

Министерство образования и науки Российской Федерации
Государственное образовательное учреждение высшего профессионального
образования «Владимирский государственный гуманитарный университет»

А.В. МАЛЕЕВ, А.В. ШУТОВ

**МОДЕЛЬ ПОСЛОЙНОГО РОСТА РАЗБИЕНИЙ,
УПАКОВОК И ГРАФОВ**

Владимир 2011

УДК 548.1

Рецензенты:

Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры инженерно-технологических дисциплин и сервиса Владимирского филиала Российского университета кооперации

Красильщиков В.В.

Кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры кристаллографии и экспериментальной физики Нижегородского государственного университета им. Н.И.Лобачевского

Иванов В.А.

Публикуется за счет внутривузовского гранта ВГГУ

Модель послойного роста разбиений, упаковок и графов: монография /

А.В. Малеев, А.В. Шутов. – Владимир: ВГГУ, 2011. – 107 с.

ISBN 978-5-8311-0546-9

В монографии представлена модель послойного роста разбиений, упаковок и графов, основанная на последовательном координационном окружении произвольно выбранной в структуре затравке. Отдельно рассмотрены особенности послойного роста в периодических, однопериодических, квазипериодических и случайных структурах, а также применение модели послойного роста в кристаллохимическом анализе молекулярных кристаллов.

ISBN 978-5-8311-0546-9

© А.В. Малеев, А.В. Шутов, 2011

© «Владимирский государственный гуманитарный университет», 2011

© Полиграфическая компания «Транзит-Х», 2011

СОДЕРЖАНИЕ

Предисловие	5
Глава 1. Введение	7
1.1. Физические модели роста.....	7
1.1.1. Термодинамика процесса образования кристалла	7
1.1.2. Модели роста кристалла.....	9
1.1.2.1. Косселевская модель растущего кристалла.....	9
1.1.2.2. Периодические цепи связей.....	11
1.1.2.3. Сложности ступенчатой концепции роста	11
1.2. Абстрактные математические модели роста	12
1.2.1. Примеры глобальных вероятностных моделей роста.....	13
1.2.2. Примеры локальных вероятностных моделей роста	14
1.2.3. Примеры детерминированных моделей роста	15
1.2.4. Модель роста <i>FPP</i> (<i>First Passage Percolation</i>)	16
1.2.5. Модель порогового роста.....	18
1.3. Координационные последовательности.....	19
ГЛАВА 2. Модель послойного роста в разбиениях, упаковках и графах....	22
2.1. Понятие послойного роста разбиений и упаковок.....	22
2.2. Отношение соседства фигур упаковки.....	23
2.3. Форма послойного роста упаковки	24
2.4. Граф связности упаковки и его послойный рост	26
ГЛАВА 3. Рост периодических структур.....	28
3.1. Многогранник послойного роста периодических графов	28
3.2. Доказательство теоремы о форме роста.....	28
3.3. Свойства многогранника послойного роста периодических графов.	32
3.4. Алгоритм построения многогранника послойного роста периодических графов	32
3.5. Рост в узком секторе и теория склейки.....	34
3.6. Обратная задача теории роста	39
ГЛАВА 4. Физические приложения.....	43
4.1. Спектры многогранников роста реальных кристаллических структур, полученные накладыванием ограничений на граф связности	43
4.2. Оценка устойчивости молекулярных агломератов в молекулярных кристаллах.....	47
4.3. Примеры молекулярных агломератов, определяемых жесткими молекулярными контактами	50
4.4. Многогранники послойного роста, полученные кластеризацией	53
ГЛАВА 5. Рост случайных графов.....	56
5.1. Общие сведения о росте случайных графов.....	56
5.2. Построение модельного случайного графа.....	57
5.3. Вероятностная мера случайных графов	59
5.4. Кривая роста.....	59
5.5. Оценки снизу и сверху формы роста γ_p^+	60

ГЛАВА 6. Рост 1-периодических графов	64
6.1. 1-периодические графы	64
6.2. Случай $ l_1 - l_2 = 0$	65
6.3. Случай $ l_1 - l_2 = 1$	66
6.4. Локальные стратегии.....	69
6.5. Случай $l = (0, 2)$	70
6.6. Случай $l = (1, -1)$	71
6.7. Граф без самоподобного роста.....	72
6.8. Случай высшей размерности	73
ГЛАВА 7. Рост квазипериодических разбиений	75
7.1. Обобщенные разбиения Розы.....	75
7.2. Сильная параметризация разбиения Розы	79
7.3. Нижняя граница послыного роста разбиения Розы.....	81
7.4. Трехмерное периодическое разбиение $Ti\tilde{l}^{3D}$	84
7.5. Верхняя граница роста разбиения Розы	87
7.6. Квазипериодическое разбиение Ито-Оцуки и его рост.....	89
7.7. Послойный рост квазипериодических разбиений и функция сложности	92
ГЛАВА 8. Координационные числа	94
8.1. Асимптотические формулы для координационных чисел	94
8.2. Точные формулы в периодическом случае	95
8.3. Координационные числа квазипериодических разбиений	97
Литература.....	100

Предисловие

Исследование механизма кристаллообразования является важной задачей кристаллографии практически с момента ее возникновения. Кристалл представляет собой, с одной стороны, совокупность правильно расположенных атомов или молекул, с другой, - многогранник, имеющий совершенную форму с достаточно строго определенным набором граней. Возникновение кристалла происходит самопроизвольно из окружающей исходную затравку неупорядоченной хаотичной среды. Какие физические факторы определяют неизбежность роста кристаллических структур, если в среде достигнуты определенные условия? Каков механизм (необходимый и достаточный), обеспечивающий сохранение углов в процессе роста? С помощью какого физического фактора скорость роста одной грани согласована со скоростью роста другой? Эти и другие вопросы не получили полного разрешения и на сегодняшний день.

В настоящей работе рассмотрена модель послойного координационного роста разбиений, упаковок и графов связности, которые, в частности, могут являться моделями кристаллических или квазикристаллических структур. Эта модель позволяет исследовать наиболее общие свойства процесса кристаллообразования и других ростовых процессов.

В главе 1 приведены некоторые литературные данные о ростовых моделях. Отдельно рассмотрены физические модели на примере ступенчатого роста косселевского кристалла и абстрактные математические модели роста, в том числе приведены примеры глобальных и локальных вероятностных, детерминированных моделей роста, модели First Passage Percolation и модели порогового роста.

В главе 2 дана аксиоматика модели послойного роста разбиений и упаковок, вводится математически строгое понятие формы роста. Обсуждается отношение соседства фигур в разбиениях и упаковках. Модель послойного роста обобщается на графы связности.

Глава 3 посвящена исследованию послойного роста периодических структур. Сформулирована и доказана теорема о многогранной форме роста периодических структур, исследуются свойства многогранников послойного роста. Рассмотрены алгоритм построения многогранника роста и вопрос о том, какие многогранники могут являться формами роста периодических графов.

В главе 4 рассмотрен послойный рост разбиений пространства на молекулярные полиэдры Вороного-Дирихле, построенных для реальных кристаллических структур. В качестве интегральных характеристик молекулярных упаковок рассмотрены спектры многогранников роста, полученные накладыванием ограничений на граф связности или кластеризацией.

В главе 5 рассмотрен пример послойного роста случайных графов. Приводится пример семейства плоских случайных графов, имеющих форму роста, которая содержит как прямолинейные, так и криволинейные грани. Получены формулы расчета формы роста через вероятность случайных ребер графа.

Глава 6 посвящена исследованию послойного роста графов, имеющих решетку трансляций на 1 меньшую размерности самого графа. В плоском слу-

чае это приводит к 1-периодическим графам. Для ряда семейств таких 1-периодических графов строго доказана многоугольная форма роста.

В главе 7 приведены результаты исследования послойного роста квазипериодических разбиений на примере обобщенных разбиений Розы и разбиений Ито-Оцуки. Рассмотрена связь послойного роста квазипериодических разбиений с поведением их функции сложности.

Глава 8 посвящена исследованию координационных последовательностей. В периодическом случае для них удастся получить точные формулы. В квазипериодическом случае получены асимптотические формулы и исследовано поведение отклонений координационных чисел от рассчитанных по ним значений.

Глава 1. Введение

1.1. Физические модели роста

Кристаллография зародилась как наука о форме кристаллов, поэтому вопросы, связанные с процессами кристаллообразования, всегда находились в центре внимания кристаллографов. "Нет кристаллографии без кристаллов" - отмечал академик А.В. Шубников, основатель Института Кристаллографии РАН. С другой стороны, невозможно целенаправленно вырастить кристалл без кристаллографии, физики и химии. Основой современной кристаллографии можно считать триаду: рост кристаллов, кристаллическая структура, свойства кристаллов.

Несмотря на настоятельную потребность электроники и титанические усилия кристаллографов, потребовались годы, чтобы разработать удовлетворительные методики выращивания достаточно больших чистых бездислокационных кристаллов кремния из расплава, или полуметровых кристаллов KN_2PO_4 (KPD) из раствора, или искусственного кварца и слюды длиной в десятки сантиметров. Сложность проблемы отражает тот факт, что мы до сих пор вынуждены использовать природные кристаллы кальцита для оптических систем.

Наряду с задачей выращивания больших качественных кристаллов последнее время все активнее развиваются исследования ростовых процессов на нанометровом уровне. Миллиарды долларов вкладываются в создание наноразмерных полупроводников, магнитных пленок, квантовых точек, колодцев, проводников. Несмотря на некоторый прогресс в этой области, очевидно, что впереди предстоит еще долгий путь к практической реализации уникальных потенциалов заложенных в этих объектах. В этой связи становится важным структурный аспект исследований, который позволяет обратиться к процессам роста на молекулярном уровне.

Большинство моделей кристаллообразования позволяют на качественном уровне объяснять процессы фазовых переходов. Задача определения формы растущего кристалла по известной кристаллической структуре остается нерешенной. Новые методики поверхностной и жидкостной дифракции, силовой микроскопии в ряде случаев позволяют экспериментально проследить характер перехода атомов или молекул из свободного состояния в расплаве, растворе или газе в связанное состояние на поверхности растущего кристалла. Все еще отсутствует схема корректной оценки энергии взаимодействия молекул с кристаллом, учитывающая тепловые колебания и другие кинетические факторы.

В этом параграфе кратко рассмотрены основные физические модели механизма кристаллообразования, а также абстрактные математические модели роста, исследование которых, возможно, позволит выявить наиболее общие фундаментальные закономерности ростовых процессов.

1.1.1. Термодинамика процесса образования кристалла

Рассмотрим однокомпонентную систему, содержащую две фазы, например кристалл и пар или кристалл и расплав [1]. Если обе фазы обмениваются частицами, то между ними с течением времени наступает равновесие, которое

характеризуется равенством химических потенциалов кристалла и среды (пара или расплава) $\mu_{\kappa}(P_{\kappa}, T) = \mu_{\kappa}(P_c, T)$. Если пренебречь действием поверхностной энергии и считать, что к границе не приложено других сил, то $P_{\kappa} = P_c = P$, а химический потенциал определяется формулой $\mu_i = \varepsilon_i - Ts_i + P\Omega_i$, где ε_i - потенциальная энергия, s_i - энтропия, а Ω_i - удельный объем фазы в расчете на одну частицу; $i = \kappa, c$ (кристалл или среда).

Оценки показывают, что при давлениях порядка атмосферного или меньших решающую роль в химическом потенциале играют первые два слагаемых. Превращение фаз определяется различием величин потенциальной энергии, а не их абсолютными значениями. Так из условия равенства химических потенциалов $\varepsilon_{\kappa} - Ts_{\kappa} = \varepsilon_c - Ts_c$ следует, что $\varepsilon_c - \varepsilon_{\kappa} = T(s_c - s_{\kappa}) = \Delta H$, где ΔH - теплота плавления или испарения.

Очевидно, что условие равновесия фаз $\mu_{\kappa}(P_{\kappa}, T) = \mu_c(P_c, T)$ определяют давление и температуру, при которых фазы не меняются в объеме. При нарушении этого равновесия появляется сила для фазового превращения, мерой которой является разность химических потенциалов $\Delta\mu$. В частности, для фазового превращения пар - кристалл $\Delta\mu = \mu_n(P, T) - \mu_{\kappa}(P, T)$, для превращения расплав - кристалл $\Delta\mu = \mu_{\text{жс}}(P, T) - \mu_{\kappa}(P, T)$. Если пересыщение пара создается повышенным (по сравнению с равновесным P_0) давлением P , то $\Delta\mu = kT \ln \frac{P}{P_0}$,

а при небольших относительных пересыщениях $\Delta\mu \approx kT \frac{\Delta P}{P_0}$. Если пересыщение создается переохлаждением пара, насыщенного при $T = T_0$, то, поскольку $\Delta P = 0$, разность химических потенциалов выражается через переохлаждение $\Delta\mu = \Delta H \frac{\Delta T}{T_0}$, где $\Delta H = T_0(s_n - s_{\kappa})$ - теплота испарения при температуре T_0 .

При росте кристаллов из раствора следует рассмотреть равновесие в двухкомпонентной (бинарной) системе. Если компоненты обозначить A и B , условия равновесия имеют вид

$$\mu_{A\kappa}(P, T, X_{A\kappa}) = \mu_{A\text{жс}}(P, T, X_{A\text{жс}}); \quad \mu_{B\kappa}(P, T, X_{B\kappa}) = \mu_{B\text{жс}}(P, T, X_{B\text{жс}}),$$

где X_{Ai} и X_{Bi} - относительные молярные концентрации компонентов в фазе i ($i = \text{жс}, \kappa$) определяются как доля молекул одного компонента по отношению к общему числу молекул в фазе i , поэтому $X_{Ai} + X_{Bi} = 1$.

Отклонение от равновесия в бинарной системе описывается двумя величинами $\Delta\mu_A = \mu_{A\text{жс}} - \mu_{A\kappa}$ и $\Delta\mu_B = \mu_{B\text{жс}} - \mu_{B\kappa}$. В частном случае, когда растворитель (B) практически не входит в состав кристалла, т.е. $X_{B\kappa} = 0$, из двух указанных соотношений остается только первое, определяющее равновесие перехода вещества кристалла (A) в раствор и обратно. Концентрацию вещества в растворе в этом случае обозначают через C . Отклонение $\Delta C = C - C_0$ концентрации от равновесного значения C_0 называют абсолютным пересыщением.

Для идеальных (разбавленных) растворов удается показать, что разность химических потенциалов $\Delta\mu = kT \ln \frac{C}{C_0}$.

С точки зрения механизма роста кристалла важным является понятие равновесной формы кристалла, впервые сформулированное Гиббсом [2]. Согласно его представлениям, кристалл в равновесном состоянии принимает форму с минимальной поверхностной энергией из всех форм того же объема: $\sum S_i \alpha_i = \min$ при $V = \text{const}$. Кюри [3] дополнил понятие равновесной формы, указав, что если в условиях равновесия кристалл не имеет равновесной формы, то он должен стремиться ее приобрести путем растворения материала одних частей и отложения его на других. Геометрически равновесную форму описал Вульф [4]: кристалл равновесной формы образован такими гранями, расстояние от которых до центра кристалла пропорционально поверхностным энергиям этих граней.

1.1.2. Модели роста кристалла

Монокристаллы из паров растворов, как правило, растут в форме многогранников. Очевидно, что форма многогранника определяется в первую очередь внутренним строением кристалла – его кристаллической структурой. Первой попыткой связать эти понятия была идея Бравэ [5] о том, что в кристалле реализуются в первую очередь грани, соответствующие простым кристаллографическим плоскостям, в которых поверхностная плотность (число атомов или молекул на единицу площади) самая высокая. Доннэй и Харкер [6] обобщили закон Бравэ в том смысле, что оценку поверхностной плотности недостаточно проводить только по межплоскостному расстоянию. Необходимо учитывать еще наличие в кристаллической структуре и ориентацию относительно рассматриваемой плоскости таких элементов симметрии как винтовые оси и плоскости скольжения. Так, например, если перпендикулярно плоскости располагается винтовая ось n -го порядка, фактическая поверхностная плотность в этой плоскости в n раз меньше по сравнению с плотностью, рассчитанной только по межплоскостному расстоянию.

1.1.2.1. Косселевская модель растущего кристалла

Простейшая геометрическая модель кристалла представляет собой гипотетический кристалл, состоящий из атомов, которым приписана форма кубиков. Кубики сложены так, что два соседних кубика имеют общую грань. Таким образом, внутри кристалла каждый атом-кубик имеет ровно шесть соседей. Слабо отклоненные от кристаллографических плоскостей грани называют *вещицальными*. Вещицаль на поверхности такого кристалла состоит из плотно упакованных плоских участков – террас, торцы которых называют *ступенями*. В силу существования тепловых колебаний при $T > 0$ атомы или молекулы могут покинуть ступень либо, возвращаясь в маточную среду, либо перемещаясь по ступени. В результате ступень становится не прямолинейной, на ней возникают *изломы*. Представление о такой структуре поверхности кристалла было введено

Косселем [7] и Странским [8]. Сама модель получила названия *кристалла Косселя* или *косселевского кристалла*.

Наиболее вероятно присоединение строительных элементов к изломам, так как в этом случае число образующихся связей совпадает ровно с половиной связей внутри кристалла. Присоединение строительного элемента к излому воспроизводит начальную конфигурацию и не меняет числа некомпенсированных связей, а значит и поверхностную энергию.

Сами ступени образуются либо в результате спонтанного образования так называемых двумерных зародышей – островков новых атомных (молекулярных) плоскостей на гладких участках грани. Альтернативой такому двумерному зарождению является генерация ступеней дислокациями решетки с отличной от нуля компонентой смещения вдоль нормали к грани кристалла. В первом случае ступени имеют форму замкнутых контуров, во втором – спиралей с центром в точке выхода дислокации.

Таким образом, грань растет только в результате генерации и распространения ступеней, на которых возникают изломы. Причем окончательное присоединение строительных элементов к поверхности граней происходит в изломах. Поэтому скорость роста граней определяется плотностью изломов на ее поверхности ($1/\text{м}^2$), которая в свою очередь равна произведению плотности ступеней на поверхности ($1/\text{м}$) на плотность изломов на ступенях ($1/\text{м}$).

Энергетическое преимущество приложения строительных единиц к изломам на ступенях роста распространяется на макроскопическое расстояние. Это означает, что существует механизм макроскопического дальнего действия, который содействует построению правильного макрокристалла и обеспечивает транспорт строительных элементов на поверхность кристалла к местам наиболее прочного их встраивания. В качестве такого механизма выступает диффузия атомов или молекул в открытом Фольмером [9, 10] адсорбционном слое, который возникает вблизи поверхности растущего кристалла.

В развитие идеи Фольмера, сначала Френкель [11], а затем Бартон и Кабрера [12, 13] дополнили модель Косселя-Странского в том смысле, что попадающие на поверхность грани адсорбированные атомы участвуют в двумерной и одномерной диффузии. Они предположили, что эти флуктуации достаточно быстры, чтобы даже в условиях роста их концентрация не слишком отличалась бы от равновесной, подчиняющейся распределению Гиббса. Если температура и концентрация раствора или пара близки к равновесным, то на ступенях устанавливается равновесная концентрация изломов пропорциональная $\frac{1}{a} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right)$, где ε - энергия излома, a - размер молекулы или параметр решетки.

Альтернативой ступенчатому росту является нормальный рост. В случае большой концентрации ступеней, а на ступенях большой концентрации изломов поверхность грани называют атомно шероховатой. С макроскопической точки зрения присоединение строительных единиц к шероховатой грани равновероятно в любом месте, так что поверхность растет по нормали к самой себе.

Такой рост грани называют *нормальным*. Атомно гладкие поверхности, напротив, растут путем последовательного отложения слоев, т.е. тангенциального перемещения ступеней. Такой рост называют *тангенциальным* или *послойным*.

1.1.2.2. Периодические цепи связей

Дальнейшим развитием методов предсказания формы роста явилось введение понятия *периодических цепей связей* [14]. Каждому парному взаимодействию атомов (молекул) в кристаллической структуре ставится в соответствие отрезок, направление которого совпадает с направлением связи, а длина пропорциональна энергии связи. Отрезки, определяющие все взаимодействия конкретного атома, располагают своими серединами в центре этого атома. В силу периодичности кристаллической структуры все связи в кристалле можно разбить на группы, представленными отрезками одинаковой длины и лежащими на одной прямой с определенными кристаллографическими индексами. Такие цепи одинаковых отрезков и получили название периодических цепей связей (ПЦС).

Величина поверхностной энергии определяется энергией тех связей, которые принадлежат ПЦС, пересекающим данную поверхность. Таких ПЦС, вообще говоря, бесконечно много, однако вклады от ПЦС все более далеких соседей быстро уменьшаются. В первом приближении можно ограничиться первыми членами этой бесконечной суммы, соответствующими наиболее близким соседям. Позднее понятие периодических цепей связей было естественно расширено до понятия *связанных сетей* [15].

Простое физическое обоснование подхода ПЦС можно проиллюстрировать на модели ступенчатого послойного роста граней кристалла Косселя. Если ограничиться связями кубиков соседних по грани (первые соседи), по ребру (вторые соседи) или по вершине (третьи соседи), то на гладкой поверхности террасы произвольную точку пересекает 9 ПЦС: одна – первых соседей, и по четыре – вторых и третьих. Кратко структуру связей можно записать 1 4 4. Аналогично, точка, находящаяся на поверхности ступени, характеризуется 12 ПЦС со структурой 2 6 4, в изломе – 13 ПЦС (3 6 4). Наиболее вероятно присоединение строительных элементов к изломам, так как в этом случае число образующихся связей совпадает ровно с половиной связей внутри кристалла (для точки внутри структура ПЦС 6 12 8). Присоединение строительного элемента к излому воспроизводит начальную конфигурацию и не меняет числа некомпенсированных связей, а значит и поверхностную энергию.

1.1.2.3. Сложности ступенчатой концепции роста

Оценки концентраций ступеней и изломов основаны на предположении, что флуктуации на поверхности грани достаточно быстры, чтобы даже в условиях роста их концентрация не слишком отличалась бы от равновесной, подчиняющейся распределению Гиббса. Отчасти это предположение косвенно подтверждается существованием округлых спиралей и островков новых слоев на гранях. Эти исследования, а также изучение геометрии изломов на ступенях стали доступны, благодаря атомно-силовой микроскопии. Однако в ряде случа-

ев, обычно для слаборастворимых кристаллов, наблюдаются ступени не округлые, а многогранные [16], что свидетельствует об ограниченности предположения о быстроте флуктуаций [17].

Скорости генерации ступеней на грани и изломов на ступени определяют скорость распространения ступеней вдоль грани, а, в конечном счете, и скорость роста грани. Однако количественная оценка этих скоростей затруднена, как правило, неизвестными энергиями активации и энтропийными барьерами. Так некоторые экспериментальные измерения [18, 19] показывают, что скорости распространения ступеней для разных граней одного и того же кристалла существенно не отличаются, если примеси не участвуют в процессе роста.

При кристаллизации из раствора в структуре ПЦС кроме взаимодействия молекул с кристаллом необходимо учитывать взаимодействие молекул с маточным раствором. Возникает зависимость кристаллической формы от температуры маточной среды, что можно объяснить кинетикой распространения ступеней и зависимостью скорости образования двумерных островов-зародышей от температуры, которая не возникает в структуре ПЦС.

Другой проблемой классической молекулярной теории является применение понятий ступеней и изломов к некосселевским кристаллам [20, 21, 22], содержащим несколько неэквивалентных по отношению к симметрии грани молекул в элементарной ячейке. К таким кристаллам относится большинство молекулярных органических кристаллов, все ионные кристаллы, диссоциирующие при испарении или растворении. В этом случае имеется несколько типов изломов, а значит, поверхностная энергия кристалла не меняется только при добавлении к излому целой элементарной ячейки, поэтому строительными единицами в косселевской модели таких кристаллов выступают целые элементарные ячейки. Однако наличие в маточной среде таких блоков экспериментально не подтверждается.

1.2. Абстрактные математические модели роста

Рассмотренные модели роста кристалла опираются, с одной стороны, на законы термодинамики, с другой, на экспериментальные сведения о растущем или выросшем кристалле. Однако учесть все факторы, приводящие к самопроизвольному возникновению упорядоченной кристаллической структуры из неупорядоченной, хаотичной среды, практически не представляется возможным. Поэтому возникает необходимость абстрагироваться от природы взаимодействия строительных элементов, из которых складывается кристалл. Это абстрагирование приводит к возникновению чисто математических моделей ростовых процессов. Такие чисто абстрактные модели могут помочь выявить и исследовать наиболее общие закономерности кристаллического роста.

В математике существует большое направление теории вероятностей, называемое *моделированием роста*, которое помогает решать разнообразные задачи теории просачивания, распространения эпидемий и пожаров, возникновения и развития биологических объектов и т.п. Во всех этих моделях под ростом понимается некоторый повторяющийся процесс, ставящий в соответствие некоторой конфигурации объектов другую конфигурацию, рассчитываемую по оп-

ределенному набору ростовых правил. Другими словами модель роста – это повторяющийся алгоритм. В простейшем случае в качестве объектов берутся узлы решетки \mathbb{Z}^d в d -мерном случае. В двумерном случае кроме квадратной решетки \mathbb{Z}^2 иногда используют гексагональные сетки, образованные правильными треугольниками или шестиугольниками.

Если ростовые правила включают в себя элемент случайности, модель роста является *вероятностной* или *стохастической*. В противном случае – модель называют *детерминированной*. Среди вероятностных моделей роста различают *глобальные* и *локальные*. В глобальных моделях ростовые правила основаны на общих свойствах активных элементов роста, в локальных – определяются конечным окружением активного элемента. Рассмотрим несколько наиболее распространенных моделей роста, заданных на двумерной квадратной решетке \mathbb{Z}^2 . Если это не будет оговорено особо, будем считать, что начальная конфигурация представляет собой узел решетки, распложенный в начале координат.

1.2.1. Примеры глобальных вероятностных моделей роста

Модель Идена [23]. На каждом временном шаге к растущей структуре (кластеру C_{n-1}) добавляется один узел, который выбирается случайным образом из совокупности узлов, являющихся соседними по отношению к кластеру, но не принадлежащие кластеру. Соседними в данном случае считаются узлы $P(x_1, y_1)$ и $Q(x_2, y_2)$, находящиеся на расстоянии 1 в d_4 -метрике, т.е. $d_4(P, Q) = |x_1 - x_2| + |y_1 - y_2| = 1$. Несмотря на то, что с ростом числа шагов n число теоретически возможных различных кластеров $\#C_n$ растет экспоненциально ($\sim 2^{2n}$), для числа $\#C_n^*$ реально встречающихся в эксперименте кластеров отношение $\frac{\#C_n^*}{n}$ стремится к 0 при $n \rightarrow \infty$. Этот результат в виде гипотезы был высказан Иденом [24] и доказан Ричардсоном [25]. При больших n растущий кластер приобретает форму круга, т.е. в каком-то смысле рост в модели Идена является изотропным. Однако в [26] показано, что участки границы роста в диагональных направлениях более гладкие по сравнению с участками в вертикальных и горизонтальных направлениях.

В качестве разновидностей модели роста Идена можно выделить две. В первой вместо случайного выбора узла из совокупности соседних к кластеру, выбирается случайным образом ребро из совокупности ребер, соединяющих кластер со своими соседями [23], и только затем присоединяется узел, соответствующий выбранному ребру. В этом случае вероятность присоединения узла тем выше, чем больше ребер идет к нему от кластера. Во второй разновидности сначала случайным образом выбирается один узел из границы кластера (совокупность узлов кластера, среди соседей которых есть хотя бы один узел не из кластера), а затем добавляется наугад один из четырех соседей выбранного узла [27].

Модель Вильямса-Бьеркнеса [28]. На каждом шаге роста к кластеру с веро-

ятностью p добавляется случайным образом узел из окружения кластера, и с вероятностью $(1-p)$ удаляется выбранный наугад узел из кластера. Эту модель можно назвать моделью обратимого роста, так как при некоторых условиях растущий кластер может вернуться к исходному состоянию. В процессе роста от основного кластера могут отделиться другие кластеры. При $p \rightarrow 1$ модель Вильямса-Бьеркнеса стремится к модели Идена. Можно было бы ожидать, что при уменьшении p граница кластера должна становиться более изрезанной, однако эксперимент показал [28], что граница имеет фрактальную размерность около 1.1, независимо от p .

DLA (Diffusion Limited Aggregation) модель [29]. Достаточно далеко от начала координат случайным образом выбирается узел, который методом случайного блуждания перемещается до тех пор, пока не коснется растущего кластера. После чего узел добавляется в месте касания, и процедура случайного блуждания повторяется для следующего узла. Главной особенностью DLA кластеров является их фрактальность. В двумерном случае фрактальная размерность составляет 1.68 ± 0.05 , что хорошо согласуется с общепринятым аналитическим результатом $(d^2 + 1)/(d + 1) = 5/3$. Фрактальная природа кластера может быть объяснена тем, что в процессе роста возникает ветвистая структура, в результате чего вероятность заполнения узлов вблизи затравки становится все меньше, чем дальше происходит рост.

1.2.2. Примеры локальных вероятностных моделей роста

В локальных моделях роста будущее присоединение узла к кластеру определяется принадлежностью к кластеру его окружения. В этом случае акт присоединения называют контактным процессом или контактом. Контактные процессы были достаточно подробно исследованы [30, 31, 32].

Эпидемические модели (случайная перколяция) были созданы для моделирования распространения инфекционных болезней, протекания химических реакций, распространения огня при пожарах. На каждом временном шаге соседние с растущим кластером узлы присоединяются к нему с вероятностью p или блокируются с вероятностью $1-p$. Блокированные узлы больше не участвуют в росте. Как контактный процесс случайная перколяция характеризуется критической вероятностью. Если значение p ниже критического значения, растущий кластер имеет конечные размеры. Если p выше критического значения, кластер почти наверное бесконечен. Критическое значение пока не известно. Сам растущий кластер представляет собой фрактал с фрактальной размерностью $91/48$ [27, 33].

Другой разновидностью эпидемических моделей является модель перколяции связей. В ней с вероятностью p открываются, а с вероятностью $1-p$ закрываются связи, идущие от кластера к соседним узлам. Присоединяются к кластеру все узлы на концах открытых связей, а остальные соседние с кластером узлы блокируются. Как и для предыдущей модели, для модели перколяции

связей существует критическое значение вероятности p , однако в данном случае известно, что оно составляет 0.5 [34]. В этой же работе Гримметта можно найти другие перколяционные модели роста.

1.2.3. Примеры детерминированных моделей роста

Примеры моделей детерминированных моделей параллельного роста появились в литературе по клеточным автоматам, математической морфологии, L-системам и фракталам.

Клеточные автоматы [35] описываются состоянием ячейки и функциями перехода. Функция перехода определяет новое состояние ячейки, исходя из ее текущего состояния и, возможно, состояния соседних ячеек. В общем случае это может привести к конечному или бесконечному, периодическому или хаотичному процессу роста. Исследование таких процессов [36] показало возможность возникновения довольно сложных и интересных структур роста. В качестве общеизвестного примера роста на клеточных автоматах можно упомянуть игру "Жизнь" Конвэя [37]. В математической морфологии [38] используются структурные элементы для выполнения расширения и разрушения формы или структуры. В L-системах и фракталах [39, 40] отдельные ячейки рекурсивно заменяются структурой ячеек. Такие процессы производят самоподобные масштабно-инвариантные структуры.

Рассмотрим несколько примеров детерминированных ростовых моделей.

Детерминированное 4/8 смешивание. Простейшие модели роста на двумерной решетке сводятся к добавлению к растущей структуре всех узлов, i -смежных с узлами структуры ($i = 4$ или 8), т.е. узлы, находящиеся от узлов растущей структуры на расстоянии $d_i = 1$. Для узлов $P(x_1, y_1)$ и $Q(x_2, y_2)$ $d_4(P, Q) = |x_1 - x_2| + |y_1 - y_2|$, а $d_8(P, Q) = \max(|x_1 - x_2|, |y_1 - y_2|)$. Определим D_4 - и D_8 -шаги роста как преобразования, переводящие любую форму S в

$$D_4(S) = S \cup \{P : d_4(P, Q) = 1 \text{ для некоторых } Q \in S\} \text{ и}$$

$$D_8(S) = S \cup \{P : d_8(P, Q) = 1 \text{ для некоторых } Q \in S\}, \text{ соответственно.}$$

Таким образом, D_4 вызывает рост только в горизонтальных и вертикальных направлениях, а D_8 еще и в диагональных направлениях. Если использовать только D_4 рост, форма роста представляет собой квадрат, повернутый на 45° , относительно базиса решетки. Если использовать только D_8 рост, форма роста – квадрат, параллельный базису. Комбинация D_4 и D_8 роста дает восьмиугольник, смежные стороны которого образуют углы 135° . Если t шагов D_8 придутся на s шагов D_4 , а в качестве затравки взять начало координат, то форма роста представляет собой восьмиугольник с вершинами

$$\{(\pm(s+t), t), (\pm(s+t), -t), (\pm t, (s+t)), (\pm t, -(s+t))\},$$

причем порядок следования D_4 и D_8 шагов не имеет значения.

Модель дискретного диффузионного роста. Модель основана на уравнении диффузии [41], которое на решетке \mathbb{Z}^2 может быть аппроксимировано ре-

куррентной формулой $u_{i,j}^{m+1} = u_{i,j}^m + \frac{c\Delta t}{h^2}(u_{i,j+1}^m + u_{i,j-1}^m + u_{i+1,j}^m + u_{i-1,j}^m - 4u_{i,j}^m)$, где через $u_{i,j}^m$ обозначено аппроксимационное решение в узле (ih, jh) в момент времени $t = m\Delta t$. Для того, чтобы локальная ошибка дискретизации стремилась к нулю, должно выполняться условие стабильности: $\Delta t \leq \frac{h^2}{4c}$. Поэтому если положить $h = \Delta t = 1$, то $c = 1/4$. Число возможных значений, которые может принимать каждая ячейка в процессе роста, ограничивается значением 2^k , где k число бит, приходящихся на ячейку. Рост начинается из ячейки в начале координат, начальное значение которой $u_{0,0}^0 = 2^k - 1$. Для остальных ячеек начальные значения $u_{i,j}^0 = 0$. Последующий рост осуществляется по следующим правилам.

1. $u_{0,0}^m = 2^k - 1$ для всех $m > 0$.

$$2. u_{i,j}^{m+1} = u_{i,j}^m + \left\lfloor \frac{1}{4}(u_{i,j+1}^m + u_{i,j-1}^m + u_{i+1,j}^m + u_{i-1,j}^m - 4u_{i,j}^m) \right\rfloor.$$

3. Ячейка (i, j) становится активной (и остается активной), когда $u_{i,j} > 0$.

В непрерывной среде использование уравнения диффузии приводит к изотропному росту, однако из-за дискретизации, используемой в рассматриваемой модели, в некоторых направлениях происходит замедление роста, которое приводит к полигональной форме роста. Экспериментальное исследование [42] показало, что стабилизация формы наступает на шаге $m = 2^{k-2}$. Там же отмечено, что с ростом k , во-первых, стабилизация формы происходит позже, во-вторых, форма становится ближе к кругу.

Рост с временной задержкой. Каждой активной ячейке, не являющейся внутренней в растущей структуре, ставится в соответствие набор из 8-ми положительных целых чисел, определяющих времена задержки роста t_1, t_2, \dots, t_8 в восьми направлениях от этой ячейки к ее соседним ячейкам. Эти наборы называют TDK (Time Delay Kernels). Первоначально активной является только ячейка, находящаяся в начале координат. Для нее задается определенный TDK набор t_i ($i = 1, \dots, 8$). На каждом временном шаге 1) для каждой ячейки, являющейся смежной к растущей структуре, определяется время присоединения, как минимальное из времен, определяемых соседними для этой ячейки активными ячейками; 2) у всех активных ячеек наборы TDK уменьшаются на единицу; 3) смежные с растущей структурой ячейки, времена присоединения которых равны 1, становятся активными; 4) в направлениях неактивных ячеек присоединяемым ячейкам приписывается либо исходный набор TDK (RC-модель), либо уменьшенный TDK набор ячеек "родителей" в момент активизации (CC-модель).

1.2.4. Модель роста *FPP* (*First Passage Percolation*)

Модель роста *FPP* была предложена Хаммерслеем и Велшем [43] в качестве модели просачивания жидкости сквозь пористую среду. На d -мерной ку-

бической решетке \mathbb{Z}^d задается граф, вершины которого совпадают с узлами этой решетки, а ребра соединяют вершины, соответствующие узлам, находящимся на кратчайшем расстоянии, равном периоду решетки. Каждому ребру $e(x, y)$ этого графа, соединяющему вершины x и y , ставится в соответствие неотрицательная случайная величина $T(e)$, которую можно рассматривать как время прохождения по ребру e . Последовательность ребер $r = (e(x_0, x_1), e(x_1, x_2), \dots, e(x_{n-1}, x_n))$ называется путем из x_0 в x_n . Каждый путь r характеризуется своим временем просачивания $T(r) = \sum_{i=1}^n T(e(x_{i-1}, x_i))$. Время прохождения $T(x, y)$ из вершины x в вершину y определяется как минимальное время $T(r)$ для всех возможных путей, ведущих из x в y .

Главным объектом исследования модели FPP является множество узлов решетки, до которых пройдет просачивание из начала координат 0 к моменту времени t : $\tilde{B}(t) = \{x \in \mathbb{Z}^d : T(0, x) \leq t\}$ или множество \bar{B} , представляющее собой множество d -мерных единичных кубов, центры которых совпадают с \tilde{B} . Наиболее часто рассматривают случай, когда все случайные величины $T(e)$ являются независимыми. Тогда удается (для случая $d = 2$ в работе [44], для случаев $d > 2$ в [45]) доказать следующую теорему.

Пусть F – функция распределения для независимых одинаково распределенных случайных величин $T(e)$, и математическое ожидание всех этих величин конечно. Тогда либо

а) существует компактное выпуклое множество B_0 с непустой внутренней областью такое, что для любого $\varepsilon > 0$ с вероятностью 1 для всех достаточно больших t выполняется условие

$$(1 - \varepsilon)B_0 \subseteq \frac{\bar{B}(t)}{t} \subseteq (1 + \varepsilon)B_0,$$

либо

б) для любого $M > 0$ с вероятностью 1 для всех достаточно больших t $\frac{\bar{B}(t)}{t}$ содержит шар радиуса M .

Первый случай отвечает существованию формы роста, совпадающей с B_0 , второй – отсутствию формы роста. Бовин [46] получил аналогичный результат о существовании формы роста для некоторых классов моделей FPP в случае, когда случайные величины $T(e)$ не являются независимыми. В работе [45] определены необходимое и достаточное условие, при котором имеет место случай (а) теоремы, т.е. когда форма роста существует:

$$F(0) < p_c(\mathbb{Z}^d, bond),$$

где $p_c(\mathbb{Z}^d, bond)$ – критическая вероятность в задаче перколяции по ребрам на решетке \mathbb{Z}^d .

Еще один интересный результат получен в работе [47], в которой доказано, что для любого компактного выпуклого центросимметричного множества

B_0 существует такая модель роста FPP, что B_0 является для нее формой роста. Краткий обзор различных моделей FPP приведен в работе Кестена [45].

Наиболее известным частным случаем моделей FPP является модель Ричардсона [25]. Для нее функция распределения случайных величин $T(e)$ определяется следующим образом. Просачивание из произвольной точки в соседнюю точку происходит за время $t=1$ с вероятностью p , за время $t=2$ с вероятностью $p(1-p)$, ..., за время $t=n$ с вероятностью $p(1-p)^{n-1}$, т.е. соответствующая случайная величина подчиняется распределению Бернули.

Наглядно модель Ричардсона как модель роста можно представить следующим образом. В начальный момент времени активным является вершина графа в начале координат. На каждом временном шаге любая вершина, связанная хотя бы с одной активной вершиной, становится активной с вероятностью p , а остается неактивной с вероятностью $(1-p)$. Главный результат полученный Ричардсоном [25] состоял в том, что при $n \rightarrow \infty$ растущая структура имеет с вероятностью 1 устойчивую форму роста для любого $p \in (0;1)$.

В работе [48] для формы роста модели Ричардсона были получены следующие результаты. Во-первых, при значениях p достаточно близких к 1 граница формы роста содержит линейные участки. Во-вторых, при сколь угодно больших $p < 1$ форма роста не становится полным квадратом. В-третьих, форма роста меняется непрерывно с изменением p .

Другой интересной разновидностью моделей FPP является модель, предложенная Сеппалайненем [49]. В двумерном случае на модель FPP накладываются следующие ограничения. Во-первых, допускаются только пути, не уменьшающие абсолютные величины координат (ориентированная модель FPP). Во-вторых, только горизонтальные переходы являются случайными, в вертикальном направлении времена просачивания одинаковы и равны некоторой константе τ_0 . В горизонтальном направлении время просачивания принимает одно из двух значений: значение λ с вероятностью p , значение κ с вероятностью $q=1-p$. В этом случае удается не только доказать существование формы роста, но и точно вычислить ее. Доказано [49], что форма роста имеет вид $\mu(x, y) \leq 1$, где

$$\mu(x, y) = \begin{cases} \lambda x + \tau_0, & \text{если } py > qx, \\ \lambda x + \tau_0 + (\kappa - \lambda) (\sqrt{qx} - \sqrt{py})^2, & \text{если } py \leq qx. \end{cases}$$

1.2.5. Модель порогового роста

Еще одна ростовая модель, для которой удается рассчитать форму роста, получила название модель порогового роста (threshold growth) [50, 51, 52]. На двумерной квадратной решетке \mathbb{Z}^2 вводится понятие окрестности. Окрестность определяется как множество узлов, попадающих в шар фиксированного радиуса в некоторой метрике. В качестве исходной конфигурации рассматривается узел в начале координат. На очередном временном шаге узел становится актив-

ным, если его окрестность содержит не меньше θ активных узлов.

Для этой модели роста удастся предложить строгий критерий существования формы роста и разработать алгоритм вычисления этой формы, если она существует. Показано, что всегда форма роста представляет собой многоугольник. Более того, множество узлов, являющихся активными в момент времени t находится в ограниченной окрестности увеличенной в t раз границы формы роста.

В работе [53] был изучен также случайный вариант модели порогового роста и доказан ряд результатов о форме роста в этом случае.

1.3. Координационные последовательности

Понятие координационных последовательностей (КП) было формально введено в работе [54] для исследования топологической идентичности кристаллических структур или отдельных атомов в структуре. В простейших атомных кристаллах КП – это числовая последовательность, в которой k -ый член совпадает с числом атомов в k -ой координационной оболочке (координационной сфере, координационном окружении), состоящей из атомов, связанных с атомами $(k-1)$ -ой оболочки. Нулевая оболочка содержит отдельный атом, поэтому число атомов в первой оболочке совпадает с координационным числом этого атома.

Для молекулярных кристаллов рассматривается упаковка молекул в кристалле. В качестве нулевой оболочки выбирается отдельная молекула, а координационные связи определяются либо энергетически (энергия парного межмолекулярного взаимодействия составляет долю больше некоторого выбранного значения) [55], либо геометрически (например, используя разбиение Вороного-Дирихле кристаллической структуры) [56, 57, 58].

В настоящее время КП используется как некоторая интегральная топологическая характеристика кристаллической структуры [59, 60, 61, 62], или даже упаковок сфер в пространствах высокой размерности [63, 64]. Другим применением КП является их использование для расчета топологической плотности, которая может быть получена из частичных сумм членов КП. Эта плотность коррелирует с некоторыми другими характеристиками, такими как энергия кристаллической решетки [65], распределение специфических элементов [66], каталитическая активность [67], а также может быть использована, например, для предсказания свойств синтетических цеолитов [68].

Последовательное присоединение к затравке координационных оболочек можно рассматривать как простую модель роста кристалла. Поэтому КП первоначально были названы ростовыми последовательностями [69] и, в этом смысле, отражают наиболее общие закономерности процесса кристаллообразования. Проведенные для ряда реальных кристаллических структур исследования [70, 71, 72, 73] показывают, что члены КП растут с ростом номера квадратично, аналогично тому, как растет площадь поверхности сферы с ростом ее радиуса.

Как отмечено в [74], все исследованные координационные последовательности реальных кристаллических структур и гипотетических периодических графов удастся представить периодическим набором квадратных уравнений

$$N_k = a_i k^2 + b_i k + c_i,$$

где $k = Mn + i$, $n = 0, 1, 2, \dots$ и $i = 1, 2, \dots, M$. Число этих уравнений M называется периодом. Уравнениям удовлетворяют все члены координационной последовательности N_k , начиная с некоторого стартового значения: $k \geq k_0$. В работе [73] вводится понятие точной топологической плотности как среднее значение коэффициентов a_i , деленное на размерность d пространства структуры (для кристаллических структур $d = 3$): $TD = \frac{\langle a_i \rangle}{d} = \frac{1}{Md} \sum_{i=1}^M a_i$. Так как с ростом k вклад линейного и постоянного слагаемых уменьшается, при $k \rightarrow \infty$ члены последовательности $N_k \approx dTDk^2$.

Другой подход к описанию координационных последовательностей был предложен в [74]. Он основан на использовании производящей функции [75], которая имеет вид бесконечного ряда $GF = \sum_{k=0}^{\infty} N_k x^k$, коэффициенты которого совпадают с членами координационной последовательности. Производящая функция GF может быть представлена в виде отношения двух конечных многочле-

нов $GF = \frac{\sum_{i=0}^{O(IT)-1} IT(i)x^i}{\prod_{i=0}^{O(PL)-1} (1 - x^{PL(i)})}$, где IT - набор начальных членов (initial terms), со-

стоящий из $O(IT)$ элементов, PL - набор степеней, состоящий из $O(PL)$ элементов. Производящие функции и специальные алгоритмы из преобразования позволяют оценивать точные значения топологической плотности для структур, для которых непосредственный расчет по определению практически невозможен.

Строгие алгоритмы получения производящих функций для некоторых простых структур, основанные на геометрическом подходе, приведены в работах [64, 76]. Более общий алгебраический подход реализован в [77].

Другим приемом исследования координационных последовательностей является расчет их вторых разностей [74]. Для непрерывной квадратичной функции вторая производная является величиной постоянной. Для последовательностей аналогом второй производной является вторые разности. Первые разности – это последовательность $F_k = N_{k+1} - N_k$. Соответственно вторые разности – последовательность $S_k = F_{k+1} - F_k$. Для координационных последовательностей вторые разности представляют собой периодическую последовательность с периодом M , совпадающим с числом квадратных уравнений, описывающих координационную последовательность.

В одномерном случае простейший периодический граф дает координационную последовательность $1, 2, 2, \dots$, для которой $IT = \{1, 1\}$ и $PL = \{1\}$. В двумерном случае похожие параметры дает гексагональная сетка b^3 , для которой координационная последовательность имеет вид $1, 3, 6, 9, 12, 15, \dots$; $IT = \{1, 1, 1\}$ и

$PL = \{1,1\}$. В трехмерном случае аналогичный граф дает структура содалита. Для него координационная последовательность характеризуется наборами $IT = \{1,1,1,1\}$ и $PL = \{1,1,1\}$. В работе [78] обобщены содалитоподобные структуры до любой размерности d и проанализированы координационные последовательности для $d \leq 6$.

Для правильных решетчатых графов, построенных на основе решеток корней размерности $d \leq 8$, координационные последовательности рассмотрены в работе [79]. В [80] проведено исследование координационных последовательностей квазипериодических разбиений типа мозаик Пенроуза и Аммана-Бинкера. В работе [81] нами предложен новый подход к получению и строгому доказательству формул для координационных последовательностей, основанный на геометрии геодезических в периодических графах. Как следствие были получены точные формулы для координационных последовательностей всех плоских сеток Лавеса и их ориентированных аналогов.

ГЛАВА 2. Модель послойного роста в разбиениях, упаковках и графах

2.1. Понятие послойного роста разбиений и упаковок

Анализ геометрических особенностей координационных сфер в структурах монокристаллов органических и гетерокомплексных соединений, а также модельных периодических и непериодических разбиений пространства на многогранники позволил предложить простой, чисто метрический подход к исследованию механизма кристаллообразования. Этот подход основан на построении следующей конструкции [82].

Пусть в пространстве задана упаковка многогранников или, в частном случае, разбиение пространства на многогранники. В качестве таких многогранников могут выступать, например, поликубы (в двумерном случае полимино), используемые в методе дискретного моделирования упаковок в молекулярных кристаллах, или полиэдры Вороного-Дирихле [56, 83]. Выберем один или несколько многогранников в качестве исходного множества - затравки. На первом шаге добавим к затравке ее первое координационное окружение - совокупность многогранников, являющихся соседними хотя бы для одного из многогранников затравки. Например, соседними можно считать многогранники, имеющие хотя бы одну общую грань. Затем описанная процедура повторяется многократно, используя на каждом новом шаге в качестве затравки построенную на предыдущем шаге совокупность многогранников.

Условно назовем присоединяемые координационные окружения слоями роста, тогда сам алгоритм естественно назвать послойным ростом упаковки или разбиения. В рамках метода дискретного моделирования [84] разработаны алгоритмы и соответствующие компьютерные программы послойного роста в периодических разбиениях плоскости на полимино и пространства на поликубы. С использованием этих программ проведены исследования ряда модельных периодических разбиений с целью выявления влияния размера и формы исходной затравки, параметров и симметрии решетки трансляций, а также особенностей самого разбиения на геометрию слоев. Во всех случаях при увеличении номера слоя обнаруживается общая закономерность: постепенное формирование некоторого феноменологического многогранника (многоугольника в плоском случае), дальнейшее увеличение размеров которого происходит с сохранением его формы. Динамика этого процесса в двумерном случае демонстрируется на рис. 2.1, где в качестве затравки выбрано одно из 14 трансляционно-независимых полимино разбиения (код разбиения 3132033223322032321221111322311332230123220111221322313 в упаковочном пространстве $P14\ 4_7$), и показаны этапы формирования феноменологического восьмиугольника с четко выраженным свойством самоподобия. Аналогичные закономерности модельного роста наблюдаются и в трехмерном варианте, представленном на рис. 2.2, где в упаковочном пространстве $S32_12_1^2$ (код разбиения 753667345767) образовался феноменологический многогранник в виде 14-гранника.

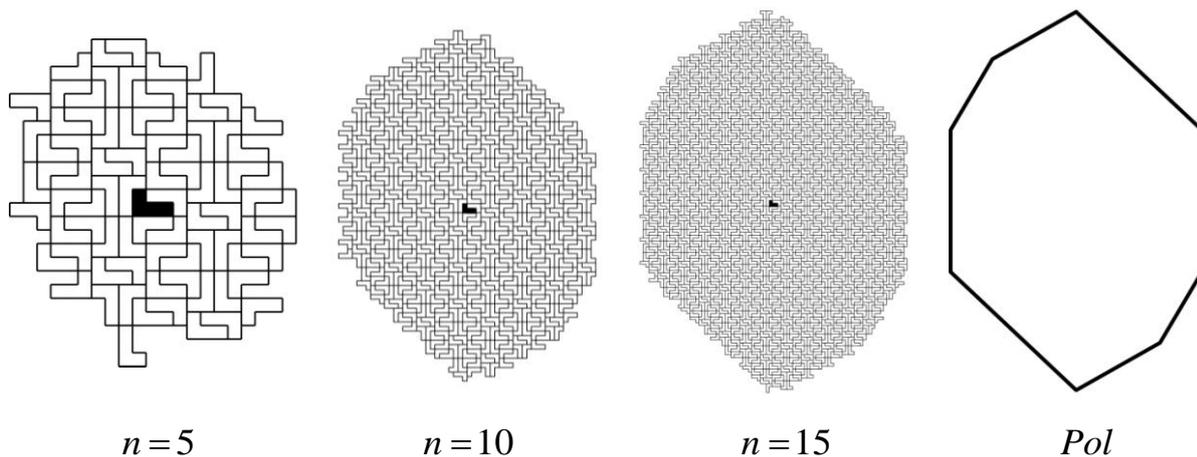


Рис. 2. 1. Формирование многоугольника роста в разбиении плоскости на полимино

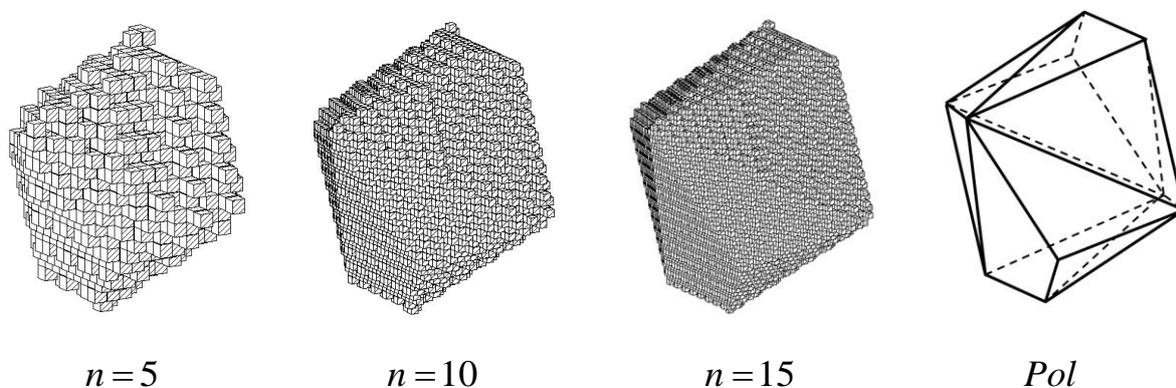


Рис. 2. 2. Формирование многогранника роста в разбиении плоскости на поликубы

С целью более строгого математического описания и дальнейшего исследования послойного роста введем несколько определений. Так как разбиение является частным случаем упаковки, в дальнейшем выделять особо разбиения не будем.

2.2. Отношение соседства фигур упаковки

Во-первых, определим понятие соседства фигур упаковки. В двумерном случае существует два естественных способа определения соседства многоугольников: 1) многоугольники считаются соседними, если они имеют общую границу ненулевой длины; 2) многоугольники считаются соседними, если они имеют хотя бы одну общую точку.

В трехмерном пространстве существует, по крайней мере, три естественных понятия соседства, а с точки зрения кристаллохимии имеет смысл рассматривать еще большее число понятий соседства. Естественным выходом из этой ситуации является аксиоматическое задание требуемых свойств соседства.

Отношение соседства – это бинарное отношение на множестве фигур упаковки $Pack$, удовлетворяющее следующим аксиомам [85]:

A1. Симметричность – если M_1 и M_2 - соседние фигуры, то M_2 и M_1 -

тоже соседние.

A2. Конечность – для любой фигуры существует только конечное число соседних с ней фигур.

A3. Кристаллографичность – для любого автоморфизма $g \in \text{Aut}(Pack)$ из группы автоморфизмов упаковки и любых двух соседних фигур M_1 и M_2 фигуры $g(M_1)$ и $g(M_2)$ - соседние.

Последовательность из соседних фигур упаковки называется цепью. Упаковка называется связной, если любые две фигуры из этой упаковки можно соединить цепью. Будем предполагать также выполнение аксиомы

A4. Связность – упаковка является связной.

Отношение соседства позволяет ввести метрику на множестве фигур упаковки. Если k – число фигур, входящих в цепь, то длиной цепи назовем число $k-1$. Расстоянием $d(M_1, M_2)$ между фигурами M_1 и M_2 назовем длину кратчайшей из соединяющих их цепей. Самую такую цепь будем называть геодезической. Легко проверить, что функция $d(M_1, M_2)$ обладает всеми свойствами расстояния.

Назовем n -ым координационным кругом с центром в фигуре M множество $Eq(M, n) = \{M' : d(M, M') \leq n\}$. Множество $eq(M, n) = \{M' : d(M, M') = n\}$ называется n -ым координационным окружением фигуры M .

Аналогично можно определить координационные круги и окружения для совокупности фигур \mathfrak{M} упаковки. Расстояние от фигуры M упаковки до множества \mathfrak{M} определяется по правилу $d(M, \mathfrak{M}) = \min_{M' \in \mathfrak{M}} d(M, M')$. При этом $Eq(\mathfrak{M}, n) = \{M' : d(M', \mathfrak{M}) \leq n\}$, $eq(\mathfrak{M}, n) = \{M' : d(M', \mathfrak{M}) = n\}$.

2.3. Форма послыогного роста упаковки

Выберем в упаковке $Pack$ произвольную фигуру M и зададим произвольную точку O . Пусть \mathbf{a} - вектор, соединяющий точку O с некоторой фиксированной точкой фигуры M . Рассмотрим последовательность множеств $\left\{ \frac{eq(M, n) - \mathbf{a}}{n} \right\}$, где деление на n означает гомотетию с центром в точке O и коэффициентом $\frac{1}{n}$. Если существует предел

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \frac{eq(M, n) - \mathbf{a}}{n} \right\}, \quad (2.1)$$

то он называется формой роста упаковки. При этом сходимость понимается в смысле метрики Хаусдорфа: $\rho(A, B) = \max \left\{ \sup_{x \in A} \inf_{y \in B} |x - y|, \sup_{x \in B} \inf_{y \in A} |x - y| \right\}$.

Из неравенства треугольника $d(M_1, M_2) \leq d(M, M_1) + d(M, M_2)$ легко следует, что если для некоторой фигуры $M \in Pack$ существует предел (2.1), то

1) для любой другой фигуры $M_1 \in Pack$ предел $\lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \frac{eq(M_1, n) - \mathbf{a}_1}{n} \right\} = \gamma$,

2) для любого множества фигур другой фигуры $\mathfrak{M} \in \text{Pack}$ также предел $\lim_{n \rightarrow \infty} \left\{ \frac{eq(\mathfrak{M}, n) - \mathbf{a}_1}{n} \right\} = \gamma$.

Эти свойства означают, что форма роста не зависит от выбора начального множества послыного роста (затравки).

Непосредственным следствием определения формы роста является то, что $eq(M, n) \subset (n \cdot \gamma)_{c_n}$, $\frac{c_n}{n} \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, где $(X)_c$ – c -окрестность множества X , то есть $(X)_c = \{x : d_e(x, X) \leq c\}$, d_e – обычная евклидова метрика. Это свойство означает самоподобный рост последовательных координационных окружений и объясняет возникновения термина "форма роста".

Теорема 2.1. Пусть упаковка Pack имеет самоподобный рост с формой роста γ . Пусть $g \in \text{Aut}(\text{Pack})$ – автоморфизм упаковки. Пусть g имеет неподвижную точку, совпадающую с началом координат O (т.к. γ не зависит от выбора O , то это не ограничительно). Тогда $g(\gamma) = \gamma$.

Приведём набросок доказательства. Всегда существует фигура $M \in \text{Pack}$ такая, что $g(M) = M$ (следует из существования неподвижной точки). Автоморфизмы g и g^{-1} – переводят цепи упаковки Pack в цепи той же длины. Поэтому $d(M, g(M')) = d(M, M')$. Отсюда следует, что если $M' \in eq(M, n)$, то $g(M')$ и $g^{-1}(M)$ также принадлежат $eq(M, n)$, то есть $eq(M, n) = g(eq(M, n))$, что и равносильно утверждению теоремы.

Можно получить также аналогичный результат для автоморфизмов упаковки, не имеющих неподвижных точек. Пусть $g \in \text{Aut}(\text{Pack})$ – автоморфизм упаковки, не имеющий неподвижных точек. Тогда g можно представить как композицию $g = t \circ g_0$, где t – параллельный перенос, а g_0 – движение, имеющее неподвижную точку, совпадающую с началом координат. Если преобразование g не является параллельным переносом, то преобразование g_0 не является тождественным.

Теорема 2.2. Пусть упаковка Pack имеет самоподобный рост с формой роста γ . Пусть $g = t \circ g_0 \in \text{Aut}(\text{Pack})$ – автоморфизм упаковки, не имеющий неподвижных точек и отличный от параллельного переноса. Тогда $g_0(\gamma) = \gamma$.

Для доказательства теоремы достаточно доказать, что $\frac{d(a, g_0(b))}{d(a, b)} \rightarrow 1$ при

$d(a, b) \rightarrow \infty$. Мы докажем более сильное неравенство

$$d(a, b) - C \leq d(a, g_0(b)) \leq d(a, b) + C$$

с константой C , зависящей только от a и g .

Вначале докажем, что $d(a, g_0(b)) \leq d(a, b) + C$. Пусть Γ – геодезическая, ведущая из a в b . Тогда мы можем построить цепь Γ_1 из a в $g_0(b)$, имеющую вид: $a \rightarrow g(a) \xrightarrow{g(\Gamma)} g(b) \rightarrow g_0(b)$, где участки $a \rightarrow g(a)$ и $g(b) \rightarrow g_0(b)$ явля-

ются геодезическими, а участок $g(a) \xrightarrow{g(\Gamma)} g(b)$ получается применением преобразования g к геодезической Γ . Отсюда получаем, что $d(a, g_0(b)) \leq d(\Gamma_1) = d(a, g(a)) + d(g(\Gamma)) + d(g(b), g_0(b))$. Ясно, что $d(g(\Gamma)) = d(a, b)$ и $d(a, g(a)) \leq C_1$, где константа C_1 зависит только от a и g . Учитывая, что $g = t \circ g_0$, где t – параллельный перенос, замечаем, что евклидово расстояние $d_e(g(b), g_0(b))$ между точками $g(b)$ и $g_0(b)$ не превосходит некоторой константы C_2 , зависящей только от t . Из теоремы о существовании формы роста следует существование константы C_3 , зависящей только от a такой, что $C_3^{-1}d_e(x, y) \leq d(x, y) \leq C_3d_e(x, y)$. Отсюда получаем, что $d(g(b), g_0(b)) \leq C_4$, где C_4 зависит только от a и t . Выбирая $C = C_1 + C_4$, получаем требуемый результат.

Второе неравенство $d(a, b) - C \leq d(a, g_0(b))$ доказывается аналогично. Приведем только общую схему рассуждений:

$$\begin{aligned} d(a, b) = d(g(a), g(b)) &\leq d(g(a), a) + d(a, g_0(b)) + d(g_0(b), g(b)) \leq \\ &\leq C_1 + d(a, g_0(b)) + C_4. \end{aligned}$$

2.4. Граф связности упаковки и его послойный рост

Отношение соседства позволяет поставить в соответствие каждой упаковке $Pack$ ее граф связности G . Для этого внутри каждой фигуры упаковки выберем по точке – вершине графа. Вершины a_1 и a_2 , соответствующие фигурам M_1 и M_2 соединим ребром графа тогда и только тогда, когда фигуры M_1 и M_2 являются соседними. На полученном графе G существует естественное отношение соседства между вершинами: две вершины называются соседними, если они соединены ребром. Понятие соседства автоматически переносит на графы все определения, касающиеся формы роста. Почти очевидным следствием определений является следующая теорема.

Теорема 2.3. *Упаковка $Pack$ и ее граф связности $G(Pack)$ имеют одинаковые формы роста, при условии, что хотя бы одна из них существует.*

Можно также определить рост не по вершинам, а по ребрам графа, считая два ребра соседними тогда и только тогда, когда они имеют общую вершину. Другими словами, для каждого графа G однозначно определен его реберный граф $L(G)$. При условии существования формы роста справедлива следующая теорема.

Теорема 2.4. *Форма роста графа G при росте по вершинам совпадает с формой роста его реберного графа $L(G)$ при росте по ребрам.*

Поэтому в дальнейшем будем рассматривать рост графов по вершинам.

В определении отношения соседства можно отказаться от аксиомы симметричности A1. Тогда функция $d(M_i, M_j)$ уже не будет метрикой, однако определения $Eq(M, n)$ и $eq(M, n)$ сохраняют свой смысл. Соответствующий упаковке $Pack$ граф связности в этом случае будет ориентированным. При этом

условие связности, даваемое аксиомой A4, часто оказывается недостаточным и его нужно заменить на условие сильной связности соответствующего орграфа, то есть существования как цепи из M_1 в M_2 , так и цепи из M_2 в M_1 . В дальнейшем, за исключением специальных оговоренных случаев, будем считать, что аксиома A1 выполнена, или же соответствующий орграф сильно связан.

В силу теоремы 2.3 рост упаковок можно свести к росту графов и наоборот. Таким образом, рост упаковок и рост графов связности – это два эквивалентных языка для описания ростовых процессов. Мы будем использовать оба языка, обращаясь к тому, который представляется более удобным для конкретной задачи. Но основным все же будет язык графов.

ГЛАВА 3. Рост периодических структур

3.1. Многогранник послыоного роста периодических графов

Рассмотрим задачу роста для периодического графа G в пространстве \mathbb{R}^m . При этом будем считать, что граф G неориентирован и его фундаментальная область содержит конечное число вершин. Сформулируем несколько определений.

Пусть L – решетка трансляций графа G . Вершины a и a' называются сравнимыми по модулю L (записывается $a \equiv a' \pmod{L}$), если $\mathbf{a} - \mathbf{a}' \in L$, где \mathbf{a} и \mathbf{a}' – радиус-векторы вершин a и a' .

По аналогии с цепью в упаковке, цепью в графе G называется множество его вершин, последовательно соединенных ребрами. Если цепь p содержит k вершин, то длиной цепи $d(p)$ называют число $k-1$. Цепь $g : a_0 \rightarrow a_1 \rightarrow \dots \rightarrow a_n$ называется геодезической, если любая другая цепь, начинающаяся в a_0 и заканчивающаяся в a_n , имеет длину не меньше чем $d(g)$.

Цепь $p : a_i \rightarrow b_1 \rightarrow \dots \rightarrow b_{s-1} \rightarrow a'_i$ называется лучом, если она является геодезической и не содержит пар вершин, сравнимых по модулю L , кроме пары (a_i, a'_i) , для которой справедливо $a_i \equiv a'_i \pmod{L}$. Определим и вектор $\mathbf{p} = \mathbf{a}'_i - \mathbf{a}_i$.

Пусть P_G – множество всех лучей графа G с вершинами в фундаментальной области. Назовем множество $St_G = P_G \cup \{\mathbf{p} : p \in P_G\}$ звездой графа G , а $st_G = \left\{ \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{d(p)} : p \in P_G \right\}$ нормированной звездой ($d(p)$ – длина цепи p).

Нормированная звезда st_G представляет собой конечное число векторов, поэтому ее выпуклая оболочка является многогранником. Обозначим границу этого многогранника Pol_G . Тогда справедлива следующая теорема.

Теорема 3.1. *Многогранник Pol_G является формой роста графа с ограниченной окрестностью, зависящей только от самого графа G . То есть для любого периодического графа G существует постоянная $c = c(G)$ такая, что для любой вершины $a \in G$ справедливо $eq(a, n) - \mathbf{a} \in (n \cdot Pol_G)_c$.*

Доказательство этой теоремы для двумерного случая предложено В.Г. Журавлевым [86]. Приведем доказательство теоремы в общем случае.

3.2. Доказательство теоремы о форме роста

Данное доказательство разбивается на две части.

1) *Нижняя граница.* Введем ряд вспомогательных обозначений. Пусть n_f – наименьшее общее кратное длин всех лучей, входящих в St_G . Заметим, что $n_f \leq \text{НОК}(1, 2, \dots, f)$ поскольку $d(p) \leq f \forall p \in P_G$. Здесь f – число вершин в фундаментальной области графа относительно решетки трансляций. Пусть vst_G

– множество векторов, ведущих из начала координат в вершины многоугольника роста. Множество vst_G задает выпуклую оболочку нормированной звезды st_G и называется вершинной звездой графа. Пусть $Cst_G = n_f \cdot vst_G$ – когерентная звезда графа, с соответствующими когерентными цепями

$p: p_s \rightarrow \dots \rightarrow p_s$ (k раз), где $p_s \in P_G$, $k = \frac{n_f}{d(p_s)}$. Для $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_t \in vst_G$ определим

многогранный угол $sec(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_t)$, называемый сектором роста. Пусть, наконец, $(n \cdot Pol_G)_c^-$ – объединение частей $(n \cdot sec)_c^-$ всех секторов роста sec , ограниченных боковыми гранями и сдвинутыми внутрь на расстояние с гранями многогранника Pol_G (внутренняя окрестность).

Граф G называется Cst -однородным, если из каждой вершины графа выходят все когерентные цепи. Примерами Cst -однородных графов являются графы связности правильных разбиений.

Рассмотрим произвольный сектор роста $sec = sec(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_t)$, которому соответствуют когерентные цепи p_{u_1}, \dots, p_{u_t} . Пусть m – размерность объемлющего графа G пространства. Без ограничения общности можно считать, что $t=m$, поскольку каждый сектор роста можно разрезать на конечное число таких секторов. Пусть геодезическая p длины n соединяет вершину a_1 с вершиной $a \in eq(a_1, n) \cap (sec + \mathbf{a}_1)$.

Идея доказательства нижней границы состоит в построении аппроксимационных цепей $p_{\text{анп}}$, ведущих из a_1 в a и имеющих длину, близкую к n .

Аппроксимационную цепь $p_{\text{анп}}$ будем строить с помощью когерентных цепей p_{u_1}, \dots, p_{u_m} в виде

$$p_{\text{анп}} : a_1 \rightarrow a_2^1 \xrightarrow[k'_{u_1} \text{ раз}]{p_{u_1}} \dots \xrightarrow[k'_{u_2} \text{ раз}]{p_{u_2}} a_3^2 \rightarrow \dots \rightarrow a_{m+1}^{m+1} \rightarrow a$$

Для Cst -однородных графов цепь $p_{\text{анп}}$ имеет вид:

$$p_{\text{анп}} : a_1 \xrightarrow[k'_{u_1} \text{ раз}]{p_{u_1}} \dots \xrightarrow[k'_{u_1} \text{ раз}]{p_{u_1}^+} a_2^1 \rightarrow \dots \rightarrow a_{m+1}^1 \rightarrow a$$

При этом выбирается цепь с минимальной суммой $k'_{u_1} + \dots + k'_{u_m}$ так, чтобы вершина a попала в фундаментальную область решётки L_{u_1, \dots, u_m} с вершиной a_m^1 и образующими векторами $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m$. В общем случае в аппроксимационную цепь добавляются геодезические переходы $a_1 \rightarrow a_2^1$ и $a_i^i \rightarrow a_{i+1}^i$.

Замечание: Можно построить не только аппроксимационную цепь, но и геодезическую, имеющую такой вид, но это не требуется для доказательства нижней границы.

По свойству геодезической, выполняется неравенство:

$$n = d(p) \leq d(p_{\text{анп}}) = d(a_1, a_2^1) + k'_{u_1} d(p_{u_1}) + d(a_2^1, a_3^2) + k'_{u_2} d(p_{u_2}) + \dots + d(a_m^m, a_{m+1}^m) + k'_{u_m} d(p_{u_m}) + d(a_{m+1}^m, a).$$

Положим $k = k'_{u_1} + \dots + k'_{u_m}$, где $k_{u_m} = k_{u_i} d(p_{u_i})$. Тогда $n = d(p) \leq k + d(a_1, a_2^1) + d(a_2^2, a_3^2) + d(a_3^3, a_4^3) + \dots + d(a_m^m, a_{m+1}^m) + d(a_{m+1}^{m+1}, a)$. Пусть $F(sec)$ – фундаментальная область сектора sec и решётки L_{u_1, \dots, u_m} , $F_i(sec) = F(sec) + \mathbf{a}_i$, где $\mathbf{a}_i \in F$ – фундаментальной области графа G . При этом $d(Cst_G) = \max_{i, sec} d(F_i(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m)) \geq n_f$. Расстояния $d(a_i^i, a_{i+1}^i)$ – измеряются между вершинами фундаментальных областей F_i . Поэтому $k \geq n - (m+1)d(Cst_G)$.

Оценим теперь снизу целое значение коэффициента гомотетии n_1 , при котором $\mathbf{a} - \mathbf{a}_1 \in (n_1 \cdot Pol_G)_c^-$. Для этого положим $k_{u_m} = k$ и рассмотрим уравнение

$$(\mathbf{a}_{m+1}^1 - \mathbf{a}_1) + k'_{u_m} \mathbf{u}_m + \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_m) = (n_1 + \beta) \mathbf{u}'_m$$

где $\mathbf{u}_i = \mathbf{p}_{u_i}$, $\mathbf{u}_i^1 = \frac{\mathbf{u}_i}{n_i}$, $0 \leq \alpha_i, \beta \leq 1$. Пусть $(\mathbf{a}_{m+1}^1 - \mathbf{a}_1) = -\sum_{i=1}^m \varepsilon_i \mathbf{u}_i$ с $0 \leq \varepsilon_i < 1$ и

$(\mathbf{a}_{m+1}^1 - \mathbf{a}_1) \in F(-\mathbf{u}_1, \dots, -\mathbf{u}_m)$. Тогда

$$-\sum_{i=1}^m \varepsilon_i n_f \mathbf{u}_i + k'_{u_m} n_f \mathbf{u}_m^1 + \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i n_f (\mathbf{u}_i^1 - \mathbf{u}_m^1) = (n_1 + \beta) \mathbf{u}_m^1$$

Так как $k'_{u_m} n_f = k_{u_m} = k$, это равносильно системе

$$\begin{cases} -\varepsilon_i n_f \mathbf{u}_i^1 + \alpha_i n_f \mathbf{u}_i^1 = 0, i = 1, \dots, m-1 \\ -\varepsilon_m n_f \mathbf{u}_m^1 + k \mathbf{u}_m^1 + \sum_{i=1}^{m-1} \alpha_i n_f \mathbf{u}_i^1 = (n_1 + \beta) \mathbf{u}_m^1 \end{cases}$$

Отсюда $\alpha_i = \varepsilon_i$, $i = 1, \dots, m-1$ и тогда $n_1 = k - \sum_{i=1}^m \varepsilon_i - \beta \geq (mn_1 + 1)$.

Отсюда следует, что

$$n_1 \geq n - ((2m+1)d(Cst_G) + 1),$$

что обеспечивает включение

$$eq(a_1, n) - \mathbf{a}_1 \supset (n \cdot Pol_G)_{c_{in}}^-$$

с константой

$$c_{in} \leq ((2m+1)d(Cst_G) + 1) |\mathbf{u}_m|$$

Обозначив $r(vst_G) = \max_{\mathbf{u} \in vst_G} |\mathbf{u}|$, можно положить

$$c_{in} = ((2m+1)d(Cst_G) + 1)r(vst_G)$$

2) *Верхняя граница.* Внешняя окрестность $(n \cdot Pol_G)_c^+$ состоит из пересечения полупространств $(n \cdot sec_G)_c^+$, содержащих $n \cdot Pol_G$, и ограниченных сдвинутыми на расстояние c от многогранника $n \cdot Pol_G$ гиперплоскостями, параллельными его граням.

Рассмотрим произвольную геодезическую p с длиной $d(p) = n > f$. Её можно представить в виде $q_1 \rightarrow p_j \rightarrow q_2$ со средней цепью p_j , в которой только крайние вершины сравнимы с $\text{mod } L$. Цепь p_j является лучом из P_a . Пусть $p_j : a'_j \rightarrow \dots \rightarrow a''_j$. Вырезанием цепи p_j получим из цепи

$$p : a_1 \rightarrow \dots \rightarrow a'_i \rightarrow a'_j \rightarrow \dots \rightarrow a''_j \rightarrow a'_k \rightarrow \dots \rightarrow a$$

укороченную цепь

$$p' : a_1 \rightarrow \dots \rightarrow a'_i \rightarrow a'_j \rightarrow (a''_k - \mathbf{p}_j) \rightarrow \dots \rightarrow (a - \mathbf{p}_j).$$

Вторая часть цепи p' представляет собой участок начальной цепи p , сдвинутый на вектор \mathbf{p}_j , принадлежащий решётке L . Поэтому p' - снова цепь. С цепью p' поступаем аналогично до тех пор, пока $d(p') \geq f$. В результате получим векторное разложение

$$\mathbf{p} = \sum_j \mathbf{p}_j + \mathbf{p}'$$

с цепью p' длиной $d(p') = f' \leq f$.

Возьмём теперь сектор роста $sec = sec(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m)$ и рассмотрим проекцию pr_{u_m} - проекцию на вектор \mathbf{u}_m вдоль гиперплоскости, натянутой на векторы $\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{m-1}$. Заметим, что все цепи p_j в полученном разложении являются геодезическими (иначе, заменяя их таковыми, получим противоречие с геодезичностью исходной цепи p). Поскольку $p_j \in P_G$, по определению выпуклой оболочки vst_G выполняются неравенства

$$pr_{u_m} \frac{\mathbf{p}_j}{d(p_j)} \leq pr_{u_m} \mathbf{u}_m^1, \text{ или } pr_{u_m} \mathbf{p}_j \leq pr_{u_m} d(p_j) \mathbf{u}_m^1.$$

Отсюда получаем неравенство

$$pr_{u_m} \mathbf{p} \leq pr_{u_m} (n - j') \mathbf{u}_m^1 + pr_{u_m} \mathbf{p}' \leq pr_{u_m} n \mathbf{u}_m^1 + pr_{u_m} \mathbf{p}',$$

которое и доказывает верхнюю границу

$$eq(a_1, n) - \mathbf{a}_1 \subset (n \cdot Pol_G)_{c_{ext}}^+,$$

где

$$c_{ext} = (f - 1) \cdot e$$

и e - наибольшая длина графа G .

Таким образом, теорема полностью доказана.

Замечание: Приведенное доказательство показывает, что для доказательства многогранной формы роста достаточно уметь строить цепи в вершины многогранника роста и раскладывать произвольную геодезическую в сумму таких цепей.

Понятия послыного роста и формы роста без каких-либо изменений переносятся на случай ориентированных графов (орграфов). Возникает вопрос о форме роста периодического орграфа.

Орграф называется сильно связным, если для любой пары вершин a и a_1 существует как цепь, ведущая из a в a_1 , так и цепь, ведущая из a_1 в a . Приведённое доказательство без каких-либо изменений применимо к сильно связным орграфам, для которых теорема 3.1 справедлива без каких-либо изменений.

В случае отказа от сильной связности многогранник Pol_G может содержать начало координат. Возникают вырожденные секторы роста, содержащие внутри себя целое полупространство. В этом случае форма роста состоит из тех граней Pol_G , которые не содержат начало координат. Условие сильной связности можно заменить на условие секторной связности (выполняющееся, в част-

ности, для графов всех кристаллографических групп): существует цепь из a_1 в a , если только, a принадлежит какому-нибудь невырожденному сектору роста с вершиной a_1 . Соответствующим образом изменив понятие s -окрестности для вырожденного сектора в плоском случае можно доказать аналог теоремы 3.1 для периодических орграфов с условием секторной связности.

В дальнейшем мы будем рассматривать только случай неориентированных графов.

Из приведенного доказательства можно извлечь ряд полезных следствий. Рассмотрим, например, геодезическую $\Gamma_1: \Gamma_1^1 \rightarrow kp_{u_1} \rightarrow lp_{u_2} \rightarrow \Gamma_1^2$, где Γ_1^1, Γ_1^2 - участки геодезической, p_{u_1} и p_{u_2} - когерентной цепи. Поскольку $d(p_{u_1}) = d(p_{u_2}) = n_f$, то цепь $\Gamma_2: \Gamma_1^1 \rightarrow (k+1)p_{u_1} \rightarrow (l-1)p_{u_2} \rightarrow \Gamma_1^2$ - имеет ту же длину, и соответствующая вершина - принадлежит тому же координационному окружению. Таким образом, если рассмотреть пересечение $eq(a_1, n) \cap (\mathbf{a}_1 + sec(p_{u_1}, \dots, p_{u_m}))$, то попавшие в него вершины $eq(a_1, n)$ будут распределены периодически. При этом в качестве решётки периодов можно взять $L[\mathbf{p}_{u_2} - \mathbf{p}_{u_1}, \dots, \mathbf{p}_{u_m} - \mathbf{p}_{u_1}]$ (однако, эта решётка может не быть наименьшей решёткой периодов).

3.3. Свойства многогранника послыюного роста периодических графов

Непосредственно из определений следует, что многогранник роста Pol_G является выпуклым.

Легко показать, что он является центросимметричным. Действительно, если $p: a_i \rightarrow b_1 \rightarrow \dots \rightarrow b_{s-1} \rightarrow a'_i$ - луч в неориентированном графе G , то $p': a'_i \rightarrow b_{s-1} \rightarrow \dots \rightarrow b_1 \rightarrow a_i$ - тоже является лучом в G . Так как a_i и a'_i трансляционно идентичны, то существует и луч $-p = p' - (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}'_i)$, выходящий из вершины a_i . Следовательно, звезды St_G и st_G - центросимметричны, а значит центросимметричен и многогранник Pol_G .

Все грани многогранника Pol_G параллельны некоторым кристаллографическим плоскостям решетки трансляций L периодического графа G . Это следует из того, что векторы звезды St_G по определению являются векторами решетки трансляций L , а значит векторы нормированной звезды st_G в целое число раз меньше векторов решетки трансляций. Так как любая грань многогранника Pol_G определяется векторами из st_G , а значит точками с рациональными координатами в базисе решетки L , то эта грань параллельна некоторой кристаллографической плоскости.

3.4. Алгоритм построения многогранника послыюного роста периодических графов

В отличие от произвольного графа связности, периодический граф можно задать во всем пространстве. Пусть в фундаментальную область решетки

трансляций L попадает f вершин графа G . Зададим координаты только этих n вершин $\{\mathbf{r}(i) | i = 1, 2, \dots, f\}$ в базисе решетки L . Тогда любая вершина графа G будет определяться номером трансляционно-идентичной ей вершины из фундаментальной области (назовем его типом вершины $t \in \{1, 2, \dots, f\}$) и целочисленным вектором индексов трансляции $\mathbf{h} = (h, k, l)$. Для каждой из этих вершин фундаментальной области определим число выходящих из нее ребер $\{nr(i) | i = 1, 2, \dots, f\}$. Вершины, с которыми эта вершина соединена ребрами, определяются их типами $\{t(i, j) | i = 1, 2, \dots, f; j = 1, \dots, nr(i)\}$ и индексами трансляций $\{\mathbf{h}(i, j) | i = 1, 2, \dots, f; j = 1, \dots, nr(i)\}$.

Алгоритм построения многогранника послойного роста pol_G можно разбить на два основных этапа: 1) построение звезды st_G ; 2) построение выпуклой оболочки звезды st_G .

При реализации первого этапа, для каждой вершины графа G из фундаментальной области решетки трансляций L строятся f первых ее окружений $\{Sph(i)\} = \{(t(j, k); \mathbf{h}(j, k)) | j = 1, 2, \dots, f; k = 1, 2, \dots, N_sph(j)\}$, где f – число вершин графа G в фундаментальной области решетки L . Пусть j -ое окружение i -ой вершины содержит вершину i -го типа с вектором трансляции \mathbf{h} , тогда нормированная звезда st_G содержит вектор $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{h}}{j}$. Множество всех построенных таким образом векторов образует всю звезду st_G .

Полученные на предыдущем этапе координаты векторов \mathbf{v} звезды st_G заданы в базисе решетки трансляций L . Прежде чем перейти к построению выпуклой оболочки их следует пересчитать в некотором ортонормированном базисе. Перебирая все возможные тройки векторов звезды st_G , строятся плоскости, в которых лежат концы этих векторов, при условии, что они не лежат на одной прямой. Из множества этих плоскостей отбрасываются те, для которых концы хотя бы двух векторов из st_G лежат по разные стороны от плоскости. В результате получаем множество плоскостей Π . Концы векторов st_G , принадлежащие хотя бы трем различным плоскостям из Π , являются вершинами многогранника Pol_G . Для дальнейшего построения этого многогранника целесообразно выписать и упорядочить вершины каждой грани.

На рис. 3.1 (а) представлены десять координационных сфер гипотетического периодического графа связности G , содержащего три трансляционно-независимые вершины, заданного в табл. 3.1. На рис. 3.1 (б) и (в) изображены увеличенные для наглядности в 10 раз нормированная звезда st_G этого графа и построенный по ней многогранник роста Pol_G .

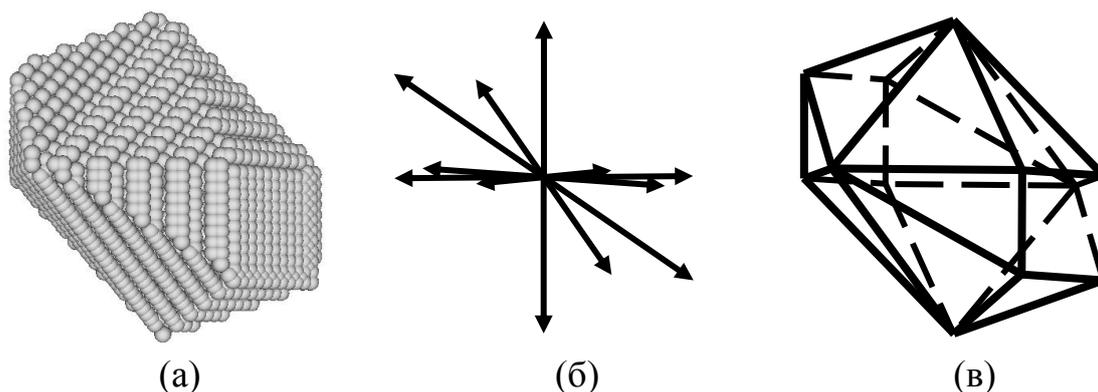


Рис. 3.1. 30-е координационное окружение (а), нормированная звезда st_G (б) и многогранник роста Pol_G (в) в гипотетическом периодическом графе G

Таблица 3.1. Гипотетический периодический граф связности G

Тип i и координаты исходной вершины	Число ребер $nr(i)$	Тип соседней вершины $t(i, j)$	Индексы трансляций $\mathbf{h}(i, j)$		
			h	k	l
1 (0,0,0)	3	2	0	0	0
		3	1	0	0
		2	0	1	0
2 (0.5,0.5,0)	4	1	0	0	0
		1	0	-1	0
		3	0	0	0
		3	0	0	1
3 (0,0.5,0.5)	3	1	-1	0	0
		2	0	0	0
		2	0	0	-1

3.5. Рост в узком секторе и теория склейки

Представляет интерес ситуация, когда рост периодического графа происходит не на всей плоскости, а в некотором секторе. Оказывается, что в этом случае форму роста можно найти как пересечение формы роста на всей плоскости с рассматриваемым сектором, ограничивающим рост. Результат справедлив для секторов со сколь угодно малым углом. При этом следует заметить, что пересечение периодического графа с сектором не обязано быть связным, однако имеет единственную бесконечную компоненту связности, содержащую все вершины пересечения за исключением, быть может, конечного их числа.

Теорема 3.2. Пусть G - плоский периодический граф, Sec - сектор с произвольно малым углом α , не обязательно являющимся сектором роста. Пусть $G' = G \cap Sec$, $Pol_{G'} = Pol_G \cap Sec$. Тогда для любой вершины a_1 из бесконечной компоненты связности G'

$$eq_{G'}(a_1, n) \subset \mathbf{a}_1 + (n \cdot Pol_{G'})_{c_n},$$

где $c_n = O(\ln n)$ при $n \rightarrow \infty$.

Приведем набросок доказательства теоремы. Верхняя граница очевидным образом вытекает из теоремы 3.1. Поэтому достаточно доказать нижнюю границу то есть научиться строить аппроксимационные цепи. Без ограничения общности можно считать, что сектор Sec содержится внутри одного единственного сектора роста образованного когерентными цепями p_{u_1} и p_{u_2} (в противном случае Sec разбивается на конечное число таких секторов). Аппроксимационная цепь имеет вид:

$$\begin{aligned} a_1 \rightarrow a_2^1 \xrightarrow{p_{u_1}} \dots \xrightarrow{p_{u_1}} a_2^2 \rightarrow a_3^2 \xrightarrow{p_{u_2}} \dots \xrightarrow{p_{u_2}} a_3^3 \rightarrow \\ \rightarrow a_4^3 \xrightarrow{p_{u_1}} \dots \xrightarrow{p_{u_1}} a_4^4 \rightarrow a_5^4 \xrightarrow{p_{u_2}} \dots \xrightarrow{p_{u_2}} a_5^5 \rightarrow \dots \rightarrow a_k^k \rightarrow a \end{aligned}$$

Цепь p_{u_1} повторяется столько раз сколько это можно сделать, чтобы не выйти за границу сектора Sec . Затем повторяется цепь p_{u_2} , затем p_{u_1} и так далее. Все переходы между цепями выбираются геодезическими. Геометрия цепи изображена на рис.3.2.

Для доказательства нижней границы нужно оценить количество геодезических переходов $a_i^i \rightarrow a_{i+1}^i$ в аппроксимационной цепи, ведущей в n -ое координатное окружение $eq_{G'}(a_1, n)$ и показать, что их число равно $O(\ln n)$. Для этого положим $A_1 \in Sec$ и проведем прямые $A_i B_i \parallel \mathbf{p}_{u_1}$ и $A_{i+1} B_i \parallel \mathbf{p}_{u_2}$ (рис.3.3). Все $\triangle A_i B_i A_{i+1}$ подобны между собой. Пусть $k > 1$ – коэффициент подобия. Каждому треугольнику, кроме первого соответствуют 2 геодезических перехода (первому – 3). Пусть l – число переходов. Тогда $(l-1)/2$ – число треугольников. Пусть d_0 – длина цепи, соответствующая первому треугольнику. Тогда i -тому треугольнику соответствует цепь длины $k^i d_0$. Суммарная длина аппроксимаци-

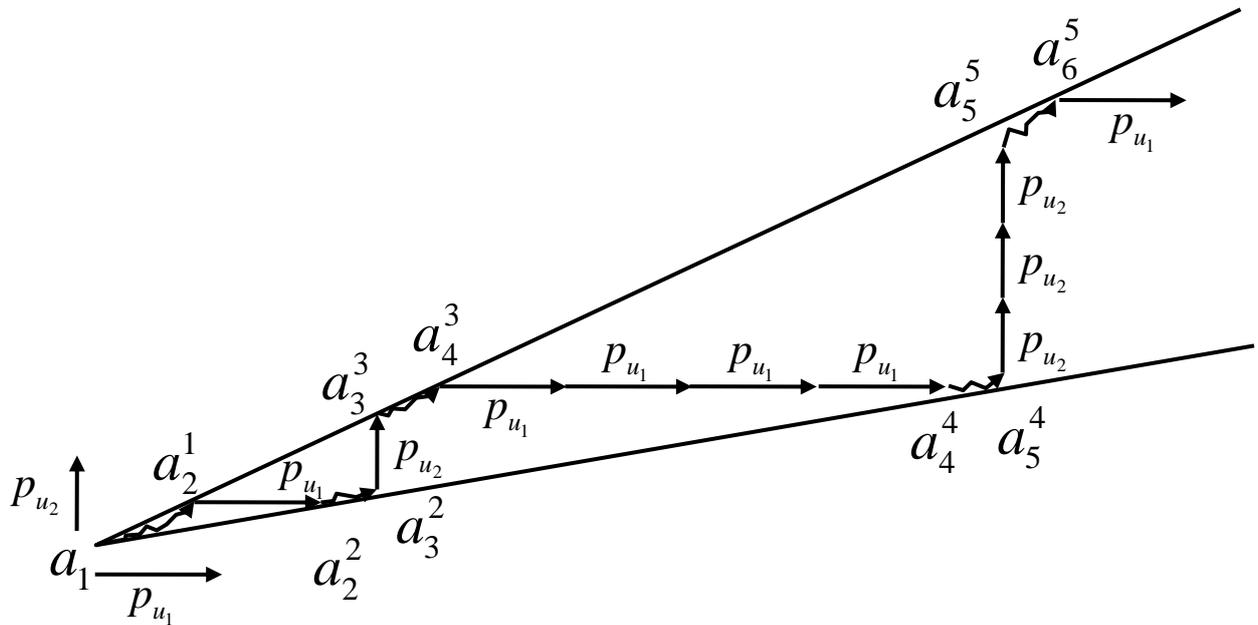


Рис. 3.2. Аппроксимационная цепь в узком секторе.

онное окружение $eq_{G'}(a_1, n)$ и показать, что их число равно $O(\ln n)$. Для этого положим $A_1 \in Sec$ и проведем прямые $A_i B_i \parallel \mathbf{p}_{u_1}$ и $A_{i+1} B_i \parallel \mathbf{p}_{u_2}$ (рис.3.3). Все $\triangle A_i B_i A_{i+1}$ подобны между собой. Пусть $k > 1$ – коэффициент подобия. Каждому треугольнику, кроме первого соответствуют 2 геодезических перехода (первому – 3). Пусть l – число переходов. Тогда $(l-1)/2$ – число треугольников. Пусть d_0 – длина цепи, соответствующая первому треугольнику. Тогда i -тому треугольнику соответствует цепь длины $k^i d_0$. Суммарная длина аппроксимаци-

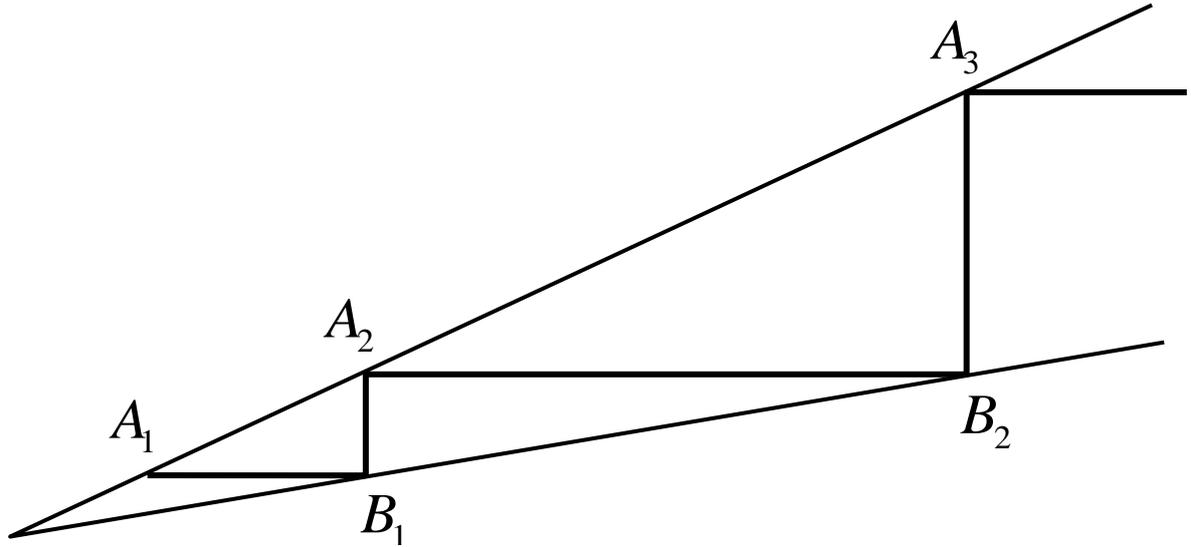


Рис. 3.3. Приближение аппроксимационной цепи для подсчета числа переходов.

онной цепи $n = d_0 + kd_0 + \dots + k^{(l-1)/2}d_0 + \sum_{i=1}^l c_i$, где c_i – длина соответствующего геодезического перехода. Непосредственным вычислением находим, что

$$n = d_0 \frac{k^{(l+1)/2} - 1}{k - 1} + cl, \text{ где } c = \frac{\sum_{i=1}^l c_i}{l}; c \leq 1.$$

При больших значениях n имеем

$$n \sim \frac{d_0}{k-1} k^{(l+1)/2}, \ln n \sim \ln \frac{d_0}{k-1} + \frac{(l+1)}{2} \ln k, \frac{(l+1)}{2} \ln k \sim \ln n - \ln \frac{d_0}{k-1},$$

$$l \sim \frac{2(\ln n + \ln \frac{k-1}{d_0})}{\ln k} - 1, \text{ то есть } l = O(\ln n), \text{ что и доказывает теорему.}$$

Граф G называется Cst -устойчивым, если существует хотя бы одна вершина, из которой выходят все когерентные цепи. Существуют Cst -устойчивые, но не Cst -однородные графы. В случае Cst -устойчивых графов все геодезические переходы кроме первого и последнего – отсутствуют, из чего следует справедливость теоремы с абсолютной постоянной c . Более того для Cst -устойчивых графов можно доказать аналог теоремы 3.2 не для сектора, а для полосы достаточно большой ширины. Аппроксимационная цепь будет иметь вид

$$p_{\text{анн}} : a_n \rightarrow a_2^1 \xrightarrow{k_1 p_{u_1}} a_2^2 \xrightarrow{k_2 p_{u_2}} a_3^2 \xrightarrow{k_1 p_{u_1}} a_3^3 \xrightarrow{k_2 p_{u_2}} a_4^3 \xrightarrow{k_1 p_{u_1}} \dots a_k^{k-1} \xrightarrow{k_1 p_{u_1}} a_k^k \rightarrow a.$$

Доказанная теорема является основой для исследования послойного роста графов, полученных склейкой периодических графов.

Ограничимся склейкой плоских разбиений и графов. Пусть Til – некоторое разбиение плоскости. Предположим, что из него можно удалить конечное число тайлов так, что освободившаяся часть разбиения можно разделить на конечное число секторов (к сектору относятся все тайлы, лежащие внутри данного угла или пересекающие его стороны) и полос (полоса ограничена двумя параллельными прямыми и перпендикулярным им отрезком), причем часть раз-

биения, расположенная внутри сектора/полосы – периодическая (то есть может быть продолжена до периодического разбиения всей плоскости). В этом случае говорят, что Til получено склейкой периодических разбиений. Теория склейки показывает, как связана форма роста склеенного разбиения Til с формами роста составляющих его периодических разбиений.

Условие периодичности гарантирует самоподобный рост каждого отдельного сектора (полосы), если пренебречь влиянием соседних секторов (полос). Будем считать, что каждому вектору склейки соответствует единственный сектор роста периодического разбиения (в противном случае сектор склейки – можно разбить на несколько более узких секторов).

Вначале предположим, что на рост каждого сектора будут оказывать влияния только соседние сектора (справедливость этого предположения будет доказана далее). Пусть Sec – сектор склейки, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ – векторы роста, отвечающие границам сектора Sec . Согласно теореме 3.2 можно строить сколь угодно длинные аппроксимационные цепи в направлениях \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , лежащие внутри Sec .

Пусть \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 – сонаправленные \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 векторы роста соседних с Sec секторов. Если с сектором Sec соседствуют не только сектора, но и полосы, то в качестве \mathbf{b}_i – выберем самый длинный из соответствующих векторов роста.

Возможны 3 принципиально различных варианта соотношений между длинами векторов $\mathbf{a}_1 = \overrightarrow{OA_1}, \mathbf{a}_2 = \overrightarrow{OA_2}, \mathbf{b}_1 = \overrightarrow{OB_1}, \mathbf{b}_2 = \overrightarrow{OB_2}$.

1) $|\mathbf{a}_1| \geq |\mathbf{b}_1|, |\mathbf{a}_2| \geq |\mathbf{b}_2|$. Форма роста в секторе – отрезок A_1A_2 (рис.3.4-а)

Набросок доказательства. Для доказательства нижней границы легко построить аппроксимационную цепь вида $p(a_1) \rightarrow p(a_2)$, где $p(a_i)$ - аппроксимационная цепь в направлении \mathbf{a}_i из сектора Sec .

Поскольку на рост сектора влияют только соседние сектора (где рост такой же, как и в периодическом случае), то часть геодезической, исходящая вне Sec - состоит из цепей $p(b_1)$ и $p(b_2)$. Таким образом, в звезду периодического

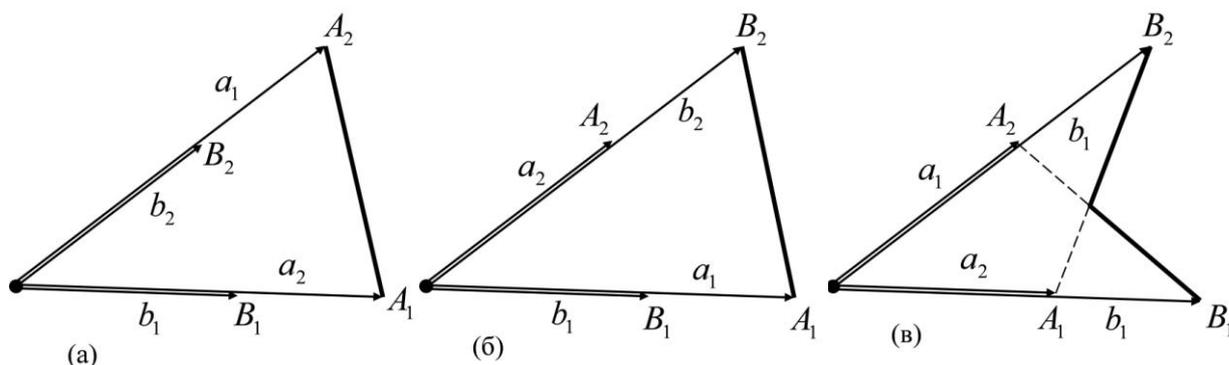


Рис. 3.4. Форма роста в секторе склейки.

разбиения, отвечающего Sec добавляются 2 вектора \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 , не влияющие на выпуклую оболочку vst (очевидно, что движение вдоль $p(a_i)$ – выгоднее, чем вдоль $p(b_i)$).

2) $|\mathbf{a}_1| \geq |\mathbf{b}_1|, |\mathbf{a}_2| < |\mathbf{b}_2|$. Форма роста в секторе – отрезок A_1B_2 (рис.3.4-б)

Набросок доказательства. Аппроксимационная цепь для доказательства нижней границы имеет вид $p(b_2) \rightarrow p(a_1)$.

Для доказательства верхней границы заметим, что любая геодезическая вновь состоит из векторов $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$. На этот раз выпуклая оболочка состоит из векторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{b}_2 .

Случай $|\mathbf{a}_1| < |\mathbf{b}_1|, |\mathbf{a}_2| \geq |\mathbf{b}_2|$ рассматривается полностью аналогично.

3) $|\mathbf{a}_1| < |\mathbf{b}_1|, |\mathbf{a}_2| < |\mathbf{b}_2|$. Пусть C – точка пересечения отрезков A_1B_2 и A_2B_1 . Тогда форма роста в секторе состоит из двух отрезков B_1C и CB_2 (рис.3.4-в).

Набросок доказательства. Для тайлов, лежащих в c -окрестности множества $(n \cdot CB_1)$ аппроксимационная цепь имеет вид $p(b_1) \rightarrow p(a_2)$, а для тайлов из c -окрестности множества $(n \cdot CB_2)$ – вид $p(b_2) \rightarrow p(a_1)$, что и доказывает нижнюю границу.

Для доказательства верхней границы заметим, что всегда существует геодезическая (отвечающая любому тайлу), в которой нет либо цепей $p(b_1)$, либо цепей $p(b_2)$ (это верно и для случаев 1 и 2), но там это соображение не требуется). Пусть $p: p_1 \rightarrow p(b_1) \rightarrow p_2 \rightarrow p(b_2)$, $p': p_1 \rightarrow p(b_1) \rightarrow p_2$ – часть геодезической p , причем p_1, p_2 не содержат $p(b_i)$. Тогда $\mathbf{p}' \uparrow \uparrow \mathbf{a}_2 \uparrow \uparrow \mathbf{b}_2$. Поскольку p' не содержит $p(b_2)$, её можно заменить на $p(a_2)$ (следует из стандартного способа доказательства верхних границ), а значит и на $p(b_1)$. Таким образом, геодезическая имеет вид либо $\mathbf{p} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{b}_1 + \mathbf{c}_1$, либо $\mathbf{p} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{b}_2 + \mathbf{c}_2$. При этом длина $|\mathbf{c}_i|$ ограничена константой, не зависящей от n . В первом случае $\frac{\mathbf{r}}{s(\mathbf{r})}$ – лежит в $\triangle OB_1A_2$, во втором – в $\triangle OB_2A_1$, что и доказывает верхнюю границу.

Заметим теперь, что соседний сектор роста влияет на рост только той части сектора склейки, которая граничит с ним, и не влияет на второй вектор роста сектора. Это оправдывает сделанное в начале допущение.

Подробнее, пусть $Sec_1 - Sec_3$ – соседние секторы склейки с естественными векторами роста $\mathbf{a}_1(Sec_i), \mathbf{a}_2(Sec_i)$. По доказанному выше, реальный вектор роста сектора Sec_2 , коллинеарный $\mathbf{a}_1(Sec_2)$ не зависит от $\mathbf{a}_j(Sec_3)$. Реальные векторы роста Sec_1 – зависят от $\mathbf{a}_1(Sec_2)$, но не от остальных векторов реального роста Sec_2 . Значит, рост Sec_1 не зависит от Sec_3 .

Отметим, что легко привести примеры разбиений (и графов), для которых имеет место каждая из ситуаций 1-3.

Таким образом, мы можем найти форму роста любого разбиения Til , склеенного из периодических разбиений. Все такие разбиения имеют самоподобный многоугольный рост. Интересно, что многоугольник роста уже не обязан быть выпуклым.

3.6. Обратная задача теории роста

Рассмотрим теперь вопрос о том, какие многогранники могут являться формами роста периодических графов. Полное решение задачи дается следующей теоремой.

Теорема 3.3. *Для того чтобы многогранник Pol являлся многогранником роста некоторого периодического графа G необходимо и достаточно выполнения трех условий:*

1) *Многогранник Pol выпуклый*

2) *Многогранник Pol центрально симметричный*

3) *Существует базис $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_m\}$, в котором координаты всех вершин многогранника Pol рациональны (при условии, что центр симметрии многогранника совпадает с началом координат).*

Необходимость условий теоремы уже доказана в параграфе 3.3. Доказательство достаточности проводится явным построением графа G , форма роста которого совпадает с многогранником Pol . Приведем соответствующее построение.

Пусть G_0 – граф, вершины которого имеют координаты $\sum_{i=1}^m x_i \mathbf{e}_i, x_i \in \mathbb{Z}$.

Вершины \mathbf{x} и \mathbf{y} графа G_0 соединим ребром тогда и только тогда, когда $\mathbf{x} - \mathbf{y} = \pm \mathbf{e}_i$. Построенные ребра назовем базовыми. Пусть теперь $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_l$ – векторы, ведущие из центра симметрии многогранника Pol в его вершины. Через n_i обозначим наименьшее общее кратное знаменателей координат вектора \mathbf{v}_i . Ясно, что все векторы $n_i \mathbf{v}_i$ имеют целочисленные координаты в рассматриваемом базисе. Построим новый граф G_1 , содержащий все вершины и ребра графа G_0 . Кроме того, вершины \mathbf{x} и \mathbf{y} графа G_1 соединим ребром тогда и только тогда, когда $\mathbf{x} - \mathbf{y} = \pm n_i \mathbf{v}_i$. Построенные ребра назовем дополнительными. Далее, построим новый граф G_2 добавлением новых вершин на дополнительные ребра графа G_1 . Пусть \mathbf{x} и \mathbf{y} – две вершины графа G_1 , соединенные дополнительным ребром, причем $\mathbf{x} - \mathbf{y} = \pm n_i \mathbf{v}_i$. Тогда разместим на каждом таком ребре еще $n_i - 1$ вспомогательных вершин. Эти вершины имеют степень 2 и не соединены ни с какими другими вершинами. Иными словами, путь $x \rightarrow y$ длины 1 в графе G_1 заменяется на путь $x \rightarrow w_1 \rightarrow \dots \rightarrow w_{n_i-1} \rightarrow y$ длины n_i в графе G_2 . Далее, заметим, что существует число M такое, что все векторы $\pm \frac{1}{M} \mathbf{e}_i$ лежат внутри многогранника Pol . Построим теперь граф G , полученный из графа G_2 добавлением $M - 1$ дополнительной вершины на каждое из базовых ребер. Используя теорему 3.1 о форме роста периодических графов нетрудно проверить, что граф G – искомый, то есть его форма роста совпадает с многогранником Pol .

Условие 3) в доказанной теореме не очень удобно для непосредственной проверки. Тем не менее, оно может быть переформулировано в легко проверяемых терминах.

Следствие 3.4. Пусть Pol – выпуклый центрально симметричный многогранник в \mathbb{R}^m , $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_t$ – векторы, ведущие из центра симметрии многогранника Pol в его вершины. Тогда Pol является многогранником роста некоторого периодического графа G тогда и только тогда, когда среди векторов $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_t$ имеется ровно t рационально независимых.

Следствие 3.5. Пусть Pol – выпуклый центрально симметричный многогранник в \mathbb{R}^m , $\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_t$ – векторы, ребер многогранника Pol . Тогда Pol является многогранником роста некоторого периодического графа G тогда и только тогда, когда среди векторов $\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_t$ имеется ровно t рационально независимых.

Для каждого выпуклого центрально-симметричного многогранника Pol можно определить так называемый двойственный многогранник Pol^* , вершинами которого будут точки пересечения граней многогранника Pol с лучами, проведенными из центра симметрии многогранника Pol в направлении нормалей к этим граням. Из доказанной теоремы можно вывести следующий результат.

Теорема 3.6. Многогранники Pol и Pol^* либо оба одновременно являются, либо оба одновременно не являются формами роста периодических графов.

Для доказательства достаточно заметить, что нормаль к гиперплоскости, проходящей через рациональные точки, имеет рациональные координаты и что точка пересечения рациональной прямой и рациональной гиперплоскости также рациональна.

Теорема 3.7. Пусть Pol – t -мерный многогранник, одна из $(t-1)$ -мерных центрально симметричных граней которого не может являться формой роста периодического графа. Тогда и сам многогранник Pol не может быть формой роста периодического графа.

Действительно, в условиях теоремы возможны всего два случая: либо соответствующая грань невыпукла, либо среди векторов грани имеется не менее t рационально независимых. В первом случае сам многогранник Pol является невыпуклым. Во втором случае заметим, что любой вектор ребра многогранника Pol не лежащий в рассматриваемой грани не может рационально выражаться через ее векторы. Отсюда сразу следует, что среди векторов ребер многогранника Pol имеется не менее $t+1$ рационально независимых.

Отметим, что теорема 3.7 без предположения о центральной симметричности грани становится неверной. Очевидным контрпримером является октаэдр.

Применим теперь полученные результаты к правильным многоугольникам и многогранникам.

Теорема 3.8 Правильный n -угольник является формой роста плоского периодического графа только при $n=4$ и $n=6$.

Заметим, что свойство многоугольника (многогранника) быть формой роста периодического графа не меняется при движениях и преобразованиях подобия. Поэтому без ограничения общности можно считать, что координаты

вершин рассматриваемого многоугольника есть $\mathbf{v}_k = (\cos \frac{2\pi k}{n}, \sin \frac{2\pi k}{n})$, $k = 0, 1, \dots, n-1$. Ясно, векторы $\mathbf{v}_0 = (1, 0)$ и $\mathbf{v}_1 = (\cos \frac{2\pi}{n}, \sin \frac{2\pi}{n})$ не сонаправлены, а, следовательно, рационально независимы. Рассмотрим теперь тройку векторов $\mathbf{v}_0, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_{n-1}$. Поскольку $\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_{n-1} = (2 \cos \frac{2\pi}{n}, 0)$, то данная тройка векторов будет рационально зависимой тогда и только тогда, когда число $\cos \frac{2\pi}{n}$ рационально.

Это возможно только при $n = 1, 2, 3, 4, 6$. При $n = 1, 2$ правильных многоугольников не существует, при $n = 3$ правильный треугольник не является центрально симметричным. Доказательство того, что квадрат и шестиугольник могут быть формами роста плоских периодических графов, проводится очевидным построением.

Теорема 3.9 *Правильный многогранник является формой роста трехмерного периодического графа тогда и только тогда, когда он является кубом или октаэдром.*

Доказательство легко вытекает из приведенных выше результатов.

Отметим, что в теореме 3.9 речь идет не о комбинаторной, а о метрической правильности. Более того, из теоремы 3.3 сразу следует, что существуют сколь угодно близкие к правильному икосаэдру и правильному додекаэдру многогранники, являющиеся формами роста трехмерных периодических графов. В качестве примеров таких многогранников можно рассмотреть многогранники, у которых каждая координата каждого из ведущих в вершину векторов есть k -ая подходящая дробь (или любое другое хорошее рациональное приближение) к соответствующей координате соответствующего вектора, ведущего в вершину правильного икосаэдра (или додекаэдра).

Обратимся теперь к многогранникам роста графов, не являющихся периодическими.

Замкнутое тело называется звездным относительно некоторой точки, если любой луч, проведенный из этой точки, пересекается с телом по единственному отрезку. Замкнутое тело называется звездным, если оно является звездным относительно хотя бы одной из своих внутренних точек.

Гипотеза. *Любая форма роста является звездным телом.*

Теорема 3.10. *Любой звездный многогранник является многогранником роста разбиения, полученного склейкой периодических разбиений.*

Для простоты проведем доказательство только в плоском случае. Пусть $P = A_1 A_2 \dots A_n$ – звездный многоугольник, O – точка, относительно которой он является звездным. Рассмотрим сектора $OA_i A_{i+1}$ ($A_{n+1} = A_1$). В каждом из секторов построим разбиения на треугольники. Все треугольники разбиения сектора получаются из $\triangle OA_i A_{i+1}$ и треугольника, дополняющего его до параллелограмма с помощью параллельных переносов на вектора полурешетки $L^+ = \{k_1 \overrightarrow{OA_1} + k_2 \overrightarrow{OA_2}, k_1, k_2 \in \mathbb{Z}, k_1, k_2 \geq 0\}$. Полученное разбиение является склей-

кой периодических разбиений с формой роста P (многоугольники считаются соседними тогда и только тогда, когда они имеют хотя бы одну общую точку).

ГЛАВА 4. Физические приложения

4.1. Спектры многогранников роста реальных кристаллических структур, полученные накладыванием ограничений на граф связности

Кристаллической структуре молекулярного кристалла можно поставить в соответствие разбиение пространства на молекулярные полиэдры Вороного-Дирихле [56, 83]. Как было показано выше, разбиение пространства задает граф связности G . Для этого выберем произвольным образом внутри всех трансляционно-независимых молекулярных полиэдров по одной вершине графа и размножим полученные вершины с помощью решетки трансляций L кристаллической структуры. Вершины будем считать соединенными ребром, если соответствующие им молекулярные полиэдры имеют хотя бы одну общую грань. Так как граф связности G периодический, ему будет соответствовать многогранник послойного роста Pol_G .

Если рассматривать послойный рост как модель кристаллообразования, то можно отметить два очевидных факта. Во-первых, присоединение очередной молекулы к затравке может происходить только при условии того, что соответствующая этой молекуле вершина графа G имеет ребро хотя бы с одной вершиной молекул затравки. Во-вторых, указанное условие является необходимым, но недостаточным. Молекула, соответствующая вершина графа G которой имеет ребро с вершинами затравки, может и не присоединиться к затравке на очередном шаге. Поэтому имеет смысл рассмотреть возможные подграфы графа связности G и соответствующие этим подграфам многогранники роста.

Например, можно построить подграфы графа G , вводя ограничение на ребра графа по величине энергии взаимодействия соответствующих молекул, или, учитывая, что энергия связи пары соседних молекул, как правило, пропорциональна суммарной площади соприкосновения полиэдров Вороного-Дирихле этих молекул, по величине площади соприкосновения. То есть вершины графа при таком подходе соединены ребром, только если суммарная площадь соприкосновения соответствующих молекулярных полиэдров (площадь граничной поверхности) больше некоторого критического значения. Варьируя величину этого критического значения, получаем семейство $G_S \subset G$ подграфов графа связности G , а, значит, и семейство соответствующих многогранников роста Pol_{G_S} . Это семейство получило название спектра многогранников послойного роста кристаллической структуры.

Спектр многогранников послойного роста можно рассматривать как некоторую интегральную характеристику молекулярной упаковки кристаллической структуры. С другой стороны, сравнение спектра многогранников послойного роста с реальной формой кристаллов может быть использовано для выявления структурообразующих молекулярных контактов.

В качестве примера рассмотрим спектры многогранников послойного роста двух полиморфных модификаций кристаллической серы S_8 .

Из Кембриджской Базы Структурных Данных [87] моноклинная кристаллическая модификация молекулярной серы S_8 (рефкод FURHUV01) [88] описывается структурным классом $P2/c, Z=4(2,2)$, т.е. имеются две кристаллографически независимые молекулы (назовем их условно A и B). Молекулы A занимают частные позиции на осях второго порядка, для которых $x=0$. Молекулы B также занимают частные позиции, но на других осях второго порядка, для которых $x=0.5$ (см. рис. 4.1).

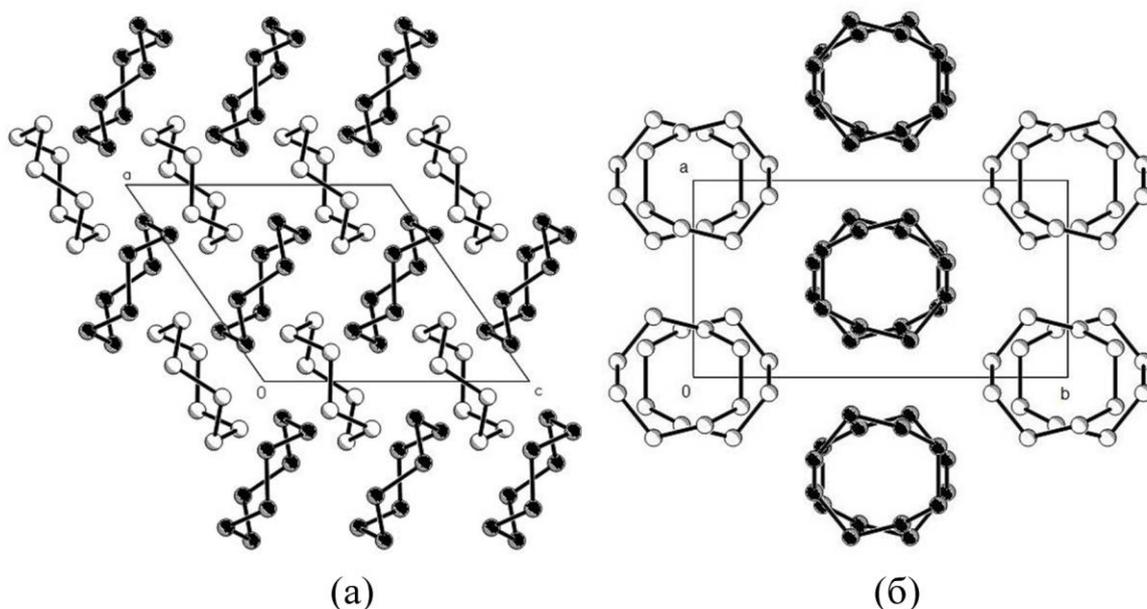


Рис. 4.1. Проекция кристаллической структуры моноклинной серы S_8 вдоль оси b (а), вдоль оси c (б)

Ромбическая модификация (рефкод FURHUV) реализована в структурном классе $Fddd, Z=16(2)$ [89]. В отличие от моноклинной модификации, где имеется две системы кристаллографически независимых молекул, в ромбической модификации все молекулы кристаллографически эквивалентны. Все они располагаются на поворотных осях второго порядка, ориентированных вдоль оси Z . Проекция кристаллической структуры вдоль оси c и вдоль кристаллографического направления (110) представлены на рис 4.2.

В кристаллической структуре моноклинной серы имеются геометрические слои, состоящие либо только из молекул A , либо только из молекул B . Слои ориентированы параллельно координатной плоскости xOy и состоят из молекулярных столбов, ориентированных вдоль оси c (рис. 4.2(а)). Так же как и в моноклинной модификации, все молекулы S_8 ромбической модификации объединяются в столбы за счёт межмолекулярного взаимодействия. Но если, в моноклинной модификации все столбы (и A и B типов) ориентированы параллельно друг другу, то в ромбической модификации столбы параллельны друг другу только в пределах четных или нечетных молекулярных слоев (рис. 4.2(б)).

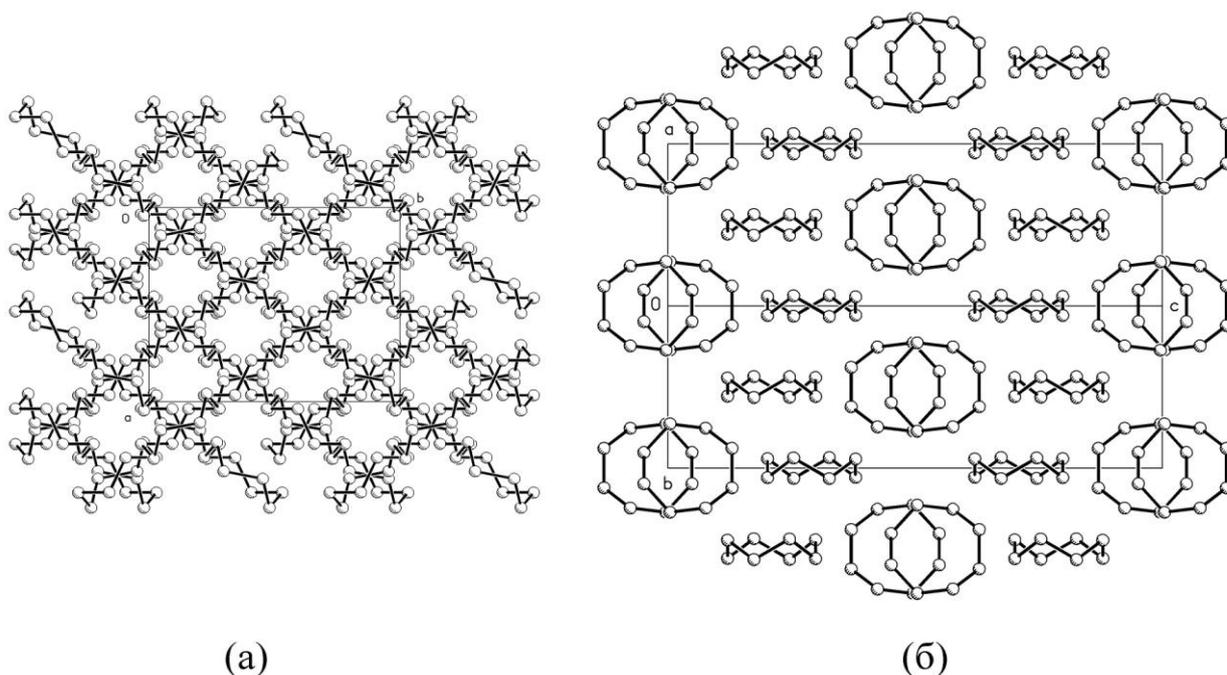


Рис. 4.2. Проекция кристаллической структуры ромбической серы S_8 вдоль оси c (а) и вдоль кристаллографического направления (110) (б)

Молекулярные полиэдры Дирихле для молекул обеих модификаций, рассчитанные по алгоритму [83], представлены на рис. 4.3. Основные характеристики этих полиэдров, включающие преобразования симметрии, которыми связаны молекулы, имеющие с исходной молекулой контакт, а также суммарную площадь соприкосновения соответствующих соседних молекулярных полиэдров, представлены в таблице 4.1 и 4.2. Спектры многогранников роста и их топологические характеристики показаны в таблице 4.3.

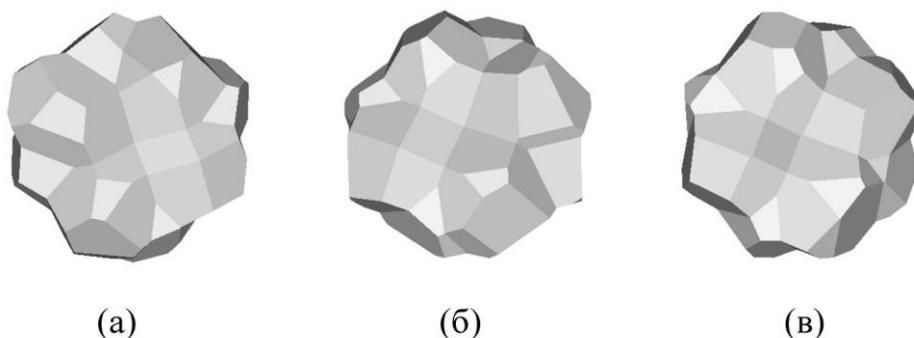


Рис. 4.3. Полиэдры Дирихле молекул А-типа (а) и В-типа (б) моноклинной модификации, а также молекулы ромбической модификации (в) кристаллической серы S_8

Рассмотренные кристаллохимические особенности показывают, что молекулярные упаковки двух модификаций кристаллической серы не только отличаются симметрией (моноклинная и ромбическая), но и имеют принципиальные отличия во взаимном расположении молекул S_8 . К такому же выводу приводит и анализ спектров многогранников роста, так как спектры моноклинной и

ромбической модификаций практически не имеют ничего общего (см. табл. 4.2).

Таблица 4. 1. Характеристики граничных поверхностей упаковочных полиэдров молекул* моноклинной серы S₈

Базисная молекула	Соседняя молекула	Преобразование симметрии соседней молекулы	Площадь ГП (Å ²)	Площадь ГП (%)
A	A	$-x, -y, -z$ $-x, -y, -z + 1$	37.8	17.8
	A	$-x - 1, -y, -z$ $-x + 1, -y, -z + 1$	17.1	8.0
	B	x, y, z $x - 1, y, z$	14.2	6.7
	B	$-x, -y - 1, -z$ $-x + 1, -y - 1, -z + 1$	13.4	6.3
	B	$-x, -y, -z$ $-x + 1, -y, -z + 1$	8.9	4.2
	B	$x, y + 1, z$ $x - 1, y + 1, z$	7.5	3.5
	A	$x - 1, y, z$ $x + 1, y, z$	7.5	3.5
B	B	$-x + 1, -y - 1, -z$ $-x + 1, -y - 1, -z + 1$	36.7	17.3
	B	$-x, -y - 1, -z$ $-x + 2, -y - 1, -z + 1$	16.1	7.6
	A	x, y, z $x + 1, y, z$	14.2	6.7
	A	$-x, -y - 1, -z$ $-x + 1, -y - 1, -z + 1$	13.4	6.3
	B	$x - 1, y, z - 1$ $x + 1, y, z + 1$	9.4	4.4
	A	$-x, -y, -z$ $-x + 1, -y, -z + 1$	8.9	4.2
	A	$x, y - 1, z$ $x + 1, y - 1, z$	7.5	3.5

* - координаты атомов изменены на вектор (0,-1,0) по сравнению с координатами структуры FURHUV01 из банка структурных данных.

4.2. Оценка устойчивости молекулярных агломератов в молекулярных кристаллах

Интерес к изучению молекулярных агломератов - конечных или бесконечных совокупностей наиболее прочно связанных молекул - объясняется тем, что они или их части могут сохраняться в растворах или расплавах, а также при фазовых переходах или твердофазных реакциях [90]. Традиционно исследование молекулярных агломератов начинается с моделирования различных вариантов взаимного расположения ансамблей молекул,

например, с использованием молекулярной динамики, метода Монте-Карло или генетического алгоритма [91, 92, 93, 94]. С помощью этих методов удается рассчитать возможные варианты агломераций небольших по объему жестких молекул, как правило, с целью исследования на этой основе особенностей строения и свойств жидкостей.

Таблица 4. 2. Характеристики граничных поверхностей упаковочных полиэдров молекул * ромбической серы S₈

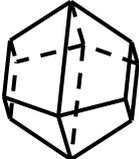
Преобразование симметрии соседней молекулы	Площадь ГП (Å ²)	Площадь ГП (%)
-x, -y, -z -x-0.5, -y-0.5, -z	37.9	17,8
x-0.5, -y-0.25, -z+0.25 x+0.5, -y-0.25, -z+0.25	15.8	7,5
-x, y-0.75, z-0.75 -x, y+0.25, z-0.75 -x, y-0.75, z+0.25 -x, y+0.25, z+0.25	12.4	5.9
x, -y-0.25, -z-0.25	10.4	4.8
x, -y+0.25, -z+0.25 x, -y-0.75, -z+0.25	9.8	4.6
x-0.5, y+0.5, z x+0.5, y-0.5, z	9.1	4.3
-x-1, -y, -z -x+0.5, -y-0.5, -z	3.3	1.6

* - координаты атомов изменены на вектор (-1,0,0) по сравнению с координатами структуры FURHUV из банка структурных данных.

Для больших и конформационно подвижных молекул моделирование агломератов в рамках этих традиционных подходов сталкивается с рядом принципиальных трудностей. Так, например, возможность конформационных подвижек требует учета не только межмолекулярного, но и внутримолекулярного взаимодействия, что предъявляет высокие требования к точности используемо-

го силового поля и корректности в учете взаимодействий. Это приводит к существенному увеличению трудоемкости процесса моделирования с точки зрения компьютерного времени.

Таблица 4.3. Спектры многогранников роста моноклинной и ромбической модификаций кристаллической серы S_8

Моноклинная модификация					
$S_{\min} (\text{Å}^2)$	7.5	8.9	9.4	13.4	14.3
Спектр					
Число граней	10	14	20	20	9
Число вершин	20	30	40	44	18
Число ребер	12	18	22	26	12
Ромбическая модификация					
$S_{\min} (\text{Å}^2)$	3.3	9.1	9.8	10.4	12.4
Спектр					
Число граней	16	18	22	28	14
Число вершин	33	28	48	48	30
Число ребер	19	12	28	22	18

С другой стороны, при исследовании процессов растворения, плавления или кристаллизации нет необходимости исследования устойчивости всех возможных для заданных молекул агломератов. Интересным представляется рассмотрение молекулярных агломератов (конечных или бесконечных), которые реализуются в кристаллической структуре, и могут, при определенных условиях, сохраняться в растворах или расплавах. Кроме того, моделирование агломератов, обладающих определенной симметрией, может быть использовано как один из этапов генерации кристаллических структур, например, в рамках метода дискретного моделирования молекулярных упаковок [⁸⁴]. В связи с этим, интерес представляет исследование распространенности и устойчивости тех или иных типов агломератов в различных структурных классах, начатое в работах

П.М.Зоркого с соавторами (см. например [95, 96, 97]).

Существование в кристалле молекулярного агломерата предполагает наличие в нем сильного взаимодействия соседствующих молекул, которое вносит значительный вклад в общую энергию кристаллической структуры, называемое эффективным контактом молекула-молекула (М-М) [98]. Однако сильное межмолекулярное взаимодействие в агломерате не всегда свидетельствует о его устойчивости вне кристаллической структуры. В большей степени эту устойчивость характеризует жесткость контакта [96], определяемая не столько величиной энергии взаимодействия М-М, сколько наличием достаточно высоких потенциальных барьеров, препятствующих существенному изменению взаимного расположения и ориентации молекул, образующих контакт, в отсутствие взаимодействия молекул этой пары с другими молекулами кристаллической структуры. Очевидное существование глобального или локального минимума энергии межмолекулярного взаимодействия кристаллической структуры в целом не всегда свидетельствует о существовании аналогичных минимумов энергии парного взаимодействия М-М даже для эффективных контактов.

Для оценки жесткости контактов М-М в уже исследованных кристаллических структурах в работе [99] предлагается алгоритм, основанный на оценке степени геометрических изменений взаимного расположения контактирующих молекул, возникающих при минимизации энергии их взаимодействия. Существование в кристаллической структуре жесткого контакта или системы жестких контактов означает существование соответствующего устойчивого агломерата.

Взаимное расположение контактирующих молекул в кристалле определяется зачастую не столько взаимодействием этих молекул, сколько их общим окружением другими молекулами. В изолированном состоянии, без учета влияния кристаллического поля, при минимизации энергии такая пара молекул может претерпевать значительные изменения взаимного расположения по сравнению с кристаллом. Будем считать контакт М-М в кристалле жестким, если минимизация энергии взаимодействия этих молекул путем изменения положения и ориентации одной из молекул не приводит к существенному изменению взаимного расположения этих молекул.

Набор межмолекулярных контактов исходной молекулы, которые целесообразно проверять на жесткость, очевидно, ограничен первой координационной сферой этой молекулы. Координационное окружение молекулы можно определить либо анализируя кратчайшие межмолекулярные расстояния всех атомов этой молекулы, либо построением молекулярного полиэдра Вороного-Дирихле этой молекулы [83]. Однако если учесть, что жесткий контакт должен быть достаточно сильным, можно ограничиться расчетом и сравнительным анализом энергий парного взаимодействия исходной молекулы со всеми молекулами в кристалле, попадающими в некоторую окрестность исходной молекулы. Например, можно рассчитать энергию взаимодействия со всеми молекулами, геометрические центры которых находятся в той же элементарной ячейке, что и исходная молекула, а так же во всех ячейках, имеющих с этой ячейкой хотя бы одну общую точку. Если абсолютная величина энергии межмолекулярного взаимодействия меньше некоторого заданного значения, то контакт не

исследуется на жесткость.

Для вычисления энергии взаимодействия М-М в рассматриваемом алгоритме используется атом-атомное приближение, согласно которому $U_{M-M} = \sum_{i,j} \varphi_{ij}$, где атом-атомный потенциал $\varphi_{ij} = -A_{ij}r_{ij}^{-6} + B_{ij} \exp(-C_{ij}r_{ij})$, A_{ij} , B_{ij} , C_{ij} – параметры взаимодействия i -го атома первой молекулы с j -ым атомом второй молекулы, определяемые типами этих атомов. Следует отметить, что приведенный потенциал не учитывает специфические взаимодействия (водородные связи, галоген-галоген взаимодействия и т.п.), однако при необходимости он может быть дополнен другими потенциалами, например, потенциалом, отвечающим за электростатическое взаимодействие остаточных зарядов на атомах.

При минимизации энергии взаимодействия молекул считаем, что исходная молекула остается неподвижной, а вторая имеет шесть степеней свободы, то есть взаимное расположение молекул описывается шестью параметрами: x_c, y_c, z_c – координаты вектора, соединяющего геометрические центры молекул, и θ, φ, ψ – эйлеровы углы, определяющие ориентацию второй молекулы. Таким образом, энергия взаимодействия для двух молекул является функцией шести переменных $U = U(x_c, y_c, z_c, \theta, \varphi, \psi)$. Минимизация энергии межмолекулярного взаимодействия производится методом наискорейшего спуска.

Количественное сравнение геометрии уточненной и исходной пар молекул фактически является количественной оценкой жесткости контакта. В качестве такой количественной оценки выступает критерий Зоркого [100]. Он представляет собой, в нашем случае, минимизированное среднеквадратичное отклонение соответствующих атомов уточненной и исходной пар молекул

$$\sigma = ((1/N) \sum_{i=1}^N (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}'_i)^2)^{1/2}, \text{ где } N - \text{общее число атомов в паре молекул, } \mathbf{r}_i \text{ и } \mathbf{r}'_i -$$

радиус-векторы i -ых атомов. Минимизация σ проводится методом наискорейшего спуска, при этом геометрические центры исходной и уточненной моделей совмещаются.

4.3. Примеры молекулярных агломератов, определяемых жесткими молекулярными контактами

На основе рассмотренного алгоритма разработан комплекс компьютерных программ для ПЭВМ типа *IBM PC*. Апробация программы проведена на кристаллических структурах, исследованных ранее методом рентгенструктурного анализа. Кристаллографические данные о структурах взяты в Кембриджской базе структурных данных (КБСД) [87].

Анализ жесткости всех эффективных контактов исходной молекулы в кристалле позволяет выявить возможные устойчивые агломераты. Рассмотрим примеры таких молекулярных агломератов, выявленных с использованием рассмотренного алгоритма. В таблице 4.4 приводятся результаты исследования жесткости межмолекулярных контактов трех кристаллических структур. Пер-

вый столбец таблицы содержит краткие сведения о кристаллических структурах: рефкод структуры в КБСД, структурный класс и ссылка на рентгеноструктурное исследование. Далее указаны преобразования симметрии, связывающие исходную молекулу со вторыми молекулами в контактах. Для каждого исследованного контакта М-М начальная E_0 и минимизированная E энергии межмолекулярного взаимодействия приведены в 4-ом и 5-ом столбцах. Далее приведен критерий различия σ исходной и уточненной пар молекул. Заметно меньше этот критерий для тех контактов, которые участвуют в агломерации молекул (в табл. 4.4 такие значения критериев выделены жирно). В последнем столбце таблицы указаны выявленные в данных кристаллических структурах молекулярные агломераты, номенклатура которых дается по [95].

Таблица 4.4. Результаты исследования жесткости молекулярных контактов трех кристаллических структур

Рефкод, структурный класс, ссылка	Операция симметрии	E_0 , ккал/моль	E , ккал/моль	Критерий* σ , Å	Агломерат
CMDCN, $P\bar{1}, Z = 2(1)$, [101]	1+x, y, z	-4.38	-4.82	0.50	Димер $\bar{1}, z = 2(1)$
	x-1, y, z	-4.38	-4.82	0.50	
	1-x,1-y,1-z	-9.66	-10.68	0.13	
	1-x,2-y,-z	-3.22	-5.98	1.65	
	1-x,2-y,1-z	-8.43	-10.52	0.67	
	2-x,1-y,1-z	-3.18	-10.64	2.45	
	2-x,2-y,-z	-3.24	-5.98	1.71	
BERLIT, $P2_1/c, Z = 4(1)$, [102]	-1+x, y, z	-3.95	-5.53	1.37	Цепь $P_{c(Y)}2_1, Z = 2(1)$
	1+x, y, z	-3.95	-6.81	2.16	
	1-x,-0.5+y,0.5-z	-8.43	-8.64	0.08	
	1-x,0.5+y,0.5-z	-8.43	-8.64	0.08	
	1-x,-y,1-z	-8.61	-9.09	0.41	
BUHDUD, $P2_12_12_1, Z = 4(1)$, [103]	x, y, -1+z	-5.05	-12.81	2.21	Слой $P_{l(XZ)}2_1, Z = 2(1)$
	X, y, 1+z	-5.05	-13.03	2.17	
	-0.5+x,0.5-y,-z	-5.28	-14.12	2.10	
	0.5+x,0.5-y,-z	-5.28	-14.08	1.89	
	0.5-x,1-y,-0.5+z	-8.17	-8.30	0.14	
	0.5-x,1-y,0.5+z	-8.17	-8.30	0.14	
	1.5-x,1-y,-0.5+z	-12.45	-13.39	0.22	
	1.5-x,-y,1.5+z	-12.45	-13.39	0.22	

* - критерий несовпадения рассчитан только по неводородным атомам.

Жесткость контакта двух молекул, связанных центром инверсии, равносильна наличию устойчивого димера $\bar{1}, Z = 2$. Так в кристаллической структуре CMDCN малое значение $\sigma=0,13$ Å для контакта двух молекул, связанных

центром инверсии с координатами $(1/2, 1/2, 1/2)$ указывает на жесткость этого контакта. На рис. 4.4 представлен перспективный вид устойчивого димера, определяемого этим контактом.

В кристаллах, обладающих винтовой осью симметрии 2-го порядка, довольно частым явлением можно считать наличие цепей $P_c 2_1, Z = 2$. Так, напри-

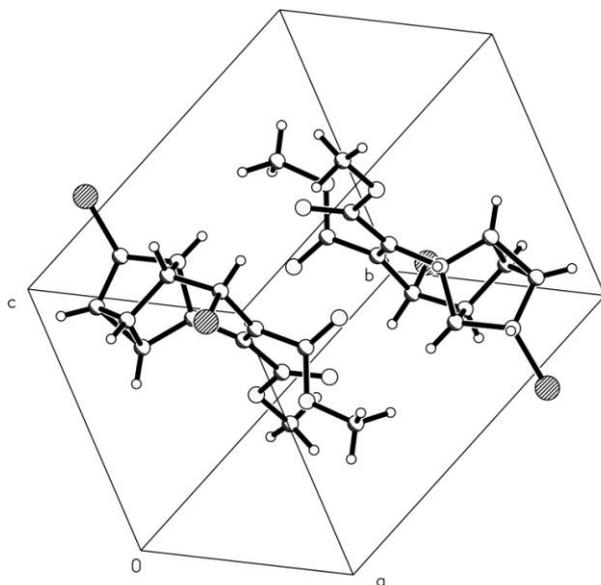


Рис. 4.4. Перспективный вид устойчивого димера $\bar{1}, Z = 2$, выявленного в кристаллической структуре CMDCN

мер, в структуре BERLIT два симметрически эквивалентных контакта молекул, связанных осью 2_1 , характеризуются значением $\sigma = 0,08 \text{ \AA}$. Определяемый этой парой контактов агломерат представляет собой бесконечную цепь $P_{c(Y)} 2_1, Z = 2$. На рис. 4.5 представлена проекция этой цепи вдоль кристаллографической оси c , изображены только неводородные атомы.

В кристаллической структуре BUHDUD удастся выделить две пары жестких контактов молекул, связанных соответственно двумя осями 2_1 , параллельными оси c кристалла ($\sigma = 0,14 \text{ \AA}$ и $\sigma = 0,22 \text{ \AA}$ соответственно). Каждая из этих пар контактов определяет цепь $P_{c(Z)} 2_1, Z = 2$, аналогичную цепи, рассмотренной выше. Так как оси 2_1 , соответствующие этим цепям, отстоят друг от друга на половину трансляции вдоль a , возникает устойчивый слой $P_{l(XZ)} 2_1, Z = 2$. Перспективный вид этого слоя представлен на рис. 4.6, в молекулах, образующих слой, изображены только неводородные атомы. Сплошной и штриховой замкнутыми линиями выделены две устойчивые цепи $P_{c(X)} 2_1, Z = 2$, образующие указанный молекулярный слой. Антипараллельное наложение слоев $P_{l(XZ)} 2_1, Z = 2$ дает кристаллическую структуру BUHDUD в целом, реализованную в структурном классе $P 2_1 2_1 2_1, Z = 4(1)$.

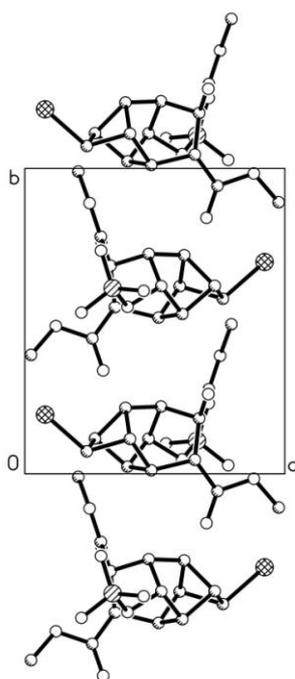


Рис. 4. 5. Проекция цепи $P_{c(Y)}2_1, Z = 2$ вдоль оси c в кристаллической структуре BERLIT; изображены только неводородные атомы

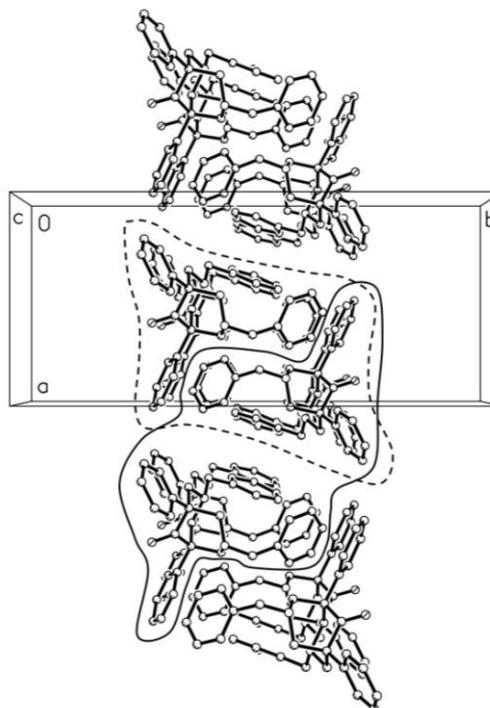


Рис. 4. 6. Кристаллическая структура BUHDUD. Перспективный вид слоя $P_{l(XZ)}2_1, Z = 2$ вдоль оси c ; изображены только неводородные атомы

4.4. Многогранники послойного роста, полученные кластеризацией

Как отмечено выше, зачастую раствор, расплав или газообразная фаза, из которых формируется кристалл, могут содержать достаточно жестко связанные молекулярные агломераты. Будем называть эти агломераты кластерами, если они могут участвовать в процессе кристаллообразования как единые образования. Объединение в кристаллической структуре отдельных молекул в кластеры, очевидно, приводит к необходимости перезадаания графа связности и, как следствие, пересчета соответствующего многогранника роста.

Рассмотрим предложенный подход (назовем его кластеризацией) на примере моноклинной и ромбической модификаций кристаллической серы, рассмотренных выше.

Анализируя площади граничных поверхностей полиэдров Дирихле моноклинной модификации (табл. 4.1), можно предположить, что кластер могут образовывать две молекулы типа A , имеющие один из двух эквивалентных контактов с площадью граничной поверхности 37.8 \AA^2 (например, исходная молекула A с молекулой, полученной из нее преобразованием $-x, -y, -z$). Второй кластер образуется аналогично из молекул типа B , имеющих контакт, соответствующий площади граничной поверхности 36.7 \AA^2 (например, исходная молекула B с молекулой, полученной из нее преобразованием $-x+1, -y-1, -z$). Многогранник роста упаковки таких кластеров представлен на рис. 4.7 (а).

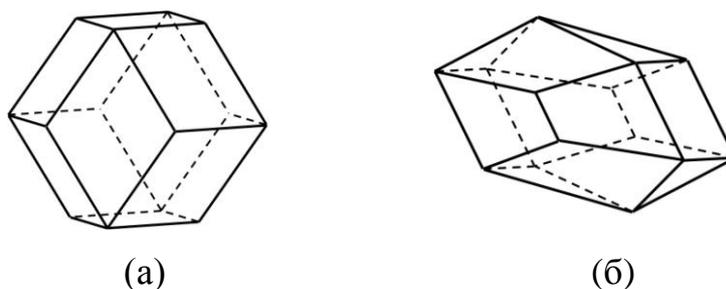


Рис. 4. 7. Многогранники послойного роста упаковки кластеров, состоящих из centrosymmetric димеров, для моноклинной (а) и ромбической (б) модификаций кристаллической серы S_8

В ромбической модификации можно построить аналогичный кластер из молекул, имеющих контакт с площадью граничной поверхности 37.8 \AA^2 (например, исходная молекула с молекулой, полученной из нее преобразованием $-x, -y, -z$). Соответствующий многогранник послойного роста, представлен на рис. 4.7 (б).

В качестве другого примера применения кластеризации рассмотрим ионный кристалл поваренной соли $[\text{NaCl}]_m$ [104].

Исследования геометрии свободных кластеров, проведенные группой авторов [105], показывают, что в свободном состоянии может существовать относительно малый незаряженный кластер $(\text{NaCl})_4$ с формой, близкой к кубической, устойчивость которого подтверждена на основе теоретических расчетов, проведенных методом молекулярной динамики. Методы газовой электронографии, примененные к простейшим соединениям галогенидов щелочных металлов, показали (см., например, [106]), что в их парах содержатся как двухатомные $(\text{NaCl} - \text{мономерные диполи})$, так и димерные элементарные кластеры $(\text{NaCl})_2$, представляющие собой искаженный квадрат. Авторами работ [105, 106] также указывается, что в случае высокосимметричной фазы, кристаллическое поле, действуя на искаженные кластеры, может «исправить» их форму до образования элементарной кубической ячейки.

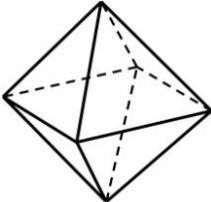
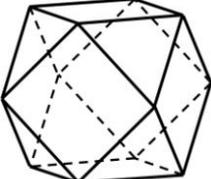
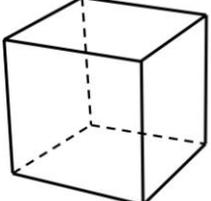
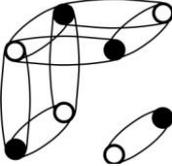
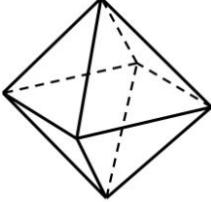
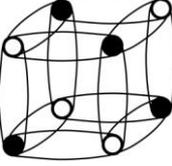
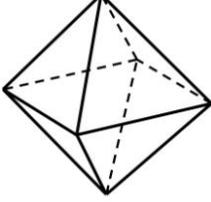
В работе [105] также приводятся экспериментальные рентгеновские спектры поглощения хлора для свободных кластеров разного размера $\{\text{NaCl}, (\text{NaCl})_2, (\text{NaCl})_3, (\text{NaCl})_4\}$, которые неявно указывают на то, что до разделения в пучке газовой фазы вещества поваренной соли присутствуют все обсуждаемые выше кластерные формы.

В работе [104] проведен анализ послойного роста для нейтральных кластеров $(\text{NaCl})_m$ ($m=1,2,3,4$), а также для отдельных ионов Na^+ и Cl^- . В случае $m=1$ в качестве кластеров выступают диполи NaCl . При $m=2$ кластером является димер $(\text{NaCl})_2$, составленный из двух диполей, ионы которых образуют квадрат. Дипольный тример с формулой $(\text{NaCl})_3$ образует плотную упаковку, соответствующую структуре поваренной соли только, если в качестве второго независимого кластера добавить диполь NaCl . И наконец, кластер $(\text{NaCl})_4$

представляет собой куб, сторона которого вдвое меньше параметра кристаллической решетки поваренной соли. Для каждого случая был рассчитан граф связности, а по нему - многогранник роста. В таблице 4.5 представлены все эти многогранники.

Учитывая, что реальная форма кристаллов поваренной соли представляет собой куб, с точки зрения рассмотренного подхода, наиболее вероятной кластерной формой, приводящей к реальному полиэдру в виде куба, является плоский димер $(\text{NaCl})_2$.

Таблица 4. 5. Многогранники послойного роста кристаллической структуры поваренной соли, полученные методом кластеризации

m	Формула кластера	Геометрия кластера	Многогранник роста
0	Отдельные ионы Na^+ и Cl^-		
1	NaCl		
2	$(\text{NaCl})_2$		
3	$(\text{NaCl})_3 + \text{NaCl}$		
4	$(\text{NaCl})_4$		

ГЛАВА 5. Рост случайных графов

5.1. Общие сведения о росте случайных графов.

Если рассматривать послойный рост в качестве простейшей, чисто геометрической модели кристаллообразования, естественным расширением этого подхода является включение в процесс формообразования элементов случайности. Фактор случайности, очевидно, присутствует в любом реальном процессе роста кристаллов. Например, габитус кристалла зависит от концентрации и характера примесей в среде (в паре, растворе или расплаве) в которой происходит кристаллизация. Оказывает влияние на скорости роста граней, а значит и на форму роста, вероятности появления на гранях роста дефектов. Для того чтобы попытаться смоделировать формообразования в условиях наличия случайных факторов, мы исследовали процесс послойного роста в случайных графах связности. Рассмотрим сначала, как можно построить случайный граф.

Каждый периодический граф G_{per} порождает семейство случайных графов G_{irr} . Множество вершин любого графа $G \in G_{irr}$ совпадает с множеством вершин графа G_{per} , а каждое ребро l графа G_{per} может, как присутствовать, так и отсутствовать в графе G . Вероятность появления ребра l равна $p(l)$. Распределение вероятностей предполагается периодическим, то есть достаточно задать $p(l)$ на множестве ребер из фундаментальной области графа G_{per} .

Отметим, что при рассмотрении роста случайных графов мы фактически должны говорить не о росте конкретного графа, а о случайной величине, принимающей те или иные значения с той или иной вероятностью.

При исследовании случайных графов необходимо различать 2 случая:

1) Несвязный случай: граф $G \in G_{irr}$ может быть несвязным при ненулевых значениях вероятностей появления ребер.

2) Связный случай: при любых ненулевых значениях вероятностей появления ребер с вероятностью 1 граф $G \in G_{irr}$ является связным.

Начнем с рассмотрения несвязного случая. В этом случае граф распадается на бесконечное число компонент связности (кластеров). Из результатов теории просачивания [107, 108, 109] известно, что может существовать не более одного бесконечного кластера. Если все кластеры конечны, то все окружения $eq(a, n)$ пусты при достаточно больших n , то есть рост останавливается. Если существуют как конечные так и бесконечные кластеры, то рост может как останавливаться так и бесконечно продолжаться, в зависимости от выбора начальной вершины. Таким образом, форма роста зависит от начальной вершины. Тем не менее, остается вопрос имеет ли место быть самоподобный рост, или начальная вершина принадлежит бесконечному кластеру? Какая вероятность самоподобного роста? Проведенные компьютерные эксперименты показывают, что при вероятностях $p(l)$ достаточно близких к единице в бесконечном кластере может наблюдаться самоподобный рост. При этом экспериментальная форма роста содержит ряд отрезков (длины которых растут при приближении $p(l)$ к еди-

нице), а также ряд криволинейных участков. Однако строгий математический анализ данной задачи представляется крайне сложным.

Перейдем к рассмотрению связного случая. В этом случае методами, аналогичными методам FPP-модели роста (глава 1) удастся доказать что для любого распределения вероятностей $p(l)$ существует кривая γ (зависящая от исходного периодического графа и распределения вероятностей) с вероятностью 1 являющаяся формой роста всех соответствующих графов G_{irr} .

К сожалению, точное вычисление формы роста и в этом случае представляет собой крайне сложную задачу.

В оставшейся части главы будут подробно рассмотрены результаты компьютерного и математического изучения роста одного модельного случайного графа на плоскости (связный случай).

5.2. Построение модельного случайного графа.

В качестве простейшего модельного примера случайного графа G в двумерном случае возьмем семейство графов, вершины которого образуют обычную квадратную решетку \mathbb{Z}^2 , в которой любые две соседние по вертикали или горизонтали вершины соединены соответствующим ребром с вероятностью 1, а вершины соседние по диагоналям квадратных элементарных ячеек соединены ребром с вероятностью p . Вершины построенного таким образом графа могут иметь одно из $2^4 = 16$ возможных первых окружений с вероятностями $p^k(1-p)^{4-k}$, $0 \leq k \leq 4$. Такому графу G можно поставить в соответствие аperiodическую упаковку замкнутых фигур на плоскости. На рис. 5.1 представлен фрагмент упаковки, соответствующей случайному графу G с $p = 0.3$. Вершины графа – точки внутри фигур. Границы фигур изображены жирными линиями, ребра графа G – тонкими линиями. Была разработана программа послойного роста случайного графа G . Серия компьютерных экспериментов, проведенных с помощью этой программы для различных вероятностей p , позволила предположить [110], что для случайного графа G координационная окружность $eq(n)$ при $n \rightarrow \infty$ растет самоподобным образом: $eq(n) \rightarrow n\gamma_p$. В первой четверти граница роста γ_p состоит из двух прямолинейных отрезков γ_1 , γ_3 и дуги эллипса γ_2 (рис.5.2). Будем обозначать границу роста в первой четверти через γ_p^+ . На остальные четверти γ_p распространяется осью четвертого порядка, проходящей через начало координат.

Для надежной проверки полученных в компьютерных экспериментах результатов ниже проведем достаточно подробный математический анализ как постановки задачи исследования формы роста предложенных случайных графов, так и ее решения.

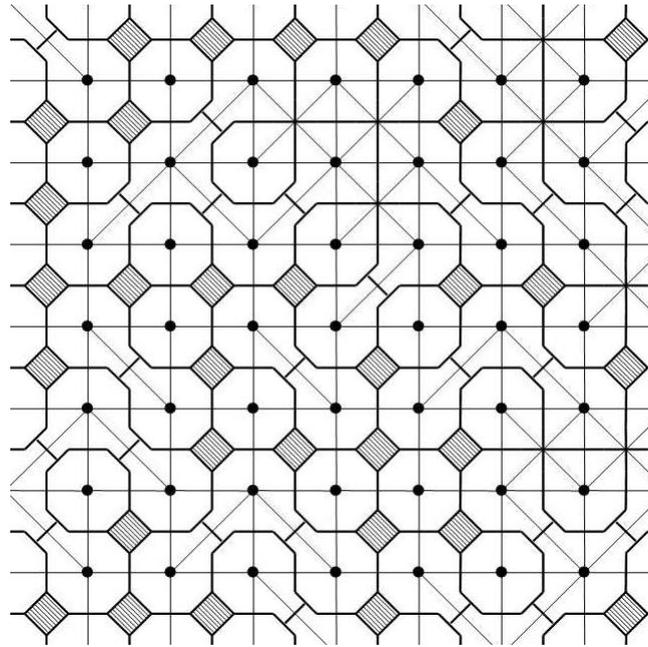


Рис. 5. 1. Фрагмент аperiodической упаковки замкнутых фигур в плоскости (границы фигур изображены жирными линиями; заштрихованные квадраты - пустоты) и соответствующий ей случайный граф с вероятностью $p = 0.3$ (вершины графа – точки внутри фигур; тонкие линии – ребра графа).

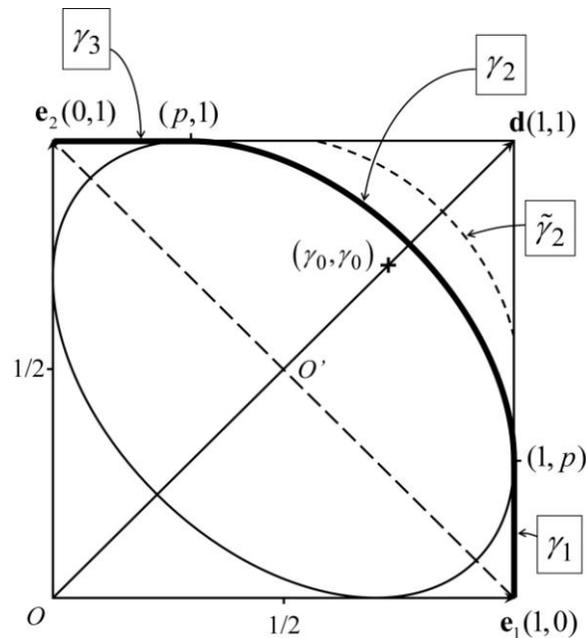


Рис. 5. 2. Структура границы роста γ_p^+ в первой четверти, состоящей из двух линейных отрезков γ_1, γ_3 и дуги эллипса γ_2

Чтобы исследовать границу роста γ_p , оказалось достаточно рассмотреть ее часть, попадающую в первую четверть, что объясняется симметрией γ_p . Кроме того, нетрудно убедиться, что форма роста в первой четверти зависит

только от наличия в графе G ребер между вершинами (i, j) , $(i+1, j+1)$ и не зависит от наличия ребер другого типа: между вершинами (i, j) , $(i-1, j+1)$. Поэтому все дальнейшие рассуждения будут проведены только для вершин графа G в первой четверти, причем учитываться будут только диагональные ребра первого типа.

5.3. Вероятностная мера случайных графов

Рассмотрим счетно-мерную случайную величину $\xi = (\xi_{ij})$. Ее компоненты ξ_{ij} нумеруются целыми точками положительного квадранта $\mathbb{Z}_+^2 = \{(i, j) : i, j = 0, 1, 2, \dots\}$ и являются независимыми одинаково распределенными бернуллевскими случайными величинами с распределением

$$P(\xi_{ij} = 1) = p, P(\xi_{ij} = 0) = q, p + q = 1. \quad (5.1)$$

По определению, случайная величина ξ принимает значения из пространства Ω всех числовых последовательностей $\omega = (\omega_{ij})$, состоящих из элементов $\omega_{ij} = 0$ или 1. Бернуллевскую меру, т.е. меру-произведение вероятностных мер (5.1) на пространстве Ω , также обозначим P [111]:

$$P(\xi : \xi_{i_1 j_1} = \omega_{i_1 j_1}, \dots, \xi_{i_n j_n} = \omega_{i_n j_n}) = p^{\Sigma} q^{n-\Sigma},$$

где $\Sigma = \omega_{i_1 j_1} + \dots + \omega_{i_n j_n}$.

Рассмотрим множество $Gr = Gr(\mathbb{Z}_+^2)$ графов G . Каждый граф G имеет множество вершин $V = \mathbb{Z}_+^2$, и любые две соседние по вертикали или горизонтали вершины соединены соответствующим ребром. Вершины (i, j) и $(i+1, j+1)$ могут быть соединены или не соединены ребром – это зависит от выбора графа G . Графы из Gr нумеруются точками $\omega = (\omega_{ij})$ пространства Ω с помощью отображения $\Omega \ni \omega \xrightarrow{G} G(\omega) \in Gr$. В графе $G = G(\omega)$ вершины (i, j) и $(i+1, j+1)$ соединены диагональю тогда и только тогда, когда $\omega_{ij} = 1$. Это отображение позволяет перенести меру P на множество Gr случайных графов $G = G(\xi)$ и, тем самым, задает изоморфизм вероятностных пространств $(Gr, P) \approx (\Omega, P)$.

5.4. Кривая роста

С помощью вероятностной меры P удастся распространить определенное в главе 2 понятие формы роста графа связности на случайные графы Gr . Формой роста γ_p^+ графов из Gr назовем кривую, к которой стремится

$$\frac{eq(n, G)}{n} \text{ при } n \rightarrow \infty \quad (5.2)$$

для почти всех графов $G \in Gr$, где $eq(n, G)$ - n -е координационное окружение, определенное в главе 2. Для простоты в качестве затравки роста будем брать вершину $(0, 0)$ графа G , расположенную в начале координат. Используя метрику

Хаусдорфа утверждение (5.2) можно сформулировать в виде $\lim_{n \rightarrow \infty} \rho\left(\frac{eq(n, G)}{n}, \gamma_p^+\right) = 0$.

Компьютерный эксперимент, проведенный многократно для различных значений вероятности p , показал, что граница $\gamma_p^+ = \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3$ (рис. 5.2) состоит из вертикального отрезка γ_1 с концами $(1, 0)$, $(1, p)$, горизонтального отрезка γ_3 с концами $(0, 1)$, $(p, 1)$ и дуги эллипса γ_2 , заключенной между точками $(1, p)$, $(p, 1)$. Уравнение эллипса имеет вид $\frac{\delta^2}{p} + \frac{d^2}{q} = 1$, где $\delta = x + y - 1$, $d = x - y$.

5.5. Оценки снизу и сверху формы роста γ_p^+

Рассмотрим теперь подходы к получению математически строгих оценок сверху и снизу для формы роста γ_p^+ [110, 112].

К каждой вершине графа G , принадлежащей координационному окружению $eq(n, G)$ идет, по крайней мере, одна геодезическая цепь длиной n . Если цепь, составленная из вершин графа G , не является геодезической, то ее конечная вершина лежит внутри области, ограниченной $eq(n, G)$. Поэтому для оценки снизу формы роста γ_p^+ можно использовать разработку алгоритмов построения цепей, для которых удастся определить координаты конечных вершин этих цепей. Сами такие алгоритмы будем называть стратегиями.

Например, стратегией S_1 назовем следующий алгоритм построения цепи. Начинаем цепь из точки $(0, 0)$ и будем двигаться по правилу: если из текущей вершины - выходит диагональ, то сдвигаемся на вектор $\mathbf{d} = (1, 1)$. В противном случае сдвигаемся на вектор $\mathbf{e}_1 = (1, 0)$. Число диагоналей, через которые пройдет цепь длины n с вероятностью 1, будет больше, чем $np - \sqrt{2pqn \ln \ln n}$ (это следует из известных в теории вероятностей законов больших чисел и повторного логарифма). Учитывая что $\lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2pqn \ln \ln n}{n}} = 0$, получаем, что точка $(1, p)$ либо лежит на кривой роста γ_p^+ , либо находится внутри области ограниченной γ_p^+ . С другой стороны, очевидной оценкой границы γ_p^+ сверху является единичный квадрат, натянутый на базисные векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 , который является кривой роста графа G в случае $p = 1$ (т.е. когда присутствуют все возможные диагонали). Поэтому делаем вывод, что $(1, p) \in \gamma_p^+$.

Для доказательства принадлежности кривой роста точки $(1, 0)$ используем более простую стратегию S_{01} : $(0, 0) \rightarrow (1, 0) \rightarrow \dots \rightarrow (n, 0)$. Если для всех $k < n$ на первых k шагах использовать стратегию S_{01} , а на оставшихся $n - k$ шагах страте-

гию S_1 получим стратегии, с помощью которых удастся доказать, что весь отрезок γ_1 принадлежит кривой роста γ_p^+ .

Аналогично доказывается, что $\gamma_3 \in \gamma_p^+$. Для этого используется стратегии S_2 и S_{02} . Согласно стратегии S_2 сдвиг осуществляется на вектор $\mathbf{d} = (1,1)$, если в текущей вершине есть диагональ, и на $\mathbf{e}_2 = (0,1)$, если диагонали нет. Стратегия $S_{02}: (0,0) \rightarrow (0,1) \rightarrow \dots \rightarrow (0,n)$.

В настоящее время не удается найти локальные стратегии, определяющие точки эллиптического сектора γ_2 , более того, весьма вероятна гипотеза о том, что таких стратегий не существует. Рассмотрим один из методов, дающих нижнюю границу на главной диагонали, то есть для точки $(\gamma_0, \gamma_0) = \gamma \cap (y = x)$.

Зададим на множестве \mathbb{Z}_2^+ вершин графа G в первой четверти координатной плоскости линейный порядок $(i, j) \triangleleft (i_1, j_1)$ двумя условиями:

- 1) $i + j < i_1 + j_1$; 2) если $i + j = i_1 + j_1$, то $j < j_1$.

Начальная \triangleleft -последовательность имеет вид:

$$(0,0) \triangleleft (1,0) \triangleleft (0,1) \triangleleft (2,0) \triangleleft (1,1) \triangleleft (0,2) \triangleleft \dots$$

Рассмотренный линейный порядок определяет \triangleleft -стратегию: находим в \triangleleft -последовательности первую вершину (i, j) , в которой есть диагональ, и строим цепь:

$$(0,0) \xrightarrow{\mathbf{e}_1} \dots \xrightarrow{\mathbf{e}_1} (i,0) \xrightarrow{\mathbf{e}_2} \dots \xrightarrow{\mathbf{e}_2} (i,j) \xrightarrow{\mathbf{d}} (i+1, j+1).$$

Далее этот шаг стратегии многократно повторяется для ближайшей в \triangleleft -последовательности вершины, в которой есть диагональ. Следует отметить, что \triangleleft -стратегия нелокальная, так как допускает цепи сколь угодно большой длины, однако с помощью нее удастся рассчитать координаты конечной вершины, что позволяет оценить значение γ_0 снизу:

$$\gamma_0 \geq \frac{1}{2} + \frac{1}{2} M(p)^{-1}, \text{ где } M(p) = \sum_{n=1}^{\infty} (1-p)^{n(n-1)/2}.$$

Перейдем к методу получения верхней границы. Выберем произвольную вершину $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{Z}_2^+$ и рассмотрим ведущие к ней цепи длиной n . В максимальном графе G_{\max} , отвечающем значению $p=1$, их число равно:

$$\frac{n!}{(n-x_1)!(n-x_2)!(x_1+x_2-n)!}.$$

При этом число диагоналей в цепи равно $x_1 + x_2 - n$. Поэтому для случайного графа математическое ожидание $\omega(x, n)$ числа путей равно:

$$\omega(x, n) = \frac{n!}{(n-x_1)!(n-x_2)!(x_1+x_2-n)!} p^{x_1+x_2-n}$$

В единичном квадрате, натянутом на векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 выделим верхний треугольник T , состоящий из точек $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ с координатами $0 \leq \alpha_1 < 1$; $0 \leq \alpha_2 < 1$; $\alpha_1 + \alpha_2 > 1$. Введем функцию энтропии:

$$H(\alpha, p) = -(1 - \alpha_1) \ln(1 - \alpha_1) - (1 - \alpha_2) \ln(1 - \alpha_2) - (\alpha_1 + \alpha_2 - 1) \ln \frac{\alpha_1 + \alpha_2 - 1}{p}.$$

Неравенства $H(\alpha, p) < 0$ и $H(\alpha, p) > 0$ задают в треугольнике T области $T^-(p)$ и $T^+(p)$, разделяемые кривой $\tilde{\gamma}_2(p)$ с уравнением $H(\alpha, p) = 0$. Если вершина $x = (x_1, x_2)$ имеет вид $([n\alpha_1], [n\alpha_2])$, то функция энтропии позволяет вычислить математическое ожидание числа путей в вершину x :

$$\omega(x, n) = \exp(nH(\alpha, p) + o(n)). \quad (5.3)$$

Для доказательства нужно вычислить предел $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln \omega(x, n)}{n}$, воспользовавшись равенствами $n - x_1 = (1 - \alpha_1)n + O(1)$, $n - x_2 = (1 - \alpha_2)n + O(1)$, $x_1 + x_2 - n = (\alpha_1 + \alpha_2 - 1)n + O(1)$ и укороченной формулой Стирлинга $\ln n! = n \ln n - n + O(\ln n)$.

Из доказанной формулы (5.3) следует, что если $x \in T^-(p)$, то существуют зависящие от α положительные постоянные N_α и C_α такие, что

$$\omega(x, n) \leq \exp(-C_\alpha n), \text{ для } n \geq N_\alpha.$$

Таким образом, кривая $\tilde{\gamma}_2(p)$ дает верхнюю границу в эллиптическом секторе (см. рис.5.2).

Следует заметить, что ни при $p \rightarrow 0$, ни при $p \rightarrow 1$ полученные нижняя и верхняя границы асимптотически не эквивалентны точному значению $\gamma_0 = \frac{1 + \sqrt{p}}{2}$. В настоящее время неизвестно как получить более точные границы для эллиптического сектора γ_2 .

Далее рассмотрим динамику формирования эллиптического сектора γ_2 . Для этого введем случайную величину:

$$S(n) = \max\{x : (x, x) \in eq(n, G)\}$$

Компьютерное моделирование приводит к гипотетической предельной теореме:

$$p \left\{ \frac{S(n) - MS(n)}{\sqrt{DS(n)}} \leq x \right\} \rightarrow \Phi_{quasi}(x),$$

где $\Phi_{quasi}(x)$ в первом приближении можно считать нормальным распределением $\Phi(x)$. Другим возможным кандидатом на функцию $\Phi_{quasi}(x)$ является так называемое распределение Трейси-Видома $[\overset{113}{,} \overset{114}{,} \overset{115}{,}]$. При этом $MS(n) = n\gamma_0 - \Delta(n)$, где $\Delta(n)$ - нелинейная функция сдерживания, $\frac{\Delta(n)}{n} \rightarrow 0$ и

$\Delta(n) = O(\sqrt{DS(n)})$. Гипотетическая формула для дисперсии $DS(n)$ имеет вид:

$$\sqrt{DS(n)} = \sigma(p)n^\alpha,$$

где $\alpha = \frac{1}{3}$, а $\sigma(p)$ – положительная постоянная, зависящая только от p . Наличие функции сдерживания $\Delta(n)$ и степени $\alpha = \frac{1}{3}$ указывает на неразложимость $S(n)$ в сумму независимых случайных величин и наличие связей дальнего порядка в процессе формирования $eq(n, G)$.

ГЛАВА 6. Рост 1-периодических графов

6.1. 1-периодические графы

Следующая по степени сложности задача возникает, когда размерность решётки периодичности разбиения (графа) на 1 меньше размерности объемлющего пространства. В плоском случае это приводит к 1-периодическим разбиениям и графам. Отказ от одного вектора периодичности привносит элемент случайности и требует введения вероятностной меры на множестве разбиений и графов. Для разбиения введение соответствующей меры представляет собой сложную задачу. Наоборот, для графов соответствующая мера легко получается «навешиванием» вероятностей на рёбра графа из фундаментальной области. Рассмотрим эту задачу для одного модельного класса графов, аналогичного случайным графам из предыдущей главы [116, 117].

Рассмотрим множество графов $G_{L,p}$, вершины которых совпадают с точками целочисленной решётки \mathbb{Z}^2 . Любые 2 вершины, соседние по вертикали или горизонтали – соединены рёбрами. Пусть $L = \{k\mathbf{l} : k \in \mathbb{Z}\}$ – 1-мерная решётка периодов, $F = \mathbb{R}^2 / L$ – ее фундаментальная область. Аналогично предыдущей главе, введём счётномерную случайную величину $\xi = (\xi_{ij})$, компоненты которой нумеруются целыми точками из F и являются независимыми бернуллевыми случайными величинами с распределением $P(\xi_{ij} = 1) = p$, $P(\xi_{ij} = 0) = q$, $p + q = 1$. Пусть Ω – множество событий для ξ . На Ω вводится вероятностная мера P , являющаяся произведением мер для ξ_{ij} . На цилиндрах она принимает значения

$$P(\xi : \xi_{i_1 j_1} = \omega_{i_1 j_1}, \dots, \xi_{i_n j_n} = \omega_{i_n j_n}) = p^{\omega_{i_1 j_1} + \dots + \omega_{i_n j_n}} q^{n - \omega_{i_1 j_1} - \dots - \omega_{i_n j_n}},$$

где все ω_{ij} равны 0 или 1. Графы из $G_{L,p}$ нумеруются точками из Ω с помощью отображения $\Omega \ni \omega \rightarrow G(\omega) \in G_{L,p}$. В графе $G(\omega)$ вершины (i, j) и $(i+1, j+1)$ из фундаментальной области F соединены ребром тогда и только тогда, когда $\omega_{ij} = 1$. Задание части графа, расположенной в F очевидным образом задаёт весь граф. Рассмотренное отображение переносит меру P на множество 1-периодических графов $G_{L,p}$ и задает изоморфизм вероятностных пространств $(G_{L,p}, P)$ и (Ω, P) . Кривая $\gamma_{L,p}$ называется формой роста для множества $G_{L,p}$, если она является формой роста для почти всех графов $G \in G_{L,p}$.

Графы $G \in G_{L,p}$ отличаются изолированностью роста по координатным четвертям. Во второй и четвёртой координатных четвертях ни одна геодезическая, выходящая из начала координат не проходит по диагонали. Отсюда следует, что в этих четвертях граф $G_{L,p}$ растёт периодически: соответствующие участки кривой $\gamma_{L,p}$ – отрезки $(-1, 0) - (0, 1)$ и $(0, -1) - (-1, 0)$. Если $G_{L,p}$ растёт самоподобным образом в первой четверти, то с вероятностью 1 он растёт самоподобным образом и в третьей четверти, причём соответствующие части кри-

вой $\gamma_{L,p}$ будут симметричными относительно начала координат. Поэтому можно рассматривать только часть γ , расположенную в первой четверти. Будем обозначать её $\gamma_{L,p}^+$.

Заметим, что при $p=0$ и $p=1$ множества $G_{L,p}$ – содержат по одному периодическому графу. При этом $\gamma_{L,0}^+$ – отрезок $(0,1) - (1,0)$, а $\gamma_{L,1}^+$ состоит из двух отрезков $(0,1) - (1,1)$ и $(1,1) - (1,0)$.

Компьютерное моделирование роста графов $G_{L,p}$ позволило установить следующие результаты:

1) С вероятностью 1 существует форма роста $\gamma_{L,p}$, зависящая только от вектора периодичности \mathbf{l} и вероятности p .

2) Форма роста $\gamma_{L,p}$ представляет собой выпуклый центрально симметричный многоугольник.

3) При $p \in (0;1]$ форма роста $\gamma_{L,p}$ непрерывно зависит от p . При $p=0$ возможен фазовый переход.

4) При $p \in (0;1)$ число сторон многоугольника роста $\gamma_{L,p}$ зависит только от вектора периодичности $\mathbf{l} = (l_1, l_2)$ и вычисляется по формуле

$$s = \begin{cases} 2|l_1 - l_2| + 6, & \text{если } l_1 l_2 > 0 \\ 2|l_1 - l_2| + 4, & \text{если } l_1 l_2 \leq 0 \end{cases}$$

5) При фиксированном $p \in [0;1]$ и $|l_1 - l_2| \rightarrow \infty$ справедливо равенство

$$\lim \gamma_{L,p}^+ = \gamma_p^+,$$

где γ_p^+ – форма роста случайного графа из предыдущей главы в первой четверти.

Перейдем далее к рассмотрению ситуаций, когда форму роста графа $G_{L,p}$ удастся точно вычислить и строго доказать. При этом мы ограничимся рассмотрением только первой координатной четверти.

6.2. Случай $|l_1 - l_2| = 0$

Введём обозначения $\mathbf{e}_1 = (1;0)$, $\mathbf{e}_2 = (0;1)$ и $\mathbf{d} = (1;1)$. Кроме того буди писать $a \leq \gamma_{L,p}^+$, если a находится внутри области, ограниченной $\gamma_{L,p}^+$ и осями координат. Ясно, что если $0 \leq p_1 < p_2 \leq 1$, то $\gamma_{L,p_1} \leq \gamma_{L,p_2}$ (если обе формы существуют).

Теорема 6.1. Пусть $\mathbf{l} = (k,k)$. Тогда при $p > 0$ с вероятностью 1 форма роста $\gamma_{L,p}^+$ существует и состоит из двух отрезков $\gamma_1^+ : (1;0) - (1;1)$ и $\gamma_2^+ : (1;1) - (0;1)$.

Поскольку $\gamma_{L,p}^+$ – многоугольник, для доказательства нижней границы достаточно построить аппроксимационные цепи, ведущие в его вершины. Начальную вершину можно выбирать произвольно. В качестве начальной выбо-

рем вершину (i, j) такую, что в вершинах $(i, j), (i+1, j+1), \dots, (i+k-1, j+k-1)$ есть диагонали. Так как $p > 0$, то с вероятностью 1 такая вершина существует. Из неё выходит цепь вида $k\mathbf{d}$. Так как $k\mathbf{d} = \mathbf{l}$ – вектор периодичности, то цепь из векторов \mathbf{d} можно продолжать неограниченно. Аппроксимационные цепи, ведущая в вершины $(n, 0), (n, n)$ и $(0, n)$ имеют вид $n\mathbf{e}_1, n\mathbf{d}$ и $n\mathbf{e}_2$ соответственно.

Доказательство верхней границы очевидным образом следует из того, что $\gamma_{L,p}^+ \leq \gamma_{L,1}^+$.

6.3. Случай $|l_1 - l_2| = 1$

Данный случай естественным образом разбивается на два подслучая: $\mathbf{l} = (k+1, k)$ и $\mathbf{l} = (k, k+1)$. Легко проверить, что эти подслучаи переводятся один в другой симметрией относительно прямой $y = x$. Более того, так как векторам \mathbf{l} и $-\mathbf{l}$ отвечает одна и та же одномерная решетка периодов, то без ограничения общности можно считать, что $k \geq 0$.

Вначале рассмотрим случай $k = 0$.

Теорема 6.2. Пусть $\mathbf{l} = (0, 1)$. Тогда при $p > 0$ с вероятностью 1 форма роста $\gamma_{L,p}^+$ существует и состоит из двух отрезков $\gamma_1^+ : (1; 0) - (1; p)$ и $\gamma_2^+ : (1; p) - (0; 1)$.

Аппроксимационные цепи, ведущие к вершинам $(n, 0)$ и $(0, n)$ очевидны. Для построения цепи в вершину (n, np) будем пользоваться следующей стратегией S_j :

Начинаем движение в точке $(0, 0)$ и двигаемся по правилу: если из текущей вершины выходит диагональ, то сдвигаемся на вектор \mathbf{d} , в противном случае сдвигаемся на вектор \mathbf{e}_1 . Число диагоналей, через которые пройдет цепь длины n с вероятностью 1, будет больше, чем $nmp - \sqrt{2pqn \ln \ln n}$ ($q = 1 - p$). Приведенная оценка легко следует из известных в теории вероятностей законов больших чисел и повторного логарифма. Из сказанного вытекает, что $(1, p) \leq \gamma_{L,p}^+$. Таким образом, нижняя граница доказана.

Для доказательства верхней границы заметим, что если $a_1 \xrightarrow{\Gamma} a_2 \xrightarrow{\mathbf{e}_2} a_3$ – участок геодезической (Γ – произвольная цепь), то его можно без потери геодезичности заменить на участок $a_1 \xrightarrow{\mathbf{e}_2} a'_2 \xrightarrow{\Gamma} a_3$. В таких случаях будем говорить, что диаграмма

$$\begin{array}{ccc} a_1 & \xrightarrow{\Gamma} & a_2 \\ \downarrow \mathbf{e}_2 & & \downarrow \mathbf{e}_2 \\ a'_1 & \xrightarrow{\Gamma} & a_3 \end{array}$$

коммутативна. Описанную замену будем называть перестройкой геодезической.

Пусть теперь Γ – геодезическая, ведущая в вершину $(n-dx, y)$. В результате конечного числа перестроек из нее можно получить новую геодезическую Γ' вида:

$$(0, 0) \xrightarrow{e_2} \dots \xrightarrow{e_2} (0, dx) \xrightarrow{\Gamma_1} \dots \rightarrow (n-dx, y),$$

где геодезическая Γ_1 не содержит векторов e_2 . Для того, чтобы оценить число векторов \mathbf{d} в Γ_1 , вводим оператор проектирования на фундаментальную область $\pi: (x, y) \rightarrow (x, 0)$.

Очевидно, что диагональ в вершине a есть тогда и только тогда, когда она есть в вершине $\pi(a)$. Поэтому число диагоналей в Γ_1 не превосходит числа вершин в $\pi(\Gamma_1)$, из которых выходят диагонали. Поэтому число диагоналей с вероятностью 1, число диагоналей в Γ_1 не превосходит величины $p|\pi(\Gamma_1)| + \sqrt{2pq|\pi(\Gamma_1)| \ln \ln |\pi(\Gamma_1)|}$. Ясно, что $|\pi(\Gamma_1)| = n-dx$. Отсюда выводим, что $y \leq dx + p(n-dx) + O(\sqrt{n \ln \ln n})$, что и доказывает верхнюю границу.

Пусть теперь $k > 0$.

Теорема 6.3. Пусть $\mathbf{l} = (k+1, k), k > 0$. Тогда при $p > 0$ с вероятностью 1 форма роста $\gamma_{L,p}^+$ существует и состоит из трех отрезков $\gamma_1^+ : (1; 0) - (1; \frac{k}{k+1})$,

$$\gamma_2^+ : (1; \frac{k}{k+1}) - (p; 1) \text{ и } \gamma_3^+ : (p; 1) - (0; 1).$$

Для доказательства выбираем в качестве начальной вершины $(i; j)$, такую, что в вершинах $(i; j), (i+1; j+1), \dots, (i+k-1; j+k-1)$ есть диагональ, а в вершине $(i+k, j+k)$ нет. Такая вершина существует с вероятностью 1. В этом случае из вершины $(i; j)$ выходит цепь вида $k\mathbf{d} \rightarrow \mathbf{e}_1$. Поскольку $k\mathbf{d} + \mathbf{e}_1 = \mathbf{l}$ – вектор периодичности, то данную цепь можно продолжать неограниченно, и она будет аппроксимационной цепью к вершине $(n; n\frac{k}{k+1})$. Цепи, ведущие в вершины $(0; n)$ и $(n; 0)$ – очевидны. Заметим, что построенная цепь в вершину $(n; n\frac{k}{k+1})$ совпадает с цепью, которая строится по описанной ранее стратегии S_1 . Для построения аппроксимационной цепи в вершину $(pn; n)$, воспользуемся стратегией S'_1 , которая получается из стратегии S_1 заменой вектора \mathbf{e}_1 на вектор \mathbf{e}_2 . Аналогично, доказательству предыдущей теоремы доказываем, что цепь, построенная по S'_1 , действительно является аппроксимационной. Цепи во внутренние точки $\gamma_{L,p}^+$ получаются как линейные комбинации рассмотренных цепей.

Прежде чем доказывать верхнюю границу, докажем лемму:

Лемма 6.4. Пусть a' – вершина, из которой выходит диагональ. Пусть Γ – геодезическая, ведущая из a' в a , содержащая диагонали. Тогда существует геодезическая, ведущая из a' в a , и начинающаяся с вектора \mathbf{d} .

Доказательство леммы немедленно вытекает из коммутативности диаграммы

$$\begin{array}{ccc} a' & \xrightarrow{m_1\mathbf{e}_1+m_2\mathbf{e}_2} & b_1 \\ \downarrow \mathbf{d} & & \downarrow \mathbf{d} \\ b_2 & \xrightarrow{m_1\mathbf{e}_1+m_2\mathbf{e}_2} & a'' \end{array}$$

Следствие 6.5. *Стратегия S_1 является оптимальной стратегией, среди всех стратегий, использующих только векторы \mathbf{d} и \mathbf{e}_1 . Стратегия S'_1 оптимальна среди стратегий, использующих только векторы \mathbf{d} и \mathbf{e}_2 .*

Следствие 6.6. *Пусть $\rho_n(S)$ – плотность диагоналей в цепи длины n , построенной по стратегии S . Пусть $\mathbf{l}=(k+1,k), k > 0, p > 0$. Тогда*

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(S_1) &= \frac{k}{k+1}, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \rho_n(S'_1) &= p. \end{aligned}$$

Вернемся к доказательству верхней границы.

Пусть Γ – геодезическая длины n в вершину a . По лемме можно считать, что Γ начинается с $k\mathbf{d}$. Более того, если Γ содержит k диагоналей и векторы \mathbf{e}_2 , то перед первым из векторов \mathbf{e}_2 стоит $k\mathbf{d}$. Докажем, что Γ можно представить в виде:

$$\Gamma : k\mathbf{d} \rightarrow \Gamma_1 \rightarrow \Gamma_2, \quad (6.1)$$

где Γ_1 не содержит \mathbf{e}_2 , а Γ_2 не содержит \mathbf{e}_1 . С учетом следствий 6.5 и 6.6 из такого разложения будет следовать требуемая верхняя граница.

Для доказательства будем применять к Γ перестройки, сохраняющие длину, начальную и конечную точки цепи.

Перестройка Π_1 : Замена цепи $\mathbf{e}_1 \rightarrow \mathbf{e}_2$ на цепь $\mathbf{e}_2 \rightarrow \mathbf{e}_1$ и обратно.

Пусть $\Gamma_m^i(\mathbf{e}_2, \mathbf{d})$ – цепь, состоящая из i векторов \mathbf{d} и $m-i$ векторов \mathbf{e}_2 , расположенных в произвольном порядке.

Перестройка Π_2 : Замена цепи $k\mathbf{d} \rightarrow \Gamma_m^i(\mathbf{e}_2, \mathbf{d}) \rightarrow \mathbf{d} \rightarrow \mathbf{e}_1$ на цепь $k\mathbf{d} \rightarrow \mathbf{e}_1 \rightarrow (i+1)\mathbf{d} \rightarrow (m-i)\mathbf{e}_2$, если $i < k+1$ и на цепь $k\mathbf{d} \rightarrow \mathbf{e}_1 \rightarrow k\mathbf{d} \rightarrow \tilde{\Gamma}_{m'}^{i-k+1}(\mathbf{e}_2, \mathbf{d}) \rightarrow m''\mathbf{e}_2$, если $i \geq k$.

Цепь $\tilde{\Gamma}_{m'}^{i-k+1}(\mathbf{e}_2, \mathbf{d})$ получается обрезанием цепи $\Gamma_m^i(\mathbf{e}_2, \mathbf{d})$ до длины m' такой, чтобы число диагоналей в $\tilde{\Gamma}_{m'}^{i-k+1}(\mathbf{e}_2, \mathbf{d})$ равнялось $i-k+1$. Число m'' выбирается так, чтобы суммарная длина цепи не изменилась.

Перестройка Π_1 выполнима для любых графов. Выполнимость перестройки Π_2 следует из того, что $\mathbf{l}=(k+1,k)$ – вектор периодичности.

Легко проверить, что используя конечное число перестроек вида Π_1 и Π_2 , а также лемму 6.4, любую геодезическую можно привести к виду (6.1).

6.4. Локальные стратегии

Доказательство нижних границ для векторов $\mathbf{l} = (k+1, k)$ существенно использует алгоритмы S_1 и S'_1 построения аппроксимационных цепей. При этом на каждом шаге алгоритма используется только локальная информация. В общем случае локальная стратегия S задается набором V из s векторов $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_s\}$ и набором St из 2^s участков аппроксимационной цепи $\{\Gamma_1, \dots, \Gamma_{2^s}\}$. Набор V – определяет локальное окружение, St – шаг алгоритма.

Пусть (i, j) – некоторая вершина графа. Пусть $t_i = 1$, если в вершине $(i, j) + \mathbf{v}_i$ есть диагональ и $t_i = 0$ в противном случае. Определим число $T = 1 + \sum_{r=0}^{s-1} t_{i+1} 2^r$. Тогда шаг стратегии состоит в присоединении к аппроксимационной цепи участка Γ_T (возможность этого присоединения должна следовать из локального окружения). После этого шаг стратегии повторяется для вершины $(i, j) + \Gamma_T$ и т. д. Будем считать, что набор V – минимальный, то есть нельзя построить локальную стратегию, с меньшим числом векторов в V , всегда дающую ту же аппроксимационную цепь.

Пусть S – локальная стратегия, $\Gamma_n(S)$ – построенная по ней цепь длины n . Пусть X_r – случайная величина, равная номеру участка цепи, выбранного на r -ом шаге стратегии. Возможно два случая:

1) Все X_r – независимые случайные величины. Тогда

$$p(X_r = i) = \text{const} = p_i(S).$$

2) Случайные величины X_r образуют цепь Маркова. Тогда во многих случаях можно доказать существование пределов

$$p_i(S) = \lim_{r \rightarrow \infty} p(X_r = i).$$

Пусть $|\Gamma|$, $x(\Gamma)$ и $y(\Gamma)$ – длина цепи Γ и ее проекций на координатные оси.

Теорема 6.7. Пусть $S = (V, St)$ – локальная стратегия, причем все вероятности $p_i(S)$, $1 \leq i \leq 2^s$ существуют. Тогда существует предел

$$\mathbf{v}(S) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\Gamma_n(S)}{n}.$$

Более того, справедливо равенство

$$\mathbf{v}(S) = \left(\frac{\sum_{i=1}^{2^s} p_i(S) x(\Gamma_i)}{\sum_{i=1}^{2^s} p_i(S) |\Gamma_i|}, \frac{\sum_{i=1}^{2^s} p_i(S) y(\Gamma_i)}{\sum_{i=1}^{2^s} p_i(S) |\Gamma_i|} \right) \quad (6.2).$$

Доказательство данной теоремы получается длинным, но достаточно простым вычислением. Детали можно найти в работе [117].

Локальные стратегии можно применять для получения нижних границ в задаче роста.

Теорема 6.8. Пусть Lst – конечное или бесконечное множество стратегий, для которых выполняется формула (6.2), Vst – множество векторов, соот-

ветствующих стратегиям из Lst . Тогда форма роста содержит выпуклую оболочку всех векторов из Vst .

Пусть S_1, S_2 – стратегии из Lst . Покажем, что существует аппроксимационная цепь в любую вершину $a \in Sec(\mathbf{v}(S_1), \mathbf{v}(S_2))$. Действительно, если a' проекция на a на $\mathbf{v}(S_2)$ вдоль $\mathbf{v}(S_1)$, то цепь $(0,0) \xrightarrow{S_1} a' \xrightarrow{S_2} a$ – искомая аппроксимационная цепь.

Замечание: Если Lst – конечное множество, то даваемая теоремой 6.8 нижняя граница – вычислима за конечное число операций и является многоугольником.

6.5. Случай $\mathbf{l} = (0, 2)$

Применим разработанную технику к случаю вектора периодичности $\mathbf{l} = (0, 2)$.

Теорема 6.9. Пусть $\mathbf{l} = (0, 2)$. Тогда при $p > 0$ с вероятностью 1 форма роста $\gamma_{L,p}^+$ существует и состоит из трех отрезков $\gamma_1^+ : (1; 0) - (1; p)$,

$$\gamma_2^+ : (1; p) - \left(\frac{1}{1+p-p^2}; \frac{3p-2p^2}{1+p-p^2} \right) \text{ и } \gamma_3^+ : \left(\frac{1}{1+p-p^2}; \frac{3p-2p^2}{1+p-p^2} \right) - (0; 1).$$

Для доказательства нижней границы рассмотрим стратегии:

$$S_0 : V = \emptyset, St = \{\mathbf{e}_1\},$$

$$S'_0 : V = \emptyset, St = \{2\mathbf{e}_2\},$$

$$S_1 : V = \{(0,0)\}, St = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{d}\},$$

$$S_2 : V = \{(0,0), (0,1)\}, St = \{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rightarrow \mathbf{d}, \mathbf{d}, \mathbf{d}\}.$$

Непосредственное применение теорем 6.7 и 6.8 дает требуемую нижнюю границу.

Для доказательства верхней границе достаточно доказать, что для любой вершины $a \in eq(n, G)$ существует ведущая в нее геодезическая вида:

$$(0,0) \xrightarrow{S_0} a_1 \xrightarrow{S_1} a_2 \xrightarrow{S_2} a_3 \xrightarrow{S'_0} a. \quad (6.2)$$

Рассмотрим произвольную геодезическую Γ_0 , ведущую в вершину a и будем применять к ней упрощающие ее перестройки. Так как $2\mathbf{e}_2$ – вектор периодичности, диаграмма

$$\begin{array}{ccc} a_1 & \xrightarrow{2\mathbf{e}_2} & a' \\ \downarrow \Gamma & & \downarrow \Gamma \\ a'' & \xrightarrow{2\mathbf{e}_2} & a_2 \end{array} \quad (6.3)$$

коммутативна, а соответствующая ей перестройка – осуществима и сохраняет геодезичность. С помощью конечного числа таких перестроек Γ_0 приводится к виду $2k\mathbf{e}_2 \rightarrow \Gamma_1$, где Γ_1 не содержит цепей вида $2\mathbf{e}_2$. Далее, в цепи Γ_1 все участки вида $\mathbf{e}_2 \rightarrow \mathbf{e}_1$ заменим на $\mathbf{e}_1 \rightarrow \mathbf{e}_2$. Возникающие при этом цепи $2\mathbf{e}_2$ убираем в начало геодезической с помощью перестройки (6.3). К полученной цепи Γ'_1 применим лемму 6.4. В результате получим геодезическую вида

$$2k\mathbf{e}_2 \rightarrow \Gamma_2 \rightarrow k'\mathbf{e}_1 \rightarrow \varepsilon\mathbf{e}_2,$$

где ε равен 0 или 1, а цепь Γ_2 не содержит пропусков диагоналей, а также участков вида $\mathbf{e}_2 \rightarrow \mathbf{e}_1$ и $2\mathbf{e}_2$. Рассмотрим участок Γ_2 , ведущий из вершины (i, j) в вершину $(i+1, j')$. Легко видеть, что $j \leq j' \leq j+2$. Возможные варианты участков приведем в таблице 6.1 (знак «+» обозначает наличие диагонали в вершин, знак «-» – ее отсутствие).

Таблица 6.1. Варианты участков геодезической Γ_2

Номер	(i, j)	$(i, j+1)$	Γ_2
1	+	+	\mathbf{d}
2	+	-	\mathbf{d}
3	-	+	\mathbf{e}_1
4	-	+	$\mathbf{e}_2 \rightarrow \mathbf{d}$
5	-	-	\mathbf{e}_1

В ситуациях $(+,-)$, $(+,+)$ и $(-,-)$ в Γ_2 возможен только один вариант участка геодезической, совпадающий с предусмотренным в стратегиях S_1 и S_2 . В ситуации $(-,+)$ – возможно 2 варианта. Случай 3 – предусмотрен стратегией S_1 , случай 4 – стратегией S_2 .

Пусть a_1 и a_2 – вершины, в которых встречаются ситуация $(-,+)$, причем в вершине a_1 выбран вариант 3, а в вершине a_2 – вариант 4. Соответствующий участок геодезической Γ_2 имеет вид $a_1 \xrightarrow{\mathbf{e}_1} a'_1 \xrightarrow{\Gamma} a_2 \xrightarrow{\mathbf{e}_2 \rightarrow \mathbf{d}} a'_2$. Заметим, что $\mathbf{e}_2 + \mathbf{d} - \mathbf{e}_1 = 2\mathbf{e}_2$ – вектор периодичности. Тогда Γ_2 можно перестроить в цепь вида $a_1 \xrightarrow{\mathbf{e}_2 \rightarrow \mathbf{d}} a'_1 + 2\mathbf{e}_2 \xrightarrow{\Gamma} a_2 + 2\mathbf{e}_2 \xrightarrow{\mathbf{e}_1} a'_2$. Следовательно, цепь Γ_2 можно привести к виду $\Gamma_3 \rightarrow \Gamma_4$, где в цепи Γ_3 встречаются только варианты 1,2,3,5, а в цепи Γ_4 – только варианты 1,2,3,4. Итак, доказано аналогичное (6.2) разложение

$$(0,0) \xrightarrow{S'_0} a' \xrightarrow{S_2} a'' \xrightarrow{S_1} a''' \xrightarrow{S_0} a'''' \xrightarrow{\varepsilon\mathbf{e}_2} a.$$

Отсюда находим, что

$$\mathbf{a} = |\Gamma| (\alpha_1 \mathbf{v}(S'_0) + \alpha_2 \mathbf{v}(S_2) + \alpha_3 \mathbf{v}(S_1) + \alpha_4 \mathbf{v}(S_0) + \varepsilon\mathbf{e}_2),$$

с $0 \leq \alpha_i \leq 1$, $\sum_i \alpha_i \leq 1$ и $\varepsilon \leq 1$, откуда и следует требуемая верхняя граница.

Замечание. Случай вектора $\mathbf{l} = (2,0)$ рассматривается полностью аналогично.

6.6. Случай $\mathbf{l} = (1,-1)$

Теорема 6.10. Пусть $\mathbf{l} = (1,-1)$. Тогда при $p > 0$ с вероятностью 1 форма роста $\gamma_{L,p}^+$ существует и состоит из трех отрезков $\gamma_1^+ : (1;0) - (1;p)$, $\gamma_2^+ : (1;p) - (p;1)$ и $\gamma_3^+ : (p;1) - (0;1)$.

Сначала докажем, что вершины из $eq(n, G)$ лежат на прямых $x = n, y = n, x + y = n + k_n, x + y = k_n + n - 1$. Доказательство проведем индукцией по числу слоев n . Для $n = 1$ утверждение проверяется непосредственно. Пусть утверждение верно для $n = n_0$. Докажем, что для $n = n_0 + 1$ возможно 6 случаев:

1) в вершинах на прямой $x + y = k_{n_0} + n_0 - 1$ есть диагональ, в вершинах на прямой $x + y = k_{n_0} + n_0$ - нет. Тогда вершины из $eq(n_0 + 1, G)$ лежат на прямых $x = n_0 + 1, y = n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 1$

2) в вершинах на прямых $x + y = k_{n_0} + n_0 - 1$ и $x + y = k_{n_0} + n_0$ есть диагональ. Тогда вершины из $eq(n_0 + 1, G)$ лежат на прямых $x = n_0 + 1, y = n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 2$.

3) В вершинах на прямой $x + y = k_{n_0} + n_0 - 1$ нет диагоналей, в вершинах на прямой $x + y = k_{n_0} + n_0$ - есть диагонали. Тогда вершины из $eq(n_0 + 1, G)$ лежат на прямых $x = n_0 + 1, y = n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 2$.

4) в вершинах на прямых $x + y = k_{n_0} + n_0 - 1$ и $x + y = k_{n_0} + n_0$ нет диагоналей. Тогда вершины из $eq(n_0 + 1, G)$ лежат на прямых $x = n_0 + 1, y = n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 1$.

5) в вершинах на прямых $x + y = k_{n_0} + n_0$ есть диагональ, в вершинах на прямой $x + y = k_{n_0} + n_0 - 1$ нет вершин из $eq(n_0, G)$. Тогда все вершины из $eq(n_0 + 1, G)$ лежат на прямых $x = n_0 + 1, y = n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 2$.

6) в вершинах на прямых $x + y = k_{n_0} + n_0$ нет диагоналей, на прямой $x + y = k_{n_0} + n_0 - 1$ нет вершины из $eq(n_0 + 1, G)$. Тогда вершины из $eq(n_0 + 1, G)$ лежат на прямых $x = n_0 + 1, y = n_0 + 1, x + y = k_{n_0} + n_0 + 1$.

Утверждение доказано. Заметим, что $(n, k_n) \in e$, но $(n, k_n + 1) \notin eq(n, G)$. Следовательно, в точку (n, k_n) ведет цепь, построенная по стратегии S_1 и $\frac{1}{n}(n, k_n) \rightarrow (1, p)$.

6.7. Граф без самоподобного роста

Во всех рассмотренных примерах графы обладали свойством самоподобного роста. Однако можно доказать, что условия 1-периодичности графа не достаточно для существования формы роста.

Рассмотрим произвольную последовательность $\{n_k\}$ такую, что $n_{k+1} - n_k = 0$ или 1 и не существует предела $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{n_k}{k}$. Построим 1-периодический граф G_0 с периодом $\mathbf{1} = (0, 1)$ такой, что в вершине $(k; 0)$ есть диагональ тогда и только тогда, когда $n_k - n_{k-1} = 1$. Тогда стратегия S_1 - ведет в вершину $(k; n_k)$ и

для графа G_0 не существует формы роста.

6.8. Случай высшей размерности

О росте непериодических графов в m - мерном пространстве, $m > 2$ известно крайне мало [118]. Ограничимся графами $G_{L,p}^m$ с вершинами в точках \mathbb{Z}_+^m . Вершины (i_1, \dots, i_n) и (i'_1, \dots, i'_m) обязательно соединены ребрами, если $\sum_{k=1}^m |i_k - i'_k| = 1$. Вершины (i_1, \dots, i_n) и $(i_1 + 1, \dots, i_n + 1)$ из фундаментальной области k - мерной решетки L ($k < m$) соединены ребром с вероятностью p . В частности, если $k = 0$ получается случайный граф. Величину $m - k$ назовем коразмерностью периодичности.

1) Пусть $k = m - 1$, $L = \left\{ \sum_{i=1}^{m-1} m_i \mathbf{e}_i, m_i \in \mathbb{Z} \right\}$, $\mathbf{e}_i = \{0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0\}$ - i -ый базисный вектор \mathbb{Z}^n . Пусть $\mathbf{d} = \{1, \dots, 1\}$ - диагональный вектор, $\mathbf{d}_p = \{p, \dots, p, 1\}$, тогда с вероятностью 1 существует форма роста $\gamma_{L,p}$, представляющая собой многогранную поверхность, натянутую на выпуклую оболочку векторов $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_m, \mathbf{d}_p$.

Аппроксимационные цепи, ведущие к вершине $m\mathbf{e}_1$ очевидны. Цепь в вершину $n\mathbf{d}_p$ - строиться в соответствии со стратегией $S: V = \{(0;0)\}, St = \{\mathbf{e}_n; \mathbf{d}\}$. Легко проверить, что $\mathbf{v}(S) = \mathbf{d}_p$. Для доказательства верхней границы рассмотрим произвольную геодезическую Γ , ведущую в вершину из $eq(n, G)$. Заметим что диаграмма

$$\begin{array}{ccc} a \xrightarrow{\bar{e}_i} a' & & \\ \Gamma \downarrow & & \downarrow \Gamma \\ a'' \xrightarrow{\bar{e}_i} a_1 & & \end{array} \quad (6.4)$$

коммулативна при $1 \leq i \leq m - 1$. В результате конечного числа определяемых диаграммой перестроек получаем геодезическую вида:

$$m\mathbf{e}_1 \rightarrow \dots \rightarrow m_{m-1}\mathbf{e}_{m-1} \rightarrow \Gamma',$$

где Γ' состоит только из \mathbf{e}_m и \mathbf{d} . Таким образом, геодезическая распадается в сумму элементарных стратегий, что и доказывает верхнюю границу.

2) Пусть $k = 1$, $m = 3$, $L = \{n\mathbf{e}_3, n \in \mathbb{Z}\}$.

Легко видеть, что геодезическая представляется в виде $t\mathbf{e}_3 \rightarrow \Gamma'(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{d})$. Рассмотрим отображение проекции $\pi: \mathbb{Z}^3 \rightarrow \mathbb{Z}^2$, $(x, y, z) \rightarrow (x, y, 0)$. Тогда граф $G_{L,p}^3$ проектируется в плоский случайный граф $G' \in G_p^2$ с той же вероятностью p . При этом диагональ проектируется в диагональ, а геодезическая в геодезическую. Часть $eq(n, G_{L,p}^3)$, в которую ведут геодезические вида $\Gamma'(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{d})$, проектируются в $eq(n, G_p^2)$. Пусть Π - плоскость, проходящая через $(1;0;0), (0;1;0)$ и $(1;1;1)$ (ее уравнение $-x - y + z + 1 = 0$), γ_p^2 - форма роста плоского случайного

графа $G' \in G_p^2$, $\gamma_{L,p}^3$ - форма роста пространственного 1- периодического графа $G \in G_{L,p}^3$. Тогда $\partial\pi(\Pi \cap \gamma_{L,p}^3) = \gamma_p^2$, где ∂ – оператор взятия границы. Оставшаяся часть γ_p^3 - коническая поверхность второго порядка с вершиной $(0;0;1)$ и направляющей $\partial\pi(\Pi \cap \gamma_{L,p}^3)$.

3) Случайные графы в \mathbb{R}^3 ($k = 0, m = 3$)

Компьютерный эксперимент показывает, что имеет место самоподобный рост. Форма роста γ_p^3 имеет симметрию третьего порядка относительно прямой

$$\begin{cases} x = t \\ y = t \\ z = t \end{cases} \text{ и состоит из 3 граней, лежащих на некоторых плоскостях, а также вы-}$$

пуклой нелинейной грани. Плоские грани вновь проектируются в форму роста плоского случайного графа γ_p^2 . Нелинейная грань касается всех трех плоских граней по эллипсам, однако ее уравнение остается неизвестным.

4) Рассмотрим произвольный граф $G \in G_{L,p}^m$ с k - мерной решеткой периодичности $L = \left\{ \sum_{i=1}^{k-1} m_i \mathbf{e}_i, m_i \in \mathbb{Z} \right\}$. Коммутативность соответствующей диаграммы

(2.4) при $1 \leq i \leq k$ приводит произвольную геодезическую к виду

$$n\mathbf{e}_1 \rightarrow \dots \rightarrow n_k \mathbf{e}_k \rightarrow \Gamma'(\mathbf{e}_{k+1}, \dots, \mathbf{e}_m, \mathbf{d})$$

Рассмотрим проекцию $\pi: \mathbb{Z}^m \rightarrow \mathbb{Z}^{m-k}$ вдоль векторов $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k$. Она проектирует графы из $G_{L,p}^m$ в случайные графы G_p^{m-k} , геодезические которых будут проекциями геодезических Γ' . Это позволяет свести изучение k - периодических графов в \mathbb{R}^m к изучению случайных графов в \mathbb{R}^{m-k} .

Сформулируем общую гипотезу. Пусть $(L - k)$ -мерная решетка в \mathbb{R}^m . Тогда почти все графы из $G_{L,p}^m$ растут самопроизвольным образом. Форма роста $\gamma_{L,p}^m$ состоит из конечного числа алгебраических поверхностей, степени которых ограничены константой $C(m - k)$, зависящей только от коразмерности периодичности $m - k$. При этом $C(0) = C(1) = 1$, $C(2) = 2$. Форма роста $\gamma_{L,p}^m$ выпукла, непрерывно зависит от p при $p \in (0,1]$ и сохраняет комбинаторную структуру (число граней каждой степени и порядок их соединения) при $p \in (0,1)$.

ГЛАВА 7. Рост квазипериодических разбиений

7.1. Обобщенные разбиения Розы

Приведем одну из возможных конструкций класса квазипериодических разбиений, известных как обобщенные разбиения Розы [119].

Рассмотрим кубическое уравнение

$$x^3 + px^2 + qx = 1 \quad (7.1)$$

с целыми коэффициентами, удовлетворяющими условиям

$$p + q \geq 1; \Delta(p, q) = 4p^3 + p^2q^2 - 4q^3 - 18pq - 27 < 0; \quad (7.2)$$

$$-1 \leq p \leq q + 1. \quad (7.3)$$

Условие (7.2) эквивалентно следующему свойству:

- 1) Уравнение (7.1) имеет единственный действительный корень ζ , принадлежащий отрезку $[0, 1]$ и два комплексных корня $\beta, \tilde{\beta}$ такие, что $|\beta| = |\tilde{\beta}| > 1$.

Известно [120], что условие (7.3) эквивалентно следующему свойству:

- 2) Пусть $r \in [0, 1]$ и $r \in \mathbb{Z}[\zeta]$. Тогда жадное разложение $r = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i \zeta^i$ конечно.

Напомним, что разложение

$$r = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i \zeta^i, \quad \varepsilon_i \in \mathbb{Z}, \quad \varepsilon_i \geq 0 \quad (7.4)$$

является жадным, тогда и только тогда, когда для любого m выполняется неравенство $|r - \sum_{i=1}^m \varepsilon_i \zeta^i| < \zeta^m$. Известно, что коэффициенты $\{\varepsilon_i\}$ из разложения (7.4)

должны удовлетворять ряду ограничений, задаваемых уравнением (7.1).

Для того чтобы описать эти ограничения, разобьем множество Q кубических уравнений, удовлетворяющих условиям (7.2), (7.3) на три подмножества Q_3, Q_4 и Q_5 . В качестве Q_4 возьмем подмножество Q , состоящее из уравнений с $p = -1$. Переобозначив q на a , мы можем записать уравнения из Q_4 в виде

$$x^3 - x^2 + ax = 1, \quad a \in \mathbb{Z}, \quad a \geq 2.$$

В качестве Q_5 возьмем подмножество Q , состоящее из уравнений с $p = q + 1$. Вновь переобозначив q на a , мы можем записать уравнения из Q_5 в виде

$$x^3 + (a + 1)x^2 + ax = 1, \quad a \in \mathbb{Z}, \quad a \geq 0.$$

Все оставшиеся кубические уравнения, удовлетворяющие условиям (7.2), (7.3) отнесем к классу Q_3 .

Для любого уравнения класса Q_3 и любого $i > 1$ коэффициенты $\{\varepsilon_i\}$ удовлетворяют неравенству $\varepsilon_i \varepsilon_{i-1} \varepsilon_{i-2} <_{lex} qp1$. Здесь $<_{lex}$ означает лексикографический порядок. Для двух оставшихся классов уравнений соответствующие условия на $\{\varepsilon_i\}$ имеют вид: $\varepsilon_i \varepsilon_{i-1} \varepsilon_{i-2} \varepsilon_{i-3} <_{lex} (a-1)(a-1)01$ для уравнений из Q_4 и любого $i > 2$, $\varepsilon_i \varepsilon_{i-1} \varepsilon_{i-2} \varepsilon_{i-3} \varepsilon_{i-4} <_{lex} (a+1)00a1$ для уравнений из Q_5 и любого $i > 3$. Во всех случаях предполагается, что $\varepsilon_0 = 0$. Доказательство описанных нера-

венств может быть найдено, например в работе [121].

На рис. 7.1 точки (p, q) , соответствующие уравнениям класса Q_3 обозначены треугольниками. Квадраты соответствуют уравнениям класса Q_4 , а пятиугольники – уравнениям класса Q_5 .

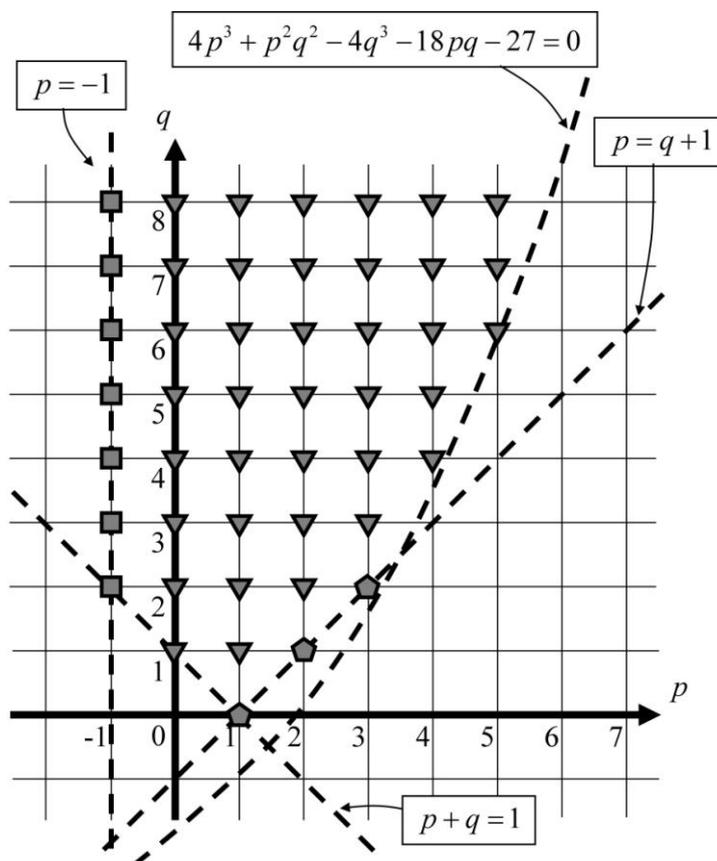


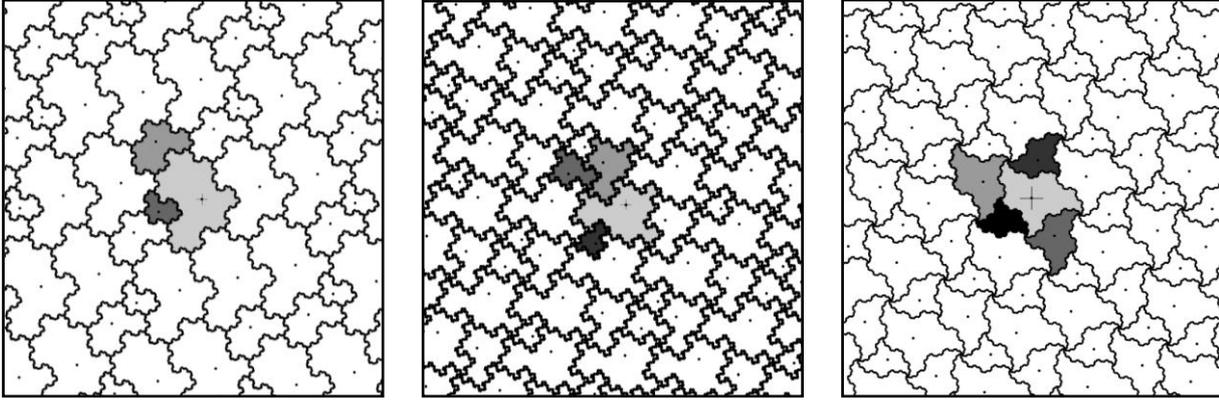
Рис 7.1. Коэффициенты p и q кубических уравнений классов Q_3 , Q_4 , Q_4 .

Рассмотрим все допустимые жадные разложения вида (7.4). Обозначим через A множество последовательностей $\{\varepsilon_i\}$, дающих допустимые жадные разложения. Определим множество

$$T = T(p, q) = \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i \beta^{-i} : \{\varepsilon_i\}_{i=1}^{\infty} \in A \right\}.$$

Известно, что $T(p, q)$ – компактное линейно связное множество с фрактальной границей. Данное множество порождает самоподобное разбиение плоскости $Til(p, q)$, называемое обобщенным разбиением Розы. В случае $p = q = 1$ говорят просто о разбиении Розы. Примеры обобщенных разбиений Розы для различных p, q изображены на рисунке 7.2. Рассмотрим более подробно построение этих разбиений.

Для получения самоподобного разбиения плоскости необходимо построить разбиение фигуры $T(p, q)$ на попарно подобные фигуры (тайлы). Оказывается, что для уравнений класса Q_k фигура $T(p, q)$ представима в виде объединения k попарно подобных тайлов. При этом принадлежность конкретной



$Til(1,2)$

$Til(-1,2)$

$Til(1,0)$

Рис 7.2. Фрагменты обобщенных разбиений Рози.

точки $z = \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i \beta^{-i} \in T(p, q)$ одному из этих тайлов однозначно определяется коэффициентами $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{k-1}$ разложения точки z по степеням β .

Более формализовано, пусть A_k – множество наборов $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_{k-1})$, которые можно продолжить до последовательностей из A . A_k можно представить в виде объединения k непересекающихся множеств $A_k^{(1)}, A_k^{(2)}, \dots, A_k^{(k)}$, которым соответствуют попарно подобные тайлы

$$T^{(m)}(p, q) = \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i \beta^{-i} : \{\varepsilon_i\}_{i=1}^{\infty} \in A, (\varepsilon_i)_{i=1}^{k-1} \in A_k^{(m)} \right\},$$

дающие требуемое разбиение фигуры $T(p, q)$. Наборы $A_k^{(m)}$ для классов Q_k приведены в таблице 7.1. При этом знак "–" означает, что соответствующий коэффициент не участвует в определении множества A_k . Знак "*" означает, что в этом месте можно использовать любые коэффициенты, возможные в соответствующем жадном разложении.

Описанное разбиение фигуры $T(p, q)$ порождает самоподобное квазипериодическое разбиение плоскости на фигуры k типов.

Будем называть разбиение $\beta^k T(p, q) = \bigcup_{m=1}^k \beta^k T^{(m)}(p, q)$ обобщенным разбиением Рози $Til_0(p, q)$ нулевого уровня. Множество фигур типа m разбиения $Til_n(p, q)$ n -го уровня может быть записано следующим образом:

$$Til_n^{(m)}(p, q) = \beta^{n+k} \cdot \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \varepsilon_i \beta^{-i} : \{\varepsilon_i\}_{i=1}^{\infty} \in A, (\varepsilon_i)_{i=n+1}^{n+k-1} \in A_k^{(m)} \right\}.$$

Так как разбиение $Til_0(p, q)$ содержит начало координат, и разбиение $Til_n(p, q)$ является частью разбиения $Til_{n+1}(p, q)$, в пределе при $n \rightarrow \infty$ получается квазипериодическое разбиение всей плоскости на фигуры k типов. Его и будем называть обобщенным разбиением Рози.

Таблица 7.1. Наборы $A_k^{(m)}$, определяющие разбиение фигуры $T(p, q)$ на тайлы $T^{(m)}(p, q)$.

		ε_1	ε_2	ε_3	ε_4
Q_3	$A_3^{(3)}$	p	q	-	-
	$A_3^{(2)}$	q	$0, 1, \dots, q-1$	-	-
	$A_3^{(1)} = A_3 \setminus (A_3^{(2)} \cup A_3^{(3)})$			-	-
Q_4	$A_4^{(4)}$	0	$a-1$	$a-1$	-
	$A_4^{(3)}$	$a-1$	$a-1$	*	-
	$A_4^{(2)}$	$a-1$	$0, 1, \dots, a-2$	*	-
	$A_4^{(1)} = A_4 \setminus (A_4^{(2)} \cup A_4^{(3)} \cup A_4^{(4)})$			-	-
Q_5	$A_5^{(5)}$	a	0	0	$a+1$
	$A_5^{(4)}$	0	0	$a+1$	*
	$A_5^{(3)}$	0	$a+1$	*	*
	$A_5^{(2)}$	$a+1$	*	*	*
	$A_5^{(1)} = A_5 \setminus (A_5^{(2)} \cup A_5^{(3)} \cup A_5^{(4)} \cup A_5^{(5)})$			-	-

Описанный способ построения обобщенных разбиений Розы является не самым удобным с точки зрения компьютерной реализации. Альтернативные подходы к построению разбиений, порождающие эффективные компьютерные алгоритмы, могут быть найдены в работе [119, 122].

Для обобщенных разбиений Розы определено понятие послойного роста из главы 2. Многочисленные компьютерные эксперименты привели к следующей гипотезе.

Гипотеза. *Разбиения $Til(p, q)$ имеют самоподобный рост с ограниченным радиусом окрестности, то есть*

$$eq(n, Til(p, q)) \subseteq (n \cdot Pol(p, q))_c$$

с константой $c = c(p, q)$, не зависящей от n . Форма роста $Pol(p, q)$ – выпуклый центрально симметричный многоугольник.

На рисунке 7.3 изображен послойный рост классического разбиения Розы $Til(1, 1)$ и соответствующий восьмиугольник роста. Согласно результатам численного моделирования [123], вершины восьмиугольника $Pol(1, 1)$ задаются комплексными числами

$$\pm(\zeta\beta - \beta^2), \pm(\beta^3 - \zeta^2\beta), \pm\left(\frac{\zeta\beta^3 - \beta^4}{1 + \zeta}\right) \text{ и } \pm\left(\frac{\zeta^2\beta^2 - \beta^4}{1 + \zeta^2}\right).$$

Следующие параграфы будут посвящены математическому обоснованию результатов о послойном росте классического разбиения Розы $Til(1, 1)$. Для этого потребуется ряд дополнительных сведений об этом разбиении.

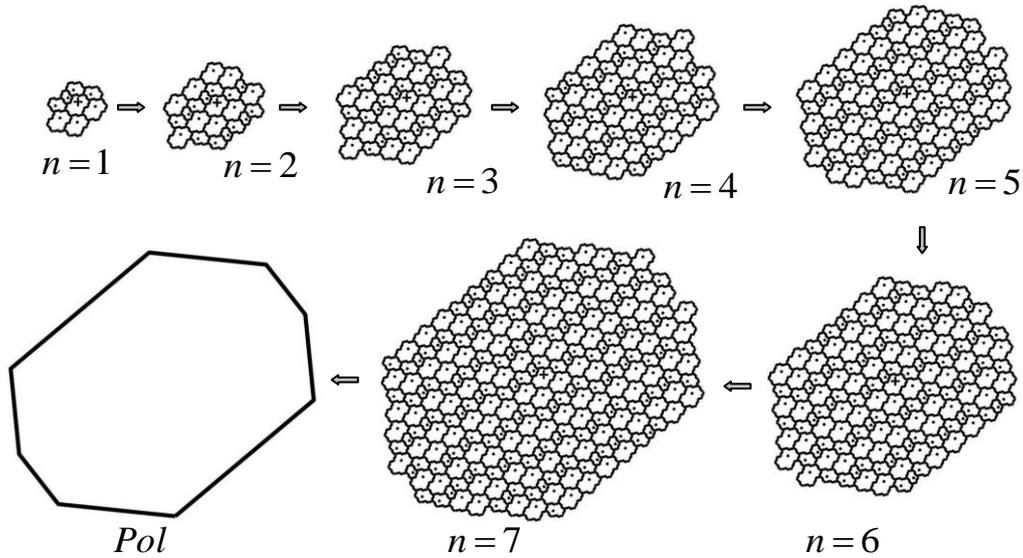


Рис. 7.3. Первые 7 координационных окружений восьмиугольник роста разбиения Розы.

7.2. Сильная параметризация разбиения Розы

Будем обозначать разбиение Розы $Til(1,1)$ просто Til . Заметим, что данное разбиение содержит тайлы трех различных типов.

Точкой Розы тайла разбиения называется образ начала координат при преобразовании подобия, переводящем тайл, содержащий начало координат, в данный тайл. Так как соответствующие преобразования подобия всегда имеют вид $z \rightarrow \beta^n z + \alpha$, где $\alpha \in \mathbb{Z}[\beta]$, любая точка Розы принадлежит кольцу $\mathbb{Z}[\beta]$. Множество точек Розы обозначим через R .

Два тайла разбиения Til будем называть соседними, если они имеют общий участок границы. Каждой точке Розы $x \in R$ поставим в соответствие ее звезду – набор векторов, соединяющих точку Розы x данного тайла с точками Розы тайлов, соседних с данным. Векторы из $S(x)$ очевидным образом принадлежат кольцу $\mathbb{Z}[\beta]$, так как все точки Розы имеют координаты из $\mathbb{Z}[\beta]$. Так как β является корнем кубического уравнения, любая точка из $\mathbb{Z}[\beta]$ может быть записана в виде $c_0 + c_1\beta + c_2\beta^2$, где $c_i \in \mathbb{Z}$.

Определим операцию $'$:

$$(c_0 + c_1\beta + c_2\beta^2)' = c_0 + c_1\zeta + c_2\zeta^2,$$

$$(c_0 + c_1\zeta + c_2\zeta^2)' = c_0 + c_1\beta + c_2\beta^2.$$

Рассмотренная операция представляет собой алгебраическое сопряжение в кольце, порожденном всеми тремя корнями кубического уравнения. Эта операция также устанавливает биекцию между кольцами $\mathbb{Z}[\beta]$ и $\mathbb{Z}[\zeta]$.

Операция сопряжения переводит множество $S(x)$ во множество локальных чисел $S'(x')$ таких, что если x' – параметр некоторого тайла, то $\{x' + y' : y' \in S'(x')\}$ есть множество параметров тайлов, соседних с ним. Сильная параметризация представляет собой описание множеств локальных чисел $S'(x')$

для всех параметров x' . Для дальнейших целей нам удобнее рассматривать цветные локальные звезды $CS(x)$, в которых каждый локальный вектор имеет вес – число, равное типу фигуры, в которой находится конец вектора. Через $CS'(x')$ обозначим соответствующее $CS(x)$ множество цветных локальных чисел, отвечающих параметру x' .

Оказалось, что для разбиения Розы существует 11 различных цветных звезд $CS(x)$. Пусть $\hat{R}^{(i)}$ – множество точек Розы, имеющих цветную локальную звезду i -го типа ($i=1,2,\dots,11$) и $\hat{I}^{(i)} = \hat{R}^{(i)'}$ – соответствующее множество параметров. Тогда справедливо следующее утверждение [123, 124].

Теорема 7.1. *Множество параметров $\hat{I}^{(i)} \subset I$ есть множество целых точек кольца $\mathbb{Z}[\zeta]$, принадлежащих некоторому открытому справа полуинтервалу.*

Таким образом, построение сильной параметризации разбиения Til предполагает нахождение интервалов $\hat{I}^{(i)}$, $i=1,2,\dots,11$ и вычисление соответствующих наборов локальных чисел. На рис. 7.4 приведены 11 типов цветных локальных звезд $CS(x)$ разбиения Розы с указанием соответствующих полуинтервалов параметров $\hat{I}^{(i)}$. В таблице 7.2 приведены локальные числа, которые используются для описания сильной параметризации разбиения Розы, представленной в таблице 7.3.

Таблица 7.2. Локальные числа разбиения Розы

Локальное число	s_1	s_2	s_3	s_4	s_5	s_6	s_7	s_8	s_9
Значение	ζ^4	ζ^3	$\zeta^3 + \zeta^4$	ζ^2	$\zeta^2 + \zeta^4$	$\zeta^2 + \zeta^3$	ζ	$\zeta + \zeta^3$	$\zeta + \zeta^2$

Из приведенной сильной параметризации также вытекает, что множество параметров точек Розы тайлов первого типа есть множество точек кольца $\mathbb{Z}[\zeta]$, принадлежащих полуинтервалу $[0; \zeta^2)$. Аналогично, точкам Розы тайлов второго типа соответствует полуинтервал $[\zeta^2; \zeta)$, а точкам Розы тайлов третьего типа – полуинтервал $[\zeta^2 + \zeta; 1)$. Такая параметризация, не несущая информации о соседстве тайлов, называется слабой параметризацией.

Отметим, что описанная сильная параметризация порождает эффективный компьютерный алгоритм послойного роста разбиения Розы.

Замечание. *Аналогичная сильная параметризация может быть найдена и для обобщенных разбиений Розы $Til(p, q)$. Детали можно найти в работе [119].*

Математическое обоснование результатов о форме роста вновь разбивается на два этапа: доказательство верхней и нижней границы.

Таблица 7.3. Сильная параметризация разбиения Розы

Тип локальной звезды i	Тип фигуры $T_n^{(m)}$	Полуинтервал $\hat{I}^{(i)}$	Локальные числа		
			Тип соседней фигуры		
			$m = 1$	$m = 2$	$m = 3$
1	$T_1^{(1)}$	$[0, \zeta^5)$	s_1, s_2, s_3	s_4, s_5, s_6	s_9
2	$T_2^{(1)}$	$[\zeta^5, \zeta^4)$	s_1, s_2	s_3, s_4, s_5, s_6	s_9
3	$T_3^{(1)}$	$[\zeta^4, \zeta^4 + \zeta^5)$	$-s_1, s_1, s_2$	s_3, s_4, s_5	s_9
4	$T_4^{(1)}$	$[\zeta^4 + \zeta^5, \zeta^3)$	$-s_1, s_1$	s_2, s_3, s_4, s_5	s_8, s_9
5	$T_5^{(1)}$	$[\zeta^3, \zeta^3 + \zeta^5)$	$-s_1, s_1, -s_2$	s_2, s_3, s_4	s_8
6	$T_6^{(1)}$	$[\zeta^3 + \zeta^5, \zeta^3 + \zeta^4)$	$-s_1, -s_2$	s_1, s_2, s_3, s_4	s_8
7	$T_7^{(1)}$	$[\zeta^3 + \zeta^4, \zeta^2)$	$-s_1, -s_2, -s_3$	s_1, s_2, s_3	s_8
8	$T_1^{(2)}$	$[\zeta^2, \zeta^2 + \zeta^4)$	$-s_1, -s_2, -s_3, -s_4$	s_2	s_7
9	$T_2^{(2)}$	$[\zeta^2 + \zeta^4, \zeta^2 + \zeta^3)$	$-s_2, -s_3, -s_4, -s_5$		s_6, s_7
10	$T_3^{(2)}$	$[\zeta^2 + \zeta^3, \zeta)$	$-s_3, -s_4, -s_5, -s_6$	$-s_2$	s_6
11	$T_1^{(3)}$	$[\zeta + \zeta^2, 1)$	$-s_8, -s_9$	$-s_6, -s_7$	

7.3. Нижняя граница послыоного роста разбиения Розы

Как показано в предыдущих главах, для доказательства нижней границы достаточно построить цепи из фигур, ведущие в фигуры из $(n \cdot Pol)_c$ и имеющие длину, превосходящую n не более чем на константу. Такие цепи будем называть аппроксимационными.

Вначале определим цепи, ведущие в вершины многоугольника роста.

Параметризацию разбиения Розы, определяемую таблицами 5.1 и 5.2, можно рассматривать как многозначное отображение $f: R \rightarrow R$, где R – множество точек Розы. Определим следующие четыре его сечения в терминах сдвигов полуинтервалов: отображение Γ_1 определено на множестве $P_1 = [0, \zeta) = [0, \zeta^2) \cup [\zeta^2, \zeta)$ и сдвигает полуинтервал $[0, \zeta^2)$ на s_3 , а полуинтервал $[\zeta^2, \zeta)$ на $-s_4$. Аналогично определяются отображения Γ_2, Γ_3 и Γ_4 . Определяющие их полуинтервалы и соответствующие им сдвиги приведены в верхней половине таблицы 7.4.

Сечения Γ_i – это однозначные отображения, изоморфные вращениям ок-

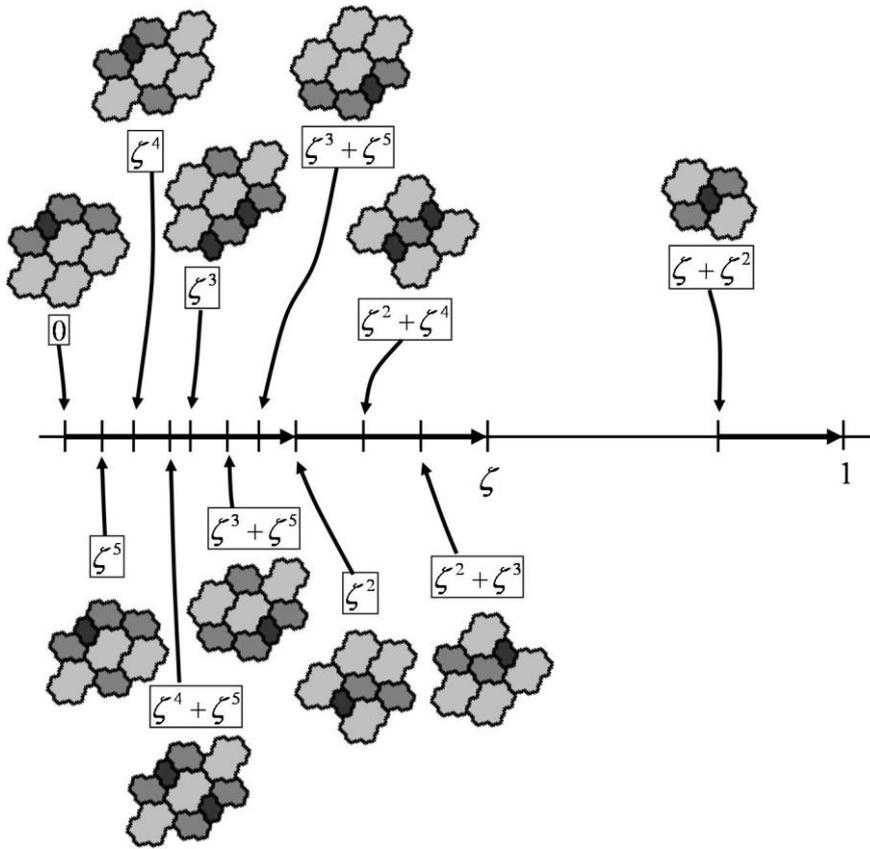


Рис. 7.4. 11 типов цветных локальных звезд $CS(x)$ разбиения Розы.

ружности, и поэтому они являются обратимыми в своей области определения. Области определения отображений Γ_i и обратных отображений Γ_{-i} совпадают $P_{-i} = P_i$, сдвиги противоположны, а точки деления областей определения на полуинтервалы симметричны относительно середин полуинтервалов P_i . Например, обратное отображение Γ_{-1} сдвигает полуинтервалы области определения $P_{-1} = [0, \zeta) = [0, \zeta^3 + \zeta^4) \cup [\zeta^3 + \zeta^4, \zeta)$ соответственно на s_4 и $-s_3$. Полуинтервалы и сдвиги, определяющие отображения Γ_{-i} приведены в нижней половине таблицы 7.4.

Отображения Γ_i , $i = \pm 1, \dots, \pm 4$ используются для построения аппроксимационных цепей γ_i , определяющих вершины восьмиугольника роста Pol , поэтому они и названы вершинными геодезическими отображениями. Геодезическая цепь γ_i представляют собой совокупность фигур, которые получены из фигуры $T(0)$ многократным применением отображения Γ_i , то есть γ_i - это Γ_i -орбита фигуры $T(0)$:

$$\gamma_i = \Gamma_i \langle T(0) \rangle = \{ \Gamma_i^n T(0) = T(\Gamma_i^n(0)) : n = 0, 1, 2, \dots \}, i = 1, 2, 3, 4, -1, -2, -3, -4.$$

Заметим, что согласно результатам компьютерного моделирования цепи γ_i на самом деле являются геодезическими.

Таблица 7.4. Вершинные геодезические отображения и определяемые ими координаты вершин восьмиугольника роста pol

Отображение	Полуинтервалы и соответствующие сдвиги		Частоты попадания в полуинтервалы		Координаты вершин
Γ_1	$[0, \zeta^2)$	$[\zeta^2, \zeta)$	$\Delta(s_3)$	$\Delta(-s_4)$	v_1
	s_3	$-s_4$	ζ	$1 - \zeta$	$\zeta\beta - \beta^2$
Γ_2	$[0, \zeta^2 + \zeta^4)$	$[\zeta^2 + \zeta^4, \zeta)$	$\Delta(s_2)$	$\Delta(-s_5)$	v_2
	s_2	$-s_5$	$\zeta + \zeta^3$	ζ^2	$\beta^3 - \zeta^2\beta$
Γ_3	$[0, \zeta^4)$	$[\zeta^4, \zeta^3 + \zeta^4)$	$\Delta(s_2)$	$\Delta(-s_1)$	v_3
	s_2	$-s_1$	$\frac{\zeta}{1 + \zeta}$	$\frac{1}{1 + \zeta}$	$\frac{\zeta\beta^3 - \beta^4}{1 + \zeta}$
Γ_4	$[0, \zeta^4)$	$[\zeta^4, \zeta^2 + \zeta^4)$	$\Delta(s_4)$	$\Delta(-s_1)$	v_4
	s_4	$-s_1$	$\frac{\zeta^2}{1 + \zeta^2}$	$\frac{1}{1 + \zeta^2}$	$\frac{\zeta^2\beta^2 - \beta^4}{1 + \zeta^2}$
Γ_{-1}	$[0, \zeta - \zeta^2)$	$[\zeta - \zeta^2, \zeta)$	$\Delta(s_4)$	$\Delta(-s_3)$	v_{-1}
	s_4	$-s_3$	$1 - \zeta$	ζ	$-\zeta\beta + \beta^2$
Γ_{-2}	$[0, \zeta^3)$	$[\zeta^3, \zeta)$	$\Delta(s_5)$	$\Delta(-s_2)$	v_{-2}
	s_5	$-s_2$	ζ^2	$\zeta + \zeta^3$	$-\beta^3 + \zeta^2\beta$
Γ_{-3}	$[0, \zeta^3)$	$[\zeta^3, \zeta^3 + \zeta^4)$	$\Delta(s_1)$	$\Delta(-s_2)$	v_{-3}
	s_1	$-s_2$	$\frac{1}{1 + \zeta}$	$\frac{\zeta}{1 + \zeta}$	$\frac{-\zeta\beta^3 + \beta^4}{1 + \zeta}$
Γ_{-4}	$[0, \zeta^2)$	$[\zeta^2, \zeta^2 + \zeta^4)$	$\Delta(s_1)$	$\Delta(-s_4)$	v_{-4}
	s_1	$-s_4$	$\frac{\zeta^2}{1 + \zeta^2}$	$\frac{1}{1 + \zeta^2}$	$\frac{-\zeta^2\beta^2 + \beta^4}{1 + \zeta^2}$

Цепь γ_1 состоит из фигур $T(\Gamma_1^a(0))$, точки Розы которых имеют координаты $(\Gamma_1^a(0))'$, определяемые рекуррентно:

$$\begin{aligned}
 &(\Gamma_1^0)' = (0, 0) \text{ для } a=0 \text{ и} \\
 &(\Gamma_1^a(0))' = (\Gamma_1^{a-1}(0))' + \begin{cases} s_3', & \text{если } \Gamma_1^{a-1}(0) \in [0, \zeta^2) \\ -s_4', & \text{если } \Gamma_1^{a-1}(0) \in [\zeta^2, \zeta) \end{cases} \text{ для } a \geq 1. \quad (7.5)
 \end{aligned}$$

Преобразование Γ_1 изоморфно повороту единичной окружности на иррациональный угол $\alpha_1 = \zeta^2 + \zeta^3 = 1 - \zeta$, поэтому Γ_1 -орбита любой точки равномерно распределена на полуинтервале $P_1 = [0, \zeta)$. В частности, частоты попада-

ния точек орбиты в полуинтервалы из (7.5) равны $\Delta(s_3) = \zeta$, $\Delta(-s_4) = 1 - \zeta$ - нормированным длинам полуинтервалов, определяющих отображение Γ_1 . Используя аппарат теории чисел (теоремы Гекке [125] и Кестена [126]), можно показать, что координаты точек Розы $(\Gamma_1^a(0))'$ разлагаются в сумму $(\Gamma_1^a(0))' = a\mathbf{v}_1 + \mathbf{r}_1(a)$, где $|\mathbf{r}_1(a)| \leq \text{const}$ для $a=0,1,2,\dots$, т.е. $(\Gamma_1^a(0))'$ получаются конечной деформацией одномерной решетки с базисом $\mathbf{v}_1 = \Delta(s_3)s_3' - \Delta(-s_4)s_4'$.

Учитывая что $Pol = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{eq(n, Til)}{n}$, получаем, что $\mathbf{v}_1 \in Pol$. Другие вершины \mathbf{v}_i восьмиугольника вычисляются аналогично с использованием характеристик отображений Γ_i .

Для построения аппроксимационной цепи в произвольную фигуру из $(n \cdot Pol)_c$ отметим, что цепи γ_i разбивают все разбиение Til на 8 секторов. Пусть интересующая нас фигура T_1 находится в секторе, ограниченном фигурами γ_1 и γ_2 . Тогда проекция вдоль вектора \mathbf{v}_2 на цепь γ_1 определяет некоторую фигуру T_1' . Применяя к T_1' отображение Γ_2 , мы получим цепь γ_2' , ведущую в фигуру T_1 . Таким образом, цепь $Til_0^{(1)} \rightarrow \gamma_1 \rightarrow T_1' \rightarrow \gamma_2' \rightarrow T_1$ будет интересующей нас аппроксимационной цепью. Нижняя граница в остальных секторах доказывается полностью аналогично. Все описанные аппроксимационные цепи изображены на рисунке 7.5.

Для доказательства верхней границы роста мы будем использовать другой подход, основанный на сечении трехмерного периодического разбиения [127].

7.4. Трехмерное периодическое разбиение Til^{3D}

В работе [128] математически строго обосновывается возможность построения разбиения Розы как сечения трехмерного периодического разбиения Til^{3D} . В качестве элементов этого периодического разбиения выступает объединение трех прямых цилиндров $Cyl = Cyl^{(1)} \cup Cyl^{(2)} \cup Cyl^{(3)}$, основания которых лежат в одной плоскости и совпадают с фигурами $T^{(1)}$, $T^{(2)}$ и $T^{(3)}$ разбиения Til (рис. 7.6а). Высоты этих цилиндров соответствуют частотам появления этих тайлов в разбиении Til , то есть $h^{(1)} = \zeta^2$, $h^{(2)} = \zeta - \zeta^2$, $h^{(3)} = \zeta^3$. Цилиндры открыты сверху, то есть верхнее основание каждого цилиндра не принадлежит объединению Cyl , поэтому любое сечение Til^{3D} плоскостью параллельной основаниям цилиндров будет представлять собой разбиение плоскости, состоящее из тех же фигур, что и квазипериодическое разбиение Розы.

Для расчета двумерных сечений трехмерного периодического разбиения Til^{3D} необходимо определить решетку трансляций Til^{3D} , а также ориентацию этой решетки относительно цилиндров Cyl . С этой целью воспользуемся методом дискретного моделирования, описанным в работах [84, 129].

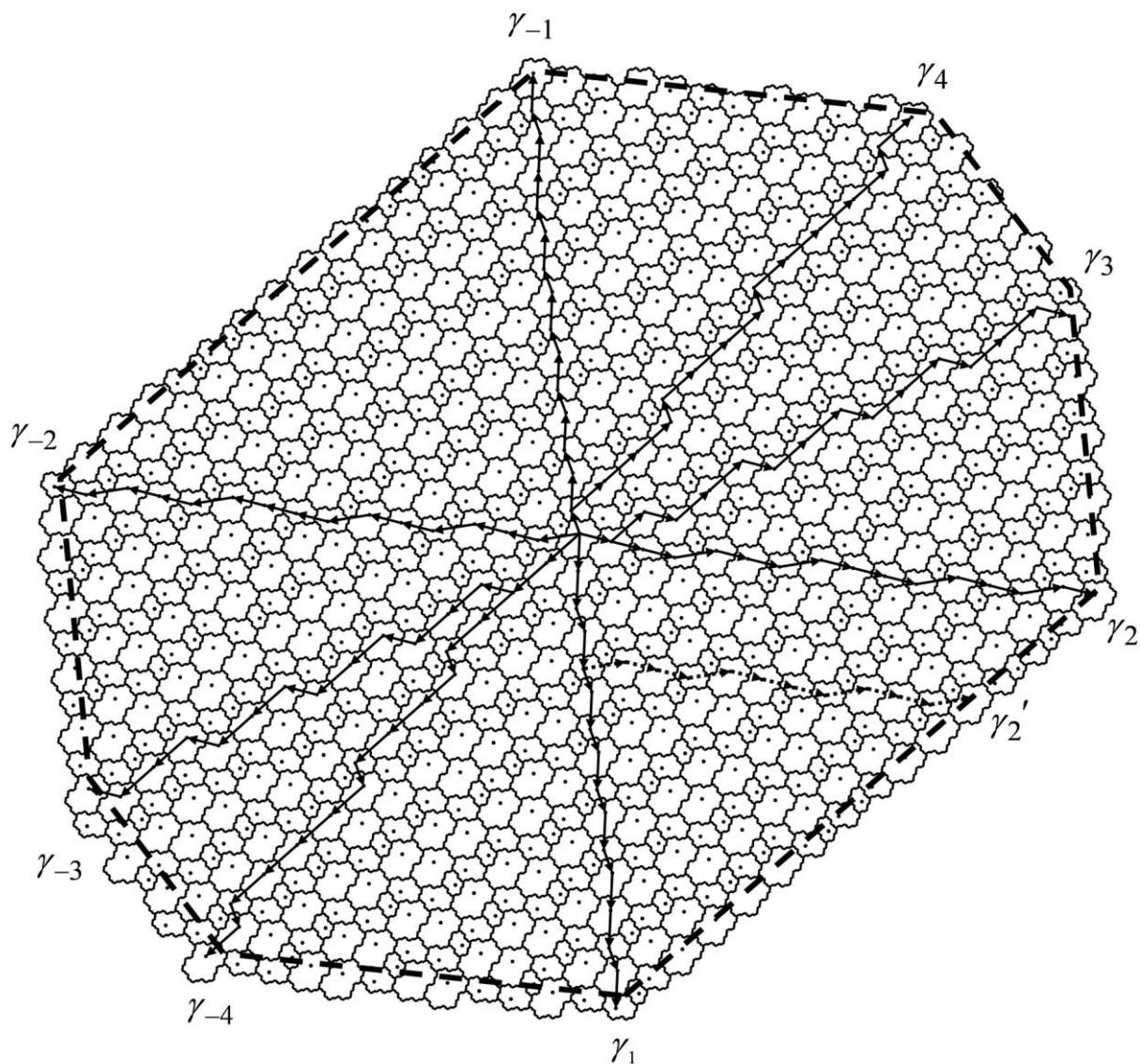


Рис. 7.5. Аппроксимационные цепи γ_i .

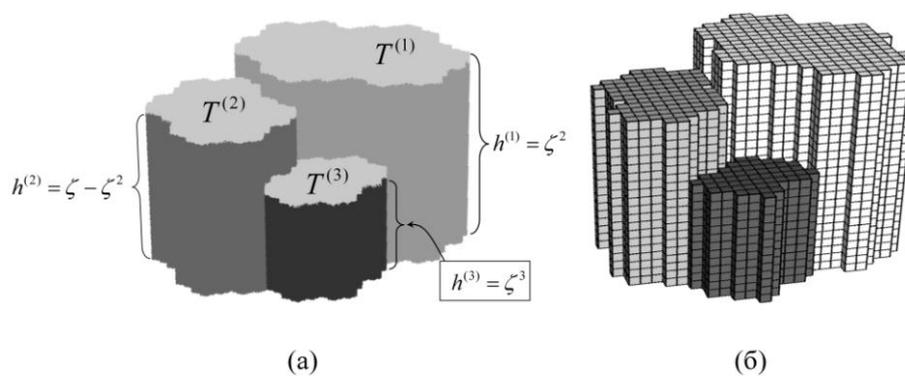


Рис. 7.6. Объединение цилиндров $Cyl = Cyl^{(1)} \cup Cyl^{(2)} \cup Cyl^{(3)}$ (а) и соответствующие им поликубы (б).

В методе дискретного моделирования элементы разбиения или упаковки заменяются их дискретными моделями – в трехмерном случае поликубами. Оси Ox и Oy системы координат, в которой целесообразно рассчитывать поликуб, естественно направить вдоль действительной и мнимой осей комплексной плоскости, в которой задаются фигуры $T^{(m)}$ - основания цилиндров. Тогда вдоль оси Oz будут отложены высоты цилиндров. Так как высоты $h^{(m)}$ рационально независимы, добиться точной пропорциональности высот поликубов высотам цилиндров невозможно. Достаточно хорошее приближение отношениям высот $h^{(m)}$ удается добиться с использованием последовательности Трибоначчи. Так при $n \rightarrow \infty$ отношения $h^{(1)} : h^{(2)} : h^{(3)}$ совпадают с отношениями $t_n : (t_{n-1} + t_{n-2}) : t_{n-1}$. Для $n = 6$ получаем числа 24:20:13. Эти высоты и были использованы для расчета поликуба, аппроксимирующего цилиндры Cyl . Таким образом, в результате был получен поликуб, состоящий из $p = 7270$ кубов (рис. 7.6б).

Очевидно, что из-за неполного соответствия поликуба и объединения цилиндров Cyl вместо разбиения пространства на поликубы следует искать их упаковку с достаточно высоким коэффициентом упаковки. При этом порядок упаковочных пространств N следует подобрать таким, чтобы, с одной стороны, число вариантов упаковок поликуба не было слишком большим, с другой стороны, чтобы вариант, соответствующий искомому разбиению Til^{3D} не был пропущен. В результате нескольких попыток расчета упаковок выбор пал на значение $N = 8560$, что соответствует коэффициенту упаковки $k = \frac{p}{N} \approx 0.85$.

Компьютерные расчеты показывают, что в этом случае существует ровно 9 упаковок поликубов с заданным коэффициентом упаковки. Сечения восьми из них содержат пустоты, сопоставимые по размеру с фигурами двумерного разбиения. Поэтому соответствующие упаковки не могут быть использованы для построения двумерного разбиения Розы. В девятой упаковке пустоты рассредоточены по границам поликубов. Дальнейший анализ показывает, что именно эта упаковка топологически соответствует разбиению Til^{3D} . Отметим, что матрица упаковочного пространства соответствующей упаковке имеет вид

$$\begin{pmatrix} 4280 & 2445 & 2272 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Столбцы матрицы УП образуют один из базисов решетки трансляций упаковки, однако этот базис не удобен для дальнейшей работы, поэтому был выбран другой базис $\mathbf{e}_1 = (-3, 10, -24)$, $\mathbf{e}_2 = (0, -16, -20)$, $\mathbf{e}_3 = (14, -4, -13)$. Для дальнейшего анализа упаковки нужно перейти от системы координат, в которой определено УП, к исходной системе координат, в которой задано объединение цилиндров Cyl . Для получения третьих координат базиса воспользуемся соответствием $24 \rightarrow \zeta^2$, $20 \rightarrow \zeta - \zeta^2$, $13 \rightarrow \zeta^3$. Первые и вторые координаты удает-

ся получить геометрическим сопоставлением соответствующих сечений упаковки поликубов и разбиения Розы Til .

Оказалось, что в этой естественной системе координат выбранный базис решетки трансляций запишется в виде $\mathbf{e}_1 = (\beta^2, -\zeta^2)$, $\mathbf{e}_2 = (\beta - \beta^2, -\zeta + \zeta^2)$, $\mathbf{e}_3 = (\beta^3, -\zeta^3)$. Здесь в записи вектора (c, z) на первом месте стоит комплексное число, что соответствует записи его координат в обычном виде $(\text{Re } c, \text{Im } c, z)$.

7.5. Верхняя граница роста разбиения Розы

В главе 3 доказано, что периодические разбиения имеют многогранную форму роста. Там же рассмотрен алгоритм расчета многогранника роста по заданному графу соседства элементов разбиения. Как показано выше разбиение Розы Til может быть получено как сечение разбиения Til^{3D} координатной плоскостью xOy . При этом две фигуры плоского разбиения являются соседними тогда и только тогда, когда соседними являются содержащие их трехмерные цилиндры. Отсюда вытекает, что многоугольник роста любого двумерного сечения трехмерного разбиения Til^{3D} принадлежит сечению многогранника роста этого разбиения. Поэтому сечение той же плоскостью xOy многогранника роста Pol^{3D} разбиения Til^{3D} можно рассматривать как верхнюю границу многоугольника роста разбиения Розы Til .

Для построения многогранника роста Pol^{3D} необходимо выписать граф соседства цилиндров в разбиении Til^{3D} . С этой целью достаточно проанализировать конечное число слоев упаковки поликубов, соответствующей разбиению Til^{3D} . В таблице 7.5 представлены для каждого из поликубов типы соседних поликубов и индексы их трансляций в базисе упаковочного пространства и в базисе решетки трансляций $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$. Как видно из таблицы в разбиении Til^{3D} цилиндр $Cyl^{(1)}$ имеет 20, цилиндр $Cyl^{(2)}$ - 12, цилиндр $Cyl^{(3)}$ - 6 соседних цилиндров.

Используя полученный граф соседства, по алгоритму, предложенному в главе 3, рассчитывается многогранник роста Pol^{3D} . На рис. 7.7-а изображена проекция этого многогранника вдоль нормали к плоскости сечения. Пунктиром выделен шестиугольник, являющийся сечением многогранника Pol^{3D} плоскостью xOy . На рис. 7.7-б на это сечение многогранника наложен восьмиугольник роста Pol разбиения Розы. Из рисунка видно, что восьмиугольник роста вписан в шестиугольник сечения. Это означает, что для шести из восьми секторов роста ($i = \pm 1, \pm 2, \pm 4$) граница снизу (восьмиугольник роста Pol , определяемый вершинными отображениями) и граница сверху (шестиугольник сечения многогранника роста Pol^{3D}) совпали. Таким образом, в этих шести секторах границу роста следует считать математически строго доказанной. Для оставшихся двух секторов ($i = \pm 3$) верхняя граница остается недоказанной.

Таблица 7.5. Граф соседства в упаковке поликубов, соответствующей периодическому разбиению Til^{3D}

№	Тип соседнего цилиндра	Индексы трансляций в базисе УП	Индексы трансляций в базисе решетки трансляций	№	Тип соседнего цилиндра	Индексы трансляций в базисе УП	Индексы трансляций в базисе решетки трансляций
Соседство цилиндра $Cyl^{(1)}$							
1	1	-3, 10, -24	1, 0, 0	11	2	3, -26, 4	-1, 1, 0
2	2	0, -16, -20	0, 1, 0	12	1	14, 12, 7	0, -1, 1
3	3	14, -4, -13	0, 0, 1	13	2	17, -14, 11	-1, 0, 1
4	2	0, 0, 0	0, 0, 0	14	3	17, -14, 11	-1, 0, 1
5	3	0, 0, 0	0, 0, 0	15	1	-14, 4, 13	0, 0, -1
6	2	14, -4, -13	0, 0, 1	16	2	-11, -22, 17	-1, 1, -1
7	1	14, -4, -13	0, 0, 1	17	1	0, 16, 20	0, -1, 0
8	1	0, -16, -20	0, 1, 0	18	1	3, -10, 24	-1, 0, 0
9	1	-14, -12, -7	0, 1, -1	19	2	3, -10, 24	-1, 0, 0
10	2	-14, -12, -7	0, 1, -1	20	3	3, -10, 24	-1, 0, 0
Соседство цилиндра $Cyl^{(2)}$							
1	1	-3, 10, -24	1, 0, 0	7	2	14, -4, -13	0, 0, 1
2	1	0, 0, 0	0, 0, 0	8	1	14, 12, 7	0, -1, 1
3	3	0, 0, 0	0, 0, 0	9	3	14, 12, 7	0, -1, 1
4	1	-17, 14, -11	1, 0, -1	10	1	-14, 4, 13	0, 0, -1
5	1	-3, 26, -4	1, -1, 0	11	2	-14, 4, 13	0, 0, -1
6	1	11, 22, 7	1, -1, 1	12	1	0, 16, 20	0, -1, 0
Соседство цилиндра $Cyl^{(3)}$							
1	1	-3, 10, -24	1, 0, 0	4	1	-17, 14, -11	1, 0, -1
2	1	0, 0, 0	0, 0, 0	5	2	-14, -12, -7	0, 1, -1
3	2	0, 0, 0	0, 0, 0	6	1	-14, 4, 13	0, 0, -1

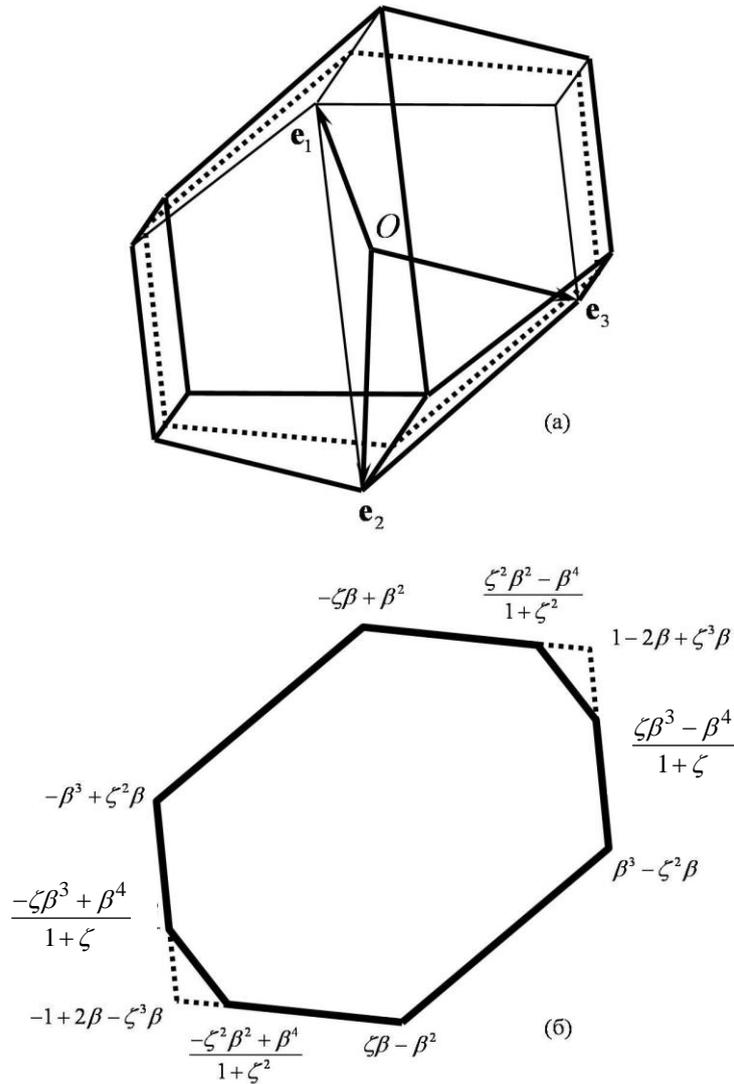


Рис. 7.7. Сечение многогранника роста Pol^{3D} периодического разбиения Til^{3D} (а) и сопоставление этого сечения с многоугольником роста Pol разбиения Розы (б).

7.6. Квазипериодическое разбиение Ито-Оцуки и его рост

В данном параграфе мы рассмотрим еще одно квазипериодическое разбиение, иногда называемое разбиением Ито-Оцуки.

Конструкция, предложенная в подходе Ито и Оцуки [130], может быть представлена следующим образом. Рассмотрим нормальное трехмерное разбиение T^3 пространства на единичные кубы. Вершины всех кубов разбиения образуют целочисленную решетку с базисом $\mathbf{e}_1 = (1,0,0)$, $\mathbf{e}_2 = (0,1,0)$, $\mathbf{e}_3 = (0,0,1)$. Выберем три числа a , b , c , линейно независимые над полем рациональных чисел и удовлетворяющие условию $0 < a < b < c$, а также произвольное действительное число h . Для каждого куба из T^3 выделим одну его вершину, так что вектор, соединяющий эту вершину с центром куба, равен вектору $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2},$

$\frac{1}{2}$). Назовем эту вершину помеченной точкой куба. Координатами куба будем считать координаты его помеченной точки. Так, например, целочисленные координаты $(0,0,0)$ имеет куб $\{\lambda_1 \mathbf{e}_1 + \lambda_2 \mathbf{e}_2 + \lambda_3 \mathbf{e}_3 : \text{все } \lambda_i \in [0,1)\}$. Рассмотрим плоскость P с уравнением $ax+by+cz+h=0$, а также множество S кубов, целиком находящихся не выше этой плоскости, то есть в полупространстве $ax+by+cz+h \leq 0$. Граница B множества S представляет собой некоторую поверхность, составленную из граней кубов. Множество B называют ступенчатой поверхностью или дискретной плоскостью.

Можно показать, что куб с отмеченной точкой (p,q,r) принадлежит ступенчатой поверхности тогда и только тогда, когда выполняются неравенства $0 < ap+bq+cr+h \leq a+b+c$. Рассмотрим отображение π , представляющее собой ортогональное проектирование из трехмерного пространства на плоскость P_0 с уравнением $x+y+z=0$. Пусть π_1, π_2, π_3 - образы базисных векторов $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$, соответственно, при этой проекции. Тогда $\pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 0$ и пара векторов π_1, π_2 порождает гексагональную решетку Γ в плоскости P_0 . Оказывается, что множество отмеченных вершин из дискретной плоскости B проецируется во множество узлов решетки Γ . Более того, порождаемое проекцией соответствие является взаимно-однозначным. Оно задается следующими формулами:

$$(p, q, r) \in B \rightarrow (p-r)\pi_1 + (q-r)\pi_2 \in \Gamma,$$

$$m\pi_1 + n\pi_2 \in \Gamma \rightarrow (m, n, 0) + \left(1 - \left\lfloor \frac{am+bn+h}{a+b+c} \right\rfloor\right)(1,1,1) \in B,$$

где $\lfloor x \rfloor$ – наименьшее целое число, не меньшее x . Отсюда вытекает, что при проектировании π разные точки ступенчатой поверхности B проецируются в разные точки плоскости P_0 . Соответственно, проекция $\pi(B)$ представляет собой разбиение $Til(a,b,c,h)$ плоскости P_0 .

Из линейной независимости чисел a, b, c над полем рациональных чисел вытекает квазипериодичность разбиения $Til(a,b,c,h)$.

Замечание. Если бы числа a, b, c были линейно зависимы над полем рациональных чисел, то разбиение $Til(a,b,c,h)$ имело бы одно- или двумерную решетку трансляций.

На рис.7.8 представлен фрагмент квазипериодического разбиения плоскости $Til(a,b,c,h)$ для коэффициентов $a=1; b=\sqrt{2}; c=\sqrt{3}; h=0.1$.

Теорема 7.2. Разбиения $Til(a,b,c,h)$ имеют самоподобный рост с ограниченным радиусом окрестности, то есть

$$eq(n, Til(p,q)) \subseteq (n \cdot Pol(a,b,c))_c$$

с константой $c=c(p,q)$, не зависящей от n . Форма роста $Pol(a,b,c)$ – выпуклый центрально симметричный многоугольник, не зависящий от h . Координаты его вершин вычисляются по формулам $\pm\left(\frac{b}{a+b}, \frac{-a}{a+b}\right), \pm\left(1, \frac{a}{a+c}\right)$ и

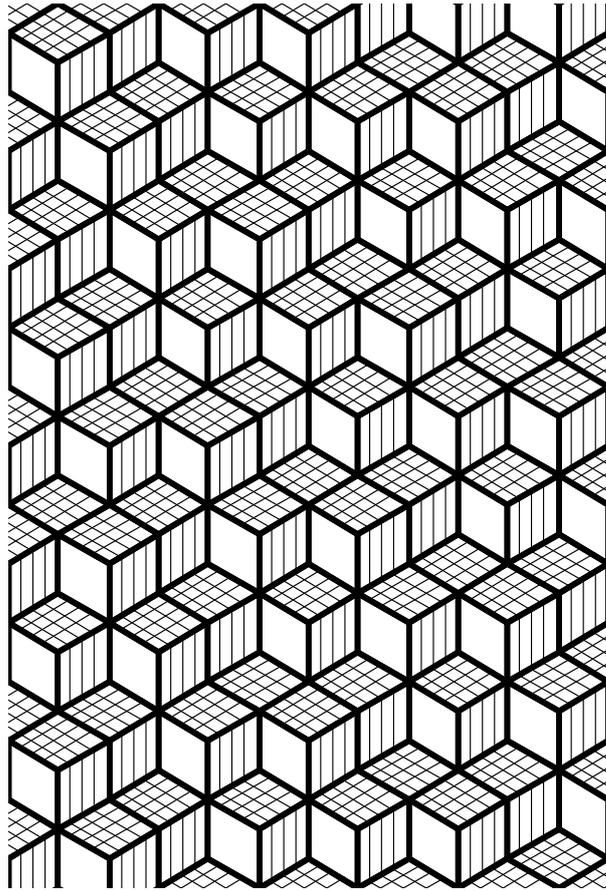


Рис. 7.8. Фрагмент квазипериодического разбиения $Til(a, b, c, h)$ для коэффициентов $a = 1; b = \sqrt{2}; c = \sqrt{3}; h = 0.1$.

$$\pm \left(\frac{b}{b+c}, 1 \right).$$

Доказательство нижней границы, так же как и в случае разбиения Розы, основывается на явном построении аппроксимационных цепей при помощи аналога вершинных геодезических отображений. При этом используется полученная в [131] сильная параметризация разбиений Ито-Оцуки.

Доказательство верхней границы также как и для обобщенных разбиений Розы использует переход в трехмерное пространство. Вновь обратимся к нормальному разбиению T^3 трехмерного пространства на единичные кубы. Рассмотрим множество всех граней всех кубов, входящих в это разбиение. Две грани будем считать соседними, если они имеют общее ребро. Получаем периодическую структуру с отношением соседства. На ней можно определить процесс послойного роста, аналогично тому, как это делается для разбиения. Формой роста является единичный октаэдр в трехмерном пространстве, натянутый на векторы $\pm \mathbf{e}_1, \pm \mathbf{e}_2, \pm \mathbf{e}_3$. Рассмотрим сечение этого октаэдра плоскостью $ax + by + cz = 0$ и ортогональную проекцию этого сечения на плоскость $x + y + z = 0$. Оказывается, что построенный таким образом многоугольник в точности совпадает с $Pol(a, b, c)$.

7.7. Послойный рост квазипериодических разбиений и функция сложности

Согласно одному из определений, квазикристаллом называется (r, R) -система Делоне, не имеющая трансляционной симметрии, но дающая дифракционную картину с брэгговскими максимумами. Существование у данной системы чисто точечного спектра обусловлено ее конечной локальной сложностью, то есть наличием у нее конечного числа различных локальных конфигураций [132]. Это в свою очередь свидетельствует, что в какой-то степени трансляционный порядок в таких системах есть. Количественной характеристикой трансляционного порядка в непериодических структурах может выступать функция сложности (complexity function).

Короной радиуса n (n -короной) фигуры X разбиения Til назовем объединение первых n ее координационных окружений:

$$C_n(X) = X \cup \bigcup_{i=1}^n q_i(X).$$

Корону $C_n(X)$ можно также определить как множество всех фигур разбиения, находящихся от данной фигуры на расстоянии, не превышающем n . Две короны $C_n(X)$ и $C_n(Y)$ будем называть эквивалентными, если существует вектор \mathbf{z} такой, что $C_n(X) = C_n(Y) + \mathbf{z}$. Пусть $c(n)$ – число классов эквивалентности корон радиуса n . Функция $c(n)$ называется функцией сложности разбиения Til .

Очевидно, что для периодических разбиений $c(n) = const$ для $n \geq n_0(Til)$. С другой стороны, для полностью случайных разбиений функция $c(n)$ имеет экспоненциальный рост, или даже равна бесконечности для всех n . Изучение функции $c(n)$ мотивировано, в частности, известной гипотезой, связывающей порядок роста функции $c(n)$ со структурой группы трансляций разбиения Til [133].

На основе сильной параметризации обобщенных разбиений Розы и разбиений Ито-Оцуки удается доказать следующую теорему.

Теорема 7.3 Пусть Til – обобщенное разбиение Розы или разбиение Ито-Оцуки. Тогда в нем можно эффективно определить конечное множество тайлов $Nucl$, для которого справедливы следующие утверждения.

1. Имеет место равенство

$$c(n) = \#C_n(Nucl) \text{ для всех } n = 0, 1, 2, \dots,$$

где правая часть есть количество фигур в n -короне $C_n(Nucl)$ ядра разбиения Розы $Nucl$.

2. Разные фигуры T из n -короны $C_n(Nucl)$ имеют разные, с точностью до параллельного переноса, n -короны $C_n(T)$ и, таким образом, n -корона $C_n(Nucl)$ содержит представителей всех фигур T из Til , которые порождают все $c(n)$ различных n -корон $C_n(T)$ в разбиении Til .

Доказательство теоремы и ее приложение к вычислению параметров различных типов n -корон может быть найдено в [134, 135].

Простейшее применение теоремы 7.3 для разбиения Розы $Til(1,1)$ иллюст-

рирует рис. 7.9. Так 1-корона $C_1(Nucl)$ содержит 11 фигур, поэтому при $n=1$ значение функции сложности $c(1)=11$, а все возможные 1-короны в разбиении R можно построить на основе фигур, входящих в 1-корону $C_1(Nucl)$. На рис. 7.9 представлен фрагмент разбиения Розы, содержащий 2-корону $C_2(Nucl)$. Белой линией выделена 1-корона $C_1(Nucl)$. Для каждой из 11 фигур T_i этой 1-короны отдельно вынесена ее 1-корона $C_1(T_i)$.

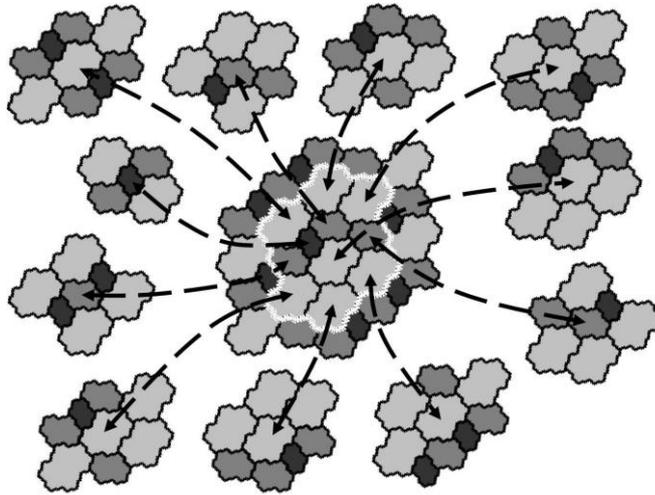


Рис. 7. 9. Одиннадцать различных 1-корон $C_1(Til(1,1))$ в разбиении Розы и порождающая их 1-корона $C_1(Nucl)$

ГЛАВА 8. Координационные числа

8.1. Асимптотические формулы для координационных чисел

Важной характеристикой послойного роста любой структуры являются числа элементов в координационных окружениях $eq(a, n)$. Эти числа обычно называют координационными числами. Мы будем обозначать их $\#eq(a, n)$.

Вначале рассмотрим поведение координационных чисел, когда число слоев $n \rightarrow \infty$. В работе [86] для $m = 2$ получена следующая теорема.

Теорема 8.1. Пусть G - периодический граф в \mathbb{R}^m , a - некоторая его вершина, $\Delta n \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$. Тогда для среднего числа вершин в n -ом координационном окружении справедлива асимптотическая формула:

$$\frac{1}{\Delta n} \sum_{n-\Delta n \leq k \leq n} \#eq(a, k) = m \frac{f |Pol_G|}{|F|} n^{m-1} + O\left(\frac{n^{m-1}}{\Delta n}\right), \quad (8.1)$$

где $|Pol_G|$ - площадь многоугольника роста графа G , f и $|F|$ - число вершин графа в фундаментальной области решетки трансляций и площадь этой фундаментальной области.

Отметим, что число

$$td(G) = \frac{f |pol_G|}{|F|},$$

возникающее в формуле (8.1) совпадает с так называемой точной топологической плотностью графа, определяемой равенством

$$td(G) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n^m} \sum_{k \leq n} \#eq(a, k).$$

Перейдем к доказательству теоремы 8.1.

Пусть G - периодический граф в \mathbb{R}^m . Возьмем какую либо вершину a_i из фундаментальной области $F = \mathbb{R}^m / L$ и сдвинем ее $L_i = L + a_i$ на все векторы из решетки периодов L . Поскольку L_i - решетка, и полоса конечной ширины вокруг многогранника $n \cdot Pol_G$ содержит $O(n^{m-1})$ вершин L_i , то множество $S_i(a, n) = L_i \cap (n \cdot Pol_G + a)$ содержит число вершин равное $|S_i(a, n)| = \frac{|Pol_G|}{|F|} n^m + O(n^{m-1})$. Объединение $S(a, n)$ всех множеств $S_i(a, n)$ для

$a_i \in F$ совпадает с множеством вершин графа a в многограннике $n \cdot Pol_G + a$ и

$$S(a, n) = \frac{f |Pol_a|}{|F|} n^m + O(n^{m-1})$$

Рассмотрим кольцо $S(a; n_1; n) = S(a; n) \setminus S(a; n_1)$ ограниченное многогранниками $n_1 \cdot Pol_G + a$ и $n \cdot Pol_G + a$ с $0 \leq n_1 \leq n$. Тогда

$$S(a; n_1; n) = \bigcup_{n^+_{i_1} \leq k \leq n^-} eq(a; k) \cup R(n_1) \cup R(n)$$

Здесь $n^\pm = n \pm c_a$ с некоторой константой $c_a > 0$. Множество

$R(n) = \bigcup_{n^- < k \leq n^+} (eq(a; k) \cap S(a_i; n_1; n))$ есть объединение координационных окружений, частично входящих в кольцо $S(a; n_1; n)$. Множество $R(n_1)$ определяется аналогично. Ясно, что $|eq(a; k)| = O(n^{m-1})$. Поэтому $\sum_{n_i^+ \leq k \leq n^-} \#eq(a, k) = |S(a; n_1; n)| + O(n^{m-1})$, откуда и следует требуемый результат.

Можно также доказать, что для периодического графа G точная топологическая плотность $td(G)$ является рациональным числом и удовлетворяет неравенству $td(G) \leq 2^m f$.

Для непериодических упаковок, разбиений и графов строгое доказательство аналога теоремы 8.1 требует строго доказанной теоремы о существовании формы роста. При этом представляет интерес тот факт, что во всех рассматривавшихся выше случаях (модельные случайные графы, 1-периодические графы $G_{L,p}$, обобщенные разбиения Розы, разбиения Ито-Оцуки) справедлив более сильный асимптотический результат:

$$\#eq(a, n) = 2td(G)n + o(n),$$

то есть асимптотическая формула для одного координационного окружения, а не для усреднения по растущему числу координационных окружений.

Для модельных случайных графов и для 1-периодические графы $G_{L,p}$ точная топологическая плотность в точности совпадает с площадью множества, ограниченного кривой роста.

В случае классического разбиения Розы можно получить формулу

$$td(Til(1,1)) = \frac{1}{2}(5 + 2\zeta + 5\zeta^2),$$

где ζ – единственный вещественный корень кубического уравнения $x^3 + x^2 + x = 1$.

Для разбиений Ито-Оцуки можно доказать, что

$$td(Til(a,b,c,h)) = 2 \left(1 + \frac{abc}{(a+b)(b+c)(c+a)} \right).$$

При этом выполняется неравенство $2 < td(Til(a,b,c,h)) < 2.25$ при любых a, b, c, h .

8.2. Точные формулы в периодическом случае

В периодическом случае координационные числа подчиняются ряду интересных закономерностей, а их поведение может быть описано в виде явных формул.

Теорема 8.2. Пусть G - периодический граф в \mathbb{R}^m , a – некоторая его вершина. Тогда существуют числа $K, a_{ij}, 0 \leq i \leq m, 0 \leq j \leq k$ (зависящие от a) такие, что если $n \equiv k \pmod{K}$, то

$$\#eq(a, n) = a_{m-1,k} n^{m-1} + a_{m-2,k} n^{m-2} + \dots + a_{2k} n + a_{0k}$$

для всех достаточно больших n .

На рисунке 8.1(б) изображено поведение координационных чисел для сетки Лавеса L3C, изображенной на рисунке 8.1(а).

В этом случае координационные числа лежат на четырех прямых, задаваемых формулами

$$\#eq(a,n) = \begin{cases} (5n + 11)/2, n \equiv 1(\text{mod } 4) \\ (9n + 30)/4, n \equiv 2(\text{mod } 4) \\ 2n + 8, n \equiv 3(\text{mod } 4) \\ (9n + 24)/2, n \equiv 0(\text{mod } 4) \end{cases}$$

Для простоты, проиллюстрируем основные идеи, приводящие к теореме

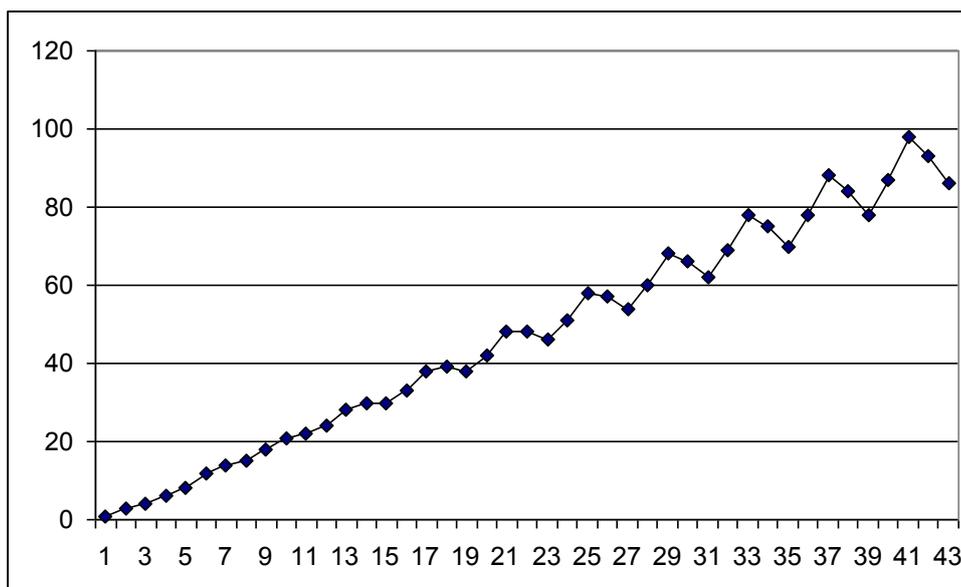
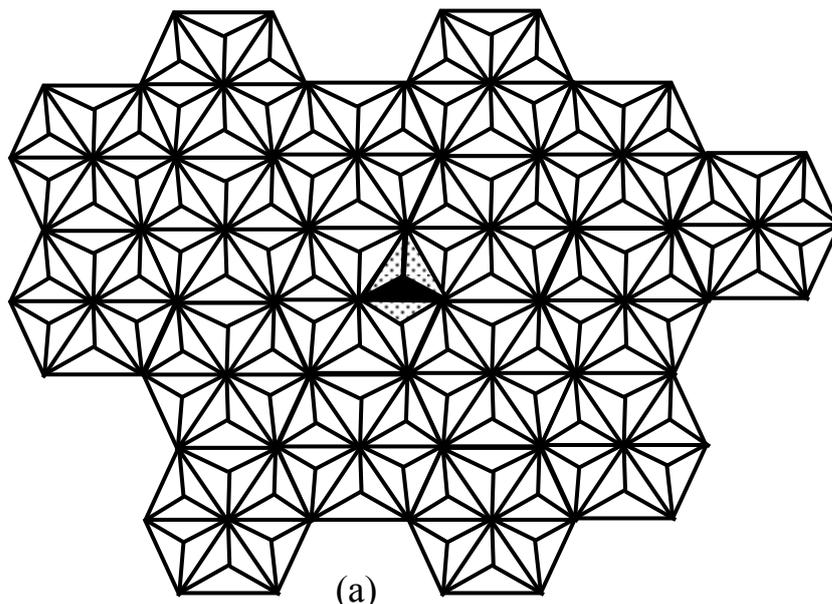


Рис. 8.1. Сетка Лавеса L3C и ее координационные числа.

8.2 в частном случае *Cst*-однородных графов, то есть графов, из каждой вершины которых выходят все когерентные цепи. Эти идеи впервые были изложены в работе [81] на примере графов кристаллографических групп.

В этом случае любая цепь из вершины a в вершину $a' \in eq(a; n) \cap Sec(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_m)$ имеет вид:

$$\Gamma: \Gamma_1 \rightarrow x_1 p_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_m p_m,$$

где p_i – цепь звезды St_G , а $|\Gamma_1| \leq f$. Следовательно $x_1 |p_1| + \dots + x_m |p_m| = n - i, i = |\Gamma_1|$. Введем функцию $r(a_1, \dots, a_m, n)$ – число решений уравнения

$$a_1 x_1 + \dots + a_m x_m = n$$

в целых неотрицательных числах x_1, \dots, x_m . При фиксированной цепи Γ_1 число цепей вида $x_1 p_1 \rightarrow \dots \rightarrow x_m p_m$ равно $r(|p_1|, \dots, |p_m|, n - i)$. Пусть $\tilde{\gamma}_i^{a, Sec}$ число цепей Γ_1 длины $i < f$, с началом в a , ведущих в различные вершины сектора $Sec = Sec(\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_m)$ (равное числу вершин $eq(a, i)$ в соответствующем секторе). Тогда:

$$\#eq(a, n) \cap Sec = \sum_{i=0}^{f-1} \tilde{\gamma}_i^{a, Sec} r(|p_1|, \dots, |p_m|, n - i)$$

Производя суммирование по всем секторам, получаем формулу:

$$\#eq(a, n) = \sum_{i_1, \dots, i_m} \sum_{j=0}^{f-1} \tilde{\gamma}_j^{a, Sec(p_{i_1}, \dots, p_{i_m})} r(|p_{i_1}|, \dots, |p_{i_m}|, n - j) \quad (8.2)$$

Однако некоторые вершины будут подсчитаны несколько раз. Это будут вершины находящиеся на гранях многогранника роста Pol_G , размерности меньшей $m-1$. Аналогичным методом можно подсчитать число вершин на этих гранях и ввести в формулу поправочный член. Данная поправка имеет вид нескольких сумм вида (8.2) суммируемых по известной комбинаторной формуле включения-исключения.

Для окончательного доказательства теоремы 8.2 необходимо воспользоваться следующим свойством функции $r(a_1, \dots, a_m, n)$ [136, 137]:

Пусть $A = НОК(a_1, \dots, a_m)$, тогда функция $r(a_1, \dots, a_m, An + b)$ ($0 \leq b < A$) является многочленом степени $m-1$ относительно n .

Отметим, что функция $r(a_1, \dots, a_m, n)$ обладает еще рядом интересных свойств. В частности для ее производящей функции справедливо соотношение

$$\sum_{n=1}^{\infty} r(a_1, \dots, a_m, n) t^n = \frac{1}{(1 - t^{a_1}) \dots (1 - t^{a_m})}$$

Данное соотношение позволяет получать формулы и для производящей функции $\sum_{n=1}^{\infty} \#eq(a, n) t^n$ в случае периодических графов.

8.3. Координационные числа квазипериодических разбиений

В случае квазипериодических разбиений Розы и Ито-Оцуки представляют интерес отклонения $r(n) = \#eq(a, n) - 2td(Til)n$. Данные отклонения имеют

крайне нетривиальную структуру и обладают свойствами квазипериодичности [131, 138].

На рисунке 8.2 изображен график функции $r(n)$ в случае классического разбиения Розы $Til(1,1)$.

Многоугольник роста Pol разбивает всю плоскость на несколько секторов. При этом определены секторные координационные числа $\#eq_i(a,n)$, равные числу тайлов из $eq(a,n) \cap Sec_i$. Для них справедливы асимптотические формулы вида $\#eq_i(a,n) = c_i(n)n + o(n)$ и определены секторные отклонения $r_i(n) = \#eq_i(a,n) - c_i n$. Отклонения $r_i(n)$ ведут себя существенно более регулярным образом, чем суммарное отклонение $r(n) = \sum_i r_i(n)$.

В случае разбиения Розы многоугольник роста разбивает плоскость на 4 пары центрально симметричных секторов. При этом $|r_4(n)| \leq C$ с независимой от n постоянной C . Графики функций $r_i(n)$ для $i = 1, 2, 3$ изображены на рис. 8.3.

Аналогичное поведение функций $r_i(n)$ можно наблюдать и для обобщенных разбиений Розы, а также для разбиений Ито-Оцуки.

Причиной такого поведения секторных отклонений $r_i(n)$ является существование параметризаций секторных слоев $eq_i(a,n)$, во многом аналогичных описанным в главе 7 вершинным геодезическим отображениям. При этом параметризации оказываются изоморфными интегральным преобразованиям от поворотов окружности на углы некоторые α_i .

Используя компьютерный эксперимент и применяя методы теории чисел, удается установить следующие свойства секторных отклонений $r_i(n)$:

- 1) *Неограниченный рост* $r_i(n) \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$.
- 2) *Квазипериодичность*. Пусть $r_i^+(n)$ и $r_i^-(n)$ соответственно возможные максимальное и минимальное значения отклонений $r_i(n)$. Тогда существует бесконечная последовательность квазипериодов $P_k^{(i)}$, для которых $|r_i^\pm(n + P_k^{(i)}) - r_i^\pm(n)| \leq 3$ для всех n . Таким образом, функции $r_i(n)$ очень близки к периодическим. Однако свойство неограниченного роста исключает возможность существования чистых периодов функции $r_i(n)$. Квазипериоды $P_k^{(i)}$ могут быть вычислены по формуле $P_k^{(i)} = C^{(i)} Q_k(\alpha_i)$. Здесь $Q_k(\alpha_i)$ - знаменатель k -ой подходящей дроби к углу поворота окружности α_i , эффективно вычисляемый по разложению α_i в цепную дробь.
- 3) *Рост амплитуды*. Пусть $A_k^{(i)}$ разность между максимальным и минимальным значениями функции $r_i(n)$ при $1 \leq n \leq P_k^{(i)}$. Тогда $A_k^{(i)}$ растет как сумма неполных частных разложения α_i в цепную дробь. Точнее, справедливы

неравенства $C_1^{(i)}(k + \sum_{j=1}^k q_j(\alpha_i)) \leq A_k^{(i)} \leq C_2^{(i)}(k + \sum_{j=1}^k q_j(\alpha_i))$, где $q_j(\alpha_i)$ - j -ое неполное частное разложения α_i в цепную дробь. Здесь $C_j^{(i)}$ - некоторые величины, не зависящие от n и k .

4) *Форма графика.* Если $1 \leq n \leq P_k^{(i)}$, то точки графика функции $r_i(n)$ располагаются в некотором параллелограмме, одна из диагоналей которого лежит на ось абсцисс и совпадает по длине с квазипериодом $P_k^{(i)}$. При этом точки графика сгущаются в некоторой полосе ширины $A_{k-1}^{(i)}$ вдоль границы параллелограмма и равномерно распределены в оставшейся части параллелограмма.

Следует заметить, что квазипериодичность огибающих, ограничивающих $r_i(n)$ сверху и снизу проявляется лишь при наличии больших неполных частных $q_k(\alpha_i)$. Так, в случае разбиения Розы, угол поворота α_1 имеет разложение в цепную дробь

$$\alpha_1 = [0; 1, 5, 4, 2, 305, 1, 8, 2, 1, 4, 6, 14, 3, 1, 13, \dots].$$

В разложении выделяется большое неполное частное $q_5 = 305$, которому отвечает знаменатель подходящей дроби $Q_5 = 17105$. Тогда, учитывая, что $C^{(i)} = 1$, получаем, что заметный квазипериод для отклонений в первом секторе составляет $P_5^{(1)} = 17105$.

Литература

- ¹ Современная кристаллография. Т. 3. Образование кристаллов. Ред. А.А. Чернов, М.: Наука, 1980. 408 с.
- ² Gibbs I.W. On the equilibrium of heterogeneous substances. Leipzig, 1892.
- ³ Curie P. Sur la formation des cristaux et sur les constantes capillaires de leur différentes faces. // *Bull. Soc. mineral. France*, 1885, **18**, 145.
- ⁴ Вульф Г.В. К вопросу о скоростях роста и растворения кристаллических граней. / Избранные работы по кристаллофизике и кристаллографии., М.: Изд. АН СССР, 1952.
- ⁵ Bravais A. Etudes Crystall-ographiques. Academie des Sciences, Paris, 1913.
- ⁶ Donnay J. D. H., Harker D. A new law of crystal morphology, extending the law of Bravais. // *Am. Mineral.*, **22**, 446-467.
- ⁷ Kossel W. Zur Theorie des Kristallwachstums. // *Nachr. Ges. Wiss. Göttingen*, 1927, **206**, 135-143.
- ⁸ Stranski I. N. Zur Theorie des Kristallwachstums. // *Z. Phys. Chem.*, 1928, **136**, 259-278.
- ⁹ Volmer M. Zur Problem des Kristallwachstums. // *Z. phys. Chem.*, 1922, **102**, 267-275.
- ¹⁰ Volmer M., Adhikari G. Nachweis und Messung der Diffusion von adsorbierten Moleculen und Oberflächen fester Körper. // *Z. phys. Chem.*, 1926, **119**, 46-52.
- ¹¹ Френкель Я.И. О поверхностном ползании частиц у кристаллов и естественной шероховатости кристаллических граней. // *ЖЭТФ*, 1946, **16**, 39-44.
- ¹² Бартон В., Кабрера Н. Новые исследования по кристаллографии и кристаллохимии. Сб. 1. Рост кристаллов. / Ред. Г.Б.Бокий, М.: Иностран. лит., 1950.
- ¹³ Бартон В., Кабрера Н., Франк Ф. Элементарные процессы роста кристаллов. / Ред. Г.Г.Лемлейн, А.А.Чернов., М.: Иностран. лит., 1959.
- ¹⁴ Hartman P. Structure and morphology. In *Crystal Growth: an introduction.* / Ed. P. Hartman, Amsterdam, London: North Holland., 1973, 367-402.
- ¹⁵ Bennema P. Handbook of Crystal Growth, edited by D. T. J. Hurle, Amsterdam: Elsevier, 1993, Vol. 1A, 477-581.
- ¹⁶ Рашкович Л.Н., Гвоздев Н.В. Яминский И.В. Механизм движения ступеней при кристаллизации лизоцима. // *Кристаллография*, 1998, **41**, 745-750.
- ¹⁷ Рашкович Л.Н., Де Юрео Д.Д., Орм К.А., Чернов А.А. *In situ* атомно-силовая микроскопия послойного роста кристаллов и ключевые концепции роста. // *Кристаллография*, 2006, **51**, 1240-1252.
- ¹⁸ Chernov A. A. Formation of crystals in solutions. // *Contemp. Phys.*, 1989, **30**, 251-276.
- ¹⁹ Chernov A. A. Present-day understanding of crystal growth from aqueous solutions. // *Prog. Cryst. Growth Charact.*, 1993, **26**, 121-151.
- ²⁰ Chernov A.A. Crystal growth science between the centuries. // *J. Mater. Sci: Mater. in Electronics.*, 2001, **12**, 437-449.
- ²¹ Cuppen H.M., Meekes H., van Enkevort W.J.P., Vissers G.W.M., Vlieg E. Kinetic roughening of Kossel and non-Kossel steps. // *Surf. Sci.*, 2004. **569**, 33-46.

-
- ²² Cuppen H.M., Meekes H., van Enkevort W.J.P., Vlieg E. Kink incorporation and step propagation in a non-Kossel model. // *Surf. Sci.*, 2004, **571**, 41-62.
- ²³ Eden M. A probabilistic model for morphogenesis. // *Symposium on Information Theory in Biology*, New York: Pergamon Press, 1958, 359-370.
- ²⁴ Eden. M. A two-dimensional growth process. In Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematics, Statistics, and Probability. / Eds. F. Neyman. // University of California Press, Berkeley, CA, 1961, 223-239.
- ²⁵ Richardson D. Random growth in a tessellation. // *Proc. Cambridge Philosophical Society*, 1973, **74**, 515-528.
- ²⁶ Freche P., Stauffer D., Stanley H.E. Surface structure and anisotropy of Eden clusters. // *Journal of Physics, Section A*, 1985, **18**, L1163-L1168.
- ²⁷ Hermann H.J. Geometrical cluster growth models and kinetic gelation. // *Physics Reports*, 1986, **136**, 153-227.
- ²⁸ Williams T., Bjercknes R. Stochastic model for abnormal clone spread through epithelial basal layer. // *Nature*, 1972, **236**, 19-21.
- ²⁹ Wolfram S. Cellular automata as models of complexity. // *Nature*, 1984, **311**, 419-424.
- ³⁰ Durrett R. On the growth of one-dimensional contact processes. *The Annals of Probability*, 1980, **8**, 890-907.
- ³¹ Griffeath D. The basic contact process. // *Stochastic Processes and their Applications*, 1981, **11**, 151-185.
- ³² Bezuidenhout C., Grimmett G. The critical contact process dies out. // *The Annals of Probability*, 1990, **18**, 1462-1482.
- ³³ Vicsek T. Fractal Growth Phenomena. World Scientific, Singapore, 1992.
- ³⁴ Grimmett G. Percolation. Springer-Verlag, New York, 1989.
- ³⁵ Wolfram S. Theory and Applications of Cellular Automata. World Scientific, Singapore, 1986.
- ³⁶ Schrandt R.G., Ulam S. On recursively defined geometrical objects and patterns of growth. Technical Report LA-3762, Los Alamos Scientific Laboratory, University of California, 1967. Reprinted in A.R. Bednarek and F. Ulam, editors, *Analogies between Analogies. The Mathematical Reports of S.M. Ulam and his Los Alamos Collaborators*, Chapter 12, University of California Press, Berkeley, CA, 1990.
- ³⁷ Conway J. Winning Ways for Mathematical Plays. Academic Press, London, 1985.
- ³⁸ Serra J. Image Analysis and Mathematical Morphology. Academic Press, London, 1982.
- ³⁹ Prusinkiewicz P., Hanan J., Lindenmayer A. Systems, Fractals, and Plants. Springer-Verlag, New York, 1989.
- ⁴⁰ Prusinkiewicz P., Lindenmayer A. The Algorithmic Beauty of Plants. Springer-Verlag, New York, 1990.
- ⁴¹ Ortega J.M., Poole W.G. Jr. Numerical Methods for Differential Equations. Pitman, Marshfield, MA, 1981.
- ⁴² Thompson S.F. Growth models for shapes. University of Maryland, College Park, 1994, MD 20742-3275.

-
- ⁴³ Hammersley J. M., Welsh J. A. First passage percolation, subadditive processes, stochastic networks, and generalized renewal theory. In Bernoulli-Bayes-Laplace Anniversary Volume., Eds. J. Neyman and L. Le Cam, Springer, Berlin. 1965.
- ⁴⁴ Cox J.T., Durrett R. Same limit theorems for percolation processes with necessary and sufficient conditions. // *The Annals of Probability*, 1981, **9**, 583-603.
- ⁴⁵ Kesten H. Aspects of first-passage percolation. In Exole d'Eté de probabilités de Sait-Flour XIV. // *Lecture Notes in Math.*, Springer, New York, 1986, **1180**, 125-264.
- ⁴⁶ Bovin D. First passage percolation: the stationary case. // *Probab. Theory Related Filds*, 1990, **86**, 491-499.
- ⁴⁷ Häggström O., Meester R. Asymptotic shapes for stationary first passage percolation. // *The Annals of Probability*, 1995, **23**, 1511-1522.
- ⁴⁸ Durrett R., Liggett T. The shape of the limit set in Richrsrdson's growth model. // *The Annals of Probability*, 1981, **9**, 186-193.
- ⁴⁹ Seppäläinen T. Exact limiting shape for a simplified model of first-passage percolation on the plane. // *The Annals of Probability*, 1998, **26**, 1232–1250.
- ⁵⁰ Gravner J., Griffeath D. Threshold growth dynamics. // *Trans. Amer. Math. Soc.*, 1993, **340**, 837–870.
- ⁵¹ Gravner J., Griffeath D. First passage times for discrete threshold growth dynamics. // *The Annals of Probability*, 1996, **24**, 1752-1778.
- ⁵² Gravner J., Griffeath D. Multitype threshold voter model and convergence to Poisson–Voronoi tessellation. // *Ann. Appl. Probab.*, 1997, **7**, 615-647.
- ⁵³ Gravner J., Griffeath D. Random growth models with polygonal shapes. // *The Annals of Probability*, 2006, **34**, 181-218.
- ⁵⁴ Brunner G.O., Laves F. Zum Problem der Koordinationszahl. // *Wiss. Z. Tech. Univ. Dresden*, 1971, **20**, 387-390.
- ⁵⁵ Ibragimov B.T., Talipov S.A., Zorky P.M. Inclusion Complexes of the Natural Product Gossypol. // *Supramolecular Chemistry*, 1994, **3**, 147-165
- ⁵⁶ Fischer W., Koch E. Geometrical packing analysis of molecular compounds. // *Z. Kristallogr.*, 1979, **150**, 245-260
- ⁵⁷ Панов В.Н., Потехин К.А., Стручков Ю.Т., Шишкина И.Н., Демьянович В.М., Зефиоров Н.С. Молекулярная и кристаллическая структура (S,S)-[o-(α-диметиламиноэтил)фенил]фениларилкарбинолов. // *Кристаллография*, 2000, **45**, 662-668.
- ⁵⁸ Блатов В.А., Шевченко А.П., Сережкин В.Н. TOPOS – комплекс программ для анализа топологии кристаллических структур. // *Ж. структурной химии*, 1993, **34**, 183-185.
- ⁵⁹ Meier W.M., Möck H. J. The Topology of Three-Dimensional 4-Connected Nets: Classification of Zeolite Framework Types Using Coordination Sequences. // *J. Solid State Chem.*, 1979, **27**, 349-355.
- ⁶⁰ Atlas of Zeolite Structure Types. 4th ed., Eds. W.M.Meier, D.H.Olson, C. Baerlocher. Amsterdam: Elsevier, 1996.
- ⁶¹ Fischer W. Existenzbedingungen homogener Kugelpackungen zu kubischen Gitterkomplexen mit weniger als drei Freiheitsgraden. // *Z. Kristallogr.*, 1973, **138**, 129-146.

-
- ⁶² Fischer W. Existenzbedingungen homogener Kugelpackungen zu kubischen Gitterkomplexen mit drei Freiheitsgraden. // *Z. Kristallogr.*, 1974, **140**, 50-74.
- ⁶³ Conway J.H., Sloane N.J.A. What are all the best sphere packings in low dimensions? // *Discret. Comput. Geom.*, 1995, **13**, 383-403.
- ⁶⁴ Conway J.H., Sloane N.J.A. Low-Dimensional Lattices VII: Coordination Sequences. // *Proc. R. Soc. London Ser. A.*, 1996, 2369-2389.
- ⁶⁵ Akporiaye D.E., Price G.D. Relative stability of zeolite frameworks from calculated energetics of known and theoretical structures. // *Zeolites*, 1989, **9**, 321-328.
- ⁶⁶ Herrero C.P. Framework dependence of atom ordering in tectosilicates. A lattice gas model. // *Chem. Phys. Lett.*, 1993, **215**, 587-590.
- ⁶⁷ Barthomeuf D. Topology and Maximum Content of Isolated Species (Al, Ga, Fe, B, Si,) in a Zeolitic Framework. An Approach to Acid Catalysis. // *J. Phys. Chem.*, 1993, **97**, 10092-10096.
- ⁶⁸ Brunner G.O. The Properties of Coordination Sequences and Conclusions Regarding the Lowest Possible Density of Zeolites. // *J. Solid State Chem.*, 1979, **29**, 41-45.
- ⁶⁹ Brunner G.O., Laves F. Zum Problem der Koordinationszahl. // *Wiss. Z. Tech. Univ. Dresden*, 1971, **20**, 387-390.
- ⁷⁰ Brunner G.O. The Properties of Coordination Sequences and Conclusions Regarding the Lowest Possible Density of Zeolites. // *J. Solid State Chem.*, 1979, **29**, 41-45.
- ⁷¹ Herrero C.P. Coordination Sequences of Zeolites Revisited: Asymptotic Behaviour for Large Distances. // *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 1994, **90**, 2597-2599.
- ⁷² Schumacher S. Periodische Graphen und Beiträge zu ihren Wachstumsfolgen. Dissertation, Universität Karlsruhe, Germany, 1994.
- ⁷³ O'Keeffe M. Dense and rare four-connected nets. // *Z. Kristallogr.*, 1991, **196**, 21-37.
- ⁷⁴ Grosse-Kunstleve R. W., Brunner G.O., Sloane N.J.A. Algebraic Description of Coordination Sequences and Exact Topological Densities for Zeolites. // *Acta Cryst. Section A*, 1996, **52**, 879-889.
- ⁷⁵ Sloane N.J.A., Plouffe S. The Encyclopedia of Integer Sequences. New York: Academic Press, 1995.
- ⁷⁶ Bacher R., De la Harpe P., Venkov B. Series de croissance et polynomes d'Ehrhart associees aux reseaux de raciness. // *Ann. Inst. Fourier*, 1999, **49**, 727-762.
- ⁷⁷ Eon J.-G. Algebraic determination of generating functions for coordination sequences in crystal structures. // *Acta Cryst. Section A*, 2002, **58**, 47-53.
- ⁷⁸ O'Keeffe, M. N-Dimensional Diamond, Sodalite and Rare Sphere Packings, *Acta Cryst. Section A*, 1991, **47**, 748-753.
- ⁷⁹ Baake M., Grimm U. Coordination sequences for root lattices and related graphs. // *Z. Kristallogr.*, 1997, **212**, 253-256.
- ⁸⁰ Baake M., Grimm U., Repetowicz P., Joseph D. Coordination sequences and critical points. Proceedings of the 6th International Conference on Quasicrystals, Eds. S. Takeuchi and T. Fujiwara, World Scientific, Singapore (1998) pp. 124-127.
- ⁸¹ Шутов А.В. Число слов заданной длины в плоских кристаллографических группах. // *Зап. научн. сем. ПОМИ.*, С.-П., 2004, **302**, 188-197.

- ⁸² Рау В.Г., Журавлев В.Г., Рау Т.Ф., Малеев А.В. Морфогенезис кристаллических структур в методе дискретного моделирования упаковок. // *Кристаллография*, 2002, **47**, 793-796.
- ⁸³ Панов В.Н., Потехин К.А., Гончаров А.В. // *Кристаллография*, 1997, **44**, 389.
- ⁸⁴ Малеев А.В., Рау В.Г., Потехин К.А., Пархомов Л.Г., Рау Т.Ф., Степанов С.В., Стручков Ю.Т. Метод дискретного моделирования упаковок в молекулярных кристаллах. // *Доклады АН СССР*, 1990, **315**, 1382-1385.
- ⁸⁵ Шутов А.В., Малеев А.В., Журавлев В.Г. Модель послойного роста разбиений и графов. // *Труды V Всероссийской научной школы «Математические исследования в естественных науках». Апатиты, Апатиты: К & М, 2009, 126-130.*
- ⁸⁶ Журавлев В.Г. Самоподобный рост периодических разбиений и графов. // *Алгебра и анализ*, 2001, **13**, 69-92.
- ⁸⁷ Cambridge Structural Database System. Version 5.27. Cambridge Crystallographic Data Centre, 2006.
- ⁸⁸ Gallacher A.C., Pinkerton A.A. A redetermination of monoclinic γ -sulfur. // *Acta Crystallogr., Sect. C*, 1993, **49**, 125-126.
- ⁸⁹ Rettig S.J., Trotter J. Refinement of the structure of orthorhombic sulfur, α -S₈. // *Acta Crystallogr., Sect. C*, 1987, **43**, 2260-2262.
- ⁹⁰ Воронцов И.И., Потехин К.А., Антипин М.Ю., Волошин Я.З., Сташ А.И., Бельский В.К., Дубовик И.И., Папков В.С. // *Кристаллография*, 2001, **46**, 833-844
- ⁹¹ Wales D.J., Hodges M.P. Global Minima of Water Clusters (H₂O)_n, $n \leq 21$, Described by an Empirical Potential. // *Chem. Phys. Lett.*, 1998, **286**, 65-72.
- ⁹² Зоркий П.М., Соколова Е.В., Маленкова Г.Г., Ланшина Л.В. Компьютерное моделирование больших кластеров и квазипериодических моделей бензола, имитирующих структуру жидкой фазы. // *Ж. физ. химии*, 2000, **74**, 1951-1956.
- ⁹³ Ekdawi-Sever N.C., Conrad P.B., de Pablo J.J. Molecular simulation of sucrose solutions near the glass transition temperature. // *J. Phys. Chem. A.*, 2001, **105**, 734-742.
- ⁹⁴ Гришина М.А., Барташевич Е.В., Потемкин В.А., Белик А.В. Генетический алгоритм для прогноза строения и свойств молекулярных агломератов в органических веществах. // *Ж. структурной химии*, 2002, **43**, 1120-1125.
- ⁹⁵ Зоркий П.М., Зоркая О.Н. Ординарная органическая кристаллохимия. // *Ж. структ. хим.*, 1998, **39**, 126-151.
- ⁹⁶ Зоркий П.М., Зоркая О.Н. Особенности строения органических кристаллов с молекулами, расположенными на кристаллографических осях второго порядка. Структурный класс C2, Z=2(2). // *Ж. структ. хим.*, 2000, **41**, 1053-1065.
- ⁹⁷ Зоркий П.М., Зоркая О.Н. Строение органических кристаллов с молекулами, расположенными на кристаллографических осях второго порядка. Структурный класс P21212, Z=2(2). // *Ж. структ. хим.*, 2001, **42**, 3-9.
- ⁹⁸ Ibragimov B.T., Talipov S.A., Zorky P.M. Inclusion Complexes of the Natural Product Gossypol. // *Supramolecular Chemistry*, 1994, **3**, 147-165

- ⁹⁹ Малеев А.В., Седов Б.Б., Житков И.К., Рау В.Г. Исследование устойчивости молекулярных агломератов в молекулярных кристаллах. // *Журнал структурной химии*, 2007, **48**, 124-128.
- ¹⁰⁰ Разумаева А.Е., Зоркий П.М. Количественное сравнение геометрии органических молекул. // *Вестник МГУ, сер. химия*, 1980, **21**, 77-82
- ¹⁰¹ Sedov B.B., Rau V.G., Potekhin K.A., Struchkov Yu.T., Koz'min A.S., Kirin, Zefirov N.S. 4(*RS*),9(*RS*)-dichloro-5,6-dimethoxycarbonyl-tetracyclo [5.3.0.0^{2,10}.0^{3,8}]dec-5-ene, C₁₄H₁₄Cl₂O₄. // *Cryst. Struct. Commun.*, 1980, **9**, 1033-1037.
- ¹⁰² Rau T.F., Rau V.G., Potekhin K.A., Struchkov Yu.T., Zhdankin V.V., Koz'min A.S., Kirin, Zefirov N.S. 9(*RS*)-iod-6(*SR*)-perchloryloxy-3(*RS*), 4(*RS*)-dimethoxycarbonyl-tetracyclo[6.1.1.0^{2,7}.0^{5,10}]decane, C₁₄H₁₆ClIO₈. // *Cryst. Struct. Commun.*, 1982, **11**, 207-210.
- ¹⁰³ Levina O.I., Potekhin K.A., Kurkutova E.N., Struchkov Yu.T., Palulin V.A., Zefirov N.S. 3,7-dibenzyl-1,5-diphenyl-3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane-9-one, C₃₃H₃₂N₂O. // *Cryst. Struct. Commun.*, 1982, **11**, 1909-1913.
- ¹⁰⁴ Rau V.G., Pugaev A.A., Rau T.F., Maleev A.V. Geometrical Aspect of Solving the Problem of Real Structure Growth on the Model of Alkali Metal Halides of the NaCl Type. // *Crystallography Reports*, 2009, **54**, N7, 1128-1134.
- ¹⁰⁵ Яловега Г.Э., Солдатов А.В., Новак К., Ридлер М., Лефкен О., Колмаков А., Меллер Т. Локальная геометрия и электронная структура свободных кластеров NaCl. // *Физика твердого тела*, 2000, **42**, 1889-1892.
- ¹⁰⁶ Вилков Л.В. Газовая электронография и структурная химия. // *Соросовский образовательный журнал*, 2001, №7, 53-59.
- ¹⁰⁷ Harris T.E. A lower bound for the critical probability in a certain percolation process. // *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 1960, **56**, 13-20.
- ¹⁰⁸ Fisher M.E. Critical probabilities for cluster size and percolation problems. // *J. Math. Phys.*, 1961, **2**, 620-670.
- ¹⁰⁹ Кестен Х. Теория просачивания для математиков, М.: Мир, 1986.
- ¹¹⁰ Журавлев В.Г., Малеев А.В., Рау В.Г., Шутов А.В. Рост случайных графов и упаковок. // *Кристаллография*, 2002, **47**, 976-981.
- ¹¹¹ Ширяев А.И. Вероятность. М.: Наука, 1980.
- ¹¹² Журавлев В.Г. Рост случайных замощений и графов: между кристаллом и хаосом // *Алгебра и анализ*, 2002, **14**, 129-168.
- ¹¹³ Tracy C.A., Widom H. Level spacing distributions and the Airy kernel. // *Comm. Math. Phys.*, 1994, **159**, 151-174.
- ¹¹⁴ Gravner J., Tracy C.A., Widom H. A growth model in a random environment. // *The Annals of probability*, 2002, **30**, 1340-1368.
- ¹¹⁵ Johansson, K., Shape fluctuations and random matrices. // *Comm. Math. Phys.*, 2000, **209**, 437-476.
- ¹¹⁶ Шутов А.В. Рост 1-периодических графов. // *Записки научных семинаров ПОМИ*, Санкт-Петербург, 2003., **286**, 215-226.
- ¹¹⁷ Шутов А.В. Рост 1-периодических графов. // *Чебышевский сборник*, 2003, **4**, 109-122.

-
- ¹¹⁸ Шутов А.В. Рост $n-1$ -мерно-периодических графов в n -мерном пространстве. // *Труды XXV конференции молодых ученых, М.:Изд. ЦПИ при мех.-мат.фак. МГУ, 2004, 2, 246-248.*
- ¹¹⁹ Shutov A.V., Maleev A.V., Zhuravlev V.G. Complex quasiperiodic self-similar tilings: their parameterization, boundaries, complexity, growth and symmetry. // *Acta Crystallogr., Section A, 2010, 66, 427-437.*
- ¹²⁰ Akiyama S. Cubic Pisot Units with finite beta expansions. In Algebraic Number Theory and Diophantine Analysis. / Eds. Halter-Koch F. and Tichy R.F., de Gruyter, 2000, 11-26.
- ¹²¹ Parry W. On the β -expansions of real numbers // *Acta Math. Acad. Sci. Hungar., 1960, 11, 269-278.*
- ¹²² Maleev A.V., Shutov A.V Generalized Rauzy fractals and quasiperiodic tilings. In Classification and Application of Fractals: New Research. / Eds. E.W. Mitchell and S.R. Murray, Nova, 2011 (in press).
- ¹²³ Журавлев В.Г., Малеев А.В. Послойный рост квазипериодического разбиения Розы. // *Кристаллография, 2007, 52, 204-210.*
- ¹²⁴ Журавлев В.Г. Параметризация двумерного квазипериодического разбиения Розы. // *Алгебра и анализ, 2010, 22, 21-56.*
- ¹²⁵ Hecke E. Eber Analytische Funktionen und die Verteilung van Zahlen mod Eins. // *Math. Sem. Hamburg Univ., 1921, 5, 54-76.*
- ¹²⁶ Kesten H. On a conjecture of Erdos and Szusz related to uniform distribution mod 1 // *Acta Arithmetica, 1966, 12, 193-212.*
- ¹²⁷ Малеев А.В., Шутов А.В., Журавлев В.Г. Двумерное квазипериодическое разбиение Розы как сечение трехмерного периодического разбиения. // *Кристаллография, 55, 773-784.*
- ¹²⁸ Pytheas Fogg N. Substitutions in Dynamics, Arithmetics and Combinatorics. Berlin: Springer-Verlag, 2002. 402 p.
- ¹²⁹ Малеев А.В. n -Мерные упаковочные пространства. // *Кристаллография, 1995, 40, 394-396.*
- ¹³⁰ Ito S., Ohtsuki M. Modified Jacobi-Perron algorithm and generating Markov partitions for special hyperbolic toral automorphisms. // *Tokyo J. Math., 1993, 16, 441-472.*
- ¹³¹ Shutov A.V., Maleev A.V. Quasiperiodic plane tilings based on stepped surfaces. // *Acta Crystallogr., Section A, 2008, 64, 376-382.*
- ¹³² Lagarias J.C. Mathematical Quasicrystals and the Problem of Diffraction. In: Directions in Mathematical Quasicrystals. Eds. M. Baake and R.V. Moody, CRM Monograph Series, 2000, 13, Amer. Math. Soc, Providence, RI, 61-93.
- ¹³³ Pleasants, P.A. B. Designers quasicrystals: cut-and-project sets with pre-assigned properties // Directions in Mathematical Quasicrystals. Eds. M. Baake, R. Moody, Providence: AMS, 2000, 93-138.
- ¹³⁴ Журавлев В.Г., Малеев А.В. Функция сложности и форсинг в двумерном квазипериодическом разбиении Розы. // *Кристаллография, 2007, 52, 612-618.*

¹³⁵ Zhuravlev V.G. Additive property of a complexity function for Rauzy tiling. In Analytic and Probabilistic methods in number theory. / Eds. A.Laurincikas and E.Manstavicius, Vilnius: TEV, 2007, 240-254.

¹³⁶ Bell E.T. Interpolated denumerants and Lambert series. // *Am. J. Math.*, 1943, **65**, 382–386.

¹³⁷ Ramirez Alfonsin J.L. The Diophantine Frobenius problem. Oxford University Press, New York, 2005.

¹³⁸ Журавлев В.Г., Малеев А.В. Квазипериоды послыного роста разбиения Ро-зи. // *Кристаллография*, 2008, **53**, 5-12.

Подписано в печать 16.06.2011 г. Формат 60x84/16.

Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. п. л. 6,69. Заказ № 964. Тираж 200 экз.

Отпечатано с готового оригинал макета
В АНО "Типография на Нижегородской"
600020, Б. Нижегородская, 88-Д.