Метод на основе аппроксимации сферическими функциями

1 Сферические функции

Нормированные сферические функции определены следующим образом:

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

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

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

где P_l — полиномы Лежандра, определяемые рекуррентно:

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

2 Аппроксимация сферическими функциями

Метод основан на следующих соотношениях [**?**]:

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

где $I_\nu(x)$ — функция Инфельда, и

$$P_l(\mathbf{x}\cdot\mathbf{y})=4\pi(2l+1)^{-1}\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{l,m}(\mathbf{x})Y_{l,m}(\mathbf{y}).\tag{5}$$

В итоге получаем

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

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:

$$\frac{Z}{(4\pi)^N} = \int_{S^N} \frac{d\mathbf{m}_1 ... d\mathbf{m}_N}{(4\pi)^N} \exp\left[\lambda_{1,N}(\mathbf{m}_1\mathbf{m}_N) + p_1(\mathbf{m}_1\mathbf{m}_0) + \sum_{i=2}^{N} \left(\lambda_{i,i-1}(\mathbf{m}_i\mathbf{m}_{i-1}) + p_i(\mathbf{m}_i\mathbf{m}_0)\right)\right] =$$
$$= \sum_{l_1,m_1}\sum_{l_2,m_2} ... \sum_{l_N,m_N} \int_{S^N} d\mathbf{m}_1 ... d\mathbf{m}_N \kappa_1 I_{l_1+1/2}(\lambda_{1,2}) \exp(p_1\mathbf{m}_1\mathbf{m}_0) Y^*_{l_1,m_1}(\mathbf{m}_1) Y_{l_1,m_1}(\mathbf{m}_2) \times$$
$$\times \kappa_2 I_{l_2+1/2}(\lambda_{2,3}) \exp(p_2\mathbf{m}_2\mathbf{m}_0) Y^*_{l_2,m_2}(\mathbf{m}_2) Y_{l_2,m_2}(\mathbf{m}_3) \times ...$$
$$\times \kappa_N I_{l_N+1/2}(\lambda_{1,N}) \exp(p_N\mathbf{m}_N\mathbf{m}_0) Y^*_{l_N,m_N}(\mathbf{m}_N) Y_{l_N,m_N}(\mathbf{m}_1), \quad (8)$$

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

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

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

Тогда Z перепишется в виде:

$$\frac{Z}{(4\pi)^N} = \sum_{\sigma_1}\sum_{\sigma_2} ... \sum_{\sigma_N} M^{(1)}_{\sigma_N,\sigma_1} M^{(2)}_{\sigma_1,\sigma_2} ... M^{(N)}_{\sigma_{N-1},\sigma_N} = \mathrm{tr}(M^{(1)}M^{(2)}...M^{(N)}). \quad (10)$$

4 Применение метода для расчета моментов многочастичных функций распределения

Рассмотрим функции распределения вида:

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

Задача состоит в расчете моментов ФП вида:

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

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:

$$M^{(q)}_{\sigma_1,\sigma_2,...,\sigma_k;\alpha_1,...\alpha_p} = \int\limits_S d\mathbf{m}_q \exp(\mathbf{p}_q \cdot \mathbf{m}_q) \prod_{i=1}^{p} (m^{\alpha_i}_q)^{s_i} \times$$
$$\times \prod_{i\in\sigma_{in}} Y^*_{l_i,m_i}(\mathbf{m}_q) \prod_{i\in\sigma_{out}} Y_{l_i,m_i}(\mathbf{m}_q) I_{l_i+1/2}(\lambda_{q,\tau^q_i}) \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{\lambda_{q,\tau^q_i}}}, \quad (13)$$

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 (**??**) по всем индексам l_i, оставляя индексы α_i.

5 Оценка погрешности трехчастичной ункции распределения

Рассмотрим погрешнсоть вычисления тензора:

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

На практике вычисляется:

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

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

Тогда погрешность может быть оценена как:

$$\begin{aligned}\Delta = \left|T_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3} - \tilde{T}_{\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3}\right| \leq \underbrace{\left|\sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3=n}^{\infty} \tilde{M}^{(1)}_{\sigma_3\sigma_1\alpha_1} \tilde{M}^{(2)}_{\sigma_1\sigma_2\alpha_2} \tilde{M}^{(3)}_{\sigma_2\sigma_3\alpha_3}\right|}_{\Delta_1} + \\ + \underbrace{\left|\sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3=0}^{\infty} \tilde{M}^{(1)}_{\sigma_3\sigma_1\alpha_1} \tilde{M}^{(2)}_{\sigma_1\sigma_2\alpha_2} \tilde{M}^{(3)}_{\sigma_2\sigma_3\alpha_3} - \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3=0}^{\infty} M^{(1)}_{\sigma_3\sigma_1\alpha_1} M^{(2)}_{\sigma_1\sigma_2\alpha_2} M^{(3)}_{\sigma_2\sigma_3\alpha_3}\right|}_{\Delta_2},\end{aligned} \tag{16}$$

что было получено прибалением и вычитанием выражения (**??**) 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:

$$\Delta_1 \leq \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3=n}^{\infty} \left|\tilde{M}^{(1)}_{\sigma_3\sigma_1\alpha_1}\right| \left|\tilde{M}^{(2)}_{\sigma_1\sigma_2\alpha_2}\right| \left|\tilde{M}^{(3)}_{\sigma_2\sigma_3\alpha_3}\right|. \tag{17}$$

Далее

$$\left|\tilde{M}^{(1)}_{\sigma_3\sigma_1\alpha_1}\right| \lesssim \frac{(2\pi)^{3/2}}{\sqrt{\lambda_3}} \exp(p_1) I_{l_1+\frac{1}{2}}(\lambda_3) \delta_{l_1,l_3} \delta_{m_1,m_3}. \tag{18}$$

В итоге получаем:

$$\Delta_1 \lesssim \frac{(2\pi)^{\frac{9}{2}}}{\sqrt{\lambda_1\lambda_1\lambda_3}} \exp(p_1+p_2+p_3) \sum_{l_1=l_{\max}+1}^{\infty} I_{l_1+\frac{1}{2}}(\lambda_1) I_{l_1+\frac{1}{2}}(\lambda_2) I_{l_1+\frac{1}{2}}(\lambda_3)(2l_1+1). \tag{19}$$