Berechnung von Dirichletzellen kristallographischer Gruppen mittels endlicher Wortlänge

Lukas Schnelle

Grüppchen 2025

In Zusammenarbeit mit

Alice C. Niemeyer und Reymond Akpanya

Ziel

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

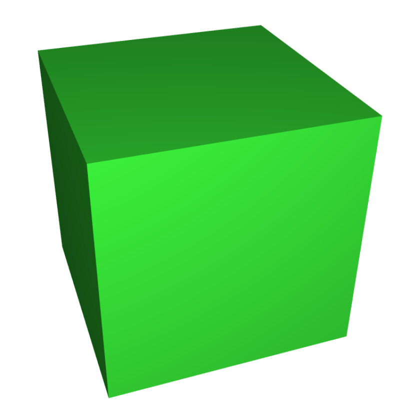
Ziel

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

Existenz

Gibt es solche Blöcke?

Würfel?



Definition

Eine solche Anordnung heißt *topologisch verriegelnde Baugruppe*.

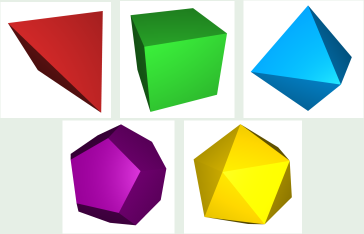
Definition

Eine solche Anordnung heißt *topologisch verriegelnde Baugruppe*.

Weitere Beispiele

Alle fünf platonischen Körper

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



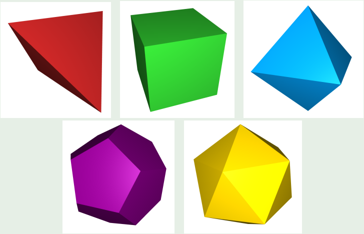
Definition

Eine solche Anordnung heißt *topologisch verriegelnde Baugruppe*.

Weitere Beispiele

Alle fünf platonischen Körper

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



Anwendungen

- Reparierbarkeit

Anwendungen

- Reparierbarkeit
- Recyclebarkeit

Anwendungen

- Reparierbarkeit
- Recyclebarkeit
- Spröde Materialien d.h. Druck, aber nicht Zug aushalten können

Anwendungen

- Reparierbarkeit
- Recyclebarkeit
- Spröde Materialien d.h. Druck, aber nicht Zug aushalten können
- Viele kleine Blöcke einfacher zu transportieren/herzustellen

Anwendungen

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

Anwendungen

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

Historischer Kontext

Erste Interlockings in 1735 gefunden.

Historischer Kontext

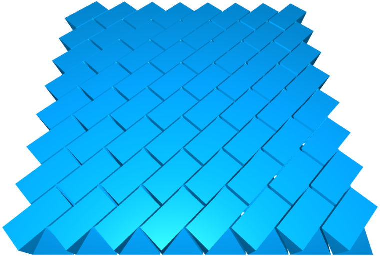
Erste Interlockings in 1735 gefunden.
Wiederaufleben der Forschung durch u.a. Estrin, Dyskin, Pasternak im 21. Jahrhundert

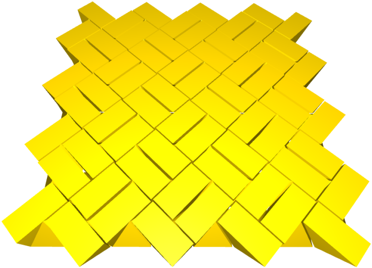
Historischer Kontext

Erste Interlockings in 1735 gefunden.
Wiederaufleben der Forschung durch u.a. Estrin, Dyskin, Pasternak im 21. Jahrhundert

Bisherige Arbeiten der Forschungsgruppe

T. Goertzen [2] hat Verfahren für Erstellung von Blöcken durch Deformation von **Fundamentalbereichen** von **kristallographischen Gruppen** erzeugt.





Ziel

Verfahren erweitern von 2D auf 3D.

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

$\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ heißt *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

$\varphi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ heißt *Isometrie*, falls $\forall v, w \in \mathbb{R}^n$:

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

Weiterhin

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

Alle Blöcke in einer Baugruppe stehen durch Isometrien miteinander in Verbindung.

Beispiele Isometrien

- Translationen
- Rotationen
- Spiegelungen

Beispiele Isometrien

- Translationen
- Rotationen
- Spiegelungen

Bemerkung

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

Beispiele Isometrien

- Translationen
- Rotationen
- Spiegelungen

Bemerkung

- $(E(n), \circ)$ ist Gruppe, genannt *Euklidische Gruppe*,
- $E(n)$ operiert 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

$$p4 := \langle \rho, \tau_1, \tau_2 \rangle \leq E(n)$$

wobei

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

Beispiel

Betrachte

$$p4 := \langle \rho, \tau_1, \tau_2 \rangle \leq E(n)$$

wobei

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

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

Beispiel

Betrachte

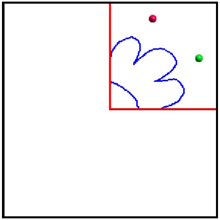
$$p4 := \langle \rho, \tau_1, \tau_2 \rangle \leq E(n)$$

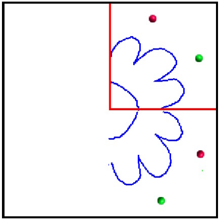
wobei

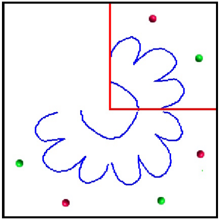
$$\rho = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right),$$

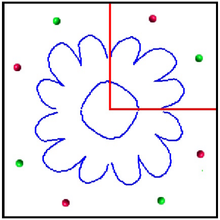
$$\tau_1 = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right),$$

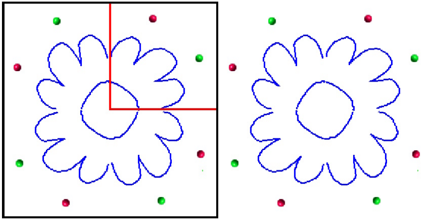
$$\tau_2 = \left(\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right).$$

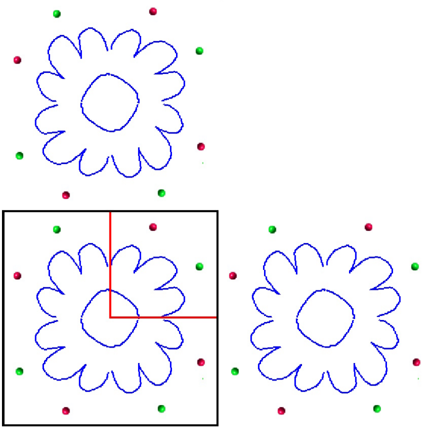


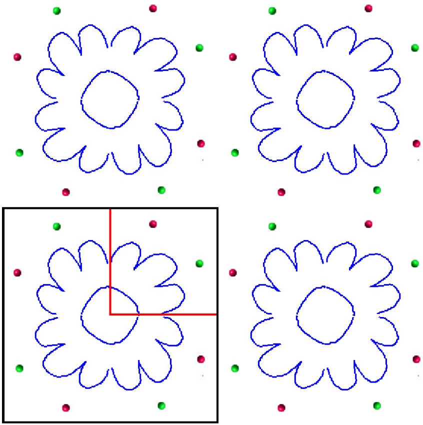


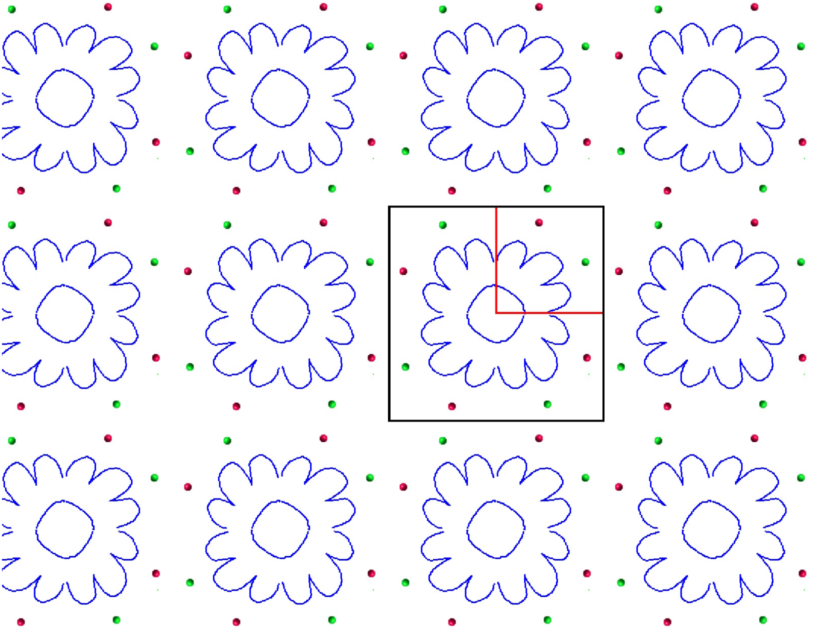












Proposition

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

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

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

Definition

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

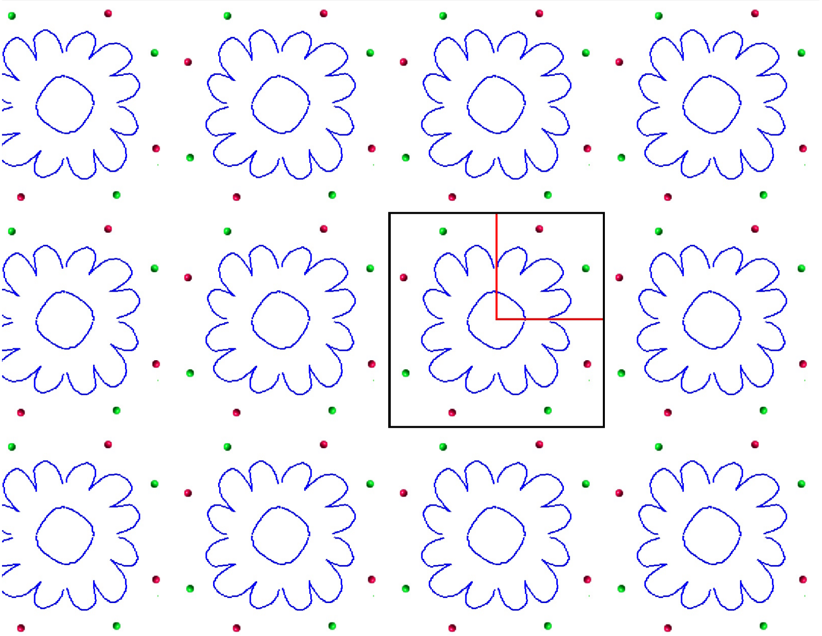
(ii) es gibt ein Vertretersystem $V \subseteq \mathbb{R}^n$ von den Bahnen von Γ auf $\mathbb{R}^n$, sodass

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

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

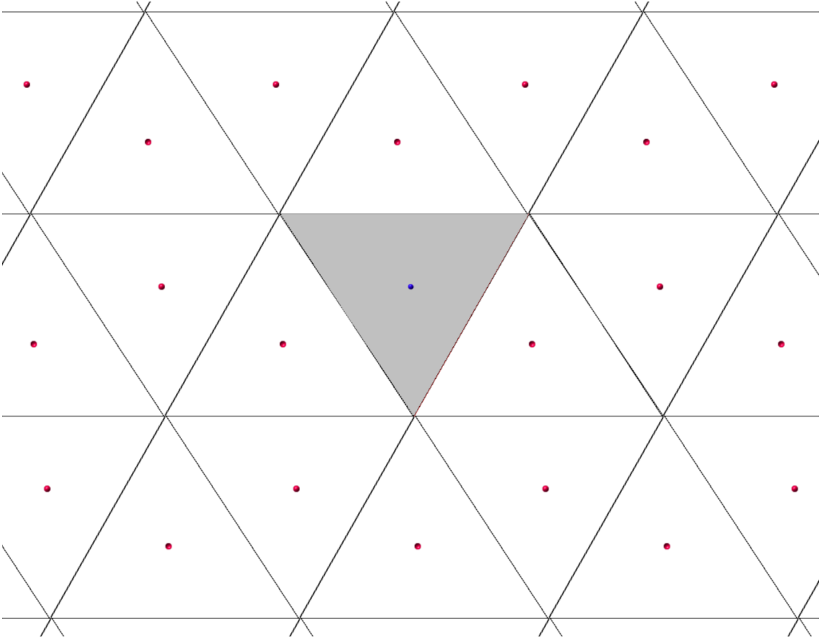
Gegeben eine kristallographische Gruppe $\Gamma \leq E(n)$ durch ein endliches Erzeugendensystem. Wie kann ein Fundamentalbereich berechnet werden?

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*

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

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

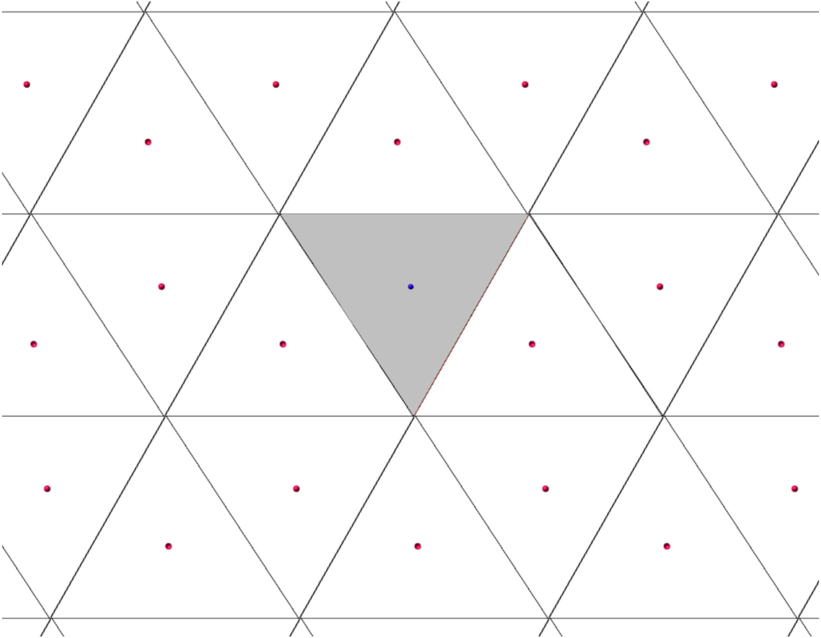
Halbräume die von zwei weit entfernten Punkten aufgespannt werden, haben weniger Einfluss als Halbräume, die von nahe beieinander liegenden Punkten aufgespannt werden.

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

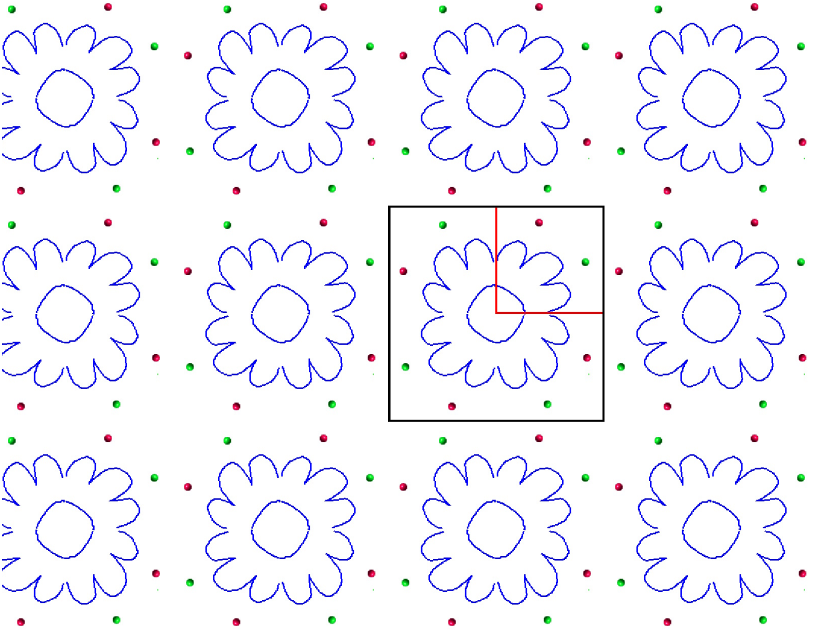
Sei $\langle X \rangle = \Gamma \leq E(n)$ kristallographische Gruppe und $u \in \mathbb{R}^n$. Dann existiert ein $A \in \mathbb{N}$ sodass die Dirichletzelle $D(u, u^\Gamma)$ berechnet werden kann, als Schnitt der Halbräume $H^+(u, u^\gamma)$ für $\gamma \in \Gamma$ Wörter der Länge maximal A.

Proposition

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.



Theorem

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

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

Algorithm 4.2: Berechnung einer Dirichletzelle

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

Algorithm 4.3: Berechnung einer Dirichletzelle

Data: eine kristallographische Gruppe $\langle X \rangle = \Gamma \leq E(n)$ und
$u \in \mathbb{R}^n$, in allgemeiner Lage.
Result: Ein Fundamentalbereich.

Algorithm 4.4: Berechnung einer Dirichletzelle

Data: eine kristallographische Gruppe $\langle X \rangle = \Gamma \leq E(n)$ und
$u \in \mathbb{R}^n$, in allgemeiner Lage.
Result: Ein Fundamentalbereich.
vol $\leftarrow$ Volumen von Fundamentalbereichen von Γ;
cand $\leftarrow$ Schnitt über Halbräume Wortänge 1;

Algorithm 4.5: Berechnung einer Dirichletzelle

Data: eine kristallographische Gruppe $\langle X \rangle = \Gamma \leq E(n)$ und
$u \in \mathbb{R}^n$, in allgemeiner Lage.
Result: Ein Fundamentalbereich.
$vol \leftarrow$ Volumen von Fundamentalbereichen von Γ;
$cand \leftarrow$ Schnitt über Halbräume Wortänge 1;
while $vol(cand) > vol$ **do**
  $cand \leftarrow$ Schnitt über Halbräume Wortänge $+1$;
end

Algorithm 4.6: Berechnung einer Dirichletzelle

Data: eine kristallographische Gruppe $\langle X \rangle = \Gamma \leq E(n)$ und
$u \in \mathbb{R}^n$, in allgemeiner Lage.
Result: Ein Fundamentalbereich.
vol $\leftarrow$ Volumen von Fundamentalbereichen von Γ;
cand $\leftarrow$ Schnitt über Halbräume Wortänge 1;
while $vol(cand) > vol$ **do**
  cand $\leftarrow$ Schnitt über Halbräume Wortänge $+1$;
end
return *cand*;

Bisher: zwei-dimensional.

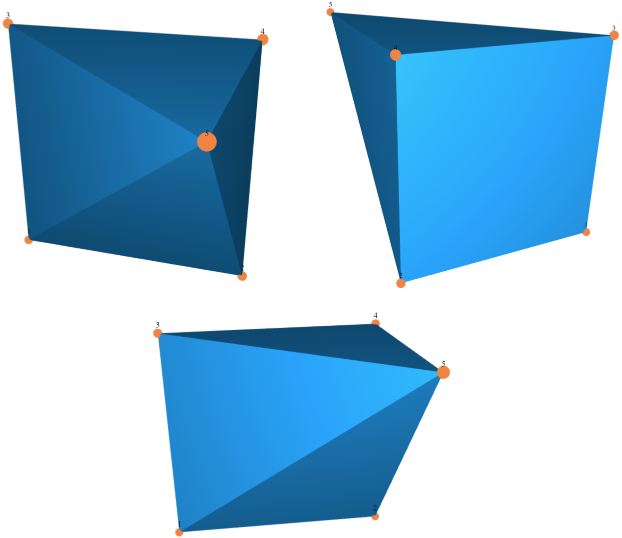
Erweiterung

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

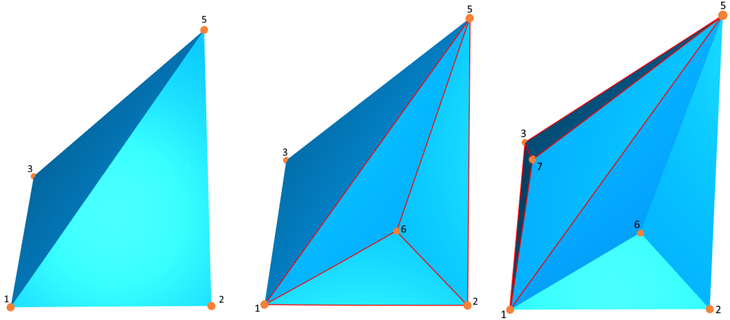
Vorgehen

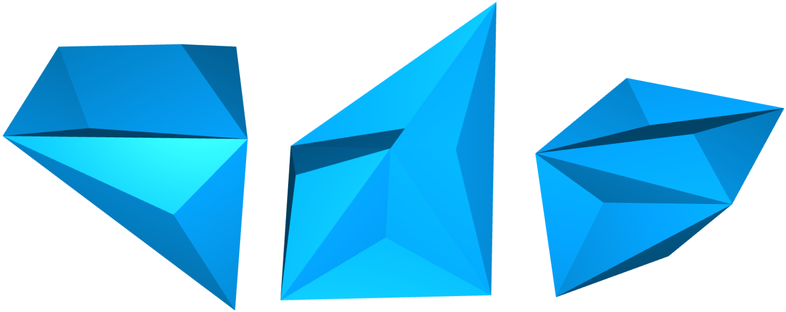
(i) Generiere Fundamentalbereich einer kristallographischen Gruppe
(ii) Deformiere diesen Fundamentalbereich
(iii) Prüfe ob topologisches Interlocking vorliegt

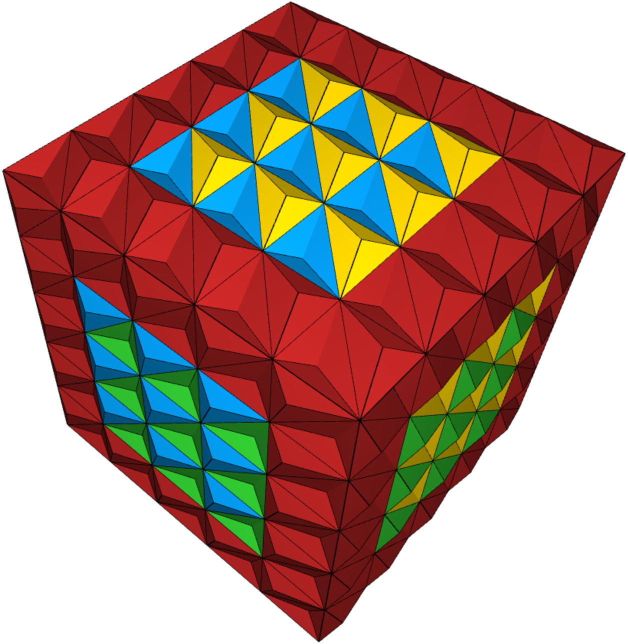
Fundamentalbereich der Gruppe *146*



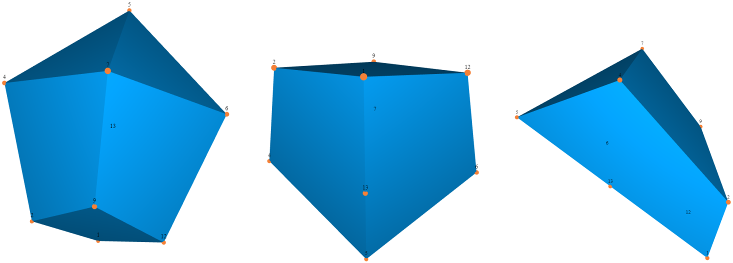
Deformationen kompatibel mit Gruppe



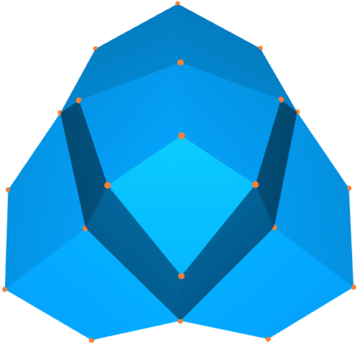


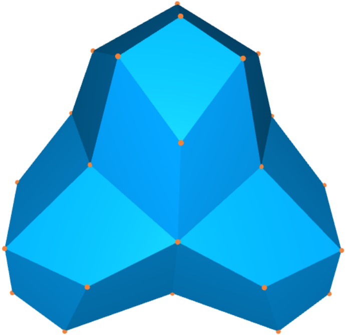


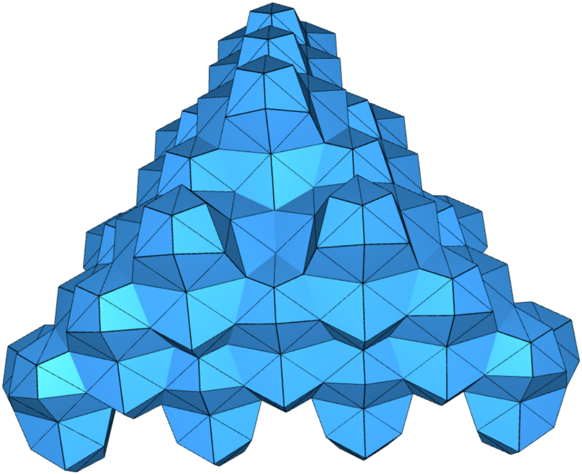
Fundamentalbereich der Gruppe *195*

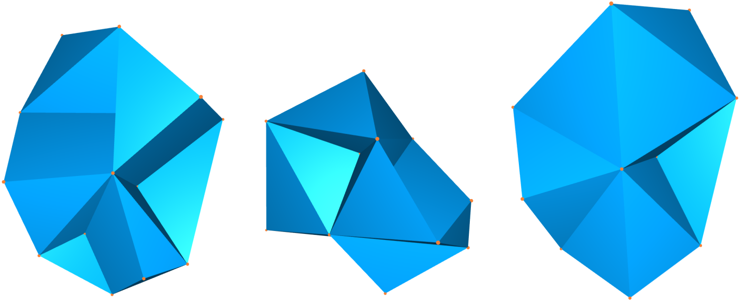


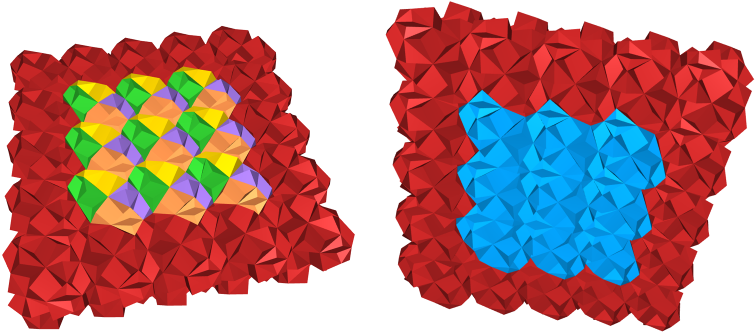
Translationszelle











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 constraints". Dissertation. RWTH Aachen University, 2024. DOI: 10.18154/RWTH-2024-08038.