1 Сферические функции

Нормированные сферические функции определены следующим образом:

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = \begin{cases} (-1)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} P_{l,m}(\cos(\theta)) \exp(im\phi), \ m \ge 0, \\ (-1)^m Y_{l,-m}^*(\theta,\phi), \ m < 0, \end{cases}$$
(1)

 $l \geq 0, \ m = -l, -l+1, ..., l-1, l$ и $P_{l,m}(x)$ — присоединенные функции Лежандра, определяемые соотношением:

$$P_{l,m}(x) = (1 - x^2)^{m/2} P_l^{(m)}, m = 0, ..., l,$$
(2)

где P_l — полиномы Лежандра, определяемые рекуррентно:

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x).$$
 (3)

2 Аппроксимация сферическими функциями

Метод основан на следующих соотношениях [1]:

$$\exp(\beta x) = (\pi/(2\beta))^{1/2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) I_{l+1/2}(\beta) P_l(x), \tag{4}$$

где $I_{\nu}(x)$ — функция Инфельда, и

$$P_l(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}) = 4\pi (2l+1)^{-1} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}^*(\mathbf{x}) Y_{l,m}(\mathbf{y}).$$

$$(5)$$

В итоге получаем

$$\exp(\beta \mathbf{m}_1 \mathbf{m}_2) = \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{\beta}} \sum_{l=0}^{\infty} I_{l+1/2} \sum_{m=-l}^{l} Y_{l,m}^*(\mathbf{m}_1) Y_{l,m}(\mathbf{m}_2).$$
 (6)

3 Пример использования для замкнутой цепочки

Рассмотрим замкнутую цепочку, задаваемую функцией распределения:

$$f = \frac{1}{Z} \exp \left[\lambda_{1,N}(\mathbf{m}_1 \mathbf{m}_N) + p_1(\mathbf{m}_1 \mathbf{m}_0) + \sum_{i=2}^{N} \left(\lambda_{i,i-1}(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_{i-1}) + p_i(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_0) \right) \right]. \tag{7}$$

Тогда выражение для Z примет вид:

$$\frac{Z}{(4\pi)^{N}} = \int_{S^{N}} \frac{d\mathbf{m}_{1}...d\mathbf{m}_{N}}{(4\pi)^{N}} \exp\left[\lambda_{1,N}(\mathbf{m}_{1}\mathbf{m}_{N}) + p_{1}(\mathbf{m}_{1}\mathbf{m}_{0}) + \sum_{i=2}^{N} (\lambda_{i,i-1}(\mathbf{m}_{i}\mathbf{m}_{i-1}) + p_{i}(\mathbf{m}_{i}\mathbf{m}_{0}))\right] = \\
= \sum_{l_{1},m_{1}} \sum_{l_{2},m_{2}} ... \sum_{l_{N},m_{N}} \int_{S^{N}} d\mathbf{m}_{1}...d\mathbf{m}_{N} \kappa_{1} I_{l_{1}+1/2}(\lambda_{1,2}) \exp(p_{1}\mathbf{m}_{1}\mathbf{m}_{0}) Y_{l_{1},m_{1}}^{*}(\mathbf{m}_{1}) Y_{l_{1},m_{1}}(\mathbf{m}_{2}) \times \\
\times \kappa_{2} I_{l_{2}+1/2}(\lambda_{2,3}) \exp(p_{2}\mathbf{m}_{2}\mathbf{m}_{0}) Y_{l_{2},m_{2}}^{*}(\mathbf{m}_{2}) Y_{l_{2},m_{2}}(\mathbf{m}_{3}) \times ... \\
\times \kappa_{N} I_{l_{N}+1/2}(\lambda_{1,N}) \exp(p_{N}\mathbf{m}_{N}\mathbf{m}_{0}) Y_{l_{N},m_{N}}^{*}(\mathbf{m}_{N}) Y_{l_{N},m_{N}}(\mathbf{m}_{1}), \quad (8)$$

где
$$\kappa_i = \sqrt{\frac{\pi}{2\lambda_{i,i+1}}}.$$

Введем матрицы с мультиндексами $\sigma_i = (l_i, m_i)$:

$$M_{\sigma_{i-1},\sigma_i}^{(i)} = \kappa_i I_{l_i+1/2}(\lambda_{i-1,i}) \int_S d\mathbf{m}_i \exp(p_i \mathbf{m}_i \mathbf{m}_0) Y_{l_{i-1},m_{i-1}}(\mathbf{m}_i) Y_{l_i,m_i}^*(\mathbf{m}_i).$$
(9)

Тогда Z перепишется в виде:

$$\frac{Z}{(4\pi)^N} = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} M_{\sigma_N,\sigma_1}^{(1)} M_{\sigma_1,\sigma_2}^{(2)} \dots M_{\sigma_{N-1},\sigma_N}^{(N)} = \operatorname{tr}(M^{(1)} M^{(2)} \dots M^{(N)}). \tag{10}$$

4 Применение метода для расчета моментов многочастичных функций распределения

Рассмотрим функции распределения вида:

$$f^{(N)} = \frac{1}{Z^{(N)}} \exp\left[\sum_{i < j}^{N} \lambda_{i,j}(\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j) + \sum_{i=1}^{N} (\mathbf{m}_i \mathbf{p}_i)\right].$$
(11)

Задача состоит в расчете моментов ФП вида:

$$T_{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_L} = \langle (\mathbf{m}_{i_1}^{\alpha_1})^{s_1} (\mathbf{m}_{i_2}^{\alpha_2})^{s_2} ... (\mathbf{m}_{i_L}^{\alpha_L})^{s_L} \rangle, \tag{12}$$

где среди индексов $i_1,...,i_L$ каждый индекс может входить любое число раз.

Далее необходимо задать направления стрелок в тензорной сети (произвольным образом), указывающие какой сомножитель (какая частица) имеет комплексное сопряжение, а именно: если стрелка идет из вершины, то соответствующий сомножитель не сопрягается комплексно и наоборот. Тогда тензорная сеть будет состоять из тензоров вида:

$$M_{\sigma_{1},\sigma_{2},\dots,\sigma_{k};\alpha_{1},\dots\alpha_{p}}^{(q)} = \int_{S} d\mathbf{m}_{q} \exp(\mathbf{p}_{q} \cdot \mathbf{m}_{q}) \prod_{i=1}^{p} (m_{q}^{\alpha_{i}})^{s_{i}} \times$$

$$\times \prod_{i \in \sigma_{in}} Y_{l_{i},m_{i}}^{*}(\mathbf{m}_{q}) \prod_{i \in \sigma_{out}} Y_{l_{i},m_{i}}(\mathbf{m}_{q}) I_{l_{i}+1/2}(\lambda_{q,\tau_{i}^{q}}) \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{\lambda_{q,\tau_{i}^{q}}}}, \quad (13)$$

где σ_i — мультииндекс, соответсвующий индексам сферической функции, σ_{in} — множество номеров индексов, входящих в вершину q, а σ_{out} — выходящих из нее, при этом $\sigma_{in} \cup \sigma_{out} = \{1,2,...,k\}$ и $\sigma_{in} \cap \sigma_{out} = \varnothing$, τ_i^q — номер тензора (частицы), который имеет связь с тензором (частицей) с номером q.

Тензорная сеть представляет собой свертку тензоров вида (13) по всем индексам l_i , оставляя индексы α_i .

5 Оценка погрешности трехчастичной ункции распределения

Рассмотрим погрешнесть вычисления тензора:

$$T_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3} = \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3=0}^{\infty} M_{\sigma_3\sigma_1\alpha_1}^{(1)} M_{\sigma_1\sigma_2\alpha_2}^{(2)} M_{\sigma_2\sigma_3\alpha_3}^{(3)}.$$
 (14)

На практике вычисляется:

$$\tilde{T}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3} = \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3=0}^{n-1} \tilde{M}_{\sigma_3\sigma_1\alpha_1}^{(1)} \tilde{M}_{\sigma_1\sigma_2\alpha_2}^{(2)} \tilde{M}_{\sigma_2\sigma_3\alpha_3}^{(3)}, \tag{15}$$

где $\tilde{M}^{(i)}$ вычисляется численным интегрированием.

Тогда погрешность может быть оценена как:

$$\Delta = \left| T_{\alpha_{1},\alpha_{2},\alpha_{3}} - \tilde{T}_{\alpha_{1},\alpha_{2},\alpha_{3}} \right| \leq \underbrace{\left| \sum_{\sigma_{1},\sigma_{2},\sigma_{3}=n}^{\infty} \tilde{M}_{\sigma_{3}\sigma_{1}\alpha_{1}}^{(1)} \tilde{M}_{\sigma_{1}\sigma_{2}\alpha_{2}}^{(2)} \tilde{M}_{\sigma_{2}\sigma_{3}\alpha_{3}}^{(3)} \right|}_{\Delta_{1}} + \underbrace{\left| \sum_{\sigma_{1},\sigma_{2},\sigma_{3}=0}^{\infty} \tilde{M}_{\sigma_{3}\sigma_{1}\alpha_{1}}^{(1)} \tilde{M}_{\sigma_{1}\sigma_{2}\alpha_{2}}^{(2)} \tilde{M}_{\sigma_{2}\sigma_{3}\alpha_{3}}^{(3)} - \sum_{\sigma_{1},\sigma_{2},\sigma_{3}=0}^{\infty} M_{\sigma_{3}\sigma_{1}\alpha_{1}}^{(1)} M_{\sigma_{1}\sigma_{2}\alpha_{2}}^{(2)} M_{\sigma_{2}\sigma_{3}\alpha_{3}}^{(3)} \right|}_{\Delta_{2}}, (16)$$

что было получено прибалением и вычитанием выражения (15) с пределами суммирования от n до ∞ . Если вычислять тензоры численно с высокой точностью (одномерные интегралы по сфере), то основной вклад в погрешность определяется Δ_1 .

Рассмортрим первый вклад:

$$\Delta_{1} \leq \sum_{\sigma_{1}, \sigma_{2}, \sigma_{3} = n}^{\infty} \left| \tilde{M}_{\sigma_{3}\sigma_{1}\alpha_{1}}^{(1)} \right| \left| \tilde{M}_{\sigma_{1}\sigma_{2}\alpha_{2}}^{(2)} \right| \left| \tilde{M}_{\sigma_{2}\sigma_{3}\alpha_{3}}^{(3)} \right|. \tag{17}$$

6 Расчет элементов тензоров через коэффициенты Клебша-Гордона

Список литературы

[1] GS Joyce. Classical heisenberg model. Physical Review, 155(2):478, 1967.