

Wanderungen in Energielandschaften

Ein Schlüssel zum Verständnis komplexer Systeme

Andreas Heuer, Michael Kastner, Alexander Karl Hartmann und Martin Weigel

Ungeordnete Systeme von Biopolymeren über strukturelle Gläser bis hin zu Spingläsern faszinieren durch ihre vielfältigen Eigenschaften und ihr komplexes Verhalten. Um tiefere Einsichten zu gewinnen, halten Physiker in den zugrundeliegenden „Energielandschaften“ nach besonders interessanten Gipfeln und Tälern Ausschau, fast wie der Wanderer auf dem berühmten Gemälde von Caspar David Friedrich.

Viele physikalische Systeme lassen sich durch eine Energiefunktion charakterisieren, welche die Abhängigkeit der Energie von den Freiheitsgraden beschreibt. Dies kann die Hamilton-Funktion eines klassischen Systems sein oder die freie Energie in der Thermodynamik. Die Energiefunktion kodiert das physikalische Verhalten des Systems: So legt z. B. die Hamilton-Funktion die Trajektorien der einzelnen Partikel fest. In der Praxis ist diese Information aber schwer zugänglich, da exakte Lösungen nur in Ausnahmefällen bekannt sind.

Eine mögliche Strategie besteht dann darin, die Energiefunktion mit den Augen eines Wanderers zu betrachten, der seinen Weg im Gebirge sucht: Geschickterweise lenkt er seine Aufmerksamkeit auf Gipfel oder Täler, die er vielleicht erreichen möchte, sowie auf Sättel, über die er am einfachsten von einem Tal ins nächste gelangen kann. Diese Konzentration auf markante Merkmale der Topographie kann, übertragen auf die Landschaft einer Energiefunktion, auch in der Physik komplexer Systeme sehr nützlich sein: Bei tiefen Temperaturen hält sich ein System in der Nähe von lokalen Minima der Energielandschaft auf, während für die Dynamik die Sättel zwischen den Minima relevant sind.

In besonders einfachen Fällen besitzt ein System nur wenige Freiheitsgrade, wie bei einfachen molekularen Reaktionen. Dann ist die Energielandschaft noch recht übersichtlich und lässt sich z. B. mittels quantenchemischer Methoden bestimmen (Abb. 1a). Manchmal lässt sich eine hochdimensionale Landschaft auch auf wenige Dimensionen projizieren und in Abhängigkeit von einigen wenigen reduzierten Koordinaten darstellen. Diese können unter anderem Bindungswinkel oder geeignet gewählte Abstände für Proteine sein, für die es inzwischen auch möglich ist, die Energielandschaft numerisch zu berechnen (Abb. 1b). Während sich in diesen Fällen die zugehörige Landschaft noch recht einfach grafisch darstellen und damit auch interpretieren lässt, ist man im Allgemeinen jedoch mit einem hochdimensionalen Konfigurationsraum konfrontiert, sodass die darstellbaren zweidimensionalen Schnitte nur noch von begrenztem Nutzen sind. So genannte Diskonnektivitätsgraphen erlauben es jedoch, auch solche hochdimensionalen Landschaften in einer Baumstruktur zu veranschaulichen und wichtige Informationen über die Dynamik zu gewinnen (Abb. 2). Eine solche Darstellung verdeutlicht grundlegende Unterschiede zwischen Proteinen und strukturellen Gläsern oder Spingläsern. Die Tatsache, dass Proteine auf kurzen Zeitskalen ihren nativen Grundzustand tatsächlich finden können, obwohl dies durch eine



„Der Wanderer über dem Nebelmeer“ (1818) von Caspar David Friedrich

tieren lässt, ist man im Allgemeinen jedoch mit einem hochdimensionalen Konfigurationsraum konfrontiert, sodass die darstellbaren zweidimensionalen Schnitte nur noch von begrenztem Nutzen sind. So genannte Diskonnektivitätsgraphen erlauben es jedoch, auch solche hochdimensionalen Landschaften in einer Baumstruktur zu veranschaulichen und wichtige Informationen über die Dynamik zu gewinnen (Abb. 2). Eine solche Darstellung verdeutlicht grundlegende Unterschiede zwischen Proteinen und strukturellen Gläsern oder Spingläsern. Die Tatsache, dass Proteine auf kurzen Zeitskalen ihren nativen Grundzustand tatsächlich finden können, obwohl dies durch eine

KOMPAKT

- Das Verhalten ungeordneter Systeme ist durch konkurrierende Wechselwirkungen geprägt.
- Diese führen, verglichen mit einfachen Systemen, zu einer wesentlich komplexeren Struktur („Energielandschaft“) mit vielen lokalen Minima und Barrieren im hochdimensionalen Konfigurationsraum.
- Die vielfältigen dynamischen und statistisch-physikalischen Eigenschaften ungeordneter Systeme lassen sich als Spiegelbild topographischer Merkmale der zugrundeliegenden Energielandschaften verstehen.

Prof. Dr. Andreas Heuer, Institut für Physikalische Chemie, WWU Münster, Corrensstr. 28/30, 48419 Münster; Prof. Dr. Michael Kastner, National Institute for Theoretical Physics, Wallenberg Research Centre, 10 Marais Street, Stellenbosch 7600, Südafrika; Prof. Dr. Alexander K. Hartmann, Institut für Physik, Universität Oldenburg, 26111 Oldenburg; Dr. Martin Weigel, Institut für Physik, Universität Mainz, Staudinger Weg 7, 55099 Mainz

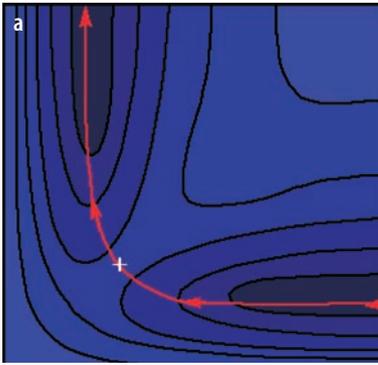
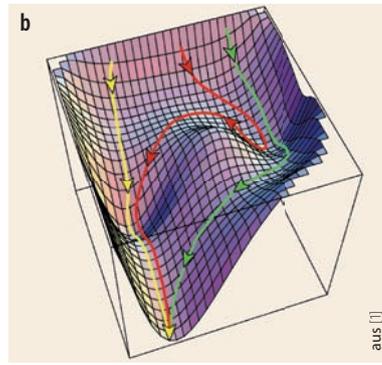


Abb. 1 Die Energielandschaft der chemischen Reaktion $A + BC \rightarrow AB + C$ wird von den Abständen d_{AB} bzw. d_{BC} aufgespannt (a). Aus der Höhe der Minima (dunkle Bereiche) sowie des Sattelpunktes (+), der diese verbindet, lassen sich Reaktions-Aktivierungsenergien



bestimmen. Beim Protein Lysozym lässt sich die Energielandschaft aus Experimenten ableiten (b): Verschiedene Faltungspfade (gelb, rot, grün) mit unterschiedlichen Zwischenzuständen führen in den nativen Grundzustand des Proteins.

rein zufallsgesteuerte Suche im Raum der metastabilen Zustände um viele Größenordnungen länger dauern würde – eine Tatsache, die auch als Levinthal-Paradox bezeichnet wird –, hängt vermutlich gerade mit dieser Trichterstruktur der Energielandschaft zusammen. Für natürlich vorkommende Biopolymere ist ein solcher eindeutiger Grundzustand entscheidend, da die biologische Funktion von Proteinen sehr eng mit ihrer räumlichen Struktur verknüpft ist. Für strukturelle Gläser oder Spingläser hingegen existieren viele nahezu gleichberechtigte Energietäler, was zu deutlich unterschiedlichen physikalischen Eigenschaften führt.

Häufig werden numerische Simulationen zur Untersuchung von Energielandschaften eingesetzt [3]. Es ist aber auch möglich, deren Eigenschaften experimentell aus Reaktionsraten, Isotopeneffekten oder Schwingungsfrequenzen zu rekonstruieren. Im Allgemeinen ist es aber weder durch numerische noch durch experimentelle Methoden möglich, die lokalen Minima und Sattelpunkte vollständig zu charakterisieren, da die Anzahl dieser Punkte typischerweise exponentiell mit der Systemgröße ansteigt. Die Frage ist dann, ob sich zumindest statistische Eigenschaften ermitteln lassen. Und weiterhin: Können die grundlegenden Eigenschaften der Landschaft mit physikalischen Beobachtungen wie dem Auftreten von Phasenübergängen in Verbindung gebracht werden? Diese Fragen sind der Ausgangspunkt für spannende Forschungsreisen etwa in der Theorie der unterkühlten Flüssigkeiten und Spingläser, hin zu einem neuen, grundlegenden

Verständnis von Phasenübergängen oder zur Untersuchung von Optimierungsproblemen aus dem Blickwinkel der statistischen Physik.

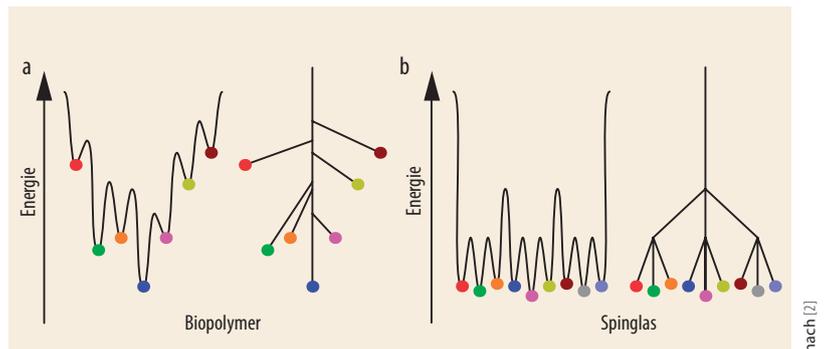
Von der Flüssigkeit zum Glas

Wird beim Glasblasen eine Flüssigkeit hinreichend schnell abgekühlt, so geht sie statt in einen kristallinen Zustand in einen metastabilen, unterkühlten Zustand über. Bei weiterem Absenken der Temperatur verlangsamt sich die Dynamik der Atome oder Moleküle stetig, bis sich die Flüssigkeit schließlich ab der Glasübergangs-Temperatur auf experimenteller Zeitskala wie ein Festkörper verhält – der Glasübergang hat stattgefunden.

Eine charakteristische Kenngröße der Dynamik ist die Diffusivität D der einzelnen Atome bzw. Moleküle. Deren Temperaturabhängigkeit ist gegeben durch $D(T) = D_0 \exp(-V(T)/k_B T)$, wobei $V(T)$ die effektive Aktivierungsenergie ist. Ein temperaturunabhängiger Wert von $V(T)$, das Arrhenius-Verhalten, tritt bei dynamischen Prozessen auf, die durch einen aktivierten Übergang über eine feste Barriere beschrieben werden, beispielsweise die Defektdiffusion in Festkörpern. Bei Glasbildnern hingegen steigt, von wenigen Ausnahmen abgesehen, $V(T)$ mit fallender Temperatur an. Ein analoges Verhalten weisen auch die Viskosität oder die Strukturrelaxation auf. Das Verständnis dieses Anstiegs und der daraus resultierenden starken Verlangsamung bei tiefen Temperaturen ist eines der zentralen Ziele der Forschungsarbeiten zu strukturellen Gläsern.

Das Konzept der Energielandschaft erlaubt es, wichtige Aspekte dieser Frage zu beantworten [4, 5]. Die Zustandsdichte $G(E)$ der lokalen Energieminima lässt sich für verschiedene Glasbildner in guter Näherung durch eine Gauss-Verteilung beschreiben. Wegen des allgegenwärtigen Boltzmann-Faktors werden bei tieferen Temperaturen im Mittel auch tiefere Energieminima besetzt. Wie kann das System aus einem tief liegenden Zustand mit Energie E_{tief} entweichen? Wegen der sehr kleinen Dichte von Zuständen niedriger Energien (Ausläufer der Gauss-Verteilung von $G(E)$) ist ein tief liegendes Minimum im Konfigurationsraum typischerweise ausschließlich von höher liegenden Minima umgeben. Der Prozess des Entweichens entspricht somit anschaulich einem Höherklettern in der Energielandschaft. Von einer Grenzenergie E_c an

Abb. 2 Die Energielandschaften (jeweils links) eines gut faltenden Biopolymers mit typischer Trichterstruktur (a) und eines Spinglases (b) unterscheiden sich deutlich. Gleiches gilt für die Diskonnektivitätsgraphen (jeweils rechts), bei denen jeder Ast einem Minimum der Energielandschaft entspricht. Zusammengeführt werden zwei Äste jeweils bei der Energie der Barriere zwischen den beiden Minima.



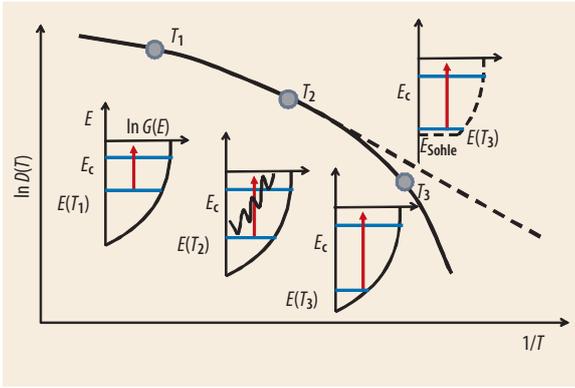


Abb. 3 Bei den meisten Glasbildnern weicht die Diffusivität $D(T)$ (durchgezogen) vom Arrhenius-Verhalten (gestrichelt) ab. Dies lässt sich im Bild der Energielandschaften darauf zurückführen, dass der Abstand zwischen den typischen besetzten Energien $E(T_i)$ – im Haupttext allgemein als E_{tief} bezeichnet – und der Grenzenergie E_c für tiefe Temperaturen immer größer wird (rote Pfeile in den logarithmischen Darstellungen der Minimum-Zustandsdichte $G(E)$). Die Aktivierung geschieht jeweils über einige Zwischenzustände (Skizze bei T_2). Bei SiO_2 hingegen gibt es eine untere Grenze der Landschaft (E_{sohle}), aus der ein reines Arrhenius-Verhalten im relevanten Temperaturregime resultiert.

gibt es aus statistischen Gründen (manifestiert in der höheren Zustandsdichte) benachbarte Minima mit ähnlicher Energie. Von dieser Energie an ist keine weitere Aktivierung zum Transport nötig, mit Ausnahme der typischerweise relativ kleinen Barriere V_0 zwischen benachbarten Minima. Die resultierende Aktivierungsenergie ist somit gegeben durch $V_0 + E_c - E_{\text{tief}}$. Nach einer geeigneten Mittelung über die typischen Zustände, die das System bei der Temperatur T annimmt, ergibt sich für die resultierende Aktivierungsenergie $V(T) = V_0 + E_c - \langle E(T) \rangle / 2$, wobei $\langle E(T) \rangle$ die mittlere potentielle Energie bezeichnet [5]. Da bei tieferen Temperaturen niedrigere Energien relevant sind, lässt sich somit ganz natürlich erklären, wieso bei den meisten Glasbildnern $V(T)$ mit fallender Temperatur ansteigt (**Abb. 3**).

Eine wichtige Ausnahme hiervon ist reines SiO_2 , welches im experimentell zugänglichen Bereich ein Arrhenius-Verhalten aufweist, d. h. $V(T) = \text{const.}$ Dieser Glasbildner zeichnet sich durch eine klar ausgeprägte lokal tetraedrische Struktur aus: Ein Si-Atom ist von vier O-Atomen umgeben und ein O-Atom von zwei Si-Atomen. Man spricht auch von einem Netzwerk. Defekte liegen dann vor, wenn die lokale Ordnung gestört ist. Es zeigt sich nun, dass die Energie einer Konfiguration stark mit der Anzahl der Defekte korreliert: je tiefer die Energie, desto kleiner die Anzahl von Defekten. Bei der Energie E_{sohle} liegen keine Defekte mehr vor, und diese Energie dient als effektive untere Grenze der Energielandschaft [6]. Die Existenz der unteren Grenze ist also eine direkte Folge der Netzwerkstruktur von SiO_2 . In einem breiten Temperaturbereich gilt somit $V(T) = V_0 + E_c - E_{\text{sohle}}$, entsprechend einem reinen Arrhenius-Verhalten (**Abb. 3**).

Eine genauere Analyse zeigt, dass sich die Dynamik als Zufallsbewegung zwischen verschiedenen „Metabasen“ beschreiben lässt, die sich aus der Zusammen-

fassung benachbarter Minima ergeben. Dadurch ist es möglich, eine sehr detaillierte Beschreibung der dynamischen Prozesse von Glasbildnern im Rahmen der Sprache der Energielandschaften zu formulieren.

Wenn Spins frustriert sind

Auch für das Studium ungeordneter magnetischer Systeme erweist sich das Konzept der Energielandschaften als äußerst fruchtbar. Klassische Spingläser entstehen aus zufällig verteilten Störstellen magnetischer Übergangsmetalle, beispielsweise Mangan, in einem regulären Kristallgitter eines unmagnetischen Metalls wie Gold. Die durch die Leitungselektronen des Metalls vermittelte effektive Wechselwirkung der eingebetteten magnetischen Momente („Spins“) ist dann, abhängig von deren Abstand zueinander, für manche Paare von Momenten ferromagnetisch, für andere dagegen antiferromagnetisch. Die Anwesenheit solcher widerstreitender Wechselwirkungen führt zur „Frustration“, da auch bei niedrigen Temperaturen nicht alle Paarwechselwirkungen zur gleichen Zeit ihren Grundzustand einnehmen können. In Verbindung mit der durch die zufällige Anordnung der magnetischen Momente bedingten Unordnung ergibt sich so ein ungewöhnliches thermodynamisches Verhalten, bei dem bis hin zu tiefsten Temperaturen keine langreichweitige Ordnung zu beobachten ist. Trotzdem kann ein Phasenübergang in eine Spinglasphase mit in

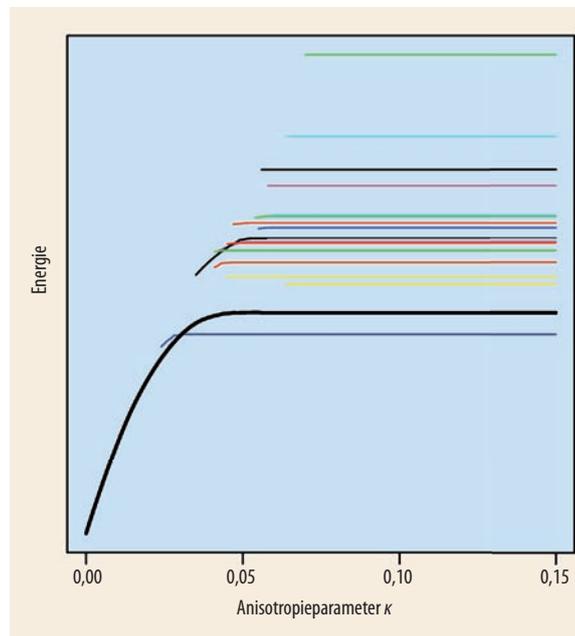


Abb. 4 Mithilfe des Anisotropieparameters κ im Spinraum lässt sich das Modell eines Vektorspinglases mit $m=5$ Spinkomponenten auf einem kubischen Gitter der Größe $6 \times 6 \times 6$ zwischen vollkommener Symmetrie ($\kappa = 0$) und dem klassischen Heisenberg-Modell mit drei Spinkomponenten ($\kappa \rightarrow \infty$) interpolieren. Jede Linie entspricht der κ -abhängigen Energie eines metastabilen Zustands. Die gewählte Zahl von fünf Spinkomponenten reicht bereits aus, damit das Energiespektrum bei $\kappa = 0$ zunächst nur eine Linie zeigt, also keine Metastabilität. Für zunehmendes κ werden Sattelpunkte zu metastabilen Minima, die als neue Linien erscheinen.

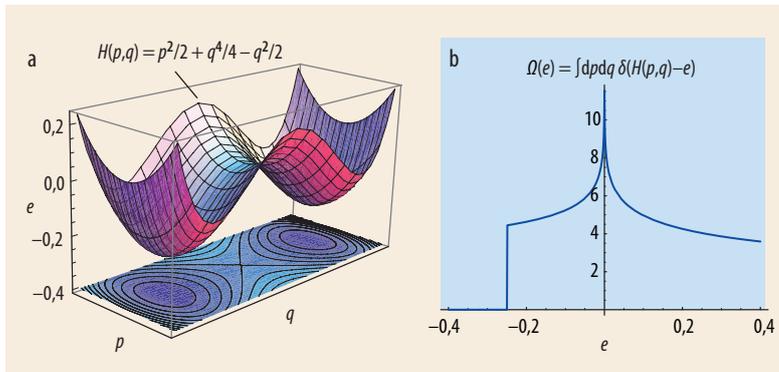


Abb. 5 Bereits für ein einzelnes Teilchen im eindimensionalen Doppelmuldenpotential, beschrieben durch die Hamilton-Funktion $H(p,q)$, besitzt die Energielandschaft drei stationäre Punkte (a): zwei Minima bei der Energie $e=-1/4$ und einen Sattelpunkt bei $e=0$. Stationäre Punkte

beeinflussen statistisch-physikalische Größen markant (b): Die Zustandsdichte $\Omega(e)$ weist einen Sprung bzw. eine Divergenz genau bei den Energien der stationären Punkte auf. Die meisten dieser Nichtanalytizitäten überleben jedoch den thermodynamischen Limes nicht.

zufälliger relativer Orientierung eingefrorenen magnetischen Momenten auftreten.

Spingläser und die oben diskutierten strukturellen Gläser in unterkühlten Flüssigkeiten haben wichtige Gemeinsamkeiten, nämlich die Anwesenheit von Frustration sowie das Fehlen langreichweitiger Ordnung. In beiden Fällen erzeugt die Kombination aus Frustration und (eingepprägter oder selbstinduzierter) Unordnung eine komplexe Landschaft der freien Energie mit einer Vielzahl lokaler Minima, die durch Sattelpunkte oder Übergangszustände miteinander verbunden sind. Diese Struktur liefert die anschauliche Erklärung für die Tatsache, dass das Auffinden von Grundzuständen in solchen Systemen im Allgemeinen ein exponentiell schwieriges Optimierungsproblem ist [7]. Das Studium niedrig liegender metastabiler Zustände, mit dem sich ein Teil der Landschaft erforschen lässt, erfordert daher in der Regel für das betrachtete Problem maßgeschneiderte Optimierungsalgorithmen, etwa basierend auf angepassten Monte-Carlo-Methoden oder genetischen Algorithmen [8, 9].

Für das Verständnis der Dynamik solcher Systeme ist die Kenntnis der Verteilung der Sattelpunkte und ihrer Indizes, also der Anzahl der Richtungen mit negativer Krümmung, entscheidend. Im Rahmen der Molekularfeldtheorie der Spingläser lassen sich hierüber noch analytische Aussagen gewinnen [10]. Dabei zeigt sich, dass in der Spinglasphase die Anzahl der Minima exponentiell mit der Systemgröße ansteigt und jedes Minimum von einem Übergangszustand begleitet wird, der nur in einer Richtung wie ein Maximum, in allen anderen dagegen wie ein Minimum aussieht. Am und über dem Übergangspunkt wächst die Anzahl solcher Minima nur noch schwächer als die Anzahl der Spins, sodass diese für hinreichend große Systeme keine Rolle mehr spielen. Für diskrete Spinsysteme, z. B. das Ising-Spinglas jenseits der Molekularfeldtheorie, ist es wesentlich schwieriger, solche Aussagen zu gewinnen. Methodisch sind wir hier bislang im Wesentlichen auf das vollständige Abzählen aller Zustände in sehr kleinen Systemen beschränkt. Etwas anders stellt sich

die Situation für kontinuierliche Spinsysteme dar, in denen die magnetischen Momente durch m -dimensionale Einheitsvektoren $\mathbf{s} = (s_1, \dots, s_m)^T$ dargestellt werden. Betrachtet man Systeme mit mehr als den üblichen $m=3$ Komponenten des Heisenberg-Modells, so zeigt sich, dass die Energielandschaft eines endlichen Systems für eine hinreichend große Zahl m von Spin-Komponenten in dem Sinne trivial wird, dass jegliche Metastabilität verschwindet und lediglich das globale Minimum übrig bleibt. Anschaulich rührt das daher, dass das System aus einem metastabilen Minimum entkommen kann, wenn ihm nur eine ausreichende Anzahl von Richtungen (also Spinkomponenten) zur Verfügung steht. In diesem Fall ist das vermeintliche Minimum also ein Sattelpunkt. Eine Variation der Anzahl m von Komponenten führt somit zu einer Verbindung der hoch komplexen Landschaft bei kleinem m zur Landschaft ohne Metastabilität bei sehr großem m . Führt man eine Anisotropie im Spinraum mit Parameter κ ein, so kann man eine kontinuierliche Interpolation zwischen den beiden Extremen erreichen (Abb. 4). Dabei durchläuft das System eine Kaskade von Übergängen, bei denen jeweils ein metastabiles Minimum aus einem Sattelpunkt entsteht. Die typische hierarchische Struktur der Landschaft in Spingläsern (Abb. 2) lässt sich so als Ergebnis einer Hierarchie solcher Umwandlungen des Charakters von stationären Punkten verstehen. Neben ihrem theoretischen Interesse hat diese Beobachtung auch praktische Konsequenzen für das Auffinden von Grundzuständen sowie die Simulation von Spingläsern, da die kontinuierliche Verbindung ihrer komplexen Landschaft mit den einfachen Landschaften bei großem m die extrem verlangsamte Dynamik erheblich beschleunigen kann.

Komplexe Systeme und ihre Phasen

In den bisher diskutierten Beispielen ermöglichte die Energielandschaft einen Zugang zum Verständnis insbesondere der Phasenübergänge komplexer Systeme wie etwa dem Glasübergang. Daher liegt es nahe, nach einem allgemeinen Zusammenhang zwischen der Topographie der Landschaft und dem Auftreten solcher Phasenumwandlungen zu fragen. Mathematisch lässt sich ein Phasenübergang typischerweise am nichtanalytischen Verhalten eines thermodynamischen Potentials, wie der freien Energie $f(T)$ als Funktion der Temperatur T , erkennen. Für die theoretische Beschreibung eines Phasenüberganges ist dann als idealisierendes Konzept der thermodynamische Limes unendlich großer Teilchenzahl vonnöten, da die Funktion f nur dann eine Nichtanalytizität entwickeln kann. Existiert dabei eine Verbindung zwischen dem Auftreten einer solchen Singularität und den stationären Punkten der zugrundeliegenden Landschaft?

Ein erster wichtiger Schritt zur Beantwortung dieser Frage geht auf die Erkenntnis zurück, dass das Vorhandensein von stationären Punkten der Landschaft in der Umgebung der Übergangsenergie e_c bei kurzreichwei-

tigen Wechselwirkungen *notwendig* ist, damit ein Phasenübergang bei der Übergangstemperatur $T_c \equiv T(e_c)$ auftritt [11] (Abb. 5). Zwar ist damit ein allgemeiner Zusammenhang zwischen stationären Punkten und Phasenübergängen hergestellt, es bleibt aber zunächst offen, welche der exponentiell vielen stationären Punkte im hochdimensionalen Konfigurationsraum nun für den Phasenübergang verantwortlich sind.

Es stellt sich heraus, dass hierfür das Krümmungsverhalten in Form der Determinante der Hesse-Matrix $\partial^2 V / (\partial q_i \partial q_j)$ des Vielteilchen-Potentials $V(q_1, \dots, q_N)$ an den stationären Punkten entscheidend ist [12]. Je flacher ein stationärer Punkt ist, also je weniger die Determinante der Hesse-Matrix an diesem Punkt von Null abweicht, desto stärker ausgeprägt sind die zugehörigen Singularitäten: Ein flacheres Potential führt also zu einem ausgeprägteren Sprung und einer schärferen Divergenz in der Zustandsdichte (Abb. 5). Im thermodynamischen Limes, also mit zunehmender Teilchenzahl N , werden zwar die Singularitäten schwächer (dies ist eine Folge der anwachsenden Dimensionalität des Konfigurationsraumes), man kann jedoch zeigen, dass eine gegen Null konvergierende Hesse-Determinante diesen Effekt kompensiert: Nur im Falle einer derartig verschwindenden Hesse-Determinante kann die durch den stationären Punkt hervorgerufene Singularität den thermodynamischen Limes $N \rightarrow \infty$ überleben und zu einem Phasenübergang, das heißt zu nichtanalytischem Verhalten der freien Energie, führen.

Wie kann man sich diesen Zusammenhang nun zunutze machen? Für besonders einfache Modellsysteme ist es manchmal möglich, *alle* stationären Punkte bei beliebiger Teilchenzahl zu bestimmen und dann die Hesse-Determinante an diesen Punkten direkt auszuwerten. Solche Rechnungen für gewisse klassische Spinsysteme bestätigen zwar die Gültigkeit des „Flachheits-Kriteriums“ [13], sind aber nur von begrenztem praktischen Wert: Eine vollständige Berechnung aller stationären Punkte eines wechselwirkenden Vielteilchensystems wird sicherlich nur in den wenigsten Fällen möglich und zudem aufwändiger sein, als eine exakte thermodynamische Lösung des Problems. Die Stärken des Energielandschaft-Konzeptes kommen erst zur Geltung, wenn es gelingt, eine Klasse von besonders einfachen, aber relevanten stationären Punkten zu konstruieren und auszuwerten. Ein einfaches Beispiel solch einer Klasse für ein wechselwirkendes Gas in einem rechteckigen Behälter mit periodischen Randbedingungen ist die Anordnung der Gasteilchen auf einem regelmäßigen, z. B. kubischen Gitter. Die Symmetrie dieser Anordnung führt zu einem Kräftegleichgewicht, die Konfiguration ist also stationär (wenn auch nicht unbedingt stabil). Mit dieser Strategie gelang etwa die Berechnung der exakten Übergangsenergie für ein eindimensionales Modell gravitierender Teilchen [14], und dieser Fall zeigt, wie stationäre Punkte der Energielandschaft für gewisse Fragen zu eleganten, analytischen Lösungen führen können. Mehr analytische Ergebnisse dieser Art für weitere Vielteilchensysteme sind in der Zukunft sicher noch zu erwarten.

Optimierung in der Energielandschaft

Das physikalisch motivierte Konzept der Energielandschaften ist aber auch in Gebieten jenseits der Physik hilfreich, beispielsweise beim Verständnis von Optimierungsproblemen. Das Erstellen von Stundenplänen ist ein Beispiel für die Allgegenwart von Optimierungsproblemen auch im täglichen Leben. Die Menge der möglichen Lösungen eines solchen Problems lässt sich dabei formal mit dem Konfigurationsraum eines physikalischen Systems identifizieren. Definiert man auf diesem Raum in geeigneter Weise eine Energiefunktion, so entsprechen die optimalen Lösungen des Problems den Minima der Energielandschaft. Von besonderem Interesse sind die „harten“ Probleme: Für diese gibt es exakte Algorithmen, also solche, die beweisbar ein Minimum finden. Die Laufzeit steigt dabei, im Gegensatz zu den „leichten“ Problemen, aber exponentiell mit der Systemgröße. Entsprechend ist eine exakte Lösung eines Stundenplans im ungünstigsten Fall nur für einige hundert Vorlesungen praktisch auffindbar.

Exponentielles Wachstum tritt jedoch nur im ungünstigsten Fall auf, stellt also eine obere Schranke an die Laufzeit dar. Insbesondere die statistische Physik betrachtet nun die ebenfalls relevante Frage der Schwierigkeit typischer Probleme, die nicht mit derjenigen der ungünstigsten Instanzen übereinstimmen muss. Für solche typischen Probleme gelang es, einige Klassen zu finden, bei denen Phasenübergänge auftreten [15]: Variiert man einen charakteristischen Parameter der Systemklasse, so sind nur in einem bestimmten Bereich von Parameterwerten exponentiell lange Rechenzeiten erforderlich.

Man kann dann versuchen, mittels analytischer [15] oder numerischer [16] Methoden einen Zusammenhang zwischen der Energielandschaft einer Problemklasse und der „Härte“ des Problems für Algorithmen herzustellen [15]. Ein Beispiel für solch einen Zusammenhang ist das Knotenüberdeckungsproblem (Abb. 6).

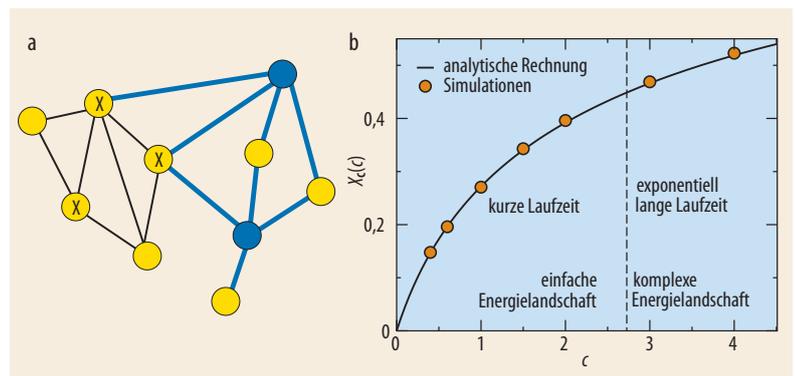


Abb. 6 Bei diesem Knotenüberdeckungsproblem sind zwei der Knoten des Graphen bedeckt (blaue Kreise) und somit auch die angrenzenden acht Kanten (blaue Linien). Man erhält eine Überdeckung, indem man zusätzlich z. B. die drei mit X markierten Knoten bedeckt. Für das Ensemble von Erdős-Rényi-Zufallsgraphen (b, vgl. Text) im Grenzfall $N \rightarrow \infty$ lassen sich Simulationen mit dem

Ergebnis von analytischen Näherungsmethoden für die Größe $X_c(c)/N$ der minimalen Überdeckungen pro Knoten als Funktion der mittleren Anzahl c von Nachbarn vergleichen. Für $c > e$ ist die Energielandschaft stark zerklüftet und es treten Abweichungen zwischen exaktem Simulationsergebnis und analytischer Näherungsrechnung auf.

Dieses Problem ist für Graphen definiert, also für eine Menge von „Knoten“ $i \in V$, von denen einige paarweise durch „Kanten“ $\{i, j\}$ verbunden sind. Für eine vorgegebene Teilmenge $V' \subset V$ werden alle Knoten in V' sowie alle Kanten, die an die Knoten in V' angrenzen, bedeckt genannt. Falls für ein V' alle Kanten des gesamten Graphen bedeckt sind, nennt man V' eine Überdeckung.

Die Suche nach Überdeckungen mit der kleinstmöglichen Anzahl von Knoten erweist sich als „hartes“ Optimierungsproblem. Man kann etwa Erdős-Rényi-Zufallsgraphen untersuchen, die aus N Knoten und im Mittel $Nc/2$ zufällig ausgelosten Kanten bestehen (c : mittlere Nachbarzahl). Hierfür lässt sich die Größe $X_c(c)$ der minimalen Überdeckungen über Computersimulationen bestimmen [16]. Eine Analyse zeigt, dass man für $c < e = 2,71\dots$ die minimalen Überdeckungen typischerweise noch sehr schnell berechnen kann, während für $c > e$ die Laufzeit exponentiell mit der Systemgröße ansteigt, sich dort also tatsächlich „hart“ verhält [15]. Interessanterweise ändern sich genau an dieser Grenze auch die Eigenschaften der Energielandschaft: Sie ist für $c < e$ sehr einfach strukturiert, für $c > e$ dagegen stark zerklüftet.

Für stochastische Algorithmen wie etwa Monte-Carlo-Simulationen, die auf lokalen Bewegungen im Konfigurationsraum basieren und durch eine zerklüftete Energielandschaft stark verlangsamt werden, ist der Zusammenhang zwischen der Landschaft und der „Härte“ noch recht offensichtlich. Für exakte Algorithmen ist ein solcher Zusammenhang jedoch bisher im Allgemeinen nicht bekannt. Diese Zusammenhänge sind ein Gegenstand der aktuellen Forschung, die sich auch mit der Entwicklung hocheffizienter Algorithmen auf der Basis von Kenntnissen über die Energielandschaft eines Problems befasst [17].

Weiterwandern zu neuen Erkenntnissen

Wichtige Eigenschaften des Gleichgewichts und Nichtgleichgewichts komplexer Systeme lassen sich direkt mit den topographischen Gegebenheiten der zugrundeliegenden Energielandschaften in Verbindung bringen. Exakte Lösungen oder vollständige Auflistungen aller stationären Punkte sind in der Regel nicht möglich. Nichtsdestotrotz erlaubt die statistische Beschreibung der Landschaften Einsichten in die Physik so unterschiedlicher Probleme wie die Faltung von Proteinen, das Verhalten von strukturellen und Spingläsern oder die Schwierigkeit von Optimierungsproblemen. Auch systemunabhängige Aussagen, namentlich ein Zusammenhang zwischen stationären Punkten und Phasenübergängen, lassen sich mit dem neuen Ansatz gewinnen. Energielandschaften erschließen damit ein übergreifendes, strukturelles Verständnis einer Vielzahl komplexer Systeme. Dabei steht dieser Forschungszweig noch am Anfang, sodass eine Vielzahl weiterer spannender Resultate in den kommenden Jahren zu erwarten ist.

Literatur

- [1] C. M. Dobson, A. Sali und M. Karplus, *Angew. Chem.* **110**, 909 (1998)
- [2] O. M. Becker und M. Karplus, *J. Chem. Phys.* **106**, 1495 (1997)
- [3] D. J. Wales, *Energy Landscapes*, Cambridge University Press, Cambridge (2003)
- [4] S. Sastry, P. G. Debenedetti und F. H. Stillinger, *Nature* **393**, 554 (1998)
- [5] A. Heuer, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 373101 (2008)
- [6] A. Saksengwijit, J. Reinisch und A. Heuer, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 235701 (2004)
- [7] A. K. Hartmann und H. Rieger, *Optimization Algorithms in Physics*, Wiley-VCH, Berlin (2001)
- [8] M. Weigel und M. J. P. Gingras, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 097206 (2006)
- [9] M. Weigel, *Phys. Rev. E* **76**, 066706 (2007)
- [10] T. Aspelmeier, A. J. Bray und M. A. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 087203 (2004)
- [11] R. Franzosi und M. Pettini, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 060601 (2004)
- [12] M. Kastner und O. Schmetz, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 160601 (2008)
- [13] M. Kastner, O. Schmetz und S. Schreiber, *J. Stat. Mech. Theory Exp.*, **P04025** (2008)
- [14] C. Nardini und L. Casetti, *Phys. Rev. E* **80**, 060103(R) (2009)
- [15] A. K. Hartmann und M. Weigt, *Phase Transitions in Combinatorial Optimization Problems*, Wiley-VCH, Berlin (2005)
- [16] A. K. Hartmann, *Practical Guide to Computer Simulations*, World-Scientific, Singapur (2009)
- [17] M. Mézard, G. Parisi und R. Zecchina, *Science* **297**, 812 (2002)

DIE AUTOREN

Andreas Heuer (FV Dynamik, Statistische Physik und FV Physik sozio-ökonomischer Systeme) studierte Physik in Dortmund und Heidelberg. Nach Postdoc-Aufenthalten am Massachusetts Institute of Technology und am Max-Planck-Institut für Polymerforschung hat er seit 1999 eine Professur für die Theorie komplexer Systeme an der WWU Münster inne.



Michael Kastner (FV Dynamik, Statistische Physik) studierte Physik an der Universität Erlangen-Nürnberg, wo er auch promovierte. Nach einem mehrjährigen Postdoc-Aufenthalt in Florenz ging er als wissenschaftlicher Assistent und späterer Privatdozent an die Universität Bayreuth. Seit 2009 ist er Chief Researcher am National

Institute for Theoretical Physics in Stellenbosch (Südafrika) und Associate Professor an der University of Stellenbosch.

Alexander Karl Hartmann (FV Dynamik, Statistische Physik und FV Physik sozio-ökonomischer Systeme) schloss Studien der Informatik (Fernuniversität Hagen) und Physik (Duisburg) jeweils mit dem Diplom ab und promovierte dann in theoretischer Physik (Heidelberg). Nach Postdoc Aufenthalten in Göttingen, Santa Cruz (USA) und Paris wurde er Leiter einer von der Volkswagenstiftung finanzierten Nachwuchsgruppe an der Universität Göttingen. Seit 2007 ist er Professor für computerorientierte theoretische Physik in Oldenburg.



Martin Weigel (FV Dynamik, Statistische Physik) studierte Physik, Philosophie und Betriebswirtschaften an der Universität Mainz. An die Promotion in Physik (Leipzig) schlossen sich ein Postdoc-Aufenthalt an der University of Waterloo (Kanada) sowie ein Marie-Curie-Stipendium der EU in Edinburgh an. Seit 2008 leitet er eine Emmy-Noether-Nachwuchsgruppe zur statistischen Physik frustrierter, ungeordneter Systeme an der Universität Mainz.