ральную плоскость шаров, определяющих эту связь, то радиус прохода связи лежит на точке пересечения связи с этой плоскостью. Если же связь не пересекает центральную плоскость, то радиус прохода связи определяется радиусом канала Вороного на конце этой связи (радиусом интерстициальной сферы на одном из узлов, которые эта связь соединяет). Здесь имеет место полная аналогия с тем, как определялся радиус прохода связи для одинаковых шаров (см. 3.3.2).

Важным моментом является то, что S-сетка Вороного исчерпывает траектории, по которым можно перемещать зонд предельного размера. Другими словами, если между двумя далекими узлами S-сетки Вороного невозможно передвинуть зонд заданного радиуса, двигаясь по какой-то цепочке связей, то не существует никакого другого пути внутри этой системы шаров, по которому удалось бы переместить зонд между указанными узлами. Это следует из того, что траектория, проходящая не по связи, а следовательно, где-то внутри S-области Вороного, не может лимитировать движение зонда предельного размера. Действительно, здесь мы всегда находимся ближе к одному шару, чем к другим шарам системы. Это означает, что в окрестности такой точки всегда может поместиться зонд большего радиуса, чем тот, центр которого лежит на нашей траектории, а поверхность уже уперлась в ближайший шар. Проще говоря, если мы двигаем зонд большего радиуса, чем минимальное расстояние от траектории до поверхности шара, то в критический момент имеется возможность сойти с траектории и все-таки провести зонд вперед. То же самое можно сказать про траекторию, проходящую по грани S-области. Там тоже есть возможность зонду "отодвинуться" от пары шаров. Реальное узкое горло создают только три шара. Размер перемещаемого зонда лимитируется величиной радиуса S-канала Вороного. Поэтому анализ именно S-сетки Вороного позволяет судить о возможных перемещениях зонда предельного размера внутри системы $\{B\}$.

Проведенными рассуждениями мы фактически обобщили теорему о глобальном перемещении на системы шаров разного радиуса. Резюмируя, можно сказать: *навигационной картой системы шаров является ее S-сетка Вороного.*

5. СИСТЕМА ВЫПУКЛЫХ ТЕЛ НЕСФЕРИЧЕСКОЙ ФОРМЫ

S-область Вороного можно, очевидно, определить не только для шаров, но и для систем тел совершенно произвольной формы. Действительно, для любого тела в системе каких-либо других тел всегда можно говорить об области пространства, ближайшей к поверхности данного тела. В общем случае S-области могут быть весьма сложного строения и обладать необычными свойствами. Однако если ограничиться только выпуклыми телами, то, несмотря на кажущуюся безнадежность проблемы, удается сделать интересные обобщения, более того, использовать их для практической работы, например, для исследования структуры пор в системах прямых линий или цилиндров.

5.1. Обобщения разбиения Вороного

С математической точки зрения, переход от системы точечных центров к ансамблю других объектов — это некоторое обобщение разбиения Вороного. В данном случае нас интересует вполне конкретное обобщение, где расстояние от точки p пространства измеряется до поверхности объекта, причем с помощью обычной декартовой меры. Между тем в математике известно множество самых различных обобщений, многие из которых могут иметь отношение к физике или другим естественным наукам только в очень далекой перспективе.

5.1.1. Математический взгляд на обобщения

Подробные обсуждения и обзор большого количества математических работ об обобщениях разбиения Вороного имеются в книге [2]. Проблема рассматривается в самом общем виде. Действительно, пусть в пространстве любой размерности m, эвклидовом или искривленном, существует ансамбль дискретных объектов $\{O\}$. Задача состоит в том, чтобы "приписать" каждую точку пространства к своему объекту O_i. Для этого достаточно ввести "правило приписки" (assignment rull) $\delta(p,O_i)$. Из бесконечного разнообразия всевозможных правил математики предлагают иметь дело только с теми, которые удовлетворяют следующим свойствам: 1) каждая точка p приписана хотя бы к одному объекту и 2) множество точек, принадлежащих общей границе обобщенных областей Вороного двух объектов, должно представлять множество размерности $m-1$, общей границе трех областей — размерности $m-2$, и так далее. Первое требование весьма общее и выполняется для всех разумных правил приписки δ. Второй пункт кажется на первый взгляд сложным для понимания, однако, говоря простым языком, он означает, что все элементы границ обобщенных областей Вороного не должны быть "толстыми". Это требование также всегда выполняется для любых естественных обобщений.

Основной путь для вариации правила приписки δ — использование различных способов для определения "расстояния" $\delta(p,O_i)$ между точкой пространства p и объектом системы O_i. В простейшем случае, если объект тоже точка (центр), в качестве такой меры используются различные функции от декартовой меры расстояния между точкой p и данным центром или, напротив, какие-либо недекартовы меры для расстояния. Такое обобщенное "расстояние" называют *Voronoi generation distance* (мера для генерации областей Вороного). В случае протяженных объектов (линий, тел) обычно ограничиваются только декартовой мерой, но в качестве меры генерации области Вороного используют, как и мы, минимальное расстояние от точки p до точек, составляющих объект O_i. Для трехмерных тел это, разумеется, точки поверхности, для линии — все точки линии. С помощью заданной меры определяются полупространства, относящиеся (приписанные) к двум центрам O_i и O_j (dominance regions). Обоб-

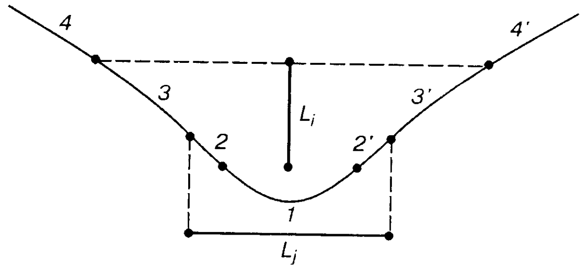

Рис. 51. Линия, разделяющая плоскость между двумя отрезками прямых L_i и L_j. Участки *1*, *3* и *3'* являются кусками параболы (между точкой и прямой). Участки *2* и *2'* — прямые (биссектриса между прямыми). Участки *4* и *4'* тоже прямые, но теперь они делят плоскость между точками на концах отрезков. Рисунок из работы [35].

щенная область Вороного получается опять же как пересечение всех таких полупространств центра O_i относительно всех других объектов системы.

Много работ посвящено исследованию областей Вороного для отрезков прямых на плоскости. На рис. 51 показана линия Вороного (bisector), разделяющая плоскость между двумя отрезками прямых. Интересно отметить, что уже для таких простых объектов эта линия состоит из кусков различного функционального вида. Действительно, участок *1* представляет собой параболу (линия Вороного между точкой и прямой). На этом участке пустая сфера Делоне касается конечной точки отрезка L_i и внутренних точек отрезка L_j. Участки *2* и *2'* — прямые, это просто биссектриса между нашими отрезками, пустая сфера здесь скользит по внутренним точкам обоих отрезков. Участки *3* и *3'* опять параболические, здесь пустая сфера касается уже конца отрезка L_j и внутренних точек L_i. Наконец, участки *4* и *4'* снова прямые, но теперь они делят плоскость между точками на концах отрезков.

Важным моментом здесь является то, что эти отрезки гладко переходят друг в друга. Заметим, что и для трехмерного случая *S*-поверхность несферических тел состоит (кроме редких исключений) из кусков различного функционального вида. При этом она также всегда остается гладкой. Ниже мы еще вернемся к этому полезному факту.

5.1.2. Медиальные оси

Существует другая задача, где используются методы, близкие к нашему. Изучается геометрическое место точек, равноудаленных от границ объекта заданной формы. Здесь имеют дело, например, с полостью внутри сплошной среды или, наоборот, с доменом определенной формы. Для полости (домена) строятся так называемые медиальные оси (medial axis). В нашей терминологии это траектория, описываемая пустой сферой Делоне, перемещаемой внутри объекта, касаясь его поверхности. Имея медиальные оси, нетрудно восстановить форму данного тела, а это означает, что мы получаем возможность экономно хранить информацию о форме объекта (механической детали, например) в памяти

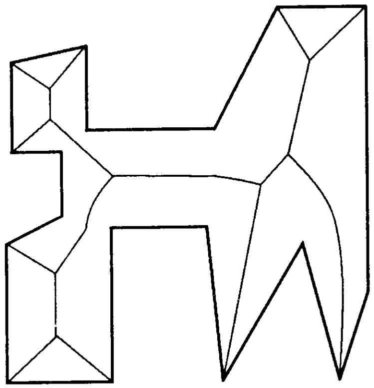

Рис. 52. Медиальные оси для объекта сложной формы. Центр пустой сферы Делоне, касающейся границ объекта, перемещается вдоль этих осей. Рисунок из книги [2].

компьютера (см. [2, 13]). На рис. 52 показаны тело сложной формы и медиальные оси внутри него.

5.1.3. Модель Джонсона—Мэла

Джонсон и Мэл в 1939 году предложили простую модель гомогенной нуклеации, которая приводит к различным типам разбиения пространства на ячейки [36]. Процесс возникновения зерен новой фазы в случае, например, кристаллизации переохлажденной жидкости или превращения аморфной фазы в кристаллическую может быть описан следующим наглядным образом. Предполагается, что зародыши новой фазы возникают независимо в различных местах образца и в случайные моменты времени. Возникнув, зародыш начинает расти. В простейшем случае предполагается, что его рост идет с постоянной скоростью v в радиальном направлении. Если два зерна встретились своими поверхностями, то их движение навстречу друг другу прекращается, но рост продолжается в других направлениях. Такой процесс продолжается, пока новая фаза не заполнит все пространство. На рис. 53 показаны последовательные этапы роста зерен (ячеек Джонсона—Мэла).

Эта модель успешно используется и в наше время. Сейчас ее называют моделью JMAK (Johnson—Mehl—Avrami—Kolmogorov model), дополняя физическую идею и первые формулы Джонсона и Мэла [36] достижениями Аврами и фундаментальными математическими результатами Колмогорова (см. работы [37—39] и ссылки в них). Основная цель этой модели — расчет зависимости объемной доли новой фазы от времени. Эта задача далеко не простая из-за влияния растущих зерен друг на друга. Однако для нас представляет интерес другой аспект модели, а именно мозаика зерен, получившаяся после полного завершения фазового перехода. Здесь могут получаться весьма различные разбиения. Этой задачей и ее обобщениями занимаются математики (см., например, [40—43], а также [2]). В общем случае финальные ячейки в мозаике могут иметь сложную, необычную форму, особенно если не ограничиваться постоянной скоростью роста зерен. Однако в простейших случаях мозаика Джонсо-

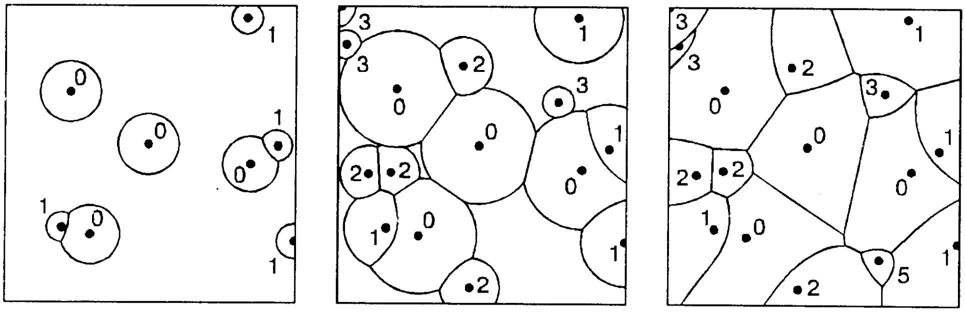

Рис. 53. Последовательные этапы роста зерен новой фазы в процессе Джонсона—Мэла. Точками и цифрами показаны местоположения и моменты времени возникновения зародышей. Зерна не перекрываются, а их скорость роста постоянна в радиальном направлении. Рисунок из книги [2].

на—Мэла превращается в знакомые разбиения. Легко убедиться, что в случае одновременного появления всех зародышей ($t_i = 0$, для всех i) и постоянной скорости роста v получается обычное разбиение Вороного для системы точек, на которых возникли зародыши зерен.

Если же появление зародышей растянуто во времени (каждый имеет свое время рождения t_i), то тогда получается уже знакомое нам S-разбиение Вороного некоторой системы шаров разного радиуса. Действительно, пусть два соседних зерна i и j зародились в моменты времени t_i и t_j. Расстояние от произвольной точки p на поверхности контакта этих зерен до центра i записывается как $r_i = v(t - t_i)$, а до центра j как $r_j = v(t - t_j)$. Здесь t — момент времени, когда произошел контакт зерен в точке p. Разность этих расстояний,

$$r_i - r_j = v(t_j - t_i)$$

не зависит от t, а следовательно, выбора точки p. Другими словами, разность расстояний от произвольной точки поверхности контакта до двух заданных точек является константой, а это, как мы знаем, означает, что такое геометрическое место точек является гиперболой (гиперболоидом) (см. 4.2.1). Таким образом, ячейки Джонсона—Мэла представляют собой S-разбиение системы шаров, имеющих радиусы $R_i = vt_i$.

Видно, что обсуждаемые математиками различные законы, генерирующие последовательность возникновения зародышей, приводят, на нашем языке, к различным дисперсным составам системы шаров $\{B\}$. (О закономерностях расположения зародышей в пространстве математики не говорят, подразумевая всегда, что их распределение случайное.) Допущение о том, что скорость роста зародышей зависит от времени или различна для разных зерен, приводит, как уже отмечалось, к новым типам разбиений.

5.2. Разбиение Вороного системы выпуклых тел

Продолжим обсуждение обобщения разбиения Вороного—Делоне, ориентируясь на физико-химические приложения. Переходя к системе несферических частиц, мы ограничиваемся выпуклыми телами. Они обладают геометрическим свойством, существенным для нашего анализа, а именно: расстояние от любой точки пространства до поверхности выпуклого тела однозначно определенно. Этого условия достаточно, чтобы разбиение Вороного, а вместе с ним и сетка Вороного такой системы тел существовали и удовлетворяли необходимым для наших применений свойствам. Анализ системы невыпуклых тел представляется значительно более сложным. На рис. 54, *а* показан пример невыпуклого тела. Видно, что для некоторых точек пространства может существовать несколько ближайших точек на таком теле. Пустая сфера может касаться его более чем в одной точке. *S*-сетка Вороного системы таких тел имеет "мертвые" концы, входящие внутрь выемки невыпуклого тела (рис. 54, *б*). Заметим, что точки разветвления на канале Вороного здесь не являются узлами сетки Вороного в нашем смысле, а представляют изломы на канале Вороного.

5.2.1. Предварительные геометрические замечания

Для практической работы удобно определить *функцию расстояния* $d_i(\mathbf{r})$, которая для любой точки пространства p с координатами $\mathbf{r}$ задает *минимальное расстояние* от этой точки до поверхности заданного объекта i. Для тел простой формы эта функция выписывается с помощью формул аналитической геометрии. Например, для шара радиуса R_i мы имеем $d_i(\mathbf{r}) = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| - R_i$, где $\mathbf{r}_i$ — координаты центра шара. Для выпуклых тел, как отмечалось, функция расстояния однозначна для любой точки пространства вне тела. Другое важное свойство функции расстояния в том, что она дифференцируема [44, 45]. Ее производную

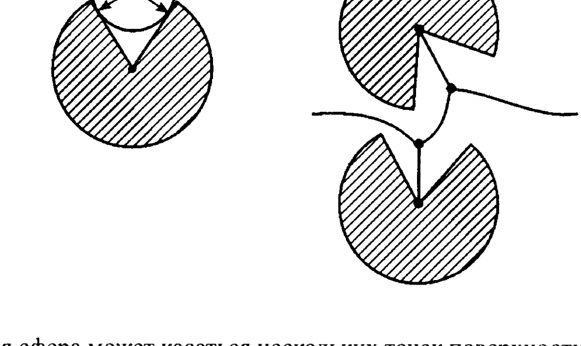

Рис. 54. Пустая сфера может касаться нескольких точек поверхности невыпуклого тела одновременно (*а*). Фрагмент *S*-сетки Вороного между невыпуклыми телами; имеются тупиковые концы, идущие внутрь выемки, и изломы на канале Вороного (*б*).

можно вычислять по всем координатам в любой точке пространства. Это свойство кажется очевидным для гладких тел типа шара, однако оно справедливо и для тел с острыми ребрами и вершинами, например для полиэдров, отрезков прямых и т.п. Следствием этого свойства функции расстояния является дифференцируемость поверхностей и каналов Вороного (см. ниже). Последний факт будет принципиален для нас, так как он позволяет применить метод инфинитезимальных смещений в алгоритме расчета сетки Вороного.

Рассмотрим наши основные геометрические построения. Для простоты не будем больше использовать букву S в их названиях. Ранее это было нужно, чтобы подчеркнуть разницу между конструкциями, построенными относительно поверхностей или центров шаров. Теперь, работая с несферическими телами, в этом нет необходимости, так как здесь работа идет только с S-построениями.

Поверхность Вороного $F_{ij}(\mathbf{r})$ определяется как геометрическое место точек, равноудаленных от поверхностей двух тел i и j. Она задается, очевидно, уравнением $d_i(\mathbf{r}) = d_j(\mathbf{r})$. Для пары бесконечных прямых линий, например, можно убедиться, что это гиперболический параболоид, конкретный вид которого зависит от взаимного расположения линий. Напомним, что пустая сфера, касающаяся одновременно двух тел, лежит своим центром на поверхности Вороного.

Канал Вороного $C_{ijk}(\mathbf{r})$ — это геометрическое место точек, равноудаленных от трех тел. Он, очевидно, задается системой уравнений $d_i(\mathbf{r}) = d_j(\mathbf{r}) = d_k(\mathbf{r})$ и представляет собой линию в пространстве, которая есть пересечение поверхностей Вороного соответствующих тел. Центр пустой сферы, касающейся своей поверхностью одновременно трех тел, находится на канале Вороного. При движении такой сферы ее центр скользит по каналу Вороного данной тройки тел.

Узел Вороного D_{ijkl} есть точка, равноудаленная от четырех тел. Он является центром пустой сферы, вписанной между данной четверкой тел. Выпуклые тела определяют по одной точке на этой сфере, т.е. четырьмя точками касания определяют сферу однозначно.

Заметим, что в случае одинаковых шаров узел Вороного единственный для данной четверки шаров. В общем случае их может быть несколько. Уже для шаров разного радиуса, как обсуждалось, их может быть два. Для тел другой формы их может быть еще больше. Этот момент не так принципиален для развития концепции навигационной карты, но приводит к тому, что понятие симплекса Делоне теряет однозначность.

Область Вороного есть область пространства, ближайшая к данному телу. Грани области Вороного образуются кусками поверхностей Вороного, ребра — это отрезки каналов Вороного, а вершины — узлы Вороного. Каждая область Вороного является кирпичиком *разбиения Вороного* данного ансамбля. На рис. 55 показана область Вороного для сфероцилиндра, расположенного внутри неупорядоченной изотропной упаковки сфероцилиндров, изучаемой в нашей работе [46].

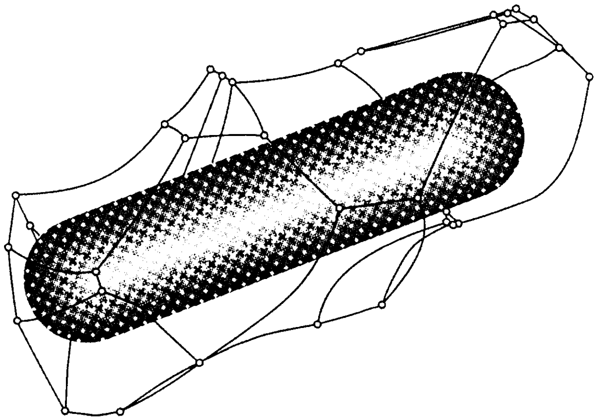

Рис. 55. Область Вороного для сфероцилиндра внутри неупорядоченной системы сфероцилиндров.

5.2.2. О разбиении Вороного системы выпуклых тел

Сформулируем основное утверждение о разбиении Вороного для общего случая выпуклых тел. Мы не приводим полного доказательства этого утверждения, поскольку это требует скрупулезной математической работы, а ограничимся только разумными доводами в его пользу, не сомневаясь в его справедливости.

ТЕОРЕМА 6. *Области Вороного произвольной системы выпуклых тел не входят друг в друга и заполняют пространство, будучи смежными по целым граням. Разбиение пространства на области Вороного однозначно определяется заданной системой и, наоборот, однозначно ее определяет.*

Первый этап доказательства этой теоремы можно провести так же, как для соответствующей теоремы для системы точечных центров или шаров. Там совсем не используется тот факт, что мы имеем дело именно с шарами. Важна только однозначность расстояния от любой точки пространства до поверхности любого объекта системы. Все выпуклые тела, как это подчеркивалось выше, удовлетворяют этому условию.

Однако на этапе доказательства смежности по целым граням областей Вороного имеются различия. Напомним, смежность по целым граням многогранников Вороного вытекала из того, что две плоскости Вороного совпадают полностью, если имеют общий кусок (для совпадения плоскостей достаточно иметь три общих точки). Аналогично было для гиперболоидов Вороного, для совпадения поверхностей второго порядка достаточно девяти общих точек. В случае произвольных выпуклых тел факт совпадения поверхностей Вороного по их общей части, по-видимому, никем не исследовался. Это не простой момент, так как мы знаем, что поверхности Вороного в общем случае могут состоять из частей разного функционального вида.

5.2.3. Сетка Вороного системы выпуклых тел

Принимая справедливость теоремы 6 о разбиении Вороного системы произвольных выпуклых тел, мы допускаем существование его сетки Вороного — сетки всех ребер и вершин областей Вороного в разбиении Вороного данного ансамбля. На рис. 56 показана сетка Вороного для системы двумерных сфероцилиндров.

Сетка Вороного в общем случае также выполняет роль навигационной карты пустого пространства внутри системы произвольных выпуклых тел. Тот факт, что сетка Вороного лежит в глубине пустого пространства, следует непосредственно из определения области Вороного. Действительно, если мы сместимся со связи сетки, которая есть не что иное, как общее ребро смежных областей Вороного, то мы попадаем внутрь одной из областей Вороного и, по определению, окажемся ближе к этому телу. В этом смысле связь сетки Вороного опять является “фарватером” между двумя соседними узлами.

Обратим вновь внимание на возможность сетки Вороного общего случая быть неодносвязной. Такое отмечалась для системы шаров, сильно различающихся по размеру, при их специальном расположении (см. 4.3.1). К счастью, большинство исследуемых в физике объектов дают односвязные сетки Вороного. Наш опыт расчетов позволяет думать, что сетка Вороного является односвязной для достаточно однородных систем выпуклых тел простой формы (прямые линии, цилиндры).

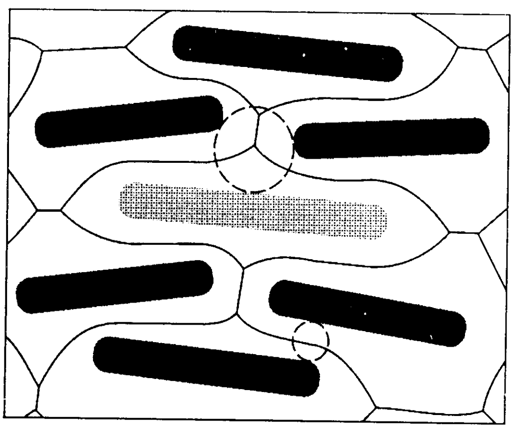

Рис. 56. Двумерная иллюстрация разбиений Вороного для системы сфероцилиндров. Область Вороного для центрального тела обведена жирной линией. Сетка Вороного лежит в глубине пустого пространства между телами. Каждый узел сетки Вороного является центром вписанной (интерстициальной) сферы. Каждая связь сетки Вороного является фарватером на пути между соседними узлами. Она характеризуется своим радиусом узкого горла (на рис. показаны штриховыми окружностями).