Statistische Mechanik ungeordneter Systeme, SoSe 2005

Timo Aspelmeier, Alexander K. Hartmann, Universität Göttingen

7. Juli 2005

Seminartermin nächste Woche Mi oder Do 16:15?

12 Zufallsfeldsysteme

12.1 Modell

Random-field Ising magnet (RFIM): $n = L^d$ Ising spins $\sigma = \pm 1$ auf (einfachem) Gitter:

$$H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J\sigma_i\sigma_j - \sum_i B_i\sigma_i \tag{1}$$

Ferromagnetische NN WW $J > 0$. Eingefrorene Unordnung: lokale Felder, z.B. $\pm h$, oder Gauß-verteilt.

$$p_\pm(B) = 0.5\delta(B-h) + 0.5\delta(B+h) \tag{2}$$

$$p_G(B) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h^2}} \exp\left(-\frac{B^2}{2h^2}\right) \tag{3}$$

Vermutung: Experimentelle Realisierung: Verdünnte Antiferromagnete im äußeren Feld. (noch unbewiesen, viele Eigenschaften stimmen aber überein)

Frage: Gibt es eine geordnete (ferromagnetische) Phase für h klein und T klein?.
Heuristisches Imry-Ma Argument [1], $d =$ Dimension des Gitters:

1. Gehe von Ferromagnetischen Zustand $\sigma_i = 1\,\forall i$ aus.
2. Betrachte Domände D mit Radius R von invertierten Spins (Abb. 1)
3. Energieänderung: $\Delta E = H\left(\{\sigma_i = -1 | i \in D\} \cup \{\sigma_i = 1 | i \notin D\}\right) - H\left(\{\sigma_i = 1\}\right)$
   a) Rand der Domände: Länge $R^{d-1} \to$ Energieerhöhung

$$\Delta E_{\partial D} = 2 \sum_{\langle i,j \rangle, i \in D, j \notin D} J \times 1 \times 1 = 2JR^{d-1} \tag{4}$$

   b) Innere der Domände: $\Delta E_D = 2\sum_{i \in D} B_i \times 1 =$ Summe von R^d *unabhängigen* Zufallszahlen $\to$ typischer Wert

$$\Delta E_D^{\text{typ}} = \sqrt{\overline{\overline{(\sum_{i \in D} B_i)^2}}} \sim 2hR^{d/2}\,, \tag{5}$$

   kann negativ sein (Energiegewinn)

   Bilanz:

$$\Delta E = \Delta E_{\partial D} - \Delta E_D^{\text{typ}} = 2JR^{d-1} - 2hR^{d/2} < 0 \text{ für } d < 2 \tag{6}$$

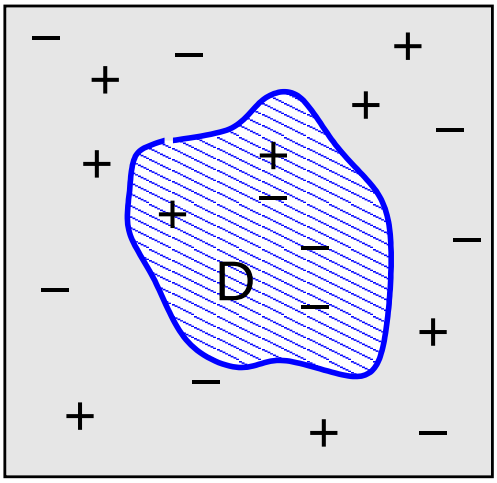
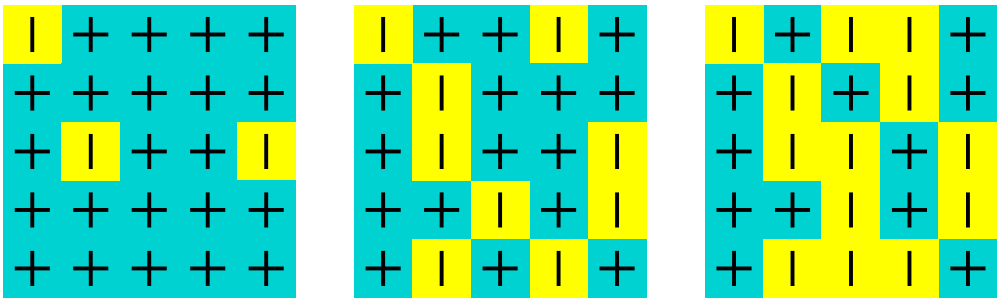


Abbildung 1: Imry-Ma Argument: Das System is Ferromagnetisch geordnet. Eine Domäne von Spins wird umgedreht. Die + und − Symbole symbolisieren einige Zufallsfelder.

Domänen könnten aber auch beliebige (fraktale) Formen haben, d.h. Volumen $D \sim R^{d_V}$, Rand $\partial D \sim R^{d_R} \rightarrow$ Argument nicht exakt.
Tatsächlich aber analytisch bewiesen: $d = 2$-dim RFIM: Geordnete Phase nur für $h = 0$ [2].
$d \geq 3$: Geordnete ferromagnetische Phase für kleine h und kleine Temperaturen T.[3]

Betrachte $d = 3$, $T = 0$ (Grundzustand):
h klein: Ferromagnet
h groß: $\sigma_i = \mathrm{sgn}(h_i)$ (Paramagnet im Feld)
$\rightarrow$ Phasenübergang bei $h = h_c$?



$h \approx 0$ $\quad$ $h \leq h_c$ $\quad$ $h > h_c$

Analytische Lösung von (1) auf d-dim bisher nicht möglich, nur für mean-field Modell [4, 5]
$\rightarrow$ Phasendiagramm:

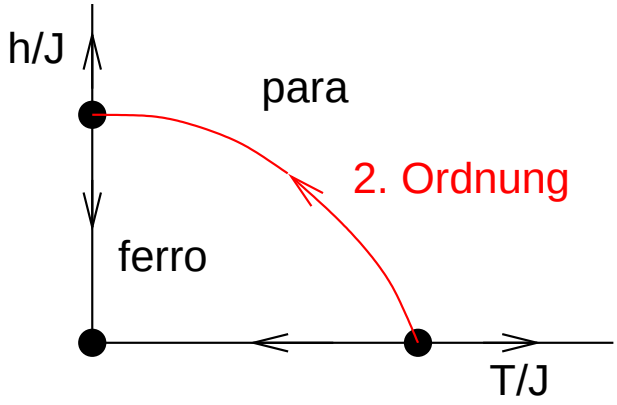


Abbildung 2: Phasendiagramm des RFIM mit Gaußscher Unordnung. Phasenübergang 2. Ordnung entlang der ganzen Linie.

Frage: Wie lauten die kritischen Exponenten entlang der Phasengrenze ($d = 3$) [überall gleich außer bei $h = 0$, aus Renormierungsgruppenrechungen [6, 7]]?
1. Ansatz: Monte Carlo Simulationen [8]. Problem: Schwierig zu equilibrieren $\rightarrow$ nur kleine Systeme $L = 16$.

Deshalb: Berechne Grundzustände. Wie wir sehen werden, Vorteile:
1. Grundzustände exakt (keine Equilibrierung)
2. Große Systeme möglich ($L = 100$)

12.2 RFIM $\Leftrightarrow$ Netzwerke

Netzwerk $(G, c, s, t) =$

- *gerichteter* Graph $G = (V, E)$ mit $n + 2$ Knoten
- Kantengewichten $c : V \times V \rightarrow \mathcal{R}_0^+$ ("Kapazitäten") mit $c(i, j) = 0$ if $(i, j) \notin E$.
- Die Knoten $s \in V$ und $t \in V$ heißen Quelle und Senke.

Konvention $V = \{0, 1, \ldots, n, n + 1\}$, $s \equiv 0$ und $t \equiv n + 1$, $c_{ij} \equiv c(i, j)$. Die Knoten $V \backslash \{s, t\} = \{1, \ldots, n\}$ heißen *innere* Knoten, Kanten (i, j) mit $i, j \in V \backslash \{s, t\}$ innere Kanten.

Interpretation: Netzwerk = System von Rohren (oder Einbahnstrassen).

Bedeutung: Durch das Netzwerk kann ein *Fluss* f_{ij} fließen (=Flüssigeit in Liter/min oder Verkehr in PKW/min). Der Fluß "entspringt" in s und "versickert" in t. Flußerhaltung an inneren Knoten:

- $f_{ij} \leq c_{ij}$ $\forall i, j \in V$
- $f_{ij} = -f_{ji}$
- $\sum_j f_{ij} = 0$ $\forall i \in V \setminus \{s, t\}$

Def.: (s, t)-*Schnitt* = Aufteilung der Knoten in zwei Teilmengen $(S, \overline{S})$ mit

- $S \cup \overline{S} = V$
- $S \cap \overline{S} = \emptyset$

- $s \in S$
- $t \in \overline{S}$

Konvention: $(S, \overline{S})$ werden als *linke* und *rechte* teilmenge bezeichnet.
Def.: *Kapazität* $C(S, \overline{S})$ des Schnitts

$$C(S, \overline{S}) = \sum_{i \in S, j \in \overline{S}} c_{ij} \,. \tag{7}$$

Merke: Nur die Kanten von S nach $\overline{S}$ werden berücksichtigt, nicht von $\overline{S}$ nach S!.
Beispiel:

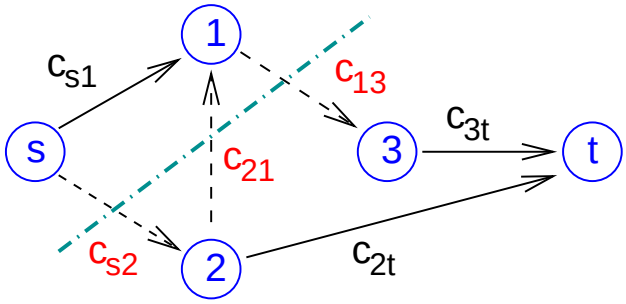


Abbildung 3: Ein Graph mit 3 inneren Knoten $1, 2, 3$. Ein Schnitt $(S, \overline{S}) = (\{s, 1\}, \{2, 3, t\})$ wird durch die strich-punktierte Linie dargestellt. Die Kapazität des Schnitts ist $C(\{s, 1\}, \{2, 3, t\}) = c_{s2} + c_{13})$. Die Kante $(1, 2)$ trägt nicht zur Kapazität bei, weil sie in Gegenrichtung zum Schnitt läuft.

Ziel: Umformulierung von Gl. (7), so dass man den Hamiltonian erhält.
Dazu: Schnitt $\Leftrightarrow$ binärer Vektor $\underline{X} = (x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1})$ with

$$x_i = \begin{cases} 1 & i \in S \\ 0 & i \in \overline{S} \end{cases} \tag{8}$$

Nur Kanten (i, j) links$\rightarrow$rechts tragen bei, also $x_i = 1$ und $x_j = 0 \Rightarrow$ ($\sum$ von 0 nach $n+1$)

$$\begin{aligned} C(\underline{X}) \equiv C(S, \overline{S}) &= \sum_{i,j} x_i (1 - x_j) c_{ij} \\ &= -\sum_{i,j} c_{ij} x_i x_j + \sum_i \left(\sum_j c_{ij} \right) x_i \end{aligned} \tag{9}$$

$x_0 = 1$ und $x_{n+1} = 0$ einsetzten, $c_{i0} = c_{n+1,0} = 0$ verwenden $\rightarrow$

$$\begin{aligned} C(x_1, \ldots, x_n) &= -\sum_{i,j=1}^{n} c_{ij} x_i x_j + \sum_{i=1}^{n} \left(-c_{0i} + c_{i,n+1} + \sum_{j=1}^{n} c_{ij} \right) x_i \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n} c_{0i} + c_{0,n+1} \end{aligned} \tag{10}$$

Sieht fast wie H aus. Unterschied $\sigma = \pm 1$ aber $x_i = 0, 1 \rightarrow x_i = 0.5(\sigma_i + 1)$. Weiter $\sum_{ij} c_{ij} = \sum_{i<j} (c_{ij} + c_{ji})$ (Da $\sum$ in H über alle Bonds läuft) $\rightarrow$ Endergebnis ($\sum$ von 1 bis

n):

$$\begin{aligned} C(\sigma_1,\ldots,\sigma_n) &= -\sum_{i<j}\frac{1}{4}(c_{ij}+c_{ji})\sigma_i\sigma_j \\ &+\sum_i\left(-\frac{1}{2}c_{0i}+\frac{1}{2}c_{i,n+1}+\frac{1}{4}\sum_j(c_{ij}-c_{ji})\right)\sigma_i \\ &+\frac{1}{4}\sum_{i<j}(c_{ij}+c_{ji})+\frac{1}{2}\sum_i(c_{0i}+c_{i,n+1})+c_{0,n+1} \end{aligned} \tag{11}$$

Abbildung auf H: Da $c_{ij}+c_{ji}$ auftaucht:

- Quadratischer Term:

  Wahl $c_{ij}=0$ für $i>j$ $\rightarrow$

  $$c_{ij}\equiv\begin{cases} 0 & \text{if } i\geq j \\ 4J & \text{else} \end{cases} \tag{12}$$

  Alle inneren Kanten liegen damit fest.

- Linearer Term:

  Def.:

  $$w_i\equiv -2B_i-\frac{1}{2}\sum_j(c_{ij}-c_{ji}) \tag{13}$$

  $\rightarrow -c_{0i}+c_{i,n+1}=w_i$. w_i kann jedes Vorzeichen haben, aber es muss $c_{ij}\geq 0$ gelten $\rightarrow$

  $$\begin{aligned} c_{0i}\equiv 0 \quad c_{i,n+1}\equiv w_i \quad & \text{if } w_i>0 \\ c_{0i}\equiv -w_i \quad c_{i,n+1}\equiv 0 \quad & \text{else} \end{aligned} \tag{14}$$

- Konstanter Term (muß 0 sein)

  $$c_{0,n+1}\equiv -\frac{1}{4}\sum_{i<j}(c_{ij}+c_{ji})-\frac{1}{2}\sum_i(c_{0i}+c_{i,n+1}) \tag{15}$$

  $c_{0,n+1}$ kann auch negativ sein! Macht nichts, denn $(0,n+1)$ muß in jedem s,t-Schnitt sein $\rightarrow$ einfach erstmal 0 setzten und den richtigen Wert später auf das Ergebnis addieren.

  Zusammenfassung: Gegeben RFIM mit n Spins. Konstruktion eines Netzwerks mit $n+2$ Knoten, Kapazitäten gemäß Gl. (13),(14),(15), so dass jeder (s,t)-Schnitt im Netzwerk über $x_i=0.5(\sigma_i+1)$ einer Spinkonfiguration $\{\sigma_i\}$ entspricht und die Energie $H(\{\sigma_i\})$ gleich der Kapzität $C(\underline{X})$ des Schnitts ist.

  Gesucht: Grundzustand = minimale Energie $\rightarrow$ Schnitt mit minimaler Kapazität ("minimaler Schnitt").

12.3 Berechnung des Minimalen Schnitts

Ford-Fulkerson: Kapazität des Minimalen Schnitts = Maximaler Fluss!

Beweis ist konstruktiv $\rightarrow$ Algorithmus.
Grundidee

- Starte mit "leerem" Netzwerk $f_{ij} = 0 \, \forall i, j$
- Suche Pfad, entlang dessen der Fluß erhöht werden kann (d.h $f_{ij} < c_{ij}$ für alle (i, j) des Pfades)
- Wiederhole bis so ein Pfad nicht mehr existiert. $\rightarrow$ maximaler Fluss

Heutzutage: Moderne Algorithmen, erhöhen Fluß "parallel" auf vielen Pfaden gleichzeitig (Wellen-Algorithmus, Preflow-Push Algorithmus) [9, 10, 11, 12] $\rightarrow$ schneller polynomialer Algorithmus.
Für 3d-RFIM (experimentell): Laufzeit $O(L^4)$ für L^3 Spins $\rightarrow$ sehr große Systeme bis $N = 100^3$ Spins.

12.4 Beispiel Ergebnisse

Berechne Grundzustände für verschiedene Werte von h.
Zuerst: eine Realisierung: Lose Zufallszahlen ϵ_i aus (z.B. ± 1 oder Normalverteilt) und wähle $B_i = h\epsilon_c$
Auswertung z.B. Magnetisierung $m = |\frac{1}{n} \sum_i \sigma_i|$ als Funktion von h:
Sprünge: "kritische" Felder, wo Cluster von Spins flippen.

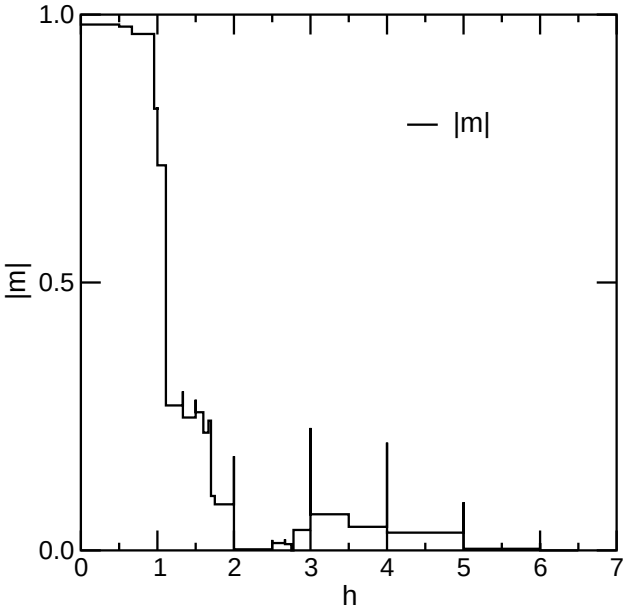


Abbildung 4: Magnetistierung eines Zufallsfeld-ähnlichen Systems ($\pm h$) als Funktion der Unordnung h.

Gemittelt über Realisierungen $M = [m]_h \rightarrow$, dann *Skalenplot* unter Aussnutzung von (analog zum Binder-Parameter)

$$M = L^{-\beta/\nu} \tilde{M} \left((h - h_c) L^{1/\nu} \right) \tag{16}$$

ergibt Werte (Gauß-RFIM): $h_c = 2.29$, $\nu = 1.19$ und $\beta = 0.02$.
Weitere krit. Exponenten: Siehe Aktivator.

Hautpergebnis: Es finden sich vergleichbare kritische Exponenten wie mit MC!

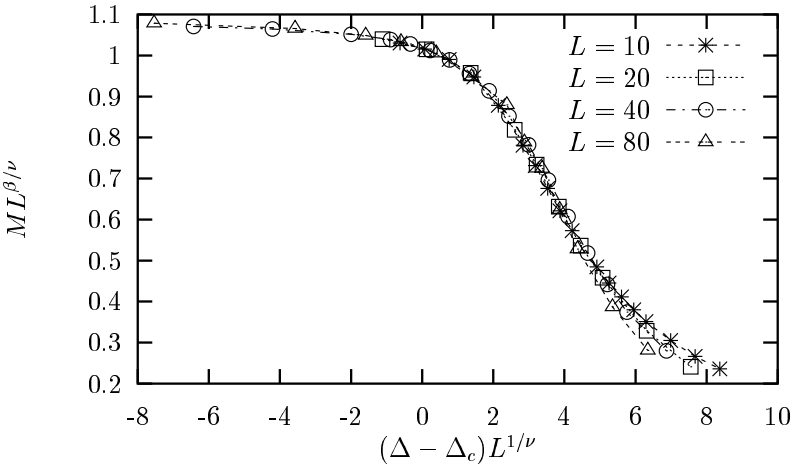


Abbildung 5: Skalenplot der gemittelten Magnetisierung (mit $\Delta \equiv h$) eines Zufallsfeldsystems (Gauß-verteilt) $L^{\beta/\nu}$ als Funktion von $(\Delta - \Delta_c)L^{1/\nu}$. Bei richtig gewählten Werten von $\Delta_c \equiv h_c, \beta, \nu$ sollten alle Datenpunkte auf einer Kurve liegen.

Literatur

[1] Y. Imry and S.-K. Ma. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 35:1399, 1975.

[2] M. Aizenman and J. Wehr. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 62:2503, 1989.

[3] J. Bricomont and A. Kupiainen. Lower critical dimension of the random-fiel Ising model. *Phys. Rev. Lett.*, 59:1829, 1987.

[4] A. Aharony. Tricritical points in systems with random fields. *Phys. Rev B*, 18:3318, 1978.

[5] T. Schneider and E. Pytte. Random-field instability of the ferromagnetic state. *Phys. Rev. B*, 15:1519, 1977.

[6] A. J. Bray and M. A. Moore. Scaling theory of the random-field Ising model. *J. Phys. C*, 18:L927, 1985.

[7] D. S. Fisher. Scaling and critical slowing down in random-field Ising systems. *Phys. Rev. Lett.*, 56:416, 1985.

[8] H. Rieger. Critical behavior of the three-dimensional random-field Ising model: Two exponent scaling and discontinuous transition. *Phys. Rev B*, 52:6659, 1995.

[9] R.E. Tarjan. *Data Structures and Network Algorithms.* Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1983.

[10] A. V. Goldberg and R. E. Tarjan. A new approach to the maximum-flow problem. *J. ACM*, 35:921, 1988.

[11] B. Cherkassky and A. Goldberg. On implementing the push-relabel method for the maximum flow problem. *Algorithmica*, 19:390, 1997.

[12] A. V. Goldberg and R. Satish. Beyond the flow decomposition barrier. *J. ACM*, 45:783, 1998.