INAUGURAL-DISSERTATION
zur
Erlangung der Doktorwürde
der
Naturwissenschaftlich-Mathematischen
Gesamtfakultät
der
Ruprechts-Karls-Universität
Heidelberg

vorgelegt von
Dipl.-Phys. Alexander Hartmann
aus Heidelberg

Tag der mündlichen Prüfung: 14. Mai 1998

Struktur der Grundzustände
ungeordneter Ising-Systeme

Gutachter: Prof. Dr. Heinz Horner
Prof. Dr. Gerhard Reinelt

Kurzfassung

In dieser Arbeit werden Grundzustände ungeordneter Ising-Systeme untersucht. Für Zufallsfeldsysteme und verdünnte Antiferromagnete können exakte Grundzustände bis Systemgröße von etwa 160^3 berechnet werden. Es wird ein Verfahren vorgestellt, das die Berechnung aller Grundzustände in einem beliebigen Intervall für das externe Feld bzw. das Zufallsfeld erlaubt. Durch Anwendung von graphentheoretischen Methoden werden außerdem erstmals alle entarteten Grundzustände mit einem Mal berechnet und ihre Struktur durch einen Graphen repräsentiert. Weiterhin wird ein Verfahren entwickelt, die sog. Cluster-Exakte Approximation, welche die sehr genaue näherungsweise Berechnung von Spinglas-Grundzuständen bis Systemgröße 14^3 in großer Zahl ermöglicht.
Es werden die anti-/ ferromagnetischen Magnetisierungen für die erstgenannten Systeme über den gesamten Feld-Bereich errechnet. Die Stufenstruktur der Kurven wird analysiert und kritische Felder werden bestimmt. Die Struktur der Entartung wird ermittelt. Es ergibt sich im wesentlichen nur ein Grundzustand, der aber aufgrund vieler kleiner Cluster, die mehr oder weniger unabhängig voneinander zwei Orientierungen einnehmen können, hoch entartet ist. Bei den Spingläsern dagegen findet sich eine komplexe Grundzustandsstruktur, was sich in Form einer breiten Verteilung der Überlapps und einer ultrametrischen Ordnung zeigt.

Abstract

In this work ground states of disordered Ising systems are investigated. Ground states of random field systems and diluted antiferromagnets are calculated exactly up to size 160^3. A method is presented which allows the calculation of all ground states in an arbitrary interval of the random/external field. By using graph theoretical methods all degenerate ground states are calculated in one run and their structure is represented by a graph. An algorithm called Cluster-exact Approximation is developed, which allows the calculation of spin glass ground states up to size 14^3 with high statistics.
The anti-/ferromagnetic magnetizations for random field systems and diluted antiferromagnets are calculated for all fields. The step structure is analyzed and critical fields are determined. The structure of the degeneracy is examined. Mainly just one ground state exists. But many small clusters, which can take more or less independently two states, lead to a high degeneracy. For spin glasses a complex ground state structure is found, indicated by a broad distribution of overlaps and an ultrametric order of the states.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung

Viele Modelle in der Physik zeichnen sich durch eine große Regelmäßigkeit aus, aber da selbst der perfekteste Kristall bei näherer Betrachtung viele Defekte aufweist, rückt die Untersuchung ungeordneter Systeme mehr und mehr in das Blickfeld der Physik. Bei experimentellen Systemen spielen eine Vielzahl von Einflußgrößen eine Rolle. Das ist etwas hinderlich, wenn man zu verstehen versucht, was die Essenz ist, welche das spezielle Verhalten vieler ungeordneter Systeme ausmacht. Man konstruiert deshalb auch für ungeordnete Systeme Modelle ohne freie Parameter, die auf den ersten Blick sehr einfach aussehen. Sie abstrahieren von der konkreten Zusammensetzung der Materialien, geben aber dennoch wichtige spezielle Eigenschaften der Stoffe wieder. Mit der Zeit gewinnen diese Modelle dann einen eigenen Wert, und die ursprünglichen Materialien rücken in den Hintergrund.

Aufgrund der Unordnung ist die theoretische Behandlung dieser Modelle recht schwierig. Deshalb gewinnen Computer-Simulationen immer mehr an Bedeutung, auch weil hier detaillierte mikroskopische Untersuchungen durchgeführt werden können, wie sie im Experiment nicht möglich sind. Allerdings ist man im Computer auf kleinere Systeme beschränkt, denn man beobachtet ein starkes Anwachsen der Rechenzeit mit der Systemgröße.

Damit ist die Entwicklung von schnellen Algorithmen und neuen Ansätzen, ein System im Computer zu simulieren, eine zentrale Aufgabe der Computerphysik. Wenn man das asymptotische Laufzeitverhalten eines Verfahrens verbessert, gewinnt man wesentlich mehr, als durch Einsatz eines schnelleren Rechners.

Die Vorstellung neuer Verfahren ist eine der beiden zentralen Absichten dieser Arbeit. Zum einen wurde ein Algorithmus entwickelt, mit dem sich zwei Systemklassen, die Zufallsfeldsysteme und verdünnte Antiferromagnete (s. Kapitel 2), nun vollständig untersuchen lassen. Vorher konnte man nur kleine Ausschnitte ihres Verhaltens betrachten. Außerdem wird die *Cluster-Exakte Approximation* vorgestellt, mit der es nun möglich ist, bei den Spingläsern (s. Kapitel 2) so große Systeme zu untersuchen, daß neue Erkenntnisse über ihr Verhalten möglich sind.

Die neuen Verfahren werden ausführlich dargestellt, d.h. alle nötigen Transformationen werden aufgeführt und Beispiele werden angegeben. Im Anhang sind zusätzlich die verwendeten Prozeduren erläutert, die noch nicht Eingang in Standard-Lehrbücher gefunden haben.

Diese Verfahren werden dann angewendet, um das Verhalten der drei genannten Modellklassen, Zufallsfeldsysteme, verdünnte Antiferromagnete und Spingläser bei sehr tiefen Temperaturen zu untersuchen. In vielen Bereichen ist das Verhalten dieser Modelle noch nicht klar. Daher wird insbesondere untersucht, wie komplex

das Tieftemperaturverhalten dieser Modelle aussieht. Es wird sich zudem zeigen, daß, anders als einige Autoren angenommen haben, diese Modelle in diesem Punkt nicht vergleichbar sind.
Die Gliederung dieser Arbeit ist wie folgt: Zunächst werden die zum Verständnis wichtigen Konzepte sowie die eben erwähnten Modelle vorgestellt und die bisher bekannten Ergebnisse aufgeführt. Es folgen die beiden zentralen Kapitel der Arbeit: Zunächst werden die im Rahmen der Arbeit entwickelten Verfahren und die wichtigsten verwendeten Algorithmen erläutert. Dann werden die Ergebnisse der Berechnungen dargestellt. Es folgt eine Zusammenfassung mit Ausblick. Im Anhang werden die weiteren verwendeten Methoden vorgestellt, die noch nicht Eingang in Lehrbücher gefunden haben.

2. Grundlagen

In dieser Arbeit werden die *Grundzustände* dreier Varianten ungeordneter *Ising-Systeme* untersucht. Ein Grundzustand ist der Zustand, den ein System beim absoluten Nullpunkt ($T = 0$) annimmt. Da dort keinerlei energetische Anregungen existieren, ist dieser Zustand das absolute energetische Minimum des Systems. Die Berechnung des Grundzustandes ist also ein Minimierungsproblem. Falls ein mikroskopisches System mehrere Grundzustände mit exakt gleicher Energie aufweist, spricht man von *Entartung*. Makroskopische Systeme zeigen laut dem dritten Hauptsatz der Thermodynamik keine Entartung, aber es kann viele tief liegende Zustände mit ähnlicher Energie geben.
Ising-Systeme bestehen aus N Teilchen, den sog. *Spins*, die fest in einem Gitter angeordnet sind und nur die zwei Zustände $\sigma = \pm 1$ annehmen können. Wenn man davon ausgeht, daß nur Wechselwirkungen zwischen Paaren von Spins sowie zwischen Spins und statischen Magnetfeldern existieren, wird die Energie eines Ising-Systems durch folgende Funktion H (die *Hamilton-Funktion*) beschrieben:

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j + \sum_i B_i\sigma_i \tag{2.1}$$

Dabei sind J_{ij} die für jedes einzelne System fest gewählten Wechselwirkungskonstanten, auch *Bonds* genannt, und B_i ist ein (lokales) magnetisches Feld. Für den Fall $J_{ij} > 0$ ist es energetisch günstig, wenn die Spins σ_i und σ_j die gleiche Orientierung haben, man spricht von einer *ferromagnetischen* Kopplung. Für $J_{ij} < 0$ hat man eine *antiferromagnetische* Bond. Bei den in dieser Arbeit betrachteten Systemen werden nur Wechselwirkungen zwischen Spins betrachtet, die Nachbarn im Gitter sind. Das wird durch die Notation $\sum_{<ij>}$ beim Summenzeichen verdeutlicht. Außerdem werden *periodische Randbedingungen* in allen Richtungen verwendet, d.h. ein Spin auf der linken Seitenfläche wechselwirkt mit dem auf der rechten Seitenfläche gegenüberliegenden Spin. Auf diese Weise wird das Verhalten von großen Systemen besser wiedergegeben.
Bei ihrer Erforschung galt anfangs *Unordnung* als Störung. Erst nach und nach wurde offensichtlich, daß ungeordnete Systeme besondere Eigenschaften aufweisen, und sie gewannen deshalb verstärkt Aufmerksamkeit. Eine Einführung in die Phasenübergänge ungeordneter Systeme findet sich in [91].
Unordnung in den oben genannten Ising-Systemen erhält man beispielsweise, indem man verschiedene Vorzeichen bei den Bonds zuläßt (Spingläser), nur einen Teil der Gitterplätze mit Spins besetzt (verdünnte Systeme) oder indem die lokalen Felder B_i zufällig mit verschiedenem Vorzeichen gewählt werden (Zufallsfeldsysteme). Diese drei Arten von Systemen werden in dieser Arbeit betrachtet. Eine

zusätzliche Schwierigkeit, die sich bei der numerischen Behandlung von ungeordneten Systemen ergibt, ist das Auftreten von Fluktuationen, die durch Unordnung erzeugt werden. Das bedeutet, daß man bei der Berechnung von Mittelwerten immer über eine sehr große Anzahl von Systemen mitteln muß. Außerdem zeigen ungeordnete Systeme ein komplexeres Verhalten als geordnete Systeme, so daß die Rechenzeiten bei Simulationen sehr groß werden können, womit man sich auf relativ kleine Systeme beschränken muß: einige tausend Teilchen bei Spingläsern und maximal 1-2 Millionen bei den anderen hier behandelten Modellen.
Da ein Grundzustand bei $T = 0$ auftritt, dieser Wert aber in Experimenten nie exakt erreicht werden kann, stellt sich natürlich die Frage nach der Relevanz der Ergebnisse von Grundzustandsberechnungen. Es gibt einige Antworten (zum Teil aus [80]):

- Man kann erwarten, daß einige Eigenschaften des Grundzustandes auch bei kleinen Temperaturen bestehen bleiben, wie zum Beispiel Domänen-Strukturen.

- Für einige Systeme, wie Zufallsfeldsysteme, sind die Grundzustände exakt berechenbar. Man hat somit keine Probleme das Gleichgewicht zu finden, wie es bei Simulationen der Fall ist.

- Man kann die Ergebnisse von analytischen Entwicklungen um $T = 0$ überprüfen.

- Aus der Berechnung der sog. *Stiffness-Energie* bei $T = 0$ läßt sich bestimmen, ob ein System einen *Phasenübergang* bei $T > 0$ aufweist. Die Stiffness-Energie ist der Unterschied zwischen der Grundzustandsenergie eines Systems und der eines modifizierten Systems, wo die Bonds genau einer Ebene invertiert werden. Wächst diese Energie mit steigender Systemgröße, so gibt es einen Phasenübergang bei $T > 0$.

Ein Phasenübergang tritt auf, wenn ein System zwischen zwei Phasen wechselt. Das bekannteste Beispiel für ein System mit mehreren Phasen (oder Aggregatzuständen) ist Wasser, welches die Phasen fest, flüssig und gasförmig annehmen kann. Zur Charakterisierung der Phasen verwendet man geeignete Meßgrößen, die sog. *Ordnungsparameter*, wie z.B. die Dichte oder das Schermodul bei Wasser. Falls sich der Ordnungsparameter an einen Phasenübergang unstetig ändert, spricht man von einem Übergang 1.Ordnung, ansonsten von einem kontinuierlichen oder 2. Ordnung-Phasenübergang.
Zunächst werden nun die wichtigsten Definitionen und Grundlagen der drei Modelle angegeben. Alle drei Abschnitte sind gleich aufgebaut: Zuerst wird das Modell formal definiert und erklärt welche Auswirkung die Unordnung auf das Verhalten jedes einzelnen Spins hat. Soweit vorhanden, werden kurz experimentelle Realisierungen der Modelle genannt. Dann wird das *Phasendiagramm* gemäß des Standes der Forschung vorgestellt, d.h. es wird wird angegeben, wie sich äußere Felder und

Temperatur auf die Ordnung der Systeme auswirken. Anschließend wird erklärt, wie man Grundzustände für die jeweiligen Modell berechnen kann und welche Ergebnisse auf diesem Gebiet bereits existieren. Zum Schluß werden jeweils die für diese Arbeit relevanten Hilfsmittel und Modelle vorgestellt, mit denen man die Struktur der Entartung der Grundzustände beschreiben kann.
Das Kapitel wird mit einer Einführung in die Graphentheorie abgeschlossen, da sie die wichtigsten Werkzeuge zur Berechnung von Grundzuständen zur Verfügung stellt.

2.1. Zufallsfeldsysteme

Modell: Die Hamiltonfunktion des Zufallsfeldsystems (engl. *Random Field Ising Modell* = RFIM) ist durch

$$H = -J \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j - \sum_i B_i \sigma_i \tag{2.2}$$

gegeben. Die Spins sind in Form eines einfachen Gitters mit $N = L^d$ Gitterplätzen angeordnet. Alle Gitterplätze sind besetzt, die Magnetfelder B_i variieren von Gitterplatz zu Gitterplatz und gehorchen einer bimodalen ($\pm\Delta$-RFIM) oder einer Gauß-Verteilung (Gauß-RFIM). Deren Wahrscheinlichkeitsdichten lauten:

$$\begin{aligned} p(B_i) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta} e^{-(B_i/\sqrt{2}\Delta)^2} && (2.3) \\ p(B_i) &= \frac{1}{2}(\delta(B_i - \Delta) + \delta(B_i + \Delta)) && (2.4) \end{aligned}$$

Die Unordnung bewirkt konkurrierende Wechselwirkungen: Der quadratische Term in der Hamiltonfunktion bevorzugt eine parallele Ausrichtung aller Spins ($J > 0$), während die lokalen Felder die Spins in ihre jeweilige Richtung drehen wollen. Ein Spin, dessen beide Orientierungen die gleiche Energie ergeben, der sich also entweder nach seinen Nachbarn oder nach dem lokalen Feld richten kann, aber nicht nach beiden, wird als *frustriert* bezeichnet.
Ein Überblick der Theorie zum RFIM findet sich in [59].
Experimente: Direkte Realisierungen von Zufallsfeldsystemen gibt es nicht, es wird aber vielfach vermutet, daß sie sich wie verdünnte Antiferromagnete verhalten, da die zufällige Verteilung der Nachbarn wie lokale Zufallsfelder wirken sollen. Verdünnte Antiferromagnete werden im nächsten Abschnitt behandelt.
Phasendiagramm: Zur Beschreibung der Ordnung wird die Magnetisierung

$$m := \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \tag{2.5}$$

verwendet. Der RFIM in zwei Dimensionen (2d) für kleine Felder nicht langreichweitig geordnet, wohl aber in 3d [17, 44], wo eine langreichweitige Ordnung für

kleine Temperaturen und kleine Felder (kritisches Feld $\Delta_c = 2.35$) existiert. Weiterhin gibt es einen ungeordneten Zustand für größere Felder (3d) bzw. für alle Felder (2d) und kleine Temperaturen. Für große Temperaturen ist der RFIM paramagnetisch. Der ungeordnete Zustand ist in zwei Dimensionen durch viele *fraktale* Domänen gekennzeichnet. Fraktal bedeutet, daß Volumen V und Oberfläche F sich zueinander nicht wie bei der Kugel gemäß $V \sim F^{3/2}$ verhalten. In 3d gibt im wesentlichen nur zwei große perkulierende Domänen [28], d.h. die Domänen erstrecken sich durch das gesamte System. Im folgenden beschränkt sich die Diskussion auf drei Dimensionen.
Viele Fragen, die den Übergang von der geordneten in die ungeordnete Phase betreffen, sind noch offen, so zum Beispiel ob er 1. oder 2. Ordnung ist. Es gibt Daten für den 3d RFIM, die für einen Sprung im Ordnungsparameter sprechen [78], und andere, die einen kontinuierlichen Übergang [85] vermuten lassen. Auch für das Szenario eines Übergangs 2.Ordnung ist noch nicht klar, ob sich das Verhalten der Meßgrößen am Übergang mathematisch wie üblich nur durch zwei [90] oder drei [16, 29, 89] unabhängige Exponenten beschreiben läßt. Eine ausführlichere Diskussion findet sich in [79].
Grundzustände: Exakte Grundzustände von Zufallsfeldsystemen lassen sich in polynomialer Zeit berechnen. Erstmals wurde dies in [65] durchgeführt. In [36, 37] wurden mehrere entartete Grundzustände berechnet. In dieser Arbeit werden Verfahren der Graphentheorie [74] angewendet, welche die Berechnung aller entarteten Grundzustände in einem Durchlauf erlauben [40]. In [28] wurde die Domänenstruktur der Grundzustände untersucht. Neuere Untersuchungen, die sich mit dem Übergang in die ungeordnete Phase bei $T = 0$ befassen, finden sich in [85, 2].
Außerdem konnten bisher die Zustände nur an bestimmten beliebig vorgegebenen Felder ausgerechnet werden. Mit dem hier eingeführten Verfahren ist das erstmals vollständig für ganze Intervalle von Feldern möglich [40]. In dieser Arbeit wird das Verhalten von m bei $T = 0$ entlang der Δ-Achse untersucht. Aufgrund der endlichen Systemgröße ergeben sich entlang der Achse auch nur endlich viele verschiedene Grundzustände. Somit ist $m(B)$ eine Stufenfunktion.
Struktur der Grundzustände: Da sich für Zufallsfeldsysteme alle entarteten Grundzustände auf einmal berechnen lassen, kann ihre Struktur hier genau untersucht werden. Dazu wird unter anderem die *Verteilung der Überlapps* verwendet. Für eine feste Realisierung der Unordnung $\{B_i\}$ und zwei statistisch unabhängige Realisierungen (*Replikas*) $\{\sigma_i^\alpha\}, \{\sigma_i^\beta\}$ wird der *Überlapp* [68, 69, 70, 71, 72] definiert als

$$q^{\alpha\beta} := \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^\alpha \sigma_i^\beta \tag{2.6}$$

Somit ergibt sich für zwei gleiche Replikas der Überlapp 1. Unterscheiden sich die beiden Replikas durch einen Flip aller Spins, ergibt sich $q^{\alpha\beta} = -1$. Das Konzept der Überlapps ist sehr allgemein, es konnte auch erfolgreich in anderen Gebieten der Physik verwendet werden, wie bei der Simulation von Edelgasatomen in

Polymerlösungen [41].
Der Grundzustand einer gegebenen Realisierung wird durch die Wahrscheinlichkeitsdichte $P_{\{B_i\}}(q)$ charakterisiert. Durch Mittelung über die Realisierungen $\{B_i\}$, bezeichnet durch $[\,\cdot\,]_{av}$, ergibt sich (Z = Anzahl der Realisierungen)

$$P(q) := [P_{\{B_i\}}(q)]_{av} = \frac{1}{Z} \sum_{\{B_i\}} P_{\{B_i\}}(q) \tag{2.7}$$

Falls sich für $P(q)$ eine Verteilung ähnlich einer Gauß-Verteilung ergibt, die mit wachsender Systemgröße immer schmaler wird, stehen in allen Grundzuständen die meisten Spin immer gleich. Sie unterscheiden sich nur in kleinen Clustern, die fast völlig unabhängig voneinander zwei Orientierungen einnehmen können. Das beschriebene Verhalten von $P(q)$ folgt dann aus dem Gesetz der großen Zahlen. Bei einer breiten Verteilung von $P(q)$ liegt eine komplexe Grundzustandsstruktur vor.

2.2. Verdünnte Antiferromagnete

Modell: Beim verdünnten Ising-Antiferromagneten mit äußerem Feld (*Diluted Antiferromagnet in a Field* = DAFF) ist jeder Gitterplatz mit einer Wahrscheinlichkeit p besetzt ($\epsilon_i = 1$, sonst unbesetzt $\epsilon_i = 0$). Der DAFF wird durch folgende Hamiltonfunktion beschrieben

$$H = J \sum_{<i,j>} \epsilon_i \epsilon_j \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \epsilon_i \sigma_i \tag{2.8}$$

Es wirkt ein homogenes äußeres Feld $B > 0$ und die Wechselwirkungskonstante ist $J > 0$. Die Summe $\langle i, j \rangle$ läuft über alle Paare von Nachbarn. Auf diese Weise erhält man wieder eine Konkurrenzsituation: Die Paarwechselwirkung bevorzugt eine unterschiedliche Ausrichtung benachbarter Spins, während das externe magnetische Feld versucht, alle Spin gleich auszurichten. Auch hier spricht man von Frustration.
Experimente:
Realisierungen von verdünnten Ising-Antiferromagneten müssen eine Kristallfeld-Anisotropie aufweisen, welche die Ausrichtung der Spins entlang einer Achse bevorzugt, damit die Modellierung als Ising-System angemessen ist. Man stellt die Proben her, indem ein solches antiferromagnetisches Material mit nichtmagnetischen Materialien gemischt wird. Das am häufigsten untersuchte System dieser Klasse ist $Fe_xZn_{1-x}F_2$. Für zweidimensionale DAFF wird meistens $Rb_2Co_xMg_{1-x}F_4$ verwendet. Typische Messungen umfassen die Ermittelung der Wärmekapazität oder Neutronenstreuexperimente. Eine Übersicht vermittelt [5].
Phasendiagramm: Zur Beschreibung der Ordnung wird die *staggered* (oder antiferromagnetische) Magnetisierung

$$a := \frac{1}{N_s} \sum_i \epsilon_i t(i) \sigma_i \tag{2.9}$$

verwendet ($N_s = \sum_i \epsilon_i$ = Anzahl der Spins). Dabei wird das Gitter in zwei schachbrettartig ineinander gesetzte Untergitter aufgeteilt, und die Magnetisierung jeweils getrennt gemessen und addiert. Die Funktion $t(i)$ ergibt den Wert $+1$ für das eine Untergitter und -1 für das andere.
Für kleine Magnetfelder B konnte gezeigt werden, daß der DAFF äquivalent zu Zufallsfeldsystemen mit kleinen Zufallsfeldern ist [33]. Somit kann von dort das Ergebnis übernommen werden, daß in zwei Dimensionen die langreichweitige Ordnung durch kleine Felder zerstört wird, aber nicht für höhere Dimensionen [17, 44]. In dieser Arbeit werden nur Systeme mit $d = 3$ behandelt.
Für niedrige Temperaturen und kleine Felder $B < B_c$ ist der 3d DAFF antiferromagnetisch geordnet. In dieser Arbeit wird $B_c \approx 0.9$ gezeigt. Für mittelgroße Felder ($B \in [1, 3]$) und tiefe Temperaturen existiert ein eingefrorener Zustand, der durch viele fraktale Domänen gekennzeichnet ist [36, 60, 88], anders als beim RFIM. Diesen Domänenzustand gibt es auch für 2d, wo die Domänen dieselben fraktalen Exponenten haben wie das Zufallsfeldsystem.
Für größere Felder oder höhere Temperaturen ist der DAFF in allen Dimensionen paramagnetisch.
Der Domänenzustand zeigt gewisse Ähnlichkeiten mit Spingläsern (siehe Kap. 2.3), wie zum Beispiel das Auftreten von Irreversibilitäten, wenn man in Simulationen ein System im äußeren Feld erst aufheizt und dann wieder abkühlt [60, 61]. Wenn man Magnetfeld B_{irr} und Temperatur T, ab denen diese Irreversibilitäten auftreten, miteinander in Relation setzt, erhält man $B_{irr} \sim (T_{eq0} - T)^{\Phi/2}$ mit T_{eq0} =konstant. und $\Phi = 3.27 \pm 0.05$. Dies entspricht der sog. *AT-Linie*, welche von de Almeida und Thouless [22] bei Spingläsern mit $\Phi = 3$ gefunden wurden. Allerdings wird im allgemeinen das Vorhandensein von Frustration, welche nur durch die Bonds erzeugt wird, als Voraussetzung für Spinglas-Verhalten angesehen. In dieser Arbeit wird gezeigt, daß tatsächlich die Grundzustände von Spingläsern wesentlich komplexer sind als beim DAFF (und RFIM) [39, 40].
Grundzustände: Auch für verdünnte Antiferromagneten lassen sich exakte Grundzustände in polynomialer Zeit berechnen [73, 86]. Dies wurde erstmals in [36, 37] durchgeführt, wo auch ein Verfahren vorgestellt wurde, das es erlaubt, viele verschiedene Grundzustände zu ermitteln. Eine Analyse der Grundzustands-Domänenstrukturen findet sich in [28].
In dieser Arbeit werden wie beim RFIM das Verhalten der Stufenfunktion $a(B)$ bei $T = 0$ und die Struktur der Grundzustände untersucht, unter anderem durch Ermittlung der Verteilung der Überlapps.
Wesentlich schwieriger als bei den bisher vorgestellten Modellen ist die Berechnung der Grundzustände von Spingläsern.

2.3. Spingläser

Modell: In einem Spinglas treten die Vorzeichen der Bonds zufällig verteilt auf. In dieser Arbeit wird das Edwards-Anderson- (EA-) Modell [27] betrachtet, dessen

Energie als Funktion der Spin-Zustände, durch folgende Hamiltonfunktion gegeben ist

$$H = -\sum_{<ij>} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - B\sum_i \sigma_i \tag{2.10}$$

wobei die Summe über nächste Nachbarn von Ising-Spins $\sigma_i = \pm 1$ läuft. Die Wechselwirkungskonstanten (Bonds) J_{ij} werden zufällig gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung gewählt, üblich sind Gauß-Verteilung und bimodale (zweiwertige) Verteilungen. B bezeichnet das externe Feld.

Im Rahmen dieser Arbeit werden einfache Gitter bestehend aus $N = L^d$ Spins (L = Kantenlänge, d = Dimension) ohne externes Feld betrachtet. Die Ergebnisse beschränken sich auf $d = 3$, für Beispiele werden auch zweidimensionale Systeme betrachtet. Die Wechselwirkungen werden zu $J_{ij} = \pm 1$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit gewählt, also gemäß der bimodalen Verteilung, und zwar so, daß die Nebenbedingung $\sum_{<ij>} J_{ij} = 0$ erfüllt ist.

Auch in einem Spinglas tritt Frustration auf. Als Beispiel ist in Abbildung 2.1 ein System aus 4 Spins dargestellt, wobei jeder Spin mit zwei Nachbarn gekoppelt ist. Es wird angenommen, daß der Spin links oben den Wert +1 annimmt, was durch einen Pfeil nach oben symbolisiert wird. Da für die Spins rechts oben und unten jeweils die gleiche Orientierung wie ihre Nachbarn energetisch günstiger ist (dargestellt durch die durchgezogenen Linien), stellen sie sich auch in Richtung +1 ein. Für den Spin links unten ist energetisch günstig die gleiche Orientierung wie sein rechter Nachbar, aber die umgekehrte Stellung seines oberen Nachbarn anzunehmen (gezackte Linie), was nicht gleichzeitig möglich ist. Ein solches System ist also auch frustriert. Bei Spingläsern spricht man auch speziell von *Bond-Frustration*, da sie nur durch Wahl der Wechselwirkungskonstanten entsteht. Die kleinsten geschlossenen Pfade in Gittern bezeichnet man als *elementare Plaquetten*. Man sieht leicht ein, daß eine elementare Plaquette immer dann frustriert ist, wenn die Anzahl ihrer negativen Bonds ungerade ist.

Eine Übersicht über die Theorie dieser Systeme findet sich z.B. in [13, 32]. Da Spingläser formal viel Ähnlichkeit zu neuronalen Netzen [42, 43, 81] haben, finden die für Spingläser entwickelten Methoden und ihre Ergebnisse auch Anwendung außerhalb der Physik, wie z.B. in der Neuroinformatik, der künstlichen Intelligenz oder der Biologie.

Experimente: Beispiele für experimentelle Vertreter von Spingläsern sind ungeordnete metallische Legierungen aus magnetischen und nicht-magnetischen Materialien wie $Cu_{1-x}Mn_x$ und $Au_{1-x}Fe_x$. Wechselwirkungen mit verschiedenen Vorzeichen bilden sich dabei aus, weil die magnetischen Momente mittels der sog. RKKY-Wechselwirkung aneinander gekoppelt sind, welche mit ansteigender Entfernung im Vorzeichen oszilliert und vom Betrag abnimmt. Ein Übersicht über Experimente an Spingläsern findet sich in [58].

Phasendiagramm($B = 0$): Durch die ungeordnete Verteilung von positiven und negativen Bonds kann sich im Spinglas weder eine ferromagnetische noch eine

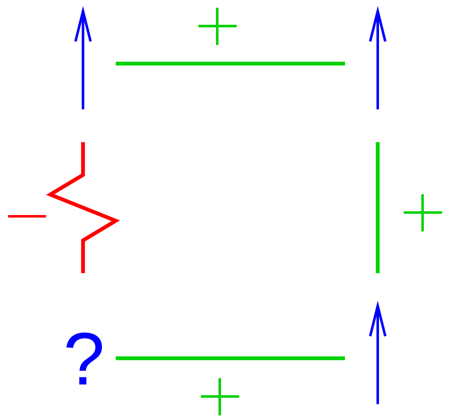


Abbildung 2.1.: Einfaches frustriertes System bestehend aus 4 Spins. Die Pfeile symbolisieren die Stellungen der Spins. Gerade Linien stellen ferromagnetische Bonds dar. Die gezackte Linie repräsentiert eine antiferromagnetische Wechselwirkung. Für den Spin links unten sind beide Orientierungen energetisch gleich.

antiferromagnetische Ordnung herausbilden. Man verwendet daher den Erwartungswert des Überlapps (siehe Def. (2.6)), gemittelt über alle Zustände und die Unordnung, als Ordnungsparameter [68, 69, 70, 71, 72]. Die Verteilung der Überlapps für eine Realisierung der Unordnung wird bei Spingläsern mit $P_J(q)$ bezeichnet. Da in dieser Arbeit nur Spingläser ohne externes Feld betrachtet werden, sind die Wahrscheinlichkeitsdichten symmetrisch: $P_J(q) = P_J(-q)$ und $P(q) = P(-q)$. Somit sind nur Mittelwerte des Betrags des Überlapps $|q|^n$ relevant:

$$\langle |q|^n \rangle := \int_{-1}^{1} |q|^n P_J(q) dq \tag{2.11}$$

$$\overline{|q|^n} := [\langle |q|^n \rangle]_{av} = \int_{-1}^{1} |q|^n P(q) dq \tag{2.12}$$

Dabei bezeichnet $\langle \cdot \rangle$ die Mittelung über alle q-Werte einer Realisierung, d.h. über alle Zustände eines Systems.
Für zweidimensionale (2d) Ising-Spingläser verschwindet der Ordnungsparameter für $T > 0$ [11], d.h. nur für Grundzustände zeigen die Systeme spinglas-artiges Verhalten. Bei 4d Spingläsern dagegen konnte die Existenz einer Spinglas-Phase bei endlicher Temperatur bereits mit geringem Aufwand durch Monte-Carlo- (MC-) Simulationen nachgewiesen werden [9, 11, 77]. Dabei wurde die Binder-Kumulante [12]

$$g := \frac{1}{2}\left[3 - \frac{[\langle q^4 \rangle]_{av}}{[\langle q^2 \rangle]_{av}^2}\right] \tag{2.13}$$

für verschiedene Temperaturen T und Systemgrößen L berechnet. Die Kurven $g(T, L)$ schneiden sich alle in einem $T_c > 0$. Für 3d Systeme wurde diese Analyse mit hohem Aufwand an Rechenzeit in [46] durchgeführt. Dort ergab sich ebenfalls ein Schnittpunkt bei endlichem T_c, aber der Effekt ist recht klein, so daß die Autoren die Möglichkeit von $T_c = 0$ nicht vollständig ausschließen möchten, siehe Abbildung 2.2. Weiter gibt es eine Vielzahl von Untersuchungen von kurzreichweitigen Spingläsern mittels Simulationen bei endlicher Temperatur. Eine aktuelle Übersicht findet sich in [53].

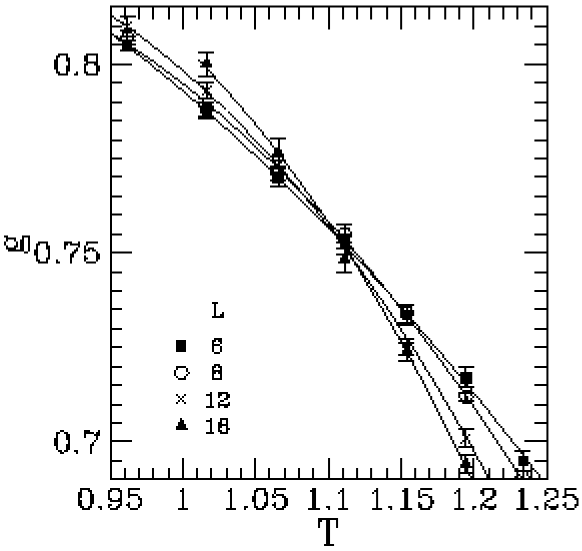


Abbildung 2.2.: Darstellung der Binder-Kumulante $g(T, L)$ (siehe Def. 2.13) für 3d Spingläser aus MC-Simulationen. Es gibt offenbar einen Schnittpunkt bei $T = 1.1$ was stark auf einen Phasenübergang bei dieser Temperatur hindeutet. Für eine völlige Eindeutigkeit sind die Meßpunkte im Rahmen der statistischen Ungenauigkeit noch zu nahe beieinander.

Grundzustände: Im allgemeinen Fall ist die exakte Berechnung von Spinglas-Grundzuständen *NP-vollständig* [3]. Das bedeutet, daß zur Zeit nur Algorithmen bekannt sind, deren Rechenzeit exponentiell mit der Anzahl der Spins wächst. Es wird vermutet, daß kein schnelleres Verfahren existiert, das konnte aber noch nicht bewiesen werden. Für den Spezialfall zweidimensionaler Systeme ohne äußeres Magnetfeld und periodische Randbedingungen nur in einer Richtung gibt es auch polynomiale Algorithmen [4]. Mit ihnen konnte durch Berechnung der Stiffness-Energie die Abwesenheit eines Phasenübergangs für $T > 0$ nachgewiesen werden [47], wie es bereits mit MC-Simulationen gezeigt wurde (s.o.).
Möchte man für 3d Systeme die Grundzustände exakt berechnen, ist man auf ein sehr komplexes Verfahren namens *Branch-and-Cut* [23, 24] angewiesen. Man muß sich zur Zeit aber auf kleinen Systeme bis ca 8^3 Spins beschränken [25]. Eine verwandte Methode, genannt *Branch-and-Bound*, ermöglicht nur die Berechnung noch kleinerer Systeme (4^3) in akzeptabler Zeit, liefert dafür aber *alle* Grundzustände und die ersten beiden Stufen angeregter Zustände [49, 50]. Für größere

Systeme ist man auf Näherungsverfahren angewiesen: In [6, 7] werden Grundzustände mittels MC-Simulation bei endlicher Temperatur berechnet, wobei die Temperatur auch eine Schwankungsgröße ist. Dieses *multikanonisches Ensemble* genannte Verfahren kann Systeme bis ca. 12^3 in kleiner Zahl behandeln. Mittels genetischer Algorithmen (siehe Kapitel 3.5) werden in [67] auch einige Systeme mit $N = 14^3$ berechnet. Die Kombination dieses genetischen Verfahrens mit dem in dieser Arbeit vorgestellten Algorithmus [38] ermöglicht die Berechnung vieler unabhängiger Grundzustände bis $N = 14^3$ mit guter Statistik [39].
Struktur der Grundzustände: Für die Spingläser beschränkt sich diese Arbeit auf die Untersuchung der Grundzustandsstruktur. Die Berechnung des Ordnungsparameters als Funktion von B, wie es beim DAFF durchgeführt wurde, wäre zu aufwendig. Die Struktur der Spinglas-Zustände wurde in der Vergangenheit bereits stark diskutiert. Es bildeten sich zwei Szenarien heraus, das *Mean-Field-* und das *Droplet-Modell*. In dieser Arbeit wird untersucht, welches Szenario die Grundzustände des $\pm J$-Modells besser beschreibt, daher werden die beiden Szenarien im folgenden Unterkapitel näher vorgestellt. Weiterhin zeigte sich, daß die im Rahmen des MF-Szenarios gefundenen Lösungen eine spezielle Eigenschaft haben, sie sind *ultrametrisch*. Im Rahmen dieser Arbeit werden später auch die Grundzustände des $\pm J$-Modells auf Ultrametrizität untersucht. Das zweite Unterkapitel erklärt deshalb diesen Begriff.

2.3.1. Mean-Field- und Droplet-Modell

Das Mean-Field-Modell basiert auf einem Spinglas-Modell, das von Sherrington und Kirkpatrik (SK) vorgeschlagen wurde [83]. Es hat kompliziertere Wechselwirkungen als das EA-Modell, kann aber analytisch gelöst werden. Ein solches System besteht aus N Spins, wobei jeder Spin mit jedem anderen wechselwirkt:

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}\sigma_i\sigma_j \tag{2.14}$$

Die Wechselwirkungskonstanten sind Gauß-verteilt:

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta}} \exp(-(J_{ij} - J_0)/2\Delta^2) \tag{2.15}$$

Dabei gilt $\Delta = \tilde{\Delta}/\sqrt{N}$ und $J_0 = \tilde{J}_0/N$. Die Faktoren $1/\sqrt{N}$ und $1/N$ verhindern eine Divergenz der Energie pro Spin bei $N \to \infty$. Für $J_0 \neq 0$ befindet sich das System in einem äußerem Feld, im folgenden wird nur $J_0 = 0$ behandelt. Zuerst gelang es Parisi [68, 69, 70, 71, 72], das Modell analytisch mittels der Mean-Field- (MF-) Theorie zu lösen. Bei tiefen Temperaturen ergibt sich eine komplexe Landschaft der freien Energie mit einer großen Anzahl von Minima, die durch sehr hohe Barrieren getrennt sind, was zu einer nicht-trivialen Verteilung der Überlapps führt (siehe Abbildung 2.3, [55]). Daraus ergibt sich, daß unabhängige Replikas beliebig verschieden sein können, man spricht deshalb auch von *Replika-Symmetrie-Brechung* (RSB).

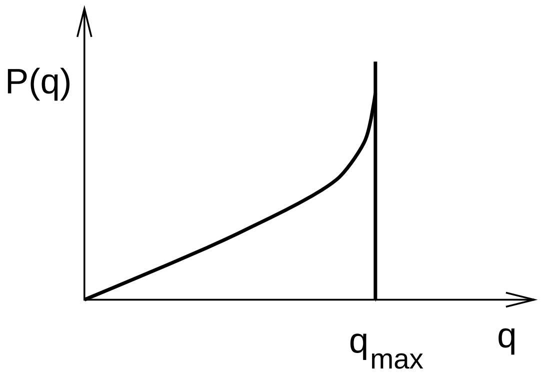


Abbildung 2.3.: Verteilung der Überlapps beim SK-Modell für tiefe Temperaturen. Für einen großen Bereich $[0, q_{max}]$ ist $P(|q|) \neq 0$. Dadurch wird angezeigt, daß es eine komplexe Energielandschaft gibt, die viele Minima aufweist, welche durch hohe Energiebarrieren voneinander getrennt sind.

Für die realistischen Spinglas-Modelle mit kurzreichweitiger Wechselwirkung ist noch nicht abschließen geklärt, ob Parisis MF-Schema auch für sie gilt, d.h. ob es eine komplizierte Energielandschaft gibt. Ein alternativer Ansatz, das *Droplet-Modell* [14, 15, 30, 31, 54], sagt voraus, daß nur zwei globale Minima in der (freien) Energielandschaft existieren, wobei die dazugehörigen Zustände gerade durch einen Flip aller Spins auseinander hervorgehen. Der Name des Modells rührt daher, daß man sich dort die kleinsten Anregungen aus dem Grundzustand als umgedrehte Gruppen von Spins, den sog. Droplets, vorstellt. Das impliziert, daß $P(q)$ für $L \to \infty$ gegen $P(q) = \frac{1}{2}(\delta(q - \overline{|q|}) + \delta(q + \overline{|q|}))$ konvergiert. (Die L-Abhängigkeit wird bei $P(q)$ nicht explizit mittels eine Indexes verdeutlicht.) Man spricht auch von Droplet-Scaling (DS). Für die Grundzustände bedeutet es, daß im wesentlichen nur zwei Grundzustände existieren. Für das $\pm J$ Modell tritt zwar immer eine hohe Entartung auf, aber die beschränkt sich nach der Droplet-Theorie auf viele kleine Cluster, die sich mehr oder weniger unabhängig voneinander in zwei Orientierungen einstellen können. Da nach dem zentralen Grenzwertsatz die Summe von Zufallszahlen gleicher Größenordnung gegen eine Gauß-Verteilung konvergiert, ergibt sich eine Gauß-artige Aufweitung von $P(|q|)$, welche mit steigendem L immer kleiner wird. Im Rahmen des MF-Bildes dagegen bleibt die Wahrscheinlichkeitsdichte ungleich Null für einen Bereich $-q_1 < q < q_1$ mit Spitzen bei $\pm q_{\max}$ $(0 < q_{\max} < q_1)$. Somit bleibt in diesem Modell die Varianz

$$\sigma^2(|q|) = \int_{-1}^{1} (\overline{|q|} - |q|)^2 P(q) dq = \overline{|q|^2} - \overline{|q|}^2 \tag{2.16}$$

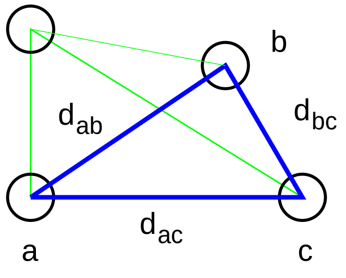
endlich für $L \to \infty$, während sie im Droplet-Bild verschwindet.
In dieser Arbeit wird durch die Analyse der Finite-Size-Verhaltens der Varianz von $P(|q|)$ und anderer Größen wie z.B. der Grundzustandsenergie getestet, ob das verwendete Modell eher MF- oder DS-Verhalten zeigt. Dabei werden folgende Fits zugrundegelegt:

$$f(L) = a_\infty + a_1/L^3 \quad (2.17)$$
$$g(L) = a_\infty + a_1 L^{-a_2} \quad (2.18)$$
$$h(L) = a_\infty + a_1 \exp(-a_2 L) \quad (2.19)$$

Die Funktion $g(L)$ wird verwendet, wenn für eine Größe ein Verhalten gemäß des Droplet-Modells angenommen wird, dabei ist $-a_2$ der Schätzwert für den $T = 0$ Scaling-Exponenten y [54], der auch mit Θ bezeichnet wird [30, 31]. Für das MF-Modell wird ein Skalenverhalten gemäß $f(L), h(L)$ in Erwägung gezogen [8].
Es wurden bereits einige Versuche unternommen, mittels Simulationen die Frage zu klären, ob das MF- oder das DS-Bild realistische Spingläser besser beschreibt. Frühe MC-Simulationen betrachteten zu kleine Systeme [9, 11, 18, 63, 64, 77] oder erreichten nicht das Gleichgewicht [45]. In [8] wurden Grundzustände mittels multikanonischer MC-Simulation berechnet, aber die Systeme waren auch zu klein. Erst aktuelle Simulationen [52] liefern deutliche Hinweise für die Richtigkeit des MF-Ansatzes auch für kurzreichweitige Spingläser. In die selbe Richtung gehen die Ergebnisse [39], die in dieser Arbeit vorgestellt werden.
Weiterhin gibt es noch Ansätze, welche die Konsistenz des MF-Bildes in Frage zu stellen versuchen [62], was hier aber nicht weiter verfolgt wird, da die Frage nach der Struktur der Grundzustände dort nicht beantwortet wird.

2.3.2. Ultrametrizität

Ein weiteres Kennzeichen der Lösungen des SK-Modells ist, daß die Struktur der Zustände untereinander ultrametrisch ist. Eine gute Einführung in Ultrametrizität findet man z.B. in [76]. Hier nur die wichtigsten Grundlagen:



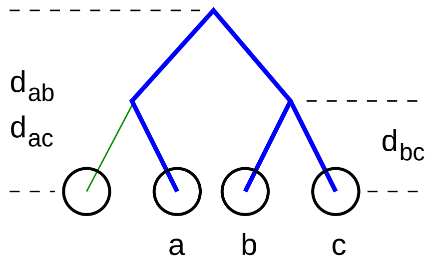


Abbildung 2.4.: Links: ein metrischer Raum. Wenn man von a nach c über b geht, sind die Teilwege kürzer als der direkte Weg, der Gesamtweg aber länger. Rechts: Ein Raum dessen Elemente die Blätter eines binären Baumes sind, und wo man sich nur entlang der Äste bewegen darf, ist ultrametrisch: Wenn man von a nach c will ist es genauso weit, wie von a nach b.

Unsere normale Lebensumgebung ist *metrisch*, d.h. für 3 verschiedene Punkte a, b, c im Raum und die Abstände zwischen diesen Punkten d_{ab}, d_{bc}, d_{ac} gilt die Dreiecksungleichung

$$d_{ac} \leq d_{ab} + d_{bc} \tag{2.20}$$

Somit ist es zum Beispiel möglich, einen langen Weg d_{ac} durch zwei kürzere d_{ab}, d_{bc} zu ersetzen, wobei deren Gesamtlänge wiederum größer als der direkte Weg sein kann (siehe Abbildung 2.4 links). Dies ist nicht möglich in einem ultrametrischen Raum, denn dort ist die Dreiecksungleichung wie folgt modifiziert:

$$d_{ac} \leq \max(d_{ab}, d_{bc}) \tag{2.21}$$

Somit ist mindestens einer der Teilwege so lang wie der direkte Weg. Ein gutes Modell für einen ultrametrischen Raum ist ein binärer Baum, wobei nur die Blätter des Baumes die Elemente des Raumes sind. Bei Spingläser sind zwei Zustände sehr nah beieinander, wenn ihr Überlapp groß ist, und sehr fern, wenn ihr Überlapp sehr klein ist. Man kann somit durch $d_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(1 - q^{\alpha\beta})$ eine Distanzfunktion erhalten. Mit dieser Distanzfunktion sind Lösungen des SK-Modells für tiefe Temperaturen ultrametrisch. Das ergibt sich aus der Parisi-Lösung, wurde aber auch in Monte-Carlo-Simulationen nachgewiesen [10]. Wenn man die modifizierte Dreiecksungleichung auf die Überlapps umschreibt, ergibt sich:

$$q^{\alpha\gamma} \geq \min(q^{\alpha\beta}, q^{\beta\gamma}) \tag{2.22}$$

Dabei sind die $q^{\alpha\beta}, q^{\alpha\gamma}, q^{\beta\gamma}$ die drei paarweise gebildeten Überlapps von drei beliebigen Gleichgewichts-Zuständen $\{\sigma_i^\alpha\}, \{\sigma_i^\beta\}, \{\sigma_i^\gamma\}$. Wenn man den kleinsten der drei Überlapps auf die linke Seite der Ungleichung schreibt, darf der kleinere der beiden Werte rechts höchstens genauso groß sein, muß also den selben Wert haben. D.h. aufgrund der ultrametrischen Struktur müssen von den drei Überlapps dreier beliebiger Gleichgewichts-Zustände mindestens zwei gleich sein, der dritte kann größer sein.

In endlichen Systemen ist diese Bedingung nicht mehr exakt erfüllt. Die Methoden, die verwendet werden um diesen Finite-Size-Effekten Rechnung zu tragen, sind in Kapitel 4.2 aufgeführt, wo die Ergebnisse der Berechnungen vorgestellt werden.

2.4. Einführung in die Graphentheorie

Im folgenden werden die Begriffe der Graphentheorie [21, 51, 84] vorgestellt, welche für das Verständnis der Arbeit notwendig sind.

Ein *gerichteter Graph* $G = (V, E)$ besteht aus einer Menge V von *Knoten* und einer Menge $E \subset V \times V$ von *Kanten*. Bildlich läßt sich ein Graph wie folgt darstellen: Für jeden Knoten wird ein Kreis gezeichnet. Eine Kante $e = (i, j)$ wird durch einen Pfeil vom Knoten i zum Knoten j repräsentiert.

Für eine Kante $e = (i, j)$ heißt i *Vorgänger* von j und j *Nachfolger* von i. Knoten, die durch Kanten verbunden sind, heißen *benachbart*.

Ein *Pfad* ist eine Folge $i_1, \ldots, i_n$ von Knoten, so daß $(i_k, i_{k+1}) \in E$ für $k = 1, \ldots, n-1$ gilt. Falls von Knoten i zu Knoten j ein Pfad existiert, so sagt man, j

ist von i aus *erreichbar*. Manchmal nennt man auch die Folge der Kanten (i_k, i_{k+1}) $(k = 1, \ldots, n-1)$ einen Pfad. Ein *Zyklus* ist ein Pfad, für den $i_1 = i_n$ gilt. Die Folge $i_1, \ldots, i_n$ heißt *Knotenfolge*, wenn für $k = 1, \ldots, n-1$ $(i_k, i_{k+1}) \in E$ oder $(i_{k+1}, i_k) \in E$ gilt. Eine Knotenfolge ist somit eine Art Pfad, bei dem die Kanten irgendwie orientiert sein können. Die Kantenmenge, welche die Knotenfolge verbindet, heißt *Kantenfolge*.
Ein *Schnitt* des Graphen zwischen zwei Knoten i_Q und i_S ist eine Aufteilung der Knotenmenge V in zwei Mengen Q, $\overline{Q}$ $(V = Q \cup \overline{Q})$, welche disjunkt sind $(Q \cap \overline{Q} = \emptyset)$ und für die gilt: $i_Q \in Q$ und $i_S \in \overline{Q}$. Entfernt man die Kanten (i,j) mit $i \in Q$ und $j \in \overline{Q}$ aus G, so ist i_S nicht mehr von i_Q aus erreichbar, der Graph ist in zwei Teile „zerschnitten".
Man kann den Kanten $e = (i,j)$ eines Graphen *Bewertungen*, d.h. reelle Zahlen $c(i,j)$ zuweisen. Falls man mittels einer Kante den Transport einer Größe von einem Knoten zum nächsten ausdrückt, so ist die *Kapazität* der Kante eine Bewertung.[1] Man nennt dann die Graphen auch *(Transport-) Netzwerke*. Man kann ein Netzwerk als System von Bewässerungskanälen betrachten. Die Zahlen $c(i,j) \geq 0$ geben dann an, wieviel Liter Flüssigkeit pro Sekunde maximal durch einen Kanal fließen kann.
Die Kapazität eines Pfades ist das Minimum der Kapazitäten der Kanten des Pfades.
Da man zum Zerschneiden eines Netzwerks in zwei Teile gerade die Kanten entfernen muß, die von Q nach $\overline{Q}$ führen, bezeichnet man die Summe ihrer Kapazitäten als *Kapazität* $c(Q, \overline{Q})$ *des Schnitts*:

$$c(Q, \overline{Q}) = \sum_{i \in Q, j \in \overline{Q}} c(i,j) \tag{2.23}$$

Die Kanten, die in umgekehrter Richtung von $\overline{Q}$ nach Q führen, tragen nicht zur Kapazität des Schnitts bei. Wieviel tatsächlich durch eine Kante $e = (i,j)$ fließt, gibt der *Fluß* $f(i,j) \geq 0$ an. Ein System von Flüssen von einem als *Quelle* bezeichnetem Knoten i_Q zu einer *Senke* i_S, welches den Gesamtfluß v von i_Q nach i_S transportiert, muß definitionsgemäß folgende Bedingungen erfüllen:

- Antisymmetrie: $f(i,j) = -f(j,i)$
- In allen Knoten außer i_S, i_Q bleibt der Fluß erhalten:
  $\sum_j f(j,i) = 0$ für alle $i \neq i_Q, i_S$.
- Der Fluß „entspringt" der Quelle:
  $\sum_j f(i_Q, j) = v$.
- Der Fluß „verschwindet" in der Senke:
  $\sum_j f(i_S, j) = -v$.

[1] In diesem Fall kann man der Einfachheit halber $c(i,j) = 0$ für $(i,j) \in V \times V \setminus E$ annehmen.

- Kein Fluß kann die Kapazität überschreiten:
  $f(i,j) \leq c(i,j)$ für alle $i, j \in V$.

- Allen anderen nicht vorhandenen Kanten sowie Kanten, die von einem Knoten zu ihm selbst führen, wird der Fluß 0 zugeordnet:
  $f(i,j) = 0$ für $i = j$ oder $(i,j) \notin E \quad \wedge \quad (j,i) \notin E$.

Eine Kante (i,j), für die $f(i,j) = c(i,j)$ gilt, nennt man *gesättigt*, sonst *ungesättigt*. Ein Pfad ist gesättigt, falls eine Kante des Pfades gesättigt ist.
Da ein Schnitt verhindert, daß überhaupt etwas von der Quelle zur Senke fließt, kann nicht mehr durch den Graphen fließen als durch jeden beliebigen Schnitt. Somit gilt: Der maximale Fluß zwischen i_Q und i_S ist gleich der minimalen Kapazität aller Schnitte zwischen i_Q und i_S (genauer Beweis siehe [51]). Ein Schnitt mit der minimalen Kapazität wird als *minimaler Schnitt* bezeichnet.
Im weiteren werden nur noch Graphen G betrachtet, die folgende Eigenschaften haben:

- G enthält keine Zyklen.

- Es existiert genau eine Quelle i_Q und genau eine Senke i_S.

- i_Q hat keine Vorgänger und i_S keine Nachfolger.

- Jeder Knoten $i \neq i_Q$ ist von i_Q aus erreichbar.

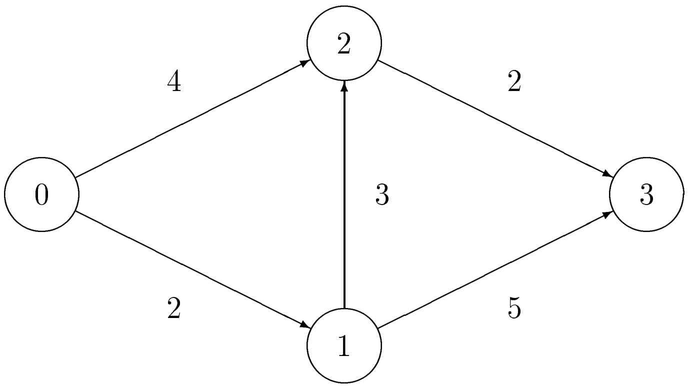


Abbildung 2.5.: Ein Beispielgraph

Als Beispiel für die in diesem Abschnitt eingeführten Begriffe ist in Abbildung 2.5 ein Graph $G = (V, E)$ abgebildet. Es gilt

$$\begin{aligned} V &= \{0, 1, 2, 3\} \\ E &= \{(0,1), (0,2), (1,2), (1,3), (2,3)\}. \end{aligned} \tag{2.24}$$

Knoten 3 ist Nachfolger von Knoten 2, Knoten 0 ist Vorgänger von Knoten 2. Knoten 3 ist von Knoten 0 aus erreichbar, z.B. über den Pfad 0,2,3. Der Graph enthält keine Zyklen.
Als Quelle wird $i_Q = 0$ und als Senke $i_S = 3$ ausgezeichnet. Die Kapazitäten der Kanten sind $c(0,1) = 2$, $c(0,2) = 4$, $c(1,2) = 3$, $c(1,3) = 5$, $c(2,3) = 2$. Der maximale Fluß durch G hat den Wert 4. Der zugehörige Schnitt minimaler Kapazität ist $S = \{0,2\}$ und $\overline{S} = \{1,3\}$. Man kann somit den Graphen mit minimalen Aufwand zerschneiden, wenn man die Kanten $(0,1)$ und $(2,3)$ entfernt.

3. Algorithmen

In diesem Kapitel wird die grundlegende Methode vorgestellt, welche die Berechnung der exakten Grundzustände von nicht Bond-frustrierten Systemen ermöglicht: Es wird ein Netzwerk konstruiert, dessen maximaler Fluß gleich der Grundzustandsenergie ist. Weiterhin wird gezeigt, wie *alle* entarteten Grundzustände dieser Systeme mittels kleinerer Graphen oder Relationen repräsentiert werden. Die dabei verwendeten Algorithmen zur Berechnung des maximalen Flusses und zur Darstellung aller minimaler Schnitte eines Netzwerks werden im Anhang erläutert. Die Laufzeit dieser Verfahren wird experimentell wiederum in diesem Kapitel untersucht.
Des weiteren enthält dieses Kapitel alle im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Verfahren: Es wird gezeigt, wie alle Grundzustände von Zufallsfeldsystemen und verdünnten Antiferromagneten in beliebigen Feld-Intervallen berechnet werden können. Danach wird demonstriert, wie die bisher genannten Verfahren auf Spingläser übertragen werden können und so eine sehr gute Approximation ihrer Grundzustände ermöglicht wird, die sog. *Cluster-Exakte Approximation* (CEA). Zur Erhöhung der Effizienz wird CEA zusammen mit einem genetischen Algorithmus angewendet.

3.1. Äquivalenz der Grundzustandsenergie von RFIM/DAFF zum maximalen Fluß durch eine Netzwerk

In diesem Kapitel wird gezeigt, wie man die Grundzustände der Zufallsfeldsysteme und verdünnten Antiferromagneten gewinnen kann, indem man sie in ein Netzwerk transformiert und dessen maximalen Fluß ausrechnet.
Dazu wird zuerst die Formel umgeschrieben, die die Kapazität eines Schnitts angibt [73] und dann speziell für die betrachteten Systeme angewendet.

3.1.1. Kapazität eines Schnitts

Sei $G = (V, E)$ ein Graph mit $N+2$ Knoten und den Kapazitäten $c(i, j)$ $(i, j \in V)$. Im folgenden werden für die Knoten natürliche Zahlen verwendet: $V = \{0, 1, \ldots, N+1\}$. Die Quelle des Graphen sei $k_Q = 0$ und die Senke $k_S = N + 1$. Alle Kanten, die von k_Q ausgehen oder in k_S enden, werden als *äußere* Kanten bezeichnet. Alle anderen Kanten heißen *innere* Kanten.
Die Kapazität eines Schnittes $(Q, \overline{Q})$ zwischen Knoten 0 und Knoten $N + 1$ ist nach Gleichung (2.23):

$$c(Q,\overline{Q}) = \sum_{i\in Q, j\in\overline{Q}} c(i,j) \tag{3.1}$$

Jeder Schnitt zwischen 0 und $N+1$ kann gemäß [34] durch einen Vektor $\underline{X} = (1, x_1, \ldots, x_N, 0)$ dargestellt werden, wobei gilt: $x_i = 1$ falls $i \in Q$, $x_i = 0$ sonst. Wegen $x_i(1-x_j) = 1$ gdw. $x_i = 1 \wedge x_j = 0$ gdw. $i \in Q \wedge j \in \overline{Q}$ gilt:

$$c(Q,\overline{Q}) = c(\underline{X}) := \sum_{i,j=0}^{N+1} c(i,j)x_i(1-x_j) \tag{3.2}$$

Durch Einsetzten von $x_0 = 1$ und $x_{N+1} = 0$ ergibt sich

$$\begin{aligned} c(\underline{X}) &= -\sum_{i,j=1}^{N} c(i,j)x_ix_j + \sum_{i=1}^{N}[c(i,N+1) - c(0,i) + \sum_{j=1}^{N} c(i,j)]x_i + \\ &\quad c(0,N+1) + \sum_{j=1}^{N} c(0,j) \end{aligned} \tag{3.3}$$

Wenn man nun eine beliebige Funktion der Form

$$F(\underline{X}) = -\sum_{i,j=1}^{N} q_{ij}x_ix_j + \sum_{i=1}^{N} p_ix_i + K \tag{3.4}$$

betrachtet ($x_i \in \{0,1\}$ für $i \in \{1,\ldots,N\}$), so gilt $c(\underline{X}) = F(\underline{X})\ \forall \underline{X} \in \{0,1\}^N$ genau dann, wenn gilt:

$$c(i,j) + c(j,i) = q_{ij} + q_{ji} \quad \forall i,j \in \{1,\ldots,N\} \tag{3.5}$$

$$c(i,N+1) - c(0,i) = p_i - \sum_{j=1}^{N} c(i,j) \quad \forall i \in \{1,\ldots,N\} \tag{3.6}$$

$$c(0,N+1) = K - \sum_{j=1}^{N} c(0,j) \tag{3.7}$$

Somit ist die Berechnung des Minimums von $F(\underline{X})$ äquivalent zur Ermittlung des minimalen Schnitts von G, wenn die Kapazitäten den Bedingungen (3.5) bis (3.7) genügen.
Um den minimalen Schnitt auszurechnen, müssen aber alle Kapazitäten bis auf $c(0,N+1)$ nicht–negative Werte haben.[1]
Wenn man für gegebene Werte $q_{ij} \geq 0$ $(i,j = 1,\ldots,N)$ die Kapazitäten der Kanten gemäß folgenden Regeln wählt, sind alle Kapazitäten bis auf $c(0,N+1)$ nicht negativ:

[1] Die Kante $(0,N+1)$ muß in jedem Schnitt, der die Knoten 0 und $N+1$ trennt, enthalten sein. Folglich kann man sie vor Berechnung des minimalen Schnitts aus dem Graphen entfernen und später wieder hinzufügen, sie wird deshalb auch *Phantomkante* genannt. Wenn man die Kapazität des Schnitts berechnet, wird $c(0,N+1)$ einfach hinzu addiert, auch wenn der Wert negativ ist.

- Setze $c(i,0)$, $c(N+1,i)$ und $c(i,i)$ auf 0 für alle $i = 0, 1, \ldots, N+1$.
- Für jedes Paar (i,j) mit $i < j$ $(i,j = 1, \ldots, N)$ setze einen der beiden Werte $c(i,j)$, $c(j,i)$ auf 0.
- Wähle die übrigbleibenden Kapazitäten so, daß sie nicht–negativ sind und die Bedingungen (3.5) bis (3.7) erfüllen.

3.1.2. Netzwerke von RFIM und DAFF

Hier werden nun die Netzwerke angegeben, welche sich speziell für Zufallsfeldsysteme und verdünnte Antiferromagnete ergeben.
Um die Hamiltonfunktion des RFIM auf die Form der Gleichung (3.4) zu bringen, welche den Bedingungen (3.5) bis (3.7) genügt, wird folgende Transformation durchgeführt:

$$\sigma_i = (2x_i - 1) \tag{3.8}$$

Dadurch wird $\sigma_i = \pm 1$ nach $x_i = 0, 1$ transformiert. Um Zyklen im Netzwerk zu verhindern, was die verwendeten Algorithmen vereinfacht, werden nur dann Kapazitäten größer als 0 zugelassen, wenn für die Kante (i,j) die Bedingung $i < j$ erfüllt ist. Insgesamt ergibt sich ($N(i)$ sei die Menge der nächsten Nachbarn von Gitterplatz i):

- fehlende Kanten:
  Setze $c(i,0)$, $c(N+1,i)$ und $c(i,i)$ auf 0 für alle $i = 0, 1, \ldots, N+1$.
- innere Kanten:
  Setze
  $$c(i,j) := \begin{cases} 4J & \text{falls} \quad j \in N(i) \wedge i < j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.9}$$
  für alle $i, j = 1, \ldots, N$.
- äußere Kanten:
  Für alle $i = 1, \ldots, N$:
  setze $w(i) := [2J \sum_{j \in N(i)} 1 - 2B_i] - \sum_{j \in N(i)} c(i,j)$. Falls $w(i) \geq 0$ setze $c(i, N+1) := w(i)$ und $c(0,i) := 0$, sonst setze $c(i, N+1) := 0$ und $c(0,i) := -w(i)$.
- Phantomkante:
  Setze $c(0, N+1) := -J \sum_{<i,j>} 1 + \sum_{i=1}^{N} B_i - \sum_{j=1}^{N} c(0,j)$.

Dabei ist $\sum_{j \in N(i)} 1$ die Zahl der Nachbarn von Spin i und $\sum_{<i,j>} 1$ die Zahl der Bonds im System.
Als Beispiel wird nun eine eindimensionale RFIM-Kette mit offenen Enden betrachtet, welche aus vier Spins $\sigma_1, \ldots, \sigma_4$ besteht. Die Zufallsfelder haben die

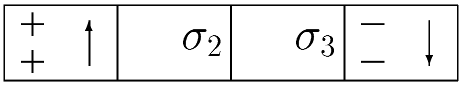


Abbildung 3.1.: Beispiel: RFIM-System mit vier Spins.

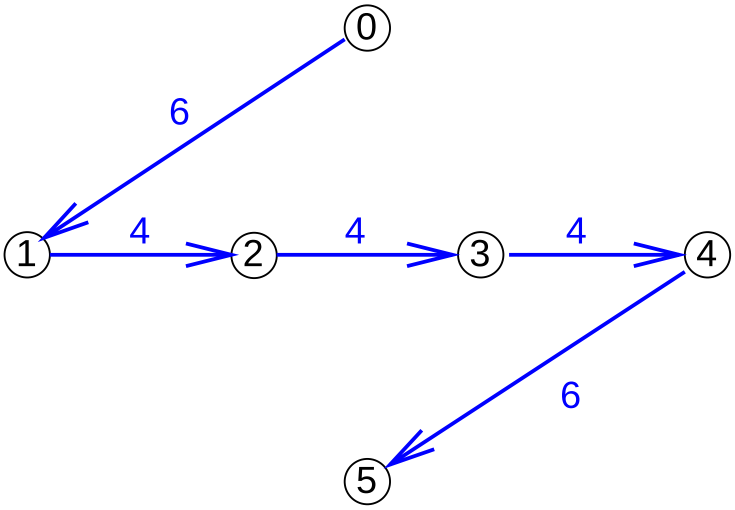


Abbildung 3.2.: Resultierendes Netzwerk einer ferromagnetischen Spin-Kette mit lokalen Feldern. Der maximale Fluß ist 4. Es gibt drei minimale Schnitte, welche durch die drei Kanten $(1, 2)$, $(2, 3)$ bzw. $(3, 4)$ gegeben sind.

Werte $B_1 = 2, B_2 = B_3 = 0, B_4 = -2$ $(J = 1)$. Das System ist in Abbildung 3.1 dargestellt.
Es ergeben sich folgende Kapazitäten gemäß der in der Vorschrift (3.9) dargestellten Regeln, wobei 0 der Quellknoten und 5 der Senkenknoten ist:

- fehlende Kanten:
  $c(1, 0) = c(2, 0) = c(3, 0) = c(4, 0) = c(5, 0) = 0$ (keine Kanten zur Quelle)
  $c(5, 1) = c(5, 2) = c(5, 3) = c(5, 4) = 0$ (keine Kanten von der Senke)
  $c(0, 0) = c(1, 1) = c(2, 2) = c(3, 3) = c(4, 4) = c(5, 5) = 0$ (keine Zyklen)

- innere Kanten:
  $c(1, 2) = 4$, $c(2, 3) = 4$ und $c(3, 4) = 4$.
  Sonst existieren keine Kanten zwischen den Knoten 1 bis 4.

- äußere Kanten:

i=1: $w(1) = [2 * 1 - 2 * 2] - 4 = -6$
$\Rightarrow \quad c(1, 5) = 0, c(0, 1) = 6$

i=2: $w(2) = [2 * 2 - 2 * 0] - 4 = 0$
$\Rightarrow \quad c(2, 5) = 0, c(0, 2) = 0$

i=3: $w(3) = [2*2-2*0]-4 = 0$
$\Rightarrow \quad c(3,5) = 0, c(0,3) = 0$

i=4: $w(4) = [2*1-2*(-2)]-0 = 6$
$\Rightarrow \quad c(4,5) = 6, c(0,4) = 0$

- Phantomkante:
  $c(0,5) = -3 + (2+0+0-2) - (6+0+0+0) = -9$

Das sich so ergebene Netzwerk ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Offenbar kann maximal ein Fluß mit dem Wert $f_{max} = 4$ durch das Netz fließen. Damit ergibt sich insgesamt die Kapazität $f_{max} + c(0,5) = -5$, welches genau die Grundzustandsenergie ist, wie wir im nächsten Abschnitt sehen werden. Für den minimalen Schnitt kann man alternativ die Kanten $(1,2)$, $(2,3)$ oder $(3,4)$ entfernen, d.h. der Grundzustand ist dreifach entartet. Mittels des charakteristischen Vektors dargestellt bedeutet dies $\underline{X} = (1,1,0,0,0,0)$, $\underline{X} = (1,1,1,0,0,0)$ oder $\underline{X} = (1,1,1,1,0,0)$. Die drei Schnitte entsprechen den Spin-Konfigurationen $(+1-1-1-1)$, $(+1+1-1-1)$ und $(+1+1+1-1)$.
Wie sich eine physikalische Änderung des Systems auf das Netzwerk auswirkt, zeigt folgendes Beispiel: Man denke sich ein Magnetfeld $B_2 > 0$ auf Spin σ_2 wirken. Dadurch erhält man den Wert $w(2) = -2B_2$, also ergibt sich zusätzlich eine Kante $(0,2)$ mit Kapazität $2B_2$. Die Gesamtkapazität des Netzwerks erhöht sich nicht, aber durch Entfernen der Kante $(1,2)$ erhält man keinen Minimalen Schnitt mehr, denn es kann nun zumindestens ein Teil des Flusses noch über die neue Kante fließen. Physikalisch bedeutet bedeutet das, es gilt $\sigma_2 = +1$ in allen Grundzuständen. Das Magnetfeld richtet den Spin also nach oben aus.
Für verdünnte Antiferromagneten werden die Spins wie folgt transformiert

$$\sigma_i = (2x_i - 1)t(i) \tag{3.10}$$

Die Funktion $t(i)$ teilt das kubische Gitter des DAFF schachbrettartig in zwei Untergitter ein: $t(i) = (-1)^{x+y+z}$ für einen Spin i, welcher die Koordinaten (x,y,z) hat. Dieser Faktor sorgt dafür, daß die Kopplungen zwischen benachbarten Gitterplätzen ferromagnetisch werden. Für die Kopplungskonstanten ergibt sich dann:

- fehlende Kanten:
  Setze $c(i,0)$, $c(N+1,i)$ und $c(i,i)$ auf 0 für alle $i = 0,1,\ldots,N+1$.

- innere Kanten:
  Setze
  $$c(i,j) := \begin{cases} 4J\epsilon_i\epsilon_j & \text{falls} \quad j \in N(i) \wedge i < j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{3.11}$$
  für alle $i,j = 1,\ldots,N$.

- äußere Kanten:
  Für alle $i = 1,\ldots,N$:

setze $w(i) := \epsilon_i[2J\sum_{j\in N(i)}\epsilon_j - 2Bt(i)] - \sum_{j\in N(i)} c(i,j)$. Falls $w(i) \geq 0$ setze $c(i,N+1) := w(i)$ und $c(0,i) := 0$, sonst setze $c(i,N+1) := 0$ und $c(0,i) := -w(i)$.

- Phantomkante:
  Setze $c(0,N+1) := -J\sum_{<i,j>}\epsilon_i\epsilon_j + \sum_{i=1}^N B\epsilon_i t(i) - \sum_{j=1}^N c(0,j)$.

Die so konstruierten Netzwerke enthalten also Kanten für alle Bonds in den ursprünglichen Systemen und zusätzlich für jeden Knoten eine Kante von der Quelle oder eine Kante zur Senke.
Zur Konstruktion eines Grundzustandes muß man zunächst den maximalen Fluß durch ein solches Netzwerk berechnen. Dazu werden bekannte effiziente Algorithmen verwendet, die aber zum Teil noch nicht Eingang in Lehrbücher gefunden haben und deshalb im Anhang A.1 erläutert werden. Damit läßt sich dann ein minimaler Schnitt zwischen den Knoten 0 und $N+1$ konstruieren, welcher den Vektor $\underline{X} = (x_1,\ldots,x_N)$ liefert. Wie *alle* minimalen Schnitte und damit alle Grundzustände dargestellt werden, wird im nächsten Abschnitt erläutert. Durch Einsetzen in $C(\underline{X})$ ergibt sich die Grundzustandsenergie, mittels der Transformation in Gleichung (3.8) bzw. (3.10) die zugehörige Spin-Konfiguration.

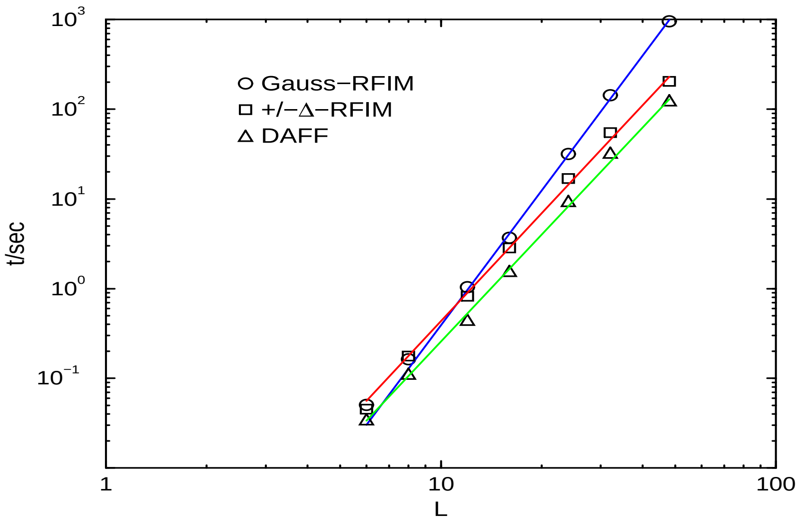


Abbildung 3.3.: Laufzeit der Berechnung eines Grundzustandes für DAFF, $\pm\Delta$-RFIM und Gauß-RFIM. Der Testrechner war ein SPARC-10 Clone mit 50 MHz. Es ergeben sich Laufzeiten $t(L) \sim L^4$ (DAFF, $\pm\Delta$-RFIM) bzw. $t(L) \sim L^5$ (Gauß-RFIM).

Die im Anhang A.1 geschilderten Algorithmen zur Berechnung des maximalen Flusses in einem Netzwerk mit einer Quelle und einer Senke sind polynomial, d.h. die Ausführungszeit als Funktion der Zahl der Knoten und Kanten im Graph läßt sich durch ein Polynom nach oben abschätzen. In der im Anhang genannten Literatur werden entsprechende Abschätzungen für beliebige Graphen vorgenommen. Da die hier verwendeten Systeme eine besondere Struktur haben, sind die Algorithmen schneller, als die Abschätzungen angeben. Deshalb wurden die Ausführungszeiten auch experimentell ermittelt. In Abbildung 3.3 sind die Laufzeiten auf einem SPARC-10 kompatiblen Rechner (50MHz) für DAFF, $\pm\Delta$-RFIM und Gauß-RFIM als Funktion der Kantenlänge L angegeben. Die Werte wurden über je 1000 Systeme bei $B = 1.4$ (DAFF) bzw. $\Delta = 2.3$ (RFIM) gemittelt. Wie man sieht, ergeben sich Laufzeiten von $t(L) \sim L^4$ für DAFF und zweiwertigen RFIM und $t(L) \sim L^5$ für den Gauß-verteilten RFIM. Für andere Werte der Felder sind die Laufzeiten erfahrungsgemäß ähnlich oder sogar kleiner.

3.2. Berechnung aller entarteten Grundzustände

Für die Analyse der Grundzustandsstruktur eines System benötigt man alle oder zumindestens viele verschiedene Grundzustände. Für Zufallsfeldsysteme und verdünnte Antiferromagnete kann man *alle* Grundzustände bei gegebenen Feld B, Δ und Wechselwirkungskonstante J berechnen. Die Größen B, Δ, J müssen ganzzahlig sein, damit die Verfahren funktionieren. Wie bereits erwähnt, wird der Grundzustand berechnet, indem das System in ein Netzwerk transformiert [73] und sein maximaler Fluß berechnet [87, 86] wird.

Einen minimalen Schnitt, der genau *einem* Grundzustand entspricht, kann man sehr leicht erhalten: Man plaziert alle Knoten, welche sich von der Quelle aus über ungesättigte Kanten erreichen lassen, links vom Schnitt, d.h. in Q, und die restlichen Knoten rechts vom Schnitt, d.h. in $\overline{Q}$. Beim Ferromagneten erhalten die Spins, welche den Knoten in Q entsprechen, gerade den Wert $+1$, die anderen den Wert -1. Beim Antiferromagneten wird aufgrund der beiden Untergitter zusätzlich noch jeder zweite Spin mit -1 multipliziert.

Wenn man aber an *allen* Grundzuständen eines Systems (bei festem B, Δ) interessiert ist, wird die Berechnung etwas komplizierter: Das oben berechnete Netzwerk wird einigen Transformationen unterworfen [74], dann kann man alle entarteten Grundzustände eines Systems durch eine Menge $\overline{V} = \{S = V_0, V_1, \ldots, V_n, V_{n+1} = T\}$ von Clustern und durch eine binäre Relation $\overline{R}$, definiert auf $\overline{V}$, darstellen. Jeder Cluster V_i ist eine Menge von antiferromagnetisch (DAFF) bzw. ferromagnetisch geordneten Spins. Diese Spins müssen nicht notwendigerweise räumlich verbunden sein. Die Relation beschreibt Abhängigkeiten zwischen den Orientierungen der Cluster. Das Verfahren, mit dem man aus einem Netzwerk mit einer Quelle und einer Senke diese Mengen und die Relation erhalten kann, wird im Anhang A.2 dargestellt.

Mittels eines Paares $(\overline{V}, \overline{R})$ wird ein Grundzustand dann wie folgt konstruiert: Jedem Cluster V_k ($k = 0, \ldots, n+1$) wird eine *Orientierung* (oder ein *Vorzeichen*) $s(V_k) = \pm 1$ zugewiesen:

Die Vorzeichen der Cluster S,T sind festgelegt: $s(S) = 1, s(T) = -1$. Für alle anderen Cluster V_k ($k = 1, \ldots, n$), genannt *innere Cluster*, kann die Orientierung frei gewählt werde, wobei folgende Bedingung beachtet werden muß ($l = 1, \ldots, n$):

$$\textbf{FALLS } s(V_k) = +1 \textbf{ UND } (V_k, V_l) \in \overline{R} \textbf{ DANN } s(V_l) = +1 \tag{3.12}$$

Somit gilt: Falls ein Cluster die Orientierung +1 hat, dann müssen alle seine Nachfolger in der Relation $\overline{R}$ ebenfalls die Orientierung +1 haben.
Aus den Vorzeichen der Cluster werden die Orientierungen der Spins $i \in V_k$ wie folgt berechnet:

$$\sigma_i = t(i)s(V_k) \quad \text{(DAFF)} \tag{3.13}$$

$$\sigma_i = s(V_k) \quad \text{(RFIM)} \tag{3.14}$$

Die Funktion $t(i)$ teilt die Gitter des DAFF in zwei Untergitter ein, siehe Def. (3.10). Somit enthalten die Cluster S,T diejenigen Spins, welche in allen entarteten Grundzuständen die gleiche Orientierung haben, für jede Orientierung einer der beiden Cluster. Alle anderen Cluster enthalten die Spins, die zur Entartung des Grundzustandes beitragen. Die Abhängigkeiten zwischen den Spins benachbarter Cluster werden durch die Relation $\overline{R}$ beschrieben.
Diese Darstellungsweise soll nun anhand eines Beispiels verdeutlicht werden. Dabei geht es nun nicht darum, darzustellen, wie aus dem Netzwerk die Menge $\overline{V}$ und die Relation $\overline{R}$ konstruiert werden, denn das wird im Anhang A.2 dargestellt. Vielmehr soll hier gezeigt werden, daß die Darstellung mittels einer Relation angemessen ist, und die Relation auch direkt konstruiert werden kann. Das Beispielsystem ist wieder die eindimensionale RFIM-Kette mit offenen Enden, welche aus vier Spins $\sigma_1, \ldots, \sigma_4$ besteht. Die Zufallsfelder haben die Werte $B_1 = 2, B_2 = B_3 = 0, B_4 = -2$ ($J = 1$). Somit sind die Werte der beiden Randspins im Grundzustand festgelegt: $\sigma_1 = 1, \sigma_4 = -1$. Die Orientierungen der beiden inneren Spins sind nicht festgelegt. Das System wurde bereits in Abbildung 3.1 dargestellt.
Die Energie des Systems als Funktion der zwei verbleibenden Spins lautet $H = -4 - \sigma_2 + \sigma_3 - \sigma_2\sigma_3$. Die Werte der vier möglichen Zustände sind in Tabelle 3.1 dargestellt.

σ_2	σ_3	H
$+1$	$+1$	-5
$+1$	-1	-5
-1	$+1$	-1
-1	-1	-5

Tabelle 3.1.: Energie für Kette bestehend aus vier Spins als Funktion der beiden inneren Spins. Der Grundzustand ist dreifach entartet.

Somit ist der Grundzustand des Systems dreifach entartet. Er kann durch folgende Regel beschrieben werden: Die inneren Spins sind nicht fixiert, aber falls $\sigma_3 = +1$

gilt, dann muß ebenfalls $\sigma_2 = +1$ gelten. Somit kann man den Grundzustand des Systems formal wie folgt darstellen:

$$\overline{V} = \{S, V_1, V_2, T\}, S = \{1\}, V_1 = \{2\}, V_2 = \{3\}, T = \{4\} \tag{3.15}$$

und

$$\overline{R} = \{(2, 1)\} \tag{3.16}$$

Der Grundzustand kann als Graph veranschaulicht werden. Knoten repräsentieren die Cluster und Kanten stellen die Relation dar. Weil in einem "realen" System die Cluster sehr groß werden können, werden nicht alle Spins einzeln aufgeführt. Statt dessen wird nur die (AF) Magnetisierung jedes Clusters angegeben. Deren Betrag ist gleich der Anzahl der Spins im Cluster. Für die inneren Cluster, deren Ordnungsparameter zwei Werte annehmen kann, wird immer der Wert der Orientierung $s(V_k) = -1$ angegeben. Der Graph, welcher zum Beispielsystem gehört, ist in Abb. 3.4 gezeigt.

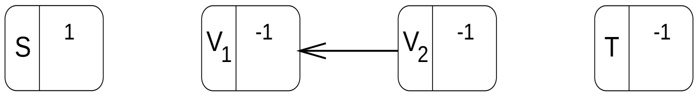


Abbildung 3.4.: Relation $\overline{R}$ für ein Beispiel RFIM.

Später wird aus der Relation $\overline{R}$ eine sehr gute obere Schranke für die Anzahl der möglichen Grundzustände berechnet, d.h. der Entartungsgrad. Im Anhang A.3 ist der verwendete Algorithmus aufgeführt.

3.3. Behandlung eines ganzes Feldintervalls

In diesem Abschnitt soll gezeigt werden, wie die Grundzustände eines Zufallsfeldsystems oder verdünnten Antiferromagneten vollständig über einen ganzen B, Δ-Intervall berechnet werden können. Das ist möglich, da sich die Grundzustände innerhalb bestimmter kleiner B, Δ-Bereiche nicht ändern, also abschnittsweise konstant sind.

Um das Verfahren zu verstehen, betrachten wir nun einen Cluster C eines DAFF mit der Magnetisierung $m_C = m_C^\uparrow - m_C^\downarrow$ ($m_C^\uparrow, m_C^\downarrow \geq 0$ sind die Anzahl der Spins im $+1$ bzw. -1 Zustand). Es wird angenommen, daß der Cluster innerhalb eines B-Intervalls $[B_1, B_2]$ als zusammenhängende Einheit existiert, d.h. nicht in unabhängige Teilcluster zerfällt. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann angenommen werden, daß alle anderen Cluster innerhalb dieses Intervalls ihre Orientierungen behalten.

Der Cluster C wechselwirkt mit den Nachbarspins an seiner Oberfläche über N_C^s ungebrochene ("satisfied") und N_C^u gebrochene ("unsatisfied") Bonds. Der Teil der

Clusterenergie, welcher diese Wechselwirkung und die Ankopplung an das externe Feld beschreibt, ist gegeben durch

$$E_c(B) = (N_C^u - N_C^s)J - m_C B = (N_C^u - N_C^s)J - (m_C^{\uparrow} - m_C^{\downarrow})B \tag{3.17}$$

($N_C^u, N_C^s, m_C^{\uparrow}, m_C^{\downarrow}$ hängen selbst von B ab). Es gilt nun

1. Wenn man den Cluster in seiner Orientierung festhält, sein Magnetisierung ungleich 0 ist und sich nur das Magnetfeld ändert, dann ändert sich in der Energie nur der zweite Term und zwar linear in B. Somit müßte es ein Magnetfeld B^j geben, wo die Energie des Clusters ihr Vorzeichen ändert, dabei seien B_1, B_2 so gewählt worden, daß $B^j \in [B_1, B_2]$ gilt.

2. Wird andererseits die Orientierung eines Clusters umgedreht, werden alle gebrochenen Bonds ungebrochen und umgekehrt und die Magnetisierung des Clusters wechselt ihr Vorzeichen. Somit wechselt auch die Energie (3.17) ihr Vorzeichen.

3. Da für einen Grundzustand aber $E_c(B) \to \min$ gilt, wird sich immer ein Zustand einstellen, daß $E_c(B) \leq 0$ für alle $B \in [B_1, B_2]$ erfüllt ist.

Insgesamt folgt, daß der Cluster bei B^j flippt und daß $E_c(B^j) = 0$ gilt. Deshalb wird B^j *Sprung-Feld* genannt. Es ergibt sich:

$$B^j/J = \frac{N_C^u - N_C^s}{m_C^{\uparrow} - m_C^{\downarrow}} \tag{3.18}$$

(wobei $N_C^u, N_C^s, m_C^{\uparrow}, m_C^{\downarrow}$ alle entweder zu einem Zustand $B < B^j$ oder alle zu einem Zustand $B > B^j$ gehören. Der Ausdruck ist in beiden Fällen gleich.) Da der Cluster C oft ein Teil der großen Cluster S oder T ist, sind diese Werte nicht direkt zugänglich. Somit ist es günstig, den Ausdruck für das Sprung-Feld so umzuformen, daß er nur noch charakteristische Werte des Graphen $\overline{R}$ vor ($B < B^j$) bzw. nach dem Sprung ($B > B^j$) enthält. Aufgrund der Annahmen über den Cluster ($m_c \neq 0$) und seine Umgebung (unverändert) ist klar, daß er außer bei $B = B^j$ jeweils nur eine Orientierung annehmen kann, also nicht zur Entartung beiträgt. Somit bewegt er sich während des Sprungs vom Supercluster S nach T oder umgekehrt. Für die Magnetisierung erhält man somit (m_S, m_T: Magnetisierung von S, T)

$$|m_C^{\uparrow} - m_C^{\downarrow}| = |m_T(B < B^j) - m_T(B > B^j)| \quad \left(= |m_S(B < B^j) - m_S(B > B^j)|\right) \tag{3.19}$$

Verwendet man $N_C^u(B < B^j) - N_C^s(B < B^j) = N_C^u(B < B^j) - N_C^u(B > B^j) = N^u(B < B^j) - N^u(B > B^j)$ (N^u = Gesamtzahl der gebrochenen Bonds im System, der Rest des Systems ändert sich ja nicht) und weil nur positive externe Felder betrachtet werden, also $B^j/J > 0$, erhält man als Endergebnis:

$$B^j/J = \frac{|N^u(B < B^j) - N^u(B > B^j)|}{|m_T(B < B^j) - m_T(B > B^j)|} \tag{3.20}$$

Folgender Ausdruck beschreibt die relevanten Terme der Energie eines Clusters in einem RFIM (analog zu (3.17))

$$E_c(\{B_i\}) = (N_C^u - N_C^s)J - \sum_{i \in C} B_i \sigma_i \tag{3.21}$$

Eine gegebene Realisierung eines RFIM wird durch die lokalen Felder bei $\Delta = 1$ vollständig bestimmt, also durch die $b_i := B_i(\Delta = 1)$. Damit ist $B_i = \Delta b_i$. Für den $\pm\Delta$-RFIM ist b_i einfach das Vorzeichen des lokalen Zufallsfeldes. Wenn man des Gesamtvorzeichen eines Clusters durch $\Sigma_C := \sum_{i \in C} b_i$ definiert, erhält man

$$E_c(\Delta) = (N_C^u - N_C^s)J - \Sigma_C s(C)\Delta \tag{3.22}$$

Durch Vergleich mit (3.17) erkennt man, daß $\Sigma_C s(C)$ die Rolle der Magnetisierung übernimmt und Δ äquivalent zum äußeren Feld B des DAFF ist. Auch ein RFIM Cluster bewegt sich bei einem Sprung von S nach T oder umgekehrt, so daß sich $|\Sigma_C| = |\Sigma_T(\Delta < \Delta^j) - \Sigma_T(\Delta > \Delta^j)|$ und $|s(C)| = 1$ ergibt. Damit berechnet sich das Feld Δ^j, wo der Cluster flippt, aus

$$\Delta^j/J = \frac{|N^u(\Delta < \Delta^j) - N^u(\Delta > \Delta^j)|}{|\Sigma_T(\Delta < \Delta^j) - \Sigma_T(\Delta > \Delta^j)|} \tag{3.23}$$

Als Beispiel sind in den Abbildungen 3.5 bis 3.7 die Grundzustände eines DAFFs ($L = 10$, $p = 0.5$) für $9/7 < B < 1.6$ dargestellt. Zusätzlich zur antiferromagnetischen Magnetisierung (oberer Wert) wird für jeden Cluster noch seine Magnetisierung (unterer Wert) angegeben.
Ein Cluster mit Magnetisierung 0 und gleicher Anzahl von gebrochenen und ungebrochenen Bonds kann über ein endliches Intervall für das externe Feld zwei Orientierungen annehmen. Für $9/7 < B < 1.5$ ist das im Beispielsystem für die Cluster C und D möglich. Der Entartungsgrad des Grundzustandes ist somit $2 \times 2 = 4$, da jeder der beiden Cluster C, D unabhängig voneinander zwei Stellungen einnehmen kann.
Bei $B^j = 1.5$ dreht sich der Cluster J um, welcher aus den kleineren Clustern J_1, J_2, J_3 zusammengesetzt ist. Die Zahl der gebrochenen Bonds läßt sich nicht direkt aus dem Graphen ablesen, kann aber leicht aus den Positionen im Gitter und Orientierungen der Spins eines jeden Clusters berechnet werden. Hier ergaben sich die Werte $N^u(9/7 < B < 1.5) = 39$ und $N^u(1.5 < B < 1.6) = 48$. Da sich die Magnetisierung von $m_T(B < B^j) = 42$ zu $m_T(B > B^j) = 48$ (Abbildung 3.7) ändert, ergibt sich tatsächlich $B^j/J = \frac{|48-39|}{|48-42|} = \frac{9}{6} = 1.5$.
Jeder der Cluster G, J_1, J_2 kann im Grundzustand zwei Orientierungen einnehmen. Die Cluster C, E zusammen haben 3 Möglichkeiten, da der Wert $s(E) = +1$ den Wert $s(C) = +1$ impliziert. Analog dazu haben die Cluster J_1, D, F isoliert betrachtet 4 Einstellmöglichkeiten. Wegen der Bedingung "$s(E) = +1$ impliziert

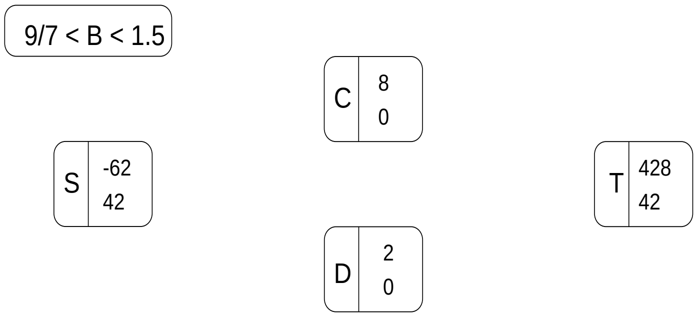


Abbildung 3.5.: Grundzustand $\overline{R}$ eines Beispiel-DAFF ($L = 10$, $p = 0.5$) für $9/7 < B < 1.5$. Jeder der Cluster C, D kann zwei Stellungen einnehmen. Es gibt also insgesamt $2 \times 2 = 4$ Grundzustände.

$s(J_1) = +1$" ergeben sich für alle 5 Cluster zusammen $4 + 4 + (4 - 1) = 11$ Kombinationen von Orientierungen. Somit ist das System $2^3 x 11 = 88$ fach entartet.
Für $1.5 < B < 1.6$ ist der Cluster J im Cluster S absorbiert worden. Nun hat das System den Entartungsgrad $2 \times 3 \times 3 = 18$. Es ist zu bemerken, daß sich die Umgebung des Clusters J während des Sprunges geändert hat. Aber es waren nur Cluster V mit $m_V = 0$ und $N_V^u = N_V^s$ betroffen. Somit ist die Formel für B^j/J auch unter diesen Bedingungen gültig.
Mittels der Formeln (3.20), (3.23) kann das vollständige Verhalten von DAFF/RFIM Systemen leicht berechnet werde. Im Folgenden wird das Verfahren anhand des DAFF erläutert. Für den RFIM funktioniert es entsprechend. Entscheidend ist, daß man das Feld, wo ein Sprung stattfindet, genau berechnen kann, wenn man nur die zwei Grundzustände vor und nach dem Sprung kennt. Man startet deshalb bei einem bestimmten Wert $B = B_0$, bei dem selbst kein Sprung stattfinden darf (s.u.), und berechnet den Graphen $\overline{R}(B_0)$. Dann wird B solange in diskreten Schritten ΔB erhöht, bis der berechnete Grundzustand $\overline{R}(B)$ sich von $\overline{R}(B_0)$ unterscheidet. Dieser Wert für das Feld sei B_1. Nun kann das Sprungfeld B^j aus den Grundzustandsgraphen bei B_0 und B_1 berechnet werden. Es muß nun überprüft werden, ob dieser Sprung wirklich der erste auftretende Sprung für $B > B_0$ ist. Dazu wird der Graph $\overline{R}(B_-^j)$ für ein Feld B_-^j berechnet, welches infinitesimal kleiner ist als B^j. Falls $\overline{R}(B_-^j) = \overline{R}(B_0)$ gilt, ist der berechnete Sprung tatsächlich der erste für $B > B_0$. Falls nicht, wird ein neues Sprung-Feld $B^{j'}$ mittels $\overline{R}(B_-^j)$ und $\overline{R}(B_0)$ berechnet. Es kann also sein, daß bei B^j gar kein Sprung auftritt. Diese Prozedur wird so lange wiederholt, bis der erste nach B_0 auftretende Sprung gefunden ist.
Man sieht, daß dieses Verfahren tatsächlich den ersten auf B_0 folgenden Sprung liefert: Angenommen es gibt zwei Sprünge $B_1^j < B_2^j$ zwischen B_0 und B_1. Dann ist B^j für den DAFF gegeben durch

$$B^j/J = \frac{|N^u(B_0) - N^u(B_1)|}{|m_T(B_0) - m_T(B_1)|} \tag{3.24}$$

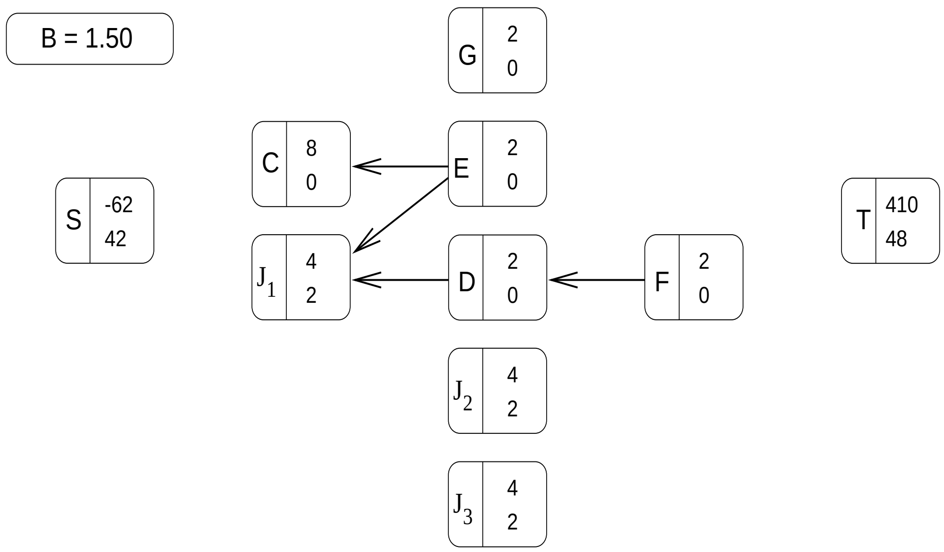


Abbildung 3.6.: Grundzustand $\overline{R}$ eines Beispiel DAFF ($L = 10$, $p = 0.5$) bei $B = 1.5$. Die Cluster G, J_2, J_3 können je zwei Orientierungen einnehmen. Die Cluster C, D alleine haben 3 Möglichkeiten, für die Cluster J_1, D, F gibt es vier. Durch die Kopplung von E und J_1 ergibt sich für die 5 zusammenhängenden Cluster insgesamt 11 Kombinationen. Somit hat das System den Entartungsgrad $2^3 \times 11 = 88$.

Da N^u und m_T monoton in B sind, addieren sich die Wirkungen der beiden Sprünge auf. Somit erhält man (wobei B^j_{1+} ein Feld ein wenig größer als B^j_1 ist)

$$B^j/J = \frac{|N^u(B_0) - N^u(B^j_{1+})| + |N^u(B^j_{2-}) - N^u(B_1)|}{|m_T(B_0) - m_T(B^j_{1+})| + |m_T(B^j_{2-}) - m_T(B_1)|} \tag{3.25}$$

Wegen $B^j_1 < B^j_2$ und weil $n_1/d_1 < n_2/d_2$ impliziert $n_1/d_1 < (n_1 + n_2)/(d_1 + d_2) < n_2/d_2$ ergibt sich

$$B^j_1/J = \frac{|N^u(B_0) - N^u(B^j_{1+})|}{|m_T(B_0) - m_T(B^j_{1+})|} < B^j/J < \frac{|N^u(B^j_{2-}) - N^u(B_1)|}{|m_T(B^j_{2-}) - m_T(B_1)|} = B^j_2/J \tag{3.26}$$

Also liegt B^j zwischen B^j_1 und B^j_2. Damit findet bei B^j kein Sprung statt und es gilt $N^u(B^j_{1+})$=$N^u(B^j_{2-})$=$N^u(B^j)$ und $m_T(B^j_{1+})$=$m_T(B^j_{2-})$=$m_T(B^j)$. Daraus folgt

$$B^j_1/J = \frac{|N^u(B_0) - N^u(B^j)|}{|m_T(B_0) - m_T(B^j)|} \tag{3.27}$$

d.h. mittels des Verfahrens wird mit B^j als Zwischen-Feld tatsächlich B^j_1 als nächster Sprung berechnet. Per Induktion folgt, daß diese Methode für jede beliebige Anzahl von Sprüngen zwischen B_0 und B_1 erfolgreich ist. Um den auf einen Sprung B^j folgenden Sprung zu finden, wird die Prozedur wiederum mit $B_0 :=$

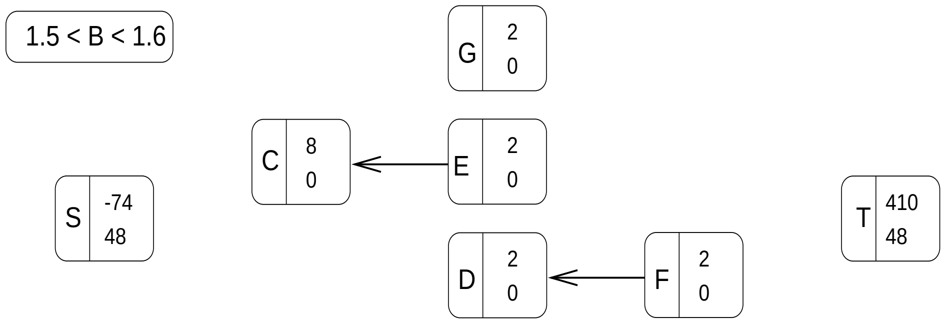


Abbildung 3.7.: Grundzustand $\overline{R}$ eines Beispiel DAFF ($L = 10$, $p = 0.5$) für $1.5 < B < 1.6$. Das System hat $2x3x3 = 18$ Grundzustände.

B_+^j gestartet. Neben dieser linearen Suche ist, es auch möglich, eine Bisektions-Methode beginnend mit $B_0 = B_{start}$ und $B_1 = B_{end}$ zu verwenden, um alle Sprünge in $[B_{start}, B_{end}]$ zu berechnen. In dieser Arbeit wurde die lineare Suche verwendet, weil sie einfacher zu implementieren ist.
Zusammenfassend hat der Algorithmus für die lineare Suche nach allen Grundzuständen in einem Bereich $[B_{start}/J_0, B_{end}/J_0]$ folgende Gestalt; dabei wurde berücksichtigt, daß zur Berechnung der Graphen $\overline{R}$ die Werte von B und J_0 ganzzahlig sein müssen:

Algorithmus Alle_Grundzustände(B_{start}, B_{end}, J_0)
begin
    $B \leftarrow B_{start}$
    $\Delta B \leftarrow J_0$
    stop $\leftarrow$ **false**
    while (**not** stop)
    begin
        $B_0 \leftarrow B$
        Berechne $\overline{R}(B_0)$
        same_R $\leftarrow$ **true**
        while(same_R) /* Suche den ersten Zustand verschieden von $\overline{R}(B_0)$ */
        begin
            if(same_R **AND** $B > B_{end}$) **then**
                stop $\leftarrow$ **true**;
            else
            begin
                $B \leftarrow B + \Delta B$
                Berechne $\overline{R}(B)$
                $\Delta B \leftarrow 2 * \Delta B$
                if($\overline{R}(B_0) \neq \overline{R}(B)$) **then**
                    same_R $\leftarrow$ false
            end
        end
        if(stop) **then**
            continue
        found $\leftarrow$ **false**
        $B_1 \leftarrow B$
        while(**not** found) /* Suche den nächsten Sprung */
        begin
            $B_-^j \leftarrow (\mathrm{int}) \left[\frac{|N^u(B_0) - N^u(B_1)|}{|m_T(B_0) - m_T(B_1)|} * J_0 + 0.5 \right] - 1$
            Berechne $\overline{R}(B_-^j)$
            if($\overline{R}(B_-^j) = \overline{R}(B_0)$) **begin**
                found $\leftarrow$ **true**
            else
                $B_1 \leftarrow B_-^j$
        end
        Es gibt einen Sprung bei $B^j \leftarrow |N^u(B_0) - N^u(B_1)|,\ J^j \leftarrow |m_T(B_0) - m_T(B_1)|$
        $B \leftarrow (\mathrm{int}) [J_0 * B^j / J_j + 0.5] + 1$
        $\Delta B \leftarrow$ Unterschiede zwischen den letzten beiden Sprüngen
    end
end

Technische Anmerkungen:

- J_0 muß ausreichend groß gewählt werden, damit kein Sprung übersehen wird, wenn B um ± 1 verändert wird. Für den DAFF und den $\pm\Delta$-RFIM ist das durch $J_0 > N$ garantiert, da der Nenner in den Formeln (3.20), (3.23) nie größer als N werden kann. Da die Werte b_i für den Gauß-RFIM alle reelle Werte annehmen können, gibt es dort immer eine kleine Wahrscheinlichkeit, einen Sprung zu übersehen. Deshalb wurden bei allen Berechnungen die b_i-Werte auf drei Stellen gerundet und $J_0 > 10^3 N$ verwendet.

- Das Feld-Inkrement ΔB, welches zur Suche nach dem nächsten Zustand verwendet wird, der von $\overline{R}(B_0)$ verschieden ist, wird auf den Unterschied zwischen den letzten beiden gefundenen Sprüngen gesetzt. Während der Suche wird ΔB bei jedem Schleifendurchlauf verdoppelt, damit eng zusammenliegende Sprünge die nachfolgende Suche nicht verlangsamen.

- Die Grundzustände $\overline{R}(B_0), \overline{R}(B_1), \overline{R}(B_-^j)$ dürfen selbst nicht bei Sprüngen liegen, damit der Algorithmus funktioniert. Das wird sichergestellt, indem überprüft wird, ob es innere Cluster mit nicht-verschwindender Magnetisierung gibt. Falls das der Fall ist, wird B solange um 1 vergrößert bzw. verkleinert, bis man bei einem Nicht-Sprung anlangt (ist im Algorithmus nicht dargestellt). Für den DAFF/$\pm\Delta$-RFIM braucht man dazu immer nur einen Schritt.

- Für den DAFF/$\pm\Delta - RFIM$ können die Zustände an den Sprüngen (B^j, J^j) berechnet werden. Für den Gauß-RFIM ist das nicht immer möglich, da die Werte von B_i gerundet werden.

Anmerkung: Auch ohne Verwendung der Formeln (3.20), (3.23) ist es möglich, alle Grundzustände zu berechnen. Das Verfahren wäre aber langsamer, da man einen Sprung zwischen B_0 und B_1 nicht direkt, sondern durch fortwährende Bisektion berechnen müßte.

3.4. Cluster-Exakte Approximation

Wir wenden uns jetzt den Bond-frustrierten Ising-Systemen zu. Für sie ist die Berechnung von Grundzuständen in mehr als zwei Dimensionen oder mit externem Feld NP-vollständig [3] und damit sehr aufwendig. Das hier vorgestellt Näherungsverfahren geht von einer Spin-Konfiguration aus und konstruiert eine andere Konfiguration mit niedrigerer oder gleicher Energie. Dieser Schritt wird dann mehrfach iteriert.

Das einfachste Verfahren, daß nach diesem Muster funktioniert, läuft durch das Gitter und dreht jeden Spin um, falls sich dadurch die Energie senken läßt. Diese Methode ist aber nicht besonders effizient.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Cluster-Exakte Approximation [38] entwickelt. Die Hauptidee dieses Verfahrens ist es, einen Teilcluster von Spins im frustrierten System zu konstruieren, welcher keine Bond-Frustrationen aufweist. Die Wechselwirkung der Clusterspins mit den anderen Spins an der Clusteroberfläche wird in Form von lokalen Feldern berücksichtigt, welche auf die Clusterspins wirken. Ein Grundzustand dieses Clusters kann mit den bereits vorgestellten graphentheoretischen Methoden berechnet werden: Es wird ein äquivalentes Netzwerk konstruiert, der maximale Fluß berechnet, ein minimaler Schnitt konstruiert und daraus ein Grundzustand der Clusterspins ermittelt. Die neue Konfiguration besteht aus diesem Grundzustand und den restlichen unveränderten Spins. Per Konstruktion des Verfahrens hat die neue Spin-Konfiguration die gleiche oder eine niedrigere Energie als die Ausgangskonfiguration. Man hat also für einen *Cluster* den Grundzustand *exakt* berechnet, erhält damit aber für das gesamte Spinglas nur eine *Approximation* des Grundzustandes.
Um den Spincluster zu beschreiben kann die Spinglas-Hamiltonfunktion umgeschrieben werden:

$$H_c = - \sum_{<ij>'} J_{ij} t_i t_j \sigma_i^c \sigma_j^c - \sum_{i'} B_i^c t_i \sigma_i^c + C \tag{3.28}$$

Es werden neue Spinvariablen durch $\sigma_i^c t_i := \sigma_i$ eingeführt. Die Werte von $t_i = 0, \pm 1$ definieren den Cluster und werden verwendet, um antiferromagnetische Wechselwirkungen zu behandeln: Falls ein Spin nicht zum Cluster gehört, ist $t_i = 0$. Die Summationsindizes $\langle ij \rangle'$ und i' bedeuten, daß nur über die Spins mit $t_i \neq 0$ summiert wird. Falls zwei benachbarte Spins σ_i, σ_j zum Cluster gehören, müssen die Vorzeichen von t_i, t_j so gewählt werden, daß sich insgesamt eine ferromagnetische Wechselwirkung ergibt:

$$J_{ij}^c := J_{ij} t_i t_j > 0 \tag{3.29}$$

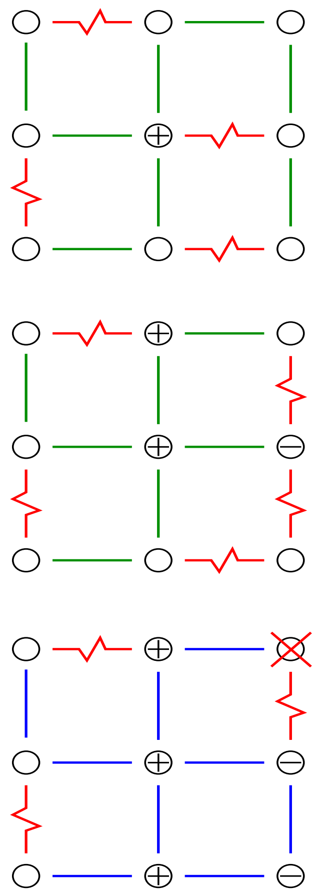
denn es können ja nur Hamiltonfunktionen mit positiven Wechselwirkungskonstanten in äquivalente Netzwerke umgerechnet werden. Die lokalen Felder berücksichtigen das externe Feld B und die Wechselwirkung mit den Nachbarspins, die nicht zum Cluster gehören:

$$B_i^c = B + \sum_{<j>} J_{ij} (1 - |t_j|) \sigma_j \tag{3.30}$$

Die Konstante C summiert die Wechselwirkung der Nicht-Clusterspins und kann ignoriert werden. Die Konstruktion des nicht Bond-frustrierten Clusters läuft wie folgt ab: Man beginnt bei einem zufällig gewähltem Spin. Iterativ werden Nachbarspins σ_i hinzugefügt, falls dadurch keine Frustration auftritt. Das ist der Fall, wenn ein Faktor t_i gefunden werden kann, durch den alle neu zum Cluster hinzukommenden Bonds zu einem positiven Wert transformiert werden. Falls ein Cluster nicht mehr erweitert werden kann, wird eine weiterer, noch nicht betrachteter Startspin gewählt. Die Konstruktion ist beendet, wenn alle Spins einmal betrachtet wurden. Der folgende Algorithmus enthält die Details:

```
Algorithmus baue_Cluster({J_ij})
begin
    for all i do
    begin
        initialisiere t_i ← 0;
        initialisiere δ_i ← 0;
    end;
    while es gibt unmarkierte Spins mit δ_i = 0 do
    begin
        wähle einen Index i_0 der Spins mit δ_i = 0;
        push i_0 auf den leeren Stack S;
        δ_{i_0} ← 1;
        while S nicht leer ist do
        begin
            Entferne einen zufällig gewählten Index i aus S;
            A ← {j|j ist Nachbar von i mit t_j ≠ 0};
            if A = ∅ then t_i ← +1;
            else if ∀ j ∈ A : J_ij t_j haben das selbe Vorzeichen α
            then
                t_i ← α;
            if t_i ≠ 0 then
            begin
                    B ← {j|j ist Nachbar von i mit δ_j = 0};
                    for all j ∈ B do
                    begin
                        push j auf S;
                        δ_j ← 1;
                    end;
            end;
            else t_i ← 0;
        end;
    end;
    return ({t_i});
end;
```

Im Algorithmus werden alle aktuellen Nachbarn des entstehenden Clusters, bei denen überprüft werden soll, ob sie zum Cluster hinzugefügt werden können, auf einem Stack S gespeichert. Die lokalen Variablen δ_i dienen dazu anzuzeigen, ob ein Spin bereits auf den Stack S gelegt wurde. Die Menge A enthält die Nachbarn eines Spins σ_i, welche bereits im Cluster sind, während B alle Nachbarn des Spins enthält, die nicht zum Cluster gehören.



Die Konstruktion des unfrustrierten Clusters wird nun an einem kurzen Beispiel erläutert. In nebenstehender Abbildung ist ein Ausschnitt aus einem zweidimensionalen Spinglas zu sehen. Die Gitterplätze werden durch Kreise dargestellt. Durchgezogene Linien symbolisieren ferromagnetische Bonds und gezackte Linien antiferromagnetische Bonds. Als Startspin wurde der mittlere Spin mit Skalierungsfaktor +1 gewählt. Da der Spin oberhalb vom Startspin nur durch einen Bond mit dem bereits existierenden Cluster verbunden ist, und diese Bond positiv ist, kann der Spin mit demselben Skalierungsfaktor wie der Startspin zum Cluster hinzugenommen werden. Gleiches gilt für den Spin rechts, allerdings mit den Skalierungsfaktor -1, da die Kopplung antiferromagnetisch ist. Entsprechend wechseln alle Bonds ihr Vorzeichen, welche an den Spin angrenzen. Es ergibt sich die Situation, die in der mittleren Abbildung dargestellt ist.

Der Spin rechts oben kann nicht zum Cluster hinzugefügt werden, da er mittels einer positiven und einer negativen Bond mit dem Cluster verbunden ist. Es können nicht beide gleichzeitig durch eine Multiplikation mit derselben Zahl positiv skaliert werden. Dagegen können die beiden rechten Spins in der unteren Reihe zum Cluster hinzugefügt werden. Das Resultat ist in der unteren Abbildung dargestellt.

Die mit dem Verfahren konstruierten Cluster umfassen große Teile der Systeme. Für zweidimensionale $\pm J$ Spingläser enthält der unfrustrierte Cluster typischerweise 70 % aller Spins. Bei dreidimensionalen Systemen liegt der Wert bei etwa 58 %. Somit ist das Verfahren sehr effektiv, da pro Minimierungsschritt ein großer Anteil der Spins flippen darf.

Um einen Eindruck von der Wirkung des Algorithmus' zu geben, ist in Abbildung 3.8 die Energie pro Spin als Funktion der Schrittzahl für zweidimensionale Spingläser mit $L = 4, 6, 16$ zu sehen, jeweils gemittelt über 96 Realisierungen der Kopplungsvariablen. Ausgehend von zufälligen Anfangskonfigurationen vermag das Verfahren anfangs sehr schnell die Energie zu vermindern. Später sind nur noch geringe Verbesserungen möglich, und schließlich bleibt die Energie kon-

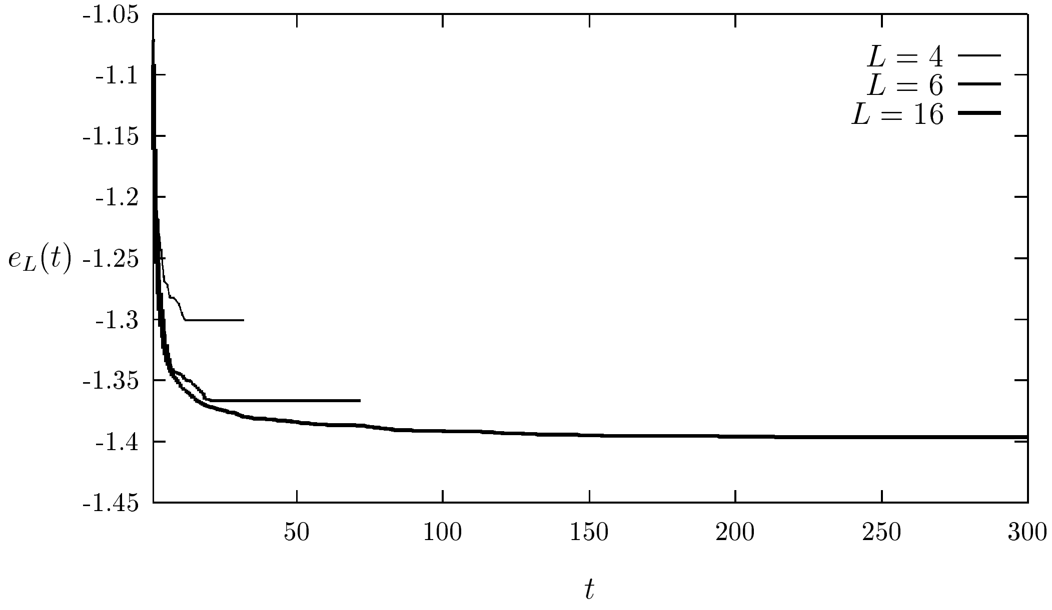


Abbildung 3.8.: Mittlere Energiedichte $e_L(t) = E_L(t)/N$ von 2d $\pm J$ Spingläsern als Funktion des Iterierungsschritts t bei der Cluster-Exakten Approximation. Gezeigt werden 3 Größen $L = 4, 6, 16$.

stant.
Um zu charakterisieren, wie der Algorithmus sich den Grundzuständen nähert, wurde ein zweidimensionales System ($L = 16$) gewählt und minimiert. Die Minimierung wurde abgebrochen, wenn sich die Energie in den letzten 100 Schritten nicht mehr änderte. Insgesamt wurden 8 unabhängige Läufe durchgeführt, und einer der Läufe, welcher zum Schluß die niedrigste Energie ergab, wurde weiter als Referenzlauf verwendet. Die niedrigste Energie lag bei $e^0 = -1.414$. Während der Berechnung des Referenzlaufs wurden 3 Konfigurationen gespeichert, sie hatten die Energien $e_s = 0.117, -1.07, -1.414$. Diese Konfigurationen wurden als Startkonfigurationen für weitere Minimierungen verwendet. Für jede Startkonfiguration wurden 8 unabhängige Läufe durchgeführt und die letzten 100 Zustände gespeichert, sofern sie die Energie e^0 aufwiesen. Je nach Startkonfiguration wurden damit insgesamt 400, 300 bzw. 800 Grundzustände gespeichert. Für diese Zustände wurde dann jeweils die Verteilung der Überlapps berechnet. Das Ergebnis ist in Abbildung 3.9 dargestellt. Die Breite der Verteilungen nimmt mit der Energie der Ausgangskonfigurationen ab. Offenbar dringt das Verfahren immer tiefer in die Energielandschaft ein. Da die Konstruktion der unfrustrierten Cluster zufällig erfolgt, vermag das Verfahren verschiedene Wege zu nehmen, und zwar um so mehr, je höher die Startenergie liegt. Bemerkenswert ist, daß auch ein größerer Bereich des Konfigurationsraumes erfaßt wird, wenn der Startzustand bereits ein Grundzustand ist.
Um das Verfahren zu verbessern, wurde die Konstruktion des unfrustrierten Clu-

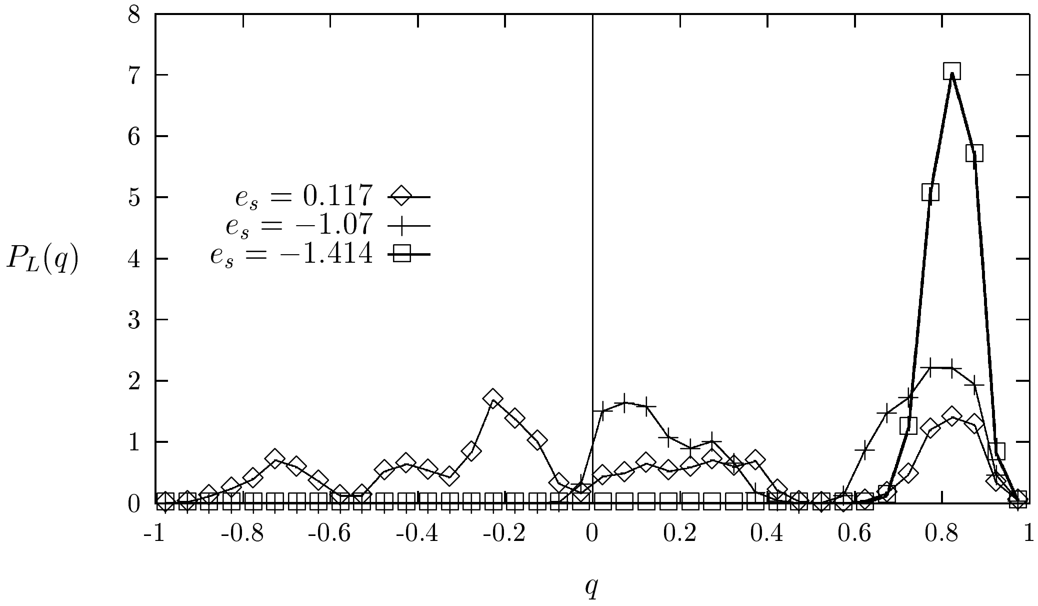


Abbildung 3.9.: Verteilung der Überlapps einer einzelnen Realisierung (2d, $L = 16$, $e^0 = -1.414$). Für verschiedene Startkonfigurationen mit Energien $e_s = 0.117$, -1.07, -1.414 wurden in jeweils 8 unabhängigen Läufen 100 tiefste Zustände berechnet. Die Zustände, welche die Energiedichte $e^0 = -1.414$ aufwiesen, wurden dann in die Berechnung der Verteilung einbezogen, das waren 400, 300, bzw. 800 Zustände für die drei verschiedenen Startkonfigurationen. Man erkennt: Je tiefer die Energie der Startkonfiguration, um so schmaler die Verteilung, d.h. um so kleiner ist der dem Algorithmus zugängliche Bereich des Konfigurationsraumes. Die Linien dienen nur der Übersichtlichkeit.

sters etwas modifiziert: Für jeden Spin wurde die Zahl der gebrochenen Bonds berechnet, über die er mit seinen Nachbarn wechselwirkt. Die Spins wurden dann nicht mehr schichtweise an den Cluster angefügt, sondern in der Reihenfolge der Zahl der gebrochenen Bonds. Somit werden die Spins häufiger berücksichtigt, die einen hohen Energiebeitrag liefern. Diese Variante wird im folgenden als *gewichtete* Cluster-Konstruktion bezeichnet. In Abbildung 3.10 ist die Energie pro Spin als Funktion des Iterierungsschritts für ein 3-dimensionale System ($L = 10$) für die beiden Varianten dargestellt, jeweils gemittelt über 100 Realisierungen. Die gewichtete Konstruktion ist deutlich schneller und erreicht wesentlich niedrigere Energien.

Abschließend wird die Cluster-Exakte Approximation mit dem anfangs erwähnten einfachsten Minimierungsverfahren verglichen: Es werden jeweils alle Spins einzeln betrachtet und umgedreht, falls sich dadurch eine Energieverringerung ergibt (Single-Spin-Flip = SSF). Bei beiden Verfahren wird so lange minimiert, bis sich die Energie seit der Hälfte der durchgeführten Schritte nicht mehr geändert hat. Die über jeweils 1000 Realisierungen der Unordnung gemittelte Grundzu-

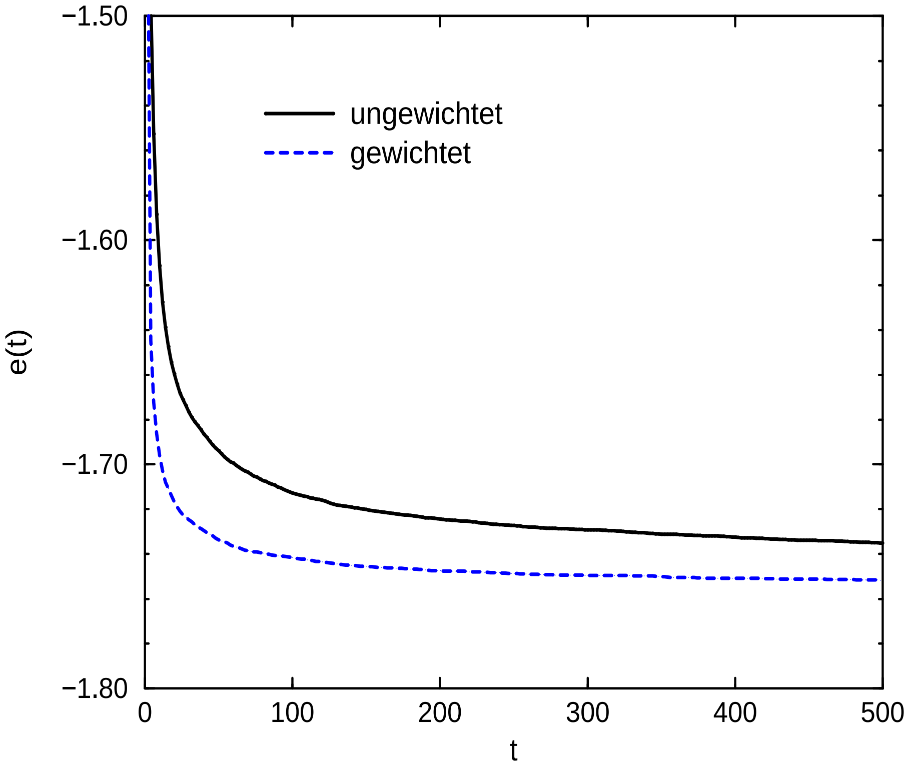


Abbildung 3.10.: Mittlere Energiedichte $e(t) = E(t)/N$ von 3d $\pm J$ Spingläsern ($L = 10$) als Funktion des Iterierungsschritts t bei der Cluster-Exakten Approximation für die gewichtete und die ungewichtete Cluster Konstruktion.

standsenergie dreidimensionaler $\pm J$ Spingläser ist als Funktion der Systemgröße L in Abbildung 3.11 dargestellt. CEA erreicht deutlich niedrigere Energiewerte. Durch einen Fit an die Funktion $f(L)$ (siehe Definition (2.17)) ergibt sich ein Schätzwert für das unendliche System von $e^0 = -1.760(1)$. Der Vergleich mit den bisher genausten Ergebnis $e^0 = -1.7863 \pm 0.0028$ [67] läßt vermuten, daß durch Anwendung der Cluster-Exakten Approximation alleine noch nicht der richtige Grundzustand gefunden wird. Deshalb wurde das Verfahren mit genetischen Algorithmen kombiniert.

3.5. Genetische CEA

Die Hauptidee der genetischen Algorithmen [56] ist es, mehrere Konfigurationen eines Systems gleichzeitig zu behandeln, d.h. man hat eine *Population* von *Individuen*. Nachdem die Konfigurationen geeignet minimiert wurden (*Entwicklung*),

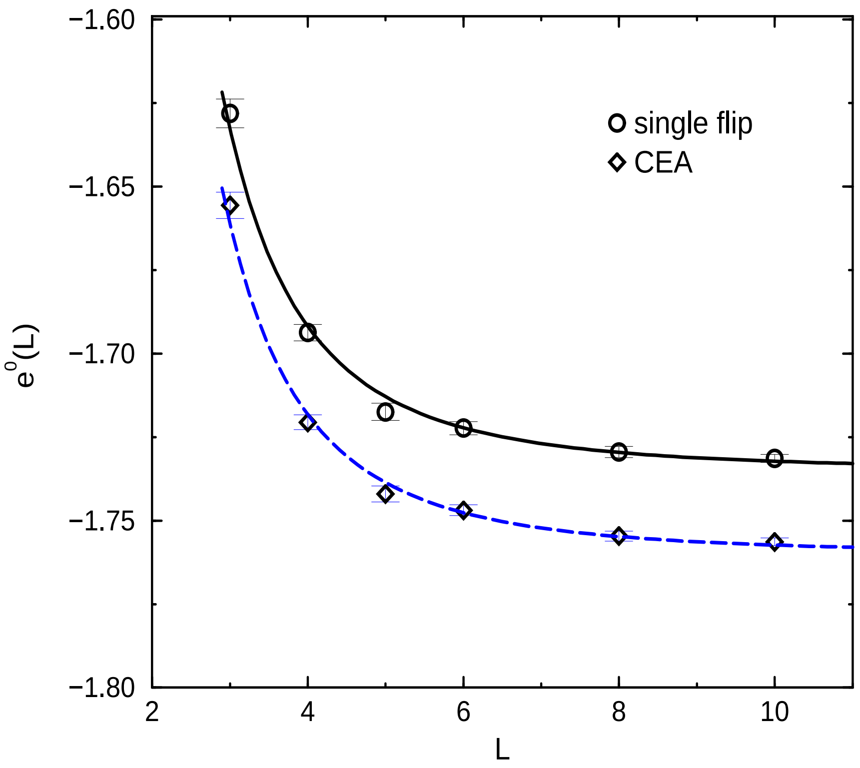


Abbildung 3.11.: Mittlere Energiedichte $e^0(L) = E^0(L)/N$ von 3d $\pm J$ Spingläsern als Funktion der Systemgröße L für ein Single-Spin-Flip- (SSF) Verfahren und Cluster-Exakte Approximation. In beiden Fällen wird die Grundzustandsenergie des unendlichen Systems mittels eines Fits an $f(L) = a_\infty + a_1/L$ ermittelt. Es ergibt sich $e^0_\infty = 1.735 \pm 0.001$ (SSF) bzw. $e^0_\infty = 1.760 \pm 0.001$ (CEA).

werden schlechte Individuen herausgeworfen (*Selektion*) und die übriggebliebenen Konfigurationen geeignet miteinander kombiniert um neue zu erzeugen (*Crossover* oder *Fortpflanzung*). Meistens werden die Individuen noch ein wenig zufällig verändert, d.h. *mutiert*. Der ganze Prozeß wird mehrmals wiederholt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein spezieller genetischer Algorithmus [67] verwendet, der nun beschrieben wird. Die anfängliche Population besteht aus M_i zufällig gewählten Spin-Konfigurationen, welche linear in Form eines Ringes angeordnet sind, d.h. jedes Individuum hat zwei Nachbarn, wobei das erste und das letzte Element auch Nachbarn sind. Nun wird $\nu \times M_i$ mal ein Paar von Nachbarn zufällig aus der Population ausgewählt, sie werden als *Eltern* bezeichnet. Es werden nur Nachbarn als Eltern gewählt, weil dadurch die Struktur der Individuen besser erhalten wird, was sich bei Spingläsern als günstiger erwiesen hat [67].

Mittels der Eltern werden zwei weitere Konfigurationen, die *Nachkommen* (oder *Kinder*) erzeugt, dabei wird der sog. *Triadische Crossover* [66] benutzt. Dazu wird eine zufällig gewählte dritte Konfiguration als Maske verwendet, wobei noch 10 % der Masken-Spins zufällig umgedreht werden. Das erste Nachkommen erhält die Spins von Elternteil A, die mit der Maske übereinstimmen, die restlichen Spins von Elternteil B. Beim zweiten Nachkommen ist es genau umgekehrt. Der Triadische Crossover erhält ebenfalls die Struktur der Konfigurationen besser, als wenn die Spins jedes Kindes zufällig von jedem Elternteil gewählt werden. Als nächstes werden die Nachkommen mutiert, d.h. ein Teil p_m der Spins wird umgedreht.

Jedes Kind wird nun über n_{min} Schritte mittels der Cluster-Exakten Approximation minimiert. Danach wird jeder minimierter Nachkomme mit genau einem Elternteil verglichen, jeder mit einem anderen Elternteil. Die Vergleichspaare werden so gewählt, daß die Summe der Überlapps zwischen den Paaren am größten ist. Jedes Elternteil wird durch das Kind ersetzt, falls die Energie des Kindes niedriger als beim Elternteil ist.

Nachdem diese Folge von Schritten $\nu \times M_i$ mal durchgeführt wurde, wird die Population halbiert. Von jedem Paar von Nachbarn wird das Element mit der höheren Energie eliminiert. Durch diese Verkleinerung wird dann Rechenzeit gespart. Man verliert dadurch keine wichtigen Informationen, weil man um so weniger Individuen benötigt, je näher sie am Optimum liegen. Der ganze Prozeß wird so lange wiederholt, bis nicht mehr als 4 Konfigurationen übrigbleiben und die Konfiguration mit der niedrigsten Energie wird als Ergebnis der Berechnung genommen.

Die folgende Darstellung gibt eine Übersicht über den gesamten Algorithmus:

```
Algorithmus genetische CEA({J_ij}, M_i, ν, p_m, n_min)
begin
    Erstelle M_i zufällige Konfigurationen
    while (M_i > 4) do
    begin
        for i = 1 to ν × M_i do
        begin
            wähle zwei Nachbarn
            Konstruiere zwei Nachkommen mittels des Triadischen Crossover
            Mutiere Nachkommen mit Rate p_m
            for beide Nachkommen do
            begin
                for j = 1 to n_min do
                begin
                    konstruiere unfrustrierten Spincluster
                    erstelle äquivalentes Netzwerk
                    Berechne maximalen Fluß
                    konstruiere minimalen Schnitt
                    setze Orientierungen der Clusterspins
                end
            end
            for beide Nachkommen do
                if Nachkomme ist besser als zugeordneter Elternteil then
                    Ersetze Elternteil durch Nachkommen
        end
        halbiere Population
    end
    return eine der Konfiguration mit niedrigster Energie
end
```

Der Algorithmus wird für jede Realisierung J der Kopplungskonstanten k mal durchgeführt, und alle Konfigurationen, welche die niedrigste Energie aufweisen, werden gespeichert, was in n_g statistisch unabhängigen Grundzuständen resultiert. Mittels umfangreicher numerischer Experimente wurden die Parameter (M_i, ν, p_m, n_{min}) für jede Systemgröße $L = 3, \ldots, 14$ des dreidimensionalen $\pm J$ Spinglasses bestimmt, so daß sich in $k = 5$ Läufen durch eine Vervierfachung des Aufwands keine Verringerung der Grundzustandsenergie erreichen ließ. Es ergab sich eine optimale Mutationsrate von $p_m = 0.2$. Der Wert mag hoch erscheinen, man muß aber in Betracht ziehen, daß die Orientierung der Spins, welche bei den CEA Schritten im unfrustrierten Cluster enthalten sind, keine Rolle spielen. Somit bleibt in 3d nach nur *einem* CEA-Schritt nur ein Anteil $p_m/2$ der Spins mutiert, da die mittlere Clustergröße mehr als 50% des Systems erreicht. Zudem wird der CEA-Schritt n_{min} mal durchgeführt. In Tabelle 3.5 sind die optimalen Parameter für die verschiedenen Systemgrößen L und die resultierende Rechenzeit τ für einen Grundzustand auf einem 80 MHz PPC601 angegeben.

L	M_i	ν	n_{min}	τ (Sekunden)
3	16	3	1	0.2
4	16	3	1	0.5
5	16	4	2	3
6	16	4	2	5
8	32	4	5	70
10	64	6	10	960
12	64	12	10	4200
14	256	14	10	32400

Tabelle 3.2.: Simulations-Parameter für die genetische Cluster-Exakte Approximation. L ist die Systemgröße, M_i die anfängliche Größe der Population. Der Wert von ν gibt an, wie oft je Individuum ein Nachkommen erzeugt wird. Jedes Nachkommen wird n_{min} Schritte mit CEA minimiert. Die Rechenzeit pro Lauf auf einem 80 MHz PPC601 ist durch τ gegeben.

4. Ergebnisse

Dieses Kapitel teilt sich auf in die Ergebnisse für Zufallsfeldsysteme und verdünnte Antiferromagnete sowie die Resultate für Spingläser.
Im ersten Teil werden zunächst die diskrete Struktur der (antiferromagnetischen) Magnetisierung als Funktion des Feldes B, Δ und die Abhängigkeit von der Systemgröße L untersucht. Daraus werden die kritische Felder B_c, Δ_c abgeschätzt, oberhalb derer die Magnetisierung verschwindet. Dann wird die Grundzustandsstruktur untersucht, d.h. wie viele verschiedene Grundzustände es gibt und wie stark sie sich unterscheiden.
Für Spingläser wird zunächst die Grundzustandsenergie des unendlich großen Systems durch eine Finite-Size-Analyse abgeschätzt. Dann wird die Grundzustandsstruktur ermittelt, die sie betreffenden Vorhersagen von MF- und DS-Modell überprüft und ein Vergleich mit den Resultaten für DAFF und RFIM durchgeführt. Abschließend werden die Grundzustände der Spingläser auf Ultrametrizität hin untersucht.

4.1. Zufallsfeldsysteme und verdünnte Antiferromagnete

Es wurden Grundzustandsberechnungen über große B, Δ-Intervalle für Systemgrößen $L = 8$ bis $L = 48$ für den DAFF (p=0.5), $\pm\Delta$-RFIM und Gauß-RFIM durchgeführt. Die Anzahl der Realisierungen je Modell sind in Tabelle 4.1 aufgeführt. Die angegebenen Werte für B und Δ beziehen sich auf $J = 1$.

L	DAFF $B \in [0, 6]$	$\pm\Delta$-RFIM $\Delta \in [0, 6]$	Gauß-RFIM $\Delta \in [0, 4]$
8	850	450	250
12	850	450	120
16	450	250	58
24	450	177	32
32	50	43	16
48	50	-	-

Tabelle 4.1.: Anzahl der Realisierungen je Modell und Gittergröße, sowie B, Δ-Intervalle, für die alle Grundzustände in diesen Intervallen berechnet wurden.

Für die $L = 48$ Realisierungen wurde das B-Intervall auf $[0.5, 1.5]$ reduziert. Bei dem Gauß-RFIM mit $L = 32$ wurde nur $\Delta \in [1.0, 2.8]$ verwendet.

In Abbildung 4.1 ist die antiferromagnetische (AF) Magnetisierung (siehe Def. (2.9)) zweier DAFF Systeme mit $L = 8$ und $L = 16$ über den gesamten Bereich $B \in [0, 6.5]$ dargestellt. Weil die Grundzustände entartet sind, kann a viele Werte annehmen. Hier werden der maximale und der minimale Wert dargestellt. Im kleinen System sind für $B < 1$ zwei zueinander inverse Grundzustände möglich, weil die Magnetisierung Null ist. Für das größere System gilt das nur für $B < 0.5$. Für größere Felder drehen sich die ersten kleinen Cluster um. Bei beiden Systemen ist der Bereich der möglichen Werte der Magnetisierung für $1 < B < 2$ relativ klein und ein wenig größer für $2 < B < 4$. Der Wertebereich ist für ganzzahlige Werte von B am größten, weil dann Spins, bei denen das magnetische Moment ihrer Nachbarn genau B ergibt, beide Orientierungen einnehmen können.
Die diskrete Struktur der B-Abhängigkeit ist klar sichtbar. In beiden Systemen ist die AF Magnetisierung hoch für kleine Felder und fällt dann schrittweise ab. Die wesentlichen Unterschiede zwischen den beiden Systemen sind: Das größere System zeigt mehr Sprünge und die Magnetisierung fällt schneller.
Aufgrund der Stufenstruktur ist es schwierig, direkt Suszeptibilitäten zu berechnen und dann mittels einer Finite-Size-Analyse den Übergang $L \to \infty$ durchzuführen, um daraus "kritische" Felder B_c zu berechnen. Stattdessen wird wie folgt vorgegangen, um erste Informationen über das Verhalten der Magnetisierung in Abhängigkeit von L zu erhalten: Es wird für jedes System das *Barrierenfeld* $B_{a<a_0}$ berechnet, bei dem $a(B)$ erstmals unter a_0 fällt, d.h.

$$B_{a<a_0} := \min\{B | a(B) < a_0\} \tag{4.1}$$

In Abbildung 4.2 ist der Mittelwert von $B_{a<a_0}$ als Funktion der inversen Systemgröße $1/L$ für $a_0 = 0.2, 0.5, 0.8$ dargestellt. Um einen ersten Eindruck zu erhalten wie sich der Grenzfall $L \to \infty$ verhalten könnte, wurden Geraden $B_{a<a_0}(1/L) = c/L + B_{a<a_0}(0)$ angefittet. Der Fit scheint gut zu passen, hat aber möglicherweise keine physikalische Bedeutung. Aus der Abbildung läßt sich $B_{a<0.5}(0) = 0.90 \pm 0.02$ ablesen, d.h. der Übergang in den Domänenzustand erfolgt bei einem $B_c < 1$. Diese steht im Widerspruch zu früheren Resultaten aus Monte-Carlo-Simulationen von Systemen der Größe $60 \times 60 \times 61$ [60], bei denen $B_c \approx 1.4$ gefunden wurde. Um den Einfluß der Fit-Funktion auszuschalten, wurde dieses überraschende Resultat geprüft, indem die Grundzustände für zehn Systeme mit $N = 160^3$ bei $B = 0.9999$ berechnet wurden. Es ergab sich ein mittlerer Wert des Ordnungsparameters von $a = 0.22 \pm 0.11$! Damit ist klar, daß das unendlich große System bei $B \approx 1$ nicht ferngeordnet ist. Aus Abbildung 4.2 läßt sich nicht entnehmen, ob das $[B_{a<0.8}, B_{a<0.2}]$ Intervall für $L \to \infty$ beliebig klein wird oder endlich bleibt. Für genauere Aussagen sind mehr Berechnungen bei noch größeren Systemen nötig.
In Abbildung 4.3 wird für zwei $\pm\Delta$-RFIM Systeme ($L = 8, 16$) die Magnetisierung pro Spin (siehe Def. (2.5)) dargestellt. Der Eindruck ähnelt dem beim DAFF, allerdings geht der Ordnungsparameter bei höheren Feldern Δ gegen 0. Außerdem gibt es mehr Sprünge, weil es in einem RFIM mehr Spins als in einem DAFF gleicher Größe L gibt. Darstellungen für den Gauß-RFIM sehen ähnlich aus, aber

es gibt sogar noch mehr Sprünge in einem System gleicher Größe und der Abfall der Magnetisierung ist weniger steil.
Wie beim DAFF wurden die Barrierenfelder $\Delta_{m<m_0}$ für die Zufallsfeldsysteme berechnet. Sie sind in Abbildung 4.4 dargestellt. Es ergaben sich Werte von $\Delta_{m<0.5}(0) = 2.35 \pm 0.01$ ($\pm\Delta$) und $\Delta_{m<0.5}(0) = 2.49 \pm 0.04$ (Gauß). Der Wert für das $\pm\Delta$ System ist konsistent mit früheren Berechnungen [65].
Insgesamt sind die Ergebnisse für den Gauß-RFIM weniger zuverlässig, weil nur wenig Systeme berechnet werden konnten. Zum einen dauert die Berechnung einzelner Grundzustände, wie bereits gesehen, für Gauß-Zufallsfeldsysteme länger als für die anderen Modelle gleicher Größe. Allgemein ist die Zahl der im Algorithmus zu berechnenden Systeme etwa sechs mal so groß wie die Zahl der Sprünge. Da zum anderen der Gauß-RFIM viele Sprünge aufweist, müssen mehr Grundzustände für diese Systeme berechnet werden, womit noch einmal mehr Rechenzeit benötigt wird.
Für alle hier betrachteten Systeme steigt die Anzahl $\#j$ der Sprünge mit der Systemgröße L an. In Abbildung 4.5 ist diese Abhängigkeit dargestellt. Grob gesehen läßt sich ein Verhalten $\#j(L) = c * L^b$ feststellen, mit $b = 1.23 \pm 0.04$ (DAFF), $b = 1.76 \pm 0.01$ ($\pm\Delta$-RFIM) und $b = 2.91 \pm 0.03$ (Gauß-RFIM)[1]. Das heißt, daß das Verhalten der Systeme mit wachsender Größe immer glatter wird. Somit verliert das unendlich große System seine diskrete Struktur auf endlichen B, Δ-Bereichen.
Außerdem wurde die Anzahl der Sprünge in denjenigen B, Δ-Intervallen bestimmt, in denen der Ordnungsparameter für jedes System von 0.8 auf 0.2 fällt. Sogar diese Zahl erhöhte sich mit steigender Systemgröße, obwohl das Intervall immer kleiner wird. Es wurden Fits wie im vorangegangenen Fall durchgeführt, dabei ergaben sich $b = 0.90 \pm 0.02$ (DAFF), $b = 1.40 \pm 0.06$ ($\pm\Delta$-RFIM) und $b = 2.18 \pm 0.02$ (Gauß-RFIM), also in allen drei Fällen kleinere Werte als bei Berücksichtigung des gesamten Feld-Bereichs.

[1] Nur Sprünge in $\Delta \in [1.0, 2.8]$ wurden gezählt, die Zahl der Sprünge in [0.0,6.0] ist etwa vier mal höher.

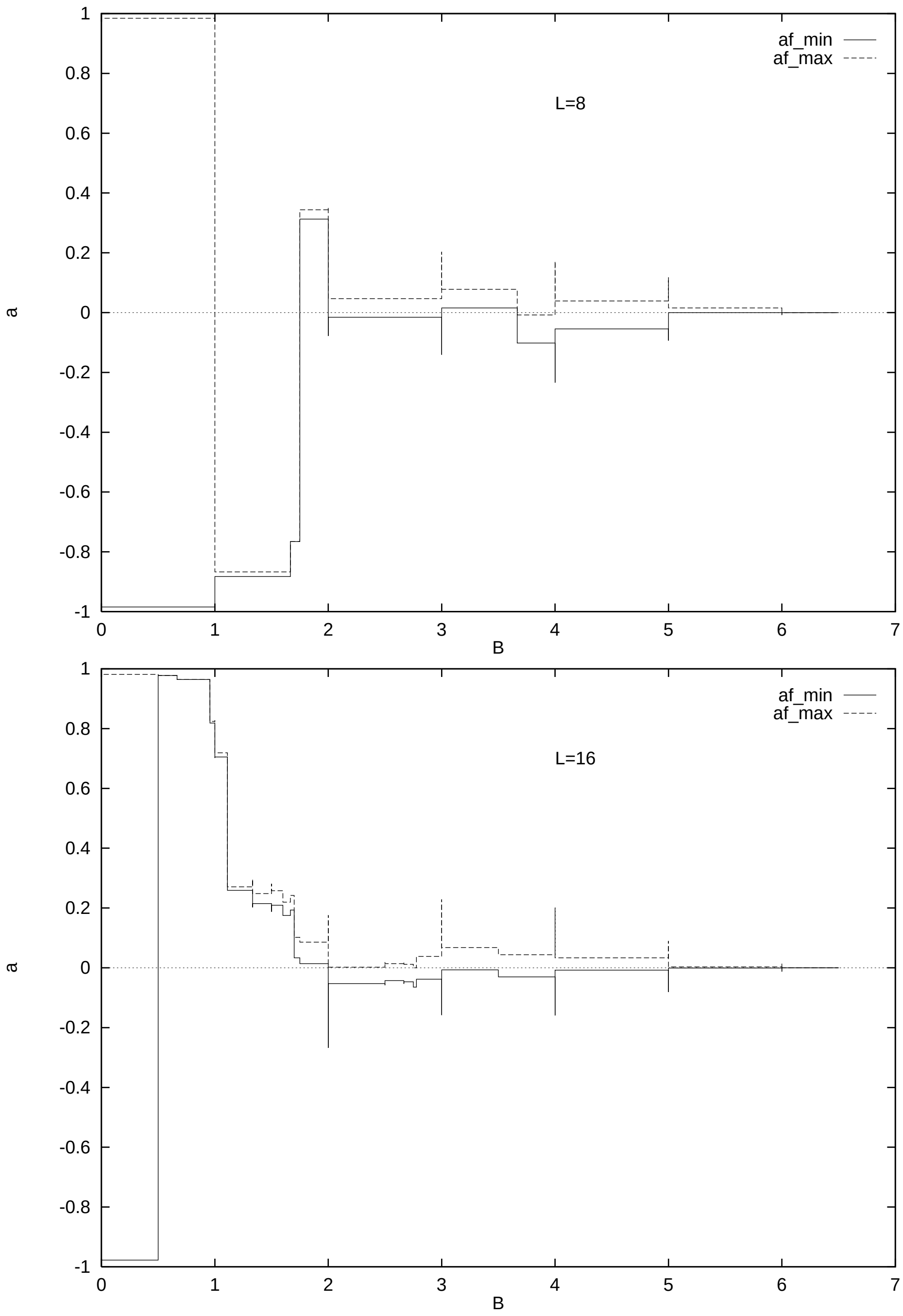


Abbildung 4.1.: Antiferromagnetische Magnetisierung von zwei DAFFs ($L = 8$, $p = 0.5$) und ($L = 16$, $p = 0.5$.) für $0 \leq B < 6.5$. Dargestellt sind der minimale und maximale Wert der Magnetisierung, der aufgrund der Entartung möglich ist.

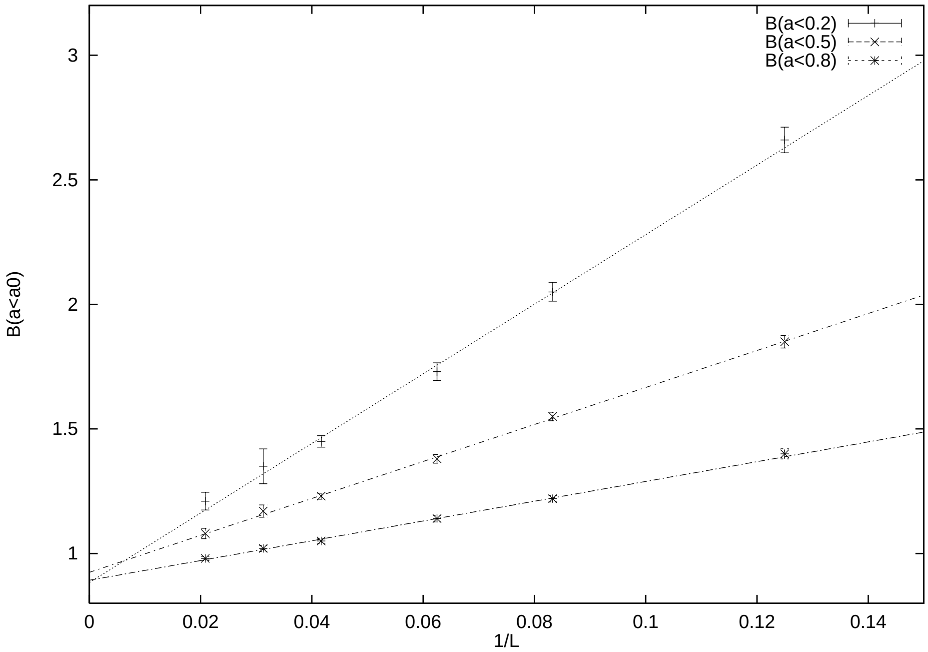


Abbildung 4.2.: Barrierenfeld $B_{a<a_0}(1/L)$ for $L = 8, \ldots, 48$ ($a_0 = 0.2, 0.5, 0.8$) und Fit-Funktionen $B_{a<a_0}(1/L) = c/L + B_{a<a_0}(0)$. Es ergibt sich $B_{a<0.5}(0) = 0.90 \pm 0.02$. Offenbar befindet sich das unendlich große System bereits bei Werten $B < 1$ im Domänenzustand.

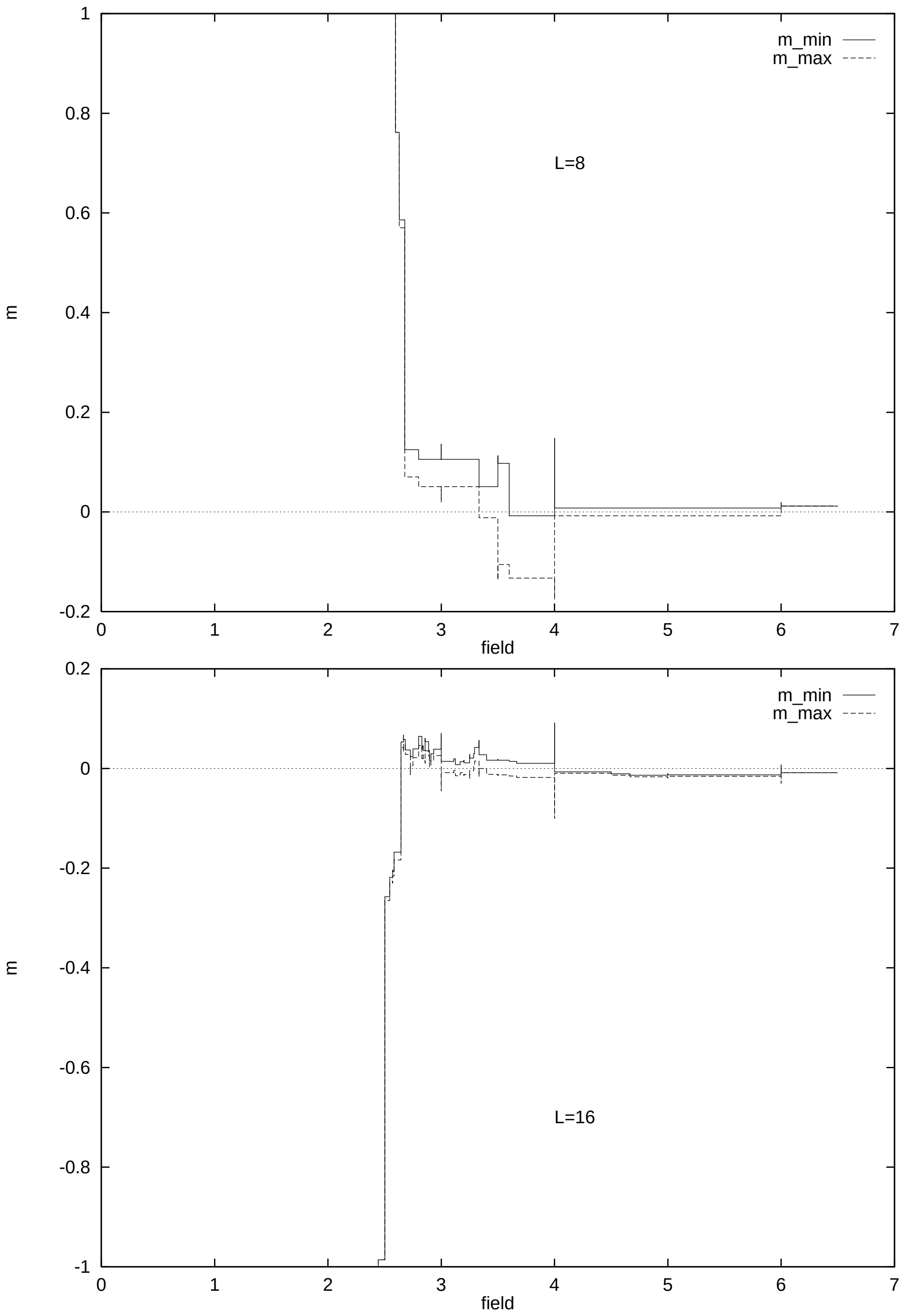


Abbildung 4.3.: Magnetisierung von $\pm\Delta$-RFIM Systemen ($L = 8$) und ($L = 16$) für $0 \leq \Delta < 6.5$. Dargestellt sind der minimale und maximale Wert der Magnetisierung, der aufgrund der Entartung möglich ist.

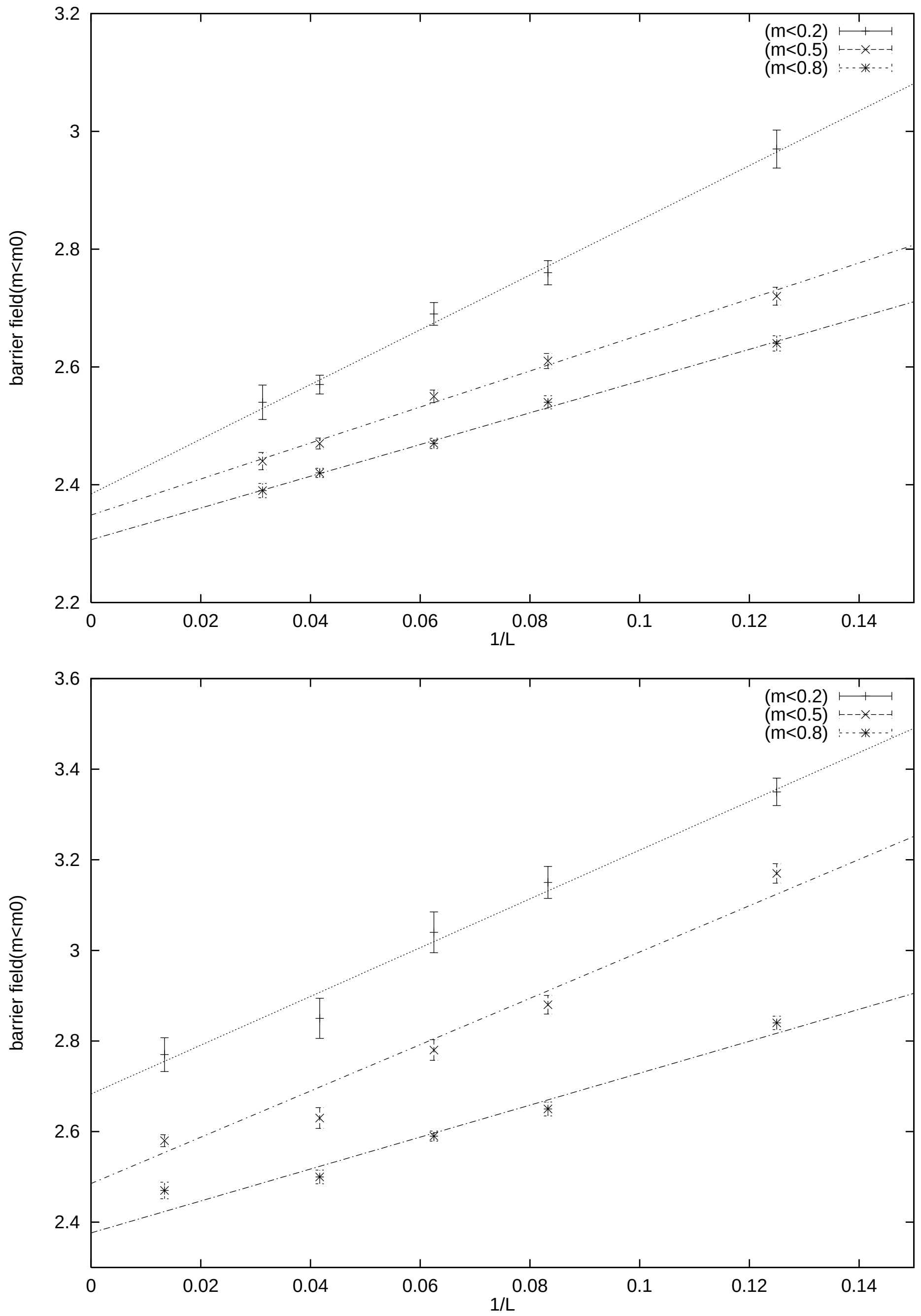


Abbildung 4.4.: Barrierenfeld $\Delta_{m<m_0}(1/L)$ for $L = 8, \ldots, 32$ ($m_0 = 0.2, 0.5, 0.8$) und Fit-Funktionen $\Delta_{m<m_0}(1/L) = c/L + \Delta_{m<m_0}(0)$ für Zufallsfeldsysteme (oben $\pm\Delta$-RFIM, unten Gauß-RFIM). Es ergibt sich $\Delta_{m<0.5}(0) = 2.35 \pm 0.01$ ($\pm\Delta$) bzw. $\Delta_{m<0.5}(0) = 2.49 \pm 0.04$ (Gauß).

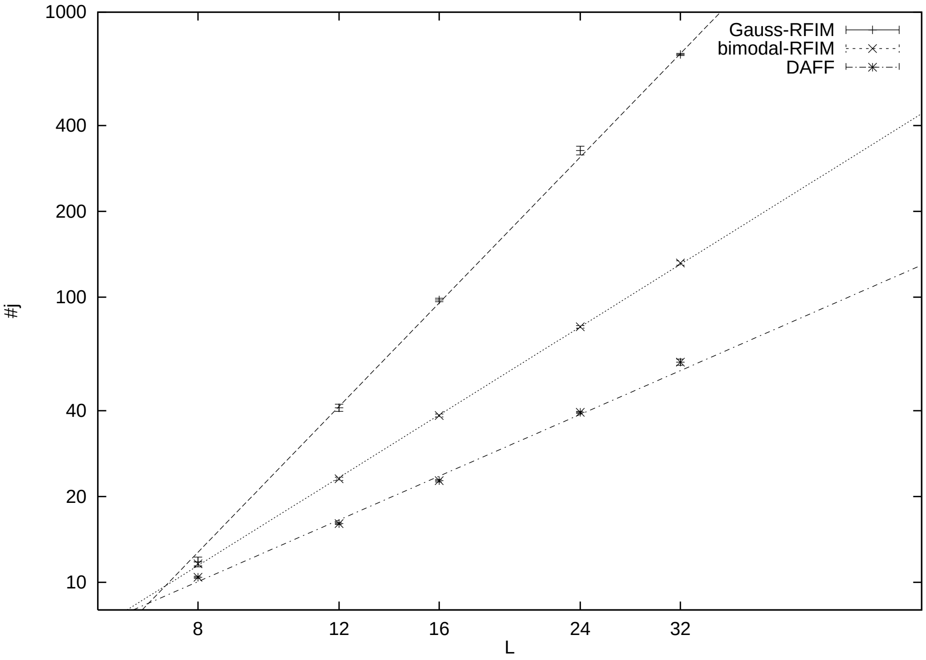


Abbildung 4.5.: Mittlere Anzahl $\#j$ der Sprünge in $B \in [1, 2.8]$ (Gauß-RFIM) bzw. $[0, 6]$ ($\pm\Delta$-RFIM, DAFF) als Funktion der Systemgröße und Fit-Funktionen $\#j(L) = cL^b$ in doppelt logarithmischer Auftragung. Es ergeben sich $b = 1.23 \pm 0.04$ (DAFF), $b = 1.76 \pm 0.01$ ($\pm\Delta$-RFIM), $b = 2.91 \pm 0.03$ (Gauß-RFIM).

Abschließend wird die Entartung genauer untersucht. Zunächst interessiert die Zahl $\#z$ der möglichen Grundzustände, d.h. der Entartungsgrad. In Abbildung 4.6 ist er für zwei Beispiel-DAFFs als Funktion des externen Feldes B dargestellt. Der Entartungsgrad wird dabei nicht exakt berechnet, sondern sehr genau nach oben abgeschätzt, denn eine Abzählung aller Grundzustände würde zu lange dauern, da ihre Zahl exponentiell mit der Systemgröße steigt (s.u.). Der verwendete Algorithmus [82] ist im Anhang A.3 dargestellt.
Der Entartungsgrad ist dort sehr groß, wo das externe Feld ganzzahlige Werte annimmt. Ansonsten ist die Zahl der Grundzustände für Werte $B \in (3,4)$ am größten.
Bei direkter Betrachtung der Graphen $\overline{R}$ zeigte sich, daß sie aus vielen kleinen Teilgraphen geringer Höhe (= maximale Länge eines Pfades im Graphen) bestehen, die nicht untereinander verbunden sind. Größere Systeme bestehen im wesentlichen aus mehr Teilgraphen, aber nicht aus größeren. Somit können die Cluster, die zur Entartung beitragen, weitgehend unabhängig voneinander zwischen zwei Orientierungen wählen. Genauere quantitative Aussagen dazu folgen weiter unten. Somit ist die Struktur der Grundzustände recht einfach. und die Anzahl der Grundzustände liegt nicht stark unterhalb von $2^{\#n}$, wobei $\#n$ die Zahl der inneren Cluster in $\overline{R}$ ist. Aus diesem Grund ist das Näherungsverfahren für die Zahl der Grundzustände auch sehr genau: Für kleine Systeme konnte direkt überprüft werden, daß die Zahl exakt ist, große Systeme bestehen im Prinzip aus vielen unabhängig zusammengesetzten kleinen Systemen, so daß sich deren Entartungsgrade aufmultiplizieren.
Es zeigte sich, daß die mittlere Zahl $\#z$ der Grundzustände sich sehr gut als Funktion von $\#n$ und der Zahl der Kanten $\#e$ im Graphen über den gesamten B-Bereich darstellen läßt:

$$\#z = 2^{\#n}\alpha^{\#e} \tag{4.2}$$

Das bedeutet, daß für $\#e = 0$ alle inneren Cluster unabhängig voneinander sind, und somit der Entartungsgrad genau exponentiell mit der Zahl der Knoten wächst. Durch die Kanten werden den Clustern Bedingungen auferlegt, die Zahl der möglichen Zustände wird reduziert. Auf diese Weise kann man die Grundzustandsstruktur durch eine einzige Zahl α charakterisieren. Es wurde für alle Systeme bei vielen Feldern der passende α-Wert berechnet und daraus die Verteilung ermittelt. Sie ist in Abbildung 4.7 dargestellt.
Es ergab sich ein Mittelwert von $\overline{\alpha} = 0.79 \pm 0.03$. Dieser Wert ist im Rahmen des angegebenen Fehlers unabhängig von Systemgröße und Wert des externen Feldes. Die Verteilungen werden durch einen Peak bei $\alpha = 0.75$ dominiert. Das ist genau der Wert, der sich für ein System ergibt, das nur aus unabhängigen Clustern sowie aus Paaren von Clustern besteht, welche durch eine Kante verbunden sind. Der Wert von $0.75 = 3/4$ kommt dadurch zustande, daß eine Kante die Zahl der energetisch gleichwertigen Zustände zweier Cluster von 4 auf 3 reduziert.
In Abbildung 4.8 wird Entartungsgrad für zwei $\pm\Delta$-RFIM Systeme der Größe

$L = 8$ und $L = 16$ gezeigt. Hier ist die Zahl der Grundzustände am größten für ganzzahlige Felder $\Delta = 3, 4, 6$ und im Intervall $(3, 4)$. Der Bereich hoher Entartung ist somit schmaler als beim DAFF. Der Entartungsgrad des $\pm\Delta$-RFIM läßt sich noch besser durch Gleichung (4.2) approximieren. Die Verteilung der Werte für α ist in Abbildung 4.9 gezeigt. Es ergab sich ein Mittelwert von $\alpha = 0.7582 \pm 0.0002$. Beim Gauß-RFIM tritt dagegen keinerlei Entartung auf, außer der zweifachen Entartung bei Sprungstellen. Das ist auch zu erwarten, da es sehr unwahrscheinlich ist, daß die Summe der Gauß-verteilten Zufallsfelder Σ_C für einen Cluster C exakt verschwindet.
Da die Zahl der Grundzustände im wesentlichen durch die Zahle $\#n$ der inneren Cluster und durch die Zahl $\#e$ der Kanten bestimmt wird, wurden diese Größen für die DAFF/ $\pm\Delta$-RFIM Systeme bei $B = \Delta = 3.9999$ für verschiedene Größen bis $L = 160$ berechnet. Es wurden von 2560 Realisierungen für $L = 12$ bis 10 Realisierungen für die größten Systeme verwendet. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.10 zu sehen. Für beide Modelle ergibt sich eine $L^{3.00}$-Abhängigkeit für $\#n$ und $\#e$. Die Zahl der Kanten ist etwa drei- bis viermal kleiner als die Zahl der Cluster. Insgesamt hängt der Entartungsgrad tatsächlich exponentiell von der Größe des Systems ab.
Für den DAFF sind etwa 4.6 % der Spins in den inneren Clustern enthalten, beim $\pm\Delta$-Zufallsfeldsystem sind es gar nur 1.8 %. Diese Werte sind unabhängig von der Systemgröße. Somit sehen die verschiedenen Grundzustände einer Realisierung praktisch gleich aus. Da die Zahl der Cluster/Kanten linear von der Zahl der Spins abhängt, zeigt dies wiederum, daß die Grundzustände der betrachteten Systeme aus vielen kleinen mehr oder weniger unabhängigen Clustern bestehen. Bei Vergrößerung der Systeme erhöht sich also die Zahl der Cluster, aber nicht ihre Größe oder der Grad der Verbindungen zwischen ihnen.
Konsequenterweise ergeben sich für die Verteilungen der Überlapps (siehe Def. (2.7)), welche die Struktur der Grundzustände charakterisieren, stark gepeakte Kurven. Sie sind um den Wert zentriert, der den Anteil der Spins angibt, die in allen Grundzuständen dieselbe Orientierung haben. In Abbildung 4.11 sind die Verteilungen für den DAFF und den RFIM für die Größen $L = 10, 20, 40$ gemittelt über jeweils 100 Konfigurationen dargestellt. Für jede Konfiguration wurden 50 Grundzustände per Zufall ausgewählt und dann für jede mögliche Paar-Kombination der Überlapp ausgerechnet.

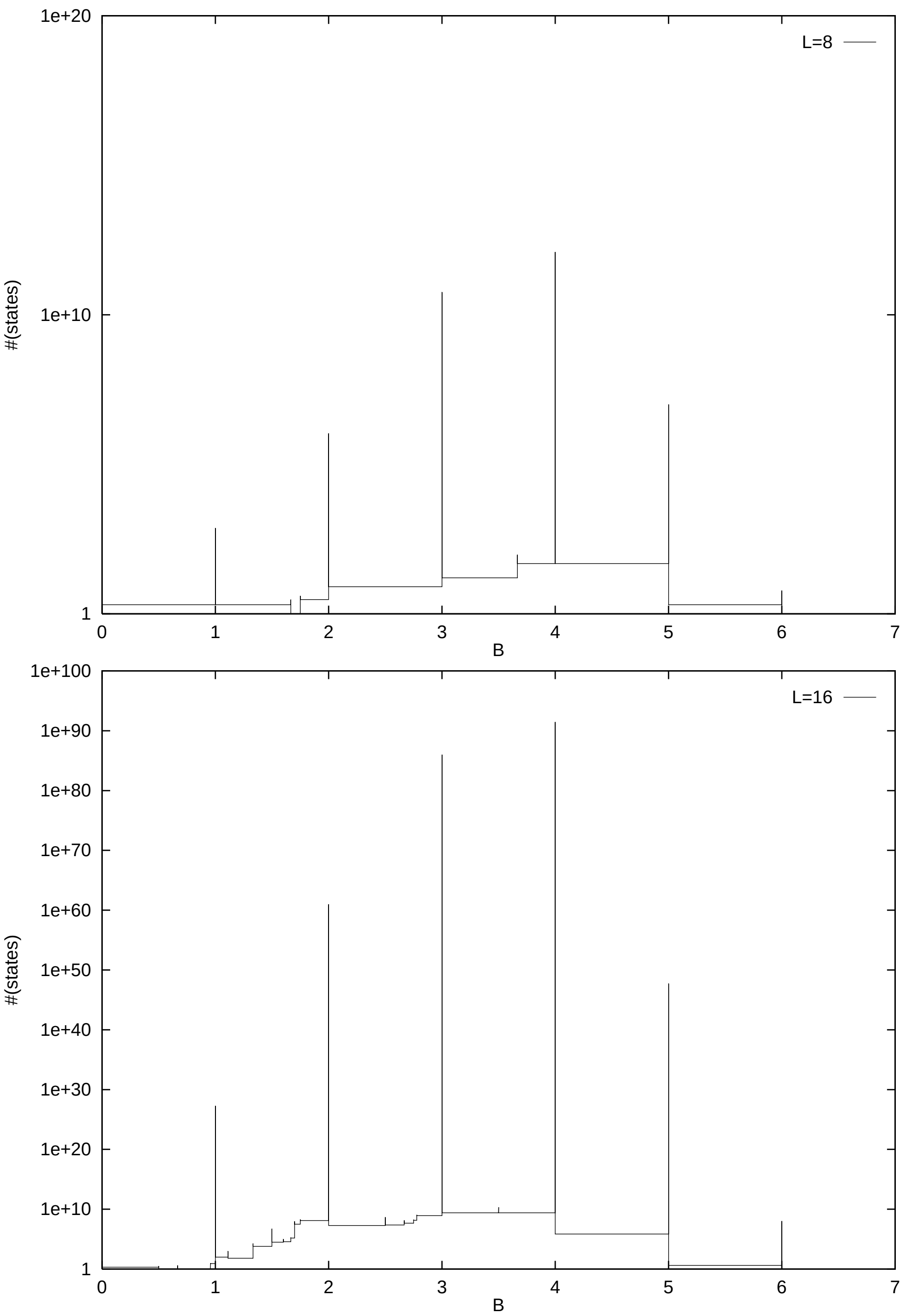


Abbildung 4.6.: Entartungsgrad von zwei DAFFs ($L = 8$, $p = 0.5$) und ($L = 16$, $p = 0.5$) für $0 \leq B < 6.5$. Für ganzzahlige Felder und im Intervall $(3, 4)$ ist die Zahl der Grundzustände am höchsten.

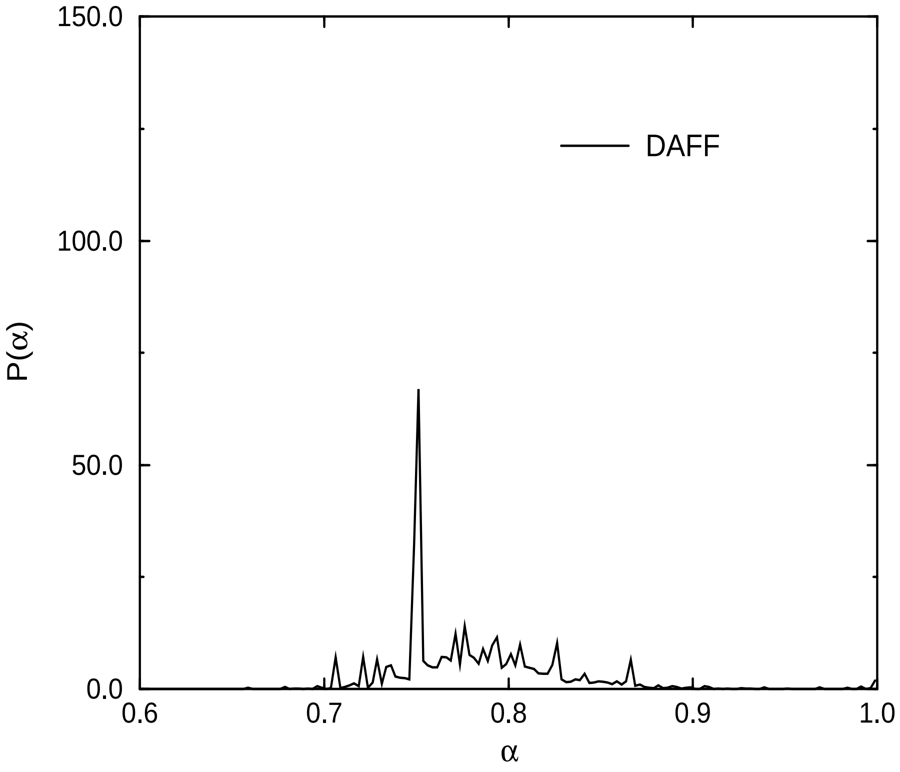


Abbildung 4.7.: Verteilung $P(\alpha)$ für DAFF ($L = 16$) für Felder B, die nicht ganzzahlig sind. Der Parameter α ist für jedes System so gewählt, daß für die Zahl der Grundzustände $\#z = 2^{\#n}\alpha^{\#e}$ gilt, wobei $\#n$ die Zahl der Knoten im Grundzustandsgraphen und $\#e$ die Zahl der Kanten ist. Die Verteilung unterscheidet sich wenig für Felder, an denen Sprünge stattfinden, und für andere Felder. Auch von der Größe der Felder hängt sie im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht ab. Der Peak liegt genau bei 0.75 (siehe Text).

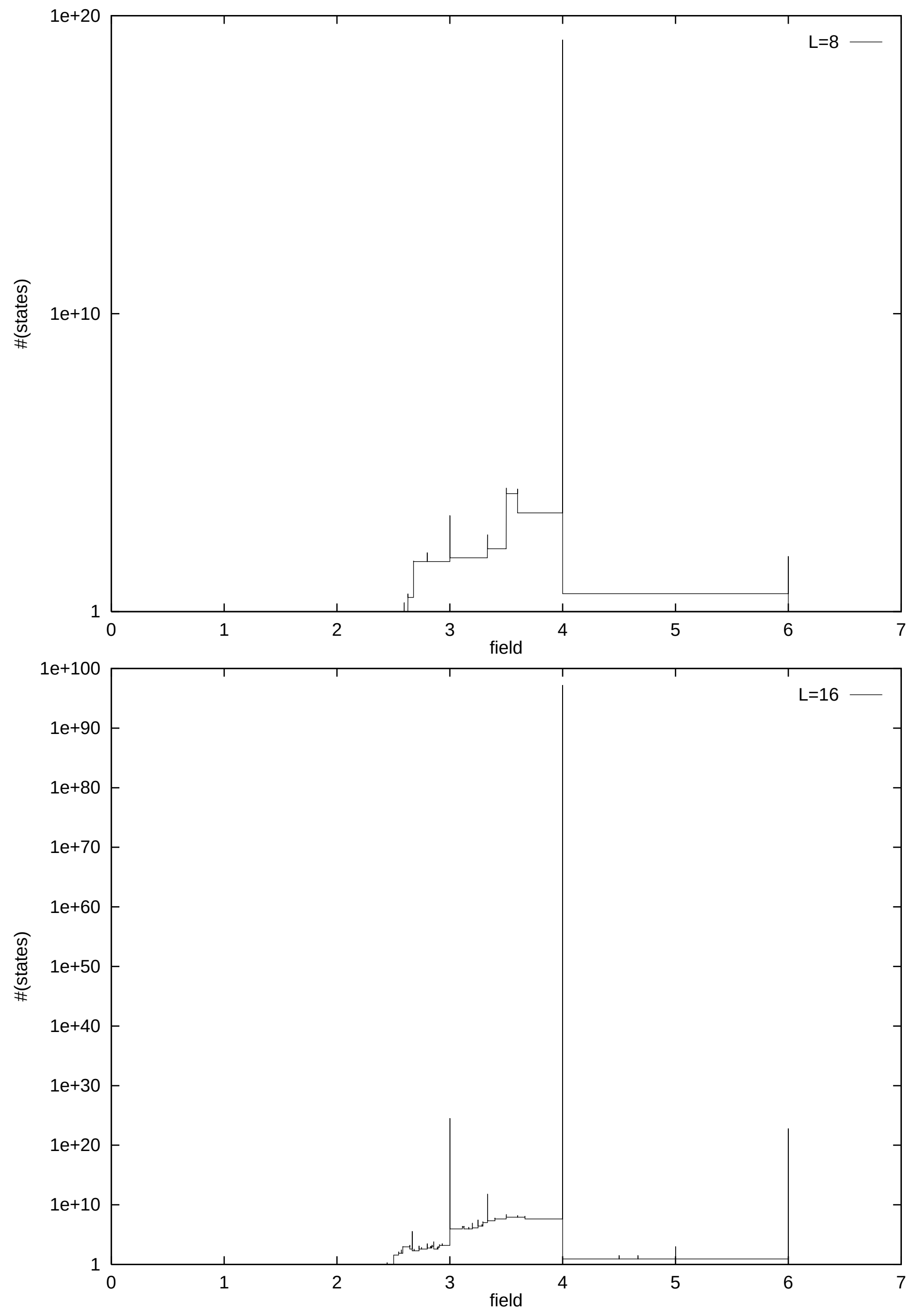


Abbildung 4.8.: Entartungsgrad von zwei $\pm\Delta$-RFIM-Systemen ($L = 8$) und ($L = 16$) für $0 \leq \Delta < 6.5$. Für $\Delta \in [3, 4]$ und $\Delta = 6$ gibt es viele Grundzustände.

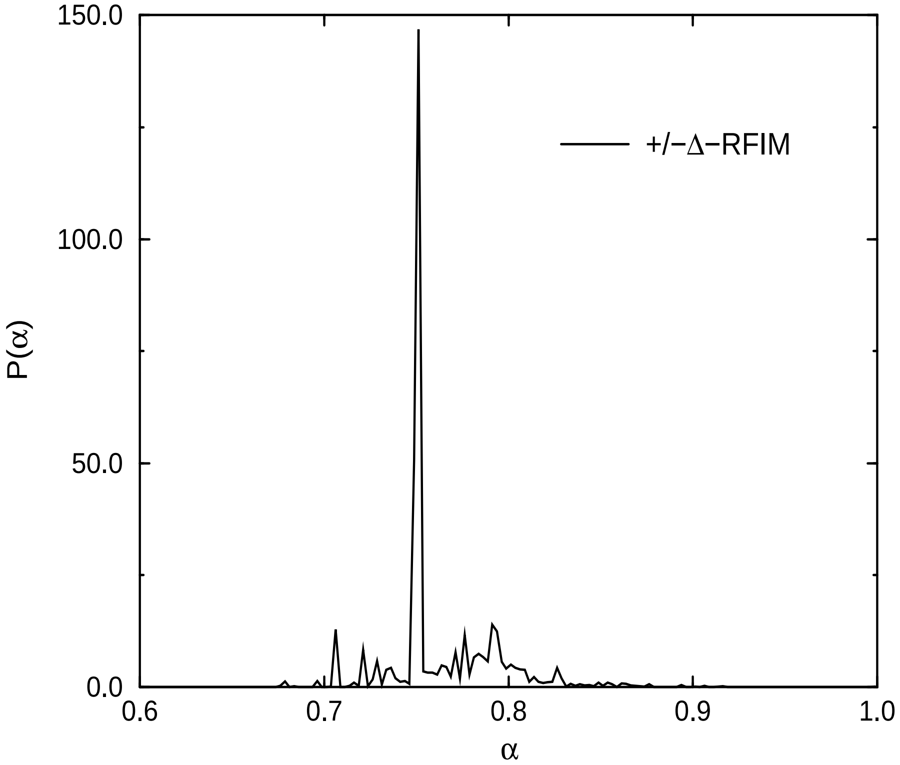


Abbildung 4.9.: Verteilung $P(\alpha)$ für RFIM ($L = 16$) für Felder Δ, die nicht ganzzahlig sind. Der Parameter α ist für jedes System so gewählt, daß für die Zahl der Grundzustände $\#z = 2^{\#n}\alpha^{\#e}$ gilt, wobei $\#n$ die Zahl der Knoten im Grundzustandsgraphen und $\#e$ die Zahl der Kanten ist. Die Verteilung unterscheidet sich wenig für Felder, an denen Sprünge stattfinden, und für andere Felder. Auch von der Größe der Felder hängt sie im Rahmen der Meßgenauigkeit nicht ab. Der Peak liegt genau bei 0.75 (siehe Text).

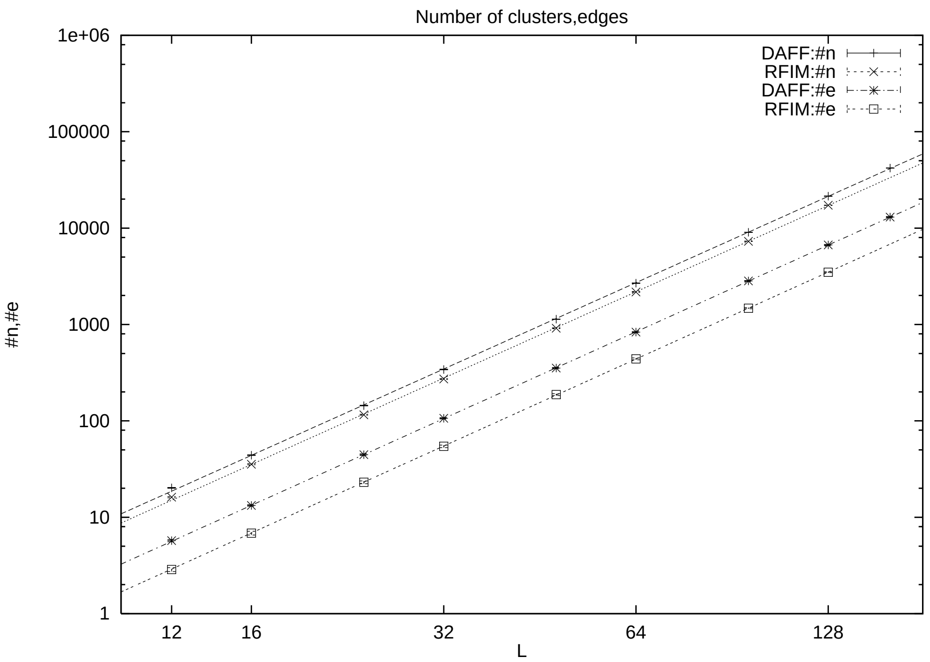


Abbildung 4.10.: Anzahl der Clusters $\#n$, Kanten $\#e$ als Funktion der Systemgröße L für den DAFF and den $\pm\Delta$-RFIM zusammen mit Fits der Form $f(L) = cL^b$. Die Zahl der Cluster ist etwa drei- bis viermal höher als die Zahl der Kanten. Beide Größen hängen linear von der Zahl der Spins ab, d.h. es ergibt sich genau $b = 3.00$.

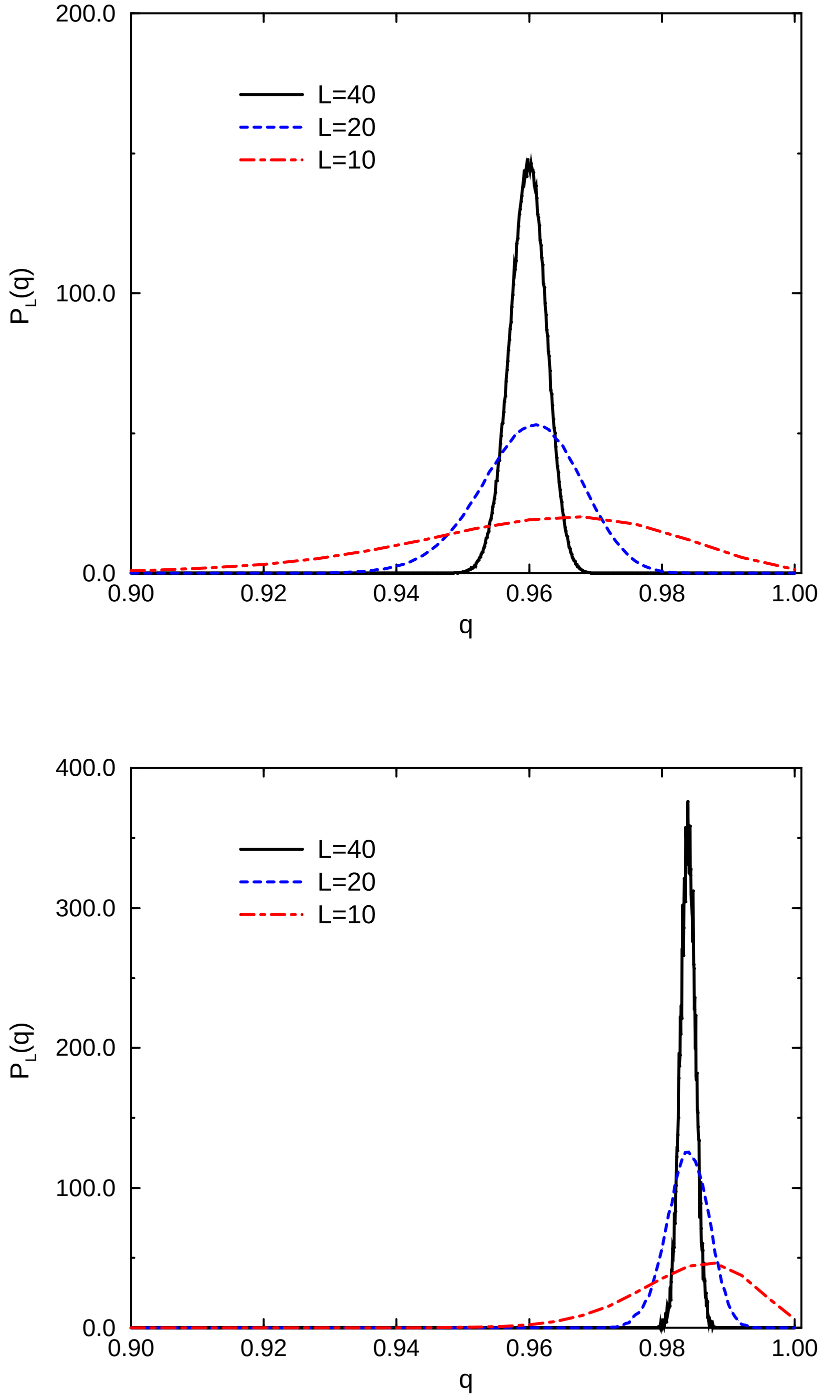


Abbildung 4.11.: Verteilungen der Überlapps für DAFF und RFIM für die Größen $L = 10, 20, 40$ gemittelt über jeweils 100 Konfigurationen für $B = 3.9999$ bzw. $\Delta = 3.9999$. Für jede Konfiguration wurden 50 Grundzustände per Zufall ausgewählt.

4.2. Spingläser

Es wurden Grundzustände von 3d $\pm J$-Ising-Spingläsern für Systemgrößen $L = 3$ bis $L = 14$ berechnet. In Tabelle 4.2 ist angegeben, wieviele verschiedene Systeme pro Systemgröße berechnet wurden (N_L). Weiterhin sind die Zahl k der unabhängigen Berechnungen und die dabei tatsächlich erhaltene durchschnittliche Zahl n_g von Grundzuständen aufgeführt.

L	3	4	5	6	8	10	12	14
N_L	4000	4000	2000	2000	1000	600	400	100
k	40	40	40	40	40	60	80	80
n_g	39.9	34.4	36.3	23.9	23.8	21.3	10.1	7.7

Tabelle 4.2.: Zahl der für jede Systemgröße L betrachteten Realisierungen N_L, Anzahl der unabhängigen Grundzustandsberechnungen k je Realisierungen und durchschnittliche Zahl n_g der tatsächlich erhaltenen Grundzustände.

In Tabelle 4.3 sind die Ergebnisse für Grundzustandsenergie e, sowie Mittelwert $\overline{|q|}$ und Varianz $\sigma^2(|q|)$ von $P(|q|)$ aufgeführt (siehe Def. (2.12) und (2.16)).

L	e	$\overline{\|q\|}$	$\sigma^2(\|q\|)$
3	-1.6731(19)	0.742(3)	0.0731(9)
4	-1.7370(9)	0.748(3)	0.0669(9)
5	-1.7603(8)	0.743(4)	0.0628(13)
6	-1.7723(7)	0.742(4)	0.0632(15)
8	-1.7802(5)	0.726(6)	0.0621(20)
10	-1.7836(3)	0.735(4)	0.0585(16)
12	-1.7851(4)	0.709(8)	0.0593(30)
14	-1.7865(7)	0.707(17)	0.0583(72)

Tabelle 4.3.: Resultate der Berechnungen der Grundzustände von L^3 $\pm J$-Ising-Spingläsern ($3 \leq L \leq 14$): e: Energie, $\overline{|q|}$: Mittelwert der Verteilung der Überlapps $P(|q|)$, $\sigma^2(|q|)$: Varianz von $P(|q|)$. Die Werte für e sind so gut oder besser wie die besten bekannten Resultate. Ein weiteres Indiz, daß die berechneten Zustände echte Grundzustände sind oder wenigstens sehr nahe an den Grundzuständen liegen.

Um die Qualität des Minimierungsverfahrens einschätzen zu können, wird als erstes die jeweils erreichte Grundzustandsenergie diskutiert. Um das Verhalten für $L \to \infty$ zu extrapolieren, werden Finite-Size-Scaling-Fits (FSS-Fits) verwendet. Dabei werden Funktionen mittels eines Fit-Verfahrens der kleinsten Quadrate namens Levenberg-Marquard-Algorithmus [75] an die Kurven angepaßt. Dieses Verfahren liefert auch eine Fit-Güte Q: Man geht dabei davon aus, daß das untersuchte System tatsächlich die durch den Fit gegebenen Mittelwerte hat. Q ist dann die

Wahrscheinlichkeit, daß die Ergebnisse eines Zufallsexperiments noch schlechter zu dem Fit passen, als die gegebenen Daten. Je größer Q, desto besser der Fit. Werte von $Q > 0.1$ scheinen akzeptabel, falls $Q < 10^{-3}$ wird ein Fit als ungeeignet angesehen. In Tabelle 4.4 sind die Ergebnisse für die am Anfang vorgestellten Fit-Funktionen $f(L), g(L)$ und $h(L)$ (Formeln (2.17) - (2.19)) angegeben. Ebenfalls sind dort zwei Fits für die Varianz $\sigma^2(|q|)$ aufgeführt.

	Fit	a_∞	a_1	a_2	Q
e	f(L)	-1.7869(3)	3.15(5)	-	0.20
e	g(L)	-1.7876(3)	2.60(15)	2.84(5)	0.77
e	h(L)	-1.7846(8)	1.01(17)	0.75(5)	10^{-7}
$\sigma^2(\|q\|)$	f(L)	0.0608(6)	0.34(3)	-	0.79
$\sigma^2(\|q\|)$	g(L)	0	0.088(4)	0.18(3)	0.09

Tabelle 4.4.: Ergebnis der FSS-Fits für Energie e and Varianz $\sigma^2(|q|)$ von $P(|q|)$ als Funktion von L: $f(L)$ nimmt MF- und $g(L)$ DS-Verhalten an. $h(L)$ ist ein Exponential-Fit für die Energie. Die Bedeutungen der Parameter a_∞, a_1, a_2 ergeben sich aus den Definitionen der Funktionen in Gleichung (2.17) bis (2.19). Q mißt die Qualität der Fits (siehe Text). Für die Energie sind sowohl MF- als auch DS-Szenario möglich, aber der Wert des Exponenten $a_2 = 2.84$ für DS liegt über der oberen Grenze $(d-1)/2 = 1$. Für die Varianz ist der MF-Fit wahrscheinlicher.

Die sich ergebenden Grundzustandsenergien des unendlichen Systems sind für die Fits von f und g sehr ähnlich: $e_\infty = a_\infty = -1.7869(3)$ ($Q = 0.20$) bzw. $e_\infty = a_\infty = -1.7876(3)$ mit $a_2 = 2.84(3)$ (Q=0.77). Der Exponential Fit ist zu schlecht (Q=10^{-7}). Diese Grundzustandsenergien sind niedriger als bei einigen früheren Berechnungen: $e_\infty = -1.75$ [48], $e_\infty = -1.76(2)$ [57]. Die Energien liegen im Bereich der bis dato genausten Studie $e_\infty = -1.7863(4)$ [67], wo auch bis $L = 14$ gerechnet wurde, aber mit geringerer Statistik bei den "großen" Systemen (dort $N_L = 50, 25$ bei $L = 12, 14$) und nur wenigen Minimierungsläufen pro System (typischerweise $n = 8$, da dort nicht verschiedene Grundzustände verglichen wurden.) In [8] wurde ein niedrigerer Wert ($e_\infty = -1.839(4)$) gefunden, aber diese Studie krankt an nur 7 Realisierungen für $L = 12$ als höchste Systemgröße. Auch durch Vergleich der Ergebnisse dieser Arbeit bei den einzelnen Größen L mit den Werten der angegebenen Literatur zeigt sich, daß das hier angewendete Verfahren immer die gleichen oder bessere Energien liefert (außer für $L = 12$ in [8]). Das ist ein weiteres Indiz, daß die hier berechneten Zustände auch Grundzustände sind, bzw. sehr nahe an den tatsächlichen exakten Grundzuständen liegen.
Für kleine Systeme bis $N = 6^3$ konnten die Ergebnisse mit etwa 10 exakten Berechnungen mittels Branch-and-Cut [25] verglichen werden. In *allen* Fällen lieferte die genetische CEA den exakten Grundzustand !
Die Energie als Funktion der Systemgröße L ist in Abbildung 4.12 gezeigt. Auch die Fits für $f(L)$ und $g(L)$ werden dargestellt, wobei die Unterschiede fast in der Strichbreite untergehen. In [67] wurde der L^{-3}-Fit ausgeschlossen, dagegen

wurde eine $L^{-2.97}$-Anpassung bevorzugt. In den hier gezeigten Daten findet sich eine ähnliche Tendenz, aber die Daten sind nicht genau genug, um die Frage zu entscheiden. Der Fit $g(L)$, der aus dem Droplet-Ansatz herkommt, unterstützt das MF-Bild ebenfalls, weil der Wert des Exponenten $y = a_2 = 2.84$ die obere Grenze von $y \leq (d-1)/2 = 1$ überschreitet, die von DS angegeben wird. Da aber in dieser Arbeit die Frage nach der Existenz einer komplexen Grundzustandsstruktur im Zentrum steht, wird nun die Diskussion der Grundzustandsenergie beendet und die Ordnungsparameter-Verteilung $P(|q|)$ (siehe Def. (2.7)) analysiert.

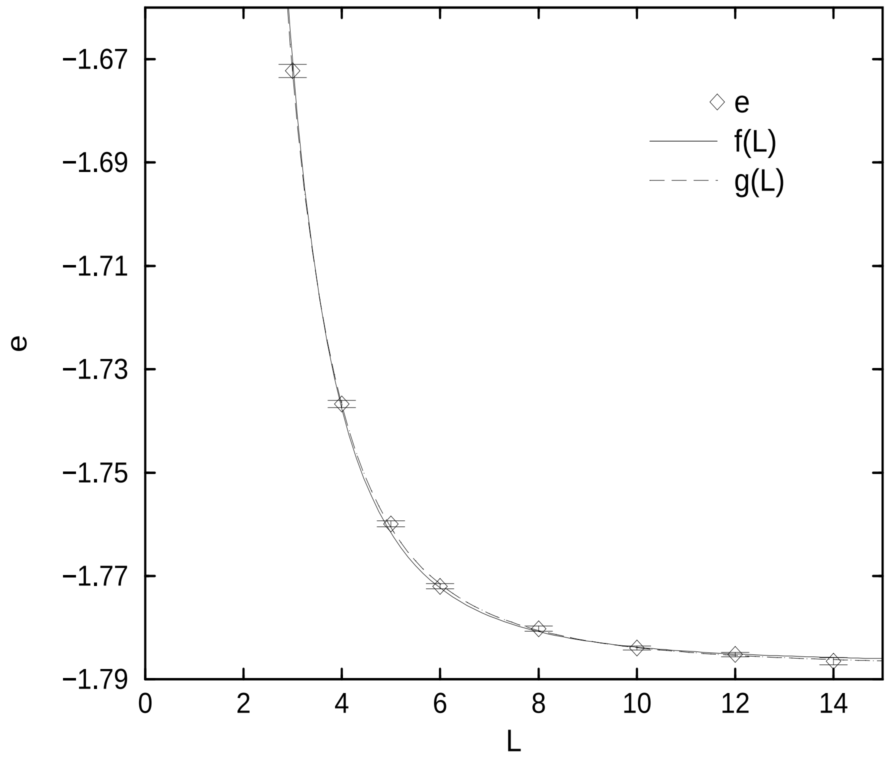


Abbildung 4.12.: Grundzustandsenergie von 3d $\pm J$-Ising-Spingläsern mit Seitenlängen $3 \leq L \leq 14$ und FSS-Fits bei denen entweder Mean-Field- (MF) oder Droplet-Scaling- (DS) Verhalten angenommen wird: $f(L)$, $g(L)$ (siehe Def. (2.17) und (2.18)). Der DS-Fit ist etwas besser, aber der Exponent des L^{-a_2}-Abfalls ist $a_2 = 2.84$, welches wesentlich größer ist als die von DS vorhergesagte Grenze von $(d-1)/2 = 1$.

In Abbildung 4.13 sind die Verteilungen der Überlapps für $L = 6$ und $L = 12$ dargestellt. Jede Realisierung geht mit gleichem Gewicht in die Mittelung ein, unabhängig davon, wieviele Grundzustände für die Berechnung der Verteilung $P_J(|q|)$ zur Verfügung standen. Nur für große q-Werte ist ein wesentlicher Unterschied zwischen den Verteilungen sichtbar. Dies äußert sich auch durch eine kleine

Verschiebung der Mittelwerte $\overline{|q|}$ (siehe Tabelle 4.3). Insbesondere für $|q| \leq 0.8$ ist keine signifikante Verringerung der Wahrscheinlichkeit für die größeren Systeme sichtbar. Somit gibt es auch bei wachsendem L viele fundamental verschiedenen Grundzustände. Sie unterscheiden sich nicht nur in vielen kleinen Clustern, denn sonst müßten sich Gauß-ähnliche Verteilungen ergeben, wie es bei den Zufallsfeldsystemen und den verdünnten Antiferromagneten der Fall war.

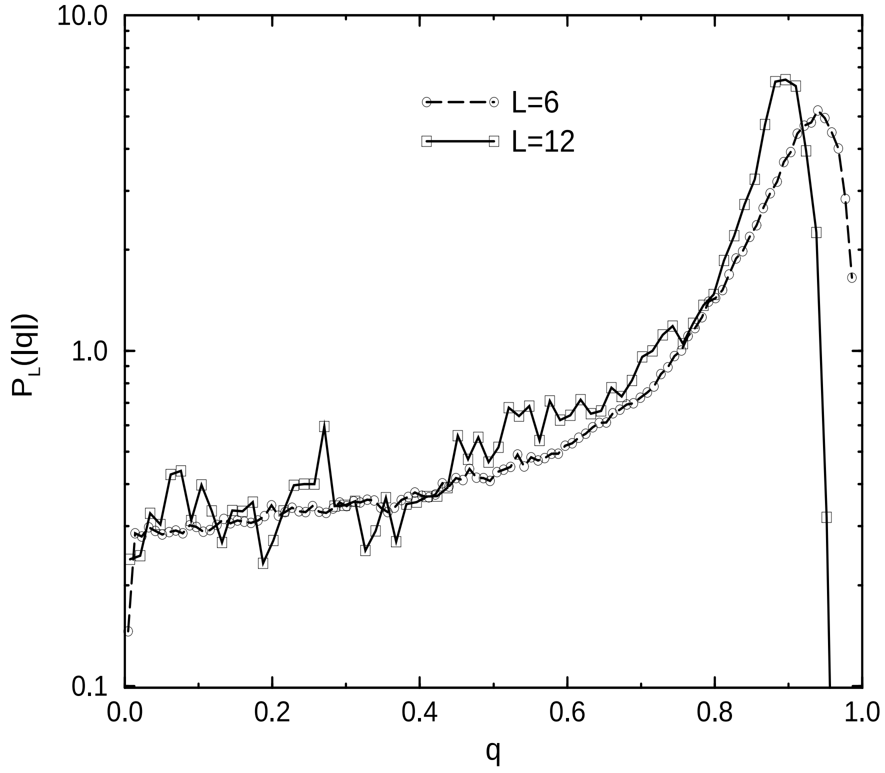


Abbildung 4.13.: Verteilung der Überlapps $P(|q|)$ (siehe Def. (2.7) für Grundzustände von 3d $\pm J$ Ising-Spingläsern für $L = 6, 12$. Nur für große Werte von q ergeben sich Unterschiede. Somit erhält man auch für große Systeme eine nicht-verschwindende Wahrscheinlichkeit des Überlapps $q = 0$. Die Linien dienen nur der Übersichtlichkeit.

Quantitativ wird dieses Resultat durch das Verhalten der Varianz der Verteilungen als Funktion von L gestützt, das in Abbildung 4.14 dargestellt ist. Die dort gezeigten Werte sind für alle Systemgrößen höher als bei der MC-Simulation nach dem multikanonischen Ensemble [8], was darauf hindeutet, daß dieses MC-Verfahren den Konfigurationsraum nicht ausreichend erfaßt. Ebenfalls in der Abbildung gezeigt sind die konkurrierenden Fits für das DS- und das MF-Szenario (siehe auch Tabelle 4.4). Die Fits ergeben eine höhere Wahrscheinlichkeit für die

Existenz vieler komplexer Grundzustände ($Q = 0.79$), als für das Zwei-Zustands Bild ($Q = 0.09$).

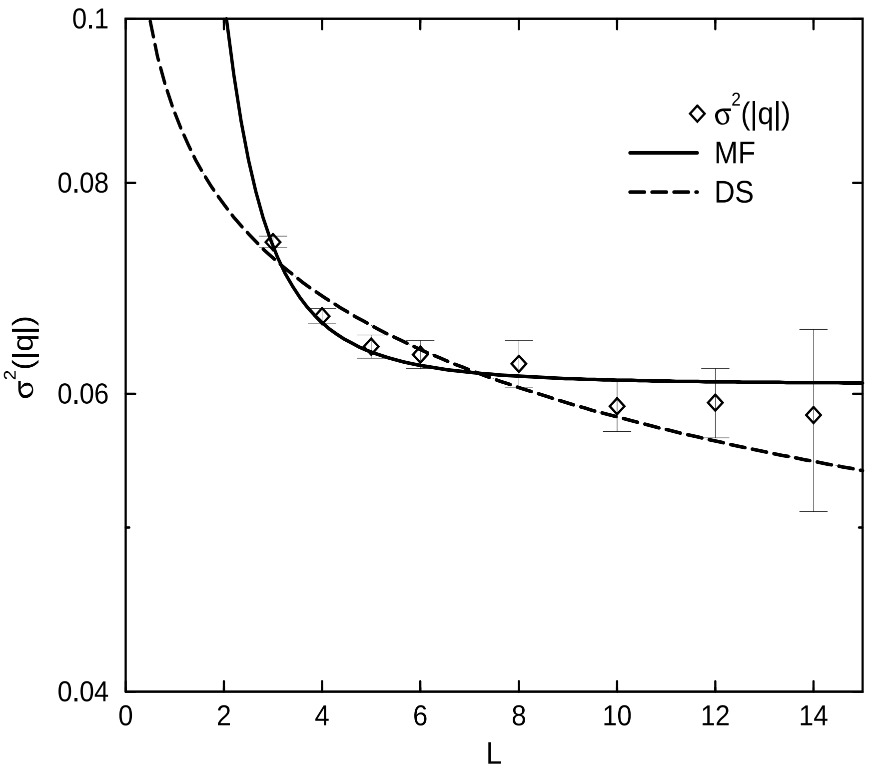


Abbildung 4.14.: Varianzen $\sigma^2(|q|)$ (siehe Def. (2.16)) der Verteilungen der Überlapps $P(|q|)$ als Funktion von L für $3 \leq L \leq 14$. Die Werte scheinen zu einem nicht verschwindenden Grenzwert zu konvergieren. Zwei Fits, welche MF- ($\sigma^2(|q|) \to c > 0$ für $L \to \infty$) oder DS- ($\sigma^2(|q|) \to 0$ für $L \to \infty$) Verhalten annehmen, sind gegeben. Das MF-Szenario ist wahrscheinlicher ($Q_{MF} = 0.77 > 0.09 = Q_{DS}$, siehe Text). Somit scheint die Breite von $P(|q|)$ für $L \to \infty$ endlich zu bleiben, woraus die Existenz vieler sehr verschiedener Grundzustände im unendlichen System folgt.

Um den Einfluß der kleinsten Systeme ($L = 3, 4$) auszuschließen, wurden die Anpassungen für $f(L), g(L)$ testweise nur für $L > 4$ durchgeführt. Es ergab sich eine höhere Wahrscheinlichkeit für den $g(L)$-Fit ($Q = 0.51$), aber der Exponent $a_2 = 0.13(3)$ liegt unter der Voraussage $y \approx 0.2$ [15]. Auch unter Berücksichtigung des optischen Eindrucks in Abbildung 4.14, erscheint insgesamt die Vorstellung einer nicht-verschwindenen Breite von $P(|q|)$ für $L \to \infty$ wahrscheinlicher, obwohl das DS-Szenario nicht völlig ausgeschlossen werden kann.
Noch mehr wird das MF-Szenario gestützt, wenn man die kumulierte Größe $X_L(q_m) = \int_{-q_m}^{q_m} P(q)dq$ betrachtet, welche die Wahrscheinlichkeit für einen Betrag des

Überlapp-Werts kleiner als q_m angibt. Sie ist in Abbildung 4.15 für $q_m = 0.5$ dargestellt. Für steigendes L steigt auch $X(0.5)$ an, was nur möglich ist, wenn auch für das unendlich große System die Verteilung $P(|q|)$ eine endliche Breite behält, da ja der Mittelwert der Verteilung immer oberhalb von $q = 0.5$ bleibt.

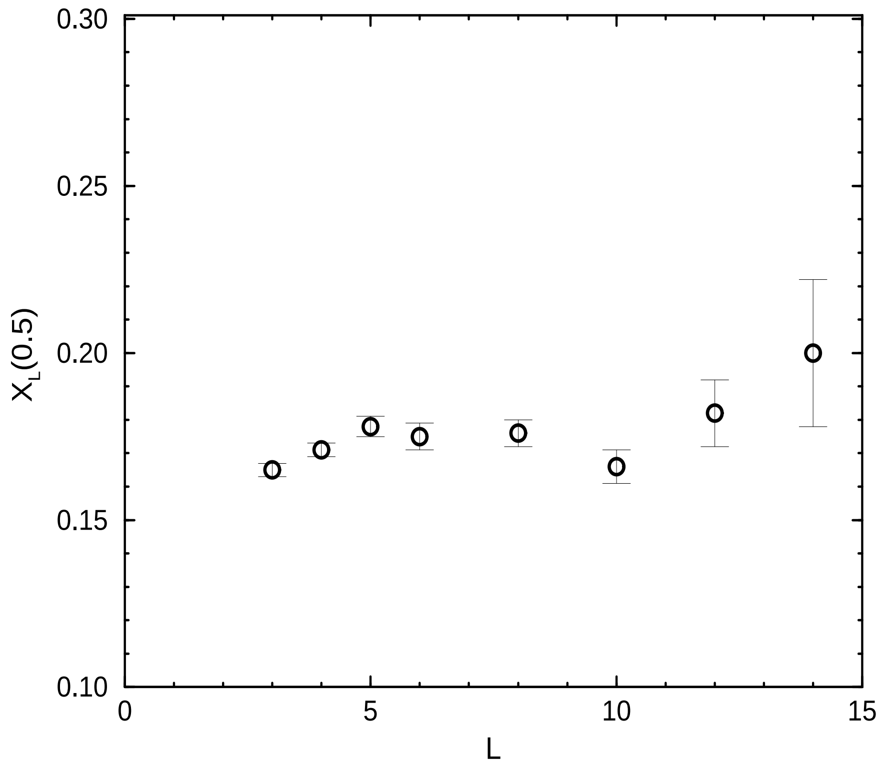


Abbildung 4.15.: Kumulierte Wahrscheinlichkeit $X_L(0.5)$, dafür, daß sich ein Betrag des Überlapps kleiner als 0.5 ergibt, als Funktion von L. Die Größe wächst mit steigendem L, was wiederum für die Existenz einer komplexen Grundzustandsstruktur spricht.

Insgesamt ergibt sich also eine komplexe Struktur der Grundzustände. Also ganz im Gegensatz zu den oben betrachteten Systemen, die keine Bond-Frustration aufweisen, wo im wesentlichen nur ein Grundzustand existiert.
Des weiteren wurde getestet, ob die Grundzustände eine ultrametrische Struktur aufweisen. Dazu wurden alle möglichen Tripel von Grundzuständen gebildet, die drei Überlapp-Werte berechnet, davon der Betrag genommen und dann der Größe nach geordnet: $q_1 > q_2 > q_3$. Falls die Grundzustände ultrametrisch organisiert sind, sollte bei festem q_1 die Differenz zwischen den beiden anderen Werten mit steigender Systemgröße verschwinden [10]. Dazu wurden alle Überlapp-Tripel mit $q_1 \in [0.5, 0.6]$ berücksichtigt und jeweils der Unterschied $\delta = q_2 - q_3$ berechnet.

Die Ergebnisse sind für $L = 4, 10, 14$ in Abbildung 4.16 dargestellt.

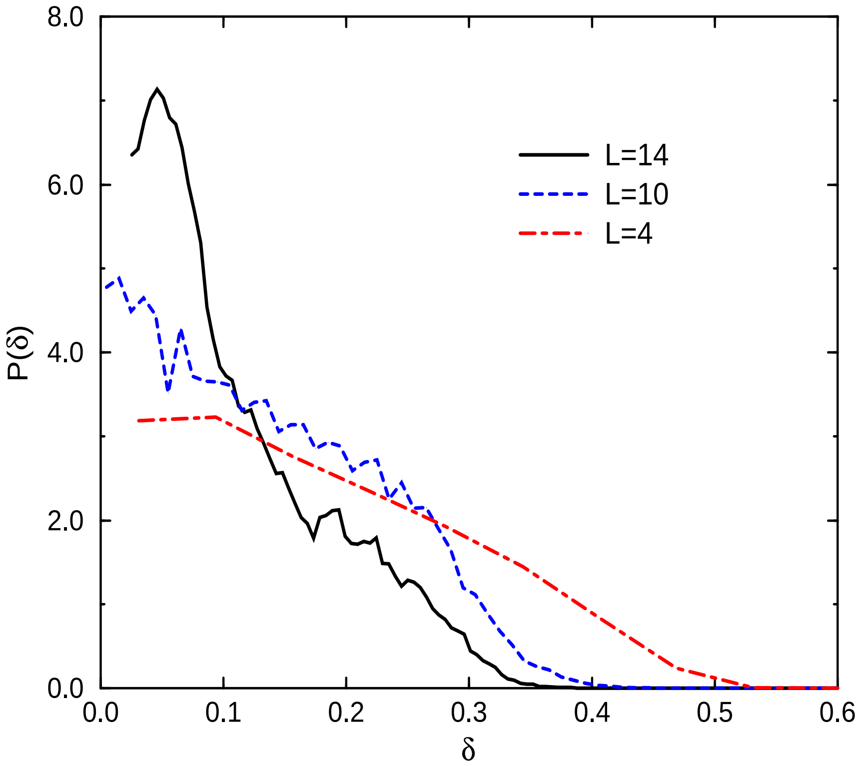


Abbildung 4.16.: Test auf Ultrametrizität: Verteilung der Unterschiede $\delta = q_2 - q_3$ zwischen den beiden kleineren Beträgen für die drei Überlapps von Tripeln von Grundzuständen, wenn für den vom Betrag größten Überlapp $q_1 \in [0.5, 0.6]$ gilt. Gezeigt werden die Verteilungen für drei Systemgrößen $L = 4, 10, 14$. Die Verteilungen werden immer schmaler mit steigendem L, wie bei einer ultrametrischen Struktur erwartet.

Die Verteilungen werden immer schmaler für $L \to \infty$, was für eine immer ultrametrischer werdende Struktur der Grundzustände spricht. Des weiteren wurde auch der Mittelwert $\langle \delta \rangle$ als Funktion von L berechnet. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.17 zu sehen. Auch hier spiegelt sich das Verschwinden von δ für wachsendes L wieder. Aber es ließ sich kein brauchbarer Fit an irgendeine Funktion durchführen.

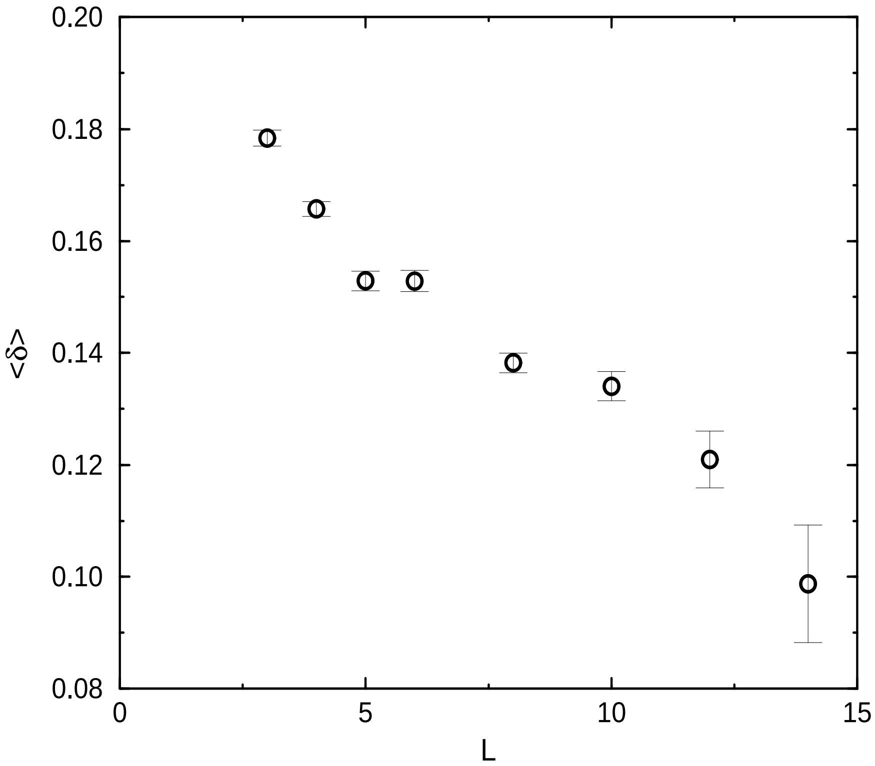


Abbildung 4.17.: Test auf Ultrametrizität: Mittelwert der Unterschiede $\delta = q_2 - q_3$ zwischen den beiden kleineren Beträgen der drei Überlapps von Tripeln von Grundzuständen, wenn für den vom Betrag größten Überlapp $q_1 \in [0.5, 0.6]$ gilt. Mit wachsenden L werden die $\langle\delta\rangle$ immer kleiner, aber es ließ sich kein brauchbarer Fit an irgendeine Funktion durchführen.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Der Schwerpunkt dieser Arbeit lag in zwei Bereichen: Zum einen wurden einige Algorithmen zur Berechnung von Grundzuständen ungeordneter Ising-Systeme entwickelt und zum anderen damit dann die Struktur der Grundzustände untersucht.

Für Ising-Systeme ohne Bond-Frustration, wie Zufallsfeldsysteme und verdünnte Antiferromagnete, können die Grundzustände exakt berechnet werden. Durch die Implementierung neuer Verfahren der Graphentheorie konnten hier erstmals Systeme bis 160^3 untersucht werden.

In dieser Arbeit wurde ein Verfahren entwickelt, daß die Analyse des Verhaltens über die gesamte Achse der externen/Zufallsfelder ermöglicht und nicht nur bei beliebigen aber fest vorgegebenen Feldwerten wie vorher üblich. Insbesondere ist es nun möglich, die Feldwerte zu berechnen, wo sich ein Grundzustand ändert. Zwischen diesen Feldern ändert sich der Grundzustand als Funktion des Feldes nicht.

Weiterhin wurden hier erstmals mathematische Verfahren eingesetzt, die die Berechnung aller entarteter Grundzustände in einem Schritt ermöglichen. Sie lassen sich dann mittels eines Graphen darstellen, dessen Knoten Cluster von Spins repräsentieren. Die Kanten in dem Graph beschreiben Abhängigkeiten zwischen den Clusterorientierungen, die in jedem Grundzustand erfüllt sein müssen. Aus diesem Graph läßt sich dann beispielsweise ablesen, wie hoch der Entartungsgrad ist und wie sehr sich die verschiedenen Grundzustände eines Systems voneinander unterscheiden.

Es wurde das Finite-Size-Verhalten der (AF) Magnetisierung von 3d RFIM und DAFF als Funktion der Felder B, Δ untersucht. Es zeigte sich, daß die Zahl der Sprungstellen immer weiter zunimmt, die Funktion also immer glatter wird. Durch Einführung des sog. Barrierenfeldes konnten die kritischen Feldwerte leicht bestimmt werden. Die Analyse der Grundzustandsstruktur ergab, daß die meisten Spins für DAFF und $\pm\Delta$-RFIM in allen entarteten Grundzuständen immer die gleiche Orientierung haben. Nur etwa 5 bzw. 2 Prozent der Spins tragen zur Entartung bei, außer bei ganzzahligen Feldwerten, wo die Entartung größer ist. Diese Spins verteilen sich auf viele kleine Cluster, die fast vollständig unabhängig voneinander zwei Orientierungen einnehmen können. Das führt zu einem exponentiellen Wachstum des Entartungsgrades und zu einer Überlapp-Verteilung, die mit steigender Systemgröße gegen eine Delta-Funktion konvergiert. Die Zusammenhänge zwischen den verschiedenen Teilclustern konnten sehr gut durch einen einzelnen neuen Parameter α beschrieben werden. Der Gauß-RFIM zeigt keine Entartung. Damit gibt es im wesentlichen immer nur einen Grundzustand in diesen Syste-

men. Das beschriebene Verhalten findet sich über einen sehr großen Bereich von Feldern. Für sehr große und sehr kleine Felder sind die Grundzustände sogar noch einfacher.
Die für RFIM und DAFF hier entwickelten bzw. angewendeten Verfahren erlauben eine vollständige Beschreibung der Grundzustände dieser Systeme als Funktion der Felder. Damit sollte es möglich sein, die Natur des Übergangs in den ungeordneten Zustand zu untersuchen. Es ist aber noch offen, ob und wie man über die Entartung mitteln muß, und wie man die Stufenstruktur der Funktionen berücksichtigt. Beispielsweise könnte man untersuchen, wie die Höhe der größten Sprünge sich mit der Systemgröße verändert. Weiterhin kann die Grundzustandsstruktur noch genauer untersucht werden: Wie verändern sich die Größenverteilungen der zur Entartung beitragenden Cluster mit Feldstärke und Anzahl der Spins? Welche Typen von Teilgraphen, wie zum Beispiel unabhängige Cluster oder Paare von Clustern, wie häufig vorkommen, dürfte ebenfalls interessant sein. Diese Untersuchungen würden aber den Rahmen dieser Arbeit sprengen.
Bei Spingläsern wird Frustration nur durch die Bonds verursacht, deshalb können in drei Dimensionen nur sehr kleine Systeme exakt berechnet werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden einige Methoden von den oben genannten Modellen übernommen. Damit ist die sehr gute näherungsweise Berechnung der Grundzustände für größere Spingläser bis $N = 14^3$ möglich. Die Grundidee dieser sog. Cluster-Exakten Approximation ist es, ein Teilsystem zu konstruieren, das keine Bond-Frustrationen aufweist. Für diesen Cluster kann der Grundzustand exakt berechnet werden. In jedem CEA-Schritt wird die Energie also monoton abgesenkt. Durch mehrfache Iteration des CEA-Schritts kann die Energie eines Spinglas' sehr stark gesenkt werden. Noch weiter konnte die Effizienz gesteigert werden, indem das Verfahren mit einem genetischen Algorithmus kombiniert wurde.
Die Grundzustandsstruktur der 3d $\pm J$-Spingläsern ist wesentlich komplexer. Es findet sich eine breite Verteilung der Überlapps, d.h. es gibt Grundzustände in jedem System, die sich in beliebigem Umfang voneinander unterscheiden. Dieses Verhalten bleibt auch bei immer größer werdenden Systemen erhalten. Außerdem ist der Raum, in dem die Grundzustände existieren, ultrametrisch. Damit wurden einige wesentliche Vorhersagen des MF-Szenarios für realistische kurzreichweitige Spingläser bestätigt.
Auch bei den Spingläsern sind noch viele Fragen offen, so zum Beispiel, ob die Verteilung der Überlapps selbstmittelnd ist. Dazu wäre aber eine wesentlich höhere Zahl von Grundzuständen nötig. Ebenfalls von Interesse ist das Verhalten der Grundzustände bei Variation der Konzentration der AF-Bonds oder bei Existenz eines äußeren Magnetfelds. Hier müßte man sich auf etwas kleinere Systeme beschränken, da man pro Realisierung für viele verschiedene Feldwerte jeweils Grundzustände berechnen muß.
Zur Zeit laufen Untersuchungen, wie sich die Steifheit des Systems gegen Invertierung der Randbedingungen als Funktion von Systemgröße L entwickelt, ähnlich wie in zwei Dimensionen bereits durchgeführt. Dazu ist aber ein höherer Aufwand erforderlich, da man eine kleine Differenz zweier Energiewerte ausrechnet

und deshalb sehr sicher sein muß, einen Grundzustand gefunden zu haben.

A. Weitere Algorithmen

Im Anhang werden die aus der Literatur verwendeten Algorithmen dargestellt, die noch keinen Eingang in gängige Lehrbücher gefunden haben. Die Verfahren werden jeweils ohne Beweise angegeben, dazu muß auf die zitierte Literatur verwiesen werden.
Zuerst wird ein schneller Algorithmus für die Berechnung des maximalen Flusses in einem Netzwerk vorgestellt. Anschließend wird gezeigt, wie man für ein Netzwerk und seinen maximalen Fluß alle existierenden minimalen Schnitte mittels nur einer Relation darstellen kann. Abschließend wird eine Methode vorgestellt, mit der die Anzahl der minimalen Schnitte, basierend auf dieser Relation, sehr genau nach oben hin abgeschätzt werden kann.

A.1. Berechnung des maximalen Flusses

Im folgenden wird die Berechnung eines maximalen Flusses in einem Netzwerk G dargestellt, das $N+2$ Knoten habe und durch die Kapazitäten $\{c(i,j)\}$ gegeben sei. Dabei sei Knoten 0 die Quelle und Knoten $N+1$ die Senke. Es wird Dinics Algorithmus [26] und der Wave-Algorithmus von R.E. Tarjan [86] zusammen mit einer Heuristik von J.L. Träff [87] verwendet. Der Fluß durch die Kanten (i,j) sei durch $f(i,j)$ gegeben. Ziel des Verfahrens ist es, den Fluß schrittweise zu erhöhen, bis es der Maximalfluß erreicht ist. Anfangs ist der Fluß überall Null.
Zunächst wird der sog. *Inkrementgraph* (engl. *residual graph*) IG konstruiert. Er hat genau dieselben Knoten wie das Netzwerk G. Die Kapazitäten seiner Kanten (IG ist also auch ein Netzwerk) geben an, wie stark der Fluß in dieser Kante noch erhöht werden kann. Wichtig: betrachtet man eine Fluß tragende Kante (i,j) entgegen der Flußrichtung ($f(j,i) < 0$), so kann man dort den (negativen) Fluß erhöhen, indem der Fluß von i nach j erniedrigt wird. Damit ergeben sich folgende Kapazitäten $res(i,j) \geq 0$ für den Inkrementgraphen:

$$res(i,j) = c(i,j) - f(i,j) \quad \forall i,j \in [0, N+1] \tag{A.1}$$

Für jeden Knoten i bezeichne $level(i)$ die Länge des kürzesten Pfades von der Quelle 0 zum Knoten i. Der *Levelgraph* $LG(IG)$ von IG ist der Teilgraph von IG, welcher nur Kanten (i,j) mit $level(j) = level(i)+1$ enthält. Dieser Graph kann in linearer Zeit mittels *Breitensuche* konstruiert werden. Bei der Breitensuche werden zuerst alle Nachfolger von der Quelle 0 besucht, dann deren Nachfolger, die noch nicht besucht wurden, und so weiter. Diese Reihenfolge des Durchlaufs durch die Knoten erfolgt in *topologischer Ordnung*, d.h. ein Knoten wird erst besucht, wenn

alle seine Vorgänger besucht wurden. Die topologische Ordnung ist im allgemeinen nicht eindeutig.
In dieser Arbeit wurde die Definition des Levelgraphen etwas abgewandelt, weil dadurch die Geschwindigkeit um den Faktor 2 erhöht werden konnte: Zusätzlich zu den genannten Kanten werden noch alle Kanten $(i, N+1)$ ($N+1 =$ Senke) aufgenommen, wodurch der mögliche "Durchfluß" durch den Levelgraphen erhöht wird.
Als nächstes werden aus dem Levelgraphen alle Kanten entfernt, die nicht auf Pfaden zur Senke liegen, d.h. die in Sackgassen führen. Dadurch beschleunigen sich die nachfolgenden Berechnungen erheblich [87].
Für den Levelgraph wird nun der *blockierende Fluß* (engl. *blocking flow*) berechnet. Das ist ein Fluß, der sich nicht mehr entlang irgendwelcher Pfade im Graphen erhöhen läßt. Es kann aber möglich sein, den Gesamtfluß mittels Umleitungen zu erhöhen. Bis auf die abschließende Zusammenfassung wird in diesem Abschnitt ab jetzt die Berechnung des blockierenden Flusses erläutert.
Da der Levelgraph aufgrund seiner Konstruktion nur kürzeste Pfade von der Quelle zur Senke enthält, und insbesondere keine Zyklen, kann der blockierende Fluß sehr schnell berechnet werden. Dazu wird R.E. Tarjans *Wave-Algorithmus* verwendet. Er arbeitet auf einem beliebigen zyklenfreien Netzwerk, das durch die Kapazitäten $\{\hat{c}(i,j)\}$ gegeben sei, also auch auf Levelgraphen. Um die Berechnung möglichst effizient zu gestalten, hat J.L. Träff auch für die *Knoten* i Kapazitäten $p(i)$ eingeführt. Sie geben an, wieviel Fluß aufgrund von Beschränkungen durch nachfolgende Knoten und Kanten maximal durch den Knoten hindurchfließen kann:

$$p(N+1) = \infty \tag{A.2}$$
$$p(i) = \sum_j \min\{\hat{c}(i,j), p(i)\} \quad \forall i \tag{A.3}$$

Die Werte der Knotenkapazitäten werden wie folgt konstruiert: man beginnt an der Senke und betrachtet deren Vorgänger, dann deren noch nicht betrachtete Vorgänger und so weiter. Dieser Durchlauf durch den Graphen erfolgt somit in *umgekehrter topologischer Reihenfolge.* Es brauchen natürlich nicht alle Knoten j bei der Berechnung von $p(i)$ berücksichtigt zu werden, sondern nur die Nachfolger von i, d.h. aufgrund der kubischen Struktur der Graphen maximal 6 Nachfolger. Für alle anderen ist ja die Kapazität $\hat{c}(i,j) = 0$.
Für den Levelgraphen wird zunächst ein *Preflow* $\{\hat{f}(i,j)\}$ berechnet und schrittweise in einen richtigen Fluß umgewandelt. Dieser Fluß ist dann der gewünschte blockierende Fluß. Ein Preflow unterscheidet sich von einem Fluß darin, daß die Flußerhaltung an den inneren Knoten nicht gelten muß. Der *Exzeß* $e(i)$ gibt dann für jeden Knoten an, wieviel Fluß an diesem Knoten erzeugt oder vernichtet wird:

$$e(i) = \sum_j \hat{f}(i,j) \tag{A.4}$$

Knoten mit $e(i) > 0$ heißen *überfließend*. Ein Fluß ist also ein Preflow ohne Exzeß. Der Preflow wird so initialisiert, daß alle Kanten, die aus der Quelle heraus führen, gesättigt werden, d.h. alle Nachfolger der Quelle fließen über. Für jeden Knoten wird erfaßt, ob er *blockiert* ist oder nicht. Anfänglich sind alle Knoten außer der Quelle nicht blockiert. Ein Knoten wird blockiert, falls es nicht mehr möglich ist, noch mehr Fluß aus ihm heraus Richtung Senke zu leiten (s.u.).
Der eigentliche Wave-Algorithmus besteht nun abwechselnd aus *Vorwärts-* und *Rückwärtswellen*. Bei einer Vorwärtswelle wird versucht, den Fluß weiter Richtung Senke zu leiten. Während einer Rückwärtswelle wird der Fluß, der irgendwo nicht weiter kommt, zurückgeleitet, damit er woanders entlang geleitet werden kann. Diese beiden Schritte laufen so lange ab, bis überall der Exzeß verschwunden ist, d.h. bis der Preflow in einen Fluß umgewandelt wurde:

- **Vorwärtswelle**:

  Es werden die Knoten i in topologischer Reihenfolge durchlaufen: Es werden alle Kanten (i, j) bearbeitet, die nicht gesättigt sind und bei denen Knoten j noch nicht blockiert ist: der Fluß wird entlang der Kante um $\min\{\hat{c}(i,j) - \hat{f}(i,j), p(j) - e(j), e(i)\}$ erhöht. Somit kann der Fluß nicht um mehr erhöht werden, als noch zusätzlich durch die Kante paßt, als der Zielknoten j noch aufnehmen kann, und als am Ausgangsknoten i als Exzeß zur Verfügung steht. Entsprechend wird $e(i)$ erniedrigt und $e(j)$ erhöht.

  Falls der Knoten i nicht balanciert werden kann, d.h. falls nicht aller Überfluß abgeleitet werden kann, wird i blockiert. Somit wird in späteren Durchgängen nicht weiter versucht, den Fluß durch i zu erhöhen, d.h. es werden andere Pfade ausprobiert.

- **Rückwärtswelle**:

  Es werden alle Knoten j in umgekehrter topologischer Reihenfolge durchlaufen: Für Kanten (i, j), die in j einlaufen, wird der Fluß um $\min\{\hat{f}(i,j), e(j)\}$ verringert, solange der Exzeß in j noch größer als Null ist. Entsprechend erhöht sich der Exzeß in den Vorgängerknoten.

Nach jeder Vorwärts- und Rückwärtswelle werden die Knotenkapazitäten $p(i)$ dynamisch angepaßt, so daß sie nur noch nicht-genutzte Kapazitäten beschreiben:

$$p(i) = \sum_j \min\{\hat{c}(i,j) - \hat{f}(i,j), p(j)\} \tag{A.5}$$

Dinics Algorithmus zur Berechnung des maximalen Flusses besteht nun darin, solange die beiden Schritte "Konstruktion des Levelgraphen" und "Berechnung eines blockierenden Flusses" durchzuführen, bis die Senke nicht mehr im Levelgraphen enthalten ist. Dann ist der maximale Fluß erreicht, weil dann kein zusätzlicher Fluß bis zur Senke geleitet werden kann. Abschließend wird noch eine Übersicht über das Verfahren gegeben:

Algorithmus Dinic(N, {c(i,j)})
begin
  Initialisiere Fluß $f(i,j) := 0 \quad \forall i,j$
  Konstruiere Inkrementgraph IG
  Konstruiere Levelgraph $LG(IG)$
  while ($N+1 \in LG(IG)$)
  begin
    Initialisiere Preflow $\{\hat{f}(i,j)\}$
    Initialisiere Knotenkapazitäten $p(i)$
    while ($\exists$ unbalancierte Knoten $e(i) > 0$)
    begin
      Durchlaufe $LG(IG)$ in topologischer Reihenfolge:
        Erhöhe Preflow
      Durchlaufe $LG(IG)$ in umgekehrt topologischer Reihenfolge:
        Erniedrige Preflow
      Aktualisiere Knotenkapazitäten $p(i)$
    end
    Erhöhe Fluß: $f(i,j) := f(i,j) + \hat{f}(i,j) \quad \forall i,j$
    Konstruiere Inkrementgraph IG
    Konstruiere Levelgraph $LG(IG)$
  end
  return $\{f(i,j)\}$
end

A.2. Berechnung aller minimalen Schnitte

Ausgehend von einem Netzwerk und seinem Fluß kann man alle minimalen Schnitte mittels einer Relation darstellen [74]. Hier wird nur das Verfahren vorgestellt. Die Beweise finden sich in der angegebenen Literatur.
Zunächst wird zu dem Netzwerk und dem maximalen Fluß ein Graph $G^{'} = (V, R^{'})$ definiert. Die Knoten des Graphen werden vom Netzwerk übernommen. Für jede nicht gesättigte Kante (i,j) gibt es ein Element (i,j) im neuen Graphen. Weiterhin wird für jede Kante (i,j), durch die ein Fluß existiert, ein Element (j,i) in $R^{'}$ angelegt:

$$(i,j) \in R^{'} \quad \Longleftrightarrow \quad f(i,j) < c(i,j) \quad \vee \quad f(j,i) > 0 \tag{A.6}$$

Für den so konstruierten Graphen wird dann die Menge der *starken Zusammenhangskomponenten* V_i berechnet. Jede starke Zusammenhangskomponente ist eine möglichst große Menge von Knoten, die in $G^{'}$ alle untereinander erreichbar sind. Die Mengen V_i lassen sie sich leicht mittels Standardverfahren berechnen [1]. Physikalisch entsprechen sie Clustern, deren Spins in allen Grundzuständen dieselbe

relative Orientierung zueinander haben, d.h. alle zugehörigen Knoten befinden sich immer auf derselben Seite eines minimalen Schnitts.
Auf der Menge $\overline{V}$ der V_i wird nun eine (reduzierte) Relation $\overline{R}$ definiert, indem die Kanten aus R' übernommen werden, die verschiedene Zusammenhangskomponenten verbinden:

$$(V_k, V_l) \in \overline{R} \quad \Longleftrightarrow \quad \exists i \in V_k, \exists j \in V_l : (i,j) \in R' \tag{A.7}$$

Anschaulich bedeutet $(V_k, V_l) \in \overline{R}$: Falls sich die Knoten in V_k links vom minimalen Schnitt befinden (d.h. in S), so muß das auch für die Knoten in V_l gelten. Mathematisch gesprochen ist S eine abgeschlossene Hülle (engl. *closure*) für $\overline{R}$, welche den Quellknoten in einem Element enthält.
Abschließend kann der Graph $G = (\overline{V}, \overline{R})$ noch etwas vereinfacht werden: Sei $S \in \overline{V}$ die Komponente, welche den Quellknoten 0 enthält, und sei $T \in \overline{V}$ die Komponente mit $N+1 \in T$. Da sich S immer links vom Schnitt befindet, können alle Komponenten, die Nachfolger von S in $\overline{R}$ sind, mit S zusammengefaßt werden, denn sie müssen ja auch immer links vom Schnitt sein. Analog können alle Vorgänger von T mit T zusammengefaßt werden.
Die folgende Darstellung faßt die Transformationsschritte zusammen, die aus einem gegebenen Netzwerk und seinem maximalen Fluß eine Menge von Komponenten und eine Relation $\overline{R}$ konstruieren, die alle minimalen Schnitte im Netzwerk repräsentieren:

Algorithmus alle_minimalen_Schnitte(N, {c(i,j)}, {f(i,j)})
begin
  Berechne Relation R' auf der Menge aller Knoten.
  Berechne die starken Zusammenhangskomponenten V_i zu R'.
  Konstruiere die reduzierte Relation $\overline{R}$ auf $\overline{V} = \{V_i\}$.
  Verkleinere $\overline{V}$, indem Nachfolger von S mit S und
    Vorgänger von T mit T verschmolzen werden.
end

A.3. Abschätzung des Entartungsgrades

Gegeben sei eine Menge starker Zusammenhangskomponenten $\overline{V}$ und eine Relation $\overline{R}$ (siehe oben). Man kann eine obere Grenze für die Anzahl der minimalen Schnitte erhalten, die durch $(\overline{V}, \overline{R})$ repräsentiert werden, indem jeder Komponente V_k eine Label $L(k)$ zugewiesen wird [82]. Das Label eines minimalen Schnitts ist gleich der Summe der Label aller Komponenten, die links von Schnitt, d.h. in Q liegen. Die Label sind so zu wählen, daß sich für alle minimalen Schnitte verschiedene Label ergeben. Eine obere Grenze für die Anzahl der minimalen Schnitte, d.h. die Anzahl der Grundzustände, ergibt sich dann aus der Summe aller Label plus 1. Die Komponenten S und T, welche immer links bzw. immer rechts vom minimalen Schnitt liegen, werden dabei nicht berücksichtigt.

Die Label werden in einem Schleifendurchlauf über alle Komponenten V_k berechnet. Es werden dabei folgende Variablen verwendet:

- $a(k) =$ Summe der Label von bereits behandelten Komponenten, die Nachfolger der Komponente V_k in $\overline{R}$ sind.
- $b(k) =$ Summe der Label von bereits behandelten Komponenten, die Vorgänger der Komponente V_k in $\overline{R}$ sind.
- $d(k) =$ Summe der Label aller bereits behandelten Komponenten.

Folgendes Verfahren berechnet die Label für alle Komponenten. Die Reihenfolge, in der die Komponenten bearbeitet werden, ist dabei egal.

Algorithmus Label($N, \overline{V}, \overline{R}$)
begin
    Setze a(k):=b(k):=d(k):=0 für alle k
    For $j = 1$ **to** n
        Setze $L(j) := d(j) - a(j) - b(j) + 1$
        Für alle $k > j$ mit V_k ist Vorgänger von V_j in $\overline{R}$
            Setze $a(k) := a(k) + L(j)$
        Für alle $k > j$ mit V_k Nachfolger von V_j in $\overline{R}$
            Setze $b(k) := b(k) + L(j)$
        Setze d(j+1):=d(j)+L(j)
end

Erklärung: Es ist offensichtlich, daß die Größen $a(k), b(k)$ und $d(k)$ gemäß ihrer Definition berechnet werden. Man kann sich leicht anhand zweier Extrembeispiele klar machen, daß die Berechnung der Label $L(k)$ das gewünschte Ergebnis für den Entartungsgrad liefert. Der genau Beweis findet sich in [82].
Zunächst betrachten wir ein System, das keinerlei Elemente in $\overline{R}$ hat ("*Parallelschaltung*"), d.h. jede Komponente (außer S und T) kann beliebig entweder links oder rechts vom Schnitt sein. Für n Komponenten hat man somit 2^n verschiedene Grundzustände. Da in der Relation $\overline{R}$ keine Elemente enthalten sind, gibt es keine Vorgänger oder Nachfolger. Somit sind alle $a(k) = b(k) = 0$. Es ergeben sich:

1. $L(1) = 1$, $d(2) = 1$
2. $L(2) = 1 + 1 = 2$, $d(3) = 1 + 2 = 3$
3. $L(3) = 3 + 1 = 4$, $d(4) = 3 + 4 = 7$
4. $L(4) = 7 + 1 = 8$, $d(5) = 7 + 8 = 15$, ...

Es ist also $L(k) = 2^{k-1}$. Jeder mögliche minimale Schnitt erhält also gerade als Label die Binärdarstellung der Komponenten, die links vom Schnitt sind, und ist damit eindeutig. Die Summe über alle Label ergibt gerade $\sum_{k=1}^{n} 2^{k-1} = 2^n - 1$, also um Eins weniger als die Anzahl der minimalen Schnitte.
Für das andere Extrembeispiel wird eine Menge von Komponenten betrachtet, die in $\overline{R}$ zu einer Kette verbunden sind, d.h. $(i, i+1) \in \overline{R}$ für $i = 1, \ldots, n-1$ ("*Reihenschaltung*"). Es sind damit nur folgende minimalen Schnitte möglich: "Alle Komponenten $k \geq 1$ links vom Schnitt", "alle Komponenten $k \geq 2$ links vom Schnitt", "alle Komponenten $k \geq 3$ links vom Schnitt", usw. bis "Alle Komponenten rechts vom Schnitt". Somit gibt es insgesamt $n + 1$ verschiedene Möglichkeiten. Da alle Komponenten immer zu einer Kette verbunden sind, d.h. jede Komponente entweder Vorgänger oder Nachfolger jeder anderen Komponente ist, gilt immer $d(k) = a(k) + b(k)$. Damit sind alle Labelwerte gleich: $L(k) = d(k) - a(k) - b(k) + 1 = 1$ für alle k. Somit ist die Summe aller Labelwerte gleich n, wiederum um Eins unter der Anzahl der verschiedenen Schnittmöglichkeiten.
Wenn ein Graph also nur aus Ketten und unverbundenen Teilen besteht (auch hierarchisch geordnet) [1], kann das Verfahren den Entartungsgrad exakt berechnen. Alle im Rahmen dieser Arbeit bisher genauer analysierten Grundzustände waren von dieser Art.
Falls Überkreuzungen in $\overline{R}$ auftreten, ist die Summe aller Label nur eine obere Schranke, d.h. es gibt Zahlen in dem Bereich, die nicht dem Label eines minimalen Schnitts entsprechen. Diese obere Schranke ist laut [82] auch im allgemeinen Fall immer nahe am tatsächlichen Wert.

[1] Anders ausgedrückt: der Graph ist eine System von "Parallel-" und "Reihenschaltungen", mathematisch gesprochen, ist der durch $\overline{R}$ gegebene Graph planar

Danksagung

In diesem Abschnitt möchte ich den wichtigsten Personen und Institutionen danken, die zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.

Herrn Prof. Dr. Heinz Horner danke ich herzlich dafür, daß er die Betreuung der Arbeit übernommen hat. Ich konnte viele fruchtbare Diskussionen mit ihm führen und habe so manchen Ratschlag erhalten. Herrn Prof. Dr. Gerhard Reinelt danke ich sehr für die Zweitbetreuung der Arbeit, hilfreiche Gespräche und die Vermittlung von Kontakten nach Köln. Mein Dank gilt ebenfalls Herrn Prof. Dr. Dieter W. Heermann, in dessen Arbeitsgruppe ich über die Simulation von Polymeren forschen konnte und wo ich sehr viel gelernt habe.

Weiterhin möchte ich mich bei den Mitgliedern beider Arbeitsgruppen für die sehr gute Arbeitsatmosphäre bedanken, besonders bei Ting Wang und Dr. Klaus Zimmer für das gute Verhältnis in unserem Büro, bei Priv.-Doz. Dr. Reimer Kühn und Dr. Harald Kinzelbach für hilfreiche Diskussionen, sowie bei Dr. Andreas Linke und Gunther Schöppe für vielfältige Unterstützung.

Für die kritische und genaue Durchsicht der Arbeit sowie viele gute Hinweise bin ich Uta Horstmann und Dr. Andreas Linke äußerst dankbar.

Für interessante Anregungen und Diskussionen gebührt mein Dank Prof. Dr. Klaus D. Usadel, Dr. Uli Nowak und Dr. Jörg Esser von der Universität Duisburg, Priv.-Doz. Dr. Heiko Rieger vom HLRZ Jülich, Prof. Dr. A. Peter Young von der Universität Santa Cruz und Dr. Jürgen Bendisch von der GMD Bonn.

Prof. Dr. Michael Jünger und Martin Diehl von der Universität Köln danke ich dafür, daß sie mir freundlicherweise einige exakte Grundzustände von Spingläsern zur Verfügung stellten .

Ich danke auch dem Graduiertenkolleg “Modellierung und Wissenschaftliches Rechnen in Mathematik und Naturwissenschaften” am Interdisziplinären Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen in Heidelberg, welches mich ideell und materiell unterstützt hat. Den Universitäten Paderborn und Duisburg danke ich dafür, daß sie mich im erheblichen Umfang mit Rechenzeit versorgt haben, ohne die die Arbeit nicht hätte gelingen können.

Liste der wichtigsten Abkürzungen

AF	antiferromagnetisch
CEA	Cluster-Exakte Approximation
DAFF	Diluted Antiferromagnet in a Field
DS	Droplet-Scaling
EA	Edwards-Anderson (-Modell)
FSS	Finite-Size-Scaling
MC	Monte-Carlo (-Simulation)
MF	Mean-Field (-Näherung)
NP	Nichtdeterministisch polynomial
RFIM	Random Field Ising Magnet
RKKY	Ruderman, Kittel, Kasuya und Yosida
RSB	Replika-Symmetrie-Brechung
SG	Spinglas
SK	Sherrington-Kirkpatrick (-Modell)
SSF	Single-Spin-Flip

Liste der wichtigsten Symbole

$[\,\cdot\,]_{av}$	Mittelung über die Unordnung
$\langle\,\cdot\,\rangle$	Mittelung über alle Zustände
0	Nummer des Quellknotens
a	antiferromagnetische Magnetisierung
α	Beschreibt den Einfluß der Grundzustandsrelation auf Entartungsgrad.
B, B_i	magnetisches Feld (am Gitterplatz i)
B_+, B_-	magnetisches Feld ein wenig größer/kleiner als B
B^j	Sprungfeld
$c(i,j)$	Kapazität der Kante von i nach j
C	Cluster
δ	$\delta = q_2 - q_3$ Differenz zweier Überlapps
Δ	Varianz des Zufallsfeldes
Δ^j	Sprungfeld bei RFIM
e, e^0	Energie, Grundzustandsenergie
$e(i)$	Exzeß-Fluß im Knoten i
E_C	Oberflächen- und Feldenergie eines Clusters
ϵ_i	=0 falls Gitterplatz i unbesetzt ist, =1 sonst
$f(i,j)$	Fluß von Knoten i zu Knoten j
$G = G(V,E)$	Graph mit Knotenmenge V und Kantenmenge E
H	Hamiltonfunktion
J, J_{ij}	Wechselwirkungskonstante (zwischen Spin i und j)
k	Anzahl der Durchläufe bei der genetischen CEA pro Realisierung
L	Kantenlänge des Gitters
m, m_C	Magnetisierung (eines Clusters)

$m^{\uparrow}, m^{\downarrow}$ Anzahl der Spins mit Orientierung $+1, -1$

M_i Größe der Population

n Anzahl der inneren Cluster

N Anzahl der inneren Knoten/Spins

$N+1$ Nummer des Senkenknotens

n_{min} Anzahl der CEA-Schritte pro Nachkommen

N^s, N^s_C Anzahl der ungebrochenen (satisfied) Bonds (an der Oberfläche des Clusters C)

N^u, N^u_C Anzahl der gebrochenen (unsatisfied) Bonds (an der Oberfläche des Clusters C)

ν Anzahl der Nachkommen je Individuum

p Wahrscheinlichkeit für einen besetzen Gitterplatz

$p(i)$ Kapazität eines Knotens i

p_m Mutationsrate

$P(q)$ Verteilung der Überlapps gemittelt über alle Realisierungen der Unordnung

$P_J(q)$ Verteilung der Überlapps einer Realisierung der Unordnung (SG)

$q^{\alpha\beta}$ Überlapp zwischen den Zuständen α und β

$Q, \overline{Q}$ Menge aller Knoten links/rechts vom Schnitt in einem Graphen

$s(C)$ Orientierung des Clusters C

Σ_C Summe der Zufallsfelder im Cluster C

σ_i Spin am Gitterplatz i.

$t(i), t_i$ Skalierungsfaktor am Gitterplatz i, erzeugt ein rein ferromagnetisches System beim DAFF/Spinglas.

Literaturverzeichnis

[1] A. Aho, J. Hopcroft, J. Ullman, The Design and Analysis of Computer Algorithms, Addison-Wesley, 1997

[2] J.C. Angles d'Auriac und N. Sourlas, Europhys. Lett. **39**, 473 (1997)

[3] F. Barahona, J. Phys. A **15**, 3241 (1982)

[4] F. Barahona, R. Maynard, R. Rammal und J.P. Uhry, J. Phys. A **15**, 673 (1982)

[5] D.P. Belanger, in: Spin Glasses and Random Fields, Hrsg. A.P. Young, World Scientific, 1998

[6] B. A. Berg und T. Celik , Phys. Rev. Lett. **69**, 2292 (1992)

[7] B. A. Berg, T. Celik und U.H.E. Hansmann, Europhys. Lett. **22**, 63 (1993)

[8] B.A. Berg, U.E. Hansmann und T.Celik, Phys. Rev. B **50**, 16444 (1994)

[9] R.N. Bhatt und A.P. Young, Phys. Rev. Lett. **54**, 924 (1985)

[10] R.N. Bhatt und A.P. Young, J. Magn. Magn. Mater. **54-57**, 191 (1986)

[11] R.N. Bhatt und A.P. Young, Phys. Rev. B **37**, 5606 (1988)

[12] K. Binder, Z. Phys. B **43**, 119 (1981)

[13] K. Binder und A.P. Young, Rev. Mod. Phys. **58**, 801–976 (1986)

[14] A. Bovier und J. Fröhlich, J. Stat. Phys. **44**, 347 (1986)

[15] A.J. Bray und M.A. Moore, J. Phys. C **18**, L699 (1985)

[16] A.J. Bray und M.A. Moore, J. Phys. C **18** L927 (1985)

[17] J. Bricmont und A. Kupiainen, Phys. Rev. Lett. **59**, 1829 (1987)

[18] S. Caracciolo, G. Parisi, S. Patarnello und N. Sourlas, J. de Phys. **51**, 1877 (1990)

[19] J.A. Cambier und M. Nauenberg, Phys. Rev. B **34**, 7998 (1986)

[20] J.L. Cardy, Phys. Rev. B **29**, 505 (1984)

[21] J.D. Claiborne, Mathematical Preliminaries for Computer Networking, Wiley, 1990

[22] J.R.L. de Almeida und D.J. Thouless, J. Phys. A **11**, 983 (1978)

[23] C. De Simone, M. Diehl, M. Jünger, P. Mutzel, G. Reinelt und G. Rinaldi, J. Stat. Phys. **80**, 487 (1995)

[24] C. De Simone, M. Diehl, M. Jünger, P. Mutzel, G. Reinelt und G. Rinaldi, J. Stat. Phys. **84**, 1363 (1996)

[25] M. Diehl, private Mitteilung (1997)

[26] E.A. Dinic, Soviet Math. Dokl. **11**, 1277-1280 (1970)

[27] S.F. Edwards und P.W. Anderson, J. de Phys. **5**, 965 (1975)

[28] J. Esser, U. Nowak und K.D. Usadel, Phys. Rev. B **55**, 5866 (1997)

[29] D.S. Fisher, Phys. Rev. Lett. **56**, 416 (1986)

[30] D.S. Fisher und D.A. Huse, Phys. Rev. Lett. **56**, 1601 (1986)

[31] D.S. Fisher und D.A. Huse, Phys. Rev. B **38**, 386 (1988)

[32] K.H. Fisher und J.A. Hertz, Spin Glasses, Cambridge University Press, 1991

[33] S. Fishman und A. Aharony, J. Phys. C **12**, L729 (1979)

[34] P.L. Hammer (Ivanescu), Operations Research **13**, 388 (1965)

[35] U.H.E. Hansmann und B.A. Berg, Int. J. Mod. Phys. C **5**, 263 (1994)

[36] A.K. Hartmann, Exakte Berechnung von Grundzuständen verdünnter Antiferromagnete, Diplomarbeit an der Universität Duisburg im Fachbereich Physik-Technologie, 1993

[37] A.K. Hartmann und K.D. Usadel, Physica A **214**, 141 (1995)

[38] A.K. Hartmann, Physica A **224**, 480 (1996)

[39] A.K. Hartmann, Europhys. Lett. **40**, 429 (1997)

[40] A.K. Hartmann, Physica A **248**, 1 (1998)

[41] A.K. Hartmann und D.W. Heermann, erscheint bei J. Chem. Phys. (1998)

[42] J. Hertz, A. Krogh und R.G. Palmer, Introduction to the Theorie of Neural Computing, Addison-Wesley, 1991

[43] H. Horner und R. Kühn, Neural Networks, preprint cond-mat/9705270

[44] J.Z. Imbrie, Phys. Rev. Lett. **53**, 1747 (1984)

[45] N. Kawashima und N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. **62**, 435 (1993)

[46] N. Kawashima und A.P. Young, Phys. Rev. B **53**, R484 (1996)

[47] N. Kawashima und H. Rieger, cond-mat/961216

[48] S. Kirkpatrick, Phys. Rev. B **16**, 4630 (1977)

[49] T. Klotz und S. Kobe, J. Phys. A **27**, L95 (1994)

[50] T. Klotz, in: Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics, Hrsg. D.P. Landau, K.K. Mon und H.-B. Schüttler, Springer, 1997

[51] W. Knödel, Graphentheoretische Methoden und ihre Anwendung, Springer, 1969

[52] E. Marinari, G. Parisi, J.J. Ruiz-Lorenzo und F. Ritort, Phys. Rev. Lett. **76**, 843 (1996)

[53] E. Marinari, G. Parisi und J.J. Ruiz-Lorenzo, in: Spin Glasses and Random Fields, Hrsg. A.P. Young, World Scientific, 1998

[54] W.L. McMillan, J. Phys. C **17**, 3179 (1984).

[55] M. Mezard, G. Parisi und M.A. Virasoro, Spin Glass Theory and Beyond, World Scientific, 1987

[56] Z. Michalewicz, Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs, Springer, 1992

[57] I. Morgenstern und K. Binder, Z. Phys. B **39**, 227 (1980)

[58] J.A. Mydosh, Spin glasses: an experimental introduction, Taylor & Francis, 1993

[59] T. Nattermann, in: Spin Glasses and Random Fields, Hrsg. A.P. Young, World Scientific, 1998

[60] U. Nowak und K.D. Usadel, Phys.Rev. B **44**, 44 (1991)

[61] U. Nowak und K.D. Usadel, Phys.Rev. B **46**, 8329 (1992)

[62] C.M. Newman und D.L. Stein, Phys. Rev. Lett. **76**, 515 (1996)

[63] A.T. Ogielski und I. Morgenstern, Phys. Rev. Lett **54**, 928 (1985)

[64] A.T. Ogielski und I. Morgenstern, Phys. Rev. B **32**, 7384 (1985)

[65] A.T. Ogielski, Phys. Rev. Lett **57**, 1251 (1986)

[66] K.F. Pál, Biol. Cybern. **73**, 335 (1995)

[67] K.F. Pál, Physica A **223**, 283 (1996)

[68] G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **43**, 1754 (1979)

[69] G. Parisi, J. Phys. A **13**, 1101 (1980)

[70] G. Parisi, J. Phys. A **13**, 1887 (1980)

[71] G. Parisi, J. Phys. A **13**, L115 (1980)

[72] G. Parisi, Phys. Rev. Lett. **50**, 1946 (1983)

[73] J.-C. Picard und H.D. Ratliff, Networks **5**, 357 (1975)

[74] J.-C. Picard und M. Queyranne, Math. Prog. Study **13**, 8 (1980)

[75] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky und W.T. Vetterlin, Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, 1988

[76] R. Rammal, G. Toulouse und M.A. Virasoro, Rev. Mod. Phys. **58**, 765 (1986)

[77] J.D. Reger, R.N. Bhatt und A.P. Young, Phys. Rev. Lett. **64**, 1859 (1990)

[78] H. Rieger und A.P. Young, J. Phys. A **26**, 5279 (1993)

[79] H. Rieger, in: Annual Reviews of Computational Physics **II**, Hrsg. D. Stauffer, 295-341, World Scientific, 1995

[80] H. Rieger, in: Advances in Computer Simulation, Hrsg. J. Kertesz and I. Kondor, Reihe Lecture Notes in Physics, Springer, 1997

[81] H. Ritter, T. Martinez und K. Schulten, Neuronale Netze, Addison-Wesley, 1991

[82] L. Schrage und K.R. Baker, Oper.Res. **26**, 444 (1978)

[83] D. Sherrington und S. Kirkpatrick, Phys. Rev. Lett. **35**, 1792-1796 (1975)

[84] M.N.S. Swamy und K. Thulasiraman, Graphs, Networks and Algorithms, Wiley, 1991

[85] M.R. Swift, A.J. Bray, A. Maritan, M. Cieplak und J.R. Banavor, preprint con-mat/9705289

[86] R.E. Tarjan, Data Structures and Network Algorithms, Society for industrial and applied mathematics, 1983

[87] J.L. Träff, Eur. J. Oper. Res. **89**, 564 (1996)

[88] K.D. Usadel und U. Nowak, J. Magn. Magn. Mater. **104-107**, 179 (1992)

[89] J. Villain, J. de Phys. **46**, 1843 (1985)

[90] J.M. Yeomans, Statistical Mechanics of Phase Transitions, Clarendon Press, 1992

[91] A.P. Young, Phase Transitions in Random Systems, Vorlesung Sommer Schule "Monte Carlo and Molecular Dynamics of Condensed Matter Systems", Como, Italien, July 1995, Hrsg. K. Binder und G. Ciccotti, Italienische Phyikalische Gesellschaft, 1996