

+

сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

53/2-81

12/1-81

P17-80-538

Й.Г.Бранков, К.А.Крежов

АНАЛИЗ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ РЯДОВ  
МЕТОДОМ ОПТИМАЛЬНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

1980

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Для изучения критического поведения решетчатых систем, при отсутствии точных результатов, широко используется метод высокотемпературных разложений термодинамических функций в ряд по степеням безразмерного отношения константы взаимодействия к температуре <sup>1,2/</sup>. Цель метода состоит в получении информации об особенностях термодинамических функций в точке фазового перехода исходя из конечного числа точно вычисленных коэффициентов в этом разложении. Естественно, при этом неизбежно приходится вводить некоторые предположения о возможном характере особенностей исследуемых функций и применять специальную технику экстраполяции <sup>3/</sup>.

Простейшее, физически разумное предположение состоит в том, что аналитическое продолжение термодинамической функции  $f(z)$  в комплексную плоскость  $f(z)$ ,  $z \in \mathbb{C}$ , принадлежит классу функций Дарбу <sup>4/</sup>, т.е.:

1/  $f(z)$  имеет конечное число изолированных особенностей на комплексной плоскости, например, в точках  $z_1, \dots, z_p$ ;

2/ для каждого  $i=1, \dots, p$  функция  $f(z)$  может быть представлена в виде

$$f(z) = \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{-\gamma_i} \Phi_i(z) + \Psi_i(z), \quad //1/$$

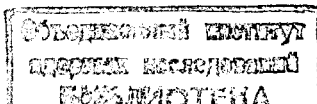
где  $\gamma_i$  - некоторые постоянные, а  $\Phi_i(z)$  и  $\Psi_i(z)$  - функции, аналитические в окрестности точки  $z_i$ .

Имея в виду физические приложения, мы потребуем, чтобы сужение  $f(z)$  на вещественную ось  $R$  было вещественнозначной функцией, т.е.

$$3/ f(x) \in R, \quad x \in R.$$

Отсюда следует, что все особые точки функции  $f(z)$  лежат либо на  $R$ , либо появляются в комплексно-сопряженных парах  $z_\alpha, z_\alpha^* \in \mathbb{C}$ .

Предположим еще, что  $f(z)$  аналитична в точке  $z=0$  /условие применимости высокотемпературной теории возмущений/ и что физическая особенность, которая соответствует точке фазового перехода, есть ближайшая к началу координат особенность на вещественной положительной полуоси. Ее положение обозначим через  $x_c$ ,  $x_c > 0$ , а соответствующий степенной показатель /критический индекс/ - через  $\nu$ . Согласно сделанному предположению,



4/ функция  $f(z)$  не имеет других особенностей на замкнутом интервале  $[0, x_c]$ , кроме точки  $x_c$  ( $x_c > 0$ ).

Заметим, что в действительности выражение вида /1/ описывает только доминирующую особенность в критической точке  $x_c$ , в этой же точке возможно наличие других, более слабых особенностей степенного или логарифмического типа /3/.

Так как радиус сходимости степенного ряда

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad /2/$$

определяется, в конечном счете, положением ближайшей к началу координат особенности функции  $f(z)$ , то методы анализа существенно зависят от того, соответствует ли эта особенность критической точке  $x_c$ , или нет.

Следуя Фишеру /5/, отнесем к классу  $F_1$  те термодинамические функции, у которых физическая особенность лежит ближе к началу координат  $z=0$ , чем любая другая /"нефизическая"/ особенность; все остальные функции отнесем к классу  $F_2$ . Таким образом,

$$\begin{aligned} f \in F_1, & \text{ если для всех } z_1 \neq x_c: 0 < x_c < |z_1|; \\ f \in F_2, & \text{ если } f \text{ не принадлежит } F_1. \end{aligned} \quad /3/$$

Методы анализа оборванных рядов для функции

$$f_N(z) = \sum_{n=0}^N a_n z^n, \quad /4/$$

получаемых в конечном порядке по теории возмущений, удобно разбить на два класса /Пиэрс /6/ /:

А. Методы экстраполяции поведения коэффициентов ряда /4/, основанные на теоремах Дарбу. В частности, из первой теоремы Дарбу следует, что если  $f$  удовлетворяет условиям 1/-4/ и, кроме того,  $f \in F_1$ , то /7/

$$\rho_n \equiv \frac{a_n}{a_{n-1}} = \frac{1}{x_c} \left(1 + \frac{\gamma-1}{n}\right) + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x_c^{-1}. \quad /5/$$

В простейшем варианте метода отношений зависимость  $\rho_n$  от  $1/n$  экстраполируется на предельный случай  $n \rightarrow \infty$  при помощи линейных экстраполянтов

$$\rho_n^{(1)} = n\rho_n - (n-1)\rho_{n-1}, \quad n=2, \dots, N. \quad /6/$$

Сглаживание осцилляций коэффициентов ряда /4/, вызываемых смущающей "антиферромагнитной" особенностью  $f(z)$  в точке  $x_1$ ,  $x_1 < -x_c < 0$ , достигается путем рассмотрения величин /8/

$$\tilde{\rho}_n \equiv \left(\frac{a_n}{a_{n-2}}\right)^{1/2} = \sqrt{\rho_n \rho_{n-1}}, \quad n=2, \dots, N \quad /7/$$

или

$$\rho_{n,2} = \frac{1}{2} [n\rho_n - (n-2)\rho_{n-2}], \quad n=3, \dots, N. \quad /8/$$

В более развитых вариантах этого метода анализируются таблицы экстраполянтов Невилля /3/. Экстраполиант Невилля  $\rho_n^{(r)}$ , который определяется кривой порядка  $r$  ( $1 \leq r \leq n-1$ ), проходящей через  $r+1$  последовательных отношений  $\rho_n, \dots, \rho_{n-r}$ , можно легко вычислить с помощью рекуррентного соотношения

$$\rho_n^{(r)} = \frac{1}{r} [n\rho_n^{(r-1)} - (n-r)\rho_{n-1}^{(r-1)}], \quad /9/$$

где  $\rho_n^{(1)}$  дается выражением /6/. Применяются также варианты смещения номера  $n$ , при которых отношения /5/-/9/ рассматриваются как функции  $\frac{1}{n+\epsilon}$ ,  $|\epsilon| \leq \frac{1}{2}$ , а не  $\frac{1}{n}$  /3/.

Иногда целесообразнее анализировать не исходный ряд для функции  $f(z)$ , а другие выводимые из него ряды, например, для  $\ln f(z)$  или  $\frac{d}{dz} \ln f(z)$  /6/.

В. Методы, при которых к коэффициентам исходного ряда или какого-нибудь выводимого из него ряда подгоняется последовательность функций  $\{\phi_m\}$  с известной структурой особенностей /чаще всего - мероморфные функции/. Эти методы основываются на предположении, что особые точки аппроксимирующих функций  $\phi_m$  сходятся к искомым особым точкам функции  $f$ . Сюда относятся методы Парка /9/, аппроксимации Паде /10/, подгонки в  $N$  точках Гуттмана /11/, техника совмещенных сингулярностей /12/, метод рекуррентных соотношений Гуттмана и Джойса /13/.

Мощные методы класса В основаны, как правило, не на строгих теоремах, а на правдоподобных предположениях о свойствах сходимости последовательностей  $\{\phi_m\}$ . Их приложение, однако, не ограничивается функциями класса  $F_1$ : они позволяют изучать глобальные свойства функции  $f(z)$ , восстанавливая ее за пределами круга сходимости степенного ряда /2/.

Область применения методов класса А удается значительно расширить, а надежность результатов, получаемых методами класса В, улучшить, если предварительно провести подходящее преобразование комплексного переменного. Идея состоит в нахождении такого преобразования  $h: C \rightarrow C$ , которое переводит рассматриваемую функцию  $f$  из класса  $F_2$  |  $f \in F_2$  | в класс  $F_1$  ( $f \circ h \in F_1$ ).

Возможность реализации этой программы в случае функций, которые удовлетворяют условиям 1/-4/, следует из теоремы Римана о конформных преобразованиях<sup>/6/</sup>. Если же рассматриваемая функция принадлежит классу  $F_1$ , но вблизи круга сходимости  $|z| \leq x_c$  имеется сильная особенность, то можно попытаться регуляризовать поведение коэффициентов ряда путем достаточного удаления смущающей особенности от круга сходимости в плоскости нового комплексного аргумента.

Улучшение точности оценок для критических параметров, получаемых на основе анализа преобразованных рядов, существенно зависит от оптимальности выбора вида преобразования и его параметров. Чаще всего применяется простое преобразование Эйлера<sup>/10,14/</sup>:

$$u = \frac{az}{1+bz}, \quad /10/$$

где  $a$  и  $b$  - вещественные параметры. Оно обладает тем свойством, что отображает точку  $z = -\frac{1}{b}$  в бесконечно удаленную точку  $u = \infty$ .

Отображение окружности с центром на вещественной оси, проходящей через точки  $-\frac{1}{b}$  и  $x_c$ :

$$z = \frac{1}{2} \left( x_c - \frac{1}{b} \right) + \frac{1}{2} \left( x_c + \frac{1}{b} \right) e^{i\phi}, \quad /11/$$

является прямой линией

$$u = u_c + i \frac{a}{b(1+bx_c)} \frac{\sin \phi}{1+\cos \phi}, \quad /12/$$

проходящей через образ  $u_c$  точки  $x_c$ :

$$u_c = \frac{ax_c}{1+bx_c}. \quad /13/$$

Для удобства точку  $x_c^0 > 0$  можно оставить неподвижной, положив  $a = 1 + bx_c^0$ .

В случаях, когда существенна одна нефизическая особенность на вещественной отрицательной полуоси, скажем, в точке  $z = x_1 < 0$ , ее можно полностью удалить, совершая преобразование Эйлера с параметром  $b = -\frac{1}{x_1}$ . При этом, поскольку для термодинамических

функций  $f(z)$  бесконечно удаленная точка  $z = \infty$  обычно является особой, эта особенность переносится в  $u$ -плоскость в точке

$$u = \frac{a}{b} = x_c^0 + |x_1|.$$

Если существенно влияние пары комплексно сопряженных нефизических особенностей, скажем, в точках  $z_1, z_1^*$ , Хэнтер и Бейкер<sup>/10/</sup> предлагают оптимизировать преобразование /10/, выбирая параметр  $b$  из условия максимальности модуля образа этих точек при фиксированном  $u_c$ , т.е. из условия максимума по  $b$  выражения:

$$|u_c|^2 = \frac{(1+bx_c)^2 |z_1|^2 u_c^2 / x_c^2}{1+2b \operatorname{Re} z_1 + b^2 |z_1|^2}. \quad /14/$$

Условие максимума дает

$$b = \frac{\operatorname{Re} z_1 - x_c}{x_c \operatorname{Re} z_1 - |z_1|^2}, \quad /15/$$

что совпадает с выбором  $b$  из требования, чтобы окружность /11/ проходила через точки  $z_1, z_1^*$ . Так как  $u_1, u_1^*$  лежат на прямой /12/, то они заведомо находятся вне физического круга  $|u| \leq u_c$ .

Очевидно, все перечисленные способы выбора параметров преобразования /10/ применимы только тогда, когда известно число и положение смущающих нефизических особенностей функции  $f(z)$ . В часто встречающемся на практике случае короткого ряда /4/ эта предпосылка обычно не имеет места. Поэтому в таких ситуациях параметр  $b$  приходится варьировать, отбирая те значения, при которых отношения коэффициентов преобразованного ряда имеют наиболее регулярное поведение.

В качестве критерия регулярности Чарльс и Джоузеф<sup>/15/</sup> предлагают так называемую "validity fraction  $V$ ", которая определяется как отношение числа ( $\ell$ ) точек  $p_m$ , лежащих на прямой линии, к полному числу ( $n$ ) наличных точек, т.е.  $V = \frac{\ell}{n}$ . При этом принимается, что точка "лежит" на прямой линии, если расстояние от нее до проведенной методом наименьших квадратов прямой не превосходит некоторого наперед заданного числа. Недостатком этого критерия является то, что при оценке оптимальности одинаковый вес придается всем точкам, тогда как известно, что экстраполяция коэффициентов ряда тем менее надежна, чем меньше порядок учитываемых коэффициентов.

Что касается оптимального типа преобразования, исследование Пиэрса<sup>/6/</sup> показывает, что в общем случае наиболее эффективным является преобразование вида

$$u = z \prod_k \left( 1 - \frac{z}{z_k} \right)^{-\gamma_k}, \quad \sum_k \gamma_k \leq 1, \quad /16/$$

которое отображает точки  $\{z_k\}$  в бесконечно удаленную точку  $u = \infty$ .

В настоящей работе предлагается метод оптимального выбора параметров преобразования, при котором не предполагается априорное знание положений смущающих нефизических особенностей в комплексной плоскости. Для простоты конкретное рассмотрение проводится для частного случая преобразования /16/. Эффективность предлагаемой методики иллюстрируется на примере некоторых тестовых функций и известных высокотемпературных рядов для восприимчивости модели Гейзенберга ( $S = \frac{1}{2}$ ) на трех кубических решетках.

## 2. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСНОГО ПЕРЕМЕННОГО

Ограничимся здесь случаем преобразования /16/ с одной только парой комплексно сопряженных особенностей в точках  $z_1, z_1^* = Be^{\pm i\phi}$ :

$$u = \frac{ABz}{\sqrt{(z - Be^{i\phi})(z - Be^{-i\phi})}}, \quad A > 0. \quad /17/$$

Для выделения однозначной и однолистной ветви функции /17/ рассматриваем комплексную  $z$ -плоскость с разрезом вдоль дуги:

$$|z| = B \frac{\cos \alpha}{\cos \phi}, \quad -\phi \leq \alpha \equiv \arg z \leq \phi. \quad /18/$$

В этом случае обратная функция

$$z(u) = \frac{Bu}{\sqrt{A^2 B^2 - u^2 \cos^2 \phi + u \cos \phi}} \quad /19/$$

однозначно определена на  $u$ -плоскости с разрезами вдоль вещественной оси  $(-\infty, -\frac{AB}{\sin \phi}]$ ,  $[\frac{AB}{\sin \phi}, \infty)$  и имеет полюс в точке  $u = AB$ , если  $\frac{\pi}{2} < \phi \leq \pi$ , или в точке  $u = -AB$ , если  $0 \leq \phi < \frac{\pi}{2}$ .

С помощью подходящего выбора параметров  $A, B$  и  $\phi$  преобразования /17/ можно добиться удаления в бесконечность заданной пары комплексно сопряженных точек  $z_1, z_1^*$ , оставляя неподвижными две другие точки: нуль и точку  $x_1^0 > 0$ . Для этого следует положить

$$A = \sqrt{1 - 2 \frac{x_1^0}{B} \cos \phi + \left(\frac{x_1^0}{B}\right)^2}, \quad /20/$$

$$B = |z_1|, \quad \phi = \arg z_1.$$

Таким образом, если функция  $f(z)$  имеет нефизические особенности в  $z_1, z_1^*$ , то в преобразованной функции  $g(u) = f(z(u))$  они будут находиться в бесконечно удаленной точке  $u = \infty$  и не скажутся на поведении коэффициентов степенного ряда

$$g(u) \equiv f(z(u)) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n(B, \phi) u^n. \quad /21/$$

Вместо них, однако, влияние окажут особенности функции  $z(u)$  /19/ и особенность  $f(z)$  в бесконечно удаленной точке  $z \rightarrow \infty$ , которая будет перенесена преобразованием /17/ в точку  $u = AB$  (для определенности рассматриваем случай  $\frac{\pi}{2} < \phi \leq \pi$ ).

Чтобы выяснить влияние особенностей, вносимых преобразованием комплексного переменного, рассмотрим сначала частный случай  $\phi = \pi$ , когда /17/ переходит в преобразование Эйлера /10/ с параметрами  $a = A, b = 1/B$ . Предположим, что исследуемая нами функция имеет простейший мультипликативный вид с одной смущающей степенной особенностью в точке  $X = X_1 < 0$ :

$$f(z) = C \left(1 + \frac{z}{|x_1|}\right)^{-\gamma_1} \left(1 - \frac{z}{x_c}\right)^{-\gamma}. \quad /22/$$

В этом случае для регуляризации поведения соответствующего степенного ряда следовало бы провести преобразование Эйлера с параметром  $b = |x_1|^{-1}$  ( $a = 1 + x_c^0 / |x_1|$ ). В результате получаем

$$g_1(u) \equiv f_1(z(u)) = C \left(1 - \frac{u}{x_c^0 + |x_1|}\right)^{\gamma + \gamma_1} \left(1 - \frac{u}{u_c}\right)^{-\gamma}, \quad /23/$$

Сравнение этого выражения с /22/ показывает, что особенность функции  $f_1(z)$  в точке  $z = x_1$  переходит в особенность  $g_1(u)$  в бесконечно удаленной точке  $u = \infty$ , а особенность  $f_1(z)$  в бесконечно удаленной точке  $z = \infty$  ( $f_1(z) \sim z^{-\gamma - \gamma_1}$ ) появляется в известной точке  $u = \frac{a}{b} = x_c^0 + |x_1|$  и лежит вне физического круга  $|u| \leq u$ . Последняя, вообще говоря, может существенно сказаться на поведении начальных коэффициентов степенного ряда для функции  $g_1(u)$ . Ее влияние тем сильнее, чем меньше отношение  $|x_1|/x_c$ .

Для частичной компенсации влияния особенности  $f(z)$  в бесконечно удаленной точке, которая переносится преобразованием Эйлера в точку  $a = \frac{a}{b}$ , и тем самым для улучшения точности оценок критических параметров  $x_c$  и  $\gamma$  Поль и Стенли /7/ предложили вместо  $g(u)$  анализировать функцию

$$g^{\text{cor}}(u) \equiv \left(1 - \frac{b}{a} u\right)^{-\gamma_{\text{est}}} g(u) \quad /24/$$

с некоторым оцененным значением  $\gamma^{est}$  для критического показателя  $\gamma$ . Проанализируем эту возможность.

При предположении /22/ в скорректированной функции,

$$g_1^{cor}(u) = C \left(1 - \frac{u}{x_c^0 + |x_1|}\right)^{\gamma + \gamma_1 - \gamma^{est}} \left(1 - \frac{u}{u_c}\right)^{-\gamma} \quad /25/$$

эффект от особенности в точке  $u = x_c^0 + |x_1|$  будет сильно подавлен, если  $\gamma^{est} \approx \gamma$  и если физическая особенность является доминирующей, т.е. если  $|x_1| \ll \gamma$ .

Коррекция может улучшить поведение коэффициентов ряда /21/ и в случае функции аддитивного типа:

$$f_2(z) = C_1 \left(1 + \frac{z}{|x_1|}\right)^{-\gamma_1} + C_2 \left(1 - \frac{z}{x_c}\right)^{-\gamma}, \quad /26/$$

но только если параметры  $\gamma$  и  $\gamma_1$  одного знака. Действительно, тогда влияние сущущей особенности в преобразованной и скорректированной функции

$$g_2^{cor}(u) = C_1 \left(1 - \frac{u}{x_c^0 + |x_1|}\right)^{\gamma_1 - \gamma^{est}} + C_2 \left(1 - \frac{u}{x_c}\right)^{\gamma - \gamma^{est}} \left(1 - \frac{u}{u_c}\right)^{-\gamma}$$

будет слабее благодаря меньшему абсолютному значению показателей  $\gamma_1 - \gamma^{est}$  и  $\gamma - \gamma^{est}$  по сравнению с  $\gamma$  /предполагается, что  $\gamma^{est} \approx \gamma > 0$ ,  $\gamma_1 > 0$  /.

Идею о коррекции преобразованной функции  $g(u)$  можно реализовать и в случае более сложного преобразования /17/. Используя /19/, запишем

$$\left(1 - \frac{z(u)}{x_c}\right)^{-\gamma} = \left(1 - \frac{u}{u_c} \frac{\sqrt{A^2 B^2 - u^2 \sin^2 \phi + u_c \cos \phi}}{\sqrt{A^2 B^2 - u^2 \sin^2 \phi + u \cos \phi}}\right)^{-\gamma} \quad /28/$$

$$= \left(1 - \frac{u}{u_c}\right)^{-\gamma} K^{-\gamma}(u, u_c),$$

$$K(u_c, u) = \frac{\sqrt{A^2 B^2 - u^2 \sin^2 \phi}}{\sqrt{A^2 B^2 - u^2 \sin^2 \phi + u \cos \phi}} \times \left[1 + \frac{u(u + u_c) \sin^2 \phi}{\sqrt{A^2 B^2 - u^2 \sin^2 \phi} \sqrt{A^2 B^2 - u_c^2 \sin^2 \phi + A^2 B^2 - u^2 \sin^2 \phi}}\right] \quad /29/$$

Отсюда видно, что поведение коэффициентов степенного ряда для функции /28/ будет возмущаться особенностями, внесенными преобразованием: точками ветвления  $u = \pm \frac{AB}{\sin \phi}$  и особенностью вида  $\left(1 - \frac{u}{AB}\right)^\gamma$ , когда  $\cos \phi < 0$ , и  $\left(1 + \frac{u}{AB}\right)^\gamma$ , когда  $\cos \phi > 0$ , которая появляется из-за особенности функции  $(1 - z|x_c)^{-\gamma}$  в бесконечно удаленной точке. Все введенные особые точки лежат вне физического диска  $|u| \leq u_c < AB$ , так что если функция  $f(z)$  имеет только одну пару изолированных особых точек в конечной комплексной плоскости, то подходящим выбором параметров преобразования /17/ всегда можно добиться, чтобы  $g(u) \equiv f(z(u))$  принадлежала классу Фишера  $F_1$ . Для улучшения поведения коэффициентов преобразованного ряда может оказаться полезным рассмотрение скорректированной функции

$$g^{cor}(u) \equiv K^{\gamma^{cor}}(u_c^{est}, u) g(u), \quad /30/$$

зависящей от параметров  $\gamma^{cor}$  и  $u_c^{cor}$ .

### 3. МЕТОД ОПТИМАЛЬНОГО ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Предположим, что нам известны  $N$  членов в разложении функции  $f(z)$  в степенной ряд /см. /4//. Тогда в ряде Тейлора /21/ для преобразованной функции  $f(z(u))$  необходимо удержать то же самое число членов:

$$g_N(u) \equiv f_N(z(u)) = \sum_{n=0}^N b_n(B, \phi) u^n \quad /31/$$

Явный вид коэффициентов  $b_n(B, \phi)$  нетрудно вычислить при помощи разложения функции /19/ обратного преобразования в ряд:

$$z_N(u) = \sum_{k=1}^N c_k(B, \phi) u^k \quad /32/$$

и подстановки последнего в исходный ряд /4/. В действительности согласно /20/ коэффициенты  $b_n(B, \phi)$  и  $c_k(B, \phi)$  зависят также от параметров  $x_c^0$ . Последний определяет вторую неподвижную точку преобразования /17/ и для удобства выбирается заранее на основе грубой оценки для критической точки  $x_c$  на основе анализа исходного ряда.

Выпишем, наконец, коэффициенты скорректированного ряда. Используя разложение

$$K_N^{\gamma^{cor}}(u_c^{est}, u) = \sum_{m=0}^N d_m(B, \phi; u_c^{est}, \gamma^{cor}) u^m \quad /33/$$

получаем

$$g_N^{\text{cor}}(u) = \sum_{n=0}^N b_n^{\text{cor}}(B, \phi; u_c^{\text{est}}, \gamma^{\text{cor}}) u^n, \quad /34/$$

где

$$b_n^{\text{cor}}(B, \phi; u_c^{\text{est}}, \gamma^{\text{cor}}) = \sum_{j=0}^n b_j(B, \phi) d_{n-j}(B, \phi; u_c^{\text{est}}, \gamma^{\text{cor}}). \quad /35/$$

Задача теперь состоит в выборе оптимальных, с точки зрения поведения коэффициентов ряда /34/, значений параметров преобразования  $B$  и  $\phi$ . При этом для простоты положим  $\gamma^{\text{cor}} = \gamma^{\text{est}}$ . Параметры  $u_c^{\text{est}}$  и  $\gamma^{\text{est}}$ , которые входят в корректирующую функцию, будем определять самосогласованным образом. Предлагаемая процедура состоит в следующем. При заданных значениях параметров преобразования  $B$ ,  $\phi$  и  $u_c^{\text{est}}$  составляем отношения последовательных коэффициентов некорректированного ряда /31/:

$$\rho_n = \frac{b_n(B, \phi)}{b_{n-1}(B, \phi)}, \quad n=1, \dots, N. \quad /36/$$

Согласно выражению /5/, ожидаемые отклонения точек  $\rho_n$  от прямой линии с наклоном  $\frac{\gamma-1}{u_c}$  и отрезком  $\frac{1}{u_c}$  имеют асимптотический вид:

$$\rho_n - \frac{1}{u_c} \left(1 + \frac{\gamma-1}{n}\right) \sim O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad /37/$$

Отсюда видно, что точкам  $\rho_n$  можно приписать вес  $w_n$ , пропорциональный  $n^2$ , и провести через них прямую линию, оптимальную в смысле наименьших взвешенных квадратичных отклонений. Мерой дисперсии точек в этом случае является величина

$$Q(B, \phi) = \sum_{n=1}^N w_n \left[ \rho_n - \frac{1}{u_c} \left(1 + \frac{\gamma-1}{n}\right) \right]^2, \quad /38/$$

$$\text{где } w_n = n^2 / \sum_{m=1}^N m^2.$$

Из минимума формы /38/ определяются оценочные значения параметров  $u_c^{\text{est}} = u_c(B, \phi)$  и  $\gamma^{\text{est}} = \gamma(B, \phi)$ . Полученные значения подставляем в коэффициенты /35/ степенного ряда для корректированной функции /34/ и составляем новые отношения вида /36/:

$$\rho_n^{\text{cor}} = \frac{b_n^{\text{cor}}(B, \phi; u_c^{\text{est}}, \gamma^{\text{est}})}{b_{n-1}^{\text{cor}}(B, \phi; u_c^{\text{est}}, \gamma^{\text{est}})}. \quad /39/$$

Далее снова проводим прямую линию по методу наименьших взвешенных квадратичных отклонений. Мерой дисперсии скорректированных точек является форма /38/, для которой получаем

$$Q^{\text{cor}}(B, \phi) = \sum_{n=1}^N w_n \left[ \rho_n^{\text{cor}} - \frac{1}{u_c'} \left(1 + \frac{\gamma'-1}{n}\right) \right]^2. \quad /40/$$

Значения  $u_c'$  и  $\gamma'$  дают скорректированные оценки для критической точки и критического показателя соответственно.

Оптимальные параметры преобразования  $B = \bar{B}$  и  $\phi = \bar{\phi}$  определяем, минимизируя форму /40/ по  $B$  и  $\phi$  в достаточно широких интервалах. Предварительную оценку интервалов значений  $B$  и  $\phi$  можно получить из анализа исходного ряда методом паде-аппроксимаций. В точке минимума Ф-лы /40/ получаем коэффициенты оптимально преобразованного скорректированного ряда:

$$\bar{b}_n^{\text{cor}} = b_n^{\text{cor}}(\bar{B}, \bar{\phi}; \bar{u}_c^{\text{est}}, \bar{\gamma}^{\text{est}}), \quad /41/$$

где  $\bar{u}_c^{\text{est}} = u_c(\bar{B}, \bar{\phi})$  и  $\bar{\gamma}^{\text{est}} = \gamma(\bar{B}, \bar{\phi})$ . По отношению к таким образом полученному оборванному степенному ряду

$$g_N^{\text{cor}}(u) = \sum_{n=0}^N \bar{b}_n^{\text{cor}} u^n, \quad /42/$$

имеющему более регулярное поведение коэффициентов, чем исходный ряд, можно применять все стандартные методы анализа с целью извлечения более надежных оценок для критических параметров.

Для реализации описанного выше метода была создана программа для ЭВМ, блок-схема которой приводится на рисунке.

#### 4. АНАЛИЗ НЕКОТОРЫХ РЯДОВ

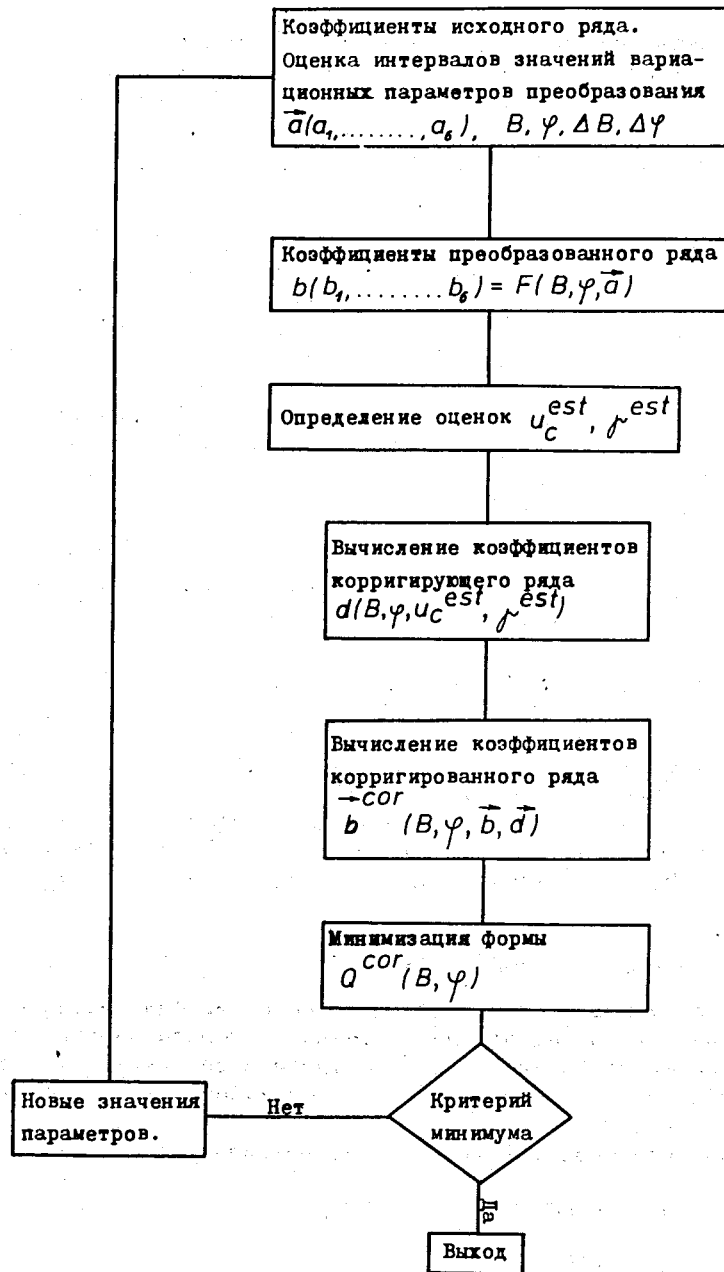
Проверку эффективности предложенного метода проведем на примере двух типов рядов: для специально сконструированных тестовых функций и для высокотемпературной восприимчивости модели Гейзенберга со спином  $S=1/2$  на трех кубических решетках /п.к., о.ц.к. и г.ц.к./.

В качестве простых функций рассматриваем следующие:

$$/A/ \quad (1 + 1,25x)^{-0.25} (1 - 1,6x)^{-1.4},$$

$$/B/ \quad (1 + 2x)^{-0.25} (1 - 1,6x)^{-1.4},$$

$$/C/ \quad (1 + 3,2x + 4x^2)^{0.25} (1 - 1,6x)^{-1.4}.$$



Блок-схема программы для вычисления коэффициентов оптимально преобразованного ряда.

Во всех случаях основная /"физическая"/ особенность выбрана на положительной полуоси, в точке  $x_c = 0,625$ , и имеет показатель  $\gamma = 1,4$ . В тестах /А/ и /В/ смущающая особенность находится на отрицательной полуоси, соответственно в точках  $x_1 = -0,80$  и  $x_1 = -0,50$ , и имеет степенной показатель  $\gamma_1 = 0,25$ . В случае /С/ включена пара комплексно сопряженных смущающих особенностей в точках  $z_1 = -0,4 + 0,3i$  и  $z_1^* = -0,4 - 0,3i$ .

В табл. 1 и 2 приводятся результаты анализа первых 6 членов разложения функций /А/, /В/ и /С/ в степенной ряд. Методом отношений  $\rho_n$  и  $\tilde{\rho}_n$  анализировались как исходный ряд - первая колонка, так и преобразованный ряд без коррекции и с коррекцией - соответственно вторая и четвертая колонки. Окончательные оценки для критической точки и критического показателя /в скобках/ и приведенные характеристики разброса их значений определены из экстраполянтов Невилля  $\rho_5^{(1)}, \rho_6^{(1)}, \rho_5^{(2)}$  и  $\rho_6^{(2)}$  /см. /6/, /8//. Оценки, полученные из паде-аппроксимантов [2,2], [3,2] и [2,3] для логарифмической производной от оптимально преобразованного ряда без коррекции и с коррекцией, приведены соответственно в третьей и пятой колонках. При анализе путем предварительного применения метода оптимального преобразования результаты разбиваются на две группы в зависимости от того, которая из величин  $\rho_n$  или  $\tilde{\rho}_n$  - кладется в основу критерия оптимальности /см. /38/, /40//. Для более сложной тестовой функции /С/ даны также оценки, полученные методом Бейкера, - табл.2, шестая колонка.

На основе этих результатов можно сделать следующие выводы. Точность оценок, получаемых при применении метода оптимального преобразования, существенно улучшается после частичной коррекции по отношению к особенностям, вводимым преобразованием комплексного переменного. В результате преобразования и коррекции достигается более удовлетворительная согласованность между оценками, полученными из анализа по методу отношений, с одной стороны, и по методу паде-аппроксимантов - с другой. Ошибка в средней оценке, вытекающей из паде-аппроксимантов [2,2], [3,2] и [2,3], не превышает 0,3% для  $x_c$  и 1,5% для  $\gamma$  в случае теста /А/ и 0,6 и 2% соответственно в случае теста /В/. Так как смущающие особенности в обоих случаях находятся на отрицательной полуоси и вызывают осцилляции коэффициентов ряда, то использование  $\tilde{\rho}_n$  вместо  $\rho_n$  при анализе по методу отношений приводит к заметному лучшему результату. Остаточная неточность оценок связана с тем, что мы уменьшили число вариационных параметров, полагая в корректирующей функции  $\gamma^{cor} = \gamma^{est}$ , где значение  $\gamma^{est}$  определяется самосогласованным образом из оценки для  $\gamma$ . Если положить  $\gamma^{cor} = 1,65$ , как следовало бы из явного вида особенности функций /А/ и /В/ в бесконечно удаленной точке, то все методы анализа преобра-



Таблица 1

Тест	Кри-те-рий	Метод отно-шений	Метод оптимального преобразования			
			Без коррекции		С коррекцией	
			1	2	3	4
А	$\rho$	0.627 <sub>62</sub> (I.42 <sub>47</sub> )	0.599 <sub>2</sub> (I.166 <sub>6</sub> )	0.635 (I.48)	0.620 <sub>2</sub> (I.352 <sub>10</sub> )	0.621 (I.37)
				0.627 (I.42)		0.625 (I.40)
	$\tilde{\rho}$	0.631 <sub>18</sub> (I.50 <sub>14</sub> )	0.6000 <sub>4</sub> (I.176 <sub>1</sub> )	0.654 (I.64)	0.6270 <sub>2</sub> (I.428 <sub>1</sub> )	0.627 (I.42)
				0.635 (I.48)		0.625 (I.40)
Б	$\rho$	0.59±8.9 (I.42± 5.45)	0.603 <sub>3</sub> (I.156 <sub>5</sub> )	0.870±0.298i	0.616 <sub>4</sub> (I.327 <sub>15</sub> )	0.615 (I.34)
				0.698 (2.07)		0.623 (I.38)
	$\tilde{\rho}$	0.629 <sub>16</sub> (I.48 <sub>8</sub> )	0.609 <sub>1</sub> (I.174 <sub>2</sub> )	0.670±0.403i	0.623 <sub>1</sub> (I.395 <sub>6</sub> )	0.625 (I.40)
				0.988±0.014i		0.624 (I.39)
				0.625 (I.40)		0.625 (I.40)

Таблица 2

Тест	Кри-те-рий	Метод отно-шений	Метод оптимального преобразования				Метод Фейкера
			Без коррекции		С коррекцией		
			1	2	3	4	
С	$\rho$	0.66 <sub>36</sub> (I.84± 2.14)	0.579 <sub>3</sub> (I.109 <sub>4</sub> )	0.594 (I.21)	0.630 <sub>1</sub> (I.434 <sub>3</sub> )	0.631 (I.44)	0.591 (I.19)
				0.599 (I.23)		0.631 (I.44)	
	$\tilde{\rho}$	0.656 <sub>42</sub> (I.72 <sub>32</sub> )	0.5819 <sub>3</sub> (I.125 <sub>1</sub> )	0.598 (I.22)	0.636 <sub>1</sub> (I.475 <sub>3</sub> )	0.631 (I.44)	0.599±0.061i
				0.599 (I.22)		0.622 (I.38)	
				0.599 (I.22)		0.617 (I.36)	

зованных и скорректированных рядов приводят к точным значениям для  $x_c$  и  $y$ . Остановимся на этом вопросе подробнее.

Логарифмические производные от тестовых функций /А/ и /В/ являются простыми дробно-рациональными функциями с двумя полюсами первого порядка в точках  $x_1$  и  $x_c$ . Поэтому все паде-аппроксиманты [1,2], [2,2], [3,2], [2,3] и [1,4] к логарифмической произвольной от исходного ряда дают точные значения для особых точек  $x_1$  и  $x_c$ , а также для соответствующих степенных показателей  $y_1$  и  $y$ . В этом случае преобразование Эйлера /10/ может удалить смущающую особенность  $(1-z|x_1|)^{-0.25}$  в бесконечность, но тогда особенность  $z^{-1.65}$  функций /А/ и /В/ в бесконечно удаленной точке появится в точке  $x_c + |x_1|$ , возмущая, в свою очередь, поведение коэффициентов ряда. Поэтому при отсутствии точной компенсации особенности  $(1-bu/a)^{1.65}$  самосогласованная оптимизационная процедура приводит к "компромиссному" решению, при котором в  $u$ -плоскости обе смущающие особенности  $(1-u/u_1)^{-0.25}$  и  $(1-bu/a)^{1.65}$  будут на достаточно большом, но конечном расстоянии от начала координат. Таким образом достигается максимальная компенсация их влияния на коэффициенты ряда. Этим обстоятельством объясняется то, что только паде-аппроксимант [2,3] для преобразованного ряда дает точный результат независимо от того, производится выбранная нами частичная коррекция или нет.

Из вышесказанного ясно, что если в случае теста /С/ провести преобразование комплексного переменного без точной коррекции, то число смущающих особенностей в конечной области  $u$ -плоскости превысит максимальное число полюсов у паде-аппроксимантов вида  $[M-1, M]$ ,  $M=1,2,\dots$ , которые можно построить из шести коэффициентов. Поэтому ни один из доступных паде-аппроксимантов для преобразованного ряда не даст точного результата. Несмотря на это, оценки для  $x_c$  и  $y$ , полученные путем усреднения по аппроксимантам [2,2], [3,2] и [2,3], отличаются от точных значений менее чем на 1% для  $x_c$  и 3% для  $y$ , если применен метод оптимального преобразования с частичной самосогласованной коррекцией. В этом случае оптимальными параметрами являются  $B=0,48$  и  $\phi=140^\circ$ , что очень близко к модулю ( $|z_1|=0,5$ ) и аргументу ( $\arg z_1=143^\circ$ ) комплексно-сопряженных смущающих особенностей в функции /С/. Без применения коррекции метод оптимального преобразования дает ошибку в 4,2-4,5% при определении  $x_c$  и 13% при определении  $y$ , и метод Бейкера - соответственно 6% и 16%.

Предлагаемый метод оптимального преобразования был применен также для анализа хорошо известных высокотемпературных рядов для восприимчивости в модели Гейзенберга /спин 1/2 / на трех кубических решетках. В этом случае мы сравниваем полученные нами из анализа шести коэффициентов результаты с лучшими существующими оценками, основанными на известных девяти /г.ц.к./ или десяти /п.к. и о.ц.к./ коэффициентах <sup>14,16,17/</sup>.

Таблица 3

Тип решетки	Критерий	Оценки критических параметров		Исходный ряд из 6 коэффициентов		Метод Бейкера	Метод оптимального преобразования			
		1	2	3	4		5	6	7	8
простая кубическая	ρ	0.588 (I.33)	0.5962 [I6] (I.43 <sub>1</sub> )	0.61 <sub>20</sub> (I.45 <sub>1</sub> I.35)	0.481 (0.68)	0.511 (0.86)	0.548 <sub>2</sub> (I.060 <sub>4</sub> )	0.558 (I.12)	0.602 <sub>7</sub> (I.392 <sub>20</sub> )	0.613 (I.43)
			0.5959 <sub>50</sub> [I4] (I.36 <sub>4</sub> )		0.321±0.095	0.529 (0.96)		0.544 (I.06)	0.550 (I.08)	0.650 (I.48)
	ρ̃	0.5942 <sub>20</sub> [I7] (I.395 <sub>30</sub> )	0.560 <sub>75</sub> (I.16 <sub>66</sub> )	0.323±0.173	0.561 (I.15)	0.5443 <sub>5</sub> (I.059 <sub>2</sub> )	0.541 (I.04)	0.543 (I.05)	0.574 <sub>8</sub> (I.28 <sub>2</sub> )	0.565 (I.19)
объемно-центрированная	ρ	0.392 (I.33)	0.3973 [I6] (I.43 <sub>1</sub> )	0.393 <sub>14</sub> (I.36 <sub>18</sub> )	0.392 (I.35)	0.393 (I.35)	0.354 <sub>4</sub> (I.04 <sub>1</sub> )	0.381 (I.25)	0.3962 <sub>6</sub> (I.392 <sub>4</sub> )	0.397 (I.40)
			0.3946 <sub>15</sub> [I4] (I.36 <sub>6</sub> )		0.391 (I.33)	0.392 (I.34)		0.393 (I.35)	0.402 (I.40)	0.392 (I.34)
	ρ̃	0.3965 <sub>20</sub> [I7] (I.41 <sub>4</sub> )	0.401 <sub>7</sub> (I.54 <sub>9</sub> )	0.391 (I.32)	0.391 (I.32)	0.397 <sub>4</sub> (I.44 <sub>5</sub> )	0.392 (I.34)	0.3983 <sub>1</sub> (I.4180 <sub>4</sub> )	0.3957 (I.386)	0.3952 (I.382)

табл. 3 /продолжение/

Гранецентрированная		1	2	3	4	5	6	7	8	9
		ρ		0.2492 [I6] (I.43 <sub>1</sub> )	0.2484 <sub>25</sub> (I.412 <sub>42</sub> )	0.229 (0.86)	0.2545 (I.504)	0.2454 <sub>16</sub> (I.320 <sub>35</sub> )	0.2430 (I.26)	0.24791 <sub>1</sub> (I.3882 <sub>2</sub> )
ρ̃	0.246 (I.33)	0.2475 <sub>15</sub> [I4] (I.36 <sub>4</sub> )		0.244 (I.28)	0.2428 (I.232)	0.2436 (I.27)	0.2423 (I.24)	0.2478 (I.382)	0.2473 (I.368)	
										0.2485 <sub>7</sub> [I7] (I.405 <sub>35</sub> )
							0.2403 (I.21)	0.2478 (I.382)	0.2476 (I.375)	

В первой колонке табл.3 приводятся оценки для критической точки и критического показателя /в скобках/, полученные в ранних работах /18-20/, посвященных этим рядам, когда были известны лишь первые 6 коэффициентов. Во второй колонке даны современные оценки. Как видно из таблицы, анализ короткого ряда из шести коэффициентов по методу отношений /колонка 3/ и паде-аппроксимантов к логарифмической производной от восприимчивости /колонка 4 - для исходного ряда и колонка 5 - для ряда, преобразованного по методу Бейкера/ сразу дает первые два знака оценки для критической точки в случае о.ц.к. и г.ц.к. решеток, тогда как для п.к. решетки  $x_c$  получается с ошибкой порядка 10%. Применение метода оптимального преобразования приводит к значительному улучшению согласованности между паде-аппроксимантами и результатами анализа по методу отношений. В частности, это особенно ясно проявляется в случае п.к. решетки.

Таблица 3 показывает, что в случае о.ц.к. и г.ц.к. решеток для преобразованного и скорректированного рядов из шести коэффициентов получаются результаты /по методу отношений - колонка 8, из паде-анализа - колонка 9/, которые практически не отличаются от лучших современных оценок, сделанных на основе рядов из большего числа членов /колонка 2/.

Иное положение наблюдается в случае п.к. решетки. Хотя преобразованные ряды существенно более регулярны, чем исходные, различие в оценках для  $x_c$ , полученных по методу отношений и из паде-аппроксимантов, указывает на необходимость проведения более обстоятельного анализа /см., например, /3.10/ /. Все-таки после преобразования и коррекции результат для  $x_c$ , согласно методу отношений, отличается лишь на 1-3% от результата работы /17/, а с помощью простого паде-анализа  $x_c$  оценивается с ошибкой порядка 3-5%, что намного лучше оценки, полученной по методу Бейкера.

Приведенные выше примеры позволяют считать, что в результате применения предлагаемого нами метода оптимального преобразования получают ряды со значительно более регулярным поведением коэффициентов. Таким образом, на основе анализа хотя и коротких исходных рядов простыми методами можно получить довольно точные оценки для критических параметров.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Rushbrooke G.S., Baker G.A., Jr., Wood P.J. In: Phase Transitions and Critical Phenomena, vol.3. Series Expansions for Lattice Models (Ed. by C.Domb and M.Green). Academic Press, London, 1974.
2. Domb C. a) *ibid*; b) *Adv.Phys.*, 1970, 19, p.339.

3. Gaunt D.S., Guttman, *ibid*.
4. Domb C. In: Proc. of the Enrico Fermi Summer School of Physics, Varenna (Ed. by M.S.Green). Academic Press, N.Y., 1971.
5. Fisher M.E. *Rep. Progr.Phys.*, 1967, 30, p.615.
6. Pearce C.J. *Adv. Phys.*, 1978, 27, p.89.
7. Paul G., Stanley H.E. *Phys.Rev.*, 1972, B5, p.2578.
8. Stanley H.E. *Phys.Rev.*, 1967, 158, p.546.
9. Park D. *Physica*, 1956, 22, p.932.
10. Hunter D.D., Baker G.A., Jr. *Phys.Rev.*, 1973, B7, p.3346.
11. Guttman A.J. *J.Phys.*, 1969, C2, p.1900; Thompson C.J., Guttman A.J., Ninham B.W., *ibid*, p.1889.
12. Baker G.A., Jr., Hunter D.L. *Phys.Rev.*, 1973, B7, p.3377.
13. Guttman A.J., Joyce G.S. *J.Phys.*, 1972, A5, p.81.
14. Lee M.H., Stanley H.E. *Phys.Rev.*, 1971, B4, p.1613.
15. Charles H.K., Jr., Joseph R.I. *Phys.Rev.*, 1973, B7, p.2046.
16. Baker G.A., Jr. et al. *Phys.Rev.*, 1967, 164, p.800.
17. Pearce C.J., Buckingham M.J. *J.Phys.*, 1976, A9, p.L107.
18. Domb C., Sykes M.F. *Phys.Rev.*, 1962, 128, p.168.
19. Gammel J., Marshall W., Morgan L- *Proc.Phys.Soc. (London)*, 1963, A275, p.257.
20. Baker G.A., Jr. *Phys.Rev.*, 1964, 136, p.A1376.

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 июля 1980 года.