基本領域の計算について

塩崎　謙

January 7, 2021

Γをn次元空間群とする． Γの基本領域（fundamental domain）のひとつを計算する手法として，Direchlet-Voronoi領域を用いるものが知られている． $a \in \mathbb{R}^n$を選ぶ． Direchlet-Voronoi領域$DV(a)$は次で定義される． ([1], Theorem 1.2.1.)

$$DV(a) := \{x \in \mathbb{R}^n | d(x,a) < d(x,\gamma(a)) \text{ for all } \gamma \in \Gamma \backslash \mathrm{Stab}_\Gamma(a)\}. \tag{1}$$

次が成立する．

- $DV(a)$は凸領域の内部．
- 小群が自明，つまり$\mathrm{Stab}_\Gamma(a) = \{1\}$ならば，$DV(a)$は$\Gamma$の基本領域．

Direchlet-Voronoi領域$DV(a)$を計算する際に問題となる点は，軌道$\Gamma(a)$にいおいて，aの近傍の点のみである．空間群Γにおける並進を$\tau = \{I, t\} \in \Gamma$と書く．スラブ

$$S_a(\tau) := \{x \in \mathbb{R}^n | (a-t,t) < (x,t) < (a+t,t)\} \tag{2}$$

を導入する．不等式は，$|x-a| < |x-(a+2t)|$，かつ$|x-a| < |x-(a-2t)|$と等価． $\tau_i, i = 1, \dots, n$を格子の基底とする．次が成立する． ([1], Lemma B.2.)

- Direchlet-Voronoi領域$DV(a)$を計算する際には，a近傍の点集合

$$\mathcal{O} = (\Gamma(a) \cap \bigcap_{i=1}^n S_a(\tau_i)) \cup \{\pm\tau_1(a), \pm\tau_2(a), \dots, \pm\tau_n(a)\} \tag{3}$$

  のみ考慮すれば良い．

効率よくDirechlet-Voronoi領域$DV(a)$を計算するには以下のようにすればよい． [1]

- まず，格子の並進$\mathcal{S} = \{\pm\tau_1(a), \pm\tau_2(a), \dots, \pm\tau_n(a)\}$のみについて，領域$DV(a)_0$を計算する．
- 点集合$\mathcal{O}' = (\Gamma(a) \cap \bigcap_{i=1}^n S_a(\tau_i))$を$a$からの距離が近い順にソートする．
- $\mathcal{O}'$の点$p_1, p_2, \dots$について以下を行う．
  - $DV(a)_j$の境界点が全てa, p_{j+1}の"垂直２等分面"の内側にが存在すれば，領域はアップデートせず$DV(a)_{j+1} = DV(a)_j$とする．
  - a, p_{j+1}の"垂直２等分面"の外側に$DV(a)_j$の境界点が存在すれば，点集合$\mathcal{S}$にp_{j+1}を加えて領域$DV(a)_{j+1}$を再計算する．

References

[1] Moritz W. Schmitt, *On Space Groups and Dirichlet-Voronoi Stereohedra*, Thesis, url.

[1] 石崎渉さんに教えて頂きました．ありがとうございます．