2.1 Teilprojekt C3

Simulation und Modellierung der Relaxation komplexer Systeme mittels Parallelrechnern

2.1.1 Antragsteller

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

2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann,
Dipl.-Phys. Sven Schubert,
Dr. Peter Blaudeck,
Dr. Thomas Klotz,
Dipl.-Phys. Peter Späth,
Theoretische Physik, insbesondere Computerphysik

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

In diesem Teilprojekt wurde die thermische Relaxation komplexer Systeme untersucht. Beispiele für solche Systeme sind Spingläser, Polymere und strukturelle Gläser, aber auch NP-schwierige Optimierungsprobleme.

Die Besonderheit komplexer Systeme ist, daß sie einen Zustandsraum besitzen, der viele lokale Minima in der Energie aufweist. Zwischen diesen Minima liegen Barrieren, die zur Einstellung eines thermischen Gleichgewichts zu überwinden sind. Wegen der Barrieren dauert dieser Vorgang mit abnehmender Temperatur immer länger. Dies führt dann bei vielen experimentellen Untersuchungen dazu, daß die Systeme im Nichtgleichgewicht sind und folglich Nichtgleichgewichtsphänomene beobachtet werden. Als ein typisches Beispiel seien die in diesem Teilprojekt untersuchten Alterungsphänomene bei Spingläsern [Lund90, Hamm92, Vinc92, Vinc94, Vinc96, Bouc97] genannt.

Stellt man sich den Relaxationsvorgang als thermisch aktivierten Hüpfprozeß im Zustandsraum vor, so besteht die Schwierigkeit bei der Untersuchung der Relaxation darin, daß man dieser experimentell folgen möchte. Die zunächst naheliegende Idee, thermische Größen, wie etwa die spezifische Wärme, zu untersuchen, führt nicht zum Erfolg, zum einen, da sie in dieser Nichtgleichgewichtssituation einer Neudefinition bedürften, zum anderen, weil durch Veränderung der Temperatur der zu untersuchende Prozeß verändert würde. Hier bieten die Spingläser eine zusätzliche Variable, nämlich die Magnetisierung, als Sonde an.

Ein Beispiel für die so möglichen Experimente sind die oben genannten Alterungsphänomene bei den Spingläsern. Dabei zeigt der Response auf ein äußeres Magnetfeld eine deutliche Abhängigkeit von der Wartezeit seit Abkühlung unter die Spinglastemperatur.

Ausgehend von einem (klassischen) Spinglashamiltonian sind nun mehrere Schritte bis zur theoretischen Vorhersage solcher Responseeigenschaften zu gehen. Am Anfang steht die Analyse der Zustandsraumstruktur des Systems. Bei der dann folgenden Modellierung dieser Strukturen hat es sich gezeigt, daß Fraktale und Baumstrukturen eine gute Basis bilden. Hierbei wird das wesentliche Moment der Relaxation, nämlich das Überwinden energetischer (aber auch entropischer) Barrieren, gut erfaßt [Palm82]. Die Dynamik solcher Modelle wird im Rahmen einer Mastergleichung beschrieben. Zusammen mit einer Modellierung der magnetischen Eigenschaften kann dann eine Berechnung von Responsefunktionen erfolgen.

2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

Die Forschungsarbeiten lassen sich in drei Teilprojekte gliedern, zwischen denen eine enge thematische Verknüpfung besteht.

Zunächst wurden Methoden entwickelt, die durch die Katalogisierung von Zuständen die Zustandsraumstruktur des Spinglases charakterisieren (Teilaufgabe 1).

Bei der Modellierung von Zustandsraumstrukturen als Grundlage für die thermischen Relaxation wurde dann von zwei Seiten vorgegangen. Startpunkt waren zum einen die in der ersten Teilaufgabe gewonnenen Daten über den Zustandsraum. Diese enthalten sehr detaillierte Informationen, die aber durch ihre Menge die Simulation einer Dynamik unmöglich machen. Daher wurde in diesem Zugang (Teilaufgabe 2) der Zustandsraum durch eine geeignete Vergröberung auf die für die Dynamik relevanten Eigenschaften reduziert.

Zum anderen wurde eine heuristische Modellbildung, die bereits bei der Modellierung von Alterungsphänomenen recht erfolgreich war, verfeinert. Um weitere Effekte, wie die Reinitialisierung der Relaxation durch Temperaturveränderungen reproduzieren zu können, mußten diese bereits sehr abstrakten Modelle durch Einführung weiterer Modellparameter erweitert werden (Teilaufgabe 3).

2.3.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur

Zunächst wurde die Zustandsraumstruktur eines kubischen Ising-Spinglases mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung untersucht. Dabei wurden die Wechselwirkungskonstanten gleichverteilt gewählt. Das Fehlen der großen Beiträge gegenüber dem Gaußschen Spinglas [Siba93, Siba94] ergibt eine glattere Energiefunktion, für die dann auch die weiteren Analysen einfacher werden. Zugleich fallen gegenüber dem in den Kobeschen Arbeiten [Klot94a, Klot94b, Klot96] verwendeten $\pm I$–Modell die Entartungen in den Wechselwirkungstermen fort, so daß auch hierdurch eine glattere Energiefunktion entsteht.

Zur Analyse der Zustandsraumstruktur wurden im wesentlichen zwei Algorithmen verwandt. Es wurden einerseits in der Umgebung eines lokalen Minimums der Energie die Zustände katalogisiert. Hierzu wurde ein Verfahren parallel implementiert, bei dem - ähnlich einem umgekehrten Sintflut-Algorithmus - das System zunächst in einem kleinen Teil des Zustandsraums „gefangen" ist. Während des Hüpfens von Zustand zu Zustand werden neu gefundene in eine Liste der besuchten Zustände aufgenommen. Später wird der zugelassene Bereich dann erweitert.

In einem weiteren Ansatz wurden alle Zustände unterhalb einer vorgegebenen Abschneideenergie mittels eines rekursiven Branch-and-Bound Algorithmusses ermittelt. Dazu war das Branch-and-Bound Verfahren dem speziellen Problem anzupassen und ein paralleler Algorithmus zu erstellen, der aufgrund der hierarchischen Organisation der Herangehensweise sehr effizient gestaltet werden kann.

Im Unterschied zu der vorhergehenden Herangehensweise erhält man mittels Branch-and-Bound auch Bereiche des Zustandsraumes, die durch Energiebarrieren, die höher als die Abschneideenergie sind, vom übrigen Zustandsraum abgetrennt sind. Dies bedeutet, daß die globale Zustandsdichte des Systems zugänglich ist, während umgekehrte Sintflutalgorithmen die Zustandsdichte in einem lokalen Minimum widerspiegeln. Beide Informationen geben einen Einblick in die Zustandsraumstruktur und sind somit Voraussetzung für eine realistische Modellbildung.

2.3.2 Teilaufgabe Modellierung vereinfachter Zustandsraumstrukturen

Da die Anzahl der Zustände sehr schnell mit der Abschneideenergie anwächst, ist für die Abdeckung eines hinreichend großen Energiebereiches die Bearbeitung sehr großer Datenmengen notwendig, was den Einsatz höchst effizienter, paralleler Implementierungen voraussetzt. Desweiteren muß die Datenmenge auf ein Maß reduziert werden, das für die Lösung des Eigenwertproblems der Mastergleichung gerade noch zugänglich ist. Dazu wurden verschiedene Parallelalgorithmen zur automatischen Vergröberung (coarse graining) der Zustandsraumstruktur erstellt und deren Vor- und Nachteile verglichen. Eine Vergröberung wird in diesem Zusammenhang dadurch erreicht, daß Gruppen von Zuständen zu Clustern zusammengefaßt werden. Dabei spielt das Konzept der Bildung lokaler Gleichgewichte eine wichtige Rolle.

Neben der Zustandsraumstruktur selbst mußte auch die Dynamik des Systems vergröbert werden, d.h. die effektiven Übergangsraten zwischen den Clustern mußten aus der mikroskopischen Dynamik bestimmt werden. Dabei standen verschiedene Möglichkeiten einer Modellierung zur Auswahl. Durch die Überprüfung, ob die ursprüngliche Struktur in ihrer Dynamik mit der vergröberten übereinstimmt, konnte eine Aussage zur Qualität der verschiedene Modelle getroffen werden.

Als eine zur parallelen Implementierung der Eigenwert- und Eigenvektorroutinen alternative Vorgehensweise wurde eine Methode untersucht, die sich auf die iterative Multiplikation der Übergangsmatrix stützt, die sich besonders vorteilhaft parallelisieren läßt.

2.3.3 Teilaufgabe Modellbildung für Aging-Experimente

Routinen zur Lösung der Mastergleichungsdynamik kamen auch bei der abstrakteren Modellbildung für Aging-Experimente durch hierarchische Baumstrukturen zur Anwendung. Hier wurde ausgehend von den vorhandenen, von uns entwickelten Modellen [Siba89, Hoff90, Schu91] eine neue Modellklasse studiert, bei der in die Übergangsraten zwischen den Knoten des Modells verschiedene Zeitskalen eingebaut wurden.

In der hier benutzten Mastergleichungsbeschreibung legt die detaillerte Balance im Gleichgewicht ja nur das Verhältnis von Übergangsraten fest, die verbleibenden Freiheiten wurden genutzt, um so möglichst viele Spinglasexperimente reproduzieren zu können. Hierzu mußte mit verschiedenen Parametersätzen eine große Anzahl von Lösungen der Mastergleichung bestimmt werden, die dann im Zusammenhang mit den ebenfalls zu modifizierenden magnetischen Überlappfunktionen den Response auf das äußere Magnetfeld ergab. Bei der Überlappfunktion wurden insbesondere auch ultrametrische untersucht, die möglicherweise als Ausgangspunkt für eine analytische Beschreibung dienen.

Die Bestimmung der besten Parameter erforderte eine Vielzahl von Rechnungen. Bei der Wahl der Parameter gingen natürlich auch Erfahrungen ein, die bei der Untersuchung realer Zustandsräume von Spinglashamiltonians gemacht wurden.

Literatur zu 2.4/(eigene Veröffentlichungen im Berichtszeitraum)

[Palm82] R. G. Palmer, Adv. Phys. **31**, 669 (1982).

[Siba89] P. Sibani and K. H. Hoffmann, Hierarchical models for aging and relaxation of spin glasses, Phys. Rev. Lett. **63**, 2853 (1989).

[Lund90] L. Lundgren, in: Relaxation in Complex Systems and Related Topics, I. A. Campbell and C. Giovannella ed. (Plenum Press, New York, N.Y., 1990)

[Hoff90] K. H. Hoffmann and P. Sibani, Relaxation and aging in spin glasses and other complex systems, Z. Phys. B **80**, 429 (1990).

[Schu91] C. Schulze, K. H. Hoffmann and P. Sibani, Aging phenomena in complex systems: a hierachical model for temperature step experiments, Europhys. Lett. **15**, 361 (1991).

[Hamm92] J. Hammann, M. Lederman, M. Ocio, R. Orbach and E. Vincent, Spin glass dynamics. Relation between theory and experiment: a beginning, Physica A **185**, 278 (1992)

[Vinc92] E. Vincent, J. Hammann and M. Ocio, in: Recent Progress in Random Magnets, D. H. Ryan ed., World Scientific, Singapore (1992)

[Siba93] P. Sibani, C. Schön, P. Salamon and J.-O. Andersson, Emergent hierarchical structures in complex system dynamics, Europhys. Lett. **22**, 479 (1993).

[Klot94a] T. Klotz and S. Kobe, Exact low-energy landscape and relaxation phenomena in Ising spin glasses, Acta Physica Slovaca **44**, 347 (1994).

[Klot94b] T. Klotz and S. Kobe, 'Valley structures' in the phase space of a finite 3D Ising spin glass with $\pm I$ interactions, J. Phys. A: Math. Gen **27**, L95 (1994).

[Siba94] P. Sibani and P. Schriver, Phys. Rev. B **49**, 6667 (1994)

[Siba94] P. Sibani and J.-O. Andersson, Excitation morphology of short range Ising spin glasses, Physica A **206**, 1 (1994)

[Vinc94] E. Vincent, J. P. Bouchaud, J. Hammann and F. Lefloch, Proceedings of the 5th Int. Woorkshop of Disordered Systems, Analdo, Feb. 27 – March 3, 1994, to be published in Phil. Mag.

[Vinc96] E. Vincent, J. Hammann, M. Ocio, J.P. Bouchaud, and L.F. Cugliandolo, Slow dynamics and aging, M. Rubi ed., Sitges Conference on Glassy Systems 1996 (Spinger-Verlag)

[Klot96] Klotz T., and Kobe S., in: Hayashibara Forum '95, International Symposium on Coherent Approaches to Fluctuations, Suzuki M., and Kawashima N. ed., (World Scientific, Singapore 1996) p.192-195

[Bouc97] J.P. Bouchaud, L.F. Cugliandolo, J. Kurchan, and M. Mezard, Preprint (1997, cond-mat/9702070).

[Scho97] J.C. Schön, J. Phys. A: Math. Gen. **30** 2367 (1997)

[Siba97] P. Sibani, Local state space geometry and thermal metastability in complex landscapes: the spin-glass case, preprint

2.4 Ergebnisse

2.4.1 Teilaufgabe Zustandsraumstruktur

Als ein repräsentatives Beispiel für ein komplexes System wurde die Zustandsraumstruktur eines kubischen Ising-Spinglases mit Nächster-Nachbar-Wechselwirkung untersucht. Bei der Analyse kamen parallel implementierte Branch-and-Bound Algorithmen zum Einsatz. Diese erlauben es, neben dem Grundzustand eines Spinglases auch alle Zustände, die unterhalb einer gewissen Abschneideenergie liegen zu bestimmen. Aus diesen Daten kann dann die Zustandsdichte in der Nähe des globalen Minimums unmittelbar gewonnen werden.

In dem betrachteten Spinglas Modell befinden sich alle Ising-Spins, die nur die Werte plus und minus eins annehmen können, auf einem translationsinvarianten Gitter. Zwischen zwei auf diesem Gitter benachbarten Spins s_i und s_j existiert eine Wechselwirkung, die durch die entsprechende Wechselwirkungskonstante J_{ij} beschrieben wird. Diese sind zufällig gewählt. Für eine konkrete Realisierung eines Spinglases (bzw. eines Modells für ein solches) sind diese Wechselwirkungskonstanten unveränderlich und bekannt. Diese Kenntnis wird in dem im folgenden kurz beschriebenen Branch-and-Bound Algorithmus gezielt ausgenutzt.

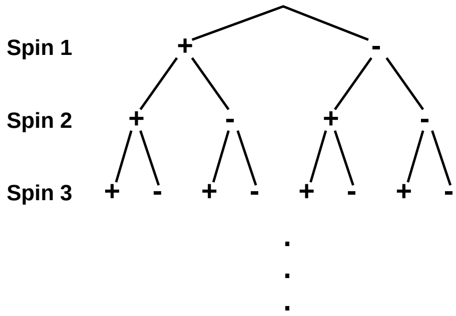

Abbildung 2.1: Konfigurationsbaum

Die Energie einer bestimmten Spin-Konfiguration ergibt sich aus dem Hamiltonian

$$H = - \sum_{<i,j>} J_{ij} \; s_i \; s_j \; , \tag{2.1}$$

wobei über alle Paare benachbarter Spins zu summieren ist. Das Ziel ist es nun, den Grundzustand des Systems, d.h. die Spin-Konfiguration mit der niedrigsten Energie, und, gegebenenfalls, alle Konfigurationen mit einer Energie, die kleiner ist als die Grundzustandsenergie plus einer Abschneideenergie, zu finden.

Dazu betrachten wir vorerst ein System mit nur einem Spin s_1. Da hier Ising-Spins betrachtet werden hat dieses System nur zwei Zustände, beide mit der Energie Null, da noch keine Wechselwirkungsterme existieren. Betrachten wir einen weiteren Spin, also ein zwei-Spin-System, so existieren vier Zustände, wobei jeder eine bestimmte Energie besitzt. Bei Hinzunahme von noch mehr Spins verdoppelt sich jedes mal die Anzahl der Zustände.

Dieser Umstand kann anhand eines sogenannten Konfigurationsbaumes (siehe dazu Fig. 2.1) verdeutlicht werden. Im obersten Niveau existiert nur ein Spin und folglich zwei Zustände, plus und minus eins. Wird ein weiterer Spin betrachtet, so spaltet jeder der beiden Zustände auf, je nach der Orientierung des zweiten Spins.

Jede Konfiguration bzw. jeder Knoten in dieser Baumstruktur besitzt eine bestimmte Energie. Dabei ist bekannt, welche Terme in (2.1) bereits berücksichtigt wurden, und welche der durch die Nichtexistenz der restlichen Spins noch unberücksichtigten Terme noch in die Summe eingehen werden, wenn man zu einem vollständigen System übergeht.

Nimmt man nun an, daß all diese Terme mit einem in unserem Sinne günstigen Vorzeichen in die Summe eingehen, so läßt sich eine untere Schranke für die Energie aller Konfigurationen unterhalb des gerade betrachteten Knotens im Konfigurationsbaum angeben. Ist nun bereits ein (mehr oder weniger) gutes Minimum bekannt, und liegt die untere Schranke über der Energie dieses Minimums (plus gegebenenfalls der Abschneideenergie), so brauchen alle Zustände unterhalb des gerade betrachteten Knotens im Konfigurationsbaum nicht mehr betrachtet zu werden.

Dieses Ausblenden ganzer Unterbäume im Konfigurationsbaum ist sehr effizient. So können Systeme mit 64 Spins mit mehr als 10^{19} Zuständen bearbeitet werden. Die parallele Implementierung gestaltet sich besonders effektiv, da einzelne Prozessoren

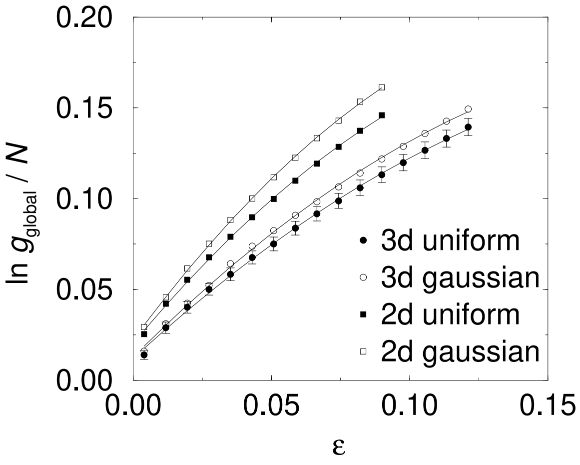

Abbildung 2.2: Globale Zustandsdichte $g_{\text{global}}(\varepsilon)$ für $2d$ (Quadrate) und $3d$ (Kreise) Systeme mit Gleichverteilung (volle Symbole) bzw. Gaußverteilung (offene Symbole) der Wechselwirkungskonstanten gemittelt über verschiedene Realisierungen. Die durchgezogenen Linien sind quadratische Fits.

verschiedene Unterbäume bearbeiten können. Die Energie des aktuellen Minimums ist dabei die einzige Größe, die zwischen den Prozessen ausgetauscht werden muß.

Die globale Zustandsdichte $g_{\text{global}}(\varepsilon)$ ist hier definiert als die Anzahl von Zuständen mit einer Energie ε pro Spin über dem Grundzustand. In Fig. 2.2 ist der Logarithmus der Zustandsdichte (je Spin) für zwei- und drei-dimensionale Systeme mit Gauß-verteilten bzw. gleichverteilten Wechselwirkungen dargestellt. Die Ergebnisse wurden über 20 Realisierungen der Gaußschen Wechselwirkungen bzw. über 50 Realisierungen der gleichverteilten Wechselwirkungen gemittelt.

Die Zustandsdichte ist für $2d$ Systeme wesentlich höher als die von $3d$ Systemen. Das ist offensichtlich eine Folge der verschiedenen Koordinationszahlen, wie man anhand von Fig. 2.3 sehen kann. Dort ist die Zustandsdichte über die Energie pro Wechselwirkung aufgetragen.

Um die funktionelle Abhängigkeit des Logarithmus der Zustandsdichte von der Energie zu ermitteln wurden die Daten gefittet. Als Ansatz wurden eine quadratische bzw. eine Potenzfunktion gewählt. So konnte gezeigt werden, daß die globale Zustandsdichte für beide Verteilungen der Wechselwirkungskonstanten unterexponentiell anwachsen. Diese Ergebnisse wurden in [Klot97a] veröffentlicht. Ganz wichtig für die Diskussion der Zustandsräume war das unterexponentielle Wachstum der Zustandsdichte. Es konnte gezeigt werden, daß – im Gegensatz zu der z.B. bei einem Workshop 1996 in Telluride vertretenen Meinung [Siba94, Scho97, Siba97] – die Zustandsdichte nicht exponentiell zunimmt. Das eröffnet eine Reihe von Fragen, insbesondere ob das beobachtete Verhalten eine spezifische Eigenschaft des $\pm J$-Modells ist. Dabei ist die Frage, ob die Zustandsdichte exponentiell anwächst oder nicht auch von Bedeutung für das Simulated Annealing Verfahren (Teilprojekt C4), da hiervon die Wahl der optimalen Abkühlfunktion abhängt. Wir haben die Diskussion der unterexponentiell ansteigenden Zustandsdichte bei einem Workshop 1997 in Telluride und bei einem Symposium hier in Chemnitz fortgesetzt, mit

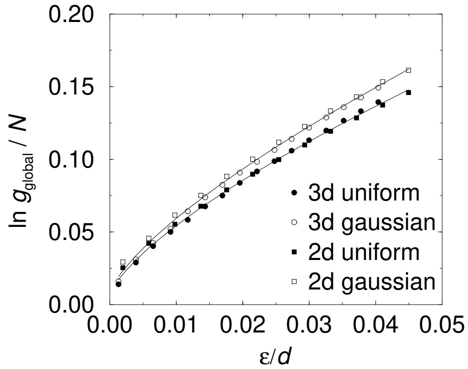

Abbildung 2.3: Globale Zustandsdichte g_{global} als Funktion von Energie je Wechselwirkung für $2d$ (Quadrate) und $3d$ (Kreise) Systeme mit Gleichverteilung (volle Symbole) bzw. Gaußverteilung (offene Symbole) der Wechselwirkungskonstanten gemittelt über verschiedene Realisierungen. Bei den durchgezogenen Linien wurden die Daten für den Logarithmus der Zustandsdichte an ein Potenzgesetz gefittet.

dem Ergebnis, daß dringend weitere Modelle untersucht werden sollten.

2.4.2 Teilaufgabe Modellierung vereinfachter Zustandsraumstrukturen

Einen tieferen Einblick in die Zustandsraumstruktur ergab die Auswertung verschiedener Vergröberungsalgorithmen. Das Ziel der Vergröberung war es, bestimmte Mengen von (mikroskopischen) Zuständen im Zustandsraum zu vergröberten Zuständen (Clustern) zusammenzufassen. Im vergröberten Bild wird dann die innere Struktur der Cluster vernachlässigt. Dadurch wird die Systemgröße drastisch reduziert und somit die Berechnung einer Dynamik ermöglicht.

Damit die vergröberte Dynamik für große Zeiten eine gute Näherung für die ursprüngliche ist, soll die Relaxation im Inneren eines Clusters schnell im Vergleich zur Relaxation zwischen verschiedenen Clustern sein. Dieses Verhalten garantiert, daß im interessanten Zeitbereich alle Zustände in einem Cluster im lokalen Gleichgewicht sind. Im Grenzfall sehr niedriger Temperaturen bedeutet das jedoch, daß ein Cluster keine Energiebarrieren enthalten darf, da diese im Grenzfall $T \to 0$ zu divergierenden Relaxationszeiten führen würden.

Ein von uns im Rahmen dieses Teilprojektes entwickelter Algorithmus, der Cluster ohne innere Energiebarrieren erzeugt, wird ausführlich in [Klot97b] beschrieben. Dabei werden die Zustände in der Reihenfolge aufsteigender Energie betrachtet und ihre Nachbarschaftsbeziehung zu allen Zuständen mit geringerer Energie ermittelt. Wird ein lokales Minimum oder eine Energiebarriere erkannt, so wird ein neuer Cluster erzeugt, dem dann weitere Zustände zugeordnet werden, sofern diese dem Cluster direkt benachbart sind.

In Abbildung 2.4 ist die Anzahl mikroskopischer Zustände und die Anzahl der so vergröberten Zustände mit einer Energie kleiner als $E - E_0$ dargestellt, wobei E die Energie der Zustandes und E_0 die Grundzustandsenergie des Systems ist. Im

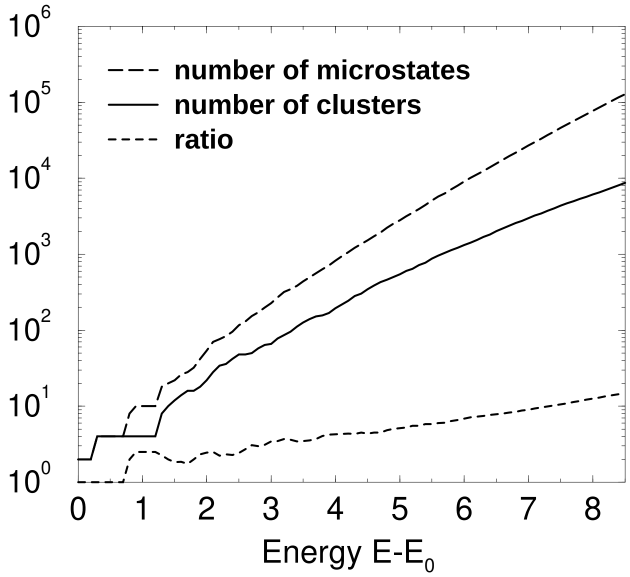

Abbildung 2.4: Anzahl mikroskopischer Zustände mit einer Energie kleiner als $E - E_0$ (gestrichelt) und die Anzahl der Cluster mit einer Startenergie unterhalb $E - E_0$ (durchgezogen). Die gepunktete Kurve zeigt das Verhältnis der beiden Kurven.

betrachteten Energiebereich wächst die Anzahl der vergröberten Zustände deutlich langsamer als die der mikroskopischen Zustände. Wie sich anhand der gepunkteten Kurve erkennen läßt, steigt die mittlere Anzahl von mikroskopischen Zuständen, die in einem Cluster zusammengefaßt werden, exponentiell an. Folglich wird der Algorithmus mit anwachsender Systemgröße immer effizienter.

Somit konnte erstmals ein automatischer Vergröberungsalgorithmus realisiert werden, der den hochdimensionalen Phasenraum eines komplexen Systems auf eine vereinfachte Struktur abbildet. Diese Tatsache eröffnet die Möglichkeit, in der weiteren Forschung eine Simulation langsamer Relaxation auf Basis einer Struktur zu erstellen, die sich direkt aus dem Zustandraum ableitet. Bisherige Arbeiten stützten sich bisher stets auf heuristische Modellstrukturen. Eine genauere Analyse der Cluster zeigt jedoch, daß diese eine große energetische Ausdehnung haben. Da dieser Umstand die Genauigkeit der Dynamik negativ beeinflußt, sind weitere Forschungsarbeiten zur Verbesserung des Vergröberungsalgorithmusses geplant.

Der Vergröberungsalgorithmus stellt zudem einen wichtigen Zugang zu einer Visualisierung des Zustandsraumes dar. Die Darstellung kleiner vergröberter Systeme vermittelte bereits erste Erfahrungen zur Anordnung von Energiebarrieren in der Umgebung lokaler Minima. Die graphische Aufbereitung größerer Systeme könnte dann den Beweis für die Existenz hierarchischer Strukturen im Zustandsraum von Spingläsern erbringen.

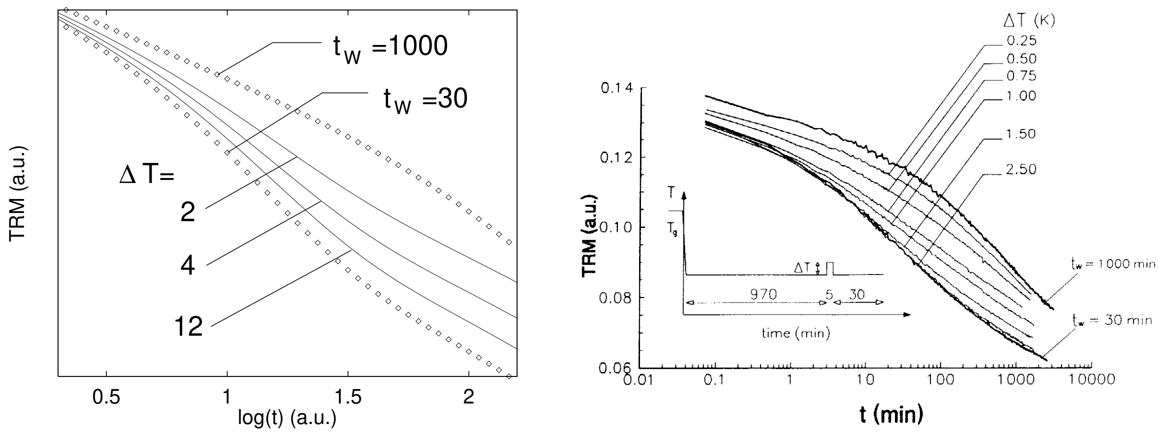

Abbildung 2.5: Die Ergebnisse des Modells für die Thermoremanente Magnetisierung mit einer kurzzeitigen Temperaturerhöhung (links) im Vergleich mit den experimentellen Daten (rechts). Mit steigendem ΔT nähern sich die Kurven der Referenz für $t_w = 30\ min$.

2.4.3 Teilaufgabe Modellbildung für Aging-Experimente

Bei diesem Teilprojekt stand die Weiterentwicklung der heuristischen Modellierung der Spinglasdynamik auf einer hierarchischen Baumstruktur im Mittelpunkt. Es sollte untersucht werden, ob durch eine geeignete Modellierung die Ergebnisse von T(hermo) R(emanent) M(agnetization) Experimenten mit einer Temperaturänderung in der Wartezeitphase reproduziert werden können.

Bei TRM-Experimenten wird ein Spinglas unter dem Einfluß eines äußeren magnetischen Feldes unter seine Glastemperatur abgekühlt. Nach einer Wartezeit $t_{\rm w}$ wird das Magnetfeld ausgeschaltet und der Verlauf der Magnetisierung des Spinglases gemessen. Bei den hier betrachteten Experimenten wurde während der Wartezeit die Temperatur für eine bestimmte Zeit um ΔT erhöht und danach wieder auf den ursprünglichen Wert eingestellt.

In Abb. 2.5 rechts sind die Ergebnisse eines solchen Experimentes nach [Vinc92] dargestellt. Nach einer relativ langen Wartezeit von 970 min wurde die Probe für 5 min von 12 K um ΔT erwärmt und danach wieder auf 12 K abgekühlt. Nach einer weiteren Wartezeit von 30 min wurde das Magnetfeld abgeschaltet und der Verlauf der Magnetisierung gemessen. Es wurden Werte für ΔT im Bereich 0.25 bis 2.5 K untersucht, sodaß in jedem Fall die Temperatur während der Temperaturerhöhung kleiner als die Glastemperatur (T_g=16.7 K) geblieben ist.

Die fettgezeichneten Kurven in Abb. 2.5 rechts sind Referenzkurven von Messungen ohne Temperaturänderung mit Wartezeiten von 30 min bzw. 1000 min. Diese beiden Kurven stehen gewissermaßen für die Grenzfälle $\Delta T \rightarrow 0$ (keine Temperaturänderung) und $\Delta T \rightarrow \infty$ (zweite Abkühlung von oberhalb T_g). Die dünnen Kurven stellen die Meßergebnisse für verschiedene ΔT dar. Das bemerkenswerte Ergebnis dieser Messungen ist nun, daß sich die Kurve für ΔT=2.5 K sehr stark der Referenzkurve für t_w=30 min annähert. Es wird ein scheinbares Alter von 30 min festgestellt. Das Spinglas verhält sich, als hätte eine Reinitialisierung der Relaxation stattgefunden.

In ersten Arbeiten zur Modellierung von Spinglasexperimenten mittels hierarchi-

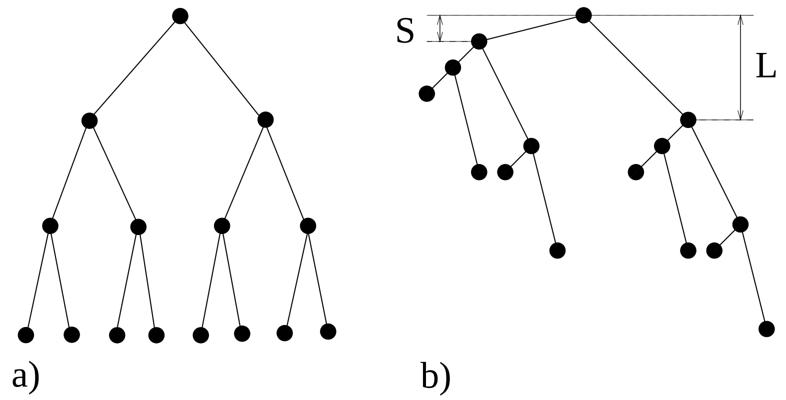

Abbildung 2.6: (a) zeigt eine Baumstruktur, bei der alle Paare verbundener Knoten eine einheitliche Energiedifferenz besitzen, es tritt eine starke Entartung auf; (b) zeigt einen L-S-Baum mit verschiedenen Energiedifferenzen der beide Tochterknoten.

scher Baumstrukturen wurde der Einfachheit halber ein stark entarteter Baum betrachtet, bei dem alle Paare benachbarter Knoten die gleiche Energiedifferenz besitzen (Fig. 2.6 a). Anhand dieses Modells konnten bereits einfache Alterungsphänomene nachgewiesen werden, jedoch war es nicht in der Lage, Effekte zu simulieren, die durch eine Temperaturänderung hervorgerufen wurden.

Deshalb wurde hier ein sogenannter L-S-Baum verwendet (Abb. 2.6 b). In diesem Modell besitzt jeder Knoten zwei Tochterknoten mit unterschiedlichen Energiedifferenzen. Die L(ong)-Tochter hat einen energetischen Unterschied zu ihrem Mutterknoten von L und die S(hort)- Tochter hat einen energetischen Unterschied von $S < L$.

Die Dynamik der thermischen Relaxation dieses Systems wird durch eine Mastergleichung beschrieben. Aus dem Gesetz der detaillierten Balance im Gleichgewicht und der Gleichgewichtsverteilung, die hier eine Boltzmannverteilung sein soll, ergibt sich das Verhältnis der Übergangsraten entlang einer Verbindung. Unter Berücksichtigung dessen wählen wir

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{up}} &= s^i \kappa^i e^{-\beta i} \\ \Gamma_{\text{down}} &= s^i \quad . \end{aligned} \tag{2.2}$$

Der Index i steht dabei für die Energiedifferenzen L bzw. S. Der Faktor κ^i ist das Verhältnis der Entartungsfaktoren der beiden Knoten einer Verbindung. Ausgehend von dem in der ersten Teilaufgabe gefundenen exponentiellen Anstieg der Zustandsdichte wurden diese Faktoren derart gewählt, daß dieses Verhalten im Modell reproduziert wird.

Da nur das Verhältnis der Übergangsraten durch die oben genannten Bedingungen festgelegt ist, bleibt noch ein Freiheitsgrad. Daher wurde ein weiterer Parameter s^i eingeführt, der keinen Einfluß auf die Gleichgewichtsverteilung besitzt, jedoch die Geschwindigkeit der Relaxation entlang einer Verbindung steuert. Diese Faktoren werden für die L-Verbindungen kleiner gewählt als für S-Verbindungen. Dies führt zu schnellen Relaxationsmoden, die durch eine Temperaturänderung angeregt werden und somit ein bereits eingestelltes lokales Gleichgewicht zerstören können.

Durch eine geeignete Modellierung der magnetischen Eigenschaften können dann

Responsefunktionen berechnet werden. Aus diesen Überlegungen ist in Zusammenarbeit mit P. Sibani (Odense Universitet) eine Arbeit zu Responsefunktionen in Energielandschaften mit vielen lokalen Minima in [Siba97] entstanden.

Um einen Vergleich mit den experimentellen Untersuchungen zu ermöglichen, wurde bei der Modellierung der gleiche Zeitablauf wie bei den Experimenten verwandt (siehe Abb. 2.5 rechts). Wie im Experiment nähern sich mit zunehmender Temperaturänderung unsere Modellkurven der Referenzkurve für t_w=30 min an (Abbildung 2.5 links) . Der Effekt der Relaxation vor und während der Temperaturerhöhung wird also vermindert und schließlich ausgelöscht. Somit konnten wir erstmals nachweisen, daß durch eine geeignete Modellierung der Relaxationsdynamik auch Reinitialisierungseffekte durch hierarchische Modelle reproduziert werden können [Hoff97a, Hoff96].

Bei einem Symposium mit dem Titel „Spin Glasses: Experiments and Modells", das im Rahmen des SFB 393 im März 1998 in Chemnitz stattfand, konnten wir unsere neuen Ergebnisse vorstellen, aber auch einen Überblick über die neuesten experimentellen Untersuchungen gewinnen. Die Weiterentwicklung unserer heuristischen Modelle unter Einbeziehung der neuen Erkenntnisse ist geplant.

Im Zusammenhang mit den hierarchischen Modellen wurde auch eine Zusammenarbeit mit C. Essex (University of Western Ontario) begonnen, bei der die Modellierung anomalen Relaxationsverhaltens mittels fraktaler Differentialgleichungen bearbeitet wird. Eine erste Veröffentlichung ist bereits eingereicht [Hoff97b].

Literatur zu 2.4/(eigene Veröffentlichungen im Berichtszeitraum)

Eigene, referierte Publikationen

[Hoff96] K. H. Hoffmann, Metastable Systems and Stochastic Optimization in Computational Physics, Springer-Verlag Heidelberg 1996.

[Hoff97a] K.H. Hoffmann, S. Schubert, and P. Sibani, Europhys. Lett. **38** (8), 613 (1997)

[Siba97] P. Sibani and K.H. Hoffmann, Physica A 234, 751 (1997)

Zur Publikation eingereicht

[Klot97a] T. Klotz, S. Schubert, and K.H. Hoffmann, The state space of short-range Ising spin glasses: the density of states, accepted for publication in European Physical Journal B

[Hoff97b] K.H. Hoffmann, C. Essex, and C. Schulzky, Fractional diffusion and entropy production, submitted for publication in Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics

[Klot97b] T. Klotz, S. Schubert, and K.H. Hoffmann, Coarse graining of a spin-glass state space, submitted for publication in J. Phys.: Cond. Mat.

[Klot97c] T. Klotz, S. Schubert, and K.H. Hoffmann, Qualitative analysis of the state-space structure in a short-range Ising spin glass, submitted for publication in Revista Mexicana de Fisica

2.5 Offene Fragen/Ausblick

Die bisherigen Ergebnisse des automatischen Vergröberungsalgorithmusses machen Systeme mit etwa 10^5 mikroskopischen Zuständen einer Simulation der Relaxationsdynamik zugänglich. In Zukunft werden noch größere Vergröberungsraten angestrebt. Ein möglicher Zugang zur Lösung dieses Problems ist die Vernachlässigung kleiner Energiebarrieren. Diese führen bei $T > 0$ zu typischen Relaxationszeiten, in denen sich noch kein lokales Gleichgewicht innerhalb der Cluster eingestellt hat, ein Bereich für den das Modell von vornherein nicht ausgelegt ist. Offen ist hier die Frage, wie sich diese Relaxationszeiten aus den Strukturinformationen des Systems ableiten lassen.

Die vergröberten Strukturen sind, neben den heuristischen Modellen, eine weitere Grundlage für die Simulation der Relaxation, in deren Ergebnis die Reproduktion experimenteller Befunde angestrebt wird. Auf diese Weise sollen die Mechanismen, die zu Nichtgleichgewichtsphänomenen führen, erkannt bzw. besser verstanden werden.

Es ist geplant, die hier durchgeführten Arbeiten zur Zustandsdichte von Spingläsern mit gleichverteilten Wechselwirkungen auch auf andere Systeme auszuweiten. Insbesondere wird auch ein Vergleich zu den von C. Schön im Rahmen vom SFB 408 durchgeführten Arbeiten angestrebt.

Bei einem Arbeitsbesuch in einem französischen Labor (E. Vincent, J. Hammann), in dem Alterungsexperimente durchgeführt werden, wurde erneut ganz deutlich, daß die Messungen der ac-Suszeptibilitäten in einem magnetischem Wechselfeld in den aktuellen Experimenten eine immer zentralere Rolle einnehmen. Die Aufnahme dieser Größe in die Modellbildung ist daher dringend erforderlich. Dabei ist der Zusammenhang mit der Responsfunktion aufgrund der Nichtgleichgewichtssituation noch zu klären.