Berechnung von Dirichletzellen kristallographischer Gruppen mittels endlicher Wortlänge

Lukas Schnelle

Grüppchen 2025 In Zusammenarbeit mit Alice C. Niemeyer und Reymond Akpanya

Endliche Wortlänge

Topologisch interlockende Baugruppen

Ziel

TIA

•00

Konstruiere eine Anordnung von gleichen Blöcken, sodass wenn ein Teil fixiert ist, alles fixiert ist.

Endliche Wortlänge

Topologisch interlockende Baugruppen

Ziel

TIA

•00

Konstruiere eine Anordnung von gleichen Blöcken, sodass wenn ein Teil fixiert ist, alles fixiert ist.

Existenz

Gibt es solche Blöcke?



Beispiel

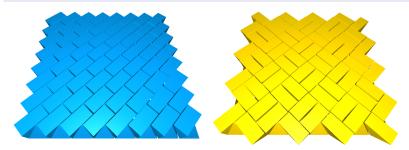
Alle fünf platonischen Solide

- Tetraeder
- Hexaeder (a.k.a. Würfel)
- Oktaeder
- Dodekaeder
- Ikosaeder



Bisherige Arbeiten

In [2] wurden solche Blöcke durch Deformation von Fundamentalbereichen von kristallographischer Gruppen erzeugt.



Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren.

<u>•00</u>0000000000

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Dann bezeichnen wir mit d(v, w) := ||v - w|| die Euklidische Distanz.

Notation

Kristallographische Gruppen

•00000000000

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Dann bezeichnen wir mit d(v, w) := ||v - w|| die Euklidische Distanz.

Definition

Seien $n \in \mathbb{N}$ und $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Dann bezeichnen wir φ als *Isometrie*, falls für alle $v, w \in \mathbb{R}^n$:

$$d(v^{\varphi},w^{\varphi})=d(v,w).$$

Notation

Kristallographische Gruppen

•00000000000

Seien $v, w \in \mathbb{R}^n$ Vektoren. Dann bezeichnen wir mit d(v, w) := ||v - w|| die Euklidische Distanz.

Definition

Seien $n \in \mathbb{N}$ und $\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Dann bezeichnen wir φ als *Isometrie*, falls für alle $v, w \in \mathbb{R}^n$:

$$d(v^{\varphi}, w^{\varphi}) = d(v, w).$$

Weiterhin

$$E(n) := \{ \varphi \mid \varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n \text{ Isometrie} \}.$$

Sei $n \in \mathbb{N}$ fest. Dann

Kristallographische Gruppen

00000000000

- $(E(n), \circ)$ ist Gruppe, genannt Euklidische Gruppe,
- E(n) wirkt auf \mathbb{R}^n .

Bemerkung

Sei $n \in \mathbb{N}$ fest. Dann

- $(E(n), \circ)$ ist Gruppe, genannt Euklidische Gruppe,
- E(n) wirkt auf \mathbb{R}^n .

Notation

Sei $n \in \mathbb{N}$. Wir bezeichnen mit O(n) die *orthogonale Gruppe*. Diese ist isomorph zur Menge der orthogonalen $n \times n$ Matrizen.

Endliche Wortlänge

Es gilt,
$$E(n)\cong O(n)\ltimes \mathbb{R}^n$$
. D.h. für $\varphi\in E(n)$ schreibe $\varphi=(\varphi_o,\varphi_t),$

wobei $\varphi_o \in O(n)$ als orthogonaler Anteil bezeichnet wird und $\varphi_t \in \mathbb{R}^n$ als translatiorischer Anteil.

00000000000

Es gilt, $E(n) \cong O(n) \ltimes \mathbb{R}^n$. D.h. für $\varphi \in E(n)$ schreibe

$$\varphi = (\varphi_o, \varphi_t),$$

wobei $\varphi_o \in O(n)$ als orthogonaler Anteil bezeichnet wird und $\varphi_t \in \mathbb{R}^n$ als translatiorischer Anteil.

Betrachte $v \in \mathbb{R}^n$. Dann wirkt φ auf v indem

$$v^{(\varphi_o,\varphi_t)}=v^{\varphi_o}+\varphi_t.$$

Betrachte

Kristallographische Gruppen

$$p4 := \langle \pi, \tau_1, \tau_2 \rangle$$

wobei

$$\pi = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right),$$

Beispiel

Kristallographische Gruppen

00000000000

Betrachte

$$p4 := \langle \pi, \tau_1, \tau_2 \rangle$$

wobei

$$\pi = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right),$$

$$\tau_1 = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right),$$

00000000000

Betrachte

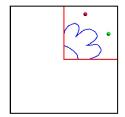
$$p4 := \langle \pi, \tau_1, \tau_2 \rangle$$

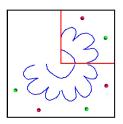
wobei

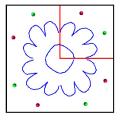
$$\pi = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix},$$

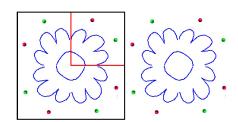
$$\tau_1 = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix},$$

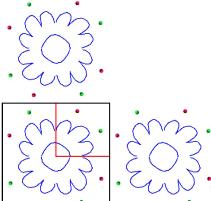
$$\tau_2 = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}.$$

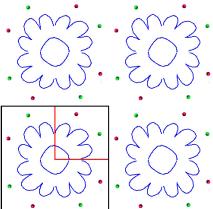


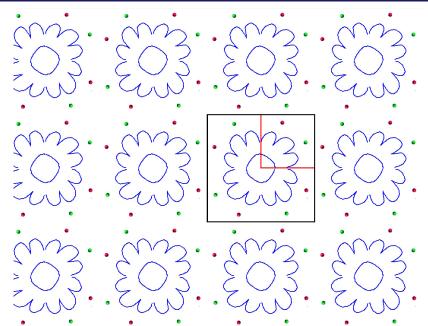










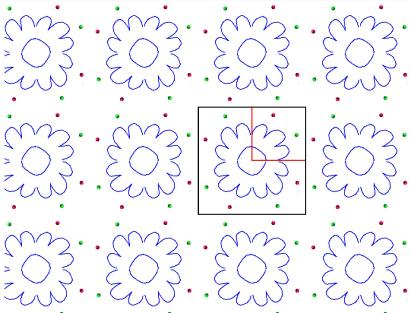


000000000000

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Dann wird der Translationennormalteiler von □ definiert als

$$\mathcal{T}(\Gamma) := \{ (\varphi_o, \varphi_t) \in \Gamma \mid \varphi_o = Id \}.$$

 $\mathcal{T}(\Gamma)$ ist ein Normalteiler von Γ .



Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Dann wird der Translationennormalteiler von Γ definiert als

$$\mathcal{T}(\Gamma) := \{ (\varphi_o, \varphi_t) \in \Gamma \mid \varphi_o = Id \}.$$

 $\mathcal{T}(\Gamma)$ ist ein Normalteiler von Γ .

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Dann definieren wir die *Punktgruppe* von Γ als die Faktorgruppe

$$\mathcal{P}(\Gamma) := \Gamma/\mathcal{T}(\Gamma).$$

Proposition

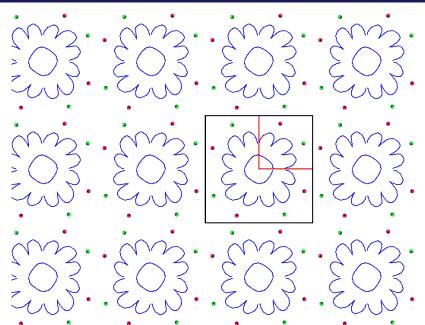
Kristallographische Gruppen

00000000000

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe. Die Menge

$$\mathcal{L}(\Gamma) := \{ \varphi_t \mid \varphi \in \mathcal{T}(\Gamma) \}$$

enthält *n* linear unabhängige Vektoren.



Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe und $F \subseteq \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene Menge. Dann heißt F ein Fundamentalbereich von Γ falls

(i)
$$\bigcup_{\gamma \in \Gamma} F^{\gamma} = \mathbb{R}^n$$

Kristallographische Gruppen

000000000000

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe und $F \subseteq \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene Menge. Dann heißt F ein Fundamentalbereich von Γ falls

(i) $\bigcup_{\gamma \in \Gamma} F^{\gamma} = \mathbb{R}^n$

Kristallographische Gruppen

000000000000

(ii) es gibt ein Vertretersystem $V\subseteq \mathbb{R}^n$ von den Bahnen der Operation von Γ auf \mathbb{R}^n , sodass

$$F^{\circ} \subseteq V \subseteq F$$
.

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe und $F \subseteq \mathbb{R}^n$ eine abgeschlossene Menge. Dann heißt F ein Fundamentalbereich von Γ falls

(i) $\bigcup_{\gamma \in \Gamma} F^{\gamma} = \mathbb{R}^n$

Kristallographische Gruppen

000000000000

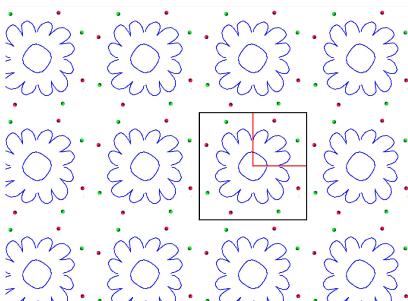
(ii) es gibt ein Vertretersystem $V \subseteq \mathbb{R}^n$ von den Bahnen der Operation von Γ auf \mathbb{R}^n , sodass

$$F^{\circ} \subseteq V \subseteq F$$
.

Definition

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine Untergruppe. Dann heißt Γ kristallographische Gruppe falls Γ eine diskrete Untergruppe ist und ein kompakter Fundamentalbereich von Γ existiert.

In der Literatur werden kristallographische Gruppen (insbesondere der Dimension 3) auch als Raumgruppen bezeichnet.



In 1900 hat Hilbert 23 Probleme bei einem Kongress vorgestellt, die zu diesem Zeitpunkt ungelöst waren.

18. Hilbert Problem

000000000000

Gibt es für festes *n* **endlich** viele kristallographische Gruppen?

In 1900 hat Hilbert 23 Probleme bei einem Kongress vorgestellt, die zu diesem Zeitpunkt ungelöst waren.

18. Hilbert Problem

റററററ്ററ്ററ്

Gibt es für festes *n* **endlich** viele kristallographische Gruppen?

Bieberbachsche Sätze (1910)

Ja, für festes $n \in \mathbb{N}$ gibt es nur endlich viele kristallographische Gruppen.

Für n = 2 gibt es 17, für n = 3 gibt es 230.

Für bis niedrige Dimensionen sind alle dieser Gruppen bekannt, z.B. für n < 4 hier: [1].

000000000000

Sei Γ eine kristallographische Gruppe mit Fundamentalbereich Fund Translationszelle C. Dann gilt

$$vol(F) = \frac{vol(C)}{|\mathcal{P}(\Gamma)|}$$

Problem

Gegeben eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$ durch ein endliches Erzeugendensystem. Wie kann ein Fundamentalbereich berechnet werden?

Gegeben eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$ durch ein endliches Erzeugendensystem. Wie kann ein Fundamentalbereich berechnet werden?

Antwort

Hier: Algorithmus für Dirichletzellen

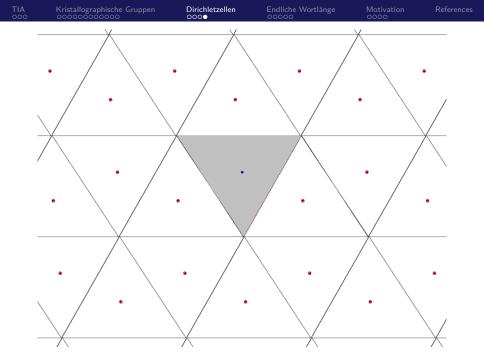
Endliche Wortlänge

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$ in allgemeiner Lage. Dann ist

$$D(u, u^{\Gamma}) = \bigcap_{w \in u^{\Gamma}, w \neq u} H^{+}(u, w).$$

ein Fundamentalbereich von Γ.

TIA 000	Kristallographische Gruppe	Dirichletzellen	Endliche Wortlär	nge Motivation	References
	•			•	
	-			_	
	•		•	•	
	•		•	•	
			-		



$$D(u, u^{\Gamma}) = \bigcap_{w \in u^{\Gamma}, w \neq u} H^{+}(u, w).$$

Problem

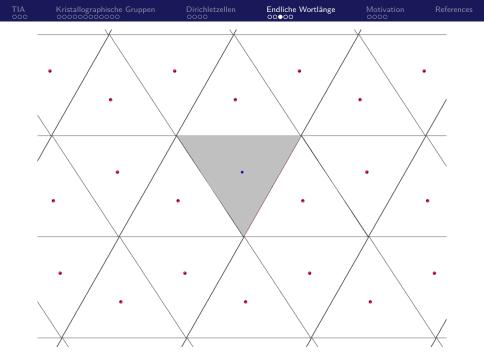
 u^{Γ} ist unendlich.

Halbräume die von zwei weit entfernten Punkten aufgespannt werden, haben weniger Einfluss als Halbräume, die von nahe beieinander liegenden Punkten aufgespannt werden.

Halbräume die von zwei weit entfernten Punkten aufgespannt werden, haben weniger Einfluss als Halbräume, die von nahe beieinander liegenden Punkten aufgespannt werden.

Ansatz

Betrachte nur Isometrien, die einen Punkt nicht "zu weit weg" operieren.



Sei $\Gamma \leq E(n)$ kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$. Dann existiert ein $A \in \mathbb{N}$ sodass die Dirichletzelle $D(u, u^{\Gamma})$ berechnet werden kann, als Schnitt der Halbräume $H^+(u,u^\gamma)$ für $\gamma\in\Gamma$ Wörter der Länge maximal A+1.

$\mathsf{Theorem}$

Sei $\Gamma \leq E(n)$ kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$. Dann existiert ein $A \in \mathbb{N}$ sodass die Dirichletzelle $D(u, u^{\Gamma})$ berechnet werden kann, als Schnitt der Halbräume $H^+(u, u^{\gamma})$ für $\gamma \in \Gamma$ Wörter der Länge maximal A+1.

Damit haben wir einen Zugang, um Fundamentalbereiche in endlichen Schritten (algorithmisch) zu bestimmen. Leider ist A im Allgemeinen nicht einfach bestimmbar.

Algorithm 4.1: Dirichlet Zelle

Data: eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$ und $u \in \mathbb{R}^n$, ein Punkt in allgemeiner Lage, sowie eine Menge gens an Erzeugern von Γ .

Result: *triangularComplex*, ein Fundamentalbereich.

 $fundamentalDomainCandidate \leftarrow gegeben durch Schnitt über gens;$

while *vol*(fundamentalDomainCandidate) < fundamentalVolume **do**

 $fundamentalDomainCandidate \leftarrow gegeben durch Schnitt über Wortlänge +1;$

end

return fundamentalDomainCandidate:

Bisher: zwei-dimensional.

Erweiterung

Alle Aussagen gelten für $n \in \mathbb{N}$. Damit erhalten wir Zugang zu den 230 drei-dimensionalen kristallographischen Gruppen.

- (i) Generiere Fundamentalbereich einer kristallographischen Gruppe
- (ii) Deformiere diesen Fundamentalbereich
- (iii) Prüfe ob topologisches Interlocking vorliegt

- doppelt gekrümmte Baugruppen
- i.A. nicht planare Baugruppen
- füllung spezieller Formen
- materialminimerte Kraftabtragung

- Verbesserung/Nachweis der (optimimalität) der Schranken
- Allgemeine Verfügbarkeit in einer Software
- Charakterisierung wann topologische Interlockings entstehen
- Charakterisierung welche topologische Interlockings "gut" sind

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit Gibt es Fragen?

Endliche Wortlänge

Referenzen:

- [1] H Brown et al. Crystallographic Groups of Four-dimensional Space. John Wiley & Sons Inc, 1978. ISBN: 978-0471030959.
- |2| Tom Goertzen. "Construction of Simplicial Surfaces with given Geometric Contraints". To be submitted, Dissertation, RWTH Aachen University, 2024. DOI: tbd. URL: tbd.
- [3] Wilhelm Plesken. Kristallographische Gruppen, Summer semester 1994