Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 302, 2003 г.

А. В. Шутов

ЧИСЛО СЛОВ ЗАДАННОЙ ДЛИНЫ В ПЛОСКИХ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИХ ГРУППАХ

§1. Введение

Одной из важных задач теории групп является задача изучения роста заданной конечнопорожденной группы G в выбранной системе образующих. Точнее, требуется получить формулы для количества слов группы G заданной длины в выбранной системе образующих.

Важность этой задачи обусловлена как ее ролью собственно в теории групп, так и приложениями к теории случайных блужданий. В частности, известная гипотеза Кестена гласит, что случайное блуждание на группе G возвратно тогда и только тогда, когда она имеет полиномиальный рост степени, большей 2.

В настоящей работе исследуется случай, когда G – плоская кристаллографическая группа. Уникальность кристаллографических групп состоит в том, что для них удается получить точное решение поставленной задачи, тогда как для других групп обычно удается доказать лишь асимптотические формулы. В работе получены точные формулы для числа слов заданной длины всех 17 плоских кристаллографических групп (теорема 2.2). Например, для группы pgg число слов длины n равно $4n-4$.

Для доказательства этого результата используется связь кристаллографических групп с открытым В. Г. Журавлевым процессом роста их графов [1]. При этом проблема получения точных формул для числа слов заданной длины в кристаллографических группах оказывается частным случаем гипотезы Слоэна о координационной последовательности периодического графа [2]. Общие методы теории роста периодических графов позволяют свести задачу к подсчету числа решений некоторых диофантовых уравнений и, в результате, получить искомые формулы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант No. 02-01-00368.

Автор выражает благодарность В. Г. Журавлеву, А. В. Малееву и В. Г. Рау за то, что они привлекли его внимание к этому кругу вопросов, а также за многократные полезные обсуждения.

§2. Постановка задачи и основной результат

Пусть G – порожденная группа, заданная множеством образующих $\{g_1, \dots, g_s\}$ и множеством определяющих соотношений R. Каждый элемент $g \in G$ имеет представление

$$g = g_1^{i_1} \dots g_s^{i_s} g_1^{i_s+1} \dots g_s^{i_{2s}} \dots g_s^{i_{ks}}, \tag{1}$$

где все $i_j \in \mathbb{Z}$.Число $\sum_{j=1}^{ks} |i_j|$ будем называть длиной представления. Представление g в виде (1), вообще говоря, не единственно. Определим длину $l(g)$ элемента g в заданной системе образующих как наименьшую из длин всех представлений g. Введем функции

$$V_G(n) = \mathrm{card}\,\{g \in G : l(g) \le n\},$$

$$S_G(n) = \mathrm{card}\,\{g \in G : l(g) = n\}.$$

Ясно, что знание $V_G(n)$ определяет $S_G(n)$ и наоборот.

Подгруппа G группы изометрий пространства $\mathbb{R}^d$ называется d-мерной кристаллографической группой, если G-орбита любой точки дискретна и существует компактное множество M такое, что $G(M) = \mathbb{R}^d$.

Известно, что все кристаллографические группы конечно порождены. Поэтому функции $V_G(n)$ и $S_G(n)$ определены для них корректно.

В. Г. Журавлевым в работе [1] была доказана

Теорема 2.1. *Пусть G – плоская кристаллографическая группа, $\Delta n \to \infty$ при $n \to \infty$. Тогда существует постоянная c_G, зависящая от выбора системы образующих и такая, что*

$$\frac{1}{\Delta n} \sum_{n \le k < n+\Delta n} S_G(k) = c_G n + O(\frac{n}{\Delta n}).$$

Цель настоящей работы – получить точные формулы для $S_G(n)$. Сформулируем основной результат.

Теорема 2.2. *Пусть G – плоская кристаллографическая группа, заданная некоторой системой образующих и определяющих соотношений. Тогда при $n \geq n_0$ значение функции $S_G(n)$ содержится в таблице 1.*

Замечание. Образующие элементы и определяющие соотношения плоских кристаллографических групп выписаны в соответствии с работой [3].

Таблица 1

Сингония	Группа	Определяющие соотношения	c_G	$S_G(n)$
Общая	$p1$	$XY{=}YX$	1	$n+1$
		$XYZ{=}ZYX{=}E$	3	$3n$
	$p2$	$T_1^2{=}T_2^2{=}T_3^2$ $=(T_1T_2T_3)^2{=}E$	3	$3n$
		$T_1^2{=}T_2^2{=}T_3^2{=}T_4^2$ $=T_1T_2T_3T_4{=}E$	4	$4n$
Прямоугольная	pm	$R^2{=}R'^2{=}E,$ $RY{=}YR,\ R'{=}YR'$	2	$2n+1$
	pg	$P^2{=}Q^2$	1	$n+1$
	cm	$R^2{=}E,\ RP^2{=}P^2R$	1	$n+1$
	pmm	$R_1^2{=}R_2^2{=}R_3^2{=}R_4^2$ $=(R_1R_2)^2{=}(R_2R_3)^2$ $=(R_3R_4)^2{=}(R_4R_1)^2{=}E$	4	$4n$
	pmg	$R^2{=}T_1^2{=}T_2^2,$ $T_1RT_1{=}T_2RT_2$	3	$3n$
	pgg	$(PO)^2{=}(P^{-1}O)^2{=}E$	4	$4n-4$
	cmm	$R_1^2{=}R_2^2{=}T^2{=}$ $=(R_1R_2)^2{=}(R_1TR_2T)^2$ $=E$	$\frac{8}{3}$	$\frac{8n}{3}, n \equiv 0 (\mathrm{mod}\ 3)$ $\frac{8n+1}{3}, n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 3)$ $\frac{8n-1}{3}, n \equiv 2 (\mathrm{mod}\ 3)$
Квадратная	$p4$	$S^4{=}T^2{=}(\mathrm{St})^4{=}E$	$\frac{16}{9}$	$2n-1, n \equiv 0 (\mathrm{mod}\ 3)$ $\frac{5n+1}{3}, n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 3)$ $\frac{5n+2}{3}, n \equiv 2 (\mathrm{mod}\ 3)$

Сингония	Группа	Определяющие соотношения	c_G	$S_G(n)$
Квадратная	$p4m$	$R_1^2=R_2^2=R_3^2=$ $=(R_1R_2)^4=(R_2R_3)^4$ $=(R_3R_1)^2=E$	$\frac{8}{3}$	$\frac{8n}{3}, n \equiv 0 (\mathrm{mod}\ 3)$ $\frac{8n+1}{3}, n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 3)$ $\frac{8n-1}{3}, n \equiv 2 (\mathrm{mod}\ 3)$ $\frac{8n-12}{3}, n \equiv 0 (\mathrm{mod}\ 3)$
	$p4g$	$R^2=S^4=(RS^{-1}RS)^2=E$	$\frac{26}{9}$	$3n-7, n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 3)$ $3n-6, n \equiv 2 (\mathrm{mod}\ 3)$
Гексагональная	п3	$S_1^3=S_2^3=S_3^3=E$	3	$3n$
		$S_1^3=S_2^3=(S_1S_2)^3=E$	2	$2n$
	$p31m$	$R^2=S^3=(RS^{-1}RS)^3=E$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3n-1}{2}, n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 4)$ $\frac{3n}{2}, n \equiv 0, 2 (\mathrm{mod}\ 4)$ $\frac{3n+1}{2}, n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 4)$
	$p3m1$	$R_1^2=R_2^2=R_3^2=$ $=(R_1R_2)^3=(R_2R_3)^3$	3	$3n$
	$p6$	$=(R_3R_1)^3=E$ $S^3=T^2=(\mathrm{St}\ )^6=E$	$\frac{36}{25}$	$\frac{8n-5}{5}, n \equiv 0 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{7n+3}{5}, n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{7n+6}{5}, n \equiv 2 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{7n-1}{5}, n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{7n-3}{5}, n \equiv 4 (\mathrm{mod}\ 5)$
	$p6m$	$R^2=R_1^2=R_2^2=$ $=(R_1R_2)^3=(R_2R)^2=$ $=(RR_1)^6$	$\frac{12}{5}$	$\frac{12n}{5}, n \equiv 0 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{12n+3}{5}, n \equiv 1 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{12n+1}{5}, n \equiv 2 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{12n-1}{5}, n \equiv 3 (\mathrm{mod}\ 5)$ $\frac{12n-3}{5}, n \equiv 4 (\mathrm{mod}\ 5)$

§3. Схема доказательства

Пусть $\vec{l_1}, \ldots, \vec{l_d}$ – линейно независимые векторы в $\mathbb{R}^d$. Множество $L = \{\sum_{i=1}^{d} k_i \vec{l_i} : k_i \in \mathbb{Z}\}$ назовем d-мерной решеткой. Нам понадобиться следующее утверждение о структуре кристаллографических групп [4].

Теорема 3.1. *Пусть G – d-мерная кристаллографическая группа. Тогда существует d-мерная решетка L, являющаяся нормальной подгруппой G, причем факторгруппа G/L конечна.*

Каждой кристаллографической группе G поставим в соответствие ее граф $\mathrm{Gr}\,(G)$. Для этого выберем произвольную точку

$O \in \mathbb{R}^d$ и систему $g_1, \ldots, g_s$ образующих группы G. Множество вершин графа $\mathrm{Gr}(G)$ есть $\{g(O) : g \in G\}$. Вершины g и g' соединяются ребром, направленным из g в g', если $g' = g_i g$ для некоторой образующей g_i.

Из теоремы 3.1 следует, что граф $\mathrm{Gr}(G)$ периодический с решеткой периодов L. Кроме того, легко видеть, что он является однородным по вершинам, то есть для любых двух его вершин g' и g'' существует автоморфизм g графа $\mathrm{Gr}(G)$, переводящий g' в g''.

На графе $\mathrm{Gr}(G)$ естественным образом определена метрика $d(g', g'')$ – длина кратчайшей цепи, соединяющей g' и g''. Определим множество

$$\mathrm{eq}\,(g, n) = \{g' \in G : d(g, g') = n\}.$$

В силу однородности графа мощность множества $\mathrm{eq}\,(g, n)$ не зависит от выбора начальной вершины g. Последовательность $\{|\mathrm{eq}\,(g, n)|\}$ называется координационной последовательность графа [2, 5, 6]. Легко видеть, что

$$S_G(n) = \mathrm{eq}\,(g, n).$$

Цепь периодического графа Gr назовем лучом, если в ней только крайние вершины сравнимы по модулю решетки периодов. Пусть $\mathrm{St}_{\mathrm{Gr}}$ – множество всех лучей графа Gr, $\mathrm{Pol}_{\mathrm{Gr}}$ – выпуклая оболочка множества векторов $\{\frac{\vec{p}}{d(p)} : p \in \mathrm{St}_{\mathrm{Gr}}\}$, $\mathrm{pol}_{\mathrm{Gr}}$ – часть границы $\mathrm{Pol}_{\mathrm{Gr}}$, не содержащая граней, проходящих через начало координат. Предположим, что граф Gr плоский. Пусть $\mathrm{vst}_{\mathrm{Gr}}$ – множество векторов, ведущих в вершины $\mathrm{Pol}_{\mathrm{Gr}}$. Соседние векторы $\vec{v_1}, \vec{v_2} \in \mathrm{vst}_{\mathrm{Gr}}$ определяют сектор $\mathrm{Sec}\,(\vec{v_1}, \vec{v_2})$ – угол на плоскости с бесконечными сторонами. Сектор называется сектором роста, если угол между его сторонами меньше π, и вырожденным сектором в противном случае.

Граф Gr назовем секторно-связным, если для любых двух вершин g' и g'' графа Gr таких, что g'' принадлежит сектору роста многоугольника $\mathrm{Pol}_{\mathrm{Gr}} + g'$, существует цепь из g' в g''. Известно, что графы всех кристаллографических групп секторно-связны.

В.Г.Журавлевым в работе [1] была доказана

Теорема 3.2. *Пусть* Gr *– плоский секторно-связный периодический граф. Тогда*

$$\mathrm{eq}\,(g, n) \subset g + (n \cdot \mathrm{pol}_{\mathrm{Gr}})_c.$$

Если $\Delta n \to \infty$ *при* $n \to \infty$, *то*

$$\frac{1}{\Delta n} \sum_{n \le k < n+\Delta n} |\mathrm{eq}\,(g,k)| = 2\frac{|\mathrm{Pol}_{\,\mathrm{Gr}}|f}{|F|} n + O(\frac{n}{\Delta n}),$$

где $F = \mathbb{R}^2/L$ *– фундаментальная область графа* Gr, f *– число вершин в ней.*

Из теоремы 3.2 сразу следует теорема 2.1 с $c_G = 2\frac{|\mathrm{Pol}_{\,\mathrm{Gr}}|f}{|F|}$. Для доказательства теоремы 2.2 требуется более точное знание структуры $\mathrm{eq}\,(g,n)$.

Пусть Sec – сектор роста графа Gr, порожденный векторами $\vec{v_1}, \vec{v_2} \in \mathrm{vst}_{\,\mathrm{Gr}}$, p_1, p_2 – соответствующие лучи $\mathrm{St}_{\,\mathrm{Gr}}$. Пусть $\mathrm{Sec}\,(g,n) = \mathrm{eq}\,(g,n) \cap \mathrm{Sec}$. Для вычисления $|\mathrm{eq}\,(g,n)|$ достаточно уметь вычислять $|\mathrm{Sec}\,(g,n)|$ для всех секторов роста графа Gr. Это следует из того, что множества $\mathrm{Sec}\,(g,n)$ могут пересекаться только по конечному множеству вершин, мощность которого зависит только от класса вычетов n по некоторому модулю.

Граф Gr назовем секторно-устойчивым, если для любого его сектора роста Sec существует вершина, из которой выходят порождающие этот сектор лучи p_1, p_2. Можно проверить, что графы плоских кристаллографических групп секторно-устойчивы.

Без ограничения общности, можно предположить, что лучи p_1, p_2 выходят из начальной вершины g. Рассмотрим произвольную вершину $g' \in \mathrm{Sec}\,(g,n)$. Можно показать, что в g' ведет геодезическая вида

$$n_1 p_1 \to n_2 p_2 \to \Gamma', \tag{2}$$

где длина Γ' ограничена константой, зависящей только от выбора сектора роста Sec. Все цепи вида $n_1 p_1 \to n_2 p_2$ являются геодезическими, ведущими в различные вершины $\mathrm{Gr} \cap \mathrm{Sec}$. Поэтому для вычисления $|\mathrm{Sec}\,(g,n)|$ необходимо подсчитать количество различных геодезических вида (2), имеющих длину n. Это число равно $\sum_{i=0}^{c} \gamma_i r(d(p_1), d(p_2), n-i)$, где c, γ_i – константы, зависящие только от Sec, а $r(d(p_1), d(p_2), k)$ означает число решений уравнения $xd(p_1) + yd(p_2) = k$ в целых неотрицательных числах.

Вычисляя значение функции r, получаем формулы для $|\mathrm{Sec}\,(g,n)|$, следовательно, и для $|\mathrm{eq}\,(g,n)| = S_G(n)$.

§4. Пример. Группа pgg

В качестве примера рассмотрим плоскую кристаллографическую группу $G = pgg$. Эта группа порождена двумя взаимно перпендикулярными скользящими отражениями P и O и имеет код $(PO)^2 = (P^{-1}O)^2 = E$. Ее граф Gr изображен на рис. 1.

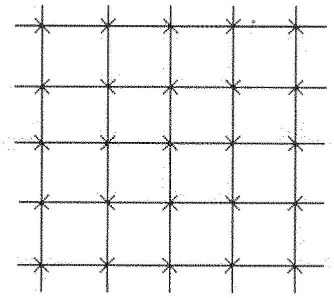

Рис. 1.

Непосредственно вычисляется, что $\mathrm{St}_{\mathrm{Gr}}$ состоит из 4 лучей $\{\pm 2\vec{e_1}, \pm 2\vec{e_2}\}$. Многоугольник роста $\mathrm{pol}_{\mathrm{Gr}}$ – повернутый квадрат с вершинами $(\pm 1; 0)$ и $(0; \pm 1)$. Его площадь равна 2. Далее, $L = \{2n_1\vec{e_1} + 2n_2\vec{e_2} : n_1, n_2 \in \mathbb{Z}\}$ – решетка периодов графа Gr. Следовательно, фундаментальная область графа Gr имеет площадь 4 и содержит 4 вершины графа. Непосредственное вычисление дает $c_G = 4$.

Граф Gr разбивается на 4 сектора $\mathrm{Sec}_1 = \mathrm{Sec}(\vec{e_1}, \vec{e_2})$, $\mathrm{Sec}_2 = \mathrm{Sec}(\vec{e_1}, -\vec{e_2})$, $\mathrm{Sec}_3 = \mathrm{Sec}(-\vec{e_1}, -\vec{e_2})$, $\mathrm{Sec}_4 = \mathrm{Sec}(-\vec{e_1}, \vec{e_2})$. Исходя из условия секторной устойчивости, полагаем, что Sec_1 начинается в вершине $O(0; 0)$, Sec_2 в $(1; 0)$,Sec_3 в $(0; 1)$, Sec_4 в $(1; 1)$. Легко видеть, что при $n > 4$ множества $\mathrm{Sec}_i(O, n)$ пересекаются только по границам секторов. Следовательно, для $n > 4$

$$|\mathrm{eq}(O, n)| = \sum_{i=1}^{4} |\mathrm{Sec}_i(O, n)| - 4.$$

Рассмотрим, для определенности, первый сектор. В любую его вершину ведет геодезическая вида

$$\Gamma : 2n_1\vec{e_1} \to 2n_2\vec{e_2} \to \Gamma', \tag{3}$$

где Γ' – одна из цепей вида $\{\emptyset, \vec{e_1}, \vec{e_2}, 2\vec{e_1} \to \vec{e_2} \to -\vec{e_1}\}$.

Обратно, любая цепь вида (3), начинающаяся в O, является геодезической, ведущей в вершину первого сектора. Так как число цепей вида $2n_1\vec{e_1} \to 2n_2\vec{e_2}$ длины n равно $r(2,2,n)$, получаем формулу

$$|\mathrm{Sec}_1(O,n)| = r(2,2,n) + 2r(2,2,n-1) + r(2,2,n-4). \qquad (4)$$

Здесь $r(2,2,n)$ – число решений уравнения $2x + 2y = n$ в целых неотрицательных числах:

$$r(2,2,n) = \begin{cases} \frac{n+2}{2}, & n \equiv 0 \pmod 2, \\ 0, & n \equiv 1 \pmod 2. \end{cases}$$

Подставляя (5) в (4), получаем

$$|\mathrm{Sec}_1(O,n)| = \begin{cases} n, & n \equiv 0 \pmod 2, \\ n+1, & n \equiv 1 \pmod 2. \end{cases}$$

В силу выбора начальных вершин для Sec_2 – Sec_4, имеем

$$|\mathrm{Sec}_3(O,n)| = |\mathrm{Sec}_1(O,n)|,$$

$$|\mathrm{Sec}_2(O,n)| = |\mathrm{Sec}_4(O,n)| = |\mathrm{Sec}_1(O,n-1)|.$$

Суммируя полученные результаты, получаем требуемое:

$$S_G(n) = |\mathrm{eq}(O,n)| = 4n - 4.$$

§5. Заключительные замечания и нерешенные проблемы

1. Метод данной работы без изменений переносится на случай d-мерных кристаллографических групп, так как их графы обладают теми же свойствами, что и в плоском случае. При этом функция $S_G(n)$ является многочленом от n степени $d-1$, коэффициенты которого зависят только от класса вычетов n по некоторому модулю. Явному вычислению функций $S_G(n)$ препятствует тот факт, что даже в трехмерном случае неизвестен полный список графов, соответствующих кристаллографическим группам.

2. В случае $G \simeq \mathbb{Z}^n$ множество вершин графа $\mathrm{Gr}(G)$ является d-мерной решеткой. Конвэй и Слоэн в работе [6] ввели класс „хорошо расположенных решеток,“ для которых все вершины $\mathrm{eq}(O,n)$ лежат в точности на многограннике $n \cdot \mathrm{pol}_{\mathrm{Gr}}$. В этом

случае результат о том, что $S_G(n)$ – многочлен, легко следует из известной теоремы о числе целых точек внутри многогранника с вершинами в точках решетки. Хорошо известно, что в этом случае коэффициенты многочлена допускают интерпретацию в терминах торического многообразия, ассоциированного с многогранником $\mathrm{pol}_{\mathrm{Gr}}$. Было бы интересно найти подобную взаимосвязь и в общем случае.

3. Вычисление функции $S_G(n)$ опирается, в первую очередь, на свойства графа Gr. Известная гипотеза Слоэна [2] утверждает, что для любого периодического графа Gr с конечным числом вершин в фундаментальной области функция $|\mathrm{eq}_{\mathrm{Gr}}(a,n)|$ является многочленом, коэффициенты которого зависят только от Gr, a и класса вычетов n по некоторому модулю. В настоящей работе гипотеза Слоэна доказана для графов кристаллографических групп.

4. Пусть G – группа, являющаяся расширением группы $\mathbb{Z}^d$ при помощи произвольной конечной группы G', то есть $\mathbb{Z}^d$ – нормальная подгруппа группы G и $G/\mathbb{Z}^d \simeq G'$. Очевидно, что все кристаллографические группы входят в этот класс. В общем случае граф $\mathrm{Gr}(G)$ периодический, но не обязательно содержащий только конечное число вершин в фундаментальной области. Так как группа G конечно порождена, то $S_G(n)$ конечна для всех n. Неизвестно, какой вид имеет эта функция. В связи с приложениями к квазикристаллам особый интерес представляют случаи $d=2, G'\simeq C_5$ (группа собственных симметрий правильного пятиугольника) и $d=3$, $G'\simeq A_5$ (группа собственных симметрий икосаэдра).

5. Еще одна интересная задача состоит в том, чтобы получить подобные результаты в случае, когда G – дискретная группа симметрий гиперболического пространства Лобачевского.

Литература

1. В. Г. Журавлев, *Самоподобный рост периодических разбиений и графов*, Алгебра и анализ **13**, вып. 2 (2001), 1–26.
2. R. W. Grosse-Kunstleve, G. O. Brunner, N. J. Sloane, *Algebraic description of coordination sequences and exact topological densities for zeolites*, Acta Crist. **2** (1996), 1–2.
3. Г. С. М. Коксетер, У. Мозер, *Порождающие элементы и определяющие соотношения дискретных групп*, М., 1980.
4. А. И. Кострикин, *Введение в алгебру, Часть* III. *Основные структуры алгебры*, М., 2001.

5. M. Baake, U. Grimm, *Coordination sequences for root lattices and related graphs*, Zeitschr. Kristallogr. **212** (1997), 253–256.
6. J. H. Conway, N. Sloane, *Low-dimensional lattices, VII : coordination sequences*, Proc. Royal Soc. London, A **526** (1997), 10–25.

Владимирский государственный
педагогический университет

Поступило 12 сентября 2003 г.