

自然の書物に書かれた数学: 結晶学と葉序とブラベー 研究室の窓

富安 亮子

1. はじめに

私の研究分野の一つである数理結晶学を紹介する。数学や理論研究に興味がある学生読者を応援する話題を入れて欲しいと言われたので、個人的なエピソードも少し織り交ぜる。

学生時代は解析数論(保型形式)の研究室に在籍していた。当時の研究室のテーマは多岐に渡り、代数的整数論や代数幾何に関わるテーマに取り組む人も多かった。私は、進学イベントごとに思い悩む程度に応用数学にも関心があったが、整数論でも応用ぐらいできるだろうと気楽に考えていた。しかし、それを周囲に期待するのは少し時期尚早だった。

数理結晶学研究を始めた当時、ポストドクが時間がかりそうな難しい問題に取り組むのは、という意見もあり、ab-initio^{*1)}結晶構造解析ではなく、ab-initio indexing という結晶格子を決定する問題に取り組んだ。結晶学では、原子がなす離散構造と、そのフーリエ係数の情報を与える観測値を扱う数理に需要がある。自分で少しずつ形にしてきたことであるが、位相回復という有名なデータ解析の問題があるこの分野でも、離散数学の問題に解析を用いる整数論の考え方は役立つ。

Indexing だと調和解析は使わず、代数の応用だけで済む。それでも、粉末回折パターンと呼ばれる実験データから、データと適合度の良い順にソートされた格子のリストを出力する、という複合的な解析で、必要な数理は多岐にわたった。クリアした問題それぞれについて論文を書き、2013年に粉末結晶用ソフトウェア CONOGRAPH を公開した。10年の節目に結晶学

会誌に記事を掲載する予定なので、本稿ではあまり触れない。

私は結晶学と、最近では数理植物学でもアルゴリズム開発の仕事をしたが、ともに2世紀前のブラベーの仕事に関係し、ブラベー以降に発展した数学(格子基底簡約理論、マルコフ理論を含む数の幾何)の応用になった。こちらを中心に紹介したい。

節2でブラベーと、ブラベー格子の紹介を行う。また節4で、ブラベーが若い頃に取り組んだ葉序の研究を紹介する。節3、節5ではそれぞれの現代的な解釈と応用の話をする。前者は格子パッキングと正定値2次形式の簡約理論、後者は、非周期的パッキングと不定値2次形式の簡約理論という数の幾何の問題に関わる。葉序の数理がそのような紹介をされたことは恐らくないはずだ。

節3の開発¹⁾を行ったのは上述の CONOGRAPH のため、標準的な教科書に載っている方法²⁾が未だに格子のパラメータが誤差を含まない場合にしか対応していないことは以前から問題になっている。解析ソフトウェアがこの段階で失敗することは未だに起きている(私の宣伝不足もある)。

数理結晶学は、最近、以下のニュースもあった。

1. 平面をただ1種類で非周期的にのみ敷き詰め可能なタイル(monotile)の発見³⁾。
2. $G = \mathbb{Z}^d, \mathbb{R}^d$ (d は十分大きな d)における periodic tiling 予想の反例⁴⁾。

Periodic tiling 予想とは、可換群 G が、その有限(もしくは有界)部分集合 $F \subset G$ の平行移動でタイリング^{*2)}されるなら、 F による周期的タイリングも存在

*1) 初期値なし、つまり局所最適化によらない解析を指す。数学では ab-initio を考えることが多い。この状況での初期値は、正解に近いと想定される結晶構造・格子のパラメータ。

*2) ある $A \subset G$ が存在して、任意の $g \in G$ は(測度0の集合を除き)、 $a + f, a \in A, f \in F$ の形に一意に表される、ということ。

する^{*3)}という予想である。1.の著者の1人 D. Smith はアマチュア数学者, 2.は有名な T. Tao が著者の1人である。

今回は代数的な話題が多いが, データ解析で有用な数理も一枚岩でない。数理結晶学の裾野の広さを感じてもらえれば, と思う。

2. ブラベーの人と業績

オーギュスト・ブラベー (Auguste Bravais, 1811–1863) は数学者ではなく, 幅広い分野で活躍した科学者である。彼の研究は, 科学と未分化だった頃の数学とはこういうものかと思わせる不思議な魅力がある。

ブラベーはガロアと同年で, ガロアも参加した数学コンクールで1位を取り, エコール・ポリテクニクに入学し成績もよかった。卒業後は海軍に入り, 各地を探検した。1840年代に初めて相関を定義した人でもある。

ブラベーの時代は, 結晶のマクロな観察により結晶格子を導出した。現代は, 回折・散乱という自然が行うフーリエ変換の情報を介しての観測が行われるが, いずれにせよ観測誤差は生じる。

しかしブラベーが格子やその対称性に興味を持ったきっかけは, 若いときに植物学者の兄と書いた葉序に関する共著論文⁵⁾だったと思われる。節3にも出てくる Gauss や Eisenstein とブラベーが同時代の人であったことは, 数学史としても興味深い。

2.1 ブラベー格子の数学的な定義

ブラベー格子^{*4)}は化学の教科書にも記載されている面心・体心格子といったものだが, 意外と数学的に定義されることは少ない。端的には, 対称性と簡約基底が明示された格子に該当する。

数学では, 格子の対称性の分類としてブラベー類が定義されているが, こちらはあまり有名でないので定義しておく。

まず, $L \subset \mathbb{R}^d$ を格子とし, その階数 (rank) は次元 d に等しいとする。以下ではこの full rank のケースのみ考えるので, 格子 L の階数を次元とも呼ぶこ

とにする。 \mathbb{Z} 加群として L は \mathbb{Z}^d に同型なので, 写像 $\mathbb{Z}^d \rightarrow L, (m_i) \mapsto \sum_{i=1}^d m_i b_i$ が一対一であるような L の基底 b_1, \dots, b_d が存在する。

ある基底ベクトル b_1, \dots, b_d を列ベクトルに持つ行列 $B \in GL_d(\mathbb{R})$ を L の基底行列, 対称行列 $S := {}^t B B$ を L の2次形式と呼ぶ。格子 L , および2次形式 S の自己同型群は以下で定義される。

$$\text{Aut}(L) := \{\tau \in O(d) : \tau L = L\},$$

$$\text{Aut}(S) := \{\sigma \in GL_d(\mathbb{Z}) : {}^t \sigma S \sigma = S\}.$$

上記の2つの群は同型である。このことは, 以下の群 G を考えたとき, $\text{Aut}(L)$ は G の第1成分への射影, $\text{Aut}(S)$ は第2成分への射影の像であり, それぞれの射影が単射でもあることから分かる。

$$G := \{(\tau, \sigma) \in O(d) \times GL_d(\mathbb{Z}) : \tau B \sigma^{-1} = B\}.$$

さらに, $B^{-1} \text{Aut}(L) B = \text{Aut}(S)$ となるから, 2つの自己同型群は $GL_d(\mathbb{R})$ で共役である。また, 基底行列 B を別の $Bg, g \in GL_d(\mathbb{Z})$ で置き換えると, $\text{Aut}({}^t g S g) = g^{-1} \text{Aut}(S) g$ となり, $GL_d(\mathbb{Z})$ で共役である。

異なる格子の対称性の分類として, 格子系 (lattice system) も定義しておく。晶系 (crystal system) は結晶構造に対して, 同様に定義されるが⁶⁾, 3次元では三方晶系を除き, 各晶系に対応する格子系はただ一つである。

定義 1 格子 $L_1, L_2 \subset \mathbb{R}^d$ に対し, S_1, S_2 をそれぞれの2次形式とする。

1. $\text{Aut}(S_1), \text{Aut}(S_2)$ が $GL_d(\mathbb{Z})$ において共役であるとき, L_1, L_2 は同じブラベー類 (Bravais class) に属するという。
2. $\text{Aut}(L_1), \text{Aut}(L_2)$ が $GL_d(\mathbb{R})$ において共役であるとき, L_1, L_2 は同じ格子系 (lattice system) に属するという。

上述の $B^{-1} \text{Aut}(L) B = \text{Aut}(S)$ より, ブラベー類は, 格子系による分類の細分になることが分かる。センタリング (centering) は, 各格子系からブラベー類への分類に該当する (図1)。

数学では, 対称性によって簡約基底の取り方を変えることはしないが, 結晶学では, 対称軸が見やすい部分格子を取ってブラベー格子とする。

次に簡約基底について説明する。2次元格子の場合, 2次形式 $S = (s_{ij})$ が簡約とは, 以下の不等式が成立

*3) ある部分群 $H \subset G$ ($G = \mathbb{Z}^d$ ならば $[G : H] < \infty$, $G = \mathbb{R}^d$ ならば H は \mathbb{R}^d の格子を仮定) が存在して, 脚注2)の A を有限個の剰余類 gH の合併集合として取れること。

*4) 結晶学者 Frankenheim が15種類とし, ブラベーが重複を指摘して14とした。Frankenheim は32点群と7晶系も与えている。

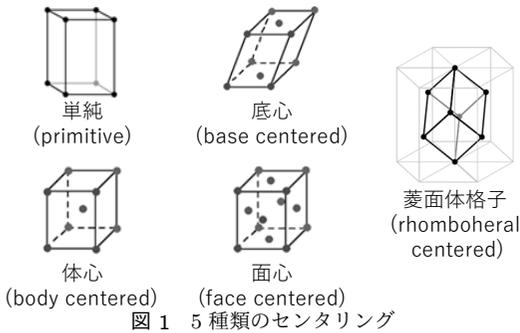


図 1 5種類のセンタリング

することである。

$$0 \leq -2s_{12} \leq s_{11} \leq s_{22}. \quad (1)$$

2次元格子は、その2次形式が上記の不等式満たすような簡約基底をただ一つ持つ。実際、式(1)の s_{11}, s_{22} は逐次最小 (successive minimum) と呼ばれる基底の取り方によらない格子の不変量で、逐次最小と行列式から式(1)の2次形式は一意に定まる。各格子が簡約基底を持つことは、簡約基底を与えるアルゴリズム (Gauss' algorithm) の存在から分かる。

任意の3次元格子に対し簡約基底がただ一つに決まるのが Eisenstein 簡約⁶⁾である。結晶学で広く用いられるが、紹介した結晶学者の名から Niggli 簡約と呼ばれている。Minkowski 簡約は一般次元への拡張だが、一部の格子が簡約基底を複数持ち得る。他にも Voronoi⁷⁾⁸⁾や多項式時間近似アルゴリズムの LLL¹⁰⁾ といった簡約方法が知られる。本節の定理の証明で用いる Venkov 簡約⁹⁾を定義しておく。

定義 2 S_0, S を正定値の n 次対称行列とする。以下が成立するとき、 S は、 S_0 に関して **Venkov 簡約** という。

$$S \bullet S_0 \leq (gS^t g) \bullet S_0 \text{ for any } g \in GL_n(\mathbb{Z}).$$

ただし、 $S \bullet T := \text{trace}(ST)$ とする。

定義 3 S が以下の $A_d = (a_{ij})$ について Venkov 簡約なら、**Selling 簡約** という。

$$a_{ij} = \begin{cases} 2 & \text{if } i = j, \\ 1 & \text{if } i \neq j. \end{cases}$$

また、 I_d について Venkov 簡約なら、広い意味で **Minkowski 簡約** ということにする。

3. 格子基底簡約理論の考え方

本節では観測誤差下でのブラベー格子決定に、格子基底簡約理論の考え方がどのように利用できるかを説明する。

ブラベー格子決定とは、与えられた格子のブラベー類を判定し、格子基底をブラベー格子の簡約基底に取り直すことである、以下の流れで実施できる。

1. 入力2次形式の簡約基底の候補を既定のリストから1つ選択し、それぞれ2, 3を実行。
2. ブラベー類を判定。
3. 1.の簡約基底と2.のブラベー類に対応する格子パラメータを出力。

ただし誤差がある状況では、単純立方の2次形式が入力されても、より低対称性のブラベー類に該当するケースが起こり得るので、格子パラメータの摂動によって得られる低対称性のケースもすべてソートして出力し、後続処理に判断を委ねる。最も対称性が高い解が正解であることは多い。

誤差がある状況で、最も自明でないのは1.である。簡約基底が固定されれば、2次形式の各成分が、候補として挙げられている群対称性(群作用から導出される線形式)を誤差の範囲で満足するかをチェックするだけで済む。

3次元格子では、1のリストは100前後の長さで大きな誤差にも対応できるようになるが、それに対応できないケースでは無限個の簡約基底のリストが必要になるのでそもそも無理、ということが簡約理論の考え方から示せる。その概要を以下に述べる。

前節で、個々の簡約基底 $B \in GL_d(\mathbb{R})$ を考えたが、以下では各点がある格子基底に対応する空間を考える。直交群 $O(d)$ の作用(回転・反転)で一致する格子基底は同一視するなら、軌道空間 $O(d) \backslash GL_d(\mathbb{R})$ 、または、2次形式 ($d \times d$ の対称行列) g がなす \mathbb{R} 上 $d(d+1)/2$ 次元線形空間の中で半正定値行列 $S = {}^t B B$ 全体がなす凸錐を考えればよい。

式(1)のようにスケールの違いで差が生じない性質を扱う場合、定数倍で等しい2次形式を同一視して、さらに次元を1減らせる。2次元格子では空間は2次元、3次元格子で5次元となる。

2次元格子基底に対応する空間は、上半平面 $\mathbb{H} = \{z \in \mathbb{C} : \text{Im}(z) > 0\}$ と同一視できることはよく知られている。格子の2次形式 $S = {}^t B B$ は正定値なので、ある実数 x と $c, y > 0$ を用いて S を式(2)左のように

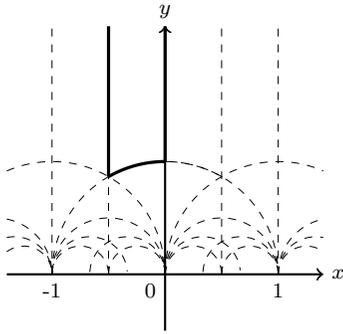


図2 簡約された2次元格子は太い線に囲まれた領域の点に対応。破線は、 $g \cdot D$ ($g \in GL_2(\mathbb{Z})$) によるタイルングを表す。各タイルは実軸に近づくほど小さくなるがポアンカレ計量 $dx dy / y^2$ の下で各 g は合同変換になる。

表せる。以下の写像は、 $O(d) \backslash GL_d(\mathbb{R}) / \mathbb{R}_{>0}$ と \mathbb{H} の一対一対応を与える。

$$S = c \begin{pmatrix} 1 & x \\ x & x^2 + y^2 \end{pmatrix} \mapsto x + iy. \quad (2)$$

式(1)を満たす簡約2次形式からなる簡約領域 D を図2に示す。

$S \mapsto gS^t g$ より、 $GL_2(\mathbb{Z})$ が \mathbb{H} に作用している。具体的には各 $z = x + iy \in \mathbb{H}$ に対し^{*5)},

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \cdot z = \begin{cases} (dz + c)/(az + b) & ad - bc = 1, \\ \overline{(dz + c)/(az + b)} & ad - bc = -1. \end{cases}$$

特に、 $g \in SL_2(\mathbb{Z})$ では一次分数変換と一致する。

2次形式に誤差が入る場合も、この空間で考えると見やすい。3次元格子の場合、5, 6次元の空間で考える必要があるが、基本的には線形代数だけでできる。理解を容易にするため、2次元格子の例を続けることにする。

正定値の2次対称行列 S が、 S^{obs} として観測されている状況を考える。以下の観測誤差に関する仮定(A)の下、未知の S の簡約基底を得る定理を証明できる。

(A) ある $0 \neq v \in \mathbb{Z}^2$ と2次対称行列 T において $S \bullet T \geq {}^t v S v$ が成立しているなら、 $S^{obs} \bullet T > 0$ も成立する。

(A) は、 ${}^t v S v$ (つまり非零の格子ベクトル長さの2乗) の上界 $S \bullet T$ の観測値 $S^{obs} \bullet T$ の値が、必ず正值になるという仮定になる。結晶学で使用されるデー

タで、(A) が成立しないほど誤差が大きいことはまずない。

以下の定理は、研究室学生の修論の結果で、IUCr ジャーナルから間もなく出版予定である。3次元の場合¹⁾と方針や証明は変わらない。

定理 1 S は単純長方形格子の2次形式とし、その観測値 S^{obs} は広い意味で **Minkowski** 簡約とする。上記の(A)が成立すれば、 S も広い意味で **Minkowski** 簡約となる。よって以下が成立する。

$$S = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 \\ 0 & s_{22} \end{pmatrix}, \quad s_{11}, s_{22} \in \mathbb{R}.$$

定理 2 S は面心長方形格子の2次形式とし、その観測値 S^{obs} は **Selling** 簡約とする。上記の(A)が成立すれば、 S は以下のいずれかの形になる。

$$\begin{pmatrix} s_{11} & -s_{11}/2 \\ -s_{11}/2 & s_{22} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} s_{22} & -s_{11}/2 \\ -s_{11}/2 & s_{11} \end{pmatrix} \\ \text{or} \begin{pmatrix} s_{22} & s_{11}/2 - s_{22} \\ s_{11}/2 - s_{22} & s_{22} \end{pmatrix}, \quad s_{11}, s_{22} \in \mathbb{R}.$$

要は、観測値の S^{obs} を簡約すれば、 S^{obs} と同じ基底で未知の S もほぼ簡約になる、というのが定理の主張である。

(A) のような S^{obs} の正定値性の仮定が必要な理由であるが、欲しい情報は、正定値である未知の S に対して、 $gS^t g$ が簡約となる $g \in GL_2(\mathbb{Z})$ である。 S^{obs} が不定値、すなわち正負の固有値を共に持つとすると、 S^{obs} に値が近い半正定値の S からなる領域として、実軸上のある区間とその近傍が含まれる(式(2)では実軸上の点や無限遠点に半正定値対称行列が対応する)。

図2に見るように、実軸の近傍は無限個の $g \cdot D$ ($g \in GL_2(\mathbb{Z})$) が集積しており、各 g について、 $g^{-1} S^t g^{-1}$ が簡約となる可能性があるため、 g の候補として無限長さのリストが必要になる。簡約理論から、そういった状況が見取れるのである。

4. 葉序と無理数

葉序は、植物の茎における葉の付き方、葉の配置を指す。図3右のように、円柱(茎)の周囲をらせん状に一定速度で上る線上に葉が出るモデルを考える。

茎を円柱と考えて真上から見ると、円周上の点として葉が配列する。 n 番目の葉と $n+1$ 番目の葉がなす角度を開度 (**divergence angle**) といい、この値が

*5) 式(1), (2) で s_{11}, s_{22} の役割を交換すれば、通常の1次分数変換の形になる。 \bar{z} は z の複素共役。

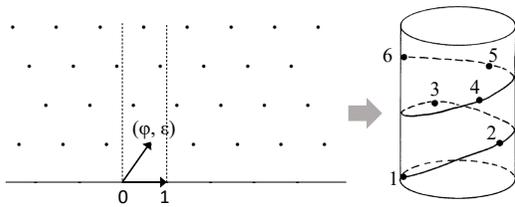


図3 2次元格子を用いた葉序モデル. 格子点の円柱面への像が葉の分布を表す.

定数になる場合を螺旋葉序という.

ブラベーの時代, Schimper-Braun の法則として, 開度 φ (radian) と 2π の比は以下の形で書いて, 特に, $n = 2$ の場合が広く見られることが, 実際の植物の観察から知られていた.

$$\frac{1}{n}, \frac{1}{n+1}, \frac{2}{2n+1}, \frac{3}{3n+2}, \frac{5}{5n+3}, \frac{8}{8n+5}, \dots$$

分子はフィボナッチ数, 分母は前の2つの分母の和であるから, $n = 1, 2$ を代入するとやはりフィボナッチ数になる.

ブラベーはこれに対し以下のようなことを考えた⁵⁾. 円柱は \mathbb{R}^2/\mathbb{Z} の一部とみなせる. 上記の円柱上の記述を無限に延長すれば, \mathbb{R}^2/\mathbb{Z} 上の点配置が得られる. 自然な全射 $\mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2/\mathbb{Z}$ による各点の逆像を $L \subset \mathbb{R}^2$ とする. L の1点が原点と一致するよう座標系を平行移動すれば, L は2次元格子になる.

実際, L は $z \mapsto z+1$ の平行移動で不変なので, 任意の $n \in \mathbb{Z}$ に対し ${}^t(n, 0) \in L$ となる. 螺旋葉序の状況では, それ以外で ${}^t(s, 0)$ の形に書けるものは L に含まれないと考えてよい. この状況で開度 φ を用いると, ある実数 $\epsilon \neq 0$ が存在して, 葉は $(n\varphi, n\epsilon)$, $n \in \mathbb{Z}$ に対応する座標に配列する. 逆像 L は, 以下の基底行列を持つ2次元格子となることが分かる(図3左).

$$B = \begin{pmatrix} 1 & \varphi \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}. \quad (3)$$

さらにブラベーは, 葉序の近接点をつなげて得られる2方向の螺旋(parastichy pair)が φ の連分数表示で記述できることを示し, $\varphi/2\pi$ は有理数よりも無理数と考えた方がよく, その場合, 最も多くの植物に見られる開度は $\varphi = (3 - \sqrt{5})/2$ になると提言した.

黄金数 $\omega = (1 + \sqrt{5})/2$ を用いると, 上記の $\varphi = (3 - \sqrt{5})/2$ は $1/(1 + \omega)$ に等しい. この角度は黄金角と呼ばれる.

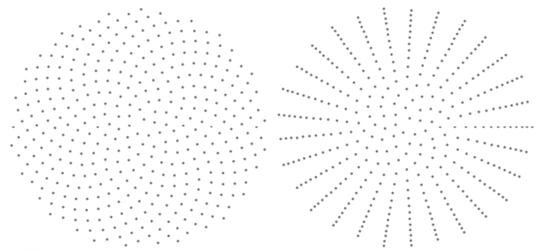


図4 Vogel螺旋(左)と黄金角 $\varphi = 1/(1 + \omega)$ を有理数 $1/(1 + 13/8)$ に置き換えた場合(右).

5. 葉序の数理とマルコフ理論

節4では円柱モデルを考えたが, 黄金角の機構は任意の回転体の表面に適用可能であることが知られている. 私の研究室では, これを一般曲面や一般次元多様体上の点パッキング生成法に拡張した¹¹⁾. この研究は九大のプログラムに用いたため留学生も参加した. 得られるパッキング密度の下限は, 曲面で0.7, 3次元多様体で0.38ぐらいである.

パッキング密度は, 各点に円の中心を置き, 円が重ならない範囲で直径を最大化したとき, 円に入る領域の割合(面積の比)として定義される. このとき円の直径は最も近い2点の距離に等しい. ただし多様体上の距離と面積の計算にはリーマン計量を用いるとする.

回転体は, xy 平面のグラフ $y = f(x)$ を x 軸の周りに回転させて得られるので, その表面 S は $(x, f(x)\cos\theta, f(x)\sin\theta)$ とパラメトライズされる. S の $a \leq x \leq b$ における表面積は $F(b) := 2\pi \int_a^b |f(x)| dx$ に等しい.

S 上の $x \geq a$ の領域に葉序パターンを生成するには, F の逆関数 F^{-1} を用いて以下のようにすればよい.

$$\theta_n := n\varphi, \quad (4)$$

$$x_n := a + F^{-1}(n\epsilon). \quad (5)$$

ただし, φ は開度, $\epsilon > 0$ は任意定数である. 式(4)より, $n+1$ 番目の点は n 番目の点から φ だけ回転した座標に現れる. 式(5)は, S の $a < x \leq F^{-1}(n\epsilon)$ を満たす面積 $n\epsilon$ の領域に n 個の点が出る, という等面積性の仮定から導出される.

同じ考え方は円盤にも適用できる. Vogel螺旋¹²⁾の各点を極座標で表すと $(r_n, \theta_n) = (\sqrt{n}, n\varphi)$, $n = 1, 2, \dots$ で, $\varphi = (3 - \sqrt{5})/2$ とすれば, 図4左のようなパターンが \mathbb{R}^2 全体に展開される. また, φ が無理数ではなく有理数なら, 図4右のように十分原点から

離れた座標で分岐する。ブラベアの開度が無理数であるという主張は、この意味で正しい。

一般曲面上に Vogel 螺旋のようなパターン生成を行うためには、回転角という考え方から、格子点の像という考え方に戻る必要がある。

ごく最近、葉序の数理とマルコフ理論の関連が指摘された¹³⁾。確率過程のマルコフ連鎖で有名なマルコフだが、マルコフ理論¹⁴⁾¹⁵⁾は、以下の最小値 $m(S)$ が、 $1/3$ より大きな値となる不定値 2 次対称行列に関する。

$$m(S) := \min \left\{ \frac{|\sum_v S_{1v} v|}{\sqrt{|\det S|}} : 0 \neq v \in \mathbb{Z}^2 \right\}.$$

$\sqrt{|\det S|}$ で割るのは、 S のスケールによって $m(S)$ の値を変えないためである。

S が不定値の場合、以下の S が最大値 $m(S) = 2/\sqrt{5}$ を与えることがマルコフ以前に知られていた¹⁶⁾。

$$S = \begin{pmatrix} 1 & -1/2 \\ -1/2 & -1 \end{pmatrix}.$$

対応する 2 次形式 $f(x) = {}^t x S x$ を因数分解すれば、黄金数 $\omega = (1 + \sqrt{5})/2$ が現れる。

$$f(x_1, x_2) = (x_1 - \omega x_2)(x_1 - (1 - \omega)x_2). \quad (6)$$

S のような不定値 2 次対称行列の場合も、正定値のアルゴリズムとほぼ同様の計算で簡約できることが知られている¹⁷⁾。ただし、 ${}^t x S x = 0$ が整数解を持たない不定値の $S = (s_{ij})$ が簡約とは、 s_{11}, s_{22} が異符号かつ $s_{11} + s_{22} \pm 2s_{12}$ も異符号であることである。

葉序の 2 次元格子との関係が分かりにくいかもしれないが、そこで、連分数表示を用いて、以下の基底行列を持つ 2 次元格子 $L_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon}$ の最短ベクトルを含む簡約基底を求めることを考える。

$$B_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon^{-1/2} & 0 \\ 0 & \epsilon^{1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\varphi_1 \\ 1 & -\varphi_2 \end{pmatrix}.$$

ただし、 $\epsilon \neq 0$ は任意定数で、暫定的に $\varphi_1 > 0 > \varphi_2$ とする。実際、どのような格子も $B_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon}$ の定数倍の形の格子基底を持つ。

φ_1, φ_2 の連分数表示を以下のようにとったとき次の定理が成立する¹¹⁾。

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= [a_0, a_1, a_2, \dots, a_n, \dots], \\ -\varphi_2^{-1} &= [a_{-1}, a_{-2}, \dots, a_{-n}, \dots]. \end{aligned}$$

定理 3 $L_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon}$ の基底 $\mathbf{b}_0, \mathbf{b}_1$ を以下のように取る。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_0 & \mathbf{b}_1 \end{pmatrix} = B_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon}.$$

各整数 $n \neq 0, 1$ に対し、 \mathbf{b}_n を以下が成立するように取る。

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_n & \mathbf{b}_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{cases} \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{n-1} & \mathbf{b}_{n-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n-1} & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{if } n \geq 1, \\ \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{n+1} & \mathbf{b}_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -a_n \end{pmatrix} & \text{if } n \leq -1. \end{cases}$$

整数 N を $\mathbf{b}_n \cdot \mathbf{b}_{n-1} \geq 0$ が成立する最小の n とし、 $1 \leq d \leq a_{N-1}$ を以下が成立する最小の整数とする。

$$(d\mathbf{b}_{N-1} + \mathbf{b}_{N-2}) \cdot \mathbf{b}_{N-1} \geq 0.$$

このとき、以下の u_i, u_j ($i \neq j$) は、それぞれ $L_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon}$ の Selling 簡約基底になる。

$$\begin{aligned} u_1 &:= \mathbf{b}_{N-1}, & u_2 &:= (d-1)\mathbf{b}_{N-1} + \mathbf{b}_{N-2}, \\ u_3 &:= -u_1 - u_2 = -(d\mathbf{b}_{N-1} + \mathbf{b}_{N-2}). \end{aligned}$$

定理 4 $\Delta(L_{\varphi_1, \varphi_2})$ を、 L_{φ_1, φ_2} のパッキング密度とすると式 (7) が成立する。 φ_1 が無理数なら式 (8) も成立する。

$$\inf_{0 \neq \epsilon \in \mathbb{R}} \Delta(L_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon}) = \frac{\pi}{4} m(S), \quad (7)$$

$$\liminf_{\epsilon \rightarrow +0} \Delta(L_{\varphi_1, \varphi_2, \epsilon}) = \frac{\pi}{2\mathcal{L}(\varphi_1)}. \quad (8)$$

ただし、 S は、 ${}^t x S x = (x_1 - \varphi_1 x_2)(x_1 - \varphi_2 x_2)$ を満たす対称行列とし、 $\mathcal{L}(\alpha)$ は α のラグランジュ数、すなわち (*) が成立する実数 M の上限 $\sup M$ とする。

(*) $|\alpha - p/q| < \frac{1}{Mq^2}$ を満たす無限個の有理数 p/q が存在する。

実際に定理 4 を用いてパッキング密度の下限を求めよう。式 (3) の基底行列を、行列式が 1 になるよう $\epsilon^{-1/2}$ 倍しておく。

$$B = \begin{pmatrix} \epsilon^{-1/2} & 0 \\ 0 & \epsilon^{1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \varphi \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \varphi = \frac{3 - \sqrt{5}}{2}.$$

以下より、 B が生成する格子は $L_{\omega, -1, \varphi^{-1}\epsilon}$ の定数倍になる。

$$B \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi\epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\omega \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \varphi^{1/2} B_{\omega, -1, \varphi^{-1}\epsilon}.$$

α が有理数のときは $\mathcal{L}(\alpha) = 0$ 、無理数 $\alpha =$

$[a_0, a_1, a_2, \dots]$ においては以下が成立する¹⁸⁾.

$$\mathcal{L}(\alpha) = \limsup_{n \rightarrow \infty} ([a_{n+1}, a_{n+2}, \dots] + [0, a_n, a_{n-1}, \dots, a_1])$$

よって $\omega = [1, 1, \dots]$ より, $\mathcal{L}(\omega) = \omega + 1/\omega = \sqrt{5}$ となるので, 定理 4 の式 (8) より,

$$\liminf_{\epsilon \rightarrow +0} \Delta(L_{\omega, -1, \varphi^{-1}\epsilon}) = \frac{\pi}{2\sqrt{5}} = 0.702\dots$$

Vogel 螺旋のパッキング密度が 0.7 以上になることは上式によって保証されている. しかし, 対応する 2 次形式 S では ${}^t x S x = (x_1 - \omega x_2)(x_1 + x_2)$ となるので, $m(S) = 0$ より, $\inf_{0 \neq \epsilon \in \mathbb{R}} \Delta(L_{\omega, -1, \varphi^{-1}\epsilon}) = 0$ となる.

すなわち, ある ϵ に対してパッキング密度は 0 にくらでも近い値を取る. Vogel 螺旋で, 原点回りの局所的なパッキング密度が若干良くないのはこのためだ. この ϵ は, 格子を写す写像のヤコビアン行列から求めることができる値で, より顕著な例も容易に作れる.

しかし上述のように, $m(S)$ が最大の 2 次形式は式 (6) である. そこで式 (3) の代わりに, 以下の基底行列 B_2 を採用する.

$$B_2 = \begin{pmatrix} 1 & -\omega \\ 1 & \omega - 1 \end{pmatrix}, \quad \omega = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}. \quad (9)$$

B_2 が生成する 2 次元格子 $L_{\omega, 1-\omega, \epsilon}$ では, ϵ の値に関わらず, 以下が成立する.

$$\inf_{\epsilon} \Delta(L_{\omega, 1-\omega, \epsilon}) = \frac{\pi}{2\sqrt{5}} = 0.702\dots$$

この $L_{\omega, 1-\omega, \epsilon}$ を採用することで, 一般曲面に葉序パターンを生成できる. 数学としてはこの辺から面白くなってくるが, 新しい研究になるので詳しくは本論文を参照されたい¹¹⁾. ブラベーの提案した式 (3) よりもさらに, 式 (9) では無理数の要素が増える. そのため曲面が自分自身と交わる場所で, それぞれの座標系の螺旋を綺麗につなげるのに一工夫必要となるが, 上述の Vogel 螺旋の原点周りの点配置も若干改善される. 高次元化には, 線形式の積 (product of linear forms) という, やはり数の幾何の知見を用いた.

参考文献

- 1) R. Oishi-Tomiyasu, Rapid Bravais-lattice determination algorithm for lattice parameters containing large observation errors, *Acta Cryst.* A68 (2012), pp. 525–535.
- 2) Edited by M. I. Aroyo, *International tables for crystallography Vol. A* (2016), Wiley.

- 3) D. Smith, J. S. Myers, C. S. Kaplan, C. Goodman-Strauss, An aperiodic monotile, <https://arxiv.org/abs/2303.10798>.
- 4) R. Greenfeld, T. Tao, A counterexample to the periodic tiling conjecture, arxiv: <https://arxiv.org/abs/2211.15847>
- 5) L. Bravais, A. Bravais, Essai sur la disposition des feuilles curvisériées. *Annales des Sciences Naturelles, Botanique* 7 (1837), pp.42–110.
- 6) G. Eisenstein, Tabelle der reduzierten positiven ternären quadratischen Formen, nebst den Resultaten neuer Forschungen über diese Formen in besonderer Rücksicht auf ihre tabellarische Rechnung, *J. Reine Angew. Math.* 41 (1851), pp. 141–190.
- 7) G. F. Voronoi, Sur quelques propriétés des formes quadratiques positives parfaites, *J. Reine Angew. Math.* 133 (1908), pp.97–178.
- 8) G. F. Voronoi, Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques, *J. Reine Angew. Math.* 134 (1908), pp.198–287.
- 9) B. A. Venkov, On the reduction of positive quadratic forms, *Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Mat.* 134 (1940), pp.37–52.
- 10) A. K. Lenstra, H. W. Lenstra Jr., L. Lovász, Factoring polynomials with rational coefficients, *Mathematische Annalen* 261 (1982), pp.515–534.
- 11) S. E. Graiff Zurita, R. Oishi-Tomiyasu, Packing theory derived from phyllotaxis and products of linear forms, submitted (arxiv: <https://arxiv.org/abs/2106.12333>)
- 12) H. Vogel, A better way to construct the sunflower head, *Mathematical Biosciences* 44 (1979), pp.179–189.
- 13) F. Bergeron, C. Reutenauer, Golden ratio and phyllotaxis, a clear mathematical link, *J. of Math. Biology* 78 (2019), pp.1–19.
- 14) A. Markoff, Sur les formes quadratiques binaires indéfinies, *Mathematische Annalen* 15 (1879), pp.381–406.
- 15) A. Markoff, Sur les formes quadratiques binaires indéfinies, *Mathematische Annalen* 17 (1880), pp.379–399.
- 16) A. Korkine, G. Zolotareff, Sur les formes quadratiques, *Mathematische Annalen* 6 (1873), pp.366–389.
- 17) J. H. Conway, *The Sensual (Quadratic) Form* (Carus Mathematical Monographs 26), The Mathematical Association of America (1997).
- 18) M. Aigner, *Markov's Theorem and 100 Years of the Uniqueness Conjecture*, Springer (2013).

(マス・フォア・インダストリ研究所, 九州大学)