الجمهــورية الجزائريــة الديمقراطيــة الشعبيــة

وزارة التعليــم العالــي و البحــث العلمــي

جامعــة الشيـخ العربـي التبسـي- تبســـة

كليـــة العـلوم الدقيقـــة و علـوم الطبيعــة و الحيـــاة

قســم: عـلوم المــادة

مذكـــــرة ماستــــرأكاديمــي

المجــال: علـــوم المـــادة

الميـــدان: فيزياء

التخصص: فيزيــاء المـــادة المكثفة

الموضوع

دراسة نموذج هيبارد بواسطة نظرية الاضطرابات في درجات الحرارة المرتفعة

من تقديـــم:

خالد وردة

قنز كوثر

أمــام لجنـــة المناقشيـــن المكونـــة مـن:

زيار توفيق	أستاذ محاضر أ	جامعة العربي التبسي-تبسة	**رئيسا**
طق محمد أمين	أستاذ محاضر أ	جامعة العربي التبسي-تبسة	**مؤطرا**
منصور محمد الهادي	أستاذ محاضر ب	جامعة العربي التبسي-تبسة	**ممتحنا**

تاريخ المناقشة: 2021/06/22

Université Larbi Tebessi- Tébessa

Faculté des sciences exactes et des sciences de la nature et de la vie

Département : sciences de matière

Filière : physique

Spécialité : physique de la matière condensée

Année universitaire 2020/2021

Formulaire de levée de réserves après soutenance d'un Mémoire de Master

Données d'identification du candidats(es) :

Nom et prénom du candidat : Khaled Warda & Guenez Kawthar

Intitulé du Sujet : دراسة نظرية لخصائص البنيوية والالكترونية للمركبات الجديدة

Données d'identification du membre de jury :

Nom et prénom : Ziar Toufik

Grade : MCA

Lieu d'exercice : Université Larbi Tebessi- Tébessa

Vu le procès-verbal de soutenance du Mémoire sus citée comportant les réserves suivantes :

reserves de forme

1°) paragraphe repeté

2°) resumé sur une seule feuille

Et après constatation des modifications et corrections suivantes :

Reserves levés

Je déclare en ma qualité de président de jury de soutenance que le mémoire cité remplit toutes les conditions exigées et permet au candidat de déposer son mémoire en vue de l'obtention de l'attestation de succès.

12 جويلية 2021

Le 11/07/2021

Président de jury de soutenance : (Nom/Prénom et signature)

Ziar Toufik

FSESNV

كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة و الحياة
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET DES SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Larbi Tébessi - Tébessa

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

جامعة العربي التبسي - تبسة
Université Larbi Tebessi - Tebessa

Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)

Je soussigné(e),

Nom, Prénom :........Khaled Warda........

Régulièrement inscrit(e) en **Master** au département :....science de la matiére

N° de carte d'étudiant :....2011401804 6/11........

Année universitaire :....2020/2021........

Domaine:....science de la matiére........

Filière:........physique........

Spécialité: ....physique de la matiére condensée....

Intitulé du mémoire :........

دراسة نموذج هبارد بواسطة نظرية الاضطرابات

في درجات الحرارة المرتفعة

Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent ;
- L'exclusion d'une année du master ;
- L'exclusion définitive.

12 جوان 2021

Fait à Tébessa, le :........12 جوان 2021........

Signature de l'étudiant(e) :

Warda

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Larbi Tébessi - Tébessa

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

FSESNV

كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة و الحياة
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES ET DES SCIENCES DE LA NATURE ET DE LA VIE

جامعة العربي التبسي - تبسة
Université Larbi Tebessi - Tebessa

Déclaration sur l'honneur de non-plagiat

(à joindre obligatoirement au mémoire, remplie et signée)

Je soussigné(e),

Nom, Prénom : Guennez Kawthar

Régulièrement inscrit(e) en **Master** au département : science de la matière.

N° de carte d'étudiant : 2013340212 17

Année universitaire : 2020 / 2021

Domaine: science de la matière

Filière: Physique

Spécialité: Physique de la matière condensée

Intitulé du mémoire :

دراسة نموذج هبارد بواسطة نظرية الاضطرابات

في درجات الحرارة المنخفضة

Atteste que mon mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Je certifie également que je n'ai ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé :

L'étudiant sera convoqué devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont :

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent ;
- L'exclusion d'une année du master ;
- L'exclusion définitive.

12 جويلية 2021

Fait à Tébessa, le : 12 جويلية 2021

Signature de l'étudiant(e) :

شكر وعرفان

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على المبعوث رحمة للعالمين

سيدنا محمد وعلى آله وصحبه أجمعين.

أشكر الله تعالى على نعمه التي لا تقدر ولا تحصى ومنها توفيقي في إنجاز

هذا العمل المتواضع.

كما أتقدم بجزيل الشكر والامتنان وخالص التقدير والعرفان إلى أستاذي
المشرف الدكتور طق

محمد أمين، الذي شرفني بقبوله الإشراف على هاته المذكرة وعلى دعمه
وتوجيهاته القيمة.

وأتقدم بوافر التقدير، وعظيم الامتنان للجنة المناقشة: الدكتور: زيار توفيق
ومنصور محمد الهادي.

أشكر كل من ساعدني في إنجاز هذا العمل.

إهداء

الحمد لله الذي خلقنا و رزقنا من كل خير و أورثنا العلم سلاحا وصلى الله وسلم على نبينا محمد حبيبنا وشفيعنا و خاتم الأنبياء والمرسلين أما بعد

بادئة بتكراتي بشكر المولى عزوجل الله العلي القدير الذي وفقنا في إنجاز هذا العمل المتواضع الذي كان نجاحنا بيديه كما أهدي ثمرة جهدي هذا إلى :

- إلى طيب القلب الذي علمني بمثاليته وتواضع صفاته إلى والدي العزيز أطال الله في عمره.

- إلى من خلد الله ذكرها في قرآن يتلى إلى يوم الدين، وجعل الجنة تحت قدميها ،حملتني وهنا على وهن إلى والدتي (خديجة)أطال الله بعمرها.

- إلى شموع البيت المنيرة إخوتي محمد و أيمن وأخواتي "فتيحة","عائشة","غالية"الأعزاء دون أن أنسى زوجة أخي و أبناء أخواتي.

- إلى جداتي وأرواح أجدادي

- إلى رفيقتي في هاته المذكرة المتواضعة " قنز كوثر".

- إلى اللواتي جمعني بهن القدر صديقاتي" حنان عسال" ,"شافية بن جرو الذيب","منى معمري","عواطف سويمي"أغلى و أعز الناس.

_إلى الأصدقاء الغالين على قلبي"خليفة","مراد",سامي","ياسين"وبالأخص " فيصل" أغلى و أعز الناس. لى كل من ذكره قلبي ونسيه قلمي.

إلى كل الصديقات و الزميلات اللواتي جمعني بهن القدر، إلى الذين قاسموني مقاعد - الدراسة في الجامعة، دفعة 2020-2021 فيزياء, تخصص : فيزياء المادة المكثفة.

خالد وردة

إهداء

باسم الله الرحمن الرّحيم

باسم الخالق الذي أضاء الكون بنوره وحده أعبد وله وحده أسجد شاكرة لفضله عليَّ في إتمام هذا العمل المتواضع وصلى الله وسلم على محمد وعلى أله وصحبه الميامين أما بعد.

إلى من كان لهما الفضل الأول في بلوغي التعليم العالي.إلى "أبي" الغالي الصبور ، و"أمي" التي لوّنتني أطال الله في عمركما

إلى أرواح أجدادي وجداتي الطاهرة رحمهم الله .

إلى عصافير قلبي ونور البيت "مريم"، "مرتضى" .

إلى أخوتي :

إلى زكرياء و ابراهيم,ويحيى, وإلى زوج أختي "مروان"

إلى أخواتي:

إلى كتلة الحنان و النبع الذي أرتوي منه الأمان أسماء ,عائشة وخديجة وبسوم الغالية.

إلى رفيقة دربي و مؤنستي طول المسيرة الدراسية "شوشو ".

إلى صديقتي وأختي في هذا المشوار الدراسي "وردة خالد".

إلى

إلى من شاءت الأقدار أن تجمعني بهن :مروى,نعيمة,رفيدةوفاطمة ,زينة,فاطمة ,جميع صديقاتي.

إلى كل مع علّمني حرف من الطور الإبتدائي إلى الطور الجامعي.......

كوثر قنز

ملخص

ندرس في هذه المذكرة الطاقة الحرة باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام عند درجة الحرارة المرتفعة، وذلك بتطبيق بعض الخوارزميات المعروفة في نظرية المخططات مثل تعداد كل الأشجار الممتدة وإيجاد كل الحلقات في مخطط غير مباشر، نجد مساهمة مخططات الفراغ لفينمان أو هيجنهولتز في هذه الطاقة. نحسب قيمة الطاقة الحرة في درجة الحرارة المرتفعة لنموذج هيبارد في بعد واحد.

Abstract

In this work we study the free energy at high temperature using Many Body Perturbation Theory. We apply some basic algorithms of graph theory like enumerate all spanning trees and finding all circuits in undirected graph, we find the contribution of the vacuum Feynman or Hugenholtz diagrams to this energy. We calculate the value of the free energy at high temperature of the Hubbard model in one dimension.

Résumé

Dans ce travail, nous étudions l'énergie libre à haute température en utilisant la théorie de la perturbation à plusieurs corps. Nous appliquons quelques algorithmes de base de la théorie des graphes comme énumérer tous les arbres couvrants et trouver tous les circuits dans un graphe non orienté, nous trouvons la contribution des diagrammes du vide de Feynman ou de Hugenholtz à cette énergie. Nous calculons la valeur de l'énergie libre à haute température du modèle Hubbard en une dimension.

فهــــــــــــــــــرس

الفصل الثالث: النتائج

قائمة الجداول

قائمة الأشكال

مقدمة عامة

نظرية الاضطرابات متعددة الأجسام (**M**any **B**ody **P**erturbation **T**heory) وتعرف اختصارا ب MBPT، هي طريقة أساسية لوصف نظام فيزيائي مكون من N جسيم متشابه أو متطابق، وذلك عن طريق هاملتون مكون من جزء قابل للحل وجزء تفاعل بين هذه الجسيمات، يتم استخدام هذه الطريقة على نطاق واسع عندما لا نستطيع إيجاد حل نظري دقيق لهذه الأنظمة. المنهجية المستخدمة في هذه النظرية تعتمد على تقنية المخططات، حيث تم اقتراحها لأول مرة من طرف العالم فينمان Feynman [1] سنة 1949 وذلك لتسهيل تمثيل التفاعلات بين الجسيمات، وتم تطبيقها على الأنظمة متعددة الأجسام بواسطة العلماء بريكينار Brueckner [2] سنة 1955 ثم هيجنهولتز Hugenholtz [3] و قولدستون Goldstone [4] سنة 1957 في الأنظمة الخاصة بالجسم الصلب، تم تطوير نظرية الاضطرابات للأجسام المتعددة في درجة الحرارة المحدودة (**F**inite **T**emperature **M**any **B**ody **P**erturbation **T**heory) أو اختصارا (FT-MBPT) بواسطة ليتنغر Luttinger [5] سنة 1960 ثم بلوخ Bloch [6] سنة 1961 حيث تطورت هذه النظرية بطريقة أساسية في هذه الفترة. على الرغم من أنه يمكن ايجاد وصف دقيق لطريقة FT-MBPT في عدة كتب، إلا أنه بسبب العدد الهائل للمخططات حيث أنه نجد كلما زادت درجة النشر n زاد عدد المخططات بمقدار $(2n)!$، وهذا ما يجعل التعامل مع هذه الطريقة صعب ومستحيل أن نستطيع حساب كل المخططات بالطريقة اليدوية، لذلك توجب علينا اللجوء إلى طرق حسابية أخرى معتمدين على الكمبيوتر، أو بعبارة أخرى سنتعامل مع نظرية FT-MBPT عن طريق تطوير خوارزميات برمجية سريعة الأداء (زمن أقل) وأقل سعة من حيث التحميل على الذاكرة (فضاء أقل).

لسوء الحظ، إذا طبقنا مباشرة نظرية ويكس Wicks theorem [7] لإيجاد جميع المخططات في درجة نشر معينة، فإن عدد تلك المخططات يزداد بشكل كبير مع تزايد درجة النشر. لذلك هناك طرق معينة لتقليل هذا العدد سوف نتطرق اليها باختصار في هذه المذكرة، كما سندرس كيفية تطبيق نظرية المخططات من أجل إيجاد طرق مختصرة لحساب الطاقة الحرة. حيث نطبق بعض المفاهيم الأساسية في نظرية المخططات مثل الأشجار الممتدة Spanning trees، ومسألة إيجاد الحلقات الأساسية والكلية في مخطط معين.

نتطرق في هذه المذكرة إلى نظام تفاعل سبين الجسيمات المحلية والخارجية في نظام هيبارد. نأخذ بعد واحد وذلك للتسهيل وكتابته في التكميم الثاني. ندرس الخصائص الترموديناميكية لهذا النموذج في درجات

الحرارة المرتفعة باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام MBPT، نجد قيمة الطاقة الحرة حتى الدرجة السادسة من النشر.

في الفصل الأول من هذه المذكرة سنتطرق الى أساسيات التكميم الثاني وكذلك نعرض نبذة عن نموذج هيبارد في بعد واحد. الفصل الثاني نصف فيه بالتدقيق كيفية إيجاد قيمة مساهمة مخطط فينمان أو هيجنهولتز في الطاقة الحرة وذلك باستخدام نظرية المخططات. أما الفصل الثالث سنطبق فيه نظرية FT-MBPT على نموذج هيبارد من أجل إيجاد الطاقة الحرة في درجات الحرارة المرتفعة، في الأخير نختم المذكرة بخاتمة عامة حول موضوع هذه المذكرة.

مراجع

1. R. P. Feynman, Phys. Rev. 76, 749 (1949), 769 (1949).

2. K. A. Brueckner, Phys. Rev. 97, 1353 (1955).

3. N. M. Hugenholtz, Physica 23, 481 (1957).

4. J. Goldstone, Proc. Roy. Soc. A 239, 267 (1957).

5. J. M. Luttinger and J. C. Ward, Phys. Rev. 118, 5 (1960).

6. C. Bloch, On the many body problem at non-zero temperature, in Lectures on the Many body Problems, ed. E. Cainiello (Academic Press, 1961), pp. 241{265.

7. G. C. Wick, Phys. Rev. 80, 268 (1950).

1.1. التكميم الثاني

معرفة النظرية المعتادة في ميكانيكا الكم المعروفة باسم "التكميم الأول" غير مناسبة نسبيًا لدراسة الأنظمة نستطيع المكونة من كم هائل من الجسيمات التي لا نستطيع التمييز فيما بينها. في الواقع، تعتمد هذه النظرية إلى الأساسية ووصف الحالة الكمية للنظام، و هذا يشير إلى دالة الموجة. بالنسبة لمجموعة من الجسيمات التي لا تمييزها، تصبح دالة الموجة معقدة للغاية بشكل رئيسي بسبب خصائصها التناظرية. أحد المبادئ لميكانيكا الكم هو أن دالة الموجة لمجموعة من الجسيمات إما متناظرة (بوزونات) أو غير متناظرة (فرميونات) وذلك عن طريق تبديل جسيمين. وبالتالي، وكذلك بالنسبة لمجموعة من الجسيمات المستقلة لا يتم اختزال دالة الموجة للنظام إلى جداء بسيط لدوال الموجة ولكن تتضمن مجموع هذه الجداءات على مجموعة التبادلات المحتملة. لذلك تم تطوير ما يسمى بنظرية "التكميم الثاني" [1]. في هذه النظرية، تصبح الدالة الموجية $\Psi(x)$ عبارة عن حقل يسمى "حقل المادة".

2.1. هاملتون مجموعة من الجسيمات المتماثلة

لدينا مجموعة مكونة من N جسيم متطابق موضوعة داخل كمون $V(x)$. هاميلتون هذه الجسيمات هو عبارة على مجموع هاميلتون كل جسيم :

$$H = \sum_{i=1}^{N} h_i \tag{1.1}$$

حيث h_i هو هاميلتون الجسيم i، و هو يصف جسيم داخل كمون $V(x)$ و يكتب على الشكل :

$$h(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \tag{1.2}$$

هنا يسمى $h(x)$ مؤثر جسم واحد.

نقترح أن الأشعة الذاتية $\phi_{\alpha,\sigma}(x)$ والقيم الذاتية $\varepsilon_{\alpha,\sigma}$ لهاملتون الجسيم α (1.2) معروفة، حيث σ يمثل سبين الجسيم. يمكن تحديد قيم $\varepsilon_{\alpha,\sigma}$ بواسطة معادلة القيم الذاتية التالية:

$$h\phi_{\alpha,\sigma}(x) = \varepsilon_{\alpha}\phi_{\alpha,\sigma}(x) \tag{1.3}$$

العلاقة (1.3) تعرف بمعادلة القيم الذاتية لمؤثر h.

من خلال هذه الشروط، صيغة التكميم الثاني تمكننا بوصف هذه المجموعة من الجسيمات بواسطة مؤثر حقل المادة $\Psi(x)$. يكتب هاملتون الجملة H_0 ببساطة على أنه "القيمة المتوسطة تحت تأثير حقل المادة" لهاملتون جسيم وحيد h كتالي [2]:

$$H_0 = \int \Psi^{+}(x)h(x)\Psi(x)dx \tag{1.4}$$

حيث $\Psi(x)$ هو مؤثر الحقل الذي يهدم جسيمًا عند النقطة x والمؤثر $\Psi^{+}(x)$ يُنشئ جسيمًا عند النقطة x.

يمكن نشر مؤثر الحقل $\Psi(x)$ باستعمال قاعدة الأشعة الذاتية $\phi_{\alpha}(x)$ لجسيم وحيد كتالي:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \sum_{\alpha,\sigma}\phi_{\alpha,\sigma}(x)c_{\alpha,\sigma}\\ \Psi^{+}(x) &= \sum_{\alpha,\sigma}\phi^{*}_{\alpha,\sigma}(x)c^{+}_{\alpha,\sigma}\end{aligned} \tag{1.5}$$

حيث $c_{\alpha,\sigma}$، $c^{+}_{\alpha,\sigma}$ تمثل مؤثرات الهدم والإنشاء، بوزونية أو فيرميونية اعتمادًا على النظام المدروس.

حيث يحقق هذان المؤثران علاقات التبادل التالية :

$$\begin{aligned}c_{\alpha,\sigma}c^{+}_{\beta,\sigma'} - \epsilon c^{+}_{\beta,\sigma'}c_{\alpha,\sigma} &= \delta_{\alpha\beta}\delta_{\sigma'\sigma}\\ c_{\alpha,\sigma}c_{\beta,\sigma'} - \epsilon c_{\beta,\sigma'}c_{\alpha,\sigma} &= 0\\ c^{+}_{\alpha,\sigma}c^{+}_{\beta,\sigma'} - \epsilon c^{+}_{\beta,\sigma'}c^{+}_{\alpha,\sigma} &= 0\end{aligned} \tag{1.6}$$

حيث $\epsilon = -1$ بالنسبة للفرميونات و $\epsilon = 1$ بالنسبة للبوزونات.

هدف المؤثرات $c_{\alpha,\sigma}$ و $c^+_{\alpha,\sigma}$ هو هدم أو إنشاء جسيمات لدالة الموجة $\phi_{\alpha,\sigma}(x)$ في الحالة الفردية. وبالتالي هذه المعاملات لا تؤثر على إحداثيات الجسيمات x ولكن هذه المعاملات تغير عدد الجسيمات الموجودة في هذه أو تلك الحالة الفردية. بتعبير أصح، إنها تؤثر على الأشعة $|n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma\prime}, \dots\rangle$ المسمات عدد الحالات، تنتمي هذه الأشعة إلى فضاء شعاعي يسمى فضاء فوك (Fock) [3]. إذن هذه الحالة $|n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma\prime}, \dots\rangle$ تصف الوضعية التي فيها $n_{\alpha,\sigma}$ جسيم (بوزون أو فرميون) متواجدون في الحالة الفردية $\phi_{\alpha,\sigma}(x)$، $n_{\beta,\sigma}$ جسيم متواجدون في الحالة الفردية $\phi_{\beta,\sigma}(x)$ ، ...إلخ. تأثير مؤثرات الإنشاء والهدم على سبيل هذه الحالات يعرف ب:

$$c_{\alpha,\sigma}|n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma\prime}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha,\sigma}}|n_{\alpha,\sigma} - 1, n_{\beta,\sigma\prime}, \dots\rangle \qquad (1.7)$$

$$c^+_{\alpha,\sigma}|n_{\alpha,\sigma}, n_{\beta,\sigma\prime}, \dots\rangle = \sqrt{n_{\alpha,\sigma} + 1}|n_{\alpha,\sigma} + 1, n_{\beta,\sigma\prime}, \dots\rangle \qquad (1.8)$$

التمثيل بواسطة فضاء فوك له أوجه نظر مختلفة: حيث لا نهتم بالحالة حيث تتواجد الجسيمات لكن بعدد الحالات المشغولة التي تميز حالة النظام. من أجل بوزونات من نفس النوع عدد الحالات المشغولة يكون كيفي. أما بالنسبة لفرميونات من نفس النوع فإن عدد الحالات المشغولة يساوي 0 أو 1. يمكن زيادة أو تقليل عدد الحالات المشغولة دون إدخال الترابط في غياب التفاعل.

الحقل الكمي يصبح موضوع أساسي جديد و هو ما يمثل الثنائية (موجة/جسيم) في ميكانيك الكم.

أخيرًا، هاملتون الجملة للجسيمات يمكننا كتابته على الشكل التالي وذلك بتعويض حقل المادة المعرف بالعلاقة (1.5) في القيمة المتوسطة (1.4) نجد:

$$H_0 = \sum_{ij}\sum_{\sigma} h_{ij} c^+_{i,\sigma} c_{j,\sigma} \qquad (1.9)$$

حتى الآن، تم إهمال التفاعلات بين الجسيمات. لذلك نفرض أن الجسيمات تتفاعل فيما بينها عن طريق كمون ثنائي الجسم $V(x,x')$. في هذه الحالة هاملتون الجملة H المعرف بالعلاقة (1.4) يضيف حد آخر، يكتب على الشكل التالي :

$$H = \int \Psi^+(x)h(x)\Psi(x)dx + \frac{1}{2}\int\int \Psi^+(x')\Psi^+(x)V(x,x')\Psi(x)\Psi(x')dxdx' \qquad (1.10)$$

نعوض كذلك بمؤثرات الحقل المعرفة بالعلاقة (1.5) في الهاملتون (1.10) نجد أن هاملتون الجملة في حالة وجود تفاعل بين الجسيمات يكتب على الشكل النهائي التالي [4] :

$$H = H_0 + H_I = \sum_{ij}\sum_{\sigma} h_{ij} c_{i,\sigma}^{+} c_{j,\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\sum_{\sigma\prime\sigma} g_{ijkl} c_{i,\sigma}^{+} c_{j,\sigma\prime}^{+} c_{l,\sigma\prime} c_{k,\sigma} \quad (1.11)$$

حيث أن h_{ij} وعناصر المصفوفة g_{ijkl} يكتبان على الشكل:

$$h_{ij} = \int \phi_i^*(x) h(x) \phi_j(x) dx \quad (1.12)$$

$$g_{ijkl} = \int\int \phi_i^*(x') \phi_j^*(x) V(x, x') \phi_k(x') \phi_l(x) dx dx' \quad (1.13)$$

هنا الهاملتون H_0 يمثل الجسيمات الحرة دون تفاعل وأحيانا يمثل الجزء القابل للحل. بينما الهاملتون H_I يمثل حد التفاعل بين الجسيمات وأحيانا يضاف على أنه اضطراب يضاف للجزء القابل للحل والممثل في الهاملتون H_0.

3.1. نموذج هيبارد

نموذج هيبارد هو نموذج تقريبي يستخدم، خاصة في فيزياء الحالة الصلبة، لوصف الانتقال بين أنظمة التوصيل وأنظمة العزل. نموذج هيبارد، الذي سمي على اسم جون هيبارد John Hubbard []، هو نموذج بسيط لتفاعل الجسيمات في شبكة حيث يحتوي على حدين فقط في الهاملتون، حد حركي يسمح بالقفز النفقي للجسيمات بين مواقع الشبكة وحد محلي ينتج من كمون التفاعل في كل موقع. يمكن أن تكون الجسيمات إما فرميونات، كما في عمل هيبارد الأصلي، أو بوزونات وفي هذه الحالة يُشار إلى النموذج باسم "نموذج بوز-هيبارد".

نموذج هيبارد هو تقريب مهم للجسيمات في الكمونات الدورية عند درجات حرارة منخفضة بما فيه الكفاية، حيث يمكن افتراض أن جميع الجسيمات في أدنى نطاق بلوخ، ويمكن تجاهل التفاعلات طويلة المدى بين الجسيمات. إذا تم إدراج التفاعلات بين الجسيمات في مواقع مختلفة من الشبكة فإنه غالبًا ما يشار إلى النموذج باسم "نموذج هيبارد الممتد".

تم اقتراح النموذج في الأصل عام 1963 لوصف الإلكترونات في المواد الصلبة [2]. منذ ذلك الحين، تم تطبيقه على دراسة الموصلية الفائقة في درجات الحرارة العالية، والمغناطيسية الكمومية، وموجات كثافة الشحنة. يقدم نموذج هيبارد تفاعلات قصيرة المدى بين الإلكترونات إلى نموذج الربط المحكم، والذي يتضمن فقط الطاقة الحركية (مصطلح "القفز") والتفاعلات مع ذرات الشبكة (جهد "ذري"). عندما يكون التفاعل بين الإلكترونات قوياً، يمكن أن يختلف سلوك نموذج هيبارد نوعياً عن نموذج الربط المحكم. على سبيل المثال، يتنبأ نموذج هيبارد بشكل صحيح بوجود عوازل موت Mott insulators وهي المواد التي تكون عازلة بسبب التنافر القوي بين الإلكترونات، على الرغم من أنها تفي بالمعايير المعتادة للموصلات، مثل وجود عدد فردي من الإلكترونات لكل وحدة خلية.

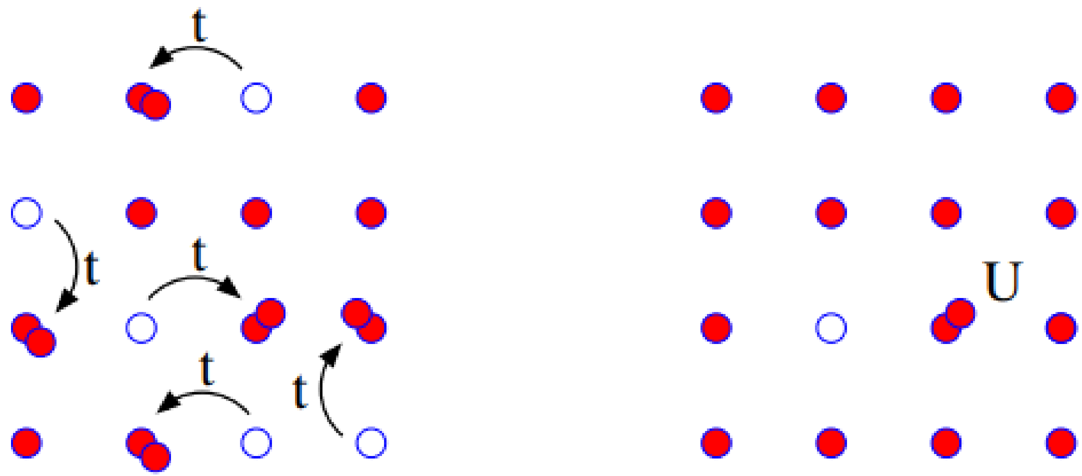
هاملتون نموذج هيبارد

بعد إدخال معاملات الإنشاء والإفناء، يمكننا الآن كتابة هاملتون هيبارد. يتشكل الهاملتون بشكل طبيعي تمامًا عند التفكير في كيفية وصف حركة وتفاعلات الإلكترونات في مادة صلبة.

أولاً، نحتاج إلى مراعاة حقيقة أن هناك مجموعة منتظمة من مواضع الأنوية في الشبكة، والتي نعتبرها ثابتة غير متحركة بسبب كتلتها الكبيرة مقارنة بالإلكترونات (تقريب بورن أوبنهايمر). أي أننا نبدأ بشبكة من الذرات (المواقع) التي تتحرك عليها الفرميونات. بالطبع، فإن الذرة الحقيقية الواحدة هي بالفعل بنية معقدة للغاية، حيث تحتوي على العديد من مستويات الطاقة المختلفة (المدارات). يبسط هاملتون هيبارد الذرات في مادة صلبة إلى مجموعة مواقع لكل منها مستوى واحد (مداري). هذه صورة جيدة لجسم صلب به نطاق طاقة واحد فقط على سطح فيرمي، لذلك، في الواقع، يوجد مدار واحد فقط مناسب.

مع هذا التبسيط (الكبير!)، فإن مواقع هاملتون هيبارد مقيدة بمبدأ Pauli بأربعة تكوينات: فارغة، أو فرميون واحد Up، أو فرميون واحد Down، أو محجوزة بواسطة زوج من الفرميونات Up و Down.

في مادة صلبة حيث يمكن للإلكترونات أن تتحرك، تتفاعل الإلكترونات عبر تفاعل كولوم. سيكون أكبر تفاعل للإلكترونات عندما يكونان في نفس الموقع. يتوقف هاملنون هيبارد عند هذا الحد فقط: يتم نمذجة التفاعلات بمصطلح يكون صفرًا إذا كان الموقع خاليًا من الفرميونات أو يحتوي على فيرميون واحد فقط، ولكن له القيمة U إذا كان الموقع مشغولاً بشكل مضاعف، ووفقا لمبدأ الاستبعاد لبولي، فإنه يجب أن يكون مشغولا بالكترونين متعاكسين في السبين. إذن الحد $Un_{j\uparrow}n_{j\downarrow}$ يعبر عن هذا التفاعل (شكل 1). في هاملتون هيبارد البسيط، لا يوجد تفاعل $Vn_{i\sigma}n_{j\sigma'}$ بين الفرميونات على مواقع مختلفة i و j، على الرغم من تضمين هذه التفاعلات في هاملتون هيبارد الممتد.



شكل 1. التمثيل التصويري لحدود هاملتون هيبارد. اليسار: الطاقة الحركية t. اليمين: التفاعل في الموقع المحلي U.

إن التفكير المنطقي للطاقة الحركية هو التعبير الذي يدمر الفرميون في موقع ما ويخلقه على أحد الجيران. سيتم تحديد مقياس الطاقة t الذي يحكم هذا "القفز" من خلال تداخل دالتين موجيتين على زوج الذرات. نظرًا لأن الدوال الموجية تتداخل بشكل أسي، فمن المعقول أن نسمح بالتنقل (القفز) فقط بين أقرب الذرات في شبكتنا.

إذن فإن هاملتون هيبارد يمكن التعبير عنه بالعلاقة التالية:

$$H = -t\sum_{<ij>\sigma}\left(c_{j\sigma}^{+}c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^{+}c_{j\sigma}\right) + U\sum_{j} n_{j\uparrow}n_{j\downarrow} - \mu\sum_{j}\left(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}\right) \qquad (1.14)$$

الحد الأول هو الطاقة الحركية: يصف تدمير فيرميون من السبين σ على الموقع i وخلقه في الموقع j (أو العكس). يمثل الترميز $< ij >$ على أن التنقل مسموح به فقط بين موقعين متجاورين. الحد الثاني هو طاقة التفاعل. حيث يمر عبر جميع المواقع ويضيف طاقة U إذا وجد أن الموقع مشغول بشكل مضاعف. الحد الأخير هو الكمون الكيميائي حيث يتحكم في التعبئة. نشير إلى الموقف الذي يوجد فيه فرميون واحد لكل موقع على أنه "نصف مملوء" Half-filling لأن الشبكة تحتوي على نصف عدد الفرميونات حيث أن العدد الأقصى هو اثنان لكل موقع.

غالبًا ما تركز دراسات هاملتون هيبارد على الحالة نصف الممتلئة لأنها تعرض الكثير من الظواهر المثيرة للاهتمام (سلوك العزل Mott، الترتيب المضاد للمغناطيسية الحديدية، إلخ.).

1. مقدمة

نظرية الاضطرابات (**M**any **B**ody **P**erturbation **T**heory) والتي تعرف اختصارا بـ **MBPT**، هي طريقة أساسية لوصف نظام فيزيائي مكون من N جسيم متشابه أو متطابق في حالة حركة حرة ومتفاعلة.

والتي قدمت من طرف العالم (Feynman)[9] سنة 1949 عند قيامه بدراسة التفاعلات بين الالكترونات والفوتونات، وتم تطبيقها على الأنظمة المتعددة الأجسام بواسطة العلماء بريكينار (Brueckner)[10] سنة 1955 ثم هيجنهولتز (Hugenholtz)[11] وقولدستون (Goldstone)[12] سنة 1957، تم تطوير نظرية الاضطرابات في درجة الحرارة المحدودة (**F**inite **T**emperature **B**ody **P**erturbation **T**heory)أو باختصار(FT-MBPT).

و بسبب العدد الكبير للمخططات حيث أنه نجد كلما زادت درجة النشر n زاد عدد المخططات بمقدار $(2n)!$، وبالتالي نتعامل مع نظرية FT-MBPTعن طريق تطوير خوارزميات برمجية سريعة الأداء (زمن أقل) وأقل سعة من حيث التحميل على الذاكرة (فضاء أقل).

ولكن هناك طريقتان أساسيتان لتقليلمن عدد هذه المخططات:

الطريقة الأولى : تعتمد على إزالة جميع المخططات المنفصلة وذلك عن طريق حساب الطاقة الحرة الترموديناميكية بدلا من التعامل مع دالة القسمة

الطريقة الثانية :فتعتمد على إيجاد المخططات المتمايزة من بين كل اهذه الاخيرة المتكافئة طوبولوجيا، وهذا ما يجعل انخفاض بشكل كبير في عدد المخططات.

الطرق القديمة [20-26]استخدمت تقنية المقارنة المباشرة مع المخططات السابقة، ولكن هذه الطريقة تحتاجالى ضرورة حفظ جميع المخططات المتمايزة السابقة على الذاكرة لتتم عملية المقارنة معها، مما يستلزم وقتًا ومساحة كبيرين جدا.

حاليا تم استعمال طرق جديدة للتعامل مع مشكلة التخزين [27]حيث أن هذه الأخيرة تولد المخططات المتمايزة مباشرة دون للجوء إلى المقارنة مع المخططات المتمايزة السابقة.

سوف نتعرض في هذا الفصل الى الخوارزميات المستحدثة لحساب المخططات المتمايزة المولدة عن طريق الخوارزمية [27] بطريقة آلية وطباعةالعبارة التحليلية لها مباشرة.

إن جميع الخوارزميات المستعملة فيهذا الفصل هي مواضيع أساسية في نظرية المخططات Graph theory،كذلك نقدم في بعض الأحيان نسخ جديدة عن بعض من هذه الخوارزميات، خاصة المستعملة المرجع [28].

2. نظرية الاضطرابات

لقد تعرضنا في الفصل الأول أن الهاملتون عبارة على نظام مكون من عدة جسيمات متشابهة تتفاعل مع بعضها البعض يمكن التعبير عنهباستخدام التكميم الثانيكالتالي:

$$H = H_0 + H_\mathrm{I} = \sum_{k} (\varepsilon_k + \mu) a_k^+ \, a_k + \frac{1}{4} \sum_{rsml} V_{ml}^{rs} a_r^+ a_s^+ a_l a_m \qquad (2.1)$$

حيث a_k^+ :و $_k$ هما مؤثرا الإنشاء والهدم على الترتيب

بينما عناصرمصفوفة كمونالتفاعلV_{ml}^{rs}فهي تحويمصفوفة كمون التفاعل المباشر$\langle rs|V|ml\rangle$ومصفوفة كمون التبادل$\langle rs|V|lm\rangle$، حيث تكتب على الشكل المختصر التالي:

$$V_{ml}^{rs} = \langle rs|V|ml\rangle + \epsilon \langle rs|V|lm\rangle \qquad (2.2)$$

الثابت ϵعرفناه في الفصل الأول

حيث أن :

$\epsilon = 1$بالنسبة للجسيمات من نوع بوزون

$\epsilon = -1$بالنسبة للجسيمات من نوع فرميون

أما ϵ_kفهي تمثل طاقة أشباه الجسيمات للنظام

μيمثل الكمون الكيميائي.

تعتمد نظرية**FT-MBPT** على نشر دالة القسمة المعرفة بـ

$$Z = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H}\right) \quad (2.3)$$

وهذا باستعمال النشر العادي لتايلور للدالة الأسية مع الأخذ بعين الاعتبار مؤثر الهاملتون H.

في العلاقة (3.3)

βتمثل معكوس درجة الحرارة $\beta = \frac{1}{k_B T}$

وكذلك (T تمثل درجة الحرارة و k_B ثابت بولتزمان)، حيث تنشر على الشكل (R):

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\,4^n} \int_0^{\beta} d\tau_1 \ldots\ldots$$
$$\times \int_0^{\beta} d\tau_n \left\langle O_t \prod_{i=1}^{n} V_{m_i l_i}^{r_i s_i}\, a_{r_i}^{+}(\tau_i) a_{s_i}^{+}(\tau_i) a_{l_i}(\tau_i) a_{m_i}(\tau_i) \right\rangle_0 \quad (2.4)$$

حيث:

يمثل O_tمؤثر الترتيب الزمني.

المقدار $\langle A \rangle_0$يمثل المتوسط الحراري في الديناميكا الإحصائية للمؤثر A في الفراغ

يعرف رياضيا بـ:

$$\langle A \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \mathrm{Tr}\left(A e^{-\beta H_0}\right) \quad (2.5)$$

مؤثرات الإنشاء $a_i^{+}(\tau)$ والهدم $a_i(\tau)$ المتعلقة بالزمن التخيليτ

الموضحة في العلاقة (2.4) المعرفة على الشكل:

$$a_i^{+}(\tau) = a_i^{+} e^{\tau E_i}$$
$$a_i(\tau) = a_i e^{-\tau E_i} \quad (2.6)$$

في هذه المذكرة نعرف الطاقة E_i على الشكل:

$$E_i = \varepsilon_i - \mu \quad (2.7)$$

المقدار Z_0 يمثل دالة القسمة للنظام غير متفاعل أي:

$$Z_0 = \mathrm{Tr}\left(e^{-\beta H_0}\right) \tag{2.8}$$

باستخدام نظرية ويكس [19](Wicks)حيث يمكننا نظرياً تعداد جميع الانقباضات (contractions)بين مؤثرات الهدم والإنشاء لكل رتبة من سلسلة النشر (2.4).
و كما يمكننا حساب قيمة المتوسط الحراري لكل انقباض فنجد قيمته تساوي الى [16].

$$\langle a_p(\tau)a_q^+(\tau')\rangle_0 = \epsilon\langle a_q^+(\tau')a_p(\tau)\rangle_0 = \delta_{pq}g_p(\tau-\tau'), \tag{2.9}$$

بينما المقدار $g_p(\tau-\tau')$ والذي يسمى الناشر propagator فهو يمثل مزيج بين تكون ثقب أو جسيم أثناء زمن تخيلي τ
وكما أنه يمكن صياغته رياضيا [16]على الشكل التالي :

$$g_p(\tau-\tau') = e^{-(\tau-\tau')E_P}\left[f_p^+\theta(\tau-\tau'-\eta) + f_p^-\theta(\tau-\tau'+\eta)\right] \tag{2.10}$$

حيث أن:
الثابت العنصري $\eta \to 0^+$ الموجود في دالة هيفيسايد$\theta(x)$(Heaviside)للدلالة على أنه يجب أخذ المقدار الثاني في حالة تساوي الأزمنة$\tau = \tau'$ في العلاقة (2.10).
المقادير الإحصائية $f_p^{\pm}$ معرفة بالعلاقتين:

$$\begin{gathered} f_p^- = \epsilon\left(e^{\beta E_P} - \epsilon\right)^{-1} \\ f_p^+ = 1 + f_p^- \end{gathered} \tag{2.11}$$

و ذلك بسبب العدد الكبير لمقادير المتوسط الحراري (2.9) في رتبة نشر معينة، والصيغ الرياضية المعقدة للناشر (2.10) والمقادير الإحصائية (2.11) أصبح من الضروري التعامل مع كل هذه المعايير بطرق أخرى.

لذا لجأ العلماء (بريكينار)[10]، (هيجنهولتز)[11] و(قولدستون)[12] وآخرون أنه من الممكن استخدام فكرة فينمان[9]وذلك باختصار كل مقادير المتوسط الحراري بواسطة المخططات للتبسيط.

ومنه يمكننا تمثيل الرتبة n من سلسلة النشر (2.4) على شكل مجموعة من المخططات و هذا عن طريق رسمnقمةنسميها $(\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n)$حيث في كل قمة$\tau_i$ نرسم أربع سطور، سطرين واردين إلى هذه القمة يمثلان مؤثرات الانشاء $a_{ri}^{+}(\tau_i)$ و $a_{si}^{+}(\tau_i)$المعرفين في سلسلة النشر (2.4).

بالإضافة إلى سطرين صادرين من هذه القمة يمثلان مؤثرات الهدم$a_{l_i}(\tau_i)$و $a_{m_i}(\tau_i)$ (شكل 1.2)، ثم نقوم بربط جميع الخطوط الواردة$a_{p_i}^{+}(\tau_i)$ مع الخطوط الصادرة$a_{p_j}(\tau_j)$بكل الطرق الممكنة للربط،بحيث في كل عملية ربط بين خطينiو jتتوافق مع الناشر$g_{p_i}(\tau_i - \tau_j)$

شكل 1.2. مخطط يمثل مؤثرات الإنشاء والهدم الواردة والصادرة في كل ذروة τ_i.

عدد المخططات N_D الممكنة الناتجة من العلاقة (2.4) هو$N_D = \frac{(2n)!}{2^n}$، هذا العدد كبير جداُ وهو يحوي كل المخططات المتصلة والمنفصلة

لكن عند تطبيق الدالة اللوغاريتمية على (2.4) فإن عدد المخططات N_D ينقص ويختزل إلى المخططات المتصلة فقط، هذا لان اللوغاريتم يعدم المخططات المنفصلة، وبما أنه يمكن استخلاص جميع الخصائص الترموديناميكية من دالة الطاقة الحرة$\Omega = -\frac{1}{\beta}\log(Z)$،

كما نلاحظ فهي تطبيق للدالة اللوغاريتمية على دالة القسمة، إذن من البديهي دراسة الطاقة الحرة Ωبدلا من دالة القسمة Z.

يمكننا أن نعبر عن الطاقة الحرة للنظام بدلالة المخططات كما يلي:

$$\Omega = \Omega_0 + \sum (\text{All connected diagrams}) \tag{2.12}$$

حيث:

Ω_0 تمثل الطاقة الحرة للنظام الغير متفاعل $\Omega_0 = -\frac{1}{\beta}\log(Z_0)$. يمكن حساب هذه الطاقة ببساطة [8] فنجد قيمتها هي:

$$\Omega_0 = \frac{\epsilon}{\beta}\sum_k \log\left(1 - \epsilon e^{-\beta E_k}\right) \tag{2.13}$$

إذن عدد المخططات ينخفض إلى $N_D = \frac{(2)!}{2^n} - n_{dd}$

حيث n_{dd} يمثل عدد المخططات المنفصلة

ولكن هذا العدد لا يزال كبيرا جدا،لذلك نلجأ لإيجاد وسيلة لخفض هذا العدد،حيث يوجد الكثير من المخططات المتصلة لها نفس القيمة العددية والتي يمكن تسميتها بالمخططات المتكافئة، فمن الضرورة إختيار مخطط واحد فقط من بين هذه المخططات المتكافئة والذي يسمى بالمخطط المتمايز

حيث نلاحظ في التكاملات على الأزمنة $d\tau_1 \dots d\tau_n$ من علاقة النشر (2.4) أنه لديها نفس مجالات التكامل من 0 إلى β، إذن هي تبديله على هذه الأزمنة (تبديله بين القمم$\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n$بلغة المخططات)أي انه لا يغير نتيجة التكاملات.

لذلك عند تطبيق عملية المبادلة بين القيم لمجموعة من المخططات الناتجة من عملية النشر(2.4) فنجد مثلاً مجموعة منها عددها n_{ed}مكافئة لمخطط سابق، فمن اللازم تجاهلها وضرب قيمة المكاملة على المخطط السابق فيn_{ed}فقط.

كما أننا نعلم أن عدد التبديلات الممكنة لمجموعة مكونة من n قيمة هو $n!$، إذن فمن الطبيعي أننا نجد $n!$ مخطط مكافئ لمخطط متمايز وحيد، و أحيانا عند القيام بعملية مبادلة معينة على هذا الأخير كيفي فإننا نتحصل على نفس هذا المخطط، أي أن هذا المخطط لا يتشوه بواسطة عملية المبادلة .

إذا كان عدد هذه المخططات التي لا تتشوه بواسطة عملية مبادلة معينة هو S، و منه فإن العدد الحقيقي للمخططات المتكافئة هو $\frac{n!}{S}$، والذي يسمى بالعدد الطبيعي S بمعامل التناظر، لذا من الضرورة إيجاد المخططات المتمايزة من بين كل المخططات المتكافئة فهذه العملية تخفض بشكل كبير عدد المخططات.

حيث عدد المخططات الآن ينخفض إلى $\frac{S}{n!}\left(\frac{(2n)!}{2^n} - n_{dd}\right) = \frac{\frac{(2n)!}{2^n} - n_{dd}}{\frac{n!}{S}} = N_D$.

تعرف هذه المجموعة بالمخططات المتمايزة الأساسية **E**ssentially **D**istinct **D**iagrams نختصرهاEDD(هذه التسمية مستخلصة من المرجع (R)) ومنه الطاقة الحرة يمكن التعبير عنها بالعلاقة:

$$\Omega = \Omega_0 + \sum_i \frac{(\mathrm{EDD})_i}{S_i} \tag{2.14}$$

وبالتالي المشكلة المطروحة هي كيفية إيجاد كل المخططات المتمايزة الأساسية EDDs عند رتبة نشر معينة n؟ففي السابق اقترحت الكثيرمن الخوارزميات [20-26] وذلك من أجل إيجاد حل لهذه المشكلة مع بعض من الاختلافات.

التقنية الأساسية المستخدمة لإيجاد EDDs :هي ترتيب كل القيم nفي سلسلة متتالية من الأعداد الطبيعية، حيث تمثل كل قيمةτ_iمن مجموع القيم$n \geq i \leq 1$على شكل عددين طبيعيين متتاليين، حيث يمثلان مؤثري الإنشاء $a^+_{s_i}(\tau_i)$ و$a^+_{r_i}(\tau_i)$، بينما موضع العددين من السلسلة يمثلان مؤثري الهدم $a_{l_i}(\tau_i)$ و $a_{m_i}(\tau_i)$،أي أنه قبل أن نقوم بعملية الربط فإنه يمكن تمثيل كل مخطط على الشكل التالي:

$$D_0 = (1,2|3,4| \dots |2i-1,2i| \dots |2n-1,2n) \tag{2.15}$$

حيث مثلنا في المخطط (2.15) كل قيمة τ_i بعددين متتاليين $2i-1,2i$، أما عملية الربط بين مؤثري الإنشاء والهدم فيمكن إيجادها عن طريق عملية المبادلة بين الأعداد $2i$ أو$2i-1$مع $2j$ أو$2j-1$ حيث $i \neq j$.

حيث أنه عند كل تبديلة تعطينا مخطط مكافئ.للعثور على المخططات المتمايزة EDDs، فإن الطريقة المستخدمة هي أيضا تعتمد غلى القيام بعملية المبادلة بين زوجي أعداد القمم τ_i و τ_jلكل مخطط مكافئ على حدى ومقارنته مع المخططات المتمايزة السابقة EDDs

لكن هذه الطريقة تأخذ وقتا ومساحة كبيرين جداً، لأننا نحتاج فيها إلى حفظ جميع المخططات المتمايزة السابقة في الذاكرة العشوائية (RAM) الخاصة بالكمبيوتر (مساحة كبيرة) ثم يجب علينا التنقل على جميع المخططات المتمايزة السابقة EDDs في كل عملية مقارنة (وقت أكبر).

حيث عثرنا على طريقة جديدة مستخدمة في المرجع [27]مختلفة عن الطرق الكلاسيكية القديمة كما أنها لا تحتاج إلى أي مقارنة مع المخططات المتمايزة السابقةEDDs (للتعرف على هذه الطريقة يمكن الإطلاع على المرجع[27]).

إن موضوع هذا الفصل ليس في كيفية إيجاد المخططات المتمايزة EDDsولكن في طريقة كيفية إيجاد العبارة التحليلية لكل مخطط متمايز EDD وطباعتها بطريقة آلية وذلك باستخدام خوارزميات مستحدثة.

2. حساب القيمة التحليلية للمخطط غير قابل للاختزال من الدرجة الثانية

ولفهم الطرق المستخدمة في الحساب هنا، يمكننا بالبدأ من أبسط حالة والمتمثلة في الوصول لعبارة التحليلية للمخط غير قابل للاختزال من الدرجة الثانية، الموضح في الشكل 2.2، حيث يمكن في البداية كتابة مساهمة الطاقة الحرة له على النحو التالي[16]:

$$\Omega_2 = \frac{1}{8} V^{p_1p_2}_{p_3p_4} V^{p_3p_4}_{p_1p_2} I_2 \tag{2.16}$$

حيث :

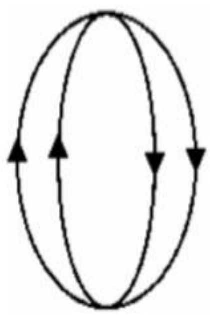
$$I_2 = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \int_0^\beta g_{p_1}(\tau_1-\tau_2)g_{p_2}(\tau_1-\tau_2)g_{p_3}(\tau_2-\tau_1)\, g_{p_4}(\tau_2-\tau_1)\, d\tau_1 d\tau_2 \tag{2.17}$$

لتوضيح الطريقة المستخدمة لحساب قيمة التكامل I_2 الموجودة في العبارة (2.17)، نقترح طريقتين أساسيتين: الطريقة المباشرة وكذلك طريقة المخططات.

3.1. الطريقة المباشرة

لحساب التكامل على المجال $[0,\beta]$، فمن الضروري إستخدام تحويل فوريي للتحول من الزمن التخيلي τإلى الترددات.

تحويل الناشر (2.10)، أو ما يعرف بمجموع ما تشيبارا Matsubara sum[29]، يكتب على الشكل التالي:



الشكل 2.2. المخطط غير المختزل للطاقة الحرة من الدرجة الثانية.

$$g_p(\tau-\tau') = \frac{1}{\beta}\sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\zeta_m(\tau-\tau'-n\theta)}}{E_p-\zeta_m}, \tag{2.18}$$

في العلاقة (2.18)، المتغير المركب ζ_m يميز لنا النظام المدروس، حيث $\zeta_m = i\frac{\pi}{\beta}(2m)$إذا كانت الجسيمات المدروسة عبارة عن بوزونات و $\zeta_m = i\frac{\pi}{\beta}(2m-1)$إذا كانت الجسيمات عبارة عن فرميونات.

الثابت θ هو عدد عنصري موجب صغير جداً $\theta \to 0^+$، أما nفهو عدد طبيعي عشوائي موجب غير معدوم، لقد اخترنا في العلاقة (2.18) الثابت العنصري $\eta = n\theta$وهذا لتجنب صعوبة بعض الحالات

وذلك عندما نحسب النهاية $\eta \to 0^+$.يمكن كذلك كتابة المقادير الإحصائية (2.11) في تمثيل ما تشيبارا [29]على النحو التالي:

$$f_p^{\pm} = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{0\pm\zeta_m}}{E_P - \zeta_m} \tag{2.19}$$

أماالآن نعوض مجموع ما تشيبارا (2.18) في التكامل (2.17)، ونكامل τعلى المجال الزمني$[0,\beta]$، نتحصل على النتيجة:

$$I_2 = \frac{1}{\beta^3} \sum_{m_1 m_2 m_3 m_4} \delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}} \prod_{i=1}^{4} \frac{e^{\zeta_{m_i} n_i \theta}}{(E_{P_i} - \zeta_{m_i})} \tag{2.20}$$

حيث $\delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}}$ هي دلتا كرونكر والتي تمثل قانون الإنحفاظ بين الخطوط الواردة ζ_{m_1}, ζ_{m_2}والخطوط الصادرة ζ_{m_3}, ζ_{m_4}. لحساب المجموع (2.20) فمن الواضح أنه من الضروري التخلص من الحفظ$\delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}}$، لذلك نضرب العلاقة(2.20)بالكمية:

$$\frac{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4} + \zeta_{m_1} + \zeta_{m_2} - \zeta_{m_3} - \zeta_{m_4}}{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4}} \tag{2.21}$$

في الحقيقة الكمية (2.21) تساوي 1.

نقوم الآن باختصار كحد $E_{p_i} - \zeta_{m_i}$من بسط الكمية (2.21) مع ما يقابله من مقام العلاقة (2.20)، فنتحصل على أربعة حدود أولية:

$$I_2 = I_2^1 + I_2^2 + I_2^3 + I_2^4 \tag{2.22}$$

حيث:

$$I_2^1 = \frac{1}{\beta^3 \left(E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4}\right)} \sum_{m_2 m_3 m_4} \frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_2-n_1)} e^{\zeta_{m_3}\theta(n_3+n_1)} e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4+n_1)}}{\left(E_{p_2} - \zeta_{m_2}\right)\left(E_{p_3} - \zeta_{m_3}\right)\left(E_{p_4} - \zeta_{m_4}\right)}, \tag{2.23}$$

$$I_2^2 = \frac{1}{\beta^3\left(E_{p_2}+E_{p_1}-E_{p_3}-E_{p_4}\right)}\sum_{m_1m_3m_4}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_1-n_2)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_3+n_2)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4+n_2)}}{\left(E_{p_1}-\zeta_{m_1}\right)\left(E_{p_3}-\zeta_{m_3}\right)\left(E_{p_4}-\zeta_{m_4}\right)},$$
$$I_2^3 = \frac{1}{\beta^3\left(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}\sum_{m_1m_2m_4}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_1+n_3)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_2+n_3)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4-n_3)}}{\left(E_{p_1}-\zeta_{m_1}\right)\left(E_{p_2}-\zeta_{m_2}\right)\left(E_{p_4}-\zeta_{m_4}\right)},$$
$$I_2^4 = \frac{1}{\beta^3\left(E_{p_4}+E_{p_3}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}\sum_{m_1m_2m_3}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_1+n_4)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_2+n_4)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_3-n_4)}}{\left(E_{p_1}-\zeta_{m_1}\right)\left(E_{p_2}-\zeta_{m_2}\right)\left(E_{p_3}-\zeta_{m_3}\right)}.$$

نختار قيم الأرقام$n_i > 0$ بطريقة يكون فيها المجموع $\sum_i n_i$ في الأس $e^{\zeta_m\theta(\sum_i n_i)}$ لايساوي الصفر. مثلا نختار القيم $n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 2, n_4 = 1$، بعد تطبيق النهاية$\theta \to 0^+$،نجد ما يكافئ كل معامل إحصائي $f_p^\pm$من العلاقة (2.19).

وبالتالي،فالحدود الأربع من العلاقة (2.23)يمكن إعادة صياغتها على الشكل:

$$\begin{aligned} I_2^1 &= \frac{1}{\left(E_{p_1}+E_{p_2}-E_{p_3}-E_{p_4}\right)}f_{p_2}^-f_{p_3}^-f_{p_4}^-,\\ I_2^2 &= \frac{1}{\left(E_{p_2}+E_{p_1}-E_{p_3}-E_{p_4}\right)}f_{p_1}^-f_{p_3}^-f_{p_4}^-,\\ I_2^3 &= \frac{1}{\left(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}f_{p_1}^-f_{p_2}^-f_{p_4}^-,\\ I_2^4 &= \frac{1}{\left(E_{p_4}+E_{p_3}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}f_{p_1}^-f_{p_2}^-f_{p_3}^-. \end{aligned} \tag{2.24}$$

بسبب التناظر، جداء الكمون$V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}$لا يتغيرعند تطبيق التحويلات $p_4 \to p_3, p_3 \to p_4$ في I_2^2 والتحويل الأخير يطبق على المقدار I_2^3و$p_3 \to p_1, p_1 \to p_3, p_4 \to p_2, p_2 \to p_4$ في I_2^1للتحولات $p_3 \to p_2, p_2 \to p_3, p_4 \to p_1, p_1 \to p_4$،ومن العلاقة (2.16) نجد القيمة النهائية ل Ω_2 كما يلي:

$$\Omega_2 = \frac{1}{4}\frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}f_{p_1}^-f_{p_2}^-\left(f_{p_3}^+ + f_{p_3}^-\right)}{\left(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)} \tag{2.25}$$

ملاحظة :

يمكننا إختيار قيم أخرى لـ n_i، على سبيل المثال:

$n_1 = 1, n_2 = 2, n_3 = 2, n_4 = 1$ أو $n_1 = 1, n_2 = 4, n_3 = 2, n_4 = 3$

ولكن النتيجة تبقى نفسها مطابقة لـΩ_2 في (2.25).

3.2. طريقة المخططات

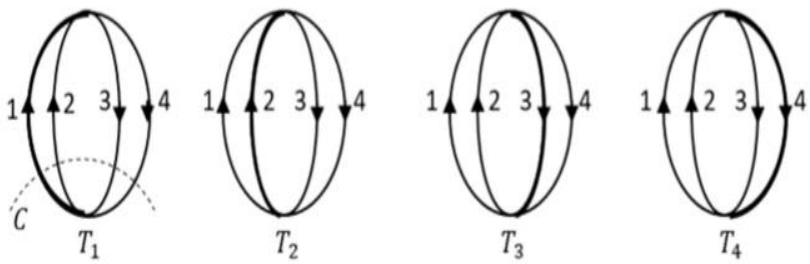
الفكرة الأساسية المعتمدة لطريقة المخططات هي تحليل جداء الناشر (2.10) المرتبط بالخطوط الداخلة أو الخارجة من قمم مخطط معين إلى كسور جزئية, حيث يساهم كل كسر في العبارة الكلية للطاقة الحرة.

حيث نرسم على المخططG_1من الشكل 2.2 جميع الأشجار الممكنة، أي نرسم جميع المخططات الممكنة التي تربط جميع قمم المخطط ولا تحوي حلقة(دورة) .

فنلاحظ أن هناك أربعة أشجارممكنة $T_i, i = 1, \ldots, 4$للمخطط G_1.الشكل 3.2 يبين جميع الأشجار الممكنة للمخطط G_1.

حيث تثمل الخطوط السميكة الشجرة T_i، بينما الخطوط الرفيعة تمثل الشجرة المكملة للمخطط G_1.

كما أننا نعلم أن الطاقة الحرة هي عبارة عن مجموعة من الكسور، كل كسر هو عبارة عن شجرة T_i، حيث يمثل مقام الكسر الخطوط السميكة للشجرة T_i، بينما الشجرة المكملة فيمكن استخراج بسط الكسر منها.



الشكل 3.2. جميع الأشجار الممكنة لمخطط من الدرجة الثانية.

أما الآن نبين طريقة حساب مقدار مساهمة الشجرة T_1من الشكل 3.2 في كمية الطاقة الحرة للمخطط G_1.

الخط السميك 1 يمكن استخراج مقام الكسر منه والمتعلق بالطاقة، حيث أن الخطوط الرفيعة2، 3 4 فيمكن استخلاص بسط الكسر والمرتبط بالمعاملات الإحصائيةf^+أوf^-.

حيث:

(1) **مقام الكسر**: لتحديد المقام D_1 لـ T_1،نقسم المخطط T_1إلى جزئين منفصلين بحيث يمر المقص عبر فرع واحد فقط (شرط إلزامي أن يمر المقص على فرع واحد سميك من فروع الشجرة) من

الشجرة (الخط السميك)، نرمز لعملية القص هذه بالرمز C في الشكل 3.2، يمكن حساب المقام مباشرة فنجده$D_1 = +E_1 + E_2 - E_3 - E_4$.

حيث وضعنا إشارة + على طاقة الخط الوحيد السميك 1 من الشجرة T_1التي مر عليها المقص، بينما إشارات الطاقات الأخرى 2، 3 و 4 فيمكن إيجادها نسبتاً إلى اتجاه الخط 1، حيث تكون موجبة إذا كانت في نفس اتجاه الخط 1 وتكون سالبة اذا كانت في الاتجاه العكسي للخط 1.

(2) بسط الكسر:هنا كل خط من الشجرة المكملة i يقابله معامل إحصائي f_i^+ أو f_i^-. يبقى الآن، كيفية العثور على العلامة$sign_i$ (+ أو -) الموجودة في المعامل الإحصائي$f_i^{sign_i}$. بدايتاً نلاحظ أن إضافة أي خط من الشجرة المكملة إلى خطوط الشجرة الممتدة T_i يشكل دورة أساسية (حلقة أساسية).

مفهوم 1: معامل الحافة O_i:هو رقم طبيعي غير معدوم$n_i > 0$مرتبط بالخط i.

مفهوم 2:نعرف الاتجاه الكلي O_i لكل دورة (حلقة) كما يلي:وهو عدد صحيح غير معدوم، يمكن تمثيله عن طريق التجول على الخطوط المشكلة للدورة (الحلقة)، حيث نقوم في كل مرة بجمع أو طرح في كل مرة قيمة معامل الحافة لكل خط،ثم نبدأ الحساب من معامل الحافة n_i ونجمع معاملات الحواف للخطوط التي تكون في نفس اتجاه الخط i، ونطرح معاملات الحواف للخطوط المعاكسة للخط i. نتحصل في الأخير على:

$$O_i = n_i^+ - n_i^- \tag{2.26}$$

حيث n_i^+ هو المجموع الكلي لمعاملات الحواف للخطوط المتجهة في نفس اتجاه الخط i، و n_i^-يمثل المجموع الكلي لمعاملات الحواف للخطوط المعاكسة للخط i.

ومنه يمكن تحديد العلامة $sign_i$كما يلي:

$$sign_i = [O_i] = \frac{O_i}{|O_i|} \tag{2.27}$$

حيث استخدمنا الأقواس $[O]$للدلالة على العلامة، وهذا لتسهيل الكتابة فقط.

إذن من التعريفين السابقين فإن الاتجاه الكلي لكل دورة (حلقة) في T_1من الشكل 3.2، وذلك لكل خط مكمل2، 3 و4هم:

بالنسبة للخط 2: $O_2 = n_2 - n_1$؛

بالنسبة للخط 3: $O_3 = n_3 + n_1$؛

بالنسبة للخط 4: $O_4 = n_4 + n_1$.

و في الاخير مما سبق فإن مساهمة الشجرة T_1 هي:

$$I_2^1 = \frac{f_2^{[n_2-n_1]} f_3^{[n_3+n_1]} f_4^{[n_4+n_1]}}{(E_1 + E_2 - E_3 - E_4)} \tag{2.28}$$

وبنفس الطريقة يمكننا حساب مساهمات الأشجار الأخرى T_2، T_3 و T_4:

$$\begin{aligned} I_2^2 &= \frac{f_1^{[n_1-n_2]} f_3^{[n_3+n_2]} f_4^{[n_4+n_2]}}{(E_2 + E_1 - E_3 - E_4)}, \\ I_2^3 &= \frac{f_1^{[n_1+n_3]} f_2^{[n_2+n_3]} f_4^{[n_4-n_3]}}{(E_3 + E_4 - E_1 - E_2)}, \\ I_2^4 &= \frac{f_1^{[n_1+n_4]} f_2^{[n_2+n_4]} f_3^{[n_3-n_4]}}{(E_4 + E_3 - E_1 - E_2)}. \end{aligned} \tag{2.29}$$

أخيراً نختار قيم معامل الحافة $n_i > 0$ بحيث لا تنعدم كل الاتجاهات O_i لكل الأشجار T_i.

نأخذ الإختيار الكيفي: $n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 2, n_4 = 1$

و منه فنحصل على نفس النتائج السابقة في (2.24) من الطريقة المباشرة.

ومنه فإننا نختار طريقة المخططات لأنها الأسهل والقابلة للبرمجة، لذلك نحن بحاجة لدراسة بعض المسائل المعروفة في نظرية المخططات.

ليكن $G = (n, m)$ مخططا متصلاً يحوي n قمة و m حافة (خط).

مفهوم3: الشجرة الممتدة T(*Spanning tree*) هيكل مخطط فرعي لـ G يتكون من جميع قمم G ولكن لا يحوي على دورات (حلقات) [44-46]،تسمى حواف الشجرة الممتدة T بالأغصان، العدد الكلي لأغصان الشجرة الممتدة يساوي $n - 1$.

مفهوم4:الشجرة المكملة T^* (cotree)للشجرة الممتدة Tفي Gوهي المخطط الذي يحوي كل حواف Gباستثناء أغصان الشجرة الممتدةT[45-46]حواف الشجرة المكملة تسمى أوتار (الشجرة المكملة ممكن أن تحوي دورات (حلقات))، عدد أوتار الشجرة المكملة هو$m - n + 1$.

مفهوم5:القَطع الأساسي هو عملية قَطع لغصن واحد فقط من أغصان الشجرة الممتدةTوعدد معين من أوتار الشجرة المكملةT^*، بحيث تؤدي هذه العملية إلى تقسيم المخططG إلى جزيئين هذه المجموعة من عمليات القطع والتي عددها $n - 1$تسمى مجموعة القَطع الأساسية. يتم تحديد إتجاهات مجموعة القطع الأساسية وفق إتجاه غصن الشجرة المقطوع [46].

مفهوم6:الحلقات الأساسية (الدورات الأساسية) هي حلقة تنتج بعد إضافة وتر واحد فقط من أوتار الشجرة المكملةT^*إلى الشجرة الممتدةT[45,47]، عدد الحلقات الأساسية الناتجة من مخطط Gهو $m - n + 1$حلقة.

الشكل 4.2يشرح لنا مثالاً توضيحياً لمخطط متصل $G(5,8)$ والذي يتكون من القممv_i،$1 \leq i \leq 5$ والحواف E_j،$1 \leq j \leq 8$، هذا المخطط يحوي مثال على شجرة ممتدةTوشجرة مكملة T^*، حيث Tمحددة بالأغصان$\{E_2, E_3, E_7, E_8\}$(الخطوط السميكة)،وأماT^* فممثلة بالأوتار$\{E_1, E_4, E_5, E_6\}$(الخطوط الرفيعة).مقام الكسر Dيمكن حسابه مباشرة من مجموعة القَطع الأساسية فنجد أن قيمته$D = C_2 C_3 C_7 C_8$ الموضحة في الشكل بالخطوط المتقطعة.

كما نلاحظ في الشكل4.2 ومن التعريف 5 فإن قيم القطع تساوي إلى:$C_2 = E_2 - E_1$، $C_3 = E_3 + E_5 - E_1 - E_4$، $C_7 = E_7 + E_4 - E_5 - E_6$، $C_8 = E_8 + E_4 - E_5 - E_6$.

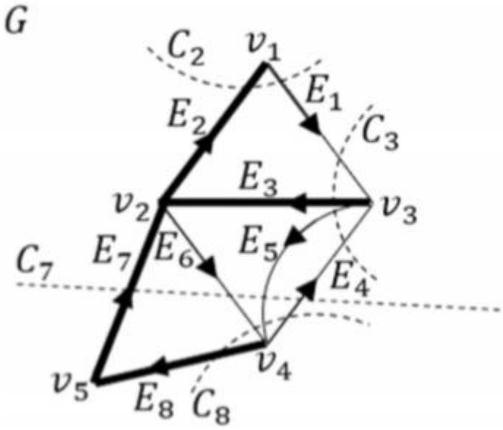
يمكن تحديد بسط الكسرNuمن أوتارالشجرة المكملة T^* فنجدمن الشكل: $Nu = f_1^{[O_1]} f_4^{[O_4]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]}$.

كما أنه يمكن كذلك إستخراج الإتجاهات الكلية $O_j; j = 1,4,5,6$من الحلقات الأساسية (مفهوم6) المرتبطة بالشجرة المكملة T^*فنجد باستخدام المفهوم2 للاتجاه الكلي أنها تساوي إلى:

$O_1 = n_1 + n_3 + n_2$، $O_4 = n_4 + n_3 - n_7 - n_8$، $O_5 = n_5 + n_7 + n_8 - n_3$، $O_6 = n_6 + n_7 + n_8$.

وبذلك فمساهمة الشجرة الممتدة T من الشكل 4.2 في الطاقة الحرة I_5^T هي:

$$I_5^T = \frac{f_1^{[n_1+n_3+n_2]} f_4^{[n_4+n_3-n_7-n_8]} f_5^{[n_5+n_7+n_8-n_3]} f_6^{[n_6+n_7+n_8]}}{(E_2 - E_1)(E_3 + E_5 - E_1 - E_4)(E_7 + E_4 - E_5 - E_6)(E_8 + E_4 - E_5 - E_6)} \quad (2.30)$$



الشكل 4.2. مثال على مخطط متصلG: تمثل الخطوط السميكة مثالًا على شجرة ممتدةT، حيث تمثل الخطوط الرفيعة الشجرة المكملةT^* المرتبطة بـ T.

مجموعة القَطع الأساسية ممثلة بالخطوط المتقطعة. التشكيلات$\{v_1, v_3, v_4\}$و$\{E_2, E_3, E_8\}$تمثل على التوالي: نهايات القمم وأغصان الشجرة الممتدة T.

الصيغة العامة Ω_n^G لمساهمة مخطط متصل $G(n,m)$في الطاقة الحرة هي:

$$\Omega_n^G = \sum_{All\ Spanning\ Trees} \frac{\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{[O_j]}}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} \tag{2.31}$$

حيث $C_i; i = 1, n-1$تمثل مجموعة القَطع الأساسية (تعريف 5) للشجرة الممتدة T (تعريف 3)، و$[O_j]$يمثل إشارة الاتجاه الكلي(تعريف 2) لكل حلقة أساسية (تعريف 6) j من الشجرة المكملةT^*(تعريف 4). نتيجة لذلك، طريقة المخططات لحساب الطاقة الحرة Ω_n^G تم اختصارها في أربع مسائل أساسية معروفة في نظرية المخططات وهي:

(1) إحصاء جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل.

(أ) إيجاد مجموعة القَطع الأساسية لكل شجرة ممتدة T.

(ب) إيجاد الحلقات الأساسية لكل شجرة مكملةT^*.

(2) إحصاء جميع حلقات (دورات) مخطط متصل، وذلك لإيجاد قيم معاملات الحوافn_iمرة واحدة (تعريف 1).

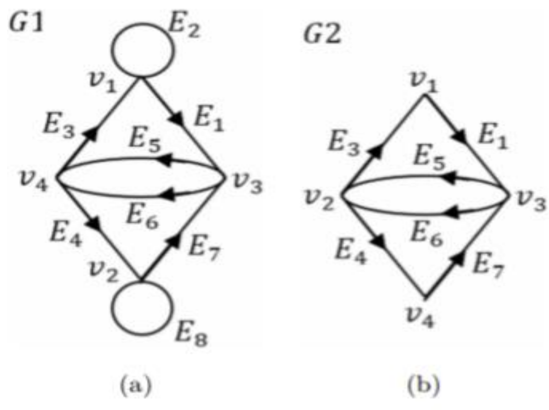
5. إحصاء الأشجار الممتدة

حيث تم تطوير العديد من خوارزميات لإحصاء الأشجار لمخطط متصل [30-37]، في هذا الفصل سوف نتطرق إلى الخوارزمية الجديدة [29] والتي تختلف عن سابقاتها، حيث تعتمد على طريقة الحذف والانكماشcontraction-deletion. سنعرض تفاصيل هذه الخوارزمية في الإجراءات التالية:

1.5. إجراءات التهيئة

قبل البدء في عملية إيجاد جميع الأشجار الممتدة لمخطط متصل $G(n,m)$، يجب أن نهيئ المخطط وذلك عن طريق الخطوات التالية:

- نحذف جميع حلقات هارتري-فوك(Hartree-Fock loops) أو اختصاراً HFLإذا وجدت في المخطط، أي تلك الحلقات التي تحوي قمة وحافة وحيدتين وتبدأ وتنتهي في نفس القمة.
- حيث مساهمة كل حلقة من حلقات HFLهي f_k^-، حيث k هورقم الحافة الخاص بهذه الحلقة، ويتم حسابها كعامل مشترك؛
- استخدم البحث العميقdepth-first search، أو ما يعرف اختصاراً بـ DFS[48]، وذلك لإيجاد شجرة ممتدة عشوائية للمخطط المتصل G؛
- إعادة ترقيم قمم المخطط Gوفقاً لترتيب القمم التي تمت مصادفتها أثناء عملية البحث العميق بـDFS.



الشكل 5.2. (a) G_1: مثال على مخطط هيجنهولتز من الدرجة الرابعة، (b) G_2: المخطط التمهيدي الذي تم الحصول عليه بعد تطبيق إجراءات التهيئة على المخططG_1.

الخطوتين (2) و (3) تجعل من قمم المخطط Gمتصلة بشكل مرتب من 1 إلى nبحيث كل قمةv_iتكون متصلة بالقمة السابقةv_{i-1}. يوضح الشكل 5.2 (a) مثالاً لمخطط هيجنهولتز G_1 من الدرجة الرابعة يحوي أربعة قممv_1, v_2, v_3, v_4وثمانية حواف $E_1, \dots\dots, E_8$،بينما الشكل 5.2 (b) يمثل المخططG_1

بعد إجراء التهيئة عليه،حيث نلاحظ من خلال مخطط المهيأ G_2 أن القمةv_4 متصلة مع القمة v_3بواسطةالحافةE_7، القمة v_3 متصلة مع القمة v_2بواسطة الحافة E_3 والقمة v_2متصلة مع القمةv_1بواسطة الحافةE_1.مساهمة حلقات هارتري-فوك(HFL) E_2 و E_8 الموضحة في الشكل 5.2 (a) هوf_8^- f_2^- وسنقوم بإضافة هذا المقدار في نهاية الحساب كعامل مشترك.

2.5.عملية الحذف والانكماش

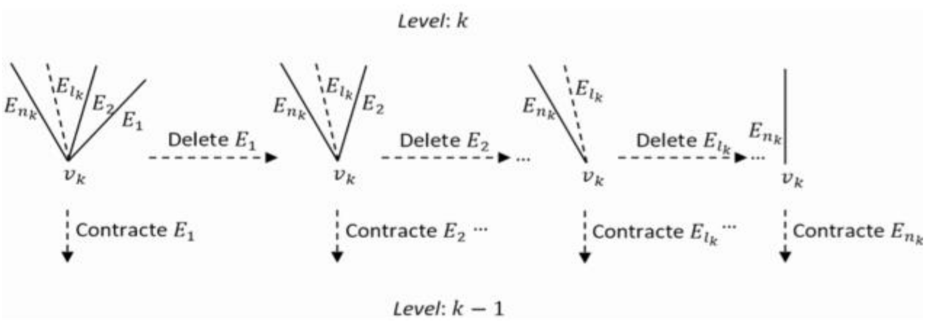
طريقة الحذف والانكماش تعمل على تحليل المخطط المهيأ $G(n,m)$إلى مخططات مقلصة متعددة المستويات $G^{(k,l_k)}$، حيث k يمثل المستوى $k=1,\dots,n$، بينما l_k يمثل رقم المخطط$1 \le l_k \le n_k$ و n_kهي عدد الحواف الخارجة من القمة v_k. بحيث في كل مستوى k، نحذف كل حافة خارجة من القمة v_k ونكمش على طول هذه الحافة (أي نجمع القمة v_k مع القمة المجاورة لها والمتصلة بها بواسطة الحافة المحذوفة)

الشكل 6.2يبين عملية الحذف والانكماش في المستوى k،أثناء هذه العملية نتعرض أحياناً لحواف متوازية تربط بين القمة v_k وقمة مجاورة لها ومنه يجب حذفهم كلهم وكمشهم كذلك كلهم مثلهم مثل حافة واحدة.

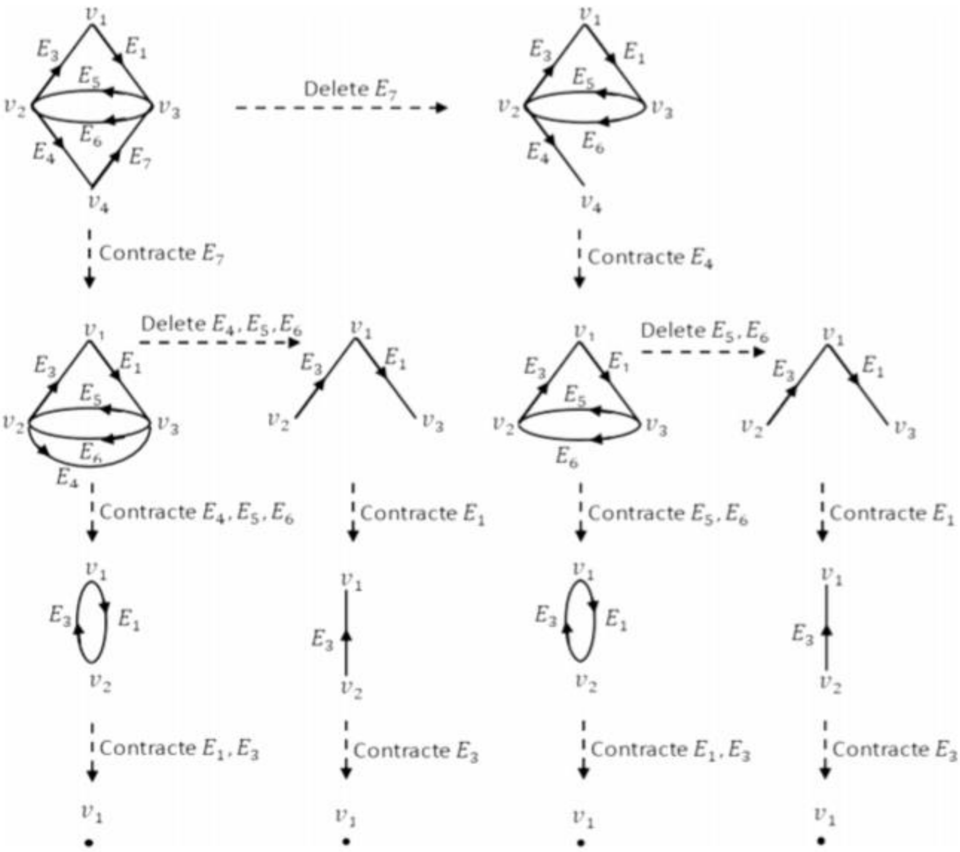
حيث نعيد هذه العملية بشكل متكرر بدءاً من المستوى nووصولاًإلى المستوى 1.

طريقة الحذف والإنكماش تساعدنا على ضغط جميع الحواف المتوازية

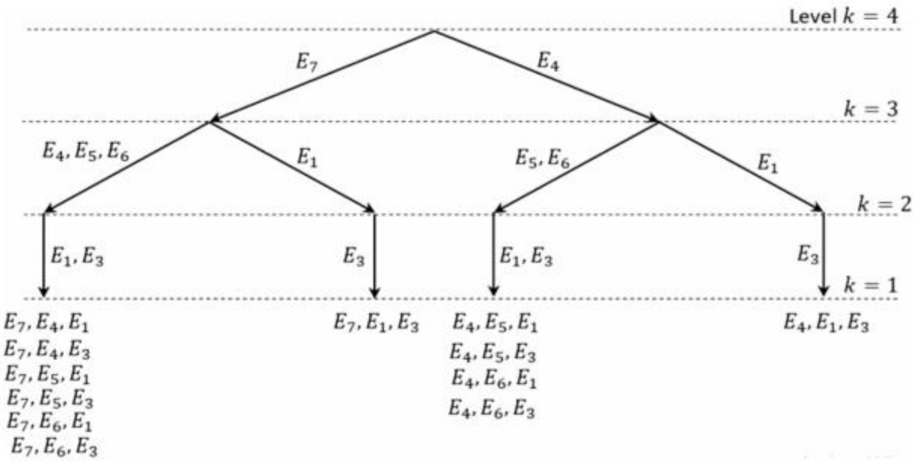
الشكل 7.2 يبين عمليات الحذف والانكماش للمخطط المهيأ G_2 والموضح سابقاً في الشكل 5.2 (b)، شجرة تدفق الحساب السابق موضحة في الشكل 8.2 (الأشجار المضغوطة) حيث يمثل كل سهم مجموعة من الحواف المتوازية.



الشكل 6.2.عملية الحذف والانكماش في المستوى k.



الشكل 7.2.عملية الحذف والانكماش للمخططG_2.



الشكل 8.2. مخطط الشجرة (الشجرة المضغوطة) للمخططG_2.

3.5. خوارزمية الضغط وإزالة الضغط للشجرة الممتدة (*CDST*)

كما اقترحت حديثاً خوارزمية جديدة لإحصاء الأشجار الممتدة، حيث تعتمد على عملية الحذف والانكماش[20]. تتمحور الفكرة الرئيسية لهذه الخوارزمية على تصنيف مواضع حواف المخطط وفقا للتمثيل الثنائي للعدد الطبيعي.

ليكن $G = (V, E)$ مخطط متصل مهيأ (مخطط مهيأ يعني أنه تم الحصول عليه بعد إجراء عملية التهيئة (1.5))، بينما V تمثل مجموعة القمم $V = \{v_n, v_{n-1}, \dots, v_1\}$ حيث E تمثل مجموعة الحواف $E = \{E_m, E_{m-1}, \dots, E_1\}$، يتم فرز الحواف بترتيب تنازلي، كما تمثل لنا كذلك قيم الطاقات.

لتكن $\mathrm{Edg}(j, i)$، $j = 2,3, \dots, n$ و$i = 1,2, \dots, j-1$، تمثل مجموعة الحواف في G التي تربط بين قمم j و i ومرتبة بترتيب متزايد وفقًا لموقعها في E. الحواف E_k من المجموعة E ممثلةفي النظامالثنائي، أي نضع:

$$E_k = 2^{k-1} \tag{2.32}$$

الترميز (2.32) يساعدنا على تمثيل الحواف $\mathrm{Edg}(j, i)$ على شكل أعداد طبيعية غير معدومة.

لتكن $\mathrm{LE}(j), j = 2,3, \dots, n$ المجموعة j التي تحوي الأعداد الطبيعية $\mathrm{Edg}(j, i)$:

$$\mathrm{LE}(j) = \{\mathrm{Edg}(j, i); 1 \le i < j\}; \;\; 2 \le j \le n. \tag{2.33}$$

عل سبيل المثال، في المخطط G_2 من الشكل 4 (*b*)،لدينا

$$\begin{gathered} \mathrm{LE}(4) = \big\{\{\quad\}, \{E_4\}, \{E_7\}\big\}, \\ \mathrm{LE}(3) = \big\{\{E_1\}, \{E_5, E_6\}\big\}, \\ \mathrm{LE}(2) = \big\{\{E_3\}\big\}. \end{gathered} \tag{2.34}$$

في المثال (2.33) الحوافE_5وE_6من المجموعة $\mathrm{LE}(3)$عبارة عن حواف متوازية. باستخدام التمثيل (2.32) للحواف نجد:

$$\begin{aligned} \mathrm{LE}(4) &= \{0, 2^3, 2^6\} = \{0,8,64\}, \\ \mathrm{LE}(3) &= \{2^0, 2^2 + 2^5\} = \{1,48\}, \\ \mathrm{LE}(2) &= \{2^2\} = 4. \end{aligned} \tag{2.35}$$

حيث الآن نطبق الخوارزمية العددية التالية التي تعتمد على عمليتين حسابيتين:

العملية (+) أو (*OR*) للانكماش .

العملية (-) أو (*XOR*) للحذف.

$k = n$

$\boldsymbol{Compression}(k)$

$\boldsymbol{if}\ k == 1\ \boldsymbol{then}$

SaveLeft Bits$(\mathrm{Edg}(k, i), k)$

Do$j = 1, j < i$

$Edg(i, j) = Edg(i, j) + Edg(k, j)$

end do

Compression$(k - 1)$

Comment: DEdg$(i, j) = Edg(i, j) - Edg(k, j)$

end do

end do

end if

end compression

حيث $\mathrm{CTr} = \{a_0, a_1, \dots, a_k, \dots, a_{n-2}\}$هي عبارة عن مجموعة من الأعداد الطبيعية a_k والتي تمثل الأشجار المضغوطة (الضغط معناه مجموع الحواف المتوازية).

ولفك ضغط a_k يجب علينا استخراج بت *Bit*أقصى يمين (أو أقصى يسار) كل عدد صحيح منa_k المجموعة CTrبواسطة العملية $a_k(AND)(NOT)(a_k - 1)$ ، ثم نحفظ هذا العدد الطبيعي في السلسلة المترابطة$LB(k, i)$، وهذا ما سوف تقوم به الدالة *SaveLeftBits*. عدد الحواف*nb* (هذا يعني عدد البتات *bits*) في a_k يمكن حسابهاخلال هذه العملية.

SaveLeftBits(a_k, k)

nb=0

While$a_k \neq 0$

LB$(k, nb) = a_k(KND)(NOT)(a_k - 1)$

$a_k = a_k(XOR)LB(k, nb)$

nb=nb+1

end while

Number Of Bits(k)=nb

endSaveLeft Bits.

العملية النهائية هو فك ضغط الأعداد الطبيعية a_k الموجودة فيCTr، وهذا يعني عملية جمع كل بيت من a_i مع كل بيت منa_jلكل$j = 0, \dots, n-2; j \neq i$. خوارزمية فك الضغط التالية يمكنها نشر CTr وطباعة جميع الأشجار الممتدة Tr على شكل أعداد طبيعية غير معدومة.

Tr = 0

Decompression(k)

If k == 1 **then**

Print: Tr

else

do$i = 0, i < NumberOfBits(k)$

Tr = Tr $+$LB(k, i)

Decompression(k$-$ 1)

Tr = Tr$-LB(k, i)$

end do

end if

end decompression

على سبيل المثال، الأشجار الممتدة المضغوطة الناتجة من تطبيق خوارزمية الضغطcompressionعلى المخططG_2الموضح في الشكل 5.2 (b) هم:

$$\begin{gathered}\{64,56,5\} \\ \{64,1,4\} \\ \{8,48,5\} \\ \{8,1,4\}\end{gathered} \tag{2.36}$$

ومنه نتحصل على الأشجار الممتدة بعد تطبيق خوارزمية إزالة الضغط **decompression**على الأشجار المضغوطة (2.36):

$$73,76,81,84,97,100\ ;69\ ;25,28,41,44\ ;13. \quad (2.37)$$

الأرقام الطبيعية (2.37)تكتب على التوالي في تمثيل النظام الثنائي على الشكل:

$$\begin{aligned} &01001001;\ 01001100;\ 01010001;\ 01010100;\ 01100001;\ 01100100; \\ &01000101;\ 00011001;\ 00011100;\ 00101001;\ 00101100;\ 00001101; \end{aligned} \quad (2.38)$$

في التمثيل (2.38)،يمثل البت 1 لكل عدد طبيعي الموضع المناسب لحافة الشجرة الممتدة وفقًا لقائمة الحواف$E = \{E_1, E_2, \dots, E_8\}$الخاصة بالمخطط$G_2$ من الشكل 5.2 (b)، أي أن أغصان كل شجرة ممتدة لهذا المخطط هي على الترتيب:

$$\begin{aligned} &01001001 \to \{E_7, E_4, E_1\}, 01001100 \to \{E_7, E_4, E_3\}, 01010001 \to \{E_7, E_5, E_1\}; \\ &01010100 \to \{E_7, E_5, E_3\}, 01100001 \to \{E_7, E_6, E_1\}, 01100100 \to \{E_7, E_6, E_3\}; \\ &01000101 \to \{E_7, E_3, E_1\}; 00011001 \to \{E_5, E_4, E_1\}, ; 00011100 \to \{E_5, E_4, E_3\}; \\ &00101001 \to \{E_6, E_4, E_1\}, 00101100 \to \{E_6, E_4, E_3\}; 00001101 \to \{E_4, E_3, E_1\}, \end{aligned} \quad (2.39)$$

وهي نفسها الأشجار الممتدة الموجودة في مخطط الشجرة (الشكل 8.2).

المساحة المطلوبة لتخزين كل شجرة ممتدة على الذاكرة هي $O(1)$لأنها مخزنة كعدد طبيعي، حيث أن الوقت اللازم لتوليد كل الأشجار الممتدة لبعض المخططات المتصلة$G(n, m)$مكونةمنnقمة و mحافة، وذلك باستخدام جهاز الكمبيوتر المنزلي($Intel\ I3, RAM\ 4\ G, 64\ Bits$) هو :

- $G(19,38)$يولد 4980736 شجرة ممتدة في 0.6 ثانية.
-
- $G(20,40)$يولد 10485760 شجرة ممتدة في ثانية واحدة.
- $G(24,48)$يولد 201326592 شجرة ممتدة في 10 ثوانٍ.

فهذه النتيجة أفضل من حيث سعة التخزين وسرعة الأداء مقارنة بالخوارزميات السابقة[25,29]،برمجت الخوارزمية*CDST* باستخدام لغة*C/C++* (أنضر المرجع[41]).

6. خوارزمية استخراج المقام والبسط من الشجرة الممتدة

لحساب المقام (مجموعة القَطع الرئيسية) والبسط(الحلقات الأساسية) لمساهمة كسر في الطاقة الحرة،ومنه نتبع العملية التالية:

أ) الخطوة الأولية

المقام الأولي: نفرض أن المقام الأولي لكل قمة من الشجرة الممتدةTيساوي إلى الفرق بين طاقة الأسهم الواردة وطاقة الأسهم الصادرة من هذه القمة.

البسط الأولي: نفرض أن الاتجاهات الكلية الأولية هي معاملات الحافة لأوتار الشجرة المكملةT^*.

ب) الخطوات الوسطى

كما نقوم بعملية انكماش جميع نهايات أغصان الشجرة الممتدةT،وذلك بالجمع بين قمم نهايات أغصان الشجرة الممتدة والقمم المجاورة لها، حيث تؤدي هذه العملية إلى تقليص حجم الشجرة الممتدة

ومنه نسمي الشجرة الممتدة الناتجة من عملية الانكماش هذه بالشجرة الممتدة المنكمشة$T^{(1)}$، بينما نسمي الشجرة المكملة الناتجة بالشجرة المكملة المنكمشة $T^{*(1)}$، نقصد بالرقم (1) هنا أن عملية الانكماش هذه هي من الدرجة الأولى (أول عملية انكماش).çلا لهذه العملية فإن مقام وبسط الكسر يصبح:

المقام: مقام كل قمة نهاية غصن الشجرة الممتدة المنكمشة$T^{(1)}$هو مجموع مقامقمة نهاية غصن الشجرة الممتدةT ومقام القمة المجاورة لها.

البسط: معامل الحافة للشجرة المكملة المنكمشة $T^{*(1)}$ هو جمع أو طرح معامل الحافة لوتر الشجرة المكملة T^* ومعامل الحافة للغصن المنكمش المجاور، بحيث أننا نجمع (نطرح) المعامل إذا كان سهم الغصن المنكمش في نفس اتجاه (عكس اتجاه) وتر الشجرة المكملةT^*المشترك معه.

نقوم بتكرار عملية الانكماش على الشجرة الممتدة $T^{(1)}$ مما ينتج عنه الشجرة الممتدة$T^{(2)}$، ثم نعيد نفس العملية على هذه الشجرة، وهكذا حتى تتقلص الشجرة الممتدة وتصبح ذات غصن واحد فقط.

ج) الخطوة النهائية

المقام: حيث يجب أن تكون إشارة طاقة أغصان الشجرة الممتدة موجبة، لذلك نضرب المقام في -1 (+1) إذا كانت إشارة طاقة الغصن سالبة (موجبة).

البسط: نستمر في عملية انكماش الغصن الأخير من الشجرة الممتدة، ومن خلال ذلك نستنتج قيمة الاتجاهات الكلية والتي هي معاملات الحواف لأوتار الشجرة المكملة المنكمشة ذات القمة الوحيدة.

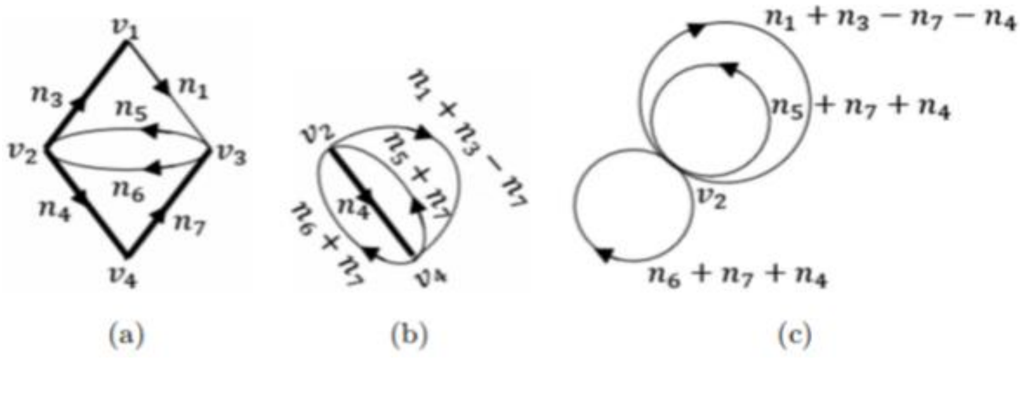
يبين لنا مثال الشكل 9.2 خطوات حساب المقام والبسط للشجرة الممتدة $T = \{E_7, E_4, E_3\}$من المخطط G_2الممثل في الشكل 5.2 (b).

<u>الخطوة الأولية</u>، نحسب المقامات الأولية لكل قمة (الشكل 9.2 (a))من المخطط فنجد:

$$\begin{aligned} D_{v_1} &= E_3 - E_1; \\ D_{v_2} &= E_5 + E_6 - E_3 - E_4; \\ D_{v_3} &= E_1 + E_7 - E_5 - E_6; \\ D_{v_4} &= E_4 - E_7. \end{aligned} \tag{2.40}$$

حيث نجد الاتجاهات الكلية الأولية للشجرة المكملة $T^* = \{E_1, E_5, E_6\}$ هي:

$$O_1 = n_1; O_5 = n_5; O_6 = n_6. \tag{2.41}$$



الشكل 9.2. خطوات حساب المقام والبسط، تمثل الأسهم السميكة (الرفيعة)أغصان (أوتار) الشجرة الممتدة (الشجرة المكملة).

في الخطوات الوسطى: نقوم بتطبيق عملية الانكماش على طول الغصنين النهائيين 3 و7 من الشجرة الممتدة، حيث أننا نجمع القمتين النهائيتين v_1 و v_3 مع القمتين v_2 و v_4 على الترتيب. وبذلك نحصل على تعدل مقامات القمم النهائية v_2وv_4في العلاقة (2.40) إلى:

$$\begin{aligned} D_{v_2} &= D_{v_2} + D_{v_1} = E_5 + E_6 - E_1 - E_4, \\ D_{v_4} &= D_{v_4} + D_{v_3} = -E_5 - E_6 + E_1 + E_4. \end{aligned} \tag{2.42}$$

من خلال هذه العملية، نجمع معامل الحافةn_3الخاص بالغصن النهائي 3 إلى معامل الحافة للوتر n_1 لأنهما في نفس الاتجاه وكذلك نطرح معامل الحافة n_7 الخاص بالغصن النهائي 7من معامل الحافة للوتر n_1حيث أنهما في اتجاهين مختلفين، بينما نضيف هذا المعاملn_7 إلى الوترين n_5و n_6 لأنهم في نفس الاتجاه (أنضر الشكل 9.2 (b))، وبذلك فقيم الاتجاهات الكلية لكل وتر (2.41)تصبح:

$$O_1 = n_1 + n_3 - n_7; O_5 = n_5 + n_7; O_6 = n_6 + n_7. \tag{2.43}$$

بما أن الشجرة الممتدة المنكمشة تحوي غصن واحد، إذن نخرج من هذه الخطوات.

في الخطوة النهائية:كما أننا نلاحظ في العلاقة (2.42) أن$D_{v_2} = -D_{v_4}$ومنه سوف نختار أحد المقامات D_{v_2}.

كذلك نضرب كل مقام في 1- إذا كانت علامة الطاقة الخاصة بأغصان الشجرة الممتدة Tسالبة.

كما نلاحظ فإن إشارة طاقة الغصن E_3 في المقامD_{v_1} و E_7 في المقامD_{v_3} موجبة، ومنه إذن لا نغيرها، كما نلاحظ أيضا إشارة طاقة الغصن E_4 سالبة في المقامD_{v_2}، إذن نضرب هذا المقام في -1، ومنه فالصيغة النهائية للمقامات هي:

$$\begin{aligned} D_{v_1} &= E_3 - E_1; \\ D_{v_2} &= E_4 + E_1 - E_5 - E_6; \\ D_{v_3} &= E_7 + E_1 - E_5 - E_6. \end{aligned} \tag{2.44}$$

للعثور على جميع معاملات الحافة للشجرة المكملة يجب علينا ضم(انكماش) الغصن النهائي 4 (أنظر الشكل 9.2 (c))، حيث نلاحظ أن الغصن 4 من الشكل 9.2 (b) في الاتجاه المعاكس للوتر 1 وفي نفس إتجاه الوترين 5 و6، إذن نطرح n_4 من O_1 ونجمعه مع O_5 و O_6 في العلاقة (2.43) فنتحصل على:

$$O_1 = n_1 + n_3 - n_7 - n_4; O_5 = n_5 + n_7 + n_4; O_6 = n_6 + n_7 + n_4. \qquad (2.45)$$

إذن باستعمال العلاقتين (2.44) و (2.45) نستنتج أن مساهمة الشجرة الممتدة$\{E_7, E_4, E_3\}$في الطاقة الحرة هي:

$$\frac{f_1^{[O_1]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]}}{D_{v_1} D_{v_2} D_{v_3}} = \frac{f_1^{[n_1+n_3-n_7-n_4]} f_5^{[n_5+n_7+n_4]} f_6^{[n_6+n_7+n_4]}}{(E_3 - E_1)(E_4 + E_1 - E_5 - E_6)(E_7 + E_1 - E_5 - E_6)} \qquad (2.46)$$

7

. قيم معاملات الحافة

من الضروري إيجاد القيم العشوائية لمعاملات الحافة O_i حيث$i = 1, \dots, m$،ولكن المشكلة المطروحة هنا هي أننا لا يمكننا تحديد n_i لكل شجرة ممتدة علىحِدَةٍ، بل يجب إيجاد قيم معاملات الحافة لكل الأشجار الممتدة الناتجة من مخطط متصل.

وبعبارة أخرى، نظرًا لأن معاملات الحافة مرتبطة بإيجاد الحلقات (الدورات)الرئيسية ، فمن الواضح أن هذا قد يؤدي إلى تحديد جميع حلقات (دورات) المخطط المتصل.

حيث يعد إحصاء جميع حلقات (دورات) مخطط متصل موضوعا أساسيا آخر في نظرية المخططات. فهناك العديد من الخوارزميات[38-43]المقترحة لحل هذه المسألة بسرعة ومساحة مثاليتين.

ففي هذا المجال،يمكننا أن نختار خوارزمية جيبس Gibbs[38]لأنها تمكننا من إيجاد جميع الحلقات (الدورات) بترميز النظام الثنائي.

كما أن هناك مشكلة في خوارزمية جيبس وهي أنها تأخذ مساحة من الذاكرة كبيرة جداً، ولحل هذه المشكلة اقترح [28] تعديل على هذه الخوارزمية،حيث تتمحور الخطوات الأساسية لهذا التعديل في الخوارزمية على ما يلي:

(1) إيجاد جميع الحلقات (الدورات) الأساسية من شجرة ممتدة عشوائية.
(2) الدمج بين جميع الحلقات الأساسية التي تم الحصول عليها من الخطوة 1.
(3) تحديد الحلقات الصحيحة فقط من بين الحلقات الناتجة من الخطوة 2.

سنوضح فيما يلي هذه الخطوات مع بعض من التفصيل:

الحلقات الأساسية: يمكن إيجاد الحلقات الأساسية من شجرة ممتدة T مختارة عشوائياً من مخطط متصل (تعريف6)،مجموعة الحلقات الأساسية هذه F_i حيث $i = 1,2,\ldots.,m-n+1$توفر أساسًا لتوليد جميع حلقات المخطط المتصل.

كل حلقة أساسيةO_iيمكن تمثيلها في النظامالثنائي وذلك باختيار كل حافة من هذه الحلقات حسب موقعها في المخطط$G = \{e_m,\ldots,e_k,\ldots,e_2,e_1\}$، حيث نمثل الحافة kفي النظامالثنائي على الشكل$e_k =$ 2^{k-1}.

الدمج: لتوليد جميع الحلقات الخاصة بالمخطط المتصل غير الموجه،فإننا نقوم بعملية دمج (تراكب) بين جميع الحلقات الأساسية وذلك بواسطة العملية XOR المستخدمة في نظام البت.

الحلقات الصحيحة: تولد عمليات الدمج بعض الحلقات المنفصلة، لأن التركيب بين حلقتين منفصلتين أو أكثر من خلال العملية XOR سوف يؤدي حتماً إلى حلقتين منفصلتين أو أكثر.

لذلك فكل دورة ناتجة من عملية الدمج يجب التحقق منها أنها غير منفصلة قبل الذهاب إلى عملية دمج أخرى.

تحتاج هذه الخوارزمية إلى$O(2^{m-n+1})$ عملية. في الأخير نتحصل على جميع حلقات المخطط المتصل Gعلى شكل أعداد طبيعية غير معدومة.

يمكن إيجاد كل الاتجاهات الكلية الممكنة للمخططGوذلك عن طريق تحويل جميع الحلقات وفقًا لإتجاه حوافها، فيتم إختيار قيم معاملات الحافة بشكل عشوائي بحيث لا تنعدم الاتجاهات الكلية.

على سبيل المثال، في الشكل 9.2(a)، الحلقات الأساسية للشجرة الممتدة$\{E_7, E_4, E_3\}$هي:

$$F_1 = \{E_1, E_3, E_4, E_7\} = 1001101,$$
$$F_2 = \{E_5, E_7, E_4\} = 1011000, \quad (2.47)$$
$$F_3 = \{E_6, E_7, E_4\} = 1101000.$$

الدمج بين كل حلقة أساسية للمجموعة (2.47) مع نظيرتها في هذه المجموعة يعطي:

$$F_4 = F_1(XOR)F_2 = 0010101 = \{E_5, E_3, E_1\},$$
$$F_5 = F_1(XOR)F_3 = 0100101 = \{E_6, E_3, E_1\}, \quad (2.48)$$
$$F_6 = F_2(XOR)F_3 = 0110000 = \{E_5, E_6\},$$
$$F_7 = F_1(XOR)F_2(XOR)F_3 = 111110 = \{E_7, E_6E_5, E_4E_3, E_1\}.$$

الحلقات الصحيحة في المجموعة (2.48) هي F_4،F_5،F_6، بينما الحلقة F_7 فهي غير صالحة لأنها تحتوي على حلقتان منفصلتان F_1وF_6.

ومن خلال ذلك نستنتج الاتجاهات الكلية لمجموعة الحلقات$O_i, i = 1, \ldots, 6$التالية:

$$O_1 = \pm(n_1 + n_3 - n_4 - n_7), O_2 = \pm(n_5 + n_4 + n_7),$$
$$O_3 = \pm(n_6 + n_4 + n_7), O_4 = \pm(n_5 + n_3 + n_1), \quad (2.49)$$
$$O_5 = \mp(n_6 + n_3 + n_1), O_6 = \pm(n_5 - n_6).$$

نظرًا لأن $n_i > 0$، فإننا نلاحظ من (2.49) أن قيم O_2،O_3،O_4وO_5تبقىدائمة موجبة أو سالبة تمامًا مهما كان n_i. مثال القيم العشوائية$n_1 = 2$، $n_3 = 1$، $n_4 = 1$، $n_5 = 2$، $n_6 = 1$ و $n_7 = 1$تجعل من الاتجاهات الكلية لا تنعدم أي$O_i \neq 0, i = 1, \ldots, 6$.

و بذلك يمكننا إيجاد المساهمة النهائية لمخطط الشكل 5.2 (a) في الطاقة الحرة، حيث نجد:

$$V_{34}^{12}V_{56}^{32}V_{17}^{56}V_{48}^{78}f_2^-f_8^-\sum_{i=1}^{8}T_i \tag{2.50}$$

حيث:

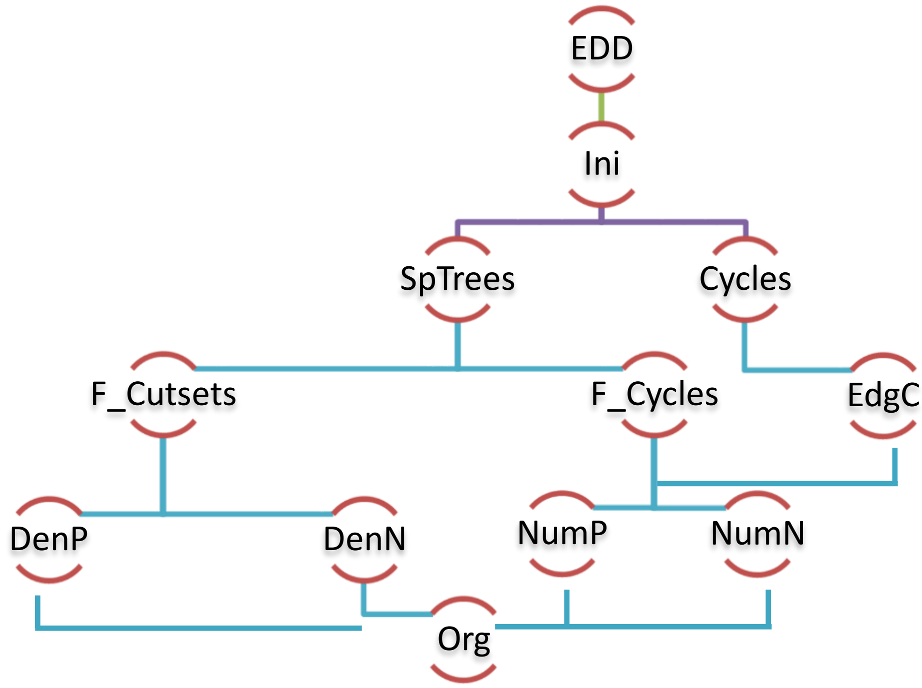
$$\begin{aligned}
T_1 &= \frac{f_1^-f_5^-f_6^-}{(E_3-E_1)(E_7+E_1-E_5-E_6)(E_7+E_1-E_5-E_6)},\\
T_2 &= \frac{f_3^-f_5^-f_6^-}{(E_1-E_3)(E_3+E_4-E_5-E_6)(E_3+E_7-E_5-E_6)},\\
T_3 &= \frac{f_4^+f_5^-f_6^-}{(E_7-E_4)(E_3+E_4-E_5-E_6)(E_1+E_4-E_5-E_6)},\\
T_4 &= \frac{f_7^+f_5^-f_6^-}{(E_4-E_7)(E_3+E_7-E_5-E_6)(E_1+E_7-E_5-E_6)},\\
T_5 &= \frac{f_3^-f_7^-(f_5^-+f_6^+)}{(E_4-E_7)(E_1-E_3)(E_5+E_6-E_3-E_7)},\\
T_6 &= \frac{f_1^-f_7^-(f_5^-+f_6^+)}{(E_4-E_7)(E_3-E_1)(E_5+E_6-E_1-E_7)},\\
T_7 &= \frac{f_3^-f_4^-(f_5^-+f_6^+)}{(E_7-E_4)(E_1-E_3)(E_5+E_6-E_3-E_4)},\\
T_8 &= \frac{f_1^-f_4^-(f_5^-+f_6^+)}{(E_7-E_4)(E_3-E_1)(E_5+E_6-E_1-E_4)}.
\end{aligned} \tag{2.51}$$

8. الدوال المستخدمة في البرنامج

بعد توليد المخطط المتمايزالأساسي (EDD) ومعامل تناظره باستخدام خوارزمية [27]،تقوم الدالة Ini على تهيئة المخطط (الشكل 5.2).بعد ذلك يأتي دور الدالتين المهمتين Cyclesو SpTrees، حيث:

- تقوم الدالة Cycles بإيجاد كل الحلقات لهذا المخطط المهيأ، حيث هنا يمكننا من العثور على جميع معاملات الحافة بمساعدةالدالة EdgC، وهذا ما يساعدنا في إيجاد إشارة أس المعاملات الإحصائية والتي تستخدم في حساب بسط الكسر الخاص بمساهمة الطاقة الحرة.

- تقوم الدالة SpTreesبتوليد كل الأشجار الممتدة من المخطط الذي تمت تهيئته، ومن خلالهذه العملية يتم تنفيذ الدوال التالية لكل شجرة ممتدة:



شكل 10.2. مخطط تدرج الدوال المستخدمة في برنامج GrandPotential

- الدالة F_Cutsets تولد مجموعة القَطع الأساسية والتي تساعد في إيجاد مقام الكسر، هذه الدالة تساعد الدالة DenP على حفظ المقامات في النظام الثنائي وذلك للطاقات التي إشارتها موجبة. حيث:
-

$$\text{DenP} = \{d_1, d_2, \dots, d_{n-1}\} \quad (2.52)$$

في العلاقة (2.52)،d_iهو عدد طبيعي غير معدوم والذي يمثل مواضع الطاقات المناسبة لكل مقام، بينما الطاقات التي إشاراتها سالبة فتحفظ في الدالة DenN،حيث:

$$\text{DenN} = \{sd_1, sd_2, \dots, sd_{n-1}\} \quad (2.53)$$

هنا sd_i هو كذلك عدد طبيعي غير معدوم يمثل مواضع الطاقات المناسبة لكل مقام.

- الدالة F_Cyclesتستخدم لإنتاج الحلقات الأساسية والتي تساعد في إيجاد بسط الكسر،هذه الدالة مع دالة معاملات الحافة EdgC تساعد الدالة NumPعلى حفظ المعاملات الإحصائية الموجبة f^+ في النظام الثنائي، كذلك الدالة NumN وبمساعدة الدالتين السابقتين تعمل على حفظ المعاملات الإحصائية السالبة f^- في النظام الثنائي.

- كلا من الدالتين NumP و NumNعبارة عن عددين طبيعيين غير معدومين يمثلان مواضع المعاملات الإحصائية الموجبة والسالبة المناسبة على الترتيب.
- في الأخير الدالة Org تعمل على تنظيم المقام المشترك، حيث تضع كل بسط له مقام مشترك مع بسط أخر في مجموعة مشتركة مع إضافة معاملات كل بسط CNum، حيث CNum=±1.

كما يمكن العثور على برنامج *GrandPotential.cpp*في الانترنت على موقع [42]*Github*.

1.3. مقدمة

في هذا الفصل سوف نتطرق الى كيفية حساب الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية باستخدام نظرية *MBPT* في درجات الحرارة العالية، كذلك ندرس بعض الخصائص الترموديناميكية لنموذج هيبارد في درجات الحرارة العالية وذلك باستخدام نشر الطاقة الحرة.

2.3. نتائج تنفيذ البرنامج

بعد تنفيذ البرنامج[50]*GrandPotential.cpp*، حيث يتم حفظ الرتبة nمن نشر الطاقة الحرة في صيغة *Latex*على الملف *GrandPotential_n.tex*، وكذلك في ملف نصي عادي*GrandPotential_n.txt*، حيث يمثل العدد الطبيعي n هنا درجة النشر التي نفذ بها البرنامج.

الملف الأخير *GrandPotential_n.txt* يحوي على قوائم من الأرقام الطبيعية غير المعدومة المشفرة في النظام الثنائي، هذي الأرقام تحوي كل المعلومات عن المخططات والكسور ومعاملاتها الخاصة بالطاقة الحرة، حيث تتم طباعة كل مخطط على النحوالتالي:

$$\begin{aligned}&\mathrm{LR, S, DenP_1, DenN_1}, \{\mathrm{NumP_1}, \dots, \mathrm{NumP_{k_1}}\}, \{\mathrm{NumN_1}, \dots, \mathrm{NumN_{k_1}}\}, \{\mathrm{CNum_1}, \dots, \mathrm{CNum_{k_1}}\},\\ &\dots, \mathrm{DenP_r, DenN_r}, \{\mathrm{NumP_1}, \dots, \mathrm{NumP_{k_r}}\}, \{\mathrm{NumN_1}, \dots, \mathrm{NumN_{k_r}}\}, \{\mathrm{CNum_1}, \dots, \mathrm{CNum_{k_r}}\}\end{aligned} \tag{3.1}$$

حيث:

- LR يمثل مواقع قمم المخطط وSمعامل تناظره، وهي تساعدنا في كتابة الكمون V لهذا المخطط؛
- $\mathrm{DenP_i}$ $(\mathrm{DenN_i})$، حيث $1 \le i \le r$، تمثل مقامات مواضع الطاقات المناسبة ذات الإشارة الموجبة (السالبة) لكل كسر مساهم، حيث أن كل مقام من المقامات iعبارة عن مجموعة من الاعداد الطبيعية ، أما العددrفهو يمثل عدد الأشجار الممتدة الناتجة من المخطط؛
- تمثل المجموعات $\{\mathrm{CNum_1}, \dots, \mathrm{CNum_{k_i}}\}$ ،$\{\mathrm{NumN_1}, \dots, \mathrm{NumN_{k_i}}\}$و$\{\mathrm{NumP_1}, \dots, \mathrm{NumP_{k_i}}\}$، حيث $1 \le i \le r$، قيم بسط المقام i مشفرة في النظام الثنائي، حيث يمثل العددين الطبيعيين الغير معدومين $\mathrm{NumP_j}$ و $\mathrm{NumN_j}$، حيث$1 \le j \le k_i$، مواضع المعاملات الإحصائية الموجبة والسالبة f^+ و f^- للبسط j على الترتيب، بينما $(1 \le j \le k_i)$ $\mathrm{CNum}_j = \pm 1;$ يمثل معامل مضروب في البسط j. هنا k_i يعني أن الكسر i مكون من k_i بسط.

حيث يمكن كتابة عبارة كل مخطط على الشكل التعبيري التالي:

$$\frac{V_{LR}}{S}\sum_{i=1}^{r}\frac{\sum_{j=1}^{k_i}\mathrm{CNum_j}\left(\mathrm{NumP_j}^\circ\mathrm{NumN_j}\right)}{\mathrm{DenP_i}-\mathrm{DenN_i}} \tag{3.2}$$

الكتابة $\mathrm{NumP_j}^\circ\mathrm{NumN_j}$ في التعبير (3.2) تعني تركيب بين مواضع المعاملات الإحصائية الموجبة والسالبة. الكتابة (3.2) هي كتابة تعبيرية فقط لأنه يجب فك التشفير من الكتابة في النظام الثنائي إلى الكتابة في النظام العشري العادي، لذلك نستخدم الكود GrandPotential.nb المكتوب بلغة Mathematica لفك التشفير عن الملف *GrandPotential_n.txt*، وكتابة علاقة النشر من الدرجة n للطاقة الحرة على شكلها الرياضي بسط/مقام. هذا البرنامج يساعد أي شخص مهتم على حساب ما يحتاجه من الطاقة الحرة مثل الحساسية المغناطيسية أو طاقة الحالة الأساسية.....الخ.

مثال: باستخدامنا البرنامج GrandPotential.cpp نجد أن الطاقة الحرة للنظام من أجل $n = 2$ تطبع على الشكل:

$$\begin{aligned}\Omega_2 = &-\frac{1}{8}V_{3,4}^{1,2}V_{1,2}^{3,4}\frac{f_1^-f_3^-f_4^- - f_1^-f_2^-f_4^+ + f_3^-f_4^-f_2^+ - f_1^-f_2^-f_3^-}{-E_3-E_4+E_1+E_2}\\ &+\frac{1}{2}V_{1,4}^{1,2}V_{3,2}^{3,4}f_1^-f_3^-\frac{f_2^- - f_4^-}{-E_2+E_4}\end{aligned} \tag{3.3}$$

3.3. نشر الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية

وجدنا في الفصل الثاني أن نشر الطاقة الحرة في نظرية الاضطرابات يمكن كتابته على شكل مجموع الحد n للطاقة الحرة الجزئية Ω_n:

$$\Omega = \Omega_0 + \sum_{n=1}^{\infty}\Omega_n \tag{3.4}$$

حيث Ω_0 يمثل حد الطاقة الحرة لهاملتون الجملة دون تفاعل.

يحتوي كل حد Ω_n على جميع الرسوم البيانية المتمايزة بشكل أساسي *(EDDs)* (*EDD* هو الرسم البياني المختار من بين المخططات المكافئة، لمزيد من المعلومات، راجع [*28*]). من أجل التبسيط، نختار فقط المخططات التي لا تحتوي على أي من حلقة من حلقات هارتري-فوك، وهذا يعني أن أي خط من المخططات المولدة يمكن أن يحوي على طاقة هارتري-فوك الفرعية، لذلك نستبدل الطاقة E_k بالطاقة التالية:

$$E_p = \varepsilon_p - \mu - e_p^{HF}(\beta) \tag{3.5}$$

حيث $e_p^{HF}(\beta)$ هي طاقة هارتري-فوك بدلالة معكوس درجة الحرارة β. هذه الطاقة يمكن حسابها بواسطة حل المعادلة التكاملية الغير خطية التالية:

$$e_p^{HF}(\beta) = \frac{1}{V}\int V_{pq}^{pq} f^{-}\left(\varepsilon_q + e_q^{HF}(\beta)\right) dq \tag{3.6}$$

يمكن صياغة الحد Ω_nعلى الشكل التالي:

$$\Omega_\mathrm{n} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(EDD)_i}{S_i} \tag{3.7}$$

حيث S_iمعامل التناظر للمخطط$(EDD)_i$. العدد Nيمثل عدد مخططات الفراغلهيجنهولتز$EDDs$. الجدول 1 يوضح بعض قيم Nلكل حد نشر nمن 2 الى 10.

الجدول 1. العدد الإجمالي لمخططات الفراغ من نوع هيجنهولتز المترابطة والمتميزة أساسًا دون المخططات الفرعية الخاصة ب هارتري-فوك.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N	1	1	2	5	13	59	285	1987	16057	149430

يمكننا إيجاد المخططات $(EDD)_i$ ومعامل تناظرها S_i باستخدام البرنامج [27].
كما يمكننا حساب مساهمة كل مخطط $(EDD)_i$ في الطاقة الحرة باستخدام البرنامج [28].
حيث نجد أن عبارة كل حد هو عبارة عن مجموع كسور جزئية. كل كسر يحوي أساساً مقام يمثل الطاقة، وبسط يحوي على المعاملات الإحصائية f^+ و f^-. كل مقام هو في الأساس جداء مجموعة القَطع الأساسيةC_i، بينما البسط مرتبط بإيجاد الحلقات الأساسية واتجاهها الكليO_j. حيث وجدنا أن مساهمة كل مخطط لهيجنهولتز في الطاقة الحرة يعطى من الشكل:

$$\Omega_n^G = \sum_{All\ Spanning\ Trees} F^s \tag{3.8}$$

هنا مساهمة كل شجرة ممتدةF^sمن العلاقة (3.1) تعطى بالكسر:

$$F^s = \frac{\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{[O_j]}}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} \tag{3.9}$$

حيث $\pm = [O_j]$ هو اشارة الاتجاه الكلي (تعريف (2.27)). مقدار القطع الأساسي يمثل مجموع الطاقات في الاتجاه الموجب E_l^{i+}لاتجاه غصن الشجرة ناقص مجموع الطاقات في الاتجاه المعاكس E_l^{i-}للغصن المكون الوحيد المار منه القطع، أي:

$$C_i = \sum_l E_l^{i+} - \sum_l E_l^{i-} \tag{3.10}$$

في هذا الجزء سوف نتطرق الى كيفية حساب المقدار (3.1) في درجات الحرارة العالية.

كما نلاحظ في العلاقة (3.1) أن بسط الكسر مكون من المعاملات الإحصائية f^+ و f^-، هذه المعاملات كما نعرف تحوي على متغير درجة الحرارة)، أي تكون بدلالة $\beta = \frac{1}{k_B T}$، عند نشر هذه المعاملات الإحصائية في درجات الحرارة العالية، أي عند $\beta \ll 1$،فإن بسط مساهمة الطاقة الحرة (3.1) يكون كثير حدود بدلالةβوكذلك الطاقات E_jورتبته من رتبة النشر المراد الوصول إليها.

إذن بعد نشر بسط العلاقة (3.1) عند رتبة النشر المراد الوصول اليها or، فإنه يمكن كتابتها على الشكل المباشر التالي:

$$\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{\pm} = \sum_{k=0}^{or} a_k \beta^k \tag{3.11}$$

حيث كما هو معروف في نشر تايلور فإن المعاملات a_k تكون من الشكل:

$$a_k = \frac{1}{k!} \frac{\partial^k}{\partial \beta^k} \left(\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{\pm} \right)_{\beta=0} \tag{3.12}$$

المعاملاتa_k المعرفة في العلاقة (3.12) تكون بدلالة الطاقاتE_jالمرتبطة بالشجرة المكملة T^*، يمكن نشر الاشتقاق الموجود في العلاقة (3.12) على الشكل:

$$a_k = \prod_{j=1}^{m-n+1} \frac{1}{k_j!}\left(\frac{\partial^{k_j} f_j^{\pm}}{\partial \beta^{k_j}}\right)_{\beta=0} \tag{3.13}$$

حيث يتم اختيار معاملات الجمع k_j،والتي هي عبارة عن أعداد طبيعية، وذلك بواسطة حل المعادلة الطبيعية التالية:

$$\sum_{j=1}^{m-n+1} k_j = k \tag{3.14}$$

في هذا الفصل سندرس نظام مكون من جسيمات فرميونية، لذلك سنقتصر الدراسة على الفرميونات، لذلك نأخذ في حالتنا هذه $\epsilon = -1$.

الاشتقاق في العلاقة (3.13) يمكن كتابته على شكل كثير حدود أولر$Euler$ويرمز له بالرمز e_k، حيث أنه لدينا من نشر المعاملات الإحصائية ما يلي:

$$\begin{aligned} f^{-}(E_j) &= -\frac{1}{1+e^{\beta E_j}} = \sum_{k=0} \frac{1}{k!}\left(\frac{\partial^k f^-}{\partial \beta^k}\right)_{\beta=0} \beta^k \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{k=0} \frac{\left(E_j\right)^k e_k}{k!}\beta^k \end{aligned} \tag{3.15}$$

إذن من العلاقة (3.15) نجد أن معاملات النشر $A_k^-(E_j)$ الخاصة بـ $f^-(E_j)$تكتب بدلالة أعداد أولر على الشكل التالي:

$$A_k^-(E_j) = \frac{1}{k!}\left(\frac{\partial^k f^-}{\partial \beta^k}\right)_{\beta=0} = -\frac{1}{2}\frac{\left(E_j\right)^k}{k!} e_k \tag{3.16}$$

يمكن كذلك إيجاد معاملات النشر $f_k^+(E_j)$ الخاصة بالمعامل الإحصائي $f^+(E_j)$فنجد أن:

$$\begin{cases} A_k^+(E_j) = A_k^-(E_j) = -\frac{1}{2}\frac{(E_j)^k}{k!}e_k \ ; \ k \neq 0 \\ A_0^{\pm}(E_j) = \pm\frac{1}{2} \end{cases} \tag{3.17}$$

أعداد أولر $e_k(0)$المعرفة في العلاقة (3.17) هي عبارة عن أعداد كسرية يمكن حسابها مباشرة بواسطة الاشتقاق من الدرجة kللدالة $2/(1+e^t)$ في حدود $t = 0$، حيث نجد أن القيم الزوجية لهذه الأعداد معدومة$e_{2k} = 0$ باستثناء e_0، بينما تبقى الأعداد الفردية غير معدومة، في العلاقة التالية نعطي بعض القيم لهذه الاعداد:

$$e_1 = \frac{1}{2}; e_3 = \frac{1}{4}; e_5 = -\frac{1}{2}; e_7 = \frac{17}{8}; e_9 = -\frac{31}{2}; \ldots \tag{3.18}$$

إذن يمكن إعادة كتابة صيغة معاملات النشر a_k المعرفة بالعلاقة (3.13) على الشكل المبسط التالي:

$$a_k = \prod_{j=1}^{m-n+1} A_{k_j}^{\pm}(E_j) \tag{3.19}$$

حيث سيتم الآن اختيار معاملات الجمع k_j، بشرط أن تكون أعداد طبيعية معدومة أو فردية فقط وذلك باستعمال علاقة الجمع (3.14).

كما نلاحظ من كسر العلاقة (3.2) فإن بسطه يجب أن يكون في حدود مقامه من حيث درجة نشر الطاقة. بعبارة أخرى يجب أن تكون المعاملات a_k والتي تحوي جداء الطاقات E_j في حدود رتبة النشر $n-1$، بينما كل المعاملاتk الأقل من $n-1$ فمجموعها على كل الأشجار الممتدة فهو بالتأكيد يجب أن ينعدم، هذا راجع لأن النشر على الطاقة الحرة في درجة الحرارة العالية من المستحيل أن يحوي كسور. لذلك فالعلاقات التالية تبقى صحيحة:

$$\sum_{All\ Spanning\ Trees} \frac{a_k}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} = 0\ ; \quad 0 \leq k < n-1 \tag{3.20}$$

إذن من العلاقة (3.13)فإنه يمكن كتابة النشر (3.4) على الشكل المبسط التالي:

$$\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{\pm} = \sum_{k=n-1}^{or} a_k \beta^k \tag{3.21}$$

حيث المعاملات a_k معرفة بالعلاقة (3.12).

إذن كخلاصة لما سبق وباستخدام العلاقات السابقة فإنه يمكن كتابة نشر مساهمة مخطط معين لهيجنهولتز في الطاقة الحرة (3.1) عند درجة نشر معينة or كما يلي:

$$\Omega_n^G = \sum_{All\ Spanning\ Trees} \frac{\sum_{k=n-1}^{or} \left(\prod_{j=1}^{m-n+1} \alpha_{k_j}^{\pm} (E_j)^{k_j} \right) \beta^k}{\prod_{i=1}^{n-1} \left(\sum_l E_l^{i+} - \sum_l E_l^{i-} \right)} \tag{3.22}$$

حيث يمكن إيجاد المعاملات a_{k_j} من العلاقات (3.10) و (3.11) حيث تساوي إلى:

$$\begin{cases} \alpha_k^{+} = \alpha_k^{-} = -\dfrac{1}{k!} \dfrac{d^k}{dt^k} \left(\dfrac{1}{1+e^t} \right)_{t=0} \quad ; \ k \neq 0 \\ \alpha_0^{\pm} = \pm \dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{3.23}$$

كما نلاحظ في العلاقة (3.15) أن النشر يكون بدلالة الطاقات E_j والتي تمثل أوتار الشجرة المكملة T^*. كذلك رتبة النشر هي من الدرجة $n-1$ فما فوق. إذن سنقوم في العمليات الحسابية بالبحث عن ناتج القسمة الاقليدية لكثيرات الحدود ذات المتغيرات الطاقوية E_j.

إذن نقوم بعملية القسمة الاقليدية لكثير حدود معين على آخر في العلاقة (3.15)، حيث نأخذ متغير طاقة كيفي E_rثم نجري عمليات القسمة الاقليدية لكثير الحدود $P_n(E_r)$ الموجود في البسط على ما يقابله في المقام $P_p(E_r)$، حيث يجب أن تكون الدرجة $n \geq p$، بينما عملية القسمة معدومة في الحالة العكسية $n < p$. نعيد نفس عملية القسمة الاقليدية على متغير طاقة آخر لباقي القسمة السابقة إلى أن نصل إلى الحد الذي يكون فيه درجة البسط أقل من المقام فنعدم هذا الباقي بكل بساطة.

4.3. حساب الطاقة الحرة في نموذج هيباردعند درجات الحرارة العالية

نحسب في هذا الجزء الطاقة الحرة الناتجة من تفاعل سبين-سبين المحلي والمجاور في بعد واحد باستخدام نموذج هيباردوكذلك التطبيقات السابقة فنجد أن الطاقة الحرة عند درجة نشر 6 هي:

$$\begin{aligned}\Omega_{\mathrm{U}} = &-\frac{2}{\beta}\ln(2) + \frac{1}{2}U - \frac{\beta}{2}\left(\frac{1}{8}\mathrm{U}^2 - 1 + \mathrm{h}^2\right) + \beta^2\frac{\mathrm{U}}{2}(\mathrm{U}^2 + \mathrm{h}^2) \\ &+ \frac{\beta^3}{4}\left(\frac{1}{768}(\mathrm{U}^4 + 8\mathrm{U}^2 + 2) - \frac{\mathrm{h}^2}{4}(\mathrm{U}^2 - 1) + \frac{\mathrm{h}^4}{3}\right) \\ &- \beta^4\frac{\mathrm{U}}{2}\left(\frac{1}{512}(\mathrm{U}^2 + 2) + \frac{\mathrm{h}^2}{48}(\mathrm{U}^2 - 3) - \frac{\mathrm{h}^4}{3}\right) \\ &- \beta^5\left(\frac{1}{45}h^6 - \frac{h^4}{4}(13\mathrm{U}^2 - 4) - \frac{\mathrm{h}^2}{768}(-2\mathrm{U}^2 + \mathrm{U}^4 + 6) \right.\\ &\left.+ \frac{1}{368640}(15\mathrm{U}^2 + 36\mathrm{U}^4 + \mathrm{U}^5 + 40)\right)\end{aligned} \tag{3.24}$$

النتيجة (3.26) متطابقة بالتمام مع المرجع [51]، بينما النتيجة (3.25) فهي جديدة حسب علمنا ويمكن القول أنها مرجع لأعمال أخرى في المستقبل.

خاتمة عامة

تطرقنا في هذه المذكرة إلى مبادئ التكميم الثاني وكيفية كتابة هاملتون الجملة باستخدام مؤثرات البناء والهدم. قدمنا كتابة نموذج هيبارد لتفاعل سبين الجسيمات المحلية والغير محلية في بعد واحد في التكميم الثاني وهذا من أجل دراسته في مذكرتنا. درسنا كيفية إيجاد مساهمة مخطط فينمان أو هيجنهولتز في الطاقة الحرة وذلك عن طريق نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام عند درجة حرارة معينة FT-MBPT، كذلك باستخدام بعض الخوارزميات الأساسية في نظرية المخططات كمسألة إيجاد كل الأشجار الممتدة والحلقات الأساسية والكلية في مخطط معين.

في مذكرتنا هذه قمنا بتطبيق عملي على نموذج هيبارد في بعد وحيد، حيث قمنا بحساب الطاقة الحرة لهذا النموذج في درجات الحرارة المرتفعة وذلك باستخدام عمليات الاشتقاق وكذلك القسمة الاقليدية لكثيرات الحدود.

وجدنا في الأخير نشر الطاقة الحرة لنموذج هيبارد في درجة الحرارة المرتفعة عند الرتبة السادسة من عملية النشر، هذه النتائج متوافقة مع الدراسات النظرية السابقة لهذا النموذج وذلك من أجل الثابت U، ونتائجنا تعتبر الأولى حسب معرفتنا الحالية.

المراجع

1. *P. A. M. Dirac, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* ***114***, *767 (1927).*

2. J. W. Negele and H. Orland, Quantum Many-Particle Systems (Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1988).

3. V. Fock, *Zeitschrift für Physik*, Springer Science and Business Media LLC. **75**, 622–647 (1932).

4. A. L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems (DoverPublications, Mineola, NY, 2003).

5. W. Heisenberg, *Zeitschrift für Physik*. **49**, 619-636 (1928).

6. E. Ising, *Z. Phys.* **31** (1), 253–258 (1925).

7. P. Jordan and E. Wigner, *Zeitschrift fur Physik*. **47**, 631 (1928).

8. P. Coleman, Introduction to Many-Body Physics (Cambridge University Press, UK, 2015).

9. R. P. Feynman, Phys. Rev. 76, 749 (1949), 769 (1949).

10. K. A. Brueckner, Phys. Rev. 97, 1353 (1955).

11. N. M. Hugenholtz, Physica 23, 481 (1957).

12. J. Goldstone, Proc. Roy. Soc. A 239, 267 (1957).

13. J. M. Luttinger and J. C. Ward, Phys. Rev. 118, 5 (1960).

14. C. Bloch, On the many body problem at non-zero temperature, in Lectures on the Many body Problems, ed. E. Cainiello (Academic Press, 1961), pp. 241{265.

15. M. Gaudin, Nuclear Physics 20, 513 (1960).

16. J. W. Negele and H. Orland, Quantum Many-Particle Systems (Addison-Wesley Publishing Company, New York, 1988).

17. A. L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems (Dover Publications, Mineola, NY, 2003).

18. R. D. Mattuck, A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem (Dover Publications, New York, 1992).

19. G. C. Wick, Phys. Rev. 80, 268 (1950).

20. J. Paldus and H. C. Wong, Comput. Phys. Commun. 6, 1 (1973), 9 (1973).

21. G. Rosensteel, E. Ihrig and L. E. H. Trainor, Proc. R. Sot. A 344, 387 (1975).

22. V. Kvasnicka, Int. J. Quantum Chem. 21, 1003 (1982).

23. A. E. Jacobs, Phys. Rev. D 23, 1760 (1981).

24. Z. Csepes and J. Pipek, J. Comput. Phys. 77, 1 (1988).

25. U. Kaldor, J. Comput. Phys. 20, 432 (1976).

26. P. D. Stevenson, Int. J. Mod. Phys. C. **14**, 1135 (2003).

27. M. A. Tag and S. Khène, Int. J. Mod. Phys. C. **28**, 9 (2017).

28. M. A. Tag and M.E. Mansour, Int. J. Mod. Phys. C. **30**, 11 (2019).

29. T. Matsubara, Prog. Theor. Phys. 14, 351 (1955).

30. S. L. Hakimi, J. Franklin Inst. 5, 347359 (1961).

31. W. Mayeda and S. Seshu, IEEE Trans. Circuit Theory 12, 181185 (1965).

32. J. P. Char, IEEE Trans. Circuit Theory. 15, 228238 (1968).

33. P. Winter, BIT Numer. Math. 26, 4462 (1986).

34. A. Shioura, A. Tamura and T. Uno, SIAM J. Comput. 26, 678692 (1997).

35. M. J. Smith, Generating Spanning Trees, MS Thesis, University of Victoria (1997).

36. T. Matsui, An algorithm for ¯nding all the spanning trees in undirected graphs, in METR93-08 (University of Tokyo, 1993), pp. 237-252.

37. M. Chakraborty, R. Mehera and R. K. Pal, A divide-and-conquer algorithm for all spanning tree generation, in Advanced Computing and Systems for Security (Springer, Singapore, 2017), pp. 19-36.

38. N. E. Gibbs, J. Appl. Comput. Mech. 16, 564 (1969).

39. J. T. Welch, J. Appl. Comput. Mech. 13, 205 (1966).

40. L. M. Maxwell and G. B. Reed, Subgraph identi¯cation-segs, Circuits and Paths, in 8th Midwest Symp. on Circuit Theory (Colorado State U., Fort Collins, Colorado, 1965), pp. 10-13.

41. P. Mateti and N. Deo, SIAM J. Comput. 5, 90 (1976).

42. H. T. Hsu and P. A. Honkanen, A fast minimal storage algorithm for determining all the elementary cycles of a graph, Computer Science Dept. (Pennsylvania State Univ, University Park, 1972).

43. D. B. Johnson, SIAM J. Comp. 4, 77 (1975).

44. G. Kirchho, Ann. Phys. Chem. 72, 497 (1847).

45. F. Harary, Graph Theory and Theoretical Physics (Academic Press, 1967).

46. W. K. Chen, Graph Theory and Its Engineering Applications (World Scientific, 1997).

47. K. Paton, Comm. ACM 12, 514 (1969).

48. S. Robert, Algorithms in C, Part 5: Graph Algorithms (Addison-Wesley, 2002).

49. https://github.com/tagtog12000/SpanTree/blob/master/st.cpp

50. https://github.com/tagtog12000/GrandPotential/blob/master/GrandPotential.cpp

51. M. Takahashi, Progress of Theoretical Physics 47.1 (1972): 69-82.