Асимптотические результаты о координационных окружениях

А.В. Шутов

2022 год

Содержание

Разбиения

Разбиение пространства $\mathbb{R}^d$ есть коллекция счетного числа непустых компактных множеств $\{T_i\}_{i=1}^{\infty}$ таких, что

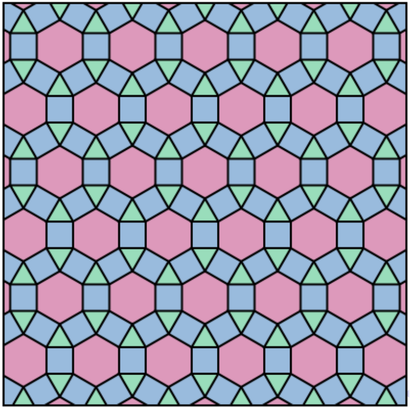
$$\mathbb{R}^d = \bigcup_{i=1}^{\infty} T_i,$$

$$Int(T_i) \cap Int(T_j) = \emptyset.$$

T_i называются тайлами разбиения.
Эквивалентные термины — мозаика, паркет, замощение.

Разбиения

Обычно предполагается, что любой тайл, с точностью до движения совпадает с элементом конечного множества $\{\mathcal{T}_1, \ldots, \mathcal{T}_m\}$. Его элементы называются прототайлами.



Отношение соседства

Отношение соседства – бинарное отношение $\sim$ на множестве тайлов разбиения, удовлетворяющее следующим условиям:

- Симметричность: $T_1 \sim T_2 \Longleftrightarrow T_2 \sim T_1$

Отношение соседства

Отношение соседства – бинарное отношение $\sim$ на множестве тайлов разбиения, удовлетворяющее следующим условиям:

- Симметричность: $T_1 \sim T_2 \iff T_2 \sim T_1$
- Конечность: число соседей любого тайла ограничено абсолютной константой

Отношение соседства

Отношение соседства – бинарное отношение $\sim$ на множестве тайлов разбиения, удовлетворяющее следующим условиям:

- Симметричность: $T_1 \sim T_2 \Longleftrightarrow T_2 \sim T_1$
- Конечность: число соседей любого тайла ограничено абсолютной константой
- Связность: для любых двух тайлов существует связывающая их цепь

Отношение соседства

Отношение соседства – бинарное отношение $\sim$ на множестве тайлов разбиения, удовлетворяющее следующим условиям:

- Симметричность: $T_1 \sim T_2 \iff T_2 \sim T_1$
- Конечность: число соседей любого тайла ограничено абсолютной константой
- Связность: для любых двух тайлов существует связывающая их цепь
- Кристаллографичность: для любого автоморфизма g разбиения $T_1 \sim T_2 \iff g(T_1) \sim g(T_2)$.

Отношение соседства

Примеры для $d = 2$

- Тайлы имеют общий участок границы ненулевой длины

Отношение соседства

Примеры для $d = 2$

- Тайлы имеют общий участок границы ненулевой длины
- Тайлы имеют общую точку

Отношение соседства

Примеры для $d = 2$

- Тайлы имеют общий участок границы ненулевой длины
- Тайлы имеют общую точку
- Тайлы имеют общий участок границы длины $\geq \varepsilon$

Графы и метрика

Каждому разбиению можно сопоставить погруженный в $\mathbb{R}^d$ граф.

Вершины – согласованно выбранные точки внутри тайлов (если тайлы связаны параллельным переносом, то выбранные точки связаны тем же переносом).

Точки соединены отрезком $\Longleftrightarrow$ соответствующие тайлы – соседние относительно отношения $\sim$.

При этом отрезки могут пересекаться в новых точках, не являющихся вершинами графа.

Графы и метрика

Каждому разбиению можно сопоставить погруженный в $\mathbb{R}^d$ граф.
Вершины – согласованно выбранные точки внутри тайлов (если тайлы связаны параллельным переносом, то выбранные точки связаны тем же переносом).
Точки соединены отрезком $\Longleftrightarrow$ соответствующие тайлы – соседние относительно отношения $\sim$.
При этом отрезки могут пересекаться в новых точках, не являющихся вершинами графа.
На разбиении/графе определена метрика $d(\cdot,\cdot)$ – расстояние между тайлами/вершинами полагается равным длине кратчайшей цепи.

Координационные окружения и форма роста

X – конечное множество тайлов (затравка).

$$d(x, X) = \min\{d(x, y) : y \in X\}.$$

Координационные окружения:

$$eq_n(X) = \{y : d(y, X) = n\}.$$

Координационные окружения можно также определить индуктивно:

- $eq_0(X) = X$
- $eq_n(X)$ – множество тайлов, соседних с тайлами из $eq_{n-1}(X)$ и не принадлежащих $eq_k(X)$ с $0 \leq k < n$.

Координационные окружения и форма роста

Если для некоторой точки $x \in X$ существует предел

$$\gamma = \lim_{n \to \infty} \frac{eq_n(X) - x}{n},$$

то он называется формой роста разбиения/графа. Здесь деление на n означает гомотетию с центром в начале координат и коэффициентом $\frac{1}{n}$.

Координационные окружения и форма роста

Если для некоторой точки $x \in X$ существует предел

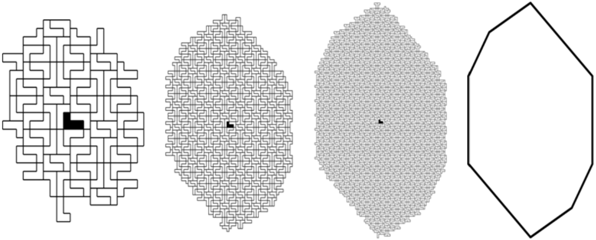
$$\gamma = \lim_{n\to\infty} \frac{eq_n(X) - x}{n},$$

то он называется формой роста разбиения/графа. Здесь деление на n означает гомотетию с центром в начале координат и коэффициентом $\frac{1}{n}$.

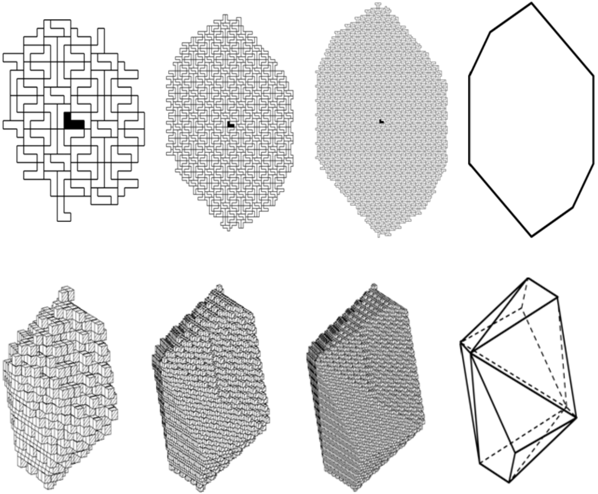
Утверждение

Если форма роста существует, то она не зависит от выбора затравки X.

Координационные окружения и форма роста



Координационные окружения и форма роста



Координационные последовательности и топологическая плотность

Координационные последовательности: x – тайл/вершина. n-ое координационное число

$$e_n(x) = \sharp eq_n(x).$$

Координационные последовательности и топологическая плотность

Координационные последовательности: x – тайл/вершина. n-ое координационное число

$$e_n(x) = \sharp eq_n(x).$$

Топологическая плотность

$$td(x) = \lim_{n\to\infty} \frac{\sum_{k=1}^{n} e_k(x)}{n^d}.$$

Координационные последовательности и топологическая плотность

Координационные последовательности: x – тайл/вершина. n-ое координационное число

$$e_n(x) = \sharp eq_n(x).$$

Топологическая плотность

$$td(x) = \lim_{n\to\infty} \frac{\sum_{k=1}^{n} e_k(x)}{n^d}.$$

Утверждение

Если топологическая плотность существует, то она не зависит от выбора x.

Периодический случай: форма роста

Разбиение/граф в $\mathbb{R}^d$ называется полномерно периодическим, если его группа автоморфизмов содержит подгруппу L, изоморфную $\mathbb{Z}^d$ и число орбит конечно.

Периодический случай: форма роста

Разбиение/граф в $\mathbb{R}^d$ называется полномерно периодическим, если его группа автоморфизмов содержит подгруппу L, изоморфную $\mathbb{Z}^d$ и число орбит конечно.

Теорема

Для любого полномерно периодического графа G форма роста существует и представляет собой выпуклый центрально симметричный многогранник pol_G.

Периодический случай: форма роста

Разбиение/граф в $\mathbb{R}^d$ называется полномерно периодическим, если его группа автоморфизмов содержит подгруппу L, изоморфную $\mathbb{Z}^d$ и число орбит конечно.

Теорема

Для любого полномерно периодического графа G форма роста существует и представляет собой выпуклый центрально симметричный многогранник pol_G.

Теорема

Существует абсолютная постоянная C такая, что для любого x $eq_n(x)$ содержится в C-окрестности многогранника $x + n \cdot pol_G$.

Периодический случай: форма роста

G – периодический граф в $\mathbb{R}^d$, L – d-мерная решетка периодов. Цепь Γ называется лучом, если выполняются условия:

- цепь является геодезической
- начальная и конечная вершины цепи сравнимы по модулю решетки L
- никакая другая пара вершин цепи не сравнима по модулю решетки L.

Периодический случай: форма роста

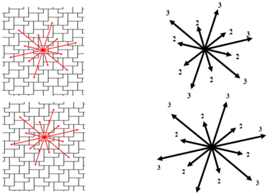
G – периодический граф в $\mathbb{R}^d$, L – d-мерная решетка периодов.
Цепь Γ называется лучом, если выполняются условия:

- цепь является геодезической
- начальная и конечная вершины цепи сравнимы по модулю решетки L
- никакая другая пара вершин цепи не сравнима по модулю решетки L.

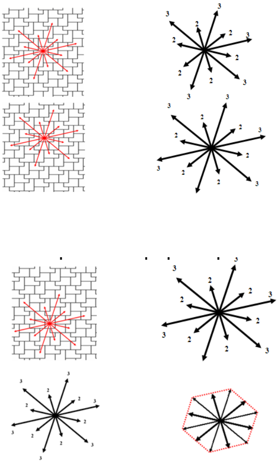
Теорема

Пусть Pol_G – выпуклая оболочка векторов вида $\frac{1}{d(\Gamma)}\overrightarrow{\Gamma}$, где Γ пробегает все лучи. Тогда pol_G – граница Pol_G.

Периодический случай: форма роста



Периодический случай: форма роста



Координационные последовательности и топологическая плотность

Теорема (Nakamura - Sakamoto - Mase - Nakagawa, 2021)

Для любого полномерно периодического графа G в $\mathbb{R}^d$ существуют числа n_0 и K, а также многочлены $P_0(x), \ldots, P_{K-1}(x)$ степени $d-1$ такие, что при $n > n_0$ и $n \equiv i \pmod{K}$ имеет место равенство

$$e_n(x) = P_i(n).$$

Координационные последовательности и топологическая плотность

Теорема (Nakamura - Sakamoto - Mase - Nakagawa, 2021)

Для любого полномерно периодического графа G в $\mathbb{R}^d$ существуют числа n_0 и K, а также многочлены $P_0(x), \ldots, P_{K-1}(x)$ степени $d-1$ такие, что при $n > n_0$ и $n \equiv i \pmod K$ имеет место равенство

$$e_n(x) = P_i(n).$$

Теорема

$$td = Z\frac{vol_d(Pol_G)}{|\det L|},$$

где Z – число вершин, различных относительно решетки

Обратная задача

Теорема

Выпуклый центрально-симметричный d-мерный многогранник pol является многогранником роста некоторого полномерно периодического графа тогда и только тогда, когда $\mathbb{Q}$-размерность пространства, порожденного векторами его ребер равна d.

Обратная задача

Теорема

Выпуклый центрально-симметричный d-мерный многогранник pol является многогранником роста некоторого полномерно периодического графа тогда и только тогда, когда $\mathbb{Q}$-размерность пространства, порожденного векторами его ребер равна d.

Следствие

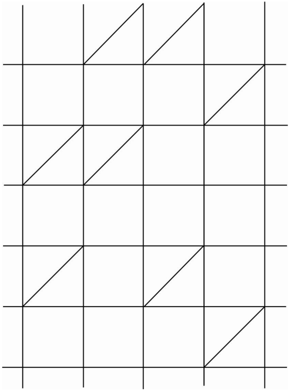
Правильный m-угольник является формой роста только при $m = 4, 6$. Среди правильных многоранников формами роста являются только куб и октаэдр.

Плоский случайный граф

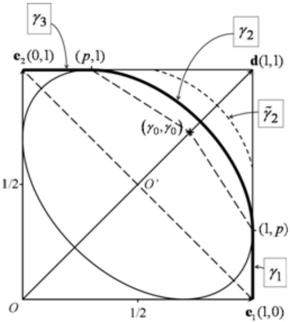
Множество вершин – решетка $\mathbb{Z}^2$. Вертикальные и горизонтальные ребра есть всегда, диагональ есть с вероятностью $p \in (0;1)$.

Плоский случайный граф

Множество вершин – решетка $\mathbb{Z}^2$. Вертикальные и горизонтальные ребра есть всегда, диагональ есть с вероятностью $p \in (0;1)$.



Плоский случайный граф



$$\gamma_1 : (1;0) - (1;p)$$

$$\gamma_2 : \frac{\delta^2}{p} + \frac{d^2}{q} = 1$$

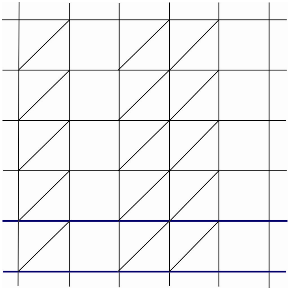
$$\delta = x + y - 1$$

$$d = x - y$$

$$\gamma_3 : (0;1) - (p;1)$$

Плоские 1-периодические графы

$l = (l_1, l_2) \in \mathbb{Z}^2$ – некоторый вектор.
Множество вершин – решетка $\mathbb{Z}^2$. Вертикальные и горизонтальные ребра есть всегда, в фундаментальной области решетки $l\mathbb{Z}$ диагональ есть с вероятностью $p \in (0; 1)$, далее диагонали расставляются по периодичности.



Плоские 1-периодические графы

Гипотеза

С вероятностью 1 форма роста существует и представляет собой выпуклый центрально-симметричный многоугольник. Число сторон равно $2|l_1 - l_2| + 6$ при $l_1 l_2 > 0$ и $2|l_1 - l_2| + 4$ при $l_1 l_2 \leq 0$.

Плоские 1-периодические графы

Гипотеза

С вероятностью 1 форма роста существует и представляет собой выпуклый центрально-симметричный многоугольник. Число сторон равно $2|l_1 - l_2| + 6$ при $l_1 l_2 > 0$ и $2|l_1 - l_2| + 4$ при $l_1 l_2 \leq 0$.

Теорема

Гипотеза верна при $|l_1 - l_2| \leq 1$, $l = (1, -1)$, $l = (0, 2)$.

Модельные множества

$\mathbb{R}^d$ – физическое пространство

Локально компактная абелева группа A – фазовое пространство

L – подгруппа в $\mathbb{R}^d \oplus A$ для которой фактор $\mathbb{R}^d \oplus A/L$ компактен.

Проекции $\pi_1 : \mathbb{R}^d \oplus A \to \mathbb{R}$ и $\pi_2 : \mathbb{R}^d \oplus A \to A$ такие, что образ L всюду плотен.

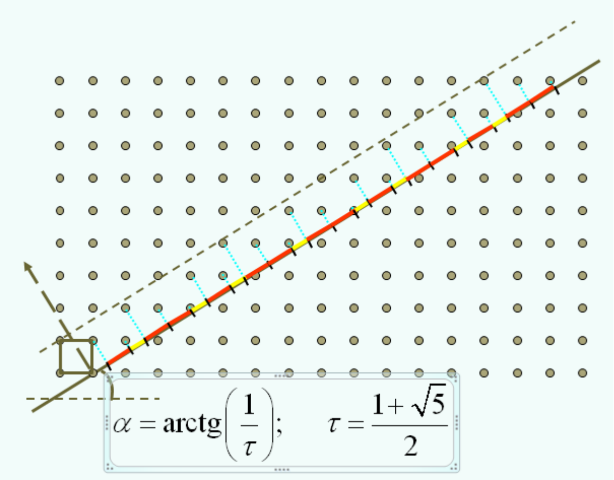
Подмножество $W \subset A$, называемое окном.

Модельное множество

$$\Lambda_W = \{\pi_1(x) : x \in L, \pi_2(x) \in W\}.$$

Примеры: разбиение Фибоначчи

Физическое и фазовое пространство: $\mathbb{R}$. $L = \mathbb{Z}^2$.



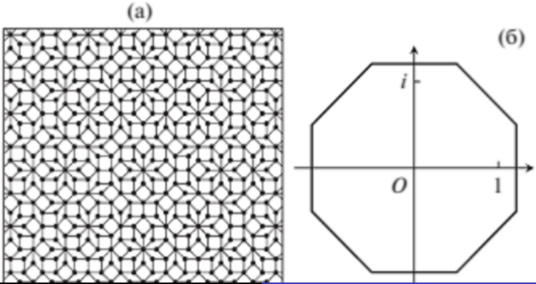
Примеры: разбиение Амманна-Бинкера

Физическое и фазовое пространство: $\mathbb{R}^2 = \mathbb{C}$, $L = \mathbb{Z}^4$.
$\zeta_8 = e^{\pi i/4}$,

$$\pi_1((h,j,k,l)) = h + j\zeta_8 + k\zeta_8^2 + l\zeta_8^3,$$

$$\pi_2((h,j,k,l)) = h + j\zeta_8^3 + k\zeta_8^6 + l\zeta_8.$$

Окно – правильный восьмиугольник со стороной 1.



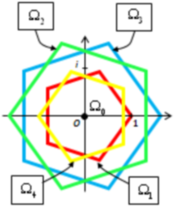
Примеры: разбиение Пенроуза

Физическое пространство: $\mathbb{R}^2 = \mathbb{C}$. Фазовое пространство: $\mathbb{C} \oplus C_5$. $L = \mathbb{Z}^4$. $\zeta_5 = e^{2\pi i/5}$,

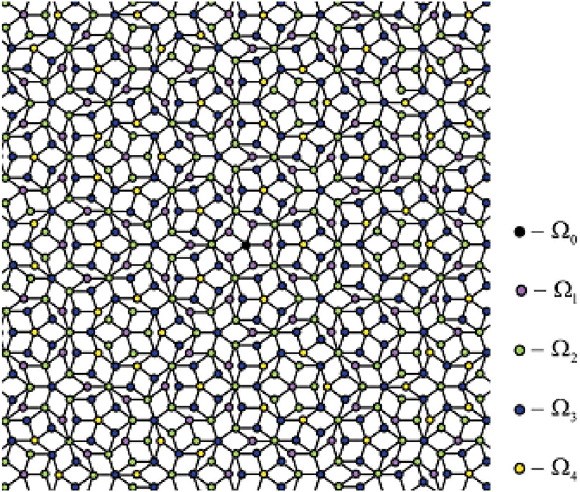
$$\pi_1((h, j, k, l)) = h + j\zeta_5 + k\zeta_5^2 + l\zeta_5^3,$$

$$\pi_2((h, j, k, l)) = (h + j\zeta_5^2 + k\zeta_5^4 + l\zeta_5, (h + j + k + l) \bmod 5).$$

Окно $W = \bigcup_{i=0}^4 (\Omega_i, i)$, где $\Omega_0 = \{0\}$, $\Omega_1 = P$, $\Omega_2 = \tau P$, $\Omega_3 = -\tau P$, $\Omega_4 = -P$. P – правильный пятиугольник с вершинами $1, \zeta_5, \zeta_5^2, \zeta_5^3, \zeta_5^4$.



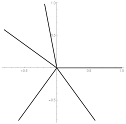
Примеры: разбиение Пенроуза

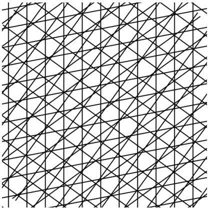


Multigrid разбиения

$g_1, \ldots, g_N$ – N единичных векторов в $\mathbb{R}^d$.
$\gamma_1, \ldots, \gamma_N$ – действительные параметры.

$$L_N = \{x \in \mathbb{R}^d : (x, g_i) - \gamma_i \in \mathbb{Z}\}$$





Multigrid разбиения

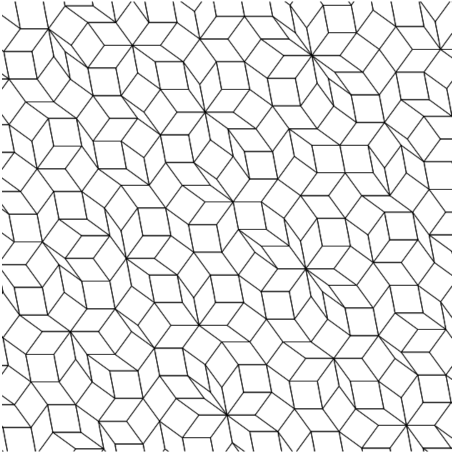
Multigrid называется регулярным, если в нем точки, в которой пересекается более d гиперплоскостей.

$$K_i(x) = \min\{n \in \mathbb{Z} : n \geq (x, g_i) - \gamma_i\}$$

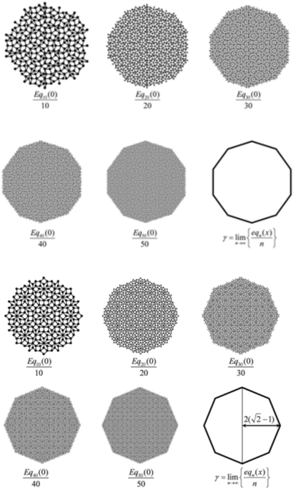
$$K(x) = \sum_{i=1}^{N} K_i(x) g_i$$

K постоянно на тайлах L_N, Λ – образ множества тайлов L_N под действием K.
Λ – множество вершин multigrid разбиения. Две вершины $v_i, v_j \in \Lambda$ соединены ребром тогда и только тогда, когда $v_i - v_j = \pm g_k$.

Multigrid разбиения



Формы роста


$\frac{Eq_{10}(0)}{10}$
$\frac{Eq_{20}(0)}{20}$
$\frac{Eq_{30}(0)}{30}$
$\frac{Eq_{40}(0)}{40}$
$\frac{Eq_{50}(0)}{50}$
$\gamma = \lim_{n\to\infty}\left\{\frac{eq_n(x)}{n}\right\}$
$\frac{Eq_{10}(0)}{10}$
$\frac{Eq_{20}(0)}{20}$
$\frac{Eq_{30}(0)}{30}$
$2(\sqrt{2}-1)$
$\frac{Eq_{40}(0)}{40}$
$\frac{Eq_{50}(0)}{50}$
$\gamma = \lim_{n\to\infty}\left\{\frac{eq_n(x)}{n}\right\}$

Формы роста

Теорема

Формы роста графа и разбиения Пенроуза существуют. В обоих случаях это выпуклый центрально-симметричный десятиугольник с вершинами $Re^{2\pi ik/10}$, $0 \le k \le 9$ и $R = i(\tau^{-1} \sin \frac{2\pi}{5} + \tau^{-2} \sin \frac{\pi}{5})$.

Формы роста

Теорема

Формы роста графа и разбиения Пенроуза существуют. В обоих случаях это выпуклый центрально-симметричный десятиугольник с вершинами $Re^{2\pi ik/10}$, $0 \le k \le 9$ и $R = i(\tau^{-1}\sin\frac{2\pi}{5} + \tau^{-2}\sin\frac{\pi}{5})$.

Теорема

Форма роста графа Амманна-Бинкера существует и представляет собой выпуклый центрально-симметричный восьмиугольник с вершинами $Re^{\pi ik/4}$, $0 \le k \le 7$ и $R = 2(\sqrt{2} - 1)$.

Формы роста

Теорема

В случае графов Пенроуза и Амманна-Бинкера, $eq_n(x)$ лежит в C-окрестности многоугольника $x + n \cdot pol$, где C – зависит от x, но не от n.

Формы роста: multigrid разбиения

$e_1, \ldots, e_N$ – стандартный ортонормированный базис.
O_N – выпуклая оболочка $\pm e_i$
$\pi_1 : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^d : \pi_1((t_1, \ldots, t_N)) = \sum_{i=1}^N t_i g_i$
$\pi_2 : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^{N-d}$ – ортогональная проекция на (N_d)-мерную плоскость $\pi_1(t) = 0$.
P – плоскость $\pi_2(t) = 0$.

Теорема

В случае регулярного multigrid разбиения форма роста существует, не зависит от γ_i и представляет собой выпуклый центрально симметричный многогранник, являющийся границей множества $\pi_1(O_N \cap P)$.

Примеры

$d = 2$
$g_i = (\cos\frac{\pi(i-1)}{N}, \sin\frac{\pi(i-1)}{N})$.
pol – правильный $2N$-угольник, вписанный в окружность радиуса $\frac{N}{2}\operatorname{tg}\frac{\pi}{2N}$.

Примеры

$d = 2$

$g_i = (\cos\frac{\pi(i-1)}{N}, \sin\frac{\pi(i-1)}{N})$.

pol – правильный $2N$-угольник, вписанный в окружность радиуса $\frac{N}{2}\operatorname{tg}\frac{\pi}{2N}$.

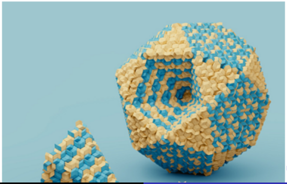
Трехмерное разбиение Амманна с икосаэдральной симметрией

$d = 3,\ N = 6$

$g_i = (\frac{2}{\sqrt{5}}\cos\frac{2\pi(i-1)}{5}, \frac{2}{\sqrt{5}}\sin\frac{2\pi(i-1)}{5}, \frac{1}{\sqrt{5}}),\ i = 1, \ldots, 5,$

$g_6 = (0, 0, 1)$.

pol – икосододекаэдр, вписанный в сферу радиуса $\sqrt{5 - 2\sqrt{5}}$.



Топологическая плотность

G – граф с множеством вершин Λ_W. Пусть $A = \mathbb{R}^{d'}$ и $\pi : \mathbb{R}^{d+d'} \to \mathbb{R}^{d+d'}$ задается равенством $\pi(x) = (\pi_1(x), \pi_2(x))$.

Теорема

Пусть форма роста γ графа G существует. Тогда его топологическая плотность существует, не зависит от выбора начальной вершины и равна $\frac{vol_d(\gamma) vol_{d'}(W)}{|\det L \det \pi|}$.

Топологическая плотность

G – граф с множеством вершин Λ_W. Пусть $A = \mathbb{R}^{d'}$ и $\pi : \mathbb{R}^{d+d'} \to \mathbb{R}^{d+d'}$ задается равенством $\pi(x) = (\pi_1(x), \pi_2(x))$.

Теорема

Пусть форма роста γ графа G существует. Тогда его топологическая плотность существует, не зависит от выбора начальной вершины и равна $\frac{vol_d(\gamma) vol_{d'}(W)}{|\det L \det \pi|}$.

Теорема

Топологическая плотность графа Амманна-Бинкера равна $8 - 4\sqrt{2}$.

Топологическая плотность

Теорема

Топологическая плотность графа Пенроуза равна $\frac{25}{4\tau^2}$.

Координационные числа

Теорема

Для координационных чисел графа Амманна-Бинкера справедлива асимптотическая формула

$$e_n(0) = 8C\left(\left\{\frac{\sqrt{2}}{2}(n-\frac{1}{2})\right\}\right)n + O(\log n),$$

где

$$C(x) = \begin{cases} 4\sqrt{2}-5, & x \in [0, \frac{\sqrt{2}}{4}) \\ \frac{7\sqrt{2}-8}{2} - (2\sqrt{2}-2)x, & x \in [\frac{\sqrt{2}}{4}, 1-\frac{\sqrt{2}}{4}) \\ \frac{4-3\sqrt{2}}{2} + (2\sqrt{2}-2)x, & x \in [1-\frac{\sqrt{2}}{4}, 2-\frac{3\sqrt{2}}{4}) \\ 4\sqrt{2}-5, & x \in [2-\frac{3\sqrt{2}}{4}, 1) \end{cases}$$

Координационные числа

Теорема

Для координационных чисел графа Пенроуза справедлива асимптотическая формула

$$e_n(0) = C(n)n + O(\log n),$$

где

$$C(n) = \begin{cases} 10\tau^{-2} + \frac{5}{2}\tau^{-1}, n \equiv 0 \pmod 2, \{\frac{n-1}{2}\tau^{-2}\} \in [0, \tau^{-1}) \\ 10\tau^{-2}, n \equiv 0 \pmod 2, \{\frac{n-1}{2}\tau^{-2}\} \in [\tau^{-1}, 1) \\ 10\tau^{-2} + \frac{25}{2}\tau^{-3}, n \equiv 1 \pmod 2, \{\frac{n-2}{2}\tau^{-2}\} \in [0, \tau^{-3}) \\ 10 - 5\tau^{-3}\{\frac{n-2}{2}\tau^{-2}\}, n \equiv 1 \pmod 2, \{\frac{n-2}{2}\tau^{-2}\} \in [\tau^{-3}, \tau^{-1}) \\ 10 - 10\tau^{-4} + 5\tau^{-3}\{\frac{n-2}{2}\tau^{-2}\}, n \equiv 1 \pmod 2, \{\frac{n-2}{2}\tau^{-2}\} \in [\end{cases}$$