

ЗАВЕРШЕННОСТЬ КОМПЛЕКТАЦИИ ПЛОТНЕЙШИХ УКЛАДОК ДВУХСОРТНЫХ КРУГОВ НА ПЛОСКОСТИ

Г.Ф. Пинаев

Резюме _ Представлены аргументы, что число 9 известных плотнейших двухсортных упаковок кругов на плоскости не может быть увеличено.

Ключевые слова _ 2D упаковки, укладки кругов на плоскости, плотнейшая укладка кругов, двухсортная укладка, ячейка укладки кругов, ядро ячейки, оболочка ячейки, гнездо упаковки, замощающая область укладки кругов;

ВВЕДЕНИЕ _ Задача Кеплера (1611 г) *односортной 3D* укладки 13 шаров вокруг одного шара ждала решения методами геометрии 340 лет и найдено, что можно уложить лишь 12 шаров (Варден, Лич, Шютте)[1]; кристаллографы решили задачу на 70 лет раньше (Барлоу, 1883 г) [2].;

Двухсортных плотнейших *3D* упаковок шаров известно две, *одну* получим заполняя шарами тетраэдрические пустоты односортной шаровой *3D* кладки, *другую* – заполнением октаэдрических пустот односортной кладки шаров [3]. Наличие в односортных *3D* шаровых упаковках октаэдрических пустот (кроме пустот тетраэдрических) делает, формально говоря, *3D* односортные шаровые упаковки не самыми «плотнейшими по определению».

2D Плотнейшие Укладки Кругов 2-сортных (ПУК2) также интересны. В отличие от *3D* упаковок шаров *2D* укладки полностью очевидны, но это не означает, что их легко получить. *Дискретность упаковок* является ключевым условием решения задач дизайна ПУК2, признаком которой является *треугольность* пустот. Первый список, насчитывающий пять ПУК2, дал Л.Ф.Тот (Венгрия) в книге, изданной в Германии в 1953г, а в 1958г в СССР [4]. В работе А.Хеппеша [5] число ПУК2 доведено до шести, Т.Кеннеди [6] представил 9 ПУК2 и указал, что это число увеличить нельзя, но без дополнительных доказательств. Наша работа число 9 ПУК2 подтверждает.

ТЕЗАУРУС: _ ТЕРМИНЫ и ОБОЗНАЧЕНИЯ: *тройной контакт* кругов $\Delta(1, 2, 3)$ -- это такой кластер трёх кругов (триада), где каждый круг смежен двум другим кругам на отрезках $\{[c1(A)-c2(B)], [c1(A)-c3(C)], [c2(B)-c3(C)]\}$, или иначе на сторонах $\{(1,2),(1,3),(2,3)\}$, в точках $\{a12, a13, a23\}$, где $\{c1, c2, c3\}$ – указания центров кругов, $\{A, B, C\}$ – указания размеров кругов $\{1, 2, 3\}$; *ракурс (угол) контакта* кругов (2,3) относительно круга (1) в вышеуказанной триаде кругов $\Delta(1, 2, 3)$, находящихся в тройном контакте, равен углу $\Phi(2,3)_1$, или $\langle 213 \rangle$, т.е. углу между отрезками $[c1-- c2]$ и $[c1-- c3]$, где $c1--$ *вершина*, $c2$ и $c3--$ *крылья* ракурсного угла $\Phi(2,3)_1$; *ядро*, (синоним) *ядро ячейки* –выбранный из числа уложенных кругов круг

радиуса r_A , (по желанию -- радиуса r_B), вокруг которого уложены другие смежные круги, образующие *окружение ядра*;
окружение ядра, (синоним) *оболочка ячейки* – совокупность *всех* кругов ПУК2, смежных заданному или указанному кругу *ядру ячейки*;
ракурсная розетка – замкнутая совокупность *ракурсных* углов, т.е. углов контакта *из центра* круга ядра, смежного кругам (дискам) оболочки ядра к центрам кругов в рассматриваемой *оболочке ядра* ;
ячейка –фрагмент ПУК2, включающий *ядро* вместе с *окружением ядра*, или (тавтология) *ячейка*, есть *ядро ячейки* плюс *оболочка ячейки*;
вид (сорт) ячейки –характеристика ячейки по величине *радиуса* круга ядра ячейки; возможны *1- ячейки*, имеющие *ядра* радиуса $r_A=1$ (*1- ядро*), и *2- ячейка*, имеющие *ядра* радиуса $r_B=r < 1$ (*2- ядро*);
гнездо– минимальный планарный локально плотнейший *2D* фрагмент ПУК2, включающий не менее одной *1-ячейки* плюс *2- ячейку* вместе со *смежными* друг другу *1-ядром* и *2-ядром* ;
замощающая область - фрагмент ПУК2 на бесконечной плоскости, который может быть плотно перенесён и пристыкован к построенной части ПУК2 неограниченное число раз; Согласно кристаллографии (Е.С.Фёдоров [7]), замощающие области на плоскости *можно* представить *параллелоэдрами* (фигуры *параллелограмм*, *шестиугольник* или их фрагмент *треугольник*);
Граф-Проекция ПУК2 (*Г-П ПУК2*) -- граф, полученный заменой каждого круга в ПУК2 вершиной в центре круга и соединением центров смежных кругов отрезками прямых;
ТЕОРЕМА 1_Тройной контакт кругов является признаком *необходимым* и *достаточным* локально плотнейшей *2D* укладки кругов;
СЛЕДСТВИЕ 1: *Граф-Проекция* ПУК2 (*Г-П ПУК2*) есть триангуляция, где все оболочки *ячеек замкнутые* ломаные, каждая вершина оболочки *смежна* двум вершинам оболочки, и все вершины оболочки *смежны ядру* ячейки;
ТЕОРЕМА 2: *Необходимое* условие дизайна ПУК2 из кругов радиусов $r_A=1$ и $r_B=r < 1$ –это возможность синтеза из указанных кругов (дизайн-1) *гнезда*;
Достаточное условие существования ПУК2 на *D2* -плоскости --возможность синтеза из указанных кругов *замощающей области* (дизайн-2), имеющей в себе не менее одного *гнезда*;
СЛЕДСТВИЕ 2: *в Г-П ПУК2* сохраняются фиксированными геометрические характеристики контактов взаимно смежных кругов ПУК2 -- *длины отрезков соединительных* прямых и *ракурсные углы контактов*, что позволяет при дизайне ПУК2использовать *Г-П ПУК2* вместо ПУК2;
СЛЕДСТВИЕ 3: *ракурсная розетка* в *Г-П ПУК2* представляет собой совокупность центральных углов, представленных *ракурсными углами*

контактов в ячейках ПУК2, сумма которых равна полному углу 2π ;

ТЕОРЕМА 3: _ каждая ПУК2 дискретна, параметрами состояния дискретных ПУК2 являются: 1) радиус r_B малых кругов (2-кругов, B-кругов), если радиус больших кругов (1- кругов , A-кругов) принят за эталон равным 1,0000;

2) относительное количество s малых кругов относительно больших кругов (стехиометрия, формула AB_s , $s = \text{число 2-кругов} / \text{число 1-кругов}$) в ПУК2;

СЛЕДСТВИЕ 4: _ каждая ПУК2 имеет оригинальную (не повторяющуюся в других ПУК2) и 1-ячейку (A-ячейку) и 2-ячейку(B- ячейку);

1 _ШКОЛА: 1.1 _КЛЮЧЕВЫЕ УРАВНЕНИЯ: _ Ключевыми уравнениями ПУК2 называем уравнения, выражающие признаки *планарности* и локальной *плотности укладки* кругов в *гнезде* (согласно *Тезаурусу* и определению “гнездо“) в 1- ячейке и 2- ячейке, критерием которой должно быть равное 2π суммарное *дискретное* заполнение угловых $2D$ - окрестностей ядер ячеек;

Уравнение суммарного заполнения угловой окрестности 1-ядра 1-ячейки:

$$i * \Phi(1,1)_1 + j * \Phi(1,2)_1 + k * \Phi(2,2)_1 = 2\pi, \quad (1)$$

Уравнение суммарного заполнения угловой окрестности 2-ядра 2- ячейки:

$$l * \Phi(1,1)_2 + m * \Phi(1,2)_2 + n * \Phi(2,2)_2 = 2\pi, \quad (2)$$

где: $\Phi(1,1)_1, \Phi(1,2)_1, \Phi(2,2)_1$ –обозначения углов ракурсов контактов вида $(1,1)_1, (1,2)_1$ и $(2,2)_1$, соответственно, в оболочке 1- ячейки;

$\Phi(1,1)_2, \Phi(1,2)_2$ и $\Phi(2,2)_2$ - обозначения углов ракурсов контактов вида $(1,1)_2, (1,2)_2$ и $(2,2)_2$, соответственно, в оболочке 2 - ячейки ;

i, j, k, l, m, n - числа контактов того вида, который указан в обозначениях вида углов ракурсов контактов, для которых данные числа контактов применены в качестве сомножителей в уравнениях (1) и (2);

Уравнения (1) и (2) явно даны в работе Кеннеди [6] и лежат в основе модели ПУК2, но поскольку не содержат общих переменных, то ещё не составляют системы уравнений. Дополнительные *связующие* уравнения получены с учётом *триангулированности* ПУК2(Следствие 1) и *тригонометрии* [4];

1.2 _ТРИГОНОМЕТРИЯ : _Рассмотрим информацию о ракурсных углах, под которыми центры контактирующих кругов ячейки видны из центра ядра ячейки, (центры) отвечающие всевозможным видам контактов кругов в ячейках ПУК2. Контактные треугольники в контактах вида $(1,1)_1$ и $(2,2)_2$, являются *равносторонними*, откуда следуют равенства

$$\Phi(1,1)_1 = \pi/3, \quad (3)$$

$$\Phi(2,2)_2 = \pi/3; \quad (4)$$

Остальным видам контактов в ПУК2, учитываемых в выражениях углов ракурсов $\Phi(1,2)_1$ и $\Phi(2,2)_1$ в 1- ячейке, и $\Phi(1,1)_2$ и $\Phi(1,2)_2$ в 2- ячейке и в уравнениях (1) и (2) отвечают *равнобедренные* треугольники $[1,2,1]$ или

[2,1,2] соответственно.

Далее используем из *Тригонометрии*, во-первых, теорему: «сумма углов треугольника равна π », учитывая взаимное равенство прилежащих углов в треугольниках и последующее деление равенства на 2:

$$(1/2)*\Phi(1,1)_2 + \Phi(1,2)_1 = \pi/2, \quad (5)$$

$$(1/2)*\Phi(2,2)_1 + \Phi(1,2)_2 = \pi/2, \quad (6)$$

Подставляем (3-- 6) в (1) и (2):

$$i*\pi/3 + j*[\pi/2 - (1/2)\Phi(1,1)_2] + k*\Phi(2,2)_1 = 2\pi,$$

$$l*\Phi(1,1)_2 + m*[\pi/2 - (1/2)\Phi(2,2)_1] + n*\pi/3 = 2\pi,$$

и получаем *систему линейных уравнений*:

$$-(1/2)j*\Phi(1,1)_2 + k*\Phi(2,2)_1 = \pi*(2-j/2 - i/3), \quad (7)$$

$$l*\Phi(1,1)_2 - (1/2)m*\Phi(2,2)_1 = \pi*(2-m/2 - n/3), \quad (8)$$

для избавления от дробей можем умножить полученные равенств на 6:

$$-3j*\Phi(1,1)_2 + 6k*\Phi(2,2)_1 = \pi*(12-3j-2i), \quad (9)$$

$$6l*\Phi(1,1)_2 - 3m*\Phi(2,2)_1 = \pi*(12-3m-2n) \quad (10)$$

Во-вторых, *Тригонометрия* даёт функциональную связь ракурсных углов в равнобедренных треугольных плотнейших укладках кругов на плоскости с радиусами кругов, а именно

$$\sin[(1/2)\Phi(1,1)_2] = 1/(1+r), \quad (11)$$

$$\sin[(1/2)\Phi(2,2)_1] = r/(1+r); \quad (12)$$

Совместный учёт формул (11), (12) и (5),(6) позволяет дать формулы:

$$\cos \Phi(1,2)_1 = 1/(1+r), \quad (13)$$

$$\cos \Phi(1,2)_2 = r/(1+r); \quad (14)$$

Формулы (11) и (12) пополним формулами для 'не половинных' углов:

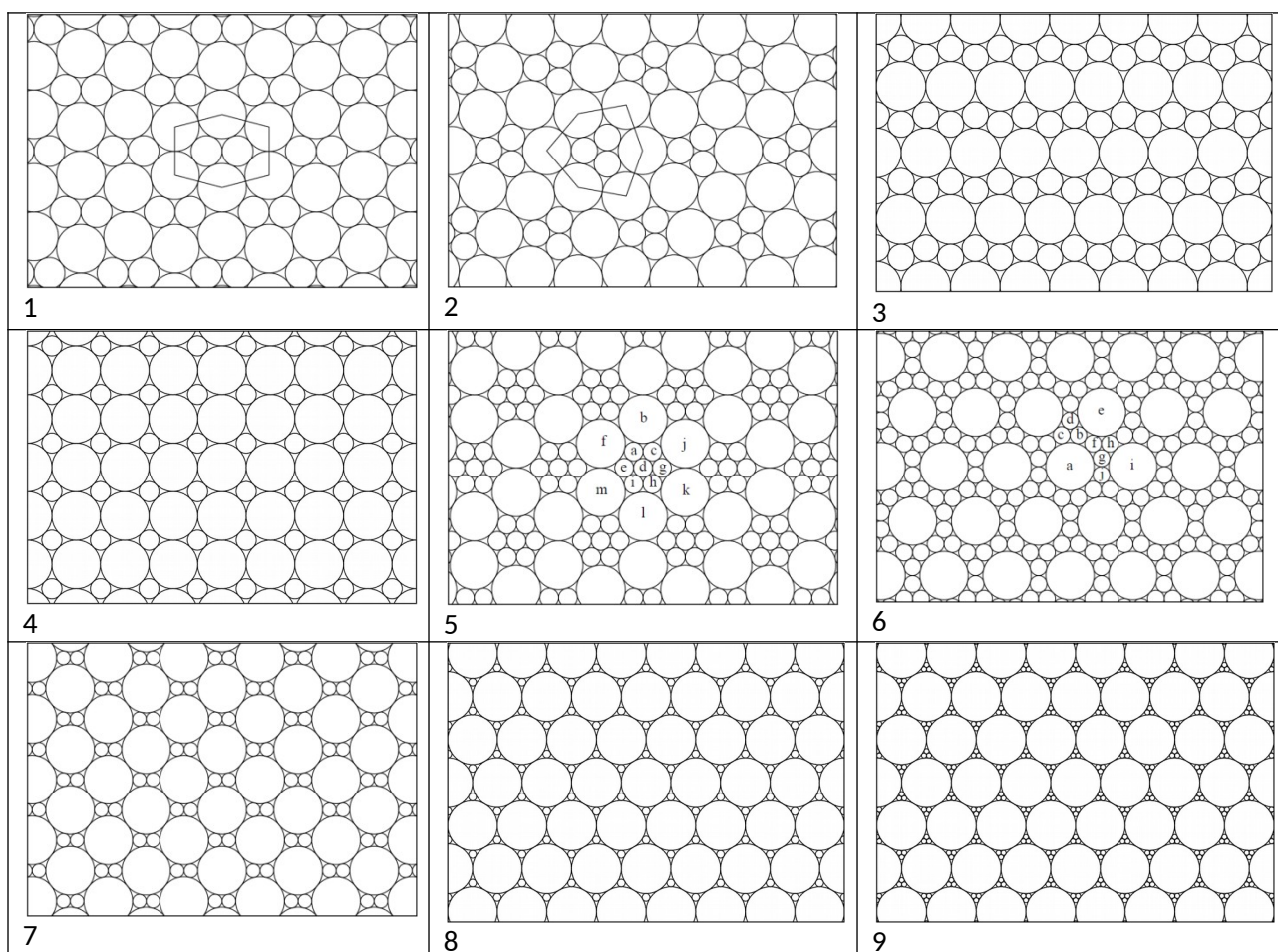
$$\cos \Phi(1,1)_2 = 1 - 2/(1+r)^2; \quad (15)$$

$$\cos \Phi(2,2)_1 = 1 - 2r^2/(1+r)^2; \quad (16)$$

1.3_ДИЗАЙН ПУК2: Дизайном ПУК2 называем описание разновидностей ПУК2 с выбором или расчётом всех существенных параметров состояния каждой разновидности ПУК2, встречающихся в формулах (7- 16), включая характеристики стехиометрии упаковок s согласно формуле AB_s аналогично формуле химического соединения, где $s=n_2/n_1$ --отношение числа малых кругов к числу больших кругов в ПУК2; дизайн подразумевает также и указание замощающей фигуры для заполнения D2-плоскости каждой ПУК2. Для дальнейшего анализа берём работу [6], т.к. работа [6] охватывает более ранние работы [4,5]. Дизайн ПУК2 в работе [6], подтверждает *рисунок*. Нашей задачей является рассмотрение невозможности (или возможности) увеличения числа известных ПУК2 сверх девяти, указанных в работе [6]. К сожалению, в работе [6] даны лишь результаты дизайна, но метод не описан (из-за возможного упрека в близости к школьным курсам Тригонометрии и

Геометрии), следуя вероятно формуле “satis callidus”.

Об уместности такого упрека к Дискретной геометрии, актуального и для нынешнего времени, автор, принеся извинения за исторический экскурс, хотел бы напомнить об уже забытом классическом примере яркой работы Е.С. Фёдорова [7], на подготовку которой ушло 10 лет, но профессора минералог П.В. Еремеев и математик П.Л.Чебышев её не сочли актуальной, далее работа ещё 6 лет ждала выпуска, и была издана в 1885г благодаря решительному одобрению работы кристаллографом А.В. Гадолином. Возвращаясь к теме нашей работы признаем, что *дизайн ПУК2* частично основан на волевом *выборе*, частично на *расчёте* намечаемых параметров 1- и 2- ячеек укладок кругов на плоскости, т.е. фактически на “школьных” формулах (1- 16) , а также на графическом дизайне *гнезд* согласно *Теореме 2* и замощающих областей для ПУК2, показанных на *Рисунке*, а в *Таблице* даны численные характеристики ячеек ПУК2 -- развёртки оболочек 1- и 2- ячеек и параметры s и r ПУК2 согласно работе [6].



Рисунок_ Двухсортные Плотнейшие Укладки Кругов (ПУК2) по данным работы Kennedy[6]. Цифры под фрагментами отвечают номерам Упаковок.

Таблица

Развёртки оболочек [1]-ячеек и [2]-ячеек, характеристики стехиометрических

чисел s Двухсортовых Плотнейших Укладок Кругов (ПУК2) формулы АВ_s и радиусы 2-кругов («малых») r по данным работы Kennedy[6].

Упаковка 1: [1]=(1212212);	[2]=(11112); $s=1, r=0.6375559772$;
Упаковка 2: [1]=(2211211);	[2]=(11122); $s=1, r=0.5451510421$;
Упаковка 3: [1]=(22212221);	[2]=(11212); $s=2, r=0.5332964167$;
Упаковка 4: [1]=(12121212);	[2]=(1111); $s=1, r=0.4142135624$;
Упаковка 5: [1]=(221221221);	[2]=(11222); $s=3.5, r=0.3861061049$;
Упаковка 6: [1]=(222222222222);	[2]=(12122); $s=6, r=0.3491981862$;
Упаковка 7: [1]=(2212122121);	[2]=(1112); $s=2, r=0.2807764064$;
Упаковка 8: [1]=(121212121212);	[2]=(111); $s=2, r=0.1547005384$;
Упаковка 9: [1]=(122122122122122122);	[2]=(1122); $s=6, r=0.1010205144$;

2.ПОИСК: 2.1 АНАЛИЗ ИЗВЕСТНЫХ ПУК2 Осуществим геометрический анализ ПУК2, представленных в работе [6], основываясь на формальных признаках, топологических и геометрических показателях ПУК2, на качественных или полуколичественных рассуждениях. Первое суждение : дизайн ПУК2 необходимо начинать согласно Теореме 2 с анализа 2-ячеек, которые согласно геометрии кругов имеют заселённость оболочек не более чем 5 кругов, что даёт вполне обозримое число ПУК2. Указанные случаи рассмотрим подробнее.

1) **Заселённость 2-оболочки 3 круга;**

Случай 1: заселённость 2- оболочки равна [3,0], т.е.: [2]=(111) ,

что отвечает *Упаковке 8* на *Рисунке* и в *Таблице* :

Упаковка 8: [1]=(121212121212); [2]=(111); $s=2, r=0.1547005384$;

Случаи 2 : заселённость 2- оболочки [2,1], т.е.: [2]=(121) , что отвечает незамкнутой оболочке и *Случай 2* отвергается ;

Случаи 3 : заселённость 2- оболочки [1,2], т.е.: [2]=(212) , что отвечает незамкнутой оболочке и *Случай 3* отвергается ;

2) **Заселённость 2-оболочки 4 круга;**

Случай 4: заселённость 2- оболочки [4,0], т.е.: [2]=(1111) , что отвечает *Упаковке 4* на *Рисунке* и в *Таблице* :

Упаковка 4: [1]=(12121212); [2]=(1111); $s=1, r=0.4142135624$;

Случаи 5 : заселённость 2- оболочки [3,1], т.е.: [2]=(1112) , что отвечает *Упаковке 7* на *Рисунке* и в *Таблице* ;

Упаковка 7: [1]=(2212122121); [2]=(1112); $s=2, r=0.2807764064$;

Случаи 6 : заселённость 2- оболочки [2,2] и следующее распределение видов кругов в оболочке: [2]=(1122) , что отвечает *Упаковке 9* на *Рисунке* и *Таблице* ;

Упаковка 9: [1]=(122122122122122122); [2]=(1122); $s=6, r=0.1010205144$;

Случаи 7 : заселённость 2- оболочки [2,2] и распределение видов кругов в оболочке: [2]=(1212) , оболочке незамкнутая и *Случай 7* отвергается ;

Случаи 8 : заселённость 2- оболочки [1,3], т.е.: [2]=(1222) , что отвечает незамкнутой оболочке и *Случай 8* отвергается ;

3) Заселённость 2-оболочки 5 кругов;

Случай 9: заселённость 2- оболочки [5,0], т.е.: [2]=(11111) ;

Следуя *Теоремам 2 и 3* и *Следствиям 2, 3 и 4*, дизайн упаковок ПУК2 в общем требует рассматривать *гнезда упаковок*, т.е. совместно 1-ячейку и 2-ячейку, однако замощающие области в предыдущих случаях можно было увидеть почти сразу, рассматривая 2-ячейки, что видно на представленном *Рисунке*; *Случай 9* особый, т.к. кроме 2-ячейки требует учесть 1-ячейку.

Ключевые параметры, заданные 5-арной 2-ячейкой: угол ракурса контакта $(1,1)_2$, (далее все углы в *рад*): $\Phi(1,1)_2=2\pi/5=1.2566370614$,

используя который и формулу (11) находим радиус 2-круга r :

$$\sin [(1/2)*\Phi(1,1)_2]=0.5877852523=s, \quad r=(1-s)/s=0.7013016167; \quad (17)$$

угол ракурса контакта $(1,2)_1$ по формуле (6):

$$\Phi(1,2)_1=\pi/2-\pi/5=3\pi/10=.9424777962, \quad (18)$$

угол ракурса контакта $(2,2)_1$ по формуле (12):

$$2*\arcsin[r/(r+1)] = .8497672300, \quad (19) \quad \text{угол}$$

ракурса контакта $(1,1)_1$ по формуле (3): $\Phi(1,1)_1=\pi/3=1.0471975512$; (20)

Найдены все углы ракурсов контактов кругов в оболочке 1-ячейки, учтём их при адаптации уравнения (1), все слагаемые которого делим на $(\pi/3)$:

$$k*[\Phi(2,2)_1]/(\pi/3) + [(j*\Phi(1,2)_1)]/(\pi/3) + [i*(\pi/3)]/(\pi/3) = 6, \quad (21)$$

где $0 \leq i \leq 5, 2 \leq j \leq 5, 0 \leq k \leq 6$;

Перегруппируем и оцифруем уравнение (1), используя данные из (18-20):

$$k*0.81146793=[6 - i - j*(9/10)] ; \quad (22)$$

Обращаем внимание на «разнородность» чисел в левой и правой частях уравнения (22): в правой части числа целочисленные, или дискретные, а в левой части дробная величина трансцендентная, что не позволяет рассчитывать на дискретное решение уравнения (22) для (k) при любых значениях (i) и (j) и прямо доказывает, что *Случай 9* должен быть отвергнут как не реализуемый;

Случаи 10 : заселённость 2- оболочки [4,1], т.е.: [2]=(11112) , что отвечает *Упаковке 1* на *Рисунке* и в *Таблице* ;

Упаковка 1: [1]=(1212212); [2]=(11112); $s=1, r=0.6375559772$;

Случаи 11 : заселённость 2- оболочки [3,2], распределение сортов кругов в оболочке: [2]=(11122) , что отвечает *Упаковке 2* на *Рисунке* и в *Таблице*;

Упаковка 2: [1]=(2211211); [2]=(11122); $s=1, r=0.5451510421$;

Случаи 12 : заселённость 2- оболочки [3,2] и распределение сортов кругов в

оболочке: $[2]=(11212)$, что отвечает Упаковке 3 на Рисунке и в Таблице;
Упаковка 3: $[1]=(22212221)$; $[2]=(11212)$; $s=2$, $r=0.5332964167$;
Случаи 13: заселённость 2- оболочки $[2,3]$ и распределение сортов кругов в оболочке $[2]=(11222)$, что отвечает Упаковке 5 на Рисунке и в Таблице;
Упаковка 5: $[1]=(221221221)$; $[2]=(11222)$; $s=3.5$, $r=0.3861061049$;
 Особенностью Упаковки 5 является координационная неоднородность 2- кругов, группирующихся кластерами по семь, и один из 2-кругов лежит в центре кластера, а вокруг центрального круга лежат шесть 2-кругов, образующих периферию кластера; центральный 2-круг кластера имеет оболочку (22222), тогда как 2-круги периферии кластера имеют указанную выше заселённость оболочек (11222);
Случаи 14: заселённость 2- оболочки $[2,3]$ и распределение сортов кругов в оболочке: $[2]=(12122)$, что отвечает Упаковке 6 на Рисунке и в Таблице;
Упаковка 6: $[1]=(222222222222)$; $[2]=(12122)$; $s=6$, $r=0.3491981862$;

2.2 ЗАКЛЮЧЕНИЕ Выполненный анализ является исчерпывающим и означает, что приведенными в работе [6] девятью упаковками двухсортных кругов в 2D плоскости список возможных ПУК2 исчерпан .

ЛИТЕРАТУРА

1. И.М. Яглом. Проблема 13 шаров; изд. «Вища школа», Киев, 1975 г;
2. В.С. Урусов. Теоретическая кристаллохимия; изд. МГУ, М. 1987
3. Г.Б.Бокий . Кристаллохимия, Наука, 1971 г;
4. Л.Ф.Тот. Расположения на сфере, на плоскости и в пространстве; Физматгиз, М., 1958, стр. 100-158;
5. Aladar Heppes . Some Densest Two Size Disc Packings in the Plane; Discrete Comput. Geometry 30,241-262 (2003);
6. Tom Kennedy; Compact packing of the plane with two sizes of discs. Discrete and Computational Geometry 35, 235-267 (2006);
7. Е.С.Фёдоров . Начала учения о фигурах .Санктпетербург, типография Академии Наук, 1879--1885, переиздано Изд. АН СССР, М.,1953 г ;

Сведения об авторах:

Пинаев, Геннадий Фёдорович доктор химических наук, профессор;

