Квазікристали, майжеперіодичні функції та їх застосування

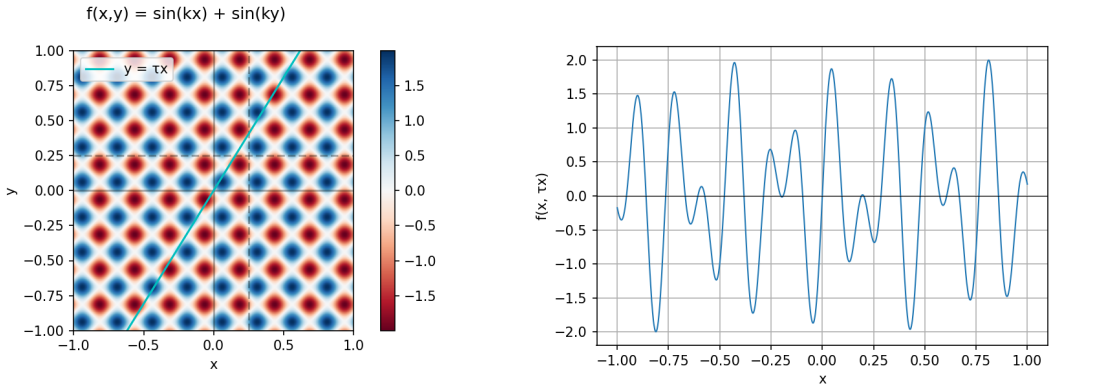
Михайло О. КОРЕШКОВ, Марина О. НЕСТЕРЕНКО

Інститут математики НАН України, Київ, Україна
E-mail: *mykhailo.koreshkov@gmail.com*, *maryna@imath.kiev.ua*

1 Вступ

Теорія квазікристалів є новою, не усталеною галуззю, яка активно розвивається. Квазікристали та квазіперіодичні функції — це один зі способів формалізувати множини із певною самоподібністю, особливо у великому масштабі, проте без періодичності в сенсі трансляційної симетрії.

Історично першими дослідженнями у цій галузі були роботи, присвячені майже періодичним функціям — функціям, що можуть бути представлені у вигляді суми скінченної кількості періодичних функцій з ірраціональними відношеннями періодів. Таку функцію можна розглядати як обмеження функції аргументу вищої розмірності на підпростір меншої розмірності під ірраціональним кутом.



(a) Візуалізація регулярної функції $f(x,y) = \sin(kx) + \sin(ky)$

(b) Графік майже періодичної функції $f(x, \tau x)$ як обмеження на лінію $y = \tau x$

Рис. 1. Побудова майже періодичної функції.

Поштовхом для розвитку теорії квазікристалів стала робота Шехтмана 1984 року, в якій було експериментально виявлено квазікристалічну структуру у сплаві алюмінію та марганцю з п'ятикратною симетрією, що суперечила класичній кристалографії.

Типово квазікристал будується як проєкція регулярної, кристалографічної ґратки, породженої кореневою системою, на простір меншої розмірності під ірраціональним кутом. Ця проєкція буде дискретною множиною (множиною Делоне) $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, не матиме періодичності, і матиме дискретний дифракційний малюнок. Поняття квазікристалу тісно пов'язано з питанням визначення впорядкованості і має інші визначення в залежності від контексту (наприклад, через замощення простору), проте в основному всі зводяться до дискретності дифракційного малюнку — перетворення Фур'є автокореляції множини [1].

Одним з напрямків досліджень є методи наближеного обчислення квазіперіодичних функцій — функцій, що допускають симетрії математичних квазікристалів ("локальні відносно Λ"), що є необхідним для опису процесів у фізичних квазікристалах (потенціал міжатомної взаємодії, дифракційний малюнок, дифузія тепла, поширення хвиль тощо), які в свою

чергу цікаві своїми унікальними фізичними властивостями у матеріалознавстві, оптиці, виробництві напівпровідників. Поміж іншого, квазікристалічні структури та функції особливі тим, що їх не вийде представити як збурення деякої періодичної структури, а математичний апарат для роботи з такими функціями на довільній області визначення все ще у процесі становлення.

2 Теоретичне підгрунтя

Сучасним підходом до моделювання квазікристалів є метод перерізів та проєкцій (cut and project), згідно з яким квазікристал розглядається як проєкція періодичної ґратки вищої розмірності на підпростір меншої розмірності під ірраціональним кутом. Застосовна наступна схема:

$$\begin{array}{ccccc} \mathbb{R}^d & \xleftarrow{\parallel} & \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d & \xrightarrow{\perp} & \mathbb{R}^d \\ & & \cup & & \\ L & \xleftarrow{1-1} & \widetilde{L} & \xrightarrow{\text{щільний образ}} & L' \end{array}$$

Тут $\widetilde{L}$ — це ґратка в $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, яка орієнтована таким чином, що проєкції ґратки на простори $\mathbb{R}^d$ будуть відповідно щільними та взаємно однозначними. Простір $\mathbb{R}^d$ ліворуч на схемі є *фізичним простором*, тобто простором, якому буде належати квазікристал Λ, а простір $\mathbb{R}^d$ праворуч є *внутрішнім простором*, який буде використовуватися для контролю проєкції ґратки $\widetilde{L}$ у фізичний простір.

Позначивши через $\tilde{x}$, x та x' елементи з $\widetilde{L}$, їх ліві та праві проєкції, отримаємо $\tilde{x} = (x, x')$, де x пробігає L. Перетворення $(\,\cdot\,)'$ пов'язує фізичний та внутрішній простори: $(\,\cdot\,)' \colon L \to L'$, при цьому $x \mapsto x'$. Обравши компактну підмножину Ω у внутрішньому просторі (вікно), яка співпадає зі своїм замиканням та має границю міри нуль, визначимо *квазікристал* Λ:

$$\Lambda(\Omega) := \{x \mid \tilde{x} \in \widetilde{L},\, x' \in \Omega\}.$$

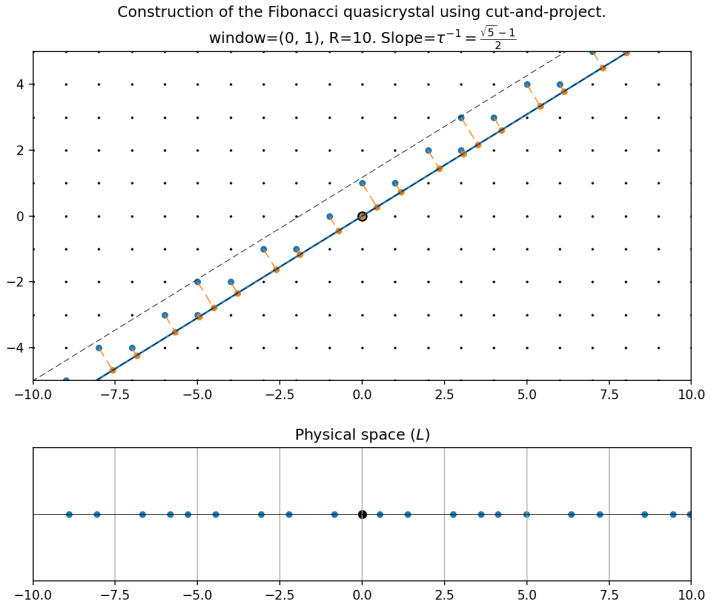


Рис. 2. Побудова квазікристала Фібоначчі.

Класичним та чи не найбільш дослідженим прикладом квазікристала є родина одновимірних *квазикристалів Фібоначчі*. Для побудови екземпляра квазікристала беру двовимірну квадратну ґратку $\widetilde{L} = \mathbb{Z}^2$, внутрішній простір спрямовую під ірраціональним кутом, наприклад $\arctan \tau^{-1}$, де $\tau = (1+\sqrt{5})/2$ — золотий переріз. Вікном обираємо відрізок $\Omega = [0;1)$. Замість τ можна взяти, наприклад, інший корінь рівняння $x^2 = mx + 1$, $m \in \mathbb{N}$. Отримуємо неперіодичну дискретну множину Λ (див. рис. 2). Важливою властивістю є те, що сусідні точки у Λ можуть набувати лише двох чи трьох різних відстаней між собою, що визначає "тип плитки", якщо розглядати квазікристал як замощення $\mathbb{R}$.

3 Обчислення локальних функцій на квазікристалах

Назвемо множину *множиною Делоне*, якщо будь-яка відкрита куля радіуса r містить не більше однієї точки множини, а будь-яка відкрита куля радіуса R містить принаймні одну точку множини.

Для двох множин Делоне $\Lambda_1, \Lambda_2 \subset \mathbb{R}^d$ кажемо що вони (R,δ)-*близькі*, якщо в кулі радіуса R кожна точка першої множини знаходиться на відстані не більше δ від деякої точки другої множини і навпаки.

Назвемо функцію $f\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{C}$ *локальною відносно квазікристала* Λ, якщо для довільно малого $\epsilon > 0$ існує радіус $R > 0$ та мале $\delta > 0$ такі, що якщо зсуви $t_1, t_2 \in \mathbb{R}^d$ породжують (R,δ)-близькі множини $t_1 + \Lambda$ та $t_2 + \Lambda$, то $|f(t_1) - f(t_2)| < \epsilon$. Тобто вона неперервно пропускається через *локальну оболонку* Λ — замикання орбіти Λ відносно дії трансляцій. Іншими словами, функція локальна, якщо вона однакова там, де оточення виглядає однаково.

Важливим результатом з дискретної геометрії квазікристалів є те, що будь-яка локальна функція відносно квазікристала Λ може бути піднята до періодичної функції на торі вищої розмірності. Це означає, що для будь-якої функції $f\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, локальної відносно Λ, існує періодична функція $F\colon \mathbb{T} \to \mathbb{R}$ на торі $\mathbb{T} = (\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)/\widetilde{L}$ така, що $f(x) = \tilde{F}(x,x')$ для всіх $x \in \Lambda$, де $\tilde{F}$ є підняттям F на $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$.

Окрім застосувань у фізиці, локальні функції на квазікристалах можуть бути використані для завадостійкого кодування інформації [4] та генерації псевдовипадкових послідовностей, доцільних у криптографії [2,5].

У роботі [3] побудовано загальну схему обчислення локальних функцій за допомогою дискретного аналізу Фур'є їх підняття на тор. У нашій роботі запропонований алгоритм для конкретних випадків квазікристалів буде реалізовано мовою Python, а в подальшому узагальнено і підготовлено у вигляді бібліотеки для публічного використання.

Дослідження Марини О. Нестеренко підтримано грантом від Simons Foundation (SFI-PD-Ukraine-00014586, M.O.N.).

Література

[1] Baake M., A guide to mathematical quasicrystals, in Quasicrystals: An Introduction to Structure, Physical Properties and Applications, *Springer Ser. Mater. Sci.*, vol. 55, Springer, Berlin, 2002, 17–48, arXiv:math-ph/9901014.

[2] Guimond L.-S., Patera J., Proving the deterministic period breaking of linear congruential generators using two tile quasicrystals, *Math. Comp.* **71** (2002), 319–332.

[3] Moody R.V., Nesterenko M., Patera J., Computing with almost periodic functions, *Acta Crystallogr. Sect. A* **64** (2008), 654–669, arXiv:0808.1814.

[4] Nesterenko M., Posta S., Application of quasicrystals to data processing, *J. Phys. Conf. Ser.* **2912** (2024) 0120330, 8 pages.

[5] Patera J., Nesterenko M., Quasicrystals in cryptography, in Aspects of Network and Information Security, *NATO Sci. Peace Secur. Ser. D Inf. Commun. Secur.*, vol. 17, IOS Press, 2008, 274–282.