Візуалізація локальної оболонки одновимірного квазікристала

М. О. Корешков[1], М. О. Нестеренко[2]

[1]Інститут математики НАН України, Київ, Україна

[2]Університет "Київська Школа Економіки", Київ, Україна

mykhailo.koreshkov@gmail.com, maryna.nesterenko@gmail.com

Математичними квазікристалами називають точкові множини Делоне $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, які мають дискретну дифракційну картину, але не є періодичними [2]. Найпоширенішим способом їх побудови є метод перерізів та проєкцій (cut-and-project). Визначимо його для одновимірного випадку ($d = 1$). Нехай $\widetilde{L} \subset \mathbb{R}^2$ — регулярна ґратка (наприклад, $\mathbb{Z}^2$). Визначимо $\mathbb{R}^2 \supset E_{phys} \cong \mathbb{R}$ — фізичний простір квазікристала, розташований під ірраціональним кутом до ґратки $\widetilde{L}$, та $\mathbb{R}^2 \supset E_{int} \cong \mathbb{R}$ — внутрішній простір, ортогональний до E_{phys}. Також визначимо вікно $W \subset E_{int}$ у вигляді відрізку, $W = [a, b]$.

Називаємо *модельною множиною* проєкцію ґратки на фізичний простір $\Lambda = \Lambda(W) = \pi_{phys}\big(\widetilde{L} \cap \pi_{int}^{-1}(W)\big)$. За припущень незвідності та регулярності вікна, така множина є квазікристалом [2]. Класичним прикладом є родина *квазікристалів Фібоначчі* із $\widetilde{L} = \mathbb{Z}^2$ та $E_{phys} = \{(x, \tau x)\}$, де $\tau = (1 + \sqrt{5})/2$. У цій роботі вікно визначається як проєкція фундаментальної комірки ґратки. Сусідні точки Λ розташовані лише на одній з двох відстаней, що задає замощення прямої двома типами плиток (a та b) та можливість ввести канонічне кодування реалізації Λ через послідовність символів. (Рис. 1 (б)).

Розглядаємо лише випадок скінченної кількості локальних конфігурацій точок. Дві Делонівські множини $A, B \subset \mathbb{R}^d$ називаються *локально нерозрізненними*, якщо будь-яка локальна конфігурація однієї з них з точністю до трансляції зустрічається в іншій і навпаки [1]. У відповідній топології *локальною оболонкою* Λ називають замикання її трансляційної орбіти $X(\Lambda) = \overline{\{t + \Lambda : t \in \mathbb{R}^d\}}$ — компактний топологічний простір, точки якого відповідають усім квазікристалам, локально нерозрізненним з Λ [4].

Ключовим результатом теорії є існування неперервної *параметризації локальної оболонки тором* — сюр'єктивного, ін'єктивного майже всюди відображення $\beta\colon X(\Lambda) \to \mathbb{T}^p$ [3, 5]. Квазікристали Фібоначчі параметризуються *двовимірним* тором. Виключна множина міри нуль, на якій β не є ін'єктивною, відповідає *сингулярним випадкам*, коли точка ґратки потрапляє точно на межу вікна.

На основі вищевказаних класичних результатів для наочного дослідження параметризації було розроблено інтерактивний Jupyter Notebook [1] на Python, який дозволяє будувати реалізації квазікристала Фібоначчі разом з її ab-кодом за заданими координатами на торі. Користувачу запропоновано дві координатні системи: xy — стандартні декартові координати, обмежені на $[0, 1)^2$, та uv — координати у базисі (e_{phys}, e_{int}), у яких рух за u при фіксованому v відповідає трансляції в межах однієї реалізації (Рис. 1 (а)), а зміна v — переходу до іншої реалізації (Рис. 1 (в)). Інтерфейс побудовано на `ipywidgets`, графіку — на `matplotlib` з інтерактивним бекендом `ipympl`.

У процесі розробки довелось подолати ряд технічних складнощів. Включення перевіряється з допуском $\varepsilon = 10^{-6}$, щоб покращити точність алгоритму. Додатково реалізовано виявлення сингулярних випадків (наприклад, $(x, y) = (0{,}5; 0{,}5)$ для нашого вибору W). Також, підібрано налаштування візуалізації для плавної інтерактивності.

[1]`https://github.com/mkrooted256/fibonacci-torus-notebook`

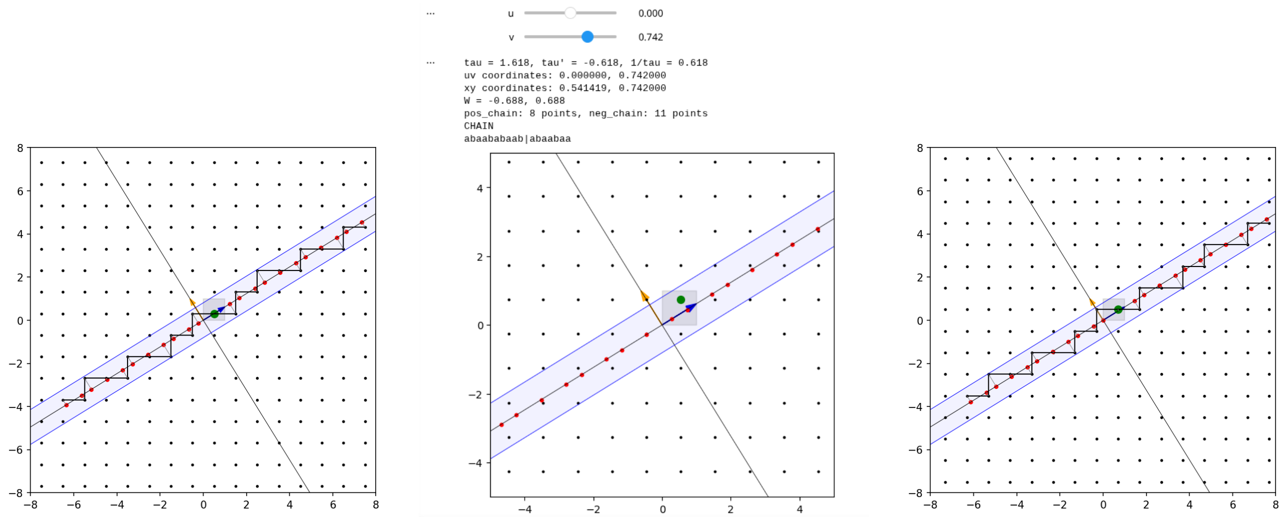

Рис. 1: (а) Зліва: $u = 0.5, v = 0$; (б) посередині: реалізація квазікристала з інтерфейсом введення координат та виведенням ab-коду. (в) справа: $u = 0, v = 0.5$.

Наступними кроками плануються дослідження апроксимацій локальних функцій квазікристала методами Фур'є-аналізу на торі [6].

Проєкт 2025.07/0405 "Алгебраїчні методи дослідження рівнянь математичної фізики" реалізується завдяки грантовій підтримці Національного фонду досліджень України. Зміст, висвітлений в цій роботі, може не співпадати з поглядами Національного фонду досліджень України і є виключною відповідальністю Інституту математики НАН України.

[1] M. Baake, A guide to mathematical quasicrystals, in Quasicrystals: An introduction to structure, physical properties and applications, Springer, 2002, 17–48, (arXiv:math-ph/9901014).

[2] M. Baake and U. G. Grimm, *Aperiodic order. Vol. 1*, Encyclopedia of Mathematics and its Applications, 149, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2013.

[3] M. Schlottmann, Generalized model sets and dynamical systems, in *Directions in mathematical quasicrystals*, 143–159, CRM Monogr. Ser., 13, Amer. Math. Soc., Providence, RI (2000).

[4] C. Radin, M. Wolff, Space tilings and local isomorphism, Geom. Dedicata **42** (1992), no. 3, 355–360.

[5] M. Baake, J. Hermisson and P. A. B. Pleasants, The torus parametrization of quasiperiodic LI-classes, J. Phys. A **30** (1997), no. 9, 3029–3056.

[6] R. V. Moody, M. O. Nesterenko, J. Patera, Computing with almost periodic functions, Acta Crystallogr. Sect. A **64** (2008), no. 6, 654–669.