

лами ее могут служить либо оба решения сразу, либо одно, или же оба действительных решения не дают узлов. Однако это все устанавливается на этапе обычной проверки, является ли найденный центр интерстициальной сферы смежным узлом к известному узлу S -сетки Вороного.

На первом шаге определяется стартовый узел S -сетки Вороного, что не представляет большой проблемы. Основным этапом является нахождение узлов, смежных к данному. Эта работа продолжается до тех пор, пока не будут найдены все узлы S -сетки. Правило, по которому находится смежный узел, то же самое. Пусть известный узел S -сетки Вороного соответствует шарам $i_\alpha, i_\beta, i_\gamma, i_\delta$. Требуется найти новый узел, который будет смежным ему по грани S -симплекса $i_\beta, i_\gamma, i_\delta$, т.е. смежный узел на S -канале данной тройки шаров. Для этого надо перебрать шары системы и выбрать тот шар i_η , который, совместно с шарами i_β, i_γ и i_δ , дает интерстициальную сферу с центром, лежащим к известному узлу на минимальном расстоянии вдоль данного S -канала. Отсюда уже видно, что наш алгоритм формирует только односвязную сетку. Изолированные части S -сетки Вороного просто не будут найдены.

Для несвязных систем можно предложить другой алгоритм, в котором вычисляются сами S -области Вороного. Подчеркнем, что в отличие от S -сетки Вороного мозаика S -областей Вороного всегда односвязная, они всегда заполняют пространство без щелей, а несвязность S -сетки обусловлена специфическим строением некоторых S -областей Вороного.

Для такого алгоритма можно использовать идеологию “метода обхода граней”. Укажем на главные моменты реализации такого подхода. Во-первых, нахождение вершин S -областей Вороного здесь также сведется к решению вышеприведенной системы уравнений. Другим нетривиальным моментом, усложняющим вычисление, является то, что расстояния между точками на S -канале или на грани S -области Вороного следует, строго говоря, измерять вдоль канала или по поверхности грани, т.е. по кривой линии. Правда, эту сложность для большинства реальных систем можно не принимать во внимание и измерять расстояния между точками по прямой линии.

6.5. Решение трехмерной задачи Аполлония

Покажем, как вписать сферу между четверкой произвольных шаров. Эта задача является обобщением на трехмерное пространство известной в математике задачи Аполлония, сформулированной более двух тысяч лет назад: вписать окружность между тремя произвольными окружностями на плоскости [62]. В двумерном случае эта задача решена различными способами. Наиболее известное ее применение — построение упаковки Аполлония — покрытие плоскости кругами подходящего радиуса путем последовательного вписывания новых кругов в свободные места между уложенными. Решением трехмерной задачи в общем случае математики, по-видимому, не занимались. Действительно, в пространстве упаковка Аполлония не столь наглядна как на плоскости, кроме

того, для работы с ней необходимы компьютеры, а они появились сравнительно недавно.

Итак, нас интересует только действительное решение системы (1), причем с положительным значением R . Отрицательное R соответствует, как не трудно сообразить, описанной касательной сфере (включающей в себя все шары данной четверки). Раскрывая квадраты в (1) и вычитая одно уравнение, например четвертое из трех других, мы получим систему линейных уравнений для x, y, z

$$(x_4 - x_i)x + (y_4 - y_i)y + (z_4 - z_i)z = (R_i - R_4)R + U_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Здесь $U_i = R_i^2 - x_i^2 - y_i^2 - z_i^2$ представляют собой выражения, не содержащие неизвестных переменных. Если детерминант этой системы Det не равен нулю, то полученная система (2) имеет определенное решение, которое выписывается в явном виде:

$$x = \frac{A_1 R + B_1}{\text{Det}}, \quad y = \frac{A_2 R + B_2}{\text{Det}}, \quad z = \frac{A_3 R + B_3}{\text{Det}}. \quad (3)$$

Выражения A_1, A_2, A_3 и B_1, B_2, B_3 зависят только от исходных значений координат центров и радиусов данной четверки шаров. Теперь можно подставить это решение (3) в четвертое уравнение системы (1). В результате получим квадратное уравнение для неизвестного R :

$$ER^2 + 2GR + F = 0. \quad (4)$$

Коэффициенты E, G и F также зависят только от исходной четверки шаров. Они представляют собой весьма громоздкие выражения, если пытаться выразить их через x_i, y_i, z_i и R_i . К счастью, при работе на компьютере это не нужно делать. Найденные коэффициенты можно выразить и вычислить через выражения A_k и B_k ($k = 1, 2, 3$), которые в свою очередь вычисляются через U_i ($i = 1, 2, 3$).

Решение квадратного уравнения (4) дает явное выражение для R :

$$R = \frac{-G \pm \sqrt{G^2 - EF}}{E}.$$

Рассмотрим только действительные решения. Здесь возможны следующие варианты. Во-первых, корни уравнения могут иметь разные знаки. В этом случае имеется одно положительное решение для R . Подставляя его в (3), находим координаты центра единственной для данной четверки шаров интерстициальной сферы. Второй вариант — оба корня положительны. Это означает наличие двух разных интерстициальных сфер. Координаты центров каждой из них вычисляются опять же из (3) подстановкой своего значения R . Третий вариант — оба корня отрицательны. Это означает отсутствие интерстициальных сфер, зато

такая четверка шаров имеет две описанные сферы. Однако они не имеют для нас физического смысла.

Отметим интересное поведение решения при стремлении величины E к нулю. В этом случае у четверки шаров появляется общая касательная плоскость (радиус сферы R стремится к бесконечности). При вариации исходных параметров, приводящей к смене знака E , корни уравнения меняют знак, т.е. вписанные сферы превращаются в описанные и наоборот.

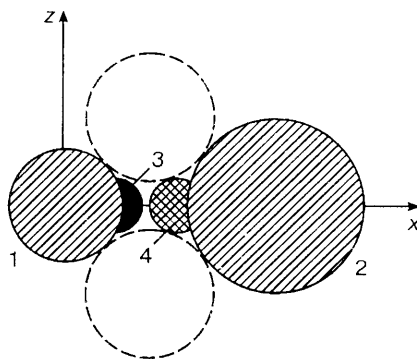
Наконец, если действительных корней нет (дискриминант уравнения отрицателен), то в этом случае нет ни описанных, ни вписанных сфер.

Итак, система (1) дает нам одно, два или ни одного физического решения. Это находится в соответствии с геометрическими представлениями о трех основных типах конфигураций четверок шаров, характеризующихся одной, двумя или ни одной интерстициальными сферами.

Полученное решение уже может использоваться для создания программы нахождения интерстициальных сфер для конфигураций, где можно пренебречь вероятностью расположения центров всех четырех шаров на одной плоскости. Именно в этом случае детерминант Det системы (2) оказывается равным нулю. Такая ситуация является вырожденной, но для устойчивой работы алгоритма полезно рассмотреть такую возможность. Более важным, однако, оказывается то, что такие четверки шаров разных радиусов имеют вполне определенные интерстициальные сферы. На рис. 61 показан пример такой конфигурации. Поэтому, если детерминант системы очень мал, следует предпринять специальные меры, чтобы не потерять физического решения системы (1).

Для решения этой задачи предлагается следующий простой и наглядный способ. Итак, пусть центры данной четверки шаров лежат на одной плоскости. В этом случае мы не можем воспользоваться решением (3), так как детерминант системы (2) равен нулю. Выбрав новые оси x и y , перейдем в новую систему координат, в плоскости которой лежат наши центры. Можно поступить так: начало новой системы координат поместить на центре шара 1, ось x направить на центр шара 2, а ось y ориентировать так, чтобы центр шара 3 лежал на плоскости xy (см. рис. 61). Центр шара 4 при этом также окажется на плоскости xy . Определившись с новой системой координат, можно выписать матрицу перехо-

Рис. 61. Выбор новой системы координат для вычисления интерстициальных сфер для случая, если детерминант системы уравнений (2) равен нулю (центры всех четырех шаров лежат на одной плоскости). Ось y направлена перпендикулярно к листу. Пунктиром изображены интерстициальные искомые сферы. Они имеют одинаковый радиус и расположены на равном расстоянии от плоскости xy .



да к новым координатам центров шаров, в результате система уравнений (1) примет следующий вид:

$$\begin{aligned} x^2 + y^2 + z^2 &= (R_1 + R)^2, \\ (x_2 - x)^2 + y^2 + z^2 &= (R_2 + R)^2, \\ (x_3 - x)^2 + (y_3 - y)^2 + z^2 &= (R_3 + R)^2, \\ (x_4 - x)^2 + (y_4 - y)^2 + z^2 &= (R_4 + R)^2. \end{aligned} \tag{5}$$

Теперь можно провести упрощающие преобразования системы (5). Избавляясь от переменной z и выражая из первого уравнения R через x , легко найдем, что решением данной системы уравнений являются две интерстициальные сферы одинакового радиуса, симметрично расположенные относительно плоскости центров шаров (см. рис. 61).

Однако и здесь возможна ситуация, когда детерминант системы (5) равняется нулю. Это будет означать, что какие-то три шара лежат своими центрами на одной прямой. Если же радиусы этих шаров различны, то и здесь имеются вполне определенные интерстициальные сферы. Чтобы не потерять и такого возможного физического решения, можно действовать аналогичным образом. Следует подобрать новую систему координат, выбрав ось x вдоль коллинеарной тройки шаров и чтобы шар 4 лежал в плоскости $xу$. Система уравнений, записанная с учетом специфики данной четверки шаров, будет иметь простой вид в новой системе координат и легко решается.

По опыту наших расчетов можно сказать, что в неупорядоченных системах практически не встречаются четверки шаров с центрами на одной плоскости или тройки на одной прямой. Однако в случаях работы с системами, в которых шары разные, а их центры образуют кристаллическую решетку, указанные уточнения решения системы (1) становятся принципиальными.

6.6. Построение сетки Вороного для произвольных выпуклых тел

Основная идея построения сетки Вороного для системы несферических тел та же, что и для системы шаров. Стартуя от известного узла, последовательно находятся новые узлы и определяются новые связи сетки Вороного. Такая работа продолжается до тех пор, пока мы не построим всю сетку.

Принципиальная особенность общего случая заключается в том, что теперь не удастся выписать аналитические формулы для расчета узлов сетки Вороного. Попытки получения такой формулы даже для простейших несферических тел — прямых линий, оказались безуспешными. Единственным путем решения проблемы остается численный поиск узлов и связей. Здесь мы предлагаем такой алгоритм, предложенный недавно в нашей работе [46].

6.6.1. Функция расстояния

Решение нашей задачи требует использования функции расстояния $d_i(\mathbf{r})$, заданной для каждого тела исследуемой системы (см. 5.2.1). Эта функция оп-

ределает минимальное расстояние от точки пространства с координатами \mathbf{r} до поверхности заданного объекта i . Она зависит не только от формы данного тела, но и от его положения и ориентации.

Основная специфика расчета сетки Вороного системы несферических тел определяется конкретным видом функции расстояния. Обсуждаемый ниже алгоритм является общим, применимым для любых функций расстояния. В частности, он может быть применен для работы с системами шаров и даже точечных центров. Приведем функции расстояния для основных тел простой формы. Для шара, напомним, функция расстояния записывается как

$$d_i(\mathbf{r}) = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i| - R_i,$$

где \mathbf{r}_i и R_i — координаты центра шара и его радиус.

Для бесконечных прямых линий функция расстояния выглядит сложнее. Прямую линию удобно представлять параметрически: $\mathbf{L}(t) = \mathbf{a} + \mathbf{n}t$, где \mathbf{a} и \mathbf{n} являются трехмерными векторами, удовлетворяющими условиям $|\mathbf{n}| = 1$ и $\mathbf{n} \perp \mathbf{a}$. В результате функция расстояния может быть записана так:

$$d(\mathbf{r}) = \{\mathbf{r}^2 + \mathbf{a}^2 - 2(\mathbf{r}, \mathbf{a}) - (\mathbf{r}, \mathbf{n})^2\}^{1/2}.$$

Поверхность Вороного для пары произвольно расположенных в пространстве прямых определяется уравнением $d_i(\mathbf{r}) = d_j(\mathbf{r})$ и для выписанной функции расстояния является гиперболическим параболоидом общего вида.

Физическим телесным объектом простейшей несферической формы является сфероцилиндр (цилиндр с полусферами на концах). Пространственное положение сфероцилиндра однозначно определяется координатами центров полусфер \mathbf{r}_α и \mathbf{r}_β . Для определения его толщины нужно еще добавить радиус ρ , общий для цилиндра и полусфер. В этих обозначениях функция расстояния записывается в виде:

$$d(\mathbf{r}) = \begin{cases} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha| - \rho, & \text{если } t < 0, \\ |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\alpha - \mathbf{n}t| - \rho, & \text{если } 0 \leq t \leq t_1, \\ |\mathbf{r} - \mathbf{r}_\beta| - \rho, & \text{если } t > t_1, \end{cases} \quad (6)$$

где $\mathbf{n} = (\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha) / |\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha|$, $t = (\mathbf{r}, \mathbf{n}) - (\mathbf{r}_\alpha, \mathbf{n})$ и $t_1 = |\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha|$. Если радиус нашего цилиндра стремится к нулю, то он превращается в отрезок прямой. Функция расстояния для такого отрезка выписана, например, в [2].

Отметим, что поверхность Вороного пары сфероцилиндров состоит из частей, представляющих следующие типы поверхностей второго порядка: 1) гиперболический параболоид (от пары цилиндров), 2) гиперболический цилиндр (от цилиндра и полусферы), 3) плоскость (от пары равных полусфер). Это означает, что связи сетки Вороного будут представлять собой линии весьма сложного функционального вида. Однако это не имеет для нас никакого значения.

Мы работаем численно. Главное для нас то, что каналы Вороного являются гладкими линиями для любых выпуклых тел.

6.6.2. Поиск первого узла

Нахождение первого, стартового узла сетки Вороного не представляет принципиальной проблемы. Это может быть любой узел сетки. Найти его можно, выбирая четверку ближайших тел и вычисляя для них центр пустой вписанной сферы. Для этого вводится функция $\Psi(\mathbf{r})$, имеющая нулевое значение на центре такой сферы:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{i_4 < j_4} \left(d_{i_4}(\mathbf{r}) - d_{j_4}(\mathbf{r}) \right)^2. \quad (7)$$

В суммировании участвуют только те четыре тела, которые являются ближайшими к точке \mathbf{r} . Искомый центр находится по процедуре градиентного спуска [63], в котором мы смещаем нашу точку в направлении, максимально уменьшающем значение функции $\Psi(\mathbf{r})$. При этом используемые соседи всегда должны быть ближайшими, т.е. при необходимости четверка должна изменяться.

Процедура останавливается, когда $\Psi(\mathbf{r}) < \delta^2$, где δ является параметром, характеризующим точность расчета сетки. Таким образом мы получаем первый узел сетки Вороного D_{ijkl} : его координаты, номера тел i, j, k, l , его определяющих, а также радиус интерстициальной сферы. Найденные значения начинают массивы D , DA и R_i .

6.6.3. Движение вдоль связи сетки Вороного

Пусть известный узел сетки Вороного задается четверкой тел i, j, k, l . Они определяют четыре различных тройки тел i, j, k ; i, j, l ; i, k, j ; j, k, l , каждая из которых задает свой канал Вороного. Стартуя из нашего узла и двигаясь, например, вдоль канала C_{ijk} , мы обязательно достигнем нового узла сетки, определяемого четверкой тел i, j, k, m , и тем самым определим связь сетки Вороного.

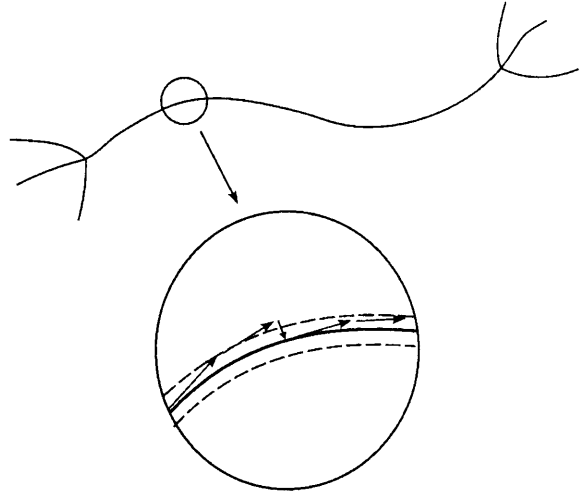
Движение вдоль канала Вороного осуществляется известным численным методом инфинитезимальных смещений. В этом методе находятся последовательные положения точки, удовлетворяющие системе уравнений

$$d_i(\mathbf{r}) = d_j(\mathbf{r}) = d_k(\mathbf{r}),$$

т.е. лежащих на канале Вороного заданной тройки тел. Делается это стандартным способом. На каждом шаге смещения вдоль канала вычисляется малый сдвиг \mathbf{v} . Этот вектор смещения определяет новое положение точки $\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{v}$, которая также должна лежать на канале, т.е. должна выполняться та же система уравнений

$$d_i(\mathbf{r} + \mathbf{v}) = d_j(\mathbf{r} + \mathbf{v}) = d_k(\mathbf{r} + \mathbf{v}).$$

Рис. 62. Иллюстрация процедуры движения вдоль канала Вороного для нахождения связи сетки Вороного.



Линейризуя ее в предположении малости вектора \mathbf{v} , получаем уравнение

$$(\nabla d_i, \mathbf{v})|_{\mathbf{r}} = (\nabla d_j, \mathbf{v})|_{\mathbf{r}} = (\nabla d_k, \mathbf{v})|_{\mathbf{r}}, \quad (8)$$

откуда сразу находится направление вектора \mathbf{v} . Длину вектора смещения можно брать произвольной, исходя из соображений необходимой точности и разумного времени расчета.

Во избежание накопления ошибки вычислений при движении вдоль связи нужно время от времени возвращать точку на канал Вороного. Это делается методом градиентного спуска для оценочной функции:

$$\Phi(\mathbf{r}) = (d_i(\mathbf{r}) - d_j(\mathbf{r}))^2 + (d_i(\mathbf{r}) - d_k(\mathbf{r}))^2 + (d_j(\mathbf{r}) - d_k(\mathbf{r}))^2.$$

Она принимает свое минимальное значение $\Phi = 0$ на канале Вороного. Если на каком-то шаге оказалось, что $\Phi > \delta^2$, то включаем процедуру градиентного спуска и возвращаем точку на канал. Рис. 62 иллюстрирует передвижение нашей точки при вычислении связи сетки Вороного.

Можно сказать, что такая процедура непосредственно реализует метод пустой сферы Делоне. Перемещение точки вдоль связи сетки моделирует движение центра сферы Делоне, поверхность которой находится в контакте с тремя телами.

6.6.4. Формирование сетки

Движение вдоль канала Вороного остановится в тот момент, когда наша сфера Делоне наткнется своей поверхностью на какое-то тело m данной системы, т.е. найдется тело, расстояние до которого от нашей точки окажется близким к расстояниям до используемой тройки тел. Это означает, что мы находимся в окрестности узла Вороного четверки i, j, k, m . Положение узла уточняется

методом градиентного спуска с использованием функции $\Psi(\mathbf{r})$. Теперь с помощью массивов D и DA остается установить, является этот узел новым или он уже определялся ранее. Если узел новый, то он записывается в указанные массивы, а его связность с исходным узлом указывается в массиве DD . При движении вдоль канала мы имеем значение радиуса канала на каждом шаге. Минимальное значение этого радиуса на связи задает радиус прохода (узкого горла) связи. Для его записи следует завести специальный массив R_b . Эти радиусы нужны для работы с сеткой Вороного в качестве навигационной карты для исследования пустого пространства в системе.

Найденный узел D_{ijkm} определяет свои каналы Вороного: C_{ijk} , C_{ijm} , C_{ikm} , C_{jkm} . Канал C_{ijk} между нашими узлами уже пройден. Три остальных канала являются новыми, их надо будет также пройти и определить на них новые узлы, смежные узлу D_{ijkm} . Продолжая такую процедуру, мы последовательно определим все узлы и связи сетки Вороного.

Итак, данный алгоритм выдает нам массивы, определяющие сетку Вороного и ее метрические свойства: массив D , содержащий координаты всех узлов, таблицу связностей узлов DD , задающую связи сетки Вороного, таблицу инцидентностей узлов и тел DA , радиусы интерстициальных сфер R_i и радиусы узких горл R_b . Кроме того, двигаясь шаг за шагом вдоль связей сетки Вороного, мы можем запомнить несколько последовательных точек на каждой связи с тем, чтобы иметь возможность изобразить сетку Вороного на рисунке.

В работе [46] были проведены тестовые расчеты сетки Вороного для систем сферических частиц с использованием различных алгоритмов. Это позволило сравнить данный алгоритм со специализированными для сфер. Расчеты показали, что общий алгоритм работает примерно в 20 раз медленней. Это понятно, так как основное время теперь тратится на вычисление последовательных точек при прохождении связей сетки Вороного, тогда как специализированные алгоритмы вычисляют узлы непосредственно, используя аналитические формулы, существующие для случая сферических частиц.