

Teilprojekt

C8

Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme

2.1 Teilprojekt C8

Langzeitverhalten großer dynamischer Systeme

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. G. Radons 16.08.1953	PD. Dr. W. Just 19.06.1962 ehemals	PD. Dr. A. Latz 06.02.1962 ehemals
Theoretische Physik I (Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik)	Theoretische Physik I (Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik)	Theoretische Physik I (Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik)
Fak. für Naturwiss. TU Chemnitz 09107 Chemnitz Tel.: (0371) 531-3205 Fax: (0371) 531-3233 radons@physik. tu-chemnitz.de	Fak. für Naturwiss. TU Chemnitz 09107 Chemnitz (0371) 531-3040 (0371) 531-3233 just@physik. tu-chemnitz.de	Fak. für Naturwiss. TU Chemnitz 09107 Chemnitz (0371) 531-3292 (0371) 531-3233 arnulf.latz@physik. tu-chemnitz.de

Wegen der derzeitigen hochschulpolitischen Situation, die insbesondere für den wissenschaftlichen Nachwuchs starke Unwägbarkeiten mit sich bringt, sahen sich zwei der Antragsteller, die auf zeitlich befristeten Stellen eingestellt waren, gezwungen, vorzeitig aus dem SFB auszuschneiden. Um den neuen Beschränkungen, die das 5. Hochschulrahmengesetz mit sich brachte, zu entgehen, wurde das Arbeitsverhältnis mit PD Dr. Arnulf Latz im gegenseitigen Einverständnis noch vor Ablauf des Jahres 2001 aufgehoben. Herr Dr. Latz konnte daraufhin eine längerfristige Anstellung am Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik, Kaiserslautern, antreten. Ebenfalls vorzeitig und im gegenseitigen Einverständnis wurde das Arbeitsverhältnis mit PD Dr. Wolfram Just Ende September 2003 aufgehoben, der daraufhin eine unbefristete Stelle als Lecturer im Bereich Applied Mathematics am Queen Mary College der University of London antreten konnte. Beide Projektleiter standen und stehen weiterhin beratend zur Verfügung.

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. Günter Radons
PD Dr. Wolfram Just
PD Dr. Arnulf Latz
Dr. Hongliu Yang
Dr. Benno Rumpf (seit 1/2004)
Dipl. Phys. Christian Drobniowski (seit 4/2004)
Dipl. Phys. Andreas Fichtner (seit 11/2003)
Prof. Dr. Gudula Rünger (Informatik, B8)
Michael Schwind (Informatik, B8)

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Die Theorie der nichtlinearen Dynamik verknüpft deterministische Bewegungsgleichungen mit chaotischen, scheinbar stochastischen Phänomenen. Für einfache niedrigdimensionale Systeme lässt sich eine statistische Beschreibung aus dynamischen Eigenschaften ohne probabilistische Annahmen begründen. Ergodisches und mischendes Verhalten und der Zerfall von Zeitkorrelationen lassen sich dabei aus der dynamischen Instabilität von Trajektorien herleiten [K79]. Während niedrigdimensionale Systeme auf diese Weise intensiv untersucht worden sind [ER85], ist das Verständnis von hochdimensionalen Systemen noch immer unzureichend [CH].

Das langfristige Ziel dieses Teilprojekts ist es, ein tieferes Verständnis statistischer Prozesse in hochdimensionalen Systemen mit Mitteln der nichtlinearen Dynamik zu erhalten. Dabei wird eine Verbindung zwischen dem Lyapunov-Spektrum und den Lyapunov-Vektoren, die mikroskopisch die Instabilitäten charakterisieren, und den makroskopischen Systemeigenschaften wie den Transportkoeffizienten gesucht. Die Gaussche Thermostatenmethode von Nosé, Hoover, Evans, Morriss et al. [E90, H91, H99] und einige Arbeiten von Gaspard und Nicolis [G98, D99] konnten einen derartigen Zusammenhang bereits nachweisen.

Unser besonderes Interesse gilt dabei glasartigen Zuständen [A95, DS01], die trotz ihrer praktischen Relevanz immer noch nicht ausreichend verstanden sind [M01]. Dabei erwarten wir insbesondere durch numerische nichtlineare Stabilitätsanalysen neue Einsichten. Wir untersuchen die binäre Lennard-Jones-Mischung, die als der Prototyp für die Simulation der molekularen Dynamik von Gläsern gelten kann [K95, K96, K00, S96, DST00]. Wir erwarten dabei, dass Unordnungsphänomene am Glasübergang, sowie auch Alterungsprozesse von Gläsern im Lyapunov-Spektrum und in den Lyapunov-Vektoren der mikroskopischen Dynamik erkennbar sind.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Nichtlineare und molekulare Dynamik

Mit molekulardynamischen Methoden lassen sich die Struktur und die Dynamik von unterkühlten Flüssigkeiten und Gläsern untersuchen [AT87]. Dabei werden die Newtonschen Bewegungsgleichungen der Atome numerisch integriert. Trotz der im Vergleich zu realen Systemen kleinen Zahl N von Atomen und der relativ kurzen Simulationszeit lassen sich dadurch analytisch nicht zugängliche Eigenschaften ermitteln. Die Lyapunov-Exponenten sind hierbei das wichtigste Mittel zur Charakterisierung der chaotischen Dynamik.

Molekulardynamische Simulationen für den Glasübergang in einem d -dimensionalen Lennard-Jones-System mit N Teilchen ($N = 100 - 1000$) sollten in diesem Projektteil durch eine Lyapunov-Analyse der Instabilitäten ergänzt werden. Die effizienteste Methode zur Berechnung von Lyapunov-Exponenten und Lyapunov-Vektoren in hochdimensionalen Systemen stammt von Benettin und Shimada [BGS76, SN79]. Dabei werden $2dN * 2dN$ lineare und $2dN$ nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichungen simultan integriert, um die Dynamik der $2dN$ Tangentialraumvektoren und der Trajektorie zu gewinnen.

Zur Berechnung der Lyapunov-Exponenten und Vektoren müssen die Vektoren periodisch orthogonalisiert werden. Das geschieht entweder mit dem Gram-Schmidtschen

Orthogonalisierungsverfahren oder durch eine QR-Zerlegung. Die Ergebnisse werden anschließend der Integrationsroutine der Molekulardynamik übergeben, die den Ausgangspunkt der nächsten Orthogonalisierung liefert. Die Simulation auf hinreichend langen Zeitskalen erfordert die Implementierung des Algorithmus auf einem Parallelrechner. Die wiederholte Orthogonalisierung benötigt dabei den größten Teil der Rechenzeit und erfordert bei der Programmentwicklung besondere Sorgfalt. Außerdem erfordert in einem Cluster von Rechnern der wiederholte Wechsel zwischen der Orthogonalisierungs- und der Integrationsroutine zusätzliche Anstrengungen in Bezug auf Zuweisung von Rechenzeit und Speicherkapazität. Die Parallelimplementierung des Programms sollte deshalb in Zusammenarbeit mit Projekt B8 durchgeführt werden. Dieses Programm konnte erfolgreich umgesetzt werden

Jedem der Lyapunov-Exponenten ist ein zeitabhängiger Lyapunov-Vektor zugeordnet [O68]. Abgesehen von einigen frühen Untersuchungen [PPP84, GP91, PP98, PEME00, MPH98] wurde dieses zustandsabhängige orthogonale Vektorsystem lange Zeit lediglich als Hilfsmittel zur Berechnung von Lyapunov-Spektren angesehen. Dass diese Größen interessante strukturelle und dynamische Informationen enthalten, ist erst neuerdings entdeckt worden [PH00, FHPH04, H02], allerdings waren diese Resultate auf Hartkugelsysteme beschränkt. Erst durch Einführung einer neuen Methode, die statische und dynamische Korrelationen der Dichtefluktuationen der Lyapunov-Vektoren bestimmt, konnte eine Kontroverse zur Existenz hydrodynamischer Lyapunov-Moden in Soft-Potential-Systemen [PH00, FHPH04, H02] gelöst werden. Diese von uns eingeführten Korrelationsfunktionen stellen ein wesentliches Werkzeug für die getätigten und noch anstehenden Untersuchungen dar.

2.3.2 Entwicklung raum–zeitlicher Dynamik nach periodischen Orbits, Altern und anomaler Transport

Die Idee dieses Projektteils bestand darin, die Möglichkeiten der Periodic-Orbit-Theorie an einfachen Modellsystemen auszuloten und das anomale Zeitverhalten ungeordneter dynamischer Systeme zu untersuchen. Diese Untersuchungen an idealisierten Systemen sollten die Forschungsergebnisse der viel komplexeren nichtlinearen Dynamik von monoatomaren und binären Lennard-Jones-Flüssigkeiten von einer komplementären Seite beleuchten und ergänzen. Die zu untersuchenden Modellsysteme sind durch ungeordnete iterierte Abbildungen gegeben. In Spezialfällen, für die Markov-Partitionen existieren, können diese Modelle auf bekannte Systeme der Statistischen Mechanik abgebildet werden. Von Letzteren ist bekannt, dass sie Nichtgleichgewichtsphänomene wie Altern und anomalen Transport zeigen. Im Rückschluss gilt dies auch für die zugeordneten dynamischen Systeme, und darüber hinaus für eine noch viel größere, noch nicht klar definierte Klasse von dynamischen Systemen, die nicht notwendigerweise Markov-Partitionen besitzen. Dieser letzte Punkt ist allerdings bisher kaum untersucht worden. Wegen der Wichtigkeit dieser Nichtgleichgewichtsphänomene ist jedoch ein tiefergehendes Verständnis gefragt und sollte in diesem Projektteil erarbeitet werden.

Literaturverzeichnis zu 2.3 (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [A95] C. A. Angell, Formation of Glasses from Liquids and Biopolymers, *Science*, **267**, 1924-1935 (1995); P. Debenedetti, *Metastable liquids* (Princeton University Press, Princeton, 1997).
- [AT87] M. P. Allen and D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids* (Clarendon Press, Oxford 1987).
- [BGS76] G. Benettin, L. Galgani and J. M. Strelcyn, Kolmogorov Entropy and Numerical Experiments, *Phys. Rev. A* **14**, 2338-2345 (1976).
- [CH] M.C. Cross und P.C. Hohenberg, Pattern Formation outside of Equilibrium, *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851-1112, 1993.
- [D99] J.P. Dorfman, *An Introduction to Chaos in Nonequilibrium Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [DS01] P.G. Denenedetti and F.H. Stillinger, Supercooled Liquids and the Glass Transition, *Nature* **410**, 259-267 (2001).
- [DST00] C. Donati, F. Sciortino, and P. Tartaglia, Role of Unstable Directions in the Equilibrium and Aging Dynamics of Supercooled Liquids, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1464-1467 (2000).
- [E90] D.J. Evans, G.P. Morriss, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Liquids* (Academic, New York, 1990).
- [ECM90] D.J. Evans, E.G.D. Cohen and G.P. Morriss, Viscosity of a Simple Fluid from its Maximal Lyapunov Exponents, *Phys. Rev. A* **42**, 5990-5997 (1990).
- [EG00] J.-P. Eckmann and O. Gat, Hydrodynamic Lyapunov Modes in Translation-Invariant Systems, *J. Stat. Phys.* **98**, 775-798 (2000).
- [ER85] J.-P. Eckmann, D. Ruelle, Ergodic Theory of Chaos and Strange Attractors, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 617-656 (1985); E. Ott, *Chaos in Dynamical Systems* (Cambridge University Press, Cambridge 1993).
- [FHPH04] Ch. Forster, R. Hirschl, H.A. Posch and Wm.G. Hoover, Perturbed Phase-space Dynamics of Hard-disk Fluids, *Physica D* **187**, 294-310 (2004).
- [G98] P. Gaspard, *Chaos, Scattering, and Statistical Mechanics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1998).
- [GLS94] W. Gropp, E. Lusk, and A. Skjellum, *Using MPI: Portable Parallel Programming with the Message Passing Interface* (MIT Press, Cambridge, 1994).
- [GP91] G. Giacomelli and A. Politi, Spatio-temporal Chaos and Localization, *Europhys. Lett.* **15**, 387-392 (1991).
- [H91] Wm.G. Hoover, *Computational Statistical Mechanics* (Elsevier, New York, 1991).
- [H99] Wm.G. Hoover, *Time Reversibility, Computer Simulation, and Chaos* (World Scientific, Singapore, 1999).
- [H02] Wm.G. Hoover et al., Lyapunov Modes of Two-Dimensional Many-Body Systems; Soft Disks, Hard Disks, and Rotors, *J. Stat. Phys.* **109**, 765-776 (2002).

- [K79] N.S. Krylov, *Works on the Foundations of Statistical Mechanics* (Princeton University Press, Princeton, 1979).
- [K95] W. Kob and H.C. Andersen, Testing Mode-coupling Theory for a Supercooled Binary Lennard-Jones Mixture I: the van Hove Correlation Function, *Phys. Rev. E* **51**, 4626-4641 (1995).
- [K96] W. Kob, C. Donati, S. J. Plimpton, P. H. Poole and S. C. Glotzer, Dynamical Heterogeneities in a Supercooled Lennard-Jones Liquid, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2827-2830 (1997).
- [K00] W. Kob, Supercooled Liquids and Glasses, p.249-277 in M.E. Cates and M.R. Evans (Hrsg.), *Soft and Fragile Matter, Nonequilibrium Dynamics, Metastability and Flow* (Institute of Physics, London, 2000).
- [KY79] J. Kaplan and J. A. Yorke, Chaotic Behavior of Multidimensional Difference Equations, in *Functional Differential Equations and Approximation of Fixed Points*, Springer Lecture Notes in Mathematics **730**, p.204-227 (1979).
- [M01] M. Mézard, Statistical Physics of the Glass Phase, arXiv: cond-mat/0110363.
- [MNM01] S. McNamara and M. Mareschal, Origin of the Hydrodynamic Lyapunov modes, *Phys. Rev. E* **64**, 051103-1-14 (2001); M. Mareschal and S. McNamara, Lyapunov Hydrodynamics in the Dilute Limit, *Physica D* **187**, 311-325 (2004).
- [MPH98] Lj. Milanović, H.A. Posch, and Wm.G. Hoover, Lyapunov Instability of Two-dimensional Fluids: Hard Dumbbells, *Chaos* **8**, 455-461 (1998).
- [O68] V.I. Oseledec, A Multiplicative Ergodic Theorem: Ljapunov Characteristic Numbers for Dynamical Systems, *Trans. Mosc. Math. Soc.* **19**, 197-231 (1968).
- [P04] H.A. Posch, talk given at DPG-Frühjahrstagung; Regensburg, 8-12 March 2004, Ch. Forster and H.A. Posch, in preparation.
- [PEME00] W. Pesch, D.A. Egolf, I.V. Melnikov and R.E. Ecke, Mechanism of Extensive Spatiotemporal Chaos in Rayleigh-Bénard Convection, *Nature* **404**, 733-736 (2000).
- [PF04] H.A. Posch, Ch. Forster, in *Collective Dynamics of Nonlinear and Disordered Systems*, p.309-346, Eds. G. Radons, W. Just, and P. Häussler (Springer, Berlin, 2004), in print.
- [PH88] H.A. Posch and Wm.G. Hoover, Lyapunov Instability of Dense Lennard-Jones Fluids, *Phys. Rev. A* **38**, 473-482 (1988).
- [PH00] H.A. Posch and R. Hirschl, Simulation of Billiards and of Hard Body Fluids, p.269-314, in *Hard Ball Systems and the Lorentz Gas*, EMS Vol. **101**, Ed. D. Szasz (Springer, Berlin, 2000).
- [PP98] A. Pikovsky and A. Politi, Dynamic Localization of Lyapunov Vectors in Space-time Chaos, *Nonlinearity* **11**, 1049-1062 (1998); A. Pikovsky and A. Politi, Dynamic Localization of Lyapunov Vectors in Hamiltonian Lattices, *Phys. Rev. E* **63**, 036207-1-9 (2001).
- [PPP84] Y. Pomeau, A. Pumir, and P. Pelce, Intrinsic Stochasticity with Many Degrees of Freedom, *J. Stat. Phys.* **37**, 39-49 (1984); K. Kaneko, Lyapunov Analysis and Information Flow in Coupled Map Lattices, *Physica D* **23**, 436-447 (1986).

- [S96] S. Sastry, Lyapunov Spectra, Instantaneous Normal Mode Spectra, and Relaxation in the Lennard-Jones Liquid, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 3738-3742 (1996).
- [SN79] I. Shimada and T. Nagashima, A Numerical Approach to Ergodic Problem of Dissipative Dynamical Systems, *Prog. Theor. Phys.* **61**, 1605-1616 (1979).
- [TM02] T. Taniguchi and G.P. Morriss, Stepwise Structure of Lyapunov Spectra for Many-Particle Systems using a Random Matrix Dynamics, *Phys. Rev. E* **65**, 056202-1-15 (2002).
- [TM03a] T. Taniguchi and G.P. Morriss, Boundary Effects in the Stepwise Structure of the Lyapunov Spectra for Quasi-one-dimensional Systems, *Phys. Rev. E* **68**, 026218-1-18 (2003).
- [TM03b] T. Taniguchi and G.P. Morriss, Localized Behavior in the Lyapunov Vectors for Quasi-one-dimensional Many-hard-disk Systems, *Phys. Rev. E* **68**, 046203-1-22 (2003).
- [WB] A.S. de Wijn and H. van Beijeren, Goldstone Modes in Lyapunov Spectra of Hard Sphere Systems, arXiv: nlin.CD/0312051.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Nichtlineare und molekulare Dynamik

Die Grundlagen für diesen Projektteil wurden bereits in unseren Vorarbeiten zu zufällig gekoppelten Phasenoszillatoren [SR98, SR00] gelegt. Dort wurde gezeigt, dass sich Nichtgleichgewichtsphasenübergänge aus einer dynamisch ungeordneten Phase in eine spin-glasartige Phase mit eingefrorener Unordnung klar im Lyapunov-Spektrum niederschlägt. In Spezialfällen, wie dem Kuramoto-Modell, können für derartige Systeme auch exakte analytische Ergebnisse für die Lyapunov-Spektren gewonnen werden [R04b]. Das theoretische Verständnis des zu untersuchenden Glasübergangs wurde in den Arbeiten [L00, L01, L02] geschaffen. Von diesem Hintergrund ausgehend wurde in der laufenden Förderperiode die Lyapunov-Instabilität von Lennard-Jones-Flüssigkeiten untersucht. Basis für diese Untersuchungen war die Erstellung eines um die Tangentialraumdynamik erweiterten Molekulardynamikprogramms, das auf dem konventionellen MD-Code von Walter Kob aufsetzt. Ziel war es, für die binäre Mischung eine charakteristische Veränderung z.B. der Lyapunov-Spektren zu detektieren. Die Ergebnisse einiger Testläufe dieses Programms in einer dreidimensionalen binären Lennard-Jones Mischung mit 100 Teilchen sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Dabei verwenden wir die von Kob und Anderson zur Simulation von unterkühlten Flüssigkeiten und Gasen eingeführte Parametrisierung [K95]. Eine Abschätzung [K95] ergibt in diesem Modell einen Modenkopplungsübergang bei $T = 0.435$. Es ist bereits gezeigt worden, dass sich das Systemverhalten an diesem Punkt erheblich ändert, obwohl hier kein klassischer Phasenübergangspunkt in einen glasartigen Zustand vorliegt [DS01].

Aus den Simulationen fanden wir, dass sich das gesamte Lyapunov-Spektrum für sinkende Temperaturen nach unten verschiebt. Das ist vermutlich auf die mit sinkender Temperatur sinkende Kollisionsrate zurückzuführen. Die Symmetrieeigenschaften des Spektrums sind zudem ein Beleg für die Funktionsfähigkeit unseres Programms. Mit

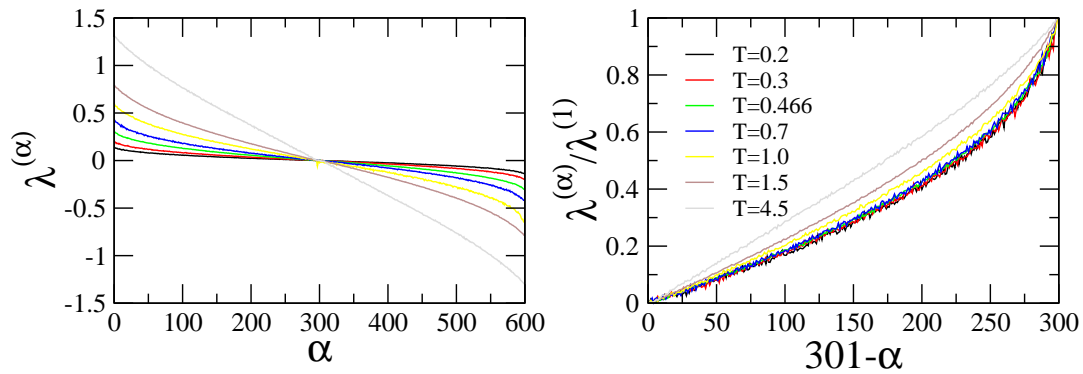


Abbildung 2.1: Das Lyapunov-Spektrum $\lambda^{(\alpha)}$ (links) und das normierte Lyapunov-Spektrum $\lambda^{(\alpha)}/\lambda^{(1)}$ (rechts) für ein binäres 3d Lennard-Jones-System bei verschiedenen Temperaturen. Die Teilchenzahl ist $N = 100$ und Systemgröße ist $L = 4.36$.

sinkender Temperatur wird das Spektrum mehr und mehr gekrümmt. Unterhalb von $T = 0.466$ ändert sich das normierte Spektrum nur wenig mit der Temperatur. Anscheinend spiegelt der größte Lyapunov-Exponent $\lambda^{(1)}$ im Wesentlichen die kinetische Energie der Atome wieder, während das gesamte Spektrum die Konfiguration der Atome wiedergibt. Die Krümmung des Spektrums folgt aus der Separation der schnellen Zeitskala der Atomvibrationen und der langsamen Zeitskala der Relaxation der Atomkonfiguration. Bei der durch die Berechnung auf nur einem Prozessor möglichen Systemgröße und Simulationsdauer sind endgültige Schlussfolgerungen noch nicht möglich. Insbesondere bei niedrigen Temperaturen treten noch erhebliche Fluktuationen auf. Es musste daher erst eine parallelisierte Version des Programms erstellt werden.

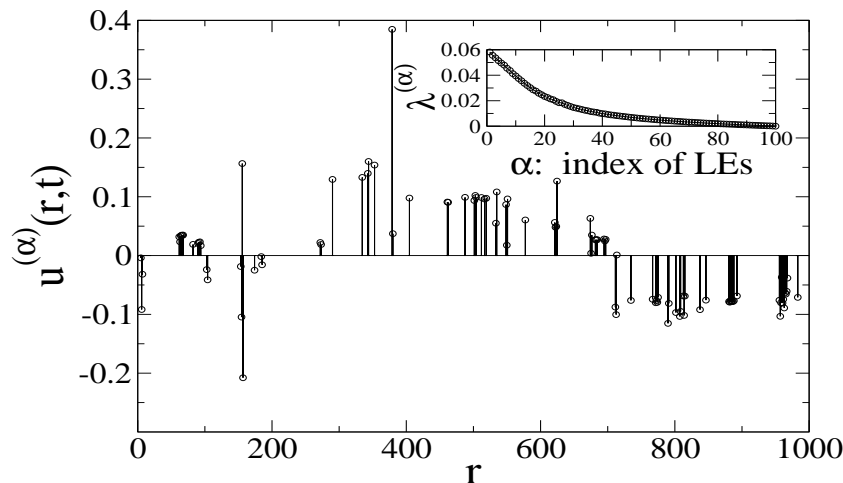


Abbildung 2.2: Momentaufnahme LV-Dichte $u^{(\alpha)}(r,t)$ für eine 1-d Lennard-Jones-Flüssigkeit ($N = 100$), wobei der Lyapunov-Exponent $\lambda^{(96)}$ nahe Null liegt. Die Auslenkungen $u_i^{(\alpha)}$ sind vertikal über der Teilchenposition R_i aufgetragen und zeigen eine wellenartige Struktur. Außerdem ist der positive Zweig des Lyapunov-Spektrums dargestellt.

Unsere Ergebnisse für binäre LJ-Systeme deuteten an, dass das Lyapunov-Spektrum al-

lein nicht genügend aussagekräftig sein würde, da es zu unsensitiv auf das Einführen von Unordnung reagiert. Diese Tatsache brachte uns zu der Einsicht, dass die Untersuchung der zugehörigen Lyapunov-Vektoren die Problematik lösen könnte. Und in der Tat zeigen schon sehr einfache Größen, wie die Partizipationsverhältnisse (participation ratios) der Lyapunov-Vektoren, charakteristische Unterschiede zwischen Systemen mit und ohne Unordnung. Diese Unterschiede betreffen stark lokalisierte Lyapunov-Vektoren, die zu den maximalen Lyapunov-Exponenten gehören. Interessanter sind jedoch die Lyapunov-Vektoren, die zu Lyapunov-Exponenten nahe der Null gehören, da diese für das Verständnis von Langzeitphänomenen wichtig sind. Dies konnte bereits durch Simulationen ein-komponentiger Lennard-Jones-Flüssigkeiten gezeigt werden, was zudem nichttriviale Resultate hervorbrachte. Für Hartkugelsysteme wurde kürzlich die interessante Entdeckung gemacht, dass Lyapunov-Vektoren, deren Exponenten nahe bei Null liegen, eine wellenartige Struktur aufweisen [PH00]. Diese so genannten hydrodynamischen Moden verhalten sich sehr verschieden von den typischerweise lokalisierten Lyapunov-Vektoren, die zu den größten Lyapunov-Exponenten gehören [PPP84, GP91, MPH98]. In Folgearbeiten [FHPH04, EG00, MNM01, WB, TM02] wurden diese Moden anhand von vereinfachten Modellen auf der Basis von Zufallsmatrizen [EG00] untersucht, sie sind aber immer noch nicht ausreichend verstanden. Beispielsweise existierte die durch plausible Argumente unterstützte Meinung, dass solche hydrodynamischen Moden nur in Flüssigkeiten mit harten Potentialen existieren, nicht aber in Vielteilchensystemen mit weichen Wechselwirkungspotentialen [PH00, FHPH04, H02]. Auch in molekulardynamische Simulationen von Soft-Potential-Systemen mit WCA-Wechselwirkungen wurden zunächst keine hydrodynamischen Lyapunov-Moden detektiert. Deren Existenz in Systemen mit weichen Potentialen konnte erst durch unsere Arbeiten nachgewiesen werden.

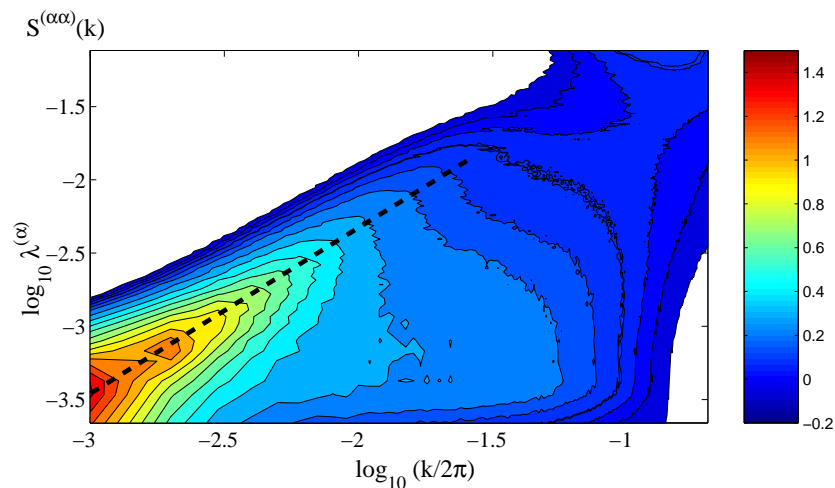


Abbildung 2.3: Höhenlinien der statischen Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k)$ für eine 1-d Lennard-Jones- Flüssigkeit ($N = 100$, $L = 1000$). Der Kamm bei kleinen k - und λ -Werten (angedeutet durch die gestrichelte Linie) zeigt die Existenz hydrodynamischer Lyapunov-Moden.

Um hydrodynamische Lyapunov-Moden im Lennard-Jones-System detektieren zu können, führten wir statische und dynamische Korrelationsfunktionen für die räumlichen Dichten der Lyapunov-Vektoren ein. Dabei ist die räumliche Dichte der Lyapunov-Vektoren als $u^{(\alpha)}(r, t) = \sum_{i=1}^N u_i^{(\alpha)}(t) \delta(r - R_i(t))$ definiert, wobei $R_i \in R^d$ der Ort des i -ten Teilchens

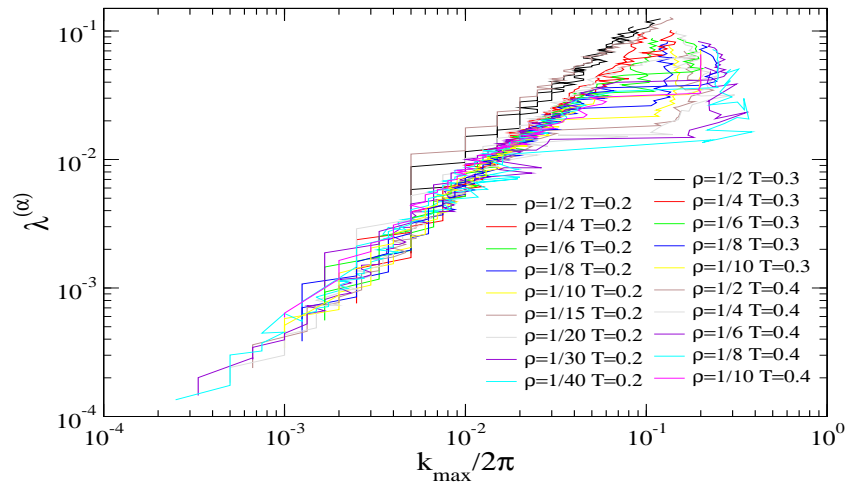


Abbildung 2.4: Dispersionsrelation $\lambda(k)$ der hydrodynamischen Lyapunov-Moden, dargestellt für verschiedene Teilchendichten und Temperaturen. Die Dispersionsrelation ist über einen weiten Parameterbereich unabhängig von der Temperatur.

und $u_i^{(\alpha)}(t)$ der räumliche Anteil des α -ten Lyapunov-Vektors für das i -te Teilchen ist. Wie in Abbildung 2.2 für $L = 1000$ und $T = 0, 2$ gezeigt ist, fluktuiert $u^{(\alpha)}(r, t)$ in der Zeit und im Raum.

Die räumlichen Korrelationen werden durch $S^{(\alpha\alpha)}(k)$, die gleichzeitigen Korrelationen der Fourierkomponenten $u^{(\alpha)}(k, t)$ von $u^{(\alpha)}(r, t)$ erfasst. Zur Vereinfachung diskutieren wir zunächst die Resultate für eine eindimensionale Lennard-Jones-Flüssigkeit, für die $S^{(\alpha\alpha)}(k)$ eine skalare Größe ist. Abbildung 2.3 zeigt einen Grat (gestrichelt) bei kleinen λ und k . Dementsprechend bedeutet die entsprechende Dispersionsrelation $\lambda(k)$, dass die Lyapunov-Mode räumlich oszillatorisches Verhalten zeigt. In Abbildung 2.4 ist λ über $k_{\max} = \arg \max_k S(\lambda, k)$ für Systeme mit verschiedenen Dichten und Temperaturen aufgetragen. Die Dispersionsrelation $\lambda(k)$ ist weitgehend unabhängig von diesen Größen in dem Bereich, in dem $\lambda(k)$ wohldefiniert ist. Die gemeinsame Dispersionsrelation $\lambda(k)$ ist linear in der doppellogarithmischen Darstellung, woraus sich ein Skalengesetz $\lambda(k) \sim k^\eta$ mit $\eta = 1, 2 \pm 0, 1$ ergibt. Allerdings kann man aus diesen Daten auch eine lineare Dispersionsrelation mit quadratischen Korrekturen nicht ausschließen. Diese Resultate zeigen eindeutig die Existenz hydrodynamischer Lyapunov-Moden in Lennard-Jones-Flüssigkeiten.

Genauere Informationen können aus der dynamischen LV-Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ gewonnen werden, die man durch zeitliche Fouriertransformation aus den ungleichzeitigen Korrelationen $F^{(\alpha\alpha)}(k, \tau)$ der Fluktuationen $u^{(\alpha)}(k, t)$ erhält. Diese Funktion enthält neben strukturellen auch zeitliche Korrelationen. Durch Frequenzintegration $S^{(\alpha\alpha)}(k) = \int S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega) d\omega$ kann wieder die statische Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k)$ gewonnen werden. In Abbildung 2.5 ist ein typisches Beispiel der Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ dargestellt. Sie besteht aus einem zentralen “quasi-elastischen” Maximum und schulterförmigen seitlichen Strukturen, die der dynamischen Strukturfunktion $S(k, \omega)$ von Flüssigkeiten ähneln. Die dynamische Information kann durch eine 3-Pol-Approximation der Laplace-Transformation von $F^{(\alpha\alpha)}(k, \tau)$ gewonnen werden, was einem Fit der Funktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ durch Lorentz-Funktionen bei $\omega = 0$ und bei $\omega = \pm\omega(k)$ ent-

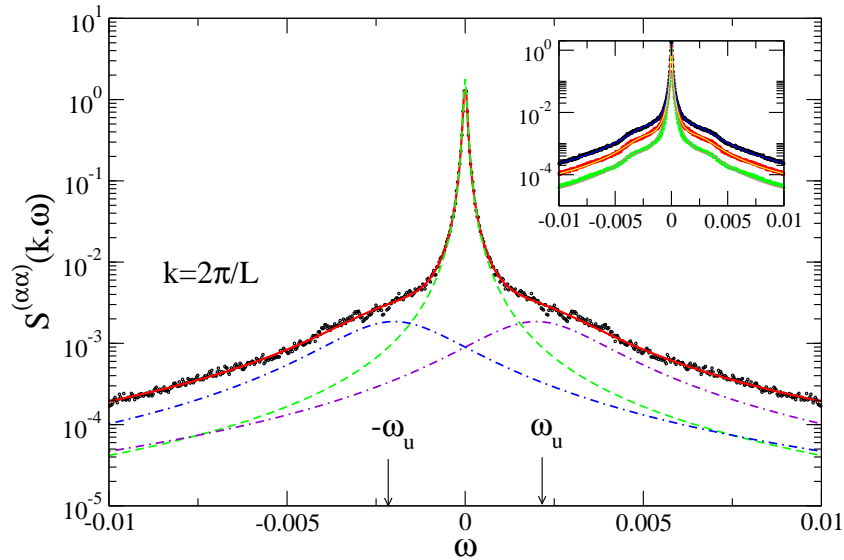


Abbildung 2.5: Dynamische Korrelationsfunktion $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ für $\alpha = 96$ und $k = 2\pi/L$. Die durchgezogene Linie folgt aus einem Fit für die 3-Pol-Approximation. Außerdem ist die Zerlegung in drei Lorentz-Kurven dargestellt. Die kleine Abbildung vergleicht die Fits für $k = 2\pi/L$, $4\pi/L$, und $8\pi/L$ (von oben).

spricht. Diese Fits (Abbildung 2.6) beschreiben die Frequenzabhängigkeit von $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ recht genau. Mit Hilfe dieser Fits können die Dispersionsrelationen $\omega^{(\alpha)}(k)$ für jede der hydrodynamischen Lyapunov-Moden mit dem Index α gewonnen werden. Diese Lyapunov-Moden sind durch die Wellenlänge $2\pi/k(\lambda)$ und die typische Frequenz $\omega(k(\lambda))$ charakterisiert. Weil $\frac{d\omega}{dk}$ ungleich Null ist, liegen propagierende wellenartige Anregungen vor. Die Herkunft der Frequenz $\omega(k(\lambda))$ ist noch nicht vollständig aufgeklärt. Vermutlich spiegelt sie die Rotation des orthogonalen Bezugssystems $\{e^{(\alpha)}(t)\}$ um die Referenztrajektorie wieder. Die vollständige LV-Dynamik ist dagegen noch komplizierter. Beispielsweise finden wir, dass die kohärente wellenartige Bewegung intermittent auftritt. Dieses Phänomen ist vermutlich die Ursache für die Breite der "inelastischen" Peaks von $S^{(\alpha\alpha)}(k, \omega)$ bei $\omega = \pm\omega(k)$.

Diese Resultate zeigen die Mächtigkeit der von uns eingeführten LV-Dichtekorrelationsfunktion bei der Quantifizierung raumzeitlicher Phänomene im Zusammenhang mit Lyapunov-Vektoren. Dadurch ist es erstmalig möglich, hydrodynamische Lyapunov-Moden und deren Dynamik in Systemen mit weichen Potentialen zu bestimmen. Wir schließen daraus, dass Lyapunov-Moden universell und unabhängig von der speziellen Wechselwirkung in chaotischen translationsinvarianten Vielteilchensystemen auftreten. Dieser Schluss wird auch durch die Beobachtung von hydrodynamischen Moden in ein- und zweidimensionalen Flüssigkeiten mit einer Weeks-Chandlers-Anderson (WCA) Wechselwirkung untermauert [P04].

Im Gegensatz zu den Systemen aus harten Kugeln, in denen die Lyapunov-Moden zuerst entdeckt wurden, ist das Lyapunov-Spektrum im Lennard-Jones-System nicht stufenförmig, obwohl die betreffenden Moden auch hier existieren (siehe Abbildung 2.2). Die Lyapunov-Vektoren enthalten im Vergleich zum Lyapunov-Spektrum wesentlich detailliertere Informationen, wobei die hydrodynamischen Lyapunov-Moden offensichtlich ein robustes und universelles Phänomen darstellen. Folglich sind die Lyapunov-Vektoren

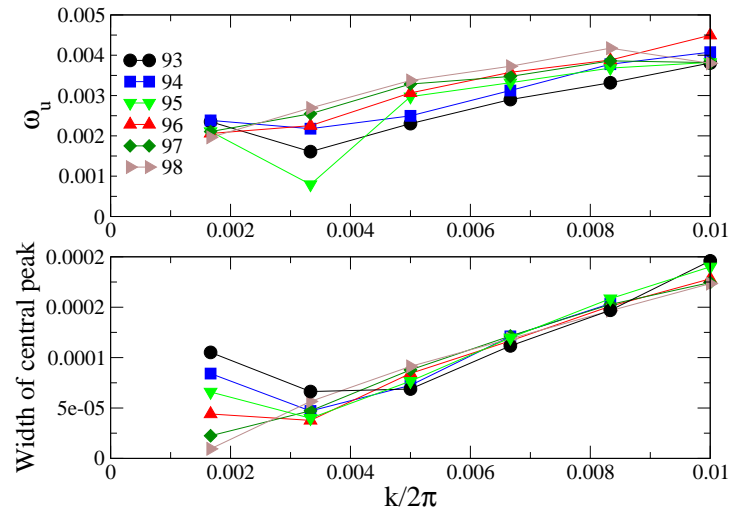


Abbildung 2.6: Dispersionsrelationen $\omega^{(\alpha)}(k)$ (oben) und die k -Abhängigkeit der Breite des zentralen Peaks (unten) für verschiedene Lyapunov-Vektoren in der 3-Pol-Approximation. Die verschiedenen Zeitskalen sind klar voneinander getrennt.

wesentlich für unsere Suche nach Verbindungen zwischen mikroskopischen und makroskopischen Beschreibungen von Vielteilchensystemen.

Um den Mechanismus der hydrodynamischen Lyapunov-Moden weiter aufzuklären, betrachteten wir zusätzlich einfache gekoppelte, chaotische Abbildungen (CML, coupled map lattice). Anhand dieser Modelle konnten wir einerseits das generische und universelle Verhalten der hydrodynamischen Lyapunov-Moden überprüfen. Andererseits können CMLs einfach simuliert und modifiziert werden, was insbesondere für die Vorbereitung von numerischen Experimenten in komplizierteren Systemen unter gut kontrollierten Bedingungen nützlich ist. Unsere vorläufigen Resultate zeigen, dass hydrodynamische Lyapunov-Moden auch in CMLs existieren (siehe Abbildung 2.7). Dies und die Arbeiten [RUN04, RU04a, RU04b] legen nahe, dass auch partielle Differentialgleichungen hydrodynamische Lyapunov-Moden aufweisen können. Das Beispiel zeigt, dass uns CMLs auch in Zukunft, insbesondere bei der Untersuchung von Unordnungseffekten, nützlich sein dürften.

In Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Professor Rürger (TP B8) konvertierten wir das zuvor erstellte sequentielle Programm zur Berechnung von Lyapunov-Spektren in eine parallelisierte Version unter Verwendung von MPI [GLS94]. In die Reorthogonalisierung, die der rechenzeitaufwändigste Teil der Simulation ist, implementieren wir drei Algorithmen: PCGS ist eine parallelisierte klassische Gram-Schmidt-Orthogonalisierung, PICGS ist ein numerisch stabiler Gram-Schmidt-Algorithmus und PBQR ist ein QR-Algorithmus für Blockmatrizen. Alle Parallelrechnungen basieren auf einem zweidimensionalen Prozessorengitter mit einer entsprechenden blockzyklischen Datenverteilung der Matrix der Offset-Vektoren. Zeilenzyklische und spaltenzyklische Verteilungen entsprechen der Blockgröße, die approximativ gewählt werden kann. Das Programm wurde sorgfältig modular aufgebaut, um auch für einfache sequentielle Operationen die Prozessor- und Knotenarchitektur optimal ausnutzen zu können. Das Interface zwischen paralleler Reorthogonalisierung und Integration muss eine invariante Datenverteilung gewährleisten. Um verschiedene Parallelalgorithmen zur Orthogonalisierung zusammen

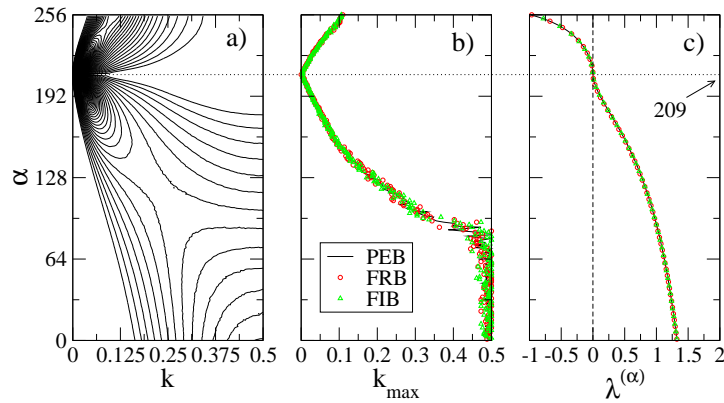


Abbildung 2.7: Ergebnisse der Simulationen der gekoppelten Kreisabbildungen für $\epsilon = 2.3$. a) Höhenlinien von $S_u^{(\alpha)}(k)$, b) Index α der LV als Funktion von k_{max} , c) das Lyapunov-Spektrum. In b) sind die Ergebnisse für feste (FIB), freie (FRB) und periodische (PEB) Randbedingungen dargestellt. Die Systemgröße ist $L = 256$.

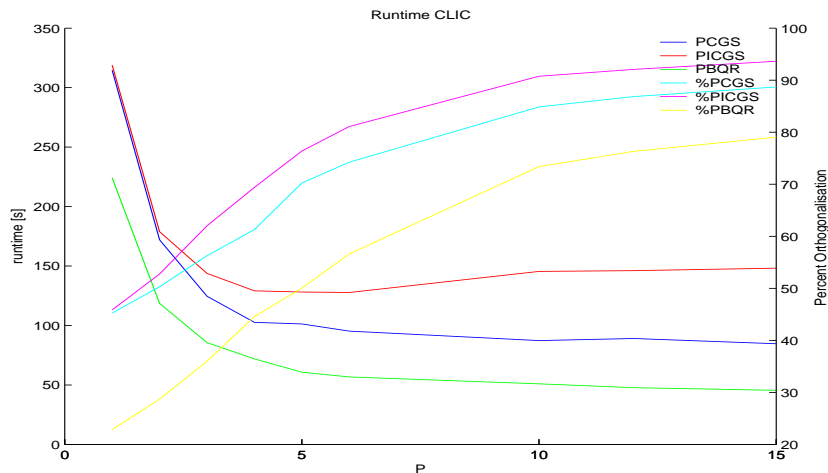


Abbildung 2.8: Rechendauer (abfallende Kurven) und Orthogonalisierungsgrad (ansteigende Kurven) als Funktion der Prozessorenzahl für das parallelisierte Programm im Cluster CLIC der TU Chemnitz für eine Simulation einer 3d binären Lennard-Jones-Flüssigkeit mit 80 A -Teilchen und 20 B -Teilchen.

mit dem Integrationsalgorithmus effizient nutzen zu können, kann eine automatische Datenverteilung nötig sein. Die Absicht dabei ist es, durch eine effiziente Kombination von Standardroutinen und parallelen Orthogonalisierungsroutinen eine optimale Ausnutzung von Prozessoren, Knoten und Netzwerk zu erreichen. Dadurch kann die Berechnung von Lyapunov-Vektoren und Spektren so effizient durchgeführt werden, dass auch Simulationen in sehr großen Systemen möglich sind. Die Rechengeschwindigkeit wurde auf einem Beowulf-Cluster (Dual-Xeon-Knoten) und einer IBM SP4 am NIC Jülich bestimmt. Solche Tests sind auch wichtig, damit das Parallelprogramm zur Berechnung der Lyapunov-Instabilität auch von anderen Arbeitsgruppen auf anderen Rechenanlagen effizient genutzt werden kann.

Das in der laufenden Förderperiode entwickelte parallelisierte Programm wird auch in der nächsten Antragsperiode von erheblicher Bedeutung sein. Erst dieses Programm ermöglicht uns aussagekräftige und extensive Untersuchungen durch zuverlässige Berechnungen in zwei- und dreidimensionalen Systemen mit ausreichend großer Teilchenzahl. Insbesondere Nichtgleichgewichtsprozesse, wie die nichtlineare Alterungsdynamik, können nun zuverlässig untersucht werden. Der Projektbearbeiter Herr Dr. Yang arbeitet momentan Herrn Dipl. Phys. Christian Drobniowski in die Thematik ein, der ihn dann im Fortgang des Projekts unterstützen soll.

2.4.2 Entwicklung raum–zeitlicher Dynamik nach periodischen Orbits, Altern und anomaler Transport

In der laufenden Förderperiode konnte dieser Teil des TP C8 aufgrund der reduzierten Mittelbewilligung (es wurde nur eine von zwei beantragten Personalstellen bewilligt) lediglich eingeschränkt mit Mitteln der Grundausrüstung bearbeitet werden. In den entsprechenden Arbeiten waren somit im Wesentlichen die Antragsteller involviert [R04a, J04, R04b, RJH04, MKJ01, MKJ02, BASJ02]. Zudem können die Diplomarbeiten von Herrn Fichtner [F03, FJR04] und Frau Hallerberg [HJR04] als Beitrag zu diesem Themenkreis gerechnet werden. Seit Ende 2003 arbeitet sich Herr Fichtner als wissenschaftlicher Mitarbeiter, über eine Haushaltsstelle (bis Ende 2004) finanziert, in die konkreten Fragestellungen dieses Projektteils ein, um ihn in der kommenden Förderperiode fundiert bearbeiten zu können.

Aufgrund unserer Arbeiten kann die folgenden Zwischenbilanz gezogen werden. Erstens konnten inzwischen der Ausgangspunkt und die möglichen Perspektiven dieses Projektteils neu definiert und klar ausgearbeitet werden [R04a]. Insbesondere die Möglichkeiten der Spektralanalyse der interessierenden dynamischen Systeme und des Escape-Rate-Formalismus wurden in [R04a] ausgelotet. Damit wurde z.B. die Wichtigkeit der Zustandsdichte am Rande des Spektrums (Lifshitz-tails) für das Langzeitverhalten dieser Systeme aufgezeigt. Daraus resultierte auch die Erkenntnis über den engen Zusammenhang dieser Problematik mit den in A14 behandelten mathematischen Problemen der Zustandsdichte für das Anderson-Modell. Zweitens war ursprünglich vorgesehen die Methoden der Periodic-Orbit-Theorie einzusetzen. In diesem Zusammenhang ist auch die abgeschlossene Diplomarbeit von Herrn Fichtner zu sehen, in der er sich mit dem Auffinden und der Stabilisierung von periodischen Orbits mittels Rückkopplung beschäftigt hat [FJR04] und die noch laufende Diplomarbeit von Frau Hallerberg zur Periodic-Orbit-Theorie der Zeta-Funktion an Phasenübergängen [HJR04]. Es stellte sich aufgrund der Ergebnisse zu den Spektren des Frobenius-Perron-Operators für ungeordnete Systeme [R04a] allerdings auch heraus, dass die Periodic-Orbit-Theorie nicht besonders geeignet zu sein scheint oder zumindest zu große Probleme mit sich bringt, um die Beschreibung der raum-zeitlichen Dynamik ungeordneter Systeme vorteilhaft zu erfassen. Daher soll der Ansatz der Periodic-Orbit-Theorie in der kommenden Periode nicht weiter verfolgt werden. Drittens hat Herr Fichtner bereits erste lauffähige Varianten (einer Untermenge) der Programmpakete erstellt, die in der kommenden Förderperiode zum Einsatz kommen sollen.

Der wissenschaftliche Ausgangspunkt für diesen Projektteil bestand in der Erkenntnis, dass schon einfache iterierte Abbildungen mit eingefrorener Unordnung einerseits anomale Transporteigenschaften, wie dynamische Lokalisierung und anomal verlangsamte Drift,

aufweisen können [R96a, R99], und andererseits eng damit verbunden Alterungsphänomene auftreten [R99, R04a]. Diese Einsicht basiert auf dem engen Zusammenhang von ausgedehnten dynamischen Systemen mit Markov-Modellen für Random Walks, falls erstere so genannte Markov-Partitionen besitzen [R96b, R95]. Dies impliziert ferner die Anwendbarkeit von fortgeschrittenen Methoden, z.B. des Thermodynamischen Formalismus in beiden Systemklassen [R95, SSR95]. Damit lassen sich etwa Gleichgewichtseigenschaften für Random Walks in Random Environments, die man für endliche Systeme auch analytisch berechnen kann [R98], auf dynamische Systeme übertragen. Dasselbe gilt für Nichtgleichgewichtseigenschaften wie das Altern oder den anomalen Transport [R04a, R04b]. Exemplarisch konnte dies an den spektralen Eigenschaften des Frobenius-Perron-Operators deutlich gemacht werden.

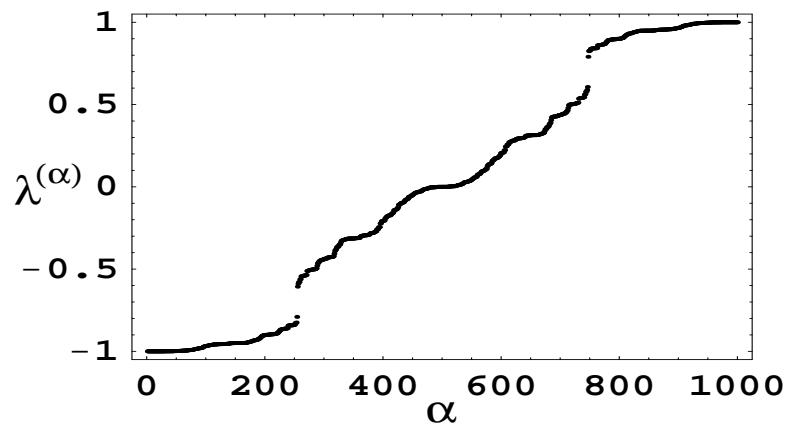


Abbildung 2.9: Das Spektrum eines dynamischen System vom Sinai-Typ. Die Eigenwerte clustern bei $\lambda = 1$ (und aus Symmetriegründen auch bei $\lambda = -1$). Sie wurden durch Diagonalisierung der Übergangsmatrix gewonnen.

Abbildung 2.9 zeigt das Spektrum $\{\lambda^{(\alpha)}\}$ dieses Operators für ein einfaches ungeordnetes dynamisches System mit Markov-Partition. Die entsprechende Übergangsmatrix des so genannten Sinai-Modells kann mit einem Lokalisierungsproblem der Quantenmechanik ungeordneter Systeme in Verbindung gebracht werden. Für das Langzeitverhalten des dynamischen Systems ist das Clustern der Eigenwerte bei $\lambda = 1$ verantwortlich. Unsere Untersuchungen zeigten das entsprechende singuläre Verhalten der Zustandsdichte auf. Dieses ist allerdings von den betrachteten Modellklassen abhängig. Es gibt zudem einen Zusammenhang mit der Entweichrate eines geeignet konstruierten offenen Systems, der auch nur für den Spezialfall des Sinai-Modells verstanden ist. Da diese Eigenschaften sowohl für anomale Transporteigenschaften als auch für Alterungsphänomene relevant sind, ist es notwendig diese Eigenschaften genauer zu untersuchen. Solche Zusammenhänge bzw. Analogien zwischen Systemen der Statistischen Physik und der Nichtlinearen Dynamik wurden in der von uns im Jahr 2002 organisierten Heraeus-Sommerschule thematisiert und sind in [RJH04] dokumentiert. Aus diesen Arbeiten folgte jedoch auch, dass die Phänomenologie der nichtlinearen dynamischen Systeme wesentlich reicher ist als die der bekannten Modelle der Statistischen Physik. Diese noch unbekannt Aspekte dynamischer Systeme, insbesondere in Bezug auf Altern und anomalen Transport, bilden die zentralen Fragestellungen, die zukünftig von Herrn Fichtner

in diesem Projektteil bearbeitet werden sollen.

Literaturverzeichnis

- [BASJ02] N. Baba, A. Amann, E. Schöll, and W. Just; Giant improvement of time delayed feedback control by spatio-temporal filtering, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 074101-1 (2002).
- [F03] A. Fichtner, *Chaoskontrolle mit zeitlich oszillierender zeitverzögerter Rückkopplung, Diplomarbeit*, TU Chemnitz, Oktober 2003.
- [FJR04] A. Fichtner, W. Just, and G. Radons, Analytical investigation of modulated time-delayed feedback control. *J. Phys. A* **37**, 3385-3391 (2004).
- [HJR04] S. Hallerberg, W. Just, and G. Radons, Analytic Properties of the Ruelle Zeta Function for Mean-Field Models of Phase Transitions, in Vorbereitung.
- [J04] W. Just, On Symbolic Dynamics of Space-Time Chaotic Models, p.347-366, in [RJH04].
- [L00] A. Latz, Non-Equilibrium Mode Coupling Theory for Supercooled Liquids and Glasses, *J. Phys. Cond. Mat* **12**, 6353-6363 (2000).
- [L01] A. Latz, Universal properties of aging in structural glasses, arXiv: cond- mat/0106086.
- [L02] A. Latz, Non-Equilibrium Projection Operator for Quenched Thermostatted Systeme, *J. Stat. Phys.* **109**, 607-622 (2002).
- [MKJ01] E. Ferretti Manfra, H. Kantz, and W. Just; Periodic orbits and topological entropy of delayed maps, *Phys. Rev. E* **63**, 046203 (2001).
- [MKJ02] E. Ferretti Manfra, W. Just, and H. Kantz; Invariant densities of delayed maps in the limit of large time delay, *Phys. Rev. E* **65**, 016211 (2002).
- [R95] G. Radons, Thermodynamic Analysis of Random Walks in Inhomogeneous Environments: Localization and Phase Transitions; *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4719-4723 (1995).
- [R96a] G. Radons, Suppression of Chaotic Diffusion by Quenched Disorder. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 4748-4751 (1996).
- [R96b] G. Radons, The Thermodynamics of Random Walks with Applications to Fractals and Chaos. in: *Nonlinear Physics of Complex Systems - Current Status and Future Trends*, Lecture Notes in Physics, J. Parisi et. al. (Hrsg.), S.281-289, Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [R98] G. Radons, On the Equilibrium State of Random Walkers in Random Environments: Analytical Results. *J. Phys. A* **31**, 4141-4148 (1998).
- [R99] G. Radons, Disorder Phenomena in Chaotic Systems. *Adv. Solid State Physics* **38**, S.439-451 (1999).
- [R04a] G. Radons, Anomalous Transport in Disordered Dynamical Systems. *Physica D* **187**, 3-19 (2004).

- [R04b] G. Radons, Disordered Dynamical Systems, p.279-308, in [RJH04].
- [RJH04] G. Radons, W. Just, and P. Häussler (Hrsg.), Collective Dynamics of Nonlinear and Disordered Systems (Springer, Berlin, 2004), im Druck.
- [RRSY] G. Radons, G. Rünger, M. Schwind, and H.L. Yang, Parallel algorithms for the determination of Lyapunov characteristics of large nonlinear dynamical systems. Proceedings of PARA04, WORKSHOP ON STATE-OF-THE-ART IN SCIENTIFIC COMPUTING, Lyngby, June 20-23, 2004, erscheint in Lecture Notes of Computer Science (Springer, Berlin, 2004).
- [RUN03] B. Rumpf, A. C. Newell, Localization and coherence in nonintegrable systems, *Physica D* **184**, 162-191 (2003).
- [RUN04] B. Rumpf, A. C. Newell, Intermittency as a consequence of turbulent transport in nonlinear systems, *Phys. Rev. E* **69**, 026306-1-4 (2004)
- [RU04a] B. Rumpf, Simple statistical explanation for the localization of energy in nonlinear lattices with two conserved quantities *Phys. Rev. E* **69**, 016618-1-5 (2004).
- [RU04b] B. Rumpf, Intermittent movement of localized excitations of a nonlinear lattice, *Phys. Rev. E* **70**, im Druck (2004).
- [RY04a] G. Radons and H.L. Yang, Static and Dynamic Correlations in Many-Particle Lyapunov Vectors, nlin.CD/0404028, eingereicht bei *Phys. Rev. Lett.*
- [RY04b] G. Radons and H.L. Yang, Lyapunov Modes in Coupled Map Lattices, Vorabdruck.
- [SR98] J. Stiller and G. Radons, Dynamics of Randomly Coupled Phase Oscillators. *Phys. Rev. E* **58**, 1789-1799 (1998).
- [SR00] J. Stiller and G. Radons, Self-Averaging of an Order Parameter in Randomly Coupled Limit-Cycle Oscillators. *Phys. Rev. E* **61**, 2148-2149 (2000).
- [SSR95] R. Stoop, W.-H. Steeb, and G. Radons, A New Characterization of Deterministic Diffusion: Diffusion-Related Entropy Functions; *Phys. Lett. A* **202**, 195-200 (1995).
- [YR03a] Hongliu Yang and G. Radons, Lyapunov Instability of One-dimensional Lennard Jones Systems, 23th European Dynamics Days, 24th-27th Sept. 2003, Palma de Mallorca, Spain.
- [YR03b] Hongliu Yang and G. Radons, Dynamical Structures of Lyapunov Vectors, 4. Dresdner Herbstseminar des Arbeitskreises Nichtlineare Physik, MPIPKS Dresden, 9th-12th Nov. 2003.
- [YR04] H.L. Yang and G. Radons, Lyapunov instability of Lennard Jones fluids, nlin.CD/0404027, wird in *Phys. Rev. E* veröffentlicht.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

1. Im Bereich der Nichtlinearen Dynamik von Lennard-Jones-Flüssigkeiten sind u.a. noch die folgenden Fragen zu untersuchen:

- Wir haben bereits gezeigt, dass hydrodynamische Lyapunov-Moden in einer Dimension in einkomponentigen Lennard-Jones-Systemen existieren, wobei wir das Verhalten durch LV-Korrelationen charakterisiert haben. Diese Phänomene bedürfen in zwei und drei Dimensionen noch einer genaueren Untersuchung.
 - Durch welchen Mechanismus und unter welchen Umständen treten hydrodynamische Lyapunov-Moden auf?
 - Wie werden die Lyapunov-Moden durch statische Unordnung oder dynamisches Rauschen beeinflusst?
 - Wie beeinflusst das nichtergodische Verhalten im glasartigen Zustand die Lyapunov-Moden? Wie verändert sich das Lyapunov-Spektrum beim Übergang vom ergodischen in den nicht-ergodischen Zustand?
 - Bisher haben wir Lennard-Jones-Flüssigkeiten im Gleichgewichtszustand untersucht. Welche Auswirkung hat die Präparation des Systems in einem Nichtgleichgewichtszustand (Alterungsprozess) auf das Lyapunov-Spektrum und die Lyapunov-Vektoren?
 - Kann die numerische Algorithmik noch effizienter gemacht werden, z.B. durch kontinuierliche Orthogonalisierungsverfahren?
2. Im Bereich der Nichtlinearen Dynamik des Alterns und des anomaler Transports sind u.a. noch die folgenden Fragen zu untersuchen:
- Welche Systemklassen von ungeordneten dynamischen Systemen (iterierten Abbildungen) existieren? Wie unterscheiden sie sich in Bezug auf die Alterungsdynamik und die Transporteigenschaften?
 - Wie ist das singuläre Verhalten der Zustandsdichte des Spektrums des Frobenius-Perron-Operators in den verschiedenen Klassen zu charakterisieren?
 - Welchen Einfluss haben Randbedingungen auf die spektralen Eigenschaften?
 - Lassen sich das singuläre Verhalten beweisen und entsprechende Exponenten auch analytisch berechnen?
 - Gibt es immer einen Zusammenhang mit der Systemgrößenabhängigkeit der Entweichrate? Unsere Untersuchungen deuten darauf hin, dass in einfachen Systemen ein einfacher Zusammenhang existiert, für komplexere Modelle zumindest dieser einfache nicht mehr. Hier sind systematische Untersuchungen notwendig.
 - Die Modelle repräsentieren die Dynamik von Zuständen in eingefrorenen, ungeordneten Umgebungen. Welche Auswirkungen haben dynamische Fluktuationen der ungeordneten Umgebung?

Eine ausführliche Darstellung der geplanten Vorhaben ist im Finanzierungsantrag 2005-2007, Teilprojekt C8, enthalten.

