

Teilprojekt

C3

Simulation und Modellierung der Relaxation komplexer
Systeme mittels Parallelrechnern

2.1 Teilprojekt C3

Simulation und Modellierung der Relaxation komplexer Systeme mittels Parallelrechnern

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann
29.7.1953
Professur für Theoretische Physik, insbesondere Computerphysik
Institut für Physik
Fakultät für Naturwissenschaften
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Telefon: (0371) 531-3212
Fax: (0371) 531-3233
e-mail: hoffmann@physik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. K. H. Hoffmann, Computerphysik
Dr. P. Blaudeck, Computerphysik
Dipl.-Phys. A. Fischer, Computerphysik
Dipl.-Phys. F. Heilmann, Computerphysik
Dipl.-Phys. A. Nemnes, Computerphysik
Dr. S. Schubert, Computerphysik
Dr. S. Seeger, Computerphysik

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Das Projekt befasst sich mit dem Relaxationsverhalten komplexer Systeme [Pal82, Hof99]. Diese sind durch einen Zustandsraum charakterisiert, der viele lokale Minima der Energiefunktion enthält, die ihrerseits durch energetische Barrieren unterschiedlicher Höhe getrennt sind. Zudem wird die Bewegung im Zustandsraum nicht nur durch diese energetischen Barrieren, sondern auch durch die Konnektivität der Zustände und damit durch die Mobilität zwischen verschiedenen Zustandsraumbereichen beschränkt.

Diese Einflüsse bestimmen das thermische Relaxationsverhalten der komplexen Systeme, welches als Hüpfen zwischen den Zuständen beschrieben werden kann. Die Zeitskalen, auf denen solche Prozesse ablaufen, sind sehr groß verglichen mit den typischen, für experimentelle Untersuchungen verwandten Zeiten. Dies führt zu einer Vielzahl interessanter experimenteller Befunde; insbesondere werden Nichtgleichgewichtsphänomene beobachtet. In Spin-Gläsern drücken sich diese besonders durch das so genannte Aging-Verhalten aus [LSNB83, GSN⁺88, SGN⁺87, HLO⁺92, VHO⁺97, JVH⁺98, MJN⁺02, JYN02].

Ziel dieses Teilprojektes ist es, u. a. diese Nichtgleichgewichtsphänomene auf der Basis komplexer Zustandsräume zu modellieren. Wegen der extrem hohen Anzahl von Zuständen selbst relativ kleiner Systeme kann eine erfolgreiche Modellierung in der Regel nicht im vollständigen Zustandsraum erfolgen. Statt dessen hat es sich als fruchtbar erwiesen, diesen auf eine handhabbare Anzahl sogenannter Cluster zu vergrößern. Dies sind Zusammenfassungen sehr vieler energetisch dicht beieinander liegender benachbarter Zustände, die untereinander schnell ins Gleichgewicht kommen.

Bei der Modellierung von Aging-Phänomenen in sogenannten Temperature-Step-Experimenten [VHO91, GSN⁺88, LHOV94, HSS97] zeigte es sich, dass die Berücksichtigung von kinetischen Faktoren notwendig ist, die in vergrößerter Weise die Konnektivitäten im Zustandsraum wiedergeben. Um die durch die Konnektivitäten bedingten Relaxationseigenschaften besser modellieren zu können, haben wir unsere Forschungen zur Relaxation in selbstähnlichen, fraktalen Strukturen vertieft. Bei diesen ist die Relaxation nicht durch die Energielandschaft, sondern ausschließlich durch die Topologie des Zustandsraumes bestimmt.

Basierend auf einer schon früher entwickelten Beschreibung von Fraktalen, die eine effektiv randlose Simulation der Diffusion von Zufallswanderern möglich macht, implementierten wir nun eine parallelisierte Variante, die die Grundlage des Langzeitstudiums der Diffusion auf Fraktalen bildet. So konnten wir die anomalen Diffusioneigenschaften sehr genau charakterisieren.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

2.3.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und langsame Relaxation bei Spingläsern und anderen Systemen

Die Struktur des Zustandsraums komplexer Systeme bildet die Grundlage für die Beschreibung des dynamischen Verhaltens solcher Systeme. Dabei wird der Zustandsraum häufig als Oberfläche einer gebirgsartigen Landschaft mit vielen verschiedenen hohen Bergen, Tälern und Pässen visualisiert [Hof02, HS02]. Die Analyse dieser Zustandsraumstruktur für ausgewählte, physikalisch relevante Modellsysteme wie z.B. Ising-Spins war erneut ein primäres Ziel unserer Untersuchungen, da an dieser Stelle eine der Ursachen für eine Reihe interessanter thermodynamischer Nichtgleichgewichtsphänomene zu finden ist.

Die teilweise bereits in den vergangenen Bewilligungsperioden begonnenen Arbeiten zur Untersuchung der Zustandsraumstruktur wurden fortgesetzt, aber im Jahr 2005 konnten nicht alle der für den Zeitraum 2005–2007 gesteckten Ziele erreicht werden.

Ein Ziel unserer Untersuchungen war die Charakterisierung durch Enumeration im niedrigerenergetischen Bereich sowie in der Umgebung lokaler Minima und die Gewinnung von Zustandsdichten auch für höhere Energien. Weiterhin sollte die Enumeration durch Einsatz eines parallel implementierten Branch-and-Cut-Algorithmus verbessert werden.

Nachdem wir durch die Implementation einer automatischen Vergrößerung des Zustandsraums eine Reihe interessanter Erkenntnisse über Barrierenstrukturen gewonnen hat-

ten, wurden darauf aufbauend die Modelle komplexer Zustandsräume verbessert, und es konnte ein tieferes Verständnis des Wechselspiels zwischen Struktur des Zustandsraums, der Konnektivität seiner Zustände sowie kinetische Eigenschaften gewonnen werden. Hierzu wurde zunächst anhand eines einfachen Modellsystems die Dynamik untersucht, wobei besonders der Einfluss verschiedener Zustandsdichten getestet wurde.

Weiterhin sollte die Vergöberung enumerierter Zustandsräume in Hinblick auf die Alterungsphänomene fortentwickelt werden. Hierbei war es besonders interessant, ob das bisher im Versuchsstadium befindliche Zulassen innerer Barrieren ausreicht, um wesentlich größere Zustandsraumbereiche zusammenfassbar zu machen. Danach sollten die schon bewährten Methoden zum Einsatz kommen, die aber eine parallele Erweiterung benötigen: speziell die in unserem NB-Clustering-Algorithmus auftretenden großen Cluster benötigen eine innere Struktur, um eine stärkere Vergröberung zuzulassen.

Für die Systeme, für die eine Enumeration aufgrund der Größe nicht in Frage kommt, wollten wir den Zugriff auf die Zustandsdichte verbessern. Zur Berechnung der globalen Zustandsdichte solcher Systeme ist eine neue Parallelisierungsstrategie erforderlich, die es erlaubt, die entstehenden sehr großen Übergangsmatrizen auf mehrere Knoten eines Compute-Clusters zu verteilen. Außerdem war das Problem des Über- oder Unterlaufs in Standard-Fließkommazahlen lösen.

2.3.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Dynamik eines Systems wird nicht nur durch energetische Barrieren, sondern auch von der Zusammenhangsstruktur des Zustandsraums selbst wesentlich beeinflusst. Fraktale Strukturen dienen einerseits als Zustandsraummodell eines komplexen Systems, andererseits als Realraummodell z. B. poröser Materialien. Die besondere Art von Konnektivität zwischen den Zuständen verlangsamt im Allgemeinen die Bewegung von Zufallswanderern bzw. die Diffusion von Teilchen. Auf diesem Gebiet ist es notwendig, Langzeitstudien durchführen zu können. Dazu muss die Beschränkung durch Speicherausbau und CPU-Leistung umgangen werden. Hierzu bietet sich die Benutzung von Compute-Clustern an.

Eine Beschränkung auf Sierpinski-Teppiche ist für die Simulation der Diffusion sinnvoll, weil ein von uns entwickelter effizienter Algorithmus existiert [SFSH01] aber auch komplementäre Methoden zur Bestimmung der Random-Walk-Dimension solcher Strukturen zur Verfügung stehen. Jedoch werden für die Lösung anderer Probleme, wie die Bestimmung von wichtigen fraktalen Dimensionen, auch andere Zufallsstrukturen zu Rate gezogen. Insbesondere gilt dies für das Beispiel der Percolationscluster.

Besonders wichtige Fragestellungen waren: Wie wirkt sich die Mischung von unterschiedlichen Fraktalgeneratoren gleicher Random-Walk-Dimension auf die Dimension des erzeugten Zufallsfraktals aus? Was geschieht, wenn nunmehr Generatoren verschiedener Dimension verwendet werden? Welche gemeinsame Eigenschaften haben die Zufallsfraktale im allgemeinen? Wie können besonders große Sierpinsky-Teppiche und Percolationscluster mit Hilfe von parallelen Algorithmen analysiert werden, wenn sie sich der Untersuchung mit üblichen Algorithmen wegen einer um Größenordnungen zu aufwändigen skalaren Berechnung entziehen?

2.3.3 Teilaufgabe Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Zur Beschreibung von Aging-Phänomenen in Spingläsern wurden in der Vergangenheit hierarchisch organisierte Modelle mit großem Erfolg verwendet. Es gelang mit ihrer Hilfe einige der experimentellen Befunde zu reproduzieren. Begonnen wurde dabei mit sehr stark vereinfachten Baummodellen, die, versehen mit einer Mastergleichungsdynamik, zum Teil sogar eine analytische Lösung zuließen. Zusammen mit einer Modellierung der magnetischen Überlappfunktion, die alle für den Einsatz der Resonsetheorie notwendigen Informationen über die magnetischen Eigenschaften des Systems enthält, konnten so die einfachen Agingexperimente mit ihrer charakteristischen Verschiebung des Maximums in der Relaxationsrate wiedergefunden werden.

Zwischenzeitlich konnte auch ein direkter Zusammenhang zwischen den verwendeten Baummodellen und der wirklichen Zustandsraumstruktur gefunden werden, in dem der niederenergetische Teil des Zustandsraumes eines $\pm I$ -Ising-Spinglases durch Enumeration untersucht und barrierefrei vergrößert wurde; die erhaltene Struktur weist große Ähnlichkeit mit den einfachen hierarchischen Baummodellen auf, ist aber weniger regelmäßig und weniger symmetrisch.

Ziel unserer Untersuchungen war, aufbauend auf dem bisher Erreichten, eine geschlossene Beschreibung der Dynamik unter dem Einfluss von Temperaturrampen zu finden. Dies ist eine Vorarbeit zur Modellierung der sogenannten „temperature-cycling“-Experimente, bei denen die Temperatur in der Wartezeit verändert wird, und der ac-Suszeptibilitätsexperimente. Für diese Experimente ist es bisher noch unklar, ob sie im Rahmen der hierarchischen Baummodelle beschrieben werden können. Gleichzeitig mit den Untersuchungen zur Temperaturabhängigkeit der Dynamik wurde begonnen, die oben genannten Experimente mit einem alternativen Ansatz, der Zerlegung der Temperaturrampen in diskrete Schritte, zu modellieren.

Literaturverzeichnis zu 2.3

- [GSN⁺88] P. Granberg, L. Sandlund, P. Norblad, P. Svedlindh, and L. Lundgren. Observation of a time-dependent spatial correlation length in a metallic spin glass. *Phys. Rev. B*, 38(10):7097–7100, 1988.
- [HLO⁺92] J. Hamman, M. Lederman, M. Ocio, R. Orbach, and E. Vincent. Spin-glass dynamics – relation between theory and experiment – a beginning. *Physica A*, 185(1–4):278–294, 1992.
- [Hof99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics – from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30–33, 1999.
- [Hof02] K. H. Hoffmann. The statistical physics of energy landscapes: From spin glasses to optimization. In K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors, *Computational Statistical Physics*, chapter 4, pages 57–76. Springer Verlag, Berlin, 1st edition, 2002.
- [HS02] K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors. *Computational Statistical Physics*. Springer Verlag, Berlin, 2002.

- [HSS97] K. H. Hoffmann, S. Schubert, and P. Sibani. Age reinitialization in hierarchical relaxation models for spin-glass dynamics. *Europhys. Lett.*, 38(8):613–618, 1997.
- [JVH⁺98] K. Jonason, E. Vincent, J. Hammann, J. P. Bouchaud, and P. Nordblad. Memory and chaos effects in spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3243–3246, 1998.
- [JYN02] P. E. Jönsson, H. Yoshino, and P. Nordblad. Symmetrical temperature-chaos effect with positive and negative temperature shifts in a spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 89(9):097201/4–097201/4, 2002.
- [LHOV94] F. Lefloch, J. Hammann, M. Ocio, and E. Vincent. Spin glasses in a magnetic field: phase diagram and dynamics. *Physica B*, 203:63–74, 1994.
- [LSNB83] L. Lundgren, P. Svedlindh, P. Nordblad, and P. Beckman. Dynamics of the relaxation-time spectrum in a cumn spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 51(10):911–914, 1983.
- [MJN⁺02] R. Mathieu, P. E. Jönsson, P. Nordblad, H. Aruga Katori, and A. Ito. Memory and chaos in an ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 65(1):012411/1–012411/4, 2002.
- [Pal82] R. G. Palmer. Broken ergodicity. *Adv. Phys.*, 31(6):669–735, 1982.
- [SFSH01] S. Seeger, A. Franz, C. Schulzky, and K. H. Hoffmann. Random walks on finitely ramified Sierpinski carpets. *Comp. Phys. Comm.*, 134(3):307–316, 2001.
- [SGN⁺87] P. Svedlindh, P. Granberg, P. Nordblad, L. Lundgren, and H. S. Chen. Relaxation in spin glasses at weak magnetic fields. *Phys. Rev. B*, 35(1):268–273, 1987.
- [VHO91] E. Vincent, J. Hammann, and M. Ocio. Slow dynamics in spin glasses and other complex systems. Saclay Internal Report SPEC/91-080, Centre D’Etudes de Saclay, Orme des Merisiers, 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France, October 1991. also in *Recent Progress in Random Magnets*, D.H. Ryan editor.
- [VHO⁺97] E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.-P. Bouchaud, and L. F. Cugliandolo. Slow dynamics and aging in spin glasses. In Miguel Rubíand Conrado Pérez-Vicente, editors, *Lecture Notes in Physics: Complex Behaviour in of Glassy Systems*, volume 492, pages 184–219. Springer, 1997.

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur und langsame Relaxation

Bei der Vergrößerung von Zustandsräumen sind sowohl Effizienz (starke Reduktion der Freiheitsgrade) als auch Wirkungsgleichheit (im dynamischen Verhalten) einerseits grundlegende aber andererseits einander widersprechende Forderungen. Um an dieser Stelle einen optimalen Kompromiss finden zu können ist es wichtig, alle Größen genau zu kennen, die das dynamische Verhalten des Systems beeinflussen. Aufgrund der bisher durchgeführten Untersuchungen konnten wir mit die Barrierenstruktur von Spingläsern charakterisieren und Aussagen zur Verteilung lokaler Minima treffen.

Die thermische Relaxation komplexer Systeme wird im wesentlichen durch drei Einflüsse bestimmt [Hof02]. Erstens sind energetische Barrieren im Zustandsraum zu nennen, die

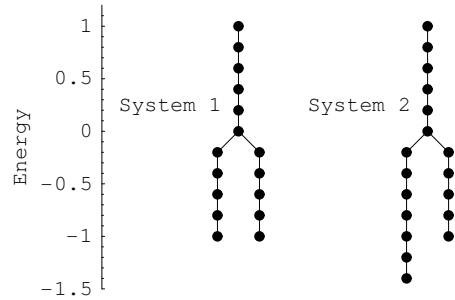


Abbildung 2.1: Zur Analyse des *Preferential Trapping* benutzen wir ein Modellsystem, welches aus zwei Tälern besteht, die in ein Haupttal eingebettet sind. Die Eigenschaften hinsichtlich Energie, Zustandsdichte und Konnektivität werden hierbei durch die Tiefe der Täler, die Entartung der Knoten und die Übergangswahrscheinlichkeit zwischen benachbarten Knoten repräsentiert.

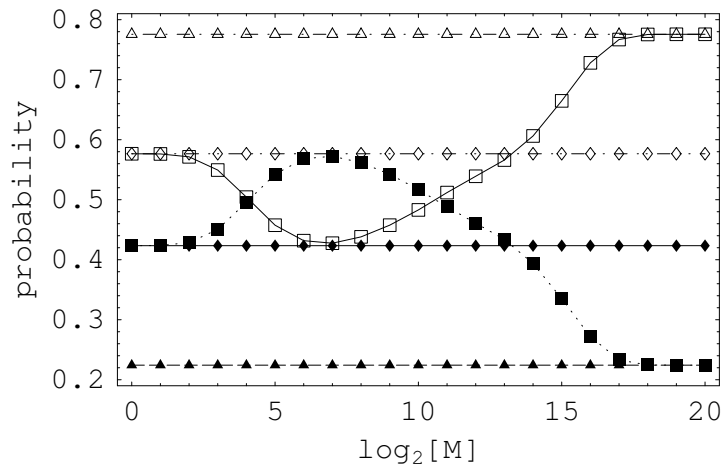


Abbildung 2.2: Die Wahrscheinlichkeit, einen Zufallswanderer in Tal 1 (offene Symbole) oder Tal 2 (ausgefüllte Symbole) zu finden, als Funktion der Anzahl der Annealing-Schritte M . Dabei repräsentieren normale Kästchen die Wahrscheinlichkeiten, die aus der Iteration der Mastergleichung entlang einer linearen Temperaturrampe mit anschließendem Schockkühlen gewonnen wurden, während auf die Spitze gestellte Kästchen die Startverteilung und Dreiecke die Gleichgewichtsverteilung, jeweils anschließend schockgekühlt, darstellen. Man erkennt, dass bei hohen Annealing-Geschwindigkeiten die Aufenthaltswahrscheinlichkeit in Tal 1 wegen seines größeren Randes höher ist. Ebenso kann bei niedrigen Annealing-Geschwindigkeiten Tal 1 wiederum aufgrund seiner größeren Tiefe mehr Wahrscheinlichkeit in sich vereinen. Demgegenüber gibt es eine mittlere Geschwindigkeit bei der der sogenannte *Trapping-Effekt* eintritt, d.h. dass die Wahrscheinlichkeit in Tal 2 geleitet wird und dieses nicht mehr verlassen kann.

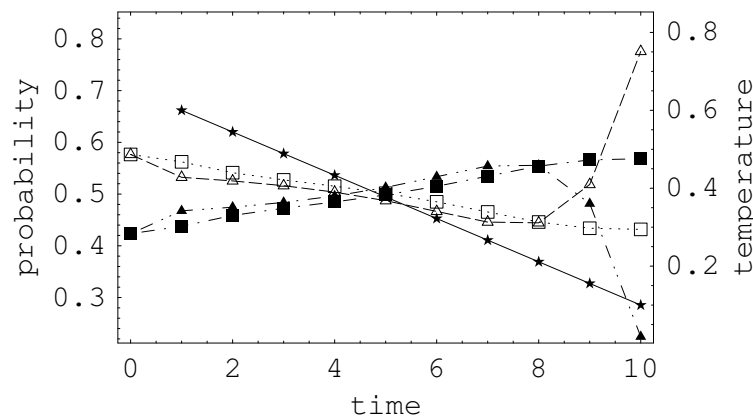


Abbildung 2.3: Der Zeitverlauf der Wahrscheinlichkeiten in Tal 1 (offene Symbole) bzw. Tal 2 (ausgefüllte Symbole) unter dem Einfluss einer linearen Temperaturrampe (Symbol: Stern). Dabei repräsentieren Kästchen die (schockgekühlte) Wahrscheinlichkeit des Annealing-Prozesses, während die Dreiecke den Gleichgewichtszustand bei der jeweiligen Temperatur darstellen. Auch hier erkennt man deutlich, dass bei hohen Temperaturen Tal 1 die höchste Aufenthaltswahrscheinlichkeit in sich vereint. Dies ändert sich ungefähr dann, wenn die Trapping-Temperatur von Tal 2 unterschritten wird. Im Prinzip würde sich die Situation wiederum ändern, wenn die Temperatur so weit gesunken ist, dass sich die größere Tiefe von Tal 1 bemerkbar macht, wie die Gleichgewichtskurven zeigen, aber an dem Punkt ist die Beweglichkeit bereits so gering, dass sich die Wahrscheinlichkeit die Barriere nicht mehr überwinden kann.

lokale Minima bzw. Täler voneinander trennen, und die bei der Relaxation zu überwinden sind. Zweitens spielt die Zustandsdichte eine wesentliche Rolle, und drittens sind die Konnektivitäten im Zustandsraum selbst zu beachten, da diese die Möglichkeiten der Entwicklung des komplexen Systems in das thermische Gleichgewicht definieren.

Infolgedessen wurden diese drei Faktoren anhand eines Referenzsystems (siehe Abb. 2.1) zunächst isoliert, später mehr und mehr in ihrem Wechselspiel untersucht [HS05, Fised]. Dabei stellte sich heraus, dass die Wahrscheinlichkeit, das System in einer bestimmten Region des Zustandsraumes vorzufinden, durch äußere Parameter massiv beeinflusst werden kann. Dieser Vorgang wird als *Preferential Trapping* bezeichnet. Dies hat weitreichende Konsequenzen für das Verständnis der dynamischen Prozesse in komplexen Zustandsräumen, da es einen Erklärungsansatz liefern kann, wieso stochastische Optimierungsverfahren auch in Situationen erfolgreich angewandt werden können, in denen frühere Hypothesen wie *deep valleys have large rims* nicht zutreffen und auch wieso bei Prozessen wie der Proteinfaltung ein bestimmtes und mit einer speziellen Funktionalität verbundenes energetisches Minimum innerhalb kürzester Zeit gefunden werden kann.

In den Abbildungen 2.2 und 2.3 ist ein Beispiel eines solchen *Trapping-Effekts* im Rahmen unseres Modellsystems dargestellt. Dabei stellen wir in einem Aufbau entsprechend System 2 aus Abbildung 2.1 zwei Täler mit exponentiellem Anstieg der Ent-

artung der Knoten aber unterschiedlichen *Trapping-Temperaturen* von $T^{(1)} \approx 0,259$ und $T^{(2)} \approx 0,563$. Zusätzlich ist das Haupttal ebenfalls mit exponentiellem Anstieg der Entartung und $T^{(HT)} \approx 0,597$ belegt. Das führt insgesamt zu einer Situation, in der Tal 2 einen geringfügig schmalen Rand als Tal 1 hat, aber bereits eine Ebene unterhalb breiter als Tal 1 ist. Demgegenüber ist Tal 1 um 2 Ebenen tiefer, was die Gleichgewichtsverteilung der Aufenthaltswahrscheinlichkeiten bei tiefen Temperaturen wesentlich beeinflusst.

Innerhalb dieses Aufbaus senken wir die Temperatur linear von $T_A = 0,6$ bis $T_E = 0,05$ in 10 Schritten mit jeweils einer (variablen) Anzahl von Annealing-Schritten $M \in [1 \dots 2^{20}]$ zwischen den Temperaturschritten. Wie man in Abbildung 2.2 gut erkennen kann, befindet sich nach schnellen Annealing-Prozessen (wegen seines breiteren Randes) und langsamen Annealing-Prozessen (wegen seiner größeren Tiefe) der Hauptteil der Wahrscheinlichkeit in Tal 1. Bei Annealing-Prozessen von mittlerer Geschwindigkeit kann jedoch ein Großteil der Wahrscheinlichkeit in Tal 2 fließen und es dann nicht mehr verlassen. Dieser Vorgang wird durch den Zeitverlauf des Prozesses (Abbildung 2.3) noch verdeutlicht.

Dieses Ergebnis widerspricht einerseits der oft verwendeten Annahme, dass bei einem Annealing-Prozess das globale Minimum bei der geringsten Geschwindigkeit mit der größten Wahrscheinlichkeit und beim Schockkühlen mit der geringsten Wahrscheinlichkeit gefunden wird.

Andererseits macht es deutlich, dass der Verlauf dynamischer Prozesse nicht nur von der energetischen Lage der lokalen Minima und der Barrieren abhängt, sondern auch von den lokalen Zustandsdichten und Konnektivitäten wesentlich beeinflusst wird. Deshalb ist bei der Vergrößerung von Zustandsräumen besonders darauf zu achten, dass diese lokalen Zustandsdichten und Konnektivitäten nicht verfälscht werden.

Bei den Untersuchungen der vergrößerten Zustandsraumstruktur unter dem Einfluss innerer Barrieren sowie der Zustandsdichte großer Systeme konnten noch keine Fortschritte erzielt werden.

2.4.2 Teilaufgabe Relaxationsverhalten auf Fraktalen

Die Arbeiten auf dem Gebiet der Struktur von Fraktalen und den damit in Verbindung stehenden dynamischen Prozessen im Zustandsraum wurden bis Ende 2005 weitergeführt. Die folgenden im Bericht 2002 bis 2004 ausführlich erläuterten Ergebnisse

- Untersuchungen der Diffusion auf Fraktalen
- Bestimmung der Random-Walk-Dimension
- Random Walker auf dynamisch erzeugten Fraktalen
- Untersuchung der Diffusion mittels Mastergleichung
- Weiterentwicklung paralleler Algorithmen

wurden komplettiert.

Die im Finanzierungsantrag 2005–2007 in Unterkapitel 3.5.1.2 formulierten Ziele konnten bis Ende 2005 teilweise erreicht werden. Wie im folgenden dargestellt, betrifft dies die Unterpunkte „Zufallsfraktale“ sowie den Einsatz und die Verbesserung der Leistungsfähigkeit paralleler Algorithmen.

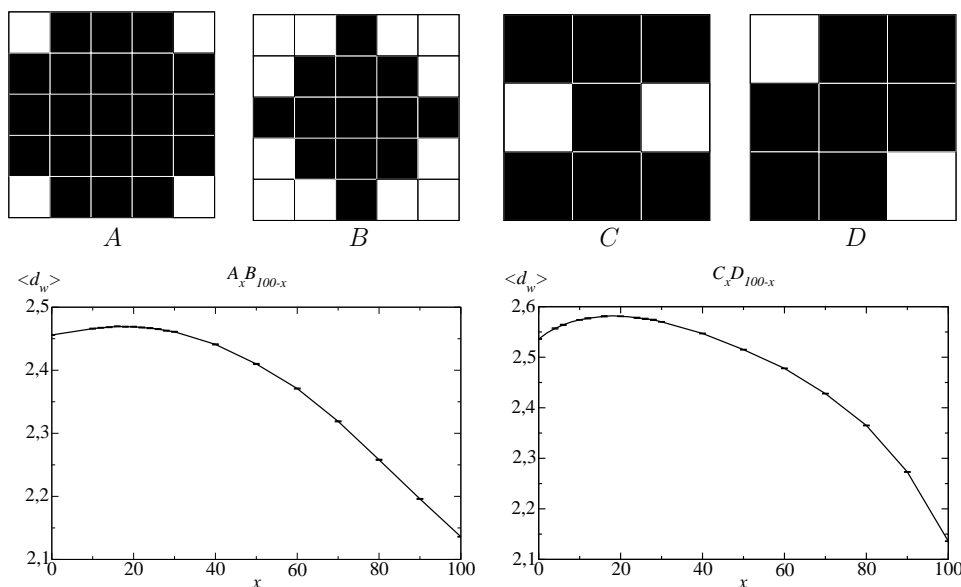


Abbildung 2.4: Oben: Generatoren für die Erzeugung zufälliger Sierpinsky-Carpets. Fraktale Dimensionen: $d_w^A = 2.14$, $d_w^B = 2.46$, $d_w^C = 2.14$, $d_w^D = 2.54$. Unten: $\langle d_w \rangle$ in Abhängigkeit vom prozentualen Anteil x für die Mischungen $A_x B_{100-x}$ (links) und $C_x D_{100-x}$ (rechts).

In einer der neu entstandenen Publikationen [AHST05] steht die Generierung von Sierpinsky-Carpets aus Mischungen von Generatoren gleicher und ungleicher fraktaler Dimension und die Diffusionsvorgänge auf den entstehenden Carpets im Vordergrund. Bedeutsam ist es, die mit der Diffusion verbundene fraktale Dimension d_w zu ermitteln, die mit dem mittleren Quadrat des Abstandes $\langle r^2 \rangle$ eines Random Walkers vom Ausgangspunkt nach einer Zeit t durch die Gleichung

$$\langle r^2 \rangle \sim t^{2/d_w} \quad (2.1)$$

verknüpft ist.

Dazu wurden durch zufällig kombinierte Aufrufe verschiedener Generatoren die dadurch entstandenen zufälligen Sierpinsky-Carpets untersucht. In Abbildung 2.4 ist beispielhaft nur eines der wesentlichsten Resultate dieser Arbeit dargestellt. Jeweils zwei Generatoren für Sierpinsky-Carpets werden gemischt, das heißt, mit verschiedenen prozentualen Wahrscheinlichkeiten aufgerufen, um das Carpet zu erzeugen. Das erstaunliche Ergebnis ist, dass die fraktalen Dimensionen für Random Walker nicht monoton von diesen Wahrscheinlichkeiten abhängen, sondern einen Extremwert bei einem bestimmten Mischungs-

verhältnis annehmen. Wie in [AHST05] dargelegt, trifft dies sogar auf Mischungen von Generatoren gleicher Dimension zu.

Die gefundenen Extrema sind nicht notwendigerweise Maxima. Es wurden auch Kombinationen von Generatoren gefunden, die zu einem Minimum von d_w für ein bestimmtes Mischungsverhältnis führten. Dies entspricht interessanterweise einer unerwarteten *Erhöhung* der Diffusionsgeschwindigkeit trotz zusätzlich in die Struktur eingebrachter Unordnung.

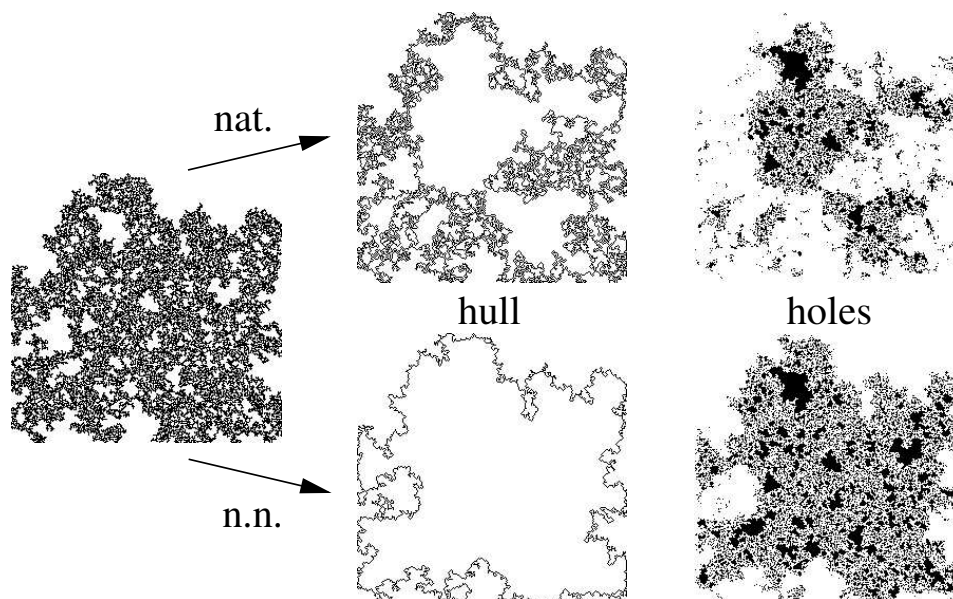


Abbildung 2.5: Beispiel für ein Percolations-Cluster (links): Außenrand und Hohlräume für natürliche Ränder (oben) und Ränder für Transport in Hohlräumen (unten).

Eine weitere interessante Fragestellung betrifft die fraktalen Dimensionen von Randlinien oder Grenzflächen. Diese Frage wurde für die Randlinien verschiedener zweidimensionaler Cluster untersucht. Auf dreidimensionale Gebilde übertragen, könnte die Beantwortung dieser Frage sogar zu unmittelbarer praktischer Bedeutung gelangen, zum Beispiel bei der Untersuchung von geologischen Formationen, die durch natürliche Wachstumsprozesse entstanden sind.

In den vergangenen Monaten gelang es uns, für drei verschiedene Arten von Fraktalen, das reguläre Sierpinsky-Carpet, das zufällig generierte Sierpinsky-Carpet und den zufälligen Percolations-Cluster, den Nachweis zu erbringen, dass die fraktalen Dimensionen des Außenrandes und die Dimensionen der Ränder aller Hohlräume übereinstimmen, wenn der Cluster durch einen einheitlichen Wachstums-Algorithmus entstanden ist [BSS⁺06]. Für den Fall des regulären Sierpinsky-Carpet gelang dieser Nachweis sogar exakt auf analytischem Weg.

Dieses Ergebnis konnte bei allen Strukturen für zwei verschiedene Definitionen für die Ränder erzielt werden, bei denen eine Randlinie durch nur punktweise aneinander stoßen-

de Teile des Clusters entweder unterbrochen wird (natürliche Randlinie) oder fortgesetzt wird (praktisch bedeutsam für Transportvorgänge in Hohlräumen). Der Unterschied zwischen beiden Definitionen ist in Abbildung 2.5 dargestellt (Die für Transportvorgänge in Hohlräumen geeignete Definition wird durch „n.n.“ für „next neighbour“ gekennzeichnet.).

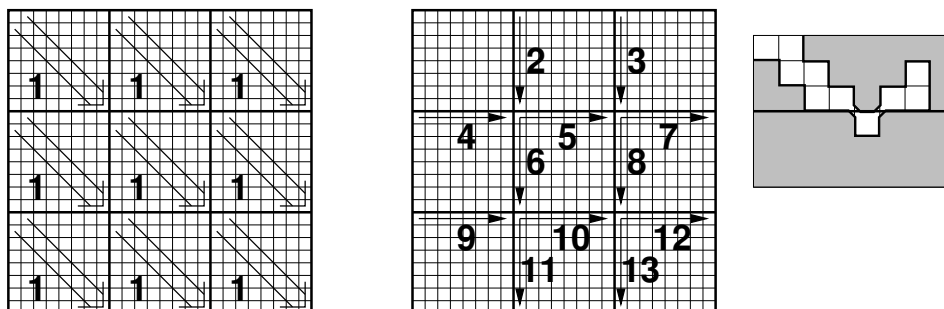


Abbildung 2.6: Parallelisierte Hoshen-Kopelman-Analyse, vereinfacht für eine 3×3 -Aufteilung. links: Schritt 1, Analyse der kleinen Teilquadrate, parallel und unabhängig, rechts: Sequentielle Umnummerierung durch Analyse der Grenzlinien (Detail: Beispiel für die Verknüpfung zweier Hohlräume im oberen Quadrat durch einen kleinen Hohlraum im Quadrat darunter).

Für die Analyse der Topologie großer Cluster wird gewöhnlich der Hoshen-Kopelman-Algorithmus benutzt. Dieser erwies sich jedoch als ungenügend für die Untersuchung sehr großer Cluster. Deshalb wurde von uns in [BSS⁺06] ein paralleler Algorithmus entwickelt, dargestellt in Abbildung 2.6, bei dem zunächst kleine Teilmengen der Cluster gleichzeitig analysiert werden und danach durch sorgfältige Untersuchung der Grenzlinien die endgültige Analyse mit vollständiger Numerierung der Cluster-Bestandteile und Hohlräume vorgenommen wird.

	random SC (nat.)	random SC (n.n.)	percolation cluster (nat.)	percolation cluster (n.n.)
hull dim.	1.48	1.37	1.76	1.36
hole dim.	1.474	1.364	1.744	1.346

Tabelle 2.1: Ergebnisse für Außenrand- und Hohlraum-Dimensionen für natürliche Ränder (nat.) und Ränder für Transport in Hohlräumen (n.n.). (500 Cluster 1024×1024 , fettgedruckt: 50 Cluster 4096×4096)

Eine Zusammenfassung der numerischen Ergebnisse ist in Tabelle 2.1 dargestellt. Die fraktalen Dimensionen von Außenrand und Hohlräumen stimmen im Rahmen der Standardabweichungen (± 0.02 für die Außenrand-Daten, ± 0.006 für die Hohlraum-Daten) überein.

2.4.3 Teilaufgabe Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern

Bereits in der Vergangenheit konnte das Verhalten verschiedener Alterungsphänomene bei Spingläsern anhand hierarchischer Baummodelle erfolgreich erklärt und nachvollzogen werden. Weiterhin konnte der Ansatz der hierarchischen Baummodelle als Grundlage zur Beschreibung des Zustandsraumes verifiziert werden, indem die Zustandsraumstruktur eines Ising-Spinglases durch Enumeration untersucht und barrierefrei vergrößert wurde. Aufbauend auf diesen Ergebnissen wurde mit der Modellierung der bisher noch nicht beschriebenen ac-Suszeptibilitätsexperimente in zwei Stufen begonnen.

Zum einen wurde zur Darstellung des Propagators einer Temperaturrampe die Temperaturabhängigkeit der Eigenwerte und Eigenvektoren der Übergangsmatrix untersucht. Diese Untersuchungen haben sich als sehr schwierig erwiesen, da die analytische Temperaturabhängigkeit bereits bei relativ kleinen Systemen eine nicht mehr beherrschbare Komplexität aufweist. Um an dieser Stelle weitere Fortschritte erzielen zu können, wurde mit der Suche nach geeigneten Näherungsverfahren zur Darstellung der Temperaturabhängigkeit der Eigenwerte und Eigenvektoren begonnen.

Zum anderen wurde der bisher erfolgreich zur Bestimmung von Magnetisierung und Relaxationsrate verwendete Ansatz der linearen Responsetheorie herangezogen um die ac-Suszeptibilitätsexperimente nachzubilden. Dabei wurden die Temperaturrampen nicht mit Hilfe eines Propagators (siehe oben) sondern als Abfolge diskreter Schritte modelliert. Die Ergebnisse dieser Modellierung zeigen bisher noch keine Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden. Mögliche Ursachen hierfür könnten nach dem aktuellen Stand der laufenden Untersuchungen in der Verwendung diskreter Temperaturschritte oder in der speziellen, aber bei vorangegangenen Modellierungen von Alterungsphänomenen erfolgreichen Wahl der magnetischen Überlappfunktion unter Verwendung des ultrametrischen Abstandes der Knoten liegen.

Insgesamt konnten die Arbeiten im Bereich der Modellierung von Aging-Experimenten in Spingläsern im Jahr 2005 noch nicht abgeschlossen werden.

Literaturverzeichnis

- [AHST05] D. H. N. Anh, K. H. Hoffmann, S. Seeger, and S. Tarafdar. Diffusion in disordered fractals. *Europhys. Lett.*, 70(1):109–115, 2005.
- [BHss] P. Blaudeck and K. H. Hoffmann. Optimizing simulated annealing schedules for amorphous carbons. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 227. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [BSS⁺06] P. Blaudeck, S. Seeger, C. Schulzky, K. H. Hoffmann, T. Dutta, and S. Tarafdar. The coastline and lake shores of a fractal island. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 39:1609–1618, 2006.
- [Fised] A. Fischer. PhD thesis, Chemnitz University of Technology, Chemnitz, to be published.

- [FSDH⁺ss] A. Franz, C. Schulzky, N. A. Do Hoang, S. Seeger, J. Balg, and K. H. Hoffmann. Random walks on fractals. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 305. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [HFSSss] K. H. Hoffmann, A. Fischer, S. Schubert, and T. Streibert. Modelling aging experiments in spin glasses. In K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel algorithms and cluster computing*, page 283. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [HH05] F. Heilmann and K. H. Hoffmann. Parq – high-precision calculation of the density of states. *Europhys. Lett.*, 70(2):155–161, 2005.
- [HHS04] K. H. Hoffmann, F. Heilmann, and P. Salamon. Fitness Threshold Accepting over extremal optimization ranks. *Phys. Rev. E*, 70(4):046704–1 – 046704–6, 2004.
- [HMss] K. H. Hoffmann and A. Meyer, editors. *Parallel algorithms and cluster computing - implementations, algorithms, and applications -*. Springer Verlag, Berlin, in press.
- [Hof02] K. H. Hoffmann. The statistical physics of energy landscapes: From spin glasses to optimization. In K. H. Hoffmann and M. Schreiber, editors, *Computational Statistical Physics*, chapter 4, pages 57–76. Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [HS05] K. H. Hoffmann and J. C. Schön. Kinetic features of preferential trapping on energy landscapes. *Foundations of Physics Letters*, 18(2):171–182, 2005.
- [SH06] S. Schubert and K. H. Hoffmann. The structure of enumerated spin glass state spaces. *Comp. Phys. Comm.*, 174:191–197, 2006.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Eine Fortsetzung der Arbeiten an den Aufgaben dieses Teilprojektes ist im Rahmen verschiedener Einzelprojekte vorgesehen.

- Kann eine Methode implementiert werden, die den Zustandsraum eines Spinglases gerade soweit vergrößert, dass die dynamischen Eigenschaften des Systems nicht wesentlich verändert werden? Wie muss die innere Struktur sehr großer Cluster beschaffen sein, damit dies möglich wird?
- Wie könnte eine solche Methode effektiv parallelisiert werden? Hierzu könnten sich Schemata anbieten, die eine Gebietszerlegung im Zustandsraum benutzen, um benachbarte Zustände zusammenzufassen.
- Wie kann das unterexponentielle Wachstum der Zustandsdichte am besten charakterisiert werden?
- Auf Fraktalen kann auch eine Energiefunktion definiert sein. Dann existieren Vorzugsrichtungen für Zufallswanderer auf diesen. Wie ist dann das Wechselspiel zwischen Random-Walk-Dimension und Energiefunktion zu charakterisieren?
- Kann man mit Hilfe der linearen Response-Theorie die ac-Suszeptibilität der hierarchischen Modelle für die neueren Experimente mit Temperaturrampe bestimmen, und darauf aufbauend die experimentell beobachteten Effekte reproduzieren?

