

Lineær respons og intermittens i glasdynamik
ved lave temperaturer

Simon Christiansen

260579-1363

Institut for Fysik og Kemi
Syddansk Universitet - Odense

Vejleder: Paolo Sibani

31. august 2007

Indhold

1	Indledning	1
1.1	Formål	1
1.2	Specialets struktur	2
2	Baggrund	6
2.1	Magnetiske materialer	6
2.2	Spin glasser	9
2.2.1	Spin glassets dynamik	9
2.2.2	Spin glassets struktur	12
2.2.3	Energilandskabets struktur	14
2.3	Hvad er et “glas”?	18
2.4	Analogier og applikationer	19
2.4.1	Evolution	20
2.4.2	Optimeringsproblemer	21
2.4.3	Proteinfoldning	22
2.4.4	Neurale netværk	22
2.4.5	Sociale netværk	23
2.4.6	Økonomi	23
2.4.7	Filosofi	24
3	Teori og metode	25
3.1	Rekorddynamikken	25
3.2	Plaket modellen	27
3.3	Ventetidsmetoden	28
3.4	En “mesoskopisk” model	31

<i>INDHOLD</i>	2
4 Resultater og diskussion	33
4.1 Intermittens	34
4.1.1 Energiens udvikling	34
4.1.2 “Realspace” undersøgelser	38
4.2 Den statistiske fordeling af quakes	42
4.2.1 Ventetidernes fordeling	45
4.2.2 Antallet af quakes i et logaritmisk tidsinterval	48
4.2.3 Raten af quakes	56
4.3 Lineær respons	60
4.3.1 Feltets effekt på energiudviklingen	61
4.3.2 Magnetiseringens udvikling	62
4.3.3 Korrelation mellem intermittens i energien og magnetiseringen	65
4.3.4 t_w skalering af magnetiseringens udvikling	67
4.4 Temperaturskridt	72
4.4.1 Negative temperaturskridt	72
4.4.2 Positive temperaturskridt	79
5 Konklusion	83
A Programkode	91

Figurer

1	En Ising model for en ferromagnet.	8
2	Et simpelt spin glas.	12
3	Et spin glas i sin grundtilstand.	13
4	En kvalitativ visualisering af energilandskabets struktur.	16
5	En plaket bestående af fire spins.	27
6	Energien, og det tilsvarende BSF signal, plottet over for tiden.	35
7	BSF energien for $t \in (10^5; 10^6 + 10^5)$	37
8	PDF for fluktuationer i energien.	38
9	3D plot af spin flips under et quake.	39
10	“Coarse grained” spin flips under et quake.	41
11	Samtlige “coarse grained” spin flips under hele kørslen.	42
12	Kumulativ fordelingsfunktion for ventetiderne.	47
13	$\alpha = \frac{\langle n(t) \rangle}{\ln(\frac{t}{t_w})}$ plottet over for tiden.	50
14	Variansen over for gennemsnittet.	51
15	$\alpha = \frac{\langle n(t) \rangle}{\ln(\frac{t}{t_w})}$ plottet over for tiden, med $\frac{t_{obs}}{\delta t} = 10^4$	52
16	Variansen over for gennemsnittet med $\frac{t_{obs}}{\delta t} = 10^4$	53
17	Plot af α over for $\frac{t_{obs}}{\delta t}$	54
18	Korrelationsfunktionen for ventetiderne.	56
19	α over for temperaturen.	57
20	α over for $N = L^3$	59
21	Energien som funktion af tiden, med et eksternt felt, $H = 0.3$, der tændes ved forskellige værdier af t_w	61
22	Magnetiseringen over for tiden.	63
23	PDF'er for fluktationer i magnetiseringen.	64

24	Betingede og ubetingede PDF'er	66
25	Betinget PDF for magnetiseringen uden intermittens.	67
26	μ_{ZFCM} over for $\frac{t}{t_w}$	69
27	$\mu_{ZFCM} + b_0(t_w)$ over for $\frac{t}{t_w}$	70
28	$\mu_{ZFCM} + b_0(t_w)$ over for $\frac{t}{t_w}$	71
29	Skaleringsplots for fire temperaturskridt med $\Delta T < 0$	74
30	$t_{w,eff}$ over for t_w med $\Delta T < 0$	76
31	b over for $ \Delta T $	77
32	$t_{w,eff}$ over for t_w med $\Delta T = -0.2$	78
33	Skaleringsplots for seks temperaturskridt med $\Delta T > 0$	81
34	Skaleringsplots for to temperaturskridt med $\Delta T > 0$ samt et plot af $t_{w,eff}$ over for ΔT	82

Resumé

In this thesis I study the dynamics of a class of systems known as “glasses”. This “glassy dynamics” is examined by means of a p-spin model which has earlier been shown to exhibit glassy behavior.

Glassy dynamics refers to the extremely slow relaxation observed in several types of many component systems. Glassy systems relax at a gradually slowing rate, never quite reaching equilibrium. When observed over relatively short time scales, the glass may therefore appear to be in a time independent equilibrium state. However, when observations are made over time scales longer than the age of the system, its properties are observed to change gradually. Since the measurable properties of the system depends on its age, this relaxation process is known as “aging”.

Aging behavior has been observed in many types of systems including various polymers, melted alloys and magnetic spin glasses. Even many systems from outside the field of physics, like biological evolution, have been observed to exhibit glassy dynamics. The basic prerequisite for glassy dynamics to arise seems to be the presence of some type of competing interactions which makes it difficult for the system to reach a steady equilibrium state.

It will be demonstrated that the chosen p-spin model exhibits behavior in accordance with what has been observed experimentally in many types of glassy materials. As such, results based on the study of the this model can potentially be applied to a wide variety of complex systems, including ones from other fields of science than physics.

The aging behavior will be shown to arise from the fact that the system evolves through a series of intermittent jumps, or “quakes”, separated by periods of apparent stability. The statistics of these quakes can be accurately predicted using the mathematical theory of records. By observing the changes in the system configuration it is seen that these quakes correspond to changes in small isolated domains in the system.

Futhermore, the response of the system to an external field is examined and is seen to agree with experimental results. The evolution of the magnetisation is shown to be subordinated to the same quakes that also control the energy dynamics.

The behavior of the model when a small change in the temperature, a temperature step, is made also reproduces known experimental phenomena. A negative temperature step makes the system appear older while a positive step resets the age, causing the relaxation to start anew. These effects are known as “memory” and “rejuvenation” respectively.

1 Indledning

1.1 Formål

I dette speciale vil der blive foretaget numeriske undersøgelser, dvs. computersimuleringer, af en model for en klasse af komplekse systemer under et kaldet glasser. Specialet sigter mod at beskrive naturen af modellens udvikling efter et pludseligt brat fald i temperaturen, et såkaldt “quench”, samt dens lineære respons når et eksternt magnetfelt slås til i løbet af udviklingen.

Glasser er karakteriseret ved en langsom aftagende udvikling mod ligevægt der benævnes “aging”. Systemet når aldrig helt en ligevægtstilstand. I stedet vil dets egenskaber afhænge af systemets alder, deraf ordet “aging”. Systemet bliver ældre. Denne udvikling sker via såkaldte “intermittente” begivenheder, dvs. hurtige spring adskilt af perioder med stabilitet.

Begrebet glasser dækker over en lang række af systemer der ved første øjekast er vidt forskellige men som udvikler sig på lignende vis. Som eksempler kan man blandt andet nævne almindeligt vinduesglas, visse typer polymerer og magnetiske glasser. Mange systemer uden for fysikkens verden kan dog også med fordel beskrives via glasmodeller¹. Studiet af alle disse systemer kaldes under et glasdynamik [22].

Til undersøgelserne anvendes en spin model, dvs en model opbygget af magnetiske dipoler, “spins”, der påvirker hinanden. Da glassernes udvikling er uafhængig af strukturen af det specifikke system, er egenskaberne med fordel blevet studeret via modeller for magnetiske glasser, såkaldte “spin glasser”.

Den model der anvendes i dette speciale, en såkaldt p-spin model², har dog to fordele frem for de spin glas modellerne:

- Den er simplere end spin glas modellerne der forsøger at efterligne strukturen i de konkrete magnetiske legeringer der kaldes spin glasser. I

¹I kapitel 2.4 giver jeg flere eksempler på vidt forskellige systemer der alle kan forventes at opføre sig som glasser.

²Se kapitel 3.2 for en detaljeret beskrivelse af denne.

disse findes der mange forskellige indbyrdes modstridende interaktioner mellem de forskellige spins. I modsætning hertil er der i p-spin modellen kun en enkelt meget simpel interaktion.

- Resultaterne mere generelle da den ikke forsøger at efterligne strukturen i noget konkret materiale. Strukturelle glasser, som almindeligt vinduesglas, har ikke samme struktur som spin glasserne. Det har derfor været uklart, om resultater fra studiet af spin glasser kunne overføres til sådanne systemer. P-spin modellen demonstrerer at glassernes egenskaber ikke afhænger af nogen bestemt mikroskopisk struktur men kun af visse basale egenskaber.

Af disse grunde er det interessant at studere egenskaberne ved denne p-spin model. En meget stor klasse af systemer kan forventes at udvikle sig på lignende vis som modellen. Ved at studere denne opnår man en generel viden der kan overføres til mange områder, også uden for fysikken. Studiet af glasdynamik har derfor stor grundvidenskabelig interesse samt potentielle anvendelser indenfor både materialefysik og kemi.

1.2 Specialets struktur

Specialets struktur er som følger

- Kapitel 1 er det nuværende kapitel. Her defineres specialets formål og strukturen beskrives.
- Kapitel 2 er en uformel gennemgang af den teoretiske baggrund bag specialet. Denne kan læses af ikke-fysikere da den ikke indeholder nogen matematisk formalisme.
 - Kapitel 2.1 gennemgår de forskellige grundlæggende typer af magnetiske materialer. Det er nødvendigt at forstå disses egenskaber da den benyttede model er baseret på magnetiske modeller.

- Kapitel 2.2 beskriver egenskaberne ved de særlige former for magnetiske glasser der kaldes spin glasser. Spin glas modeller er længe blevet brugt til at studere glasdynamik, og p-spin modellen er også opbygget af magnetiske spins.
 - * Kapitel 2.2.1 gennemgår spin glassets særegne dynamiske egenskaber.
 - * Kapitel 2.2.2 forklarer hvordan spin glassets dynamik er relateret til strukturen.
 - * Kapitel 2.2.3 forklarer hvordan spin glassernes særlige udvikling, og dermed udviklingen af glasser generelt, kan belyses ved at studere strukturen af “energilandskabet”.
- Kapitel 2.3 diskuterer, mere detaljeret, hvad der egentlig forstås ved et “glas” og hvorfor disse systemer er interessante.
- Kapitel 2.4 giver flere eksempler på systemer uden for fysikkens verden der med fordel er blevet studeret, eller forventes at kunne studeres, via glasmodeller.
- Kapitel 3 beskriver de matematiske teorier der benyttes i specialet. Dette indeholder al den matematiske formalisme der benyttes i specialet og kræver en matematisk baggrund.
 - Kapitel 3.1 omhandler rekord dynamikken, der er den matematiske teori for rekorder i stokastiske sekvenser. Denne kan bruges til at forklare statistikken af de begivenheder der styrer udviklingen af et glas.
 - Kapitel 3.2 giver en detaljeret beskrivelse af den benyttede p-spin model. Denne kaldes også plaket modellen da de forskellige spins interagerer i “plaketter” bestående af fire spins.
 - Kapitel 3.3 omhandler den benyttede simuleringsalgoritme. Først beskrives Metropolis algoritmen der er den mest almindelige algoritme for simuleringer af spin modeller. Derefter beskrives den i

- specialet benyttede algoritme, ventetidsmetoden, og det forklares hvorfor denne er valgt frem for Metropolis algoritmen.
- Kapitel 3.4 diskuterer modellens størrelse. Det vil blive forklaret hvorfor det er fordelagtigt at studere en lille model selv om konkrete materialer typisk indeholder milliarder af partikler.
 - Kapitel 4 fremlægger alle resultaterne af simuleringerne og disse diskuteres og fortolkes.
 - I kapitel 4.1 påvises det at modellen udvikler sig mod ligevægt via intermittente “quakes” adskilt af perioder med stabilitet.
 - * Kapitel 4.1.1 demonstrerer dette direkte ved at betragte energiens udvikling, som funktion af tiden.
 - * Kapitel 4.1.2 betragter de konkrete intermittente ændringer i systemets konfiguration der er involveret i udviklingen.
 - I kapitel 4.2 studeres statistikken af de intermittente begivenheder, “quakes”, der styrer systemets udvikling. Denne fortolkes via rekord dynamikken.
 - * Kapitel 4.2.1 belyser fordelingen af quakes indirekte ved at betragte fordelingen af ventetiderne mellem to quakes.
 - * Kapitel 4.2.2 finder fordelingen af quakes direkte ved at tælle antallet af quakes i et givent tidsinterval.
 - * Kapitel 4.2.3 beskriver hvordan raten af quakes afhænger af henholdsvis temperaturen og systemets størrelse.
 - I kapitel 4.3 undersøges modellens opførsel når denne udsættes for en ydre påvirkning i form af et eksternt magnetisk felt. Flere forskellige fænomener diskuteres i dette kapitel:
 - * Først, i kapitel 4.3.1, demonstreres det at feltets tilstedeværelse ikke har nogen betydelig effekt på energiens udvikling.

- * Derefter, i kapitel 4.3.2, ses det at magnetiseringens udvikling, lige som det er tilfældet for energien, foregår via intermitterende spring.
 - * I kapitel 4.3.3 ses det at der er en stærk korrelation mellem intermitterende spring i magnetiseringen og tilsvarende intermittens i energien.
 - * Til sidst, i kapitel 4.3.4, bliver det demonstreret at responsens udvikling, til en god approksimation, kun afhænger af forholdet mellem tiden og systemets alder, $\frac{t}{t_w}$.
- Kapitel 4.4 betragter effekten af et temperaturskridt der foretages samtidig med at et eksternt felt slås til.
- * I kapitel 4.4.1 ses det at negativt temperaturskridt får systemet til at virke ældre.
 - * I Kapitel 4.4.2 bliver det vist at et tilstrækkelig stort positivt temperaturskridt rejuvenerer systemet - systemets alder bliver “nulstillet”.
- Kapitel 5 er specialets konklusion. Her opsummeres de resultater der er opnået og deres betydning diskuteres.
 - Den benyttede programkode er vedlagt i Appendix A.

2 Baggrund

Studiet af komplekse ikke-lineære systemer begyndte med opdagelsen af konkrete systemer der udviste uforudsigelig, tilsyneladende “kaotisk”, opførsel. Spin glasset var et af de første sådanne systemer der vakte interesse i det videnskabelige samfund. Et spin glas er grundlæggende en magnetisk legering der opfører sig usædvanligt ved lave temperaturer. Studiet af disse har vist sig at have applikationer inden for vidt forskellige discipliner der ikke nødvendigvis har noget som helst at gøre med magnetisme. Mange andre systemer, under et kaldet “glasser”, udviser lignende opførsel. Da det er muligt at foretage meget nøjagtige målinger på magnetiske materialer, kan disse med fordel bruges til at studere glasdynamik generelt. Resultater fra studiet af magnetiske glasser kan så overføres til tilsvarende systemer der ville være svære at studere direkte.

2.1 Magnetiske materialer

Da spin glasset er et magnetisk materiale kan dette, og alle de lignende glasser, studeres ved hjælp af computermodeller der er udviklet til studiet af magnetiske materialer. Det er derfor relevant at beskrive de mest almindelige typer af magnetiske materialer og de modeller vi benytter til at forklare deres opførsel.

Når en jernstang placeres i et magnetfelt bliver den magnetiseret med nord og syd polen i samme retning som feltet[28]. Hvis feltet derefter slukkes beholder jernstangen en vedvarende magnetisering³. Således opstår stangmagneter. Dette fænomen kaldes “hysteresis”, materialet “husker” den tidligere tilstedeværelse af magnetfeltet. Da stangmagneten har en magnetisk nordpol i den ene ende og en sydpol i den anden, kaldes den også en magnetisk dipol. Et materiale der bibeholder sin magnetisering når det ydre felt slås fra

³Rent jern(Fe) vil dog ikke bibeholde nogen betydelig magnetisering i længere tid. I praksis benyttes som regel en legering af jern og andre metaller.

kaldes ferromagnetisk. Magnetiske materialer kan grundlæggende opdeles i forskellige typer alt efter deres magnetiske egenskaber:

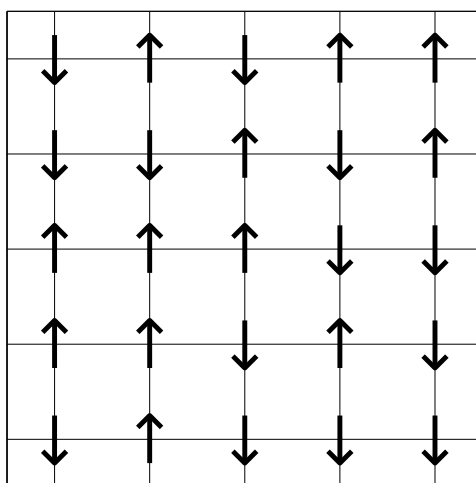
- Ferromagnetiske materialer magnetiseres i samme retning som et ydre felt og bevarer magnetiseringen når feltet slås fra. Et ferromagnetisk materiale vil tiltrækkes af en magnet som det kendes fra jern. En ferromagnet vil også spontant magnetiseres når temperaturen bliver tilstrækkelig lav, selv hvis et ydre magnetfelt ikke er til stede.
- Paramagnetiske materialer bliver også magnetiseret i et felt men mister magnetiseringen når feltet slås fra. Ligesom ferromagneterne vil paramagneter tiltrækkes af et ydre magnetfelt. Magnetiske materialer bliver som regel paramagnetiske hvis temperaturen er tilstrækkelig høj.

Et magnetisk materiales opførsel kan forklares ved at betragte det som opbygget af mange små magnetiske dipoler, kaldet "spins", hver med sin egen nord og syd pol. Dipolerne vil konstant fluktuere, dvs. ændre retning tilfældigt, med en frekvens der afhænger af temperaturen. Der vil derfor som regel ikke være nogen total magnetisering da magnetfeltet fra hver dipol opvejes af en modsatrettet dipol. Et ydre felt vil få et flertal af disse dipoler til at pege i samme retning hvilket får materialet som helhed til at opføre sig som en magnetisk dipol.

I et ferromagnetisk materiale vil de individuelle spins påvirke hinanden på en sådan måde at de vil have en tendens til at pege i samme retning. Denne påvirkning kaldes en ferromagnetisk interaktion. Når materialet først er magnetiseret vil dipolerne derfor fastholde hinanden så materialet bevarer en total magnetisering. Ved tilstrækkelig lave temperaturer vil materialet spontant blive magnetiseret da dipolernes indbyrdes påvirkning vil overstige den energi de får fra temperaturen. Et flertal af spins vil derfor pege i samme retning.

En stangmagnet vil altid være magnetiseret med en pol i hver ende. Der er altså to mulige magnetiseringer, svarende til at nordpolen kan være i en af

de to ender. Det er derfor som regel tilstrækkeligt at benytte en simplificeret model kaldet Ising modellen. I denne betragtes materialet som værende opbygget af såkaldte Ising spins der hver kan vende i kun to retninger, kaldet “op” og “ned”. Når et Ising spin ændrer retning siger vi at det har “flippet”. På fig. 1 ses en tegning af en simpel Ising model.



Figur 1: En Ising model for en ferromagnet. Spins kan kun vende op og ned. Linierne er ferromagnetiske interaktioner.

Der eksisterer også materialer hvor dipolerne påvirker hinanden med en antiferromagnetisk interaktion, dvs. at de vil forsøge at pege i modsat retning af deres nabo. Et sådant materiale vil som regel ikke opnå nogen spontan magnetisering ved lave temperaturer. I stedet vil dipolerne forme et mønster hvor de peger skiftevis den ene og den anden vej.

Alle materialer vil blive paramagnetiske ved tilstrækkeligt høje temperaturer hvor den termiske energi overdøver dipolernes interaktion. I så fald vil de forskellige spins flippe tilfældigt hele tiden når et ydre felt ikke får dem til at foretrække den ene retning frem for den anden. Den temperatur hvor en ferromagnet bliver paramagnetisk, og mister sin spontane magnetisering,

kaldes Curie temperaturen, T_c .

2.2 Spin glasser

Sidst i 1960'erne viste det sig at visse magnetiske legeringer, ved lave temperaturer, udviser usædvanlige effekter der ikke passer med nogen af de førnævnte typer af materialer [4, 26]. At disse "spin glassers" opførsel ikke svarer til nogen af de andre typer af magnetiske materialer, blev man først opmærksom på ved målinger af den magnetiske susceptibilitet, χ . Denne er defineret ved $M = \chi H$ hvor H er det magnetiske felt og M er systemets magnetisering. Susceptibiliteten er altså et mål for hvor meget materialet bliver magnetiseret når det placeres i et magnetfelt med en given størrelse. For en ferromagnet afhænger susceptibiliteten kun af temperaturen. Når T går mod T_c vil susceptibiliteten vokse indtil den i princippet bliver uendelig ved $T = T_c$. Her er dipolernes interaktionsenergi i perfekt balance med den termiske energi og der skal derfor, i princippet, kun et uendeligt lille magnetfelt til for at få hele materialet til at blive magnetiseret.

For spin glasset vil susceptibiliteten ikke kun afhænge af temperaturen men også af tiden. Susceptibilitetskurven får en forskellig form alt efter hvor hurtigt man ændrer temperaturen. Dette viser sig at være en helt fundamental egenskab ved glasser. De målelige egenskaber er tidsafhængige. Systemet opnår aldrig helt termodynamisk ligevægt.

I løbet af de næste årtier skete der en eksplosiv vækst i interessen for spin glasser, og flere interessante fænomener blev belyst. I resten af dette kapitel vil jeg opsummere hvad vi i dag ved om spin glassernes opførsel.

2.2.1 Spin glassets dynamik

Når et spin glas udsættes for en hurtig nedkøling, vil dets energi ikke straks falde til den er i overensstemmelse med omgivelsernes. I stedet sker der en

gradvis proces hvor materialet afgiver energi over længere tid men tilsyneladende aldrig helt når ligevægtstilstanden. Denne proces kaldes "aging". Da spin glasset aldrig opnår ligevægt vil dets egenskaber afhænge af tiden, og man siger derfor at systemet bliver ældre. Aging har yderligere den egenskab at udviklingen går langsommere og langsommere som tiden går. Systemet kommer således tættere og tættere på ligevægt uden helt at nå frem. Lignende aging fænomener var tidligere blevet observeret i forskellige polymerer der stivner gradvist når de nedkøles[30].

Et lignende fænomen opstår når materialet udsættes for et ydre magnetfelt ved lave temperaturer. Når feltet slås til, vil magnetiseringen først stige brat hvor efter den stiger langsomt ved en "aging" proces af samme natur som energiens udvikling. Når feltet slukkes sker det modsatte. Magnetiseringen falder først brat og begynder derefter at aftage gradvist uden helt at forsvinde.

Det er vist at denne langsomme udvikling kan forklares ved at antage at udviklingen sker gennem en serie af hurtige spring adskilt af perioder af stabilitet [5, 31]. Disse spring, der forventes at ske når et domæne af spins ændrer retning samtidig, kan dog ikke observeres direkte eksperimentelt. Dette skyldes at man ved eksperimentelle målinger kun ser den gennemsnitlige energi af milliarder af spins. For at observere springene direkte er man nødt til at betragte små modeller hvor de enkelte spins bidrag til energien kan ses tydeligere.

At magnetiseringen udviser samme langsomme aging som energien kan forklares ved at både energiens og magnetiseringens udvikling styres af de samme spring i systemets konfiguration [17]. Det samme kan ventes at gælde for udviklingen af en hvilken som helst målelig størrelse. Alle aspekter af systemets udvikling kan derfor forklares ved at studere fordelingen af disse spring.

Ydermere har det vist sig at spin glasserne opfører sig sælsomt hvis man foretager et lille temperaturskridt, dvs ændrer temperaturen, under et eks-

periment [16, 18]. En sænkning i temperaturen får systemet til at virke ældre, dvs. opføre sig som om man havde kørt med den lavere temperatur hele vejen, bare i længere tid. Hvis man derimod hæver temperaturen “glemmer” systemet hele den foregående udvikling og opfører sig som om man lige havde startet et eksperiment med den pågældende temperatur. Hvis man først sænker temperaturen, venter et stykke tid og derefter hæver temperaturen igen, fortsætter systemet hvor det slap da man sænkede temperaturen. Hele udviklingen ved den lavere temperatur “glemmes”. Disse fænomener kendes som “memory” og “rejuvenation”. Når temperaturen sænkes “husker” systemet hvor det er nået til, mens en forøgelse af temperaturen fører til at systemet “forynges”. Alt hvad der skete ved den lavere temperatur er glemt. Yderlige undersøgelser viste at de forskellige spins i den “frosne” nedkølede tilstand peger i alle mulige retninger uden noget overordnet mønster. Dette er i skarp kontrast til de almindelige magnetiske materialer hvor spins som regel former et ferromagnetisk eller antiferromagnetisk mønster ved lave temperaturer. I modsætning til paramagneten er de forskellige spins frosset fast i denne uordnede tilstand uden at ændre sig synderligt.

Spin glasserne er interessante fordi flere andre systemer, de såkaldte “glasser”, udvikler sig på lignende vis. Et “glas” kan groft sagt defineres som et materiale der fryser med de forskellige bestanddele i en konfiguration uden global orden. Mindre områder i materialet kan udvise ordnede strukturer, men materialet som helhed gør det ikke.

Et eksempel er det materiale vi til daglig kender som glas. I vinduesglas ligger atomerne ikke i en ordnet krystalstruktur som det f.eks. er tilfældet for is. I stedet bibeholder atomerne samme uordnede konfiguration som da glasset var flydende⁴ blot med den forskel at de nu næsten står helt stille. Et spin glas er så et glas bestående af magnetiske spins. Et glas hvor atomerne fryser i en tilstand uden global orden kaldes et strukturelt glas. I modsætning hertil er det i et spin glas de magnetiske dipoler, og ikke atomerne, der fryser i en

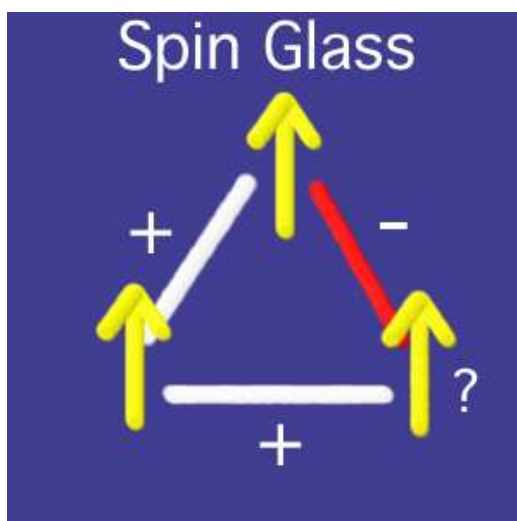
⁴Den ofte gentagede skrøne om at glas er en langsomt flydende væske, og at gamle vinduer derfor er tykkere i bunden, er dog en myte. Se f.eks [6]

uordnet konfiguration.

Et hvilket som helst materiale kan i princippet blive et glas hvis man fryser det tilstrækkelig hurtigt så atomerne ikke når at forme nogen ordnet struktur.

2.2.2 Spin glassets struktur

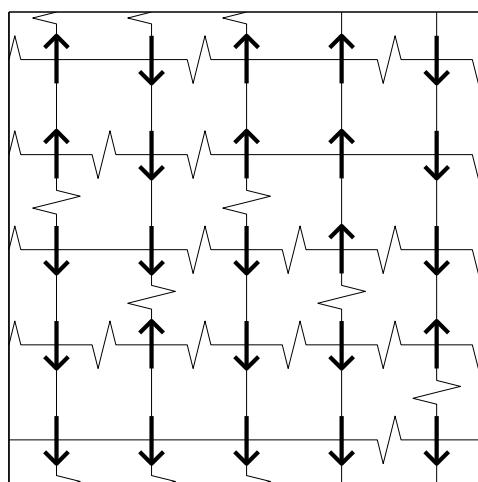
I dag mener man at de særlige egenskaber ved et spin glass opstår fordi de forskellige spins er koblet sammen med en blanding af ferromagnetiske og antiferromagnetiske interaktioner. Dette skaber “frustration” hvilket vil sige at nogen spins ikke kan opfylde alle kravene fra de indbyrdes modstridende påvirkninger. Et simpelt eksempel ses på fig. 2.



Figur 2: Et simpelt spin glas. “+” er en ferromagnetisk interaktion. “-” er antiferromagnetisk. Billedet er taget fra [25].

Vi ser her tre Ising spins der kan vende enten op eller ned. Et “+” er en ferromagnetisk interaktion og et “-” en antiferromagnetisk. Det ses at det spin der ligger i nederste højre hjørne er ude af stand til at opfylde kravene fra de to andre. Begge peger opad men trækker det tredje spin i hver sin retning. Det tredje spin kan derfor pege både op eller ned uden at det har nogen betydning for systemets stabilitet. Begge tilstande er lige stabile, og der kan

ikke opnås en mere stabil tilstand da vores spin aldrig vil kunne opfylde to modsatrettede krav på en gang. De to tilstande er derfor begge grundtilstande, dvs. tilstande hvor energien er minimeret. Når grundtilstanden ikke er unik siger vi at systemet har en “degeneration” af grundtilstande. Hvis vi fryser et sådant system vil det før eller siden, i princippet, fastlåses i en af disse tilstande uden at vi kan sige med sikkerhed hvilken det bliver.



Figur 3: Et spin glas i sin grundtilstand hvor energien er minimeret. Tilstanden er fastfrosset uden nogen global orden. Lige linier er ferromagnetiske interaktioner. Brudte linier er anti-ferromagnetiske.

I et virkeligt spin glass vil der være en enorm mængde af grundtilstande hvor forskellige interaktioner er opfyldt. Set fra vores synspunkt virker konfigurationen helt tilfældig. Mindre domæner i systemet kan udvise ordnede mønstre, men som helhed er der ingen orden. Man siger at systemet udviser lokal, men ikke global, orden. Da energien afhænger af mange komplicerede interaktioner mellem de forskellige spins, er det meget svært at forudsige hvordan en grundtilstand vil se ud. På fig. (3) ses en simpel spin glas model der befinder sig i grundtilstanden⁵. På tegningen repræsenterer de lige linier

⁵Denne simple model kaldes en Edwards-Anderson model. Den er identisk med Ising

ferromagnetiske interaktioner mens de brudte linier er anti-ferromagnetiske. Det ses at der ikke kan observeres nogen form for global orden i spin glassets grundtilstand.

Et konkret fysisk spin glas kan typisk være en legering af et ikke-magnetisk materiale, som f.eks. guld, og et magnetisk materiale, som f.eks. jern. Da de to metaller er blandet sammen, vil jernatomerne ligge i forskellig afstand fra hinanden. Denne variable afstand mellem dipolerne i jernet skaber, via kvantefysiske effekter, den blanding af ferro- og antiferromagnetiske interaktioner der giver spin glasset dets unikke natur.

2.2.3 Energilandskabets struktur

“Kaos-teorien anskuer hele systemets opførsel som en dråbe vand, der bevæger sig på overfladen af en kompliceret skrue eller propel. Dråben kan løbe af propellen i en spiralbane, eller den kan løbe ud over kanten. Den kan gøre mange forskellige ting, alt efter omstændighederne. Men den vil altid bevæge sig langs propellens overflade.”

“Okay.”

“Malcolms modeller er tilbøjelige til at have en afsats eller en stejl skråning, hvor vanddråbens hastighed vil øges radikalt. Det er denne pludselige acceleration han i al beskedenhed kalder Malcolm-effekten. Hele systemet kan kollapse uden varsel. Og det var det han sagde om Jurassic Park. At den havde indbyggede ustabiliteter.”

-Michael Crichton, “Jurassic Park”. [23]

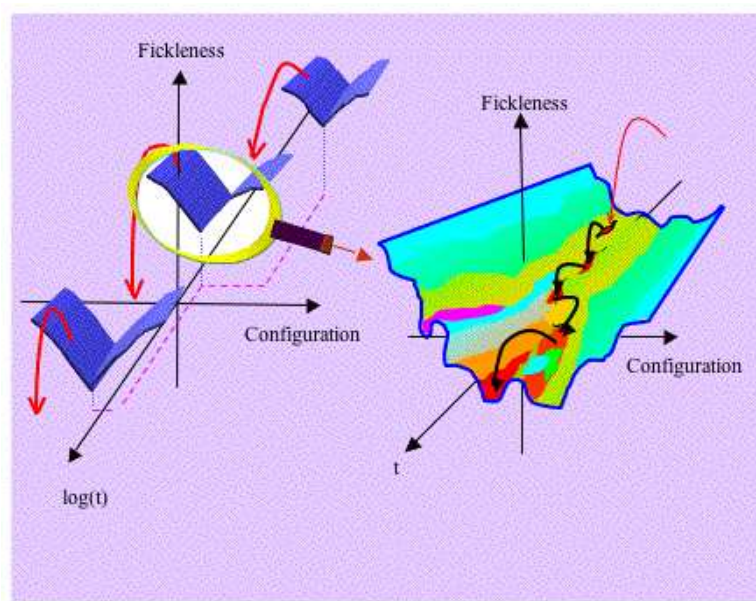
Når et spin glas udsættes for et pludseligt fald i den ydre temperatur, vil dets energi begynde at aftage. Da systemets interne energi nu er markant højere modellen bortset fra at spins her interagerer med en blanding af ferro- og antiferromagnetiske interaktioner.

end omgivelsernes termiske energi, er der opstået en ubalance. Systemet vil derfor begynde at afgive energi til omgivelserne så længe den indre og ydre energi ikke er i balance. Ved en meget lav temperatur kan vi antage at systemet er i ligevægt når energien er minimeret. Spin glassets udvikling kan derfor forklares ved at studere strukturen af det såkaldte “energilandskab”, dvs. hvordan systemets energi afhænger af konfigurationen.

At systemet udvikler sig gennem en serie af spring, kan forklares ved at det har en tendens til at hænge fast i en delvist stabil, eller “metastabil”, tilstand der skyldes et lokalt minimum i energien. Da energien fra hvert spin afhænger af alle de spins der påvirker dette, er det ofte ikke muligt at formindske systemets energi ved blot at dreje et enkelt spin. I stedet er flere forskellige spins nødt til at dreje, før systemet er i stand til at henfalde til en lavere energitilstand. Dette vil i første omgang forøge energien da visse spins er nødt til dreje i en retning der til at starte med er i modstrid med påvirkningerne fra flere af de tilstødende spins. Først når alle de relevante spins er drejet, vil den nye tilstand have en lavere energi end den gamle.

Hvis man plotter energien overfor en eller flere andre parametre vil fænomenet vise sig som en dal i dette energilandskab. Systemet ligger på bunden af en energidal hvor en hvilken som helst ændring vil forøge energien. Først når systemet er skubbet op af dalen, vil det være i stand til at rulle ned i en dybere dal hvor processen så gentager sig. Dette medfører at den gennemsnitlige energi er konstant så længe systemet befinder sig i dalen hvor efter den pludselig falder brat. På fig. 4 ses et kvalitativt billede af hvordan energilandskabet for et spin glas kan tænkes at se ud. “Fickleness” repræsenterer her et abstrakt mål for systemets ustabilitet.

Et sådant plot kaldes et fasediagram. I et fasediagram betragter man systemets parametre, som f.eks. energien, som koordinater i et koordinatsystem og plotter disse over for hinanden. Systemets tilstande kommer så til at udgøre et “landskab” i dette faserum der har lige så mange dimensioner som der er uafhængige parametre. På figuren er faserummet for nemhedens skyld afbildet som tre-dimensionelt. Energilandskabet bliver så en to-dimensionel overflade



Figur 4: En kvalitativ visualisering af energilandskabets struktur. Systemet hænger fast i metastabile dale hvor energien har et lokalt minimum. Billedet er taget fra [7].

der giver energien som funktion af de to andre parametre.

Når systemet hænger fast i en energidal, siger vi at det befinder sig i en “metastabil” tilstand. Så længe systemet befinder sig i dalen, opfører det sig som et stabilt ligevægtssystem, men denne tilsyneladende stabilitet er kun midlertidig. Den rette tilfældige fluktuation kan på et hvilket som helst tidspunkt skubbe systemet ud af dalen og ind i en ny.

Da tilfældige ændringer i de forskellige spins sker ved temperaturfluktuationer, betyder det at systemet til en vis grad vil fryse hurtigere ved højere temperaturer! Jo højere temperaturen er jo kortere tid går der, i gennemsnit, før fluktuationerne skubber systemet ud af dalen⁶.

Spin glassets gradvist aftagende udvikling forklares ved at hver ny metastabil dal er marginalt dybere end den foregående. Der skal således større og større

⁶Ved tilstrækkeligt høje temperaturer vil systemet naturligvis holde helt op med at fryse da den termiske energi vil være lige så høj som systemets.

fluktuationer til for at få systemet til at hoppe videre. Deraf opstår den gradvist aftagende “aging” der bliver langsommere jo længere tid der går. Se kapitel 3.1 for en mere detaljeret forklaring af dette fænomen.

Systemets reaktion på forskellige temperaturskridt viser sig også at kunne belyses ved at se nærmere på energilandskabets struktur. Dette indeholder ikke kun dale i energien, men disse er også ordnet i en hierarkisk struktur [19, 13, 20, 21]. Nærmere betegnet er energilandskabet en “fraktal”. En fraktal er en matematisk struktur der ses ens ud på alle størrelsesordner. Man siger at strukturen er “selvsimilær” eller “skala-invariant”. Den ligner sig selv når man zoomer ind eller ud.

Naturen indeholder mange eksempler på strukturer der er tæt på at være fraktaler. Et grantræ, f.eks, består af en central stamme med flere mindre sidegrene. Hver sidegren består af en central gren med flere mindre sidegrene. Hver mindre sidegren har selv mindre sidegrene osv. Denne selvsimilaritet ophører naturligvis efter et begrænset antal gentagelser, men til en vis grad er grantræet selvsimilært. I en matematisk fraktal vil selvsimilariteten fortsætte i det uendelige, men dette er naturligvis aldrig tilfældet i konkrete fysiske systemer.

For energilandskabet betyder dette at hver dal i sig selv indeholder et landskab af mindre dybe dale. Siden af en given dal er altså ikke helt glat men indeholder “bump” der i sig selv er lokale minima for energien. Ved en given temperatur “ser” systemet kun de energidale der har en passende dybde. Meget små dale vil systemet slet ikke bemærke da energien er for høj til at systemet hænger fast i disse. Meget dybe dale vil det ikke kunne komme ud af på en eksperimentel tidsskala, og disse vil derfor ikke have nogen synlig indvirkning på systemets udvikling.

Når temperaturen, og dermed systemets energi, sænkes, vil det begynde at hænge fast i de små dale der før var betydningsløse. Systemet vil derfor hoppe rundt i et lille minilandskab uden nogen sinde at forlade den større dal det befandt sig i før temperaturskridtet. Systemet “husker” dermed hvor det var

nået til da det bliver liggende i det område af energilandskabet der svarede til en enkelt dal ved den højere temperatur. Når temperaturen hæves igen, hopper det snart ud af denne dal og udviklingen fortsætter hvor den slap.

Et positivt temperaturskridt har den modsatte effekt. De dale systemet før hoppede rundt imellem er nu pludselig blot ubetydelige bump i en større dal som systemet snart efter vil hoppe ud af. Alt hvad der skete ved den lavere temperatur er derfor “glemte” da det blot virker som om systemet har ligget i den samme del hele tiden.

Ved at antage at energilandskabet har denne hierarkiske fraktalstruktur, kan man derfor belyse glassernes særegne reaktion på temperaturskridt. Ligesom grantræet er energilandskabet naturligvis også kun selvtilsvarende til en vis grad. Vi vil dog se at selvtilsvarende er en god approksimation ved de temperaturer hvor simuleringerne vil blive kørt.

Grundlæggende er der altså to elementer der skal være til stede for at skabe et spin glass:

- En uordnet/rodet blanding af ferro- og antiferromagnetiske interaktioner. Dette kaldes også for “quenched disorder” da denne uordnede blanding af interaktioner ikke ændrer sig når den først er fastlagt.
- Frustration mellem indbyrdes modstridende interaktioner der leder til en stor degeneration af grundtilstande.

Et hvilket som helst system der indeholder disse to basale elementer kan forventes at opføre sig som et spin glass.

2.3 Hvad er et “glas”?

Et glas kan generelt defineres som et materiale der fryser i en uordnet konfiguration og derefter fortsætter med at ændre sig gennem en langsom aftagende “aging” process. Materialets egenskaber vil afhænge af dets “alder” og er

kun konstante over relativt korte tidsperioder. Studiet af glasser kaldes glasdynamik. Naturen af “aging” afhænger ikke nærmere af systemets præcise opbygning men er universel for alle glasser [22]. Den kan derfor med fordel studeres via simple magnetiske modeller, som f.eks. spin glasset.

Andre materialer, som f.eks. vand, fryser som regel ved en faseovergang hvor temperaturen forbliver konstant mens alle molekylerne samler sig i en ordnet krystalstruktur. Først herefter fortsætter temperaturen med at falde. I modsætning hertil vil et glas, som f.eks. almindeligt vinduesglas, ikke fryse ved en sådan brat overgang. I stedet bevæger molekylerne sig gradvist langsommere og langsommere indtil de til sidst står næsten helt stille. Da der ikke er formet nogen krystalstruktur, vil molekylerne stadig ligge i samme uordnede konfiguration som de gjorde da materialet var flydende. Man siger at glas er et amorft fast stof.

Et spin glas, som det blev defineret i forrige kapitel, er et eksempel på et glas. Dog er det også muligt at lave glasmodeller der ikke har samme mikroskopiske struktur som spin glasset men alligevel udviser lignende opførsel. Den plaket model der bliver undersøgt i specialet er et eksempel på en sådan model. Plaket modellen, som vil blive beskrevet mere detaljeret i kapitel 3.2, indeholder hverken “quenched disorder” eller frustration men har alligevel en stor degeneration af grundtilstande. Denne degeneration er nok til at få systemet til at opføre sig som et glas selv om strukturen ikke har den opbygning der normalt betragtes som en basal forudsætning for et spin glas. Modellen er derfor interessant da strukturelle glasser, som almindeligt vinduesglas, ikke indeholder nogen indbygget frustration. Det er derfor vigtigt at vise at glasdynamikkens resultater også har relevans for systemer der ikke besidder spin glassets strukturelle uorden og frustration.

2.4 Analogier og applikationer

Studiet af spin glasser begyndte da man opdagede at visse magnetiske legeringer udviste usædvanlig opførsel. Disse studier har applikationer langt

ud over deres oprindelige ophav. Et hvilket som helst system der har visse basale egenskaber kan forventes at opføre sig på lignende vis som et spin glas. Systemet behøver blot at besidde et stort antal metastabile tilstande der opstår som konsekvens af konkurrence mellem en eller anden form for indbyrdes modstridende krav.

Et sådant system behøver ikke at have noget som helst at gøre med magneter eller med fysik for den sags skyld. I de anvendte modeller har vi godt nok beskæftiget os med et netværk af magnetiske dipoler der hver trækker i hinanden på forskellig vis. Men dette er langt fra den eneste måde at fortolke en sådan model. Et hvilket som helst system af variable der påvirker hinanden vil i princippet kunne beskrives med lignende modeller. Et "glas" behøver derfor slet ikke være et materiale, som f.eks. en magnetisk legering. Begrebet kan også dække over systemer uden for fysikken hvilket jeg nu vil komme nærmere ind på. Vi ser at glasdynamikken har potentielle applikationer for studiet af en lang række af vidt forskellige systemer.

2.4.1 Evolution

Den biologiske evolution er et eksempel på et system hvis opførsel minder om spin glassets selv om de to ting ved første øjekast ikke har meget med hinanden at gøre. Man har observeret at arternes udvikling mod større tilpassethed på visse områder minder om spin glassets udvikling mod større stabilitet [4, 7, 24]. Udviklingen udviser en intermitterent natur der ligner den vi vil se i kapitel 4.1.

Mange forskellige arter konkurrerer med hinanden hvilket giver en stor mængde af metastabile tilstande for hele miljøet. De termiske fluktuationer i spin glassets energi svarer til de tilfældige mutationer der sker i arternes gener. De fleste mutationer har ingen betydning og arterne vil derfor være stabile over længere perioder. På et tidspunkt sker så den helt rigtige serie af tilfældige mutationer der skaber en art med en klar fordel over for dens forgænger. Der sker en forholdsvis hurtig evolution der ser ud som et skarpt spring på en

geologisk tidsskala. Dette svarer til når den helt rigtigt kombination af spin fluktuationer skubber spin glasset ind i en mere stabil konfiguration.

At evolutionen vitterlig sker gennem sådanne spring bekræftes når vi betragter fossilerne i de geologiske jordlag. Her ses det at nye arter tilsyneladende er opstået ved hurtige spring således at de mellemliggende arter ofte ikke har eksisteret længe nok til at efterlade fossiler. Dette fænomen kaldes punktuert ligevægt [37].

Visse aspekter af evolutionen kan således, tilsyneladende, belyses via matematiske modeller der minder om dem der benyttes til at studere spin glasser.

2.4.2 Optimeringsproblemer

Som nævnt er det svært at forudsige hvordan en grundtilstand for et spin glas vil ende med at se ud. Grundet de mange komplekse interaktioner der påvirker energien er der ikke nogen generelt brugbar analytisk metode til at finde en grundtilstand for et vilkårligt spin glas. For at finde denne må man benytte forskellige computeralgoritmer. De metoder der benyttes til at finde grundtilstanden for et spin glas kan også overføres til andre matematiske optimeringsproblemer [4, 38].

Et af de kendteste optimeringsproblemer kaldes “The travelling salesman problemet”. En sælger skal besøge et bestemt antal byer og derefter vende tilbage til sin hjemby. I hvilken rækkefølge skal han besøge byerne for at ruten bliver kortest mulig? Hvis der er et stort antal byer vil antallet af mulige ruter være for stort til at man blot kan sammenligne dem alle. I stedet kan man forsøge at finde den optimale rute ved at starte med en tilfældig rækkefølge. Rutens længde kan forkortes ved at foretage små ændringer i den rækkefølge byerne besøges.

Som det er tilfældet for spin glassets udvikling, kan processen hænge fast i en delvist stabil “dal” hvor en hvilken som helst lille ændring i rækkefølgen vil gøre ruten længere. Dette gør det besværligt at finde den korteste rute.

Man kan ikke altid bare lave en simpel ændring i rækkefølgen så ruten bliver kortere.

For at løse problemet kan man indføre en fiktiv “temperatur” der medfører tilfældige ændringer i ruten og så køre en simulering hvor systemet “afkøles”, dvs. raten af tilfældige ændringer bliver formindsket. Systemet vil så begynde at udvikle sig mod kortere ruter, lige som et spin glas der udvikler sig mod en lavere energi når temperaturen sænkes. Hvis systemet hænger fast i en metastabil dal, kan man få det til at hoppe videre ved at “opvarme” det og derefter sænke temperaturen igen. På denne måde kan man komme tættere og tættere på den korteste rute ved at betragte systemet som et spin glas der bevæger sig mod den laveste energi. En lignende procedure kan, i princippet, benyttes på et hvilket som helst optimeringsproblem.

2.4.3 Proteinfoldning

En anden spin glass analogi fra biologiens verden ses i foldningen af et protein. Et protein er en lang kæde af aminosyrer der spontant folder sig sammen i en indviklet 3 dimensionel konfiguration. Foldningen forårsages af kemiske reaktioner mellem sidekæderne på de forskellige aminosyrer. Proteinets endelige konfiguration er en lav energi grundtilstand for dette. Da der er en enorm mængde af mulige foldninger er denne ikke nem at finde og det er derfor svært at forudse hvordan proteinet vil komme til at se ud. Der vil være et stort antal metastabile foldninger der ser helt anderledes ud end den ideelle konfiguration. Proteinfoldning er derfor et glasdynamisk problem og spin glass modeller er derfor også blevet brugt til at studere dette [8, 9, 24, 26].

2.4.4 Neurale netværk

Spin glass modeller er også blevet brugt inden for datalogien til konstruktion af såkaldte neurale netværk[4]. Disse forsøger at efterligne hjernens funktion ved et netværk af neuroner forbundet med synapser der tillader dem at kommunikere med hinanden. Hver neuron kan være enten aktiv eller passiv.

Parallellen til spin glasset er åbenlys. Et neuron svarer til et Ising spin der kan pege enten op eller ned. Synapserne svarer til de forskellige interaktioner hvormed spins påvirker hinanden. Man kan således bruge en stor del af spin glas teorien til at studere netværk af neuroner der forsøger at simulere den menneskelige hjerne.

2.4.5 Sociale netværk

Et andet eksempel på et netværk der muligvis vil kunne studeres via spin glas modeller er de sociale netværk. I social netværks teori betragter man et netværk af personer der hver udveksler information med de andre i deres bekendtskabskreds. Igen er analogien til spin glasset åbenlys. I stedet for spins har vi nu personer der kan kommunikere med hinanden og påvirke hinandens meninger på forskellig vis. Det er også blevet bemærket at sociale forandringer har en tendens til at ske ved pludselige omvæltninger svarende til de bratte spring i spin glassets energi som vi vil se i kapitel 4.1. F.eks. har Arnold Toynbee argumenteret for at civilisationernes udvikling udviser en form for intermittens. Imperier vil være stabile over lange tidsperioder hvor efter disse pludselig kan bryde sammen i løbet af relativ kort tid [34, 35].

2.4.6 Økonomi

Der er på nuværende tidspunkt meget forskning inden for såkaldt “økonofysik” hvor man forsøger at beskrive økonomien via metoder hentet fra statistisk fysik. Blandt andet er det blevet foreslået at økonomien bør betragtes som et komplekst system der muligvis vil kunne beskrives ved hjælp af spin glass modeller [10]. Dette skyldes at økonomien, i sin essens, er et netværk af personer der forsøger at tage højde for hinandens beslutninger når de foretager investeringer. Hver person er derfor udsat for indbyrdes modstridende påvirkninger fra de forskellige personer de har kontakt med. Et sådant netværk af variable, der udsætter hinanden for indbyrdes modstridende påvirkninger, er netop det der er karakteristisk for et spin glas.

Det er også blevet observeret at fluktuationer i markedspriserne ikke, som mange økonomiske teorier antager, er normalfordelte men at disse har haler der er højere end det ville være tilfældet for en normalfordeling [36]. Der er altså større risiko for store fluktuationer end ventet. Som forklaret i kapitel 4.3.3 er dette netop hvad man vil forvente hvis markedet opfører sig som et glas. De høje haler vil så skyldes spring mellem metastabile tilstande.

2.4.7 Filosofi

Selv et tilsyneladende fjernt emne som filosofien kunne måske have gavn af glasdynamikken. Også her finder man fænomener der vækker associationer til spin glasset.

Det er blevet observeret, indenfor videnskabsteorien, at videnskaben selv udvikler sig via spring, såkaldte paradigmeskift, adskilt af perioder hvor videnskabens verdensbillede er nogenlunde stabilt [11]. De stabile perioder kunne tænkes at svare til det vi ser i et glas der hænger fast i en metastabil dal. En stor fluktuation i energien vil så svare til at en videnskabsmand får en genial ide. Denne vil derefter skubbe det videnskabelige samfund ud af den metastabile teoretiske konfiguration hvor det har hængt fast.

Ideer fra glasdynamikken kunne derfor tænkes at have relevans for studiet af videnskabens egen dynamik.

Denne analogi er dog ren spekulation og er ikke baseret på nogen videnskabelig forskning. Den er alligevel medtaget for at vise at selv systemer meget fjernt fra fysikkens verden har egenskaber der vækker associationer til glasdynamikken.

3 Teori og metode

I forrige kapitel gav jeg en uformel introduktion til teorien bag specialet. I dette kapitel vil jeg gå mere i dybden med den matematiske baggrund samt beskrive de metoder og modeller der er benyttet.

3.1 Rekorddynamikken

Spin glassets gradvise aging kan forklares ved at systemet udvikler sig gennem en serie af spring mellem metastabile energidale. Statistikken af disse spring, herefter kaldet “quakes”, viser sig at kunne beskrives ved hjælp af den matematiske teori for rekorder i stokastiske sekvenser. Et quake kan forventes at finde sted når der sker en energifluktuations hvis størrelse overskrider dybden af den energidal hvori systemet befinder sig. Når systemet nedkøles vil energien falde og hvert spring antages at foregå ind i en dal der er dybere end den foregående [1, 20, 21, 22, 38]. Systemet vil forblive i denne dal indtil der sker en ny energifluktuations hvis størrelse overstiger dybden af den nye metastabile dal. Man kan visualisere systemet som en kugle der ruller rundt i bunden af en glat skål. For at få kuglen til at rulle ud af skålen skal denne tildeles en kinetisk energi der er større end den potentielle energi ved skålens kant.

Da hver dal antages at være dybere end den foregående, medfører dette at et spring først vil finde sted efter en energifluktuations hvis størrelse overstiger alle de foregående. En såkaldt rekord for energifluktuationserne. Hvis man yderligere antager at hver dal kun er infinitesimalt dybere end den foregående, vil et spring ske hver gang en sådan rekord har fundet sted⁷. Systemets opførsel kan derfor analyseres ved hjælp af eksisterende matematiske metoder omhandlende rekorder i stokastiske sekvenser.

⁷Denne antagelse kaldes “Marginal Stabilitet”. At antagelsen er brugbar skyldes energilandskabets fraktale struktur. Da energilandskabet er selvtilsvarende vil der eksistere et kontinuum af dale med alle størrelser. Dale der ligger tæt på hinanden vil kun have infinitesimalt forskellige dybder.

Den matematiske teori for rekorder vil nu kort blive beskrevet:

Betragt en sekvens af tilfældige tal med en vilkårlig stationær fordeling over en uendelig definitions­mængde. Det kan vises at fordelingen af rekorder i denne sekvens approksimativt bliver en log-Poisson fordeling, helt uafhængigt af sekvensens fordeling [2, 15].

Antag at vi til hver enhedstid, $t = 1, 2, 3, \dots$, vælger et tilfældigt tal til vores sekvens, med en fast fordeling. Lad $t > 0$ og betragt en tid, $t_w > 1$. For store t er sandsynligheden for at k rekorder finder sted i intervallet $[t_w, t_w + t]$ approksimativt givet som

$$P_k(t_w, t_w + t) = \frac{1}{k!} \left[\alpha \log \left(\frac{t_w + t}{t_w} \right) \right]^k \left[\frac{t_w + t}{t_w} \right]^{-\alpha} \quad (1)$$

Da $\log \left(\frac{t_w + t}{t_w} \right) = \log(t_w + t) - \log(t_w)$, er dette slet og ret en Poisson fordeling over logaritmisk tid, dvs. en log-Poisson fordeling. Det forventes altså at det gennemsnitlige antal rekorder der finder sted i et givent logaritmisk tidsinterval vil være konstant. Dvs. der vil i gennemsnit findes lige så mange rekorder mellem $t = 10$ og $t = 10^2$ som mellem $t = 10^2$ og $t = 10^3$.

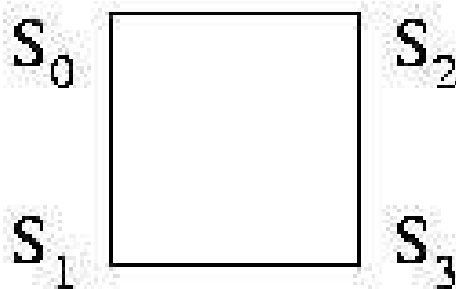
Som et konkret eksempel på rekord­dynamik “in action”, kan man forestille sig et højhus der er konstrueret til at modstå alle kendte jordskælv på det tidspunktet højhuset blev bygget. Efter et stykke tid sker der et jordskælv der er voldsommere end alle tidligere observerede jordskælv og højhuset styrter i grus. Klog af skade genopbygger man højhuset så det også kan modstå jordskælv af denne størrelse. Efter endnu længere tid sker der så et endnu voldsommere jordskælv og højhuset styrter sammen igen! Man genopbygger igen osv. Antallet af højhusstyrt i et givent tidsinterval vil i så fald følge en log-Poisson fordeling. Højhuset vil i gennemsnit styrte sammen lige så mange gange mellem år 10 og år 100 som det gør mellem år 100 og år 1000.

Da de intermitterende quakes i systemets energi sker efter hver rekord i energifluktuationerne, forventes disse altså approksimativt at følge denne log-Poisson fordeling. Det gennemsnitlige antal quakes i et givent tidsinterval vil være stationært, på en logaritmisk tidsskala.

3.2 Plaket modellen

Det er længe blevet debatteret hvorvidt spin glas opførsel kan opstå i modeller uden indbygget strukturel uorden og blandede interaktioner[4]. Resten af specialet vil beskæftige sig med med en sådan model, kaldet plaket modellen. Det er blevet vist at denne udviser intermittent opførsel af samme natur som spin glassets [1].

I de mest almindelige modeller, som f.eks. Ising modellen og Edwards-Anderson modellen, påvirker spins hinanden i grupper på to naboer. Hvert nabopar påvirker hinanden uafhængig af interaktionen mellem de andre nabospins. Plaket modellen er dermed en p -spin model, hvilket vil sige at spins interagerer i grupper med p spins i hver gruppe. I plaket modellen er $p = 4$ og grupperne kaldes plaketter. En sådan plaket ses på fig. 5.



Figur 5: En plaket bestående af fire spins. I en 3D model vil hvert spin deltage i 12 plaketter, 4 i hvert plan.

Hver plakets bidrag til systemets totale energi er givet som⁸

$$E_{\text{plaquette}} = - \prod_{i=0}^3 s_i$$

⁸Vi tildeler værdien +1 til “op” spins og -1 til “ned” spins.

En plaket har således to energitilstande, 1 og -1 , hvor -1 er grundtilstanden. Da en hvilken som helst tilstand med et lige antal ned spins vil være en grundtilstand, er grundtilstanden degenereret. Hver plaket har otte grundtilstande.

I et system bestående af P plaketter vil hamiltonfunktionen, systemets totale energi, være

$$H = \sum_{i=1}^P E_{\text{plquette},i} \quad (2)$$

Systemets totale degeneration er så $8^P = 2^{3P}$. Vi har således et eksempel på et system med en stor degeneration af grundtilstande uden at dette har forudsat strukturel uorden af nogen art.

I Ising modellen er grundtilstanden nået når alle spins vender i samme retning. Da Ising spins kan vende enten op eller ned, er der kun to grundtilstande. Under simuleringer observeres det at spins under afkølingen danner domæner hvor alle spins vender enten op eller ned. Før eller siden får et af disse alternativer overtaget og systemet bevæger sig ind i den tilhørende grundtilstand.

I plaket modellen kan det derfor også forventes at der vil dannes domæner der hver favoriserer en af de mange mulige grundtilstande. Da der her er et gigantisk udvalg af alternativer, vil konkurrencen mellem disse domæner kunne få systemet til at blive fanget i en energidal på samme måde som det sker for spin glasset. Eksistensen af disse energidale vil medføre intermitterent opførsel, som det blev forklaret i kapitel 2.2.3.

3.3 Ventetidsmetoden

Den mest almindelige metode til numerisk analyse af Ising spin modeller kaldes Metropolis algoritmen [26]. Denne er et eksempel på en Monte Carlo metode, dvs. en metode der benytter sig af computergenerede "tilfældige" tal til at simulere tilfældige fluktuationer i systemet.

Metropolis algoritmen består af to simple trin der gentages for hvert spin i systemet:

- 1 Vil systemets energi blive mindre hvis dette spin drejes i den modsatte retning?⁹ Hvis ja, ændres værdien af det pågældende spin. I modsat fald går vi videre til næste trin.
- 2 For at simulere effekten af tilfældige temperaturfluktuationer, tildeles vores spin en sandsynlighed for alligevel at ændre værdi. Denne er givet ved $P = e^{-\frac{\Delta E}{K_b T}}$. ΔE er forandringen i systemets energi hvis trækket gennemføres, K_b er Boltzmanns konstant og T er temperaturen. Sandsynligheden for at trækket gennemføres stiger altså eksponentielt med temperaturen, men falder eksponentielt med størrelsen af energiændringen.

Når disse trin er gennemført for alle spins i systemet, siger man at man har gennemført et “sweep” af systemet med Metropolis algoritmen.

Ulempen ved Metropolis algoritmen er at den ofte vil bruge meget tid på at tjekke hvert enkelt spin uden at gennemføre nogen ændringer. Hvis temperaturen er lav, og systemet er i en relativ stabil tilstand, vil langt de fleste træk blive afvist. Man spilder derfor en masse tid på at køre en simulering hvor der ikke sker det fjerneste. I vores plaket model, så vel som i Edwards-Anderson spin glas modellen, vil systemet som sagt have en tendens til at hænge fast i delvist stabile energidale. Når systemet befinder sig i en dal, vil alle ændringer i et enkelt spin føre til en forøgelse af energien, og der skal ske en forholdsvis stor stigning i energien for at få systemet ud af dalen. Da sandsynligheden for at gennemføre trækket i trin 2 af Metropolis algoritmen falder eksponentielt med størrelsen af ΔE , vil denne derfor være meget lille. Metropolis algoritmen er derfor upraktisk at bruge på denne model.

⁹Det erindres at et Ising spin kun har to mulige værdier: op og ned, svarende til værdierne ± 1 .

Til formålet benyttes derfor istedet en mere sofistikeret metode kaldet Ventetidsmetoden [14]. Denne tager udgangspunkt i Metropolis algoritmen men afviser ikke nogen træk. I stedet tildeles hvert spin, σ_i , en ventetid, t_i , der svarer til den tid hvor det pågældende spin vil ændre værdi hvis det lokale felt er konstant. Til at starte med beregnes ventetiderne som

$$t_i = -\tau_i \log X_i$$

X_i er her en stokastisk variabel der er uniformt fordelt i intervallet $[0, 1]$. Ventetiderne har således en eksponentiel fordeling hvor gennemsnittet er givet ved

$$\tau_i = \max(1, e^{\Delta_i/T})$$

Her er Δ_i den energiændring der opnås ved at flippe det pågældende spin.

Systemets globale tid, t_{global} , sættes til nul.

Herefter gennemgår ventetidsmetoden tre trin

- 1 Flip det spin der har den laveste ventetid.
- 2 Sæt den globale tid lig med den pågældende ventetid.
- 3 Generer nye ventetider, med det nye Δ_i , for det pågældende spin samt alle de spins der interagerer med dette.

Ventetidsmetoden har tre fordele frem for Metropolis algoritmen.

- 1 Den er hurtigere ved lave temperaturer da ingen træk bliver afvist.
- 2 Da ventetiderne har en kontinuert fordeling, kan tiden hvor en begivenhed finder sted være et hvilket som helst reelt tal. Metropolis algoritmen tillader kun tiden at antage hele tal som værdi.

3 Kædereaktioner kan simuleres mere realistisk. Et spin der flipper kan ofte forventes at skabe en kædereaktion hvor alle spins i et domæne ændrer værdi i løbet af kort tid. Da Metropolis algoritmen tjekker et spin ad gangen, vil mange nærliggende spins først blive tjekket når der er gennemført et helt sweep af systemet. Med ventetidsmetoden kan domæner nemmere ændre værdi sammen. Et spin der flipper vil medføre at alle de spins der interagerer med dette spin vil få tildelt nye ventetider med det samme.

Ventetidsmetoden undgår Metropolis algoritmens problemer men stiller til gengæld sine egne krav til computeren. For at finde det spin der har den laveste ventetid skal der foretages en søgning i en database over alle spins og deres ventetider. Denne skal opdateres efter hvert træk. Hvis databasen ordnes i et træ med den laveste ventetid i bunden skal der i alt udføres $\log N$ operationer efter hvert træk, hvor N er antallet af spins. Metoden vil altså ikke nødvendigvis være hurtigere end Metropolis algoritmen. Da ventetidsmetodens beregningsmæssige krav ikke afhænger af temperaturen, kan den dog forventes at være hurtigere end Metropolis algoritmen ved lave temperaturer. Det er blevet vist, for et Edwards-Anderson spin glass, at dette er tilfældet for $T < 1.3$. Det svarer nogenlunde til den temperatur hvor systemet vil begynde at udvise aging og alle undersøgelser af Edwards-Anderson modellen er derfor foretaget under denne temperatur.

Da de interessante fænomener i vores model kun observeres ved lave temperaturer, kan ventetidsmetoden forventes at være betydeligt mere effektiv end Metropolis algoritmen. Ventetidsmetoden vil derfor blive benyttet til alle simuleringer i dette speciale.

3.4 En “mesoskopisk” model

Systemets udvikling forventes at foregå via intermitterende spring, eller “quakes”, adskilt af perioder med stabilitet. For at studere disse er det nødvendigt

at benytte en model med den rette størrelse. Er modellen for stor vil de enkelte quakes ikke kunne skelnes. En for lille model vil derimod slet ikke udvise den korrekte glasdynamiske udvikling [31].

I dette speciale betragtes, med mindre andet er nævnt, en model bestående af en $16 \times 16 \times 16$ kube af spins der interagerer via plaket interaktionen. Kuben har topologi som en torus, hvert side spin interagerer med det tilsvarende spin i den modsatte side.

Denne model, der består af beskedne $16^3 = 4096$ spins, er meget lille i forhold til et makroskopisk system der vil indeholde milliarder af dipoler. Dette er dog ikke udelukkende en ulempe. Faktisk er det meget vigtigt at betragte et lille system for at undersøge de fænomener der er årsag til glasdynamikkens interessante natur.

I et makroskopisk system vil de tidligere nævnte quakes ikke kunne observeres da ændringerne i systemets energi vil være et gennemsnit af alle de spring der vil ske uafhængigt på vidt forskellige steder. Energiens udvikling, såvel som den tilsvarende udvikling af en hvilken som helst anden målelig størrelse, vil derfor fremstå som en glat graf uden noget synligt tegn på intermittens. Dette skyldes at spins kun interagerer med nærliggende spins og at størrelsen af et quake, og den tilsvarende størrelse af det spin domæne der forårsager det, derfor er uafhængig af systemets størrelse. Jo større systemet er jo sværere er det derfor at skelne de enkelte quakes.

For at observere intermittensen direkte er det derfor nødvendigt at betragte et system der er meget lille i forhold til det makroskopiske tilfælde, men stadig stort nok til at den samme overordnede opførsel vil opstå. Et sådant system kaldes Mesoskopisk og er en mellemting mellem det mikroskopiske og det makroskopiske. Når intermittensen kan observeres direkte, kan man undersøge den statistiske fordeling af de quakes der forventes at være årsagen til alle forandringer i systemet. Resultaterne kan derefter bruges til at forklare naturen af systemets udvikling i det makroskopiske tilfælde selv om intermittensen her ikke kan ses direkte.

4 Resultater og diskussion

I dette kapitel fremlægges resultaterne af simuleringerne. Det vil blive vist at disse bekræfter de teoretiske forventninger. Systemet udvikler sig via intermitterende quakes der, til en god approksimation, følger en log-Poisson statistik. Disse quakes styrer udviklingen af alle målelige størrelser, som f.eks. energien og magnetiseringen.

Ved at antage at systemets udvikling styres af sådanne intermitterende quakes, hvis statistik afhænger af statistikken af rekorder i energifluktuationerne, kan man udlede testbare forudsigelser:

- Den gradvist aftagende energiudvikling kan forklares ved at antallet af quakes følger samme fordeling som antallet af rekorder i energifluktuationerne. Det bør derfor være muligt at observere sådanne spring i systemets energiudvikling, og disse bør følge den forventede log-Poisson statistik.
- Magnetiseringens og energiens udvikling vil være underlagt de samme intermitterende quakes. Den lineære respons til et eksternt felt der slås til ved $t = t_w$ vil derfor kun afhænge af $\frac{t}{t_w}$ da raten af de quakes der styrer systemets udvikling er stationær i logaritmisk tid.
- Effekten af temperaturskridt kan belyses ved at antage at systemet udvikler sig via spring i et fraktalt energilandskab. Plaket modellen bør derfor udvise samme hukommelses- og rejuveneringseffekter som spin glasset hvis blot energilandskabet har samme fraktalstruktur.

Alle disse forudsigelser vil blive bekræftet.

I det følgende betragtes, med mindre andet er nævnt, et system bestående af en kube af spins med bredden $L = 16$ og temperaturen $T = 1.5$. Systemet vil således indeholde $M = 16^3 = 4096$ spins. Disse interagerer via den tidligere beskrevne plaket interaktion. Hver spin deltager i 12 plaketter, 4 i

hvert plan. Topologien er som en torus, dvs. hvert spin er forbundet med det tilsvarende spin i den modsatte ende af kubens. Simuleringen kører uobserveret til tiden $t_w = 10^2$ hvorefter systemet observeres over et tidsinterval på $t_{obs} = 10^4$ tidsenheder¹⁰. En tidsenhed svarer til et sweep af systemet via Metropolis Algoritmen. Et pludseligt fald i temperaturen, et såkaldt “quench”, simuleres ved at starte systemet i en tilfældig konfiguration¹¹ og derefter køre simuleringen.

I alle statistiske analyser, som beregning af sandsynlighedsfunktioner, er data, med mindre andet nævnes, samlet fra 1000 uafhængige kørsler.

4.1 Intermittens

Systemets udvikling forventes at være styret af intermittente “quakes” hvor energien falder brat[1]. Mellem disse er systemet i en metastabil dal hvor der kun sker reversible fluktuationer i energien. Et quake defineres som en ændring i energien der er irreversibel i det betragtede tidsinterval. Når systemet først er hoppet ned i en dybere energidal er sandsynligheden for at det hopper tilbage, i løbet af den tid hvor simuleringen køres, så lille at dette i praksis er umuligt. Dette adskiller “quakes” fra de reversible fluktuationer der finder sted inden for en energidal¹².

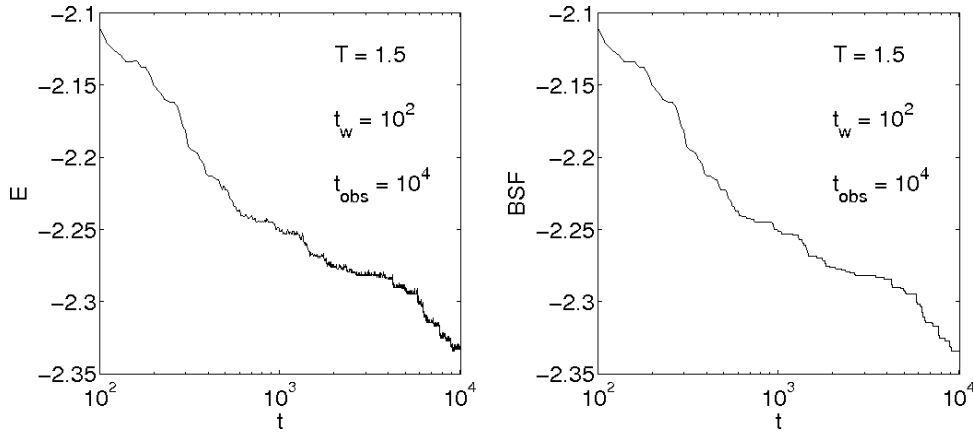
4.1.1 Energiens udvikling

Som vi vil se udviser plaket modellens udvikling rent faktisk denne intermittens. Den mest direkte måde at vise dette på er ved slet og ret at måle

¹⁰Også kaldet to “dekader” da vi ganger tiden med en faktor 10 to gange.

¹¹Ved tilstrækkelig høje temperaturer vil interaktionsenergien være ubetydelig i forhold til den termiske energi, og alle spins vil derfor fluktuere konstant. En tilfældig konfiguration svarer derfor til det man vil se ved en meget høj temperatur.

¹²Det bemærkes at der ikke er nogen absolut grænse mellem et quake og en reversibel fluktuation men at denne afhænger af tidsskalaen. Hvad der er et quake på en kort tidsskala vil være en reversibel fluktuation på længere sigt, og omvendt.



Figur 6: Til venstre ses energien som funktion t . Til højre ses det tilsvarende “Best So Far” (BSF) energisignal. På begge figurer observeres den forventede intermittens. Udviklingen sker via hurtige spring adskilt af perioder med stabilitet. Den eneste forskel mellem de to signaler er at BSF signalet mangler de reversible fluktuationer.

energien i løbet af kørslen, og så se om dennes udvikling er intermitterent. Til dette formål måles energien ved 1000 linært ækvidistante tidspunkter, mellem t_w og $t_w + t_{obs}$, og denne plottes som funktion af tiden på et semilogaritmisk plot¹³. Resultatet ses til venstre på fig. 6.

Energien aftager, som forventet, ved en række hurtige “quakes” adskilt af perioder med stabilitet. Dog er det svært at adskille de irreversible ændringer fra de termiske fluktuationer i energien.

For at få et tydeligere billede af energiudviklingen plottes i stedet den laveste energi der er opnået indtil videre. Da de eneste irreversible ændringer i energien per definition sker via quakes, kan de forventes at svare nogenlunde til fald i denne “Best So Far” (BSF) energi. Et quake defineres derfor tentativt som en ændring i BSF signalet.

Denne definition har den ulempe at den potentielt vil fejltælle antallet af quakes. Hvis to quakes sker mellem to energimålinger, vil disse kun blive talt som et enkelt quake hvilket medfører en undertælling. Et quake tager dog også en vis tid da de involverede spins ikke alle ændrer retning på nøjagtig samme

¹³Afstanden mellem hver energimåling er således $\delta t = \frac{t_{obs}}{1000} = 10$.

tid. Hvis flere energimålinger foretages i løbet af et enkelt quake, vil disse derfor hver blive talt som et separat quake. Dette medfører en overtælling af det korrekte antal quakes.

Definitionen forventes dog at være en god approksimation når blot man tager højde for den potentielle fejltælling. BSF energien ses til højre på fig. 6.

Her ses de enkelte quakes noget tydeligere. Dog kan det stadig være svært at skelne enkelte begivenheder da udviklingen sker meget hurtigt. Lige efter et temperatur “quench”, vil systemet befinde sig i en transient fase hvor energien falder meget hurtigt. Herefter vil aging dominere og energiudviklingen bliver logaritmisk. Ydermere så vi i kapitel. (3.1) at antallet af rekorder i en sekvens først bliver log-Poisson fordelt ved relativt sene tider. Energiudviklingen virker stadig til at gå meget hurtigt ved $t = 10^2$.

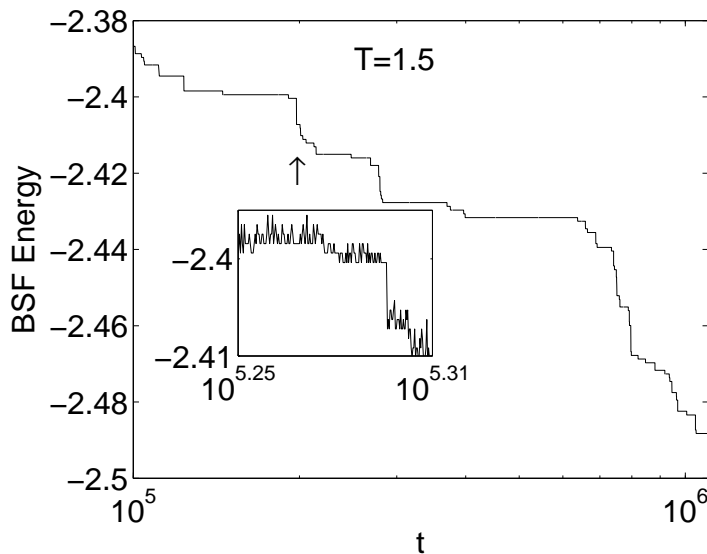
For at få et endnu tydeligere billede af energiudviklingens natur er der derfor kørt en tilsvarende simulering med $t_w = 10^5$ og $t_{obs} = 10^6$. Se fig. 7

Her kan de enkelte quakes skelnes tydeligere da den transiente fase nu ser ud til at være overstået. Ydermere betragtes her kun en enkelt dekade hvilket gør det nemmere at se de enkelte begivenheder. Til sammenligning vises et udsnit af det ubehandlede energisignal hvor de reversible fluktuationer tydeligt ses. BSF signalet virker til at have samme form som det ubehandlede energisignal, med den ene forskel at de reversible fluktuationer er fjernet.

Eksistensen af de intermittente quakes kan også påvises indirekte ved at betragte en PDF¹⁴ af energifluktuationerne. Fra tidligere undersøgelser forventes det at denne vil være gaussisk tæt på nul men vil have en eksponentiel hale [1]. Dette skyldes at systemet, når det er fanget i en energidal, opfører sig som et ligevægtssystem med normalfordelte reversible fluktuationer omkring nul. De eneste irreversible ændringer sker ved spring ind i en ny dal, og disse har en eksponentiel fordeling. Dette giver den eksponentielle hale.

PDF'en konstrueres ved at betragte 20 logaritmisk ækvidistante tider i hver

¹⁴PDF står for “Probability Density Function”. Sandsynligheden for at måle en energifluktuation indenfor et givent interval er lig med arealet under PDF'en.

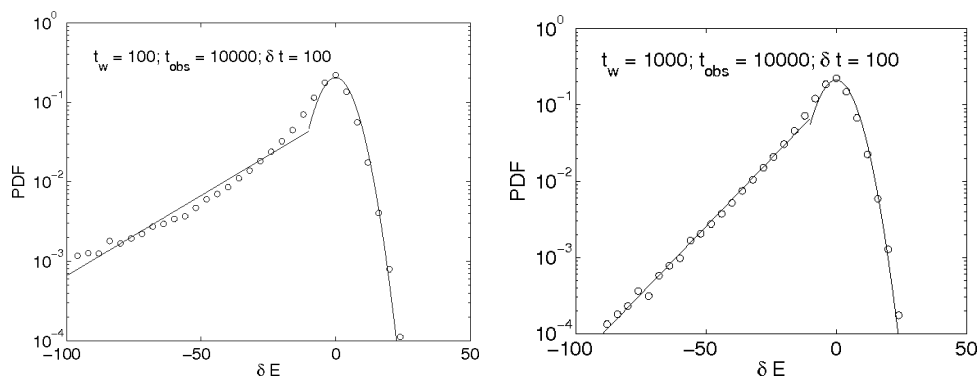


Figur 7: BSF energien som funktion af t for $t \in (10^5; 10^6 + 10^5)$. Intermittensen kan her ses endnu tydeligere end på fig. (6). I firkanten ses et udsnit af det tilsvarende ubehandlede energisignal. Dette er næsten identisk med BSF signalet, blot med reversible fluktuationer mellem de irreversible quakes.

kørsel. For hver tid måles ændringen i energien fra denne tid, t_{fluc} , og frem til en senere tid, $t_{fluc} + \delta t$. I dette tilfælde benyttes $\delta t = 100$. Data er her samlet fra 2000 uafhængige kørsler.

Til venstre på fig. 8 ses resultatet for $t_w = 10^2$. Som forventet er PDF'en gaussisk med en hale i den negative del. Dog virker halen ikke til at være helt eksponentiel men krummer opad på det semilogaritmiske plot. Der sker altså flere irreversible ændringer end forudsagt. Dette skyldes sandsynligvis at systemet efter det indledende quench befinder sig i den transiente fase hvor energien falder drastisk. Når energien er faldet tilstrækkeligt, begynder systemet at hænge fast i de nævnte energidale, og energiudviklingen vil blive domineret af aging via spring mellem disse dale. Den høje hale kan altså skyldes at systemet ikke er helt ude af den transiente fase.

For at vise at dette rent faktisk er årsagen, laves en ny PDF med $t_w = 10^4$ hvor



Figur 8: Til venstre ses en PDF for fluktuationer i energien med $t_w = 10^2$. Til højre ses en tilsvarende PDF for en simulering med $t_w = 10^4$. I begge tilfælde ses det at PDF'en har to dele. Omkring $\delta E = 0$ er PDF'en gaussisk med gennemsnittet $\mu_{\delta E} = 0$. For store negative fluktuationer ses derimod en ikke-gaussisk hale. Halen bliver eksponentiel for $t_w = 10^4$ men er det ikke for $t_w = 10^2$.

den transiente fase burde være helt overstået. Til højre på fig. 8 ses at halen nu bliver fint eksponentiel. Det kan altså konkluderes at systemet først bliver helt færdig med den transiente fase et sted mellem $t_w = 10^2$ og $t_w = 10^4$. En fuldstændig skarp grænse kan ikke defineres da der er en glidende overgang fra den transiente fase til det område hvor aging dominerer.

Vi har nu set at to former for dynamik eksisterer sideløbende i systemet. Når dette er fanget i en metastabil dal udviser det gaussiske fluktuationer der ligner dem vi ser i et system i ligevægt. Når systemet springer fra en dal til en anden, ser vi store intermitterende fald i energien. Størrelsen af disse quakes ses at være eksponentielt fordelt.

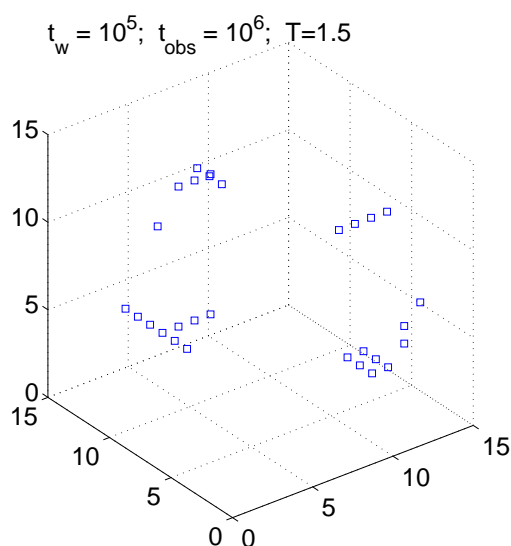
4.1.2 “Realspace” undersøgelser

Det forventes at et quake vil finde sted når et eller flere domæner af spins i modellen ændrer værdi i forlængelse af hinanden. I dette kapitel vil det blive vist at store fald i energien rent faktisk sker sideløbende med ændringer i sådanne spin domæner. Vi vil også se at disse domæner er meget små i forhold til systemet som helhed. Det er altså kun en lille brøkdel af den

totale mængde spins der skal ændre værdi for at forårsage et quake.

Forskningen i glasdynamik har som regel fokuseret på strukturen af systemets faserum, som f.eks. energilandskabet. Her betragtes i stedet de ændringer der finder sted i det normale 3-dimensionelle rum hvori modellen er indlejret. Dette benævnes “realspace” for at adskille det fra faserummet.

Vi vil nu se hvordan de forskellige spins ændrer sig i løbet af et quake. På fig. 9 ses et 3D plot af de spins der har ændret værdi i løbet af et quake. Simuleringen er observeret over en enkelt dekade fra $t_w = 10^5$ til $t = 10^5 + 10^6$.¹⁵ Energien er målt 1000 gange i løbet af kørslen, og et quake defineres som en ændring i BSF signalet. Plottet viser de spins der har forskellig værdi før og efter det pågældende fald i BSF energien.



Figur 9: 3D plot af spin flips under et quake. Figuren viser de spins der har forskellig værdi før og efter den pågældende ændring i BSF energien. Det ses at de fleste spins har formet aflange domæner der tilsyneladende er flippet sammen.

På plottet ses tydeligt at de forskellige spins, som forventet, har formet sam-

¹⁵Den høje alder er valgt for at sikre at den transiente fase er helt overstået, så individuelle quakes tydeligt kan skelnes fra de reversible fluktuationer.

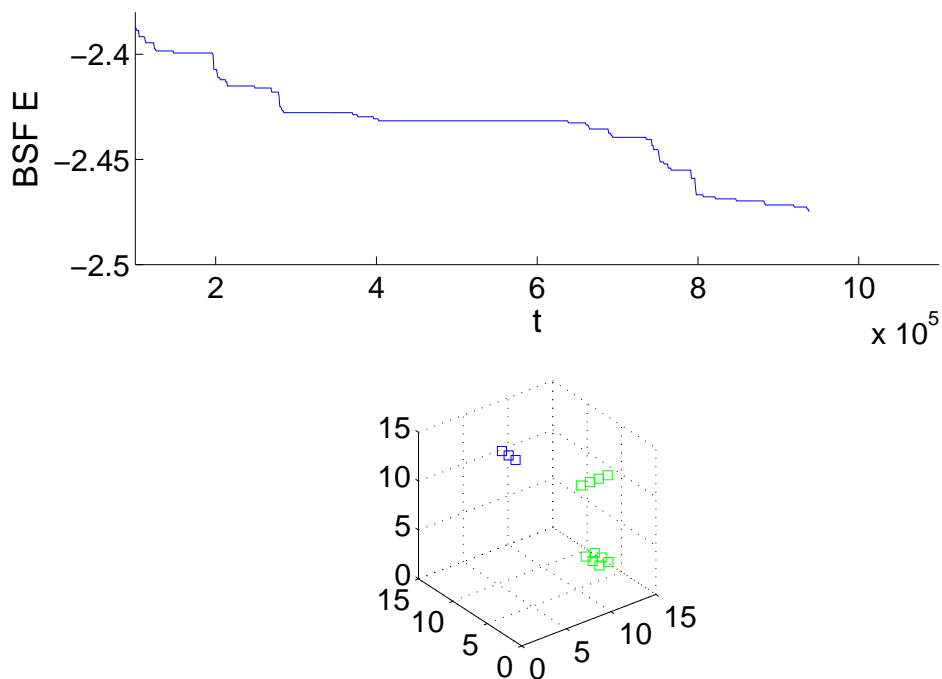
menhængende domæner der har ændret værdi nogenlunde samtidig. Vi kan dog ikke vide med sikkerhed om de pågældende spins er flippet helt samtidig. Da der kun er foretaget 1000 energimålinger, ser vi her alle de spins der har en anden værdi før og efter et tidsinterval af størrelsen $\delta t = 1000$. Der kunne selvfølgelig foretages finere målinger, men i så fald ville antallet af quakes risikere at blive overtalt, og vi ville derfor kun se en del af de spin flips der hører til det reelle quake.

Man kan ikke, på fig. 9, skelne mellem de spin flips der har medført den irreversible energiændring og de der blot har deltaget i de reversible energi-fluktuationer der er sket i det samme tidsinterval. De spins der har forårsaget det pågældende quake bør i princippet kun have flippet en enkelt gang og derved skabt en vedvarende energiændring. I modsætning hertil vil de spins der har været involveret i de termiske fluktuationer ofte have flippet frem og tilbage mange gange på kort tid. Desværre vil de sidstnævnte også ses på plottet hvis blot deres værdi er forskellig ved de to måletider.

For at isolere de spins der rent faktisk har deltaget i et quake, fra de der blot har fluktueret tilfældigt, foretages nu en “coarse graining” over tiden. Værdien af hvert spin erstattes med dets gennemsnitlige værdi over 5 måletider, og spins betragtes kun som betydningsfulde hvis deres gennemsnitlige værdi har ændret sig betydeligt. For et spin der konstant flipper frem og tilbage vil den gennemsnitlige værdi være stort set uændret. Hvis det pågældende spin derimod kun har flippet en enkelt gang i løbet af det pågældende quake, vil ændringen i den gennemsnitlige værdi være 2; fra -1 til 1 eller omvendt.

Nederst på fig. 10 ses alle de spins hvis gennemsnitlige værdi har ændret sig betydeligt i løbet af et quake i energien. På den øverste figur ses BSF signalets udvikling indtil en given tid. Nedenunder ses de “coarse grained” spins der har ændret værdi siden den foregående måletid.

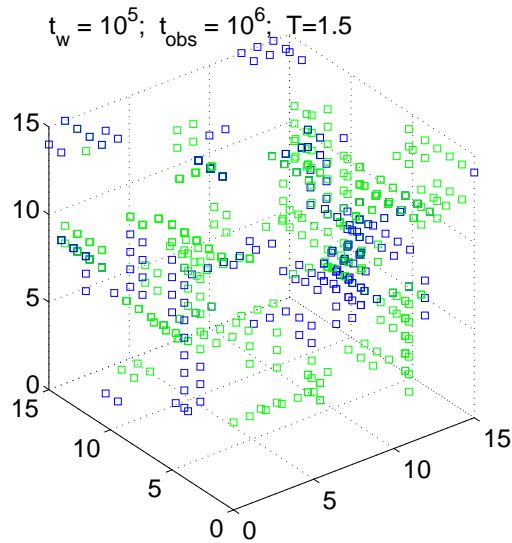
De blå firkanter repræsenterer de spins der kun har flippet en gang. De røde firkanter svarer til de spins hvor ændringen i gennemsnitsværdien opfylder $|\Delta\mu_S| > 1.5$. Disse er medtaget da et spin godt kan deltage i et quake selv om



Figur 10: Øverst ses et plot af BSF energisignalet efter en given tid. Det ses at der netop er sket et quake i energien. Nedenunder ses et snapshot af de “coarse grained” spins der har deltaget i dette quake. Blå: $|\Delta\mu_S| = 2$. Rød: $|\Delta\mu_S| > 1.5$. Alle disse spins har dannet sammenhængende domæner.

det har flippet tilfældigt en enkelt gang eller to undervejs. Her ses det endnu tydeligere at de forskellige spins har formet aflange domæner i systemet.

For at give et tydeligere billede af hvor mange domæner der er involveret i quakes, vises på fig. 11 alle de coarse-grained spin flips der har fundet sted under hele simuleringen. Her ses det tydeligt at kun en lille brøkdel af spins har bidraget til de quakes der styrer systemets energiudvikling. Alle disse spins har dannet sammenhængende domæner. De spins der havde flippet alene på fig. 9 havde sandsynligvis kun deltaget i reversible fluktuationer. De har derfor ikke haft nogen indflydelse på systemets udvikling. Udviklingen har altså været styret af et lille mindretal af spins, mens det store flertal



Figur 11: Samtlige “coarse grained” spin flips under hele kørslen. Blå: $|\Delta\mu_S| = 2$. Rød: $|\Delta\mu_S| > 1.5$. Alle de spins der har deltaget i quakes under hele kørslen virker til at have dannet sammenhængende domæner. Disse dækker kun over en lille brøkdel af det totale antal spins. Det store flertal af spins har ikke haft nogen betydning for systemets udvikling.

ikke har haft nogen betydning. Dette er interessant da mange teoretikere har ment at udviklingen af et glas skyldes omfattende ændringer i hele systemets konfiguration [29].

Vi har altså set at systemets intermittente energiudvikling sker sideløbende med intermittente ændringer af domæner af spins. Disse domæner udgør kun en lille brøkdel af systemet men forventes alligevel at styre hele systemets udvikling. De resterende spins deltager kun i reversible fluktuationer der ikke har nogen betydning for udviklingen.

4.2 Den statistiske fordeling af quakes

Det er nu blevet påvist at systemets udvikling, som ventet, er styret af intermittente quakes. Statistikken af disse quakes kan derfor bruges til at forklare udviklingens natur. Antallet af quakes forventes at følge en log-Poisson for-

deling - en Poisson fordeling over logaritmisk tid¹⁶.

I dette kapitel vil det blive vist at antallet af quakes, til en god approksimation, følger denne log-Poisson fordeling. Ydermere vil det blive vist hvordan log-Poisson fordelingsparameter, α , afhænger af temperaturen og af systemets størrelse. Vi vil se at disse afhængigheder begge passer med de teoretiske forventninger.

Når der foretages en statistisk analyse af antallet af quakes i et givent tidsinterval, skal der tages højde for flere forskellige statistiske fejlkilder og usikkerheder. Den væsentligste fejlkilde skyldes den metode der benyttes til at tælle antallet af quakes.

Quakes defineres som ændringer i energien der er irreversible på den betragtede tidsskala. Hvis antallet af quakes er log-Poisson fordelt, vil disse yderligere være ukorrelerede. At to quakes er ukorrelerede betyder at tilstedeværelsen af et quake, til en given tid¹⁷, ikke har nogen indflydelse på hvornår de andre quakes finder sted. To quakes skal altså være tilstrækkelig langt fra hinanden i tiden til at systemet har "glemt" det første quake på det tidspunkt hvor det andet finder sted. Hvis en irreversibel ændring i energien forårsager en ny irreversibel ændring, er begge del af et og samme quake.

I praksis vil enhver ændring i "Best So Far" rekordsignalet blive talt som et quake. Dette medfører indlysende problemer. Antallet af registrerede quakes kommer til at afhænge af hvor fine energimålinger vi foretager i løbet af kørslen, dvs. størrelsen af afstanden, δt , mellem to på hinanden følgende målinger af energien. En serie af korrelerede irreversible fald i energien vil, per definition, være et enkelt quake. Hvis dette quake strækker sig over et tidsinterval der er større end afstanden mellem måletiderne, δt , vil det blive talt som flere forskellige quakes. Hver gang energien måles i løbet af et quake,

¹⁶Se ligning (1).

¹⁷Det erindres at vi her benytter en logaritmisk tidsskala da fordelingen ventes at være en log-Poisson fordeling. På en lineær tidsskala vil quake tiderne være korrelerede, da raten af quakes aftager. Man skal derfor, i gennemsnit, vente i længere og længere tid for at observere det næste quake.

vil der blive registreret et fald i BSF energien. Hvert af disse fald vil blive talt som et separat quake. Antallet af quakes vil altså blive overtaget, og denne overtælling vil kun forværres hvis energimålingerne gøres finere.

Hvis energimålingerne derimod er for grove, vil antallet af quakes risikere at blive undertalt. To quakes der finder sted mellem to måletider vil kun blive registreret som et enkelt fald i BSF energien. Denne undertælling vil kunne rettes ved at gøre energimålingerne finere, men dette vil forværre overtællingen.

Da energien måles på en lineær skala, vil en evt. fejltælling også afhænge af den tid hvor antallet af quakes måles. I starten af kørslen vil raten af quakes være meget hurtig¹⁸ hvilket vil øge faren for at undertælle det korrekte antal quakes. Hen imod slutningen af kørslen vil raten af quakes være aftaget drastisk så overtællingen bliver mere markant.

For at tage højde for en eventuel fejltælling er det derfor nødvendigt at se på hvordan en Poisson fordeling påvirkes når antallet af begivenheder fejltælles.

Lad \bar{X} være en Poisson fordelt stokastisk variabel der giver antallet af begivenheder i et givent interval. For en sådan fordeling vil gennemsnittet og variansen, af antallet af begivenheder, begge være lig med Poisson parameteren, α :

$$\langle x \rangle = \sigma^2(x) = \alpha$$

Antag at det målte antal af begivenheder afviger fra det reelle med en faktor a . Vi får så en ny stokastisk variabel givet ved $\bar{Y} = a\bar{X}$. Gennemsnit og varians af \bar{Y} bliver så:

$$\langle y \rangle = a\langle x \rangle = a\alpha, \quad \sigma^2(y) = a^2\sigma^2(x) = a^2\alpha$$

Overtællingsfaktoren kan altså findes som

¹⁸Da denne kun forventes at være konstant over logaritmisk tid.

$$a = \frac{\sigma^2(y)}{\langle y \rangle}$$

Og Poisson parameteren kan udregnes ud fra $\langle y \rangle$

$$\alpha = \frac{\langle y \rangle}{a}$$

En evt. fejltælling kan derfor påvises og korrigeres ved at betragte gennemsnittet og variansen af antallet af begivenheder i forskellige tidsintervaller. For en Poisson fordeling vil disse være identiske. Hvis Poisson fordelingen er fejltalt vil variansen derimod afvige fra gennemsnittet med en faktor a . Det korrekte antal begivenheder kan så fås ved at dividere det målte antal med denne fejltællingsfaktor.

En anden vigtig fejlkilde skyldes de såkaldte “finite-size” effekter. Modellen har en endelig størrelse, og kørslen fortsætter kun over et endeligt tidsinterval. Vi kan altså umuligt få et eksakt billede af hvad der vil ske til alle tider i et makroskopisk system. F.eks. er fordelingen af ventetiderne mellem to på hinanden følgende quakes blevet undersøgt. Her er store ventetider blevet undertalt da kørslen ofte vil være stoppet mellem to quakes med lang ventetid imellem. Store ventetider vil derfor ikke blive medtaget når formen af fordelingen skal bestemmes. Ydermere vil simuleringen kun give et endeligt antal data hvilket giver statistiske usikkerheder når disse bruges til at estimere de korrekte fordelinger.

Vi vil se at tilsyneladende uoverensstemmelser mellem teorien og resultaterne kan forklares når der tages højde for disse fejlkilder.

4.2.1 Ventetidernes fordeling

Når det ønskes vist at antallet af begivenheder følger en bestemt fordeling, kan dette gøres på flere måder. F.eks. vil fordelingen af ventetiderne mellem

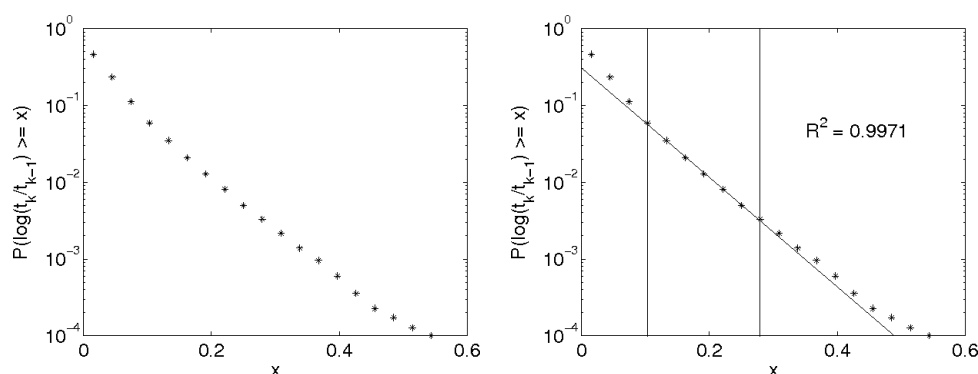
to begivenheder afhænge af begivenhedernes fordeling. Ved at undersøge fordelingen af ventetiderne kan man drage konklusioner vedrørende fordelingen af begivenhederne som sådan.

Fordelingen af ventetiderne mellem quakes viser sig at være i overensstemmelse med den antagelse at antallet af quakes er log-Poisson fordelt. Det vil blive vist at de tilsyneladende uoverensstemmelser kan forklares ved de fejlkilder der blev beskrevet i forrige kapitel.

Hvis antallet af quakes er Poisson fordelt, vil ventetiderne mellem to på hinanden efterfølgende quakes følge en eksponentiel fordeling [27]. Quakes ventes at være log-Poisson fordelt, dvs. Poisson fordelt over logaritmisk tid. Ventetiderne vil derfor være givet ved forskellen mellem de logaritmiske tider, $\ln(t_k) - \ln(t_{k-1}) = \ln(\frac{t_k}{t_{k-1}})$, hvor t_k er den tid hvor det k 'te quake registreres.

De logaritmiske ventetider beregnes på basis af dataene fra simuleringen med $t \in [10^2; 10^4 + 10^2]$. Hver ændring i BSF energien tælles som et quake. Ventetiderne bør være eksponentielt fordelt, og fordelingsfunktionen bør derfor danne en lige linie på et semilogaritmisk plot. På fig. 12 ses to semilogaritmiske plots af sandsynligheden for at observere en logaritmisk ventetid større end x . Denne forventes at følge en eksponentiel fordeling, $P(\ln(\frac{t_k}{t_{k-1}}) \geq x) = \exp(-\alpha x)$.

De første 3-4 punkter på grafen afviger betydeligt, men derefter observeres den forventede lineære afhængighed. Afvigelserne for de små ventetider kan skyldes at antallet af quakes er blevet overtalt. Når et enkelt quake tælles som flere forskellige, giver dette en serie af quakes med korte ventetider imellem. Korte ventetider vil derfor sandsynligvis blive overtalt hvilket giver en større hældning på den første del af fordelingsfunktionen. Dette er i overensstemmelse med hvad vi ser på figuren. Hvis antallet af quakes var blevet undertalt, ville antallet af korte ventetider også være blevet det. En undertælling af quakes vil skyldes at to eller flere quakes ligger så tæt på hinanden at de falder mellem to måletider. Ventetiderne mellem sådanne quakes vil være meget korte men vil ikke blive registreret.



Figur 12: Figurene viser den kumulative fordelingsfunktion for de logaritmiske ventetider $\ln(\frac{t_k}{t_{k-1}})$. Den sorte linie på figuren til højre er et fit til en eksponentiel funktion, $a \cdot \exp(-\alpha x)$, med $\alpha = 16.44$. Det ses at funktionen er eksponentiel i et område der strækker sig over næsten to dekader. Værdien for R^2 er udregnet for det område af grafen, mellem de to lodrette linier, hvortil den analytiske funktion er fittet.

Den sidste del af grafen flader ud og afviger markant fra det teoretisk forventede resultat. Dette skyldes angiveligt finite-size effekter. Da systemet kun kører en endelig tid vil højere ventetider være underrepræsenteret hvilket medfører at grafen flader ud.

Ydermere ses det at de første 10 punkter allerede har strukket sig over de første 2-3 dekader. Dvs. mere end 99% af dataene vil ligge i dette område. De resterende punkter dækker altså kun over højst 1% af dataene. Da datasættet indeholder godt 10^5 ventetider, er den sidste del af fordelingsfunktionen estimeret på basis af under 1000 datapunkter. Der vil derfor være for store statistiske usikkerheder til at de sidste punkter kan bruges som pålidelige estimater for den korrekte proportion af ventetider i det pågældende interval.

Poisson parameteren, α , vil være identisk med det tilsvarende α i eksponentialfunktionen. På det semilogaritmiske plot vil den eksponentielle fordeling være en ret linie med hældningen $-\alpha$. Ved at fitte en lige linie til den lineære del af grafen¹⁹ fås

$$\alpha = 16.44$$

¹⁹Dvs. punkt 4 til 10.

Det bemærkes at fordelingsfunktionen i praksis er fittet til $a \cdot \exp(-\alpha x)$ frem for $\exp(-\alpha x)$. Da kurven kun skal gå igennem de midterste punkter vil den ikke nødvendigvis skære y -aksen i $y = 1$. Dette skyldes at de korte ventetider tilsyneladende er overtalt, og at de resterende ventetider derfor udgør en mindre brøkdel af det totale datasæt end det ellers ville være tilfældet. En fejltælling af korte ventetider bør derimod ikke påvirke hældningen af linien i det område hvor antallet af ventetider ikke forventes at være fejltalt.

Fittet ses til højre på fig. 12. Værdien for R^2 er udregnet for det lineære område som kurven er fittet til²⁰.

Vi har altså nu set at ventetidernes fordeling er næsten fuldstændig i overensstemmelse med de teoretiske forventninger når man tager hensyn til de ventede fejlkilder. Afvigelserne for korte ventetider kan forklares ved at antallet af quakes er overtalt hvilket medfører en tilsvarende overtælling af de korte ventetider. De tilsvarende afvigelser for lange ventetider kan forklares ved en kombination af finite-size effekter og statistiske usikkerheder. Antallet af lange ventetider vil blive undertalt, og antallet af data i dette område er under alle omstændigheder for lavt til at give et korrekt estimat for antallet af ventetider.

Det kan konkluderes at ventetiderne følger den forventede eksponentielle fordeling. Afvigelserne fra eksponentialfordelingen skyldes sandsynligvis de forventede fejlkilder. Ventetidernes fordeling er i overensstemmelse med den antagelse at antallet af quakes er Log-Poisson fordelt.

4.2.2 Antallet af quakes i et logaritmisk tidsinterval

I kapitel 4.2.1 så vi at ventetidernes fordeling er i overensstemmelse med det der forventes hvis antallet af quakes er log-Poisson fordelt. Poisson parameteren blev estimeret som $\alpha \approx 16$. Det vil nu blive vist at antallet af quakes

²⁰ R^2 er et statistisk mål for hvor stor en del af variationen i dataene der er forklaret af teorien [33]. Hvis alle data ligger på den analytiske kurve fås $R^2 = 1$. Dataene er altså næsten 100% i overensstemmelse med teorien i det pågældende interval.

i et givet tidsinterval følger den ventede log-Poisson fordeling. Vi vil igen se at afvigelserne fra de teoretiske forventninger kan forklares ud fra de kendte fejlkilder.

Poisson parameteren, α , forventes at give et estimat af raten af quakes, dvs. det gennemsnitlige antal quakes per enhedstid, på en logaritimisk tidsskala. Hvis antallet af quakes følger en log-Poisson fordeling, bør α også kunne udregnes ved direkte at tælle det gennemsnitlige antal quakes per tid:

$$\alpha = \frac{\langle n(t) \rangle}{\ln\left(\frac{t}{t_w}\right)} \quad (3)$$

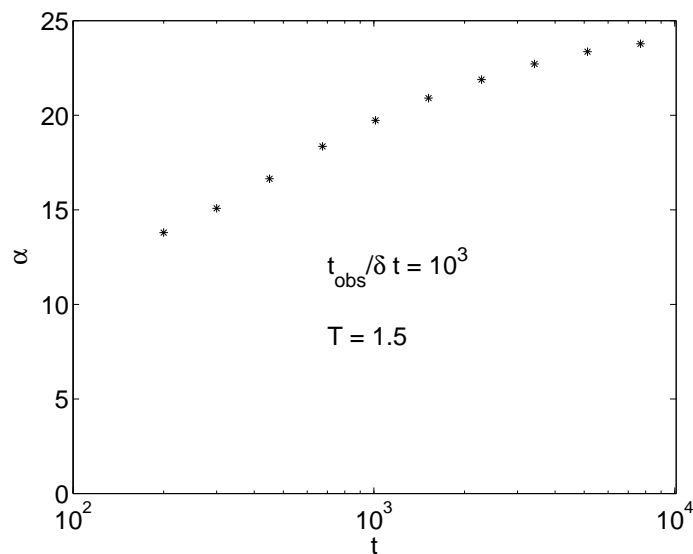
Her er $\langle n(t) \rangle$ det gennemsnitlige antal quakes der har fundet sted mellem tiderne t_w og t , og $\ln\left(\frac{t}{t_w}\right)$ er den tid der er gået siden observationerne påbegyndtes, på en logaritmisk skala. Denne beregning er foretaget for 10 logaritmisk ækvidistante værdier af t , mellem $t = 200$ og $t = 7700$. Da raten af quakes er stationær over logaritmisk tid, forventes det at det gennemsnitlige antal quakes vil stige lineært mellem måletiderne.

Estimatet i ligning (3) forventes ikke at afhænge synderligt af måletiden, t . Hvis det gør, har vi ikke en log-Poisson fordeling da raten af quakes i så fald skulle være stationær.

På fig. 13 ses at α ikke er uafhængig af måletiden men rangerer mellem 13 og 24. Gennemsnittet, $\alpha = 19.62$, er i nogenlunde overensstemmelse med resultatet fra ventetidsanalysen, men antallet af quakes virker ikke umiddelbart til at være log-Poisson fordelt. Raten af quakes er ikke stationær over logaritmisk tid.

Det vil nu blive demonstreret at også denne afvigelse kan korrigeres hvis man tager højde for fejlkilderne.

For en log-Poisson fordeling vil variansen og gennemsnittet af antallet af quakes, $n(t)$, i et givet logaritmisk tidsinterval, $\frac{t_{slut}}{t_{start}}$, være identiske: $\sigma^2(n(t)) = \langle n(t) \rangle$. Et plot af variansen som funktion af gennemsnittet vil derfor give en ret linie med hældningen 1.



Figur 13: Estimatet $\alpha = \frac{\langle n(t) \rangle}{\ln(\frac{t}{t_w})}$ er her plottet over for tiden, t . Dette er ikke, som håbet, uafhængigt af den tid hvor antallet af quakes tælles. I stedet vokser estimatet, til at starte med, med tiden og flader derefter ud.

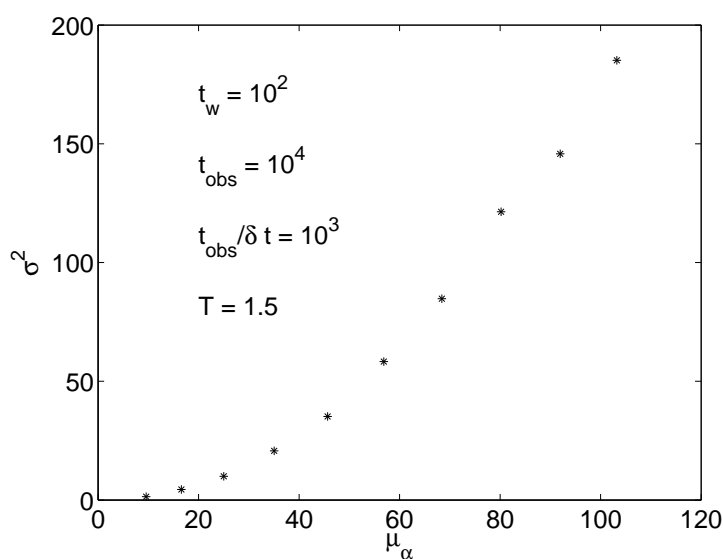
Hvis antallet af quakes er fejltalt med en faktor a , fås i stedet $\sigma^2(n(t)) = a\langle n(t) \rangle$. Hvis fejltællingen er den samme for alle tidsintervallerne, vil et plot af variansen som funktion af gennemsnittet derfor give en ret linie med hældningen a .

Estimatet på fig. 13 giver et resultat der i starten er mindre end det tilsvarende fra ventetidsanalysen. Derefter flader grafen ud, og α bliver til sidst nogenlunde konstant men er nu betydeligt større end ventetidsanalysens estimat.

Når tiden måles på en lineær skala, vil antallet af quakes mellem tidlige måletider være større end det tilsvarende antal mellem sene måletider. Der vil derfor være en tendens til at undertælle quakes i begyndelsen og overtælle dem til slut. Ud fra fig. 13 ser det ud til at antallet af quakes er undertalt i starten. Derefter begynder overtællingen at dominere og bliver til sidst konstant. En konstant overtælling vil medføre at variansen, af antallet af

quakes, vil blive proportionel med gennemsnittet.

På fig. 14 ses at dette rent faktisk er tilfældet. Når variansen plottes over for gennemsnittet, fås en kurve der krummer i starten men derefter nærmer sig en ret linie. Dette er i overensstemmelse med hvad der forventes for en Poisson fordeling når antallet af begivenheder fejltælles.

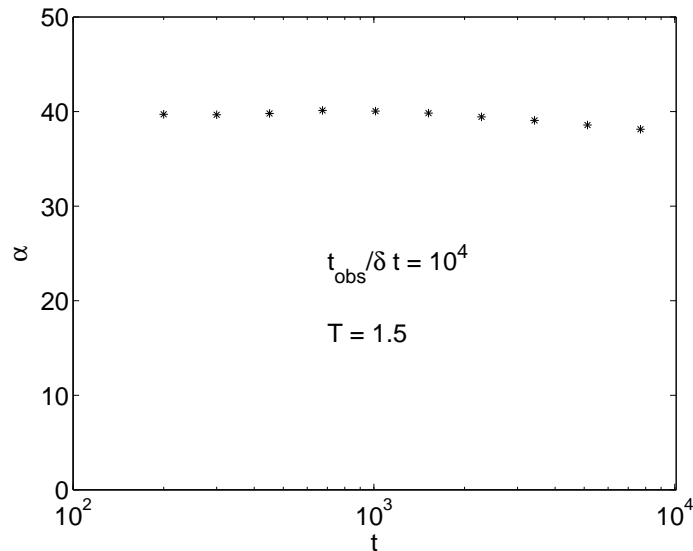


Figur 14: Variansen over for gennemsnittet. For en log-Poisson fordeling ville dette give en lige linie med hældningen 1. I stedet ses en markant krumning i begyndelsen hvorefter kurven bliver nogenlunde lineær.

Vi ser at estimatet for α bliver nogenlunde konstant til senere tider hvor raten af quakes er aftaget betydeligt. Her ser det ud til at undertællingen er elimineret og at der i stedet sker en konstant overtælling. Undertællingen vil også kunne elimineres ved at foretage finere målinger af energien. Det ser ud til at vi i så fald vil få en konstant overtælling og dermed også et estimat for α der ikke afhænger af tidsintervallet. Det korrekte α vil så kunne estimeres ved at dividere estimatet med den konstante overtællingsfaktor.

For at opnå dette er der kørt en tilsvarende simulering hvor energien er målt

10^4 gange²¹.



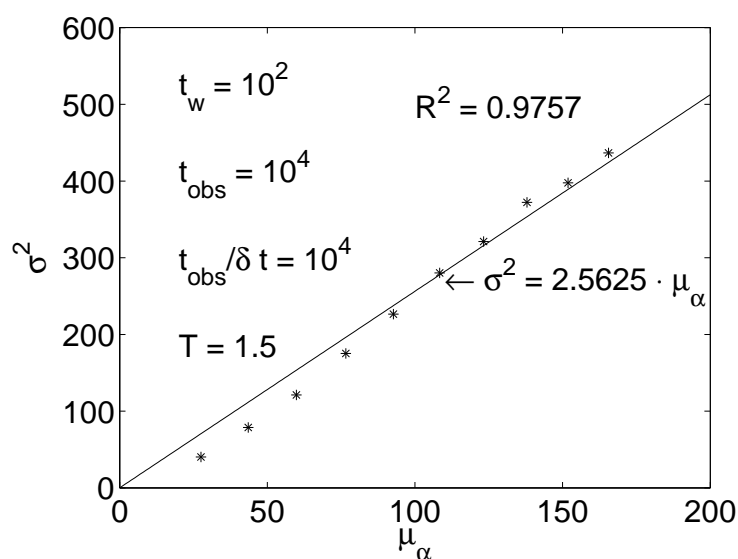
Figur 15: Estimatet $\alpha = \frac{\langle n(t) \rangle}{\ln(\frac{t}{t_w})}$ plottet over for tiden, t , med $\frac{t_{obs}}{\delta t} = 10^4$. Dette er nu næsten konstant hvilket er i overensstemmelse med antagelsen om at vi her har en log-Poisson fordeling med en konstant overtælling.

De tilsvarende plots for denne simulering ses på fig. 15 og fig. 16.

Det ses at $\alpha \approx 40$ nu, som ventet, er næsten konstant hvis der sker en konstant overtælling af quakes. Variansen bliver næsten fuldstændig proportionel med gennemsnittet hvilket bekræfter at dette er tilfældet.

Overtællingsfaktoren, a , kan nu estimeres ved at fitte punkterne på fig. 16 til en lige linie, $\sigma^2(n(t)) = a \cdot \langle n(t) \rangle$, gennem $(0, 0)$. Dette giver resultatet $a = 2.5625$. Det målte antal quakes synes altså at være ca. 2.5 gange større end det reelle antal. Det korrekte α kan herefter estimeres som $\frac{\langle \alpha \rangle}{2.5625} = 15.3899$, et resultat der er i fin overensstemmelse med det tilsvarende estimat fra ventetidsanalysen.

²¹Det totale antal af energimålinger benævnes $\frac{t_{obs}}{\delta t}$ hvor δt er tiden mellem hver energimåling.

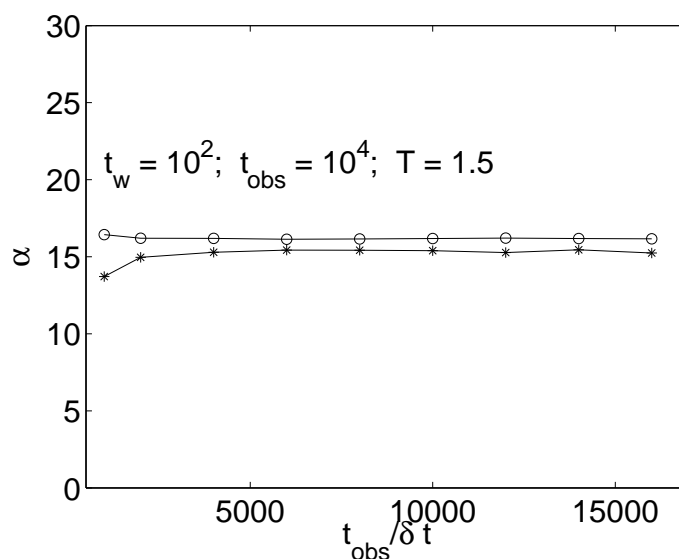


Figur 16: Plot af variansen over for gennemsnittet med $\frac{t_{\text{obs}}}{\delta t} = 10^4$. Data ligger nu omtrent på en lige linie som forventet hvis antallet af quakes er log-Poisson fordelt. Variansen bliver næsten proportionel med gennemsnittet som ventet hvis der sker en konstant overtælling.

For at sikre at overensstemmelsen mellem estimerne ikke blot er et tilfælde, køres en serie simuleringer med $\frac{t_{\text{obs}}}{\delta t}$ rangerende fra 2000 til 16000. I hver simulering udregnes α først ved ventetidsanalyse. Derefter udregnes det tilsvarende estimat via $\frac{\langle n \rangle}{\log(t - t_{\text{obs}})}$, og resultatet korrigeres for overtælling som beskrevet ovenfor. Fejltællingsfaktoren, a , findes ved at fitte en lige linie til variansen som funktion af gennemsnittet. Det korrekte α estimeres derefter som $\frac{\langle \alpha \rangle}{a}$.

Resultaterne ses på fig. 17.

Her ses det at der er fin overensstemmelse mellem de to estimater. Dog er estimatet fra tællemetoden lidt mindre end det tilsvarende fra ventetidsanalysen. Begge estimater er næsten fuldstændigt uafhængige af hvor fine energimålinger der foretages. Antallet af energimålinger vil påvirke fejltællingen, men når der tages højde for denne fås den samme værdi for α i alle tilfælde. Ventetidsanalysens estimat påvirkes ikke af fejltællingen da denne kun æn-



Figur 17: Plot af α over for $\frac{t_{\text{obs}}}{\delta t}$. Cirkler: ventetidsanalyse. Stjerner: $\alpha = \frac{\langle n \rangle}{\log(\frac{t}{t_w})}$. Ingen af de to estimater påvirkes synderligt af antallet af energidata. Ventetidsanalysens estimat virker en anelse mere stabilt end $\alpha = \frac{\langle n \rangle}{\log(\frac{t}{t_w})}$. For det sidstnævnte estimat skal der korrigeres for overtælling, men når dette er gjort er begge estimater næsten i overensstemmelse. Dog er $\alpha = \frac{\langle n \rangle}{\log(\frac{t}{t_w})}$ en smule lavere end det tilsvarende estimat fra ventetidsanalysen.

drer antallet af korte ventetider. Fordelingen af korte ventetider bliver ikke taget i betragtning når α estimeres, og fejltællingen har derfor ingen betydelig indflydelse på estimatet.

Tællemetodens estimat påvirkes, i første omgang, betydeligt af fejltællingen. Dette har imidlertid ingen betydning da størrelsen af fejlen kan udregnes meget nøjagtigt ved at analysere variansen og gennemsnittet af antallet af quakes i hvert tidsinterval. Det korrekte α kan herefter estimeres.

Vi har altså nu stærk evidens for at $\alpha \approx 16$ er et godt estimat for den korrekte Poisson parameter. Begge metoder giver næsten samme resultat, og størrelsen af fejltællingen har ingen betydelig effekt på nogen af estimaterne. For yderligere at bekræfte at antallet af quakes bliver overtalt, vil det blive vist at der er en korrelation mellem ventetiderne. Da quakes er ukorrelerede

betyder det at nogen af de registrerede quakes i virkeligheden hører sammen som dele af et enkelt quake.

Korrelationen mellem to størrelser, x og y , kan defineres som

$$C(x, y) = \langle xy \rangle - \langle x \rangle \langle y \rangle \quad (4)$$

Denne vil være nul hvis de to størrelser er uafhængige, positiv hvis de følges ad og negativ hvis de har en tendens til at bevæge sig i modsat retning af hinanden [26, 27].

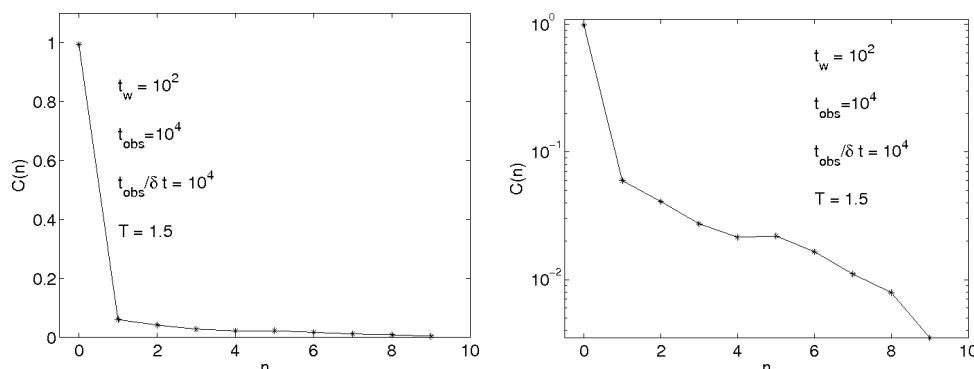
Hvis antallet af begivenheder er Poisson fordelt, vil de tider hvor der observeres en begivenhed være uafhængige af hinanden. Der vil derfor ikke være nogen korrelation mellem ventetiderne mellem to begivenheder. Tilstedeværelsen af en begivenhed har ingen indflydelse på hvor længe man skal vente på den næste begivenhed. Hvis quakes er log-Poisson fordelt vil korrelationen mellem de logaritmiske ventetider, $\ln(\frac{t}{t_w})$, derfor være nul.

Hvis et enkelt quake derimod tælles som flere forskellige, vil dette give en serie af quakes med små ventetider lige efter hinanden. Små ventetider vil altså have en tendens til at følges ad hvilket giver en positiv korrelation.

For at teste dette plottes korrelationerne, $C(n) = \langle \ln(\frac{t_k}{t_{k-1}}) \ln(\frac{t_{k+n}}{t_{k+n-1}}) \rangle - \langle \ln(\frac{t_k}{t_{k-1}}) \rangle \langle \ln(\frac{t_{k+n}}{t_{k+n-1}}) \rangle$, mellem en given ventetid og de n efterfølgende ventetider. For uafhængige quakes vil dette give $C(0) = 1$ og $C(n) = 0$ for $n > 0$. En såkaldt delta funktion. En ventetid vil altid følges ad med sig selv men vil ikke påvirke de efterfølgende ventetider. Hvis quakes er overtalt, vil der være en positiv korrelation for $n > 0$. En lille ventetid vil have en tendens til at blive efterfulgt af andre små ventetider.

På fig. 18 ses to plots af denne korrelationsfunktion. Data er taget fra kørslerne med $\frac{t_{obs}}{\delta t} = 10^4$. Som forventet observeres en positiv korrelation mellem ventetiderne. Små ventetider vil altså have en tendens til at følges ad hvilket bekræfter at antallet af quakes er overtalt²². Dette forklarer også hvorfor de små ventetider på fig. 12 ikke følger den forventede eksponentielle fordeling.

²²I princippet kunne korrelationen også skyldes at store ventetider følger efter hinanden,



Figur 18: Korrelationsfunktionen, $C(n) = \langle \ln(\frac{t_k}{t_{k-1}}) \ln(\frac{t_{k+n}}{t_{k+n-1}}) \rangle - \langle \ln(\frac{t_k}{t_{k-1}}) \rangle \langle \ln(\frac{t_{k+n}}{t_{k+n-1}}) \rangle$. Venstre: Lineært plot. Højre: Semilogaritmisk plot. Der observeres en vedvarende korrelation mellem efterfølgende ventetider.

Det er bekræftet at der sker en overtælling af uafhængige quakes.

Det er blevet demonstreret at antallet af quakes følger den ventede log-Poisson fordeling med Poisson parameteren $\alpha \approx 16$.

4.2.3 Raten af quakes

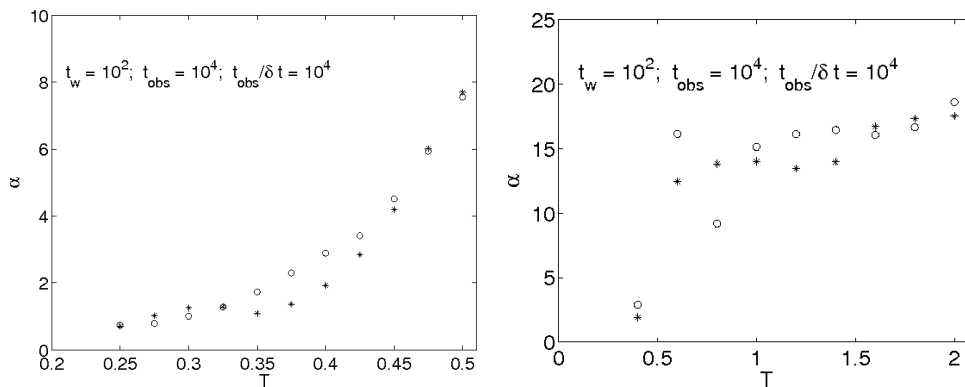
Det vil nu blive beskrevet hvordan raten af quakes, α , afhænger af henholdsvis temperaturen og systemets størrelse. Vi vil se at disse afhængigheder svarer til de teoretiske forudsigelser. Ved at bekræfte afhængighederne har vi derfor også bekræftet de teoretiske antagelser der medførte forudsigelserne.

En ændring i temperaturen forventes ikke at have nogen betydelig effekt på størrelsen af α . Dette skyldes energilandskabets selvtilsvarende fraktal natur. Ved lavere temperaturer vil systemet fluktuere inden for mindre dybe dale hvilket medfører mindre quakes, når der sker et spring imellem disse. Da energilandskabet er selvtilsvarende, bør dette ikke påvirke antallet af quakes i et givet logaritmisk tidsinterval. De betydelige energidale har samme fordeling ved alle temperaturer. Parameteren bør altså ikke udvise nogen betydelig men der er ingen grund til at antage at dette skulle være tilfældet. På fig. 6 og 7 ses flere eksempler på klynger af små ventetider men ingen tilsvarende sammenhæng mellem de store.

temperaturafhængighed inden for det temperaturinterval hvor fraktalstrukturen er en god approksimation.

På fig. 19 ses at denne forventning er opfyldt inden for et afgrænset temperaturinterval. Cirklerne viser α beregnet via ventetidsanalyse og stjernerne det tilsvarende resultat ved brug af $\alpha = \frac{\langle n \rangle}{\log(\frac{t}{t_w})}$. I det sidste tilfælde er α korrigeret for fejltæling som tidligere beskrevet.

Simuleringerne er kørt med t i intervallet $[0.4; 0.2]$. $\frac{t_{obs}}{\delta t}$ er sat til 10^4 .



Figur 19: På de to figurer ses plots af estimerne for α over for temperaturen. Cirklerne er estimeret fra ventetidsanalysen, og stjernerne er det tilsvarende estimat udregnet som $\alpha = \frac{\langle n \rangle}{\log(\frac{t}{t_w})}$. Til højre ses α over for temperaturen med $T \in [0.4; 2.0]$. Det ses at der ikke er nogen betydelig temperaturafhængighed mellem $T = 1$ og $T = 2$. Ved lavere temperaturer varierer α betydeligt med temperaturen. På figuren til venstre ses et tilsvarende plot for lavere værdier af T . Her udviser α en markant temperaturafhængighed.

I begge tilfælde afhænger α ikke synderligt af temperaturen for $T > 1$. Begge estimer har dog en markant outlier ved $T = 0.4$, og ved ventetidsanalysen ses også en mindre drastisk afvigelse ved $T = 0.8$.

Disse afvigelser er i overensstemmelse med de teoretiske forventninger da fraktalstrukturen kun er en approksimation. For at energilandskabet skal være fuldstændig selvtillignende, kræves det at energiændringerne kan antage vilkårlige værdier i et kontinuert interval. Dette er ikke tilfældet i praksis. Den mindste energiændring der kan opnås fås ved at flippe et enkelt spin fra $+1$ til -1 , eller omvendt. Dette vil medføre en energiændring på $|\Delta E| = 2$ for alle de 12 plaketter der indeholder det pågældende spin. Hvis halvdelen

af plaketterne stiger i energi og den anden halvdel falder, vil den totale energiændring være nul. Den mindst mulige energiændring er derfor den hvor 7 plaketter ændrer sig i én retning og 5 i en anden. Dette vil medføre en total energiændring på $|\Delta E| = (7 - 5) \cdot 2 = 4$.

Når temperaturen sænkes vil quakes blive mindre. Ved en tilstrækkeligt lav temperatur vil et stort antal quakes være nede på den minimale størrelse. Selvsimilariteten bryder derved sammen og en yderligere sænkning af temperaturen fører til færre quakes, og ikke blot samme antal af mindre quakes. Det ser altså ud til at selvsimilariteten bryder helt sammen ved temperaturer lavere end omtrent $T \approx 0.4$. Dog er der kun et enkelt punkt til at understøtte denne hypotese. For at få en grundigere test af vores formodning, er der kørt en serie simuleringer ved $T \in [0.25; 0.5]$. Hvis vores hypotese er korrekt, forventes det at antallet af quakes vil vokse med temperaturen i dette område. De to estimater ses til venstre på fig. (19).

Som forventet vokser antallet af quakes med temperaturen for temperaturer under $T = 0.5$. I dette område vil energilandskabet altså ikke længere være selvsimilært.

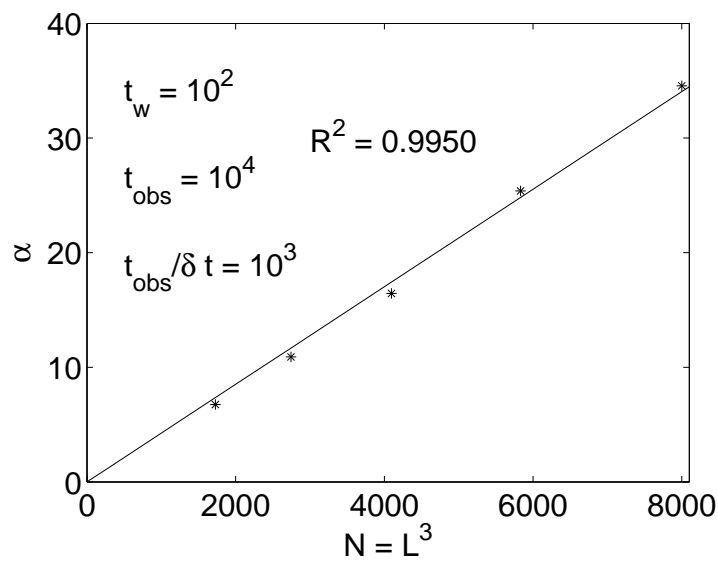
Da ventetidsanalysen synes at være den mest stabile, bliver denne benyttet fremover. De efterfølgende simuleringer er kørt med $\frac{t_{obs}}{\delta t} = 10^3$ da antallet af energimålinger ikke virker til at påvirke ventetidsanalysens estimat betydeligt.

Det er således blevet vist at α ikke udviser nogen betydelig temperaturafhængighed for temperaturer større end $T = 1$. Dette bekræfter at energilandskabet besidder den forventede fraktalstruktur, som beskrevet i kapitel 2.2.3. Fordelingen af betydelige energidale er selvsimilær når temperaturen ændres. Raten af quakes kan derimod forventes at afhænge betydeligt af systemets størrelse.

Vil vil nu se at α afhænger lineært af systemet størrelse, $M = L^3$. Dette skyldes at størrelsen af de spin domæner der forårsager quakes ikke afhænger af det totale antal spins. Spins interagerer kun med andre spins i de samme

plaketter og er ligeglade med hvor stort systemet er. I et dobbelt så stort system, vil der derfor være dobbelt så mange spin domæner der kan forårsage quakes når de pågældende spins flipper i forlængelse af hinanden.

Der er derfor kørt en serie simuleringer, med L i intervallet 12 – 20, og estimatet for α er plottet over for $N = L^3$. På fig. 20 ses at estimatet følger den forventede lineære afhængighed med stor nøjagtighed.



Figur 20: α over for $N = L^3$. α udviser en lineær afhængighed af systemets størrelse, N .

Dette bekræfter at quakes skyldes ændringer i spin domæner hvis størrelse ikke afhænger af systemets.

Fordelingen af quakes opfylder således de teoretiske forventninger på alle områder. Antallet af quakes per tid er log-Poisson fordelt når man tager højde for den ventede fejltælling. At en sådan fejltælling rent faktisk finder sted, bekræftes ved at der er en korrelation mellem de på hinanden efterfølgende ventetider.

Raten af quakes, dvs. log-Poisson fordelings parameter, udviser ydermere den forventede afhængighed af de andre parametre. Denne er uafhængig af temperaturen, inden for et vist temperaturinterval, og afhænger lineært af

systemets størrelse. Dette er i overensstemmelse med at energilandskabet har fraktalstruktur og at quakes forårsages af spin domæner hvis størrelse ikke påvirkes af systemets.

4.3 Lineær respons

Hvis man vil undersøge hvordan et givet system opfører sig, kan dette gøres ved at betragte responsen til et lille eksternt magnetfelt. For et system i ligevægt vil magnetiseringens udvikling være givet ud fra de samme fluktuationer der også sker uden felt. Responsen siger derfor noget om hvordan systemet opfører sig når feltet ikke er til stede. Dette kaldes “Fluktuations-Dissipations” teoremet. Systemets respons er givet ud fra ligevægtsfluktuationerne [27].

Vi vil se at noget lignende gælder for plaket modellen selv om denne aldrig er i ligevægt. Når feltet ikke er for stort, vil dette ikke have nogen betydelig effekt på systemets energiudvikling. Udviklingen af magnetiseringen vil derfor blive styret af de samme fluktuationer der også styrer energiens udvikling.

I plaket modellen, samt i alle de andre glasser, sker alle de betydelige ændringer i energien ved intermittente quakes. Disse finder sted når et eller flere domæner af spins flipper samtidig. Da de eneste betydelige ændringer i konfigurationen sker via sådanne quakes, kan udviklingen af en hvilken som helst målbar størrelse forventes at udvise samme type intermittens som energiens. Alle aspekter af systemets udvikling vil være underlagt de samme intermittente ændringer i konfigurationen. Magnetiseringens udvikling forventes altså at udvise intermittent natur af samme type som energiens. Det vil blive vist at dette rent faktisk er tilfældet.

Vi betragter systemets respons til et eksternt felt der slås til ved tiden $t = t_w$. I det følgende er der benyttet et magnetfelt med størrelsen $H = 0.3$, hvis bidrag til energien er givet ved

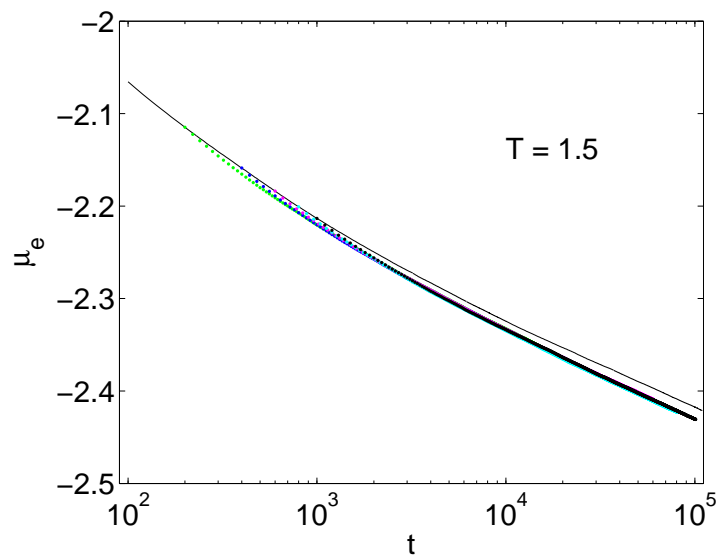
$$E_H = H \cdot \sum_i s_i$$

Den samlede Hamilton funktion bliver derfor

$$H = - \sum_{i=1}^N \prod_{i=0}^3 s_i + H \cdot \sum_i s_i \quad (5)$$

De andre parametre er uændrede.

4.3.1 Feltets effekt på energiudviklingen



Figur 21: Energien som funktion af tiden, med et eksternt felt, $H = 0.3$, der tændes ved forskellige værdier af t_w . Den sorte linie er energien uden felt. De farvede kurver er den tilsvarende energiudvikling når et felt slås til ved $t = t_w$. Når feltet slås til sker der først et lille fald i energien, men derefter påvirkes energiens udvikling ikke synderligt af feltet.

Det forudsættes at magnetfeltet er tilstrækkeligt lille til at dette ikke vil have nogen betydelig indvirkning på systemets energiudvikling. På fig. 21 ses at denne forudsætning er korrekt. Når feltet slås til, sker der først et lille fald i energien, men derefter påvirkes denne ikke synderligt af feltets tilstedeværelse. Det kan altså antages at feltet ikke ændrer naturen af systemets udvikling. De samme intermittente quakes vil styre alle de betydelig ændringer i systemets konfiguration.

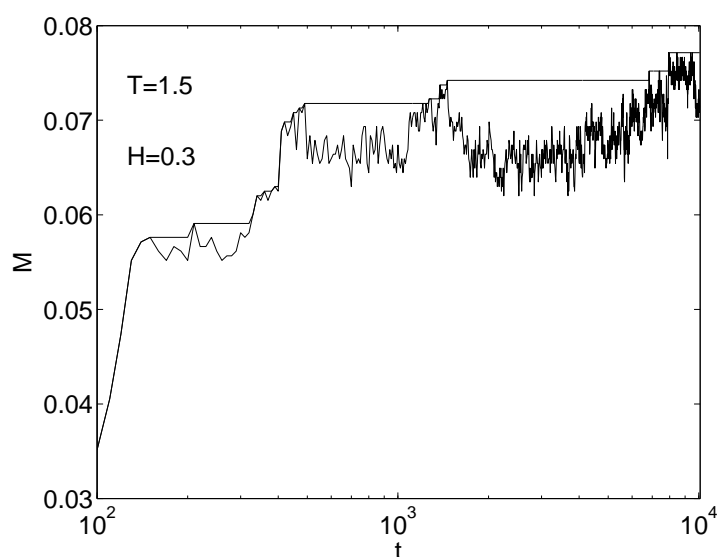
Da fordelingen af quakes kun afhænger af fordelingen af rekorder i energifluktuationerne, vil denne ikke påvirkes af et lille felt. Blot vil quakes nu være mere tilbøjelige til at få systemet til at springe ind i en energidal med en højere magnetisering. Dette skyldes at magnetfeltet ændrer systemets energi, som det ses i ligning (5), og dermed forskyder energibarrierne. Når systemet befinder sig i en metastabil dal, vil det skulle overskride en mindre barriere for at komme ind i en ny metastabil dal hvor magnetiseringen er større. For at komme ind i en dal hvor magnetiseringen er mindre skal systemet derimod over en større barriere.

4.3.2 Magnetiseringens udvikling

Det forventes at magnetiseringen vil stige gradvist med en intermitterent udvikling svarende til energiens. Hvis energiens og magnetiseringens udvikling er styret af de samme quakes i systemet, vil der være en stærk korrelation mellem intermittens i energien og tilsvarende intermittente ændringer i magnetiseringen. En sådan korrelation er allerede blevet observeret for Edwards-Anderson spin glasset [17]. Vi vil nu se at en lignende korrelation kan observeres for plaket modellen.

Til at starte med plottes magnetiseringen som funktion af tiden for at se hvorvidt dennes udvikling udviser samme intermittente natur som energiens. Resultatet ses på fig. 22. Linien viser den tilsvarende værdi for BSF magnetiseringen, som her giver den højeste værdi der er observeret indtil videre.

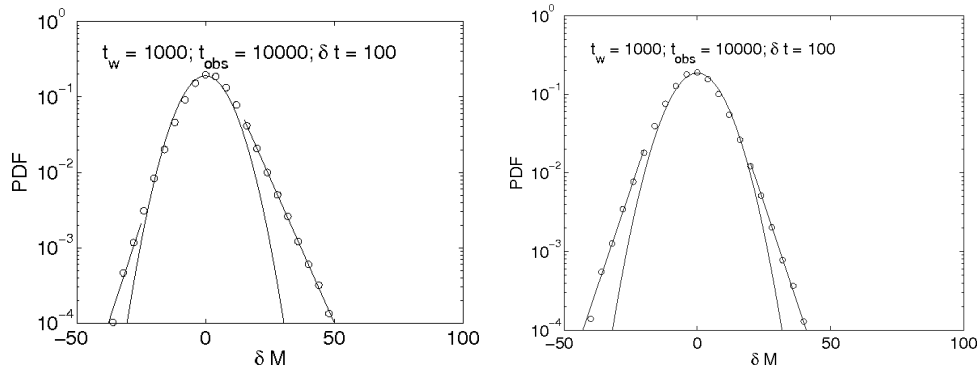
På figuren ses at magnetiseringen først stiger voldsomt og derefter skifter til en langsommere udvikling hvor der sker store spring adskilt af nogenlunde stabile perioder. Dog adskiller magnetiseringens udvikling sig fra den tilsvarende for energien ved at springene her sker i begge retninger. Der er en overordnet tendens mod højere magnetisering, men BSF kurven giver ikke længere noget nøjagtigt billede af udviklingen da spring i nedadgående retning ikke bliver registreret. Vi kan derfor ikke identificere et quake i systemet med en ændring i BSF magnetiseringen.



Figur 22: Magnetiseringen over for tiden. Linie: BSF magnetisering. Magnetiseringens udvikling udviser også intermittens, men springene går her i begge retninger. Ændringer i BSF signalet kan derfor ikke her bruges som estimater for tilstedeværelsen af quakes.

Det forventes at intermittens i magnetiseringen er forårsaget af de samme irreversible ændringer i systemets konfiguration som også styrer energiens udvikling. PDF'en for magnetiseringsfluktuationerne forventes altså også at være gaussisk for små fluktuationer med en eksponentiel hale for de store. Da spring i magnetiseringen tilsyneladende sker i begge retninger, forventes det ydermere at PDF'en vil have to haler, en i hver retning, i modsætning til energi PDF'en hvor der kun observeredes én hale.

For energifluktuationerne så vi tidligere at halen kun blev eksponentiel for en relativt stor værdi af t_w . For at få en pæn PDF for magnetiseringen er der derfor kørt en simulering med $t_w = 10^3$ og $\delta t = 10^2$. Dataene samples fra i alt 2000 uafhængige kørsler med samme startbetingelser. PDF'en for disse simuleringer ses til venstre på fig. (23). Den centrale del er fittet til en gaussisk funktion, og de to intermittente haler er fittet til eksponentialfunktioner. Som forventet observeres tydelige haler i begge sider, dog med en mere markant hale i den positive side. Der sker altså intermittente spring i begge retninger,



Figur 23: PDF'er for fluktuationer i magnetiseringen. Til venstre ses en PDF for fluktuationerne efter at et eksternt felt, $H = 0.3$, er blevet slået til ved $t = t_w$. Til højre ses en tilsvarende PDF uden ydre felt. I begge tilfælde ses det at PDF'en, lige som det var tilfældet for energien, består af en central gaussisk del med eksponentielle haler. Blot er der her intermittente haler i begge retninger. Uden felt er halerne symmetriske og der sker derfor ingen netto ændring i magnetiseringen.

men der sker i gennemsnit større spring i den positive retning. Dette passer med hvad vi observerede på grafen hvor magnetiseringen blev vist over for tiden.

Til sammenligning ses til højre på fig. 23 en tilsvarende PDF for en serie simuleringer uden noget ydre felt. Det ses at PDF'en stadig har to intermittente haler men at disse nu er lige store. Der sker altså stadig intermittente ændringer i magnetiseringen, men disse medfører i gennemsnit ingen ændringer i den totale magnetisering.

Dette er en interessant kontrast til hvad der observeres i ligevægtssystemer. I et system i ligevægt vil fluktuationerne være normalfordelt omkring nul [27]. Påføres et ydre felt vil effekten være at flytte normalfordelingens gennemsnit så der sker flere fluktuationer i feltets retning. For plaket modellen ses det i stedet at den gaussiske del af PDF'en næsten ikke påvirkes af feltet. I stedet medfører feltet at de intermittente haler forskydes, så der sker flere intermittente ændringer i feltets retning.

Dette resultat giver stærk evidens for hypotesen om at udviklingen af magnetiseringen sker i forbindelse med spring mellem meta-stabile dale. Når syste-

met hænger fast i en sådan dal, og fluktuationerne derfor ligner de gaussiske fluktuationer for et system i ligevægt, kan der ikke ske betydelige ændringer i konfigurationen. Feltet fører derfor ikke til øget magnetisering. Når systemet derefter springer ud af dalen, vil det være mere tilbøjeligt til at “rulle” ned i en af de nærliggende dale i energilandskabet hvor magnetiseringen er større. Dette ses ved at intermittensen i den positive retning øges på bekostning af den tilsvarende negative.

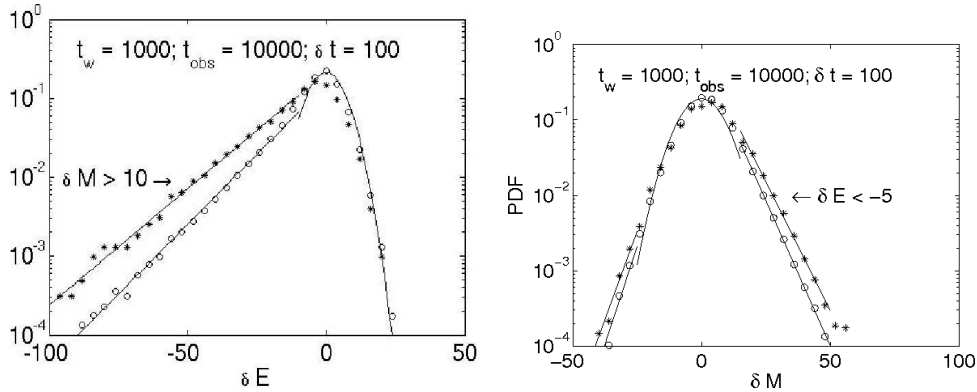
4.3.3 Korrelation mellem intermittens i energien og magnetiseringen

Da det formodes at de intermittente ændringer i energien og magnetiseringen begge styres af de samme begivenheder, bør der være en stærk korrelation mellem disse. Store ændringer i energien og magnetiseringen forventes at følges ad. For at vise at dette vitterligt er tilfældet, er der til venstre på fig. 24 plottet en betinget PDF for de fluktuationer i magnetiseringen der sker samtidig med, eller umiddelbart efter, en “stor” fluktuation i magnetiseringen med $|\Delta M| > 10$.²³ Til sammenligning er den ubetingede PDF medtaget. Her ses det tydeligt at sandsynligheden for at observere en stor fluktuation i energien stiger kraftigt når der lige er sket en stor ændring i magnetiseringen. Den betingede hale er betydeligt mere markant.

At korrelationen går begge veje ses til højre på fig. 24. Her er plottet en tilsvarende betinget PDF for de fluktuationer i magnetiseringen der sker samtidig med, eller umiddelbart efter, en fluktuation i energien med $\Delta E < -5$. Her ses det igen at den intermittente hale bliver mere markant på den betingede PDF.

Vi har nu stærk evidens for at de samme irreversible quakes i systemet styrer udviklingen af både energien og magnetiseringen. Disse quakes vil ske når et eller flere domæner af spins ændrer værdi og kan forventes at styre udviklingen af alle målelige størrelser.

²³Her begyndte de intermittente haler i magnetiserings PDF'en.

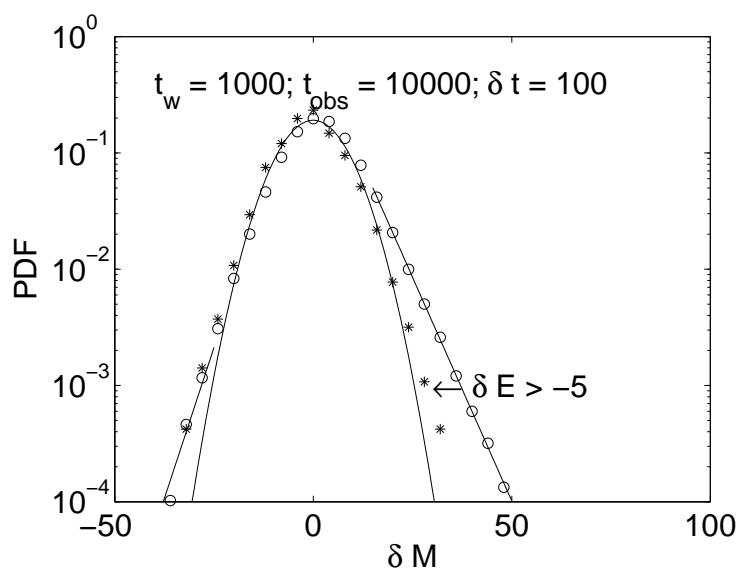


Figur 24: Til venstre ses en betinget og en ubetinget PDF for fluktuationerne i energien. Cirklerne er den ubetingede PDF. Stjernerne er den tilsvarende PDF givet at der lige er sket en stor ændring i magnetiseringen med $|\Delta M| > 10$. Det ses at den intermittente hale er højere for den betingede PDF. Sandsynligheden for at observere et spring i energien er altså større når der lige er observeret et spring i magnetiseringen. Til højre ses tilsvarende PDF'er for fluktuationerne i magnetiseringen. Cirklerne er her en betinget PDF for fluktuationer i umiddelbar forlængelse af energifluktuationer med $\Delta E < -5$. Igen ses det at den intermittente hale er højere for den betingede PDF. Spring i magnetiseringen og spring i energien vil altså følges ad.

For at give et endnu stærkere bevis for denne påstand vises nu, på fig. 25, en betinget PDF for magnetiseringsfluktuationerne i umiddelbar forlængelse af energifluktuationer med $\Delta E > -5$. I dette område vil energi PDF'en være gaussisk uden synlig intermittens. Hvis de samme konfigurationsændringer står bag alle de intermittente spring, bør magnetiserings PDF'en derfor også blive approksimativt gaussisk. Det ses tydeligt på grafen at dette rent faktisk er tilfældet. Det kan altså konkluderes at quakes i både energien og magnetiseringen skyldes de samme begivenheder.

Det er nu blevet vist at de intermittente spring i energien og magnetiseringen følges ad. Disse kan derfor ventes at være forårsaget af de samme intermittente quakes i systemets konfiguration. Responsen til feltet vil derfor også afhænge af fordelingen af disse quakes.

En revideret udgave af Fluktuations-Dissipations teoremet gælder i det glasdynamiske tilfælde. For et ligevægtssystem vil responsen til et lille felt



Figur 25: Cirkler: PDF for magnetiseringsfluktuationerne. Stjerner: Betinget PDF givet $\Delta E > -5$. På den betingede PDF er de intermittente haler næsten helt forsvundet. Der kan altså ikke observeres nogen quakes i magnetiseringen med mindre der sideløbende er observeret et quake i energien.

være givet ud fra ligevægtsfluktuationerne. For et glas har vi i stedet set at responsen kun er styret af de intermittente quakes. Tilstedeværelsen af feltet påvirker kun de intermittente haler på PDF'en. De gaussiske "ligevægtsfluktuationer" der finder sted inden for en metastabil dal har ingen betydelig indflydelse på responsen.

4.3.4 t_w skalering af magnetiseringens udvikling

For et system i ligevægt vil responsen til et ydre felt afhænge af den tid, t_{obs} , der er gået siden feltet blev slået til. Da et glas aldrig er ligevægt, vil dets egenskaber afhænge af dets alder. Responsen vil derfor ikke kun afhænge af t_{obs} men også af systemets alder, t_w .

Vi så på fig. 21 at tilstedeværelsen af feltet ikke har nogen betydelig effekt på energiens udvikling. Antallet af quakes kan altså ventes at følge den samme

log-Poisson fordeling som givet i ligning 1. Det gennemsnitlige antal quakes i et logaritmisk tidsinterval, $\log\left(\frac{t_{slut}}{t_{start}}\right)$, vil derfor være konstant. Da magnetiseringens udvikling er styret af disse quakes i systemet, kan vi slutte at denne vil afhænge af $\frac{t}{t_w}$, og ikke kun af t .

Hvis responsen afhænger af $\frac{t}{t_w}$, har vi derfor yderligere evidens for at magnetiseringens og energiens udvikling er styret af de samme quakes. Ydermere vil vi også have vist at tilstedeværelsen af feltet ikke har ændret fordelingen af quakes.

Det er allerede blevet vist at dette er tilfældet for Edwards-Anderson spin glasset [17]. Her er det også blevet vist at responsen kan fittes til en sum af en logaritme og en potenslov med en lille t_w afhængig korrektionsfaktor

$$\mu_{ZFCM} = b_0(t_w) + a_m \ln\left(\frac{t}{t_w}\right) + b_m \left(\frac{t}{t_w}\right)^{\lambda_m} \quad (6)$$

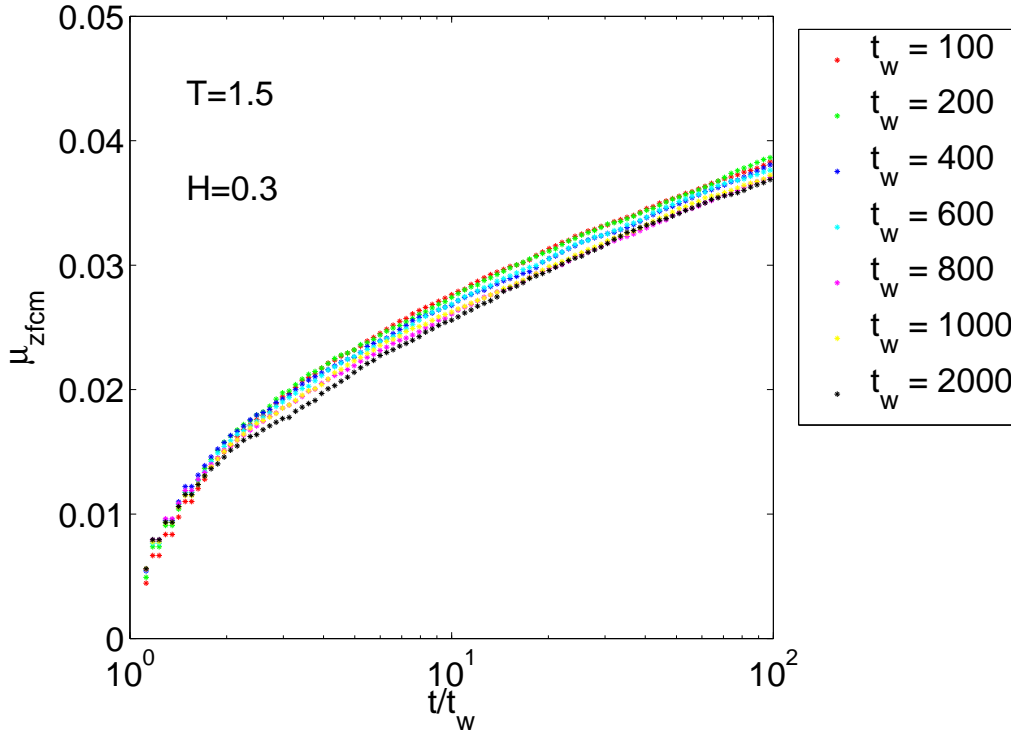
Potensloven giver en hurtig transient respons i begyndelsen hvorefter aging dominerer, og systemet begynder at følge en logaritmisk udvikling. Ifølge teorien burde responsen kun afhænge af $\frac{t}{t_w}$, men dette er ikke helt i overensstemmelse med resultaterne. I praksis er det nødvendigt at addere en lille lineær korrektionsfaktor, $b_0(t_w)$, for at fitte funktionen til dataene.

Da responsen er underlagt de intermittente quakes, bør denne kun afhænge af disses fordeling. Fordelingen af quakes afhænger ikke af systemets mikroskopiske struktur. Så længe energilandskabet har samme hierarkiske opbygning vil fordelingen af quakes være den samme. Ligning (6) bør derfor også kunne benyttes på plaket modellen.

For at vise dette er der blevet kørt en serie simuleringer med forskellige værdier af t_w og T . Den gennemsnitlige magnetisering over 1000 kørsler er herefter plottet som funktion af $\frac{t}{t_w}$. Er vores hypotese korrekt bør der ikke forefindes betydelige forskelle mellem kurverne, ved en given temperatur.

På fig. 26 ses resultatet for $T = 1.5$.

Det ses at data skalerer nogenlunde, men at udviklingen ved højere t_w går



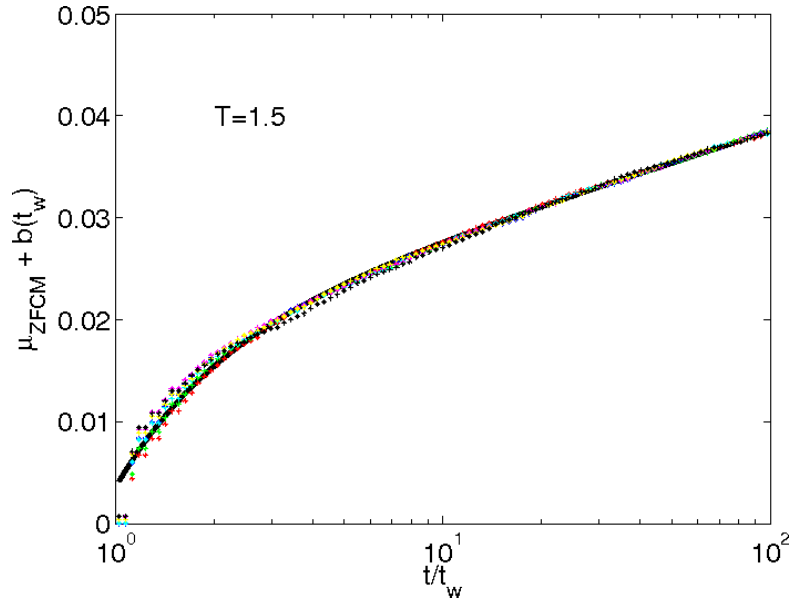
Figur 26: μ_{ZFCM} over for $\frac{t}{t_w}$. Graferne skalerer næsten, men udviklingens hastighed aftager stadig lidt hurtigere med tiden end antaget.

lidt langsommere end teoretisk forventet. Hvis plaket modellen opfører sig som Edwards-Anderson modellen, bør denne afvigelse kunne fjernes ved at addere korrektionsfaktoren $b_0(t_w)$.

På fig. 27 ses resultaterne for $T = 1.5$ med korrektionsfaktoren adderet til magnetiseringen. Det ses at dataene nu skalerer næsten fuldstændigt. De eneste betydelige afvigelser ses for den transiente del af responsen. Den logaritmiske del af responsfunktionerne har samme form. Dette er ikke uventet da $\frac{t}{t_w}$ skaling netop er karakteristisk for en logaritmisk udvikling.

På fig. 28 ses de tilsvarende resultater for alle de benyttede værdier af T . Dataene skalerer fint ved alle temperaturerne.

Den sidste graf på figuren viser hvordan parametrene, a_m, b_m, λ_m , afhænger



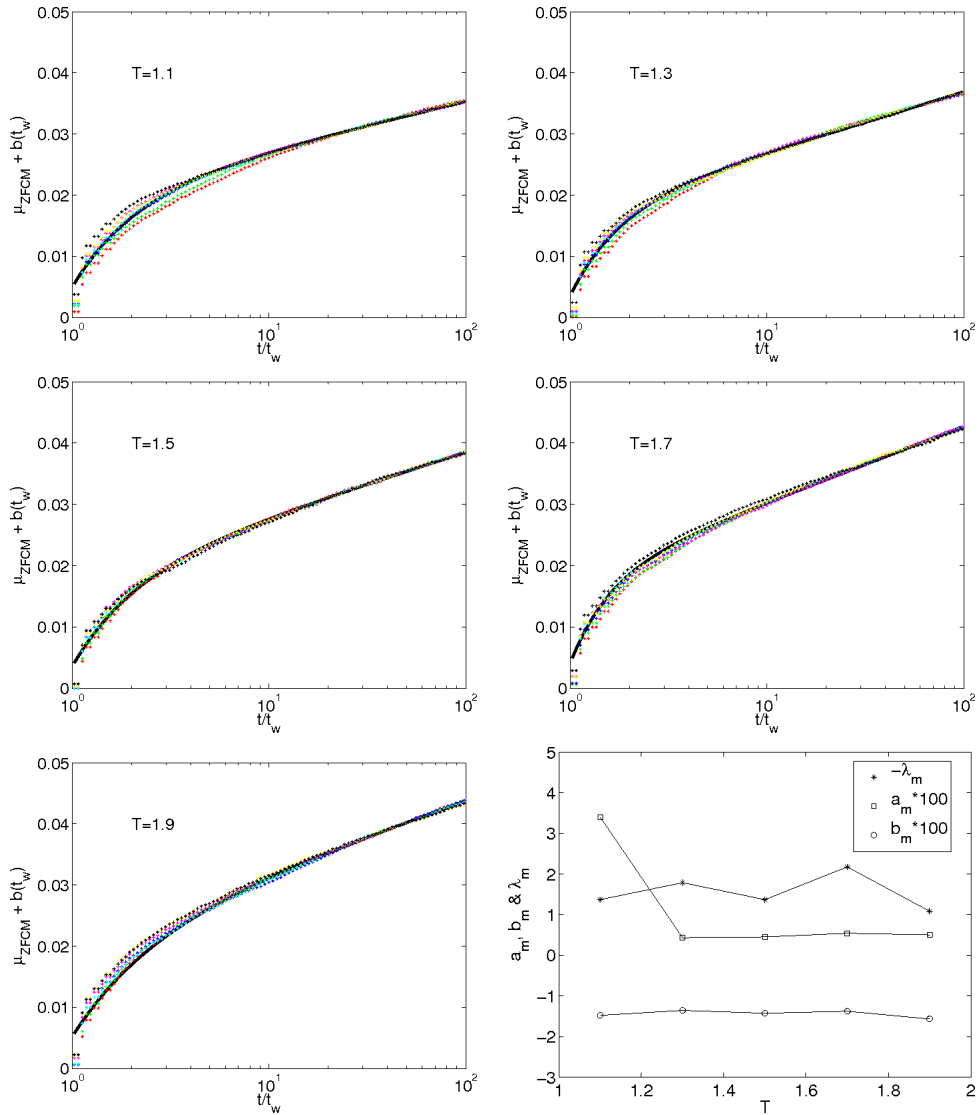
Figur 27: $\mu_{ZFCM} + b_0(t_w)$ over for $\frac{t}{t_w}$. Den sorte linie er et fit til ligning (6). Når den lineære korrektionsfaktor adderes, skalerer data næsten fuldstændigt.

af temperaturen. Det ses at både a_m og b_m er nogenlunde uafhængige af T undtagen for $T = 1.1$ hvor a_m afviger betydeligt. At a_m er nogenlunde konstant er fint i overensstemmelse med teorien da antallet af quakes ikke afhænger af temperaturen, og disse forventes at styre systemets respons. At denne så afviger ved meget lave temperaturer er i overensstemmelse med de tidligere resultater²⁴ hvor det blev vist at temperaturafhængigheden kun holder ved temperaturer over et vist minimum. Ved temperaturer omkring $T = 1$ begynder der at opstå afvigelser.

For Edwards-Anderson spin glasset observeredes der for λ_m en lineær afhængighed af temperaturen [17]. Noget lignende kan ikke ses i dette tilfælde. Parameteren λ_m synes ikke at have nogen systematisk afhængighed af T .

Vi har nu set at responsen til feltet er givet ved $\frac{t}{t_w}$ og ikke kun ved t . Dette er som forventet hvis responsen er styret af de samme intermitterende quakes der også styrer energiens udvikling. Raten af disse quakes er stationær over

²⁴Se fig. 19.



Figur 28: $\mu_{ZFCM} + b_0(t_w)$ over for $\frac{t}{t_w}$ for forskellige temperaturer. Data skalerer fint i alle tilfælde. De eneste betydelige afvigelser ses i responsens transiente del. Den sidste figur viser hvordan koefficienterne i ligning (6) afhænger af temperaturen. Det ses at den logaritmiske koefficient, a_m , er næsten konstant bortset fra en enkelt outlier ved $T = 1.1$.

logaritmisk tid, og antallet af quakes vil derfor være konstant i et givent logaritmisk tidsinterval, $\frac{t_{slut}}{t_{start}}$. Resultaterne viser derfor også at fordelingen af quakes ikke påvirkes betydeligt af feltets tilstedeværelse.

4.4 Temperaturskridt

Glasser udviser særegen opførsel når der foretages et lille temperaturskridt under eksperimentet/kørslen [16, 18]. Et negativt temperaturskridt får systemet til at virke ældre, mens et positivt temperaturskridt nulstiller udviklingen. Disse effekter benævnes henholdsvis Hukommelse og Rejuvenering og opstår som konsekvens af energilandskabets hierarkiske struktur.

Lineær respons kan benyttes til at studere effekten af sådanne temperaturskridt. Ved at betragte hvordan responsen ændrer sig når der foretages et temperaturskridt, kan man studere naturen af hukommelses- og rejuveneringseffekterne.

Forskningen har indtil videre beskæftiget sig med temperaturskridt hvor temperaturen først sænkes for derefter at hæves igen eller omvendt [16]. I modsætning hertil har jeg undersøgt plaket modellens opførsel når der foretages et temperaturskridt, og kørslen derefter fortsættes isotermt ved denne temperatur.

I det følgende betragtes responsen til et felt på $H = 0.3$ der tændes ved $t = t_w$. Samtidig med at feltet slås til foretages der et temperaturskridt med størrelsen ΔT , og responsens udvikling betragtes.

4.4.1 Negative temperaturskridt

Når der foretages temperaturskridt med $\Delta T < 0$, forventes det at systemet vil virke ældre. Dette medfører at responsen bør udvikle sig identisk med den tilsvarende respons for en isotherm kørsel med en højere værdi af t_w . Det blev vist i kapitel 4.3.4 at responsen ved en given temperatur udelukkende afhænger af $\frac{t}{t_w}$. Det forventes derfor at responsfunktion, efter temperaturskridtet,

vil falde sammen med den isoterme, hvis vi plottes den som funktion af $\frac{t}{t_{w,eff}}$, med $t_{w,eff} > t_w$. Resultatet af temperaturskridtet vil altså være at erstatte t_w med et højere effektiv t_w , kaldet $t_{w,eff}$.

På fig. 29 ses resultaterne for fire temperaturskridt²⁵. Den øverste røde graf er den isoterme kørsel, plottet over for $\frac{t}{t_w} - 1$. Den grønne graf er responsen efter temperaturskridtet, også plottet over for $\frac{t}{t_w} - 1$. Den blå graf er den samme respons, nu plottet over for $\frac{t}{t_{w,eff}} - 1$. Den sorte linie er et fit af en logaritmisk funktion til sidste halvdel af den isoterme kørsel. $t_{w,eff}$ er fundet ved at minimere afstanden fra temperaturskridtresponsen til den logaritmiske funktion, når denne plottes over for $\frac{t}{t_{w,eff}} - 1$.

Det ses at dataene skalerer næsten perfekt når t_w erstattes med et højere effektivt $t_{w,eff}$. Dette bekræfter at temperaturskridtets effekt har været at få systemet til at virke ældre.

Ydermere kan det observeres at temperaturskridtets effekt virker til at stige med både $|\Delta T|$ og t_w .

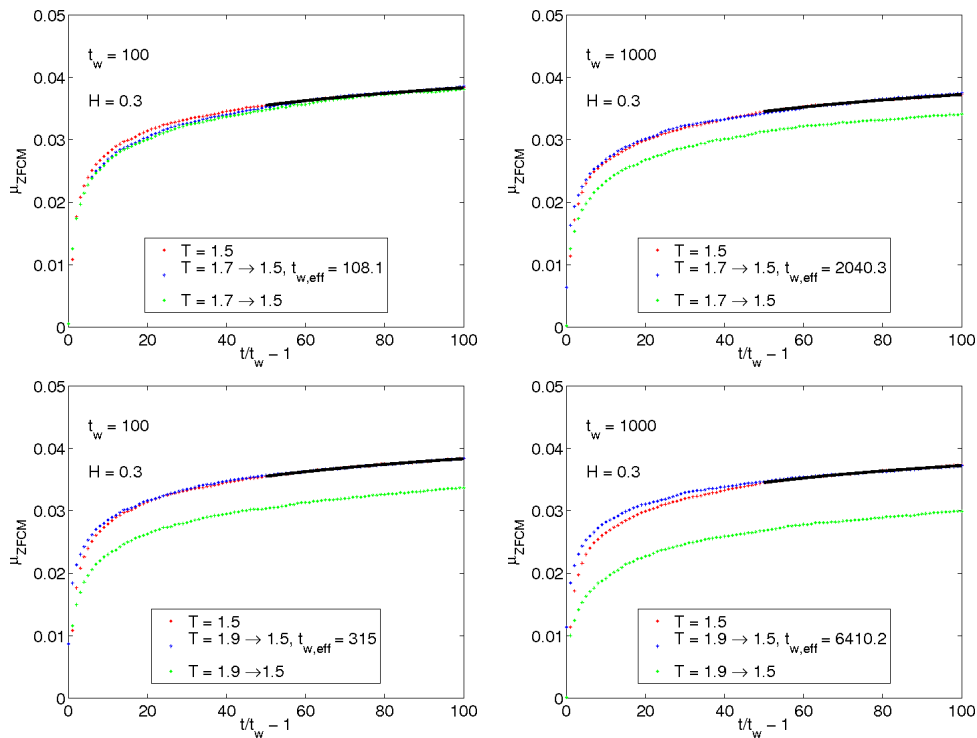
At $t_{w,eff}$ afhænger af både t_w og ΔT er i overensstemmelse med resultater fået fra studier af Edwards-Anderson spin glasset [18]. Her blev det fundet at den effektive t_w følger en potenslov således at

$$t_{w,eff} \propto t_w^{\frac{a(T')}{a(T)}}, \quad T' < T \quad (7)$$

med $a(T) = (\frac{1}{T} - \frac{1}{\epsilon_0})$. Størrelsen $a(T)$ kaldes den reducerede inverse temperatur.

For at undersøge om disse forudsigelser passer for plaket modellen, er der kørt en serie af simuleringer med forskellige temperaturskridt og forskellige værdier af t_w . I alle simuleringerne sættes temperaturen til $T = 1.5$ ved $t = t_w$. Temperaturen før t_w sættes til henholdsvis 1.9, 1.8, 1.7 og

²⁵Det bemærkes at dataene her er plottet på en lineær skala over for $\frac{t_{obs}}{t_w} = \frac{t-t_w}{t_w} = \frac{t}{t_w} - 1$. Dette er gjort så den logaritmiske del af responsen, der ofte kun strækker sig over godt halvdel af tiderne, ses tydeligere. Når t_w erstattes med $t_{w,eff}$ bliver x -aksen i stedet $\frac{t-t_{w,eff}}{t_{w,eff}} = \frac{t}{t_{w,eff}} - 1$



Figur 29: De fire figurer viser, for forskellige værdier af t_w og ΔT , temperaturskridt grafer skaleret ved at udskifte t_w med $t_{w,eff}$. Den røde graf viser responsen for en isoterm simulering, med $T = 1.5$, plottet over for $\frac{t}{t_w} - 1$. Den grønne graf viser responsen, også plottet over for $\frac{t}{t_w} - 1$, når et negativt temperaturskridt foretages ved $t = t_w$, samtidig med at feltet slås til. Den blå graf viser den tilsvarende respons plottet over for $\frac{t}{t_{w,eff}} - 1$ med $t_{w,eff} > t_w$. Den sorte linie er et fit til en logaritmisk funktion. Det ses at responserne skalerer fint når t_w erstattes med et højere effektivt $t_{w,eff}$. Dette bekræfter at temperaturskridtets effekt har været at få systemet til at virke ældre.

1.6. For hver af disse fire temperaturskridt køres der simuleringer med $t_w = 100, 200, 400, 800, 1600, 3200, 6400$ og 12800 . Kørslerne observeres over en tid, t_{obs} , på tre dekader fra t_w . Det har været nødvendigt at måle tiden tre dekader frem, i stedet for de sædvanlige to, for at få plads til at skalere responsen. Når t_w erstattes med et større $t_{w,eff}$ vil kurven blive forskudt mod venstre, og det er derfor nødvendigt med ekstra data for at kunne sammenligne denne med en isotherm kørsel.

At foretage disse simuleringer har kun været muligt ved at benytte “Horseshoe” cluster computeren på SDU [32].

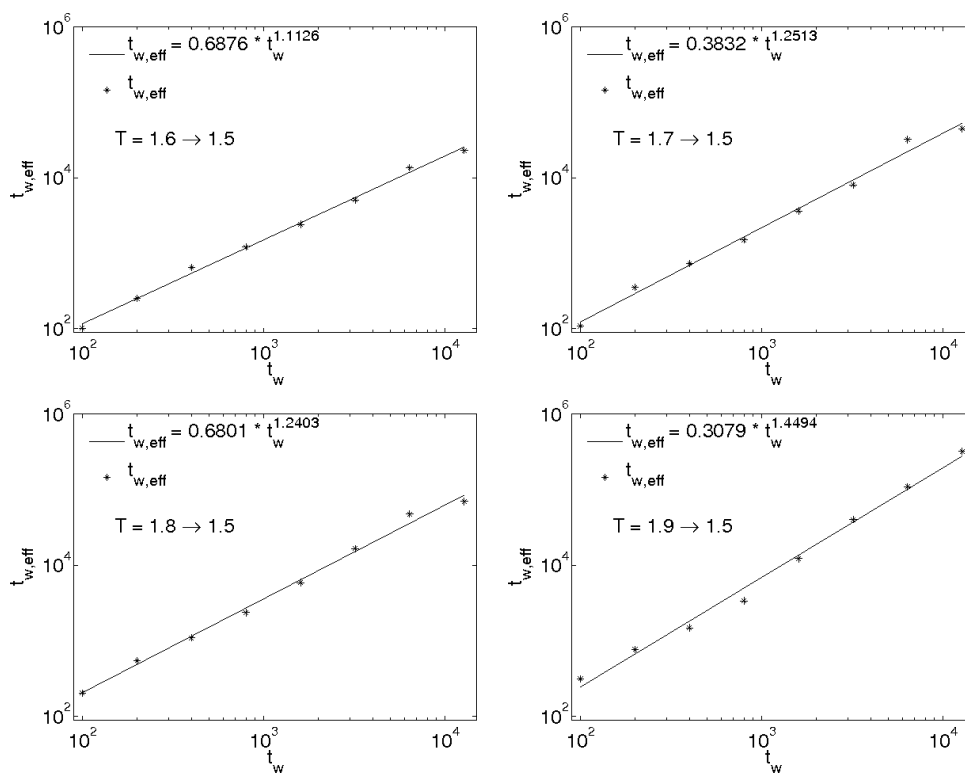
På fig. 30 ses dobbeltlogaritmiske plots af $t_{w,eff}$ over for t_w for de fire temperaturskridt. Dataene fra hvert temperaturskridt er fittet til en potenslov, $a \cdot t_w^b$. Det ses at dataene følger potenslove med stor nøjagtighed. Dog ses der periodiske afvigelser fra linien.

Det er nu blevet demonstreret at $t_{w,eff}$ følger den samme potenslov som er påvist for Edwards-Anderson modellen. Ifølge teorien bør potensen afhænge af start og slut temperaturen, som tidligere beskrevet. Denne skal altså kunne skrives som

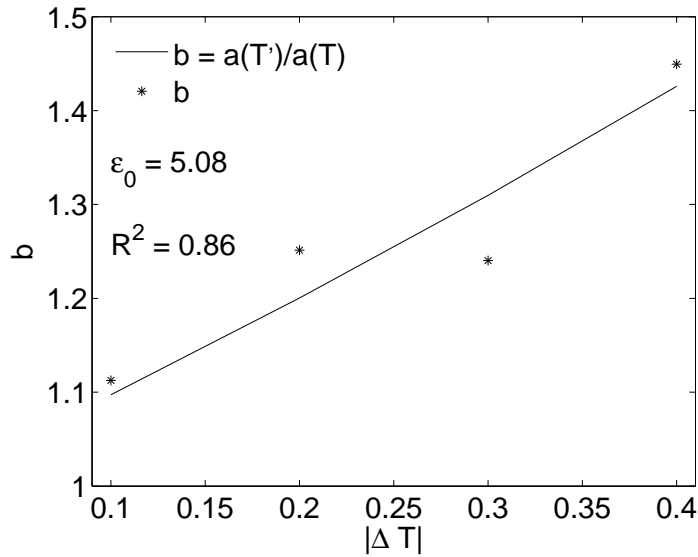
$$b = \frac{\left(\frac{1}{1.5} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)}{\left(\frac{1}{T_{start}} - \frac{1}{\epsilon_0}\right)} \quad (8)$$

På fig. 31 ses de forskellige værdier for b over for det tilsvarende $|\Delta T|$. Dataene er fittet til ligning (8) hvilket giver $\epsilon_0 = 5.08$. Det ses at dette giver et nogenlunde fit til de numeriske data. Det er dog svært at konkludere noget med sikkerhed ud fra kun fire punkter. Beklageligvis er det ikke trivielt at producere flere punkter da de foregående kørsler allerede har krævet mange computertimer på Horseshoe clusteret.

I stedet for at foretage flere kørsler med samme sluttemperatur, er det blevet valgt at køre en ny serie af simuleringer med samme værdier af t_w men nye temperaturskridt. På den måde vil vi have udforsket et større udsnit af parameterrummet. I det foregående benyttedes en konstant sluttemperatur



Figur 30: Figurene viser $t_{w,eff}$ som funktion af t_w for fire forskellige temperaturskridt. Linierne viser fits til en potenslov, at_w^b . Resultaterne følger fint en sådan potenslov dog med enkelte afvigelser.



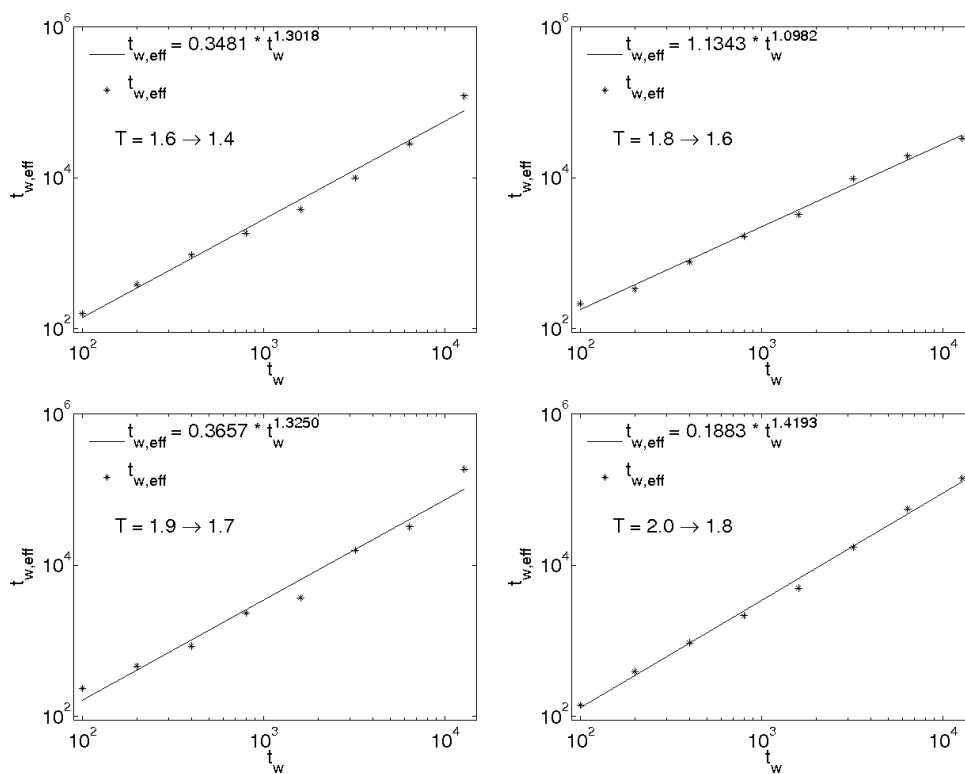
Figur 31: Figuren viser de fire potenser, b , plottet over for $|\Delta T|$. Den sorte linie er et fit til ligning (8), med $\epsilon_0 = 5.08$. Potenserne er i nogenlunde overensstemmelse med det analytiske udtryk.

med en varierende starttemperatur. I den nye serie vælges i stedet et konstant $|\Delta T|$ med varierende start og sluttemperaturer. $|\Delta T| = 0.2$ er valgt da denne virkede til at give de bedste data i de foregående simuleringer. Meget lave værdier af $|\Delta T|$ medfører ikke betydelige ændringer. Alt for store skridt vil give for meget støj i dataene. Disse simuleringer er også blevet kørt på Horseshoe clusteret.

Resultaterne ses på fig. (32). Dataene følger igen den forventede potenslov, men de periodiske afvigelser er stadig til stede.

Forsøg på at fitte b til ligning (8) er dog slået fejl i dette tilfælde. Det kan muligvis skyldes at parameteren ϵ_0 ikke er konstant men kan afhænge af temperaturerne. Når både start og sluttemperaturen varieres er det derfor ikke muligt at finde nogen fælles værdi for ϵ_0 .

Det kan altså konkluderes at dataene følger den teoretisk forudsagte potenslov, $t_{w,eff} \propto t_w^b$, men at potensen b ikke umiddelbart kan udtrykkes via den



Figur 32: Figurene viser $t_{w,eff}$ som funktion af t_w for fire temperaturskridt, med $\Delta T = -0.2$. Linierne er fits til en potenslov. Som på fig. 31 passer fittet fint med resultaterne, dog med enkelte afvigelser.

reducerede inverse temperatur.

4.4.2 Positive temperaturskridt

Effekten af et positivt temperaturskridt forventes at være mere simpel end den tilsvarende effekt af et negativt skridt. For et tilstrækkeligt stort temperaturskridt, forventes det at systemet bliver rejuveneret, dvs. at $t_{w,eff}$ bliver “nulstillet“ til det t_w hvor aging startede. Da alle de dale der blev udforsket ved den lavere temperatur nu er ubetydelige, vil det virke som om systemet lige er startet med aging og stadig hænger fast i den første energidal. For mindre temperaturskridt forventes det at systemet vil komme til at virke yngre uden helt at blive nulstillet [18, 16].

At erstatte t_w med $t_{w,eff}$ er en anelse mere kompliceret i dette tilfælde. Da $t_{w,eff}$ nu er betydeligt mindre end det rigtige t_w , kan vi ikke bare bruge $\frac{t}{t_{w,eff}} - 1$ som x -akse. Da magnetfeltet først bliver slået til ved $t = t_w$, ville responsen i så fald ikke starte ved $x = 0$ som ønsket. Det er derfor nødvendigt først at skalere tiden ved at sætte $t = t - (t_w - t_{w,eff})$ for alle t så responsen starter ved $t = t_{w,eff}$. Derefter kan dataene plottes over for $\frac{t}{t_{w,eff}} - 1$ og sammenlignes med tilsvarende data for isoterme kørsler.

På fig. 33 og fig. 34 ses skaleringsplots af responsen for disse simuleringer. For den blå graf er t_w erstattet med et mindre $t_{w,eff}$ som beskrevet ovenfor. Den sidste graf viser $t_{w,eff}$ som funktion af ΔT .

Skaleringen er ikke helt perfekt i alle tilfælde. Der observeres visse afvigelser mellem den isoterme respons og den skalerede temperaturskridtrespons. Når man tager i betragtning at $t_{w,eff}$ her afviger fra det rigtige t_w med op til en faktor 50, samt at $\frac{t}{t_w}$ afhængigheden ikke er helt eksakt, er skaleringen dog stadig god. Den forventede lineære korrektionsfaktor er ikke adderet i dette tilfælde.

Det ses at systemet kommer til at virke yngre, og at $t_{w,eff}$ falder med størrelsen af temperaturskridtet. I starten falder $t_{w,eff}$ næsten eksponentielt, men derefter flader kurven ud. En yderlige stigning i ΔT har ikke nogen

betydelig effekt på $t_{w,eff}$. Det virker til at $\Delta T \approx 0.7$ er tilstrækkeligt til at “nulstille” systemet til alderen $t_{w,eff} \approx 150$. Dette er et rimeligt resultat da det tidligere er blevet vist at aging dominerer udviklingen et sted mellem $t = 100$ og $t = 1000$. Systemets alder er derfor blevet sat tilbage til den tid hvor aging startede.

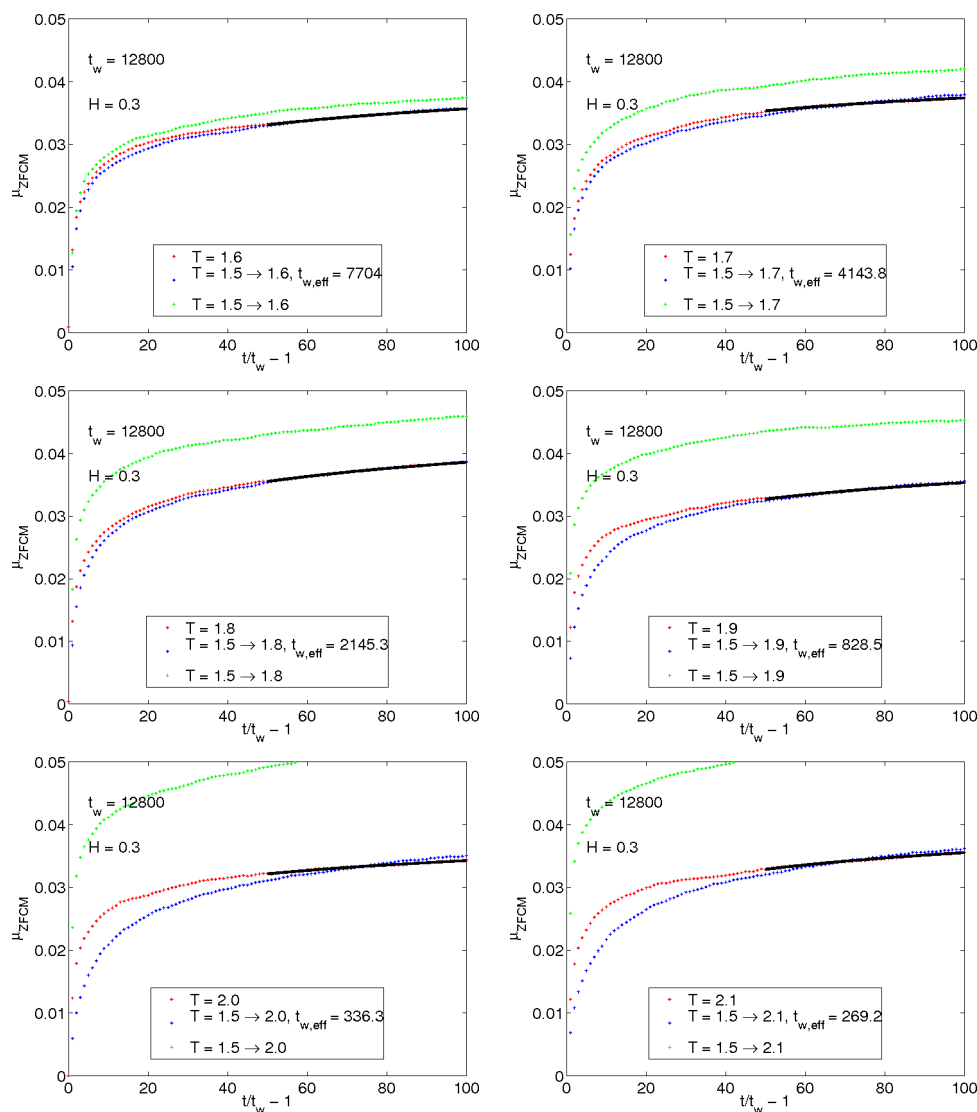
Et mindre temperaturskridt giver, som ventet, kun en partiel rejuvenering.

Effekten af både negative og positive temperaturskridt er nu blevet belyst ved at betragte deres effekt på responsen til et ydre felt. Resultaterne har været i overensstemmelse med de teoretiske forventninger. Et negativt temperaturskridt får systemet til at virke ældre, mens et positivt ditto har den modsatte effekt. Et tilstrækkeligt stort positivt temperaturskridt virker til helt at “nulstille” systemets alder til den tid hvor aging startede.

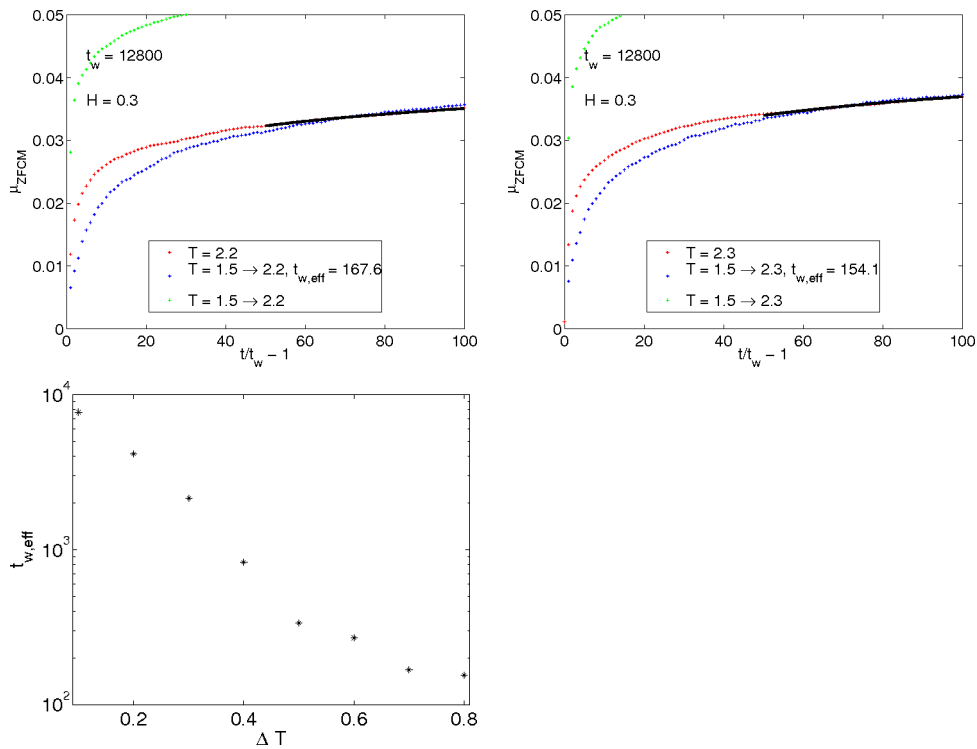
For et negativt temperaturskridt vil effektens størrelse afhænge af både $|\Delta T|$ og t_w . Det effektive $t_{w,eff}$ viser sig at afhænge af t_w som en potenslov, for et givent temperaturskridt. Dette er i overensstemmelse med tidligere resultater fra Edwards-Anderson spin glasset. Dog har det ikke været muligt at fitte potenssens størrelse til en funktion af T_{start} og T_{slut} .

For et positivt temperaturskridt ses det at “foryngelsen” vokser med ΔT til at starte med men derefter virker til at blive konstant. Ved en tilstrækkelig høj værdi af ΔT er systemets alder blevet “nulstillet”, og en yderligere foryngelse er ikke længere mulig.

Resultaterne giver yderligere evidens for at energilandskabet besidder den forventede hierarkiske fraktalstruktur.



Figur 33: Figurerne viser skaleringsplots for seks temperaturskridt med $\Delta T > 0$. Det positive temperaturskridt medfører en rejuvenering af systemet, dvs. får systemet til at virke yngre. Rejuveneringen virker til at afhænge af ΔT for disse relativt små skridt. Der er altså sket en partiel rejuvenering hvor systemet virker yngre uden at blive helt nulstillet.



Figur 34: De to første figurer viser skaleringsplots for to temperaturskridt med $\Delta T = 0.7$ og $\Delta T = 0.8$. $t_{w,eff}$ afhænger ikke længere betydeligt af temperaturskridtet. Det kan konkluderes at der er sket en fuld rejuvenering hvor systemets alder er blevet “nulstillet” til den tid hvor aging begyndte at dominere udviklingen. Den tredje figur viser hvordan $t_{w,eff}$ afhænger af ΔT . Denne bekræfter at $t_{w,eff}$ afhænger af ΔT for små skridt hvorefter kurven flader ud og ΔT afhængigheden tilsyneladende forsvinder.

5 Konklusion

I dette speciale har jeg undersøgt egenskaberne ved en p-spin model for et glas og dennes applikationer for studiet af glasser generelt. Undersøgelserne er foretaget numerisk via ventetidsmetoden, en algoritme der er betydeligt hurtigere end Metropolis algoritmen ved lave temperaturer.

Den intermittente natur af modellens udvikling er blevet bekræftet ved direkte at betragte plots af energien over for tiden. Tidligere undersøgelser af modellens intermittens har kun vist denne indirekte, som haler i en PDF over fluktuationerne [1].

At quakes forårsages af spin domæner der flipper sammen, er yderligere blevet bekræftet ved direkte at betragte de ændringer i systemets konfiguration der sker sideløbende med et quake. Her ses det at quakes sker samtidig med flips af aflange domæner af spins. Disse forventes at ske på grænsen mellem to områder i systemet der favoriserer hver sin grundtilstand.

Den totale mængde spins der på denne måde deltager i quakes viser sig kun at udgøre en lille brøkdel af de totale spins i systemet. Systemets udvikling er altså styret af ganske små ændringer i konfigurationen og ikke, som nogen teoretikere har ment, af omfattende ændringer i hele systemet.

Ydermere er det blevet vist at statistikken af de quakes der styrer systemets udvikling approksimativt følger den forventede log-Poisson fordeling. Mange af afvigelserne fra log-Poisson statistikken kan enten forklares som finite-size effekter eller skyldes overtælling af begivenhederne. I det område hvor ingen af disse to fejlkilder er betydelige, er resultaterne i meget god overensstemmelse med teorien.

At der rent faktisk sker en overtælling af quakes, er blevet bekræftet på to måder, efter at have foretaget en direkte optælling af det gennemsnitlige antal quakes der er fundet sted til en given tid. Før det første observeres at variansen er proportionel med gennemsnittet men afviger med en konstant faktor. Der ud over viser korrelationsfunktionen at der er en lille korrelation

mellem efterfølgende ventetider. Denne overtælling kan der dog korrigeres for og det opnåede estimat for log-Poisson parameteren bliver derefter i fin overensstemmelse med det tilsvarende fra ventetidsanalysen. Dette giver yderligere evidens for at log-Poisson fordelingen er korrekt.

Det er også blevet vist at log-Poisson parameteren, α , er omtrent uafhængig af temperaturen i et vist temperaturinterval. Dette bekræfter at energilandskabet har en approksimativ fraktalstruktur, og at fordelingen af metastabile dale derfor ikke afhænger af temperaturen. Ved tilstrækkeligt lave temperaturer er denne approksimation dog ikke længere brugbar, og log-Poisson parameteren udviser derfor en betydelig temperaturafhængighed.

Parameteren viser sig at afhænge lineært af systemets størrelse. Dette bekræfter hypotesen om at quakes skyldes ændringer af spin domæner hvis størrelse ikke afhænger af systemets. I et dobbelt så stort system vil der derfor være dobbelt så mange domæner der kan flippe og forårsage et quake. Systemets respons til et eksternt magnetfelt er blevet studeret på flere forskellige måder.

Det er blevet vist at intermittente spring i magnetiseringen er stærkt korreleret med tilsvarende quakes for energien og vice versa. Dette bekræfter at både magnetiseringens og energiens udvikling styres af de samme intermittente ændringer i systemets konfiguration. Et eksternt felt vil ikke påvirke fordelingen af disse quakes og vil dermed heller ikke påvirke energiens udvikling, men vil blot få systemet til at foretrække quakes der forøger magnetiseringen. Med andre ord er systemets respons styret af fluktuationerne, lige som i et ligevægtssystem. Blot er responsen i det glasdynamiske tilfælde kun styret af de intermittente fluktuationer.

Ved at betragte responsens tidsudvikling er det blevet vist at denne, til en god approksimation, kun afhænger af $\frac{t}{t_w}$, dog med en lille lineær korrektionsfaktor. Dette giver yderligere evidens for at responsen er styret af de log-Poisson fordelte quakes. Raten af disse vil være stationær i logaritmisk tid og $\frac{t}{t_w}$ er netop den tid der er gået, på en logaritmisk skala, siden feltet

blev slået til.

Tilstedeværelsen af hukommelses- og rejuveneringseffekter er blevet bekræftet ved at foretage temperaturskridt samtidig med at feltet tændes. Et negativt temperaturskridt får, som forventet, systemet til at virke ældre, mens et positivt skridt nulstiller systemets alder. Dette giver yderligere bevis for at energilandskabet besidder den ventede fraktalstruktur.

For de negative temperaturskridt er det blevet vist at den effektive alder, $t_{w,eff}$, følger en potenslov når denne plottes over for den reelle alder, t_w . Dog var det kun i begrænset grad muligt at fitte potensen til det teoretiske udtryk²⁶ fra [18].

Det er altså blevet demonstreret at plaket modellen udviser glasdynamisk opførsel der svarer til den man ser for Edwards-Anderson spin glasset, og som også ses eksperimentelt i konkrete fysiske glasser. Dette er betydningsfuldt da plaket modellen er betydeligt mere simpel end Edwards-Anderson modellen og ikke indeholder noget af dennes strukturelle uorden. Resultaterne kan altså forventes også at gælde for strukturelle glasser der ikke indeholder “quenched disorder” eller blandede interaktioner.

Det kan konkluderes at glasdynamikkens natur ikke afhænger af én specifik struktur, som f.eks. “quenched disorder” og modstridende interaktioner. Glasdynamikken bør være relevant for alle systemer der, på den ene eller den anden måde, har et stort antal metastabile tilstande. Disse kan forventes at opstå som konsekvens af konkurrence/frustration mellem modstridende krav, men denne konkurrence behøver ikke at være indbygget i systemets struktur. Som i plaket modellen kan frustrationen opstå indirekte, f.eks. som konsekvens af et stort antal forskellige grundtilstande. Disse vil medføre konkurrence mellem domæner i systemet der favoriserer hver sin grundtilstand hvilket ses at være tilstrækkeligt til at få systemet til at opføre sig som et glas. Glasdynamikkens resultater kan altså have relevans for en større klasse af systemer end det tidligere er blevet antaget.

²⁶Ligning (8).

Da plaket modellen både er simplere og mere generel end Edwards-Anderson spin glas modellen, kan denne derfor med fordel anvendes til fremtidige studier af glasdynamik.

Litteratur

- [1] P. Sibani, Physical Review E 74(3), 031115 (2006), Aging and intermittency in a p-spin model of a glass.
- [2] P. Sibani and J. Dall, Europhys. Lett., 64 (2003) 8-14, log-Poisson statistics and full aging in glassy system.
- [3] V. Lubchenko og P.G. Wolynes, arXiv:cond-mat/0607349, Theory of Structural glasses and Supercooled Liquids.
- [4] J.A Mydosh, Spin glasses: An Experimental Introduction, Taylor and Francis, London, 1993.
- [5] P. Sibani, G.F. Rodriguez og G.G. Kenning, Phys. Rev. B 74, 224407 (2006), Intermittent quakes and record dynamics in the thermoremanent magnetization of a spin-glass.
- [6] F. Neumann, Glass: Liquid or Solid – Science vs. an Urban Legend, <http://dwb.unl.edu/Teacher/NSF/C01/C01Links/www.ualberta.ca/bderksen/florin.html>.
- [7] P. Anderson, H.J. Jensen, L.P. Oliveira og P. Sibani, arXiv:cond-mat/0406689, Evolution in Complex Systems.
- [8] S. Suresh Rao og S.M. Bhattacharjee, arXiv:cond-mat/9503173, Protein folding and spin glass.
- [9] R.A. Goldstein, Z.A Luthey-Schulten og P.G. Wolynes, Proc.Natl.Acad.Sci, USA, Vol. 89, pp 4918-4922, Juni 1992, Biophysics, Optimal protein-folding codes from spin-glass theory.
- [10] W.B. Arthur, Science, 2, April 1999, 284, 107-09, Complexity and the Economy.
- [11] T. Kuhn, The Structure of Scientific Revolutions, University Of Chicago Press, 1996.

- [12] S. Boetcher og P. Sibani, European Physics Journal B 44, 317-326 (2005), Comparing extremal and thermal Explorations of Energy Landscapes.
- [13] J. Dall og P. Sibani, Eur.Phys.J.B 36 (2) 233-243 (2003), Exploring valleys of aging systems: the spin glass case.
- [14] J. Dall og P. Sibani, Computer Physics Communication 141 (2001) 260-267, Faster Monte Carlo Simulations at Low Temperatures. The Waiting Time Method.
- [15] J. Krug, arXiv:cond-mat/0702136, Records in a changing world.
- [16] E. Vincent, J. Hamman, Miguel Ocio, J-P, Bouchard og L.F. Cugliandolo, arXiv:cond-mat/9607224, Slow Dynamics and Aging in Spin Glasses.
- [17] P. Sibani, arXiv.org/cond-mat/0611749, Intermittent linear response in aging glassy systems. A case study.
- [18] P. Sibani og H.J. Jensen, arXiv:cond-mat/0406614, How a spin-glass remembers. Memory and rejuvenation from intermittency data: an analysis of temperature shifts.
- [19] C. Schulze, K.H. Hoffmann og P. Sibani, Europhys. Lett., 15 (3), pp. 361-366 (1991), Aging Phenomena in Complex Systems: A Hierarchical Model for Temperature Step Experiments.
- [20] P. Sibani og K.H. Hoffmann, Phys. Rev. Lett, Vol 63, No. 26, 2853-2856, Hierarchical Models for Aging and Relaxation of Spin Glasses.
- [21] P. Sibani og K.H. Hoffman, Europhys. Lett., 16 (5), pp. 423-428 (1991), Relaxation in Complex Systems: Local Mini and Their Exponents.
- [22] Henrik Jeldtoft Jensen, Paolo Sibani (2007) Glassy Dynamics, Scholarpedia.org, p.14566.

- [23] Michael Crichton, *Jurassic Park*, Lindhardt og Ringhof, 1993.
- [24] Daniel L. Stein, *Spin glasses and biology*, 1992, World Scientific Publishing.
- [25] <http://www.physics.emory.edu/faculty/boettcher/mainframe.htm>
- [26] M.E.J Newman og G.T Barkema, *Monte Carlo Methods in statistical physics*, Oxford University Press, 2004.
- [27] N.G Van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, Elsevier, 2006.
- [28] D. Halliday, R. Resnick og K.S Krane, *Physics: Fifth Edition. Volume 2*, John Wiley and Sons, 2002.
- [29] J. Lamarcq, J.-P.Bouchaud, O.C. Martin og M. Mezard, *Europhys. Lett.* 58(3), 321 (2002), Non-Compact local excitations in spin glasses.
- [30] L.C.E. Struik. *Physical aging in amorphous polymers and other materials*. Elsevier Science Ltd, New York, 1978.
- [31] P. Sibani, Mesoscopic fluctuations and intermittency in aging dynamics, *Europhys. Lett.*, 73 (1), pp. 69-75 (2006).
- [32] <http://www.dcsc.sdu.dk/>
- [33] J.D. Petruccelli, B. Nandram og M. Chen, *Applied Statistics for Engineers and Scientists*, Prentice Hall, 1999.
- [34] Arnold. J. Toynbee, *A Study of History: The First Abridged One-Volume Edition*, Gramercy, 1989.
- [35] Per Lyngs Hansen, lektor, Syddansk Universitet - Odense, Memphys Center for Biomembrane Physics, personlig kommunikation.
- [36] Benoit. B. Mandelbrot, *The (Mis) Behavior of Markets: A Fractal View of Risk, Ruin And Reward*, Perseus Books Group, 2006.

- [37] N. Eldridge og S.J. Gould, Punctuated equilibria: an alternative to phyletic gradualism, *Models in Paleobiology*, San Francisco: Freeman Cooper. pp. 82-115, 1972.
- [38] P. Sibani, J.C. Schön, P. Salamon og J.O. Anderson, Emergent Hierarchical Structures in Complex-System Dynamics, *Europhys. Lett.*, 22 (7), pp. 479-485 (1993).

A Programkode

WTM.c

```

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <sys/types.h>
#include <malloc.h>

#include "size_defs.h"

#define TWOPI 6.283185307
#define MAX_V_NO 1000
#define NO_EVENTS 20
#define MAX_NO_TRAJ 5000
#define NO_TIME_BINS 100
#define NO_CORR_BINS 100
#define NO_DT_BINS 5
#define NO_TIMES 1000
#define COARSE_GRAIN 1
#define NO_CORR_CUTS 10
/*
MAX_NO_TRAJ: is the largest number of trajectories with same starting point
NO_TIME_BINS : is the number of time bins for the event statistics
MAX_TOT_NO_TRAJ: is the largest allowed number of trajectories (including different quenches and different systems
NO_PDF_BINS: is the total number of bins in the heat PDF. For a single spin flip the energy change
varies between -12 and 12. There can be more flips in the same direction. We have taken
tentatively the range between -10 M and M for the total energy change. binsize is one! We can always coarse grain the PDF later...
*/
typedef unsigned long conf_genT[NO_IDS];
/* this is an array of 32 bits unsigned int in a 32 bit environment !*/

typedef struct valley_data {
    short int BSF_conf[M] ; /* save configuration */
    double global_time, BSF_energy, energy; /* save the time at which the conf is hit */
    struct valley_data *next;
} valley_dataT ;

typedef struct heap {
    int spin_index;
    double flip_time;
} heapT ;

static short unsigned int x_co[M],y_co[M],z_co[M],spin_index[N][N][N];
static short unsigned int north[M],south[M],east[M],west[M],northwest[M], northeast[M], southwest[M], southeast[M], up[M],down[M];
static short unsigned int upeast[M],upwest[M], upnorth[M],upsouth[M],downeast[M],downwest[M], downsouth[M], downnorth[M];
/*stores the 18 neighbors for the plaquette model*/
static valley_dataT *valley_head[MAX_NO_TRAJ], *start_valley, *current_valley ;
static long int RNGS, NO_TRAJ, sys_seed,conf_seed,NO_ITEM ;
static long int NO_VALLEYS[MAX_NO_TRAJ],NO_REP,NO_REAL, NO_TRAJ_SAME_START;
static heapT *heaptop, *whereis[M];
static short int spin[M],init_spin[M],count_flips[M], old_spin[M];
static long int no_hits_corr[NO_EVENTS][NO_EVENTS],no_hits_tr[NO_EVENTS], no_hits_events[NO_TIME_BINS],bin_index;
static long int no_hits_along_tr[NO_EVENTS],no_hits_flipped[NO_EVENTS];
static long int no_hits_time[NO_EVENTS],no_hits_events[NO_TIME_BINS];

```

```

static double correlation[NO_EVENTS][NO_EVENTS][NO_CORR_BINS], av_correlation[NO_EVENTS][NO_EVENTS], heatflow, oldE[NO_DT_BINS], oldM[NO_DT_BINS];
static double temperature, temp_temperature, inv_temp, BSF_barrier, VBSF, tr_divergence[NO_EVENTS], probe_times[NO_EVENTS], log_step;
static double max_global_time, global_time, threshold_time[NO_DT_BINS], BSF_energy, energy, X, MAX_GLOBAL_TIME, energy_stat[NO_EVENTS];
static double log_magnet, log_magnet_BSF;

static double valleytimes[NO_EVENTS], start_age, delta_age, lin_delta_age, delta_time[NO_DT_BINS],
EPDF[NO_DT_BINS][NO_PDF_BINS], MPDF[NO_DT_BINS][2*M], CORRPDF[NO_DT_BINS][NO_PDF_BINS][NO_CORR_CUTS],
ETOMCORR[NO_DT_BINS][NO_PDF_BINS][NO_CORR_CUTS], MNOQUAKES[NO_DT_BINS][NO_PDF_BINS][NO_CORR_CUTS], final_age;
static int corr_counter[NO_DT_BINS][NO_CORR_CUTS], etom_corr_counter[NO_DT_BINS][NO_CORR_CUTS],
mnoquakes_counter[NO_DT_BINS][NO_CORR_CUTS];
static double av_time[NO_EVENTS], std_time[NO_EVENTS], av_BSF[NO_EVENTS], av_E[NO_EVENTS], std_BSF[NO_EVENTS];
/*fake valleytimes fixed times at which output is taken, statistical measures for times and energies */
static double av_MBSF[NO_EVENTS], std_BSM[NO_EVENTS], av_M[NO_EVENTS];
static int valleyindex; /* index of current fake valley*/
static int field_flag; /* 1 if the field is applied */
static double event_stat[NO_TIME_BINS], barr_event_stat[NO_TIME_BINS];
static double var_event_stat[NO_TIME_BINS], barr_var_event_stat[NO_TIME_BINS];
FILE *fpe,*errorf;
char comments[60], outcorr[60], outmeancorr[60], outtimes[60], outevents[60], outPDF[60], out_lin_en[60], out_quakes[60],
out_conf[60], out_spins[60], out_lin_mag[60], out_magstats[60], out_magPDF[60], out_corrPDF[60], out_etomcorrPDF[60],
out_mnoquakesPDF[60];
static double lin_energy[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], lin_BSF[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], lin_times[NO_TIMES], lin_global_time[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES];
static double lin_quake_en[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES];
static double lin_magnet[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], lin_magnet_BSF[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES],
lin_global_magnet_time[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES];
static long int lin_time_index, lin_traj_index; /*Index of current linearly spaced energy recording, and the current
trajectory in which the recording is made*/
static double quake_time[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], quake_size[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], quake_log_times[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES];
static double magnet_time[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], magnet_size[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES],
magnet_log_times[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], lin_magnet_quake[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES];
static double quake_tot_time[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES], quake_tot_size[MAX_NO_TRAJ][NO_TIMES];
static long int quake_index[MAX_NO_TRAJ], quake_tot_index[MAX_NO_TRAJ], change_index, magnet_index[MAX_NO_TRAJ];
static double coords[N][N][N];
static int coord_change[N][N][N][NO_TIMES], quake_change[N][N][N][NO_TIMES],
spin_values[N][N][N][NO_TIMES];
static double avg_spin_values[N][N][N][NO_TIMES],
avg_spin_changes[N][N][N][NO_TIMES/COARSE_GRAIN];
double H_field, max_field, t_step; /* The applied magnetic field and the temperature step size*/

#include "en_procedures_H.h"
#include "heap_procedures.h"

/* ----- */

void read_data()
{
FILE *fp;
char comments[60];
int k ;
double obs_time, fraction;
fp = fopen("in_data", "r");
if (fp != NULL)
{
fscanf(fp, "%lf %s", &fraction, comments ); /* fraction delta t/t_w for heat current measurement*/
fscanf(fp, "%d %s", &conf_seed, comments ); /* seed for initial random conf */
fscanf(fp, "%lf %s", &start_age, comments ); /* start age */
fscanf(fp, "%lf %s", &obs_time, comments ); /*obs_time is the duration of run*/
fscanf(fp, "%d %s", &NO_TRAJ, comments); /* number of trajectories */
fscanf(fp, "%lf %s", &temperature, comments );
fscanf(fp, "%lf %s", &max_field, comments); /* the magnitude of the external field */
fscanf(fp, "%lf %s", &t_step, comments); /* The size of the temperature step at t_w */
if (fraction >= 0.5) {
printf("delta_t is too large\n");
exit(1);
}
}
}

```

```

}
final_age = start_age + obs_time; /*time at which sampling stops*/

delta_age = exp(log(final_age/start_age)/20);
lin_delta_age = obs_time/NO_TIMES;
delta_time[0] = obs_time*fraction;
for (k=1; k<NO_DT_BINS; k++)
delta_time[k]= delta_time[k-1]*sqrt(2);

}
else {
    printf("file in_data does not exist. ");
    exit(1);
}
printf("echo input ...\n");
printf("%lf\n ",fraction); /* deltat/t_w */
printf("%d \n ",conf_seed);/* seed for initial random conf */
printf("%lf \n ",start_age); /* start age */
printf("%lf \n ",obs_time ); /*time at which sampling stops*/
printf("%ld \n ",NO_TRAJ); /* number of trajectories */
printf("%lf \n ",temperature);
printf("%lf \n", max_field);
printf("%lf \n", t_step);
fclose(fp);
}
/* ----- */

void check_integrity_of_energy_function()
/* checks the integrity of the energy function on a given state
by calculating the energy twice: afresh and incrementally */

{
int i,flag;
double e, check_energy,x;

printf("checking integrity ...\n");
errorf = fopen("errorlog","w");
e = init_energy3D(spin); /*initial energy*/
printf("start energy e = %lf\n",e);
flag =0;
for(i=0;i<M;i++) /* check energy and energy difference */
{

x = energy_diff3D(i,spin); /*change i*/
e += x; /* update energy*/
spin[i] = -spin[i];
check_energy = init_energy3D(spin);
if (fabs(check_energy-e)>0.00000001){
fprintf(errorf,"%f %d %d %d \n",check_energy-e,x_co[i],y_co[i],z_co[i]);
flag ++;
}
spin[i] = -spin[i]; /* return to reference conf */
e -= x; /* go bck to old energy */
}
fclose(errorf);
if (flag) {
printf("inconsistent energy calculation, exiting ...\n");
exit(1); /*stop the program if */
}
}

/*-----*/

```

```

void mk_headers() /*fills global string arrays used for output names*/
{
if (temperature < 1){
    sprintf(outcorr,"T0%2.0fL%2dD3_corr.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outmeancorr,"T0%2.0fL%2dD3_meancorr.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outtimes,"T0%2.0fL%2dD3_times.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outevents,"T0%2.0fL%2dD3_events.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outPDF,"T0%2.0fL%2dD3_PDF.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_lin_en,"T0%2.0fL%2dD3_linen.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_quakes,"T0%2.0fL%2dD3_quakes.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_conf,"T0%2.0fL%2dD3_conf.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_spins,"T0%2.0fL%2dD3_spins.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_lin_mag, "T0%2.0fL%2dD3_linmag.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_magstats, "T0%2.0fL%2dD3_magstats.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_magPDF, "T0%2.0fL%2dD3_magPDF.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_corrPDF, "T0%2.0fL%2dD3_corrPDF.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_etomcorrPDF, "T0%2.0fL%2dD3_etomcorrPDF.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_mnoquakesPDF, "T0%2.0fL%2dD3_mnoquakesPDF.dat", temperature*100,N);
} else
{
    sprintf(outcorr,"T%3.0fL%2dD3_corr.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outmeancorr,"T%3.0fL%2dD3_meancorr.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outtimes,"T%3.0fL%2dD3_times.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outevents,"T%3.0fL%2dD3_events.dat",temperature*100,N);
    sprintf(outPDF,"T%3.0fL%2dD3_PDF.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_lin_en,"T%3.0fL%2dD3_linen.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_quakes,"T%3.0fL%2dD3_quakes.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_conf,"T%3.0fL%2dD3_conf.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_spins,"T%3.0fL%2dD3_spins.dat",temperature*100,N);
    sprintf(out_lin_mag, "T%3.0fL%2dD3_linmag.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_magstats, "T%3.0fL%2dD3_magstats.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_magPDF, "T%3.0fL%2dD3_magPDF.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_corrPDF, "T%3.0fL%2dD3_corrPDF.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_etomcorrPDF, "T%3.0fL%2dD3_etomcorrPDF.dat", temperature*100,N);
    sprintf(out_mnoquakesPDF, "T%3.0fL%2dD3_mnoquakesPDF.dat", temperature*100,N);
}

}

/* ----- */

void write_conf(spin)
short int spin[M];
{
FILE *fp;
short unsigned int i;
fp = fopen("better_gstate","w");

    fprintf(fp,"%u %f \n",sys_seed,BSF_energy/M);
    fprintf(fp,"*\n"); /*makes the header */

for(i=0;i<M;i++)
    fprintf(fp,"%d \n ",spin[i]);

    fclose(fp);
}

/* ----- */

double overlap(p1,p2)
valley_dataT *p1,*p2;
/* beregn overlap mellem to tilstande,normalized to 1 */

{
int i;

```

```

double x;

x = 0;
for (i=0; i <M; i++)
x += p2->BSF_conf[i] * p1->BSF_conf[i] ;

return(x/M);
}
/*-----*/

void print_header(fp)
FILE *fp; /*pointer to an already open file*/
{
fprintf(fp,"% echoing input file: \n");
fprintf(fp,"% rand. conf.seed= %d \n",conf_seed);/* seed for initial random conf */
    fprintf(fp,"% initial age= %lf \n",start_age); /* no of time scans */
fprintf(fp,"% final age= %lf \n",final_age); /* no of time scans */
fprintf(fp,"% time increment for correlations= %f \n",delta_age); /* no of time scans */
fprintf(fp,"% NO_TRAJ= %d \n",NO_TRAJ); /*no of trajectories*/
fprintf(fp,"% temperature= %lf \n",temperature);/* running temperature */
}

/*-----*/

void print_time_stat()
{
int i;

FILE *fp;
fp = fopen(outtimes,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"% column 1: data point \n");
fprintf(fp,"% column 2: average time \n");
fprintf(fp,"% column 3: st. dev of time \n");
fprintf(fp,"% column 4: average BSF per spin \n");
fprintf(fp,"% column 5: st. dev of BSF per spin \n");
fprintf(fp,"% column 6: internal energy per spin \n");
fprintf(fp,"% \n");

for(i=0;i<NO_EVENTS ;i++){
fprintf(fp,"%d %f %f %f %f \n", i,av_time[i],std_time[i],av_BSF[i]/M,std_BSF[i]/M,av_E[i]/M );
}
fclose(fp);
}

/* ----- */

/*-----*/

void print_lin_energy()
{
int i,j;

FILE *fp;
fp = fopen(out_lin_en,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"% column 1: data point \n");
fprintf(fp,"% column 2: linearly spaced observation times \n");
fprintf(fp,"% column 3: Global time \n");
fprintf(fp,"% column 4: internal energy per spin \n");
fprintf(fp,"% column 5: BSF energy per spin \n");
fprintf(fp,"% column 6: Quake energy per spin \n");
fprintf(fp,"% \n");
for(j=0; j<NO_TRAJ; j++)

```

```

{
fprintf(fp, "\\% Trajectory no. %d \n", j+1);
for(i=0; i<NO_TIMES; i++){
fprintf(fp, "%d %f %f %f %f \n", i, lin_times[i], lin_global_time[j][i],
lin_energy[j][i]/M, lin_BSF[j][i]/M, lin_quake_en[j][i]/M);
}
}/*end trajectory loop*/
fclose(fp);
}

/* ----- */
/*-----*/

void print_lin_magnet()
{
int i,j;

FILE *fp;
fp = fopen(out_lin_mag, "w");
print_header(fp);
fprintf(fp, "\\% column 1: data point \n");
fprintf(fp, "\\% column 2: linearly spaced observation times \n");
fprintf(fp, "\\% column 3: Global time \n");
fprintf(fp, "\\% column 4: Avg. magnetisation per spin \n");
fprintf(fp, "\\% column 5: BSF magnetisation per spin \n");
fprintf(fp, "\\% \n");
for(j=0; j<NO_TRAJ; j++)
{
fprintf(fp, "\\% Trajectory no. %d \n", j+1);
for(i=0; i<NO_TIMES; i++){
fprintf(fp, "%d %f %f %f %f \n", i, lin_times[i], lin_global_time[j][i],
lin_magnet[j][i]/M, lin_magnet_BSF[j][i]/M);
}
}/*end trajectory loop*/
fclose(fp);
}

/* ----- */
/*-----*/

void print_quake_stats()
{
int i,j;

FILE *fp;
fp = fopen(out_quakes, "w");
print_header(fp);
fprintf(fp, "\\% column 1: Quake number \n");
fprintf(fp, "\\% column 2: Global quake time \n");
fprintf(fp, "\\% column 3: Magnitude of quake \n");
fprintf(fp, "\\% column 4: ln(t_k)/t_{k-1} \n");
fprintf(fp, "\\% \n");
for(j=0; j<NO_TRAJ; j++)
{
fprintf(fp, "\\% Trajectory no. %d \n", j+1);
fprintf(fp, "\\% Total number of quakes in trajectory: %d \n", quake_index[j]);
for(i=0; i<quake_index[j]; i++){
if (i == 0)
fprintf(fp, "%d %f %f \n", i+1, quake_time[j][i], quake_size[j][i]);
else
fprintf(fp, "%d %f %f %f \n", i+1, quake_time[j][i], quake_size[j][i], quake_log_times[j][i]);
}
}
}

```

```

}/*end trajectory loop*/
fclose(fp);
}

/* ----- */

/*-----*/

void print_magnet_stats()
{
int i,j;

FILE *fp;
fp = fopen(out_magstats,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%% column 1: Magnetic quake number \n");
fprintf(fp,"%% column 2: Global magnetic quake time \n");
fprintf(fp,"%% column 3: Magnitude of magnetic quake \n");
fprintf(fp,"%% column 4: ln(t_k)/t_(k-1) \n");
fprintf(fp,"%% \n");
for(j=0; j<NO_TRAJ; j++)
{
fprintf(fp,"%% Trajectory no. %d \n", j+1);
fprintf(fp,"%% Total number of quakes in trajectory: %d \n", magnet_index[j]);
for(i=0; i<magnet_index[j] ;i++){
if (i == 0)
fprintf(fp,"%d %f %f\n", i+1, magnet_time[j][i], magnet_size[j][i]);
else
fprintf(fp,"%d %f %f %f\n", i+1, magnet_time[j][i], magnet_size[j][i], magnet_log_times[j][i]);
}
}/*end trajectory loop*/
fclose(fp);
}

/* ----- */

/*-----*/

void print_conf_changes()
{
int i,j,q;

FILE *fp;
fp = fopen(out_conf,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%% The x,y,z coordinates of all the spins that have flipped during the quake.\n");
fprintf(fp,"%% column 1: x coordinate \n");
fprintf(fp,"%% column 2: y coordinate \n");
fprintf(fp,"%% column 3: z coordinate \n");
fprintf(fp,"%% The first quake is ignored, since the system has aged unobserved, from the time the initial \n");
fprintf(fp,"%% configuration was recorded \n");
fprintf(fp,"%% \n");
j = NO_TRAJ-1;
for(i=1; i<quake_index[j]; i++)
{
fprintf(fp, "%% Quake number: %d\n%%Quake magnitude: %f\n\n", i+1, quake_size[j][i]);
for (q=0; q < M; q++)
{
if(coord_change[x_co[q]][y_co[q]][z_co[q]][i])
fprintf(fp,"%d %d %d\n",x_co[q], y_co[q], z_co[q]);
}
}
}

```

```

fclose(fp);
}

/* ----- */
/* ----- */

void print_spins()
{
int i,j,q;

FILE *fp;
fp = fopen(out_spins,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%% The average value of all spins in the last trajectory.\n");
fprintf(fp,"%% column 1: x coordinate \n");
fprintf(fp,"%% column 2: y coordinate \n");
fprintf(fp,"%% column 3: z coordinate \n");
fprintf(fp,"%% column 4: avg. value over 5 times \n");
fprintf(fp,"%% column 5: change in average values from last time \n");
fprintf(fp,"%% \n");
j = NO_TRAJ-1;
for(i = COARSE_GRAIN - 1; i < NO_TIMES; i = i + COARSE_GRAIN)
{
fprintf(fp,"%% Global time: %f\n", lin_global_time[j][i]);
for (q=0; q < M; q++)
{
fprintf(fp,"%d %d %d %f %f\n",x_co[q], y_co[q], z_co[q],
avg_spin_values[x_co[q]][y_co[q]][z_co[q]][i/COARSE_GRAIN],
avg_spin_changes[x_co[q]][y_co[q]][z_co[q]][i/COARSE_GRAIN]);
}

}
fclose(fp);
}

/* ----- */

void print_EPDF()
{
int i,k,empty;

FILE *fp;
fp = fopen(outPDF,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%% dt_0 = %f \n",delta_time[0]);
fprintf(fp,"%% delta_age = %f \n",delta_age);
fprintf(fp,"%% column 1: unscaled energy \n");
fprintf(fp,"%% column 2-10: # counts for dt=dt_0*delta_age^k, k=0,1,..10 \n");
fprintf(fp,"%% \n");

for(i=0;i<NO_PDF_BINS;i++){
empty =1;
k=0;
while (empty && (k<NO_DT_BINS)) {
if (EPDF[k][i] >0) empty=0;
k++;
}

if (empty==0) {
fprintf(fp,"%d ", i+EMIN);
for (k=0; k<NO_DT_BINS; k++) fprintf(fp,"%f ",EPDF[k][i]);
fprintf(fp,"\n");
}
}

```



```

    }
fclose(fp);
}
/* ----- */
/* ----- */

void print_MPDF()
{
int i,k,empty;

FILE *fp;
fp = fopen(out_magPDF,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%f dt_0 = %f \n",delta_time[0]);
fprintf(fp,"%f delta_age = %f \n",delta_age);
fprintf(fp,"%f column 1: unscaled magnetisation \n");
fprintf(fp,"%f column 2-10: # counts for dt=dt_0*delta_age^k, k=0,1,..5 \n");
fprintf(fp,"%f \n");

for(i=0;i<2*M;i++){
empty =1;
k=0;
while (empty && (k<NO_DT_BINS)) {
if (MPDF[k][i] >0) empty=0;
k++;
}

if (empty==0) {
fprintf(fp,"%d ", i-M);
for (k=0; k<NO_DT_BINS; k++) fprintf(fp,"%f ",MPDF[k][i]);
fprintf(fp,"\n");
}
}
fclose(fp);
}
/* ----- */
/* ----- */

void print_corrPDF()
{
int i,k,j,empty;

FILE *fp;
fp = fopen(out_corrPDF,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%f dt_0 = %f \n",delta_time[0]);
fprintf(fp,"%f delta_age = %f \n",delta_age);
fprintf(fp,"%f column 1: The cutoff, X\n");
fprintf(fp,"%f column 2: unscaled energy fluctuations after deltaM > X \n");
fprintf(fp,"%f column 3-6: # counts for dt=dt_0*delta_age^k, k=0,1,..5 \n");
fprintf(fp,"%f \n");

for(j=0;j<NO_CORR_CUTS; j++)
{
for(i=0;i<NO_PDF_BINS;i++){
empty =1;
k=0;
while (empty && (k<NO_DT_BINS)) {
if (CORRPDF[k][i][j] >0) empty=0;
k++;
}
}
}
}

```

```

if (empty==0) {
fprintf(fp,"%d ", (j+1)*(50/NO_CORR_CUTS));
fprintf(fp,"%d ", i+EMIN);
for (k=0; k<NO_DT_BINS; k++) fprintf(fp,"%f ",CORRPDF[k][i][j]);
fprintf(fp,"\n");
}
}
}
fclose(fp);
}
/* ----- */
/* ----- */

void print_etomcorrPDF()
{
int i,k,j,empty;

FILE *fp;
fp = fopen(out_etomcorrPDF,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%d dt_0 = %f \n",delta_time[0]);
fprintf(fp,"%d delta_age = %f \n",delta_age);
fprintf(fp,"%d column 1: The cutoff, X\n");
fprintf(fp,"%d column 2: unscaled magnetisation fluctuations after deltaE < -X \n");
fprintf(fp,"%d column 3-6: # counts for dt=dt_0*delta_age^k, k=0,1,..5 \n");
fprintf(fp,"%d \n");

for(j=0;j<NO_CORR_CUTS; j++)
{
for(i=0;i<NO_PDF_BINS;i++){
empty =1;
k=0;
while (empty && (k<NO_DT_BINS)) {
if (ETOMCORR[k][i][j] >0) empty=0;
k++;
}

if (empty==0) {
fprintf(fp,"%d ", (j+1)*(50/NO_CORR_CUTS));
fprintf(fp,"%d ", i-M);
for (k=0; k<NO_DT_BINS; k++) fprintf(fp,"%f ",ETOMCORR[k][i][j]);
fprintf(fp,"\n");
}
}
}
fclose(fp);
}
/* ----- */
/* ----- */

void print_mnoquakesPDF()
{
int i,k,j,empty;

FILE *fp;
fp = fopen(out_mnoquakesPDF,"w");
print_header(fp);
fprintf(fp,"%d dt_0 = %f \n",delta_time[0]);
fprintf(fp,"%d delta_age = %f \n",delta_age);
fprintf(fp,"%d column 1: The cutoff, X\n");
fprintf(fp,"%d column 2: unscaled magnetisation fluctuations after deltaE > -X \n");
fprintf(fp,"%d column 3-6: # counts for dt=dt_0*delta_age^k, k=0,1,..5 \n");

```

```

fprintf(fp,"%% \n");

for(j=0;j<NO_CORR_CUTS; j++)
{
for(i=0;i<NO_PDF_BINS;i++){
empty =1;
k=0;
while (empty && (k<NO_DT_BINS)) {
if (MNOQUAKES[k][i][j] >0) empty=0;
k++;
}

if (empty==0) {
fprintf(fp,"%d ", (j+1)*(50/NO_CORR_CUTS));
fprintf(fp,"%d ", i-M);
for (k=0; k<NO_DT_BINS; k++) fprintf(fp,"%f ",MNOQUAKES[k][i][j]);
fprintf(fp,"\n");
}
}
}
fclose(fp);
}
/* ----- */

void print_corr_functions()
{
int i,j,bin;
float x,dbin;
FILE *fp, *fp2;
fp = fopen(outcorr,"w");
fp2 = fopen(outmeancorr,"w");
print_header(fp);
print_header(fp2);
dbin = 1/((float)NO_CORR_BINS);
fprintf(fp2,"%% age time time/age av_corr \n");
for(i=0;i<NO_EVENTS-1 ;i++){
for(j=i+1;j<NO_EVENTS ;j++){
fprintf(fp,"%% age= %lf time= %lf av_corr= %lf \n", av_time[i], av_time[j], av_correlation[i][j]/NO_TRAJ);
fprintf(fp2,"%lf %lf %lf %lf \n", av_time[i],av_time[j],av_time[j]/av_time[i], av_correlation[i][j]/NO_TRAJ);
fprintf(fp,"%% x Prob(C=x) \n");
for(bin=0; bin< NO_CORR_BINS; bin++){
x = bin*dbin;
if(correlation[i][j][bin]>0)
fprintf(fp,"%f %f\n",x,correlation[i][j][bin]/NO_TRAJ);
}
}
}
fclose(fp);
fclose(fp2);
}
/*-----*/

int update_conf()
/*
Updates global variable spin, by flipping the spin
with the lowest waiting time.
*/
{
double fliptime,x,heat[NO_DT_BINS], magchange[NO_DT_BINS] ;
int pick,i,pickbin,k, q, j, m;

pick = heaptop->spin_index;

```

```

global_time = heaptop->flip_time;

if (!field_flag && global_time > start_age)
{
H_field = max_field;
temperature = temperature + t_step;
inv_temp = 1/temperature;
field_flag = 1;
fill_initial_waiting_times_in_heap(global_time);
printf("Temperature set to %f from %f at time = %f \n",temperature, temp_temperature, global_time);
}

spin[pick] = -spin[pick]; /* flip spin*/

x = energy_diff3D(pick,spin); /*new barrier*/
energy -= x; /* update energy, the - is ok, the old barrier is -x */
log_magnet += 2*spin[pick]; /* update magnetisation */
fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48())+ global_time;
reorder_heap(heaptop,fliptime);

if (energy < BSF_energy) energy = init_energy3D(spin);
/*refresh energy one extra time and check once more */

if (energy < BSF_energy) BSF_energy = energy; /* keep track of BSF */
if (log_magnet < log_magnet_BSF) log_magnet_BSF = log_magnet;
if ((global_time > valleytimes[valleyindex]) && (valleyindex < NO_EVENTS)){
for (i=0; i <M; i++) current_valley->BSF_conf[i] = spin[i];
current_valley->BSF_energy = BSF_energy;
current_valley->energy = energy;
current_valley->global_time = global_time;
current_valley->next =current_valley +1 ;
current_valley = current_valley +1;
current_valley->next = NULL;
if (valleyindex < NO_EVENTS) valleyindex ++;
/*else return(0);*/
}
if (global_time > lin_times[lin_time_index]) /*Records the linearly spaced energies */
{
if (lin_traj_index == NO_TRAJ-1) /*records all the spin values for the last trajectory. */
{
for (q=0; q < M; q++)
{
spin_values[x_co[q]][y_co[q]][z_co[q]][lin_time_index] = spin[q];
}
}
lin_energy[lin_traj_index][lin_time_index] = energy;
for(m = 0; m < M; m++)
{
lin_magnet[lin_traj_index][lin_time_index] += spin[m];
}
lin_magnet[lin_traj_index][lin_time_index] = lin_magnet[lin_traj_index][lin_time_index];
lin_global_time[lin_traj_index][lin_time_index] = global_time;
if (lin_time_index == 0)
{
lin_BSF[lin_traj_index][lin_time_index] = energy;
lin_magnet_BSF[lin_traj_index][lin_time_index] = lin_magnet[lin_traj_index][lin_time_index];
}
else
{
if (energy < lin_BSF[lin_traj_index][lin_time_index - 1])
{
lin_BSF[lin_traj_index][lin_time_index] = energy;
if (lin_traj_index == NO_TRAJ-1) /*Records real space conf. change for BSF changes in the
last trajectory. */

```

```

{
for (q=0; q < M; q++)
{
if (spin[q] != old_spin[q])
coord_change[x_co[q]][y_co[q]][z_co[q]][change_index] = 1;
else coord_change[x_co[q]][y_co[q]][z_co[q]][change_index] = 0;
old_spin[q] = spin[q];
}
change_index++;
}
}
else
{
lin_BSF[lin_traj_index][lin_time_index] = lin_BSF[lin_traj_index][lin_time_index - 1];
for (j=0; j < M; j++)
old_spin[k] = spin[k];
}
if (lin_magnet[lin_traj_index][lin_time_index] > lin_magnet_BSF[lin_traj_index][lin_time_index
- 1])
{
lin_magnet_BSF[lin_traj_index][lin_time_index] =
lin_magnet[lin_traj_index][lin_time_index];
}
else
{
lin_magnet_BSF[lin_traj_index][lin_time_index] =
lin_magnet_BSF[lin_traj_index][lin_time_index - 1];
}
}
lin_time_index++;
if (lin_time_index == NO_TIMES)
{
return(0);
}
}/*end if*/
for(k=0; k<NO_DT_BINS; k++){
for(q=0; q<NO_CORR_CUTS; q++)
{
corr_counter[k][q]++;
etom_corr_counter[k][q]++;
mnoquakes_counter[k][q]++;
}
if (global_time > threshold_time[k]){

if (oldE[k] !=0) {
heat[k] = energy-oldE[k];
for(j=0; j<NO_CORR_CUTS; j++)
{
if (heat[k] < -(j+1)*(50/NO_CORR_CUTS))
{
etom_corr_counter[k][j]=0;
}
else
{
mnoquakes_counter[k][j]=0;
}
}
pickbin= heat[k] -EMIN;
EPDF[k][pickbin]++; /* EMIN is predefined to -10 M where M is the size, the bin size is one...*/
/*EPDF is the unnormalized energy transfer PDF*/
}
oldE[k]=energy;
threshold_time[k]+= delta_time[k]; /*new threshold*/
if (oldM[k] !=0)

```

```

{
magchange[k] = log_magnet-oldM[k];
for(j=0; j<NO_CORR_CUTS; j++)
{
if (magchange[k] > (j+1)*(50/NO_CORR_CUTS))
{
corr_counter[k][j]=0;
}
}
pickbin = magchange[k] + M;
MPDF[k][pickbin]++;
}
oldM[k] = log_magnet;
for(q=0; q<NO_CORR_CUTS; q++)
{
if (corr_counter[k][q] < 2)
{
pickbin = heat[k] - EMIN;
CORRPDF[k][pickbin][q]++;
}
if (etom_corr_counter[k][q] < 2)
{
pickbin = magchange[k] + M;
ETOMCORR[k][pickbin][q]++;
}
if (mnoquakes_counter[k][q] < 2)
{
pickbin = magchange[k] + M;
MNOQUAKES[k][pickbin][q]++;
}
}
}

i = north[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48())+ global_time;
reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = south[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48()) + global_time;
reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = east[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48())+ global_time;
reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = west[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48())+ global_time;
reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = up[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48()) + global_time;
reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = down[pick];

```

```
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()) + global_time;
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = upnorth[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = upsouth[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()) + global_time;
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = upeast[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = upwest[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = downnorth[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = downsouth[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()) + global_time;
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = downeast[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = downwest[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = northeast[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = southeast[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()) + global_time;
    reorder_heap(wheris[i],fliptime);

i = northwest[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48()+ global_time);
```

```

reorder_heap(wheréis[i],fliptime);

i = southwest[pick];
x = energy_diff3D(i,spin);
    fliptime = - exp(x*inv_temp)*log(drand48()) + global_time;
reorder_heap(wheréis[i],fliptime);

return(1);
}
/*-----*/

double look_and_refresh(x) /* refreshes energy */
double x;
{
double n_energy;
n_energy = init_energy3D(spin); /*calculate energy */
if (fabs(n_energy - energy)> 0.0001)
{ fprintf(errorf,"Large rounding error %f \n",fabs(n_energy - energy));
return(x/5); /* must refresh more often..*/
}
energy = n_energy;
return(x*1.1); /* refresh more seldom*/

}
/*-----*/

void initialize_global()

{
int i,j,k;
double age;
read_data(); /*reads input file */
initialize_conf(conf_seed);
make_coord(); /*initialize coordinates */
make_spin_index(); /*initializes the spin_index array */
make_neighbor_lists(); /* fills in the indices of the neighbors to each spin */
mk_headers();

max_global_time = 1000000000000.0; /* this variable stores the max globaltime allowed */
MAX_GLOBAL_TIME = 0; /* this variable stores the max globaltime actually reached */
temp_temperature = temperature;
inv_temp = 1/temperature;
age = start_age;
change_index = 0; /* Index for the current linear BSF energy */
for (i=0; i< NO_EVENTS ; i++) {
valleytimes[i] = age;
age *= delta_age; /* use multiplicative constant close to One!*/
/* delta_age*=2; */
av_time[i] = 0; std_time[i] = 0;
av_BSF[i] = 0; std_BSF[i] =0; av_E[i]=0;
av_MBSF[i] =0; std_BSFM[i] = 0; av_M[i] = 0;
for(j=0; j < NO_EVENTS; j++) av_correlation[i][j]=0;
} /*initialize output times for conf. overlaps*/
age = start_age;
for (i=0; i < NO_TIMES; i++) /*Initialize output times for linearly spaced energies*/
{
lin_times[i] = age;
age += lin_delta_age;
} /*end for */
for (i=0; i < NO_TRAJ; i++)
{
for (j=0; j < NO_TIMES; j++) /*For testing purposes */

```



```

{
lin_energy[i][j] = 1;
lin_global_time[i][j] = 1;
}
}
for(k=0; k<NO_DT_BINS ; k++)
for (i=0; i< NO_PDF_BINS ; i++) {
{
EPDF[k][i] =0; /*PDF og heat transfer initialized*/
MPDF[k][i] =0; /*Magnetic PDF initialised */
}
}
RNGS = 0;

heaptop = malloc(M*sizeof(heapT));
initialize_heap(); /*fills bogus fliptime[i] in heap to initialize*/

}
/*-----*/

void simulate()
{
int l,flag;

flag =1;

while (flag){ /* flag is set to zero if the largest output time is exceeded*/

flag = update_conf(); /*single move*/

}

}
/*-----*/

void initialize_tr(int temp_index)
{
int i,j,k,s;
for (k=0; k < NO_DT_BINS; k++)
{
for(j=0; j<NO_CORR_CUTS; j++)
{
corr_counter[k][j] = 2;
etom_corr_counter[k][j]=2;
mnoquakes_counter[k][j]=2;
}
}
field_flag = 0;
H_field = 0;
temperature = temp_temperature;
inv_temp = 1/temperature;
valleyindex = 0;
/* POINTER PROBLEMS!!*/
valley_head[temp_index] = malloc((NO_EVENTS+3)*sizeof(valley_dataT)); /* allocate memory to next trajectory */
for(k=0; k < M; k++) spin[k] = init_spin[k]; /* set random initial state */
for(s=0; s < M; s++) old_spin[s] = spin[s]; /*Keeps track of old spin conf. for comparison
purposes */
BSF_energy = init_energy3D(spin); /* energy ok */
printf("initial energy=%f\n",BSF_energy);
global_time = 0;
valley_head[temp_index]->next = NULL;
current_valley = valley_head[temp_index];

```

```

energy = BSF_energy;
log_magnet =0;
log_magnet_BSF=0;
for (k=0; k<M; k++)
{
log_magnet += spin[k];
}
/*log_magnet = log_magnet/M;*/
log_magnet_BSF = log_magnet;
for (k=0; k<NO_DT_BINS; k++){
oldE[k]= 0;
oldM[k]= 0;
threshold_time[k] =start_age +delta_time[k] ;
}
fill_initial_waiting_times_in_heap(global_time);
lin_time_index = 0;
}
/*-----*/

void calculate_corr(valley_dataT *current_valley)
/* fills global variables distance_along_tr and correlation */
{
double x;
int i,j,bin;
valley_dataT *current_valley_2 ;

i =0; j=0;

while( i<NO_EVENTS ) {
av_time[i] += current_valley->global_time;
av_BSF[i] += current_valley->BSF_energy; /*add to these global variables to start calculating averages and standard deviations*/
av_E[i] += current_valley->energy;
if (i<NO_EVENTS-1){
current_valley_2 = current_valley->next;
j = i + 1;
while((current_valley_2 != NULL)&&(j<NO_EVENTS)) {
x = overlap(current_valley,current_valley_2);
av_correlation[i][j] +=x; /*increment the average*/
bin = floor(x*NO_CORR_BINS); /*find the correct bin*/
correlation[i][j][bin] ++; /*increment count*/
current_valley_2 ++;
j ++;
}
}
current_valley ++;
i ++;
};
}

/*-----*/

void mk_stat()
/* fills global variables av_time, std_time, av_BSF, std_BSF */
{
double x;
int i, tr;
valley_dataT *start_valley;

for (i=0; i < NO_EVENTS; i++){
av_time[i]/=NO_TRAJ;
av_BSF[i]/=NO_TRAJ;
av_E[i]/=NO_TRAJ;
} /*gives the correct normalization of the averages*/

```

```

for(tr =0; tr < NO_TRAJ; tr++){
    start_valley = valley_head[tr];
    for (i=0; i < NO_EVENTS; i++){
        std_time[i]+=(start_valley->global_time -av_time[i] )*(start_valley->global_time -av_time[i] ) ;
        std_BSF[i]+=(start_valley->BSF_energy -av_BSF[i] )*(start_valley->BSF_energy -av_BSF[i]) ;
        start_valley = start_valley->next;
    }

}

for (i=0; i < NO_EVENTS; i++){
    std_time[i] =sqrt(std_time[i]/(NO_EVENTS-1));
    std_BSF[i] =sqrt(std_BSF[i] /(NO_EVENTS-1));
    /*printf(" %d %f %f %f %f \n", i,av_time[i],std_time[i],av_BSF[i],std_BSF[i] );*/
}

}

/*-----*/

/*-----*/

void quake_stats()
{
    int i,j,k, q, j_index[NO_TIMES + 100], j_tot_index[NO_TIMES];
    for (i = 0; i < NO_TRAJ; i++)
    {
        for (j = 0; j < NO_TIMES; j++)
            lin_quake_en[i][j] = lin_BSF[i][j];
    }

    for (i=0; i < NO_TRAJ; i++)
    {
        quake_index[i] = 0;
        for (j=0; j < NO_TIMES - 1; j++)
        {
            if (lin_BSF[i][j + 1] < lin_BSF[i][j])
            {
                quake_time[i][quake_index[i]] = lin_global_time[i][j];
                quake_size[i][quake_index[i]] = lin_BSF[i][j] - lin_BSF[i][j + 1];
                quake_index[i]++;
            }
        }
        quake_log_times[i][0] = 0;
        quake_tot_index[i] = 0;
        q = 0;
        for (k=1; k < quake_index[i]; k++)
        {
            quake_log_times[i][k] = log(quake_time[i][k]/quake_time[i][k - 1]);
        }
    }

}

/*-----*/

/*-----*/

void magnet_stats()
{
    int i,j,k, q;
    for (i = 0; i < NO_TRAJ; i++)
    {
        for (j = 0; j < NO_TIMES; j++)

```

```

lin_magnet_quake[i][j] = lin_magnet_BSF[i][j];
}

for (i=0; i < NO_TRAJ; i++)
{
magnet_index[i] = 0;
for (j=0; j < NO_TIMES - 1; j++)
{
if (lin_magnet_BSF[i][j + 1] > lin_magnet_BSF[i][j])
{
magnet_time[i][magnet_index[i]] = lin_global_time[i][j];
magnet_size[i][magnet_index[i]] = lin_magnet_BSF[i][j + 1] - lin_magnet_BSF[i][j];
magnet_index[i]++;
}
}
magnet_log_times[i][0] = 0;
q = 0;
for (k=1; k < quake_index[i]; k++)
{
magnet_log_times[i][k] = log(magnet_time[i][k]/magnet_time[i][k - 1]);
}
}
}

/*-----*/

/*-----*/

void spin_stats()
{
int i,j,s,k;

k = 0;
for (i=0; i < NO_TIMES; i = i + COARSE_GRAIN)
{
for (s = 0; s < M; s++)
{
for (j = i; j < i + COARSE_GRAIN; j++)
{
avg_spin_values[x_co[s]][y_co[s]][z_co[s]][k] +=
spin_values[x_co[s]][y_co[s]][z_co[s]][j];
}
avg_spin_values[x_co[s]][y_co[s]][z_co[s]][k] =
avg_spin_values[x_co[s]][y_co[s]][z_co[s]][k]/COARSE_GRAIN;
}
k++;
}

for (i = 1; i < NO_TIMES/COARSE_GRAIN; i++)
{
for (s = 0; s < M; s++)
{
avg_spin_changes[x_co[s]][y_co[s]][z_co[s]][i] =
avg_spin_values[x_co[s]][y_co[s]][z_co[s]][i] -
avg_spin_values[x_co[s]][y_co[s]][z_co[s]][i - 1];
}
}
}

/*-----*/

```

```
main()

{

int i,j,l,k,ii,jj,CONT,temp_index,start_valley_index, min_no, traj_index;

initialize_global();
lin_traj_index = 0;

for(i=0;i<NO_TRAJ;i++){ /*new realization of the couplings */

initialize_tr(i);
check_integrity_of_energy_function();

printf(" run # %d \n", i+1 );

simulate();

calculate_corr(valley_head[i]); /* calculate correlation for current valley*/

RNGS ++; /* ready for a new series of random numbers*/
srand48(RNGS); /* re-initialize random number generator for dynamics*/

sys_seed ++; /*new couplings */
conf_seed ++; /*new initial conf */
initialize_conf(conf_seed);
lin_traj_index++;

} /* end of set of trajectories for same same quench */

quake_stats(); /*Analyses the distribution of quake times and sizes */
magnet_stats();
mk_stat(); /*do the statistics of times and energies for which the correlation is sampled*/
spin_stats();
print_spins();
print_time_stat();
print_corr_functions();
print_EPDF();
print_MPDF();
print_corrPDF();
print_etomcorrPDF();
print_mnoquakesPDF();
print_lin_energy();
print_lin_magnet();
print_quake_stats();
print_magnet_stats();
print_conf_changes();
return(1);
}
```

size_defs.h

```
/*
This file contains the following parameters:

H is the size of the subset of the configuration, which
is used to generate a non-unique label. (H<=NO_BITS )

TWO_TO_THE_H must be H raised to the power two.
The system uses TWO_TO_THE_H different search trees,
each one indexed by a subset of the data.

D is the dimensionality of the grid (two or three)

N is the systems linear size

M is the total number of spins

NO_B defines the resolution with which the density of state is sampled

NO_L is the max number of lid values which are analyzed

NO_IDS is the number of long long integers necessary to specify all the spin confs.
It must be at least M/32 + 1.

NO_BITS is the number of bits in a long integer (32)

MAXH is the max Hamming distance considered (M+1)/2
NO_PDF_BINS is chosen such that with a minimum energy difference of one
one can account for energy changes between -10 M (all energy goes out in one quake)
up to M (excitation which is extensive). Clearly, this is way too much, but better
than having to speculate about the possibility of something being forgotten
*/

#define H 12
#define TWO_TO_THE_H 4096
#define D 3
#define N 16
#define sqN 256
#define M 4096
#define NO_B 500
#define NO_L 250
#define NO_IDS 32
#define NO_BITS 32
#define MAXH 108
#define NO_PDF_BINS 45056
#define EMIN -40960
```

en_procedures_H.h

```

/*
Contains energy evaluations routines and other routines which are
specific for the spin-glass problem
*/

void initialize_conf(seed)
unsigned short int seed;
{
int i;
double mean,var;

srand48(seed);

for (i=0;i< M;i++)
{
if (drand48())>0.5) init_spin[i] = 1;
else init_spin[i] = -1;
/* init_spin[i] = 1; /* must be removed eventually*/
}

}

/* -----*/

void make_coord()
/* fills the global variables x_co, y_co and z_co */

{
short unsigned int i;
for(i=0;i<M;i++)
{
x_co[i] = i / sqN;
y_co[i] = (i - x_co[i] * sqN) / N;
z_co[i] = ( i - x_co[i] * sqN - y_co[i]*N); /* spin coordinates */
}
} /*end of make_coord */

/* ----- */

void make_spin_index()
/* fills the global variable spin_index[N][N][N] */

{
int k,l,j,i;

/* first calculate the internal part*/

for (k=0;k<N-1;k++)
for (l=0;l<N-1;l++)
for (j=0;j<N-1;j++)
spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN;

/* calculate the contribution from 'east face' except for its north and upper edges */
j = N-1;
for (k=0;k<N-1;k++)
for (l=0;l<N-1;l++)
spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN;
}

```

```

/* calculate the contribution from the north face except for its east and upper edges*/
l = N-1;
for (k=0;k<N-1;k++)
for (j=0;j<N-1;j++)
  spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN; /*spin index */

/*calculate the contribution from the 'roof' except for its east and north edges*/
k = N-1;
for (l=0;l<N-1;l++)
for (j=0;j<N-1;j++)
  spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN; /*spin index */

/*calculate the contribution from the edge between north and east facade, except for the vertex*/
j = N-1;
l = N-1;
for (k=0;k<N-1;k++)
  spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN; /*spin index */

/*calculate the contribution from the edge between east facade and roof, except for the vertex */
j = N-1;
k = N-1;
for (l=0;l<N-1;l++)
  spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN; /*spin index */

/*calculate the contribution from the edge between north facade and roof, except for the vertex */
l = N-1;
k = N-1;
for (j=0;j<N-1;j++)
  spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN; /*spin index */

/*calculate the contribution from the vertex */
l = N-1;
k = N-1;
j = N-1;
spin_index[k][l][j] = j + l*N + k * sqN; /*spin index */

} /*end of make_spin_index */

/* ----- */

double init_energy3D(spin)
register short int spin[M];
/* calculates the energy of the initial configuration*/
{
  int k,l,j,i;
  double en, plaquette, magnet;

  en = 0;

  /* first calculate the internal part*/
  for (k=0;k<N-1;k++)
  for (l=0;l<N-1;l++)
  for (j=0;j<N-1;j++)
  {
    i = spin_index[k][l][j] ;
    plaquette = -spin[i]*spin[i+1]*spin[i+1+N]*spin[i+N]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/

```



```

en += plaquette;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+ N + sqN]*spin[i+N]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+1]*spin[i+1+sqN]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;
}

/* calculate the contribution from 'east face' except for its north and upper edges */
/* NB: +1 replaced with +1-N */
j = N-1;
for (k=0;k<N-1;k++)
for (l=0;l<N-1;l++)
{
i = spin_index[k][l][j];
plaquette = -spin[i]*spin[i+1-N]*spin[i+1]*spin[i+N]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/
en += plaquette;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+ N + sqN]*spin[i+N]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+ 1-N]*spin[i+1-N+sqN]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;
}

/* calculate the contribution from the north face except for its east and upper edges*/
/* NB: +N replaced with N -sqN , should one not call this the south face??*/
l = N-1;
for (k=0;k<N-1;k++)
for (j=0;j<N-1;j++)
{
i = spin_index[k][l][j] ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+1]*spin[i+1+N-sqN]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/
en += plaquette;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+ N]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+ 1]*spin[i+1+sqN]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;
}

/*calculate the contribution from the 'roof' except for its east and north edges*/
/*NB: +sqN replaced with +sqN-M, I would say this is the floor... */
k = N-1;
for (l=0;l<N-1;l++)
for (j=0;j<N-1;j++)
{
i = spin_index[k][l][j];
plaquette = -spin[i]*spin[i+1]*spin[i+1+N]*spin[i+N]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/
en += plaquette;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ N + sqN-M]*spin[i+N]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ 1]*spin[i+1+sqN-M]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;
}

/*calculate the contribution from the edge between north and east facade, except for the vertex*/
j = N-1;
l = N-1;
/*NB: +1 replaced with +1-N, and +N replaced with +N-sqN */
for (k=0;k<N-1;k++)
{
i = spin_index[k][l][j];
plaquette = -spin[i]*spin[i+1-N]*spin[i+1-sqN]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/
en += plaquette;
}

```

```

plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+ N]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN]*spin[i+ 1 -N]*spin[i+1-N+sqN]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;

}

/*calculate the contribution from the edge between east facade and roof, except for the vertex */
j = N-1;
k = N-1;
/*NB: +1 replaced with +1-N, and +sqN replaced with + sqN-M */
for (l=0;l<N-1;l++)
{
i = spin_index[k][l][j] ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+1-N]*spin[i+1]*spin[i+N]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/
en += plaquette;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ N + sqN-M]*spin[i+N]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ 1-N]*spin[i+1-N+sqN-M]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;

}

/*calculate the contribution from the edge between north facade and roof, except for the vertex (I should probably have written south facade and floor) */
l = N-1;
k = N-1;
/*NB: +N replaced with +N-sqN, and +sqN replaced with + sqN-M */
for (j=0;j<N-1;j++)
{
i = spin_index[k][l][j];
plaquette = -spin[i]*spin[i+1]*spin[i+1+N-sqN]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/
en += plaquette;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ N -M]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ 1]*spin[i+1+sqN-M]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;

}

/*calculate the contribution from the vertex */
/* +sqN -> sqN-M; +N-> +N-sqN; +1-> +1-N; in this order...*/
l = N-1;
k = N-1;
j = N-1;
i = spin_index[k][l][j];
plaquette = -spin[i]*spin[i+1-N]*spin[i+1-sqN]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-y plaquette, with spin i located at North-West corner*/
en += plaquette;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ N -M]*spin[i+N-sqN]; /* contribution from x-z plaquette, with spin i located at Up-North corner*/
en += plaquette ;
plaquette = -spin[i]*spin[i+sqN-M]*spin[i+ 1-N]*spin[i+1-N+sqN-M]; /* contribution from y-z plaquette, with spin i located at Up-West corner*/
en += plaquette ;
magnet = 0;
for(i = 0; i < M; i++)
{
magnet += spin[i];
}
en += - H_field * magnet;
/* printf("initial energy/spin is %f\n",-en/M);*/
return(en);
}
/* ----- */

void make_neighbor_lists() /* fills the global arrays north, south ... etc */

```

```

{
int i,j,l,k,h;

for (k=0;k<N;k++)
for (l=0;l<N;l++)
for (j=0;j<N;j++)
{
    i = spin_index[k][l][j] ;

if (j< (N-1)) east[i] = i+1 ; else east[i] = i - (N-1);
if (j > 0) west[i] = i-1 ; else west[i] = i + (N-1);
if (l< (N-1)) north[i] = i+N ; else north[i] = i - (N-1)*N;
if (l>0) south[i] = i-N ; else south[i] = i + (N-1)*N ;
if (k < (N-1)) up[i] = i+sqN ; else up[i] = i - (N-1)*sqN ;
if (k > 0) down[i] = i-sqN ; else down[i] = i + (N-1)*sqN ;
}

for (i=0;i<M;i++)
{
h= up[i];
upnorth[i] = north[h]; upwest[i]=west[h]; upeast[i]= east[h]; upsouth[i]= south[h];
h=down[i];
downnorth[i] = north[h]; downwest[i]=west[h]; downeast[i]= east[h]; downsouth[i]= south[h];
h= north[i];
northwest[i] = west[h]; northeast[i]= east[h];
h = south[i];
southwest[i] = west[h]; southeast[i] = east[h];
}

}
/*-----*/

double energy_diff3D(i,spin)
short unsigned int i;
register short int spin[M];

/*
returns the energy difference for a spin-flip. Apparently in error?
*/
{
double en, d_plaquette, upedge, downedge, magnet;

/* NB: the common factor -2*spin[i] is included at the end */

en=0;

d_plaquette = spin[east[i]]*spin[northeast[i]]*spin[north[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = spin[north[i]]*spin[northwest[i]]*spin[west[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = spin[west[i]]*spin[southwest[i]]*spin[south[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = spin[south[i]]*spin[southeast[i]]*spin[east[i]];
en+= d_plaquette;

/* these are the contributions from the x-y plane*/

upedge = spin[up[i]];

```

```
d_plaquette = upedge*spin[east[i]]*spin[upeast[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = upedge*spin[north[i]]*spin[upnorth[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = upedge*spin[west[i]]*spin[upwest[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = upedge*spin[south[i]]*spin[upsouth[i]];
en+= d_plaquette;

/* these are the contributions from the 4 plaquettes sharing an edge along the z axis*/

downedge = spin[down[i]];
d_plaquette = downedge*spin[east[i]]*spin[downeast[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = downedge*spin[north[i]]*spin[downnorth[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = downedge*spin[west[i]]*spin[downwest[i]];
en+= d_plaquette;

d_plaquette = downedge*spin[south[i]]*spin[downsouth[i]];
en+= d_plaquette;

magnet = H_field;
en += magnet;

return( 2*en*spin[i]);

}
```

heap_procedures.h

```

void initialize_heap()
/* fills heap with bogus (ordered) waiting times,
assigned in the same order as the spin indeces.*/
{
double dx, time;
int i;

heapT *current;

/* heaptop = malloc(M*sizeof(heapT)); assumed to exist */

dx = 1; /*bogus flip time increment */
time = 1;

heaptop->up = NULL;
heaptop->flip_time = time;
heaptop->spin_index = 0;
heaptop->dl = heaptop +1;
heaptop->dr = heaptop +2;
whereis[0] = heaptop;
time += dx;
for(i=1;i<M/2;i++) /* all nodes with children */
{
current = heaptop+i;
current->up = current -(1 +i/2);
current->dl = heaptop +2*i +1;
if ((2*i +2) == M) current->dr = NULL;
else current->dr = heaptop + 2*i +2;

current->flip_time = time;
current->spin_index = i;
whereis[i] = current;
time += dx;
}
for(i=M/2;i < M; i++)
{
current = heaptop+i;
current->up = current -(1 +i/2);
current->dl = NULL;
current->dr = NULL;
current->flip_time = time;
current->spin_index = i;
whereis[i] = current;
time += dx;
}
}
/* ----- */
void print_heap() /* just to check what isin there!*/

/* prints heap*/
{
heapT *p;
int i;

for(i=0;i<M ;i++)
{
p=heaptop+i;
printf("%f \n",p->flip_time);

}
}

```

```

/* ----- */

void swap_down(p,newtime)
double newtime;
heapT *p;

{
int spin, flag;
double min;
heapT *c;

flag =1;

while (flag) {
spin = p->spin_index; /*save spin conf*/
if (p->dl == NULL){
/* we are right away at the bottom layer.. */
p->flip_time = newtime; /* and happy to be here, assign*/
flag =0;
}
else if (p->dr == NULL) { /*only left child exists */
c = p->dl;
if (c->flip_time < newtime){ /* got to swap*/
whereis[c->spin_index] = p;
whereis[p->spin_index] = c;
p->flip_time = c->flip_time;
p->spin_index = c->spin_index;
c->flip_time = newtime;
c->spin_index = spin;
flag = 0; /* can't go deeper than this, last swap done */
}
else {
p->flip_time = newtime; /* happy to be here*/
flag =0;
}
}

if (flag) {
if (p->dl->flip_time < p->dr->flip_time)
c = p->dl;
else c = p->dr;

min =c->flip_time;

if (min < newtime){
whereis[c->spin_index] = p;
whereis[p->spin_index] = c;
p->flip_time = c->flip_time;
p->spin_index = c->spin_index;
c->flip_time = newtime;
c->spin_index = spin;
p = c; /*go deeper*/
}
else{
p->flip_time = newtime; /* happy to be here*/
flag =0;
}
}
} /*end of swap down*/

/* ----- */

```

```

void swap_up(p,newtime)
double newtime;
heapT *p;

{
int spin, flag;
heapT *c;

flag =1;
while (flag) {

spin = p->spin_index; /*save spin conf*/
    c = p->up;
    if ((c == NULL)|| (newtime >= c->flip_time)){ /* we are at the top */
p->flip_time = newtime;
flag =0; }

        else if(newtime < c->flip_time){
whereis[c->spin_index] = p;
whereis[p->spin_index] = c;
p->spin_index = c->spin_index;
p->flip_time = c->flip_time;
c->spin_index = spin;
c->flip_time = newtime;
p = c;

}

}
}
/* ----- */

void reorder_heap(p,newtime)
double newtime;
heapT *p;

{
if(p==NULL) { printf("null pointer!\n"); exit(1);}
else if (newtime < p->flip_time ){
swap_up(p,newtime);
/* printf("swap up terminated \n"); */
}
else {
swap_down(p,newtime);
/*printf("swap down terminated \n");*/ }
}
/* ----- */

void fill_initial_waiting_times_in_heap(offset)
double offset;
/* this fills in the correct initial waiting times*/
{
int i;
double x,newtime;

for(i=0;i<M;i++)
{
x = energy_diff3D(i,spin);
if (x < 0) newtime = - log(drand48());
else newtime = -exp(x*inv_temp)*log(drand48());
reorder_heap(whereis[i],newtime+offset);

}
}

```

```
}
/* ----- */

void extract_shortest_time_in_heap()
/* this fills in the correct initial waiting times*/
{
  int i;
  double newtime;
  newtime = 999999;
  for(i=0;i<M;i++)
  {
    printf(" %f \n", heaptop->flip_time);
    reorder_heap(heaptop,newtime);
  }
}
/* ----- */
```