

УДК 519.614

М-матрицы и кристаллические структуры

Балонин Н.А. Сергеев М.Б.

Аннотация: В статье приведен обзор минимаксных ортогональных матриц Адамара, Мерсенна, Ферма и Эйлера. Рассмотрены элементарные базисы из них и разложения малоуровневых ортогональных матриц на выделенные структуры. Пояснены применение моделей химических элементов, опирающихся на связь периодической таблицы Менделеева с теорией чисел, и преимущество базисов, дающих пространственные характеристики. Показаны примеры математических моделей сплавов в форме квазикристаллов, решающих теоретические трудности официальной кристаллографии.

Ключевые слова: кристаллические структуры, ортогональные матрицы, матрицы Адамара, числа Мерсенна, числа Ферма.

M-matrices and crystal structures

Balonin Nikolaj Alekseevich – Doctor of Technical Sciences, professor Saint Petersburg State University of Aerospace Instrumentation (SUAI). The direction of research: control systems theory, dynamic systems, numerical methods, theory of matrices. E-mail: korbendfs@mail.ru

Sergeev Mikhail Borisovich – Doctor of Technical Sciences, Professor, Director of the Institute of Information and Control Systems of the National Research University of Information Technologies, Mechanics and Optics. The direction of research: numerical methods, bit computing methods, designing special processor for monitoring and control systems, optical information systems. E-mail: mbse@mail.ru.

Abstract: This article provides an overview of Minimax orthogonal Hadamard, Mersenne, Fermat and Euler matrices. The elementary basis of these matrices and low-levels orthogonal matrices with the shown structures are considered. The models of chemical elements, based on the relationship of the periodic table of Mendeleev with the theory of numbers, and the advantage of bases, giving the spatial characteristics, are explained. Examples of mathematical models of alloys in the form of quasicrystals solving theoretical difficulties of the official crystallography are clarified.

Keywords: crystal structures, orthogonal matrices, Hadamard matrices, Mersenne primes, Fermat numbers.

Введение

Давно отмечено, что между компактными математическими объектами и реально наблюдаемыми в физическом мире структурами есть соответствие. Один из давних примеров на эту тему – размышление Иоганна Кеплера о шестиконечной форме снежинки (рис.1). Он объяснил ее тем, что кристалл замерзшей воды строится из мельчайших одинаковых шариков, теснейшим образом присоединенных друг другу: вокруг центрального шарика можно плотно разместить только шесть таких же шариков.

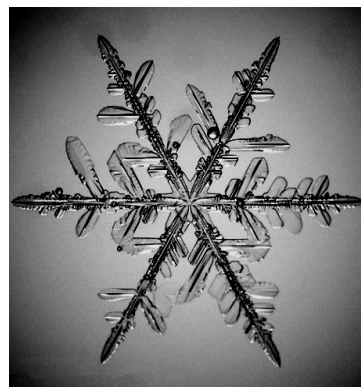
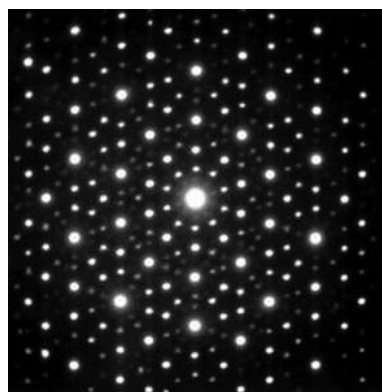


Рисунок 1 – Дифракционная картина квазикристалла и симметрия снежинки

Кристалл – упорядоченная структура, состоящая из бесконечно повторяющегося фрагмента, который называется элементарной ячейкой. Систематизация сведений в отношении допустимой симметрии кристаллов выделила кристаллическую решетку – вспомогательный геометрический образ, вводимый для анализа строения кристалла, и поворотные оси второго, третьего, четвертого и шестого порядков, отвечающие совпадению фигуры с собой при повороте, соответственно, на 180, 120, 90 и 60 градусов. Эти догмы насколько укоренились в официальной кристаллографии, что оппонирование их привело к получению Нобелевской премии 2011 года Даном Шехтманом [1], открывшим пентаграммы в экспериментах по сверхбыстрому охлаждению сплавов алюминия и марганца (рис.1).

Признанию открытия способствовали опыты британского математика Р. Пенроуза с двумя ромбами – плитками Пенроуза, построенными на пропорциях золотого сечения [2], образующими повторяющиеся узоры с дальней симметрией, как у фракталов. Подобные объекты сегодня признаны и названы квазикристаллами. Новые материалы уже используются для изготовления лезвий хирургических инструментов, особенно в глазной хирургии. Будущие перспективы очень широки, в частности, материалы с такими свойствами нужны в авиационной промышленности.

Данная статья – первая попытка осветить еще один аспект задач о плотной упаковке, связанный с изучением ортогональных матриц, обладающих экстремальными свойствами.

Теория соответствия чисел и матриц ортогональных базисов

Гипотеза Адамара о кратности порядков ортогональных (после нормирования столбцов) матриц Адамара числу 4 закладывает основы теории соответствия чисел и ортогональных базисов, речь идет об оставшихся трех соседях матриц Адамара.

Числа $4k+1$ и $4k+3$ ($4k-1$) ввели в научный обиход Ферма и Эйлер. Согласно утверждению Ферма всякое простое число вида $4k+1$ может быть представлено в виде суммы двух квадратов, причем единственным образом. Простые числа вида $4k+3$, как легко показать, не представляются в виде суммы квадратов. Эйлер установил, что верно и обратное: если представление n в виде суммы квадратов существует и единственно, то n – простое число. Минимаксными ортогональными матрицами (M -матрицами) с минимальным числом уровней, в зависимости от остатка r деления порядка n на 4, являются:

$r=0$, матрицы Адамара **H**, включающие матрицы последовательности Сильвестра;

$r=1$, матрицы Ферма **F**, включающие порядки из последовательности чисел Ферма;

$r=2$, матрицы Эйлера **E** (и матрицы Белевича **C**, с исключениями порядков на основе критерия Эйлера);

$r=3$, матрицы Мерсенна **M**, включающие порядки из последовательности чисел Мерсенна.

M -матрицы включают **H**, **F**, **E**, **M** множества ортогональных матриц, в которых последовательности Сильвестра являются системообразующими. Оценки плотности охвата матрицами числовой оси питаются, соответственно, сходными гипотезами Адамара (перенос свойств последовательности на матрицы **H**) и Балонина [4] (перенос свойств последовательности на матрицы **M**). Получается общая для числовой оси теория минимаксных ортогональных базисов.

Минимаксные ортогональные базисы Мерсенна и Ферма

Матрицы Адамара – пример экстремальных матриц ортогональных базисов, дающих минимальную максимальную проекцию их ортов на оси координат. Обобщение этой задачи на случай матриц любого порядка дает нетривиальные решения, например, крестовина из двух отрезков при ее повороте составляет оси минимального квадрата, однако минимальный охватывающий ось «трехмерного ежа» параллелепипед вовсе не куб. Одна из проекций ее на оси декартовых координат вдвое меньше двух остальных.

Напомним, что матрица Адамара (Hadamard) – квадратная двухуровневая матрица \mathbf{H}_n порядка n , состоящая из чисел $\{1, -1\}$, столбцы которой ортогональны $\mathbf{H}_n^T \mathbf{H}_n = n \mathbf{I}$, где \mathbf{I} – единичная матрица.

Адамар примерами матриц 12-го и 20-го порядка дополнил известную в теории последовательность Сильвестра ортогональных матриц четных порядков $n=2^k$ [4].

В работах [5,6] предложены адекватные им версии малоуровневых ортогональных матриц, отвечающих нечетным порядкам, равным числам Мерсенна и Ферма. Последовательность Мерсенна задается формулой $n=2^k-1$ и начинается с чисел 1, 3, 5, 15, 31, ..., она принадлежит подмножеству чисел вида $4k-1$. Последовательность Ферма задается формулой $n=2^{2^k}+1$ и начинается с чисел 3, 5, 17, 257, 65537, 4294967297, 18446744073709551617, ..., она принадлежит подмножеству чисел вида $4k+1$.

Дадим определения нужных нам, в аспекте данной работы, малоуровневых матриц.

Определение 1. Матрица Мерсенна, это квадратная двухуровневая матрица \mathbf{M}_n порядка n , состоящая из чисел $\{a=1, -b\}$, столбцы которой ортогональны

$$\mathbf{M}_n^T \mathbf{M}_n = \mu^2 \mathbf{I},$$

где $b = \frac{1}{2}$ при $n=3$, в остальных случаях $b = \frac{q - \sqrt{4q}}{q-4}$, $q=n+1$ (порядок матрицы

Адамара), вес $\mu^2 = \frac{(n+1) + (n-1)b^2}{2}$ учитывает, что $\frac{q}{2}$ элементов каждого столбца составляют $a = 1$, остальные элементы равны $-b$.

Итерационная процедура вычисления двухуровневых ортогональных матриц, порядки которых равны числам Мерсенна вида $n=2^k+1$, получается модификацией [5] алгоритма Сильвестра. Также, как у матриц Адамара, это множество расширяется до матриц порядков $n=4k+3$.

Определение 2. Матрица Ферма, это квадратная трехуровневая матрица \mathbf{F}_n порядка n , состоящая из чисел $\{a=1, -b, s\}$, столбцы которой ортогональны

$$\mathbf{F}_n^T \mathbf{F}_n = f^2 \mathbf{I},$$

где $b = \frac{2}{3}$ при $n=5$, в остальных случаях $b = \frac{2n-q}{q}$, $s = \frac{\sqrt{np-2\sqrt{p}}}{q}$, $q = p + \sqrt{p}$,

$p=n-1$ (порядок матрицы Адамара), s – элементы первой строки и столбца, начинающихся с a (т.е. каймы матрицы $b < s < a$).

Вес $f^2 = \frac{(2p-q) - (2p-q)b^2}{2} + nb^2 + s^2$ учитывает, что $p - \frac{q}{2}$ элементов прочих столбцов составляют $a = 1$, остальные элементы равны $-b$ (помимо начального s).

Итерационная процедура вычисления трехуровневых ортогональных матриц, порядки которых равны числам Ферма, а также числам вида $n = 2^k+1$, где k – четное (за исключением $k = 1$, когда $b = s = 2$), получается модификацией [6] алгоритма Сильвестра.

Обе отмеченные структуры локально-оптимальны по критерию минимума максимума абсолютных значений элементов (максимума m -нормы), они строго оптимальны в рамках выделенной малоуровневой структуры, как и матрицы Адамара, и стремятся к ним с ростом порядка. В этом построении отсутствуют порядки $n=2^k+2$, что восполняется построением минимаксных ортогональных базисов Эйлера [7].

Иерархия минимаксных ортогональных базисов и связь с химическими элементами

Дополнение матриц Адамара матрицами четных и нечетных порядков создает структурный базис вложенных матричных элементов: матриц первого (Odin), второго (Euler), третьего (Mersenne), четвертого (Hadamard) и пятого (Fermat) порядков, приведенных на рис. 2. Цвет клеток соответствует уровням $a = 1$ (белый), $-b$ (черный) и s (серый).

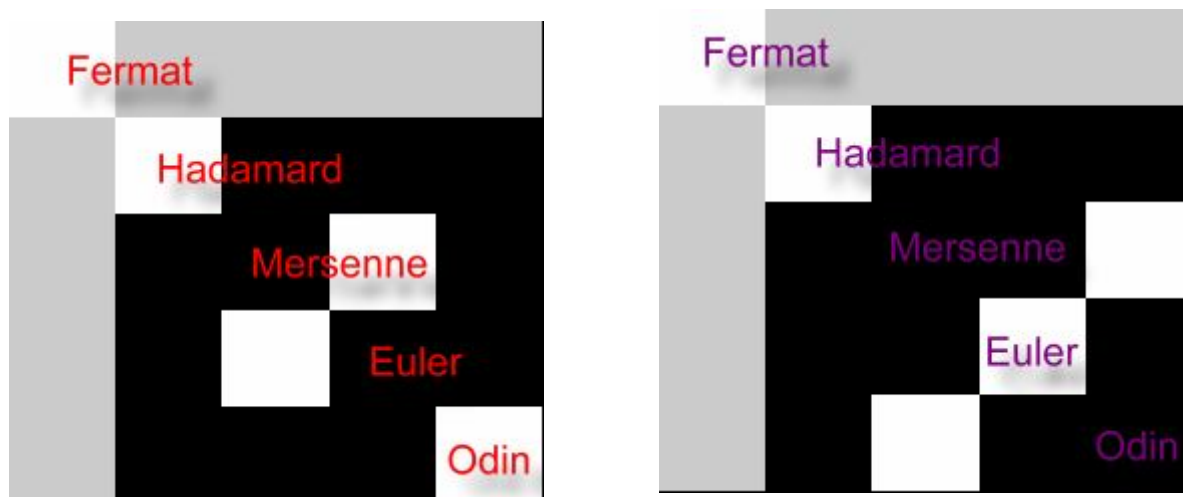


Рисунок 2 – Пять вложенных элементов минимаксных ортогональных базисов

Пятый элемент этой иерархии (матрица Ферма) восполняет отсутствие какой-либо структуры у первого единичного элемента. Этот базис, как и в случае плиток Пенроуза, может быть удвоен диагонализацией матрицы Мерсенна, что встречается, например, при построении двухуровневой минимаксной ортогональной матрицы тринадцатого порядка \mathbf{M}_{13} из двух сортов клеток Мерсенна \mathbf{M}_3 , обозначенных как $\mathbf{Me1}$, $\mathbf{Me2}$ (см. рис. 2).

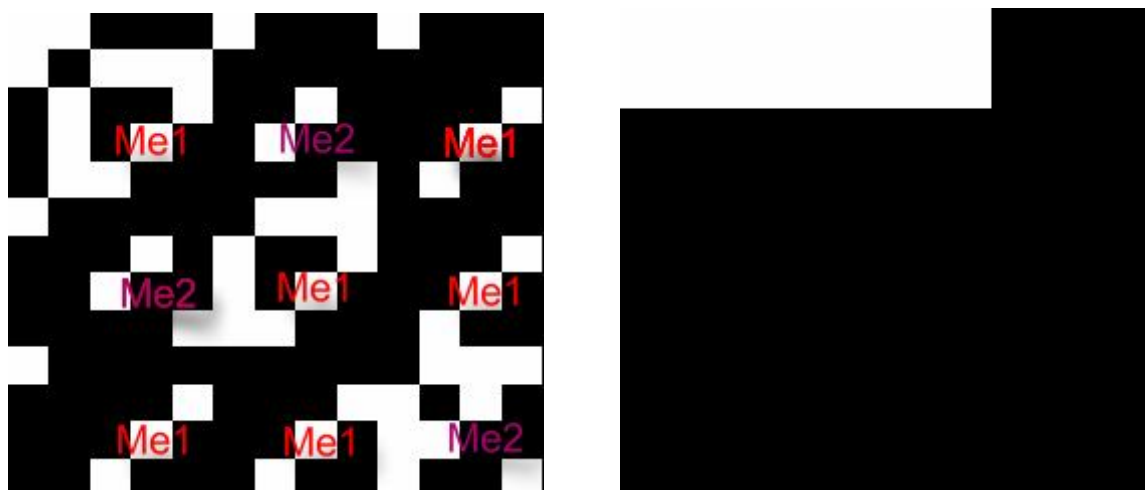


Рисунок 3 – Строение матрицы M_{13} и гистограмма модулей ее элементов.

Построение периодической таблицы химических элементов Менделеева наследует у теории чисел (и, соответственно, ортогональных базисов) характерные для нее периоды. В частности, порядкам матриц Адамара соответствуют элементы: Гелий 4 (атомная масса 4,002602), Неон 20 (20.1797), Аргон 40 (39.948) и т.п., а также Углерод 12, Кислород 16, Кремний 28, Германий 72. Порядкам обобщенных матриц Мерсенна $n=4k+3$ – последовательность радиоактивных элементов, называемая рядом актиния: Уран 235, Плутоний 239 (изотоп, который является более мощным источником атомной энергии, чем Уран) и т.п. В ряду, соответствующем матрицам Ферма и их замещениям, стоят волею судьбы Фермий 257, Золото 197. Медь 64 и Серебро 108, символы электроники, соответствуют матрицам Адамара. Порядкам матриц Эйлера соответствует Азот 14, а с золотым сечением связан Бор – атомная масса наиболее близка к 10 (точнее 10.8).

Форма кристалла бора – икосаэдр, пять треугольников образуют вершину. Бор – достаточно скрытый элемент. Строение каркаса в его структурах гораздо сложнее, чем в алмазе. Уникальный тип химической связи, которая позволяет бору поглощать любую примесь, очень плохо изучен, хотя за исследования, связанные с ним, большое количество ученых уже получили Нобелевские премии.

Хаотические решения

Известная нестабильность тяжелых элементов имеет у их аналогов – минимаксных ортогональных матриц – свою интерпретацию. Также как и химические элементы, минимаксные матрицы в итерациях поискового алгоритма сжатия их m -нормы с ростом размерности неустойчивы, а устойчивые решения имеют выделенные в данной статье структурные признаки. Приведенная выше двухуровневая матрица M_{13} лишь локально-оптимальна.

В работе авторов [8] показано, что на тринадцатом порядке по критерию m -нормы начинает превалировать хаотическая структура. Эта структура в работе изучена, приведен численный показатель в виде специфической меры хаоса: B -уровень для m -нормы. Показаны примеры бифуркаций уровней ортогональных M -матриц, среди которых рассмотренные выше отвечают максимально простой структуре.

При переходах от матрицы к матрице вниз по порядку наблюдается усложнение структуры уровней: двухуровневые матрицы Адамара и Мерсенна замещаются четырехуровневой структурой матриц Эйлера, на пятом порядке наблюдается наличие пятиуровневой структуры, альтернативной трехуровневой структуре матриц Ферма. Все это говорит о том, что структурные признаки распространяются как вверх по порядкам, так и вниз, причем матрицы Адамара составляют специфические узлы стабильности. Начиная с порядка $n = 10$ встречаются отдельные оригинальные матрицы золотого сечения и прочие артефакты [9]. Континуальные множества решений, возможные у локально-оптимальных матриц, также не рассматривались ранее.

Заключение

Задачи плотной упаковки имеют достаточно важные интерпретации в области физических экспериментов, в частности, относительно недавно это существенно продвинуло понимание структуры квазикристаллов.

Главная заслуга Д. Шехтмана заключалась в том, что он не списал полученные результаты на случайность, как это делали многие до него. Не исключено, что математические особенности выделенных выше элементарных минимаксных базисов имеют существенное отражение на физический эксперимент, также достаточно интересное для исследования, поскольку в отличие от модели Пенроуза рассматривается не плоская, а n -мерная модель. Однако освещение таких интерпретаций выходит за рамки данной статьи.

Хаос в построении минимаксных ортогональных базисов и островки стабильности могут сделать их востребованными при математическом моделировании квазистабильных химических элементов, кристаллов и сплавов.

Список литературы

1. D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, J. W. Cahn. Metallic Phase with Long-Range Orientational Order and No Translational Symmetry // Physical Review Letters, Vol. 53. 1984, P. 1951–1953.
2. Penrose R. Pentaplexity // Evreka. 1978, V. 39, P. 16–22.
3. Hadamard, J. Résolution d'une question relative aux déterminants. Bulletin des Sciences Mathématiques 17: 1893, P. 240–246.

4. Балонин Н.А. О существовании матриц Мерсенна 11-го и 19-го порядков // Информационно-управляющие системы. 2013. № 2. С. 90 – 91.
5. Балонин Н.А., Сергеев М.Б., Мироновский Л.А. Вычисление матриц Адамара-Мерсенна // Информационно-управляющие системы. 2012. № 5. С. 92-94.
6. Балонин Н.А., Сергеев М.Б., Мироновский Л.А. Вычисление матриц Адамара-Ферма // Информационно-управляющие системы. 2012. № 6. С. 90-93.
7. Балонин Н.А., Сергеев М.Б. О двух способах построения матриц Адамара-Эйлера // Информационно-управляющие системы. 2013. № 1. С. 7 – 10.
8. Балонин Н.А., Сергеев М.Б. М-матрицы // Информационно-управляющие системы. 2011. № 1. С. 14-21.
9. Балонин Ю. Н., Сергеев М. Б. М-матрица 22-го порядка // Информационно-управляющие системы. 2011. № 5. С. 87–90.