

## Komplexe Grundzustände ungeordneter Systeme

In unserer Nachwuchsgruppe wird an der Schnittstelle zwischen Physik und Informatik geforscht und gelehrt.

Den Schwerpunkt bildet die Untersuchung komplexer Systeme aus den Bereichen Festkörperphysik, theoretische Informatik und Molekularbiologie mit Hilfe von Computersimulationen.

Dabei werden hauptsächlich hocheffiziente Optimierungsalgorithmen eingesetzt, die zum Teil in den letzten Jahren in der Informatik entwickelt wurden, zum anderen Teil auch in unserer Gruppe entstanden sind bzw. verbessert wurden.

Die Nachwuchsgruppe wird von Dr. Alexander Hartmann geleitet und arbeitet am Institut für Theoretische Physik der Universität Göttingen. Die Gruppe wird von der VolkswagenStiftung im Rahmen des Programms »Nachwuchsgruppen an Universitäten« für 5 Jahre finanziert. Die Ausstattung umfasst die Stelle des Gruppenleiters, zwei weitere Stellen, die teilbar sind, sowie Reise- und Sachmittel.

Auf den folgenden Seiten werden die Arbeitsschwerpunkte der Nachwuchsgruppe genauer vorgestellt.



## Kombinatorische Optimierungsprobleme

Man unterscheidet zwischen leichten und harten **Optimierungsproblemen**, für erstere kennt man sehr schnelle Algorithmen, für letztere nicht. Besonders interessant sind die sog. **NP-harten** Probleme, für die die Frage noch völlig offen ist, ob es schnelle Algorithmen gibt (P-NP Problem).

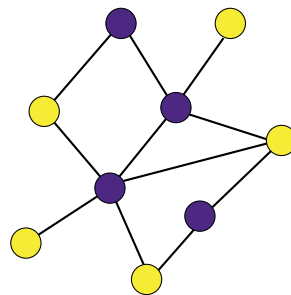


Dazu gehören viele Fragestellungen, die sowohl in der Anwendung als auch in der theoretischen Informatik sehr wichtig sind. In der Nachwuchsgruppe untersuchen wir insbesondere Knotenüberdeckungen von Graphen und die Erfüllbarkeit von logischen Formeln.

Vor kurzem wurde entdeckt, dass in vielen dieser Probleme Phasenübergänge auftreten, die oft mit drastischen Änderungen der Rechenzeit einhergehen.

Durch Abbildung auf physikalische Systeme wie **Spingläser** und durch die Untersuchung dieser Phasenübergänge können wir mehr über die Probleme erfahren, als bisher mit anderen Ansätzen herausgefunden wurde.

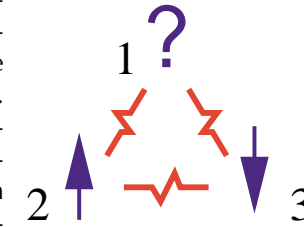
Weiterhin erlaubt uns das verbesserte Verständnis dann effizientere Lösungsalgorithmen zu entwickeln, die auch in der Praxis eingesetzt werden können.



## Ungeordnete magnetische Systeme

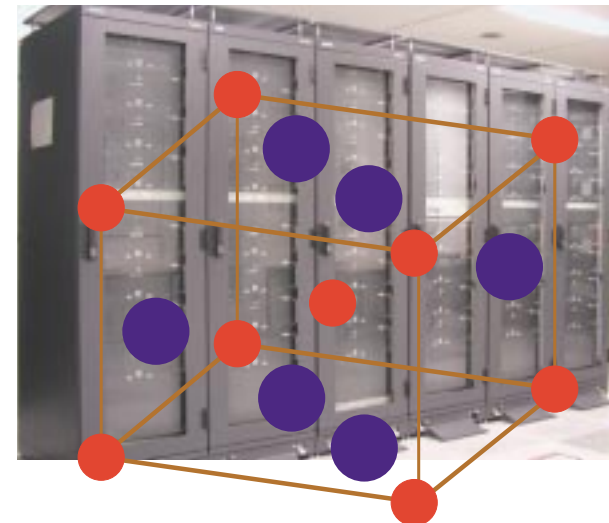
Wir betrachten magnetische Systeme, wie **Spingläser** und Zufallsfeldsysteme, für Temperaturen nahe des absoluten Nullpunktes. Das Verhalten dieser Systeme ist sehr komplex und es gibt noch viele offene Fragen.

Die Ursache der Komplexität liegt in den Wechselwirkungen, die einander widersprechende Bedingungen erzeugen. Diese Bedingungen können nicht alle gleichzeitig erfüllt werden, man sagt das System ist „frustriert“.



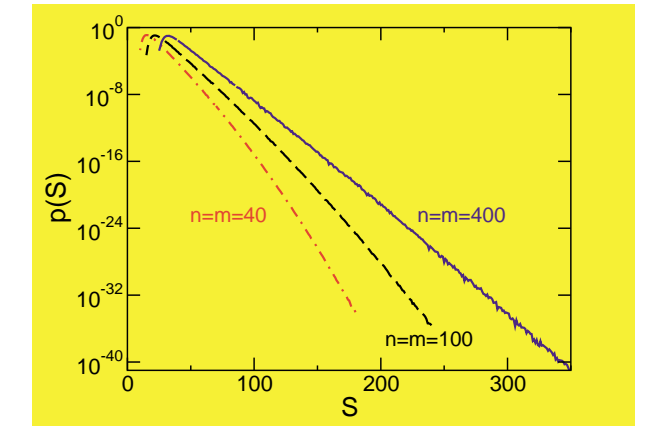
Mittels **Optimierungsalgorithmen** kann die Zahl der verletzten Bedingungen minimiert, d. h. die Grundzustände dieser Systeme bestimmt werden. Für einige Grundzustandsprobleme gibt es sehr schnelle Algorithmen. In diesem Bereich werden wir uns mit der Entwicklung von neuen Modellen und verbesserten Messgrößen beschäftigen.

Die interessantesten Grundzustandsprobleme gehören zu den **NP-harten** Problemen. Wir konzentrieren uns in der Gruppe daher auf die Entwicklung schnellerer Algorithmen. Damit können wir größere Systeme untersuchen und ihr komplexes physikalisches Verhalten besser verstehen.



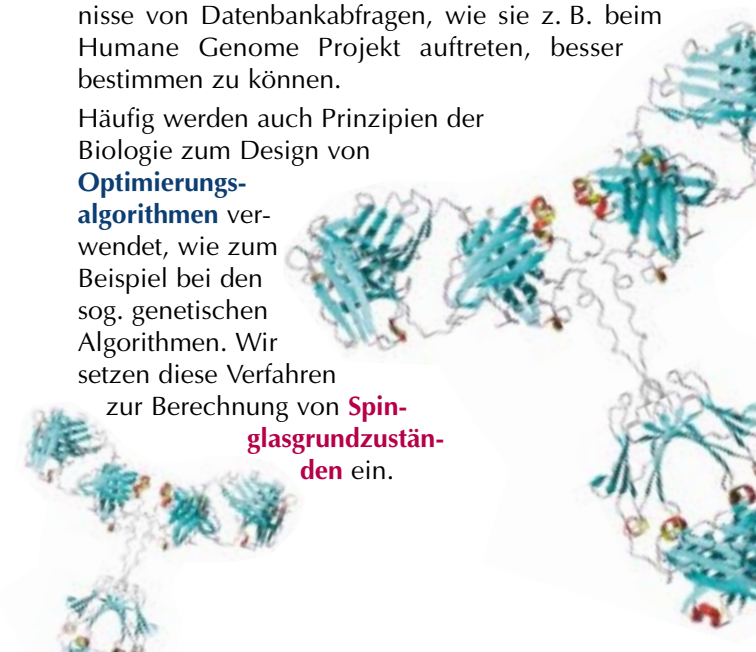
## Bioinformatik

In der Molekularbiologie werden **Optimierungsalgorithmen** vielfältig eingesetzt. Beispiele sind die Bestimmung der Faltung von Proteinstrukturen, der Entwurf von Arzneimitteln oder die Speicherung von Informationen in Neuronalen Netzen.



In der Nachwuchsgruppe untersuchen wir die Sekundärstrukturen von RNA. Wir wollen herausfinden, welche Eigenschaften idealisierte Strukturmodelle haben. Weiterhin analysieren wir die Statistik des Vergleichs von Protein- und DNA-Sequenzen. Unser Ziel ist, die oben dargestellte Signifikanz der Ergebnisse von Datenbankabfragen, wie sie z. B. beim Humane Genome Projekt auftreten, besser bestimmen zu können.

Häufig werden auch Prinzipien der Biologie zum Design von **Optimierungsalgorithmen** verwendet, wie zum Beispiel bei den sog. genetischen Algorithmen. Wir setzen diese Verfahren zur Berechnung von **Spinglasgrundzuständen** ein.



## Kontakte

Wenn Sie Interesse an unseren Projekten haben, mit uns zusammenarbeiten möchten oder sich auf eine Stelle in der Nachwuchsgruppe bewerben wollen, nehmen Sie bitte mit uns Kontakt auf!

### Dr. Alexander Hartmann

Institut für Theoretische Physik  
Bunsenstraße 9  
37073 Göttingen  
Deutschland  
Telefon: +49 551 / 39-5995  
Fax: +49 551 / 39 96 31  
e-mail: hartmann@theorie.physik.uni-goettingen.de  
www.theorie.physik.uni-goettingen.de/~hartmann

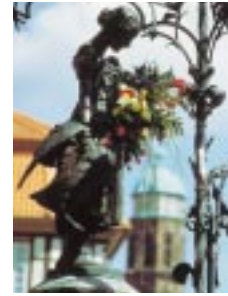
### Weitere Informationen:

Universität Göttingen:  
www.uni-goettingen.de

VolkswagenStiftung:  
www.volkswagenstiftung.de



## Umfeld



Die Nachwuchsgruppe profitiert stark vom Wissenschaftsstandort Göttingen, insbesondere natürlich von der Universität mit 13 Fakultäten und rund 24.000 Studierenden. Weiterhin gibt es in Göttingen zwei Fachhochschulen, vier Max-Planck Institute, vier weitere nationale Forschungszentren und sieben sonstige Forschungsinstitute.

Die Nachwuchsgruppe ist an mehreren nationalen und internationalen Gemeinschaftsprojekten beteiligt. Es bestehen Kooperationen mit Gruppen aus Deutschland, England, Finnland, Frankreich, Israel, Italien und den USA.

Zur Durchführung der numerischen Simulationen werden große Rechnerkapazitäten benötigt. Neben einem Workstation-Cluster werden dazu Rechenzentren und Parallelrechner in Göttingen, Paderborn und Magdeburg genutzt.

Die Finanzierung der Nachwuchsgruppe erfolgt durch die VolkswagenStiftung. Diese ist eine gemeinnützige Stiftung privaten Rechts, ihr Zweck ist die Förderung von Wissenschaft und Technik in Forschung und Lehre. Ihr Sitz ist Hannover.

In ihrem Programm »Nachwuchsgruppen an Universitäten« hat die Volkswagen Stiftung bislang 58 solcher selbständigen Gruppen an 23 Hochschulstandorten mit insgesamt 60,2 Millionen Euro Fördermitteln ermöglicht.



## Zur Person

### Alexander K. Hartmann

- ▶ Geboren 1968 in Heidelberg
- ▶ Diplome in Informatik (Hagen, 1993) und in Physik (Duisburg, 1994)
- ▶ Promotion in Physik (Heidelberg, 1994-1998)
- ▶ Mitarbeit an einem Projekt am IBM Wissenschaftszentrum Heidelberg (1996-1998)
- ▶ Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Theoretische Physik in Göttingen (1998-2000)
- ▶ Post-Doc Aufenthalte in Santa Cruz (USA) und Paris (2001-2002)
- ▶ Arbeitsschwerpunkte: Computersimulationen (insbesondere Optimierungsverfahren) in den Bereichen statistische Physik, theoretische Informatik, Oberflächenphysik und Molekularbiologie



© 2002 Georg-August-Universität Göttingen - Presse- und Öffentlichkeitsarbeit - Gestaltung: Rothe Grafik

www.uni-goettingen.de

Forschernachwuchsgruppe  
Komplexe  
Grundzustände  
ungeordneter Systeme



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT GÖTTINGEN