ВВЕДЕНИЕ

Метод Вороного—Делоне как подход для изучения структуры некристаллических систем зародился в шестидесятые годы нашего века. Именно тогда появились реальные возможности исследования конкретного расположения атомов для некристаллических систем. До этого времени структура жидкостей и аморфной фазы рассматривалась только в терминах функций радиального распределения, работы Г.Ф. Вороного и Б.Н. Делоне были известными лишь узкому кругу математиков, а взгляд на структуру как на конкретное расположение атомов был прерогативой кристаллографии.

В значительной мере появление метода связано с именем известного английского физика Дж. Бернала. Задавшись целью понять структуру простой жидкости, он построил свою знаменитую упаковку стальных шариков, координаты центров которых были затем измерены и внесены в компьютер. Это была первая модель некристаллического состояния, для которой известно положение всех составляющих ее частиц. Детальный анализ такой системы требовал новых подходов. Именно Бернал предложил использовать для этой цели многогранники Вороного. Дальнейшее развитие структурных исследований некристаллических систем шло параллельно с развитием и распространением методов численного моделирования, молекулярной динамики и Монте-Карло.

Извлечение содержательной структурной информации из модели некристаллической фазы является непростой задачей. Структурные образы такой системы глубоко скрыты в списке координат атомов, который дает нам компьютерная модель. Успех в продвижении в этом направлении, как показало время, связан с использованием геометрических идей, опирающихся на классические результаты Вороного и Делоне. Благодаря им мы можем построить и использовать фундаментальное геометрическое построение — разбиение Вороного—Делоне, содержащее всю структурную информацию о системе частиц. Такое разбиение существует и однозначно для весьма произвольных систем и поэтому дает возможность работать с моделями, для которых необязательно наличие ни трансляционной, ни ориентационной симметрии.

Книга состоит из двух основных частей. В первой части излагаются математические основы метода Вороного—Делоне. Кратко обсуждается история возникновения и развития основных идей, вводятся основные геометрические построения: многогранник Вороного, симплекс Делоне, сетка Вороного, сетка Делоне, разбиение Вороного—Делоне, доказываются теоремы, утверждающие основные свойства этих построений. После этого мы переходим от системы точек к системе шаров. Учет конечного размера частиц необходим для исследования строения пустого межчастичного пространства. Здесь появляется понятие S-области Вороного — области пространства, все точки которой ближе к поверхности данного шара, чем к поверхностям других шаров системы. Исследуются геометрические свойства как отдельных S-областей Вороного, так и образуемой ими мозаики. Обсуждается также обобщение метода на системы произвольных выпуклых тел. Показано, что основные идеи метода работают и для общего случая. В завершение первой части объясняется, как наши геометрические образы представляются при численной реализации для компьютерных расчетов. Описаны алгоритмы вычисления отдельных многогранников Вороного и полного разбиения Вороного—Делоне для различных систем.

Вторая часть посвящена приложениям метода. Сначала кратко обсуждается история развития представлений о структуре некристаллических систем, формирование науки аморфографии. Затем на примере конкретных задач показывается, как с помощью многогранников Вороного и симплексов Делоне характеризуется локальный (ближний) порядок в различных системах. Для изучения пространственных структурных корреляций (структурных мотивов) в жидкостях и стеклах применяются сетки Вороного и Делоне. В этом случае разбиение Вороного—Делоне используется, образно говоря, как канва, на которой выявляются "узоры", составленные из заданных структурных элементов. Структурные закономерности в некристаллических материалах имеют статистическую природу и требуют соответствующих подходов для их описания, поэтому существующий опыт и методы кристаллографии здесь оказываются бесполезными. Теперь мы должны изучать статистику метрических и топологических характеристик наших геометрических конструкций. Специальное внимание уделено возможностям метода для решения задач, требующих количественного анализа строения пустого пространства внутри системы сферических частиц. Здесь используется то важное свойство сетки Вороного, что она является навигационной картой системы. Это позволяет использовать ее в качестве инструмента для компьютерной порометрии. Решаются задачи нахождения и исследования доступного объема в различных некристаллических системах, рассматриваются подходы для количественного анализа протекания и диффузии сквозь упаковки сферических частиц, некоторые другие задачи, где применение метода Вороного—Делоне сыграло существенную роль.

Часть I. ОСНОВЫ МЕТОДА

В этой части книги мы рассмотрим математическую сторону метода Вороного—Делоне. Обсудим идеи, лежащие в его основе, главные результаты, полученные Г.Ф. Вороным и Б.Н. Делоне, введем необходимые понятия и терминологию. После уяснения классических результатов приступим к обобщению метода, а именно — перейдем от ансамбля математических точек к системе шаров, а затем и к произвольным выпуклым телам. Хотя обсуждаются чисто математические вопросы, в них без особого труда могут разобраться читатели, не являющиеся математиками. Используемые геометрические идеи достаточно просты и интуитивно понятны, однако о них полезно иметь представление, если мы хотим со знанием дела использовать метод и понимать результаты, полученные с его помощью. Доказательства, приводимые в этой главе, предназначены для читателей, желающих более глубоко понять математические детали, это будет полезно им для создания своих алгоритмов построения разбиения Вороного—Делоне и приложения метода для новых задач.

1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИСТОКИ МЕТОДА

1.1. Исторические замечания

В последние годы, в связи с применением многогранников Вороного и симплексов Делоне в самых различных науках, появляется интерес к истории возникновения этих геометрических построений. Обнаруживаются забытые или известные только узкому кругу специалистов факты.

Идея того, что для любого центра из некоторого ансамбля можно выделить область пространства, относящуюся к данному центру, возникала неоднократно и для разных целей. По-видимому, самая ранняя иллюстрация разбиения Вороного (в двумерном случае) сделана Декартом и относится к 1644 году. Он предложил таким способом разделять пространство между объектами Солнечной системы. Рисунок Декарта, репродуцированный из [1], приведен в недавней книге А. Окабе с соавторами [2], где даже высказывается мысль, что истоки появления концепции разбиения Вороного уходят в античные времена. Декарт не сопровождал свой рисунок какими-либо пояснениями о принципах его построения, считая, наверное, такое разбиение уже известным.

Следующими, кто касался этой проблемы, были Гаусс (1840 г.) [3], Дирихле (1850 г.) [4] и Вороной (1908 г.) [5, 6]. Они занимались чисто математическими проблемами, изучением квадратичных форм, а заполнение пространства параллелоэдрами, являющимися многогранниками Вороного некоторой решеточной системы центров, использовалось в качестве удобной геометрической интерпретации. После этих работ естественной областью применения многогранников Вороного стала кристаллография, см., например, работу Нигли (1927 г.) [7], где область, ближайшую к данному атому, он называет областью действия (активности) данного атома. Следующим независимым открытием многогранников Вороного является ячейка Вигнера—Зейтца (1933 г.) [8, 9]. Это построение хорошо известно в физике твердого тела и является одной из возможностей выбора простейшей кристаллической ячейки, заполняющей при трансляции все пространство.

В другой науке, метеорологии, Фиссен (1911 г.) [10], а затем Хортон (1917 г.) [11], для более равномерного определения количества осадков на большой площади, предложили относить их к тем участкам территории, которые ближе к своей метеостанции. В этой науке такие участки называют полигонами Фиссена, которые не что иное, как наши многогранники (полигоны) Вороного, построенные на плоскости для системы центров, указывающих местоположение метеостанций. В экологии также совершенно независимо было предложено Брауном (1965 г.) [12] и до сих используется понятие области потенциального влияния для обозначения, в частности, площади, захватываемой в лесу данным деревом. Такое построение имеет смысл не только для растений, но и для животных, например, каждый лев, живущий в саванне (или суслик в степи), считает себя хозяином той территории, где он находится ближе к своему логову, чем к логову соседа. Поэтому границы владения этих животных также оцениваются с помощью полигонов Вороного.

Можно называть другие области науки, где данное геометрическое построение используется и наверняка было "переоткрыто" кем-нибудь самостоятельно. Целый список таких наук приводится в [2]. Кроме физики и химии, чем мы будем заниматься, отметим наиболее известные: астрономию (изучение структуры Вселенной), экономику (методы оптимизации), картографию, экологию, компьютерную графику, робототехнику (нахождение оптимального пути между препятствиями). Подробный историко-научный обзор применения данного геометрического подхода еще ждет своих исследователей.

Главным полем применения метода в наше время, судя по количеству научных публикаций, являются математические науки. Как отмечалось на недавней конференции (Voronoi conference, 7–14 Sep. 1998, Киев), Г.Ф. Вороной сейчас — один из наиболее цитируемых математиков в мире. Обширное рассмотрение математических работ, использующих разбиения Вороного и Делоне, сделано А. Окабе с соавторами [2]. Уделено внимание как классическим результатам, так и разнообразным обобщениям метода. Отметим также обзор Ауренхаммера (1991 г.) [13], автор которого претендует на "первую всеобъемлющую библиографию по разбиениям Вороного и связанным с ними структурам". Правда, это относится опять же к математическим наукам. Укажем более ранние,

Г.Ф. Вороной

переведенные на русский язык математические книги Препарата и Шеймоса [14], Конвея и Слоуна [15], касающиеся некоторых аспектов обсуждаемых геометрических идей. Представление о современном состоянии дел дает недавняя книга Voronoi's impact on modern science (1998 г.) [16], посвященная 130-летнему юбилею Г.Ф. Вороного. Этот двухтомник включает более 30 обзорных и оригинальных статей, содержащих новые принципиальные результаты из самых разных разделов математики и некоторые приложения к естественным наукам.

1.2. Основные результаты Вороного и Делоне

Георгий Феодосеевич Вороной родился 16 (28) апреля 1868 г. в селении Журавка Полтавской губернии. Его отец получил филологическое образование в Киевском университете, работал профессором русской литературы, а затем был директором гимназий в Кишиневе, Бердянске, Прилуках. Закончив гимназию в Прилуках, Георгий поступил в Санкт-Петербургский университет, где учился с 1885 по 1890 г. Там он связал свою судьбу с математикой. Сохранился его дневник тех лет, фрагменты которого опубликованы (на русском языке) в первом томе книги [16]. После защиты магистерской диссертации в 1894 г. он получает направление в Варшавский университет. В 1898 г. Вороной становится профессором Варшавского политехнического института. В 1903–1904 гг. вышли его две большие статьи по теории чисел, внесшие существенный вклад в эту область, в результате чего в 1907 г. он был избран членом-корреспондентом Санкт-Петербургской академии наук. К этому времени Вороной завершил свои исследования по теории квадратичных форм и сопроводил свой "мемуар", посланный в математический журнал, редактируемый Креле (A.L. Crelle) [5], письмом, содержащим такие слова: "Трехмерные параллелоэдры играют сейчас важную роль в теории кристаллических тел, и кристаллографы уже обратили внимание на свойства этих странных многогранников, но только сейчас кристаллографы удовлетворены описанием параллелоэдров исходя из чисто геометрической точки зрения. Я отмечал уже давно, что задача разделения n-мерного пространства на выпуклые конгруэнтные многогранники тесно связана с арифметической теорией положительно-определенных квадратичных форм". Эта работа представляет одно из самых глубоких и значительных достижений Вороного, обессмертивших его имя. Во время революционных событий 1905–1907 гг. Вороной переезжает в Новочеркасск. Там обострилась его желчекаменная болезнь, из-за которой он умер в ноябре 1908 г. Похоронен Г.Ф. Вороной согласно его завещанию на его родине — в Журавке.

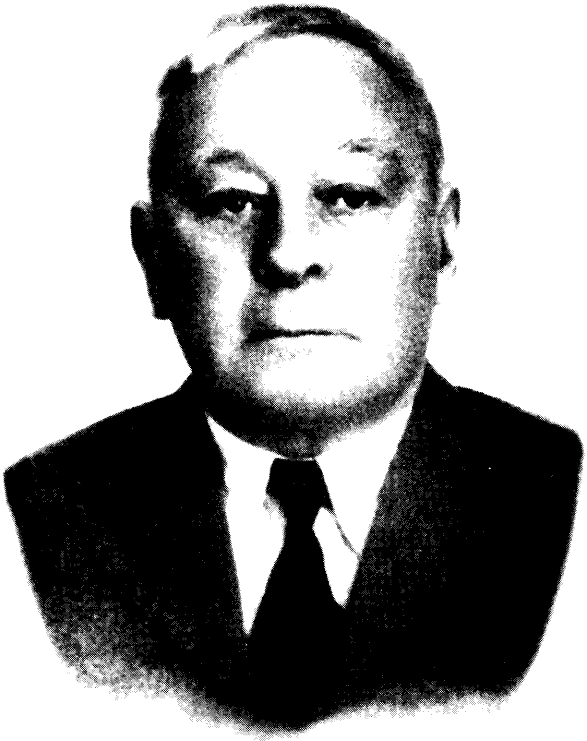
В 1908 г. вышла первая ("Свойства положительных совершенных квадратичных форм"), а в 1909 — вторая часть ("Исследования о примитивных параллелоэдрах") работы Вороного о квадратичных формах [5] (см. также на русском языке [6]). Задача, которую рассматривает Вороной, посвящена проблеме заполнения n-мерного эвклидова пространства параллелоэдрами, т. е. одинаковыми, параллельно расположенными выпуклыми многогранниками, не входящими друг в друга и смежными целыми гранями. Решается вопрос: каковы эти многогранники в самом общем случае? Постановка данной проблемы исходила из потребностей зарождающейся в те годы кристаллографии. Вопрос о параллелоэдрах для трехмерного пространства впервые был поставлен основоположником практической кристаллографии Е.С. Федоровым в его книге "Начало учения о фигурах" в 1885 г. [17].

Важным результатом работы Вороного явился алгоритм, позволяющий найти все примитивные параллелоэдры для данного числа измерений n. Этот алгоритм получается сведением теории примитивных параллелоэдров на теорию областей "действия". Он определяет их в общем случае как "совокупность тех точек n-мерного пространства, каждая из которых от точки O данной решетки не дальше, чем от всех других точек этой решетки". Это не что иное, как многогранник Вороного, определенный для n-мерной решетки. Разбиение пространства на эти области Вороной называл заполнением R.

Кроме заполнения R Вороной ввел другое заполнение, тесно связанное с первым, которое он называл заполнением L. Он писал: "...центры $n + 1$ примитивных параллелоэдров, сходящиеся к одной вершине, можно рассматривать как вершины некоторого n-мерного симплекса". Это первое определение симплекса Делоне. Была сформулирована и доказана фундаментальная теорема: "Симплексы L заполняют пространство не входя друг друга и будучи смежными целыми n–1-мерными гранями, причем совокупность их вершин совпадает с совокупностью всех центров параллелоэдров заполнения R". Факт существования разбиений R и L и установление между ними взаимно однозначного соответствия являются базисом, на котором строятся основные приложения метода.

Вороной работал только с решеточными (кристаллическими) системами, а большинство современных приложений имеют дело с произвольными точками. Переход от решеточных к произвольным системам точек — это заслуга Делоне.

Борис Николаевич Делоне родился 3 (15) марта 1890 г. в Санкт-Петербурге. Однако вскоре семья переехала в Киев, где его отец получил должность профессора механики. С 1908 по 1913 гг. Борис Николаевич учился на физико-математическом факультете Киевского университета и был оставлен при университете "для подготовки к профессорскому званию". До 1922 г. он преподавал в Киевском университете, а затем переехал в Ленинград, где стал профессором Ленинградского университета. В 1929 г. Делоне избирают членом-корреспондентом АН СССР, а в 1935 г. он переезжает в Москву, куда переводилась Академия наук. С тех пор, вторую половину своей жизни — 45 лет, он жил в Москве, работал в Математическом институте им. В.А. Стеклова и преподавал в Московском университете на кафедре геометрии. Умер Борис Николаевич в 1980 г., в возрасте 90 лет, прожив долгую и плодотворную жизнь, внеся свой вклад в теорию чисел, алгебру и геометрию, а также воспитав многих выдающихся учеников. Делоне был чрезвычайно одаренным человеком, неутомимым альпинистом, талантливым педагогом. Теплые воспоминания о нем написаны



Б.Н. Делоне

его учениками к юбилейным датам: академиком А.Д. Александровым к 90-летию в журнале "Природа" [18], Д.К. Фадеевым, Н.П. Долбилиным, С.С. Рышковым, М.И. Штогриным к 100-летию со дня рождения в специальном выпуске Трудов Математического института АН СССР им. В.А. Стеклова [19]. Заслуга Делоне еще в том, что он мог изложить фундаментальные математические результаты, как свои, так и других авторов, простым и наглядным языком, понятным не только математикам. Это видно по его книге "Петербургская школа теории чисел" [20], рассчитанной на широкого читателя, где он, в частности, излагает суть работы Вороного и делает свои обобщения.

Делоне доказал справедливость важнейших результатов Вороного для произвольной системы точек, причем сделал это просто и наглядно. Для этих целей он использует образ "пустого шара", впервые предложенный им еще в 1924 г. на Международном конгрессе в Торонто (см. [21, 22]). Делоне пишет [20]: "...рассмотрим шар, увеличивающийся и уменьшающийся и как угодно передвигающийся между точками системы, подчиненный лишь одному условию — не содержать внутри себя точек этой системы". Этот шар оказался очень полезным инструментом, и мы его будем использовать в дальнейшем. Подходы, предложенные Делоне, представляют собой тот принципиальный шаг, после которого идеи Вороного вышли за рамки теории чисел и кристаллографии и стали работать в самых разных науках.

Названия "многогранник Вороного" и "симплекс Делоне" сложились в среде английской геометрической школы. Их использует К. Роджерс в своей книге [23], отдавая должное российским математикам, внесшим фундаментальный вклад в разработку данного вопроса. Затем эта терминология перешла в компьютерные науки, начавшие бурное развитие в 60-е годы. Отсюда же эти названия были перенесены Дж. Берналом в физику жидкостей, после чего они распространились на физико-химические науки. Для обозначения всей мозаики многогранников Вороного и симплексов Делоне в русском языке используются термины "разбиение Вороного" и "разбиение Делоне". Слово "разбиение" имеет в математике вполне конкретный смысл. Оно означает покрытие, заполнение пространства без перекрывания элементов и без щелей, т. е. представление пространства как совокупности отдельных элементов. В свое время Вороной и Делоне использовали для этой цели слово "заполнение", которое может быть синонимом математического слова "разбиение". В английском языке обычно используются слова "tessellation" или "diagram". В книге [2] даже предлагается использовать их оба для выражений "Voronoi diagram" и "Delaunay tessellation". Слово "tessellation" означает буквально "мозаика" или "замощение" (укладка мостовой) и может использоваться в русской транскрипции как специальный научный термин "тесселяция". Слово "diagram" означает чертеж, схему, однако в русском языке слово диаграмма ассоциируется скорее с двумерными графиками.

В математической и кристаллографической литературе встречается выражение "многогранник (разбиение, диаграмма) Дирихле". Это не что иное, как синонимы терминам "многогранник (разбиение, диаграмма) Вороного". Исполь-