

5.3. Замечания о системах невыпуклых тел

Разбиение Вороного существует и для невыпуклых тел, однако оно может содержать неприятные свойства из-за неоднозначности определения ближайшего расстояния от точки до поверхности (см. рис. 54). Мы не будем заниматься этой задачей в общем случае, это дело математиков. Заметим только, что в некоторых случаях проблему невыпуклости можно обойти простым способом. Если невыпуклое тело можно представить как объединение нескольких выпуклых, то с системой можно работать как с состоящей из выпуклых тел. Например, если наши объекты представляют собой “ежей”, то каждую его иглу можно считать отдельным объектом. Более сложная ситуация имеет место, когда наши объекты кривые, например, волокна, завитые в спирали. Подобные системы также могут представлять интерес для практических целей, например, в качестве моделей волоконных фильтров. Однако спираль трудно представить как объединение выпуклых объектов. Проблема неразрешима, если радиусы кривизны наших объектов малы или порядка величины характерного расстояния между объектами. Однако в другом крайнем случае, когда радиусы кривизны заведомо больше, чем характерное расстояние между объектами (слабо искривленные волокна), то двойное касание объекта пустой сферой не реализуется. В этом случае с такой системой можно работать как с системой выпуклых тел (по крайней мере можно использовать предлагаемый ниже алгоритм для построения сетки Вороного).

6. СПОСОБЫ ПОСТРОЕНИЯ РАЗБИЕНИЯ ВОРОНОГО—ДЕЛОНЕ

Существуют различные способы расчета многогранников Вороного, симплексов Делоне и полного разбиения Вороного—Делоне, выбор между которыми определяется целями исследования. Математики создают свои алгоритмы, см., например, [47—51]. Характерной чертой многих математических алгоритмов является их рекуррентность (incremental methods). В этом случае разбиение Вороного—Делоне перестраивается в процессе добавления новых объектов в систему. Такое бывает нужно, например, для конструирования нерегулярной сетки Делоне с переменной плотностью узлов, на которой бывает удобно решать дифференциальные уравнения для специальных задач [52, 53]. Существуют алгоритмы для построения двумерных [47, 54, 55] и, наоборот, многомерных [49, 56] разбиений. Некоторые исследователи создают узкоспециализированные алгоритмы, например, для нахождения ближайших соседей или только объема многогранников Вороного. В книге [2] дается обзор различных алгоритмов, главным образом, для работы на плоскости.

Физики разрабатывают свои алгоритмы. Специфика их в том, чтобы извлечь как можно больше структурной информации об исследуемой системе путем расчета всевозможных характеристик многогранников Вороного, симплексов Делоне и самого разбиения. Авторы первых “физических” алгоритмов

вычисляли многогранники Вороного для исследования структуры жидкостей. Самые первые из опубликованных это алгоритм Бростова с соавторами [57] и алгоритм Финни [58]. Они еще не ставили своей целью достичь максимальной эффективности алгоритма, однако стимулировали разработку и публикацию новых, более эффективных, отметим, например, алгоритм Танимуры с соавторами [59] и алгоритм Медведева [60].

Математики оценивают эффективность работы алгоритма по степени возрастания времени расчета с увеличением числа n точек в системе. Например, если время растет квадратично с n , то записывают это как $O(n^2)$ и говорят, что эффективность алгоритма “порядка n^2 ”. Подразумевается, что указанная закономерность должна выполняться с ростом n . Для физических задач такая оценка не имеет особого смысла, так как наши модели всегда содержат ограниченное число атомов, которое не меняется. Здесь используются другие критерии. Например, эффективность расчета многогранника Вороного может быть оценена через количество соседей N_S , которые используются для построения многогранника. Эти соседи находятся внутри некоторой сферы (или куба) вокруг центрального атома и определяются перед началом расчета многогранника. Эффективность обоих алгоритмов [59] и [60] формально оценивается как $O(vN_S)$, тогда как эффективность первых алгоритмов Бростова [57] и Финни [58] является $O(N_S^3 \ln N_S)$ и $O(fN_S^3)$, соответственно. Здесь f — число граней, а v — вершин на многограннике.

Ниже излагаются алгоритмы, используемые автором в своих работах. Отмечаются наиболее важные моменты для реализации данных алгоритмов. Однако прежде чем переходить к алгоритмам, уясним, каким образом следует представлять разбиение Вороного—Делоне для компьютерного расчета, какую информацию мы должны знать и уметь вычислять для конкретного использования метода.

6.1. Численное представление разбиения Вороного—Делоне

Для численного представления разбиений Вороного или Делоне достаточно задать их сетки. В свою очередь, для определения сетки (графа) нужно, во-первых, перенумеровать узлы, т.е. приписать каждому из них порядковый номер, во-вторых, иметь таблицу связности узлов и, наконец, если нас интересует метрика, знать координаты узлов. Все это должно определяться в процессе построения разбиения. Дополнительный структурный анализ может потребовать расчета других характеристик, но это уже отдельная работа.

Исходной информацией у нас является массив координат центров атомов. (Будем работать здесь с системой $\{A\}$.) Нумерация атомов естественным образом определяется порядком их расположения в исходном массиве. Нумерация узлов сетки Вороного устанавливается в порядке их выявления. Заметим, что разные алгоритмы могут нумеровать узлы системы $\{D\}$ в разном порядке.

6.1.1. Сетка Вороного

Для записи координат узлов сетки Вороного необходим вещественный массив D размерностью $(1:3, 1:nD)$, где nD — число узлов сетки. Номера узлов естественно определять в том порядке, в котором их координаты будут записаны в массиве D . Для указания связей (таблицы связности) достаточно иметь целый массив DD размерностью $(1:4, 1:nD)$, имея в виду, что у сетки Вороного любой невырожденной системы степень вершин равна четырем. В каждом i -м столбце этого массива, где i пробегает значения от 1 до nD , записаны номера его смежных узлов (симплексов Делоне). Таким образом, пара массивов D и DD полностью определяют сетку Вороного.

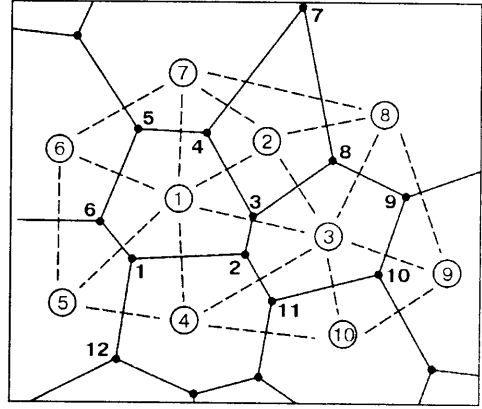
6.1.2. Сетка Делоне

Поскольку узлами этой сетки являются атомы, то их номера и их координаты содержатся в исходном массиве данных, определяющих систему $\{A\}$. Система, состоящая из nA атомов, содержится в вещественном массиве A размерностью $(1:3, 1:nA)$. Связность на этой сетке определяется геометрическим соседством. Для ее записи нужен целый массив AA размерностью $(1:fmax, 1:nA)$. В каждом i -м столбце этого массива, где i пробегает значения от 1 до nA , записаны номера его геометрических соседей. В отличие от сетки Вороного здесь число соседей в общем случае различно. Поэтому (при работе, например, на Фортране) следует задать длину столбцов не менее, чем максимальное число геометрических соседей, возможное у атомов данной системы. Это значение $fmax$ априори неизвестно и определяется только после построения разбиения Вороного—Делоне. Опыт работы с трехмерными моделями физических систем говорит о том, что для “однородных” систем типа плотных упаковок одинаковых шаров значение $fmax$ обычно не превышает 20; для “ажурных” типа тетраэдрически координированных систем (аморфный кремний), а также случайно разбросанных точек бывает и 30, а теоретически может быть еще больше. Пара массивов A и AA содержат всю информацию, определяющую сетку Делоне.

6.1.3. Соответствие между сетками Вороного и Делоне

Для установления соответствия между системами $\{A\}$ и $\{D\}$ достаточно предусмотреть массив DA размерностью $(1:4, 1:nD)$ или AD размерностью $(1:vmax, 1:nA)$. В первом массиве для каждого узла сетки Вороного (симплекса Делоне) записаны номера атомов, образующих данный симплекс. Во втором массиве для каждого атома указываются номера узлов сетки Вороного, являющиеся вершинами многогранника Вороного данного атома. Величина $vmax$ — максимально возможное число вершин многогранника Вороного данной системы. Как и в случае с $fmax$, точное значение $vmax$ мы можем узнать только после того, как построим все многогранники Вороного системы. С помощью массивов DA и AD легко вычисляется связность сетки Делоне (массив AA), если

Рис. 57. Примеры массивов AA , DD , DA и AD , определяющих связность и инцидентность узлов двумерных сеток Вороного и Делоне. Черными точками и сплошными линиями отмечена сетка Вороного, большими кружками и пунктирными линиями — сетка Делоне. Содержание трех первых столбцов массивов следующее:



AA				DD				DA				AD			
1	2	3	...	1	2	3	...	1	2	3	...	1	2	3	...
2	1	2	...	2	1	2	...	1	1	1	...	1	3	2	...
3	7	8	...	6	3	4	...	5	3	2	...	2	4	3	...
4	8	9	...	12	11	8	...	4	4	3	...	3	7	8	...
5	3	10	4	8	9	...
6		4	5		10	...
7		1	6		11	...

мы имеем только сетку Вороного (массив DD), и наоборот, из DD легко пересчитать AA .

На рис. 57 приведен пример наших массивов. Массивы AA и DD представляют собой таблицы смежности, а DA и AD — таблицы инцидентности для элементов массивов A и D . Известную в теории графов матрицу смежности (инцидентности) мы не используем, так как она состоит только из нулей и единиц и является громоздкой для компьютерных расчетов.

6.1.4. Характерные числа

Разбиение Вороного—Делоне каждой системы $\{A\}$ характеризуется следующими основными числами: nA — число атомов системы, nF — число граней мозаики Вороного, nE — число связей сетки Вороного, nD — число узлов сетки Вороного. Если наша система заполняет все пространство, то указанные числа стремятся к бесконечным значениям, однако имеющиеся соотношения между ними остаются. Для конечной системы с периодическими граничными условиями все характерные числа имеют вполне определенные конечные значения.

Кроме упомянутых выше максимальных значений f_{max} и v_{max} имеют практический интерес величины \bar{v} — среднее число вершин многогранников Вороного и \bar{f} — среднее число граней многогранников Вороного, усредненные по всему разбиению Вороного.

Для разных систем с одним и тем же числом атомов nA характерные числа могут быть различными. Для невырожденных систем они связаны простыми соотношениями (подобные соотношения для примитивных многогранников рассматриваются в Приложении).

Из того, что в каждую вершину сетки Вороного входит ровно по четыре связи и каждая связь соединяет два узла, имеем:

$$nE = 2 \cdot nD .$$

Поскольку nF — это также число связей сетки Делоне, а в каждую ее вершину сходится в среднем по \bar{f} связей, то:

$$nF = nA \cdot \bar{f} / 2 .$$

Аналогично, полное число всех общих вершин многогранников есть

$$nD = nA \cdot \bar{v} / 4 .$$

Из двух последних формул и выражения $v = 2f - 4$, взятого из Приложения, следует очень простое и полезное соотношение:

$$nF = nD + nA .$$

Его можно использовать для контроля правильности расчета разбиения Вороного—Делоне.

6.2. Построение индивидуальных многогранников Вороного. Метод обхода граней

В данном алгоритме построение многогранника Вороного осуществляется последовательным нахождением вершин путем обхода вокруг каждой грани [60]. Он был разработан в начале 80-х, обладает высокой эффективностью и показал устойчивую работу на вычислительных машинах различных типов.

В этом алгоритме информация о многограннике Вороного записывается в специальном виде, удобном для расчета всевозможных топологических и метрических характеристик многогранника. Формируется целый массив $NF(1:Nangls, 1:Nfaces)$, представляющий собой таблицу смежности для граней на данном многограннике. Грани нумеруются в порядке выявления. Для k -й грани (в k -м столбце) записываются номера смежных к ней граней. Порядок записи этих граней идет в той последовательности, в которой выявляются образованные ими ребра на данной k -й грани. Тем самым и грани, и вершины многогранника сразу оказываются упорядоченными для данного многогранника.

Основная вычислительная работа алгоритма заключается в нахождении точек пересечения трех плоскостей. Для этого решается система уравнений вида:

$$A_i x + B_i y + C_i z - D_i = 0 \quad (i=1, 2, 3).$$

Здесь x, y, z — координаты искомой точки, а коэффициенты A_i, B_i, C_i, D_i задают три плоскости Вороного между центральным атомом i_0 , для которого строится многогранник Вороного, и тремя текущими атомами из его окружения. Через координаты атомов коэффициенты выражаются таким образом:

$$A_i = (x_0 - x_i)/2, \quad B_i = (y_0 - y_i)/2, \quad C_i = (z_0 - z_i)/2, \quad D_i = A_i^2 + B_i^2 + C_i^2.$$

Перед началом расчета многогранника составляется список ближайших соседей данного атома, из которых будут определяться геометрические соседи. Количество этих атомов должно несколько превышать максимально возможное число граней на многогранниках Вороного исследуемой системы, так как геометрические соседи не обязательно самые близкие к центральному атому. Особенно это относится к неосновным геометрическим соседям. Для гомогенных систем (упаковки шаров) бывает достаточно взять 25—30 ближайших соседей, для ажурных (типа структуры воды) — порядка 50, для гетерогенных может потребоваться 100 и даже больше. Для повышения эффективности работы алгоритма полезно расположить выбранных ближайших соседей в порядке увеличения расстояния от центрального атома.

1. На первом шаге работы алгоритма находится первая грань искомого многогранника. Перебирая все атомы системы, находим атом i_1 , ближайший к i_0 . Плоскость Вороного этих атомов (назовем ее P_1) является образующей плоскостью, т.е. дает ненулевую грань многогранника Вороного атома i_0 . Более того, точка p пересечения этой плоскости с отрезком, связывающим атомы i_0 и i_1 (рис. 58, а), обязана лежать на этой грани. Если бы точка p не лежала на грани, то это означало бы существование атома j , плоскость Вороного которого P_j отсекала бы точку p от центрального атома i_0 . Но в этом случае плоскость P_j лежала бы ближе к i_0 , чем P_1 , а значит и атом j был бы ближе к центральному, чем i_1 , что противоречит условию выбора атома i_1 . (Здесь мы используем то свойство плоскости Вороного, что точка p есть основание перпендикуляра из i_0 на плоскость P_1 .)

2. Перебирая всех оставшихся соседей, находим атом i_2 , плоскость Вороного которого P_2 пересекает плоскость P_1 по линии (P_1P_2) , ближайшей к уже известной точке p (рис. 58, б). Основание перпендикуляра из точки p на прямую (P_1P_2) (точка q) будет принадлежать ребру искомого многогранника. Это также понятно, ибо точка q не может быть отсечена от точки p никакой другой линией (P_1P_j) на плоскости P_1 , так как опять точка q есть ближайшая к p по построению.

3. Находим атомы i_3 и i_e , плоскости Вороного которых P_3 и P_e пересекают линию (P_1P_2) в точках V_1 и V_e , ближайших к точке q (рис. 58, в). Точки V_1 и V_e являются вершинами искомого многогранника. Это очевидно, так как точка q , мы знаем, принадлежит ребру, а ближайшие к ней точки пересечения с какими-либо плоскостями Вороного системы являются его концами, т.е. вершинами многогранника Вороного.

4. Перебирая оставшихся соседей, находим атом i_4 , плоскость Вороного P_4 которого пересекает прямую (P_1P_3) в точке V_2 , ближайшей к вершине V_1 (рис. 58, z). Эта точка V_2 будет очередной вершиной на первой грани, что следует из рассуждений, аналогичных приведенным на шаге 3. Продолжая эту работу, будем определять вершину за вершиной, пока не закончим обход, достигнув вершины V_e .

Итак, первая грань многогранника Вороного определена. Известны координаты всех ее вершин и последовательность номеров атомов, дающих смежные с ней грани. Для нахождения остальных граней используем то, что каждый выявленный при обходе атом дает свою ненулевую грань этого многогранника.

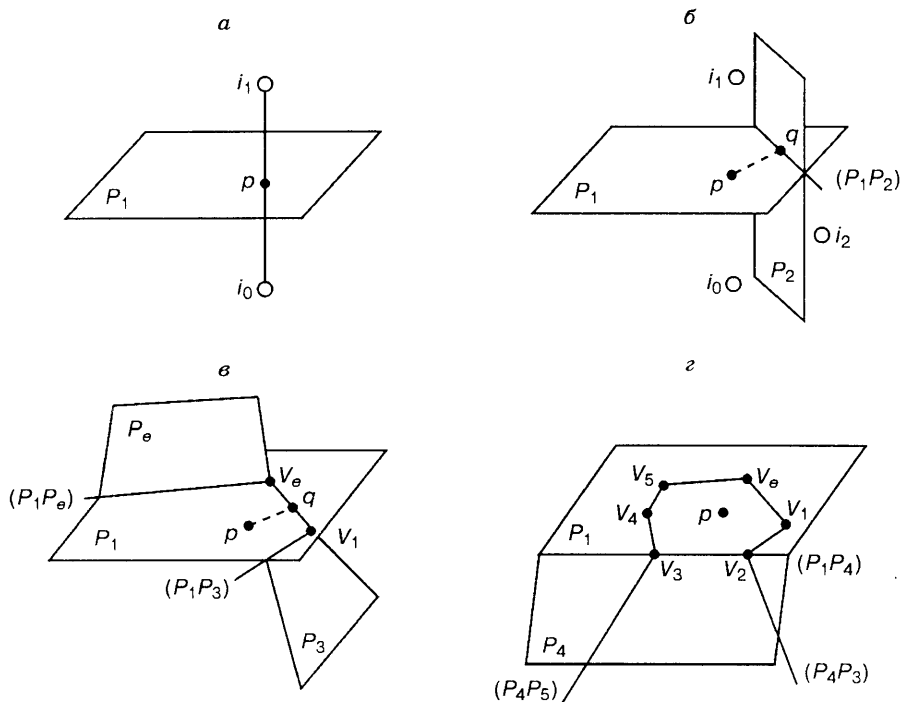


Рис. 58. Построение многогранника Вороного вокруг атома i_0 по методу “обхода граней”: a — плоскость Вороного P_1 центрального атома i_0 и ближайшего к нему атома i_1 дает грань на искомом многограннике. Точка p пересечения отрезка i_0i_1 с плоскостью лежит на этой грани; b — атом i_2 , плоскость Вороного которого P_2 дает на плоскости P_1 линию (P_1P_2) , ближайшую к точке p . Она определяет вторую грань многогранника. Точка q — основание перпендикуляра из точки p на линию (P_1P_2) — лежит на ребре многогранника; v — атомы i_3 и i_e , плоскости Вороного которых пересекают линию (P_1P_2) в точках V_1 и V_e , ближайших к точке q , дадут грани искомого многогранника. Точки V_1 и V_e являются вершинами, а отрезок V_1V_e — ребром многогранника; z — атом i_4 , плоскость Вороного которого P_4 пересекает линию (P_1P_3) в точке V_2 , ближайшей к вершине V_1 , дает грань многогранника. Продолжая таким образом, в конце концов замкнем грань (совершим ее обход), найдя атом i_e , определяющий вершину V_e .

Причем для каждой из них уже имеется информация, позволяющая начать обход грани. Например, плоскость P_4 содержит вершины V_2 и V_3 , определяющие ребро на линии (P_1P_4) , лежащей на этой плоскости, а также линии (P_4P_3) и (P_4P_5) (см. рис. 58, z). Начав обход с одной из этих вершин, мы, следуя процедуре шага 4, достигнем другую, определив тем самым грань на плоскости P_4 . При обходе этой грани выявятся, очевидно, новые атомы, дающие очередные грани на данном многограннике. Причем для каждой из них мы вновь имеем аналогичную стартовую информацию для их обхода. Дальнейшая работа состоит в последовательном обходе всех выявляемых таким способом новых плоскостей Вороного, дающих грани многогранника. Исчерпав все такие плоскости, получаем готовый многогранник Вороного.

С помощью этого алгоритма легко получить сетку Делоне. Для этого нужно построить многогранники Вороного для всех атомов системы. Тем самым мы будем знать для каждого атома его геометрических соседей. После этого останется только должным образом записать их в массив $AA(1:fnax, 1:nA)$, используя нумерацию атомов, заданную в исходном массиве A .

6.3. Построение сетки Вороного. Метод описанной сферы

Предлагаемый алгоритм служит в первую очередь для построения сетки Вороного и симплексов Делоне. Здесь по сути дела эксплуатируется идея пустого шара Делоне для нахождения узлов сетки Вороного. Вычисление вершин многогранника Вороного с помощью пустой сферы, описанной вокруг четверки центров, представляется простой и наглядной процедурой, используемой многими исследователями. В частности, похожая идея реализована в алгоритме расчета многогранников Вороного, описанного в [59]. Наш алгоритм ориентирован на построение всей мозаики целиком, поэтому порядок выявления узлов у нас не привязывается к отдельным многогранникам. Узлы с близкими номерами могут относиться к разным многогранникам, во всяком случае не лежат на одной и той же грани, как это было в алгоритме “обхода граней”.

Основная вычислительная работа алгоритма состоит в построении описанных сфер вокруг четырех точек. Для нахождения такой сферы решается система уравнений

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

Здесь x_i, y_i, z_i есть известные координаты центров, вокруг которых строится описанная сфера. R есть радиус искомой сферы, x, y, z — координаты ее центра. Данная система легко сводится к трем линейным уравнениям относительно координат центра. Решение такой системы не вызывает никаких проблем. Определив x, y, z , сразу же вычисляем значение R с помощью любого из четырех уравнений исходной системы. При решении линейной системы приходится следить за ее детерминантом. Если он близок к нулю, то это означает, что

данная четверка центров компланарна и у нее нет определенной описанной сферы. Такое бывает для вырожденных систем.

Итак, сначала находится первый (стартовый) симплекс Делоне. Для этого:

1. Выбирается какой-либо атом i_1 заданной системы атомов $\{A\}$. Этот атом лучше выбирать в центре системы, с тем чтобы первый симплекс не содержал граничных атомов.

2. Перебирая все атомы системы, находим ближайший к i_1 атом i_2 . Заметим, что сфера, для которой отрезок i_1i_2 является диаметром, будет обязательно пустой. Атом, если бы он оказался внутри этой сферы, был бы ближе к i_1 , чем i_2 (рис. 59, а).

3. Из всех оставшихся атомов находим атом i_3 такой, чтобы окружность, описанная вокруг i_1, i_2 и i_3 , имела минимальный радиус.

Здесь отметим, что сфера, для которой данная окружность является экваториальной, тоже пуста. Убедимся в этом. Обозначим эту сферу как S_{123} (рис. 59, б). В самом деле, та ее часть, которая покрыта сферой S_{12} , пуста в силу шага 2. Остается “полумесяц” вне S_{12} . Если бы некий атом i_n располагался в этой части, то описанная вокруг атомов i_1, i_2 и i_n сфера имела бы радиус меньше, чем сфера S_{123} . Уменьшая радиус сферы S_{123} и сохраняя на ней атомы i_1 и i_2 , мы сжимаем ее поверхность к поверхности сферы S_{12} . В этом процессе наша уменьшающаяся сфера пройдет через все точки области между S_{12} и S_{123} , т.е. через любой атом i_n , оказавшийся там. Но в этом случае окружность, описанная вокруг i_1, i_2, i_n , имеет радиус меньше, чем радиус исходной окружности. Таким образом, наличие атомов внутри S_{123} противоречит условию выбора атома i_3 .

4. Находим четвертый атом i_4 такой, чтобы описанная вокруг атомов i_1, i_2, i_3, i_4 сфера имела минимальный радиус.

Эта сфера тоже пуста. В силу шага 3 посторонний атом не может находиться в той ее части, которая покрыта сферой S_{123} . Если же какой-то атом i_n находится внутри S_{1234} , располагаясь вне S_{123} , то уменьшая радиус сферы S_{1234} , сохраняя тройку i_1, i_2, i_3 на ее поверхности, мы обязательно достигнем атом i_n поверхностью этой сжимающейся сферы (см. рассуждения для шага 3). В тот

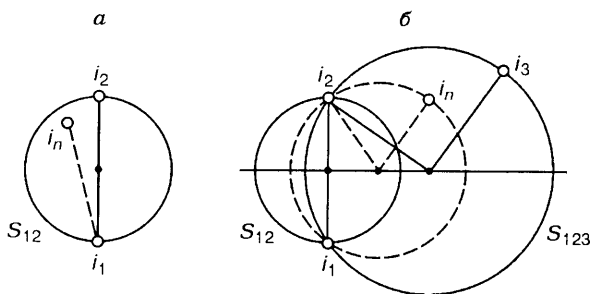


Рис. 59. Нахождение стартового симплекса Делоне по методу описанной сферы: а — если атом i_2 — ближайший к атому i_1 , то сфера S_{12} , для которой отрезок i_1i_2 является диаметром, — пуста. Иначе любой атом i_n внутри этой сферы лежал бы к i_1 ближе чем i_2 ; б — аналогично, если

атом i_3 дает с атомами i_1 и i_2 описанную окружность минимального радиуса, то сфера S_{123} , имеющая эту окружность в качестве диаметральной, пуста.

момент она будет описанной сферой для i_1, i_2, i_3, i_n с радиусом меньше чем у сферы S_{1234} , что невозможно по условию.

Итак, найденная четверка атомов представляет один из симплексов Делоне системы $\{A\}$, ибо их описанная сфера действительно пуста. Ее центр дает первый узел сетки Вороного.

На втором этапе работы алгоритма начинаем пристраивать новые симплексы к граням уже найденных. Пусть мы имеем симплекс с атомами $i_\alpha, i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ в его вершинах. Требуется найти смежный ему по грани $i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ симплекс $i_\beta, i_\gamma, i_\delta, i_\eta$, т.е. задача состоит в том, чтобы из всех атомов системы $\{A\}$ выбрать нужный атом i_η . Этим атомом будет тот, который удовлетворяет следующим условиям:

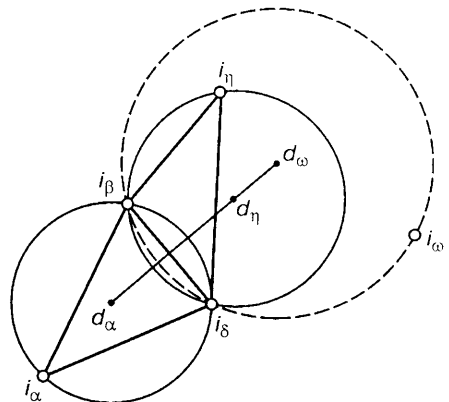
1) найденный атом должен лежать по другую сторону от плоскости атомов $i_\beta, i_\gamma, i_\delta$, чем атом i_α . Это требование очевидно, иначе симплексы будут входить друг в друга;

2) центр описанной сферы атомов $i_\beta, i_\gamma, i_\delta, i_\eta$ (обозначим его точкой d_η) располагается на ближайшем расстоянии к центру описанной сферы исходного симплекса $i_\alpha, i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ (точка d_α) (рис. 60).

Напомним, что все центры описанных сфер вокруг тройки атомов $i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ и любого четвертого лежат на одной прямой, а именно — на канале Вороного данной тройки. Отметим также, что на связи сетки Вороного не должно быть других узлов, кроме тех, которые она соединяет. Узлы Вороного являются концевыми точками связи. Поэтому, выбирая атом i_η , мы действительно должны взять тот, который дает самый близкий узел Вороного d_η к точке d_α на канале $C_{\beta\gamma\delta}$.

Заметим, что использование данного алгоритма предполагает существование сетки Вороного. Однако это было доказано ранее из весьма общих соображений. Из существования сетки Вороного следует также, что, последовательно пристраивая новые симплексы Делоне к каждой непокрытой грани симплексов, мы в конце концов построим всю сетку Вороного.

Рис. 60. Нахождение нового симплекса Делоне (двумерная иллюстрация). Атом i_η совместно с i_β и i_δ определяет симплекс Делоне, смежный к известному симплексу $i_\alpha, i_\beta, i_\delta$, в том случае, если центр его описанной окружности d_η лежит на минимальном расстоянии от центра описанной окружности d_α исходного симплекса. Любой другой атом системы i_ω дает описанную окружность, которая уже не будет пустой (включает в себя другие атомы, в частности, атом i_η).



момент она будет описанной сферой для i_1, i_2, i_3, i_n с радиусом меньше чем у сферы S_{1234} , что невозможно по условию.

Итак, найденная четверка атомов представляет один из симплексов Делоне системы $\{A\}$, ибо их описанная сфера действительно пуста. Ее центр даст первый узел сетки Вороного.

На втором этапе работы алгоритма начинаем пристраивать новые симплексы к граням уже найденных. Пусть мы имеем симплекс с атомами $i_\alpha, i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ в его вершинах. Требуется найти смежный ему по грани $i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ симплекс $i_\beta, i_\gamma, i_\delta, i_\eta$, т.е. задача состоит в том, чтобы из всех атомов системы $\{A\}$ выбрать нужный атом i_η . Этим атомом будет тот, который удовлетворяет следующим условиям:

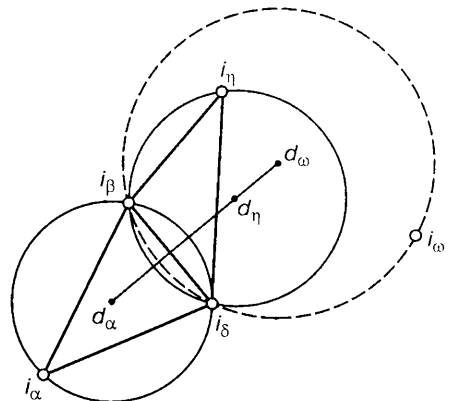
1) найденный атом должен лежать по другую сторону от плоскости атомов $i_\beta, i_\gamma, i_\delta$, чем атом i_α . Это требование очевидно, иначе симплексы будут входить друг в друга;

2) центр описанной сферы атомов $i_\beta, i_\gamma, i_\delta, i_\eta$ (обозначим его точкой d_η) располагается на ближайшем расстоянии к центру описанной сферы исходного симплекса $i_\alpha, i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ (точка d_α) (рис. 60).

Напомним, что все центры описанных сфер вокруг тройки атомов $i_\beta, i_\gamma, i_\delta$ и любого четвертого лежат на одной прямой, а именно — на канале Вороного данной тройки. Отметим также, что на связи сетки Вороного не должно быть других узлов, кроме тех, которые она соединяет. Узлы Вороного являются концевыми точками связи. Поэтому, выбирая атом i_η , мы действительно должны взять тот, который дает самый близкий узел Вороного d_η к точке d_α на канале $S_{\beta\gamma\delta}$.

Заметим, что использование данного алгоритма предполагает существование сетки Вороного. Однако это было доказано ранее из весьма общих соображений. Из существования сетки Вороного следует также, что, последовательно пристраивая новые симплексы Делоне к каждой непокрытой грани симплексов, мы в конце концов построим всю сетку Вороного.

Рис. 60. Нахождение нового симплекса Делоне (двумерная иллюстрация). Атом i_η совместно с i_β и i_δ определяет симплекс Делоне, смежный к известному симплексу $i_\alpha, i_\beta, i_\delta$, в том случае, если центр его описанной окружности d_η лежит на минимальном расстоянии от центра описанной окружности d_α исходного симплекса. Любой другой атом системы i_ω дает описанную окружность, которая уже не будет пустой (включает в себя другие атомы, в частности, атом i_η).



В процессе расчета по данному алгоритму вычисляются координаты каждого узла сетки Вороного и радиус описанной сферы. Кроме того, непосредственно прослеживается связность симплексов, а также инцидентность узлов сетки Вороного и атомов системы $\{A\}$. Другими словами, данный алгоритм безо всяких дополнительных усилий позволяет сформировать основные массивы, полностью характеризующие разбиение Вороного—Делоне: $D(1:3, 1:nD)$, $DD(1:4, 1:nD)$ и $DA(1:4, 1:nD)$ (см. раздел 6.1). Кроме того, для каждого симплекса мы имеем значения радиуса описанной сферы R_{DS} , нужные для структурного анализа, которые также полезно записать в специальный массив $R(1:nD)$.

6.4. Построение S -сетки Вороного для систем шаров разного радиуса

6.4.1. Общие замечания

Прежде чем приступить к системе разных шаров, напомним, что для одинаковых шаров S -сетка тождественна обычной сетке Вороного, построенной для центров шаров, и для ее построения можно использовать любой из вышеизложенных алгоритмов. При этом радиус каждой интерстициальной (вписанной между шарами) сферы R_i выражается через радиус описанной сферы симплекса R_{DS} очевидным образом: $R_i = R_{DS} - R_A$, а радиус узкого горла R_b связан с радиусом окружности, описанной около соответствующей грани симплекса Делоне R_{FS} , аналогичным выражением $R_b = R_{FS} - R_A$ (см. раздел 3.2).

Для разных шаров нужен свой алгоритм. Здесь мы предлагаем способ, аналогичный “методу описанных сфер”. Он позволяет построить S -сетку Вороного для любой системы $\{B\}$, имеющей односвязную сетку. Если S -сетка Вороного несвязная (несимплициальная система шаров), то мы можем найти только одну из ее частей. Но поскольку физические системы, как правило, имеют односвязную сетку, то предлагаемый алгоритм достаточен для большинства приложений. Он успешно использовался, например, в работе [61] для изучения трехмерной упаковки Аполлония, где размер шаров различался примерно в 10 раз.

Главная особенность данного алгоритма в том, что для нахождения узлов S -сетки Вороного мы должны уметь находить вписанные сферы между произвольными четверками шаров. Для этого решается система уравнений

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

Здесь R и x, y, z есть искомый радиус и координаты центра интерстициальной сферы, а R_i и x_i, y_i, z_i — радиусы и координаты центров заданных шаров соответственно. Решение этой системы достаточно громоздко. Из-за различных значений R_i она не сводится к системе линейных уравнений, а остается системой уравнений второй степени. Поэтому ее решение не является однозначным. В зависимости от исходных параметров возможны одно, два или ни одного действительного решения. Ниже показано, как решать эту систему.

Из-за возможности существования двух решений приведенной системы уравнений возникает дополнительная сложность при построении S -сетки. Уз-