

ERRATUM

1. Correction to the paper:

N.N. Medvedev, V.P. Voloshin, V.A. Luchnikov, M. L. Gavrilova. "An Algorithm for Three-Dimensional Voronoi S-Network", Journal of Computational Chemistry, Vol. 27, No. 14, 1676-1692, 2006.

Section "Determination of the correct direction at Voronoi S-channel", p.1689

It was printed:

Let us draw vector l directed from this site to the fourth ball (l , in this example). If the scalar product of these vectors $(t_{ijk} * l) < 0$, then vector t_{ijk} specifies the correct direction at the channel; otherwise a new site should be sought in the opposite direction.

It should be:

Let us draw vector l directed from the tangency point of a given interstitial sphere V_{ijkl} with one of the balls forming a given S-channel C_{ijk} (e.g. with ball i) to the tangency point of V_{ijkl} with the ball l of the given site. If the scalar product of the vectors $(t_{ijk} * l) < 0$, then vector t_{ijk} specifies correct direction at the channel; otherwise a new site of the Voronoi network should be sought in the opposite direction along this channel.

Note, this mistake was made in the text of article at the preparation of the article in English. The working program on our website has not this error.

Comments: Ниже мы поясняем данный тонкий момент алгоритма на примере двумерной системы.

На рис. 1 показана наиболее часто встречающаяся ситуация, когда симплициальная конфигурация (в данном случае тройка дисков) имеет одну интерстициальную сферу. Итак, пусть мы имеем вершину Вороного V_{123} (узел сетки Вороного). Это центр вписанной (интерстициальной) окружности между атомами 1, 2 и 3. Он является пересечением каналов Вороного C_{12} , C_{13} и C_{23} и представляет собой один из концов (вершину) ребер сетки Вороного лежащих на этих каналах.

Рассматривается канал C_{23} . Мы хотим найти вторую вершину Вороного, чтобы установить ребро сетки. Для атомов A_2 и A_3 , определяющих данный канал, мы должны найти такой атом системы (пусть это будет атом A_4), который дает вершину V_{234} , ближайшую (вдоль канала C_{23}) к вершине V_{123} . Чтобы найти такой атом, придется перебирать все атомы системы и рассчитывать вписанную сферу между каждым атомом и парой A_2 и A_3 . Центры таких сфер будут лежать, по построению, на канале C_{23} . Однако сложность в том, что они могут располагаться по обе стороны от вершины V_{123} . Поэтому необходимо проверять, лежит ли новая вершина в правильном направлении.

Зададим вектор t_{23} , с помощью которого мы определяем направление на канале. В данном случае этот вектор касается канала C_{23} в точке V_{123} и может быть направлен в одну или другую сторону (зеленая и красная стрелки на рис. 1). Найдем точки касания интерстициальной сферы V_{123} с атомами, между которыми она вписана. Выберем точку касания с каким-либо атомом, который формирует канал C_{23} (в нашем случае, например, атом 3 и точка P_3), и точку касания с атомом, который не формирует канал C_{23} (атом 1 и точка P_1). Построим вектор l_{31} соединяющий эти точки. Правильное направление на канале является противоположным вектору l_{31} , выбранному таким образом. Поэтому, чтобы установить, является ли выбранное направление t_{23} правильным, нужно чтобы скалярное произведение этих векторов было отрицательным: $(t_{23} * l_{31} < 0)$. Если это условие не выполняется, правильным будет противоположное направление.

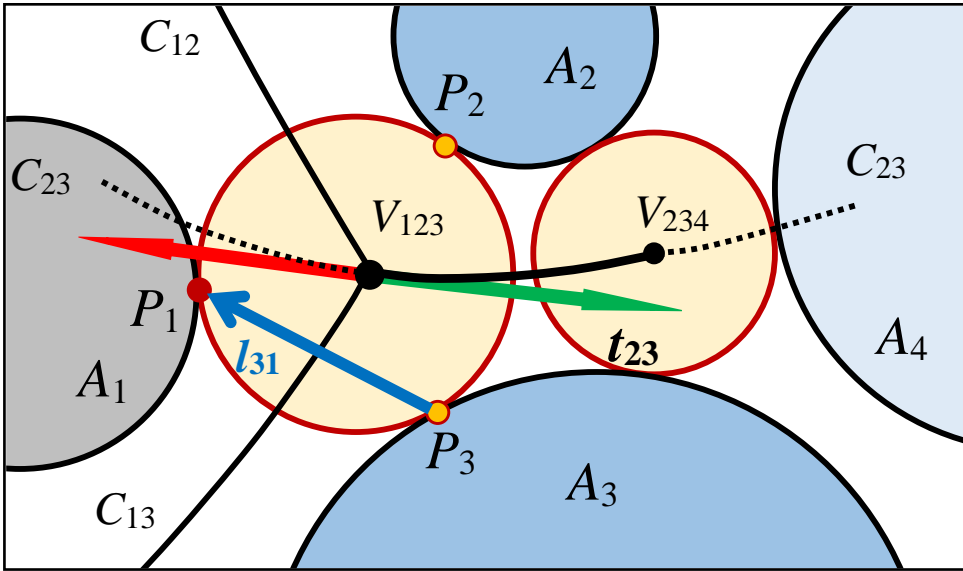


Рис. 1. Выбор правильного направления на канале Вороного. Точка V_{123} определяет узел сетки Вороного на канале C_{23} (канал показан пунктирной линией, жирный сплошной участок выделяет искомое ребро сетки Вороного). Зеленая стрелка показывает правильное направление, где может находиться второй узел сетки Вороного на данном канале, красная показывает неправильное направление. Интерстициальная сфера касается своих атомов в точках P_1 , P_2 и P_3 . Вектор t_{23} выделяет направление на канале, а вектор l_{31} показывает направление, где расположен атом, "закрывающий" данный канал. Направление, вдоль которого нужно искать новый узел, определяется условием $(t_{23} \cdot l_{31}) < 0$.

На рис. 2 показан случай, когда симплициальная конфигурация имеет две интерстициальных сферы. Данный способ выбора направления работает и в этом случае. На рисунке видно, что условие того, что атом "закрывает" данное направление по каналу, определяется не положением центров шаров, а взаимным расположением точек касания с интерстициальной сферой, см. положение атома A_1 относительно канала C_{23} .

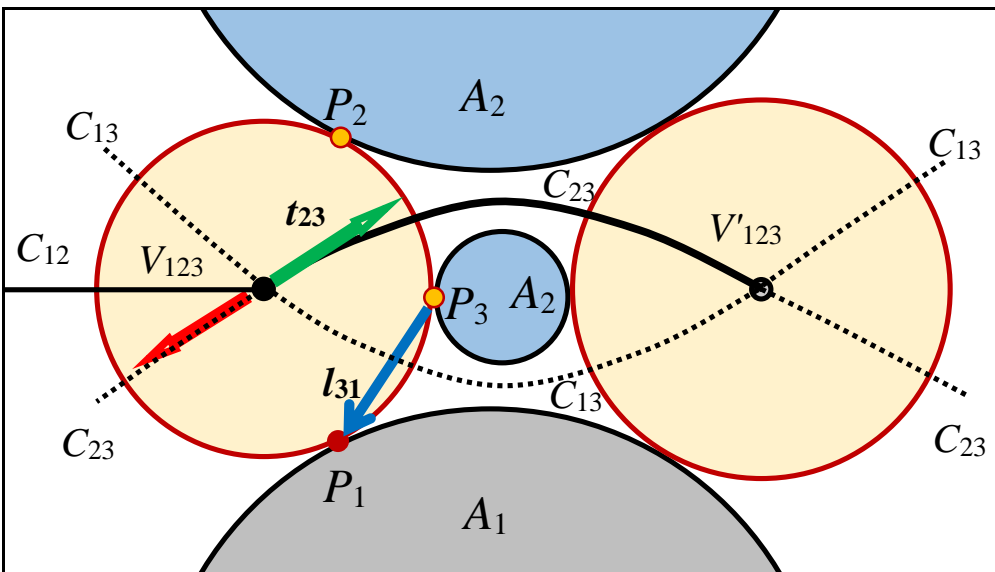


Рис. 2. Случай двух интерстициальных сфер у одной симплициальной конфигурации. Подписи и обозначения соответствуют рис. 1.