arXiv:2301.13161v1 [math.NA] 6 Jan 2023

六边形的回响：正多边形内部六角密堆积的遗迹

Paolo Amore科利马大学理学院，CUICBAS，Bernal D´ıaz del Castillo 340，科利马，科利马，墨西哥
paolo@ucol.mx

Mauricio Carrizalez科利马大学理学院，Bernal D´ıaz del Castillo 340，科利马，科利马，墨西哥mcarrizalez@ucol.mx

Ulises Zarate科利马大学理学院，Bernal D´ıaz del Castillo 340，科利马，科利马，墨西哥
uzarate@ucol.mx

2023年1月31日

摘要

根据我们进行的数值模拟，对于具有 $\sigma = 6j$ 条边（其中 $j = 2$，3，.....），$N(k) = 3k(k + 1) + 1$（其中 $k = 1$，2，.....）的正多边形，可以将大小适当的全等圆盘以高度对称的构型整齐地堆积在其中；这些构型显然具有最大密度，当 N 足够小时。这些构型在 $\pi/3$ 的旋转下保持不变，并且与很久以前 Graham 和 Lubachevsky 在正六边形中发现的完美六边形堆积构型，以及在圆中发现的 *curved hexagonal packing*(CHP) 构型密切相关[1]。

我们探索的基础是所设计的算法，它们能够高效地在正多边形内生成 CHP 及更一般的构型。我们利用这些算法，为不同的正多边形和圆盘数量生成了大量 CHP 构型；对这些结果的细致研究，使我们得以完整刻画 CHP 构型的一般性质，并设计出一种 *deterministic* 算法，只要指定适当的输入（“DNA”），就能完整地组装给定的 CHP 构型。我们的分析表明，给定 N的 CHP 构型数量在堆积率方面高度简并，而且可以根据 k （壳层数）、DNA 的构建模块

本身以及基本域中的顶点数量（由于对称性，我们只研究整个区域的 $1/6$ ）明确计算出来。借助确定性算法，我们能够构建具有 k 层壳的多边形的 *all* 个 CHP 构型。

我们还发现了一些例子：在具有 $3(2j+1)$ 条边的某些多边形中，存在具有变形六角密堆积的这类对称构型（$j = 1$、2、.....）；此外，也存在一些构型，它们具有正确的对称性，并且在区域较小的一部分内包含完美六边形堆积。

1 引言

根据 Thue 定理，在平面上堆积全等圆盘所能达到的最大密度（堆积率）为 $\rho = \pi/\sqrt{12}$ ，对应的规则结构是：每个圆盘都位于一个正六边形的中心，另有 6 个圆盘分别位于该六边形的顶点。

然而，如果考虑有限区域而非整个平面，由于边界造成的几何挫折，通常无法实现六角密堆积。这一规律有一个例外：当容器为正六边形，且包含 N个圆盘和 $N = h(k) \equiv 3k(k+1)+1$ 以及 $k \geq 1$ (例如参见文献 [2])；另一个例外是容器为等边三角形，且包含 $N = t(k) \equiv k(k+1)/2$ (例如参见文献 [3]和 [2])。

很久以前，Graham 和 Lubachevsky [1] 在研究全等圆盘在圆内的堆积时发现，对于 $N = h(k)$ 且 $k \leq 5$ 的情形，密度最大的构型呈现弯曲六边形堆积（CHP）模式，并且在 60^0 的旋转下保持不变（例如参见 [1] 的图 1.1）。这些作者得出的结论基于大规模数值计算；在上述情形中得到的最密构型始终都是 CHP。从 $N = 127$ ($k = 6$) 开始，这些构型便不再是最优的，因为此时得到了一些密度更高且不具有对称性的构型。

在研究全等圆盘在边数各异的正多边形内的堆积时， σ 我们在文献 [2] 中意识到，Graham 和 Lubachevsky 最初在圆中观察到的现象也会出现在正多边形中，尤其当 σ 是 6 的整数倍时（如果意识到圆其实就是边数为 $\sigma = \infty$ 的正多边形，这一发现或许就不那么令人惊讶了）。本文旨在探索这一尚未开辟的领域，并全面刻画这些奇特而优美的构型的性质。

本文结构安排如下：第 2 节简要介绍数值算法（读者可参阅 [2] 了解更详细的讨论）；第 3 节阐述 CHP构型的一般性质；第 4 节建立一种确定性算法，用于完整构建给定多边形和给定壳层数对应的所有构型（即 σ 和k）；第 5 节讨论不同情形下所得的结果；第6节探讨如何利用含有大量圆盘的 CHP构型（当然，这些构型并非最优）来获得密度高得多的无序构型，

采用 [2]中的算法2；最后，第 7 节总结全文，并简要展望未来的研究方向。

2 数值算法

本文使用的算法最近在参考文献 [2] 中提出；特别是参考文献 [2] 中的第一个算法，是对很久以前由 Nurmela 和 Osterg¨ard（NO）最初为正方形提出的算法的改进。˚最近，参考文献 [4] 对该算法进行了修改和改进， [5], 引入了边界排斥 [1]。

这里我们仅简要概述该算法的基本思想（读者可在 [2] 中找到所有必要的细节），然后说明如何利用这些算法（尤其是算法 2），在具有 $6j$ 条边的正多边形内生成弯曲六边形堆积。

按照参考文献 [2]，我们将具有 σ 条边的正多边形内部一个点的坐标参数化为

$$\begin{aligned} x(t,u,\sigma) &= \sin^2 t \; X(u,0,\sigma) \\ y(t,u,\sigma) &= \sin^2 t \; Y(u,0,\sigma) \; , \end{aligned} \tag{1}$$

其中

$$\begin{aligned} X(u,\delta,\sigma) &\equiv \Gamma(u,\delta,\sigma)\cos(u) \\ Y(u,\delta,\sigma) &\equiv \Gamma(u,\delta,\sigma)\sin(u) \; , \end{aligned} \tag{2}$$

and

$$\Gamma(u,\delta,\sigma) \equiv \left(\delta + \cos\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)\right)\sec\left(\frac{\pi}{\sigma} - (u \bmod \frac{2\pi}{\sigma})\right) \; . \tag{3}$$

特别地， $P = (X(u,0,\sigma)\;\; Y(u,0,\sigma))$ 是多边形边界上的一个点。

每个点都被视为半径为 R 的圆盘的中心：圆盘可以与其他圆盘及容器接触，但不能重叠。这样一来

$$R = \min_{1\le i\neq j\le N}\{r_{ij}\} \tag{4}$$

人们希望将这些点布置在区域中，使 R 达到最大值（在这种表述下，装填问题就变成了一个极小极大问题）。需要注意的是，这里有两个多边形：上文由点 P 表示的内多边形，对应平面中允许圆盘中心移动的区域；另一个是外多边形，对应实际的容器（例如参见 [2] 的图 1）。

在 NO 特表述中，这些点被视为电荷，它们通过势 $(\lambda/r^2)^s$ 相互作用，并且最初随机分布在多边形内部（在他们的研究中，多边形仅为正方形）。 s 的值决定了

[1]还请注意，[4, 5] 的算法仅适用于正方形容器，而 [2] 的算法则可以处理边数任意的正多边形。

势的作用范围：较小的 s 对应长程势，此时一个点会与许多其他点相互作用，即使相距很远；较大的s 对应短程势，该势在 $0 \leq r \leq \sqrt{\lambda}$处非常大，并在 $r > \sqrt{\lambda}$处迅速衰减。参数 λ 显然与圆盘的半径有关；对于 $s \to \infty$，则会得到刚性圆盘之间预期的接触相互作用。

算法1从一个随机的初始构型开始，并针对给定的 s 值最小化系统的总能量（在此阶段 s 不应过大，这样长程相互作用便能轻松地在整个区域内建立有序排列）。找到新的排列后，便增大 s 的值并再次进行最小化。重复这一过程多次，直至 s 达到非常大的值（在我们的案例中为$s \approx 10^8 - 10^9$ ）。以此方式得到的最终构型对应于多边形中的圆堆积，但未必是最优的（事实上，该算法并不直接最大化堆积密度）。因此，必须重复这一过程大量次数，随后可将获得的最佳构型视为堆积率 [2]全局最大值的候选构型。

算法 2 最初在参考文献 [5] 中针对正方形提出，随后在 [2]中推广到一般的正多边形。在这种情况下，初始构型并非随机生成，而可以是使用算法1（或任何其他堆积算法）得到的堆积构型。该算法的基本思想源于物理学：实验表明，将物体倒入容器后，若摇晃容器，物体的堆积密度会更高 [6, 7]。在我们的案例中，通过对圆盘的位置施加随机扰动来实现摇晃，随后针对不断增大的 s 值最小化总相互作用能。如果过程结束时密度有所提高，就保留新的构型；否则保留原构型。重复这一过程大量次数。该算法在改善数量众多的圆盘所组成的高密度构型方面也可能非常有效（例如[5] 中讨论的正方形内堆积3000个圆盘的情况）。

最后，还可以使用第三种算法（细化算法）以高精度“细化”圆盘的位置（参见文献 [2] 中的讨论）。

本文使用上述三种算法，尤其是算法 2，但作了一些重要调整。事实上，我们的目标是获得多边形内部的弯曲六边形堆积（CHP）构型。这些构型与六边形内部的六角密堆积构型相关；当 $N(k) = 3k(k+1) + 1$ 和 $k = 1, 2, \ldots$ ...取某些特殊值时，就会出现这类构型。

因此，CHP 构型必须在旋转 $\pi/3$ 的整数倍后保持不变：基于这一点，自然应在具有 $\sigma = 6j$ 条边的多边形区域中寻找 CHP，其中 $j = 2, 3, \ldots\ldots$。

六边形堆积的第二个特性也应由 CHP 保留，即其“壳层”结构：在含有 $N(k)$ 个圆盘的构型中，有 $6k$ 个外侧圆盘与容器接触。因此，CHP 的密度

[2]使用他们的算法，Nurmela 和 ¨Osterg˚ard 得以在 [4] 证明，正方形内部 49 个全等圆盘的最优构型并非正方形堆积。

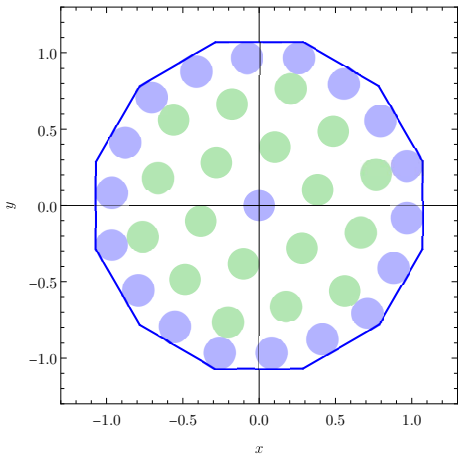

图1：十二边形内37个圆盘的初始构型：蓝色圆盘已位于精确位置，而绿色圆盘则对应于旋转了任意角度并缩放至适合该区域的六角密堆积。

可以通过确定 k 个点在 $0 \leq u < \pi/3$ 上均匀分布的位置来计算。这些点位于边界上。边界上的其余点可利用对 $\pi/3$ 的整数倍旋转所具有的对称性求得。另一个特殊点是原点，它始终对应中心圆盘的位置。

如果恰当选择初始构型，算法可能会有效得多：我们考虑这样一种构型，其中 $6k$ 边界圆盘和中心圆盘已位于精确位置，其余$3k(k-1)$个点对应于区域内旋转了某个任意角度并经过适当缩放的六角密堆积（见图1）。

利用已有 $6k+1$ 个点处于精确位置这一事实会很方便；显然，算法不应移动这些点！只需将与这些精确点对应的梯度分量设为零，即可施加这一条件。如此修改后的算法速度更快，而且也更擅长寻找CHP构型，因为现在内部点会在更多约束的引导下移至最终位置。事实上，采用这种方式通过一次试验生成CHP的概率，远高于多次运行算法1，甚至高于对一般初始构型运行算法 2。

即便如此，要找出给定$N(k)$的所有或大多数退化CHP构型，仍是一项艰巨且耗时的工作，具体取决于 N的大小

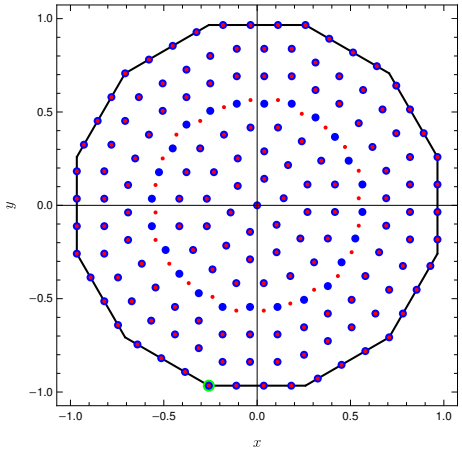

图2：十二边形内169个圆盘的两种CHP构型对比（蓝色和红色的点分别对应两种构型中圆盘的中心，绿色的点标示基本顶点的位置）。实线表示十二边形，边界圆盘的中心分布在其上。

；我们可以通过一种简单却非常有效的方法，大幅提升上述算法的性能，同时只需付出有限的计算成本。

为说明其工作原理，我们来看图2，其中绘出了十二边形内169个圆盘的两种独立CHP构型。蓝色和红色的点分别对应这两种情况。可以看到，这两种构型有许多点重合，但其中一个特定壳层（从中心向外数的第四层）发生了旋转。因此，若将第四壳层中的蓝色点旋转适当角度，再应用算法 2，生成第二种构型的概率就会非常高。基于这一想法，我们采用了以下方法：

- 假设至少有一个CHP
- 进行若干次试验，每次将不同的壳层（随机选取）旋转一个有限的（随机）角度；
- 对这些情况逐一应用算法2，并验证相应的构型是否为 CHP；如果是 CHP，则将其与原始 CHP 进行比较，若不同于原始 CHP，则予以接受；
- 完成这些试验后，重复整个过程，这次使用你在前一过程中找到的某个独立 CHP；

我们已针对十二边形内堆积169个圆盘的情形测试了这一过程（该情形并不对应堆积密度的全局最大值），并找到了许多此前未曾发现的构型。

3 曲线六角堆积

我们可以使用式（1）中的正多边形参数化，求得 CHP 可行的条件以及相应的堆积密度。

下文约定正多边形的方向如图 2 所示，并将点 $P_1 \equiv(-\sin\frac{\pi}{\sigma}, -\cos\frac{\pi}{\sigma})$ 作为基本顶点，该点在图中以绿色标出。由于构型在 $\pi/3$ 旋转下具有对称性，我们可以将考察范围限制在基本区域 $\frac{3\pi}{2} - \frac{\pi}{\sigma} \le \phi \le \frac{11\pi}{6} - \frac{\pi}{\sigma}$ 内。对于具有 k 个壳层（即 N<style id='32>$(k) = 3k(k+1) + 1$ 个圆盘的构型，边界上排列着 $6k$ 个圆盘，因此基本区域内有 k 个圆盘。按照约定，我们将第一个圆盘放置在顶点 P_1处；假设圆盘直径为 d，则接下来的圆盘将放置在正多边形上的以下各点：

$$\begin{aligned} P_2 &= P_1 + d(\cos\varphi_1, \sin\varphi_1) \\ P_3 &= P_2 + d(\cos\varphi_2, \sin\varphi_2) \\ &\cdots \end{aligned} \tag{5}$$

满足以下条件

$$P_{k+1} = \left(\cos\left(\pi\left(\frac{1}{\sigma}+\frac{1}{6}\right)\right), -\sin\left(\pi\left(\frac{1}{\sigma}+\frac{1}{6}\right)\right)\right) . \tag{6}$$

以下 φ_j 是连接 j 和（$j+1$）圆盘的线段与水平轴所成的角。以十八边形的情形为例，这一构造如图 3 所示，其中 $k = 4$。

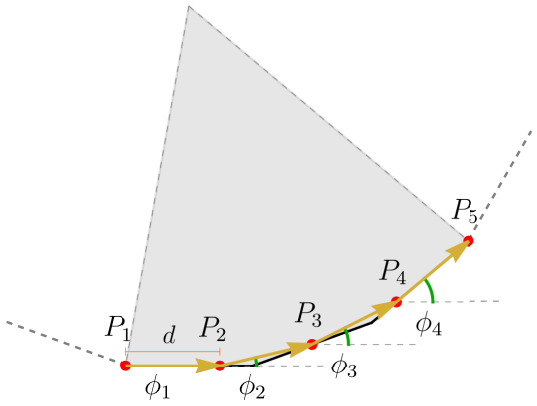

图3：对于具有 $k = 4$ 的十八边形，确定边界点。阴影区域对应基本区域。

只有当圆盘的直径由以下公式给出时，方程（6）才成立

$$d = \frac{\sin\left(\frac{\pi}{\sigma}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{\sigma} + \frac{\pi}{6}\right)}{\sum_{j=1}^{k} \cos(\phi_j)} \tag{7}$$

且各角满足补充条件

$$\frac{\sum_{j=1}^{k} \sin(\phi_j)}{\sum_{j=1}^{k} \cos(\phi_j)} = \frac{4}{\tan\left(\frac{\pi}{\sigma}\right) + \sqrt{3}} - \sqrt{3}\,. \tag{8}$$

堆积率（密度）定义为圆盘覆盖的面积与多边形总面积之比，可表示为

$$\begin{aligned} \rho(k,\sigma) &= (3k(k+1)+1)\frac{\pi d^2 \cot\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)}{\sigma\left(d + 2\cos\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)\right)^2} \\ &= 8\pi(3k(k+1)+1)\frac{\csc\left(\frac{2\pi}{\sigma}\right)\left(\sin\left(\frac{\pi}{\sigma}\right) + \cos\left(\frac{\pi}{\sigma} + \frac{\pi}{6}\right)\right)^2}{\sigma\left(4\sum_{j=1}^{k}\cos(\phi(j)) + \tan\left(\frac{\pi}{\sigma}\right) + \sqrt{3}\right)^2} \end{aligned} \tag{9}$$

对于所有顶点都被占据的特殊情况，$6k/\sigma$ 必须是一个整数，并且

$$\phi_j = \begin{cases} 0 & , \quad j = 1, \ldots, 6k/\sigma \\ 2\pi/\sigma & , \quad j = 6k/\sigma + 1, \ldots, 12k/\sigma \\ \cdots & \\ 2\pi/6 & , \quad j = k - 6k/\sigma + 1, \ldots, k \end{cases}\,. \tag{10}$$

在这种情况下，密度简化为

$$\rho(k,\sigma)=\frac{\pi(3k(k+1)+1)\sigma\cot\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)}{\left(6k\cot\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)+\sigma\right)^2}\ , \tag{11}$$

对于六边形，化简为

$$\rho(k,6)=\frac{6\sqrt{3}\pi(3k(k+1)+1)}{\left(6\sqrt{3}k+6\right)^2}\ . \tag{12}$$

类似地，圆的情形对应于在 $\phi_j=(2j-1)\pi/6k$ 中使用公式（9），得到

$$\rho(k,\infty)=(3k(k+1)+1)\frac{\sin^2\frac{\pi}{6k}}{\left(1+\sin\frac{\pi}{6k}\right)^2}\ . \tag{13}$$

根据我们先前的分析，对于有 σ 条边和 k 个壳层的正多边形，只有一组唯一的数值 $\{\varphi_1,\varphi_2,\ldots,\varphi_k\}$ 能够形成弯曲的六边形堆积。然而，一般而言，可能存在许多彼此不等价、但对应于同一组角 φ [3] 的堆积构型。这些构型具有相同的密度，且边界上的圆盘排列也相同。例如，关于十二边形的数值证据表明，“退化”构型的数量会随着 $^{k}!\,2(\lfloor k/2\rfloor)!_2$ [4] 增长。

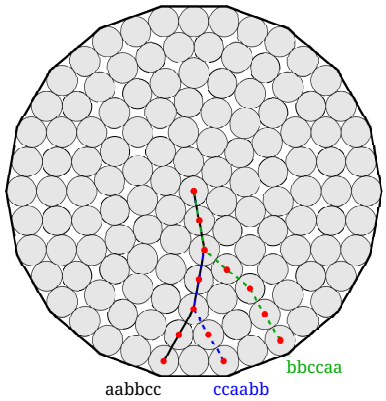

图 4：具有 $k=6$ 的十八边形构型的 DNA。

[3]如果无法通过对其中一个构型进行旋转和反射使二者重合，则这两个构型是不等价的。[4]事实证明，这个表达式是我们在本文中推导出并将在后文介绍的一般公式的一个特例。

为完整地刻画一个构型，我们考察顶点 P_1，并从 P_1 出发，经过 k 个圆盘，画出一条以原点为终点的最短路径（见图 4）。连接两个 j^{th} 圆盘和（$j+1$）th 圆盘的线段长度为 d，并与水平轴形成一个角 ξ_j。然而，每个构型都对应两组可能的角 ξ，因为可以关于经过 P_1 和原点的轴进行反射。

在此反射下，有

$$\xi_j \to \pi - \xi_j - \frac{2\pi}{\sigma} \qquad j = 1, 2, \ldots, k \ . \tag{14}$$

因此，$\{\xi_1, \ldots, \xi_k\}$ 和$\{\pi - \xi_1 - \frac{2\pi}{\sigma}, \ldots, \pi - \xi_k - \frac{2\pi}{\sigma}\}$ 表示相同的构型。这意味着，对于某个 $1 \le l \le k$，有 $\pi - \xi_j - \frac{2\pi}{\sigma} = \xi_l$。

为了帮助对这些构型进行分类，我们采用以下约定：从最小角开始，按角度递增的顺序为每个角指定一个字母。例如，在含有61个圆盘的十二边形（$k = 2$）中，我们只观察到 $\pi/3$ （两次）和 $\pi/2$ （两次）这两个 ξ 的取值。于是，第一个角用字母 a表示，第二个角则用字母b表示。在这种情况下，反射（14）对应于互换 $a \leftrightarrow b$，因此**aabb** 和**bbaa** 是相同的构型。我们认为始终使用对应于最低字典序的记号更为方便（在本例中为**aabb**）。

我们针对不同的σ 和 k 进行了大量数值实验，并得到了许多CHP构型。基于这些结果，我们提出如下

猜想：

集合 $\{\xi_1, \ldots, \xi_k\}$ 是集合 $\{\varphi_1 + \pi/3, \ldots, \varphi_k + \pi/3\}$的一个排列

接受这一猜想后，我们得到以下结果

- 将反射（14）作用于集合 $\{\xi_1, \ldots, \xi_k\}$所得到的角集合对应于原集合的一个特定排列，其中字典序被逆转，例如

$$abc \ldots w \to w \ldots cba$$

- k角 ξ可以分成 $\ell \le k$ 个集合，$\{s_1, s_2, \ldots, s_\ell\}$，其中每个集合只包含同类的角；设 n_i 为每个集合中的元素个数，使得 $n_1 + n_2 + \cdots + n_\ell = k$（我们将 $\{n_i\}$ 称为简并度）。

- 令 n_V 表示基本域中占据顶点的数量（占据顶点是指恰好在顶点处放置了圆盘）；若 $n_V \ge 2$ 对于某个构型，将另一个占据顶点旋转至位置 P_1 会产生一个退化构型，其字典序列不同；

• 在特殊情况下，反射（14）会产生前一点所述旋转得到的构型之一；为考虑这种情况，我们接着定义参数

$$\eta \equiv \begin{cases} 1 \quad , & \text{reflection produces a configuration} \\ & \text{already obtained by rotation} \\ 2 \quad , & \text{otherwise} \end{cases} \tag{15}$$

• 不等价的弯曲六边形堆积构型的数量因此就是

$$\# = \max\left(1, \frac{k!}{\eta\ n_V\ \left(\prod_{i=1}^{\ell} n_i!\right)}\right) \ , \tag{16}$$

其中，因子 η 用于消除通过反射得到的冗余构型。请注意，只有在 $k = 1$的情况下才需要取最大值，此时只有一个构型。

对于圆这一特殊情况，我们有 $n_i = 1$，其中 $1 \le i \le k$， $n_V = k$ （所有圆盘都放置在一个具有 $6k$ 条边的正多边形的顶点上），且 $\eta = 2$；此时，式（16）便化简为 Graham 和 Lubachevsky 给出的表达式[1]

$$\# = \max\left(1, \frac{(k-1)!}{2}\right) \ . \tag{17}$$

除上述性质外，我们的数值结果还表明，角 ϕ 和 ξ 满足以下关系：

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{k} \varphi_j &= k\pi\left(\frac{1}{6} - \frac{1}{\sigma}\right) \\ \sum_{j=1}^{k} \xi_j &= k\pi\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\sigma}\right) \end{aligned} \ .$$

4 确定性算法

利用上一节的结果，我们为 CHP 设计了一种确定性算-法，可系统地构造给定的全部构型，其中给定 σ 和 k。图 5 展示了这一过程在十二边形（$\sigma = 12$）且 $k = 6$ （$N = 127$）时的情况。

该算法由以下步骤组成：

1) 确定 CHP 的边界点（对于给定的σ和 k，这些点是唯一的）及其对应的角， $\varphi_1, \ldots, \varphi_k$； 2) 选取 $\{\varphi_1 + \pi/3, \ldots, \varphi_k + \pi/3\}$ 的一个特定排列，这相当于确定角 $\{\xi_1, \ldots, \xi_k\}$ （我们将这个序列称为该构型的 DNA，因为它完全决定了该构型）；

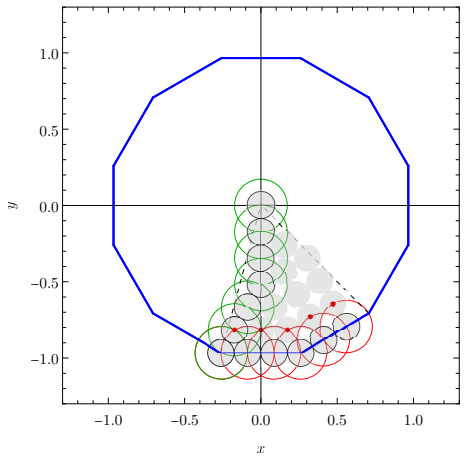

图5：在十边形内进行弯曲六边形堆积的确定性算法。虚线之间围成的区域是我们进行操作的基本域。

3) 经过步骤 2，每个内部壳层的第一个圆盘都已放置；从最外层壳层开始，从左向右，找出以已放置圆盘为圆心的圆之间的交点，即可确定新圆盘应放置的位置；每放置一个新圆盘，就可以计算新的交点并据此放置更多圆盘，直到该壳层完成（请记住，由于对称性，只需在角宽为 $\pi/3$ 的区域内进行操作）；

4) 每完成一层壳层，就移至下一层并重复该过程；迭代直至填满所有壳层；

这样，以前通过数值算法得到的相同构型，如今可以系统地获得，而且速度快得多、精度也高得多。了解这些“构建块” $\{\xi_i\}$ 后，就能够计算出所有CHP构型，因为它们对应于这些构建块所有可能的不等价排列。

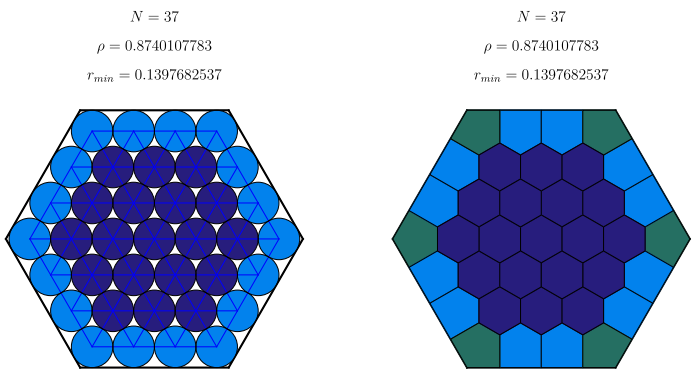

图6：正六边形内37个全等圆盘的六边形构型；右图为该构型的 Voronoi 图。这些示意图中的颜色分别根据接触数（左图）或 Voronoi 单元的边数（右图）指定。

5 结果

本节介绍使用第2 节所述数值算法或第3节所述确定性算法得到的结果。我们也简要提及此前已有研究的六边形和圆。尤其是，Graham 和 Lubachevsky 首先观察到了圆的弯曲六边形堆积[1] 。

5.1 六边形（$\sigma = 6$）

近期，六边形的相关研究见[2, 8]。对于 $N(k) = 3k(k+1) + 1$以及 $k = 1, 2,$ .....边长为 N的正六边形内，全等圆盘的最佳堆积构型对应于完美六边形堆积，且为密度的全局最大值（另见 [1]）。此时的密度（堆积率）由式（12）给出，且且 $\lim_{k\to\infty} \rho(k,6) = \rho_{plane} \equiv \frac{\pi}{\sqrt{12}}$。

对于这些构型，Voronoi 图中的内部单元为六边形，而边界单元则为五边形或四边形（见图6）。

5.2 圆（$\sigma = \infty$）

对于圆，Graham 和 Lubachevsky [1] 发现，存在具有弯曲六边形堆积的构型，其对应的数值与六边形的 $N(k)$ 相同，其中 $N \leq 91$ (对于 $N > 91$ 这些构型虽然仍然存在，但并不是最

密的）。他们在论文的式（4）中给出了密度的显式表达式，并发现 $\lim_{N\to\infty}\rho^{(circle)}{}_{\mathrm{CHP}}(N)=\frac{\pi^2}{12}$。

由于 $\frac{\pi^2}{12}<\rho_{\mathrm{plane}}$ 当$N(k)$ 足够大时，弯曲六边形堆积构型必然不再是最优的。数值结果表明 [1] 确定了 $N=91$ 为弯曲六边形堆积仍然最优时圆盘数量的最大值。

他们还发现，对于 $N(k)=3k(k+1)$ 个 $+1$ 圆盘，且 $k=1$、2、.....，不等价的弯曲六边形堆积构型有 $\max((k-1)!/2,1)$ 个。

通过用 DNA 描述这些构型，我们不仅能够验证 Graham 和 Lubachevsky 的结果，还能极其轻松地明确构造出对应于给定壳层数的所有构型。我们已在补充材料 [11] 中列出最多包含 7 层壳层的所有构型图。

5.3 σ =6j 的正多边形

边数为 $6j$ 的正多边形（$j=2,3,\ldots..$）是形成弯曲六边形堆积构型的自然候选对象，因为其边界在 $\pi/3$ 的旋转下保持不变。然而，当 k足够大时，这些构型必然不是最优的，因为根据式（11），我们得到

$$\lim_{k\to\infty}\rho_{\mathrm{CHP}}=\frac{\pi\sigma}{12}\tan\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)\le\rho_{\mathrm{plane}}\equiv\frac{\pi}{\sqrt{12}}\,, \tag{18}$$

其中，$\sigma=6$ 是上述表达式取等号的唯一情形。

表 1 和 2 给出了若干正多边形（$\sigma=12$、18、.....、60）中 CHP 构型的完整分类。首先，在第八列和第九列中，我们可以比较通过我们的确定性算法得到的不等价构型数量与我们推导出的显式公式（式（16））。第四列尤为重要，它报告了简并度：对于表中的所有情形，我们都观察到一个初始序列，其中 $\{n_i\}=\{1,1,\ldots,1\}$ 当 $1\le k<\sigma/3$（当 $\sigma\ge30$ 时，由于系统规模还不够大，我们尚未达到这一规律）：这一模式与圆相同，对应于达到更密集的 CHP，因为所有顶点都被占据。

这些表中报告的所有构型都可以在补充材料 [11, 12, 13, 14]中找到。

在表3 中，我们报告了对于 $\sigma=12$、18、.....、96边形，首次发现非CHP构型的情形。十二边形、十八边形、三十六边形和七十二边形（$\sigma=12$、18、36、72）尤为突出，因为它们是唯一几种对于 $k=6$ 个壳层（$N=127$）我们未能找到比CHP更密的构型；当然，这并不构成形式上的证明，不能说明对于这些多边形，127个圆盘的最密构型就是CHP，尽管我们的数值结果支持这一结论。另一方面，表中的其余多边形与圆有着相同的命运：Graham和Lubachevsky证明，对于圆，$N=91$ 是CHP达到最密构型的最后一种情形[1]。

直观上，我们预计当 σ 足够大时，CHP将不再是最优的，因为圆内127个圆盘的最密构型（$\sigma=\infty$）并不是

f shells.



of shells.



表3：非CHP构型的出现

σ	k	ρ	$\rho - \rho_{CHP}$
12	7	0.838209	0.0109501
18	7	0.826627	0.00687681
24	6	0.818231	0.000477362
30	6	0.817599	0.00137266
36	7	0.825064	0.00798317
42	6	0.817919	0.0017007
48	6	0.816806	0.000371802
54	6	0.816963	0.000313375
60	6	0.816443	0.0000973674
66	6	0.816631	0.000417085
72	7	0.825047	0.00794864
78	6	0.816701	0.000480921
84	6	0.816578	0.000294333
90	6	0.816688	0.000323156
96	6	0.816786	0.000517179

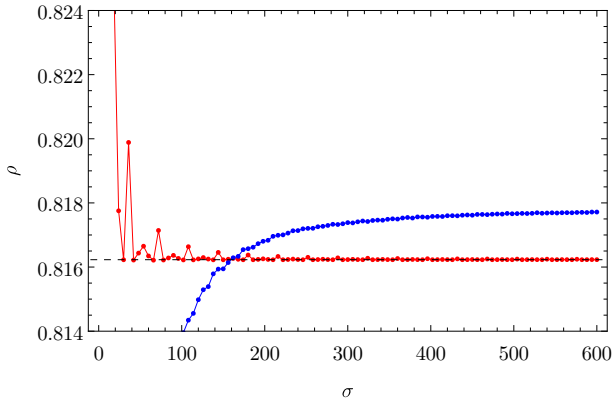

图7：不同 σ 下 CHP构型（红色曲线）和非CHP构型（蓝色曲线）的密度。

表4：边数为 $6j$ 的正多边形中出现的首个非CHP构型的边界圆盘数量。

σ	k	N_b	$6k$	σ	k	N_b	$6k$	σ	k	N_b	$6k$
12	7	35	42	18	7	33	42	24	6	29	36
30	6	32	36	36	7	38	42	42	6	31	36
48	6	31	36	54	6	29	36	60	6	32	36
66	6	30	36	72	7	37	42	78	6	31	36
84	6	30	36	90	6	31	36	96	6	31	36

CHP [1, 9]。在图 7 中，我们绘出了 $N = 127$个圆盘在边数为 $\sigma = 6j$的正多边形内的堆积构型密度（$j = 1$，2，.....）：红色曲线表示由公式（9）给出的CHP构型密度；蓝色曲线则表示将[9], 中圆内127个圆盘的最密构型调整到边数为 [5]的正多边形后得到的构型密度。黑色虚线表示式（13）中给出的圆的CHP构型在 $k = 6$时的密度。当然，我们预期 [9] 的构型仅在 $\sigma \gg 1$时才是一个好的试探构型：当 $\sigma < 100$ 时，蓝色曲线低于红色曲线，这并不意味着此处的CHP比其他任何构型都更密，而是说明基于圆的试探构型对于边数不太多的正多边形不够理想。然而，对于 $\sigma < 100$，我们有表3 中的数值结果，这些结果表明，$k = 6$的大多数构型确实是非CHP构型。从图中可以看出，对于 $\sigma \geq 162$，修正试探构型的密度始终高于相应的CHP构型。

在表 4 中，我们报告了对于表 3中相同的正多边形，所找到的首批密度高于相应 CHP构型的非CHP构型的边界圆盘数量。该表中引人注目的一点是，N_b 始终远小于 $6k$，即 CHP 中的边界圆盘数量。对于更大的 k，预计该因子 $6k - N_b$ 会增大。

表 3 和 4中报告的非CHP构型示意图见 [15] （[16] 包含与所得构型相对应的完整数据集）。

5.4 特殊CHP

所谓特殊CHP，是指正多边形中的堆积构型，该构型在 $\pi/3$ 旋转下保持不变，但要么满足 $\sigma \neq 6j$ （因此边界在该旋转下不保持不变），要么满足 $N \neq N(k)$，因而原始六边形堆积的壳层结构未被保留。

在第一类中，我们发现了两个例子，分别对应于在九边形或二十七边形内排列37个圆盘的情形（见图 8）。值得注意的是

[5]原始构型中已经位于多边形内部的点保持不动，而落在圆内但位于多边形外部的点则投影到多边形的边界上。

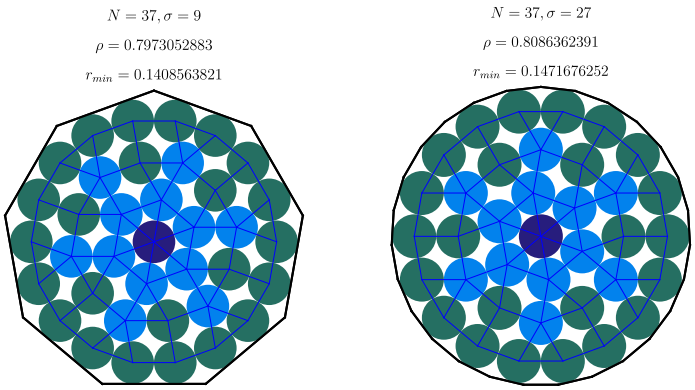

图8：九边形（左）和二十七边形（右）内37个圆盘的特殊六角密堆积

这些构型在 $\pi/3$ 旋转下保持不变，尽管边界并非如此：事实上，我们针对不同的多边形以及不同（呈六边形排列）的圆盘数量进行了多次数值实验，但未能找到其他例子（这并不意味着不存在其他情况，但说明这类构型极为罕见）。

在第二类中，我们在若干种正多边形中发现了这类实例，其边数为$6j$，尤其是 $N = 31$ 和 $N = 55$，如图 9中的十二边形所示。在这种情况下，构型由一个完美六角密堆积的紧密堆积核心构成，外围则是密度较低的区域，外围圆盘沿边界对称分布。图中所示的构型，其核心分别对应六角数 19 和 37，并有 12 个和 18 个边界圆盘；另一方面，这类构型中，核心由 7 个圆盘和 6 个边界圆盘组成，或核心由 61 个圆盘和 24 个边界圆盘组成的构型并非密度的全局最大值。这些构型似乎与 Hopkins 首先发现的“楔形六角密堆积”构型有关，见 [10]。

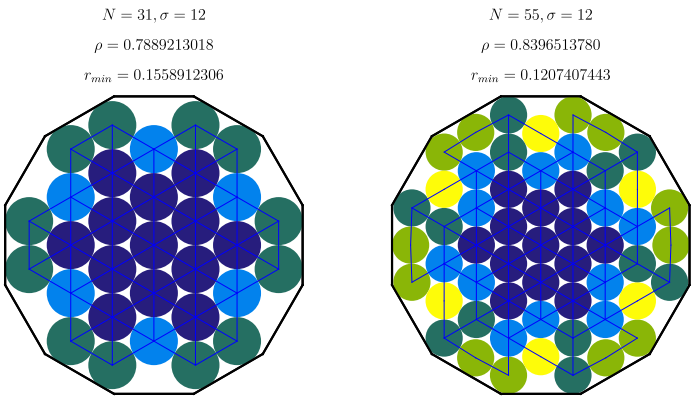

图 9：十二边形内 31 个（左）和 55 个（右）圆盘的特殊六角密堆积

6 破冰

本节将探讨我们研究结果的另一项应用：尽管弯曲六边形堆积构型仅在圆盘数量不超过某个临界值时才是最优的 $N_{\max}$（对于圆 $N_{\max} = 91$），但可以将其作为起点，通过执行 [2] 中的算法 2 一次或多次，生成密度高得多的不规则构型。如果 N 足够大，系统将形成无序构型，原有晶体的结构也会完全消失。

在图10 中，我们展示了在一次算法 2 运行过程中，1657 个圆盘在十二边形内某个构型的密度变化：算法开始时，先构造一个 CHP 构型（在我们的例子中，选取字典序最小的构型），然后将圆盘的位置随机微调；这一过程通常会得到一个密度低于原始 CHP 构型的初始试探构型（图中的虚线）。随着算法推进，s（势中控制作用范围的指数）的值逐渐增大，直至非常大的 $s = 10^8$取值。在这一过程中，构型开始重新调整，密度逐步提高，最终达到一个密度高得多的构型（当 $s \approx 40$ 时，系统的密度已超过 CHP 密度）。当然，我们无法保证这个新构型虽然远优于原始构型，却会达到堆积率的全局最大值（很可能恰恰相反！）。不过，算法 2 可以迭代应用，每次都以目前找到的最佳构型为基础，从而进一步提高密度。然而，我们当前分析的重点并非寻找全局最大值；对于如此

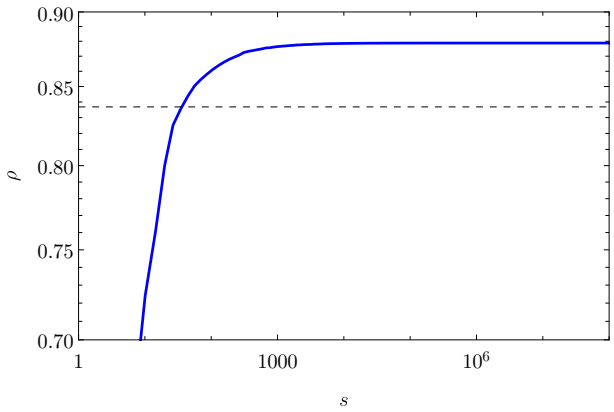

图 10：算法 2 单次运行中，十二边形内 N =1657 个圆盘的密度演变。虚线表示 CHP 构型的密度 $\rho_{\mathrm{CHP}} \approx 0.8368374943$。

大的 N 取值，这将极具挑战性且耗时极长；我们的重点是展示，如何以简单有效的方式为 $N \gg 1$生成密度极高的构型。

在图 11 中，我们展示了十二边形内字典序最小的 CHP 构型，其中有 $N = 1657$个圆盘：右图为 Voronoi 图。图 12 中的构型密度高得多，它是通过单次运行算法 2 得到的，初始试探构型采用了前述 CHP 构型，并施加了微小的随机扰动。尽管根据欧拉定理，两种情况下 Voronoi 图的拓扑荷之和都必须为 6，但在第二种情况下，我们注意到两个显著的现象：高阶顶点（其拓扑荷为负）的消失，以及拓扑荷几乎完全被排挤到区域边界。关于欧拉定理和拓扑荷的讨论，请参见 [2] 。

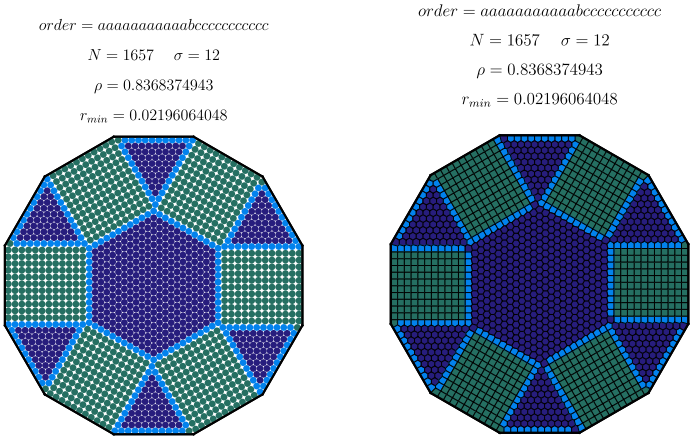

图 11：十二边形内 $k = 23$ (N =1657) 的字典序最小 CHP 构型。右图为 Voronoi 图。

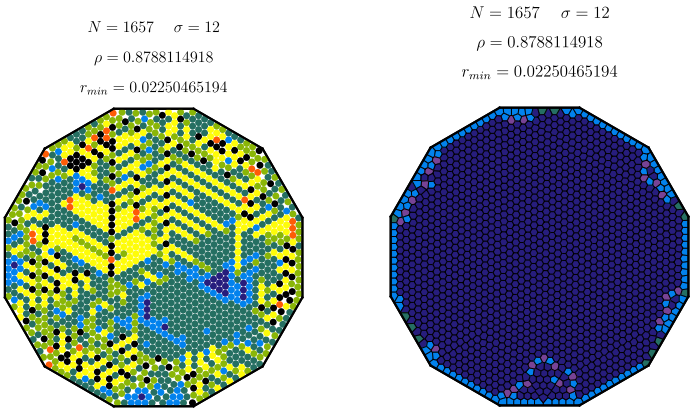

图 12：通过对图 $N = 1657$ 11 的构型运行一次算法 2 得到的十二边形内圆盘构型 11。

7 结论

本文的主要发现可概括如下：

- N（k）$= 3k$（$k+1$）$+1$ 个全等圆盘在边数为 $\sigma = 6j$ 的正多边形内的最密堆积构型，对应于一种弯曲六边形堆积；$k \leq k_{\text{最大}}$

- 我们已能够全面刻画这些构型，并建立一种确定性算法，可为给定的 σ 和 k枚举所有构型；

- 这些 CHP 构型的密度为

$$\rho(k,\sigma) = 8\pi(3k(k+1)+1)\frac{\csc\left(\frac{2\pi}{\sigma}\right)\left(\sin\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)+\cos\left(\frac{\pi}{\sigma}+\frac{\pi}{6}\right)\right)^2}{\sigma\left(4\sum_{j=1}^{k}\cos(\phi(j))+\tan\left(\frac{\pi}{\sigma}\right)+\sqrt{3}\right)^2}$$

- 随着 k 增大，这些构型在密度方面似乎会变得高度简并；不等价的弯曲六边形堆积构型的数量为

$$\# = \max\left(1, \frac{k!}{\eta\ n_v\ \left(\prod_i n_i!\right)}\right)$$

- 我们还发现，对于特定数量的圆盘，某些边数为 3(2j + 1) 的正多边形中也存在弯曲六边形堆积，尽管多边形的边界在旋转 $2\pi/3$ 下保持不变，而非 $\pi/3$；

- 在 N 的某些特定取值下，存在一些特殊构型，其内部区域呈现完美六边形堆积，但在边界处遭到破坏；

- 我们的分析证实了 Graham 和 Lubachevsky 关于圆内弯曲六边形堆积的主要结果（我们重现了参考文献 [1] 中报告的密度和构型数量），此外，我们还为正多边形（包括圆）中的所有弯曲六边形堆积提供了一个简单的统一图景，以及一种强大的确定性算法，可用于明确计算与给定壳层数量相对应的所有构型；

- 我们展示了，通过将 CHP 构型用作初始试探构型，并对其应用 [2, 5] 的算法 2，可以生成由大量组成粒子构成的高密度无序系统。

致谢

P.A. 的研究得到了国家研究人员系统（M´exico）的支持。本文中的图使用 Mathematica 绘制 [17]，并使用 MaTeX [18]。数值计算使用 python 完成 [19]，并借助 numba [20]。

参考文献

[1] Lubachevsky, Boris D., and Ronald L. Graham. ”圆内等圆盘的曲线六边形堆积。”《离散与计算几何》18.2 (1997): 179-194. (2004).[2]P. Amore, ”正多边形中的圆堆积”, https://doi.org/10.48550/arXiv.2212.12287 (2022)[3] Graham R. and Lubachevsky, ”等边三角形内等圆盘的密堆积：从22到34及更远。” arXiv预印本 math/0406252.[4] Nurmela, Kari J., and Patric RJ Osterg˚ard. ”在正方形中堆积最多50个等圆。”《离散与计算几何》18.1 (1997): 111-120.[5] Amore, Paolo, and Tenoch Morales. ”在正方形内密堆积全等圆的高效算法。”《离散与计算几何》(2022): 1-19.[6] Pouliquen, Olivier, Maxime Nicolas, and P. D. Weidman, “水平振动下非布朗球体的结晶”，《物理评论快报》79.19 (1997): 3640.[7] Baker Jessica and Arshad Kudrolli, “柏拉图立体的最大和最小稳定随机堆积”，《物理评论E》82.6 (2010): 061304.[8] Paolo Amore, ”正六边形内的圆堆积：补充材料”，https://doi.org/10.5281/zenodo.7474815(2022)[9] Specht,Eckard,固定尺寸容器中的等圆与不等圆堆积..

访问于2023年1月4日[10] Hopkins, Adam Bayne，《冷致密系统的微观结构：硬球模型与最优堆积的启示》。博士论文，普林斯顿大学，2012年。

[11]P. Amore、M. Carrizalez、U. Zarate，《六边形的回响：圆（补充材料）》，https://doi.org/10.5281/zenodo.7510244 （2023）

[12]P. Amore, M. Carrizalez, U. Zarate，《六边形的回响：十二边形（补充材料）》，https://doi.org/10.5281/zenodo.7510250 (2023)

[13]P. Amore, M. Carrizalez, U. Zarate，《六边形的回响：八边形（补充材料）》，https://doi.org/10.5281/zenodo.7510255 (2023)[14] P. Amore, M. Carrizalez, U. Zarate，《六边形的回响：二十四边形（补充材料）》，https://doi.org/10.5281/zenodo.7510301 (2023)[15] P. Amore, M. Carrizalez, U. Zarate，《六边形的回响：非CHP构型（补充材料）》，https://doi.org/10.5281/zenodo.7510309 (2023)[16] P. Amore, M. Carrizalez, U. Zarate，CHP和非CHP构型的坐标（补充材料）》，https://doi.org/10.5281/zenodo.7507985 (2023)[17] Wolfram Research, Inc.，Mathematica，12.3.1版，伊利诺伊州尚佩恩（2021）。[18]Szabolcs H.，《Mathematica 中的 LaTeX 排版》，http://szhorvat.net/pelican/latex-typesetting-in-mathematica.htm

l

[19] ”G. van Rossum，《Python 教程》，技术报告 CS-R9526，数学与计算机科学中心（CWI），阿姆斯特丹，1995 年 5 月。”[20] Lam, S. K.、Antoine P. 和 Seibert S.，《Numba：基于 LLVM 的 Python 即时编译器》。第二届 HPC 中的 LLVM 编译器基础设施研讨会论文集。（2015 年）。