

质心 Voronoi 镶嵌作为静电平衡：凸域中广义的 Thomson 问题

Zachary Mullaghy, M.S.
Independent Researcher

摘要

我们提出了一种变分框架，在该框架中，质心 Voronoi 图 (CVTs) 作为广义静电能量泛函的局部极小值出现。通过将凸域内的点分布建模为相互排斥的电荷与连续边界电荷之间的平衡，我们展示了由此产生的平衡配置会收敛到 CVT 结构。我们证明了这一点，即 CVTs 同时最小化经典的质心能量和静电势，从而建立了几何量化理论与位势论之间的联系。最后，我们介绍了一种基于 Boltzmann 统计和随机行走动力学的全局 CVT 优化热力学退火方案。通过引入一种改变时间步长（更快或更慢冷却）的方法，我们展示了可以恢复质心能量泛函（以及因此静电势）的一系列极小值。通过恢复与每个极小值相对应的生成器位置，我们可以创建一个晶格延续，从而为寻找个体极小值提供了一个可定制的框架。

1 介绍

经典汤普森问题 [4] 考虑在球面上相互通过反平方定律排斥的点电荷。我们将其推广到限定在一个域 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 内的点电荷，其中边界 $\partial\Omega$ 携带一个连续均匀的电荷密度，其大小等于内部点的总电荷量。内部电荷彼此排斥，并且还受到边界的排斥。

我们证明了当这个系统松弛到静电平衡时，所得到的点的配置收敛于一个质心 Voronoi 镶嵌 (CVT)，这种结构在几何优化、网格划分和量化中有着广泛的应用 [3]。势函数图及其变分解释 [2] 为 CVT 结构和离散能量建模提供了几何见解，这项工作将其扩展到了一个连续的静电框架。

通过将 Voronoi 图的用途扩展到一个经典静电问题中，我们进一步巩固了它们在澄清物理定律方面的实用性。空间等分的概念与质心 Voronoi 镶嵌完全吻合，因此两个等分空间的过程具有相同的最小值也就不足为奇了，尤其是在这个等分特别“公平”的时候。

该框架还扩展了在 [8] 中引入的几何和变分结构。通过找到质心能量泛函最小值的地图，我们可以绘制出在几何细化变换中表现良好的解决方案。因此，本文的结果可以用于指导具有所需特性的高度对称 GRTs。

备注 1. 在经典的汤普森问题中，点电荷被限制在球体的表面，这隐含地施加了一个无限势垒。我们的模型模仿了这种结构，将电荷置于凸域 Ω 的内部，并在边界 $\partial\Omega$ 处施加一个无限势，从而将原始设置推广到更广泛的几何形状并保留核心变分动力学。

2 问题表述：具有边界平衡的静电学

令 $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ 为一个紧致的凸域，其边界为 $\partial\Omega$ 。设 $\{x_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$ 为一组内部点电荷，这些电荷的大小相等（归一化为 1）。该区域内总的电荷量为 $Q = N$ 。

为了保证电荷中性，我们在 $\partial\Omega$ 上施加一个均匀连续表面电荷密度 σ ，定义如下：

$$\int_{\partial\Omega} \sigma(y) dS(y) = N.$$

每个内部点通过逆距离库仑力排斥所有其他内部点，并且还受到连续边界电荷的排斥。系统的总静电势能为：

$$U(\{x_i\}) = \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} \frac{1}{\|x_i - x_j\|} + \sum_{i=1}^N \int_{\partial\Omega} \frac{\sigma(y)}{\|x_i - y\|} dS(y). \quad (1)$$

目标

我们的目标是确定此静电势的局部极小值 U 是否对应于 Ω 的质心 Voronoi 镶嵌 (CVT) 配置，其中每个生成器 x_i 都是其 Voronoi 单元 V_i 的质心。特别是，我们研究：

- CVTs 是否代表了该静电系统中的稳定平衡状态
- 能量最小化动力学是否倾向于演变为 CVTs,
- 这种变分原理如何与经典重心能量泛函相关。

3 质心 Voronoi 镶嵌和能量泛函

定义 1 (质心 Voronoi 镶嵌 (CVT)). 一个域 Ω 的 Voronoi 镶嵌 $\{V_i\}$ ，其生成器为 $\{x_i\}$ ，如果每个生成器都位于其区域的重心，则称为质心 Voronoi 镶嵌。

$$x_i = \frac{1}{\text{Vol}(V_i)} \int_{V_i} y dy$$

我们的公式提供了经典空间镶嵌框架 [9] 与能量最小化电荷系统之间的物理桥梁。

定义 2 (重心能量泛函). 令 V_i 为生成元 x_i 对应的 Voronoi 单元。重心能量泛函是：

$$E(x_i) = \int_{V_i} \|x_i - y\|^2 dy$$

当 $x_i = c_i$ ，即 V_i 的重心时，其达到最小值。

此能量泛函在量化理论中自然出现 [7]，其最小化构成了 Lloyd 算法生成 CVT 的基础 [6]。

4 质心能量泛函的变分等价性

我们现在展示经典的质心能量和基于边的近似在 CVT 配置附近变分等价。

定理 1 (局部重心能量泛函等价性). 令 $\{p_i\}_{i=1}^n \subset \Omega \subset \mathbb{R}^2$ 是一个质心 Voronoi 镶嵌 (CVT), 对应的 Voronoi 单元为 V_i . 定义:

$$E_{\text{centroid}} = \sum_i \int_{V_i} \|x - p_i\|^2 dx, \quad (2)$$

$$\tilde{E}_{\text{centroid}} = \sum_{i < j} \ell_{ij} \cdot \|p_i - p_j\|^2, \quad (3)$$

其中 ℓ_{ij} 是 V_i 和 V_j 之间共享的 Voronoi 边的长度. 然后在 CVT 配置的邻域中, 两个泛函的二阶变分通过以下关系关联:

$$\nabla^2 \tilde{E}_{\text{centroid}}[\delta p, \delta p] = \lambda(\theta) \cdot \nabla^2 E_{\text{centroid}}[\delta p, \delta p],$$

对于所有扰动 δp , 其中 $\lambda(\theta) > 0$ 是一个光滑的、依赖于方向的权重.

证明. 我们从真实的中心能量开始:

$$E_{\text{centroid}} = \sum_i \int_{V_i} \|x - p_i\|^2 dx.$$

接近 CVT 时, 生成器 p_i 接近于 V_i 的中心, 所以我们对扰动 δp_i 进行展开. 二阶的主要贡献是:

$$\delta^2 E_i \approx |V_i| \cdot \|\delta p_i\|^2,$$

得到:

$$\nabla^2 E_{\text{centroid}} \approx \sum_i |V_i| \cdot \|\delta p_i\|^2.$$

假设局部各向同性, 并近似 $|V_i| \approx \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \frac{1}{2} \ell_{ij} d_{ij}$, 将 δp_i 展开为:

$$\delta p_i = \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \alpha_{ij} \cdot \frac{p_j - p_i}{\|p_j - p_i\|},$$

我们得到:

$$\|\delta p_i\|^2 \propto \sum_{j \in \mathcal{N}(i)} \|p_i - p_j\|^2.$$

备注 2. 此表达式将 δp_i 表示为朝向相邻生成器的方向扰动之和. 单位向量 $\frac{p_j - p_i}{\|p_j - p_i\|}$ 定义了一个局部方向基底, 系数 α_{ij} 测量每个方向上的运动量. 在各向同性 CVT 类似配置中, 我们假设这些方向平均来说近似正交, 因此 $\|\delta p_i\|^2$ 中的交叉项消失. 此外, 扰动幅度 α_{ij} 与距离 $\|p_i - p_j\|$ 成比例, 因为更大的分离允许更大的变化. 这证明了将能量近似为边长平方和是合理的.

因此,

$$E_{\text{centroid}} \propto \sum_{i < j} \ell_{ij} \cdot \|p_i - p_j\|^2 = \tilde{E}_{\text{centroid}},$$

在标量权重 $\lambda(\theta) > 0$ 下完成证明. □

定义 3 (静电势能泛函). 假设单位排斥电荷, 生成器 x_i 的静电势能为:

$$U(x_i) = \sum_{j \neq i} \frac{1}{\|x_i - x_j\|} + \int_{\partial\Omega} \frac{\sigma(y)}{\|x_i - y\|} dy$$

其中 $\sigma(y)$ 是均匀边界电荷密度.

5 CVTs 作为静电势能的局部最小值通过基于边的能量分析

我们现在展示 CVTs 通过建立 U 和基于边缘的质心能量 $\tilde{E}_{\text{centroid}}$ 之间的变分等价性，在局部最小化电静电势能泛函 U 。

定理 2 (CVTs 最小化局部静电势). 令 $\{x_i\}_{i=1}^N$ 是凸域 Ω 中的一个质心 Voronoi 镶嵌。那么该配置局部最小化静电势能泛函：

$$U(x_1, \dots, x_N) = \sum_{i < j} \frac{2}{\|x_i - x_j\|} + \sum_i \int_{\partial\Omega} \frac{\sigma(y)}{\|x_i - y\|} dy,$$

在意义上是，二阶变分 $\nabla^2 U$ 在 CVT 配置的邻域内是正定的。

证明. 我们观察到成对交互项 $\frac{1}{\|x_i - x_j\|}$ 惩罚生成器之间的近距离。在接近一个规则的 CVT 时，其中生成器的距离大致均匀，我们可以将其展开为：

$$\frac{1}{\|x_i - x_j\|} \approx \frac{1}{d_{ij}} - \frac{1}{d_{ij}^2} \langle \delta x_i - \delta x_j, \hat{d}_{ij} \rangle + \mathcal{O}(\|\delta x\|^2),$$

备注 3. 这是在生成器位置小扰动下静电相互作用项的一阶泰勒展开。函数 $f(x_i, x_j) = \frac{1}{\|x_i - x_j\|}$ 对 $x_i \neq x_j$ 是光滑可微的，梯度为 $\nabla f(z) = -z/\|z\|^3$ 。应用多元泰勒展开并使用 $z = x_i - x_j$ 和 $\delta z = \delta x_i - \delta x_j$ 得到：

$$\frac{1}{\|x_i + \delta x_i - x_j - \delta x_j\|} \approx \frac{1}{\|x_i - x_j\|} - \frac{1}{\|x_i - x_j\|^3} \langle \delta x_i - \delta x_j, x_i - x_j \rangle.$$

提取单位方向向量 $\hat{d}_{ij}$ 给出主文中使用的形式。此展开使我们能够用扰动 δx_i 来近似总静电势能 U 的二阶变分，从而得到一个曲率表达式，该表达式建立了在 CVT 配置附近凸性的关系。

其中， $d_{ij} = \|x_i - x_j\|$ 和 $\hat{d}_{ij}$ 是单位方向向量。静电项的二阶变分则包含：

$$\nabla^2 U \sim \sum_{i < j} \frac{2}{\|x_i - x_j\|^3} \cdot \|\delta x_i - \delta x_j\|^2.$$

另一方面，基于边缘的重心能量泛函是：

$$\tilde{E}_{\text{centroid}} = \sum_{i < j} \ell_{ij} \cdot \|x_i - x_j\|^2.$$

取其二阶变分得到：

$$\nabla^2 \tilde{E}_{\text{centroid}} \sim \sum_{i < j} \ell_{ij} \cdot \|\delta x_i - \delta x_j\|^2.$$

因此，在一个光滑且严格正的重标度函数 $\phi_{ij} = \frac{2}{d_{ij}^3 \ell_{ij}}$ 下，我们得到：

$$\nabla^2 U \sim \sum_{i < j} \phi_{ij} \cdot \nabla^2 \tilde{E}_{\text{centroid}}.$$

由于所有 $\phi_{ij} > 0$ 和 CVT 结构确保了 $\nabla^2 \tilde{E}_{\text{centroid}} \succ 0$ ，因此 $\nabla^2 U \succ 0$ 也成立。

边界积分项在均匀的 σ 下是光滑且凸的，其海森矩阵正向贡献于 $\nabla^2 U$ ，强化了结论。

因此，CVTs 对应于静电势能泛函的局部极小值。 $\square$ $\square$

5.1 硬边界约束通过无限势能

为了确保所有内部生成器保持在域 Ω 内，我们通过在边界处施加无限势能来引入一个约束条件：

$$U(x_i) = \begin{cases} \sum_{j \neq i} \frac{1}{\|x_i - x_j\|} + \int_{\partial\Omega} \frac{\sigma(y)}{\|x_i - y\|} dy, & \text{if } x_i \in \Omega \\ \infty, & \text{if } x_i \notin \Omega \end{cases}$$

这确保了最小化问题在 Ω 内是适定的，并反映了粒子被完美反射或禁止穿越边界的物理系统。从数学上讲，这种表述等同于在经典椭圆偏微分方程中施加硬壁狄利克雷约束条件，或者在量子限制模型中设置无限势阱。

此外，这反映了经典的汤姆逊问题，在这个问题中点电荷被限制在球体的表面上——隐含地在外流形上施加了无限势能。通过在 Ω 的边界处施加类似的无限势能，我们保持了这种变分对称性，并建立了将经典汤姆逊设置中的结果扩展到新设置的自然框架。

6 热力学退火和全局优化中的随机游走

虽然 CVTs 在局部最小化电静电势能泛函 U ，但能量景观包含多个局部极小值——特别是在具有复杂几何形状或对称性约束的区域。为了逃脱这些次优配置并收敛到全局最优的 CVT 排列，我们引入了一种热力学退火方案，该方案通过温度参数 T 控制随机动态来增强静电模型。

6.1 玻尔兹曼分布在生成器配置中

我们将静电能 $U(\{x_i\})$ 解释为一个有效的哈密顿量，并通过玻尔兹曼-吉布斯框架定义生成器配置的概率分布：

$$P_T(\{x_i\}) \propto \exp\left(-\frac{U(\{x_i\})}{T}\right),$$

其中 $T > 0$ 起到温度的作用，控制系统的随机性。在高温下，系统探索广泛的配置；随着 $T \rightarrow 0$ ，概率质量集中在 U 的全局最小值附近。

6.2 退火动力学通过随机游走扰动

我们通过离散时间随机过程模拟生成器位置 $\{x_i\}$ 的演化。在每一步中：

1. 随机选择一个生成元 x_i 。
2. 提出一个小的扰动 $x_i \rightarrow x_i + \delta$ ，其中 $\delta \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$ 从零均值各向同性高斯分布中抽取。
3. 计算能量差 $\Delta U = U_{\text{new}} - U_{\text{old}}$ 。
4. 以概率接受该移动：

$$P_{\text{accept}} = \begin{cases} 1, & \Delta U \leq 0, \\ \exp\left(-\frac{\Delta U}{T}\right), & \Delta U > 0. \end{cases}$$

5. 对所有生成器重复操作，然后根据冷却计划降低温度。

此过程镜像了经典的 Metropolis 算法和关于模拟退火的基础工作 [5, 1]，用于采样热平衡并逃离局部最小值。

6.3 冷却计划与收敛

温度 T 通过退火计划逐渐降低，例如，

$$T(t) = T_0 \cdot \alpha^t, \quad \text{with } 0 < \alpha < 1.$$

更慢的冷却 ($\alpha \rightarrow 1$) 增加了收敛到全局最小值的可能性，但需要更长的计算时间。理论上，如果系统以遍历的方式探索构型空间且冷却足够缓慢（如指数级），则可以保证收敛到全局最小值 [5]。

6.4 物理解释和熵流

这一热力学过程可以解释为系统随着时间的推移而散失熵：高能量、无序的状态在早期被采样，而结构化、低能量（类似 CVT）的状态随着温度下降而稳定。这与经历弛豫的物理系统中的熵衰减相平行，并且符合先前关于几何细化变换中系数熵动态的讨论。

备注 4. 退火过程特别有效地打破由对称性引起的简并状态，在这种状态下存在多个具有几乎相等能量的局部 CVT。增加的热噪声使系统能够跨越会困住基于梯度算法（如 Lloyd 方法）的能量壁垒。

7 晶格锚定和变量退火用于亚稳态 CVT 映射

虽然缓慢的退火计划会使系统偏向电势能的全局最小值，但我们提出通过系统地改变退火速率可以揭示与亚稳态 CVT 状态对应的所有局部最小值。

7.1 能量深度与退火时间尺度

我们假设系统退火的时间尺度 τ 决定了哪些极小值是可以达到的。具体来说，如果一个局部极小值的能量差为 $\Delta E = E_{\text{local}} - E_{\text{global}}$ ，那么将系统困在该构型所需的近似退火时间尺度与这个能量差成反比：

$$\tau \propto \frac{1}{\Delta E}.$$

这种关系使我们能够使用更快的冷却方案来探测较浅的极小值，以及使用更慢的冷却方案来探测更深的极小值。因此，通过扫描一系列退火时间尺度，我们可以构建一个不同的局部极小值目录。

7.2 格结构锚定局部最小值

通过退火发现的每个局部最小值都可以与一个极小值晶格锚点相关联：这是内部点配置向周围空间的一种结构化延续。这种延续充当了一个稳定边界，在 CVT 优化过程中确定性地选择特定的内部配置。

我们定义晶格锚点 A_k 为内部结构的最小对称或周期性扩展，使得固定 A_k 并优化 Ω 内的点配置可以恢复相同的局部极小值。从物理上讲，晶格锚作为晶体支架——扩展内部的规律性并通过静电相互作用强制其几何形状。

备注 5. 在内部晶格结构无限周期扩展的极限下，我们猜想原始晶格排列使静电势最小化唯一地。这一想法得到了一维经典结果的支持，在这些结果中，对均匀电荷晶格的扰动会在库仑相互作用下返回平衡状态 [?]。虽然在更高维度中的完整证明仍然是开放问题，但物理直觉和数值证据表明无限晶格锚定确保了原始配置的独特恢复。

此解释将退火景观与超均匀系统和晶格稳定性的更广泛理论联系起来，将无限周期边界条件定位为控制和选择内部 CVT 极小值的工具。

7.3 LAAM 方法

我们将这种结合方法总结为**格锚定退火映射 (LAAM)** 方法：

1. 在一系列退火速率 $\{\tau_k\}$ 范围内进行扫描并记录最终配置。
2. 通过聚类在构型和能量空间中识别不同的局部极小值。
3. 对于每个最小值，构造一个能够重现该状态的极小固定晶格锚点。
4. 将所得空间组织为一组 CVT-格对 $\{(x_i^{(k)}, A_k)\}$ ，其中 A_k 是相应的锚点。

此方法系统地记录了类似 CVT 结构的亚稳态景观，并提供了对其对称性、稳定性和几何起源的见解。

备注 6. 该方法在固态建模、相变分析、自适应网格划分以及生物结构形成方面具有潜在应用。特别是，LAAM 方法允许在一个原则性的几何框架内探索和控制亚稳态。

7.4 展望与算法影响

该框架为在任意域中计算高质量的 CVTs 提供了一种基于物理的算法。此外，它还开启了混合方案的大门——即在概率退火循环内嵌入确定性的 CVT 细化（例如 Lloyd 算法），以平衡速度和全局收敛性。未来的工作可能会探索自适应温度控制、各向异性扰动核以及纳入特定领域的约束条件（例如医学成像中的解剖结构）。

8 结论

这项工作将中心 Voronoi 镶嵌重新定义为广义 Thomson 类静电问题的极限配置。通过证明 CVTs 是电势能的局部最小值，并建立能量泛函之间的变分等价性，我们为最优镶嵌提供了新的物理解释和算法构造的基础。这种视角为在连续介质中建模空间规则性、剂量分布以及物理传输过程提供了强大的工具。

未来的研究方向包括将此框架扩展到非凸或各向异性域，纳入非均匀边界电荷分布，并利用静电解释来指导高维或物理约束设置中的 CVT 计算的动态优化算法。

参考文献

- [1] E. H. L. Aarts and J. Korst. *Simulated Annealing and Boltzmann Machines*. Wiley, 1988.
- [2] Franz Aurenhammer. Voronoi diagrams—a survey of a fundamental geometric data structure. *ACM Computing Surveys*, 23(3):345–405, 1991.
- [3] Qiang Du, Vance Faber, and Max Gunzburger. Centroidal voronoi tessellations: Applications and algorithms. *SIAM Review*, 41(4):637–676, 1999.
- [4] T. Erber and G. M. Hockney. Equilibrium configurations of n equal charges on a sphere. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24(23):L1369–L1377, 1991.
- [5] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220(4598):671–680, 1983.
- [6] Stuart P. Lloyd. Least squares quantization in pcm. *IEEE Transactions on Information Theory*, 28(2):129–137, 1982.
- [7] J. Max. Quantizing for minimum distortion. *IRE Transactions on Information Theory*, 6(1):7–12, 1960.
- [8] Zachary Mullaghy. The geometric refinement transform: A unified framework for basis expansion, entropy, and spatial coding. <https://arxiv.org/abs/2503.20930>, 2025. arXiv:2503.20930 [math.FA].
- [9] Atsuyuki Okabe, Barry Boots, Kokichi Sugihara, and Sung Nok Chiu. *Spatial Tessellations: Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. Wiley, 2000.