Berechnung von Dirichletzellen kristallographischer Gruppen mittels endlicher Wortlänge

Lukas Schnelle

Grüppchen 2025

In Zusammenarbeit mit
Alice C. Niemeyer und Reymond Akpanya

Topologisch interlockende Baugruppen

Ziel

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

Topologisch interlockende Baugruppen

Ziel

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

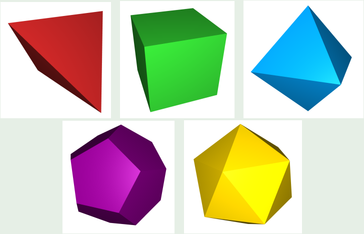
Existenz

Gibt es solche Blöcke?

Beispiele

Alle fünf platonischen Körper

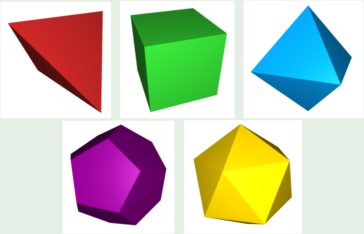
- Tetraeder
- Hexaeder (a.k.a. Würfel)
- Oktaeder
- Dodekaeder
- Ikosaeder



Beispiele

Alle fünf platonischen Körper

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



Definition

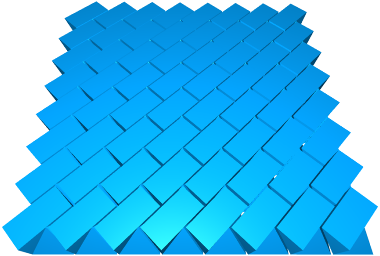
Eine solche Anordnung heißt *topological Interlocking Assembly* oder auch *topologisch interlockende Baugruppe*.

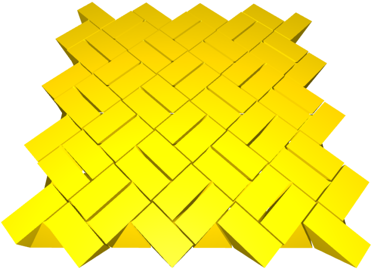
Anwendungen

- Spröde Materialien d.h. Druck, aber nicht Zug aushalten können
- Viele kleine Blöcke einfacher zu transportieren/herzustellen
- Zugang relativ klein
- Falls Klebstoffe problematisch

Bisherige Arbeiten der Forschungsgruppe

T. Goertzen [2] hat solche Blöcke durch Deformation von **Fundamentalbereichen** von **kristallographischen Gruppen** erzeugt.





Notation

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

Notation

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

Notation

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

Definition

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

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

Notation

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

Definition

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

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

Weiterhin

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

Bemerkung

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

- $(E(n), \circ)$ 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.

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

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

wobei $\varphi_o \in O(n)$ *orthogonaler Anteil* und $\varphi_t \in \mathbb{R}^n$ *translatorischer Anteil*.

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

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

wobei $\varphi_o \in O(n)$ *orthogonaler Anteil* und $\varphi_t \in \mathbb{R}^n$ *translatorischer Anteil*.
Betrachte $v \in \mathbb{R}^n$. Dann

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

Beispiel

Betrachte

$$\mathit{p4} := \langle \pi, \tau_1, \tau_2 \rangle$$

wobei

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

Beispiel

Betrachte

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

wobei

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

Beispiel

Betrachte

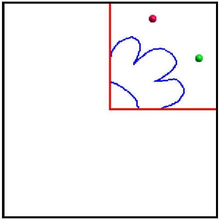
$$p4 := \langle \pi, \tau_1, \tau_2 \rangle$$

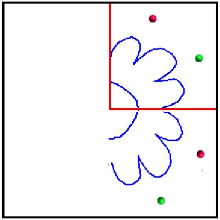
wobei

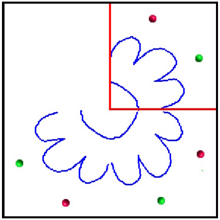
$$\pi = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right),$$

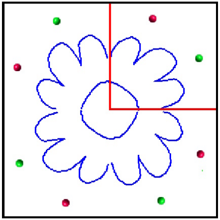
$$\tau_1 = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right),$$

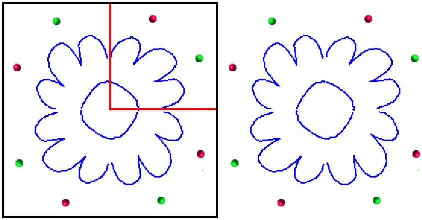
$$\tau_2 = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right).$$

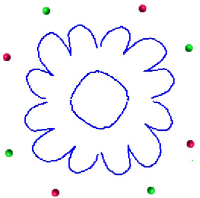


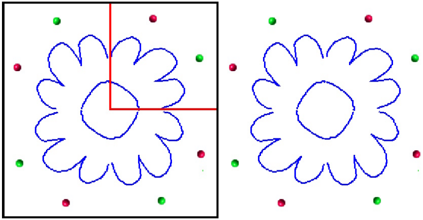


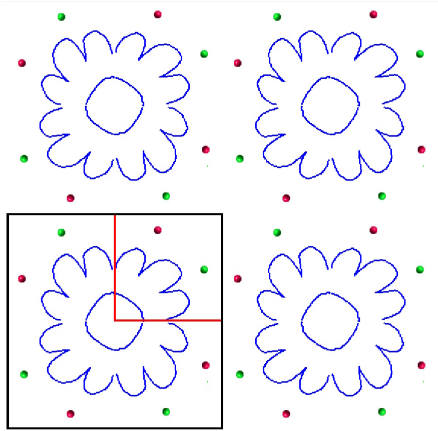


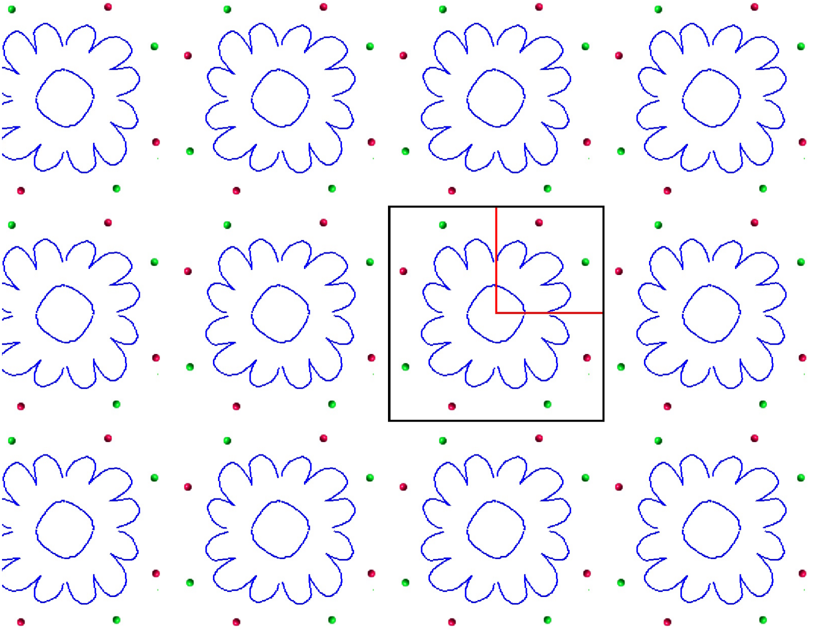












Proposition

Sei $\Gamma \leq E(n)$. 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.

Proposition

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

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

Proposition

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

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

enthält n linear unabhängige Vektoren.

Definition

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

Definition

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

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

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

Definition

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

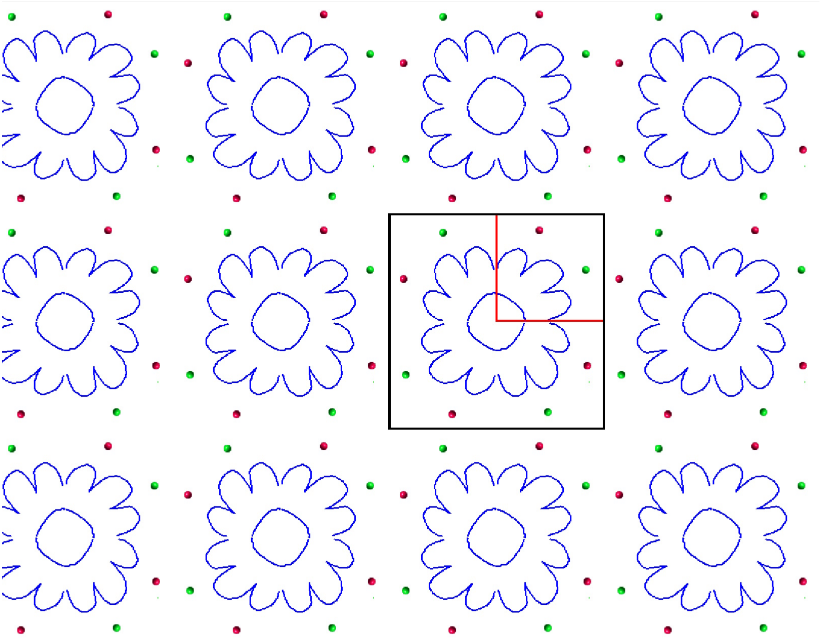
(ii) es gibt ein Vertretersystem $V \subseteq \mathbb{R}^n$ von den Bahnen von Γ auf $\mathbb{R}^n$, sodass

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

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 für $n = 3$ auch als Raumgruppen bezeichnet.



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

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

18. Hilbert Problem

Gegeben n, gibt es **endlich** viele kristallographische Gruppen?

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

18. Hilbert Problem

Gegeben n, gibt es **endlich** viele kristallographische Gruppen?

Bieberbachsche Sätze (1910)

Ja, z.B. für $n = 2$ gibt es 17, für $n = 3$ gibt es 230.

Für niedrige Dimensionen sind diese Gruppen bekannt, z.B. *Crystallographic Groups of Four-dimensional Space* [1].

Problem

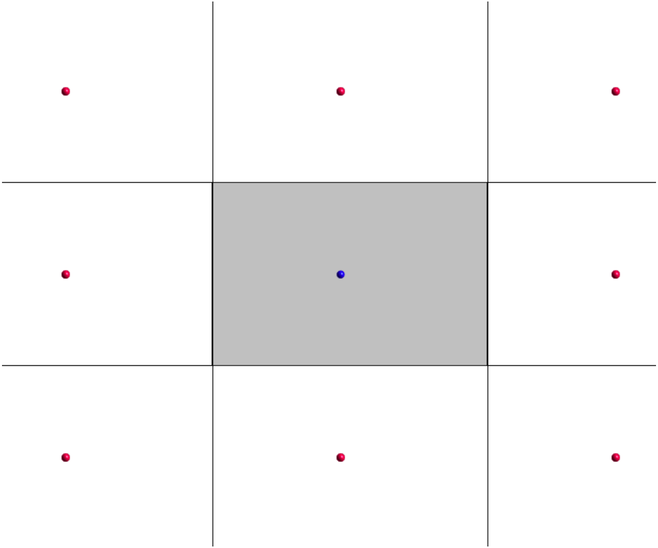
Gegeben eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$ durch ein endliches Erzeugendensystem. Wie kann ein Fundamentalbereich berechnet werden?

Problem

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

Antwort

Hier: Algorithmus für Dirichletzellen

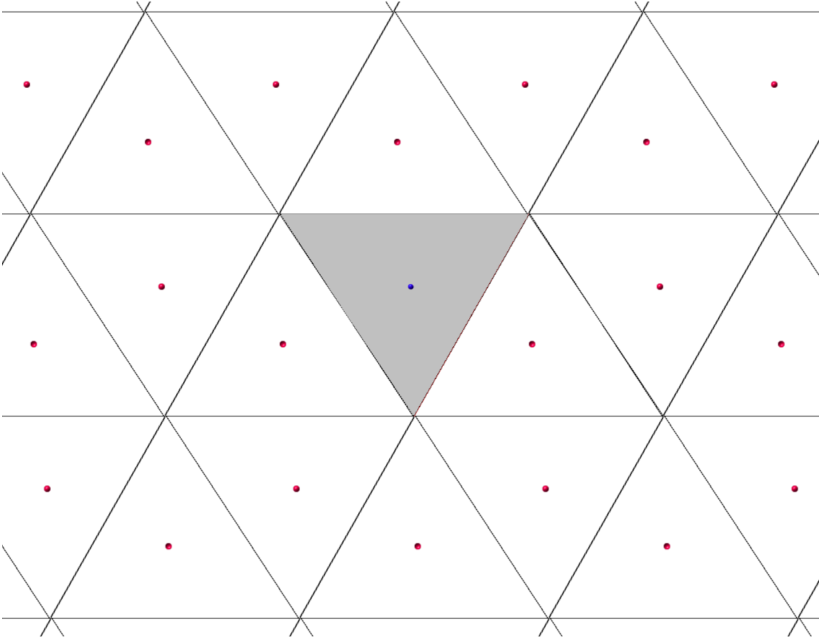


Theorem (Dirichlet)

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

$$D(u, u^\Gamma) := \bigcap_{w \in u^\Gamma, w \neq u} \{w \in \mathbb{R}^n \mid d(u, w) \leq d(v, w)\}.$$

ein Fundamentalbereich von Γ.



Erinnerung:

$$D(u, u^\Gamma) := \bigcap_{w \in u^\Gamma, w \neq u} \{w \in \mathbb{R}^n \mid d(u, w) \leq d(v, w)\}$$

Erinnerung:

$$D(u, u^\Gamma) := \bigcap_{w \in u^\Gamma, w \neq u} \{w \in \mathbb{R}^n \mid d(u, w) \leq d(v, w)\}$$

Problem

u^Γ ist unendlich.

Idee

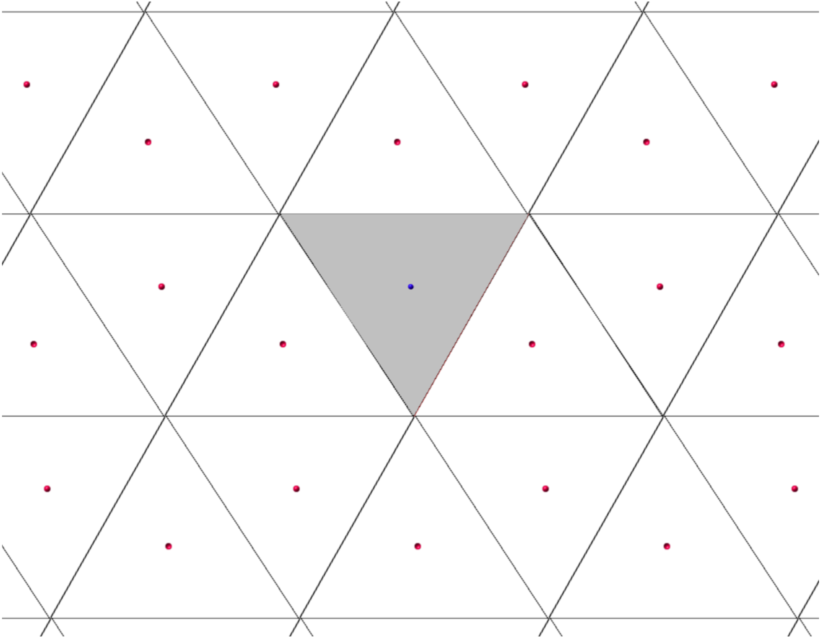
Halbräume die von zwei weit entfernten Punkten aufgespannt werden, haben weniger Einfluss als Halbräume, die von nahe beieinander liegenden Punkten aufgespannt werden.

Idee

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.



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 $A + 1$.

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 $A + 1$.

Ist von uns bewiesen und haben noch keine entsprechende bisherige Veröffentlichung dazu gefunden.

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 $A + 1$.

Ist von uns bewiesen und haben noch keine entsprechende bisherige Veröffentlichung dazu gefunden.
Damit haben wir einen Zugang, um Fundamentalbereiche in endlichen Schritten (algorithmisch) zu bestimmen. Leider ist A im Allgemeinen nicht einfach bestimmbar.

Theorem

Sei $\Gamma \leq E(n)$ eine kristallographische Gruppe mit Fundamentalbereich F und Translationszelle C. Dann gilt

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

Algorithm 4.1: Berechnung einer Dirichletzelle

Data: eine kristallographische Gruppe $\langle \gamma \mid \gamma \in \mathit{gens} \rangle = \Gamma \leq E(n)$ und $u \in \mathbb{R}^n$, ein Punkt in allgemeiner Lage.

Result: Ein Fundamentalbereich.

fundamentalVolume ← Volumen berechnet mit Theorem;

fundamentalDomainCandidate ← gegeben durch Schnitt über *gens*;

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

  fundamentalDomainCandidate ← 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.

Vorgehen

(i) Generiere Fundamentalbereich einer kristallographischen Gruppe

(ii) Deformiere diesen Fundamentalbereich

(iii) Prüfe ob topologisches Interlocking vorliegt

Offene Themen

- 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?

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.