arXiv:2301.05137v1 [cs.CG] 12 Jan 2023

密度　连续事件的周期序列的函数　S

Olga Anosova[1] 和 Vitaliy Kurlin[1*]

1*计算机科学，利物浦大学，Ashton Street，利物浦，L69 3BX，英国。

通讯作者。电子邮箱：vitaliy.kurlin@gmail.com；其他作者：oanosova@liverpool.ac.uk；

摘要

周期几何研究周期点集的等距不变量，这些不变量在扰动下也保持连续。研究动机源自周期晶体：其结构以刚性形式确定，但测量中的微小噪声可能导致任意最小胞发生不连续变化。对于任意整数 $\boldsymbol{k} \geq \mathbf{0}$，周期集 $\boldsymbol{S}$ 的密度函数此前被定义为：在一个最小胞内，所有由半径可变的球构成的 $\boldsymbol{k}$ 重交集的体积分数；这些球的中心位于 $\boldsymbol{S}$ 的所有点，半径为 $\boldsymbol{t}$ 。本文介绍了具有不同初始半径的周期点集的密度函数，其研究动机来自化学元素的原子半径，以及时间序列中占据不相交区间的连续事件。本文的贡献是明确描述区间周期序列的密度函数。新的密度函数严格更强，能够区分在零半径情况下密度相同的周期序列。

关键词： 计算几何、周期集、周期时间序列、等距不变量、密度函数　n

数学主题分类： 68U05 , 51K05 , 51N20 , 51F30 , 51F20

1 周期集密度函数的研究动机

本研究大幅扩展了先前发表于离散几何与数学形态学 2022 的会议论文 [3] 。先前的研究明确描述了由零尺寸点构成的周期序列的密度函数。本研究将这些解析描述扩展至点具有非负半径的周期序列。

提出加权情形的扩展，源于晶体学和材料化学的研究 [1] ，因为所有化学元素的原子半径都各不相同。在一维情形中，关键动机是研究由连续且依次发生（互不重叠）的事件构成的周期时间序列，这些事件用不相交区间表示。任意这样的区间 $[a, b] \subset \mathbb{R}$ 对于 $a \leq b$ 而言，是以 $\frac{a+b}{2}$ 为中心、半径为 $\frac{b-a}{2}$ 的一维球。

周期晶体的点集表示是晶体材料最基本的数学模型，因为原子核是定义明确的物理对象，而化学键并非真实的棍棒或绳线，而是抽象地表示原子间相互作用，且这些相互作用取决于许多距离和角度阈值。

由于晶体结构是以刚性形式确定的，其最实用的等价关系是刚体运动 （平移与旋转的复合）或等距变换 ，后者保持所有点间距离，也包括镜面反射 [20]。

现在我们介绍关键概念。设 $\mathbb{R}^n$ 为欧几里得空间， $\mathbb{Z}$ 为所有整数的集合。

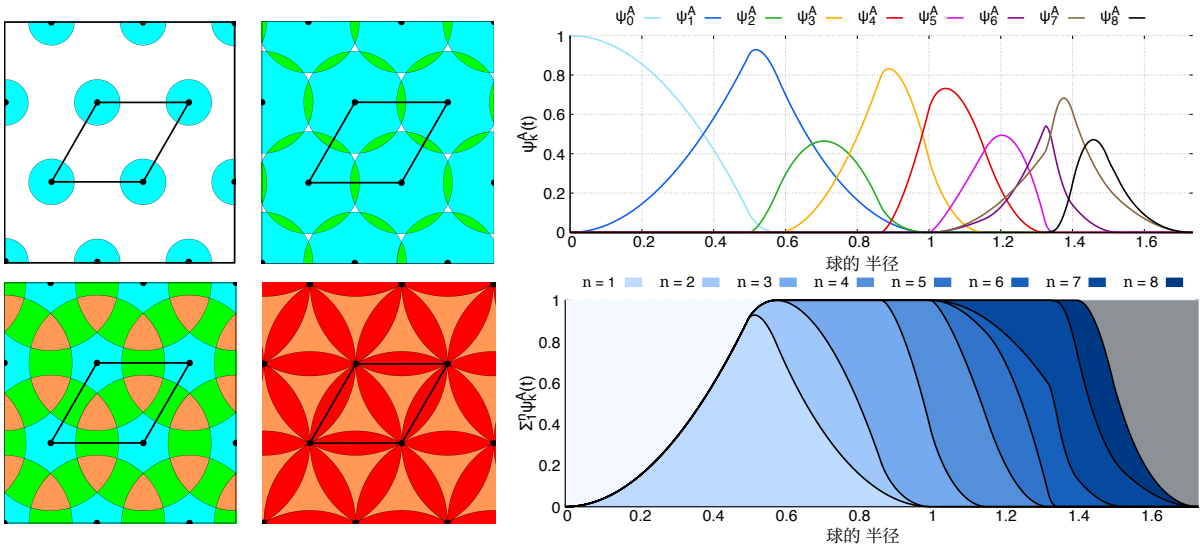


图 1 六角晶格的定义1.2 示意图。**左图**：子区域 $U_k(t)$ 被以下半径的 k 圆盘覆盖：$t = 0.25,\ 0.55、0.75、1$。**右图**：密度 ψ_k 高于累积函数相应的 *densigram* 取值 $\sum_{i=1}^{k} \psi_i(t)$。

定义 1.1（一个晶格 Λ、一个单位胞 U、一个基元 M、一个周期点集 $S = M + \Lambda$）。对于 $\mathbb{R}^n$ 的任意线性基 $v_1, \ldots\ldots, v_n$，一个晶格 Λ 为 $\Lambda = \{\sum c_i v_i : \ c_i \in \mathbb{Z}\}$。单位胞 $U(v_1, \ldots\ldots, v_n) = \left\{ \sum_{i=1}^{n} c_i v_i : \ c_i \in [0,1) \right\}$ 是由上述基张成的平行六面体。基元 $M \subset U$ 是任意有限点集 $p_1, \ldots\ldots, p_m \in U$。一个周期点集 [20] 是闵可夫斯基和 $S = M + \Lambda = \{u + v \mid u \in M, v \in \Lambda\}$。■

在维数为 $n = 1$ 的空间中，晶格由任意非零向量 $v \in \mathbb{R}$ 定义；任意周期点集 S 都是一个周期为 v 的周期序列 $\{p_1, \ldots, p_m\} + \mathrm{v}\mathbb{Z}$，其中 v 等于向量 v 的长度。

定义 1.2（带半径的周期点集的密度函数）。设周期集 $S = \Lambda + M \subset \mathbb{R}^n$ 有一个单位胞 U。对每个点 $p \in M$，指定一个半径 $r(p) \geq 0$。对于任意整数 $k \geq 0$，令 $U_k(t)$ 表示单位胞 U 内恰好被 k 个闭球 $B(p;\ r(p) + t)$ 覆盖的区域，其中这些闭球对应于 $t \geq 0$ 以及所有点 $p \in M$ 和它们经过 Λ 平移后的位置。第 k 个密度函数 $\psi_k[S](t) = \mathrm{Vol}[U_k(t)]/\mathrm{Vol}[U]$ 表示单位胞 U 内这些闭球的 k 重交区域的体积分数。■

密度 $\psi_k[S](t)$ 可以解释为一个随机点（在 U 中均匀选取）点 q 到恰好 k 个初始半径为 $r(p)$ 且中心均为 $p \in S$ 的球的最大距离为 t。

对于 $k = 0$，零阶密度 $\psi_0[S](t)$ 衡量的是未被任何扩张球 $B(p;\ r(p) + t)$ 覆盖的空白空间的体积分数。

在半径 $r(p) = 0$ 最简单的情形下，无限序列 $\Psi[S] = \{\psi_k(t)\}_{k=0}^{+\infty}$ 在[8, 节 3] 中被称为周期点集 S 的密度指纹。对于 $k = 1$ 和较小的 $t > 0$，当所有大小相同的球 $B(p;\ t)$ 仍互不相交时，第一阶密度 $\psi_1[S](t)$ 与 t^n 成正比地增加，但随后达到最大值；当 $\mathbb{R}^n$ 的所有点都至少被两个球覆盖时，密度最终降回 0。参见 [8, 图 2] 中正方形晶格和六角晶格的密度 ψ_k、$k = 0,\ \ldots\ldots 8$。

原始密度帮助我们在剑桥结构数据库中找到了一种缺失的晶体。它被意外地与另一种具有相同化学组成的晶体（多晶型）发生的微小扰动混淆了（测量温度不同），见 [8, 节 7]。

定义 1.2 中的新加权情形 $r(p) \geq 0$ 更具实际重要性，因为范德华半径各不相同，且为每种化学元素分别定义。

密度函数相较于周期晶体的其他等距不变量的主要优势

（例如对称性，或基于最小胞几何的常规表示）在扰动下具有连续性，详情请见第 2 节，其中回顾了相关的既往研究。

唯一的限制是密度 $\psi_k(t)$ 的规模无限大，这是由无界参数导致的：整数指标 $k \geq 0$ 和连续半径 $t \geq 0$。

我们以最一般的形式陈述以下问题，以此激发对这些密度的后续研究。

问题 1.3 （计算 ψ_k）。验证定义 $\psi_k[S]\,(t)$ 中定义的密度函数1.2 能否在多项式时间内（相对于 m 中一个基元的规模 S）计算，其中维数 n固定。■

本文的主要贡献是完整解决了 问题 1.3 对于 $n = 1$的情形。定理 3.2、4.2、5.2、6.2以及推论 6.4能够高效计算所有 $\psi_k[S]\,(t)$，这些值取决于 k 和 t的无穷多个取值。

2 相关前期工作综述

周期几何于 2020年由问题 [14,第 2 节3] 发起，旨在为格的等距类设计一种可计算度量，该度量关于格基的扰动连续。

尽管沃罗诺伊域在扰动下组合结构不稳定，但其几何形状被用于引入两种连续度量 [14,定理 2, 4]，由于需要对无穷多个旋转取最小值，因此必须进行近似计算。

完整不变量等距集 [2, 4] 和密度函数也需要对旋转或其他连续参数进行类似的最小化；它们可以在低维空间中实际计算 [16]，，并且已证明其对一般周期点集具有完备性，见 $\mathbb{R}^3$ [8,定理 2]。密度指纹 $\Psi[S]$ 被证明并不完备，见下文的 [8, 例子 5]。

例 2.1 （周期序列 S_{15}，$Q_{15} \subset \mathbb{R}$）。Widdowson 等人 [20, 附录 B]讨论了可由 AMD（平均最小距离）不变量区分、但无法由衍射图样区分的同距集。这些序列

$$S_{15} = \{0, 1, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 12\} + 15\mathbb{Z},$$
$$Q_{15} = \{0, 1, 3, 4, 6, 8, 9, 12, 14\} + 15\mathbb{Z}$$

单位胞 $[0, 15]$ 在图中以圆圈表示。2。

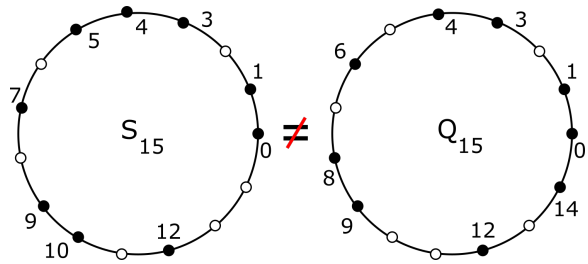


图 2 周期集的圆周版本 S_{15}，Q_{15}。

这些周期序列 [9] 是通过闵可夫斯基和 $S_{15} = U + V + 15\mathbb{Z}$ 和 $Q_{15} = U - V + 15\mathbb{Z}$ 得到的，其中 $U = \{0, 4, 9\}$, $V = \{0, 1, 3\}$。■

对于取值为有理数的周期序列，[9,定理 4] 证明，直至 $r = 6$的 r 阶不变量（r因子乘积的组合）足以将此类序列区分开来，且差异仅在于平移（$\mathbb{R}$ 的不含反射的刚性运动）。

AMD 不变量被扩展为逐点距离分布（PDD），其一般完备性定理 [19, 定理 4.4] 已在任意维数 $n \geq 1$下得到证明。然而，$\mathbb{R}^3$ [15, 图 S4] 中存在具有相同 PDD 的有限集，而在 [18, 附录 C]中，更复杂的基于距离的不变量将它们区分开来。

格几何这一分支为二维 [7, 13] 和三维 [6, 10] 中按等距变换视为等价的格的模空间，发展出了连续参数化方法。

对于实数轴 $\mathbb{R}^n$中的 1-周期点序列，已有具有连续且可计算度量的完备等距不变量；[12]，参见关于无标签有限点云的相关结果 [11, 17]。

3 零阶密度函数 ψ_0

本节明确证明定理 3.2，并明确描述任意不相交区间周期序列的零阶密度函数 $\psi_0[S](t)$ $S \subset \mathbb{R}$。

为方便起见，将任意周期序列S 缩放为周期 1，使得 S 由点$0 \leq p_1 < \cdots < p_m < 1$及其对应的半径 $r_1, \ldots, r_m$给出。由于 $\mathbb{R}$ 中的扩张球是增长区间，它们的交集体积会随可变半径t线性变化。因此，任意密度函数 $\psi_k(t)$都是分段线性的，并由梯度发生变化的 $\psi_k(t)$的拐角点 (a_j, b_j) 唯一确定。

为准备定理 3.2 的证明，我们先考察简单序列 S 的例 3.1。

例 3.1（零阶密度函数 ψ_0）。 设周期序列 $S = \left\{0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$ 有三个点 $p_1 = 0$, $p_2 = \frac{1}{3}$, $p_3 = \frac{1}{2}$，其半径分别为 $r_1 = \frac{1}{12}$, $r_2 = 0$, $r_3 = \frac{1}{12}$。图 3 展示了每个点 p_i 及其增长区间

$$L_i(t) = [(p_i - r_i) - t, (p_i + r_i) + t] \text{ of the length } 2r_i + 2t$$

对于 $i = 1, 2, 3$，分别用红、绿、蓝三种颜色表示。

根据定义 1.2，每个密度函数$\psi_k[S](t)$ 衡量单位胞 $[0,1]$ 内恰好被 k 个区间覆盖的分数长度 $[0,1]$。我们将每个增长区间的端点周期性地映射到单位胞 $[0,1]$。例如，点 $p_1 = 0 \equiv 1$的区间 $[-\frac{1}{12} - t, \frac{1}{12} + t]$ (模 1) 映射为红色区间 $[0, \frac{1}{12} + t] \cup [\frac{11}{12} - t, 1]$，如图 3 中的实线红线所示。同一图中，绿色区间 $[\frac{1}{3} - t, \frac{1}{3} + t]$ 用虚线表示，蓝色区间 $[\frac{5}{12} - t, \frac{7}{12} + t]$用点线表示。

此时 $t = 0$，由于起始区间互不相交，它们覆盖的长度为 $l = 2(\frac{1}{12} + 0 + \frac{1}{12}) = \frac{1}{3}$。未覆盖的部分 $[0,1]$ 长度为 $1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$。因此， $\psi_0(t)$ 在 $t = 0$处的图像从点 $(0, \frac{2}{3})$ 开始，见图 4。

在第一个临界时刻 $t = \frac{1}{24}$，绿色和蓝色区间在 $p = \frac{3}{8}$ 处相撞，此时只有总长度为 $\frac{5}{12}$ 的区间 $[\frac{1}{8}, \frac{7}{24}] \cup [\frac{5}{8}, \frac{7}{8}]$ 仍未被覆盖。因此， $\psi_0(t)$ 线性下降至点 $(\frac{1}{12}, \frac{5}{12})$。在下一个临界时刻$t = \frac{1}{8}$，红色和绿色区间在$p = \frac{5}{24}$处相撞，此时只有长度为 $\frac{1}{12}$ 的区间 $[\frac{17}{24}, \frac{19}{24}]$ 仍未被覆盖，因此 $\psi_0(t)$ 继续下降至 $(\frac{1}{8}, \frac{1}{12})$。

$\psi_0(t)$ 的图像最终在点 $(\frac{1}{6}, 0)$ 处回到 t轴，并在此处保持$t \geq \frac{1}{6}$。

的分段线性行为 $\psi_0(t)$ 可通过指定图 4 中的拐角点来描述：$\left(0, \frac{2}{3}\right)$, $\left(\frac{1}{24}, \frac{5}{12}\right)$, $\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{12}\right)$, $\left(\frac{1}{6}, 0\right)$。■

定理 3.2 将例 3.1 推广到任意周期序列 S，并表明零阶密度函数 $\psi_0(t)$ 由相邻区间之间的有序间隙长度唯一确定。

定理 3.2（ψ_0的描述）。设周期序列 $S = \{p_1, \ldots, p_m\} + \mathbb{Z}$ 由中心为 $0 \leq p_1 < \cdots < p_m < 1$、半径为 $r_1, \ldots, r_m \geq 0$的不相交区间组成。考虑相邻区间之间的总长度 $l = 2\sum_{i=1}^{m} r_i$ 和间隙 $g_i = (p_i - r_i) - (p_{i-1} + r_{i-1})$，其中 $i = 1, \ldots, m$ 且$p_0 = p_m - 1$, $r_0 = r_m$。将间隙按递增顺序排列： $g_{[1]} \leq g_{[2]} \leq \cdots \leq g_{[m]}$。

那么，零阶密度 $\psi_0[S](t)$ 是分段线性的，其（无序）拐点如下：$(0, 1 - l)$ 和 $\left(\frac{g_{[i]}}{2}, 1 - l - \sum_{j=1}^{i-1} g_{[j]} - (m - i + 1)g_{[i]}\right)$ $i = 1, \ldots, m$，因此最后一个拐点为 $\left(\frac{g_{[m]}}{2}, 0\right)$。

如果有拐角重复，例如当 $g_{[i-1]} = g_{[i]}$ 时，这些拐角会合并为一个拐角。■

Proof 根据定义 1.2 零阶密度函数$\psi_0(t)$ 表示单位胞 $[0,1]$ 中未被任何增长区间覆盖的子区间的总长度 $L_i(t) = [p_i - r_i - t, p_i + r_i + t]$, $i = 1, \ldots\ldots, m$。对于 $t = 0$, 由于所有初始区间 $L_i(0)$ 互不相交，它们覆盖的总长度为 $2\sum_{i=1}^{m} r_i = l$。

于是， $\psi_0(t)$ 的图像在 $t = 0$ 处从点 $(0, 1 - l)$ 开始。因此， $\psi_0(t)$ 从初始值 $\psi_0(0) = 1 - l$ 开始线性递减，但在 m 的临界值处除外；在这些临界值处，连续增长区间 $L_i(t)$ 与 $L_{i+1}(t)$ 之间的某个间隙区间 $[p_i + r_i + t, p_{i+1} - r_{i+1} - t]$ 会缩小为一个点。这些临界半径 t按照间隙 $g_{[1]} \leq g_{[2]} \leq \cdots \leq g_{[m]}$的顺序排列。

第一个临界半径为 $t = \frac{1}{2}g_{[1]}$，此时长度为 $g_{[1]}$ 的最短间隙区间被增长的相邻区间覆盖。此时

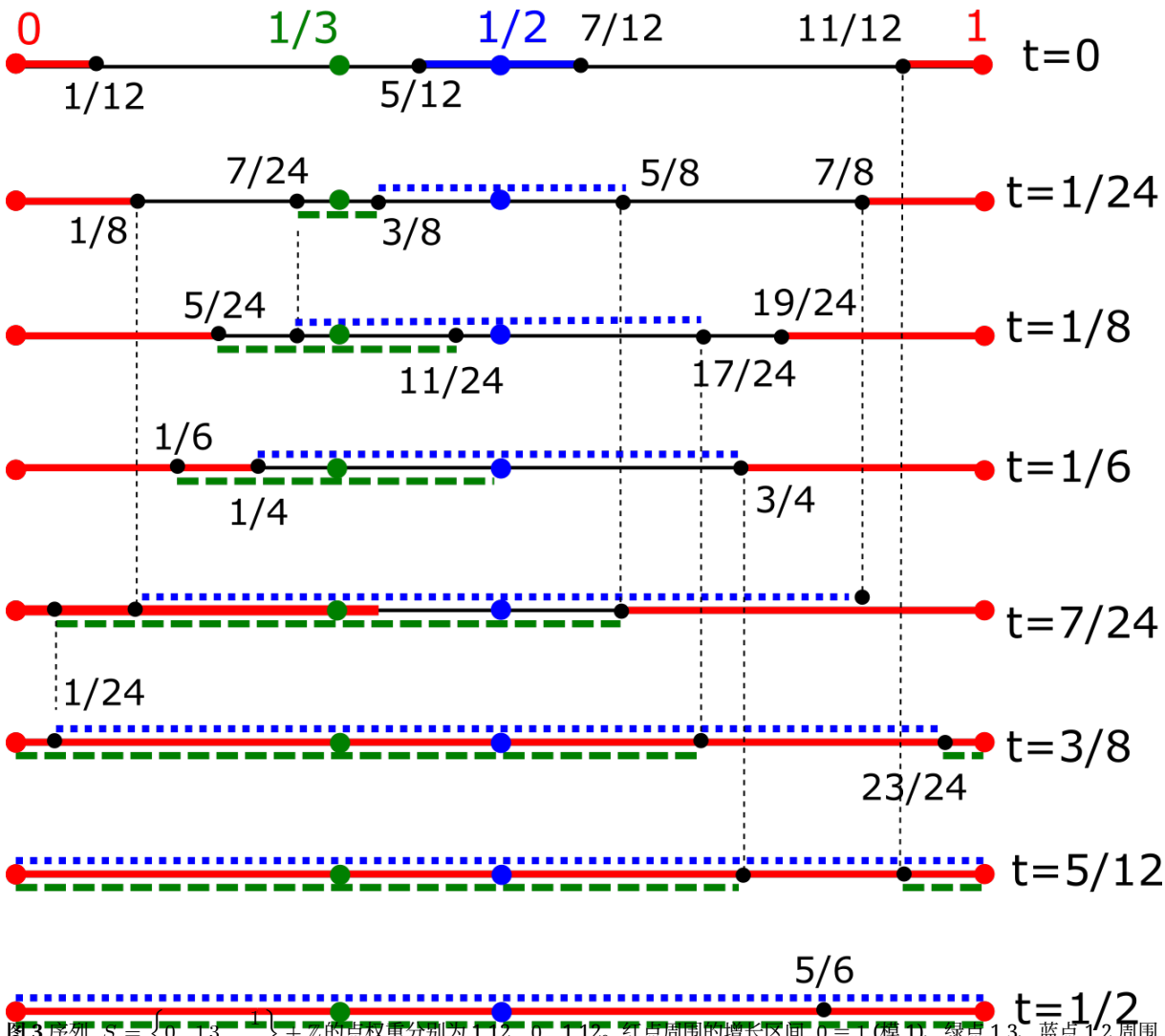


图 3 序列 $S = \left\{0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$ 的点权重分别为 $\frac{1}{12}$, 0, $\frac{1}{12}$。红点周围的增长区间 $0 = 1$ (模 1)、绿点 $\frac{1}{3}$、蓝点 $\frac{1}{2}$ 周围的增长区间在不同半径下具有相同的颜色 t，参见示例 3.1，4.1，5.1。

$t = \frac{1}{2}g_{[1]}$，所有 m 个增长区间 $L_i(t)$ 的总长度为 $l + mg_{[1]}$。那么，零阶密度 $\psi_0(t)$ 的第一个拐点为 $(0, 1-l)$ 和 $\left(\frac{g_{[1]}}{2}, 1 - l - mg_{[1]}\right)$。

第二个临界半径为 $t = \frac{g_{[2]}}{2}$，此时所有区间 $L_i\ t$ $l + (\ )$ 的总长度为 $g_{[1]} + m - 1\ g_{[2]}$，也就是说，下一个角点是 $\left(\frac{g_{[2]}}{2}, 1 - l - g_{[1]} - (m-1)\right.$ $\left.g_{[2]}\right)$。如果 $g_{[1]} = g_{[2]}$，那么两个角点重合，因此 $\psi_0(t)$ 将从这个共同的角点继续延伸。

上述规律可推广至第 i个临界半径 $t = \frac{1}{2}g_{[i]}$，此时所有覆盖区间的总长度为$i-1 \sum_{j=1} g_{[j]}$（对于已完全覆盖的区间）加上（$m - i + 1$）$g_{[i]}$（对于仍在增长的区间）。

对于最终临界半径 $t = \frac{g_{[m]}}{2}$，整个单位胞 $[0, 1]$ 都被增长后的区间覆盖，因为 $\sum_{j=1}^{m} g_{[j]} = 1 - l$。最终拐点为（$\frac{g_{[m]}}{2}$，0）。□

例3.3应用定理3.2得到 ψ_0在例 S 中为周期序列 S 在例 3.1 中找到。

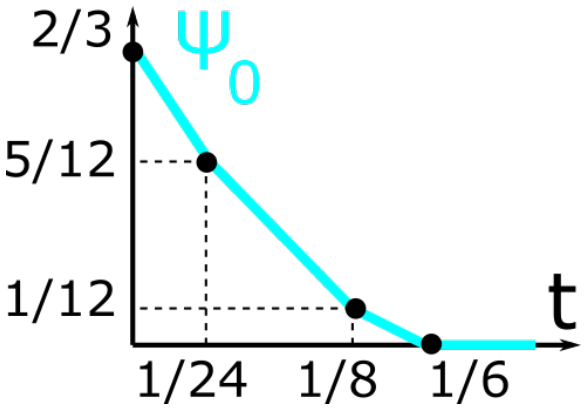


图 4 零阶密度函数 $\psi_0(t)$ 对于 1-周期序列 S，其点 0、1 3、1 2 的半径分别为 1 12、0、1 12。参见例 3.1。

Example 3.3 (using Theorem 3.2)**.** The sequence $S = \left\{0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$ in Example 3.1 with points $p_1 = 0$, $p_2 = \frac{1}{3}$, $p_3 = \frac{1}{2}$ of radii $r_1 = \frac{1}{12}$, $r_2 = 0$, $r_3 = \frac{1}{12}$, respectively, has $l = 2(r_1 + r_2 + r_3) = \frac{1}{3}$ and the initial gaps between successive intervals

$$g_1 = p_1 - r_1 - p_3 - r_3 = (1 - \frac{1}{12}) - (\frac{1}{2} + \frac{1}{12}) = \frac{1}{3},$$

$$g_2 = p_2 - r_2 - p_1 - r_1 = (\frac{1}{3} - 0) - (0 + \frac{1}{12}) = \frac{1}{4},$$

$$g_3 = p_3 - r_3 - p_2 - r_2 = (\frac{1}{2} - \frac{1}{12}) - (\frac{1}{3} + 0) = \frac{1}{12}.$$

Order the gaps: $g_{[1]} = \frac{1}{12} < g_{[2]} = \frac{1}{4} < g_{[3]} = \frac{1}{3}$.

$$1 - l = 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3},$$

$$1 - l - 3g_{[1]} = \frac{2}{3} - \frac{3}{12} = \frac{5}{12},$$

$$1 - l - g_{[1]} - 2g_{[2]} = \frac{2}{3} - \frac{1}{12} - \frac{2}{4} = \frac{1}{12},$$

$$1 - l - g_{[1]} - g_{[2]} - g_{[3]} = \frac{2}{3} - \frac{1}{12} - \frac{1}{4} - \frac{1}{3} = 0.$$

By Theorem 3.2 $\psi_0(t)$ has the corner points

$$(0, 1 - l) = \left(0, \frac{2}{3}\right),$$

$$\left(\frac{1}{2}g_{[1]}, 1 - l - 3g_{[1]}\right) = \left(\frac{1}{24}, \frac{5}{12}\right),$$

$$\left(\frac{1}{2}g_{[2]}, 1 - l - g_{[1]} - 2g_{[2]}\right) = \left(\frac{1}{8}, \frac{1}{12}\right),$$

$$\left(\frac{1}{2}g_{[3]}, 1 - l - g_{[1]} - g_{[2]} - g_{[3]}\right) = \left(\frac{1}{6}, 0\right).$$ See the graph of the 0-th density $\psi_0(t)$ in Fig. 4. ■

根据定理 3.2 任意零阶密度函数$\psi_0(t)$ 都由相邻区间之间的间隙长度（无序集合）唯一确定。因此，我们可以重新排列这些区间，而不改变 $\psi_0(t)$。例如，周期序列 $Q = \{0, \frac{1}{2}, \frac{2}{3}\} + \mathbb{Z}$的点为 0、1 2、2 3，权重为1 12 、1 12、0，其有序间隙集合$g_{[1]} = \frac{1}{12}$、$d_{[2]} = \frac{1}{3}$、$d_{[3]} = \frac{1}{2}$与例 $S = \left\{0, 1\,3, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$ 中的周期序列相同，见例 3.1。

上述序列 S、Q 由镜像反射 $t \mapsto 1 - t$相互关联。很容易构造出许多与$\psi_0[S](t) = \psi_0[Q](t)$不等距的序列。对于任意 $1 \le i \le m - 3$，序列 $S_{m,i} = \{0, 2, 3, \ldots, i + 2, i + 4, i + 5, \ldots\ldots, m + 2\} + (m + 2)\mathbb{Z}$ 具有相同的区间长度 $d_{[1]} = \cdots = d_{[m-2]} = 1$，$d_{[m-1]} = d_{[m]} = 2$，但它们并非通过等距变换（实数轴 $\mathbb{R}$ 上的平移和反射）相互关联，因为长度为 2 的区间之间隔着 $i-1$个长度为 1 的区间，位于 $S_{m,i}$中。

4 第一密度函数 ψ_1

本节将明确证明定理 4.2 给出了任意周期序列的第一密度 $\psi_1[S](t)$，该序列由 S 不相交区间构成。为准备定理4.2的证明，例4.1求出了 $\psi_1[S]$对应于例 S 3.1中的序列。

例 4.1 (ψ_1 对于 $S = \left\{0, 1\,3, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$)。第一密度函数 $\psi_1(t)$ 可以表示为三个梯形函数 η_R、η_G、η_B之和，每个函数测量由单个同色区间覆盖的区域长度，见图3。

在初始时刻 $t = 0$，红色区间$[0, \frac{1}{12}] \cup [\frac{11}{12}, 1]$的总长度为 $\eta_R(0) = \frac{1}{6}$。这些红色区间 $[0, \frac{1}{12} + t] \cup [\frac{11}{12} - t, 1]$在$t \in [0, \frac{1}{8}]$不断增长，直到与绿色区间$[\frac{7}{24}, \frac{3}{8}]$接触，此时总长度为 $\eta_R(1\,8) = \frac{1}{6} + \frac{2}{8} =$

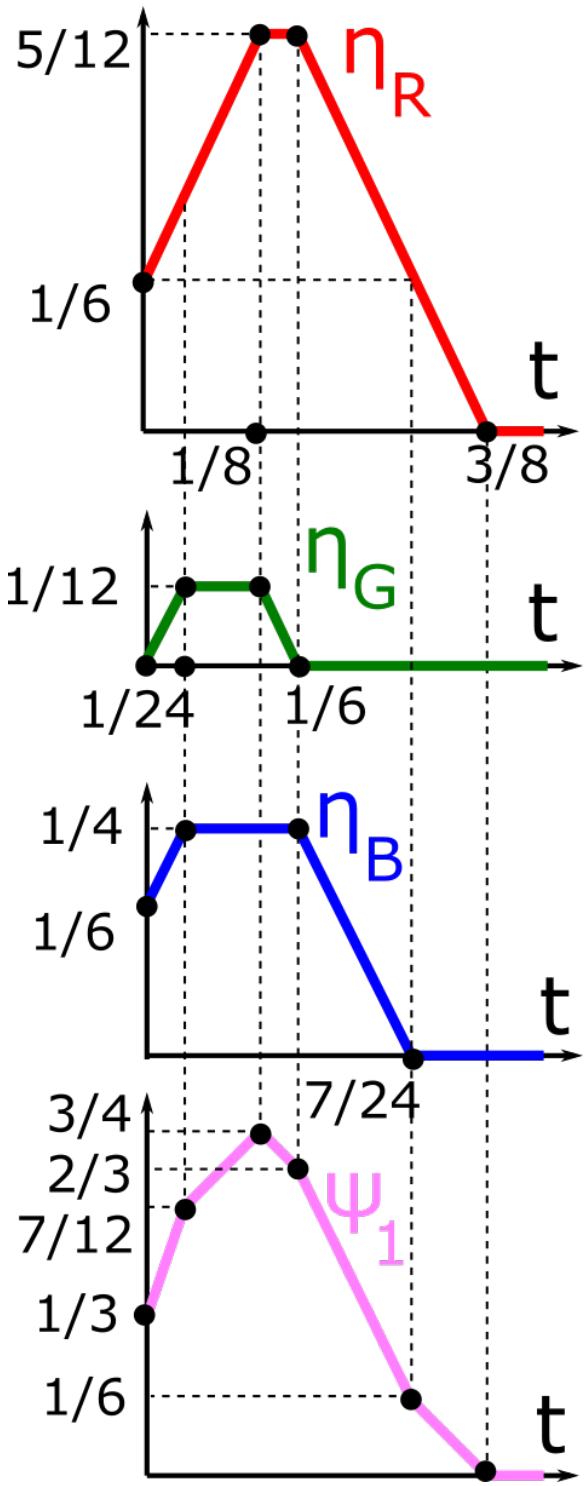


图 5 梯形函数 η_R、η_G、η_B 以及第一密度函数 $\psi_1(t)$，对应于 1-周期序列 S，其点 0、1 3、1 2 的半径为 1 12、0、1 12，见示例4.1。

图 3的第二幅图中为 5 12。因此，红色长度的图像 $\eta_R(t)$ 从点 (0，1 6) 到角点 (1 8，5 12) 以梯度 2 线性增长。

对于 $t \in [\frac{1}{8}, \frac{1}{6}]$，左侧红色区间以相同的速率收缩（这是由于与绿色区间重叠），而右侧红色区间继续扩张，直到 $t = \frac{1}{6}$，此时它与蓝色区间接触$[\frac{1-3}{4}, \frac{}{4}]$。因此，$\eta_R(t)$ 的图像在 $t \in [\frac{1}{8}, \frac{1}{6}]$ 处保持恒定，直至角点 (1 6，5 12)。

此后，$\eta_R(t)$ 的图像线性递减（梯度为 -2），直到所有红色区间在时刻 $t = \frac{3}{8}$ 都被绿色和蓝色区间完全覆盖，见图 3中的第 6 幅图。

因此，梯形函数 η_R 的分段线性图像经过以下拐点：(0，1 6)、(1 8，5 12)、(1 6，5 12)、(3 8，0)。此后，$\eta_R(t) = 0$在 $t \geq \frac{3}{8}$ 上保持不变。图5 显示了 η_R、η_G、η_B 和 $\psi_1 = \eta_R + \eta_G + \eta_B$的图像。■

定理4.2 推广了例4.1，并证明任何 $\psi_1(t)$ 都是由梯形函数相加得到的，其拐角均有明确描述。我们考虑任意指标 $i = 1$、...、m (对应一个点 p_i 或一个间隙 g_i)，并对 m 取模，使得 $m + 1 \equiv 1$ (模 m)。

定理 4.2（ψ_1的描述）。设周期序列 $S = \{p_1, \ldots, p_m\} + \mathbb{Z}$ 由若干不相交区间组成，其中心为 $0 \leq p_1 < \cdots < p_m < 1$，半径分别为 r_1，...，$r_m \geq 0$。

考虑间隙 $g_i = (p_i - r_i) - (p_{i-1} + r_{i-1})$，其中 $i = 1, \ldots, m$ 以及 $p_0 = p_m - 1$, $r_0 = r_m$。

Then the 1st density $\psi_1(t)$ is the sum of m *trapezoid* functions η_i, $i = 1, \ldots, m$, with the corners $(0, 2r_i)$, $\left(\frac{g_i}{2}, g + 2r_i\right)$, $\left(\frac{g_{i+1}}{2}, g + 2r_i\right)$, $\left(\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i, 0\right)$, where $g = \min\{g_i, g_{i+1}\}$.

因此，$\psi_1(t)$由无序对的无序集合 (g_i, g_{i+1})、$i = 1, \ldots, m$确定。■

Proof 第一密度 $\psi_1(t)$ 等于恰好被其中一个区间覆盖的子区域的总长度

$L_i(t) = [p_i - r_i - t, p_i + r_i + t]$, $i = 1, \ldots\ldots, m$，其中所有区间都在 $[0,1]$ 内按模 1 计算。

因此，$\psi_1(t)$ 是函数 η_{1i}之和，每个函数都用于测量 $L_i(t)$ 中未被其他区间 $L_j(t)$、$j \in \{1,\ldots,m\} - \{i\}$ 覆盖的子区间长度。

由于初始区间 $L_i(0)$ 互不相交，每个函数 $\eta_{1i}(t)$ 都从值 $\eta_{1i}(0) = 2r_i$ 开始，并线性增长（梯度为 2），直至 $\eta_i(\frac{1}{2}g) = 2r_i + g$，此时 $g = \min\{g_i, g_{i+1}\}$，长度为 $2r_i + 2t = 2r_i + g$ 的增长区间$L_i(t)$ 与其最近邻区间 $L_{i\pm1}(t)$ 接触，二者之间的间隙最短，为 g。

如果（例如） $g_i < g_{i+1}$，那么仅由 $L_i(t)$ 覆盖的子区间左侧在缩短，右侧则以相同速率增长，直到 $L_i(t)$ 与右侧的增长区间 $L_{i+1}(t)$ 接触。在此增长过程中，当 t 介于 $\frac{1}{2}g_i$ 和 $\frac{1}{2}g_{i+1}$之间时，梯形函数 $\eta_i(t) = g$ 保持不变。

如果 $g_i = g_{i+1}$，这条水平线会在 $\eta_i(t)$ 的图像中收缩为一个点。当 $t \geq \max\{g_i, g_{i+1}\}$ 时，仅由 $L_i(t)$ 覆盖的子区间会从两侧逐渐缩小，直至相邻区间 $L_{i\pm1}(t)$ 在它们最初最近端点 $p_{i-1} + r_{i-1}$ 和 $p_{i+1} - r_{i+1}$之间的中点处相遇。这个相遇时刻是$t = \frac{1}{2}(p_{i+1} - r_{i+1} - p_{i-1} - r_{i-1}) = \frac{1}{2}(g_i + 2r_i + g_{i+1})$，图 6 也对此作了说明。因此，梯形函数 η_i具有预期的拐角 $(0, 2r_i)$、$\left(\frac{g_i}{2}, 2r_i + g\right)$、$\left(\frac{g_{i+1}}{2}, 2r_i + g\right)$、$\left(\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i, 0\right)$。□

例4.3应用定理4.2 得到 ψ_1在例 S 中的周期序列4.1的结果。

例4.3（利用定理4.2 来处理 ψ_1）。例 $S = \left\{0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$中的序列4.1，其点 $p_1 = 0$，$p_2 = \frac{1}{3}$，$p_3 = \frac{1}{2}$的半径分别为 $r_1 = \frac{1}{12}$，$r_2 = 0$，$r_3 = \frac{1}{12}$，相邻区间之间的初始间隙为 $g_1 = \frac{1}{3}$，$g_2 = \frac{1}{4}$，$g_3 = \frac{1}{12}$，所有计算详见例3.3。

情况（实数轴）。在定理 4.2 中，对于梯形函数 $\eta_R = \eta_1$，我们仅测量红色区间覆盖的分数长度，并设定 $k = 1$ 且 $i = 1$. Then $r_i = \frac{1}{12}$, $g_i = \frac{1}{3}$ and $g_{i+1} = \frac{1}{4}$, so

$$\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{3} + \frac{1}{4}\right) + \frac{1}{12} = \frac{3}{8},$$

$$g = \min\{g_i, g_{i+1}\} = \frac{1}{4},\ g + 2r_i = \frac{1}{4} + \frac{2}{12} = \frac{5}{12}.$$

Then $\eta_R = \eta_1$ has the following corner points:

$$(0, 2r_i) = \left(0, \frac{1}{6}\right), \quad \left(\frac{g_i}{2}, g + 2r_i\right) = \left(\frac{1}{6}, \frac{5}{12}\right),$$

$$\left(\frac{g_{i+1}}{2}, g + 2r_i\right) = \left(\frac{1}{8}, \frac{5}{12}\right),$$

$$\left(\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i, 0\right) = \left(\frac{3}{8}, 0\right),$$

其中两个中间拐角因 $g_i > g_{i+1}$ 而意外调换了位置，但它们定义的梯形函数与图 5中的第一幅图相同。

情形（G）。在定理4.2 中，对于梯形函数 $\eta_G = \eta_2$，其测量仅由绿色区间覆盖的分数长度，我们设 $k = 1$且 $i = 2$。那么 $r_i = 0$，$g_i = \frac{1}{4}$且 $g_{i+1} = \frac{1}{12}$，因此

$$\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{12}\right) + 0 = \frac{1}{6},$$

$$g = \min\{g_i, g_{i+1}\} = \frac{1}{12},\ g + 2r_i = \frac{1}{12} + 0 = \frac{1}{12}.$$

那么 $\eta_G = \eta_2$ 恰好具有图 5第二幅图所示的以下拐点:

$$(0, 2r_i) = (0, 0), \quad \left(\frac{g_i}{2}, g + 2r_i\right) = \left(\frac{1}{8}, \frac{1}{12}\right),$$

$$\left(\frac{g_{i+1}}{2}, g + 2r_i\right) = \left(\frac{1}{24}, \frac{5}{12}\right),$$

$$\left(\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i, 0\right) = \left(\frac{1}{6}, 0\right).$$

情形（B）。在定理4.2 对于梯形函数 $\eta_B = \eta_3$ 测量仅由蓝色区间覆盖的分数长度，我们设 $k = 1$ 并且

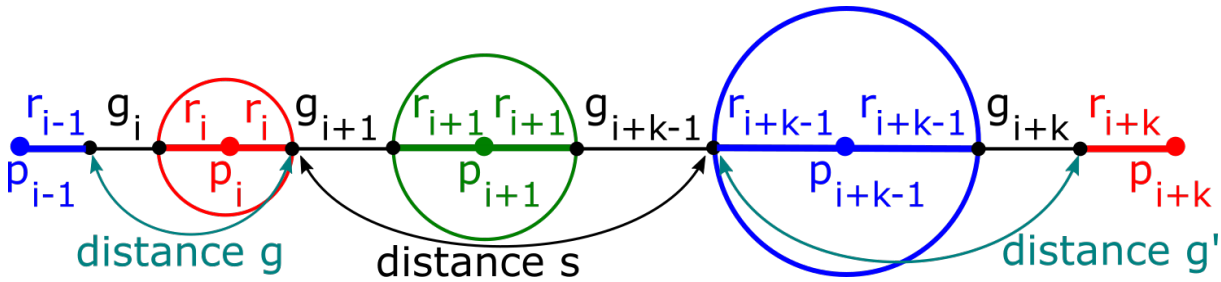


图 6 距离 s g，s，g' 定理 4.2 和 5.2的证明中所用线段区间之间的距离，如图所示，其中 $k = 3$.

$i = 3$。于是 $r_i = \frac{1}{12}$、$g_i = \frac{1}{12}$和 $g_{i+1} = \frac{1}{3}$，因此

$$\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{12} + \frac{1}{3}\right) + \frac{1}{12} = \frac{7}{24},$$

$$g = \min\{g_i, g_{i+1}\} = \frac{1}{12},\ g + 2r_i = \frac{1}{12} + \frac{2}{12} = \frac{1}{4}.$$

那么 $\eta_B = \eta_3$ 具有以下角点：

$$(0, 2r_i) = \left(0, \frac{1}{6}\right), \quad \left(\frac{g_i}{2}, g + 2r_i\right) = \left(\frac{1}{24}, \frac{1}{4}\right),$$

$$\left(\frac{g_{i+1}}{2}, g + 2r_i\right) = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{4}\right),$$

$$\left(\frac{g_i + g_{i+1}}{2} + r_i, 0\right) = \left(\frac{7}{24}, 0\right)$$

与图 5 的第三幅图所示完全一致。 ■

5 高阶密度函数 ψ_k

本节证明了定理 5.2，该定理描述了任意 k 阶密度函数 $\psi_k[S](t)$ 以及一个由不相交区间组成的 $k \geq 2$ 周期序列 S。

为准备定理 5.2 的证明，例 5.1 计算了 $\psi_2[S]$，其中 S 取自例 3.1。

例 5.1 (ψ_2 当 $S = \left\{0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$)。密度 $\psi_2(t)$ 可表示为以下梯形函数之和 梯形 函数 η_{GB}，η_{BR}，η_{RG}，每个函数分别表示一个双重交集的长度，见图 3。

对于绿色区间 $[\frac{1}{3} - t, \frac{1}{3} + t]$ 和蓝色区间 $[\frac{5}{12} - t, \frac{7}{12} + t]$，函数$\eta_{GB}(t)$的图像是分段线性的，并从点 (1 24， 0) 开始，因为这些区间在 $t = \frac{1}{24}$ 处相接。

绿蓝交集 $[\frac{5}{12} - t, \frac{1}{3} + t]$ 不断扩大，直至 $t = \frac{1}{6}$，此时所得区间 $[\frac{1}{4}, \frac{1}{2}]$与左侧的红色区间相接。同时，$\eta_{GB}(t)$ 的图像以线性方式增长（梯度为 2），直至拐角 (1 6， 1 4)，见图，7。

当 $t \in [\frac{1}{6}, \frac{7}{24}]$时，绿蓝交集区间左侧变短，但右侧以相同速率增长，直到 $t = \frac{7}{24}$，此时 $[\frac{1}{8}, \frac{5}{8}]$在右侧与红色区间 $[\frac{5}{8}, 1]$ 相接，见图 3中的第 5 幅图。因此，$\eta_{GB}(t)$ 的图像在点 (7 24， 1 4) 之前保持不变。

对于 $t \in [\frac{7}{24}, \frac{5}{12}]$，绿蓝交集区间从两侧缩短。因此，$\eta_{GB}(t)$的图像线性递减（梯度为$-2$），并在拐角 (5 12, 0)处返回到 t轴，然后在 $t \geq \frac{5}{12}$ 期间保持 $\eta_{GB}(t) = 0$ 不变。

图 7 展示了双重交集的所有梯形函数，以及 $\psi_2 = \eta_{GB} + \eta_{BR} + \eta_{RG}$。 ■

定理 5.2 （ $k \geq 2$的 ψ_k 描述）。设周期序列 $S = \{p_1, \ldots, p_m\} + \mathbb{Z}$ 由若干不相交区间组成，其中心分别为 $0 \leq p_1 < \cdots < p_m < 1$，半径分别为 $r_1, \ldots, r_m \geq 0$。考虑 S中相邻区间之间的间隙 $g_i = (p_i - r_i) - (p_{i-1} + r_{i-1})$，其中 $i = 1, \ldots, m$ 和 $p_0 = p_m - 1$, $r_0 = r_m$。

对于 $k \geq 2$，密度函数 $\psi_k(t)$ 等于以下 m 梯形函数之和：$\eta_{k,i}(t)$，$i = 1, \ldots, m$，每个函数都具有以下角点：

$$\left(\frac{s}{2}, 0\right), \left(\frac{g+s}{2}, g\right), \left(\frac{s+g'}{2}, g\right), \left(\frac{g+s+g'}{2}, 0\right),$$

es

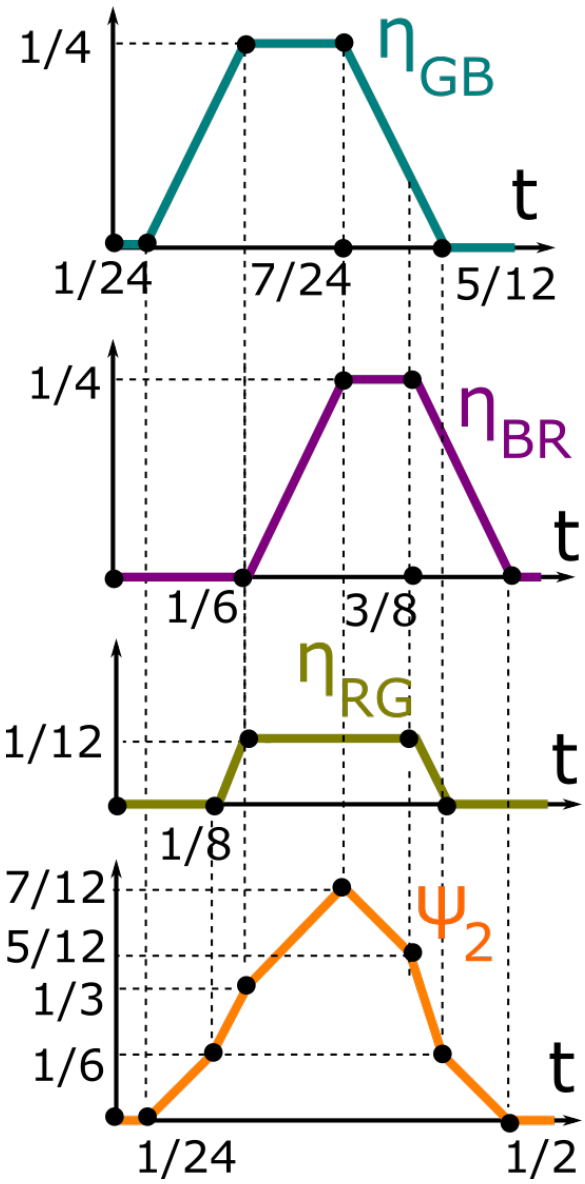


图 7 梯形函数 η_{GB}，η_{BR}，η_{RG} 以及第二个密度函数 ψ_2 (t)，对应于 1-周期序列 S，其点 0、1 3、1 2 的半径为 1 12、0、1 12，见例 5.1。 — —

其中 g, g' 是数对 $\{g_i + 2r_i, g_{i+k} + 2r_{i+k-1}\}$ 中的最小值和最大值，且 $s = \sum_{j=i+1}^{i+k-1} g_j + 2\sum_{j=i+1}^{i+k-2} r_j$，因此对于 $k = 2$，$s = g_{i+1}$。

因此，$\psi_k(t)$ 由有序元组 $(g,\ s,\ g')$、$i = 1$、……、m 所构成的无序集合确定。 ■

Proof 第 k个密度函数 $\psi_k(t)$ 衡量了 m 个区间 $L_i(t) = [p_i - r_i - t, p_i + r_i + t]$、$i = 1$、……、$m$ 之间所有 k 重交集的分数长度。现在，我们将直线 $\mathbb{R}$ 上所有这类区间 $L_i(t)$ 可视化，而不将它们模 1 映射到单位胞 $[0, 1]$。

由于所有半径 $r_i \geq 0$，只有 k 个连续区间会对 k 重交产生贡献。因此，只有当两个区间 $L_i(t)$ 和 $L_{i+k-1}(t)$ 重叠时，才会出现 k 重增长区间的交集，因为它们的交集还必须被所有中间区间 $L_i(t)$ $L_{i+1}(t)$……，$L_{i+k-1}(t)$覆盖。

那么，密度 $\psi_k(t)$ 等于 m *trapezoid functions* $\eta_{k\,i}$ $i = 1 \ldots m$ 的总和，每一项都等于未被其他区间覆盖的 k 重交区间 $\cap_{j=i}^{i+k-1} L_j(t)$ 的长度。此后，$\eta_{k,\,i}(t)$ 一直为 0，直到第一个临界时刻 t，此时 $2t$ 等于 $\mathbb{R}$ 中点 $p_i + r_i$ 与 $p_{i+k-1} - r_{i+k-1}$ 之间的距离，见图 6，因此 $2t = \sum_{j=i+1}^{i+k-1} g_j + 2\sum_{j=i+1}^{i+k-2} r_j = s$。于是 $t = \frac{s}{2}$，且 $(\frac{s}{2}, 0)$ 是 $\eta_{k,\,i}(t)$ 的第一个角点。

在 $t = \frac{s}{2}$ 处，k 重交区间$\cap_{j=i}^{i+k-1} L_j(t)$开始向两侧扩展。因此$\eta_{k,\,i}(t)$开始增加（梯度为 2），直到$k$重交与左侧或右侧相邻的区间 $L_{i-1}(t)$ 或 $L_{i+k}(t)$ 接触。

当 $2t$ 等于$p_{i-1} + r_{i-1}$（L_{i-1}的右端点）到$p_{i+k-1} - r_{i+k-1}$（L_{i+k-1}的左端点）的距离时，左区间 $L_{i-1}(t)$ 与 k 重交 $\cap_{j=i}^{i+k-1} L_j(t)$ 接触，见图。于是

$$2t = \sum_{j=i}^{i+k-1} g_j + 2\sum_{j=i}^{i+k-2} r_j = g_i + 2r_i + s.$$

右区间 $L_{i+k-1}(t')$ 与 k 重交 $\cap_{j=i}^{i+k-1} L_j(t')$ 接触，此时 $2t'$ 等于 $p_i + r_i$（L_i 的右端点）到 $p_{i+k} - r_{i+k}$（L_{i+k} 的左端点）的距离，见图 6，因此

$$2t' = \sum_{j=i+1}^{i+k} g_j + 2\sum_{j=i+1}^{i+k-1} r_j = s + g_{i+k} + 2r_{i+k-1}.$$

例如，若 $g_i + 2r_i = g < g' = g_{i+k} + 2r_{i+k-1}$，则$k$重交集 $\cap_{j=i}^{i+k-1} L_j(t)$ 在较早时刻 t 首次与 L_{i-1} 接触，随后在较晚时刻 t'到达 $L_{i+k}(t')$。在较早时刻，$\eta_{k,\,i}(t)$ 等于 $2(t - \frac{s}{2}) = g_i + 2r_i = g$，且拐角位于 $(\frac{g+s}{2}, g)$。

之后，k重交集在左侧不断缩小，并以相同的速率在右侧扩大。因此，函数 $\eta_{k,\,i}(t) = g$ 保持不变，直到k重交集与右区间 $L_{i+k}(t')$相接触。

在稍后的这一时刻 $t' = \frac{s + g_{i+k}}{2} + r_{i+k-1} = g'$，$\eta_{k,\ i}(t')$ 仍等于 g，且拐角位于 $(\frac{s+g'}{2},\ g)$。

若 $g_i + 2r_i = g' > g = g_{i+k} + 2r_{i+k-1}$，增长区间 $L_{i-1}(t)$ 和 $L_{i+k-1}(t)$ 以相反的顺序与 k 重交集 $\cap_{j=i}^{i+k-1} L_j(t)$ 相接。然而，上述论证得到的 $\eta_{k,i}(t)$ 的拐角相同，分别为 $(\frac{g+s}{2}, g)$ 和 $(\frac{s+g'}{2}, g)$。若 $g = g'$，则这两个拐角在 $\eta_{k,i}(t)$ 的图像中合并为一个拐角。

当 k重交集 $\cap_{j=i}^{i+k-1} L_j(t)$ 被区间 $L_{i-1}(t)$ $L_{i+k}(t$ 完全覆盖时。此时，$2t$ 等于从 $p_{i-1} + r_{i-1}$（L_{i-1}的右端点）到 $p_{i+k} - r_{i+k}$（L_{i+k}的左端点）的距离，见图 6，因此 $2t = \sum_{j=i}^{i+k} g_j + 2\sum_{j=i}^{i+k-1} r_j = g_i + 2r_i + s + g_{i+k} + 2r_{i+k-1} = g + s + g'$. $\eta_{k,i}(t)$ 的图像有一个最终拐点 $\left(\frac{g+s+g'}{2}, 0\right)$。□

例 5.3应用定理 5.2 得到 ψ_2，它是例 S 3.1中周期序列的结果。

例 5.3（利用定理 5.2 求 ψ_2）。例 $S = \left\{0,\ 13,\ \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$中由点 4.1 $p_1 = 0$、$p_2 = \frac{1}{3}$、$p_3 = \frac{1}{2}$的半径分别为 $r_1 = \frac{1}{12}$、$r_2 = 0$、$r_3 = \frac{1}{12}$，其初始间隙为$g_1 = \frac{1}{3}$、$g_2 = \frac{1}{4}$、$g_3 = \frac{1}{12}$，参见例 3.3。

在定理 5.2中，第二个密度函数$\psi_2[S](t)$ 表示为若干梯形函数之和，这些梯形函数由下文所列的拐角计算得出。

情形（GB）。对于函数 η_{GB}，它测量以 $p_2 = p_i$ 和 $p_3 = p_{i+k-1}$ 为中心的绿色和蓝色区间的双重交集，我们设 $k = 2$ 和 $i = 2$。于是我们得到半径 $r_i = 0$ 和 $r_{i+1} = \frac{1}{12}$、间隙 $g_i = \frac{1}{4}$、$g_{i+1} = \frac{1}{12}$、$g_{i+2} = \frac{1}{3}$，以及总和 $s = g_{i+1} = \frac{1}{12}$。该对

$$\{g_i + 2r_i, g_{i+2} + 2r_{i+1}\} = \left\{\frac{1}{4} + 0, \frac{1}{3} + \frac{2}{12}\right\}$$

具有最小值 $g = \frac{1}{4}$ 和最大值$g' = \frac{1}{2}$。那么 $\eta_{2,2}[S](t) = \eta_{GB}$ 具有以下如图7所示的拐角：

$$\left(\frac{s}{2}, 0\right) = \left(\frac{1}{24}, 0\right),$$

$$\left(\frac{g+s}{2}, g\right) = \left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{12}\right), \frac{1}{4}\right) = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{4}\right),$$

$$\left(\frac{s+g'}{2}, g\right) = \left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{12} + \frac{1}{2}\right), \frac{1}{4}\right) = \left(\frac{7}{24}, \frac{1}{4}\right),$$

$$\left(\frac{g+s+g'}{2}, 0\right) = \left(\frac{1}{2}(\frac{1}{4} + \frac{1}{12} + \frac{1}{2}), 0\right) = \left(\frac{5}{12}, 0\right).$$

案例（BR）。对于梯形函数 η_{BR}，它测量以 $p_3 = p_i$ 和 $p_1 = p_{i+k-1}$ 为中心的蓝色和红色区间的双重交集，我们设 $k = 2$ 和 $i = 3$。于是我们得到半径 $r_i = \frac{1}{12} = r_{i+1}$、间隙 $g_i = \frac{1}{12}$、$g_{i+1} = \frac{1}{3}$、$g_{i+2} = \frac{1}{4}$，以及 $s = g_{i+1} = \frac{1}{3}$。该对

$$\{g_i + 2r_i, g_{i+2} + 2r_{i+1}\} = \left\{\frac{1}{12} + \frac{2}{12}, \frac{1}{4} + \frac{2}{12}\right\}$$

具有最小值 $g = \frac{1}{4}$ 和最大值 $g' = \frac{5}{12}$。那么 $\eta_{2,3}[S](t) = \eta_{BR}$ 正如预期的那样，具有以下拐角，见图7：

$$\left(\frac{s}{2}, 0\right) = \left(\frac{1}{6}, 0\right),$$

$$\left(\frac{g+s}{2}, g\right) = \left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{3}\right), \frac{1}{4}\right) = \left(\frac{7}{24}, \frac{1}{4}\right),$$

$$\left(\frac{s+g'}{2}, g\right) = \left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{3} + \frac{5}{12}\right), \frac{1}{4}\right) = \left(\frac{3}{8}, \frac{1}{4}\right),$$

$$\left(\frac{g+s+g'}{2}, 0\right) = \left(\frac{1}{2}(\frac{1}{4} + \frac{1}{3} + \frac{5}{12}), 0\right) = \left(\frac{1}{2}, 0\right).$$

案例（RG）。对于梯形函数 η_{RG}，它用于测量以 $p_1 = p_i$ 和 $p_2 = p_{i+k-1}$ 为中心的红色和绿色区间的双重交集，我们设 $k = 2$ 和 $i = 1$。于是得到半径 $r_i = \frac{1}{12}$ 和 $r_{i+1} = 0$，以及间隙 $g_i = \frac{1}{3}$，

es

$g_{i+1} = \frac{1}{4}$、$g_{i+2} = \frac{1}{12}$ 和 $s = g_{i+1} = \frac{1}{4}$。这一对

$$\{g_i + 2r_i, g_{i+2} + 2r_{i+1}\} = \left\{\frac{1}{3} + \frac{2}{12}, \frac{1}{12} + 0\right\}$$

具有最小值 $g = \frac{1}{12}$ 和最大值 $g' = \frac{1}{2}$。那么 $\eta_{2_1}[S](t) = \eta_{RG}$ 具有以下拐角：

$$\left(\frac{s}{2}, 0\right) = \left(\frac{1}{8}, 0\right),$$

$$\left(\frac{g+s}{2}, g\right) = \left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{12} + \frac{1}{4}\right), \frac{1}{12}\right) = \left(\frac{1}{6}, \frac{1}{12}\right),$$

$$\left(\frac{s+g'}{2}, g\right) = \left(\frac{1}{2}\left(\frac{1}{4} + \frac{1}{2}\right), \frac{1}{12}\right) = \left(\frac{3}{8}, \frac{1}{12}\right),$$

$$\left(\frac{g+s+g'}{2}, 0\right) = \left(\frac{1}{2}(\frac{1}{12} + \frac{1}{4} + \frac{1}{2}), 0\right) = \left(\frac{5}{12}, 0\right).$$

正如图7的第三幅图所示。 ■

6 新密度的性质

本节证明序列ψ_k关于指标 $k \geq 0$ 在定理6.2中的周期性，这与原始定义1.2略有出乎意料。我们从图 3中熟悉的三点序列的简单例子开始。

例 6.1（ψ_k 在指标 k上的周期性）。设周期序列 $S = \left\{0, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$有三个点 $p_1 = 0$、$p_2 = \frac{1}{3}$、$p_3 = \frac{1}{2}$，其半径分别为$r_1 = \frac{1}{12}$、$r_2 = 0$、$r_3 = \frac{1}{12}$。初始区间 $L_1(0) = [-\frac{1}{12}, \frac{1}{12}]$、$L_2(0) = [\frac{1}{3}, \frac{1}{3}]$、$L_3(0) = [\frac{5}{12}, \frac{7}{12}]$的 -重交集由 $\psi_0(0) = \frac{2}{3}$ 度量，而一重交集由 $\psi_1(0) = \frac{1}{3}$度量，见图 4 和 5。

到 $t = \frac{1}{2}$ 时，L_1 个初始区间将增长为 $= [-\frac{7}{12}, \frac{7}{12}]$、$= [\frac{1}{6}, \frac{5}{6}]$、$= [-\frac{1}{12}, \frac{13}{12}]$（$_{12}$、$_{12}$、$_{12}$）。半径为 $t = \frac{1}{2}$ 时，增长后的区间有一个长度为 $\psi_3(_{12}) = \frac{2}{3}$ 的三重交集$[-\frac{1}{12}, \frac{7}{12}]$，这与 $\psi_0(0) = \frac{2}{3}$ 一致。

加入以 $p_4 = 1$ 为中心的额外区间 $L_4(_{12}) = [\frac{5}{12}, \frac{19}{12}]$ 后，四重交集为 $L_1 \cap L_2 \cap L_3 \cap L_4 = [\frac{5}{12}, \frac{7}{12}]$。加入以 $p_5 = \frac{4}{3}$ 为中心的额外区间 $L_5(_{12}) = [\frac{5}{6}, \frac{11}{6}]$ 后，四重交集 $L_2 \cap L_3 \cap L_4 \cap L_5$ 是单点 5 6。加入以 $p_6 = \frac{3}{2}$ 为中心的额外区间 $L_6(_{12}) = [\frac{11}{12}, \frac{13}{12}]$ 后，四重交集为 $L_3 \cap L_4 \cap L_5 \cap L_6 = [\frac{11}{12}, \frac{13}{12}]$。因此，$t = \frac{1}{2}$ 处四重交集的总长度为 $\psi_4(_{12}) = \frac{1}{3}$，这与 $\psi_1(0) = \frac{1}{3}$ 一致。

对于较大的 $t = 1$，六个扩大的区间

$$L_1(1) = \left[-\frac{13}{12}, \frac{13}{12}\right], L_2(1) = \left[-\frac{2}{3}, \frac{4}{3}\right],$$

$$L_3(1) = \left[-\frac{7}{12}, \frac{19}{12}\right], L_4(1) = \left[-\frac{1}{12}, \frac{25}{12}\right],$$

$$L_5(1) = \left[\frac{1}{3}, \frac{7}{3}\right], \quad L_6(1) = \left[\frac{5}{12}, \frac{31}{12}\right]$$

具有六重交集 $\left[\frac{5}{12}, \frac{13}{12}\right]$ 长度为$\psi_6(1) = \frac{2}{3}$，与 $\psi_0(0) = \psi_3(_{12}) = \frac{2}{3}$重合。 ■

推论6.2证明了例6.1 中的重合并非偶然。关于ψ_k 相对于 k 的周期性如图8所示。

定理 6.2（ψ_k 关于指标 k的周期性）。周期序列 $S = \{p_1, \ldots, p_m\} + \mathbb{Z}$ 的密度函数 $\psi_k[S]$ 由一系列不相交区间组成，其中心为 $0 \leq p_1 < \cdots < p_m < 1$，半径分别为$r_1$、.....、$r_m \geq 0$，满足周期性$\psi_{k+m}(t + \frac{1}{2}) = \psi_k(t)$，对于任意 $k \geq 0$ 和 $t \geq 0$ 均成立。 ■

Proof 由于初始区间彼此不相交，对于 $k \geq 0$，任意 $(k+m)$ 重交都涉及以 S 的点为中心的 $k+m$ 个相邻区间 $L_i(t) \ldots, L_{i+k+m-1}(t)$。因此，我们可以找到一个区间 $[x, x+1]$，恰好覆盖 S 的 m 个初始区间。

将 $[x, x+1]$ 压缩到点 x后，由半径$r \geq \frac{1}{2}$ 扩张的 $k+m$ 个区间的（$k+m$）重交集会变成 k 个区间的 k 重交集

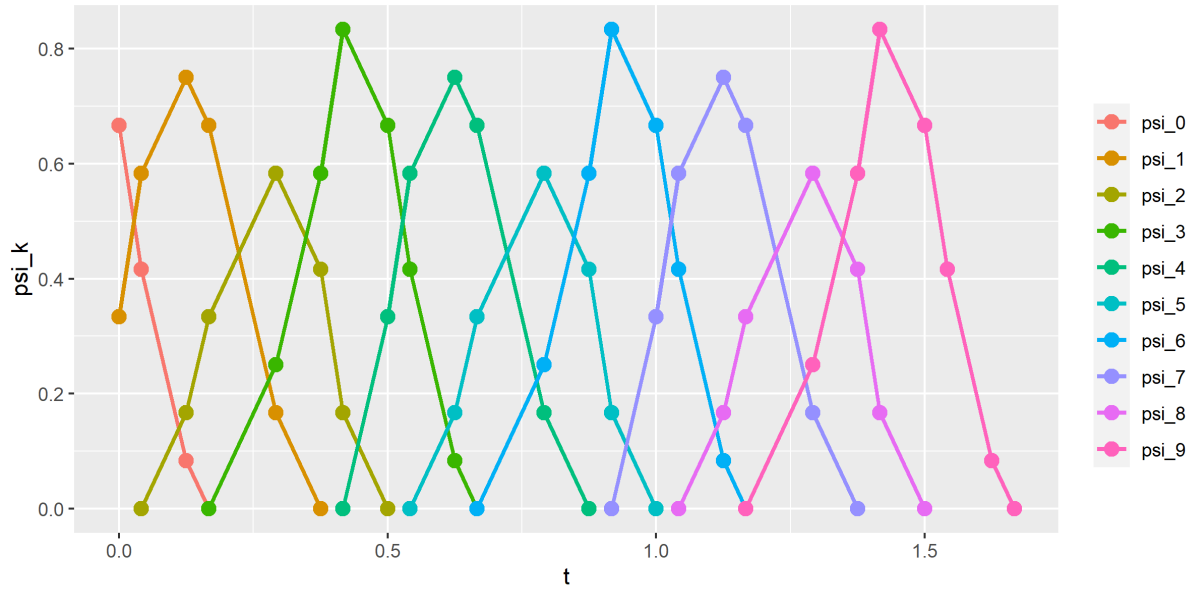


图 8 密度 ψ_k，$k = 0, \ldots\ldots$，对于 1-周期序列 S，其点 0，13，12 的半径分别为 $1\,\underline{12}$，0，$1\,\underline{12}$。密度 $\underline{\psi_0}$，$\underline{\psi_1}$，$\underline{\psi_2}$ 见例 3.1，4.1，5.1，并根据定理 6.2中的周期性确定所有其他密度。

这些区间由 $t = r - \frac{1}{2}$ 扩张而成。任意单位胞内的 k重交集和（$k+m$）重交集具有相同的分数长度，因此，对于任意 $t \geq 0$，$\psi_{k+m}\left(t + \frac{1}{2}\right) = \psi_k(t)$。□

对称性 $\psi_{m-k}\left(\frac{1}{2} - t\right) = \psi_k(t)$ $k = 0 \ldots$ 对于 $\left[\frac{m}{2}\right]$，以及 $t \in [0, \frac{1}{2}]$ 在 [3, 定理 8]中不再适用于半径不同的点。例如，$\psi_1(t) \neq \psi_2(\frac{1}{2} - t)$ 对于周期序列 $S = \left\{0, 13, \frac{1}{2}\right\} + \mathbb{Z}$，见图 5，7。如果所有点的半径都相同 r，[3, 定理 8]则意味着，将 t 替换为 $t + 2r$后，对称性仍成立。

主要结果 [3] 表明，所有密度函数都无法区分具有零半径的非等距序列 $S_{15} = \{0, 1, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 12\} + 15\mathbb{Z}$和 $Q_{15} = \{0, 1, 3, 4, 6, 8, 9, 12, 14\} + 15\mathbb{Z}$。例6.3表明，具有非零半径的序列的密度更强，可以区分序列 $S_{15} \ncong Q_{15}$。

例 6.3（ψ_k 对于 S_{15}，Q_{15} 具有邻点半径）。对于周期序列 $S \subset \mathbb{R}$中的任意点 p，将其邻点半径定义为该序列 S中 p 到最近邻的半距离。

这种半径的选取符合等距变换，具体来说，半径为零的周期序列 S, Q 当且仅当 S, Q 与其邻居半径是等距的。图9 显示，密度 ψ_k 对于 $k \geq 2$ 可以区分非等距序列 S_{15} 和 Q_{15} 缩小 15 倍后的单位胞 $[0, 1]$，参见例2.1。■

推论 6.4（计算 $\psi_k(t)$）。设S，$Q \subset \mathbb{R}$ 是至多有 m 个基元点的周期序列。对于 $k \geq 1$，可以在时间 O（m^2）内绘制第 k个密度函数 $\psi_k[S]$ 的图像。可以在时间 O（m^3）内检查 $\Psi[S] = \Psi[Q]$是否成立。 ■

Proof 要绘制 $\psi_k[S]$的图像，或计算 k第 $\psi_k[S](t$阶密度函数在任意半径 t处的值，我们首先利用定理 6.2 中的周期性，将 k约化到 0、1、...、m的范围内。用时 $O(m \log m)$，我们将一个单位胞中的点（为方便起见，缩放至 U）按递增（循环）顺序排列为 $[0, 1]$、...、p_1。用时 $p_m()$，我们计算相邻区间之间的间隙 $()()$。

对于 $k = 0$，我们用时 $g_{[1]} \leq \cdots \leq g_{[m]}$ 按递增顺序排列间隙 $O(m \log m)$。根据定理 3.2，用时 $O(m^2)$，我们列出 $O(m)$ 个角点，其横坐标是临界半径，在这些半径处 $\psi_0(t)$ 的梯度可能发生变化。

我们通过将 t 处的 m 梯形函数的值相加，在每个临界半径 t 处计算 ψ_0，耗时为 $O(m^2)$。剩下的工作是在所有

es

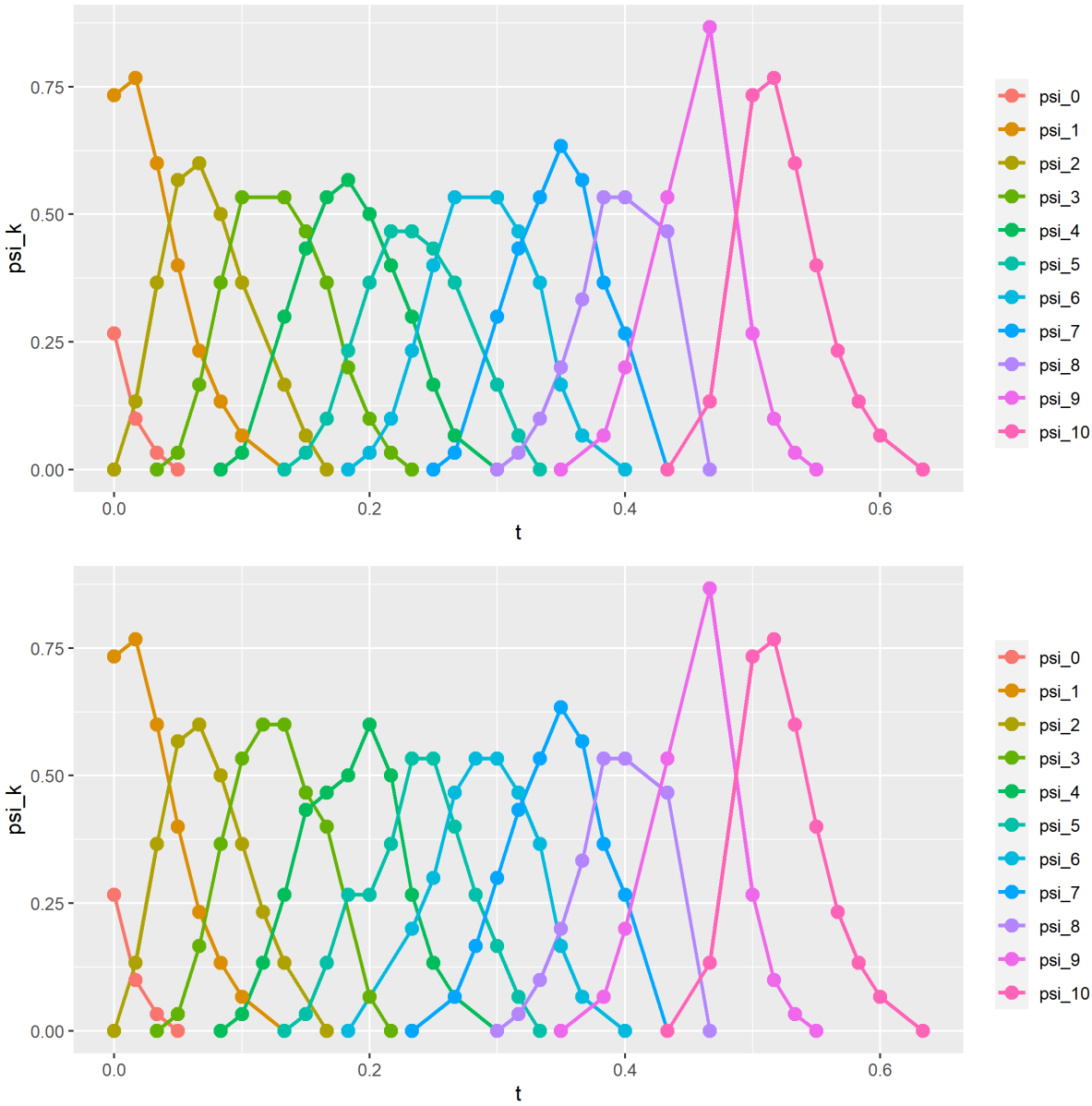


图 9 密度 ψ_k，$k = 0, \ldots\ldots, 10$，区分（对于 $k \geq 2$ 已经如此）这些（按周期 15 缩放后的）序列 $S_{15} = \{0, 1, 3, 4, 5, 7, 9, 10, 12\} + 15\mathbb{Z}$（上）和 $Q_{15} = \{0, 1, 3, 4, 6, 8, 9, 12, 14\} + 15\mathbb{Z}$（下），其中任意点的半径 r_i 是其与最近邻之间距离的一半。这些具有零半径的序列对所有 ψ_k 都具有相同的 k，见 [3, 例 10]。

$O(m)$ 个临界半径 t 处绘制点，并用直线连接相邻的点，因此总耗时为 $O(m^2)$。

对于任意更大的固定指标 $k = 1, \ldots, m$，在时刻$O(m^2)$我们列出定理 4.2 和 5.2中的所有 $O(m)$ 个拐点，由此可以得到 $\psi_k(t)$ 的图像，方法与上文关于 $k = 0$ 的论证类似。

要判断无限多个密度函数序列是否相同：$\Psi[S] = \Psi[Q]$，根据定理6.2只需只需检查 $O(m)$ 密度函数是否相同：$\psi_k[S](t) = \psi_k[Q](t)$，其中 $k = 0, 1, \ldots\ldots, \lceil \frac{m}{2} \rceil$。

要检查两个分段线性函数是否重合，只需比较它们在定理 $O(m)$ 中所有由角点确定的临界半径 t 处的取值。3.2、4.2和5.2。由于这些取值已在上文用时 $O(m^2$ 得出，因此 $k = 0$、1、……、$\lceil \frac{m}{2} \rceil$ 的总用时为 $O(m^3)$。□

此前的所有示例都展示了具有单个局部最大值的密度。不过，新的 R 代码[5] 帮助我们发现了相反的例子。

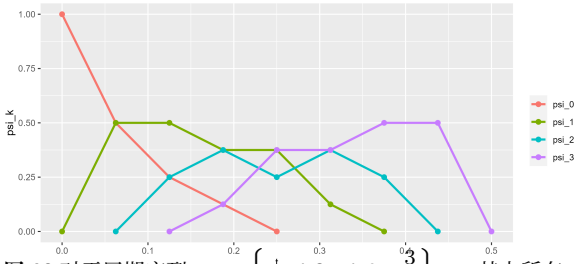


图 10 对于周期序列 $S = \left\{0, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right\} + \mathbb{Z}$其中所有点的半径均为 0，第二个密度 $\psi_2[S](t)$ 在 $t = \frac{1}{2}$ 处有一个局部最小值，位于两个局部最大值之间。

例 6.5 （具有多个极大值的密度）。图10 展示了一个简单的 4 点序列 S，其第二个密度 $\psi_2[S]$ 有两个局部最大值。图 11和12 展示了更复杂的序列，其密度函数有两个以上的极大值。 ■

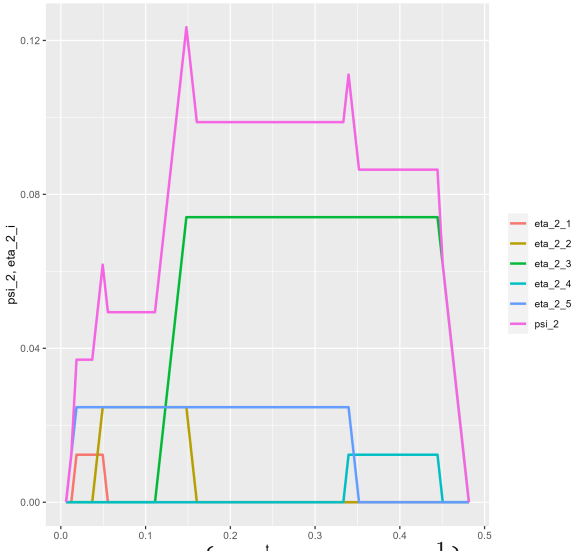


图 11 对于序列 $S = \left\{0, \frac{1}{81}, \frac{1}{27}, \frac{1}{9}, \frac{1}{3}\right\}+\mathbb{Z}$ 其中所有点的半径均为 0， $\psi_2[S]$ 等于图示五个梯形函数之和，并具有三个极大值。

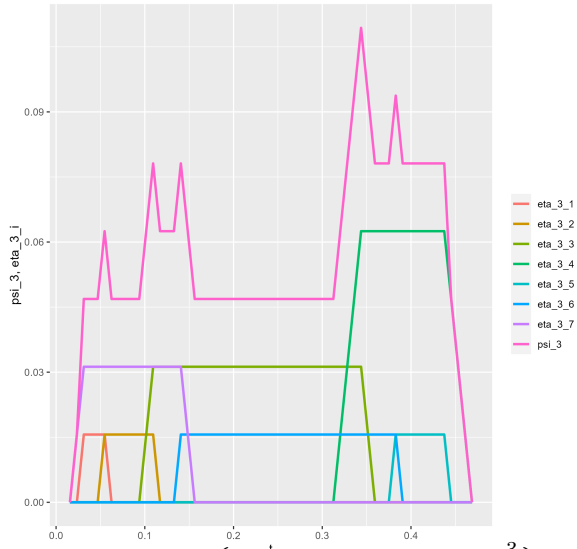


图 12 对于序列 $S = \left\{0, \frac{1}{64}, \frac{1}{16}, \frac{1}{8}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right\} + \mathbb{Z}$，其所有点的半径均为 0， $\psi_3[S]$ 有 5 个局部极大值。

7 结论与未来工作

与以往工作相比， [3]，本文的主要贡献如下。

- 定义1.2 将密度函数扩展到 ψ_k 具有半径 $r_i \geq 0$的任意周期点集。
- 定理3.2、4.2和5.2明确描述了 ψ_k对于任意周期序列 S 的点及其半径。
- 对 ψ_k 的描述使我们能够证明定理 ψ_k 中的6.2 周期性，并在推论 ψ_k 6.4 中给出计算任意 ψ_k 的二次时间算法6.4。
- 代码 [5] 帮助我们在示例 $S_{15} \ncong Q_{15}$ 6.3 中进行区分，并在示例中找到密度具有多个局部最大值的序列6.5。

以下是未来工作的开放问题。

- 验证对于较小的 k 值，密度函数 $\psi_k[S](t)$是否至少能通过半径 0 区分所有非等距的周期点集 $S \subset \mathbb{R}^n$ 。
- 刻画所有密度函数 $S \subset \mathbb{R}$都 ψ_k 具有唯一局部最大值的周期序列 $k \geq 1$ ， 而非如示例中那样6.5。
- 类似于定理3.2、4.2、5.2，对 $\psi_k[S]$ 高维 $S \subset \mathbb{R}^n$ 中的周期点集 $n > 1$的密度函数进行解析描述。

本研究得到了英国工程与自然科学研究委员会的资助

es

最后一位作者获得委员会资助（EP/R018472/1、EP/X018474/1）及英国皇家工程院工业研究员奖学金（IF2122/186）。感谢所有审稿人付出的时间并提出宝贵建议。

参考文献

[1]Anosova, O., Kurlin, V.: 周期几何与拓扑学导论。arxiv:2103.02749 (2021年)

[2] Anosova, O., Kurlin, V.: 周期点集的等距变换分类。载于：《计算机科学讲义》（DGMM 论文集），第 12708 卷，第 229–241 页（2021年）[3] Anosova, O., Kurlin, V.: 周期序列的密度函数。载于：《计算机科学讲义》（DGMM 论文集），第 13493 卷，第 395–408 页（2022）[4] Anosova, O., Kurlin, V.: 在多项式时间内识别近似重复的周期模式。arxiv:2205.15298 (2022)[5]Anosova, O.: 周期序列密度函数的 R 代码（2023），
https://github.com/oanosova/DensityFunctions1D[6]Bright, M., Cooper, A.I., Kurlin, V.: 欢迎来到三维格的连续世界。arxiv:2109.11538 (2021年)[7] Bright, M., Cooper, A.I., Kurlin, V.: 二维晶格的地理风格地图。《晶体学报》A辑**79**(1),1–13 (2023)[8]Edelsbrunner, H., Heiss, T., Kurlin, V., Smith, P., Wintraecken, M.: 周期点集的密度指纹。载于：SoCG，第 189 卷，第 32:1–32:16 页（2021年）[9] Gr¨unbaum, F., Moore, C.: 高阶不变量在确定广义 Patterson 分圆集合中的应用。《晶体学报》A辑**51**, 310–323（1995）

[10] Kurlin，V.：三维晶格的完全等距分类。arxiv:2201.10543（2022）

[11]Kurlin，V.：有限无标签点云的可计算完全不变量。arxiv:2207.08502（2022），
http://kurlin.org/projects/complete-isometry-invariants.pdf[12] Kurlin，V.：有限序列和一维周期序列的精确可计算连续等距类度量。arXiv:2205.04388（2022），
https://kurlin.org/projects/periodic-geometry-topology/metric1D.pdf[13] Kurlin，V.：二维晶格的数学。《计算数学基础》（2022），
https://kurlin.org/projects/lattice-geometry/lattices2Dmaths.pdf[14] Mosca，M.，Kurlin，V.：基于 Voronoi 的任意晶体格相似性距离。《晶体研究与技术》**55**（5），1900197（2020年）[15]Pozdnyakov，S. 等：原子结构表示的不完备性。《物理评论快报》**125**，166001（2020年）[16]Smith，P.，Kurlin，V.：三维周期点集 k 阶 Voronoi 区域的实用算法。载于：《计算机科学讲义》（ISVC 论文集）。第 13599 卷，第 377–391 页（2022）[17]Smith，P.，Kurlin，V.：具有相同一维持久性的点集族。arxiv:2202.00577（2022），
https://kurlin.org/projects/periodic-geometry-topology/trivial-persistence.pdf [18]Widdowson，D.，Kurlin，V.：周期集的逐点距离分布。arXiv:2108.04798（版本 1）（2021）[19]Widdowson，D.，Kurlin，V.：解决周期晶体的数据歧义。《神经信息处理系统进展》（arXiv:2108.04798，v2）**35**（2022），
http://kurlin.org/projects/periodic+geometry/NeurIPS2022PDD.pdf[20] Widdowson，D. 等：周期点集的平均最小距离。《MATCH 通讯数学通讯》