

УДК 537.226

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БАЗИСА ГРЕБНЕРА ПРИ ПОСТРОЕНИИ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ МЕТОДАМИ ТЕОРИИ КАТАСТРОФ

**А.П. Шамшин, Т.М. Изотова, Э.В. Матюшкин,
А.В. Десятниченко**

Украинская государственная академия железнодорожного
транспорта

Украина, г. Харьков, пл. Фейербаха, 7

Анализ фазовых переходов (ФП) сегнетоэлектриков, ферромагнетиков и т.д. производится путем построения термодинамического потенциала, являющегося инвариантом относительно группы симметрии высокотемпературной фазы. Имеется несколько способов, с помощью которых можно записать термодинамический потенциал системы, например, прямой метод построения полиномиальных инвариантов, метод построения целого рационального базиса инвариантов (ЦРБИ) и др. [1-4].

В последнее время для построения термодинамического потенциала используется теория катастроф [5,6], имеющая ряд преимуществ по сравнению со стандартными методиками. Во-первых, не требуется малости параметра порядка. Во-вторых, модели, построенные с помощью теории катастроф, дают адекватное поведение системы вблизи точки ФП. В третьих, эти модели избавляют от появления нефизичных, структурно-неустойчивых результатов.

При построении термодинамического потенциала системы, с помощью теории катастроф возникает необходимость нахождения миниверсальной деформации нормальной формы. Для функций общего положения используется метод последовательных приближений или метод спектральной последовательности фильтрации Кошуля [7], заключающийся в нахождении градиентного идеала квазиоднородных составляющих f_i потенциала Φ

$$\Phi = f_0 + f_1 + f_2 + \dots$$

Сначала находится градиентный идеал f_0 , действием на нее всеми полями из алгебры U :

$$I_{\nabla f_0} = R_i(\vec{\eta}) \frac{\partial f_0}{\partial \eta_i}$$

где $R_i(\vec{\eta})$ - произвольный полином, η_i — компоненты параметра порядка.

Затем находится градиентный идеал $I_{\nabla f_1}$, действуя всеми полями из U , сохраняющими f_0 :

$$sf_0 = 0, \quad s \in S_{f_0},$$

S_{f_0} - стационарная алгебра f_0 .

Далее находится градиентный идеал $I_{\nabla f_2}$ при действии полей из U , сохраняющих f_1 :

$$s(f_0 + f_1) = 0, \quad s \in S_{f_0+f_1}$$

и т. д.

В итоге получают локальную алгебру особенности потенциала Φ , которая определяется фактором кольца полиномов $R_i(\vec{\eta})$ по градиентному идеалу $I_{\nabla f}$:

$$Q = R(\vec{\eta}) / I_{\nabla f}$$

Нахождение нормальной формы и миниверсальной деформации термодинамического потенциала, описывающего физические свойства данной системы с учетом симметрии, в теории катастроф обычно проводится с использованием эквивариантных векторных полей в пространстве параметра порядка

$$V_k = \sum_i \nabla_i J_k \frac{\partial}{\partial x_i},$$

$$\text{где } \nabla_i J_k = \frac{\partial J_k}{\partial x_i},$$

или в пространстве инвариантов из ЦРБИ:

$$U_k = \sum_{m,i} (\nabla_i J_k \nabla_i J_m) \frac{\partial}{\partial J_m}$$

Затем, применяя метод последовательных приближений, находится термодинамический потенциал с учетом числа варьируемых параметров.

В работе рассмотрено применение современных математических методов алгебры и теории катастроф для нахождения термодинамического потенциала. В случае построения термодинамического потенциала в пространстве параметров порядка предлагаемый ниже метод нахождения базиса Гребнера и идеала старших членов, идеала однородной

части и ее градиентов по параметрам порядка дает мономы, входящие в миниверсальную деформацию уже на первом шаге. При работе в кольце инвариантов ЦРБИ для получения локальной алгебры приходится использовать последовательные приближения, но их число существенно меньше, чем при обычной методике, а процедура нахождения образующих градиентного идеала, на наш взгляд, проще метода «разгадывания кроссвордов».

Методика построения термодинамического потенциала Φ следующая.

На первом шаге записывается формальный ряд Тейлора по параметрам порядка и инвариантам из ЦРБИ. Далее, задается число внешних варьируемых параметров. Находится однородная часть наименьшей степени f_0 . Действуя векторными полями V_i или U_i , находим образующие градиентного идеала. Пусть идеал будет образован полиномами $I = \langle f_0, U_i f_0 \rangle$ и используется градуированное лексикографическое упорядочение. Находим базис Гребнера G идеала I . Затем находим идеал старших членов базиса Гребнера $\langle LT(I) \rangle$. Степени мономов идеала $\langle LT(I) \rangle$ будут координатами на диаграмме Ньютона, выше и правее которых находятся мономы, принадлежащие идеалу I , а ниже и левее – мономы, входящие в факторкольцо $k[x_1, \dots, x_n]/I$. То есть для заданного $f \in R(\vec{\eta})$ остатки деления f на базис Гребнера $\bar{f}^G$ являются линейной комбинацией S мономов, которые не входят в область идеала I .

При нахождении эквивариантных векторных полей в пространстве инвариантов возникает необходимость вычисления матричных элементов $a_{km} = V_k J_m$, которые выражаются через инварианты группы. Заметим, что поиск a_{km} можно существенно упростить, используя идеал соотношений и следующее Предложение 1 [8]:

Пусть $k[x_1, \dots, x_n]^G = k[f_1, \dots, f_m]$. Рассмотрим идеал

$$J_F = \langle f_1 - y_1, \dots, f_m - y_m \rangle \subset k[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n],$$

1. I_F является n -м исключаяющим идеалом идеала J_F , т.е.

$$I_F = J_F \cap k[y_1, \dots, y_n].$$
2. Зафиксируем мономиальное упорядочение в кольце $k[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n]$, такое, что моном, содержащий хотя бы одну из переменных $x_1, \dots, x_n$ больше любого

монома из $k[x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_n]$ и пусть G – базис Гребнера идеала J_F . Тогда $G \cap k[y_1, \dots, y_n]$ является базисом Гребнера идеала I_F относительно индуцированного мономиального упорядочения в $k[y_1, \dots, y_n]$.

Так как $V_k J_m, J_i$ образуют кольцо инвариантов $k[J_1, \dots, J_n]^{Gr} = k[V_k J_m, J_1, \dots, J_n]$, где Gr – группа симметрии высокосимметричной фазы кристалла, то положим $F = (V_k J_m, J_1, \dots, J_n)$ и пусть $u, v, \dots, w$ – новые переменные. Идеал соотношений определяется исключением $J_1, \dots, J_n$ из системы

$$V_k J_m = u$$

$$J_1 = v$$

$$\vdots$$

$$J_n = w$$

Задаем лексикографическое упорядочение $J_1 > \dots > J_n > u > v > \dots > w$, и находим базис Гребнера идеала $J_F = \langle u - V_k J_m, v - J_1, \dots, w - J_n \rangle$. Исключающий идеал содержит полином (или несколько полиномов), в который не входят инварианты из ЦРБИ $J_1, \dots, J_n$. Этот полином дает искомое выражение a_{km} через инварианты группы $J_1, \dots, J_n$.

Построим термодинамический потенциал в случае, если параметр порядка преобразуется по представлениям точечной группы C_{6v} с одним варьируемым параметром – a_1 .

Инварианты группы C_{6v} :

$$J_1 = \frac{1}{2}(\eta_1^2 + \eta_2^2); \quad J_2 = \frac{1}{6}(\eta_1^3 - 3\eta_1\eta_2^2)^2.$$

Разложение термодинамического потенциала в ряд Тейлора

$$\Phi = a_1 J_1 + a_2 J_2 + a_3 J_1^2 + a_4 J_1 J_2 + a_5 J_2^2 + a_6 J_1^3 + a_7 J_1^2 J_2 + \dots =$$

$$\frac{1}{2} a_1 (\eta_1^2 + \eta_2^2) + \frac{1}{6} a_2 (\eta_1^3 - 3\eta_1\eta_2^2)^2 + \frac{1}{4} a_3 (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 + \frac{1}{12} a_4 (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 (\eta_1^3 - 3\eta_1\eta_2^2)^2 +$$

$$\frac{1}{36} a_5 (\eta_1^3 - 3\eta_1\eta_2^2)^4 + \frac{1}{8} a_6 (\eta_1^2 + \eta_2^2)^3 + \frac{1}{24} a_7 (\eta_1^2 + \eta_2^2)^2 (\eta_1^3 - 3\eta_1\eta_2^2)^2 + \dots$$

Эквивариантные векторные поля в пространстве параметра порядка

$$V_1 = \eta_1 \frac{\partial}{\partial \eta_1} + \eta_2 \frac{\partial}{\partial \eta_2}$$

В рассматриваемом случае группы C_{6v} базисы Гребнера исключающих идеалов будут:

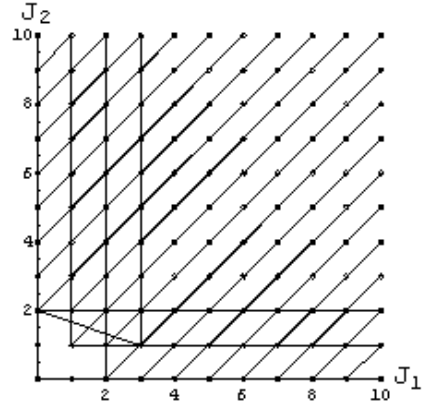
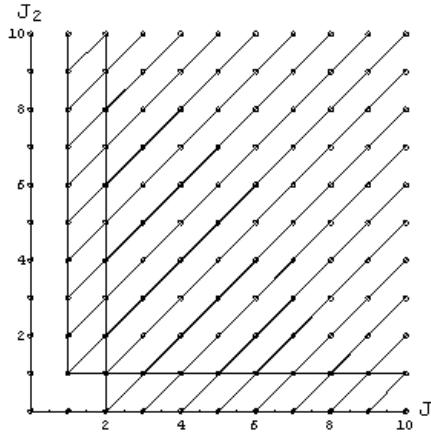
$$\begin{aligned}
G_{11} &= \{-u + 2v, -4v^2 + 3w + 18v^2\eta_2^2 - 24\eta_2^4 + 8\eta_2^6, 2v - \eta_1^2 - \eta_2^2\}, \\
G_{12} &= \{-u + 6w, 4v^2 - 3w - 18v^2\eta_2^2 + 24\eta_2^4 - 8\eta_2^6, 2v - \eta_1^2 - \eta_2^2\}, \\
G_{21} &= \{-u + 6w, 4v^2 - 3w - 18v^2\eta_2^2 + 24\eta_2^4 - 8\eta_2^6, 2v - \eta_1^2 - \eta_2^2\}, \\
G_{22} &= \{-u + 24v^2w, -4v^2 + 3w + 18v^2\eta_2^2 - 24\eta_2^4 + 8\eta_2^6, 2v - \eta_1^2 - \eta_2^2\}.
\end{aligned}$$

Тогда матричные элементы

$$a_{11} = 2v = 2J_1, \quad a_{12} = a_{21} = 6w = 6J_2, \quad a_{22} = 24v^2w = 24J_1^2J_2.$$

Искомые эквивариантные векторные поля запишутся в виде

$$\begin{aligned}
U_1 &= a_{11} \frac{\partial}{\partial J_1} + a_{12} \frac{\partial}{\partial J_2} = 2J_1 \frac{\partial}{\partial J_1} + 6J_2 \frac{\partial}{\partial J_2}, \\
U_2 &= a_{21} \frac{\partial}{\partial J_1} + a_{22} \frac{\partial}{\partial J_2} = 6J_2 \frac{\partial}{\partial J_1} + 24J_1^2J_2 \frac{\partial}{\partial J_2}
\end{aligned}$$



Действуя найденными

эквивариантными векторными полями на однородную часть $f_0 = a_3J_1^2$, находим образующие градиентного идеала: $U_1f_0 = 4a_3J_1^2$, $U_2f_0 = 12a_3J_1J_2$. Градиентный идеал запишется в виде $I = \langle J_1^2, J_1J_2 \rangle$. Его базис Гребнера $G = \{J_1J_2, J_1^2\}$. Идеал старших членов базиса Гребнера $\langle LT(I) \rangle = \langle J_1J_2, J_1^2 \rangle$. Показатели степени мономов из $\langle LT(I) \rangle$ (1,2) и (2,0) будут порождающими элементами идеала I .

Откладываем их на диаграмме Ньютона (рис. 1). Локальной алгебры не получилось. Для ее нахождения обычно используется метод последовательных приближений, согласно которому строится векторное поле $U = \alpha U_1 + \beta U_2$, где α и β некоторые полиномы, такие, что $Uf_0 = 0$, и далее действуют на однородную часть $f_1 = J_2$, в нашем случае шестой степени. Тогда

$$Uf_0 = a_3(2\alpha J_1^2 + 6\beta J_1J_2) = 0$$

Откуда $\alpha = 3J_2$; $\beta = -J_1$, и, следовательно,

$$U = 3J_2U_1 - J_1U_2 = 3(J_2^2 - 4J_1^3J_2) \frac{\partial}{\partial J_2}$$

Действуя U на f_1 , получаем

$$Uf_1 = 3(J_2^2 - 4J_1^3 J_2). \quad (1)$$

Как показано выше, в методе последовательных приближений находятся соотношения между новыми векторными полями U и векторными полями U_1 и U_2 . Воспользуемся снова для нахождения соотношений $U(U_1, U_2)$ Предложением 1. Базис Гребнера исключающего идеала будет равен

$$G_1 = \{36a_3 J^2 v - w^2, 3J_2 v - J_1 w, -12a_3 J_1 J_2 + w, -4a_3 J_1^2 + v\}$$

Подставляя $v = U_1(f_0)$, $w = U_2(f_0)$ во второй член базиса Гребнера, получаем формулу (1). Тогда идеал $I = \langle J_1^2, J_1 J_2, J_2^2 - 4J_1^3 J_2 \rangle$. Базис Гребнера $G = \{J_2^2, J_1 J_2, J_1^2\}$. Идеал старших членов $\langle LT(I) \rangle = \langle J_2^2, J_1 J_2, J_1^2 \rangle$. Факторкольцо по идеалу I $Q = k[J_1, J_2]/I = \{1, J_1, J_2\}$. Факторкольцо содержит конечное число членов и мы можем записать термодинамический потенциал

$$\Phi = a_1 J_1 + J_1^2 + \mu J_2$$

Построение в случае двух и более варьируемых параметров проводится аналогично.

Отметим, что нахождение базиса Гребнера и исключающих идеалов (соотношений между величинами) проводилось с помощью математической системы Maple, имеющей пакет расширения Groebner. Программа настолько проста, что состоит всего из одной строки (58 символов) при вычислении базиса Гребнера и двух строк при вычислении сизигий. Таким образом, использование базиса Гребнера и сизигий при построении термодинамического потенциала позволяет не только существенно упростить процедуру построения, но и компьютеризировать процесс построения.

Литература

1. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. – М.:Наука, 1984. – 248 с.
2. Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. – М.:Наука, 1982. – 304 с.

3. Леванюк А.П., Санников Д.Г. Несобственные сегнетоэлектрики.// УФН. – 1974. Т.112, №4. – С.561 – 588.
4. Спенсер Э. Теория инвариантов. М.: Мир, 1974. – 156 с.
5. Павлов С.В. Методы теории катастроф в исследовании фазовых переходов. – М.:Изд-во МГУ, 1993. 104 с.
6. Кутьин Е.И., Лорман В.Л., Павлов С.В. Методы теории особенностей в феноменологии фазовых переходов//УФН. 1991. Т.161, №6. – С.109 – 147.
7. Арнольд В.И., Варченко А.Н., Гусейн-Заде С.М. Особенности дифференцируемых отображений. Т.1. – М.: Наука, 1982. 304с.
8. Кокс Д., Литтл Дж., О’Ши Д. Идеалы, многообразия и алгоритмы. М.: Мир, 2000. –687 с.