зование имени Дирихле связывают с тем, что Дирихле "открыл" многогранники Вороного раньше, чем Вороной. Однако, если следовать только хронологическому принципу, то симплексы Делоне следует называть "симплексами Вороного", так как именно Вороной впервые ввел их. Разумеется, каждый вправе использовать ту терминологию, к которой привык, главное, чтобы не возникало недоразумений. В данном случае таких проблем, к счастью, нет, поскольку обсуждаемые геометрические построения достаточно простые и ясные.

2. СИСТЕМА ДИСКРЕТНЫХ ТОЧЕК

Классические результаты Вороного и Делоне получены для системы точек (центров). Рассмотрим их подробней, определим основные геометрические понятия, изучим их свойства, докажем необходимые теоремы. Итак, объектом нашего исследования является система точек, произвольно расположенных в пространстве. Единственным требованием к системе будет только то, что наши точки обособлены одна от другой, и то, что в ней нет бесконечно больших пустот. Делоне сформулировал это следующим образом: а) можно указать некоторый конечный радиус (пусть даже очень маленький), такой, что внутри сферы этого радиуса, построенной вокруг *любой* точки системы, нет других точек, принадлежащих данной системе; б) можно указать другой конечный радиус (пусть даже очень большой), такой что внутри сферы этого радиуса, расположенной в *любом месте* нашей системы, всегда найдется хотя бы одна точка системы. Никаких других ограничений нет. Точки могут располагаться как упорядоченно, так и случайно. Будем обозначать такую систему как $\{A\}$, поскольку наши точки обычно являются центрами атомов. Там, где уместно, сами точки системы также будем называть атомами или центрами.

Для простоты мы считаем нашу систему безграничной, заполняющей все пространство. На практике, где возможны только конечные модели, это не вызывает принципиальных трудностей, ибо проблемы с границами всегда можно решить, работая внутри достаточно большой модели либо используя периодические граничные условия.

Из всевозможных систем $\{A\}$ мы будем ниже различать *невырожденные* и *вырожденные* системы, уделяя основное внимание первым. Из всего множества систем $\{A\}$ вырожденные составляют несущественную долю. Они характеризуются специфическим расположением точек, причем ничтожным смещением этих точек система превращается в невырожденную [20].

2.1. Разбиение Вороного

2.1.1. Плоскость, канал и узел Вороного

Прежде чем начинать работать с системой $\{A\}$, определим вспомогательные построения, которые нам пригодятся в дальнейшем. Будем называть *плоскостью Вороного* P_{ij} двух произвольных центров i и j геометрическое место точек, равноудаленных от этих центров. Эта плоскость проходит через середину отрезка, соединяющего центры i и j, и делит пространство на два полупространства. Все точки одного из них ближе к центру i, а точки другого — к центру j (рис. 1), для любой точки p, лежащей на этой плоскости, $pi = pj$. Такая разделяющая граница всегда существует и для точечных центров в трехмерном пространстве она является плоскостью.

Пусть теперь i, j и k — три произвольных центра в пространстве, не лежащие на одной прямой, а P_{ij}, P_{ik} и P_{jk} — их плоскости Вороного. Эти три плоскости всегда пересекаются по одной общей прямой, которая является геометрическим местом точек, равноудаленных от данных центров. Действительно, возьмем любую точку p на линии пересечения каких-нибудь двух из этих плоскостей, например P_{ij} и P_{ik}. Так как мы имеем дело с плоскостями Вороного, то расстояния от этой точки до наших центров i, j и k удовлетворяют соотношениям $pi = pj$ и $pi = pk$. Но это означает также, что $pj = pk$, т. е. точка p лежит одновременно на одинаковом расстоянии от центров j и k, а следовательно, принадлежит плоскости P_{jk}. Будем называть эту прямую *каналом Вороного* данной тройки центров и обозначать как C_{ijk} (рис. 2).

Отметим нужные нам свойства каналов Вороного.

1. *Канал Вороного перпендикулярен плоскости, в которой лежат образующие его центры, и пересекает ее в точке, являющейся центром описанной вокруг них окружности.*

Это свойство вполне очевидно, имея в виду, что каждая из плоскостей Вороного перпендикулярна плоскости, в которой лежат наши центры.

2. *Точка p канала Вороного находится на минимальном расстоянии от центров, образующих данный канал, когда она лежит в плоскости этих центров. При удалении точки p вдоль канала от этой плоскости расстояние от точки p до центров монотонно возрастает.*

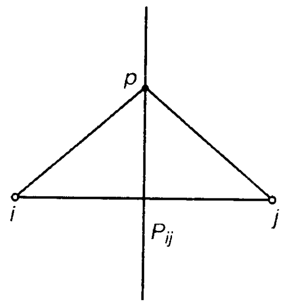

Рис. 1. Плоскость Вороного P_{ij} центров i и j есть геометрическое место точек, равноудаленных от этих центров. Она проходит перпендикулярно через середину отрезка, их соединяющего. Для любой точки p этой плоскости $pi = pj$. Плоскость Вороного делит пространство на два полупространства. Все точки одного их них ближе к центру i, а точки другого — к центру j.

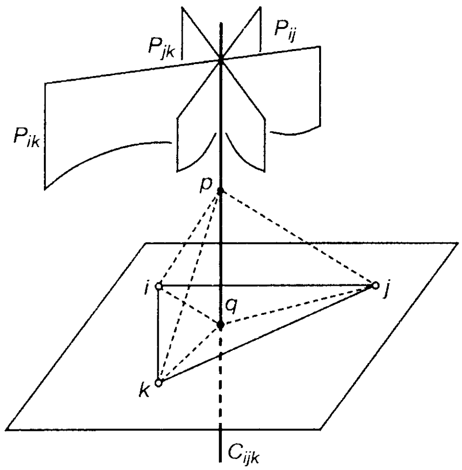

Рис. 2. Канал Вороного C_{ijk} центров i, j, k есть геометрическое место точек, равноудаленных от этих центров. Он является линией пересечения плоскостей Вороного P_{ij}, P_{ik}, P_{jk}. Канал перпендикулярен плоскости, в которой лежат данные центры. Точка пересечения канала с этой плоскостью является центром окружности, описанной вокруг i, j, k (точка q). Расстояние от некоторой точки p канала Вороного до центров i, j, k возрастает монотонно с удалением точки p от их плоскости.

Расстояние от текущей точки p до центров (будем в дальнейшем называть его *радиус канала Вороного в точке p*) можно записать как $\sqrt{(pq)^2 + R_q^2}$. Здесь pq есть расстояние от точки p до плоскости, а R_q — радиус описанной вокруг наших центров окружности. Свойство 2 с очевидностью следует из этого выражения.

Рассмотрим теперь четыре центра i, j, k и l, не лежащих в одной плоскости. Они определяют шесть различных пар, т.е. существует шесть плоскостей Вороного: P_{ij}, P_{ik}, P_{il}, P_{jk}, P_{jl} и P_{kl}. С другой стороны, из данной четверки центров можно выбрать тройки четырьмя различными способами, т.е. имеются четыре разных канала Вороного: C_{ijk}, C_{ijl}, C_{ikl} и C_{jkl}. Имеет место следующий факт.

3. *Все каналы Вороного, построенные для произвольной четверки центров, пересекаются в одной точке, а именно в центре описанной вокруг них сферы.*

Действительно, обозначим центр описанной вокруг точек i, j, k, l сферы буквой d, а ее радиус как R_d. Он, как известно, всегда существует и единствен для четверки некомпланарных точек в трехмерном пространстве. Для расстояний от точки d до i, j, k и l имеем $di = dj = dk = dl = R_d$. Из этой цепочки равенств можно написать равенства для любой тройки выписанных расстояний: $di = dj = dk$, $di = dj = dl$, $di = dk = dl$, $dj = dk = dl$, каждая из которых означает, что точка d принадлежит каналу Вороного соответствующей тройки центров. Отсюда видно, что точка d является общей для всех каналов, что и доказывает данное свойство. Эту точку, равноудаленную от четверки центров, будем иногда называть *узел Вороного*.

2.1.2. Многогранник Вороного

Для любого центра системы $\{A\}$ можно указать область пространства, все точки которой ближе к данному центру, чем к любому другому центру системы. Такая область называется *многогранник Вороного* или *область Вороного*. Заметим, что к многограннику Вороного обычно относят и его поверхность. Поэтому было бы более правильно вместо "ближе" говорить "не далее". Однако здесь не возникает недоразумений.

В трехмерном пространстве область Вороного любого центра i системы $\{A\}$ есть выпуклый многогранник, в двумерном — выпуклый многоугольник. Легко понять, как они получаются. Соединим центр i отрезками прямых со всеми другими центрами системы и проведем через середины этих отрезков перпендикулярные плоскости, т.е. построим плоскости Вороного, связанные с центром i. Каждая их них, мы знаем, делит пространство на два полупространства. Точки одного из них лежат ближе к данному центру i, чем к соответствующему соседу. Пересечение всех полупространств, содержащих центр i, дает нам искомую область. Она является многогранником, поскольку ограничена плоскостями. Этот многогранник является выпуклым, так как по построению он целиком лежит по одну сторону от плоскости любой из его граней (это одно из определений выпуклости многогранника, см. Приложение).

Двумерный многогранник Вороного показан на рис. 3. Плоскости Вороного, которые породили грани у данного многогранника, будем называть *образующими плоскостями Вороного*, а соответствующие центры системы — *геометрическими соседями* данного центра i. Среди геометрических соседей полезно различать *основные* и *неосновные*. Для первых середина отрезка, соединяющая его с центральным, лежит на грани многогранника Вороного. Для вторых —

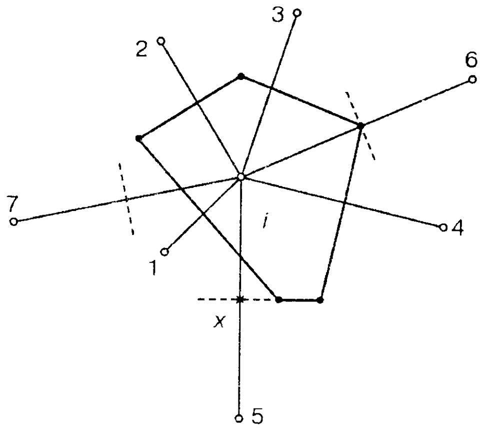

Рис. 3. Многогранник Вороного для центра i двумерной системы. Несколько ближайших плоскостей Вороного ограничивают вокруг него область пространства, все точки которой ближе к данному центру, чем к любому другому центру системы. Плоскости Вороного центра i с соседями 1–5 образуют грани многогранника Вороного. Эти соседи называются геометрическими соседями центра i. Из них 1–4 являются основными, а 5 — неосновным, для него точка пересечения отрезка $i5$ со своей плоскостью Вороного лежит вне многогранника (точка x). Плоскость Вороного от соседа 6 проходит через вершину многогранника Вороного, но не образует грани. Центр 7 не образует грани у данного многогранника, его плоскость Вороного отсечена от центра i более близкими плоскостями.

вне грани и, следовательно, вне самого многогранника. На рис. 3 таковым является сосед с номером 5. Основные соседи дают, как правило, самые большие грани многогранника. Неосновные — это обычно более далекие соседи, а их грани есть небольшие срезы вершин или ребер на многограннике Вороного. Отметим, что некоторые плоскости Вороного могут проходить через вершины или ребра многогранника, не создавая граней. Эти плоскости не являются образующими, однако при небольших смещениях центров системы они могут породить грани. Такие плоскости будем называть *вырожденными плоскостями Вороного*. Реально они имеются только в специфических системах, в частности, в кристаллических решетках. Например, система узлов простой кубической решетки имеет многогранником Вороного обычный куб, образованный шестью ближайшими соседями. Однако через каждое его ребро проходит плоскость Вороного от одного из двенадцати соседей второй координационной сферы решетки, а через каждую вершину — плоскости от соседей третьей координационной сферы. При случайных возмущениях узлов такой решетки получается большое разнообразие многогранников с весьма сложной топологией.

На рис. 4 приведены многогранники Вороного некоторых трехмерных систем. Видно, что они различаются существенно.

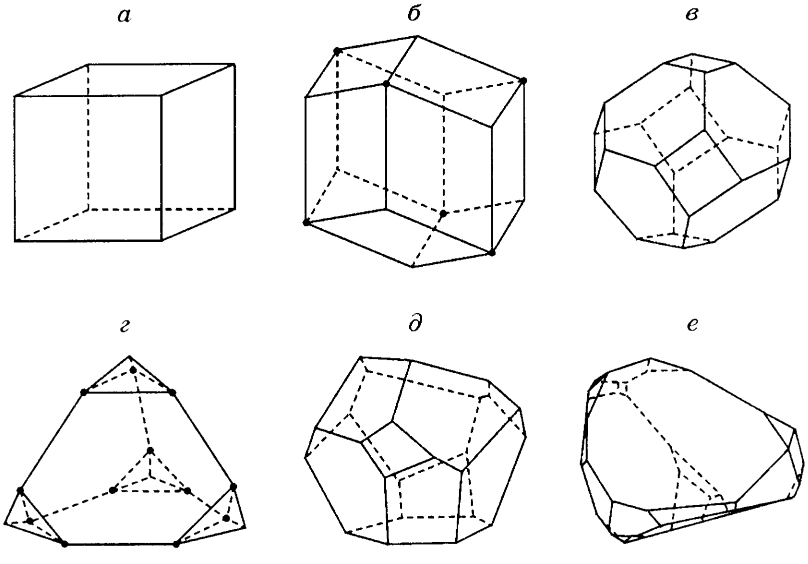

Рис. 4. Иллюстрация трехмерных многогранников Вороного. Кристаллические решетки: *а* — простая кубическая; *б* — гранецентрированная кубическая; *в* — объемноцентрированная; *г* — алмаза. Неупорядоченные системы: *д* — плотная некристаллическая упаковка шаров; *е* — модель аморфной фазы с тетраэдрической координацией атомов. Для случаев *б* и *г* многогранники являются непримитивными. У них в некоторые вершины (обозначены жирными точками) сходится более трех ребер (см. Приложение).

2.1.3. Теорема о разбиении Вороного

Многогранники Вороного, построенные для каждого центра системы $\{A\}$, дают нам мозаику многогранников, которая называется *разбиением Вороного*. На рис. 5 изображена двумерная мозаика многогранников Вороного. Б. Н. Делоне сформулировал основные свойства этой мозаики в виде следующей общей теоремы, которую можно назвать *теоремой о разбиении Вороного*.

ТЕОРЕМА 1. *Многогранники Вороного системы $\{A\}$ не входят друг в друга и заполняют пространство, будучи смежными по целым граням. Разбиение пространства на многогранники Вороного однозначно определяется системой $\{A\}$ и, наоборот, однозначно ее определяет.*

Утверждения теоремы почти очевидны, но поскольку она лежит в основе всех дальнейших результатов, приведем ее доказательство.

Тот факт, что многогранники Вороного не входят друг в друга, следует из того, что расстояние между точками определяется однозначно. Никакая точка пространства не может одновременно *быть ближе* сразу к двум центрам системы. В крайнем случае она лежит на одинаковом расстоянии от двух или нескольких центров (в таком случае она принадлежит общей границе нескольких многогранников Вороного). Из таких же рассуждений, очевидно, заключаем, что в мозаике Вороного не может быть щелей, т. е. точек, не принадлежащих никакому многограннику Вороного. Действительно, никакая точка пространства не может не быть ближе к какому-то центру системы.

Пусть многогранник Вороного некоторого центра i оказался смежен какой-то одной своей гранью с гранями многогранников Вороного двух разных

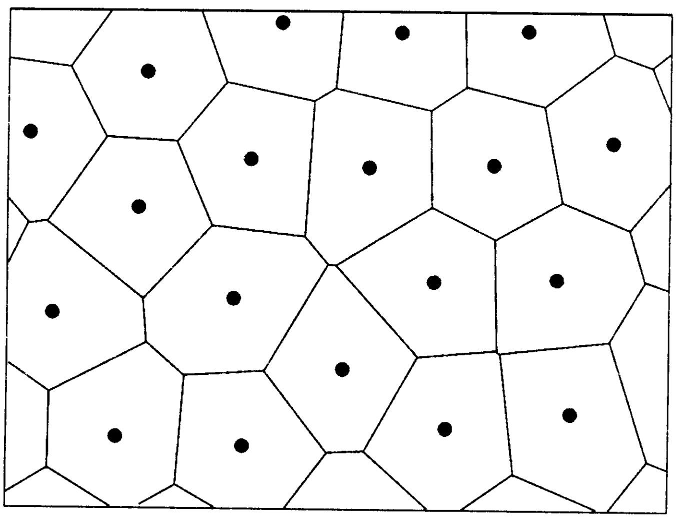

Рис. 5. Двумерная иллюстрация разбиения Вороного системы точечных центров. Многогранники Вороного покрывают пространство без щелей и наложений.

центров j и k. В этом случае плоскости Вороного P_{ij} и P_{ik} обязаны совпадать, поскольку, по предположению, они имеют общую часть на данной грани. Далее, центры j и k должны лежать на прямых, проходящих через центр i перпендикулярно своим плоскостям P_{ij} и P_{ik}. Но поскольку это одна и та же плоскость, то оба центра должны лежать на одной и той же прямой. При этом они обязаны быть на равном расстоянии от центра i. Из этих требований однозначно следует, что центры j и k могут только совпадать. Это доказывает, что каждая грань многогранника может быть смежной только с одной из граней другого многогранника. Другая ситуация, когда смежный центр один, но его грань совмещается не полностью с гранью нашего многогранника Вороного, представляется невозможной по той причине, что непокрытый участок грани открывал бы щель в разбиении Вороного, которых, как сказано выше, не может быть.

Однозначность разбиения данной системы видна из того, что никакая точка пространства не может при одном рассмотрении быть ближе к одному центру системы, а при втором оказаться ближе к другому. Обратное утверждение, что мозаика многогранников Вороного однозначно определяет систему центров, следует из того, что каждый многогранник имеет свой единственный центр, относительно которого он построен. Итак, теорема доказана полностью.

Важным следствием теоремы является то, что ребра и вершины мозаики Вороного образуют односвязную и совершенную, без "мертвых концов", сетку. Действительно, многогранники контактируют по целым граням, а в результате и по целым ребрам. Эта сетка называется *сеткой Вороного* и будет существенно использоваться в дальнейшем.

Приведем простые, но полезные свойства разбиения Вороного:

1) *центры системы $\{A\}$, многогранники Вороного которых сходятся в общую вершину, лежат на одинаковом расстоянии от этой вершины;*

2) *центры системы $\{A\}$, многогранники Вороного которых имеют общее ребро, лежат на одинаковом расстоянии от прямой, проходящей вдоль этого ребра;*

3) *центры системы $\{A\}$, многогранники Вороного которых имеют общую грань, лежат на одинаковом расстоянии от плоскости этой грани.*

Первое утверждение означает, что общая вершина многогранников является центром сферы, описанной вокруг соответствующих центров системы. Справедливость второго утверждения следует из того, что общее ребро является отрезком канала Вороного данной тройки центров. Последнее утверждение тривиально, ибо общая грань есть кусок плоскости Вороного соответствующих центров системы $\{A\}$.

Отметим еще одно свойство, которое справедливо, кстати, не только для разбиения Вороного, но и для любого разбиения пространства на выпуклые многогранники:

4) *в каждой вершине разбиения пространства на выпуклые многогранники встречается не менее четырех многогранников, а в каждом ребре — не менее трех.*

Это известный геометрический факт. В общем случае n-мерного пространства в вершину (элемент нулевой размерности) сходится не менее чем $n+1$ многогранников, в ребро (элемент единичной размерности) — не менее чем n. В двумерном случае, соответственно, в вершину сходится не менее трех многоугольников, а ребра-грани всегда объединяют пару. Здесь мы говорим "не менее", однако в типичном для нас случае невырожденных систем выполняется точное равенство: в вершины сходится ровно по $n+1$, а в ребра — ровно по n многогранников. Пример вырожденной системы представляет, как упоминалось выше, простая кубическая решетка. В ее разбиении Вороного в каждую вершину сходится по восемь, а в ребро — по четыре многогранника Вороного. Заметим, что теоретически можно придумать такие конфигурации, для которых в некоторые вершины или ребра сходилось бы большое число многогранников. О проблеме вырождения мы еще будем говорить ниже. Заметим только, что для невырожденных систем все многогранники Вороного являются *примитивными* (см. Приложение). Однако обратное утверждение в общем случае не верно. Примитивные многогранники могут составлять разбиение Вороного вырожденных систем. Примером тому является та же простая кубическая решетка, где все многогранники Вороного — кубы — примитивные многогранники.

Заканчивая рассмотрение разбиения Вороного, отметим, что каждый центр системы $\{A\}$ посредством граней многогранника Вороного определяет своих геометрических соседей. Те, в свою очередь, определяют своих соседей и т.д. Таким образом, можно говорить о графе, вершинами которого являются центры системы $\{A\}$, а связность определена через геометрическое соседство. Этот граф (сетка Делоне) подводит нас к понятию разбиения Делоне.

2.2. Разбиение Делоне

2.2.1. Метод пустого шара Делоне. Симплекс Делоне

Воспользуемся пустым шаром, который мы будем перемещать, изменяя его размер так, чтобы он мог касаться точек системы $\{A\}$, но всегда оставался пустым. Этот мысленный образ, предложенный Делоне [21], помогает увидеть проблему с новой стороны и яснее понять взаимосвязь и единство разбиений Вороного и Делоне.

Итак, поместим в систему точек $\{A\}$ пустой шар Делоне. Это всегда возможно, если выбрать шар достаточно малым. Начнем увеличивать его радиус, оставляя центр шара на месте. В какой-то момент поверхность шара встретит некоторую точку i системы $\{A\}$. Это обязательно произойдет, ибо в нашей системе нет неограниченно больших пустот. (Мы видим, что условия, наложенные ранее на систему $\{A\}$, действительно являются нужными.) Будем продолжать увеличивать радиус пустого шара так, чтобы точка i оставалась на его поверхности. Для этого придется двигать центр шара от точки i. Неважно, по какой траектории мы будем перемещать центр шара, рано или поздно шар достигнет

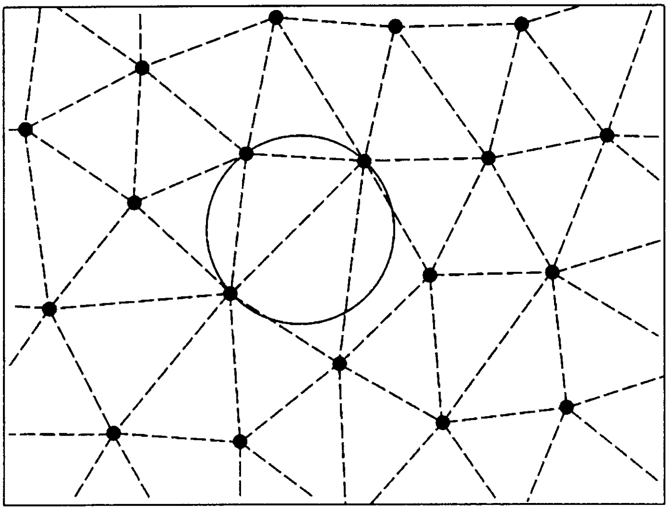

Рис. 6. Разбиение Делоне двумерной системы точек. Симплексы Делоне заполняют пространство без щелей и наложений. Описанная сфера любого симплекса не содержит внутри себя других точек системы.

своей поверхностью другой точки системы $\{A\}$. Пусть это будет точка j. Продолжим увеличивать радиус нашего шара, сохраняя уже обе точки на его поверхности. Увеличиваясь, шар достигнет какой-то третьей точки системы, точки k. В двумерном случае наш "пустой круг" в этот момент зафиксируется, т.е. станет невозможным дальнейшее увеличение его радиуса при сохранении круга пустым. При этом мы выявляем элементарную двумерную конфигурацию трех точек (i, j, k), определяющую некий треугольник, особенностью которого является то, что внутри его описанной окружности нет других точек системы $\{A\}$. В трехмерном пространстве шар не определяется тремя точками. Продолжим увеличивать его радиус, сохраняя все три найденные точки на его поверхности. Это будет возможно до тех пор, пока поверхность шара не встретится с четвертой точкой l системы. После этого движение и рост пустого шара станут невозможными. Найденные четыре точки (i, j, k, l) определяют вершины тетраэдра, который характерен тем, что внутри его описанной сферы нет других точек системы $\{A\}$. Такой тетраэдр называется *симплексом Делоне.*

Напомним, что *симплексом* в математике называют простейшую фигуру в пространстве данной размерности: тетраэдр — в трехмерном пространстве, треугольник — в двумерном. Во избежание недоразумений подчеркнем еще раз, что произвольная четверка точек системы, не лежащих в одной плоскости, всегда определяет некий симплекс. Однако он будет симплексом Делоне только в том случае, если его описанная сфера пуста. Другими словами, симплексы Делоне определяются особым выбором четверок точек в системе $\{A\}$.

Здесь уже видна связь симплексов Делоне с многогранниками Вороного. Действительно, на первом шаге нашей процедуры центр пустого шара находился внутри многогранника Вороного точки i. Сохраняя контакт с двумя точками, центр шара перемещался по плоскости Вороного точек i и j. Наконец, с тремя точками на поверхности шара его центр мог двигаться только вдоль канала Вороного данной тройки.

Мы построили один симплекс Делоне, однако, помещая пустой шар в различные места и повторяя ту же процедуру, можно определить и другие. Утверждается, что совокупность всех симплексов Делоне системы $\{A\}$ заполняет пространство без наложений и щелей, т.е. подобно многогранникам Вороного реализует разбиение пространства, но на этот раз на тетраэдры. Это разбиение называется *разбиением Делоне* (рис. 6). Однако перед тем как доказать теорему о разбиении Делоне, обсудим с новой стороны проблему вырождения.

2.2.2. Вырождение

Выше мы ограничивались тем фактом, что ровно четыре точки в пространстве фиксируют пустой шар. В общем случае, однако, возможно, чтобы на его поверхности оказалось больше чем четыре точки системы. Например, если имеется октаэдрическая конфигурация точек, то на поверхности вписанного шара будет лежать шесть точек — вершин октаэдра, а если кубическая, то восемь. Более того, легко можно представить весьма произвольную конфигурацию любого числа точек, лежащих на одной сфере. Все такие конфигурации, если они имеются в системе, будут выявляться с помощью пустого шара Делоне. Действительно, если мы наткнулись поверхностью шара сразу на несколько точек системы $\{A\}$, то при дальнейшем увеличении радиуса будем сохранять их всех на его поверхности. Рано или поздно мы упремся в последнюю точку (или точки), которая остановит движение нашего пустого шара.

Итак, если на поверхности пустого шара оказалось более четырех точек, будем их рассматривать как вершины некоего несимплициального многогранника. Будем называть такой многогранник *несимплициальным полиэдром Делоне*, подчеркивая, с одной стороны, что это не симплекс, а с другой, что это совсем иное, чем многогранник Вороного. Любой несимплициальный полиэдр Делоне, очевидно, может быть разбит на симплексы Делоне. Однако сделать это можно различными способами, именно поэтому такие конфигурации точек и называются вырожденными. В двумерном случае для многоугольника с N вершинами может реализоваться C_N^3 (число сочетаний из N по три) различных симплексов (рис. 7). Однако каждое конкретное разбиение содержит всегда N–2 симплекса. Аналогично в трехмерном пространстве можно построить C_N^4 различных симплексов. Однако, в отличие от двумерного случая, здесь в разных конкретных разбиениях может быть различное число симплексов. Например, можно убедиться, что куб (N=8) может быть разбит как на пять, так и на шесть симплексов (рис. 8).

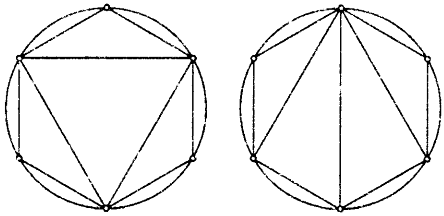

Рис. 7. Различные разложения двумерного несимплициального полиэдра на симплексы. Любой N-угольник разбивается всегда на N–2 симплекса.

Систему $\{A\}$ будем называть *вырожденной*, если в ней имеется хотя бы один несимплициальный полиэдр Делоне, т.е. хотя бы один раз на поверхности пустого шара оказывается более четырех точек системы. Если нет ни одной такой конфигурации, то система называется *невырожденной*. Отметим, что система, вырожденная согласно данному определению, является вырожденной и в обсуждаемом ранее смысле, на языке многогранников Вороного.

С вырождением приходится сталкиваться при работе с некоторыми решеточными (кристаллическими) системами. Неупорядоченные системы практически всегда можно считать невырожденными. Расположение более четырех точек на одной сфере является уникальной ситуацией в том смысле, что их доля в полном наборе возможных конфигураций бесконечно мала. Говоря языком математиков, множество вырожденных конфигураций есть "множество меры нуль". Неважно, что вырожденных конфигураций можно создать сколько угодно много, существенно то, что невырожденных неизмеримо больше.

Приступая к доказательству теоремы о разбиении Делоне, будем иметь в виду общий случай, когда система $\{A\}$ может быть как вырожденной, так и невырожденной.

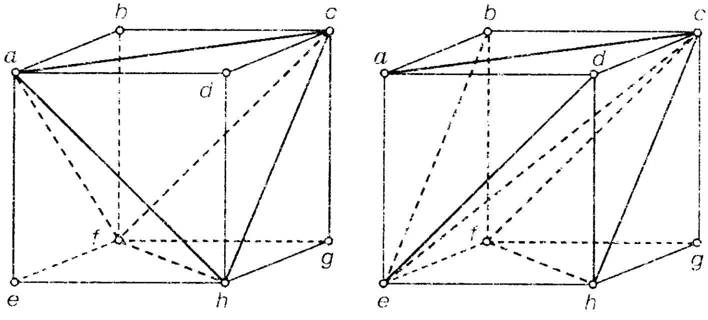

Рис. 8. Несимплициальные полиэдры трехмерного пространства могут разлагаться на разное число симплексов. Различные разбиения куба на симплексы: слева — пять симплексов – *achf*, *afhe*, *abcf*, *cghf*, *acdh*; справа — шесть симплексов – *cghf*, *chef*, *cehd*, *cefb*, *abce*, *adce*.