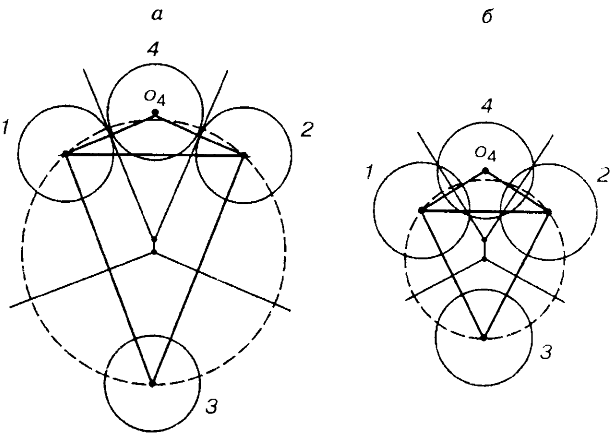

Рис. 29. Примеры нестандартных симплициальных полостей. Шар 4 частично входит в чужую симплициальную полость, образованную шарами 1, 2, 3. Для этого необходимо: для твердых шаров (*а*), чтобы радиус описанной сферы симплекса превосходил радиус шаров по крайней мере в два раза; для перекрывающихся шаров (*б*) такое возможно и при меньших радиусах описанной сферы симплекса.

жат дальше от центра описанной сферы симплекса, чем шары его собственной симплициальной конфигурации. Это условие непосредственно следует из определения симплекса Делоне (иначе его описанная сфера не была бы пуста). Если бы мы захотели насильственно придвинуть какой-нибудь чужой шар, чтобы перекрыть симплекс или проход, то это привело бы к перемене симплициальных конфигураций, к перестройке разбиения Делоне.

Использование сетки Вороного в качестве навигационной карты межшарового пространства полностью применимо для системы перекрывающихся шаров. Нужно только иметь в виду, что некоторые связи сетки Вороного теперь могут иметь отрицательные значения радиусов проходов, что означает всего лишь, что они блокированы для любого зонда.

4. СИСТЕМА ШАРОВ РАЗНОГО РАДИУСА

В предыдущем разделе объектом нашего исследования была система одинаковых шаров, центры которых представляют систему $\{A\}$, т.е. весьма произвольный ансамбль дискретных точек. Теперь мы переходим к шарам разного радиуса. Будем считать, что их центры также образуют систему $\{A\}$, а радиусы шаров могут быть любыми. Все физические объекты, которые мы будем исследовать, удовлетворяют этому условию. Будем называть такой ансамбль шаров системой $\{B\}$. Система одинаковых шаров является ее частным случаем. Опять будем считать, что наша система невырождена, т.е. в ней нет конфигураций, когда вписанная сфера касается более чем четырех шаров. Для упрощения анализа ограничимся также условием, что наши шары не перекрываются.

4.1. Подходы к анализу систем разных шаров

Многогранники Вороного, построенные для системы центров (точек), не учитывают размера шаров. Это не имело особого значения для одинаковых

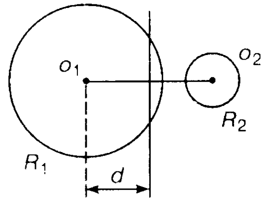

Рис. 30. Плоскость Вороного, построенная для центров двух шаров разного радиуса, может пересекать шар, т. е. многогранник Вороного может входить внутрь шара.

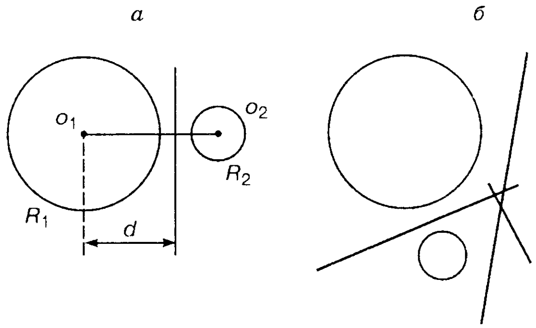

Рис. 31. Простейшая попытка учесть радиусы шаров: плоскость проводится посередине между поверхностями шаров (*а*). Однако получающиеся многогранники не дают разбиения пространства, оставляют непокрытые области (*б*).

шаров, однако становится существенным для систем разных шаров. В частности, плоскости Вороного могут проникать внутрь шаров (рис. 30). Попытки исправить дело "вручную" оказались неудачными. Предлагалось, например, поделить пополам расстояние между поверхностями шаров (рис. 31, *а*) или разбить отрезок, соединяющий центры, на части, пропорциональные отношению радиусов шаров [24—26]. Такими способами удается избежать пересечения шаров с гранями многогранников. Однако они имеют существенный недостаток. Получающиеся многогранники не дают разбиения пространства. На рис. 31, *б* показано, что между ними могут быть щели, т.е. существуют области, точки которых не принадлежат никакому многограннику.

Другой способ работы с шарами разного радиуса — строить многогранники с помощью так называемых радикальных плоскостей [27, 28]. Получающиеся при этом многогранники не входят внутрь шаров и дают строгое разбиение пространства. Радикальная плоскость для пары произвольных шаров есть геометрическое место точек, имеющих одинаковые отрезки касательных, проведенных из данной точки пространства к каждому из шаров (рис. 32). Нетрудно убедиться, что радикальная плоскость действительно является плоскостью и никогда не проходит через шар (если шары сами не пересекаются). Для нахождения вершины *радикального многогранника* решается система уравнений

$$(x_i - x)^2 + (y_i - y)^2 + (z_i - z)^2 - R_i^2 = L^2 \quad (i = 1,\ 2,\ 3,\ 4),$$

которая сводится к системе линейных уравнений, как и в случае с плоскостями Вороного. Расчет радикальных многогранников не представляет проблемы. Для этого требуется только слегка изменить алгоритм построения многогранников Вороного.

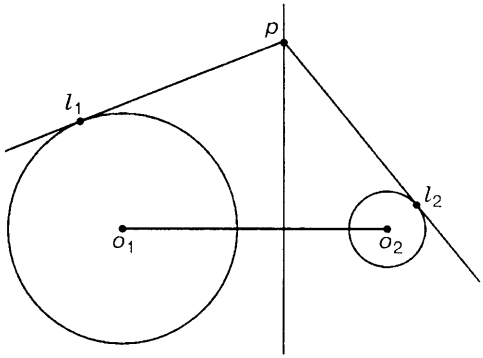

Рис. 32. Радикальная плоскость пары шаров есть геометрическое место точек, для каждой из которых отрезки касательных к шарам имеют одинаковую длину: $pl_1 = pl_2$.

На рис. 33 показано радикальное разбиение на плоскости, рассчитанное в работе [29]. Данная система дисков представляет собой сечение трехмерной неупорядоченной плотной упаковки одинаковых шаров. Исследование плоских сечений для понимания структуры трехмерных систем является предметом науки стереологии [30, 31]. Заметим, что радикальное разбиение обладает здесь интересным математическим свойством: в плоскости сечения трехмерного радикального разбиения произвольной системы шаров получается опять же радикальное разбиение. Некоторые уточнения к этому свойству обсуждаются в [29]. Действительно, нетрудно убедиться, что отрезок касательной от точки к диску в плоскости сечения является одновременно отрезком касательной от точки до той же сферы в трехмерном пространстве.

В физике метод радикальных плоскостей используется при исследовании локальной структуры моделей многокомпонентных сплавов и молекулярных систем [32, 33]. Для радикальных многогранников можно рассчитывать все те же топологические и метрические характеристики многогранников, что и для

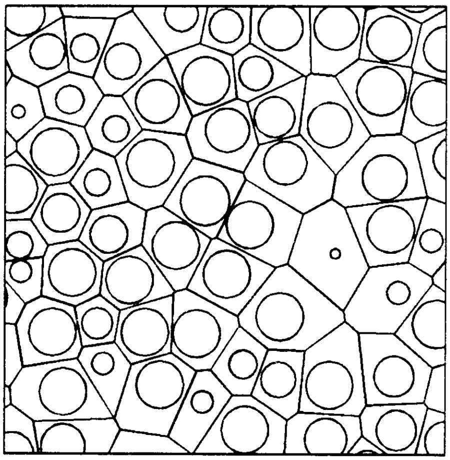

Рис. 33. Двумерная иллюстрация радикального разбиения (см. текст). Рисунок из работы [29].

многогранников Вороного. Однако радикальные многогранники не имеют особого физического смысла. Это скорее абстрактная математическая конструкция. Поэтому, имея в виду физические приложения метода, мы обращаемся к более естественному и содержательному обобщению многогранников Вороного на S-области Вороного.

4.2. Основные понятия и определения

4.2.1. S-поверхность (гиперболоид) Вороного

Рассмотрим геометрическое место точек H_{ij}, равноудаленных от поверхностей двух шаров радиусов R_i и R_j. В любом сечении, проходящем через прямую, на которой лежат центры шаров, эти точки образуют гиперболу, а центры шаров являются ее фокусами (рис. 34).

В самом деле, пусть p есть произвольная точка, лежащая на одинаковом расстоянии от поверхностей шаров, т.е. ps_i=ps_j. Вспомним, что ближайшие к ней точки поверхностей s_i и s_j находятся на прямых, соединяющих точку p с центрами шаров. Выпишем разность po_i и po_j:

$$po_i - po_j = \left(ps_i + R_i\right) - \left(ps_j + R_j\right) = R_i - R_j\,,$$

т.е. она не зависит от выбора точки p. Но это условие является одним из определений гиперболы: разность расстояний от любой ее точки до фокусов есть величина постоянная.

В силу аксиальной симметрии пары шаров заключаем, что в трехмерном пространстве H_{ij} является гиперболоидом вращения. Строго говоря, H_{ij} есть

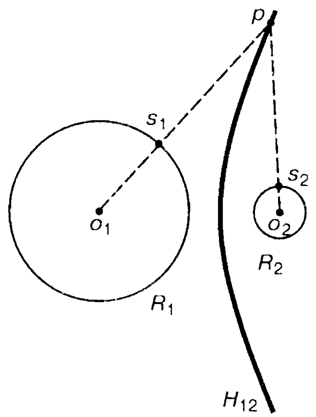

Рис. 34. Геометрическое место точек, равноудаленных от поверхностей шаров, является гиперболоидом вращения. Для любой точки p, по условию, $ps_1 = ps_2$, откуда следует, что разность $po_1 - po_2$ равна $R_1 - R_2$, т. е. не зависит от точки p, что является одним из определений гиперболы.

одна из частей двуполостного гиперболоида вращения. Вторая его часть получается при измерении расстояния не до ближайшей, а до диаметрально расположенной точки на поверхностях шаров. Однако для наших задач это не представляет интереса. Найденную S-поверхность Вороного будем иногда называть *гиперболоид Вороного*, или *гиперболоид профессора Вороного*, если это звучит для читателя более привычно.

Резюмируем некоторые свойства гиперболоида Вороного. Прежде всего отметим, что для любой пары шаров гиперболоид Вороного всегда существует. Для одинаковых шаров он превращается, очевидно, в плоскость. Из условия построения гиперболоида Вороного и элементарной геометрии имеем следующее.

1. *Гиперболоид Вороного направлен своей вершиной в сторону большего шара.*

2. *Отрезок прямой, соединяющий центры шаров, проходит через вершину гиперболоида Вороного и совпадает с осью его вращения.*

3. *Из всех точек гиперболоида Вороного его вершина лежит на минимальном расстоянии от поверхностей шаров.*

4. *Расстояние от точки p на гиперболоиде Вороного до поверхностей шаров возрастает монотонно с удалением этой точки от вершины гиперболоида.*

Заметим, что измерять удаление точки p на поверхности гиперболоида от вершины t можно как вдоль поверхности (по гиперболе), так и по прямой, соединяющей вершину с данной точкой, так как длины отрезка прямой и стягиваемого им отрезка гиперболы изменяются синбатно с удалением точки p от вершины.

4.2.2. S-канал Вороного. Конфигурации троек шаров

S-канал Вороного есть геометрическое место точек C_{ijk}, равноудаленных от поверхности тройки шаров i, j и k. Пустая сфера, касающаяся одновременно этих шаров, перемещается своим центром вдоль этой линии. Прежде всего отметим справедливость полезного для дальнейшего утверждения.

Если гиперболоиды Вороного H_{ij}, H_{ik}, H_{jk} тройки шаров i, j, k пересекаются, то они пересекаются по одной линии.

Эта линия, разумеется, и является S-каналом Вороного. Доказательство утверждения полностью аналогично рассмотренному ранее для тройки точечных центров (см. раздел 2.1.1). Возьмем точку p на линии пересечения двух каких-либо гиперболоидов данной тройки шаров, например, H_{ij} и H_{ik}. Так как мы имеем дело с S-поверхностями Вороного, то расстояния от этой точки до ближайших точек поверхностей s_i, s_j и s_k соответствующих шаров удовлетворяют цепочке равенств: $ps_i = ps_j$, $ps_i = ps_k$. Но это означает, что $ps_j = ps_k$. Следовательно, точка p лежит на одинаковом расстоянии от поверхностей шаров j и k, т.е. принадлежит также гиперболоиду H_{jk}. Поскольку точка p любая на линии пересечения H_{ij} и H_{ik}, то заключаем, что гиперболоид H_{jk} также проходит через всю эту линию.

Однако, как отражено в формулировке утверждения, не для каждой тройки шаров S-канал Вороного существует. Для шаров разных радиусов возможны ситуации, когда не существует пустой сферы, одновременно касающейся поверхностей трех шаров. (Для одинаковых шаров такое невозможно.) Из доказанного утверждения, кстати, следует, что если два гиперболоида не пересекаются между собой, то ни один из них не пересекается и с третьим.

Разберемся подробней с возможными конфигурациями троек разных шаров. Анализ показывает, что можно выделить три характерных типа конфигураций. Первый тип троек можно назвать *планарными*. Для таких конфигураций можно построить плоскость, касающуюся одновременно всех трех шаров. Другими словами, такую конфигурацию можно положить на плоскую поверхность Любая планарная тройка всегда имеет две касательных плоскости (рис. 35, *а*). Это следует из того, что три шара всегда симметричны относительно своей *центральной плоскости*, т.е. плоскости, проходящей через их центры. S-канал Вороного планарной тройки шаров всегда уходит своими концами в бесконечность Это тоже легко понять, поскольку касательную плоскость можно считать касательной сферой с центром, удаленным в бесконечность. Приближаясь, касательная сфера уменьшает свой радиус, проходит между шарами, пересекая центральную плоскость, и снова уходит в бесконечность, превращаясь в другую касательную плоскость (рис. 35, *б*).

Все тройки шаров, которые нельзя положить на плоскость тремя шарами, будем называть *непланарными*. Из них выделим конфигурации, для которых существует S-канал Вороного (рис. 36, *а*). В этих конфигурациях меньший шар

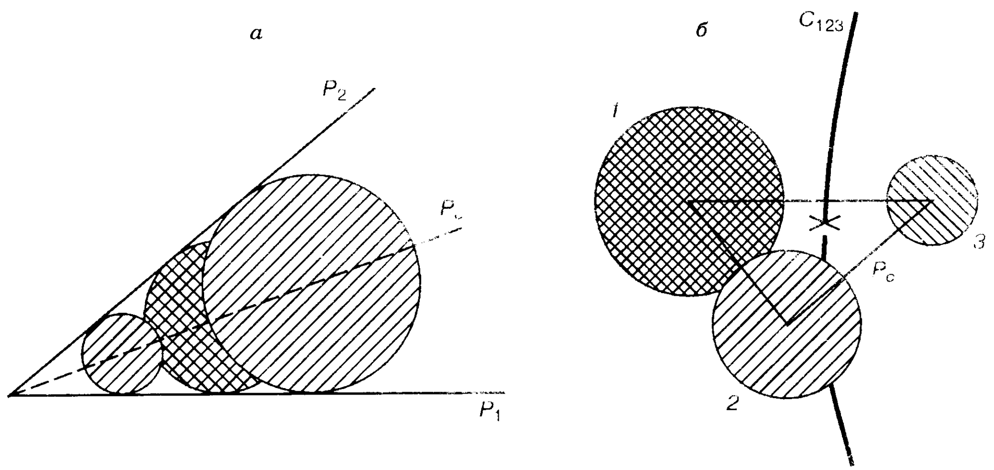

Рис. 35. Иллюстрация планарной тройки шаров. Если тройку шаров можно "положить" на плоскость P_1, то существует еще одна плоскость P_2, касающаяся этих шаров. Плоскостью симметрии является *центральная плоскость* P_c, проходящая через центры данных шаров (*а*). S-канал Вороного планарной тройки шаров уходит своими концами на бесконечность (*б*).

"спрятан" между двумя большими. Сразу отметим, что у такой тройки шаров канал Вороного всегда замкнут. Если бы он не замыкался, а уходил бы своими концами в бесконечность, то это означало бы наличие касательной сферы бесконечного радиуса, т.е. планарность данной тройки. Наконец, возможны тройки шаров, не имеющие S-канала Вороного вообще (рис. 36, *б*). Это случается, когда большой шар закрывает друг от друга два меньших шара. В этом случае сфера не может касаться трех шаров одновременно.

Подчеркнем, что канал Вороного может быть либо бесконечным, либо замкнутым, но никогда на бывает с "обрубленными" концами. Это следует из общего математического факта, что открытые (безграничные) множества, коими являются поверхности Вороного, не могут иметь в пересечении закрытое (с границами) множество. Поэтому бесконечные и замкнутые линии исчерпывают всевозможные S-каналы Вороного.

Кроме рассмотренных типов конфигураций теоретически существуют, разумеется, промежуточные, являющиеся переходными между указанными типами. Например, три шара, вписанные в цилиндр или в конус, имеют бесчисленное количество касательных плоскостей. Мы не будем их рассматривать, ибо это вырожденные случаи. Множество таких конфигураций есть множество меры нуль. Ничтожные смещения центров, или вариации радиусов, немедленно снимут вырождение. Мы считаем наши системы шаров невырожденными. Подчеркнем, что вырождение в системе шаров имеет две независимые причины. Во-первых, это специфическое расположение центров шаров, во-вторых, — специальный подбор радиусов. Например, центры четырех шаров, расположенных в вершинах правильного квадрата, представляют вырожденную конфигурацию. Однако, если радиусы шаров различны, то конфигурация шаров на этих центрах будет невырожденной. Этот момент следует иметь в виду при разработке программ расчета S-построений.

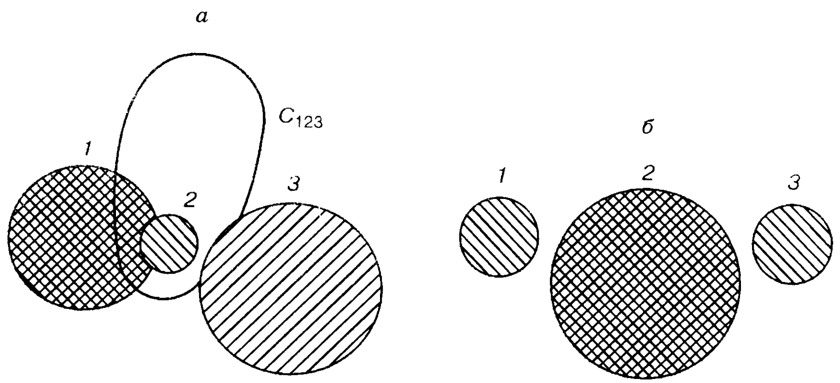

Рис. 36. Трехмерная иллюстрация непланарных троек шаров. Для них не существует плоскости, касающейся одновременно всех трех шаров. S-канал Вороного непланарной тройки шаров является замкнутой линией (*а*). Возможны ситуации, когда S-канала Вороного не существует (*б*).

Отметим, что планарные конфигурации заметно более вероятны, чем непланарные. Однако непланарные конфигурации нельзя считать уникальными и рассматривать как вырождение. Небольшие смещения шаров и вариации радиусов скорее всего не приведут к изменению типа такой конфигурации. Поэтому их нельзя игнорировать при исследовании системы $\{B\}$.

4.2.3. Свойства S-каналов Вороного

Отметим важные для нас свойства S-канала Вороного.

1. *S-канал Вороного симметричен относительно центральной плоскости.*

Это непосредственно следует из симметрии тройки шаров относительно центральной плоскости.

2. *S-канал Вороного всегда пересекает центральную плоскость, причем под прямым углом.*

Факт пересечения прямо следует из первого свойства. Если бы пересечение было не под прямым углом, то канал имел бы излом при переходе через центральную плоскость (опять же из-за симметрии). Но он не может иметь углов (разрывов в первых производных), так как S-канал Вороного является линией второго порядка — пересечением двух гиперболоидов.

3. *S-канал Вороного является односвязной линией.*

Данное свойство не является тривиальным, поскольку поверхности второго порядка в общем случае могут пересекаться по неодносвязной линии. Такое возможно и для гиперболоидов. Например, на рис. 37 "острый" гиперболоид дважды протыкает поверхность более широкого, в результате линия пересечения состоит из двух отдельных участков. Если же нет сквозного протыкания, то линия пересечения будет одна — замкнутая или незамкнутая. Этот факт можно представить себе, оперируя, например, с конусами, которыми можно аппроксимировать наши гиперболоиды для этой цели. В частности, сквозного проты-

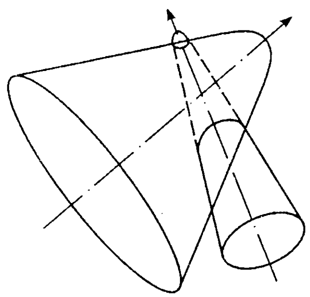

Рис. 37. Иллюстрация пересечения двух гиперболоидов по неодносвязной линии. В этом случае оси гиперболоидов направлены в разные стороны.

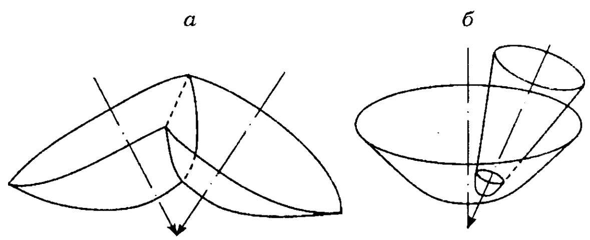

Рис. 38. Иллюстрации пересечения двух гиперболоидов, оси которых направлены в одну точку, лежащую снаружи.

кания не будет, если вершины обоих гиперболоидов направить в одну точку вне гиперболоидов (рис. 38). Это вполне очевидное частное требование является достаточным условием для односвязности линии пересечения, и мы используем его для доказательства свойства 3.

Доказательство, которое мы сейчас проведем, базируется на том, что для тройки шаров разного радиуса всегда существует пара гиперболоидов Вороного, ориентированных на общую внешнюю точку. Действительно, пронумеруем наши шары в порядке уменьшения радиусов: $R_1 > R_2 > R_3$. Схематично можно изобразить наши шары и направления вершин гиперболоида как показано на рис. 39. Посмотрим на гиперболоиды H_{12} и H_{13}. Они имеют общий фокус — центр самого большого шара с номером *1*, лежащий вне этих гиперболоидов. По первому свойству гиперболоидов Вороного именно на больший шар направлены их вершины (см. раздел 4.2.1). Таким образом, указанные гиперболоиды ориентированы на общую внешнюю точку, а поэтому, как обсуждалось, должны пересекаться по односвязной линии. Тот факт, что другие пары гиперболоидов, например, H_{13} и H_{23}, имеют "опасные" направления вершин, уже не имеет значения, так как третий гиперболоид должен пересечься по той же линии (см. 4.2.2.).

Наконец, сформулируем и докажем свойство S-канала Вороного, которое пригодится для нахождения узких горл в упаковке шаров.

4. *Радиус S-канала Вороного имеет экстремальное значение в точке пересечения с центральной плоскостью.*

Напомним, что радиусом канала в точке p мы называем расстояние от данной точки канала до поверхностей шаров, определяющих этот канал. Для планарной тройки шаров имеется только одна точка пересечения канала с центральной плоскостью. При этом, очевидно, реализуется минимальное значение радиуса канала, т.е. узкое горло между шарами расположено именно на центральной плоскости. Замкнутый канал Вороного пересекает центральную плоскость в двух точках. В одной реализуется минимальное, а в другой — максимальное значение радиуса данного канала.

Справедливость сказанного можно понять из рис. 40. Напомним, что любой канал Вороного — это линия на гиперболоиде, симметричная относительно центральной плоскости тройки шаров. Для незамкнутого канала точка его

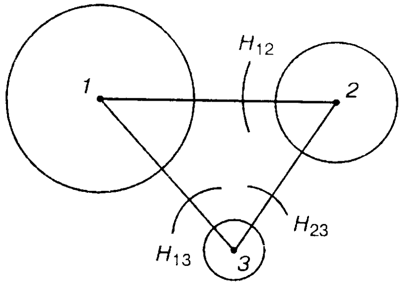

Рис. 39. К доказательству утверждения 3. Схематично изображены направления вершин гиперболоидов Вороного для конфигурации трех шаров разного размера. Гиперболоиды H_{12} и H_{13} направлены на центр шара *1*, который является их общим фокусом.

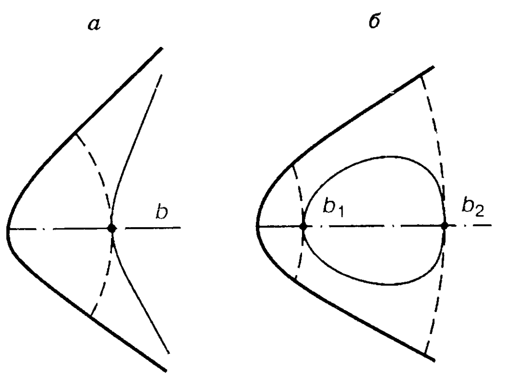

Рис. 40. Расположение S-каналов Вороного на гиперболоиде Вороного. S-канал Вороного симметричен относительно центральной плоскости. Для незамкнутого канала точка пересечения его с плоскостью (точка b) является ближайшей к вершине гиперболоида (*а*). Для замкнутого канала имеется две точки пересечения. Точка b_1 является ближайшей к вершине гиперболоида, а точка b_2 — самой удаленной (*б*).

пересечения с центральной плоскостью всегда будет самой близкой к вершине гиперболоида (см. рис. 40, *а*). По-другому он просто не может располагаться на гиперболоиде, так как его конусы должны уйти в бесконечность. Для замкнутого канала его точки пересечения с плоскостью являются, соответственно, самой близкой и самой дальней точками канала относительно вершины (см. рис. 40, *б*). Это следует из того, что линия пересечения гиперболоидов обязана быть "выпуклой" (как примерно показано на рисунке). Она не может иметь вид гантели или сердечка, которые представляют собой линии более высокого порядка, чем второй. Наконец, из свойств гиперболоидов Вороного мы знаем, что чем дальше точка от вершины гиперболоида, тем дальше она от поверхностей шаров, т.е. тем больше радиус канала для этой точки.

4.2.4. Интерстициальная сфера. Конфигурации четверок шаров

Займемся теперь четверками шаров. Поскольку пустая сфера может иметь только одну точку касания с шаром, то четыре шара в трехмерном пространстве фиксируют пустую сферу. Геометрическое место точек, равноудаленных от поверхностей четырех шаров, представляет собой математическую точку — S-узел Вороного. Однако здесь имеется принципиальное отличие от случая одинаковых шаров. Для шаров разного радиуса их может быть одна, две или ни одной. Другими словами, четверка шаров в общем случае может иметь одну или две интерстициальные сферы или не иметь такой сферы вообще.

Двумерную иллюстрацию сказанного см. на рис. 41. Заметим, что других ситуаций не бывает. Четверка шаров не может иметь больше двух интерстициальных сфер. Привести простые геометрические доводы в пользу данного факта затруднительно. Однако существует аналитическое решение этой проблемы. В разделе 6 при изложении алгоритма построения S-сетки Вороного выписаны формулы для нахождения координат центров и радиусов таких сфер. Анализ формул показывает, что в зависимости от конфигурации шаров может быть одно, два или ни одного действительного решения с положительным значением ра-