الجمهـــورية الجزائريـــة الديمقراطيـــة الشعبيـــة
وزارة التعليـــم العالـــي و البحـــث العلمـــي
جامعـــة الشيـــخ العربـــي التبســـي- تبســـــة
كليـــة العـلـوم الدقيقـــة و علـــوم الطبيعـــة و الحيـــاة
قســم: عــلـوم المــادة

مذكــــــرة ماستــــرأكاديمـي
الميــدان: علـــوم المـــادة
المجال : فيزياء
التخصص: فيزيـــاء المــــادة المكثفة

الموضوع

دراسة نموذج هيزنبرغ XXZ في درجات الحرارة المرتفعة بواسطة نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام.

من تقديـــــم:

طراد مريم **حجاج إيمان**

أمـــام اللجنـــة المناقشيـــن المكونـــة مـن:

رواق نوا ري	أستاذ محاضر أ	جامعة العربي التبسي-تبسة	رئيسا
طق محمد الأمين	أستاذ محاضر ب	جامعة العربي التبسي-تبسة	**مؤطرا**
بوديار عبيد	أستاذ محاضر ب	جامعة العربي التبسي-تبسة	**ممتحنا**

تاريخ المناقشة: 2020/06/29

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: رواق نواري والدكتور بوديار عبيد.

أشكر كل من ساعدني في إنجاز هذا العمل.

إهداء

نشكر 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 (طراد مسعود) 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 أطال الله بعمرها.

- إلى شموع البيت المنيرة إخوتي وأخواتي الأعزاء دون أن أنسى زوجة أخي و إبنيه.

- إلى جداتي وأرواح أجدادي

- إلى خالتي و أخوالي الأعزاء وزوجاتهم وأولادهم .

_ إلى عماتي وأعمامي .

- إلى رفيقتي في هاته المذكرة المتواضعة وصديقتي العزيزة" حجاج ايمان ".

- إلى اللواتي جمعني بهن القدر صديقاتي" رجب شروق,عاد صليحة ,براهمي وردة " أغلى و أعز الناس.

- إلى كل الصديقات و الزميلات اللواتي جمعني بهن القدر، إلى الذين قاسموني مقاعد الدراسة في الجامعة، دفعة 2019-2020 فيزياء, تخصص : فيزياء المادة المكثفة.

طراد مريم

إهداء

باسم الله الرحمن الرّحيم

باسم الخالق الذي أضاء الكون بنوره وحده أعبد وله وحده أسجد شاكرة لفضله عليَّ في إتمام هذا العمل المتواضع الذي يشرّفني أن أهديه إلى صاحب الفردوس الأعلى، معلّم البشرية و منبع العلم محمد صلّى الله عليه وسلّم .

إلى أصحاب السيرة العطرة، والفكر المستنير، إلى قرة عيني، إلى أقدس معاني الإنسانية و أعظم هبات الحياة ،إلى من علّماني هندسة العبارة ؛ إلى من كان لهما الفضل الأول في بلوغي التعليم العالي. إلى "أبي" الذي رسمني ، و"أمي" التي لوّنتني أطال الله في عمركما

إلى أرواح أجدادي وجداتي الطاهرة رحمهم الله .

إلى عصافير قلبي ونور البيت "نمارق"، "إجلال" ، و "قدر"

إلى أخوتي :

إلى ذلك الجبل الذي أسند عليه نفسي عند الشدائد ،إلى رفيق طفولتي الأول أخي الوحيد "كمال"

إلى كتلة الحنان و النبع الذي أرتوي منه الأمان إلى أمي الثانية "سارة"

إلى من علمتني الصمود مهما تبدلت الظروف و علمتني الصبر والنجاح "سهيلة"

إلى رفيقة دربي و مؤنستي طول المسيرة الدراسية " سيليا"

إلى صغيرة البيت الذكية "شروق"

إلى أخواي اللذان لم تلدهما أمي ولكن ولدتهما لي الأيام إلى الغاليين على قلبي"وليد" ، و "ياسين"

إلى كل أخوالي و.أعمامي و خالاتي و.عماتي ؛ وأخص بالذكر خالي الصغير " فوزي" الذي طالما تمنى لنا النجاح.

إلى من شاءت الأقدار أن نكون معا و يجمعنا سقف واحد ،إلى من تذوقت معهن أجمل اللحظات، إلى حبيبة قلبي الأولى "صليحة" ، إلى من كدّت معي لإتمام المذكرة أختي "مريم" ،إلى "خولة" "إكرام"، "آسيا"، "فلة".

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

لى كل من ذكره قلبي ونسيه قلمي .

إيمان

ملخص

ندرس في هذه المذكرة الطاقة الحرة باستخدام نظرية الاضطرابات المتعددة الاجسام عند درجة حرارة معينة FT-MBPT، نطبق نظرية المخططات وبعض من خوارزمياتها الأساسية في إيجاد مساهمة مخططات فينمان أو هيجنهولتز في هذه الطاقة. نحسب قيمة الطاقة الحرة في درجة الحرارة المرتفعة لنموذج هيزنبرغ لتفاعل سبين ½ في بعد وحيد XXZ.

Abstract

In this dissertation we study the free energy using Finite-Temperature Many Body Perturbation Theory (FT-MBPT). We apply the so-called graph theory and some of their basic algorithms to find the contribution of the Feynman or Hugenholtz diagrams to this energy. We calculate the value of the free energy at high temperature of the Heisenberg XXZ model for the Spin interaction in one dimension.

Résumé

Dans ce mémoire, nous étudions l'énergie libre à l'aide de la théorie des perturbations à N-corps multiples et à température finie (FT-MBPT). Nous appliquons la théorie des graphes et certains de leurs algorithmes de base pour trouver la contribution des diagrammes de Feynman ou Hugenholtz à cette énergie. Nous calculons la valeur de l'énergie libre à haute température du modèle Heisenberg XXZ pour l'interaction de Spin dans une seule dimension.

فهـــــــرس

الفصل الثالث: النتائج

قائمة الجداول

قائمة الأشكال

مقدمة عامة

نظرية الاضطرابات المتعددة 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، وتم تطبيقها على الأنظمة المتعددة الأجسام بواسطة العلماء بريكينار Brueckner [2] سنة 1955 ثم هيجنهولتز Hugenholtz [3] و قولدستون Goldstone [4] سنة 1957، 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. 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 مباشرتا 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 كذلك في هذه المذكرة إلى نظام تفاعل سبين الجسيمات لهيزنبرغ. نأخذ بعد واحد XXZ 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 هيزنبرغ لتفاعل السبين 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 هيزنبرغ XXZ من أجل إيجاد الطاقة الحرة في درجات الحرارة المرتفعة، في الأخير نخدم 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

النظرية المعتادة في الميكانيكا المعروفة باسم "التكميم الأول" غير مناسبة نسبيًا لدراسة الأنظمة المكونة من عدد كبير من الجسيمات التي لا يمكن التمييز فيما بينها. في الواقع، تستند هذه النظرية إلى معرفة ووصف الحالة الكمية للنظام، وهذا يشير إلى دالة الموجة. بالنسبة لمجموعة من الجسيمات التي لا يمكن تمييزها، تصبح دالة الموجة معقدة للغاية بشكل رئيسي بسبب خصائصها التناظرية. أحد المبادئ الأساسية لميكانيكا الكم هو أن دالة الموجة لمجموعة من الجسيمات إما متناظرة (بوزونات) أو غير متناظرة (فرميونات) وذلك عند طريق تبديل جسيمين. وبالتالي، حتى 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

لتكن 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، وهو يصف جسيم داخل كمون $V(x)$ و يكتب على الشكل :

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

هنا $h(x)$ يسمى كذلك مؤثر جسم واحد.

نفرض أن الأشعة الذاتية $\phi_\alpha(x)$ والقيم الذاتية ε_α لهاملتون الجسيم α (1.2) معروفة، حيث تحدد عن طريق معادلة القيم الذاتية لمؤثر التالية:

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

العلاقة (1.3) تسمى معادلة القيم الذاتية لمؤثر h.

تحت هذه لشروط، صيغة التكميم الثاني تسمح بوصف هذه المجموعة من الجسيمات بواسطة مؤثر حقل المادة $\Psi(x)$. يعبر عن هاملتون الجملة H_0 ببساطة على أنه "القيمة المتوسطة تحت تأثير حقل المادة" لهاملتون جسيم وحيد h كما يلي [2]:

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

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

يمكن نشر مؤثر الحقل $\Psi(x)$ باستخدام قاعدة الأشعة الذاتية $\phi_\alpha(x)$ لجسيم وحيد كما يلي:

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= \sum_\alpha \phi_\alpha(x) a_\alpha \\ \Psi^+(x) &= \sum_\alpha \phi_\alpha^*(x) a_\alpha^+ \end{aligned} \tag{1.5}$$

حيث a_α، a_α^+تمثل مؤثرات الهدم و الإنشاء، بوزونية أو فيرميونية اعتمادًا على النظام المدروس.

يحقق هذان المؤثران علاقات التبادل التالية :

$$\begin{aligned} a_\alpha a_\beta^+ - \epsilon a_\beta^+ a_\alpha &= \delta_{\alpha\beta} \\ a_\alpha a_\beta - \epsilon a_\beta a_\alpha &= 0 \\ a_\alpha^+ a_\beta^+ - \epsilon a_\beta^+ a_\alpha^+ &= 0 \end{aligned} \tag{1.6}$$

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

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

$$a_\alpha|n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle = \sqrt{n_\alpha}|n_\alpha - 1, n_\beta, \dots\rangle \tag{1.7}$$

$$a_\alpha^+|n_\alpha, n_\beta, \dots\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1}|n_\alpha + 1, n_\beta, \dots\rangle \tag{1.8}$$

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 يمكن كتابته على الشكل التالي وذلك بتعويض حقل المادة المعرف بالعلاقة (1.5) في القيمة المتوسطة (1.4) نجد:

$$H_0 = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha a_\alpha^+ a_\alpha \tag{1.9}$$

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] :

$$H = H_0 + H_I = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{+} a_{\alpha} + \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle a_{\alpha}^{+} a_{\beta}^{+} a_{\delta} a_{\gamma} \qquad (1.11)$$

حيث أن $_\alpha$ وعناصر المصفوفة $\langle \alpha|V|\gamma\delta\rangle$ يكتبان على الشكل:

$$\varepsilon_{\alpha} = \langle \alpha|h|\alpha\rangle = \int \phi_{\alpha}^{*}(x)h(x)\phi_{\alpha}(x)dx \qquad (1.12)$$

$$\langle \alpha\beta|V|\gamma\delta\rangle = \int\int \phi_{\alpha}^{*}(x')\phi_{\beta}^{*}(x)V(x,x')\phi_{\gamma}(x')\phi_{\delta}(x)dxdx' \qquad (1.13)$$

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 هايزنبرغ لتفاعل سبين سبين

نموذج هايزنبرغ (Heisenberg)، تم تطويره بواسطة ورنر هايزنبرغ (Werner Heisenberg) [5] وهو نموذج ميكانيكي إحصائي يستخدم في دراسة النقاط الحرجة وتحولات الطور للأنظمة المغناطيسية، بحيث يتم التعامل مع سبينات الأنظمة المغناطيسية باستخدام ميكانيك الكم وهو نموذج مرتبط بنموذج إيزينغ (Ising)[6]، بحيث في كل موقع k من الشبكة لدينا سبين $S_{\mathrm{k}}\epsilon\left\{\pm\frac{1}{2}\right\}$ الذي يمثل ثنائي القطب المغناطيسي المجهري والذي يكون فيه العزم المغناطيسي إما إلى أعلى up أو إلى الأسفل down.

باستخدام ميكانيك الكم، عند حصر التفاعل بين الجيران الأقرب نحصل على أقل طاقة بسبب الاقتران السائد بين ثنائي القطبين.

بفرض أنه لدينا بنية شبكة دورية أحادية البعد (بحيث تحدث التفاعلات المغناطيسية فقط بين ثنائيات القطب المجاورة)، يمكن كتابة الهاملتون على الشكل :

$$H = -J\sum_{k=1}^{N}\vec{S}_k\vec{S}_{k+1} - h\sum_{k=1}^{N}S_k^z \qquad (1.14)$$

حيث J هو ثابت التبادل.

إذا كان $J < 0$ نسمي الحالة هنا مغناطيسية حديدية متضادة antiferromagnetic. أما إذا كان ثابت التبادل $J > 0$ فنسمي الحالة هنا مغناطيسية حديدية ferromagnetic.

ويتم تمثيل ثنائيات القطب بالأشعة الكلاسيكية (أو "السبينات") $\vec{S}_k$. سبين الجسيمات يخضع للشروط الحدود الدورية $\vec{S}_{N+1} = \vec{S}_1$. يعد نموذج هايزنبرغ نموذجًا أكثر واقعية لأنه يتعامل مع السبينات بالطريقة الكمية.

يمكن تعميم الهاملتون (1.14) وذلك باختيار ثوابت التبادل الغير متماثلة J_x، J_y و J_z وكذلك في وجود حقل مغناطيسي خارجيh، يتم اعطاء الهاملتون H في الحالة العامة على الشكل :

$$H = -\sum_{k=1}^{N}\left(J_x S_k^x S_{k+1}^x + J_y S_k^y S_{k+1}^y + J_z S_k^z S_{k+1}^z\right) - h\sum_{k=1}^{N}S_k^z \qquad (1.15)$$

الهدف من دراسة نموذج هايزنبرغ هو إيجاد القيم الذاتية للهاملتون (طيف الطاقة)، والذي يمكن من خلاله حساب دالة القسمة، والتي تمكننا من ايجاد الخواص الترموديناميكية للنظام في درجات حرارة معينة وكذلك ايجاد الطاقة الدنيا (الأرضية) للنظام.

اعتمادا على قيمJ_x,J_y وJ_z يمكن تسمية نموذج هايزنبرغ وذلك حسب الحالات التالية:

- إذا كان $J_x \neq J_y \neq J_z$يسمى نموذج هايزنبرغ XYZ،
- في حالة $J_x = J_y = J; J_z = J\Delta$يسمى نموذج هايزنبرغ XXZ،
- أما إذا كان $J_x = J_y = J_z = J$ يسمى نموذج هايزنبرغXXX.

تم حل نموذج هايزنبرغ في حالة سبين 1/2 وفي بعد واحد بشكل دقيق باستخدام جبر(Betheansatz)(R). لكن هذا الحل مرتبط بمعادلة تكاملية ليس لها حل. لذلك تعتمد طرق تقريبية لحلها في درجات الحرارة العالية والدنيا.

4.1. نموذج هايزنبرغ xxz ذو سبين 1/2 في بعد واحد

نتطرق هنا الى إعادة كتابة نموذج هيزنبرغ XXZ ذو سبين ½ وفي بعد واحد وذلك باستخدام طرق التكميم الثاني. في الحالة العامة هاملتون نموذج XXZ يكتب على الشكل:

$$H_{XXZ} = -J\sum_{k=1}^{N}\left(S_k^x S_{k+1}^x + S_k^y S_{k+1}^y + \Delta S_k^z S_{k+1}^z\right) - h\sum_{k=1}^{N} S_k^z \tag{1.16}$$

نستخدم التعريف التالي للمؤثرات $\frac{\pm}{k}$

$$\begin{aligned} S_k^+ &= S_k^x + iS_k^y \\ S_k^- &= S_k^x - iS_k^y \end{aligned} \tag{1.17}$$

العلاقة (1.17) يمكن من خلالها كتابة S_k^x و S_k^y كما يلي :

$$\begin{aligned} S_k^x &= \frac{1}{2}(S_k^+ + S_k^-) \\ S_k^y &= \frac{1}{2i}(S_k^+ - S_k^-) \end{aligned} \tag{1.18}$$

بالتعويض بقيم $\frac{x}{k}$ و S_k^y من العلاقة (1.18)في الهاملتون (1.16)نجد أن هاملتون الجملة يمكن كتابته على الشكل :

$$H_{XXZ} = -\frac{J}{2}\sum_{k=1}^{N}(S_k^+ S_{k+1}^- + S_k^- S_{k+1}^+) - J\Delta\sum_{k=1}^{N} S_k^z S_{k+1}^z - h\sum_{k=1}^{N} S_k^z \tag{1.19}$$

صيغة الهاملتون(1.19) بهذه الطريقة تبقى صعبة التعامل معها خاصة في ايجاد طيف الطاقة ودراسة الخواص الترموديناميكية للنظام، لذلك اعتمدت كتابة أخرى لتسهيل التعامل مع هذا الهاملتون، حيث أنه في حالة البعد الواحد يمكن استخدام تحويل جوردان-ويغنر(Jordan-Wigner) [7]، وهو تحويل يقوم على كتابة مؤثرات سبين ½ إلى مؤثرات الهدمa_k والإنشاء a_k^+ الفرميونية.

كما نلاحظ أن علاقات التبادل لمؤثرات السبين في نفس الموقع لها نفس شكل علاقات التبادل للفرميونات التالية :

$$\{S_k^+, S_k^-\} = S_k^+ S_k^- + S_k^- S_k^+ = 1 \tag{1.20}$$

ولكن علاقات التبادل تكون مختلفة في حالة اختلاف الموقع، حيث لدينا:

$$\left[S_j^+, S_k^-\right] = S_j^+ S_k^- - S_k^- S_j^+ = 0 \tag{1.21}$$

العلاقة (1.21) مختلفة عن علاقة التبادل الفرميونية (1.6).

لذلك وجد جوردان وويغنر طريقة تحويل معرفة كما يلي :

$$\begin{gathered} S_k^+ = \exp\left(i\pi \sum_{j=1}^{k-1} a_j^+ a_j\right) a_k^+ \\ S_k^- = \exp\left(-i\pi \sum_{j=1}^{k-1} a_j^+ a_j\right) a_k \\ S_k^z = a_k^+ a_k - \frac{1}{2} \\ n_k = a_k^+ a_k \end{gathered} \tag{1.22}$$

بتعويض قيم $S_k^{\pm}$ و S_k^z من العلاقات (1.22) في هاملتون الجملة (1.19) نجد أنه يمكن كتابة هاملتون الجملة على الشكل التالي :

$$H_{XXZ}=\frac{N}{2}\left(h-\frac{J\Delta}{2}\right)-\frac{J}{2}\sum_{k=1}^{N}(a_k^+a_{k+1}+a_{k+1}^+a_k)-J\Delta\sum_{k=1}^{N}n_kn_{k+1}+(J\Delta-h)\sum_{k=1}^{N}n_k \tag{1.23}$$

الكتابة (1.23)تسمى الكتابة الفرميونية لنموذج هيزنبرغ XXZ.

نستخدم الآن في دراستنا في هذه المذكرة تحويل فورييه من أجل كتابة الهالمتون (1.23) في صيغة التكميم الثاني، حيث أنه يمكن كتابة مؤثرات الهدم a_k والانشاء a_k^+ الفرميونية على شكل تحويل فورييه لمؤثرات هدم وإنشاء فرميونية شبه جزيئية جديدة كما يلي :

$$\begin{aligned} a_k^+ &=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_p e^{ipR_k}a_p^+=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_p e^{i\frac{2\pi}{N}pka}a_p^+ \\ a_k &=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_p e^{-ipR_k}a_p=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_p e^{-i\frac{2\pi}{N}pka}a_p \end{aligned} \tag{1.24}$$

حيث يمثل a البعد بين موقعين متتاليين من سلسلة سبين هيزنبرغ .

بتعويض قيم مؤثري الهدم والإنشاء من العلاقة (1.24) في الهاملتون (1.23)، واستخدام علاقات التبادل الفرميونية الممثلة في العلاقة (1.6) مع الأخذ بطبيعة الحال $(\epsilon=-1)$، كذلك نأخذ $a=1$ للتسهيل فقط، ومنه فإن هاملتون نموذج هيزنبرغ XXZ يكتب على الشكل المتجانس التالي [8] :

$$\begin{aligned} H_{XXZ} &=\frac{N}{2}\left(h-\frac{J\Delta}{2}\right)+\sum_p\left(J\Delta-h-J\cos\left(\frac{2\pi}{N}p\right)\right)a_p^+a_p \\ &-\frac{J\Delta}{N}\sum_{p,p',q}\cos\left(\frac{2\pi}{N}q\right)a_{p-q}^+a_{p'+q}^+a_{p'}a_p \end{aligned} \tag{1.25}$$

الكتابة (1.25) تمثل هاملتون نموذج هيزنبرغ XXZ لسبين ½ في بعد واحد باستخدام التكميم الثاني، وهي الكتابة التي سنعتمدها في هذه المذكرة مع تغييرات بسيطة، حيث نقوم بالجمع على معاملات جديدة معرفة كما يلي :

$$\begin{aligned} \alpha &=p-q \\ \beta &=p'+q \\ \gamma &=p \end{aligned} \tag{1.26}$$

$$\delta = p'$$

نعوض بمعاملات الجمع (1.26) في هاملتون الجملة (1.25)، مع أخذ الثابت $\theta = \frac{2\pi}{N}$، حيث أنه لدينا من العلاقات (1.26) أن معاملات الجمع تحقق المساواة $\alpha + \beta = \gamma + \delta$، إذن نجد في الأخير هاملتون الجملة يكتب على الشكل المبسط التالي :

$$H_{XXZ} = \sum_{p} \varepsilon_p a_p^{+} a_p + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle a_\alpha^{+} a_\beta^{+} a_\delta a_\gamma \tag{1.27}$$

قمنا بإهمال الحد $\frac{N}{2}\left(h - \frac{\Delta}{2}\right)$ في الهاملتون (1.27) لأنه ثابت، كما نلاحظ التشابه مع الكتابة (1.11) الممثلة للتكميم الثاني، حيث عرفنا المقادير الموجودة في الهاملتون (1.27) والمتمثلة في طاقة أشباه الجسيمات p وكمون التفاعل $\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle$ كما يلي :

$$\varepsilon_p = J\Delta - h - J\cos(\theta p) \tag{1.28}$$

$$\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle = -\frac{2J\Delta}{N} \cos\left(\frac{\theta}{2}(\beta - \alpha + \gamma - \delta)\right) \delta_{\alpha+\beta,\gamma+\delta} \tag{1.29}$$

حيث $\delta_{\alpha+\beta,\gamma+\delta}$ يمثل دلتا كرونيكا.

سوف نعتمد الكتابة (1.27) في مذكرتنا وخاصة في دراسة نموذج هيزنبرغ XXZ في درجات الحرارة المرتفعة والتي سوف نتطرق لها بالتدقيق في الفصل الثالث.

1. مقدمة

نظرية الاضطرابات للأجسام المتعددة (**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، 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 تقديمها لأول مرة من طرف العالم فينمان (Feynman) [9] سنة 1949، وتم تطبيقها على الأنظمة المتعددة الأجسام بواسطة العلماء بريكينار(Brueckner)[10] سنة 1955 ثم هيجنهولتز (Hugenholtz)[11] و قولدستون (Goldstone) [12] سنة 1957، 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) [13] سنة 1960 ثم بلوخ (Bloch) [14] سنة 1961. على الرغم من أنه يمكن ايجاد وصف دقيق لطريقة FT-MBPT في كتب مختلفة [15-18]، 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 مباشرتا نظرية ويكس (Wicks theorem) [19] لإيجاد جميع المخططات في درجة نشر معينة، فإن عدد تلك المخططات يزداد بشكل كبير مع تزايد درجة النشر. ولكن هناك طريقتان أساسيتان لتقليل عدد هذه المخططات: الأولى تعتمد على إزالة جميع المخططات المنفصلة وذلك عن طريق حساب الطاقة الحرة الترموديناميكية بدلا من التعامل مع دالة القسمة، أما الطريقة الثانية فتعتمد على إيجاد المخططات المتمايزة من بين كل المخططات المتكافئة طوبولوجيا، وهذا ما يخفض بشكل كبير عدد المخططات. الطرق القديمة [20-26] استخدمت تقنية المقارنة المباشرة مع المخططات السابقة، ولكن هذه الطريقة تحتاج الى ضرورة حفظ جميع المخططات المتمايزة السابقة على الذاكرة لتتم عملية المقارنة معها، مما يستلزم وقتًا ومساحة كبيرين جدا. حديثا تم استخدام طرق جديدة للتعامل مع مشكلة التخزين [27] حيث أن هذه التقنية تولد المخططات المتمايزة مباشرتاُ دون الحاجة إلى المقارنة مع المخططات المتمايزة السابقة.

سوف نتطرق في هذا الفصل الى الخوارزميات المستحدثة لحساب المخططات المتمايزة المولدة عن طريق الخوارزمية [27] بطريقة آلية وطباعة العبارة التحليلية لها مباشرتاُ. إن جميع الخوارزميات

المستخدمة في هذا الفصل هي مواضيع أساسية في نظرية المخططات Graph theory، سوف نقدم في بعض الأحيان نسخ جديدة عن بعض من هذه الخوارزميات، خاصة المستخدمة في المرجع [28].

2. نظرية الاضطرابات المتعددة الأجسام

لقد تطرقنا في الفصل الأول أن هاملتون نظام مكون من عدة جسيمات متشابهة تتفاعل مع بعضها يمكن التعبير عنه باستخدام التكميم الثاني على النحو التالي:

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

حيث a_k^+ و $_k$ هما مؤثرا الإنشاء والهدم على التوالي، بينما عناصر مصفوفة كمون التفاعل V_{ml}^{rs} فهي تحوي مصفوفة كمون التفاعل المباشر $\langle rs|V|ml\rangle$ ومصفوفة كمون التبادل $\langle rs|V|lm\rangle$، حيث تكتب على الشكل المختصر التالي:

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

الثابت ϵ عرفناه في الفصل الأول حيث أن $\epsilon = 1$ بالنسبة للجسيمات من نوع بوزون و $\epsilon = -1$ بالنسبة للجسيمات من نوع فرميون، أما ϵ_k فهي تمثل طاقة أشباه الجسيمات للنظام، في الأخير μ يمثل الكمون الكيميائي.

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

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

وذلك باستخدام النشر العادي لتايلور للدالة الأسية مع الأخذ بعين الاعتبار مؤثر الهاملتون H. في العلاقة (3.3) β تمثل معكوس درجة الحرارة $\beta = \frac{1}{k_B T}$ (T تمثل درجة الحرارة و k_B ثابت بولتزمان)، حيث تنشر على الشكل (R):

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!\, 4^n} \int_0^\beta d\tau_1 \ldots\ldots \tag{2.4}$$

$$\times \int_0^{\beta} d\tau_n \left\langle O_t \prod_{i=1}^{n} V_{m_i l_i}^{r_i s_i}\, a_{r_i}^{+}(\tau_i) a_{s_i}^{+}(\tau_i) a_{l_i}(\tau_i) a_{m_i}(\tau_i) \right\rangle_0$$

يمثل $_t$ مؤثر الترتيب الزمني. المقدار $\langle A\rangle_0$ يمثل المتوسط الحراري في الديناميكا الإحصائية للمؤثر A في الفراغ، يعرف رياضيا بـ:

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

مؤثرات الإنشاء $^{+}_{i}(\tau)$ والهدم $a_i(\tau)$ المتعلقة بالزمن التخيلي τ والمبينة في العلاقة (2.4) معرفة على الشكل:

$$\begin{aligned} a_i^{+}(\tau) &= a_i^{+} e^{\tau E_i} \\ a_i(\tau) &= a_i e^{-\tau E_i} \end{aligned} \tag{2.6}$$

في هذه المذكرة نعرف الطاقة E_i على الشكل:

$$E_i = \varepsilon_i - \mu \tag{2.7}$$

المقدار $_0$ يمثل دالة القسمة للنظام الغير متفاعل أي:

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

باستخدام نظرية ويكس (Wicks) [19] يمكننا نظرياً تعداد جميع الانقباضات (contractions) بين مؤثرات الهدم والانشاء لكل رتبة من سلسلة النشر (2.4)، 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 $_p(\quad)$ والذي يسمى الناشر propagator فهو يمثل مزيج بين تكون ثقب أو جسيم أثناء زمن تخيلي τ ويمكن صياغته رياضيا [16] على الشكل

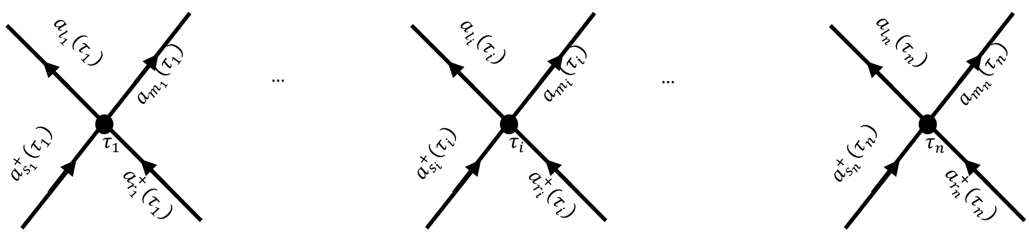
$$g_p(\tau-\tau') = e^{-(\tau-\tau')E_P}\left[f_p^{+}\theta(\tau-\tau'-\eta) + f_p^{-}\theta(\tau-\tau'+\eta)\right] \qquad (2.10)$$

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

المقادير الإحصائية $f_p^{\pm}$ معرفة بالعلاقتين:

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

بسبب العدد الهائل لمقادير المتوسط الحراري (2.9) في رتبة نشر معينة، والصيغ الرياضية المعقدة للناشر (2.10) والمقادير الإحصائية (2.11) صار من اللازم التعامل مع كل هذه المقادير بطرق أخرى، لذلك وجد العلماء (بريكينار) [10]، (هيجنهولتز) [11] و(قولدستون) [12] وآخرون أنه من الممكن تطبيق فكرة فينمان [9] وذلك باختصار كل مقادير المتوسط الحراري بواسطة المخططات. للتبسيط، يمكننا تمثيل الرتبة n من سلسلة النشر (2.4) على شكل مجموعة من المخططات وذلك عن طريق رسم n قمة نسميها $(\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \quad _n)$ حيث في كل قمة τ_i نرسم أربع سطور، سطرين واردين إلى هذه القمة يمثلان مؤثرات الانشاء $a^+_{si}(\tau_i)$ و $a^+_{ri}(\tau_i)$ المعرفين في سلسلة النشر (2.4)، بالإضافة إلى سطرين صادرين من هذه القمة يمثلان مؤثرات الهدم $_{l_i}(\tau_i)$ و $a_{m_i}(\tau_i)$ (شكل 1.2)، ثم نقوم بربط جميع الخطوط الواردة $^+_{p_i}(\tau_i)$ مع الخطوط الصادرة $a_{p_j}(\tau_j)$ بكل الطرق الممكنة للربط، بحيث في كل عملية ربط بين خطين i و j تتوافق مع الناشر $g_{p_i}(\tau_i-\tau_j)$.



شكل 1.2. مخطط يمثل مؤثرات الانشاء 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 جداً 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 لإن اللوغاريتم يعدم المخططات المنفصلة، وبما أنه يمكن استخلاص جميع الخصائص الترموديناميكية من دالة الطاقة الحرة $\Omega = -\frac{1}{\beta}\log(Z)$، وهي كما نلاحظ هي تطبيق للدالة اللوغاريتمية على دالة القسمة، إذن من البديهي دراسة الطاقة الحرة Ω بدلا 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 $_D = \frac{(2)!}{2^n} - n_{dd}$ ، حيث $_{dd}$ يمثل عدد المخططات المنفصلة، ولكن هذا العدد لا يزال كبيرا جدا، لذلك من المهم إيجاد طريقة لخفض هذا العدد. هنالك العديد من المخططات المتصلة لها نفس القيمة العددية والتي تسمى المخططات المتكافئة، إذن من الضروري اختيار مخطط واحد فقط من بين هذه المخططات المتكافئة والذي نسميه المخطط المتمايز، حيث كما نلاحظ في التكاملات على الأزمنة الخيالية $d\tau_1 \dots d\tau_n$ من علاقة النشر (2.4) أنه لديها نفس مجالات التكامل من 0 إلى β، لذلك أي تبديله على هذه الأزمنة (تبديله بين القمم $\tau_1, \dots, \tau_i, \dots, \tau_n$ بلغة المخططات) لا يغير نتيجة التكاملات. لذلك فعند تطبيق عملية المبادلة بين القمم لمجموعة من المخططات الناتجة من عملية

النشر (2.4) فنجد مثلاً مجموعة منها عددها n_{ed} مكافئة لمخطط سابق، فمن الضروري تجاهلها وضرب قيمة المكاملة على المخطط السابق في n_{ed} فقط.

كما نعلم أن عدد التبديلات الممكنة لمجموعة مكونة من n قمة هو $n!$، إذن فمن الطبيعي أننا نجد $n!$ مخطط مكافئ لمخطط متمايز وحيد، لكن أحياناً عند القيام بعملية مبادلة معينة على مخطط كيفي فنجد نفس هذا المخطط، أي أن هذا المخطط لا يتشوه بواسطة عملية المبادلة هذه، فإذا كان عدد هذه المخططات التي لا تتشوه بواسطة عملية مبادلة معينة هو S، إذن فالعدد الحقيقي للمخططات المتكافئة هو $\frac{n!}{S}$، يسمى العدد الطبيعي S بمعامل التناظر، إذن من المهم إيجاد المخططات المتمايزة من بين كل المخططات المتكافئة فهذه العملية تخفض بشكل كبير عدد المخططات.

إذن فعدد المخططات الآن ينخفض إلى $D = \frac{\frac{(2n)!}{2^n} - n_{dd}}{\frac{n!}{S}} = \frac{S}{n!}\left(\frac{(2n)!}{2^n} - n_{dd}\right)$ ، تسمى هذه المجموعة من المخططات بالمخططات المتمايزة الأساسية **E**ssentially **D**istinct **D**iagrams أو اختصارا ب EDD (هذه التسمية مستخلصة من المرجع (R)). إذن فالطاقة الحرة يمكن التعبير عنها بالعلاقة:

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

اذن المشكلة المتبقية هنا هو كيفية إيجاد كل المخططات المتمايزة الأساسية EDDs عند رتبة نشر معينة n؟ اقترحت سابقاً العديد من الخوارزميات [20-26] من أجل إيجاد حل لهذه المشكلة مع بعض من الاختلافات. التقنية الأساسية المستخدمة لإيجاد EDD هي ترتيب كل القمم n في سلسلة متتالية من الأعداد الطبيعية، حيث نمثل كل قمة τ_i من مجموع القمم $1 \le i \le n$ على شكل عددين طبيعيين متتاليين، حيث يمثل هذان العددان مؤثري الانشاء $a^+_{s_i}(\tau_i)$ و $a^+_{r_i}(\tau_i)$، بينما موضع العددين من السلسلة يمثلان مؤثري الهدم $a_{m_i}(\tau_i)$ و $a_{l_i}(\tau_i)$، 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 قمة τ_i بعددين متتاليين $2i-1,2i$، أما عملية الربط بين مؤثري الانشاء والهدم فيمكن ايجادها عن طريق عملية المبادلة بين الأعداد $2i$ أو$2i-1$ مع $2j$ أو$2j-1$ حيث $i \neq j$. حيث أن كل تبديله تعطينا مخطط مكافئ. للعثور على المخططات المتمايزة EDD، فإن الطريقة المستخدمة هي أيضا القيام بعملية المبادلة بين زوجي أعداد القمم τ_i و τ_j لكل مخطط مكافئ على حده ومقارنته مع المخططات المتمايزة السابقة EDDs، لكن هذه الطريقة تستغرق وقتا ومساحة كبيرين جداً، لأننا نحتاج 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). لذلك وجدت طريقة جديدة مستخدمة في المرجع [27] مختلفة عن الطرق الكلاسيكية القديمة حيث أنها لا تحتاج إلى أي مقارنة مع المخططات المتمايزة السابقة EDDs (للتعرف على الطريقة يمكن الاطلاع على المرجع [27]). موضوع هذا الفصل ليس في كيفية إيجاد المخططات المتمايزة EDDs ولكن في كيفية إيجاد العبارة التحليلية لكل مخطط متمايز EDD وطباعتها بطريقة آلية وذلك باستخدام خوارزميات مستحدثة.

3. حساب القيمة التحليلية للمخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثانية

لفهم طرق الحساب المستخدمة هنا، نبدأ من أبسط حالة والمتمثلة في إيجاد العبارة التحليلية للمخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثانية، المبين في الشكل 2.2، حيث يمكن في البداية كتابة مساهمة الطاقة الحرة له على النحو التالي [16]:

$$\Omega_2 = \frac{1}{8} V_{p_3p_4}^{p_1p_2} V_{p_1p_2}^{p_3p_4} I_2 \qquad (2.16)$$

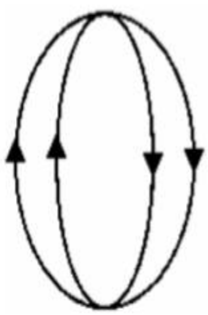
حيث

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

لفهم الطريقة المستخدمة لحساب قيمة التكامل ${}_2$ الموجودة في العبارة (2.17)، نقترح طريقتين أساسيتين: الطريقة المباشرة وطريقة المخططات.

3.1. الطريقة المباشرة

لحساب التكامل على المجال $[0,\beta]$، فمن المهم استخدام تحويل فوريي للتحول من الزمن التخيلي τ إلى الترددات. تحويل الناشر (2.10)، أو ما يعرف ب مجموع ماتشيبارا 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 n فهو 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 ماتشيبارا [29] على النحو التالي:

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

نعوض الآن مجموع ماتشيبارا (2.18) في التكامل (2.17)، ونكامل τ على المجال الزمني $[0,\beta]$، نتحصل على النتيجة:

$$I_2 = \frac{1}{\beta^3}\sum_{m_1m_2m_3m_4}\delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}}\prod_{i=1}^{4}\frac{e^{\zeta_{m_i}n_i\theta}}{(E_{P_i}-\zeta_{m_i})} \quad (2.20)$$

حيث $\delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}}$ هي دلتا كرونكر والتي تمثل قانون الانحفاظ 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 $\zeta_{\ 1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}$ ، لذلك نضرب العلاقة (2.20) بالكمية:

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

في الحقيقة الكمية (2.21) تساوي 1. نقوم الآن باختصار كل حد $p_i-\zeta_{m_i}$ من بسط الكمية (2.21) مع ما يقابله من مقام العلاقة (2.20)، فنتحصل على أربعة حدود أولية:

$$I_2 = I_2^1 + I_2^2 + I_2^3 + I_2^4 \quad (2.22)$$

حيث:

$$\begin{aligned}
I_2^1 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_1}+E_{p_2}-E_{p_3}-E_{p_4})}\sum_{m_2m_3m_4}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_2-n_1)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_3+n_1)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4+n_1)}}{(E_{p_2}-\zeta_{m_2})(E_{p_3}-\zeta_{m_3})(E_{p_4}-\zeta_{m_4})},\\
I_2^2 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_2}+E_{p_1}-E_{p_3}-E_{p_4})}\sum_{m_1m_3m_4}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_1-n_2)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_3+n_2)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4+n_2)}}{(E_{p_1}-\zeta_{m_1})(E_{p_3}-\zeta_{m_3})(E_{p_4}-\zeta_{m_4})},\\
I_2^3 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2})}\sum_{m_1m_2m_4}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_1+n_3)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_2+n_3)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4-n_3)}}{(E_{p_1}-\zeta_{m_1})(E_{p_2}-\zeta_{m_2})(E_{p_4}-\zeta_{m_4})},\\
I_2^4 &= \frac{1}{\beta^3(E_{p_4}+E_{p_3}-E_{p_1}-E_{p_2})}\sum_{m_1m_2m_3}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_1+n_4)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_2+n_4)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_3-n_4)}}{(E_{p_1}-\zeta_{m_1})(E_{p_2}-\zeta_{m_2})(E_{p_3}-\zeta_{m_3})}.
\end{aligned} \quad (2.23)$$

الآن، نختار قيم الأرقام $_i > 0$ بطريقة يكون فيها المجموع n_i $\sum$ في الأس $\zeta_m\theta(\Sigma\ \ n_i)$ لا يساوي 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 يتغير عند تطبيق التحويلات $p_4 \to p_3, p_3 \to p_4$ في I_2^1 و I_2^3 والتحويل الأخير يطبق على المقدار I_2^2 في $p_3 \to p_1, p_1 \to p_3, p_4 \to p_2, p_2 \to p_4$ للتحولات $p_3 \to p_2, p_2 \to p_3, p_4 \to p_1, p_1 \to p_4$، ومن العلاقة (2.16) نجد القيمة النهائية ل Ω_2 كما يلي:

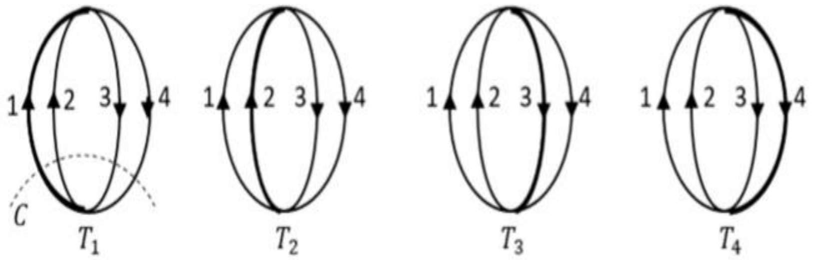
$$\Omega_2 = \frac{1}{4}\frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4} f_{p_1}^- f_{p_2}^- \left(f_{p_3}^+ + f_{p_3}^-\right)}{\left(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)} \tag{2.25}$$

ملاحظة: يمكننا اختيار قيم أخرى لـ $_i$ ، 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 لـ Ω_2 في (2.25).

3.2. طريقة المخططات

الفكرة الرئيسية 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. نرسم على المخطط G_1 من الشكل 2.2 جميع الأشجار الممكنة، أي نرسم جميع المخططات الممكنة التي تربط جميع قمم المخطط ولا تحوي دورة (حلقة)، وكما نلاحظ فهناك أربعة أشجار ممكنة $T_i, i = 1, \dots, 4$ للمخطط G_1. الشكل 3.2 يظهر جميع الأشجار الممكنة للمخطط G_1، حيث تثمل الخطوط السميكة الشجرة T_i، بينما الخطوط الرفيعة تمثل الشجرة المكملة للمخطط G_1.

نحن نعلم أن الطاقة الحرة هي عبارة عن مجموعة من الكسور، كل كسر هو عبارة عن شجرة $_{i}$ ، 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.

نشرح الآن طريقة حساب مقدار مساهمة الشجرة $_{1}$ من الشكل 3.2 في كمية الطاقة الحرة للمخطط $_{1}$. الخط السميك 1 يمكن استخراج مقام الكسر منه والمتعلق بالطاقة، بينما الخطوط الرفيعة 2، 3 4 فيمكن استخلاص بسط الكسر والمرتبط بالمعاملات الإحصائية$^{+}$ أوf^{-}، حيث:

(1) مقام الكسر: لتحديد المقام D_1 لـ T_1، نقسم المخطط T_1 إلى 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_1 التي مر عليها المقص، بينما إشارات الطاقات الأخرى 2، 3 و 4 فيمكن ايجادها نسبتاً الى 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 $_{i}$ يشكل دورة أساسية (حلقة أساسية).

تعريف 1: معامل الحافة $_{i}$: هو رقم طبيعي غير معدوم $n_i > 0$ مرتبط بالخط i.

تعريف 2: نعرف الاتجاه الكلي O_i لكل دورة (حلقة) كما يلي: وهو عدد صحيح غير معدوم، يمكن تعيينه عن طريق التجول على الخطوط المشكلة للدورة (الحلقة)، حيث نقوم في كل مرة بجمع أو طرح في كل مرة قيمة معامل الحافة لكل خط، 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 $_i^+$ 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 [ ] للدلالة على العلامة، وهذا لتسهيل الكتابة فقط.

إذن من التعريفين السابقين فإن الاتجاه الكلي لكل دورة (حلقة) في $_1$ من الشكل 3.2، وذلك لكل خط مكمل 2، 3 و4 هم:

بالنسبة للخط 2: $O_2 = n_2 - n_1$؛

بالنسبة للخط 3: $O_3 = n_3 + n_1$؛

بالنسبة للخط 4: $O_4 = n_4 + n_1$.

وأخيرا ومما سبق فإن مساهمة الشجرة $_1$ هي:

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

بنفس الطريقة، يمكننا حساب مساهمات الأشجار الأخرى $_2$ ، 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 الاختيار الكيفي: $n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 2, n_4 = 1$، وبذلك نحصل على نفس النتائج السابقة في (2.24) من الطريقة المباشرة.

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

4. **تعاريف**

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

تعريف 3: الشجرة الممتدة T (*Spanning tree*) هي كل 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 $n-1$.

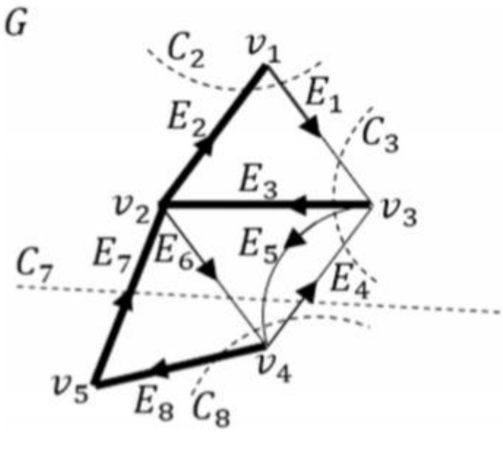
تعريف 4: الشجرة المكملة * (cotree) للشجرة الممتدة T في G وهي المخطط الذي يحوي كل حواف G باستثناء أغصان الشجرة الممتدة T [45-46] حواف الشجرة المكملة تسمى أوتار (الشجرة المكملة ممكن أن تحوي دورات (حلقات))، عدد أوتار الشجرة المكملة هو $m-n+1$.

تعريف 5: القَطع الأساسي هو عملية قَطع لغصن واحد فقط من أغصان الشجرة الممتدة T وعدد معين من أوتار الشجرة المكملة T^*، بحيث تؤدي هذه العملية إلى تقسيم المخطط G إلى قسمين. هذه المجموعة من عمليات القطع والتي عددها $n-1$ تسمى مجموعة القَطع الأساسية. يتم تحديد اتجاهات مجموعة القطع الأساسية وفقاً لاتجاه خصن الشجرة المقطوع [46].

تعريف 6: الحلقات الأساسية (الدورات الأساسية) هي حلقة تنتج بعد إضافة وتر واحد فقط من أوتار الشجرة المكملة * إلى الشجرة الممتدة T [45,47]، عدد الحلقات الأساسية الناتجة من مخطط G هو $m-n+1$ حلقة.

يوضح الشكل 4.2 مثالاً توضيحياً لمخطط متصل $G(5,8)$ والذي يتكون من القمم v_i، $1 \leq i \leq 5$ والحواف E_j، $1 \leq j \leq 8$، هذا المخطط يحوي مثال على شجرة ممتدة T وشجرة مكملة T^*، حيث T محددة بالأغصان $\{E_2, E_3, E_7, E_8\}$ (الخطوط السميكة)، وأما T^* فممثلة بالأوتار $\{E_1, E_4, E_5, E_6\}$ (الخطوط الرفيعة). مقام الكسر D يمكن حسابه مباشرة من مجموعة القَطع الأساسية فنجد أن قيمته $D =$ C_2 3 7 8 الموضحة في الشكل بالخطوط المتقطعة، وكما نلاحظ في الشكل 4.2 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 الكسر Nu من أوتار الشجرة المكملة * فنجد من الشكل: $Nu = f_1^{[O_1]} f_4^{[O_4]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]}$، حيث يمكن كذلك استخراج الاتجاهات الكلية $O_j; j = 1,4,5,6$ من الحلقات الأساسية (تعريف 6) المرتبطة بالشجرة المكملة T^* فنجد باستخدام التعريف 2 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 متصل G: تمثل الخطوط السميكة مثالًا على شجرة ممتدة T، بينما تمثل الخطوط الرفيعة الشجرة المكملة * 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 اشارة الاتجاه الكلي (تعريف 2) لكل حلقة أساسية (تعريف 6) j من الشجرة المكملة T^* (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 مكملة T^*.

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

5. إحصاء الأشجار الممتدة

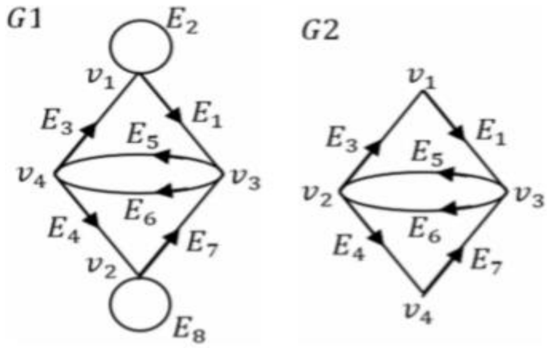
تم تطوير العديد من خوارزميات لإحصاء الأشجار لمخطط متصل [30-37]، في هذ الفصل سوف نتطرق إلى الخوارزمية الجديدة [29] والتي تختلف عن سابقاتها، حيث تعتمد على طريقة الحذف والانكماش contraction-deletion. سنعرض تفاصيل هذه الخوارزمية في الإجراءات التالية.

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 HFL إذا وجدت في المخطط، أي تلك الحلقات التي تحوي قمة وحافة وحيدتين وتبدأ وتنتهي في نفس القمة. مساهمة كل حلقة من حلقات HFL هي f_k^-، حيث k هو رقم الحافة الخاص بهذه الحلقة، ويتم حسابها كعامل مشترك؛
- استخدم البحث العميق depth-first search، أو ما يعرف اختصاراً بـ DFS [48]، وذلك لإيجاد شجرة ممتدة عشوائية للمخطط المتصل G؛

- إعادة ترقيم قمم المخطط G وفقاً لترتيب القمم التي تمت مصادفتها أثناء عملية البحث العميق بـ DFS.



(a) (b)

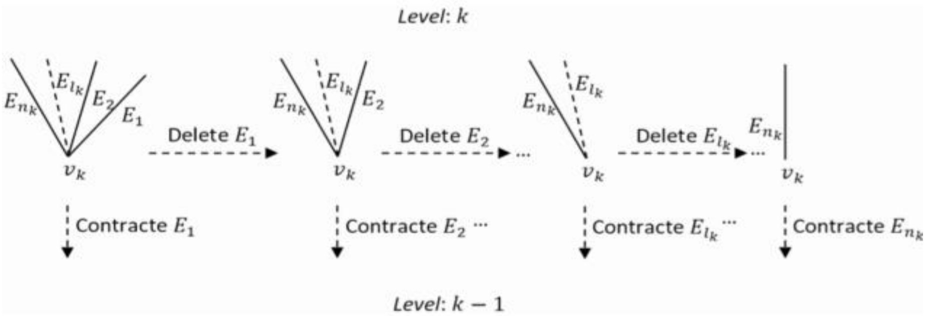
الشكل 5.2. (a) G_1: مثال على مخطط هيجنهولتز من الدرجة الرابعة، (b) G_2: المخطط التمهيدي الذي تم الحصول عليه بعد تطبيق إجراءات التهيئة على المخططG_1.

الخطوتين (2) و (3) تجعل من قمم المخطط G متصلة بشكل مرتب من 1 إلى n بحيث كل قمة $_i$ تكون متصلة بالقمة السابقة v_{i-1}. يوضح الشكل 5.2 (a) مثالاً لمخطط هيجنهولتز G_1 من الدرجة الرابعة يحوي أربعة قمم v_1, v_2, v_3, v_4 وثمانية حواف $E_1, \dots \dots, E_8$، بينما الشكل 5.2 (b) يمثل المخطط $_1$ بعد إجراء التهيئة عليه، كما نلاحظ في المخطط المهيأ G_2 أن القمة v_4 متصلة مع القمة v_3 بواسطة الحافة E_7، القمة v_3 متصلة مع القمة v_2 بواسطة الحافة E_3 والقمة v_2 متصلة مع القمة v_1 بواسطة الحافة E_1. مساهمة حلقات هارتري-فوك (HFL) E_2 و E_8 الموضحة في الشكل 5.2 (a) هو $f_2^- \ f_8^-$ وسنضيف هذا المقدار في نهاية الحساب كعامل مشترك.

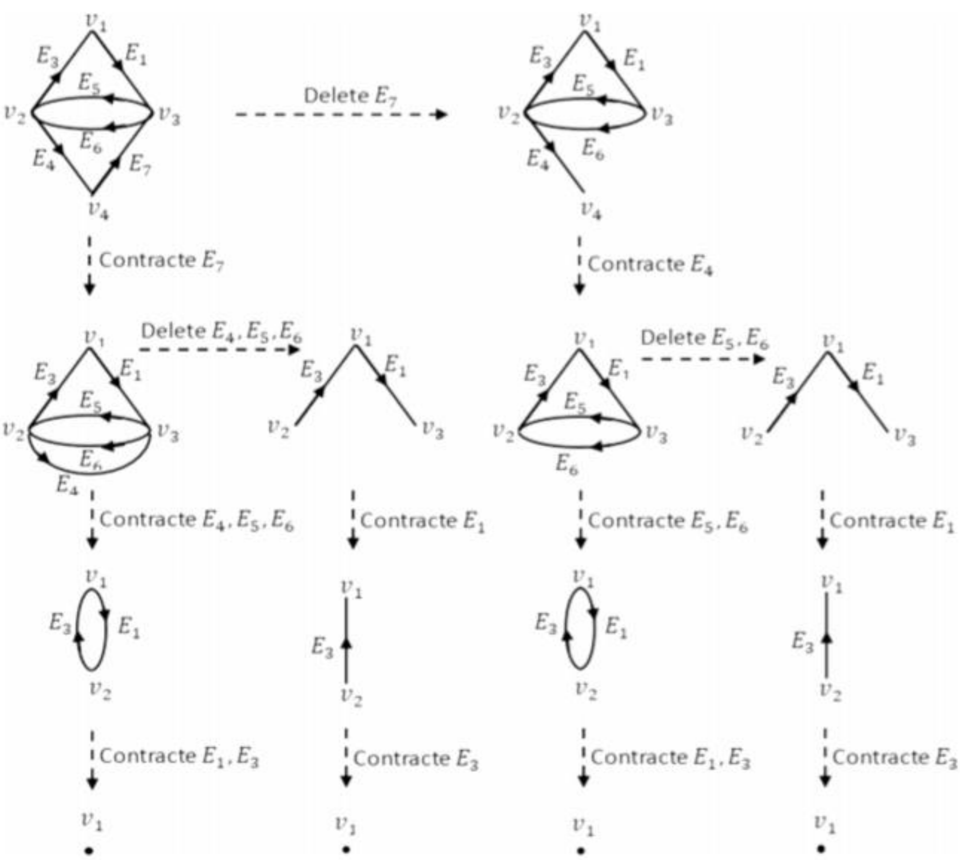
2.5. عملية الحذف والانكماش

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 $1 \leq l_k \leq n_k$ و n_k هي 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 6.2 يوضح عملية الحذف والانكماش في المستوى k، أثناء هذه العملية نصادف أحياناً حواف متوازية تربط بين القمة v_k وقمة مجاورة لها فيجب حذفهم كلهم وكمشهم كذلك كلهم مثلهم

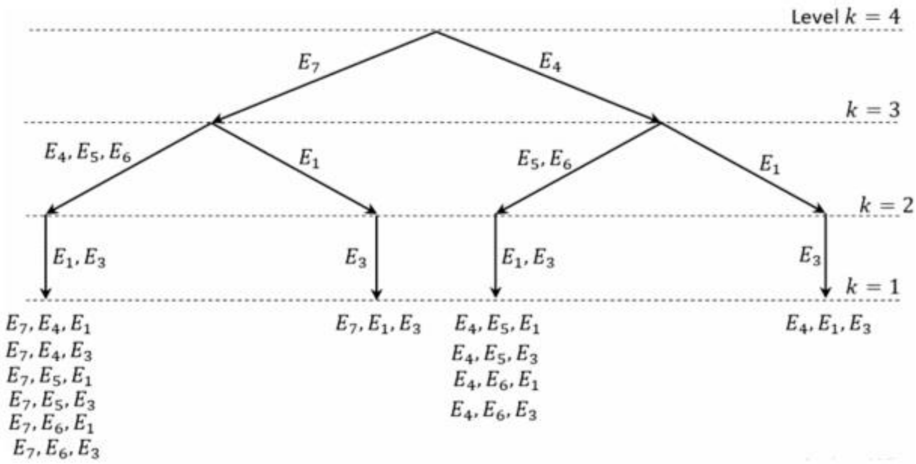
مثل حافة واحدة. نعيد هذه العملية بشكل متكرر بدءاً من المستوى n ووصولاً إلى المستوى 1. طريقة الحذف والانكماش تساعدنا على ضغط جميع الحواف المتوازية، يوضح الشكل 7.2 عمليات الحذف والانكماش للمخطط المهيأ G_2 والموضح سابقاً في الشكل 5.2 (b)، شجرة تدفق الحساب السابق موضحة في الشكل 8.2 (الأشجار المضغوطة) حيث يمثل كل سهم مجموعة من الحواف المتوازية.



الشكل 6.2. عملية الحذف والانكماش في المستوى k.



الشكل 7.2. عملية الحذف والانكماش للمخطط G_2.



الشكل 8.2. مخطط الشجرة (الشجرة المضغوطة) للمخططG_2.

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

اقترحت حديثاً خوارزمية جديدة لإحصاء الأشجار الممتدة، حيث تعتمد على عملية الحذف والانكماش [20]. تتمحور الفكرة الأساسية 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 التهيئة (1.5))، حيث V تمثل مجموعة القمم $V = \{\ \ _n, v_{n-1}, \dots, v_1\}$ بينما E تمثل مجموعة الحواف $E = \{E_m, E_{m-1}, \dots, E_1\}$، يتم فرز الحواف بترتيب تنازلي، حيث 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 $_k$ من المجموعة E ممثلة في النظام الثنائي، 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 $_2$ 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) الحواف E_5 و E_6 من المجموعة $\mathrm{LE}(3)$ عبارة عن حواف متوازية. باستخدام التمثيل (2.32) للحواف نجد:

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

الآن نطبق الخوارزمية العددية التالية التي تعتمد على عمليتين حسابيتين، العملية (+) أو (*OR*) للانكماش والعملية (-) أو (*XOR*) للحذف.

$k = n$

$\boldsymbol{Compression}(k)$

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

Print: *CTr*

Decompress(n)

else

Comment: Contraction stage

Do $i = 1, i < k$

if Edg (k, i)*==0* ***then continue***

end if

CTr(k)=Edg(k, i)

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: Deletion stage

CTr$(k) = 0$

Do $j = 1, j < i$

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

end do

end do

end if

end compression

حيث $\mathrm{CTr} = \{a_0, a_1, \dots, a_k, \dots, a_{n-2}\}$ عبارة عن مجموعة من الاعداد الطبيعية a_k والتي تمثل الأشجار المضغوطة (الضغط معناه مجموع الحواف المتوازية). لفك ضغط a_k يجب علينا استخراج بت *Bit* أقصى يمين (أو أقصى يسار) كل عدد صحيح a_k من المجموعة CTr بواسطة 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 حسابها أثناء 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

NumberOfBits(k)=nb

endSaveLeftBits.

الإجراء النهائي هو فك ضغط الاعداد الطبيعية a_k الموجودة في CTr، وهذا يعني عملية جمع كل بيت من a_i مع كل بيت من a_j لكل $j = 0, \dots, n-2; j \neq i$. 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 الضغط compression على المخطط $_2$ الموضح 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):

$$73, 76, 81, 84, 97, 100 ; 69 ; 25, 28, 41, 44 ; 13. \tag{2.37}$$

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

$$\begin{gathered}01001001; 01001100; 01010001; 01010100; 01100001; 01100100;\\ 01000101; 00011001; 00011100; 00101001; 00101100; 00001101;\end{gathered} \tag{2.38}$$

في التمثيل (2.38)، يمثل البت 1 لكل عدد طبيعي الموضع المناسب لحافة الشجرة الممتدة وفقًا لقائمة الحواف $E = \{\quad _1, E_2, \ldots, E_8\}$ الخاصة بالمخطط G_2 من الشكل 5.2 (b)، أي أن أغصان كل شجرة ممتدة لهذا المخطط هي على الترتيب:

$$\begin{gathered}01001001\rightarrow \{E_7, E_4, E_1\}, 01001100 \rightarrow \{E_7, E_4, E_3\}, 01010001 \rightarrow \{E_7, E_5, E_1\};\\ 01010100 \rightarrow \{E_7, E_5, E_3\}, 01100001 \rightarrow \{E_7, E_6, E_1\}, 01100100 \rightarrow \{E_7, E_6, E_3\};\\ 01000101\rightarrow \{E_7, E_3, E_1\}; 00011001 \rightarrow \{E_5, E_4, E_1\},; 00011100 \rightarrow \{E_5, E_4, E_3\};\\ 00101001\rightarrow \{E_6, E_4, E_1\}, 00101100 \rightarrow \{E_6, E_4, E_3\}; 00001101 \rightarrow \{E_4, E_3, E_1\},\end{gathered} \tag{2.39}$$

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، بينما الوقت اللازم لتوليد كل الأشجار الممتدة لبعض المخططات المتصلة $G(n, m)$ مكونة من n قمة و m حافة، 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.

هذه 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 الاساسية) والبسط (الحلقات الاساسية) لمساهمة كسر في الطاقة الحرة، نتبع العملية التالية:

أ) الخطوة الأولية

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

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

ب) الخطوات الوسطى

نقوم بعملية ضم (انكماش) جميع نهايات أغصان الشجرة الممتدة T، وذلك بالجمع بين قمم نهايات أغصان الشجرة الممتدة والقمم المجاورة لها، تؤدي هذه العملية إلى تقليص حجم الشجرة الممتدة، 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). أثناء هذه العملية فإن مقام وبسط الكسر يصبح:

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

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

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

ج) الخطوة النهائية

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

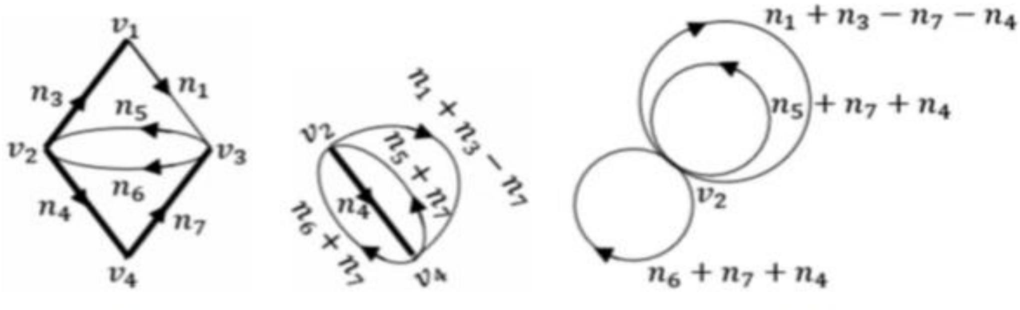
البسط: نستمر في عملية ضم الغصن الأخير من الشجرة الممتدة، وبذلك نستنتج قيمة الاتجاهات الكلية والتي هي معاملات الحواف لأوتار الشجرة المكملة المنكمشة ذات القمة الوحيدة.

يوضح مثال الشكل 9.2 خطوات حساب المقام والبسط للشجرة الممتدة $T = \{E_7, E_4, E_3\}$ من المخطط G_2 الممثل في الشكل 5.2 (b). <u>الخطوة الأولية</u>، نحسب المقامات الأولية لكل قمة (الشكل 9.2 (a)) من المخطط فنجد:

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

كذلك نجد الاتجاهات الكلية الأولية للشجرة المكملة $\{\ _1, E_5, E_6\} = {}^*$ هي:

$$O_1 = n_1; O_5 = n_5; O_6 = n_6. \qquad (2.41)$$



(a) (b) (c)

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

في الخطوات الوسطى، نطبق بعملية الضم (الانكماش) على طول الغصنين النهائيين 3 و7 من الشجرة الممتدة، حيث نقوم بجمع القمتين النهائيتين v_1 و v_3 مع القمتين v_2 و v_4 على الترتيب. وبذلك تعدل مقامات القمم النهائية v_2 و v_4 في العلاقة (2.40) إلى:

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

أثناء هذه العملية، نجمع معامل الحافة n_3 الخاص بالغصن النهائي 3 إلى معامل الحافة للوتر n_1 لأنهما في نفس الاتجاه، كذلك نطرح معامل الحافة n_7 الخاص بالغصن النهائي 7 من معامل الحافة للوتر n_1 لأنهما في اتجاهين مختلفين، بينما نضيف هذا المعامل n_7 إلى الوترين n_5 و n_6 لأنهم في نفس الاتجاه (أنضر الشكل 9.2 (b))، وبذلك فقيم الاتجاهات الكلية لكل وتر (2.41) تصبح:

$$O_1 = n_1 + n_3 - n_7; O_5 = n_5 + n_7; O_6 = n_6 + n_7. \qquad (2.43)$$

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

في الخطوة النهائية، كما نلاحظ في العلاقة (2.42) أن $_{v_2} = -D_{v_4}$ لذلك سوف نختار أحد المقامات D_{v_2}. كذلك نضرب كل مقام في 1- إذا كانت علامة الطاقة الخاصة بأغصان الشجرة الممتدة T سالبة، كما نلاحظ فإن إشارة طاقة الغصن E_3 في المقام D_{v_1} و E_7 في المقام D_{v_3} موجبة، اذن لا نغيرها، بينما نلاحظ إشارة طاقة الغصن E_4 سالبة في المقام D_{v_2}، إذن نضرب هذا المقام في -1، ومنه فالصيغة النهائية للمقامات هي:

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

للعثور على جميع معاملات الحافة للشجرة المكملة يجب علينا ضم الغصن النهائي 4 (أنضر الشكل 9.2 (c))، كما نلاحظ أن الغصن 4 من الشكل 9.2 (b) في الاتجاه المعاكس للوتر 1 وفي نفس اتجاه الوترين 5 و6، إذن نطرح $_4$ من O_1 ونجمعه مع O_5 و O_6 في العلاقة (2.43) فنجد:

$$O_1 = n_1 + n_3 - n_7 - n_4; O_5 = n_5 + n_7 + n_4; O_6 = n_6 + n_7 + n_4. \tag{2.45}$$

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

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

7

. قيم معاملات الحافة

من الضروري إيجاد القيم العشوائية لمعاملات الحافة $_i$ حيث $i = 1, \ldots, m$، ولكن المشكلة المطروحة هنا هي أننا لا نستطيع تحديد n_i لكل شجرة ممتدة على حِدَةٍ، بل يجب إيجاد قيم معاملات الحافة لكل الأشجار الممتدة الناتجة من مخطط متصل. بعبارة أخرى، نظرًا لأن معاملات الحافة مرتبطة بإيجاد الحلقات (الدورات) الأساسية، فمن الواضح أن هذا يؤدي إلى تحديد جميع حلقات (دورات) المخطط المتصل. يعد إحصاء جميع حلقات (دورات) مخطط متصل موضوعا أساسيا آخر في نظرية المخططات. هناك العديد من الخوارزميات [38-43] المقترحة لحل هذه المسألة بسرعة ومساحة مثاليتين. في هذا المجال، نختار خوارزمية جيبس Gibbs [38] لأنها تمكننا من إيجاد جميع الحلقات (الدورات) بترميز النظام الثنائي. 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.

نستعرض فيما يلي هذه الخطوات مع بعض من التفصيل:

الحلقات الأساسية: يمكن إيجاد الحلقات الأساسية من شجرة ممتدة T مختارة عشوائياً من مخطط متصل (تعريف 6)، مجموعة الحلقات الأساسية هذه F_i حيث $i = 1,2, \ldots, m - n + 1$ توفر أساسًا لتوليد جميع حلقات المخطط المتصل. كل حلقة أساسية $_i$ يمكن تمثيلها في النظام الثنائي 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 k في النظام الثنائي على الشكل $e_k = 2^{k-1}$.

الدمج: لتوليد جميع الحلقات الخاصة بالمخطط المتصل غير الموجه، 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 سيؤدي 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 G على شكل أعداد طبيعية غير معدومة.

يمكن إيجاد كل الاتجاهات الكلية الممكنة للمخطط G وذلك عن طريق تحويل جميع الحلقات وفقًا لاتجاه حوافها، يتم اختيار 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:

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

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

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

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_1 و F_6.

وبذلك نستنتج الاتجاهات الكلية لمجموعة الحلقات $_i, i = 1, \ldots ,6$ التالية:

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

نظرًا لأن $_i > 0$ ، فإننا نلاحظ من (2.49) أن قيم O_2، O_3، $_4$ و O_5 تبقى دائمة موجبة أو سالبة تمامًا مهما كان n_i. مثال القيم العشوائية $n_1 =$ ، $n_3 = 1$، $n_4 = 1$، $n_5 = 2$، $n_6 = 1$ و $n_7 = 1$
2 تجعل من الاتجاهات الكلية لا تنعدم أي $O_i \neq 0, i = 1, \ldots ,6$.

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:

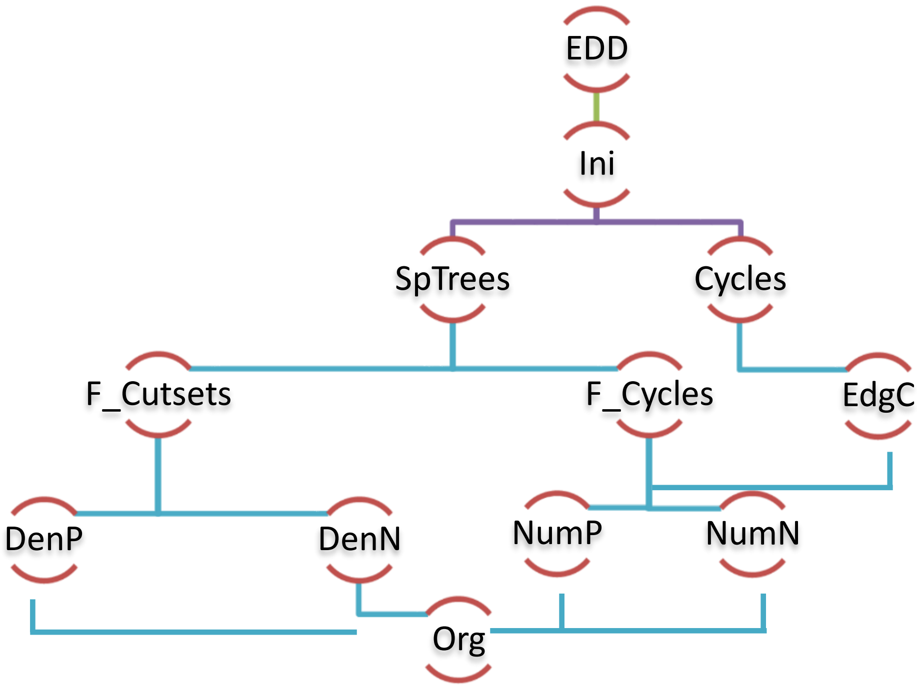
$$\begin{aligned}
T_1 &= \frac{f_1^-f_5^-f_6^-}{(E_3-E_1)(E_7+E_1-E_5-E_6)(E_7+E_1-E_5-E_6)},\\
T_2 &= \frac{f_3^-f_5^-f_6^-}{(E_1-E_3)(E_3+E_4-E_5-E_6)(E_3+E_7-E_5-E_6)},\\
T_3 &= \frac{f_4^+f_5^-f_6^-}{(E_7-E_4)(E_3+E_4-E_5-E_6)(E_1+E_4-E_5-E_6)},\\
T_4 &= \frac{f_7^+f_5^-f_6^-}{(E_4-E_7)(E_3+E_7-E_5-E_6)(E_1+E_7-E_5-E_6)},\\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

8. الدوال المستخدمة في البرنامج

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

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

- تقوم الدالة SpTrees بتوليد كل الأشجار الممتدة من المخطط الذي تمت تهيئته، أثناء هذه 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 حفض المقامات في النظام الثنائي وذلك للطاقات التي اشارتها موجبة، حيث:
-

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

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

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

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

- الدالة F_Cycles تستخدم لإنتاج الحلقات الأساسية والتي تساعد في إيجاد بسط الكسر، هذه الدالة مع دالة معاملات الحافة EdgC تساعد الدالة NumP على حفض 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 NumN عبارة 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 اخر في مجموعة مشتركة مع إضافة معاملات كل بسط CNum، حيث CNum=±1.

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

1.3. مقدمة

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

2.3. نتائج تنفيذ البرنامج

بعد تنفيذ البرنامج *GrandPotential.cpp* [48]، حيث يتم حفظ الرتبة n من 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 النحو التالي:

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

حيث:

- LR يمثل مواقع قمم المخطط و S معامل 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 i عبارة عن مجموعة من الاعداد الطبيعية الغير، أما العدد r فهو يمثل عدد الأشجار الممتدة الناتجة من المخطط؛
- تمثل المجموعات $\{\mathrm{CNum_1, \dots, CNum_{k_i}}\}$، $\{\mathrm{NumN_1, \dots, NumN_{k_i}}\}$ و $\{\mathrm{NumP_1, \dots, NumP_{k_i}}\}$، 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:

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

يوضح الجدول 1.3 عدد الكسور الناتجة لنشر الطاقة الحرة من الدرجة n، حيث تم إظهار النتائج حتى الدرجة السابعة، إجمالي الوقت المستهلك للعثور على كل هذه الكسور هو أقل من دقيقة واحدة وذلك باستخدام جهاز الكمبيوتر المنزلي [49].

3.3. حالة المخططات القابلة للاختزال

الخوارزمية المقترحة قابلة للتطبيق كذلك في حالة استخدام قاعدة الأمواج المستوية، في هذه الحالة يتحول الكمون إلى $V_{p_3,p_4}^{p_1,p_2}\delta_{p_1+p_2,p_3+p_4}$ $\rightarrow$ $V_{p_3,p_4}^{p_1,p_2}$، ولكن تظهر بعض المقادير غير متقاربة في بعض المخططات بسبب مساهمة $\frac{\delta_{pj}}{(E_p-E_j)}$، هذه المخططات تسمى المخططات القابلة للاختزال. على سبيل المثال: مشكلة عدم التقارب للحدود Gr التالية:

$$Gr = \sum_{p=1}^{k} f_p^- \prod_{j=1,p\neq j}^{k} \frac{\delta_{pj}}{(E_p - E_j)} \quad (3.4)$$

نلاحظ في المقادير (3.4) أنها غير متقاربة لأنه عندما $p = j$ بسبب دلتا كرونكر فإنه يؤدي إلى حالة عدم التعيين في المقدار Gr، وذلك لأنه عند نشر الجمع (3.4) نجد بالتمام حالات عدم التعيين من الشكل $\frac{0}{0}$، لذلك نستخدم التحويل التالي: $E_p = E_j + (p - j)h$ في المقادير (3.4) وبعد ذلك نطبق النهاية $h \to 0$. باستخدام النشر المحدود في جوار E_j، نجد أن مساهمة المقدار (3.4) في الطاقة الحرة عندما يكون $p = 1 = 2 = \cdots = k$ هو اشتقاق بالنسبة للطاقة من الدرجة $k - 1$ التالي:

$$Gr \to \frac{(-1)^{k-1}}{(k-1)!} \frac{\partial^{k-1} f^-(E_1)}{\partial E_1^{k-1}} \quad (3.5)$$

الجدول 1.3. عدد *EDDs* والكسور حتى *n=7* [2]

عدد الكسور	عدد المخططات *EDDs*	درجة النشر n
2	2	2
13	5	3
91	14	4
913	50	5
12695	265	6
202452	1601	7

كمثال كذلك نلاحظ أن المخطط الموضح في الشكل 5.2 (*a*)، هو مخطط قابل للاختزال، لذلك نستخدم التحويل التالي: $E_3 = E_1 + h_1$ و $E_7 = E_4 + h_2$، حيث $h_2 \longrightarrow 0$،$h_1 \longrightarrow 0$، وبذلك العلاقات (2.51) تتحول إلى:

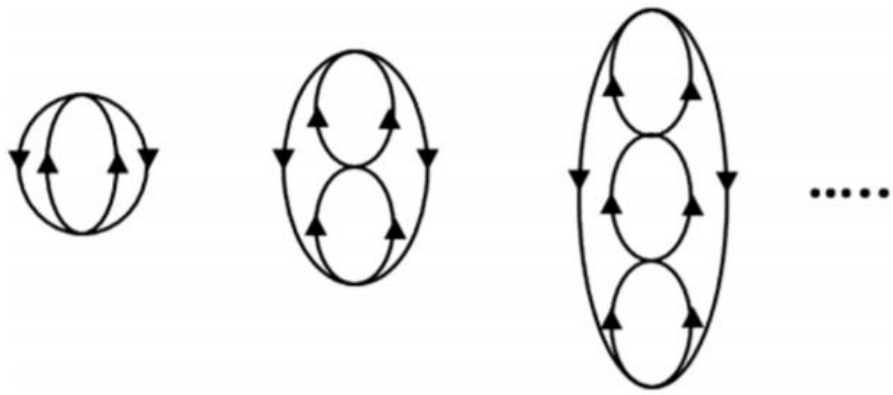
$$V_{12}^{12} V_{56}^{14} V_{14}^{56} V_{48}^{48} f_2^- f_8^- \frac{\partial^2}{\partial E_1 \partial E_4} \left(\frac{(f_1^- + f_4^+) f_5^- f_6^- - (f_5^- + f_6^+) f_1^- f_4^-}{E_1 + E_4 - E_5 - E_6} \right) \quad (3.6)$$

المقدار بين القوسين من الاشتقاق (3.6) هو مساهمة المخطط الغير قابل للاختزال من الدرجة الثانية، هو نفسه مساهمة المقدار (2.25) وذلك بتطبيق التحويل المتناظر $5 \leftrightarrow 1$، $6 \leftrightarrow 4$، $8 \leftrightarrow 2$، $5 \leftrightarrow 6$ على الشطر الثاني أو الاول من بسط هذه المساهمة.

4.3. المجموع الكلي لبعض للمخططات

يمكننا إيجاد المجموع الكلي لبعض المخططات الخاصة. على سبيل المثال، المخطط من نوع سلم هيجنهولتز (LHTD)، الشكل 1.3، يمكن حسابها لكل الدرجات. إذن بتطبيق البرنامج لبعض من هذه المخططات فإننا نجد المجموع الكلي ل LHTD هو:

$$\begin{aligned}\Omega^{\mathrm{LHTD}} =& -\frac{1}{4}V_{3,4}^{1,2}V_{1,2}^{3,4}\frac{f_1^- f_2^- (f_3^- + f_3^+)}{E_3 + E_4 - E_1 - E_2} \\ &+ \frac{1}{8}V_{3,4}^{1,2}V_{5,6}^{3,4}V_{1,2}^{5,6}\frac{f_1^- f_2^- (f_3^- + f_3^+)(f_5^- + f_5^+)}{(E_3 + E_4 - E_1 - E_2)(E_5 + E_6 - E_1 - E_2)} + \cdots\end{aligned} \tag{3.7}$$



شكل 1.3. مخططات من نوع سلم هيجنهولتز.

يمكن تعميم (3.7) في الصيغة التالية:

$$\Omega^{LHTD} = \frac{1}{2}\sum_{n=2}^{\infty} V_{1,2}^{2n-1,2n} f_1^- f_2^- \prod_{j=1}^{n-1} \frac{V_{2j+1,2j+2}^{2j-1,2j} f_{2j+1}^0}{E_1 + E_2 - E_{2j+1} - E_{2j+2}} \tag{3.8}$$

حيث: $f_k^0 = (\ _k^- + f_k^+)/2$

5.3. نشر الطاقة الحرة عند درجات الحرارة العالية

وجدنا في الفصل الثاني أن نشر الطاقة الحرة يكتب على شكل 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 الأساسية C_i، بينما البسط مرتبط بإيجاد الحلقات الأساسية واتجاهها الكلي O_j. حيث وجدنا أن مساهمة كل مخطط لهيجنهولتز في الطاقة الحرة يعطى من الشكل:

$$\Omega_n^G = \sum_{All\ Spanning\ Trees} F^s \tag{3.9}$$

هنا مساهمة كل شجرة ممتدة ^{s} من العلاقة (3.1) تعطى بالكسر:

$$F^s = \frac{\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{[O_j]}}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} \tag{3.10}$$

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

$$C_i = \sum_l E_l^{i+} - \sum_l E_l^{i-} \tag{3.11}$$

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 (العلاقات (2.11))، 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 بدلالة β وكذلك الطاقات E_j ورتبته 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:

$$\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{\pm} = \sum_{k=0}^{or} a_k \beta^k \tag{3.12}$$

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

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

المعاملات a المعرفة في العلاقة (3.4) تكون بدلالة الطاقات j المرتبطة بالشجرة المكملة T^*، يمكن نشر الاشتقاق الموجود في العلاقة (3.4) على الشكل:

$$a_k = \prod_{j=1}^{m-n+1} \frac{1}{k_j!}\left(\frac{\partial^{k_j} f_j^{\pm}}{\partial\beta^{k_j}}\right)_{\beta=0} \tag{3.14}$$

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

$$\sum_{j=1}^{m-n+1} k_j = k \tag{3.15}$$

في هذا الفصل سندرس نظام مكون من جسيمات فرميونية، لذلك سنقتصر الدراسة على الفرميونات، لذلك نأخذ في حالتنا هذه $\epsilon = -1$.
الاشتقاق في العلاقة (3.6) يمكن كتابته على شكل كثير حدود أولر ***Euler*** ويرمز له بالرمز e_k، حيث أنه لدينا من نشر المعاملات الإحصائية ما يلي:

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

إذن من العلاقة (3.8) نجد أن معاملات النشر $A_k^-(E_j)$ الخاصة بـ $f^-(E_j)$ تكتب بدلالة أعداد أولر على الشكل التالي:

$$A_k^-(E_j) = \frac{1}{k!}\left(\frac{\partial^k f^-}{\partial \beta^k}\right)_{\beta=0} = -\frac{1}{2}\frac{\left(E_j\right)^k}{k!}e_k \tag{3.17}$$

يمكن كذلك استخدام العلاقة (2.11) لإيجاد معاملات النشر $_k^+(E_j)$ الخاصة بالمعامل الإحصائي $^+(E_j)$ فنجد أن:

$$\begin{cases} A_k^+(E_j) = A_k^-(E_j) = -\frac{1}{2}\frac{\left(E_j\right)^k}{k!}e_k \ ; \ k \neq 0 \\ A_0^\pm(E_j) = \pm\frac{1}{2} \end{cases} \tag{3.18}$$

أعداد أولر $e_k(0)$ المعرفة في العلاقة (3.10) هي عبارة عن أعداد كسرية يمكن حسابها مباشرة بواسطة الاشتقاق من الدرجة k للدالة $2/(1+e^t)$ 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:

$$e_1 = \frac{1}{2}; e_3 = \frac{1}{4}; e_5 = -\frac{1}{2}; e_7 = \frac{17}{8}; e_9 = -\frac{31}{2}; \ldots \tag{3.19}$$

إذن يمكن إعادة كتابة صيغة معاملات النشر $_k$ المعرفة بالعلاقة (3.6) على الشكل المبسط التالي:

$$a_k = \prod_{j=1}^{m-n+1} A_{k_j}^{\pm}(E_j) \qquad (3.20)$$

حيث سيتم الآن اختيار معاملات الجمع ${}_j$ ، بشرط أن تكون أعداد طبيعية معدومة أو فردية فقط وذلك باستعمال علاقة الجمع (3.7).

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 المعاملات k 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:

$$\sum_{All\ Spanning\ Trees} \frac{a_k}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} = 0\,; \quad 0 \le k < n-1 \qquad (3.21)$$

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

$$\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{\pm} = \sum_{k=n-1}^{or} a_k \beta^k \qquad (3.22)$$

حيث المعاملات ${}_k$ 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:

$$\Omega_n^G = \sum_{All\ Spanning\ Trees} \frac{\sum_{k=n-1}^{or}\left(\prod_{j=1}^{m-n+1} \alpha_{k_j}^{\pm}(E_j)^{k_j}\right)\beta^k}{\prod_{i=1}^{n-1}\left(\sum_l E_l^{i+} - \sum_l E_l^{i-}\right)} \qquad (3.23)$$

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

$$\begin{cases} \alpha_k^+ = \alpha_k^- = -\dfrac{1}{k!}\dfrac{d^k}{dt^k}\left(\dfrac{1}{1+e^t}\right)_{t=0} \quad ; \; k \neq 0 \\ \alpha_0^{\pm} = \pm\dfrac{1}{2} \end{cases} \tag{3.24}$$

كما نلاحظ في العلاقة (3.15) أن النشر يكون بدلالة الطاقات $_j$ 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_r ثم 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.

6.3 حساب الطاقة الحرة في نموذج هيزنبرغ *XXZ* عند درجات الحرارة العالية

نحسب في هذا الجزء الطاقة الحرة الناتجة من تفاعل سبين-سبين في بعد واحد باستخدام نموذج هيزنبرغ *XXZ* وكذلك التطبيقات السابقة فنجد أن الطاقة الحرة عند درجة نشر 6 هي:

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathrm{xxz}} = &-\frac{1}{\beta}\ln(2) + \frac{1}{4}\mathrm{J}\Delta - \frac{\beta}{2}\left(\frac{\mathrm{J}^2}{16}(\Delta^2+2) + \mathrm{h}^2\right) + \beta^2\frac{\mathrm{J}\Delta}{4}\left(\frac{\mathrm{J}^2}{16} - \mathrm{h}^2\right) \\ &+ \frac{\beta^3}{4}\left(\frac{\mathrm{J}^4}{768}(\Delta^4 + 8\Delta^2 + 6) - \frac{\mathrm{J}^2\mathrm{h}^2}{4}(\Delta^2 - 1) + \frac{\mathrm{h}^4}{3}\right) \\ &- \beta^4\frac{\mathrm{J}\Delta}{2}\left(\frac{\mathrm{J}^4}{512}(\Delta^2+2) + \frac{\mathrm{h}^2\mathrm{J}^2}{48}(\Delta^2 - 3) - \frac{\mathrm{h}^4}{3}\right) \\ &- \beta^5\left(\frac{1}{45}h^6 - \frac{J^2}{96}h^4(13\Delta^2 - 4) - \frac{\mathrm{J}^4}{768}\mathrm{h}^2(-2\Delta^2 + \Delta^4 + 6) \right. \\ &\left. + \frac{\mathrm{J}^4}{368640}(15\Delta^2 + 36\Delta^4 + \Delta^5 + 40)\right) \end{aligned} \tag{3.25}$$

من أجل $\Delta = 1$ نجد

$$\begin{aligned} \Omega_{XXX} = &-\frac{ln2}{\beta} + \frac{J}{4} + \frac{\beta}{32}(-16h^2 - 3J^2) + \frac{\beta^2}{64}(-16Jh^2 + J^3) \\ &+ \frac{\beta^3}{3072}(256h^4 + 15J^4) + \frac{\beta^4}{3072}(512h^4J + 64J^3h^2 - 9J^5) \end{aligned} \tag{3.26}$$

$$+\frac{\beta^5}{368640}(-8192h^4 + 34560h^4 - 2400J^4h^2 - 63J^6)$$

النتيجة (3.26) متطابقة بالتمام مع المرجع [50]، 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 هيزنبرغ لتفاعل سبين الجسيمات 2/1 لبعد وحيد XXZ 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 هيزنبرغ 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 هيزنبرغ XXZ في درجة الحرارة المرتفعة عند الرتبة السادسة من عملية النشر، هذه النتائج متوافقة مع الدراسات النظرية السابقة لهذا النموذج وذلك من أجل الثابت $\Delta = 1$، أما من أجل $\Delta \neq 0$ فنتائجنا 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