arXiv:2301.11925v1 [math.NA] 23 Jan 2023

八极体与八面体对称性

YU. NESTERENKO

Abstract. 四阶球谐函数因能够再现八面体对称性，而广泛应用于体积框架场的设计。本文展示了如何使用三阶谐函数（八极子）实现相同目的，从而减少参数数量和计算复杂度。本文方法的关键要素包括

- 八极子流形的隐式方程，其中的八极子在乘以 -1 后具有八面体对称性，
- 用于度量八极体偏离指定对称性的相应旋转不变度量，
- 在场优化过程中补偿八极子缺乏对称性的平滑惩罚项。

1. Introduction

目前最常见的先进体积框架场设计方法采用四阶球谐函数来表示场值（见 [7, 11]）。这一选择十分自然，因为这类球谐函数构成了一个在线性空间内对三维旋转封闭、且包含具有八面体对称性的球谐函数的线性空间。此外，以隐式方程和惩罚函数形式表达这种对称性的代数条件也已为人所知（[10]）。

这种表示方法在实践中的主要缺点是空间维数为 9——这是参数化标架旋转所需最小维数的三倍。本文展示了如何通过从四阶球谐函数转向三阶球谐函数（亦称八极子）来降低维数（参见 Landau 和 Lifshitz [9]，其中阐明了其与张量形式的联系）。

简而言之，我们的建议是牺牲框架表示的一半对称性，但通过在平滑惩罚项中增加额外的对称性来予以补偿。

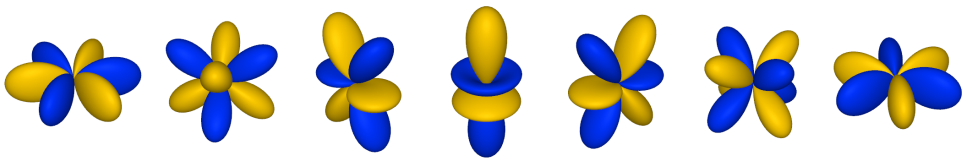


Figure 1. 基函数的球面图 $Y_{3,\ -3}$，...，$Y_{3,\ 3}$。

2. Semisymmetric octupoles

如前所述，我们考虑单位球面上三阶的实值球谐函数——八极子。这些多项式构成一个七维线性空间，其标准正交基为 $Y_{3,\,-3}$，……，$Y_{3,\,3}$（见 [6]）。

由于它们是奇函数，除零函数外，没有任何八极子本身具有八面体对称性，但其中一些模具有这种对称性。图1展示了两个半对称 八极子——$Y_{3,\,-2}$ 和 $Y_{3,\,2}$ ——它们具有一半的八面体对称变换（其余对称变换则在乘以 -1 后成立）。

由于我们所处的空间是拉普拉斯算子的特征空间，其中函数的所有可能旋转仍属于同一空间，并且可以表示为其基函数的线性组合。

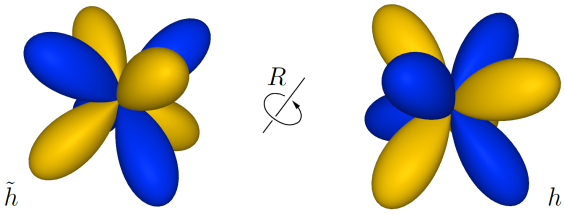


Figure 2. 参考调和函数及其旋转。

这尤其适用于半对称调和函数。此外，在坐标形式下，这类所有调和函数均可由一个参考函数（设为$Y_{3,\,-2}$）通过以下公式得到

$$a = R_x(\alpha) \times R_y(\beta) \times R_z(\gamma) \times \tilde{a}.$$

这里，$\tilde{a} = (0,\ 1,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0,\ 0)^T$ 和 a 分别是参考谐波和旋转后谐波的坐标，而 α、β 和 γ 是相应旋转的欧拉角。

附录 A.1 描述了旋转矩阵 R_x、R_y 和R_z的构造。

从几何角度来看，所有 $a(\alpha,\ \beta,\ \gamma)$构成嵌入在 $\mathbf{R}^7$中的三维流形。下一个引理指出，这个流形只是二次曲面（即二阶超曲面）的交集。

引理1。 所有半对称八极子的流形由以下方程组给出

$$\begin{cases} a^T\, a = 1, \\ a^T\, M_k\, a = 0, \quad k = 1, \ldots, 3, \end{cases} \tag{2.1}$$

其中， M_1、 M_2、 M_3 是定义如下的对称矩阵。

$$M_1 = \begin{bmatrix} -5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -5 \end{bmatrix} \tag{2.2}$$

$$M_2 = \begin{bmatrix} 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & \sqrt{15} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & \sqrt{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{15} & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.3}$$

$$M_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{15} & 0 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & -\sqrt{15} & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{15} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & -\sqrt{15} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2.4}$$

证明思路。 给定的隐式方程可以通过标准技术得到：使用单位圆的有理参数化（以消去三角表达式），并构造 Gr¨obner 基（见 [5]）。该陈述可通过直接计算验证。

半对称八极子的流形拓扑见附录 A.2。

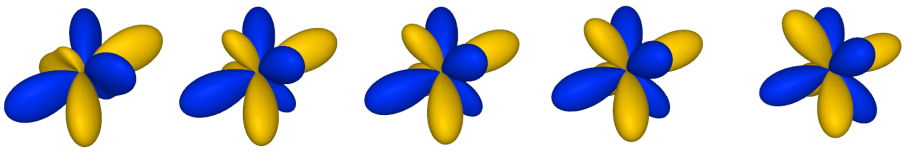


Figure 3. 迭代半对称化

3. Semisymmetry enforcement

现在，我们可以构造多项式惩罚函数，以强制其自变量——八极——满足半对称性。

引理2. 齐次四次多项式

$$
\begin{aligned}
d(a) = {} & 25a_{-3}^4 + 50a_{-3}^2a_{-2}^2 + 20\sqrt{15}a_{-3}a_{-2}^2a_{-1} - 10a_{-3}^2a_{-1}^2 + \\
& 30a_{-2}^2a_{-1}^2 + 8\sqrt{15}a_{-3}a_{-1}^3 + 21a_{-1}^4 - 40a_{-3}^2a_0^2 + 80a_{-2}^2a_0^2 + \\
& 32a_{-1}^2a_0^2 + 16a_0^4 + 120a_{-3}a_{-2}a_0a_1 - 16\sqrt{15}a_{-2}a_{-1}a_0a_1 - \\
& 10a_{-3}^2a_1^2 + 30a_{-2}^2a_1^2 - 24\sqrt{15}a_{-3}a_{-1}a_1^2 + 42a_{-1}^2a_1^2 + 32a_0^2a_1^2 + \\
& 21a_1^4 + 120a_{-3}a_{-1}a_0a_2 + 8\sqrt{15}a_{-1}^2a_0a_2 + 40\sqrt{15}a_{-3}a_{-2}a_1a_2 - \\
& 8\sqrt{15}a_0a_1^2a_2 + 50a_{-3}^2a_2^2 - 20\sqrt{15}a_{-3}a_{-1}a_2^2 + 30a_{-1}^2a_2^2 + \\
& 80a_0^2a_2^2 + 30a_1^2a_2^2 - 120a_{-2}a_{-1}a_0a_3 - 20\sqrt{15}a_{-2}^2a_1a_3 + \\
& 24\sqrt{15}a_{-1}^2a_1a_3 - 8\sqrt{15}a_1^3a_3 + 40\sqrt{15}a_{-2}a_{-1}a_2a_3 + \\
& 120a_0a_1a_2a_3 + 20\sqrt{15}a_1a_2^2a_3 + 50a_{-3}^2a_3^2 + 50a_{-2}^2a_3^2 - \\
& 10a_{-1}^2a_3^2 - 40a_0^2a_3^2 - 10a_1^2a_3^2 + 50a_2^2a_3^2 + 25a_3^4,
\end{aligned}
\tag{3.1}
$$

其中 $a = (a_{-3}, a_{-2}, a_{-1}, a_0, a_1, a_2, a_3) \in \mathbb{R}^7$ 由基 $Y_{3,-3}, \dots, Y_{3,3}$ 中的八极坐标组成，定义了八极偏离半对称性的旋转不变度量。

证明思路。 该结论可由构造此多项式的方法得出。该方法是对试探性非不变偏差度量进行平均

$$
\widehat{d}(a) = \sum_{k=1}^{3} (a^T M_k\, a)^2 \tag{3.2}
$$

在 SO_3 作用的轨道上。下一个公式可以通过直接计算验证。

$$
\begin{aligned}
d(a) \;&=\; \frac{1}{vol\, SO_3} \int\limits_{R \in SO_3} \widehat{d}(R \cdot a)\, d\mu = \\
&\frac{1}{8\pi^2} \int\limits_0^{2\pi} \int\limits_0^{\pi} \int\limits_0^{2\pi} \widehat{d}(R_z(\alpha) \times R_x(\beta) \times R_z(\gamma) \times a) \sin\beta \, d\gamma \, d\beta \, d\alpha.
\end{aligned}
\tag{3.3}
$$

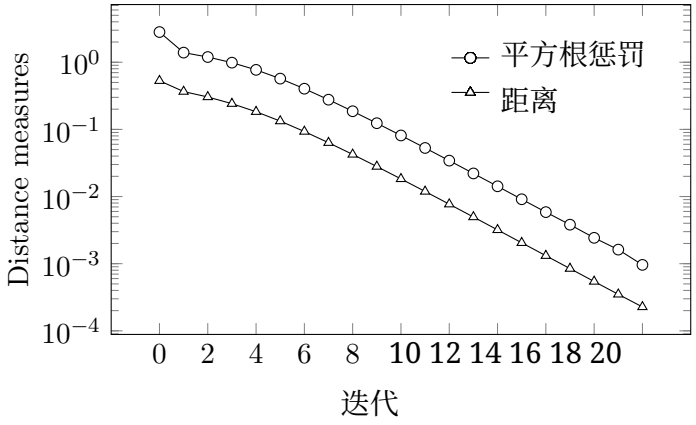
4. Numerical example

本节将展示偏差度量 (3.1) 的作用。我们采用尺度项与半对称性控制项的以下组合，并赋予正权重 $w_1 = 5$ 和 $w_2 = 2.5$

$$
p(a; w_1, w_2) = w_1 (a^T\, a - 1)^2 + w_2\, d(a), \tag{4.1}
$$

作为惩罚函数，并结合简单的梯度下降法。图3展示了样本初始八极向半对称八极收敛的过程。

下图展示了到最近半对称八极的距离以及惩罚值的平方根。可以看到， $p(a; w_1, w_2)$ 的平方根具有类似距离的行为。



请注意，由于式（4.1）在三维旋转下具有不变性，其对称化效果与取向无关。因此，在优化过程中将其应用于场值不会影响八极子的取向，但有助于保持其对称性。本主题将在下一节中讨论。

5. Fields smoothing

由于八极子仅在乘以 -1 的意义下具有八面体对称变换，我们需要通过以特殊方式定义场光滑性来对此进行补偿。为此，我们提出了一个相当直观的表达式 $|x-y|^2|x+y|^2$，将其作为平滑惩罚项。

因此，在离散情形下，最终的场能量（边界条件的考虑不在本文讨论范围内）变为

$$E = \sum_{a\sim b} |a-b|^2|a+b|^2 + \sum_a p(a, w_1, w_2). \tag{5.1}$$

其中，第一项用于强制保证光滑性，第二项负责在优化过程中保持场值的半对称性。

上述能量函数结合由粗到细的优化策略，所得结果与“经典”的标架场设计方法（[7, 11]）相当，同时每个标架仅使用 7 个而非 9 个未知量。

附录 A.3 给出了这种方法的两个简单示例。

6. Conclusion

已找出相差一个 -1 倍的具有八面体对称性的八极子流形的隐式方程，以及相应的旋转不变偏差度量。还构造了用于补偿八极子场对称性缺失的平滑惩罚项。

与现有方法相比，所得结果能够减少体积框架场设计问题中的未知数数量和计算成本。

7. Appendix A.1

3 阶球谐函数的旋转矩阵 R_x、 R_y 和 R_z 定义如下。

$$R_z(\gamma) = \begin{bmatrix} \cos 3\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sin 3\gamma \\ 0 & \cos 2\gamma & 0 & 0 & 0 & \sin 2\gamma & 0 \\ 0 & 0 & \cos\gamma & 0 & \sin\gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sin\gamma & 0 & \cos\gamma & 0 & 0 \\ 0 & -\sin 2\gamma & 0 & 0 & 0 & \cos 2\gamma & 0 \\ -\sin 3\gamma & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cos 3\gamma \end{bmatrix} \tag{7.1}$$

$$R_x(\frac{\pi}{2}) = \frac{1}{4}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \sqrt{10} & 0 & -\sqrt{6} & 0 \\ 0 & -4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & \sqrt{10} & 0 \\ -\sqrt{10} & 0 & -\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & -\sqrt{15} \\ \sqrt{6} & 0 & -\sqrt{10} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{15} & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{7.2}$$

$$R_y(\beta) = R_x(\frac{\pi}{2}) \times R_z(\beta) \times R_x(\frac{\pi}{2})^T \tag{7.3}$$

$$R_x(\alpha) = R_y(\frac{\pi}{2})^T \times R_z(\alpha) \times R_y(\frac{\pi}{2}) \tag{7.4}$$

请参阅 [2, 3, 4, 8] 以了解更多详情。

8. Appendix A.2

标架旋转流形具有商空间 SO_3 / S_4 的拓扑，其中 S_4 表示包含所有八面体对称变换的 24 阶群。半对称八极子仅在偶 S_4 变换下保持不变。因此，相应的拓扑为 SO_3 / A_4，其中 A_4 表示相应的子群。

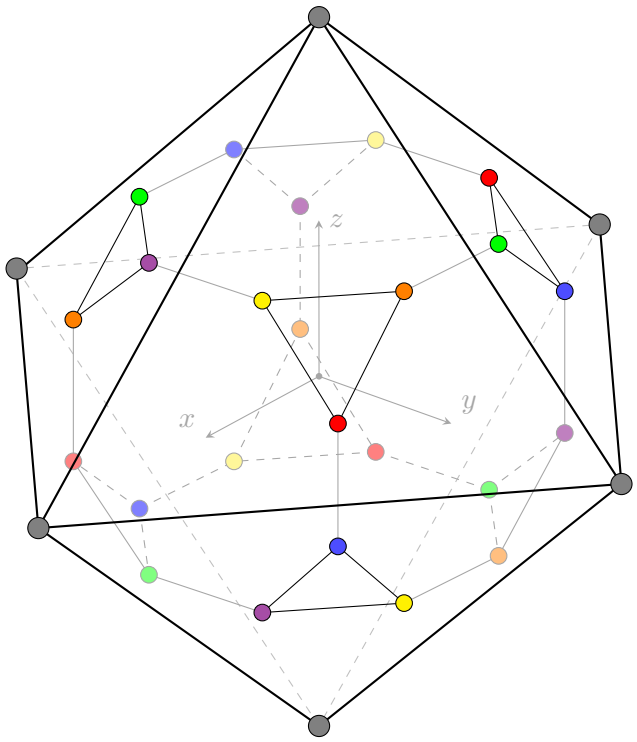


Figure 4. S_4 和 A_4 对称性的基本区域。

可以使用 $3D$ 旋转的 Rodriguez 表示来描述这些拓扑结构（见 [1]）。在这种表示中， S_4 对称性的基本区域呈截角立方体形状，具有 6 个正八边形面和 8 个正三角形面。对于 A_4 对称性，基本区域是正八面体。包含关系 $A_4 \subset S_4$ 意味着基本区域之间存在反向的包含关系（见图 4；请注意，三角形面两两共面）。

我们考虑的拓扑结构是通过粘合相对的八边形以及对应的相对三角形得到的，粘合时分别旋转 $45°$ 和 $60°$。图中的颜色表示顶点之间的映射关系。注意，八面体的所有顶点都重合，并对应于与参考八极相对的八极（即 $-Y_{3,\ -2}$）。

9. Appendix A.3

下图展示了使用能量函数 (5.1) 优化标架场后得到的常见奇异结构（见 [7, 11]）。

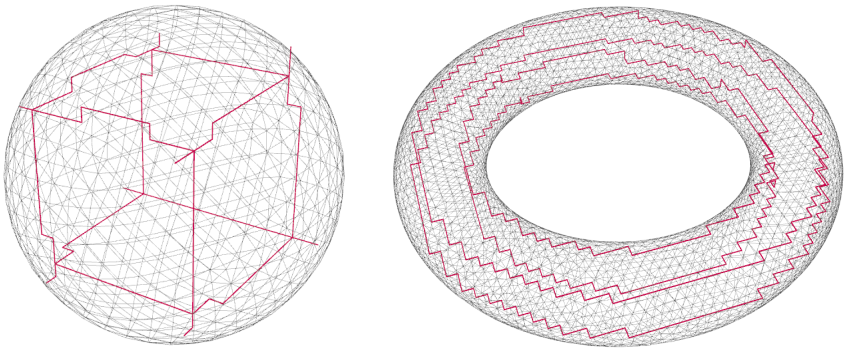


Figure 5. 标架场奇点的价数为 3。

References

[1] R. Becker 和 S. Panchanadeeswaran。以罗德里格斯向量表示晶体旋转。*Texture, Stress, and Microstructure*，10:167–194，1989。[2] M.A. Blanco、M. Florez 和 M. Bermejo。实球谐函数基底下旋转矩阵的计算。 *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*，419(1-3):19–27，1997。[3] C.H. Choi、J. Ivanic、M.S. Gordon 和 K. Ruedenberg。通过直接递归快速稳定地确定球谐函数之间的旋转矩阵。 *The Journal of Chemical Physics* 111 19 8825 8831, 1999 ，( ): – 。[4] J.R.A. Collado 、 J.F. Rico 、 R. Lopez 、 M. Paniagua 和 G. Ramirez。实球谐函数的旋转。 *Computer Physics Communications*，52(3):323–331，1989。[5] D. O'Shea、D. A. Cox、J. Little。 *Ideals, Varieties, and Algorithms*。《数学本科生教材》。施普林格，第 4 版，2015。[6] C. G¨orller-Walrand 和 K. Binnemans。晶场参数化的合理化。 *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*，23:121–283，1996。[7] J. Huang、Y. Tong、H. Wei 和 H. Bao。边界对齐的光滑三维交叉标架场。 *ACM Transactions on Graphics*，30(6):143:1–143:8，2011。[8] J. Ivanic 和 K. Ruedenberg。实球谐函数的旋转矩阵：通过递归直接确定。 *The Journal of Chemical Physics*，100(15):6342–6347，1996。[9] L. Landau 和 E. Lifshitz。 *The Classical Theory of Fields*，第 96–99 页。《理论物理教程》第 2 卷。佩加蒙出版社，英文修订第 3 版，1971。[10] Yu. Nesterenko。论具有八面体对称性的球谐函数。 *ArXiv*，2012.12614，2020。[11] N. Ray 和 D. Sokolov。论光滑三维标架场设计。 *ArXiv*，1507.03351，2015。

Siemens Digital Industries Software
Email address: Yuri.Nesterenko@siemens.com