2.2.3. Теорема о разбиении Делоне

Итак, методом пустого шара мы определяем как симплексы Делоне, так и несимплициальные полиэдры Делоне. Ниже для краткости будем их называть *полиэдрами Делоне*. В формулировке и доказательстве этой красивой теоремы мы опять следуем Б.Н. Делоне.

ТЕОРЕМА 2. *Полиэдры Делоне системы {A} не входят друг в друга и заполняют все пространство, будучи смежными по целым граням. Разбиение пространства на полиэдры Делоне однозначно определяется системой {A} и, обратно, однозначно ее определяет.*

Покажем, что полиэдры Делоне не входят друг в друга. Возьмем какие-либо два полиэдра Делоне системы $\{A\}$, обозначим их как D_1 и D_2, а описанные вокруг них сферы — как S_1 и S_2. Если S_1 и S_2 не пересекаются, то полиэдры D_1 и D_2 также не имеют общих точек и поэтому не входят друг в друга. Если же S_1 и S_2 пересекаются, то все вершины полиэдра D_1 всегда лежат на той "шапочке" сферы S_1, которая расположена вне сферы S_2, поскольку по условию сфера S_2 пуста (рис. 9). Точно так же рассуждая, приходим к тому, что вершины полиэдра D_2 лежат на той "шапочке" сферы S_2, которая располагается вне сферы S_1. Следовательно, вершины полиэдров D_1 и D_2 всегда лежат по разные стороны от хордальной плоскости этих сфер или, возможно, частично на ней самой. Это означает, что все точки полиэдров D_1 и D_2 должны лежать по разные стороны от этой плоскости, ибо все полиэдры Делоне — выпуклые многогранники. Другими словами, никакие из них не входят друг в друга, но, возможно, касаются своими поверхностями.

Убедимся теперь, что полиэдры Делоне могут соприкасаться только по целым граням. Возьмем произвольную грань некоторого полиэдра D. Станем двигать центр описанной вокруг него сферы по направлению из полиэдра пер-

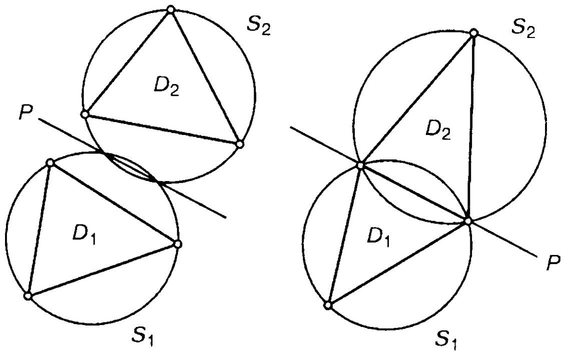

Рис. 9. К доказательству теоремы 2. Если пустые сферы двух полиэдров Делоне пересекаются, то их вершины всегда лежат по разные стороны от плоскости пересечения этих сфер (плоскость P) или, может быть, на этой плоскости (иначе сферы не были бы пусты). Поэтому любые два полиэдра Делоне никогда не входят друг в друга.

пендикулярно этой грани. При этом будем так менять радиус сферы, чтобы вершины выбранной грани оставались на ее поверхности. Очевидно, сфера сразу покинет все остальные вершины D и, в конце концов, наткнется на некоторую точку (или точки) системы $\{A\}$, лежащую вне этого полиэдра. Тем самым мы обязательно найдем новый полиэдр Делоне, который является смежным полиэдру D по целой грани (грань полностью определяется своими тремя вершинами, а мы их не меняли). Это означает, что для произвольной грани любого полиэдра Делоне всегда существует смежный по целой грани другой полиэдр Делоне этой же системы $\{A\}$.

Отсюда также следует, что в системе полиэдров Делоне нет пустот. Иначе существовали бы грани, являющиеся стенками таких пустот, не покрытые другими полиэдрами систем $\{A\}$.

Если бы разбиение пространства на полиэдры Делоне было неоднозначным, то это означало бы, что в системе нашлось два нетождественных полиэдра Делоне, имеющих общие внутренние точки. Но такого не может быть, ибо как было показано, никакие полиэдры Делоне одной системы $\{A\}$ не входят друг в друга.

Обратное утверждение о том, что система дискретных точек $\{A\}$ однозначно определяется разбиением Делоне, следует из того, что система $\{A\}$ совпадает с множеством вершин полиэдров Делоне заданного разбиения. Итак, теорема полностью доказана.

2.2.4. Симплициальное разбиение (триангуляция)

Следуя первоначальной логике Б.Н. Делоне, разбиением Делоне является разбиение системы $\{A\}$ на полиэдры Делоне, т.е. допускаются вырожденные конфигурации точек [20]. Однако во всех приложениях обычно предпочитают иметь дело только с симплексами. Каких-либо общих критериев разложения вырожденной конфигурации на симплициальные не существует. Но проблемы здесь нет. Всегда можно произвести достаточно малые (не изменяющие физической сущности модели) смещения точек вырожденной конфигурации. В результате несимплициальный полиэдр распадется на конкретные симплексы Делоне. В численных расчетах для проблемы вырождения имеет значение точность представления чисел. Очевидно, чем выше точность, тем меньше вероятность случайного возникновения вырожденной конфигурации. Опыт расчетов говорит, что обычной точности компьютера (порядка семи десятичных знаков) достаточно, чтобы не было проблем с вырождением при работе с неупорядоченными системами. В дальнейшем мы будем предполагать, что наша система $\{A\}$ невырождена, т.е. разбиение Делоне однозначно представлено симплексами Делоне.

Разбиение системы точек на симплексы иногда называют триангуляцией системы. Действительно, в двумерном случае это разложение системы на треугольники. В общем случае мы будем называть такое разбиение *симплициальным*, или просто разбиением Делоне.

Отметим, что центр описанной сферы может служить точкой, "обозначающей" соответствующий симплекс Делоне. Множество всех таких центров будем называть *системой* $\{D\}$. Из теоремы о разбиении Делоне следует, что система $\{A\}$ однозначно определяет систему $\{D\}$ и наоборот, имея $\{D\}$, можно однозначно восстановить $\{A\}$. Подробней о связи данных систем будем говорить в следующем разделе, а сейчас рассмотрим симплексы Делоне и основные закономерности их взаимного расположения.

2.2.5. Особенности взаимного расположения симплексов Делоне

Симплексы Делоне могут быть произвольной формы, однако их взаимное расположение в составе разбиения Делоне подчиняется определенным требованиям.

Отметим прежде всего, что центр описанной сферы симплекса Делоне может располагаться как внутри, так и вне симплекса, хотя на первый взгляд кажется, что центр всегда должен быть внутри симплекса. Будем называть симплекс *закрытым*, если центр его описанной сферы лежит внутри симплекса (рис. 10, *а*). Если центр вне симплекса, то такой симплекс назовем *открытым* (рис. 10, *б*). Возможна, разумеется, ситуация, когда центр описанной сферы лежит точно на поверхности симплекса, в частности, на грани или ребре. Будем различать и такие симплексы, называя их *полуоткрытыми* (рис. 10, *в*). Заметим, что все вершины открытых и полуоткрытых симплексов лежат на одной полусфере. Грань симплекса назовем *закрытой*, если центр описанной сферы лежит по ту же сторону от плоскости этой грани, что и сам симплекс. Аналогично грань симплекса назовем *открытой*, если центр описанной сферы симплекса лежит по другую сторону от плоскости этой грани, чем сам симплекс. Открытый симплекс всегда имеет открытую грань. В трехмерном пространстве у симплекса может быть одна или две открытые грани. В последнем случае можно говорить, что центр описанной сферы лежит "за ребром" симплекса. Такое ребро, смежное двум открытым граням, естественно также назвать открытым.

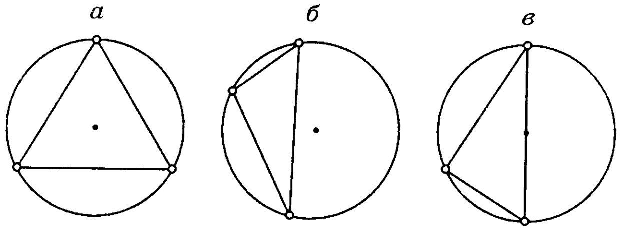

Рис. 10. Центр описанной сферы симплекса может располагаться: *а* — внутри; *б* — вне; *в* — на границе симплекса. Соответствующие симплексы называются закрытыми, открытыми и полуоткрытыми. Все вершины открытых и полуоткрытых симплексов лежат на одной полусфере описанной сферы.

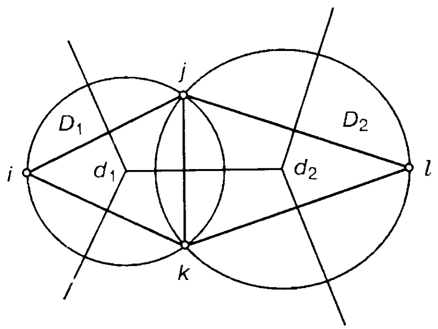

Рис. 11. Для закрытых симплексов Делоне (центры описанных сфер лежат внутри своих симплексов) отрезок d_1d_2, соединяющий центры описанных сфер, пересекает смежную грань в направлении от симплекса D_1 к D_2.

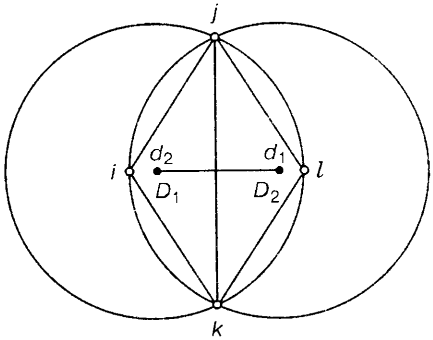

Рис. 12. Пример противоположного направления отрезка d_1d_2. Однако в этом случае смежные симплексы не являются симплексами Делоне.

Если симплексы Делоне смежны по закрытой грани, то их центры d_1 и d_2 лежат по разные стороны от смежной грани, располагаясь внутри своих симплексов, как изображено на рис. 11. Можно сказать, что отрезок канала Вороного d_1d_2 пронизывает смежную грань в направлении от симплекса D_1 к симплексу D_2. Это нетривиальный момент, так как в случае симплексов, не являющихся симплексами Делоне, допустимо, чтобы отрезок d_1d_2 был противоположно направлен (инверсирован), т.е. d_2 может быть слева, а d_1 справа от смежной грани. Однако при этом описанные сферы уже не будут пустыми (рис. 12).

В случае открытых симплексов Делоне неинверсируемость отрезка d_1d_2 менее очевидна. Однако и здесь последовательность центров описанных сфер всегда повторяет очередность следования самих симплексов. При этом, заме-

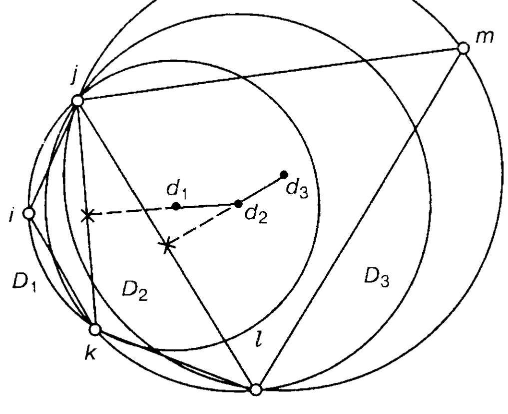

Рис. 13. Пример агрегата из открытых (ijk) и (jkl) симплексов Делоне, центры описанных сфер которых расположены в третьем симплексе (jlm). Точки d_1, d_2 и d_3 есть центры описанных сфер симплексов D_1, D_2 и D_3. Отрезки каналов Вороного d_1d_2 и d_2d_3 перпендикулярны к своим граням, хотя и не пересекают их. Последовательность расположения центров d_1, d_2, d_3 повторяет порядок чередования самих симплексов.

тим, центры вписанных сфер могут располагаться в чужих симплексах. На рис. 13 показан пример нетривиального расположения симплексов Делоне. Центр d_1 описанной сферы симплекса D_1 оказался даже не в смежном, а в более далеком симплексе. Тем не менее правильное чередование центров описанных сфер строго выполняется. Это свойство имеет существенное значение для некоторых приложений, использующих сетку Вороного.

2.3. Дуальность разбиений Вороного и Делоне

2.3.1. Разбиение Вороного—Делоне

Мы рассмотрели разбиения Вороного и Делоне по отдельности. Однако тот факт, что оба разбиения однозначно определяются системой $\{A\}$, говорит, что они сами однозначно определяют друг друга. Другими словами, если мы получили разбиение Вороного, то тем самым имеем полную информацию о разбиении Делоне, и наоборот. Как методом пустого шара Делоне, так и с помощью плоскостей Вороного мы выявляем одну и ту же систему точек $\{D\}$. Действительно, согласно первому следствию теоремы 1, каждая вершина d в мозаике Вороного расположена на одинаковом расстоянии от четырех точек системы. Но это означает, что данная четверка лежит на сфере с центром в выбранной вершине d. Эта сфера является тем пустым шаром Делоне, который определяет соответствующий симплекс Делоне. Можно рассуждать в обратном порядке. Точка d из системы $\{D\}$, определенная с помощью пустого шара, лежит, по построению, на одинаковом расстоянии от своей четверки точек из $\{A\}$, но такая точка является общей для всех плоскостей Вороного данной четверки точек, а поэтому является общей вершиной их многогранников Вороного.

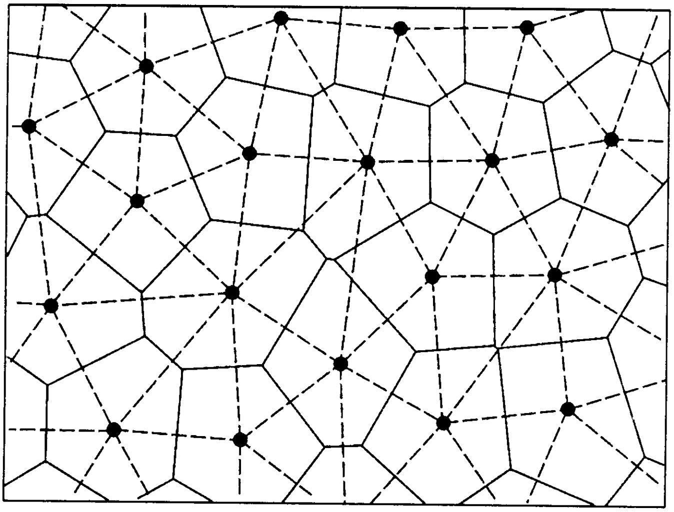

Рис. 14. Разбиение Вороного—Делоне для двумерной системы точек. Сплошными линиями нарисована мозаика Вороного, пунктирными — мозаика Делоне (см. рис. 5 и рис. 6).

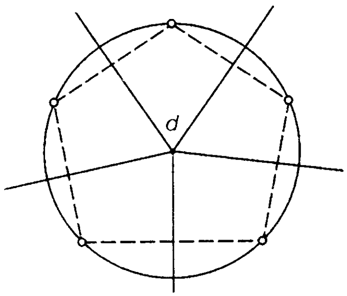

Рис. 15. Пример вырожденной конфигурации точек в системе $\{A\}$. Центр ее описанной окружности является общей вершиной многогранников Вороного всех точек этой конфигурации. Пунктирными линиями обозначен несимплициальный полиэдр Делоне, сплошными линиями — ребра многогранников Вороного, сходящиеся в общую вершину d.

Итак, можно говорить о едином разбиении *Вороного—Делоне*, в котором мы видим одновременно мозаику как многогранников Вороного, так и симплексов Делоне (рис. 14).

Заметим, что взаимная однозначность справедлива в общем случае и для вырожденных систем. Многогранники Вороного атомов, составляющих несимплициальный полиэдр Делоне, также сходятся в общую вершину, являющуюся центром описанной сферы этого несимплициального полиэдра (рис. 15). Верно и обратное, каждая вершина разбиения Вороного есть центр описанной сферы некоторого полиэдра Делоне.

2.3.2. Соответствие между элементами мозаик Вороного и Делоне

Обозначим цифрами 3, 2, 1, 0 соответственно: многогранники, грани, ребра и вершины, т.е. объекты соответствующих размерностей, а индексами V и D будем указывать, относятся они к многограннику Вороного или к симплексу Делоне. Тогда соответствие между разбиением Вороного и Делоне можно обозначить следующим образом:

$$3_D \leftrightarrow 0_V\ , \qquad (1)$$

$$2_D \leftrightarrow 1_V\ , \qquad (2)$$

$$1_D \leftrightarrow 2_V\ , \qquad (3)$$

$$0_D \leftrightarrow 3_V\ . \qquad (4)$$

Взаимосвязь (1) отражает тот факт, что каждый симплекс (многогранник мозаики Делоне) соответствует некоторой вершине мозаики Вороного, и обратно, каждая вершина многогранника Вороного соотносится с определенным симплексом Делоне. Соотношение (2) указывает, что каждая грань любого симплекса Делоне однозначно связана с ребром мозаики Вороного. Действительно, каждая грань симплекса Делоне определяется тройкой атомов, но та же самая тройка определяет канал Вороного, отрезком которого является данное ребро мозаики Вороного. Напомним, эти грани и ребра взаимно перпендикулярны, кроме того, ребро (или его продолжение) пересекает свою грань в точке, являющейся центром описанной окружности этой грани симплекса Делоне. Третье соотношение аналогично второму, но уже для граней многогранников Вороного и ребер симплексов Делоне. Каждое ребро мозаики Делоне соединяет пару геометрических соседей системы $\{A\}$, но та же самая пара определяет плоскость Вороного, на которой лежит соответствующая грань многогранника Вороного. Здесь также каждое ребро разбиения Делоне перпендикулярно плоскости своей грани многогранника Вороного, хотя точка пересечения ребра с плоскостью может как принадлежать грани, так и располагаться вне ее. Соотношение (4) говорит, что каждая вершина симплекса Делоне соотносится с некоторым своим многогранником Вороного. Вершина симплекса есть точка системы $\{A\}$, а каждая такая точка имеет свой многогранник Вороного. Построения, для которых справедливы соотношения (1) — (4), называются дуальными, и они являются в топологическом смысле эквивалентными.

2.4. Графы и сетки

Взаимное расположение элементов разбиения Вороного—Делоне можно рассматривать на языке графов. Графом называют упорядоченное, т.е. пронумерованное множество элементов (обычно называемых узлами), между которыми определена взаимосвязь (связность). Любые объекты разбиения Вороного—Делоне можно рассматривать как узлы некоторого графа, а связи между ними определять посредством других элементов. Примером тому являются уже упомянутые сетки Вороного и Делоне, узлами которых являются множества точек систем $\{D\}$ и $\{A\}$, а связность определяется смежностью граней симплексов или многогранников соответственно. Однако в качестве узлов можно выбрать, например, грани многогранников Вороного и определить связность между теми из них, которые имеют общее ребро. Аналогично, в качестве узлов можно использовать ребра многогранников, установив связи между ними через инцидентные вершины. Ясно, что все эти графы взаимосвязаны. Другое дело, что разные графы помогают наглядно отобразить или подчеркнуть разные топологические мотивы, содержащиеся в разбиении Вороного—Делоне.

С физической точки зрения интерес представляют именно сетки Вороного и Делоне. Во-первых, они естественны для восприятия, во-вторых, кроме топологии (связности узлов) содержат полезную метрическую информацию. Любой узел этих графов есть точка с определенными координатами, а каждая связь есть отрезок конкретной длины и направления. Ввиду важности этих сеток для приложений резюмируем их свойства.

Сетка Вороного системы $\{A\}$ определяется вершинами и ребрами всех многогранников Вороного этой системы.

1. Сетка Вороного совершенна, т.е. у нее нет ни разрывов, ни "мертвых концов". Это следует из теоремы 1, где доказано, что многогранники Вороного смежны по целым граням, а следовательно, и по ребрам.

2. В каждый узел сетки Вороного невырожденных систем сходится ровно по четыре связи. Это прямое следствие того, что в трехмерном пространстве в каждую вершину разбиения Вороного сходится ровно по четыре многогранника Вороного.

3. Каждому узлу сетки Вороного соответствует свой симплекс Делоне, причем узел является центром описанной вокруг этого симплекса сферы. Важное значение этого свойства в том, что оно позволяет однозначно приписывать узлам сетки Вороного какую-либо меру (физическую или геометрическую), характеризующую симплексы Делоне изучаемой системы.

4. Каждая связь сетки Вороного, соединяющая два узла, означает, что симплексы Делоне, соответствующие этим узлам, имеют общую грань. Эта связь является отрезком канала Вороного тройки точек системы $\{A\}$, образующих данную грань.

Сетка Делоне системы $\{A\}$ определяется вершинами и ребрами всех симплексов Делоне системы.

1. Сетка Делоне совершенна. Как и в случае с сеткой Вороного, она не имеет "мертвых концов". Это следует из теоремы 2, где доказано, что симплексы в мозаике Делоне смежны целыми гранями.

2. В каждый узел сетки Делоне сходится число связей, равное числу граней многогранника Вороного этого узла. Заметим, что в узлы сетки Делоне может сходиться различное число связей. Сетка Делоне состоит исключительно из трехчленных колец, коими являются грани симплексов.

3. Каждому узлу сетки Делоне соответствует определенный многогранник Вороного. Это дает возможность однозначно приписывать узлам сетки Делоне какую-либо меру (физическую или геометрическую), вводимую для характеристики многогранников Вороного или самих атомов изучаемой системы.

4. Каждая связь сетки Делоне, соединяющая два узла, означает, что многогранники Вороного, соответствующие этим узлам, имеют общую грань. Соответствующие узлы называются геометрическими соседями.

3. СИСТЕМА ОДИНАКОВЫХ ШАРОВ

Рассмотрим ансамбль шаров одинакового радиуса R_A. Будем считать, что центры наших шаров образуют систему $\{A\}$, о которой мы говорили в предыдущем разделе. Для простоты дополнительно предполагаем, что она невырожденная. Такое допущение, как обсуждалось, не является принципиальным для физической стороны проблемы. В остальном система шаров может быть произвольной: плотной или рыхлой, упорядоченной или нерегулярной. Шары могут быть как неперекрывающимися (твердыми), так и перекрывающимися. Для первых центры не могут лежать ближе чем на расстоянии $2R_A$ друг от друга, для вторых допускается сближение на меньшее расстояние. Однако всегда будем считать, что поверхности шаров непроницаемы для пробных частиц, помещаемых в систему.

3.1. *S*-построения Вороного—Делоне

При переходе от системы точек к системе шаров возникает необходимость учитывать поверхности шаров. В связи с этим нужно уточнить понятие области, ближайшей к данному шару. Фактически мы имеем теперь две возможности для измерения расстояния от точки пространства до шара: первая — до центра, вторая — до поверхности. В первом случае мы остаемся в рамках ранее рассмотренной системы дискретных точек, однако во втором случае возникает новое построение.

Определим *S-область Вороного* некоторого шара в системе шаров как область пространства, все точки которой ближе к *поверхности* данного шара, чем к *поверхностям* других шаров этой системы. Также можно говорить об *S-поверхности Вороного*, точки которой лежат на одинаковом расстоянии от поверхностей двух шаров, и об *S-канале Вороного*, точки которого равноудалены от поверхностей заданной тройки шаров. Четверка шаров, между которыми вписалась пустая сфера, определяет *S-симплекс Делоне*. Центры этих шаров служат вершинами S-симплекса.

В общем случае для шаров разного радиуса S-построения Вороного существенно отличаются от обычных, построенных для центров тех же шаров. Об этом мы будем подробно говорить в следующем разделе. Однако для шаров одинакового радиуса они тождественно совпадают. Поэтому здесь, имея дело с одинаковыми шарами, мы не акцентируем внимание на S-построениях, а работаем с обычным разбиением Вороного—Делоне.

3.2. Предварительные геометрические утверждения

Подходы к описанию межшарового пространства мы покажем на системе твердых шаров, а особенности, характерные для перекрывающихся, рассмотрим затем отдельно. Приведем сначала некоторые полезные для нас геометрические утверждения.

Утверждение 1. Пусть точка p есть произвольная точка пространства, лежащая вне шара. Утверждается, что ближайшая к ней точка s поверхности шара расположена на прямой, соединяющей данную точку p с центром шара.

Здесь достаточно напомнить, что плоскость P, касающаяся шара в точке s, перпендикулярна радиусу шара, проведенному в эту точку, и, следовательно, отрезку ps, который является продолжением радиуса. Точка s самая близкая к p из всех точек данной плоскости, а следовательно, и шара, который целиком располагается за ней (рис. 16, *а*). Заметим, что данное утверждение верно только для шара. Для тел другой формы это утверждение в общем случае не выполняется (рис. 16, *б*).

Утверждение 2. Пусть плоскость P_{12} есть плоскость Вороного точек o_1 и o_2, являющихся центрами шаров одинакового радиуса. Утверждается, что все точки этой плоскости лежат на одинаковом расстоянии от поверхностей данных шаров.

В самом деле, пусть точка p есть произвольная точка данной плоскости, а прямые, соединяющие ее с центрами шаров, пересекают их поверхности в точках s_1 и s_2 (рис. 17). Если расстояния po_1 и po_2 равны по условию и радиусы

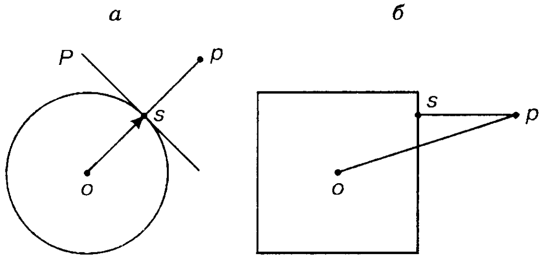

Рис. 16. Точка s поверхности шара, ближайшая к данной точке p, лежит на прямой, соединяющей точку p с центром шара o (*а*). Для тел другой формы это неверно (*б*).

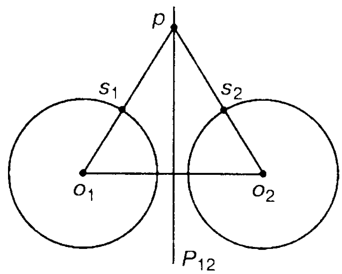

Рис. 17. Каждая точка p плоскости Вороного P_{12}, построенная для центров o_1 и o_2 шаров равного радиуса, лежит на одинаковом расстоянии от поверхностей этих шаров: $ps_1 = ps_2$.

шаров одинаковы, то в силу утверждения 1 имеем $ps_1 = ps_2$. Другими словами, плоскость P_{12} является S-плоскостью Вороного данной пары шаров. Отметим также, что все точки каждого полупространства ближе к поверхности своего шара, чем к поверхности другого. Это утверждение 2 доказывает тождественность плоскости Вороного и S-поверхности Вороного для пары одинаковых шаров.

Утверждение 3. Пусть C_{123} есть канал Вороного точек o_1, o_2, o_3, являющихся центрами шаров одинакового радиуса. Утверждается, что каждая точка p этого канала лежит на одном и том же расстоянии от поверхностей данных шаров.

Здесь достаточно повторить рассуждения, приведенные для доказательства предыдущего утверждения. Таким образом, канал Вороного тройки центров шаров является одновременно S-каналом этих шаров. При этом нетрудно убедиться, что остаются в силе все свойства канала Вороного, отмеченные в 2.1.1.

Утверждение 4. Пусть точка d есть центр сферы, описанной вокруг центров четверки шаров одинакового радиуса. Утверждается, что данная точка d является центром сферы, вписанной между этими шарами.

Справедливость этого опять же следует из того, что точки касания вписанной сферы с поверхностями шаров лежат на прямых, соединяющих точку d с их центрами. Для величины радиуса вписанной сферы R_i можем написать выражение $R_i = R_{DS} - R_A$, где R_{DS} есть радиус описанной вокруг центров сферы, а R_A — радиус шара (рис. 18).

Рассмотренных утверждений вполне достаточно, чтобы не сомневаться в тождественном совпадении S-разбиения и обычного разбиения Вороного—Делоне для центров шаров той же системы.

Для исследования межшарового пространства можно вновь использовать наглядный образ пустого шара Делоне. Будем здесь называть его пустой сфе-