

Nutzung der Compute-Server in der Computational Physics

von Dipl.Phys. Kay Hamacher
Theoretische Physik I, Universität Dortmund
hamacher@fkt.physik.uni-dortmund.de

In diesem kleinen Übersichtsartikel möchte ich darstellen wie in zwei Bereichen der aktuellen Forschung die Computerressourcen des Hochschulrechenzentrums der Universität Dortmund eingesetzt werden.

Dazu werden in diesem Artikel Ergebnisse aus zwei Fragestellungen präsentiert, wie wir [9] sie am Lehrstuhl für Theoretische Physik I behandeln: Proteinfaltung und quantenmechanische Korrelationseffekte.

Proteinfaltung

Proteine sind als biologisch wirksame Makromoleküle von größtem Interesse sowohl in der Biophysik und Biochemie als auch in der Pharmazie und Genetik. Die experimentelle Bestimmung der dreidimensionalen Struktur ist dabei von größter Wichtigkeit. Leider treten hier größere experimentelle Schwierigkeiten auf. Es wäre daher von großem wissenschaftlichen, technologischen und wirtschaftlichen Interesse, einen praktikablen theoretischen Vorhersagemechanismus dieser Struktur zu entwickeln.

Ein von uns verfolgter Ansatz ist die Optimierung einer sogenannten Potentialfunktion, aus deren globalen Minimum man die native Struktur des Proteins ablesen kann. Was sind aber nun effiziente Verfahren zur globalen Optimierung?

Hierzu wurden im Rahmen einer Diplomarbeit anhand eines vereinfachten Proteinmodells bereits etablierte Algorithmen mit einem neu entwickelten Verfahren - dem stochastischen Tunneln - in ihrer Leistungsfähigkeit verglichen [1,2,3,4]. Eines der Hauptresultate zeigt die Abbildung 1.

Weiterhin wurde stochastisches Tunneln noch auf "Standard"-Probleme angewandt und dabei eine Effizienzsteigerung um ein Faktor von bis zu 80 festgestellt ([1] und Abbildung 2).

Alle verwendeten Algorithmen nutzen zur Generierung ihrer Testschritte intensiv Zufallszahlengeneratoren. Aus diesem Grund ist für eine Aussage über das Skalierungsverhalten und die Effizienz die Mittelung über sehr viele verschiedene Läufe von Nöten. Hierzu wurde die SP2 und das ZX2-Cluster des HRZ genutzt.

Derzeit sind weitere Untersuchungen im Gange, die eine ganze Bibliothek von standardisierten Optimierungsproblemen sowie ein Modell für das sogenannte Ligand-Receptor-Docking - ein wichtiger Aspekt bei der Medikamentenentwicklung - mit stochastischem Tunneln und anderen Algorithmen bearbeiten.

Unter [5] sind einige weitere Daten, Anwendungen und Graphiken zu finden, sowie ein kleiner Film, der die Wirkungsweise der Transformation im stochastischen Tunneln illustriert.

Quantenmechanische Korrelationseffekte

In einem weiteren Bereich der Materialforschung wird in unserer Gruppe die Auswirkung der Quantenmechanik in Molekülen und Festkörpern untersucht.

Dazu werden Untersuchungen im Bereich der Quantenchemie durchgeführt. Bei diesem Bereich an der Grenze zwischen theoretischer Festkörperphysik und theoretischer Chemie stehen Fragen zu Energiespektren von Molekülen im Mittelpunkt. Weitere interessante Größen wie Schwingungsspektren, Dipolmomenten und andere lassen sich zudem berechnen.

Hierzu verwenden wir neben der sogenannten Configuration-Interaction-Methode [8] als neuen Ansatz ein Verfahren aus der theoretischen Festkörperphysik mit dem Namen Dichte-Matrix-Renormierungs-Gruppe (DMRG) in einer gerade entstehenden Dissertation.

Im Bereich der Physik der kondensierten Materie wird zum einen das sogenannte Hubbard-Modell

Abbildung 1: Skalierungsverhalten der Anzahl der notwendigen Funktionsaufrufe zum Erreichen des global Minimum mit 90% Wahrscheinlichkeit ($n_{90,raw}$) als Funktion der Systemgröße N gemittelt über 300-500 Läufe. Das Inlet zeigt das Verhalten des verwendeten *lokalen* Minimierers. Der linke Rand gibt Daten für eine kontinuierliche, der Rechte für eine diskrete Modellformulierung. ■ genetischer Algorithmus (exponentielles Wachstum!), □ stochastisches Tunneln, • Monte-Carlo with Minimization, △ Monte-Carlo im diskreten Modell

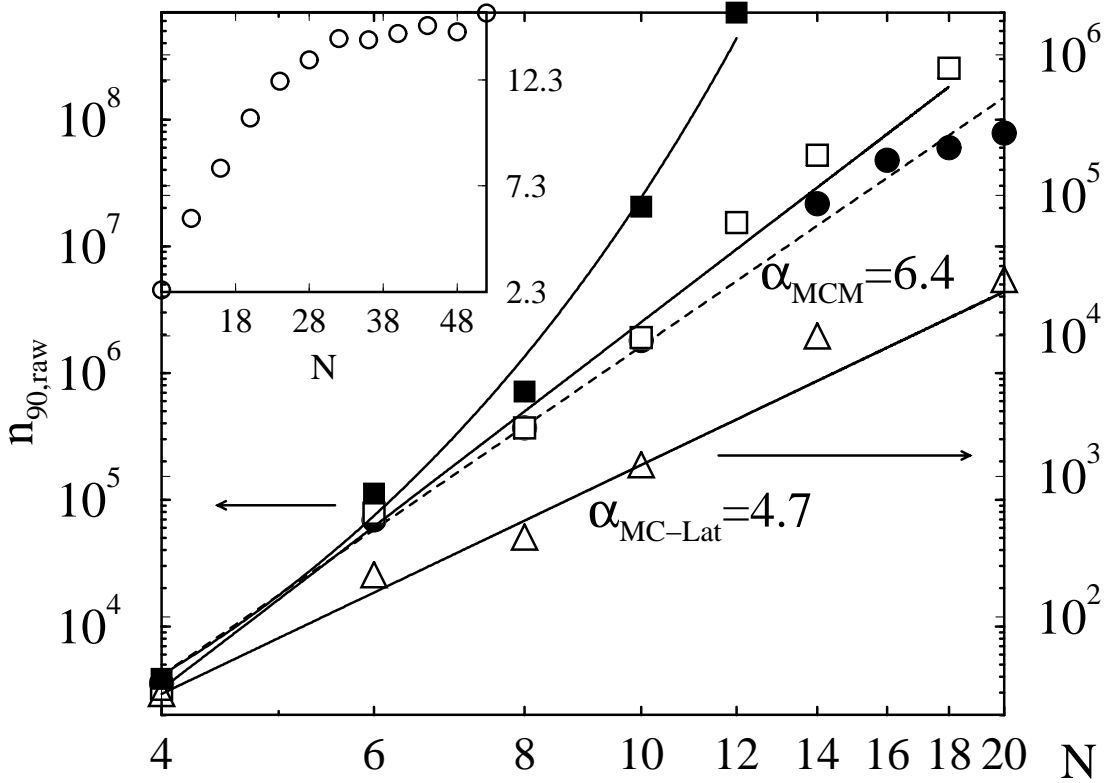


Abbildung 2: Relativer Fehler als Funktion der inversen Anzahl der Funktionsaufrufe für ein Spinglas. • Simulated Annealing, □ Stochastisches Tunneln, △ ST and ♦ Parallel Tempering für 100 (volle Linien) und 500 (gestrichelt) Spins.

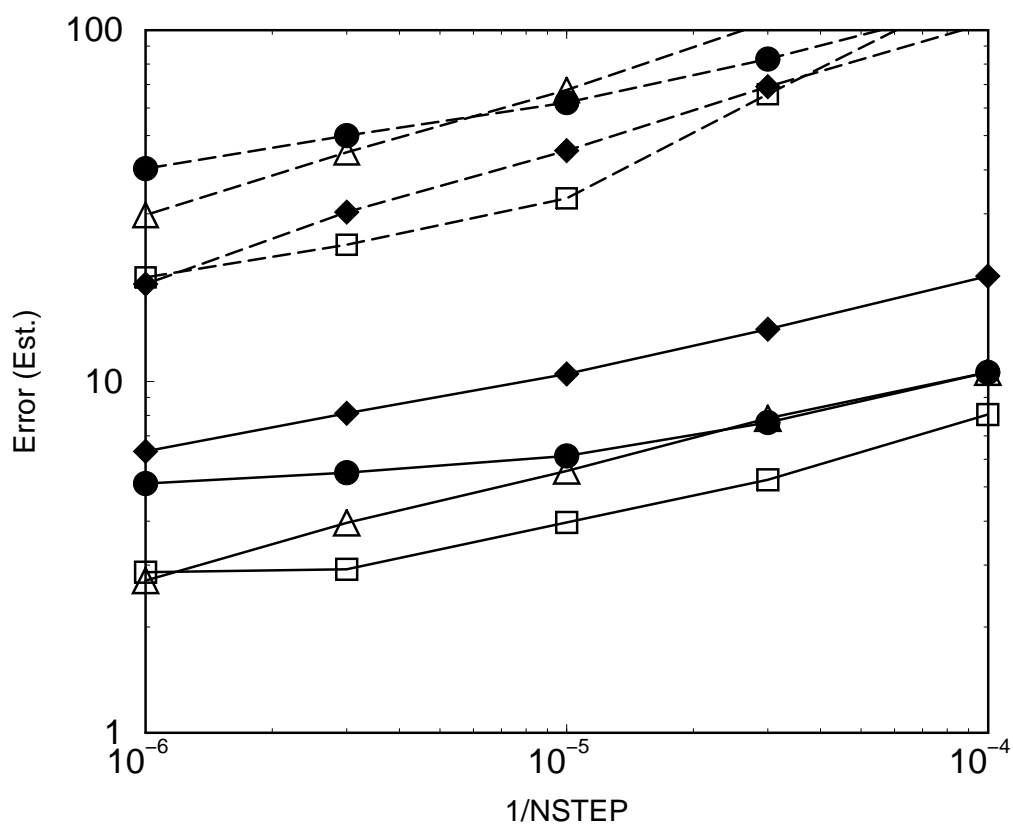
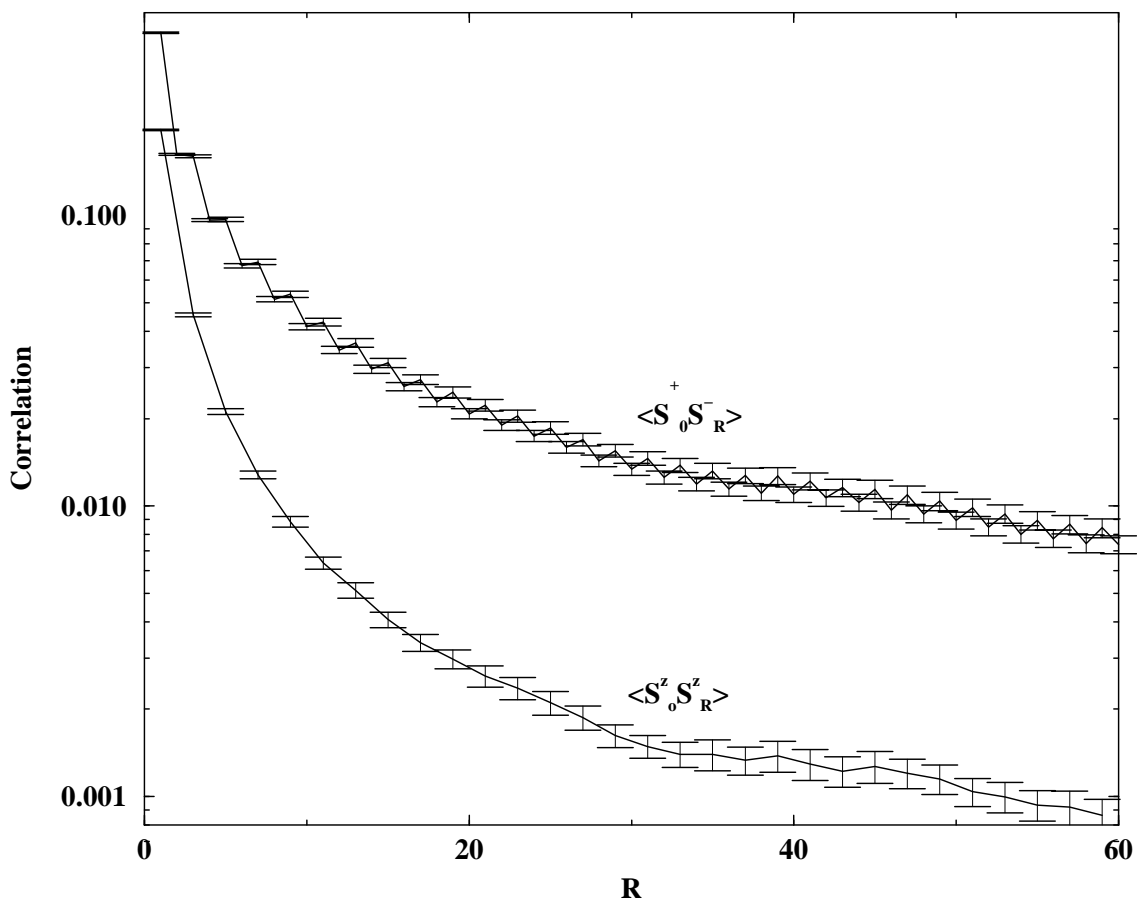


Abbildung 3: Die Korrelationen in ungeordneten XXZ-Spinketten mit $\Delta = 0.5$ und einer gleichverteilten XX-Kopplung um 1 mit einer Breite von 0.5. Die Balken geben die Varianz der Stichprobe an.



betrachtet und zudem in Zusammenarbeit mit Herrn Prof. Gros, Uni Saarbrücken ein Modell zur Beschreibung der Verbindung NaV_2O_5 untersucht. Es konnte durch analytische Rechnungen und Ergebnisse aus numerischen Berechnungen mit Hilfe der DMRG gezeigt werden, daß NaV_2O_5 sich nicht durch das Modell in seinem Verhalten beschreiben läßt [7].

In Vorbereitung befinden sich Studien zu der Verbindung CuGeO_3 , die gewisse Gemeinsamkeiten mit NaV_2O_5 besitzt.

Wir untersuchen zudem derzeit intensiv die Quantenphasenübergänge in eindimensionalen, ungeordneten Spinketten wie sie z.B. in den Verbindungen $\text{Sr}_3\text{CuPt}_{1-x}\text{Ir}_x\text{O}_6$ und $\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x\text{GeO}_3$ realisiert sind. Die dort auftretende Unordnung wird in unserem DMRG-Programm durch Zufallszahlengeneratoren entworfen und so ist auch hier wieder eine Mittelung notwendig. Zur Zeit haben wir ca. 9500 Replika berechnet mit einem numerischen Aufwand von 3-4 Stunden je Replika. Auch hier leisteten die Compute-Server des HRZ wertvolle Hilfe. Die DMRG wird dabei als numerisches Verfahren zur approximativen Diagonalisierung von großen Matrizen angewandt. In den von uns betrachteten Systemen sind dies Matrizen der Größe $10^{23} \times 10^{23}$. Für eine Parameterkombination sind in Abbildung 3 die berechneten und dann über 530 Replika gemittelten Korrelationen exemplarisch wiedergegeben. Die Ergebnisse, welche bis jetzt als valide angenommene Vermutungen negieren, werden in Kürze publiziert [6].

Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle bei den Herren Priv.Do. Dr. Wenzel, Prof. Keiter, Prof. Stolze und Prof. Weber für die Unterstützung bedanken. Die Arbeiten wurden und werden unterstützt durch Stipendien der Studienstiftung des dt. Volkes und des Fonds der chemischen Industrie sowie des BMBF und der DFG.

Referenzen

- [1] W. Wenzel and K. Hamacher. A Stochastic tunneling approach for global minimization. *Phys. Rev. Lett.*, 82(15):3003-3007, 1999.
- [2] K. Hamacher and W. Wenzel. The Scaling Behaviour of Stochastic Minimization Algorithms in a Perfect Funnel Landscape. *Phys. Rev. E*, 59(1):938-941, 1999.
- [3] W. Wenzel and K. Hamacher. Scaling Laws for Protein Folding. In *D. Reguera, J.M.G. Vilar, and J.M. Rubi, editors, Statistical Mechanics of Biocomplexity*, Springer Lecture Notes, New York, 1999. Springer.
- [4] K. Hamacher and W. Wenzel. Scaling behaviour of Minimization Algorithms in a Simple Model of Protein Folding. In *Proceedings of the HLRZ-Workshop "Monte Carlo Approach to Biopolymers and Protein Folding"*, Singapore
- [5] <http://www.kay-hamacher.de>
- [6] K. Hamacher, J. Stolze, W. Wenzel, Loss of universality in one-dimensional, disordered spin-chains, in preparation
- [7] C. Gros, R. Valenti, J.V. Alvarez, K. Hamacher and W. Wenzel. Can a frustrated spin-cluster model describe the low-temperature physics of NaV_2O_5 ? *Phys.Rev.B(Rapid Comm.)* accepted for publication.
- [8] P. Stampfuß, K. Hamacher, and W. Wenzel. A massively parallel configuration-selecting multi-reference configuration interaction implementation. *J. Mol.Struc.(THEOCHEM)*, 506:99-106, 2000.
- [9] <http://www.physik.uni-dortmund.de/t1/qchem>