V. G. Zhuravlev, Self-similar growth of periodic partitions and graphs,
Algebra i Analiz, 2001, Volume 13, Issue 2, 69–92

Алгебра и анализ
Том 13 (2001), вып. 2

САМОПОДОБНЫЙ РОСТ ПЕРИОДИЧЕСКИХ РАЗБИЕНИЙ И ГРАФОВ

© В. Г. Журавлев

Исследуется послойный рост периодических разбиений Til плоскости $\mathbb{R}^2$, ориентированных графов G и сетей G_w. Доказано, что n-й слой или координационное окружение $\mathrm{eq}(a,n)$ содержится в окрестности многоугольника роста $n\cdot\mathrm{pol}_G$ некоторой ширины, не зависящей от номера слоя n и выбора затравки a. Из такой аппроксимации вытекают самоподобный рост периодических структур (см. теоремы 5.1 и 5.2), асимптотическая формула для среднего значения скорости роста $\langle\mathrm{eq}(a,n)\rangle$ (см. предложение 6.1) и сохранение формы роста возмущенных примесями периодических разбиений Til и графов G_{mix} (п. 7.5). Кристаллографические группы $G_{\mathrm{kp}} \subset G_m^m$ имеют периодические графы. Для плоских групп $G_{\mathrm{kp}} \subset G_2^2$ найдены геометрические характеристики роста их графов G (см. теорему 6.1). Используемые аффинные конструкции переносятся на многомерные периодические разбиения, графы и m-мерные кристаллографические группы.

§0. Введение

Послойная окантовочная модель роста кристаллов содержит в двумерном варианте многоугольные разбиения Til плоскости $\mathbb{R}^2$. Затравочный многоугольник M окружается соседними с ним многоугольниками $M_1^1, M_2^2, \ldots$ из Til с общей границей длины, большей некоторого фиксированного $\varepsilon > 0$. Первый слой $\{M_i^1\}$ окружается его соседними многоугольниками $M_1^2, M_2^2, \ldots$, возникает послойный рост из первой, второй и т.д. координационных окружностей. Отметим точку a в каждом многоугольнике M разбиения Til и a соединим ребром с a' из M', если M и M' являются соседними. Получается связный неориентированный граф $G \subset \mathbb{R}^2$ с множеством вершин $V(G) = \{a, a' \ldots\}$, и задача о росте разбиения Til преобразовалась в задачу о n-й координационной окружности или эквидистантном множестве $\mathrm{eq}(a,n)$, состоящем из вершин $x \in V(G)$ на расстоянии $d(a,x) = n$ от начальной вершины a. Метрика $d(a,x)$ — суть наименьшая длина цепи из a в вершину x.

Ключевые слова: послойный самоподобный рост, периодические разбиения, графы и сети, кристаллографические группы, формы роста.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №99-01-00070.

Пусть разбиение Til будет периодическим с решеткой периодов L и каждый его домен M содержит круг радиуса $r \geqslant \varepsilon_1 > 0$. При этом допущении граф G становится периодическим и дискретным. Кристаллические формы роста могут быть нецентрально-симметрическими [1]. Предлагаемая модель допускает такие формы для ориентированных графов G, и для них доказывается следующее аппроксимационное включение (см. теорему 5.1)

$$\mathrm{eq}(a,n) - a \subset (n \cdot \mathrm{pol}_G)_c, \tag{0.1}$$

где pol_G — многоугольник роста п. 1.7, $(n \cdot \mathrm{pol}_G)_c$ — окрестность его гомотетического образа с коэффициентом n ширины $2c$, не зависящей от $n = 1, 2, 3, \ldots$ и выбора начальной вершины $a \in V(G)$. В переводе на периодические разбиения Til включение (1) означает, что многоугольники $M_1^n, \ldots, M_{k_n}^n$ n-го координационного окружения лежат в c-окрестности многоугольника $n \cdot \mathrm{pol}_G$, причем многоугольник роста pol_G в этом случае центрально-симметричный.

Из аппроксимации (1) для среднего значения $\langle \mathrm{eq}(a,n) \rangle$ числа вершин n-го окружения вытекает асимптотическая формула (см. предложение 5.1)

$$\langle \mathrm{eq}(a,n) \rangle = 2 \langle \mathrm{Pol}_G \rangle n (1 + o(1)) \tag{0.2}$$

при $n \to \infty$ с коэффициентом $\langle \mathrm{Pol}_G \rangle = f \cdot |\,\mathrm{Pol}_G\,| / |F|$. Здесь $|\,\mathrm{Pol}_G\,|$ — площадь многоугольника Pol_G, F — фундаментальная область решетки периодов L и f — количество вершин в ней. Коэффициент $\langle \mathrm{Pol}_G \rangle$ равен среднему числу вершин графа G, лежащих в многоугольнике Pol_G п. 1.7.

Таким образом, периодические разбиения и графы асимптотически растут самоподобным образом. Многоугольная форма роста соответствует многогранной форме роста кристаллов, и явление секторного роста объясняет сохранение углов в процессе роста. Аппроксимационная формула (1) показывает, что на плоскости любой периодический граф G локально растет как лексикографически упорядоченный граф квадратной решетки $\mathbb{Z}^2$.

Плоские кристаллографические группы G_{kp} [2] имеют периодические графы, и формулы (1), (2) позволяют выяснить характер их роста. В качестве примера приведем группу cmm, порожденную отражениями R_1, R_2 в катетах прямоугольного равнобедренного треугольника и полуоборотом T относительно середины гипотенузы. Это некоммутативная группа с кодом

$$R_1^2 = R_2^2 = T^2 = (R_1 R_2)^2 = (R_1 T R_2 T)^2 = E,$$

E обозначает единичный элемент. Отметим в фундаментальном треугольнике точку и вложим группу cmm в плоскость $\mathbb{R}^2$. Ее элементы S, S' соединим ребром, если $S' \cdot S^{-1}$ совпадает с одной из образующих R_1, R_2, T. В полученном графе G эквидистантное множество $\mathrm{eq}(E,n)$ содержит элементы $X = S_1 \ldots S_n$, сомножители S_i — выделенные образующие, и представление

X минимально. Теорема 6.1 содержит геометрические характеристики роста всех семнадцати плоских кристаллографических групп. В частности, для среднего значения $\langle \mathrm{eq}(E,n)\rangle$ группы cmm доказаны асимптотическая формула

$$\langle \mathrm{eq}(E,n)\rangle = \frac{8}{3}n(1+o(1))$$

и предельный рост

$$\frac{1}{n}\,\mathrm{eq}(E,n) \to \mathrm{pol}_G \quad \text{при } n \to \infty,$$

где pol_G — неправильный восьмиугольник роста с координатами вершин $\pm\frac{1}{3}e_1, \pm\frac{1}{3}e_2, \pm\frac{1}{4}(e_1 \pm e_1)$ в базисе e_1, e_2 из диагоналей разбивающего плоскость фундаментального треугольника.

Используемые в статье аффинные конструкции переносятся на многомерные периодические разбиения, графы и n-мерные кристаллографические группы [5, 6]. Другим естественным обобщением является переход от графов G к сетям G_w, ребрам которых приписаны веса или длины. Для них сохраняются аппроксимационная и асимптотическая формулы (1), (2). В этих формулах за начало роста графа G берется какая-то вершина a из $V(G)$ и форма роста не зависит от выбора a. Вместо одной вершины можно взять любое их конечное подмножество A из $V(G)$, и наш метод позволяет доказать инвариантность многоугольника роста pol_G. Изменяются только константы в формулах (1), (2).

Появление статьи обязано В. Г. Рау, привлекшего внимание автора к росту периодических полиоминных разбиений, а также стимулирующим обсуждениям возможных механизмов роста монокристаллов с А. В. Малеевым.

§1. Связные периодические графы

1.1. *Ориентированный* граф G будет *связным* или *однородным*, если любые его две *вершины* a, a' из $V(G)$ можно соединить *цепью* последовательных *дуг* — *ориентированных ребер* из $E(G)$. Причем начальной вершиной может быть выбрана любая из вершин a или a'. Вложим

$$\mathrm{em} : G \hookrightarrow \mathbb{R}^2 \tag{1.1}$$

граф G в плоскость $\mathbb{R}^2$. Метрика ее пока не важна. Граф G назовем *периодическим*, если существует *двумерная решетка* L из $\mathbb{R}^2$, сдвиги на векторы которой индуцируют автоморфизмы графа G, т.е. биекции на множестве вершин $V(G)$, сохраняющие связи между ними. Это означает, что *группа автоморфизмов* $\mathrm{Aut}\, G$ периодического графа содержит подгруппу L.

1.2. Возьмем невырожденное аффинное отображение γ из группы $GL_2(\mathbb{R})$ и считаем граф G изначально вложенным (1.1) в плоскость $\mathbb{R}^2$. Тогда его образ $G_1 = \gamma(G)$ изоморфен графу G и периодичен относительно решетки $L_1 = \gamma(L)$. В качестве L_1 можно выбрать квадратную решетку $\mathbb{Z}^2$ векторов с целыми координатами и ограничиться периодическими графами G относительно решетки $L = Z^2$. Наиболее важные для приложений графы G естественным образом вложены в R^2 и их решетки периодов L обладают дополнительными точечными ортогональными симметриями. Такими являются графы плоских кристаллографических групп [2]. В этом случае полезно сохранять решетку L.

1.3. Считаем граф G вложенным в $\mathbb{R}^2$ и фиксируем *фундаментальную область*

$$F = \mathbb{R}^2/L \tag{1.2}$$

в виде параллелограмма со сторонами, образующими базис решетки L. Будем предполагать, что F содержит конечное число *вершин*

$$a_1, a_2, \ldots, a_f \tag{1.3}$$

графа G. Для периодического графа это равносильно дискретности множества вершин $V(G)$. Вершины (1.3) попарно несравнимы между собой по $\bmod L$. Дополнительно предположим конечность *степеней* $\deg a_i$, т.е. конечность числа ребер, инцидентных вершинам a_i, $i = 1, \ldots, f$. Назовем граф G *дискретным*, если он удовлетворяет первому и второму условиям.

1.4. *Геодезической* из вершины x в y назовем цепь $x \to \cdots \to y$ с наименьшим возможным числом ребер, соединяющую x с y. Количество таких цепей — важнейшая характеристика в задаче о росте графов. Число ребер $d(x, y)$ задает метрику на множестве вершин $V(G)$:

$$d(x,y) \geqslant 0, \quad d(x,y) = 0 \iff x = y, \quad d(x,y) \leqslant d(x,z) + d(z,y).$$

Для ориентированных графов метрика, как правило, несимметричная. *Расстояние* $d(x, y)$ обладает свойством *L-инвариантности*

$$d(x+z, y+z) = d(x,y) \tag{1.4}$$

для любого вектора z решетки L. Из связности графа G для расстояния вытекает неравенство $d(x, y) < \infty$ — конечность расстояния между произвольными вершинами x, y, а из дискретности следует $d(x, y) \to \infty$ тогда и только тогда, когда обычное евклидово расстояние $|x - y| \to \infty$.

1.5. Основная цель — описание асимптотического поведения при $n \to \infty$ *координационного круга* $\mathrm{Eq}(a,n)$ с центром в вершине a и его границы — n-й *координационной окружности* или *эквидистантного множества* $\mathrm{eq}(a,n)$ уровня n. Они состоят из вершин $x \in V(G)$ на расстоянии $d(a,x) \leqslant n$ и $d(a,x) = n$ соответственно.

Произвольная вершина a сравнима с некоторой фундаментальной вершиной $a_i \bmod L$ из списка (1.3). Вектор $v(a_i, a)$ из a_i в a принадлежит решетке L, и в силу инвариантности (1.4) выполняется равенство

$$\mathrm{eq}(a,n) = \mathrm{eq}(a_i,n) + v(a_i,a).$$

Поэтому достаточно рассмотреть координационные окружности $\mathrm{eq}(a,n)$ с центрами в вершинах $a = a_1, \dots, a_f$.

1.6. Цепь

$$p : a_i \to b_1 \to \dots \to b_{s-1} \to a_i', \tag{1.5}$$

соединяющую a_i с вершиной $a_i' \equiv a_i \pmod L$, назовем *лучом*, если она удовлетворяет двум условиям: 1) расстояние равно $d(a_i, a_i') = s$, и, значит, цепь p будет геодезической; 2) промежуточные вершины обладают свойством

$$b_j \not\equiv a_i \pmod L \text{ и } b_j \not\equiv b_k \pmod L \quad \text{при } j \neq k.$$

Лучи p являются простыми цепями, состоят из различных вершин и ребер, и их *длины* $d(p) = s$ удовлетворяют неравенству

$$d(p) \leqslant f. \tag{1.6}$$

Обозначим $p(a_i, s)$ множество лучей длины s с началом a_i, а их объединение обозначим

$$P_G = \bigcup_{1 \leqslant i \leqslant f} \bigcup_{1 \leqslant s \leqslant f} p(a_i, s). \tag{1.7}$$

Каждой цепи p, не обязательно из (1.7), отвечает *вектор* $v = \overline{p}$, определяемый ее крайними вершинами. Для лучей $p \in P_G$ их векторы $v = \overline{p}$ содержатся в решетке L.

Лучевые векторы вместе со своими лучами образуют *звезду*

$$\mathrm{St}_G = P_G \cup \{v = \overline{p} : p \in P_G\} \tag{1.8}$$

графа G. Введем *нормированную* или *единичную звезду*

$$\mathrm{st}_G = \{v = \overline{p}/d(p) : p \in P_G\}. \tag{1.9}$$

Ее векторам v может не отвечать никакая цепь графа G. *Вершинная звезда* vst_G образуется из единичных векторов $v \in \mathrm{st}_G$, задающих *выпуклую оболочку* нормированной звезды st_G. Обозначим n_f наименьшее общее кратное всех вершинных расстояний $1 \leqslant s \leqslant f$ с непустым множеством лучей $p(a_i, s)$, и определим *когерентную звезду*

$$\mathrm{Cst}_G = n_f \cdot \mathrm{vst}_G\,. \tag{1.10}$$

Эту звезду полезно представлять состоящей из векторов $\overline{p}$ и *когерентных цепей*

$$p = p_s \to \cdots \to p_s \quad (k \text{ раз}),$$

полученных сложением самих с собою лучей $p_s \in P_G$ так, чтобы цепь p содержала n_f ребер, т.е. $k = n_f/s$, где $s = d(p_s)$. Длины всех когерентных цепей равны

$$d(p) = n_f \quad \text{для } p \in \mathrm{Cst}_G\,. \tag{1.11}$$

Когерентные цепи p — это реальные цепи графа G, а отвечающие им нормированные векторы

$$v = \overline{p}/n_f = \overline{p}_s/s$$

являются вершинными.

1.7. Выпуклая оболочка вершинной звезды vst_G представляет собой некоторый *выпуклый многоугольник* Pol_G. Дискретность графа G обеспечивает конечность числа вершин и векторов у многоугольника Pol_G и всех звезд п. 1.6. Расположение Pol_G на плоскости $\mathbb{R}^2$ согласовано с расположением звезды vst_G с центром в начале координат.

Соседние вершинные векторы u_1, v_1 из vst_G задают *сектор* $\mathrm{sec} = \mathrm{sec}(u_1, v_1)$ — угол на плоскости $\mathbb{R}^2$ с бесконечными сторонами. Сектор sec с углом $< \pi$ назовем *сектором роста*, а с углом $\geqslant \pi$ — *вырожденным* или *мертвым сектором*. Если многоугольник Pol_G содержит такой сектор, то одна из его вершин совпадает с началом координат, векторы u_1, v_1 образуют его стороны и Pol_G будет *вырожденным*.

Многоугольником роста pol_G назовем часть границы многоугольника Pol_G, не содержащую сторон u_1, v_1 вырожденного сектора $\mathrm{sec} = \mathrm{sec}(u_1, v_1)$, если последний присутствует в Pol_G. В этом случае многоугольник pol_G *вырожден* и представляет собой связную незамкнутую ломаную.

Образы многоугольников Pol_G и pol_G при гомотетии относительно начала координат с коэффициентом n обозначим $n \cdot \mathrm{Pol}_G$ и $n \cdot \mathrm{pol}_G$. Для невырожденного многоугольника $n \cdot \mathrm{pol}_G$ определим *внутреннюю окрестность* $(n \cdot \mathrm{pol}_G)_c^-$ как объединение частей $(n \cdot \mathrm{sec})_c^-$ всех его секторов sec, ограниченных боковыми сторонами и сдвинутыми внутрь на расстояние c сторонами многоугольника $n \cdot \mathrm{pol}_G$. *Внешняя* окрестность $(n \cdot \mathrm{pol}_G)_c^+$ состоит из пересечения *полуплоскостей* $(n \cdot \mathrm{sec})_c^+$, содержащих $n \cdot \mathrm{pol}_G$ и ограниченных сдвинутыми от многоугольника $n \cdot \mathrm{Pol}_G$ на расстояние c прямыми, параллельными его сторонам. *Двусторонняя окрестность* многоугольника $n \cdot \mathrm{pol}_G$ задается пересечением

$$(n \cdot \mathrm{pol}_G)_c = (n \cdot \mathrm{pol}_G)_c^- \cap (n \cdot \mathrm{pol}_G)_c^+. \tag{1.12}$$

В определение окрестностей вырожденного многоугольника $n \cdot \mathrm{pol}_G$ необходимо внести дополнение, касающееся вырожденного сектора $\mathrm{sec} = \mathrm{sec}(u_1, v_1)$. Теперь часть сектора $(n \cdot \mathrm{sec})_c^-$ ограничена его сторонами и двумя полупрямыми, ортогональными к u_1, v_1 и сдвинутыми от концов векторов nu_1, nv_1 к началу координат на расстояние c. Для вырожденного сектора полуплоскость $(n \cdot \mathrm{sec})_c^+$ заменяется пересечением двух полуплоскостей с параллельными векторам u_1, v_1 на расстоянии c границами, сдвинутыми от многоугольника $n \cdot \mathrm{Pol}_G$. Заметим, что окрестность $(n \cdot \mathrm{sec})_c^+$ не зависит от n.

§2. Внутренняя окрестность сектора роста

2.1. В данном параграфе полагаем граф G связным, и поэтому он имеет невырожденный многоугольник Pol_G. В когерентной звезде Cst_G с центром в вершине a_1 рассмотрим сектор $\mathrm{sec} = \mathrm{sec}(u, v)$, ограниченный когерентными векторами $u = \overline{p}_u$, $v = \overline{p}_v$ для когерентных цепей p_u, p_v п. 1.6. Предполагается, что внутри сектора нет других векторов звезды Cst_G. Поскольку многоугольник Pol_G невырожденный, то угол между векторами u, v меньше π. Пусть геодезическая цепь p длины $d(p) = n$ соединяет вершину a_1 с вершиной a из пересечения $\mathrm{eq}(a_1, n)$ и $\mathrm{sec} + a_1$.

Аппроксимируем цепь p когерентными цепями p_u, p_v

$$p_{\mathrm{ann}} : a_1 \to a_2' \underbrace{\xrightarrow{p_v} \dots \xrightarrow{p_v}}_{k_v' \text{ раз}} a_2'' \to a_3'' \underbrace{\xrightarrow{p_u} \dots \xrightarrow{p_u}}_{k_u' \text{ раз}} a_3''' \to a \tag{2.1}$$

с помощью следующей *конструкции*. Рассмотрим для сектора sec вертикальный ему сектор sec^*. Он может не входить в звезду Cst_G. Когерентные векторы u, v принадлежат решетке L и $L_{u,v} = \mathbb{Z}[u, v]$ — ее подрешетка. Поэтому в секторе sec^* в фундаментальной области решетки $L_{u,v} \subset L$, натянутой на векторы $-u$, $-v$, найдутся вершины $a_2' \equiv a_2$ и $a_3' \equiv a_3 \pmod L$, из которых исходят когерентные цепи p_v и p_u соответственно.

В случае $a_2' = a_3' = a_1$ аппроксимационную цепь

$$p_{\mathrm{ann}} : a_1 \underbrace{\xrightarrow{p_v} \dots \xrightarrow{p_v}}_{k_v' \text{ раз}} a_1' \underbrace{\xrightarrow{p_u} \dots \xrightarrow{p_u}}_{k_u' \text{ раз}} a_1'' \to a \tag{2.2}$$

выбираем с минимальной суммой $k_v' + k_u'$ так, чтобы вершина a попала в фундаментальную область решетки $L_{u,v}$ с вершиной a_1'' и образующими векторами u, v. Последняя цепь в (2.2) выбирается геодезической.

В общем случае в цепь p_{ann} (2.2) добавляются два геодезических перехода $a_1 \to a_2'$ и $a_2'' \to a_3''$.

По свойству геодезической справедливо неравенство $n = d(p) \leqslant d(p_{\mathrm{ann}})$, поэтому можем записать

$$n \leqslant d(a_1, a_2') + k_v' d(p_v) + d(a_2'', a_3'') + k_u d(p_u) + d(a_3''', a)$$

или, вводя обозначения $k = k_v + k_u$ для $k_v = k_v' d(p_v)$, $k_u = k_u' d(p_u)$, получаем неравенство

$$n \leqslant k + d(a_1, a_2') + d(a_2'', a_3''') + d(a_3''', a). \tag{2.3}$$

Из фундаментальной области $F(\mathrm{sec}) = F(u, v)$ сектора sec или решетки $L_{u,v}$ область $F_i(\mathrm{sec}) = F(\mathrm{sec}) + a_i$ получается сдвигом в вершину a_i из $V(G)$, и ее *диаметр* (*d-диаметр*) равен $d(F_i(\mathrm{sec}))$ — максимальному расстоянию $d(x, y)$ между вершинами x, y из $F_i(\mathrm{sec}) \cap L$. По определению (1.10) *диаметр когерентной звезды*

$$d(\mathrm{Cst}_G) = \max_{\substack{1 \leqslant i \leqslant f \\ \mathrm{sec} \subset \mathrm{Cst}_G}} d(F_i(\pm u, \pm v)) \tag{2.4}$$

удовлетворяет неравенству $d(\mathrm{Cst}_G) \geqslant n_f$. Расстояния в формуле (2.4) измеряются между вершинами фундаментальных областей $F_i(\pm u, \pm v)$. Из неравенства (2.3) и (2.4) выводим

$$k \geqslant n - 3d(\mathrm{Cst}_G). \tag{2.5}$$

2.2. Оценим снизу целое значение коэффициента гомотетии n_1, при котором разность между a и a_1 принадлежит

$$a - a_1 \in (n_1 \cdot \mathrm{pol}_G)_0^- \tag{2.6}$$

— внешней части множества $n_1 \cdot \mathrm{pol}_G$. Для этого положим $k_v = k$ и рассмотрим уравнение

$$(a_3' - a_1) + k_v' \cdot v + \alpha(nv) = (n_1 + \beta) v_1. \tag{2.7}$$

Здесь $v_1 = v/n_f = \overline{p}_v/n_f$ — единичный вектор, параметры α и β удовлетворяют неравенствам $0 \leqslant \alpha, \beta < 1$, и вектор $a_3' - a_1 = -\varepsilon_1 v - \varepsilon_2 u$ имеет коэффициенты $0 \leqslant \varepsilon_1$, $\varepsilon_2 < 1$, так как по условию разность $a_3' - a_1$ принадлежит параллелограмму $F(-u, -v)$. Перепишем (2.7) в виде

$$(-\varepsilon_1 n_f v_1 - \varepsilon_2 n_f u_1) + k_v' n_f v_1 + \alpha n_f (u_1 - v_1) = (n_1 + \beta) v_1.$$

Поскольку $k_v' n_f = k_v = k$, то равенство равносильно системе

$$-\varepsilon_1 n_f v_1 + k v_1 - \alpha n_f v_1 = (n_1 + \beta) v_1, \quad -\varepsilon_2 n_f u_1 + \alpha n_f u_1 = 0.$$

Отсюда получаем равенство $\alpha = \varepsilon_2$, и тогда

$$n_1 = k - \varepsilon_1 n_f - \varepsilon_2 n_f - \beta \geqslant k - (2n_f + 1), \text{ т.е. } n_1 \geqslant k - (2n_f + 1).$$

Из этого неравенства и неравенств $d(\mathrm{Cst}_G) \geqslant n_f$ и (2.5) получаем нижнюю границу

$$n_1 \geqslant n - (5d(\mathrm{Cst}_G) + 1), \tag{2.8}$$

обеспечивающую выполнение включения (2.6).

Осталось заменить его правую часть на внутреннюю окрестность $(n \cdot \mathrm{pol}_G)_c^-$ п. 1.7. Начнем с очевидного неравенства $c \leqslant |nv_1 - n_1v_1|$, $|\cdot|$ — евклидово расстояние. В силу неравенства (2.8) можем записать

$$c \leqslant (5d(\mathrm{Cst}_G) + 1) \cdot |v_1| \quad \text{или} \quad c \leqslant (5d(\mathrm{Cst}_G) + 1) \cdot r(\mathrm{vst}_G),$$

где

$$r(\mathrm{vst}_G) = \max_{v_1 \in \mathrm{vst}_G} |v_1| \tag{2.9}$$

— *радиус вершинной звезды* vst_G п. 1.6.

Нижняя граница. Пусть a_i — некоторая фиксированная вершина графа G из фундаментальной области F (1.2) и a — произвольная вершина на расстоянии $d(a_i, a) = n$ от вершины a_i с вектором $a - a_i$ из сектора роста $\sec$ когерентной звезды Cst_G. Тогда $a - a_i$ принадлежит внутренней окрестности $(n \cdot \mathrm{pol}_G)_c^-$ п. 1.7 или, что равносильно по определению n-й координационной окружности $\mathrm{eq}(a_i, n)$ п. 1.5, выполняется включение

$$(\mathrm{eq}(a_i, n) - a_i) \cap \sec \subset (n \cdot \sec)_c^- \tag{2.10}$$

с константой $c = (5d(\mathrm{Cst}_G) + 1)r(\mathrm{vst}_G)$ (2.4), (2.9).

§3. Внешние окрестности секторов

3.1. Доказательство верхних границ не нуждается в связности графа G. Поэтому будем считать G ориентированным, периодическим и дискретным графом.

Геодезическая p длины $d(p) = n$, большей числа фундаментальных вершин f (1.3), разлагается в произведение $p = q_1 \cdot p_j q_2$ со средней цепью $p_j : a'_j \to \cdots \to a''_j$, в которой только крайние вершины a'_j и a''_j сравнимы по $\mathrm{mod}\, L$. *Вырезанием* из цепи

$$p' : a_1 \to \cdots \to a'_i \to a'_j \underset{p_j\text{-цепь}}{\to \cdots \to} a''_j \to a'_k \to \cdots \to a \tag{3.1}$$

построим *укороченную цепь*

$$p' : a_1 \to \cdots \to a'_i \to a'_j \to (a'_k - \overline{p}_j) \to \cdots \to (a - \overline{p}_j). \tag{3.2}$$

Вторая часть цепи p' представляет собой изначальную цепь, сдвинутую на вектор $\overline{p}_j$ решетки L, и поэтому p' — снова цепь. На векторах операция вырезания $p \Rightarrow p'$ означает разложение в сумму $\overline{p} = \overline{p}_j + \overline{p}'$ соответствующих векторов. С укороченной цепью p' поступаем аналогично пока ее длина $d(p') > f$, и получаем разложение

$$\overline{p} = \sum_j \overline{p}_j + \overline{p}' \tag{3.3}$$

с цепью p' длины $d(p') = f'$, меньшей f.

3.2. Возьмем сектор роста $\sec = \sec(u, v)$ с углом $< \pi$ между образующими векторами u, v и рассмотрим вдоль вектора $u - v$ проекцию pr_v на вектор v. Прежде всего заметим, что цепи p_j разложения (3.3) являются геодезическими, иначе, заменяя их таковыми, придем в противоречие с геодезичностью исходной цепи p. Все p_j будут лучами множества P_G (1.7), и по определению вершинной звезды vst_G п. 1.6 выполняются неравенства $\mathrm{pr}_v \overline{p}_j / d(p_j) \leqslant \mathrm{pr}_v v_1$ или неравенства

$$\mathrm{pr}_v \overline{p}_j \leqslant \mathrm{pr}_v d(p_j) \cdot v_1.$$

Отсюда и из разложения (3.3) получаем неравенство

$$\mathrm{pr}_v \overline{p} \leqslant \mathrm{pr}_v (n - f') v_1 + \mathrm{pr}_v \overline{p}' \leqslant \mathrm{pr}_v n \cdot v_1 + \mathrm{pr}_v \overline{p}',$$

из которого вытекает

Верхняя граница. Если G — ориентированный периодический дискретный граф и $\sec = \sec(u, v)$ — сектор роста когерентной звезды Cst_G, то имеет место включение

$$\mathrm{eq}(a_i, n) - a_i \subset (n \cdot \sec)_c^+. \tag{3.4}$$

Справа записана полуплоскость, определяемая прямой $kv_1 + lu_1$ с параметрами $k + l = n$, сдвинутая от начала координат на расстояние $c = (f - 1)e$, где e — *длина наибольшего ребра* графа G.

3.3. Осталось рассмотреть случай вырожденного сектора $\sec = \sec(u, v)$ с углом $\geqslant \pi$ между образующими векторами u, v. Теперь удобнее начать с нахождения внешней окрестности. Пусть геодезическая $p : a_i \to \cdots \to a$ длины $d(p) = n$ соединяет вершину a_i многоугольника $n \cdot \mathrm{Pol}_G$ с произвольной вершиной a. Применим операцию вырезания $p \Rightarrow p'$ п. 3.1 и получим вновь разложение

$$\overline{p} = \sum_j \overline{p}_j + \overline{p}'. \tag{3.5}$$

Построим единичный вектор w, ортогональный вектору v и направленный внутрь сектора $\sec(u, v)$, и пусть pr_w обозначает проекцию на w параллельно вектору v. По свойству вершинной звезды vst_G п. 1.6 выполняются неравенства $\mathrm{pr}_w \overline{p}_j / d(p_j) \leqslant 0$ или $\mathrm{pr}_w \overline{p}_j \leqslant 0$ для всех лучей p_j множества P_G (1.7) из разложения (3.5). Поэтому можем записать неравенство

$$\mathrm{pr}_w \overline{p} \leqslant \mathrm{pr}_w \overline{p}',$$

и цепь p' имеет длину $d(p') < f$. Обозначим v_c^+ *полуплоскость* с границей v, сдвинутой на расстояние c вдоль вектора w. Из двух последних неравенств для n-го координационного окружения $\mathrm{eq}(a_i, n)$ получаем включение

$$\mathrm{eq}(a_i, n) - a_i \subset v_c^+$$

с такой же константой c, как в (3.4). Аналогичное включение справедливо для полуплоскости u_c^+. Пересечение $u_c^+ \cap v_c^+$ — суть внешняя окрестность $(n \cdot \mathrm{sec})_c^+$, поэтому для *вырожденного сектора* sec доказана верхняя граница

$$\mathrm{eq}(a_i, n) - a_i \subset (n \cdot \mathrm{sec})_c^+ \tag{3.6}$$

с константой $c = (f-1)e$. Формально включение (3.6) совпадает с включением (3.4) для сектора роста.

§4. Внутренние окрестности вырожденного многоугольника

4.1. Связные графы G имеют невырожденные многоугольники роста pol_G п. 1.7. Доказательства предыдущего параграфа верхних границ для pol_G не нуждаются в связности графа G, а основываются на его свойствах периодичности и дискретности. Напротив, в доказательстве §2 нижних границ проведено конструирование аппроксимационных цепей p_{ann}. Они получаются склеиванием когерентных цепей из Cst_G (1.10), и для склейки существенно необходима связность графа G.

Если мы хотим рассмотреть рост несвязных графов G, необходимо найти замену условию связности. Имея в виду приложения к графам кристаллографических групп [2], таким условием может быть *секторная связность*: из вершины $a \in V(G)$ существует цепь в $a' \in V(G)$, если конечная вершина a' принадлежит какому-то сектору роста многоугольника $\mathrm{Pol}_G + a$.

Для невырожденного многоугольника Pol_G секторная связность графа G совпадает с его обычной связностью.

Чтобы обеспечить устойчивость роста концов вырожденного многоугольника роста pol_G п. 1.7, приходится дополнительно потребовать *одномасштабность* граничных лучей вырожденного сектора sec с углом $\geqslant \pi$. Пусть v_1 — нормированный вектор вершинной звезды vst_G п. 1.6, определяющий одну из сторон сектора sec, p — произвольный луч из множества P_G (1.7) с сонаправленным v_1 вектором $\overline{p}$ и $d(p)$ — его длина. Одномасштабность граничных лучей для sec означает равенство

$$\overline{p}/d(p) = v_1. \tag{4.1}$$

В данном параграфе будем предполагать, что ориентированный периодический дискретный граф G имеет 1) вырожденный многоугольник Pol_G, 2) граф G является секторно-связным и 3) граничные лучи вырожденного сектора sec одномасштабны.

4.2. Вначале в вырожденном многоугольнике Pol_G с центром в вершине a_1 из фундаментальной области F (1.2) рассмотрим сектор роста $\mathrm{sec}(u, v)$. Поскольку граф G лишь секторно-связный, необходимо модифицировать построение §2 аппроксимационной цепи p_{ann} для геодезической p, соединяющей вершину a_1 с вершиной a из пересечения $\mathrm{eq}(a_1, n) \cap (\mathrm{sec} + a_1)$.

Теперь вершину a_2' выбираем в секторе $\sec(u,v)+a_1$ с минимально возможным расстоянием $d(a_1,a_2')$. Затем аналогично выбираем вершину a_3' из сектора $\sec(u,v)+a_2'$. Цепь

$$a_2' \xrightarrow{p_v} \dots \xrightarrow{p_v} a_2'' \to a_3'' \xrightarrow{p_u} \dots \xrightarrow{p_u} a_3'''$$

максимальной длины выбираем так, чтобы вершина a оставалась в секторе $\sec(u,v)+a_3'''$. Для таких вершин a выполняется включение (2.10) с эффективно вычислимой константой c.

Остались неохваченными вершины a из сектора $\sec(u,v)+a_1$ с проекциями

$$\mathrm{pr}_u\, a < c_u \quad \text{или} \quad \mathrm{pr}_v\, a < c_v,$$

где $c_u = \mathrm{pr}_u\, a_2'$ и $c_v = \mathrm{pr}_v\, a_3'$ — проекции на u, v вдоль v, u. Предположим, что соседний к $\sec(u,v)$ сектор $\sec(v,x)$ будет сектором роста. В нем содержится вершина $a_2' \equiv a_2 \pmod{L}$, и можно построить аппроксимационную цепь

$$p_{\mathrm{ann}} : a_1 \to a_2' \underbrace{\xrightarrow{p_v} \dots \xrightarrow{p_v}}_{k_v' \text{ раз}} a_2'' \to a. \tag{4.2}$$

Выбирая k_v' максимально возможным, методом §2 получаем нижнюю границу для вершины a из сектора $\sec(u,v)+a_1$ при условии $\mathrm{pr}_u\, a < c_u$. Оставшийся случай $\mathrm{pr}_v\, a < c_v$ аналогичен.

4.3. Сам вырожденный сектор $\sec(v,x)$ и случай, когда он граничит с предыдущим сектором роста $\sec(u,v)$, не позволяют по-прежнему строить короткие начальные и конечные участки аппроксимационной цепи p_{ann} (4.2). Необходима оценка их длин.

Пусть вектор v вершинной звезды vst_G реализуется лучами из множества вершин $B = \{b_1, \dots, b_s\}$, $b_i \not\equiv b_j \pmod{L}$. По определению звезды vst_G множество B непустое. Обозначим $V(G)_B$ вершины a из $V(G)$, сравнимые $a \equiv b_i \pmod{L}$ с какой-либо вершиной B. Из периодичности и дискретности графа G следует, что объединение

$$V(G)_B = \bigcup_{1 \leqslant i \leqslant s} (b_i + L)$$

— конечное множество сдвинутых решеток. Спроектируем pr_w его вдоль v на единичный ортогональный v вектор w, направленный из вершины a_1 в вырожденный сектор $\sec(v,x)+a_1$.

Выбираем вершину из $V(G)_B$ с максимальной проекцией

$$\mathrm{pr}_w\, b_i' = m, \tag{4.3}$$

соединяемую цепью $p_i : a_1 \to b_i'$ с вершиной сектора a_1. Все вершины b_i' соседнего сектора роста $\sec(u,v)$ соединимы с a_1, и, согласно верхней границе для вырожденного сектора (3.6), выполняется неравенство

$$\mathrm{pr}_w\, b_i' \leqslant c. \tag{4.4}$$

Вершинный вектор $v \in \mathrm{vst}_G$ получается сжатием некоторого вектора решетки L. Поэтому множество проекций $\mathrm{pr}_w V(G)_B$ дискретное, и, следовательно, указанные векторы b_i' (4.3) существуют.

В случае $m \geqslant 0$ вершина a сектора роста $\sec(u,v) + a_1$ аппроксимируется цепью p_{ann} вида (4.2). При $m < 0$ и $\mathrm{pr}_w a \leqslant m$ схема сохраняется.

Выделим участок цепи $p_r : a^* \to a$ исходной геодезической $p : a_1 \to \cdots \to a$, лежащей ниже уровня m (4.3). Более точно — все вершины участка p_r имеют проекции меньше m, кроме ее начала a^*. Множество проекций

$$m < \mathrm{pr}_w V(G) \leqslant 0 \tag{4.5}$$

конечное, и пусть их число будет k.

Предположим, какой-то уровень из (4.5) содержит более f вершин цепи p_r. В силу (1.3) среди них найдутся две вершины $a_j' \equiv a_j'' \pmod L$. Вектор $\overline{p}_j$ цепи $p_j : a_j' \to a_j''$ имеет направление v. Поэтому они сравнимы с вершиной b_j из B, т.е. $a_j' = b_j'$ и $a_j'' = b_j''$, проекция $\mathrm{pr}_w b_j' > m$, что противоречит выбору (4.3). Таким образом, любой уровень содержит не более f вершин цепи p_r, а вся цепь — длины

$$d(p_r) \leqslant fk. \tag{4.6}$$

Теперь аппроксимационная цепь p_{ann} имеет вид

$$p_{\mathrm{ann}} : a_1 \to b_i' \underbrace{\to \cdots \to}_{k_v' \text{ раз}} b_i'' \to a^* \to a \tag{4.7}$$

с максимальным значением k_v', при котором сектор $\sec(u,v) + b_i''$ еще содержит начальную вершину a^*.

Наконец, пусть вершина a лежит в вырожденном секторе $\sec(v,x)$. По формуле (3.6) ее проекция удовлетворяет неравенству $\mathrm{pr}_w a \leqslant c$, и снова строим аппроксимационную цепь p_{ann} вида (4.7).

Используя те же рассуждения, цепь $p_i : a_1 \to b_i'$ в начале этого пункта можно выбрать длины (4.6).

С помощью построенной аппроксимационной цепи p_{ann} методом §2 получаем *нижние границы* роста

$$(\mathrm{eq}(a_i, n) - a_i) \cap \sec \subset (n \cdot \sec)_c^- \tag{4.8}$$

всех секторов *вырожденного* многоугольника Pol_G секторно-связных графов G. Из конструкции цепи p_{ann} видно, что существует эффективно вычислимая константа c, не зависящая от a_i, n и $\sec$.

§5. Геометрия и порядок координационных окружностей

5.1. Соберем вместе результаты о росте координационного окружения $\mathrm{eq}(a,n)$ п. 1.5 при $n \to \infty$. Из определения двусторонней окрестности (1.12), из нижних границ (2.10), (4.8) и верхних границ (3.4), (3.6) вытекает

Теорема 5.1. *Пусть ориентированный, периодический и дискретный граф G, вложенный в плоскость $\mathbb{R}^2$, является связным или секторно-связным и pol_G — его многоугольник роста п. 1.7. Тогда для n-й координационной окружности $\mathrm{eq}(a,n)$ с центром в произвольной вершине a из $V(G)$ имеет место асимптотическая аппроксимационная формула*

$$\mathrm{eq}(a,n) - a \subset (n \cdot \mathrm{pol}_G)_c. \tag{5.1}$$

В случае связного графа G константа $c = \max(c_{\mathrm{in}} c_{\mathrm{ex}})$ равна максимуму

$$c_{\mathrm{in}} = (5d(\mathrm{Cst}_G) + 1)r(\mathrm{vst}_G) \quad и \quad c_{\mathrm{ex}} = (f-1)e,$$

где $d(\mathrm{Cst}_G)$ — диаметр когерентный звезды (2.4), $r(\mathrm{vst}_G)$ — радиус вершинной звезды (2.9), f — число вершин графа $V(G)$ в фундаментальной области $F = \mathbb{R}^2/L$ относительно решетки периодов L и e — длина наибольшего ребра графа G. Если же граф секторно-связный, то c равна максимуму c_{ex} и некоторой эффективно вычислимой константы из (4.8). В формуле (5.1) константа c не зависит от n и выбора начала роста a.

Приведенные в §2, 4 доказательства нижних границ для $\mathrm{eq}(a,n)$ конструктивны. Они содержат аппроксимации точек из $\mathrm{eq}(a,n)$ регулярными множествами вершин графа G и позволяют усилить приведенную теорему. *Нормируем*

$$B(a,n) = \frac{1}{n}(\mathrm{eq}(a,n) - a)$$

координационные окружности $\mathrm{eq}(a,n)$ и рассмотрим объединение $B(a,n)_\varepsilon$ евклидовых кругов радиуса $\varepsilon > 0$ с центрами в точках из множества $B(a,n)$.

Теорема 5.2. *В предположениях теоремы 5.1 нормированные множества $B(a,n)$ обладают следующими свойствами. 1) Если $(\mathrm{pol}_G)_\varepsilon$ — окрестность ширины 2ε, то*

$$B(a,n) \subset (\mathrm{pol}_G)_\varepsilon \tag{5.2}$$

для $\varepsilon = c/n$ и той же константы c, что и в формуле (5.1).

2) Существует такая константа c_1, возможно, отличная от c и не зависящая от a и n, что множество $B(a,n)_{\varepsilon_1}$ с $\varepsilon_1 = c_1/n$ задает ε_1-покрытие

$$B(a,n)_{\varepsilon_1} \supset \mathrm{pol}_G \tag{5.3}$$

многоугольника роста pol_G п. 1.7.

Включения (5.2) и (5.3) показывают, что нормированные множества $B(a,n)$ аппроксимируют многоугольник роста pol_G, и наоборот. В этом смысле координационные окружности $\mathrm{eq}(a,n)$ асимптотически с точностью до подобия сходятся

$$\mathrm{eq}(a,n) \to \mathrm{pol}_G \quad \text{при } n \to \infty \tag{5.4}$$

к многоугольнику pol_G. В более общих терминах это можно сформулировать так: любой периодический граф $G \subset \mathbb{R}^2$ из теоремы 5.1 имеет многоугольную pol_G-форму роста (5.4), не зависящую от выбора начальной вершины a из $V(G)$.

5.2. Аппроксимация (5.1) множества $\frac{1}{n}\,\mathrm{eq}(a,n)$ многоугольником pol_G позволяет вычислить среднее значение числа вершин, содержащихся в $\mathrm{eq}(a,n)$ для растущего n. При вычислении используются нижние (2.10), (4.8) и верхние (3.4), (3.6) границы для $\mathrm{eq}(a,n)$.

Возьмем какую-то вершину a_i из фундаментальной области $F = \mathbb{R}^2/L$ (1.2) и сдвинем ее $L_i = L + a_i$ на все векторы из L. Поскольку L_i является решеткой и полоса конечной ширины вокруг границы многоугольника $n\cdot\mathrm{pol}_G$ содержит $O(n)$ вершин из L_i, то множество

$$S_i(a,n) = L_i \cap (n\cdot \mathrm{Pol}_G + a),$$

где Pol_G — невырожденный или вырожденный многоугольник п. 1.7 и a — фиксированная вершина из $V(G)$, содержит число вершин, равное

$$|S_i(a,n)| = \frac{|\,\mathrm{Pol}_G\,|}{|F|}n^2 + O(n).$$

Вертикальными скобками обозначены *площади* многоугольника Pol_G и фундаментальной области F. Объединение $S(a,n)$ многоугольников $S_1(a,n),\ldots,$ $S_f(a,n)$ для всех вершин a_i из F совпадает с множеством вершин графа G в многоугольнике $n\cdot\mathrm{Pol}_G + a$, и по предыдущей формуле получаем

$$|S(a,n)| = \frac{f\cdot|\,\mathrm{Pol}_G\,|}{|F|}n^2 + O(n). \tag{5.5}$$

Рассмотрим *кольцо* $S(a;n_1,n) = S(a,n)\setminus S(a,n_1)$, ограниченное многоугольниками $n_1\cdot\mathrm{pol}_G + a$ и $n\cdot\mathrm{pol}_G + a$ с коэффициентами $0 \leqslant n_1 \leqslant n$. В силу формулы (5.1) и определения координационных окружностей п. 1.5 $\mathrm{eq}(a,n)$ имеет место дизъюнктивное объединение

$$S(a;n_1,n) = \bigcup_{n_1^+\leqslant m\leqslant n^-} \mathrm{eq}(a,m) \cup R(n_1) \cup R(n). \tag{5.6}$$

Здесь использованы обозначения $n^\pm = n \pm c_G$ с некоторой константой $c_G >$ 0, определяемой многоугольником Pol_G и константой c из формулы (5.1). Множество

$$R(n) = \bigcup_{n^- < m \leqslant n^+} (\mathrm{eq}(a,m) \cap S(a;n_1,n))$$

— также дизъюнктивное объединение координационных окружностей, возможно, частично входящих в кольцо $S(a;n_1,n)$. Второе множество $R(n_1)$ из (5.6) определяется аналогично.

Чтобы оценить количество вершин в множествах $R(n_1)$ и $R(n)$, снова применим формулу (5.1). Из нее вытекает оценка

$$|\operatorname{eq}(a,n)| = O(n)$$

для числа вершин в n-й координационной окружности. Отсюда и из разбиения (5.6) следует равенство

$$\sum_{n_1^+ \leqslant m \leqslant n^-} |\operatorname{eq}(a,m)| = |S(a;n_1,n)| + O(n).$$

С помощью асимптотической формулы (5.5) найдем число вершин в многоугольном кольце $S(a;n_1,n)$, и последнее равенство перепишем в более удобном виде

$$\frac{1}{\Delta n} \sum_{n-\Delta n < m \leqslant n} |\operatorname{eq}(a,m)| = \frac{2f \cdot |\operatorname{Pol}_G|}{|F|} n + O\Big(\frac{n}{\Delta n}\Big). \tag{5.7}$$

Определим *среднее значение* $\langle \operatorname{eq}(a,n)\rangle$, равное левой части в формуле (5.7), и еще *среднее значение*

$$\langle \operatorname{Pol}_G \rangle = f \cdot |\operatorname{Pol}_G|/|F|.$$

Из формулы (5.7) вытекает

Предложение 5.1. *Пусть G — периодический граф из теоремы* (5.1). *При условии $0 \leqslant \Delta n \leqslant n$ и $\Delta n \to \infty$, когда $n \to \infty$, для среднего значения $\langle \operatorname{eq}(a,n)\rangle$ числа вершин n-й координационной окружности $\operatorname{eq}(a,n)$ справедлива асимптотическая формула*

$$\langle \operatorname{eq}(a,n)\rangle = 2\langle \operatorname{Pol}_G\rangle n + O\Big(\frac{n}{\Delta n}\Big). \tag{5.8}$$

Константа в остаточном члене не зависит от n и выбора начальной вершины $a \in V(G)$.

Замечание 1. Среднее значение $\langle \operatorname{eq}(a,n)\rangle$ и формулу (5.8) можно интерпретировать как *среднюю скорость роста* периодического графа G. С точностью до остаточного члена $O(\frac{n}{\Delta n})$ она не зависит от начальной вершины роста $a \in V(G)$.

Замечание 2. Нетрудно выяснить *геометрический смысл* коэффициента $\langle \operatorname{Pol}_G\rangle$ в формулах (5.5) и (5.8). Напомним, что f равно числу различных по $\operatorname{mod} L$ вершин в фундаментальной области F (1.2). Отношение $|F|/f$ есть *средняя площадь*, приходящаяся на одну вершину графа G, а тогда $\langle \operatorname{Pol}_G\rangle = |\operatorname{Pol}_G|/(|F|/f)$ означает среднее число вершин графа G, лежащих в многоугольнике Pol_G. Сравнение с площадью круга приводит к гипотетическому неравенству

$$\langle \operatorname{Pol}_G\rangle \leqslant \pi, \tag{5.9}$$

из которого для площади многоугольника Pol_G следовало бы неравенство

$$|\operatorname{Pol}_G| \leqslant \frac{\pi|F|}{f}. \tag{5.10}$$

§6. Плоские кристаллографические группы

6.1. В §1 класс графов G строился из предположения о включении в него графов *плоских кристаллографических групп* G_2^2. Эти группы G_{kp} используются в кристаллографии благодаря их связям с пространственными группами [1], поскольку они описывают проекции и плоские сечения трехмерных кристаллографических структур.

Основной в G_2^2 является коммутативная группа p1 [2] параллельных переносов или трансляций плоскости $\mathbb{R}^2$. Она порождается двумя независимыми *переносами* X, Y и через них отождествляется с решеткой $L = \mathbb{Z}[X,Y]$, группа трансляций которой — суть p1. Если фундаментальную область $F = \mathbb{R}^2/L$ выбирать выпуклой, то она центрально-симметрична и будет параллелограммом или шестиугольником с центром симметрии. *Полуоборот* T переводит F в себя и меняет направления переносов X, Y. Поэтому T можно присоединить к p1 и получить расширение — группу p2. Группы общей сингонии p1 и p2 аффинные, в остальных пятнадцати группах из G_2^2 присутствует угол и они евклидовы: 7 групп с прямоугольной фундаментальной областью F, 4 с квадратной F и 5 с F из правильных треугольников. Сами группы получаются также добавлением подходящих симметрий, разрешенных фундаментальной областью F.

6.2. Элементы $\sigma_1, \ldots, \sigma_m$ некоторой группы называют *порождающими*, если любой элемент ее разлагается в произведение элементов $\sigma_1, \sigma_1^{-1}, \ldots, \sigma_m, \sigma_m^{-1}$. В G_2^2 все кристаллографические группы

$$G_{\text{kp}} = \text{gr}(\sigma_1^{\pm 1}, \ldots, \sigma_m^{\pm 1})$$

конечно-порождены и задаются *определяющими соотношениями* между порождающими. Точнее, задаются *кодом* — порождающими и соотношениями.

Например, группа $\text{p1} = \text{gr}(X, Y)$ задается параллельными переносами X, Y и соотношением $XY = YX$. При шестиугольном выборе фундаментальной области F эта же группа $\text{p1} = \text{gr}(X, Y, Z)$ задается дополнением третьего параллельного переноса $Z = X^{-1}Y^{-1}$ и кодом

$$XYZ = ZYX = E.$$

6.3. Группа G_{kp}, действуя на фундаментальную область $F_1 = \mathbb{R}^2/G_{\text{kp}}$, производит разбиение плоскости $\mathbb{R}^2$ на равные многоугольники $S \cdot F_1$ для всех симметрий S из G_{kp}. Для разных S фундаментальные многоугольники $S \cdot F_1$ могут иметь только общие стороны. Выделим в F_1 внутреннюю точку и отождествим ее с *единицей* E группы G_{kp}. Отображение

$$G_{\text{kp}} \ni S \mapsto S \cdot E \in S \cdot F_1 \tag{6.1}$$

индуцирует *вложение* $\text{em} : G_{\text{kp}} \hookrightarrow \mathbb{R}^2$ группы G_{kp} в плоскость $\mathbb{R}^2$, позволяющее строить на плоскости ориентированные графы G.

Вершины $V(G)$ такого графа — это в точности все элементы группы G_{kp}. Чтобы построить *ребра* $E(G)$ нужно в группе выбрать какое-то подмножество элементов $S_1, \ldots, S_e$. Вершины S и S' соединяются направленным из S в S' *ребром* при условии $S' = S_i \cdot S$ для некоторого S_i. Таким образом, из каждой вершины $S \in V(G) = G_{\text{kp}}$ выходит e различных S_i-*ребер*, $i = 1, \ldots, e$.

В случае *инволюции* S_i, т.е. $S_i^2 = E$, два ребра $S \to S'$ и $S' \to S$ заменим одним *ненаправленным* S_i-*ребром*.

Выясним свойства так определенных ориентированных графов

$$G = \mathrm{graph}(G_{\text{kp}}; S_1, \ldots, S_e) \tag{6.2}$$

и условимся опускать в обозначении указание на группу, когда ясно, о какой группе G_{kp} идет речь.

Всякая кристаллографическая группа G_{kp} содержит *нормальный делитель* — двумерную подгруппу трансляций L, поэтому граф G (6.2) периодический. Фактор G_{kp}/L конечный, его *порядок* f совпадает с числом вершин в *фундаментальной области* $F = \mathbb{R}^2/L$, и, следовательно, граф G (6.2) дискретный.

Предположим, что выбранные элементы $S_1, \ldots, S_e$ обладают свойством

$$G_{\text{kp}} = \mathrm{gr}(S_1, \ldots, S_e), \tag{6.3}$$

т.е. любой элемент σ из G_{kp} разлагается в произведение $\sigma = S_{i_k} \ldots S_{i_1}$, то $S' = \sigma S$ соединяется с S последовательностью $S_{i_1}, \ldots, S_{i_k}$ ребер. Обратно, из связности графа G вытекает условие (6.3).

Пример графа $G = \mathrm{graph}(\mathrm{p1}; X^2, Y)$ указывает на трудности алгебраического определения секторной связности общего графа G (6.2) в терминах его S_i-ребер. Также приходится использовать геометрические соображения для выяснения одномасштабности граничных лучей вырожденных секторов.

6.4. Как уже отмечалось, вложение (6.1) группы G_{kp} в плоскость $\mathbb{R}^2$ отождествляет ее элементы с вершинами графа G (6.2). Данное соответствие показывает, что геодезическое расстояние $d(E, S_1')$ в графе от единицы E группы G_{kp} до элемента S_1' есть *длина* $l(S_1') = n$ этого элемента — минимальная длина разложений $S_1' = S_{i_n} \ldots S_{i_1} E$. Умножение на S из G_{kp} сохраняет такие разложения, и из равенства $S' = S_{i_n} \ldots S_{i_1} \cdot S$ для $S' = S_1' \cdot S$ вытекает *инвариантность* расстояния

$$d(S, S') = d(E, S' \cdot S^{-1}) \tag{6.4}$$

относительно умножения справа

$$G \xrightarrow{S} G : X \mapsto X \cdot S \tag{6.5}$$

на элементы S группы G_{kp}. Инвариантность расстояния есть лишь одно из следствий *действия* (6.5) группы G_{kp} на ее граф G (6.2). В п. 1.1 отмечалось, что группа автоморфизмов $\mathrm{Aut}\, G$ периодического графа G с решеткой периодов L содержит L как подгруппу. Из (6.5) получаем усиление этого утверждения

$$\operatorname{Aut} G \supset G_{\text{kp}} \supset L$$

для графа G (6.2) кристаллографической группы G_{kp}. Поэтому любой такой граф G является G_{kp}-однородным относительно действия (6.5).

В терминах длины $l(S')$ координационные окружности п. 1.5 графа G определяются как множества элементов

$$\operatorname{eq}(S,n) = \{S' \in G_{\text{kp}} : l(S' \cdot S^{-1}) = n\}. \tag{6.6}$$

Из инвариантности расстояния (6.4) вытекает

$$|\operatorname{eq}(S,n)| = \operatorname{eq}(E,n)| \quad \text{для любого } S \in G_{\text{kp}} \tag{6.7}$$

— независимость количества вершин графа G (6.2) в n-й координационной окружности от выбора центра S. Предложение 5.1 позволяет сделать вывод только об асимптотическом равенстве средних значений $\langle \operatorname{eq}(S,n)\rangle$ для всех S из G_{kp}. Сходимость (5.4)

$$eq(S,n) \to \operatorname{pol}_G \quad \text{при } n \to \infty$$

показывает, что из G_{kp}-инвариантности графа G следует не только независимость порядка координационной окружности $\operatorname{eq}(S,n)$ от выбора центра S, но и асимптотическая независимость ее формы роста pol_G.

6.5. Приведем многоугольники роста pol_G, вершинные звезды vst_G п. 1.7 и средние значения $\langle \operatorname{Pol}_G\rangle$ п. 5.2 графов

$$G = \operatorname{graph}(G_{\text{kp}}; S_1, \ldots, S_e)$$

кристаллографических групп $G_{\text{kp}} = \text{p1}, \text{p2}, \text{pm}, \ldots$ Обозначения и выбор S_i-ребер, как у Кокстера [2, с. 64–79]. Базис e_1, e_2 подгруппы трансляций L соответствует сингонии группы G_{kp}: общий, прямоугольный, квадратный и гексагональный. Графы G — связные только в случае невырожденных многоугольников роста pol_G. Если pol_G вырожден, то графы G секторно-связные и граничные лучи вырожденного сектора одномасштабны п. 4.1. Число вершин многоугольника Pol_G обозначим m, m^- для вырожденного многоугольника, а $m_+ = m, m_-$ указывают, правильный он или нет. Порядок f фактор-группы G_{kp}/L равен числу вершин графа G в фундаментальной области $F = \mathbb{R}^2/L$ (2.1). Из теорем 5.1 и 5.2 вытекает

Теорема 6.1. *Графы G (6.2) плоских кристаллографических групп G_{kp} имеют следующие геометрические характеристики роста.*

Таблица

G_{kp}	f	pol_G	$\langle \mathrm{Pol}_G \rangle$	vst_G
		Общая сингония		
p1	1	3^-_-	$1/2$	e_1, e_2
p2	2	6_-	$3/2$	$\pm\frac{1}{2}e_1, \pm\frac{1}{2}e_2, \pm\frac{1}{2}(e_1+e_2)$
		Прямоугольная сингония		
pm	2	3^-_-	1	$\pm\frac{1}{2}e_1, e_2$
pg	2	3^-_-	$1/2$	$\frac{1}{2}(\pm e_1 + e_2)$
cm	2	4^-_-	$1/2$	$\frac{1}{2}e_1, \frac{1}{2}e_2, \frac{1}{2}(e_1+e_2)$
pmm	4	4_-	2	$\pm\frac{1}{2}e_1, \pm\frac{1}{2}e_2$
pmg	4	6_-	$3/2$	$\pm\frac{1}{2}e_1, \pm\frac{1}{4}(e_1 \pm e_2)$
pgg	4	4	2	$\pm\frac{1}{2}e_1, \pm\frac{1}{2}e_2$
cmm	4	8_-	$4/3$	$\pm\frac{1}{3}e_1, \pm\frac{1}{3}e_2, \pm\frac{1}{4}(e_1 \pm e_2)$
		Квадратная сингония		
p4	4	4	$8/9$	$\pm\frac{1}{3}e_1, \pm\frac{1}{3}e_2$
p4m	8	8_-	$4/3$	$\pm\frac{1}{4}e_1, \pm\frac{1}{4}e_2, \pm\frac{1}{6}(e_1 \pm e_2)$
p4g	8	4	$8/9$	$\pm\frac{1}{6}(e_1 \pm e_2)$

Гексагональная сингония

p3	3	3	3/2	$\frac{1}{3}(e_1+e_2), \frac{1}{3}(e_1-2e_2), \frac{1}{3}(-2e_1+e_2)$
	3	6	1	$\pm\frac{1}{3}e_1, \pm\frac{1}{3}e_2, \pm\frac{1}{3}(e_1+e_2)$
p31m	6	6_-	3/4	$\frac{1}{6}e_1, -\frac{1}{4}e_1, \frac{1}{4}e_2, -\frac{1}{6}e_2, \frac{1}{4}(e_1-e_2), -\frac{1}{6}(e_1-e_2)$
p3m1	6	6	3/2	$\pm\frac{1}{6}(e_1+e_2), \pm\frac{1}{6}(2e_1-e_2), \pm\frac{1}{6}(-e_1+2e_2)$
p6	6	6	18/25	$\pm\frac{1}{5}e_1, \pm\frac{1}{5}e_2, \pm\frac{1}{5}(e_1-e_2)$
p6m	12	12_-	6/5	$\pm\frac{1}{6}e_1, \pm\frac{1}{6}e_2, \pm\frac{1}{6}(e_1-e_2), \pm\frac{1}{10}(-e_1+2e_2)$ $\pm\frac{1}{10}(e_1+e_2), \pm\frac{1}{10}(2e_1-e_2)$

Группа $G_{\mathrm{kp}} = p4m$ порождается отражениями R, R_1, R_2 в сторонах прямоугольного равнобедренного треугольника и имеет код

$$R^2 = R_1^2 = R_2^2 = (R_1R_2)^2 = (R_2R)^4 = (RR_1)^4 = E.$$

Координационная окружность $\mathrm{eq}(E,n)$ состоит из элементов $X = S_1 \dots S_n$, где любое $S_i = R, R_1$ или R_2 и X не представимо меньшим числом сомножителей. Формула (5.2) и теорема 6.1 дают среднее значение

$$\langle \mathrm{eq}(E,n)\rangle = \frac{8}{3}n + O\Big(\frac{n}{\Delta n}\Big). \tag{6.8}$$

В плоскости $\mathbb{R}^2$ множество $\mathrm{eq}(E,n)$ асимптотически аппроксимируется неправильным восьмиугольником.

Аналогично группа $p6m$ порождена отражениями половины равностороннего треугольника и у нее код

$$R^2 = R_1^2 = R_2^2 = (R_1R_2)^3 = (R_2R)^2 = (RR_1)^6 = E.$$

Для этой группы среднее значение $\langle \mathrm{eq}(E,n)\rangle$ равно

$$\langle \mathrm{eq}(E,n)\rangle = \frac{12}{5}n + O\Big(\frac{n}{\Delta n}\Big), \tag{6.9}$$

и форма роста множества $\mathrm{eq}(E,n)$ — неправильный 12-ти угольник.

§7. Обобщения и открытые проблемы

7.1. Из теорем 5.1 и 5.2 вытекает независимость формы роста координационной окружности $\mathrm{eq}(a,n)$ при $n \to \infty$ от выбора ее центра a из $V(G)$. Вместо a затравкой можно взять любое конечное подмножество вершин A. Множество $\mathrm{eq}(A,n)$ состоит из вершин x с расстоянием

$$d(A,x) = \min_{a\in A} d(a,x) = n,$$

и в этом случае имеет место аппроксимация

$$\mathrm{eq}(A,n) - a \subset (n \cdot \mathrm{pol}_G)_c,$$

где a — фиксированная вершина из A и константа c существенно зависит от *d-диаметра* $d(A)$.

7.2. Пусть дано периодическое *разбиение* Til на *многоугольники* M плоскости $\mathbb{R}^2$. Отметим в каждом M по точке a, сохраняя периодичность Til. Точку a соединяем ребром с a' из M' при условии, если многоугольники M и M' имеют общую границу длины, скажем, больше $\varepsilon > 0$. Предположим, каждый M содержит круг радиуса $r \geqslant \varepsilon_1 > 0$. При таких условиях граф $G \subset \mathbb{R}^2$ с вершинами a будет периодическим, дискретным и связным. Его ребра ненаправленные, поэтому граф G имеет невырожденный центрально-симметричный многоугольник роста pol_G. Самоподобный рост координационного круга $\mathrm{Eq}(a,n)$ п. 1.5 при $n \to \infty$ интересно сопоставить с ростом физических кристаллов.

7.3. Периодические графы G можно заменить *сетями* G_w, ребрам которой приписаны *веса* или *длины* $w(e) \geqslant 0$. У графов G все веса единичные. *Геодезическую* из вершины x и y определим как цепь

$$p : x \xrightarrow{e_1} \ldots \xrightarrow{e_k} y$$

минимально возможного веса (длины)

$$d(p) = d(x,y) = \sum_{1 \leqslant i \leqslant k} w(e_i). \tag{7.1}$$

Через метрику $d(x,y)$ введем эквидистантные множества

$$\mathrm{eq}(a,n) = \{x \in V(G_w) : \mathrm{int}\, d(a,x) = n\}. \tag{7.2}$$

Целая часть int усредняет множества $\mathrm{eq}(a,n)$ с $n = 0,1,2,\ldots$ и может быть заменена усреднением более подходящего масштаба. Определение звезды St_{G_w} (1.8) не использует веса w, а в определении нормированной звезды st_{G_w} (1.9) длина цепи p заменяется весом $d(p)$ (7.1). Для периодических цепей G_w результаты теорем 5.1 и 5.2 сохраняются. Теперь константа c в определении окрестности $(n \cdot \mathrm{pol}_{G_w})_c$ дополнительно зависит от весов $w(e)$ ребер $e \in E(G)$ и от масштаба усреднения множеств $\mathrm{eq}(a,n)$ (7.2). Для достаточно больших значений n вершинная звезда vst_{G_w} позволяет выбирать оптимальные маршруты движения по сети G_w, если указано направление конечной вершины. Векторы v_1 из vst_{G_w}, как и в случае графов G, имеют направления в узлы решетки периодов L. Свяжем с сетью G_w ее граф G с единичными весами. Равенство

$$\mathrm{St}_{G_w} = \mathrm{St}_G \tag{7.3}$$

показывает, что при любом выборе весов $w(e)$ ребер $e \in E(G)$ многоугольник роста pol_{G_w} сохраняет угловые направления (при этом некоторые направления могут исчезать — вырождаться) и меняет лишь длины единичных векторов $u_1, v_1, \ldots$ Неориентированной сети G_w отвечает (7.3) неориентированный граф G. Поэтому неориентированные связные сети G_w имеют центрально-симметричные многоугольники роста pol_{G_w}.

При тех же предположениях о сетях G_w, что и для их графов G, для среднего значения $\langle \mathrm{eq}(a,n) \rangle$ числа вершин эквидистантного множества $\mathrm{eq}(a,n)$ (7.2) выполняется асимптотическая формула

$$\langle \mathrm{eq}(a,n) \rangle = 2\langle \mathrm{Pol}_{G_w} \rangle n + O\Big(\frac{n}{\Delta n}\Big)$$

с коэффициентом $\langle \mathrm{Pol}_{G_w} \rangle = f \cdot |\,\mathrm{Pol}_{G_w}\,| / |F|$.

Следующие проблемы могут представлять интерес.

7.4. Кристаллографические группы G_{kp} позволяют строить *двухцветные графы*

$$G = \mathrm{graph}(G_{\mathrm{kp}}; S_1, \ldots, S_e; R_1, \ldots, R_h). \tag{7.4}$$

В конструкцию графа (6.2) помимо *левых ребер* $E(G)_l = E(G)$ добавляются *правые ребра* $E(G)_r$ путем выделения в группе G_{kp} элементов $R_1, \ldots, R_h$. Вершины S и S' соединяются направленным из S в S' ребром, если $S' = S \cdot R_i$ для некоторого R_i. Соединяющую вершину S с S' цветопеременную последовательность ребер назовем *цепью* и введем соответствующую метрику $d(S, S')$.

В общем случае ребрам L-периодического графа G приписываются цвета так, что получается L'-периодический цветной граф G_{col} и L' допускается быть подрешеткой L. Цепи удовлетворяют заданному ограничению на чередование цветов соответствующих ребер.

7.5. Пусть $G \subset \mathbb{R}^2$ — связный периодический неориентированный граф. Нарушим его периодичность *примесями*: некоторые вершины исключаются из G и считаются примесями. Выясним при каких условиях *возмущенный граф* G_{mix} сохраняет самоподобный рост

$$\mathrm{eq}(a,n)_{\mathrm{mix}} \to \mathrm{pol}_G \quad \text{при } n \to \infty. \tag{7.5}$$

Приведенный метод позволяет это доказать для графов G_{mix}, содержащих $o(n)$ примесей в многоугольнике $n \cdot \mathrm{Pol}_G$. На распределение примесей накладываются (r, R)-*ограничения*, аналогичные ограничениям Делоне [3]:

1) каждая примесь ограничена замкнутой цепью длины $\leqslant r$;

2) примеси находятся друг от друга на расстоянии $\geqslant R$.

Параметры r, R зависят от графа G.

Численные эксперименты показывают, что ширина c окрестности $(n \cdot \mathrm{pol}_G)_c$ в (7.5) стремится к бесконечности при величине примесей $\varepsilon \cdot n^2$ с любым $\varepsilon > 0$.

Для квадратного неориентированного графа $G = \mathbb{Z}^2$ с целыми вершинами и ребрами, соединяющими соседние по горизонтали и вертикали точки из $\mathbb{Z}^2$, при доле примесей $\approx 0,4$ рост графа G останавливается. При просачивании по решетке $\mathbb{Z}^2$ в задаче узлов известно *критическое значение* для примесей $\approx 0,41$.

7.6. Приведенная *аффинная конструкция* распространяется на периодические графы $G \subset \mathbb{R}^m$ высших размерностей $m \geqslant 3$ и, в частности, на графы m-мерных кристаллографических групп $G_{\text{кр}} \subset G_m^m$.

Возьмем какую-либо группу Gr с конечным множеством порождающих $\sigma_1, \dots, \sigma_h$. Аналогично (6.2) определим ее *граф*

$$G = \mathrm{graph}(\mathrm{Gr}; \sigma_1, \sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_h, \sigma_h^{-1})$$

и обозначим $\mathrm{Eq}(E, n)$ ср. п. 1.5 множество вершин $S \in \mathrm{Gr}$ с расстоянием $d(E, S) \leqslant n$ или множество элементов длины, не превосходящей n. Группа Gr имеет *полиномиальный рост степени* $\deg(\mathrm{Gr}) \leqslant d$, если число элементов в $\mathrm{Eq}(E, n)$ не превосходит $cn^d + 1$. Так, m-мерные кристаллографические группы $G_{\text{кр}}$ имеют периодические графы G и полиномиальный рост степени $d = m$ ср. [7].

7.7. Какие непериодические разбиения и графы имеют самоподобный рост и, в частности, многоугольный рост? Квазикристаллы [4], как и периодические структуры, обладают свойством самоподобия. Не это ли свойство лежит в основе явления самоподобного роста?

Список литературы

[1] Вайнштейн Б. К., *Современная кристаллография*. Т. 1, Наука, М., 1979.

[2] Кокстер Г., Мозер У., *Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп*, Наука, М., 1980.

[3] Danzer L., Dolbilin N., *Delone graphs; some species and local rules*, The Mathematics of Long-Range Aperiodic Order (Waterloo, ON, 1995) (R. V. Moody, ed.), NATO Adv. Sci. Inst. Ser. C Math. Phys. Sci., vol. 489, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1997, pp. 85–114.

[4] Dworkin S., Shieh J., *Deceptions in quasicrystal growth*, Comm. Math. Phys. **168** (1995), 337–352.

[5] Fried D., Goldman W., *Three-dimensional affine crystallographic groups*, Adv. Math. **47** (1983), 1–49.

[6] Schwarzenberger R., *N-dimensional crystallography*, Res. Notes Math., vol. 41, Pitman, San Francisco, CA-London, 1980.

[7] Tits J., *Groupes à croissance polynomiale (d'aprés M. Gromov et al.)*, Séminaire Bourbaki. Vol. 1980/81, Exposés 561–578, Lecture Notes in Math., vol. 901, Springer-Verlag, Berlin etc., 1981, pp. 176–188 (exp. 572).

Поступило 3 апреля 2000 г.