

00362

rej. 1

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

UN ALGORITMO GENERAL PARA OBTENER ESTRUCTURAS
NO PERIÓDICAS POR EL MÉTODO DE LA BANDA.

TESIS

que para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS

presenta:

JOSÉ LUIS ARAGÓN VERA

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

México D. F., septiembre de 1988



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

ÍNDICE

LISTA DE FIGURAS Y TABLAS	i
RESUMEN	iii
INTRODUCCIÓN	1
1. REVISIÓN GENERAL	4
1.1. Introducción, 4	
1.2. Definición y propiedades de los cuasicristales, 6	
1.3. Construcción de empaquetamientos cuasicristalinos, 10	
2. EL MÉTODO DE LA BANDA	14
2.1. Introducción, 14	
2.2. Propiedades de los empaquetamientos, 15	
2.3. Singularidades, 19	
2.4. Comentarios, 23	
3. CRITERIO PARA LA SELECCIÓN DE PUNTOS	24
3.1. Planteamiento del problema, 24	
3.2. Aplicación del método simplex, 26	
3.3. Aplicación de la matriz inversa generalizada, 29	
4. APLICACIONES	31
4.1. Estructuras cuasicristalinas en 2D, 31	
4.1.1. $n=5$ (adoquinado de Penrose), 31	
4.1.2. $n=7$, 34	
4.1.3. $n=8$, 35	

- 4.1.4. $n=3$ (estructura periódica), 36
- 4.2. Estructuras cuasicristalinas en 3D, 37
 - 4.2.1. $N=6$, 39
 - 4.2.2. $N=10$, 40

CONCLUSIONES	42
APÉNDICE A: EL METODO SIMPLEX	45
APÉNDICE B: LA MATRIZ INVERSA GENERALIZADA	47
REFERENCIAS	49

LISTA DE FIGURAS Y TABLAS

FIGURA 1 (pag.7). Cusicristales formados por dos celdas unitarias en a).Una dimensión (1D) y b).Dos dimensiones (2D).

FIGURA 2 (pag.12). 3-Malla en 2D.

FIGURA 3 (pag.15). Ejemplo en 2D de la red periódica Z^2 (a) y la banda trasladada por un vector t (b).

FIGURA 4 (pag.22). Ejemplo en 2D de una 4-malla excepcionalmente singular (a) y singular (b).

FIGURA 5. Adoquinado original de Penrose.

FIGURAS 6,7,8,9,10,11 y 12. Adoquinados de Penrose obtenidos mediante diferentes traslaciones de la banda.

FIGURAS 13,14,15 y 16. Adoquinados con simetría 7 para diferentes traslaciones de la banda.

FIGURA 17 (pag.36). Adoquinado regular con simetría 8.

FIGURA 18 (pag.37). Adoquinado regular periódico con simetría 3.

FIGURA 19. Proyección del empaquetamiento regular icosaédrico ($Z^6 \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes a).5, b).3, c).2 de simetría.

FIGURA 20. Proyección del empaquetamiento excepcionalmente singular icosaédrico ($Z^6 \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes a).5 b).3, c).2 de simetría.

FIGURA 21. Las seis primeras capas del empaquetamiento regular icosaédrico ($Z^6 \rightarrow R^3$).

FIGURA 22. Las seis primeras capas del empaquetamiento excepcionalmente singular icosaédrico ($Z^6 \rightarrow R^3$).

FIGURA 23. Proyección del empaquetamiento regular icosaédrico ($Z^{10} \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes a).5, b).3, c).2 de simetría.

FIGURA 24. Proyección del empaquetamiento singular icosaédrico ($Z^{10} \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes a).5, b).3 y c).2 de simetría.

FIGURA 25. Proyección del empaquetamiento excepcionalmente singular icosaédrico ($Z^{10} \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes a).5, b).3 y c).2 de simetría.

TABLA 1 (pag.43). Tiempos de cálculo para la generación de algunas estructuras no periódicas en una computadora VAX-11.

RESUMEN

En este trabajo, después de revisar el concepto de cuasicristal y el método de la banda, se analiza el problema de como implementar el método de la banda en una computadora digital, y proponemos un criterio que nos permitirá construir un algoritmo completamente general en el sentido de que podemos trabajar con redes de cualquier dimensión y proyectar en subespacios de dimensión arbitraria.

El criterio propuesto se compone de dos partes: en la primera parte, los puntos que deben proyectarse se eligen mediante una prueba basada en la matriz inversa generalizada que, si bien involucra solo una multiplicación de matrices, no es concluyente en algunos casos. La segunda parte da la solución general al problema y es diseñada para analizar aquellos puntos para los que la prueba de la inversa generalizada no es concluyente. Esta parte se basa en el hecho de que, según demostramos, la selección de puntos dentro de la banda es equivalente a determinar la factibilidad de un problema de programación lineal. Esta última parte presenta la desventaja de que ocupa tiempos de cálculo mayores que la prueba de la inversa generalizada, sin embargo la proporción de puntos para los que esta prueba no es concluyente son mínimos.

Varios ejemplos del uso de nuestro criterio son presentados.

INTRODUCCION

El estudio de las propiedades geométricas de las estructuras no periódicas es importante para desarrollar una teoría que describa las propiedades físicas de los cuasicristales. Las propiedades geométricas son importantes no solo para modelar las posibles estructuras atómicas, también para entender las propiedades elásticas e hidrodinámicas de estos materiales.

Es por esto que muchos de los trabajos teóricos en el campo de los cuasicristales están enfocados a la geometría de las estructuras no periódicas, lo que ha dado lugar a una sorprendente variedad de técnicas matemáticas (algunas de gran generalidad) para generar estas estructuras. Algunas de ellas involucran proyecciones de espacios de dimensión mayor (comúnmente 5, 6 ó 10) [1,2,3,4] y otras que se basan, principalmente, en análisis geométricos que no involucran hiperespacios [5,6,7].

Nuestro objetivo es generar estructuras no periódicas, en cualquier dimensión y con simetría orientacional arbitraria, por medio de una computadora digital y usando una variante de un método de proyección llamado "método de la banda" o de "corte y proyección" [1].

Un algoritmo computacional que utilice el método de la banda debe resolver el problema de seleccionar los puntos que deben proyectarse (encontrar los puntos que caen en una cierta región

no es sencillo si nos encontramos, por ejemplo, en 10 dimensiones) y después proyectarlos, ya sea al plano o al espacio de 3D. Esta complicación ha provocado que se elaboren algoritmos que son válidos solo para casos particulares [28], que resulta inconveniente para muchas aplicaciones.

Nosotros proponemos un criterio algebraico para seleccionar los puntos que deben proyectarse que utiliza el método simplex de programación lineal y la matriz inversa generalizada. El criterio es completamente general en el sentido que nos permite proyectar de cualquier dimensión y obtener cuasicristales con simetría orientacional arbitraria. También nos permite generar cuasicristales en cualquier dimensión cosa que creemos puede ser útil para fines más básicos, por ejemplo en teoría de grupos. Cabe mencionar que está reportado en la literatura el análisis de un cuasicristal en 4 dimensiones obtenido por proyección [8].

Con el método de la banda no es posible obtener toda clase de estructuras cuasicristalinas (aunque no se han agotado aún todas sus posibilidades [17]), sin embargo nos provee de todas aquellas que interesan desde el punto de vista físico. Lo adoptamos con la intención de aprovechar el hecho de que buena parte del interés teórico se ha concentrado en estructuras obtenidas por proyección [9-18], además de que permite obtener de una forma inmediata el patrón de difracción de las estructuras que genera.

El presente trabajo está organizado de la siguiente manera: En la primera parte se presenta una revisión de las propiedades de

las estructuras cuasicristalinas así como de los métodos más conocidos para obtenerlas. En la segunda parte presentamos el método de la banda desde un punto de vista general (para cualquier dimensión). El material presentado en estas dos partes está basado principalmente en los artículos de D. Levine y J. Steinhardt [23], M. Duneau y A. Kutz [1] y P. Kramer [10], sin embargo, el método de la banda es presentado con un enfoque diferente que considera la estructura no periódica como puntos (denominada cuasired) y no se utiliza el concepto de celda unitaria. Como resultado de esto, las demostraciones a las proposiciones 1, 2 y 3 de la parte 2 debieron hacerse dentro de este contexto.

En la parte 3 se presenta nuestra solución al problema de la selección de los puntos que deben proyectarse y, en la última parte, varios ejemplos de cuasicristales obtenidos usando nuestro criterio son presentados y discutidos.

Los aspectos generales del método simplex de programación lineal y de la matriz inversa generalizada se presentan al final en forma de apéndice.

REVISION GENERAL

1.1. INTRODUCCION.

En 1984 Shetchman, Blech, Gratius y Cahn [19] reportaron una fase metálica obtenida por el enfriamiento rápido de una aleación de $Al_{.86} Mn_{.14}$. El patrón de difracción de esta fase mostraba una simetría de tipo icosaedra, cuya presencia en el cristal está prohibida. Sabemos que las rotaciones por $2\pi/n$ sobre un eje que pase por un punto de la red y que sean operaciones de simetría están limitadas, debido a la periodicidad de la red, a $n=1,2,3,4$ ó 6 el caso $n=5$ da lugar a una rotación incompatible con la simetría traslacional de la red, el icosaedro es un poliedro que tiene un eje de simetría 5, de aquí que la contradicción es clara.

En un intento por entender y describir la estructura de estos materiales se elaboraron una gran cantidad de trabajos teóricos discutiendo modelos alternativos para las fases icosaédricas. Algunos intentan explicar las observaciones experimentales en términos de la cristalografía clásica (maclaje múltiple, grandes celdas unitarias o una combinación de los dos [20]). Un enfoque alterno introduce la noción de una nueva clase de estructura atómica ordenada que puede representar una nueva fase sólida de la naturaleza (tradicionalmente sabemos que existen dos tipos de fases sólidas: cristalina y amorfa). La nueva estructura, al igual

que un cristal, tiene orden traslacional y orden orientacional de largo alcance. Sin embargo el orden traslacional no es periódico y la estructura no tiene simetría rotacional puntual. La nueva estructura es cuasiperiódica, una clase bien definida de orden traslacional. Dado que las nuevas estructuras tienen muchas de las propiedades de un cristal, con la excepción de que son cuasiperiódicas en lugar de periódicas, se les llamó cristales cuasiperiódicos o, por brevedad, cuasicristales.

El primer problema que se tuvo que resolver al adoptar este último enfoque fué el de elaborar un método que permitiera construir tales estructuras. Los primeros esfuerzos se orientaron en tratar de construir una estructura cuasiperiódica con orden orientacional icosaédrico, sin embargo había el prejuicio que tal estructura podía no existir ya que los icosaedros no pueden empaquetarse cristalográficamente (no podemos llenar el espacio periódicamente y sin dejar huecos con icosaedros); la frustración geométrica inducida al exigir orden icosaédrico podría limitar el rango en que existiría tal orden.

Del análisis de los adoquinados no periódicos descubiertos por el matemático inglés R. Penrose [5] surgió la posibilidad de que tales problemas podrían ser resueltos, ya que tales adoquinados tienen un orden orientacional pentagonal de largo alcance, aunque los pentágonos tampoco pueden empaquetar cristalográficamente. Se procedió entonces a construir y analizar un análogo tridimensional con simetría icosaédrica. En el proceso

se descubrió que los adoquinados de Penrose (y su análogo icosaédrico) no solo tienen orden orientacional de largo alcance, también tienen orden traslacional cuasiperiódico de largo alcance. Son, efectivamente, ejemplos de cuasicristales.

Si bien en la actualidad se han reportado cuasicristales con simetría icosaédrica, dodecagonal [21] y decagonal [22] solamente, se han elaborado técnicas matemáticas de sorprendente generalidad que permiten construir cuasicristales con cualquier simetría orientacional.

Antes de presentar algunas de estas técnicas es conveniente en este momento definir y enunciar formalmente las propiedades básicas de los cuasicristales. Adoptaremos, con este fin, las ideas de D. Levine y J. Steinhardt [23].

1.2. DEFINICION Y PROPIEDADES DE LOS CUASICRISTALES.

Un cuasicristal se construye por la repetición infinita en el espacio de dos o más unidades estructurales distintas (ya sean atómicas o moleculares), llamadas celdas unitarias, empaquetadas en una estructura que tiene orden traslacional cuasiperiódico de largo alcance y orden orientacional de largo alcance. En la figura 1 se muestra un ejemplo en una dimensión (1D) construido a partir de dos "celdas unitarias" de tamaños L y S respectivamente. Se muestra también un ejemplo en 2D, el famoso adoquinado de Penrose; las celdas unitarias son dos rombos, uno con un ángulo agudo de 36° , y el otro con uno de 72° .

En este trabajo utilizaremos el término cuasicristal para referirnos ya sea a la estructura física (atómica o molecular) correspondiente a una decoración atómica de las celdas unitarias o la representación matemática en donde los átomos son reemplazados por puntos. Usaremos también los términos adoquinado cuasiperiódico o empaquetamiento cuasiperiódico para referirnos a estas estructuras.

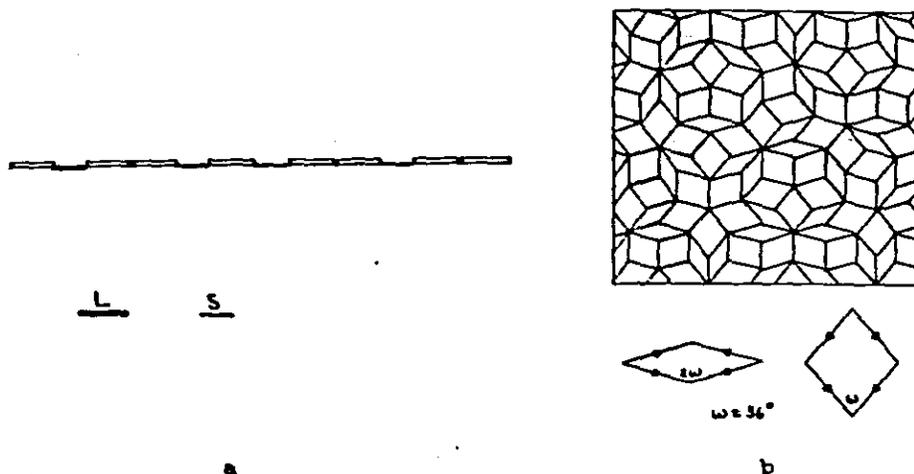


Figura 1. a). Cuasicristal en 1D formado por dos "celdas" L y S. b) Adoquinado de Penrose formado por las dos celdas que se muestran en la parte inferior.

Las propiedades formales de los cuasicristales son las siguientes:

a). Orden orientacional.- Los ángulos de los enlaces entre átomos vecinos (medidos con respecto a un conjunto fijo de ejes) tienen

correlaciones de largo alcance y están orientadas, en promedio, en la dirección de un conjunto de vectores "estrella" que definen el orden orientacional.

b). Separación mínima entre posiciones atómicas.- Existen distancias r y R mayores que cero tales que la separación entre cualesquiera dos átomos vecinos cercanos es mayor que r (el conjunto es discreto) y la distancia de cualquier punto en el espacio al átomo más cercano es menor que R (condición de cobertura). La colección de puntos que satisface estas dos propiedades se conoce como sistema de Delaunay [24].

La separación mínima es una condición necesaria para que la estructura pueda ser construida a partir de un número finito de celdas unitarias fundamentales.

c). Orden traslacional cuasiperiódico.- La función densidad de masa del cuasicristal es cuasiperiódica. Una función es cuasiperiódica si puede ser expresada como una suma de funciones periódicas donde al menos uno de los periodos es inconmensurable con respecto a los demás.

Dado un conjunto de celdas unitarias existen muchas formas de empaquetarlas y obtener un cuasicristal con diferente simetría orientacional y cuasiperiodicidad. Dados dos de estos empaquetamientos de celdas unitarias podemos caer en alguno de los siguientes casos:

a). Uno de ellos es simplemente una traslación del otro, en

tal caso decimos que los cuasicristales obtenidos son equivalentes.

b). Los empaquetamientos pueden ser completamente diferentes en todas las escalas y contener diferentes configuraciones de celdas. En dos dimensiones este caso es muy fácil de distinguir visualmente.

c). Es posible que los empaquetamientos difieran en su estructura global pero sean indistinguibles en base a cualquier región finita que contengan, esto es, cualquier región finita en un empaquetamiento existe también en algún lugar del otro. Dos empaquetamientos relacionados en esta forma se dice que son localmente isomorfos.

El concepto de isomorfismo local fué primeramente introducido por Conway [25]. La definición precisa es como sigue:

Dos cuasicristales son localmente isomorfos si y solo si dado cualquier punto P en uno de ellos y cualquier distancia finita d , existe una traslación pura del otro tal que podamos hacer que ambos coincidan dentro de una esfera de diámetro d centrada en P .

Acorde a esta definición dos cuasicristales no son localmente isomorfos si existe una región finita en uno que no pueda encontrarse en el otro. Así, el conjunto de todos los posibles empaquetamientos (con simetría orientacional y cuasiperiodicidad dadas) puede ser dividido en clases de isomorfismo local (IL); dos

cuasicristales están en la misma clase IL si y solo si son localmente isomorfos.

El concepto de isomorfismo local es importante dadas sus implicaciones físicas. En particular, dos cuasicristales tienen el mismo patrón de difracción si y solo si están en la misma clase IL [17]. Dos cuasicristales en distintas clases IL tienen patrones de difracción con picos de Bragg en las mismas posiciones pero con diferentes intensidades. Intuitivamente se espera que dos cuasicristales IL tengan el mismo patrón de difracción pues son localmente equivalentes. Por otro lado, dos cuasicristales en diferentes clases IL tienen diferente energía libre [26].

1.3. CONSTRUCCION DE EMPAQUETAMIENTOS CUASICRISTALINOS.

Se han desarrollado varios métodos para construir empaquetamientos cuasicristalinos de celdas unitarias. Es importante, con el fin de apreciar sus ventajas relativas, hacer una revisión de estas técnicas.

El método de las reglas de unión y deflación [5,29] es la técnica usada originalmente por Penrose para generar sus adoquinados. Las reglas de unión determinan como dos celdas unitarias pueden unirse y son diseñadas de manera que las celdas sean forzadas a empaquetarse con una cierta simetría orientacional. Una regla de deflación es una transformación de autosimilitud por la que cada celda unitaria puede ser subdividida en piezas que al agruparse forman un nuevo

empaquetamiento cuasicristalino con las mismas celdas unitarias solo que escaladas por un factor constante. Así, dado un pequeño empaquetamiento (construido con una regla de unión) este puede ser "crecido" aplicando sucesivamente un proceso de deflación.

Este método produce solo una clase IL, que se denomina clase de isomorfismo local de Penrose (ILP), puesto que los adoquinados de Penrose son ejemplos de la clase ILP para el caso de simetría pentagonal. Esta técnica ha sido extendida también a 3D para cuasicristales icosaédricos.

El método de proyección desarrollado simultáneamente por V. Elser [2], Kalugin y otros [3] y Duneau y Katz [1], obtiene los vértices de un empaquetamiento cuasicristalino proyectando puntos de una red periódica de dimensión mayor (frecuentemente 5D o 6D). Dependiendo de la simetría orientacional se elige un hiperplano de proyección (correspondiente al espacio real) y todos los puntos que caen dentro de una banda especial son proyectados ortogonalmente sobre este hiperplano. El hiperplano y la banda deben ser especialmente elegidos para que los puntos proyectados produzcan un conjunto completo de vértices correspondientes a un empaquetamiento cuasicristalino de celdas unitarias.

Este método es poderoso porque incluye una forma elegante y directa de calcular el patrón de difracción del empaquetamiento. Sin embargo, el método produce solo un conjunto restringido de clases IL para una simetría dada.

Existe otro método de proyección esencialmente diferente al

anterior, debido a de Bruijn [15] y Kramer y Neri [4], llamado método de multimallas propone utilizar la proyección de una red periódica de dimensión mayor para obtener una "N-malla", que consiste en un conjunto de planos (o líneas, en 2D) separados periódicamente y normales a los N vectores estrella que definen la simetría orientacional (en la figura 2 se muestra una 3-malla en 2D). Los vértices del empaquetamiento son obtenidos por una transformación "dual" que asocia a cada región abierta, formada por la intersección de planos de la N-malla, un punto (figura 2); los puntos obtenidos de esta manera son los vértices del empaquetamiento.

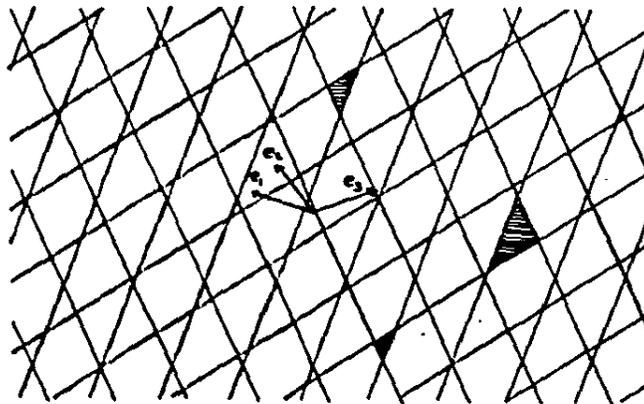


Figura 2. 3-malla en 2D formada por líneas igualmente espaciadas normales al vector estrella (e_1, e_2, e_3) . Las regiones marcadas son ejemplos de las que se asociarían a un punto en la transformación dual.

Es posible construir una N-malla sin recurrir a proyecciones. Esta es la idea del método dual generalizado [6]. Con este método

se pueden obtener, dada una simetría orientacional, más clases II que con cualquiera de los otros (incluyendo al anterior, ya que el método dual no se limita a N-mallas periódicas, se pueden construir N-mallas cuasiperiódicas también).

La N-malla se construye trazando planos (o líneas, en 2D) normales a los vectores estrella que definen la simetría orientacional. La separación entre planos de una dirección dada está en función de una sucesión $\{X_N\}$ ($N \in \mathbb{Z}$) que puede ser periódica o cuasiperiódica. Los vértices del empaquetamiento se obtienen por una transformación dual.

Con este método es posible construir empaquetamientos cuasicristalinos con simetría orientacional arbitraria. La única desventaja que presenta es que, a diferencia de los métodos de proyección, no se conoce un método analítico directo para hallar el patrón de difracción del empaquetamiento resultante.

EL METODO DE LA BANDA.

2.1. INTRODUCCION.

Desarrollado por Duneau y Katz [1] se presenta como una variante del método de proyección discutido en la sección anterior.

En el método de la banda se obtienen los vértices del empaquetamiento cuasiperiódico proyectando puntos de una red periódica de dimensión mayor. El primer paso consiste en escoger adecuadamente el hiperplano de proyección (que corresponde al espacio real) y los puntos que se proyectarán deben estar dentro de la banda generada al desplazar el cubo unitario (en general se trata de un hipercubo) de la red periódica sobre este hiperplano.

Sea $L = \mathbb{Z}^n$ la red periódica de dimensión n generada por la base natural (e_1, e_2, \dots, e_n) y sea

$$\Gamma = \left\{ \sum_{j=1}^n x_j e_j \mid 0 < x_j < 1 \right\}$$

el cubo unitario (la figura 3a muestra un ejemplo en 2D). Sea $E \subset \mathbb{R}^n$ un subespacio de dimensión p en donde se generará el empaquetamiento. Se supone que E no contiene puntos de L , excepto el origen (denotaremos por $E \cap L = \{0\}$ a esta condición).

Sea $S = E + \Gamma_n$ la banda abierta generada al desplazar Γ_n a lo

largo de E, esto es: $S = \{x+y \mid x \in E \text{ y } y \in \Gamma_n\}$. Los vertices del empaquetamiento se obtienen de la proyeccion ortogonal (sobre E) de todos los puntos que cuen dentro de la banda S, esto es, que cumplen la condicion $S \cap L \neq \emptyset$.

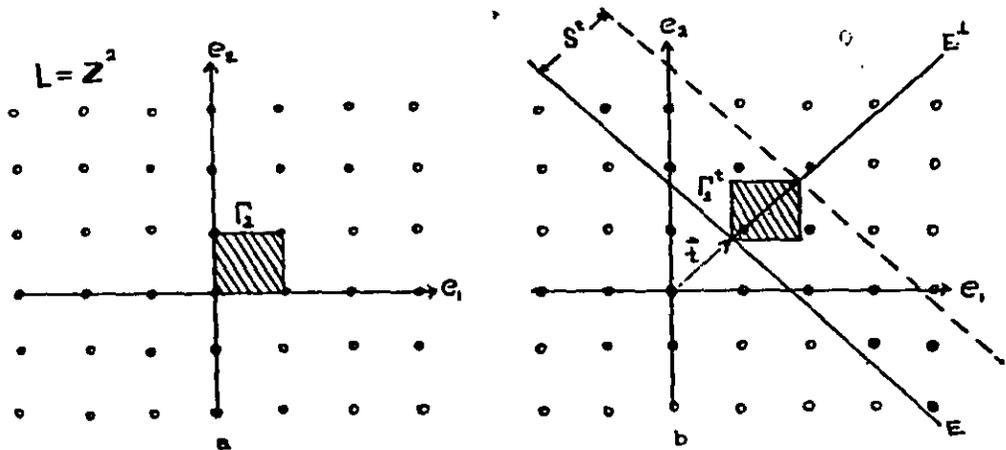


Figura 3. a).red periodica en 2D. b).traslacion de la banda S por el vector t.

Podemos considerar la situacion mas general en que la banda es desplazada por un vector cualquiera $t \in E^\perp$, entonces: $S^t = E + \Gamma_n + t = S + t$ y los correspondientes vertices del empaquetamiento son obtenidos de la proyeccion del conjunto de puntos $S^t \cap L$. (En la figura 3b se muestra un ejemplo en 2D).

2.2. PROPIEDADES DE LOS EMPAQUETAMIENTOS.

Nuestro interes ahora es investigar las propiedades de las estructuras obtenidas por este metodo. Es conveniente referirnos a las propiedades de las estructuras cuasicristalinas enumeradas en

la sección 1.2.

En lo siguiente consideraremos $t=0$. Por Π y Π^\perp representamos los operadores de proyección de \mathbb{R}^n sobre E y E^\perp respectivamente. Con esto, la estructura obtenida por proyección de los puntos (S_nL) será denotada por $\Pi(S_nL)$.

Proposición 1. - El conjunto de puntos $\Pi(S_nL)$ es un sistema de Delaunay.

Prueba.

I. Probaremos primero que el conjunto $\Pi(S_nL)$ es discreto en E . Sea ξ uno de estos puntos, entonces $\xi = \Pi(g)$ $g \in \mathbb{Z}^n$, construyamos una ϵ -vecindad alrededor de ξ . Los puntos que caen dentro de esta ϵ -vecindad (y que son vértices del empaquetamiento) son proyecciones de puntos que están dentro de una región R de la banda obtenida al desplazar la sección transversal de la banda (que corresponde a $\Pi^\perp(\Gamma_n)$) sobre toda la ϵ -vecindad. El número de puntos N contenidos en R es proporcional a su volumen:

$$N \approx \text{Volumen de } R = \text{Volumen de } \Pi^\perp(\Gamma_n) \times \text{Volumen de la } \epsilon\text{-vecindad}$$
La ϵ -vecindad es una p -esfera (p es la dimensión de E). Ahora, si Π^\perp es construida de manera que $\|\Pi^\perp(e_i)\| = 1$, entonces el poliedro convexo $\Pi^\perp(\Gamma_n)$ tiene un diámetro no mayor que 2, por lo que su volumen es menor o igual al de una m -esfera de radio unitario (m es la dimensión de E^\perp , esto es, $m=n-p$). Tomando en cuenta que el volumen de una n -esfera de radio r es

$$V_n(r) = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma(n/2)} r^n$$

($\Gamma(n/2)$) es la función Gamma de argumento $n/2$) y que la ϵ -vecindad se encuentra en el hiperplano del empaquetamiento de dimensión p , se tiene que:

$$N \approx V \approx \frac{\pi^{m/2}}{\Gamma(m/2)} 1^m \times \frac{\pi^{p/2}}{\Gamma(p/2)} \epsilon^p = \frac{\pi^{m/2} \pi^{p/2}}{\Gamma(m/2)\Gamma(p/2)} \epsilon^p$$

De esta última expresión, tomando $N=1$ y $m+p=n$, podemos concluir que para

$$\epsilon^0 \approx \left[\frac{\Gamma(m/2)\Gamma(p/2)}{\pi^{n/2}} \right]^{1/p}$$

tenemos solo un punto dentro de la ϵ -vecindad (el centro), de aquí que podemos trazar en E una vecindad de radio $\epsilon^0/2$ que no contenga ningún punto $\xi \in \Pi(S_nL)$. Por tanto $\Pi(S_nL)$ es discreto.

II. La condición de cobertura se puede probar fácilmente a partir de la demostración anterior, pues es suficiente con trazar una vecindad en E de radio $R > \epsilon^0/2$ para encontrar al menos un punto $\xi \in \Pi(S_nL)$.

La condición $(E_nL) = \emptyset$ juega un papel importante en las propiedades de simetría traslacional del empaquetamiento $\Pi(S_nL)$. Para establecer más formalmente esta conclusión es necesario primero considerar una propiedad importante de la proyección de S_nL sobre E^+ que se enuncia en la siguiente

Proposición 2.- Si $(E_nL) = \emptyset$, S_nL está en correspondencia uno a uno con su proyección $\Pi^+(S_nL)$.

Prueba:

Sean $g = \sum_{i=1}^n g_i e_i$ y $m = \sum_{i=1}^n m_i e_i$ ($g_i, m_i \in \mathbb{Z}$) dos puntos de L tales que $\Pi^{\perp}(g) = \Pi^{\perp}(m)$, entonces $\Pi^{\perp}(g-m) = 0$. Si $g \neq m$ entonces $(g-m) \perp E^{\perp}$ o bien $(g-m) \in E$, sin pérdida de generalidad podemos tomar $m=0$ (el origen), entonces $\Pi^{\perp}(g) = 0$ o bien $g \in E$, por tanto $(E \cap L) = \emptyset$.

Con este resultado en mente podemos formalizar la afirmación inicial:

Proposición 3.- Si $(E \cap L) = \emptyset$, el empaquetamiento $\Pi(S \cap L)$ es no-periódico.

prueba.

Supongamos que $\Pi(S \cap L)$ es invariante bajo una traslación u ; $u = \Pi(\xi)$, $\xi \in \mathbb{Z}^n$. Puesto que el adoquinado proviene de una transformación lineal (una proyección) de los puntos $(S \cap L)$, entonces el conjunto $(S \cap L)$ debe ser invariante bajo el grupo unidimensional de traslación generado por ξ . Sea v una traslación que deja invariante $(S \cap L)$ y sean ξ_1 y $\xi_2 \in (S \cap L)$ dos puntos tales que $\xi_1 + v = \xi_2$, puesto que $(v \parallel E)$, entonces $\Pi^{\perp}(\xi_1 + v) = \Pi^{\perp}(\xi_2)$ implica $\Pi^{\perp}(\xi_1) = \Pi^{\perp}(\xi_2)$ de donde resulta, por la proposición 2, que $(E \cap L) = \emptyset$.

Las propiedades de simetría orientacional de $\Pi(S \cap L)$ están directamente relacionadas con la elección de la dimensión n de la red cúbica y del espacio E .

Así, consideremos una red cúbica \mathbb{Z}^n con un grupo espacial de

simetría $\{T|G\}$ donde T es el grupo de traslación y G es el grupo puntual. Entonces G opera en \mathbb{Z}^n a través de una representación ortogonal D de dimensión n y $G: \mathbb{Z}^n \rightarrow \mathbb{Z}^n$.

Ahora, escogamos un subgrupo $H \subset G$ del grupo puntual. Cualquier representación D de G nos proporciona una representación de H de la misma dimensión simplemente eligiendo aquellas matrices D que son imágenes de elementos de H . Supongamos que esta representación (llamada subducida) se puede descomponer en la suma directa de dos representaciones ortogonales D_1 y D_2 de dimensiones p y $n-p$ respectivamente:

$$H: D \rightarrow D_1 \oplus D_2$$

con lo que podemos descomponer \mathbb{R}^n como:

$$\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p \oplus \mathbb{R}^{n-p} \quad ; \quad \mathbb{R}^p \perp \mathbb{R}^{n-p}$$

Por esta construcción, el subgrupo H de G actúa en $\mathbb{R}^p = E$ ($H: \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^p$), y la estructura obtenida posee la simetría orientacional asociada con el subgrupo H .

Este tipo de construcción es aplicada por Kramer y Neri¹ [4] a varios grupos H y lleva a estructuras periódicas (en el caso en que la acción de H sobre \mathbb{R}^p sea cristalográfica) y no periódicas en \mathbb{R}^p .

¹ Los autores obtienen los empaquetamientos por el método de multimasillas periódicas. Cahler y Rhyner [27] demostraron la equivalencia de este con el método de la banda.

2.3. SINGULARIDADES.

Una estructura $\Pi(S \cap L)$ que posee el grupo de simetría H se denomina regular, en otro caso, la estructura es singular. Un caso especial de estructura singular se obtiene cuando $(E \cap L) \neq \emptyset$ (el hiperplano de proyección contiene uno o más puntos de la red cúbica) y se denomina **excepcionalmente singular**.

Las estructuras singulares son una degeneración del caso regular y poseen propiedades características; por ejemplo, pueden presentar un centro de simetría rotacional (figuras 11,16,20,25) o planos de reflexión (figuras 12,24) y, si la estructura pertenece a una clase ILP , las reglas de unión no se cumplen.

Es importante notar que $t=0$ da lugar a una estructura excepcionalmente singular, pues el hiperplano E contiene el origen de \mathbb{R}^n , y si este es el único punto que contiene, la estructura es estrictamente no periódica, por la proposición 3. Si el hiperplano E está orientado de manera que además contiene una cadena infinita de puntos en una cierta dirección (esto depende de las dimensiones de \mathbb{R}^n y de E), la estructura resultante será periódica solo en una dirección. El caso extremo en que el hiperplano contiene cadenas infinitas de puntos en n direcciones diferentes da lugar a una estructura estrictamente periódica (figura 18).

Existen otra clase de singularidades que no están asociadas con el caso $t=0$ y que pueden visualizarse mejor si recurrimos al método de las multimallas periódicas mencionado en la sección 1.3.

Una n -malla G_n , en un espacio E de dimensión p , consiste en n

arreglos de hiperplanos separados periódicamente y normales a n vectores estrella $\{g_i\}$ $i=1, \dots, n$ que definen la simetría orientacional. Si la separación entre planos se asocia a una constante $k \in \mathbb{Z}$, G_n puede escribirse como:

$$G_n = \{ x \in E \mid x \cdot g_i - \gamma_i = k_i ; i=1, \dots, n, k_i \in \mathbb{Z} \}$$

El parámetro γ_j nos da la traslación del arreglo j -ésimo de hiperplanos con respecto al origen. Estos parámetros γ_i juegan un papel importante en las propiedades del empaquetamiento obtenido por dualización de la n -malla; el empaquetamiento es regular si γ_i es tal que no existen puntos en E donde más de p hiperplanos se intersecten (p es la dimensión de E), el caso extremo en el que γ_i es tal que n hiperplanos se intersecten en un punto se denomina excepcionalmente singular, los otros casos son llamados simplemente singulares.

Para aclarar ideas, supongamos que tenemos una 4-malla excepcionalmente singular en 2D (fig. 4a., notese que en el origen se cruzan 4 líneas) ésta se obtiene con $\gamma_i = 0$, $i=1, \dots, 4$. Podemos trasladar un solo arreglo (p.ej. $\gamma_2 \neq 0$. fig. 4b) y en el origen aún se cruzan tres líneas por lo cual sigue siendo singular aunque ya no excepcional. A partir de aquí se puede obtener una 4-malla regular si trasladamos otro arreglo (p.ej. $\gamma_3 \neq 0$), de manera que podemos obtener 3 diferentes empaquetamientos: uno excepcionalmente singular, uno singular y uno regular.

La conexión entre el método de multimallas periódicas y el método de la banda puede hacerse de la siguiente manera: La red

periódica Z^n puede verse como los puntos en los que se intersectan

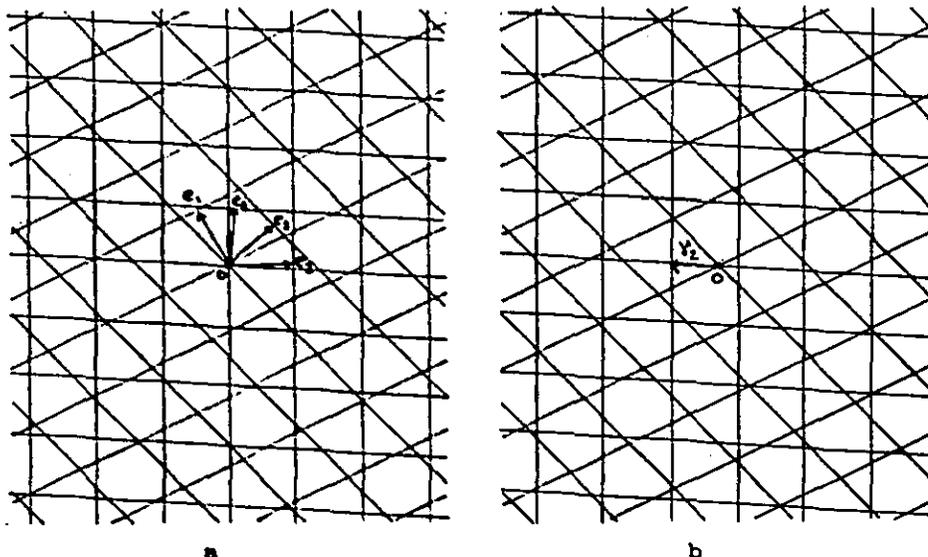


Figura.4 a). 4-malla excepcionalmente singular ($\gamma_1=0, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4 \neq 0, i=1, \dots, 4$).
 b). 4-malla singular ($\gamma_2 \neq 0, \gamma_1=\gamma_3=\gamma_4=0$).

n arreglos de hiperplanos en R^n , denotaremos por Δ a este conjunto:

$$\Delta = \{ x \in R^n \mid x \cdot e_i - t_i = k_i, \quad i=1, \dots, n, \quad k_i \in Z \}$$

donde $\{e_i\}$ es una base ortonormal de R^n y t_i son las coordenadas del origen de R^n . Si E es el hiperplano donde se obtendrá el adoquinado, la n-malla se identifica con la intersección $\Delta \cap E$ [27] y los parámetros γ_i se identifican con las coordenadas t del origen de R^n que a su vez pueden asociarse al vector de traslación de E (o de la banda) pues podemos mantener los n arreglos Δ sin trasladar y en su lugar trasladar E.

Consideremos nuevamente el ejemplo de la 4-malla; podemos

tomar un arreglo de hiperplanos en \mathbb{R}^4 y con $t=0$ obtenemos una estructura excepcional singular pues en la 4-malla obtenida por $\Delta \cap E$ se tendrán 4 líneas intersectando el origen. También podemos tomar un cierto $t \neq 0$ de manera que solo 3 líneas intersecten el origen y obtener una estructura singular o , removiendola última, llegar a una estructura regular.

En conclusión, diferentes elecciones del vector t de traslación de la banda nos dará lugar a empaquetamientos ya sea regulares, singulares o excepcionalmente singulares ($t=0$). En la parte 4 se mostrarán algunos ejemplos de estos casos.

2.4. COMENTARIOS.

Un algoritmo computacional que utilice el método de la banda para generar porciones de empaquetamientos cuasiperiódicos se enfrenta al problema de la selección de los puntos tales que $S^t \cap L \neq \emptyset$; los puntos que caen dentro de la banda. Es posible utilizar un análisis geométrico [28] que es válido solo cuando la dimensión de E^\perp es menor o igual a 3 y, además, es diferente para cada simetría deseada, lo cual lo hace inadecuado en muchas circunstancias.

En la parte siguiente presentamos un criterio completamente general para seleccionar esos puntos, en el sentido de que es válido para cualquier dimensión n de L y p de E , siempre que $n > p$.

CRITERIO PARA LA SELECCIÓN DE PUNTOS

3.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.

Consideremos el problema general en que la banda es desplazada por un vector $t \in E^1$. Dadas Π y Π^1 los vectores base $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ proyectan en $\hat{e}_j = \Pi(e_j)$ y $\hat{e}_j^1 = \Pi^1(e_j)$ donde $j=1, 2, \dots, n$.

Dado que estamos desplazando la banda por el vector t , el cubo unitario es también desplazado:

$$\begin{aligned} \Gamma_n^t &= \Gamma_n + t = \left\{ \sum_{j=1}^n x_j e_j + t \mid 0 < x_j < 1, t \in E^1 \right\} \\ &= \left\{ \sum_{j=1}^n (x_j + t_j) e_j \mid 0 < x_j < 1, t \in E^1 \right\} \end{aligned}$$

La proyección sobre E^1 de todos los puntos que caen dentro de la banda es justamente la proyección $\Pi^1(\Gamma_n^t)$ [1]. Así, decimos que un punto cae dentro de la banda S^t si su proyección sobre E^1 cae dentro de la proyección de Γ_n^t .

La proyección de Γ_n^t sobre E^1 es:

$$\begin{aligned} \pi^t(\Gamma_n^t) &= \sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^n \pi_{ij}^t (x_j + t_j) \right] e_i \\ &= \sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^n (\pi_{ij}^t x_j) + t_i \right] e_i \quad 0 < x_j < 1 \end{aligned} \quad (1)$$

donde se tomó en cuenta que $\pi^t(t) = t$, y π_{ij}^t son las componentes de la matriz de proyección π^t .

Sea $g_i = \sum_{j=1}^n g_j e_j$ ($g_j \in \mathbb{Z}$) un punto cualquiera en L . Su proyección sobre Σ^t es:

$$\begin{aligned} \pi^t(g) &= \sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^n \pi_{ij} g_j \right] e_i \\ &= \sum_{i=1}^n g_i^t e_i \end{aligned} \quad (2)$$

donde $g_i^t = \sum_{j=1}^n \pi_{ij}^t g_j$. Con esto, $g \in S^t$ si $\pi^t(g)$ está dentro del poliedro convexo generado por la proyección del cubo unitario $\pi^t(\Gamma_n^t)$, lo cual se cumple si el sistema

$$\sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^n (\pi_{ij}^t x_j) + t_i \right] e_i = \sum_{i=1}^n g_i^t e_i \quad (3)$$

tiene solución para $0 < x_j < 1$.

El sistema (3) puede también escribirse como:

$$\sum_{j=1}^n \left[\sum_{i=1}^n (\pi_{ij}^t x_j) \right] e_i = \sum_{i=1}^n (g_i^t - t_i) e_i$$

o en forma matricial como:

$$\Pi^{\perp} x = g^{\perp} - t \quad 0 < x_j < 1 \quad (3)$$

donde $(g^{\perp})^T = (g_1^{\perp}, g_2^{\perp}, \dots, g_n^{\perp})$ son las componentes de la proyección de g sobre E^{\perp} , y $t^T = (t_1, t_2, \dots, t_n)$ es el vector de traslación de la banda. Por X^T , entendemos a la matriz transpuesta de X .

De esta manera, el problema de seleccionar los puntos que están dentro de la banda se reduce a verificar la factibilidad del sistema (3) para $x_j \in (0, 1)$.

3.2. APLICACIÓN DEL MÉTODO SIMPLEX.

La factibilidad del sistema (3) puede ser detectada usando el método simplex de programación lineal (apéndice A), por lo cual debemos llevar el problema a la forma A.2.

La restricción $0 < x_j < 1$ la podemos reemplazar por una condición de no negatividad si introducimos un conjunto de variables no negativas $\{x_{n+1}, x_{n+2}, \dots, x_{2n}\}$. Es claro que la restricción $0 < x_j < 1$ se cumple si:

$$x_j + x_{n+j} = 1 \quad j=1, 2, \dots, n$$

con lo que el problema es ahora verificar si el sistema

$$\sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^n (\Pi_{ij}^{\perp} x_j) \right) e_i = \sum_{i=1}^n (g_i^{\perp} - t_i) e_i \quad (4)$$

$$x_j + x_{n+j} = 1 \quad j=1, 2, \dots, n$$

es factible para $x_j \geq 0$. Escrito en componentes:

$$\begin{array}{rcl}
 \pi_{11}^1 x_1 + \pi_{12}^1 x_2 + \dots + \pi_{1n}^1 x_n & = & g_1^1 - t_1 \\
 \pi_{21}^1 x_1 + \pi_{22}^1 x_2 + \dots + \pi_{2n}^1 x_n & = & g_2^1 - t_2 \\
 \vdots & & \vdots \\
 \pi_{n1}^1 x_1 + \pi_{n2}^1 x_2 + \dots + \pi_{nn}^1 x_n & = & g_n^1 - t_n \\
 x_1 + & & = 1 \\
 & x_{n+1} & = 1 \\
 & x_{n+2} & = 1 \\
 & \vdots & \vdots \\
 & x_{2n} & = 1
 \end{array}$$

y en forma matricial puede ser escrito como:

$$A x = b \quad (4)$$

con $x_j \geq 0$ y donde

$$A = \begin{bmatrix} (\pi^1) & (0) \\ (I) & (I) \end{bmatrix}$$

$b^T = (g_1^1 - t_1, g_2^1 - t_2, \dots, g_n^1 - t_n, 1, 1, \dots, 1)$, 0 es la matriz con todos sus elementos iguales a cero y I es la matriz unitaria estándar.

Por último, para completar el esquema del problema de programación lineal construiremos una función objetivo que deberá ser minimizada; para ello adicionamos en (4) un nuevo conjunto de variables no negativas $(z_1, z_2, \dots, z_{2n})$ que, como veremos más adelante, no afectarán nuestro problema original, y definimos la función:

$$f(z) = z_1 + z_2 + \dots + z_{2n} \quad (5)$$

de manera que tenemos ahora un sistema de $2n$ ecuaciones con $4n$

incógnitas:

$$A x + Z = b \quad (6)$$

$$x_j \geq 0, z_j \geq 0 \quad j=1, 2, \dots, 2n$$

donde:

$$Z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{2n} \end{bmatrix}$$

con lo que hemos llegado al planteamiento deseado del problema: encontrar, de entre todas las posibles soluciones no negativas de (6) aquella que haga mínima la función objetivo (5).

Es importante notar que si entre las soluciones de (6) existe una para la que la función objetivo alcance el mínimo en $f(z)=0$, debido a la no negatividad de las variables z_j , esto implica que $z_1=z_2=\dots=z_{2n}=0$ con lo que, poniendo $Z=0$ en (6), llegamos a que el sistema original (4) tiene soluciones no negativas o bien, que el sistema (3) es factible para $0 < x_j < 1$.

Concluimos entonces que un punto cualquiera $g \in L$ está dentro de la banda S^t si al minimizar (5) sujeto a (6) nos encontramos con que el mínimo se alcanza en $f(z)=0$.

Mediante el uso del método simplex la factibilidad de (3) puede detectarse de una manera concluyente y general, pues la dimensión de L puede ser cualquiera. En el siguiente apartado presentamos una manera alternativa de abordar este mismo problema usando lo que se denomina matriz inversa generalizada o matriz inversa de Penrose-Moore (apéndice B). Este método presenta la

desventaja de no ser concluyente en algunos casos, sin embargo al utilizarse junto con el método simplex nos permite reducir en forma considerable el tiempo de ejecución del programa.

3.3. APLICACIÓN DE LA MATRIZ INVERSA GENERALIZADA.

Regresemos al problema original: determinar la factibilidad del sistema

$$\Pi^t x = g^t - t \quad (7)$$

(ecuación 3) para $0 < x_j < 1$.

La matriz inversa generalizada nos da la solución de (7) que hace mínima $\|X\|^2$ (apéndice B). Para hacer uso de ésta propiedad es preciso escribir en forma más simétrica la restricción $0 < x_j < 1$. Sea $y_j = x_j - \frac{1}{2}$, con lo que la restricción $0 < x_j < 1$ se escribe ahora como $|y_j| < \frac{1}{2}$. Sustituyendo en (7) se obtiene:

$$\sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^n \Pi_{ij}^t (y_j + \frac{1}{2}) \right] e_i = \sum_{i=1}^n (g_i^t - t_i) e_i$$

o bien:

$$\sum_{i=1}^n \left[\sum_{j=1}^n \Pi_{ij}^t y_j \right] e_i = \sum_{i=1}^n d_i e_i \quad |y_j| < \frac{1}{2}$$

donde $d_i = ((g_i - \frac{1}{2})^t - t_i)$. En forma matricial queda:

$$\Pi^t y = d \quad (8)$$

donde $d^T = \left[(g_1 - \frac{1}{2})^t - t_1, (g_2 - \frac{1}{2})^t - t_2, \dots, (g_n - \frac{1}{2})^t - t_n \right]$, $|y_j| < \frac{1}{2}$

con $j=1, 2, \dots, n$

De la ecuación B.2 (apéndice B), tenemos que la solución de (8) es:

$$y = (\Pi^{\perp})^+ d \quad (9)$$

donde $(\Pi^{\perp})^+$ es la matriz inversa generalizada de Π^{\perp} . Poniendo $(\Pi^{\perp})^+ = \Pi^{\perp}$ (ecuación B.3), se obtiene:

$$y = \Pi^{\perp} d \quad (10)$$

La condición $|y_j| < \frac{1}{2}$ que requerimos de (10) nos permite formular las siguientes conclusiones:

I. Si $|y_j| < \frac{1}{2} \quad \forall j$, la solución es aceptable: el punto g está dentro de la banda.

II. Si $\sum_{j=1}^n |y_j|^2 \geq \frac{n}{4}$ el punto no está dentro de la banda puesto que la inversa generalizada nos da el valor mínimo de $\|Y\|^2 = \sum |y_j|^2$, si este valor es mayor que $\frac{n}{4}$, al menos para alguna j se tiene $|y_j| > \frac{1}{2}$, que se sale del rango.

III. Si $\sum_{j=1}^n |y_j|^2 < \frac{n}{4}$ y para alguna j se tiene $|y_j| > \frac{1}{2}$, no podemos formular conclusión alguna.

La aplicación de la matriz inversa generalizada nos permite aceptar o rechazar muchos puntos en forma directa sin embargo, como ya mencionamos, tiene la desventaja de no ser concluyente en algunos casos: aquellos que caen en la categoría III.

La matriz inversa generalizada puede ser utilizada como un test primario, aquellos puntos que caigan en la última categoría deben ser analizados por el método simplex.

4

APLICACIONES

El criterio propuesto en el capítulo anterior para seleccionar los puntos (S₀L) es utilizado para generar porciones de adoquinados cuasiperiódicos por computadora. Se presentan en esta parte los resultados obtenidos en 2 y 3 dimensiones.

4.1. ESTRUCTURAS CUASICRISTALINAS EN 2D.

Describiremos en esta sección como aplicar el método de la banda para obtener estructuras cuasicristalinas en el plano. En particular se discuten los casos de simetría orientacional pentagonal (adoquinados de Penrose), hexagonal y heptagonal. Por simplicidad representaremos la simetría por n que indica una rotación por $2\pi/n$.

4.1.1. $n=5$ (adoquinado de Penrose)

El primer ejemplo de un adoquinado no periódico fué dado por R. Penrose [5] en 1974. Este consiste de dos rombos; uno con un ángulo agudo de $2\pi/5$ y el otro con uno de $2\pi/10$. Las líneas que unen los vértices de la estructura tienen orientaciones que difieren en múltiplos de $2\pi/5$, de manera que la simetría orientacional está definida por un conjunto de vectores estrella

que señalan los vértices de un pentágono regular. Esto sugiere la aplicación del método de la banda en \mathbb{Z}^5 de manera que los vectores $\Pi(e_i) = e_i$ ($i=1, \dots, 5$, $\Pi: \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}^2$) señalen los vértices de un pentágono regular.

Nuestra propuesta puede confirmarse haciendo uso de la teoría de grupos siguiendo el esquema delineado en el capítulo anterior.

El adoquinado de Penrose se asocia con el grupo cíclico $C(5)$ de orden 5 que es generado por la operación de rotación por un ángulo de $2\pi/5$. Enseguida, consideremos el grupo hiperoctaedral $\Omega(5)$ que consiste de todas las permutaciones ($5!$) y todas las reflexiones (2^5) de 5 vectores ortonormales. Puede probarse² que $C(5) < \Omega(5)$ lo que permite obtener una representación $D^{(5)}$ de $C(5)$, subducida de la representación D de $\Omega(5)$, que puede descomponerse en una suma directa de 3 representaciones ortogonales de dimensiones 2, 2 y 1:

$$D^{(5)} \rightarrow D_1^{(2)} \oplus D_2^{(2)} \oplus D_3^{(1)}$$

con lo que \mathbb{R}^5 se descompone en 3 espacios ortogonales:

$$\mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}^2 \oplus \mathbb{R}^2 \oplus \mathbb{R}^1$$

uno de los cuales corresponde al plano del adoquinado y queda fijado al construir la matriz del operador de proyección.

Proposición 4. Los elementos de matriz del operador de proyección $\Pi: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ están determinados por los productos escalares de los vectores base proyectados, esto es:

² Una exposición detallada y clara de este proceso así como una revisión del método de multiasias periódicas puede encontrarse en la referencia [10].

$$\Pi_{ij} = \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j \quad i, j = 1, \dots, n \quad (11)$$

Prueba:

Sabemos que los vectores base $\{\hat{e}_i\}$ de \mathbb{R}^n proyectan (en \mathbb{R}^p) en la dirección de un conjunto de vectores estrella $\{\hat{e}_i\}$ conocido. La componente i -ésima de esta proyección es: $\Pi_{ij} \hat{e}_j = \hat{e}_i$ tomando el producto escalar con \hat{e}_i en ambos lados, se tiene:

$$\Pi_{ij} = \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j$$

podemos escribir $\hat{e}_j = \hat{e}_j + \hat{e}_j^\perp$ donde $\hat{e}_j \in E$, $\hat{e}_j^\perp \in E^\perp$, $\mathbb{R}^n = E \oplus E^\perp$, por tanto:

$$\Pi_{ij} = \hat{e}_i \cdot (\hat{e}_j + \hat{e}_j^\perp) = \Pi_{ij} = \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j$$

con lo que concluye la demostración. Podemos igualmente llegar a que $\Pi_{ij}^\perp = \hat{e}_i^\perp \cdot \hat{e}_j$ y si, por otra parte tomamos en cuenta que :

$$\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j = \delta_{ij} = (\hat{e}_i^\perp + \hat{e}_i) \cdot \hat{e}_j = \hat{e}_i^\perp \cdot \hat{e}_j + \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j$$

concluimos que: $\delta_{ij} = \Pi_{ij}^\perp + \Pi_{ij}$.

De esta manera, para $n=5$ y \hat{e}_i señalando los vértices de un pentágono, se obtiene:

$$\Pi = \frac{1}{5} \begin{bmatrix} 2 & \frac{1}{\tau} & -\tau & -\tau & \frac{1}{\tau} \\ \frac{1}{\tau} & 2 & \frac{1}{\tau} & -\tau & -\tau \\ -\tau & \frac{1}{\tau} & 2 & \frac{1}{\tau} & -\tau \\ -\tau & -\tau & \frac{1}{\tau} & 2 & \frac{1}{\tau} \\ \frac{1}{\tau} & -\tau & -\tau & \frac{1}{\tau} & 2 \end{bmatrix} \quad \Pi^\perp = I - \Pi$$

donde $\tau = \frac{1}{\sqrt{5}}(1+5^{1/2})$.

En la figura 5 se muestra el adoquinado original de Penrose, en las figuras 6-10 se muestran adoquinados de la clase ILP obtenidos mediante traslaciones de la banda por el vector $t \in E^1$.

En las figuras 11 y 12 se muestran los vértices de los casos excepcionalmente singular ($t=0$) y singular.

4.1.2 $n=7$

Como segundo ejemplo se muestra como obtener una estructura con ejes de simetría heptagonal. Las rotaciones por $2\pi/7$ son no cristalográficas de manera que el adoquinado obtenido es no periódico.

La simetría orientacional del adoquinado está definida por un conjunto de vectores estrella que señalan los vértices de un heptágono regular. Asociamos esta estructura con el grupo cíclico $C(7)$ de orden 7 que es un subgrupo del grupo hiperoctaedral $\Omega(7)$ que consiste de 7! permutaciones y 2^7 reflexiones de 7 vectores ortonormales.

Siguiendo el esquema ya mencionado, se construye una representación $D^{(n)}$ de $C(7)$, subducida de la representación D de $\Omega(7)$, que se descompone en una suma directa de 4 representaciones; tres de dimensión 2 y una de dimensión 1:

$$D^{(n)} \rightarrow D_1^{(n)} \oplus D_2^{(n)} \oplus D_3^{(n)} \oplus D_4^{(n)}$$

con lo que R^7 se descompone en:

$$R^7 \rightarrow R^2 \oplus R^2 \oplus R^2 \oplus R^1$$

siendo alguno de los \mathbb{R}^2 el plano E del adoquinado.

La matriz de proyección $\Pi: \mathbb{R}^7 \rightarrow \mathbb{R}^2$ se obtiene mediante la ecuación (11), tomando en cuenta que la proyección de los vectores base de \mathbb{R}^7 señalan los vértices de un heptágono regular, resultando:

$$\Pi = \frac{2}{7} \begin{bmatrix} 1 & r_1 & r_2 & r_3 & r_3 & r_2 & -r_3 \\ r_1 & 1 & r_1 & r_2 & r_3 & r_3 & r_2 \\ r_2 & r_1 & 1 & r_1 & r_2 & r_3 & r_3 \\ r_3 & r_2 & r_1 & 1 & r_1 & r_2 & r_3 \\ r_3 & r_3 & r_2 & r_1 & 1 & r_1 & r_2 \\ r_2 & r_3 & r_3 & r_2 & r_1 & 1 & r_1 \\ -r_3 & r_2 & r_3 & r_3 & r_2 & r_1 & 1 \end{bmatrix} \quad \Pi^\perp = I - \Pi$$

donde $r_n = \cos(2n\pi/7)$.

Las figuras 13-15 muestran tres adoquinados regulares de diferente clase II. La figura 16 muestra los vértices del caso excepcionalmente singular.

4.1.3. n=8

Un análisis semejante es aplicado para obtener un adoquinado con simetría octagonal, mediante la proyección $\Pi: \mathbb{R}^8 \rightarrow \mathbb{R}^2$ de manera que la proyección de los vectores base de \mathbb{R}^8 y sus componentes negativas $\Pi(\mathbf{e}_i) = \pm \mathbf{e}_i$ señalen los vértices de un octágono

regular.

La figura 17 muestra el caso regular. Obsérvese que la estructura consiste de dos celdas unitarias: un cuadrado y un rombo. F.P.M.Beenker [29] genera esta misma clase de estructuras mediante reglas de unión y deflación y propone, a la vez, una teoría algebraica para su interpretación.

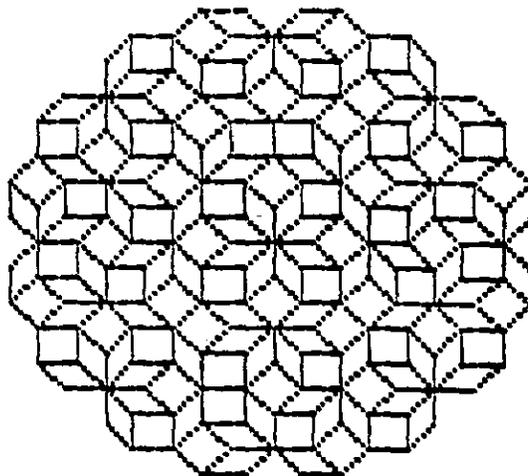


FIGURA 17. Adoquinado regular con simetría octagonal.

4.1.4. $n=3$ (estructura periódica)

En este caso la estructura se obtiene mediante la proyección $\Pi: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ con la condición de que la proyección de los vectores base de \mathbb{R}^3 señalen los vértices de un triángulo equilátero.

De la matriz de proyección:

$$\Pi = \begin{bmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 \\ -1 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\Pi^{-1} = I - \Pi$$

podemos verificar que la diagonal de \mathbb{R}^3 generada por (t,t,t) es ortogonal al plano de proyección que, en consecuencia, es $x+y+z=0$. Es claro que este plano contiene un número infinito de puntos de \mathbb{Z}^3 , de aquí que la estructura obtenida es estrictamente periódica (figura 18), como se esperaba al tratarse de una simetría cristalográfica.

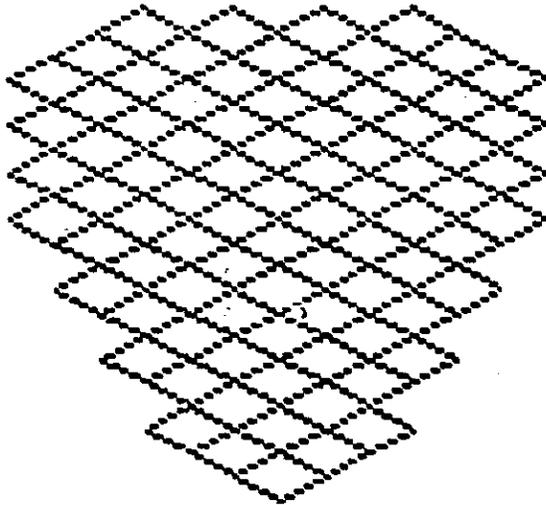


FIGURA 18. Estructura periódica con simetría $n=3$.

4.2. ESTRUCTURAS CUASICRISTALINAS EN 3D.

El análogo en tres dimensiones de los adoquinados de Penrose lo constituyen los empaquetamientos con simetría icosaedral. El grupo

icosaedro regular, tiene orden 60 y es isomorfo al grupo de permutaciones pares de 5 objetos $A(5)$ (en la mayor parte de la literatura se denota como $A(5)$ al grupo icosaedro). Como mencionamos en la primera parte, el grupo icosaedro no es compatible en \mathbb{R}^3 con la simetría traslacional. Nuestro objetivo es mostrar como aplicar el método de la banda para generar tales estructuras.

La aproximación más sencilla involucra \mathbb{Z}^6 de tal forma que la proyección de los vectores base (y sus negativos) de \mathbb{R}^6 señalen los 12 vértices de un icosaedro regular. Sin embargo esta no es la única estructura asociada con el grupo icosaedro como lo demostró P.Kramer [9] (vease también [14]) aplicando el siguiente razonamiento:

Dado el grupo $A(5)$ nuestro principal interés es conocer N tal que $A(5) \subset \Omega(N)$, pues esto nos indica que debemos proyectar de \mathbb{Z}^N . Esto se logra³ escogiendo un subgrupo $L \subset A(5)$ cuya representación unidimensional esté contenida en la representación de $A(5)$. Una vez que se tiene el subgrupo L podemos construir una representación de $A(5)$ partiendo de la representación de L , esta representación (llamada inducida) tiene dimensión $N = \frac{|A(5)|}{|L|}$ (donde $|G|$ es el orden del grupo G) y nos permite establecer la

³ Por ser más inmediato en 20, se reservó hasta este momento la discusión.

cadena $L < A(5) < \Omega(N)$ con $N = \frac{|A(5)|}{|L|}$.

En la referencia [4] los autores toman $L=C(5)$, el grupo cíclico de orden 5, lo que los lleva a una representación de $A(5)$ de dimensión $N=60/5=12$, por lo que se tiene: $C(5) < A(5) < \Omega(12)$ y se deduce que se debe proyectar de Z^{12} . Sin embargo podemos tomar $L=D(m)$ con $m=5,3,2$ [9,14], donde $D(m)$ es el grupo diédrico de orden $2m$ que es el grupo de simetrías de un polígono regular de m lados.

La representación de $D(m)$ induce representaciones de $A(5)$ de dimensión $N = \frac{|A(5)|}{|D(m)|} = \frac{60}{2m} = 6,10,15$ y podemos establecer la cadena: $D(m) < A(5) < \Omega(N)$ $N=6,10,15$.

Por lo que se tienen 3 diferentes empaquetamientos asociados al grupo icosaedro proyectando de Z^6 , Z^{10} y Z^{15} respectivamente. Las matrices de proyección son construidas de manera que los vectores base de cada uno de esos espacios proyecten en, respectivamente, un icosaedro, un dodecaedro y un icosidodecaedro. El número de celdas elementales que constituyen la estructura son, para cada caso, 2 (el equivalente al adoquinado de Penrose), 5 y 14.

Se presentan, a manera de ejemplo, las estructuras obtenidas aplicando nuestro criterio para los casos Z^6 y Z^{10} (la aplicación a Z^{15} es también inmediata).

4.2.1. $N=6$

La matriz de proyección $\Pi: \mathbb{R}^6 \rightarrow \mathbb{R}^3$ se construye de manera que

$\{e_i\} = \Pi(\{e_i\})$ ($\{e_i\}$ es la base de \mathbb{R}^6) señalen los vértices de un icosaedro regular.

La proyección de los vértices del empaquetamiento resultante ha sido calculada en planos perpendiculares a los ejes de simetría (a).5, (b).3 y (c).2, para el caso regular (figura 19) y para el caso excepcionalmente singular (figura 20).

Se pueden obtener algunos de los poliedros asociados a esta estructura al hacer un análisis por capas del empaquetamiento. Se muestran las 6 primeras capas de la estructura regular (figura 21) y de la excepcionalmente singular (figura 22).

Es interesante notar que en ninguno de los dos casos se sigue en general un proceso de dualización, esto es, que a cada vértice de una capa le corresponda una cara en la siguiente. También podemos observar que las capas 3 y 5 del caso regular son poliedros no regulares que no tienen simetría 5 como los demás, esta es una propiedad de estos empaquetamientos y puede predecirse desde la figura 18 en la que se observan puntos (marcados en negro) que violan localmente la simetría 5. Una discusión detallada de esta situación puede encontrarse en la ref.[11] secc.7.

4.2.2. N=10

La proyección $\Pi: \mathbb{R}^{10} \rightarrow \mathbb{R}^3$ es tal que la base de \mathbb{Z}^{10} (y sus negativos) proyecta en la dirección de los vértices de un

dodecaedro regular.

En las figuras 23 , 24 y 25 se muestra la proyección de los vértices del empaquetamiento en un plano perpendicular a los ejes (a).5, (b).3, (c).2 de simetría, para los casos: regular (fig.23) singular (fig.24) y excepcionalmente singular (fig.25).

Si se compara la proyección que presenta simetría 5 del caso singular (fig.24a) con su equivalente singular en 2D (fig.12) se observa que ambos presentan un plano de reflexión. En el caso de 3D este plano también se presenta en la proyección con simetría 3 (fig.24 b).

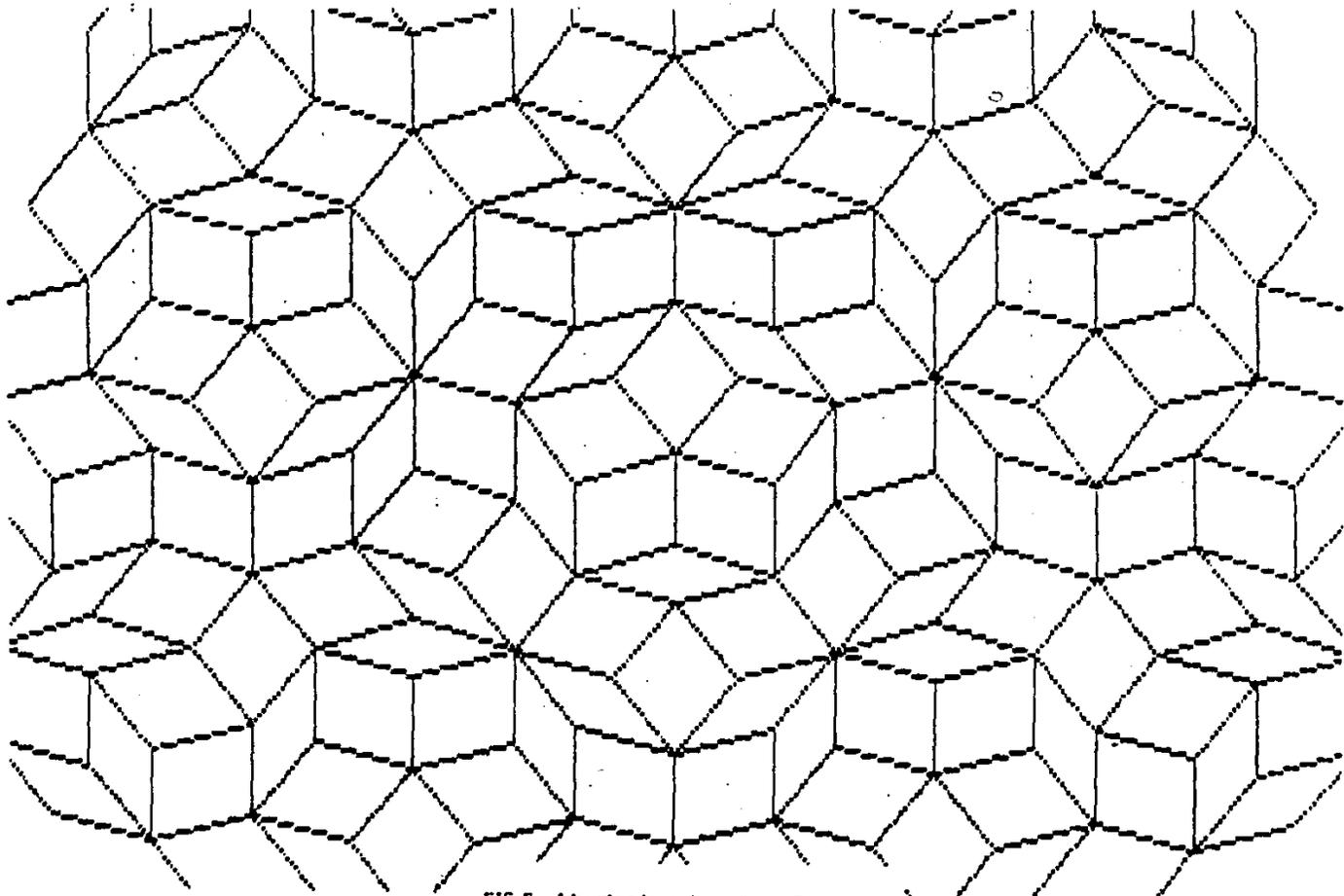
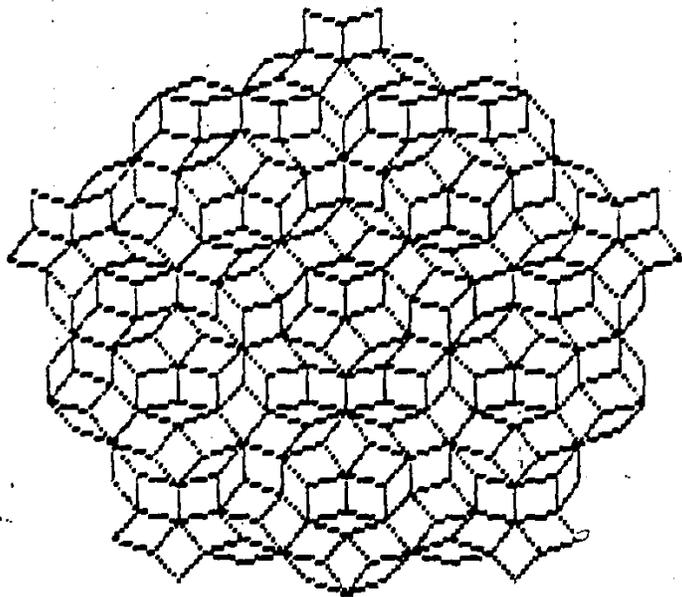
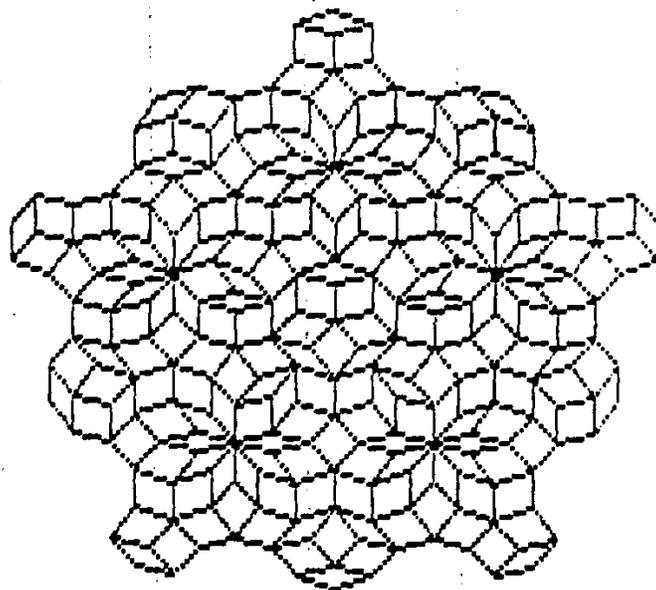


FIG. 6. Adoquinado original de Penrose.

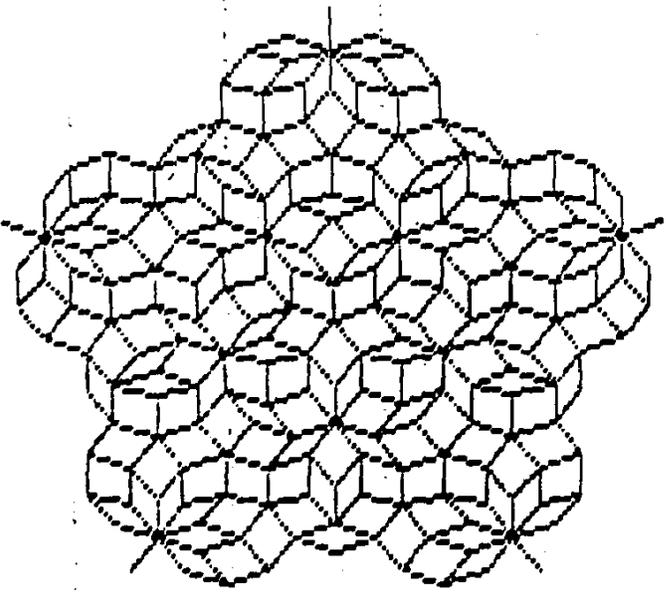


6. $t=(1,1,1,1,1,1)$



7. $t=(2,2,2,2,2,2)$

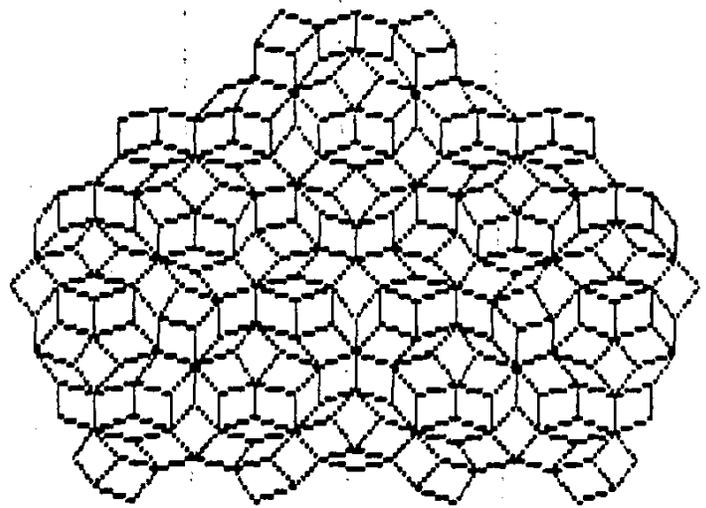
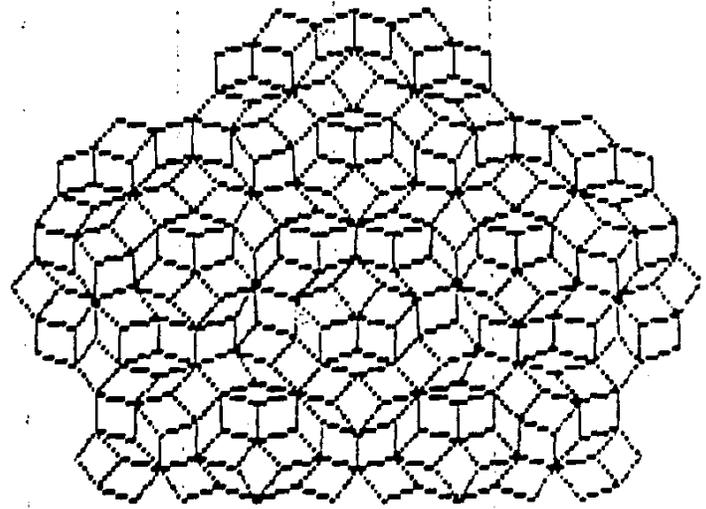
FIGS. 6-12. Adoquinados de Penrose obtenidos mediante traslaciones de la banda.

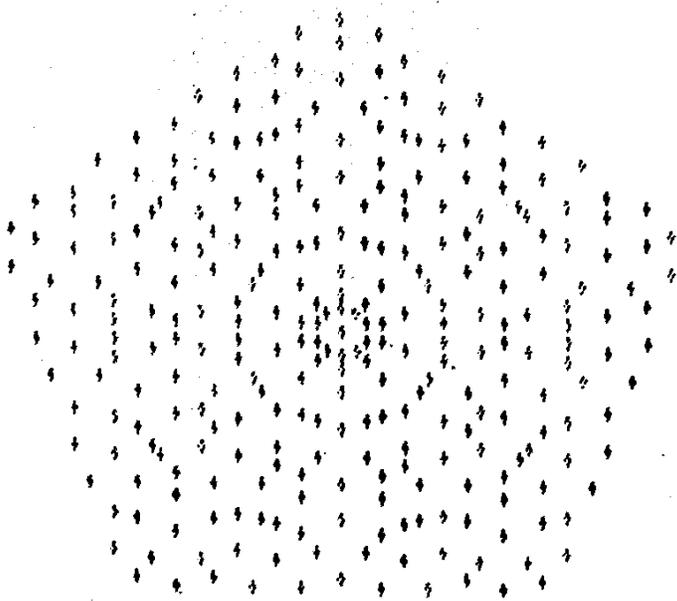


8. (arriba) $t=(3,3,3,3,3)$

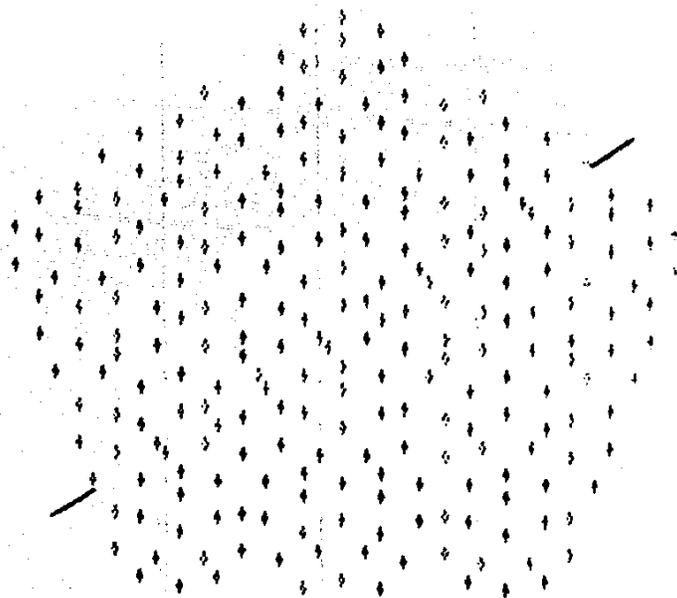
9. (arriba der.) $t=(.42,.13,-.34,-.34,.13)$

10. (derecha) $t=(.63,.19,-.51,-.51,.19)$

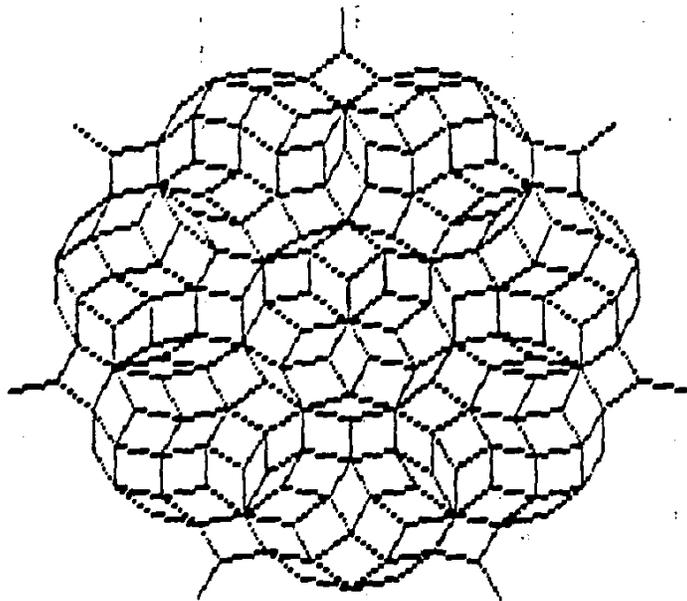




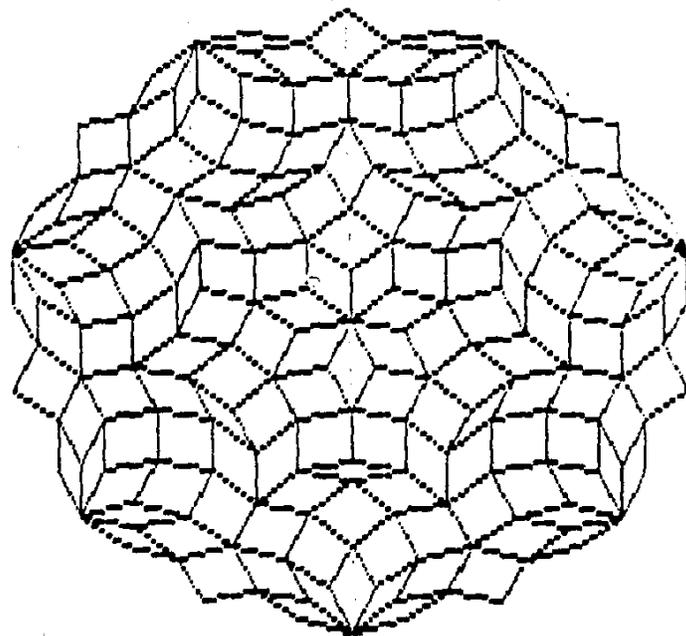
11. Excepcionalmente singular $t=0$



12. Singular $t=(.053, -.053, 0, 0, 0)$

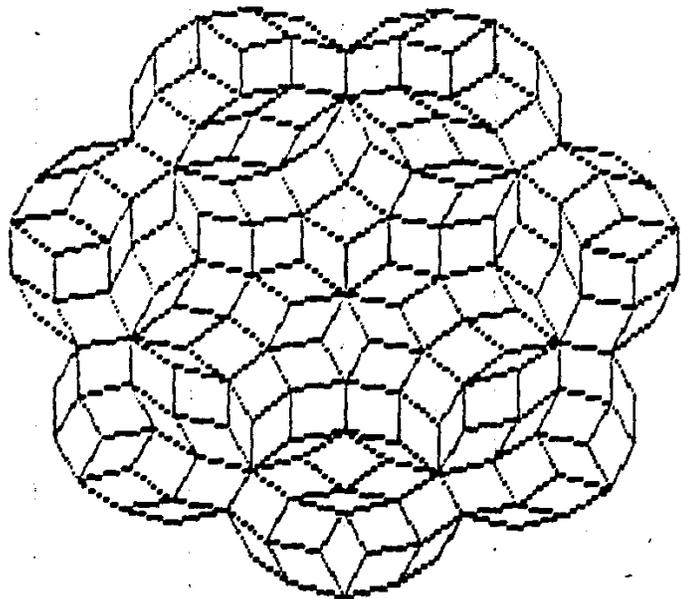


13. $t=(.1,.1,.1,.1,.1,.1,.1)$

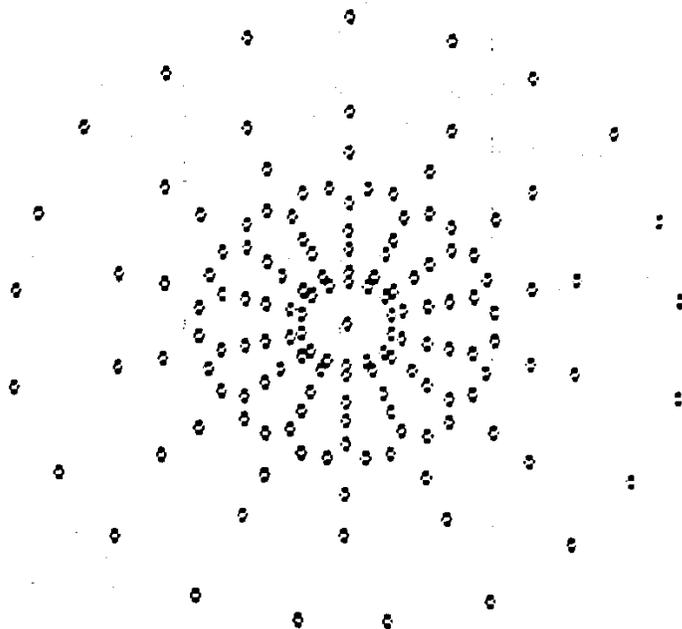


14. $t=(.2,.2,.2,.2,.2,.2,.2)$

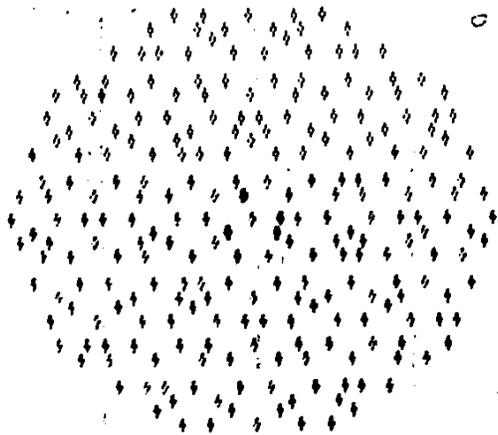
FIGS. 13-16. Adoquinados con simetria 7 para diferentes vectores de traslación de la banda.



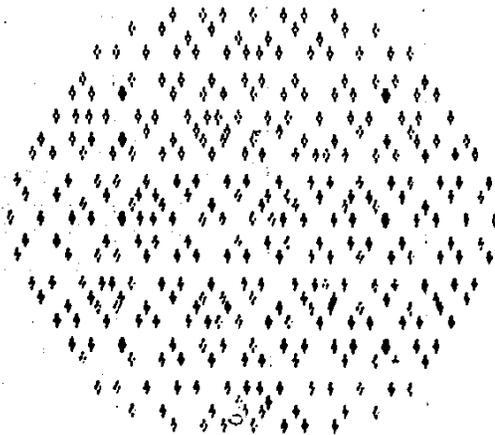
15. $t=(3,3,3,3,3,3,3)$



16. Excepcionalmente singular $t=0$

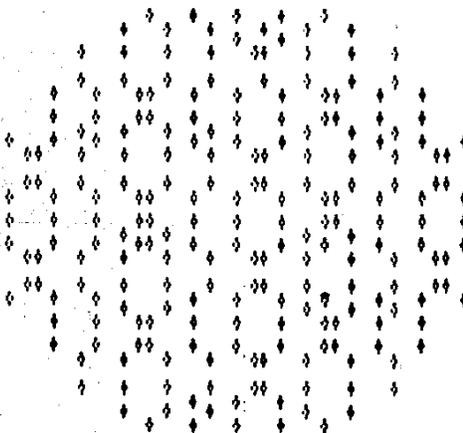


a

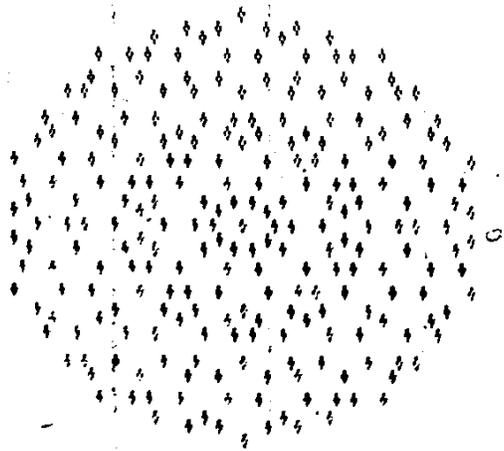


b

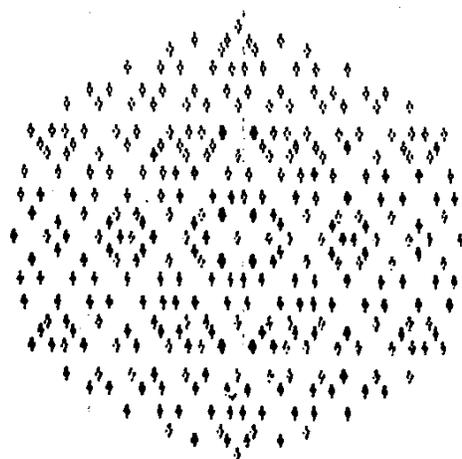
FIG.19. Proyección del empaquetamiento regular icosaédrico ($Z^6 \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes de simetría: (a).5, (b).3, (c).2.



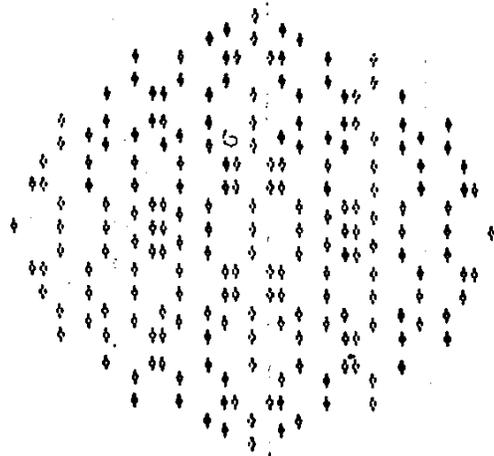
c



a



b



c

FIG.20. Proyección del empaquetamiento icosaédrico excepcionalmente singular ($Z^3 \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes de simetría: (a).5, (b).3, (c).2.

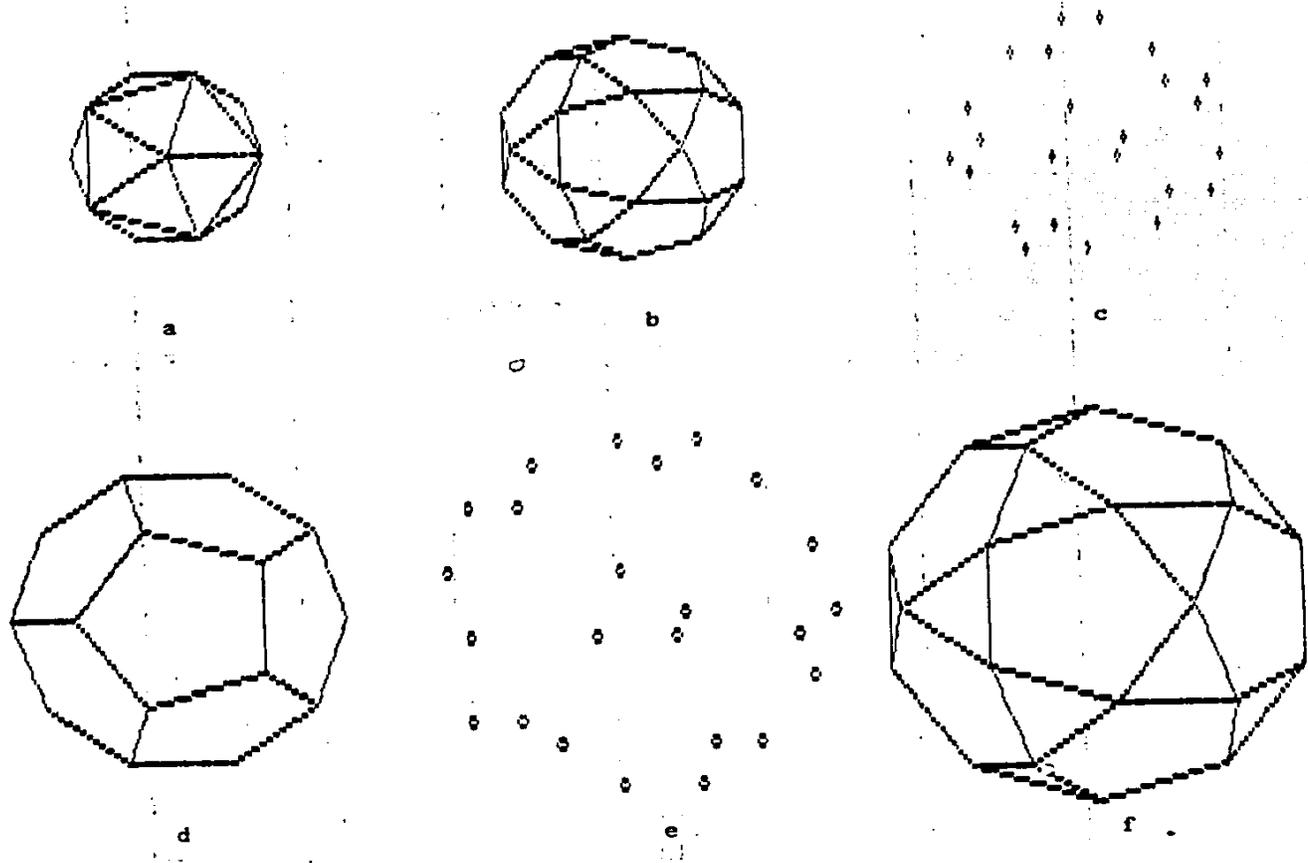


FIG.21. De a-f se muestran las seis primeras capas (en ese orden) del empaquetamiento regular icosaédrico. Podemos identificar un icosaedro (a), un icosidodecaedro (b y f) y un dodecaedro (d).

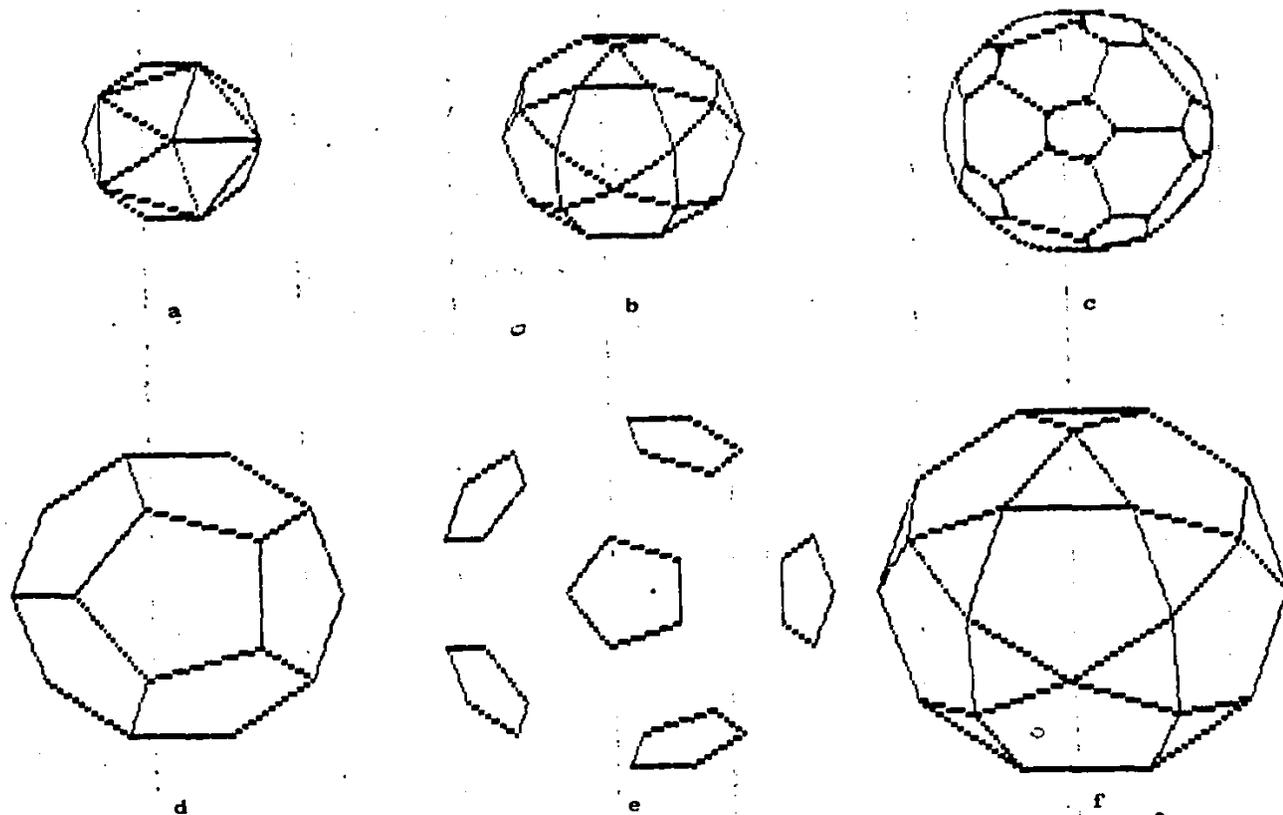
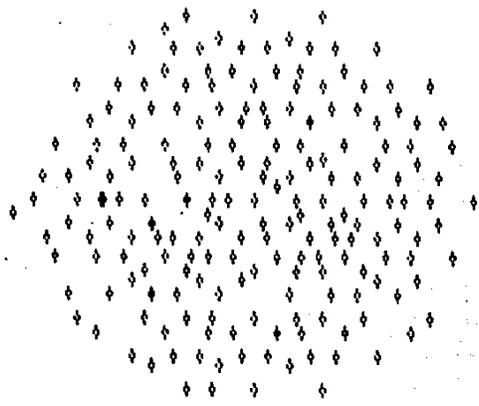
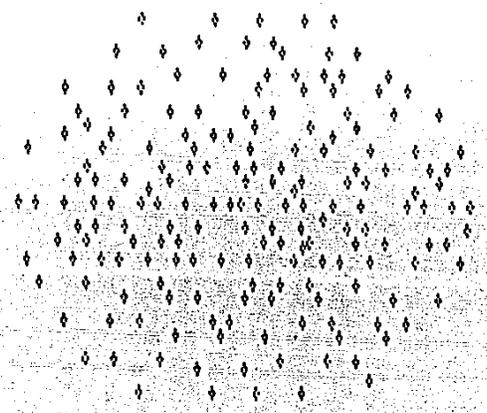


FIG.22. De a-f se muestran las seis primeras capas (en ese orden) del empaquetamiento icosaédrico excepcionalmente singular.



a

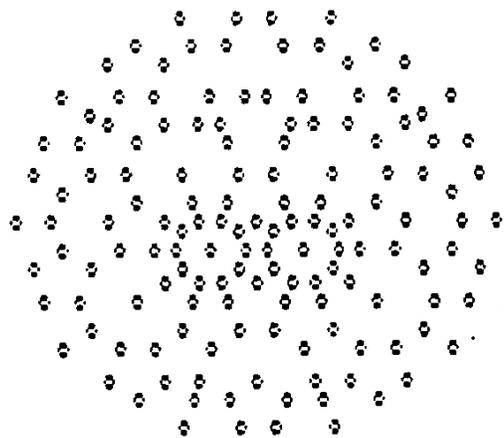


b

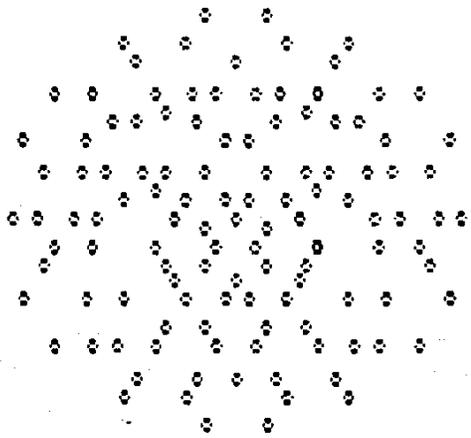


c

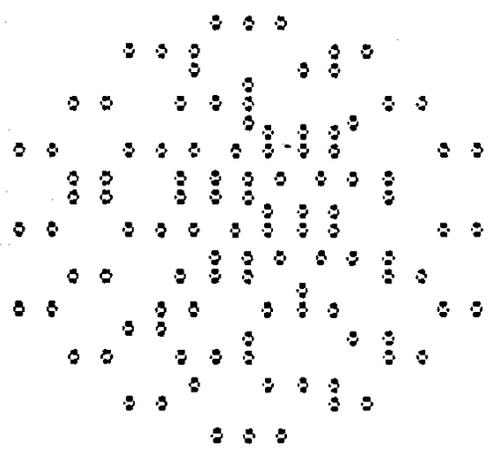
FIG.23. Proyección del empaquetamiento icosaédrico regular ($Z^{10} \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes de simetría: (a).5, (b).3, (c).2.



a

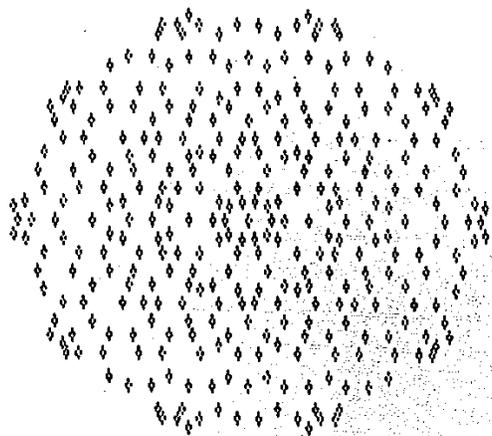


b



c

FIG.24. Proyeccion del empaquetamiento icosaedrico singular ($Z^{12} \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes de simetria: (a).5, (b).3, (c).2.

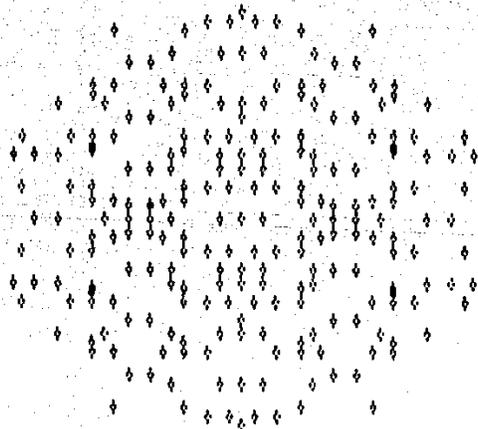


a



b

FIG.25. Proyeccion del empaquetamiento icosaedrico excepcionalmente singular ($Z^{12} \rightarrow R^3$) en planos perpendiculares a los ejes de simetria: (a).5, (b).3, (c).2.



c

CONCLUSIONES

El criterio que presentamos para seleccionar los puntos que deben proyectarse es completamente general en el sentido de que nos permite proyectar puntos dentro de una banda en un espacio euclideo arbitrario a cualquier subespacio de este.

Se mostró que nuestro criterio reproduce los casos conocidos, como los adoquinados de Penrose en 2D y en 3D. El algoritmo es capaz de generar fácilmente estructuras que por otros métodos requieren de cálculos muy complicados, como son, el adoquinado de Penrose con simetría 7 en 2D y la estructura en 3D asociada con el grupo icosaedral obtenida proyectando puntos de una red cúbica de dimensión 10.

La única limitación que se tiene es el tiempo de ejecución del programa debido a la estructura misma del método simplex que al moverse de un punto básico factible (Apéndice A) a otro mejor realiza una eliminación de tipo Gauss-Jordan, y el número de puntos básicos factibles que se tienen que considerar antes de llegar al óptimo es no predecible y puede ir, en promedio, de 10 a más de un millar en algunos casos extremos. La aplicación de la matriz Inversa Generalizada nos permitió evitar el uso del método simplex en muchos casos y la ventaja de esto, en cuanto a tiempo de cálculo se refiere, puede apreciarse en la tabla 1. Los

casos que se presentan en esta tabla se obtienen de analizar puntos con coordenadas cuyos valores son combinaciones de 1,-1 y 0. Se usó una computadora VAX-11 para generar las estructuras.

	$Z^5 \rightarrow R^2$ (regular)	$Z^6 \rightarrow R^3$ (regular)	$Z^{10} \rightarrow R^3$ (regular)
Puntos analizados	243	729	59049
Puntos proyectados	16	201	668
Tiempo de CPU sin la inversa generalizada.	1m 2s	18m 16s	No se calculó
Tiempo de CPU con la inversa generalizada.	4s	3m 2s	3h 58m 4s
Puntos analizados por el método simplex en este último caso.	10	210	5040

Tabla 1. Tiempos de calculo para la generacion de diferentes estructuras no periodicas. (h=hora, m=minuto, s=segundo).

De la tabla 1 puede deducirse la utilidad de usar la prueba de la inversa generalizada que, aunque varía de un caso a otro, reduce considerablemente el tiempo de cálculo. No fué posible hacer una comparación con otros métodos pues no tenemos conocimiento de un algoritmo con estas características, y para los

algoritmos que trabajen con casos particulares no contamos con los datos necesarios para hacer una comparación.

De la tabla podemos observar también que el número de puntos que se encuentran en un cierto intervalo de análisis crece considerablemente con la dimensión de la red cúbica, por ejemplo, van de 729 en 3D, 59 049 en 10D a 14 348 907 en 15D, lo cual conduce a un aumento considerable del tiempo de cálculo. Esta situación podría remediarse por medio de un perfeccionamiento del programa creando un criterio que nos permita saber cuando nos estamos alejando de la banda y desechar todos los puntos que siguen en esa dirección, de esta manera no sería necesario analizar todos los puntos de un intervalo dado sino solo aquellos que se encuentran alrededor de la banda. También es posible implementar en el algoritmo el proceso de inflación o deflación (para los casos en que esto sea posible) de manera que, si generamos una estructura muy pequeña, esta puede ser crecida usando este proceso.

CONCLUSIONES

El criterio que presentamos para seleccionar los puntos que deben proyectarse es completamente general en el sentido de que nos permite proyectar puntos dentro de una banda en un espacio euclideo arbitrario a cualquier subespacio de este.

Se mostró que nuestro criterio reproduce los casos conocidos, como los adoquinados de Penrose en 2D y en 3D. El algoritmo es capaz de generar fácilmente estructuras que por otros métodos requieren de cálculos muy complicados, como son, el adoquinado de Penrose con simetría 7 en 2D y la estructura en 3D asociada con el grupo icosaedral obtenida proyectando puntos de una red cúbica de dimensión 10.

La única limitación que se tiene es el tiempo de ejecución del programa debido a la estructura misma del método simplex que al moverse de un punto básico factible (Apéndice A) a otro mejor realiza una eliminación de tipo Gauss-Jordan, y el número de puntos básicos factibles que se tienen que considerar antes de llegar al óptimo es no predecible y puede ir, en promedio, de 10 a más de un millar en algunos casos extremos. La aplicación de la matriz Inversa Generalizada nos permitió evitar el uso del método simplex en muchos casos y la ventaja de esto, en cuanto a tiempo de cálculo se refiere, puede apreciarse en la tabla 1. Los

casos que se presentan en esta tabla se obtienen de analizar puntos con coordenadas cuyos valores son combinaciones de 1,-1 y o. Se usó una computadora VAX-11 para generar las estructuras.

	$Z^5 \rightarrow R^2$ (regular)	$Z^6 \rightarrow R^3$ (regular)	$Z^{10} \rightarrow R^3$ (regular)
Puntos analizados	243	729	59049
Puntos proyectados	16	201	668
Tiempo de CPU sin la inversa generalizada.	1m 2s	18m 16s	No se calculó
Tiempo de CPU con la inversa generalizada.	4s	3m 2s	3h 58m 4s
Puntos analizados por el método simplex en este último caso.	10	210	5040

Tabla 1. Tiempos de calculo para la generacion de diferentes estructuras no periodicas. (h=hora, m=minuto, s=segundo).

De la tabla 1 puede deducirse la utilidad de usar la prueba de la inversa generalizada que, aunque varía de un caso a otro, reduce considerablemente el tiempo de cálculo. No fué posible hacer una comparación con otros métodos pues no tenemos conocimiento de un algoritmo con estas características, y para los

algoritmos que trabajan con casos particulares no contamos con los datos necesarios para hacer una comparación.

De la tabla podemos observar también que el número de puntos que se encuentran en un cierto intervalo de análisis crece considerablemente con la dimensión de la red cúbica, por ejemplo, van de 729 en 3D, 59 049 en 10D a 14 348 907 en 15D, lo cual conduce a un aumento considerable del tiempo de cálculo. Esta situación podría remediarse por medio de un perfeccionamiento del programa creando un criterio que nos permita saber cuando nos estamos alejando de la banda y desechar todos los puntos que siguen en esa dirección, de esta manera no sería necesario analizar todos los puntos de un intervalo dado sino solo aquellos que se encuentran alrededor de la banda. También es posible implementar en el algoritmo el proceso de inflación o deflación (para los casos en que esto sea posible) de manera que, si generamos una estructura muy pequeña, esta puede ser crecida usando este proceso.

APÉNDICE A

EL MÉTODO SIMPLEX.

El problema de programación lineal puede ser planteado de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f(\mathbf{x}) = c_1 x_1 + \dots + c_n x_n = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \text{sujeito a} \quad & \mathbf{Ax} \geq \mathbf{b} \quad \text{y} \quad \mathbf{x} \geq 0 \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

donde \mathbf{c} y \mathbf{x} son vectores de \mathbb{R}^n , \mathbf{A} es una matriz de $m \times n$ y \mathbf{b} es un vector de \mathbb{R}^m . A la función $f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x}$ se le llama función objetivo y a las condiciones $\mathbf{Ax} \geq \mathbf{b}$ y $\mathbf{x} \geq 0$ se les denomina restricciones.

El método simplex es un algoritmo que resuelve este problema, para aplicarlo es preciso reescribir el problema en la forma:

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & f(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T \mathbf{x} \\ \text{sujeito a} \quad & \mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad \text{y} \quad \mathbf{x} \geq 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

la igualdad se consigue adicionando a (A.1) m variables no negativas llamadas "variables de holgura". Puesto que cada una de las m desigualdades en la restricción original $\mathbf{Ax} \geq \mathbf{b}$ requiere una variable de holgura $S_k \geq 0$ para transformar la k -ésima desigualdad $\mathbf{A}_k \geq \mathbf{b}_k$ en una igualdad

$$\mathbf{A}_k \mathbf{x} - S_k = \mathbf{b}_k$$

El vector \mathbf{c} y la matriz \mathbf{A} de (A.2) son obtenidos de los de (A.1) extendiendo el vector \mathbf{c} original con m ceros y sumando $-\mathbf{I}_m$ a la matriz original \mathbf{A} . En componentes, la restricción de \mathbf{A}_2 es:

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n + x_{n+1} = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n + x_{n+2} = b_2$$

: : : : :

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n + x_{n+m} = b_m$$

Si hacemos $x_k = 0$ para $k=1,2,\dots,n$ obtenemos la solución

$$x_{k+n} = -b_k$$

para $k=1,2,\dots,m$. Esta solución define un punto básico que se denota como $x^{(0)}$, si $x^{(0)} \geq 0$ éste es llamado punto básico factible puesto que satisface las constricciones (A.2).

Sin entrar en los detalles de la técnica de que se sirve el método simplex [30] mencionaremos que básicamente consiste en dos pasos:

- I. Se transforma un punto básico en un punto básico factible.
- II. Se mueve a puntos básicos factibles sucesivamente mejores (en términos de la función objetivo) hasta que el mínimo de ésta función sea alcanzado.

El método simplex puede hallar la solución o puede detectar la no factibilidad del problema. Desafortunadamente, el número de puntos básicos factibles incrementa rápidamente conforme el número de variables se incrementa y es posible construir problemas en los que el método simplex recorra casi todos los puntos básicos factibles antes de alcanzar el punto óptimo.

APÉNDICE B.

LA MATRIZ INVERSA GENERALIZADA.

La inversa generalizada o inversa de Penrose-Moore de una matriz A con m renglones y n columnas es una matriz A^+ que satisface las relaciones:

$$\begin{aligned} AA^+ &= A & (A^+A)^{\circ} &= A^+A \\ A^+AA^+ &= A^+ & (AA^+)^{\circ} &= AA^+ \end{aligned} \quad (B.1)$$

donde P° denota la transpuesta conjugada de P . Puede mostrarse que A^+ siempre existe y es únicamente determinada por esas relaciones [31]. Cualquier matriz, ya sea singular o rectangular, tiene una inversa de este tipo.

El conjunto de ecuaciones lineales $Ax=b$, donde A es una matriz de $m \times n$, x es un vector en R^n y b es un vector en R^m , tiene soluciones que caen en uno de los siguientes casos [32]:

a). $Ax=b$ tiene la solución $x=A^{-1}b$ si A tiene inversa ordinaria, esto es, si $m=n$ y es no singular. Bajo esas circunstancias, la inversa generalizada coincide con la inversa ordinaria.

b). Si $m>n$, hay más ecuaciones que incógnitas, entonces la expresión $x = A^+b$ da la solución que minimiza $\|b-Ax\|^2$.

c). Si $m<n$ y el rango r de A es menor que n , o si $m=n$ pero A es singular, la inversa generalizada da una única solución,

aquella que minimiza la norma euclídeana $\|x\|^2$. La solución completa es:

$$x = A^+ b + [I - AA^+] V \quad (B.2)$$

donde V es un vector arbitrario.

Si A es tal que $A^2=A$ (como es el caso de una matriz de proyección) puede probarse que

$$A^+ = A \quad (B.3)$$

es suficiente con sustituir $A=A^+$ en (B.1) y hacer uso de la idempotencia de A para verificar las igualdades.

El algoritmo para el cálculo de la matriz inversa generalizada así como un estudio detallado de sus propiedades puede encontrarse en la referencia [31].

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

REFERENCIAS

- [1] Duneau, M. and Katz, A. "Quasiperiodic patterns", Phys. Rev. Lett (1985), 54 (25), 2688-2691.
- [2] Elser, V., "The diffraction pattern of projected structures" Acta Cryst. (1986), A42, 36-43.
- [3] Kalugin, P. A., Kitayev, A. Yu. and Levitov, L. S., "6-dimensional properties of $Al_{0.88}Mn_{0.14}$ alloy", J. Physique Lett. (1985), 46 .
- [4] Kramer, P. and Neri, R., "On periodic and non-periodic space fillings of E^n obtained by projection", Acta Cryst. (1984), A40.
- [5] Penrose, R., "Pentaplexity", Math. Intell. (1979), 2, 32-37.
- [6] Socolar, J. E. S., Steinhardt, P. J. and Levine, D., "Quasicrystals with arbitrary orientational symmetry", Phys. Rev. B., (1985), 32 (8), 5547-5550.
- [7] Sasisekharan, V., "A new method for generation of quasiperiodic structures with n-fold axes: Application to five and seven folds", Pramāna-J. phys. (1986), 26(3), L283-L293.
- [8] Elser, V. and Sloane, N. J. A., "A highly symmetric four-dimensional quasicrystal", J. Phys. A: Math. Gen. (1987), 20, 6161-8.
- [9] Kramer, P., "Quasilattices in E^3 and their projection from lattices in E^n ", J. Physique colloque. C3 (1986), 47, 75-83.
- [10] Kramer, P., "Violation of periodic symmetry in quasicrystals", XV Int. Coll. on Group theoretical Methods in Physics., Philadelphia 1986.
- [11] Kramer, P., "On the theory of a non-periodic quasilattice associated with the icosahedral group". Z. Naturf. (1985), A43.
- [12] Kramer, P., "Continuous rotation from cubic to icosahedral order", Acta Cryst. (1987), A43, 486-489.

- [13] Kramer, P., "Space-group theory for a non-periodic icosahedral quasilattice", *J. Math. Phys.* (1988), 29(2), 516-524.
- [14] Haase, R. W., Kramer, L., Kramer, P. and Lalvani, H., "Polyhedra of three quasilattices associated with the icosahedral group", *Acta Cryst.* A43, 574-587.
- [15] de Bruijn, N. G., "Algebraic theory of Penrose's non-periodic tilings of the plane", *Proc. Ser. A* (1981), 84(1), 39-66.
- [16] Gähler, F., "Some mathematical problems arising in the study of quasicrystals", *J. Physique Colloque C3* (1986), 47, 115-124.
- [17] Divincenzo, D. P., "Perfect and imperfect icosahedral solids and the projection methods", *J. Physique Coll. C3* (1986), 47, 237-244.
- [18] Jarić, M. V., "Diffraction from quasicrystals: geometric structure factor", *Phys. Rev. B.* (1986), 34(7), 4685-4698.
- [19] Shechtman, D., Bloch, I., Gratias, D. and Cahn, J. W., "Metallic phase with long-range order and no translational symmetry", *Phys. Rev. B.* (1984), 53(20), 1951-1953.
- [20] Pauling, L., "Apparent icosahedral symmetry is due to direct multiple twinning of cubic crystals", *Nature* 317, 512-514.
- [21] Ishimasa, T., Nissen, H. U. and Fukano, Y., "New ordered state between crystalline and amorphous in Ni-Cr particles", *Phys. Rev. Lett.* (1985), 55, 511-513.
- [22] Bendersky, L., "Decagonal phase", *Phys. Rev. Lett.* (1985), 55, 1461.
- [23] Levine, D. and Steinhardt, J., "Quasicrystals: I. Definition and structure", *Phys. Rev. B* (1986), 34(2), 596-616.
- [24] Gallulin, R. V., "Delauunay systems", *Sov. Phys. Cryst.* (1980), 25(5).
- [25] Gardner, M., "Mathematical games", *Sci. Am.* (1977), 236(1), 110-121.
- [26] Levine, D., "Local isomorphism, Landau theory and matching rules in quasicrystals", *Jou. Physique Colloque C3* (1986), 47, 125-134.
- [27] Gähler, F. and Rhyner, J., "Equivalence of the generalized grid and projection methods for the construction of quasiperiodic tilings", *J. Phys. A: Math. Gen.* (1986), 19, 267-277.

- [25] Conway, J. H. and Knowles, K. M., "Quasiperiodic tiling in two and three dimensions", *J. Phys. A: Math. Gen.* (1986), 19, 3645-3653.
- [29] Beenker, F. P. M., "Algebraic theory of non-periodic tilings of the plane by two simple building blocks: a square and a rhombus", Univ. of Tech. the Netherlands report, Sep. 1982.
- [30] Gass, S. I., *Linear programming*, Mc. Gray-Hill, 1975.
- [31] Adi, R. I. and Thomas, N. E. G., *Generalized inverses: theory and applications*, John Wiley & Sons, N. Y., 1974.
- [32] Mackay, A. L., "The generalized inverse and inverse structure", *Acta Cryst.* (1977), A33, 212-215.