

最密充填問題の最適解探索

日大生産工 江見大成 松田聖

1 まえがき

ケプラーの立てた「球を空間に最も密に敷き詰める配置は、面心立方格子である」というケプラー予想は、何百年にも及ぶ長い間、数学の未解決問題として数々の数学者を悩ませてきた。それは1997年にコンピュータを用いた数値計算によって証明されたことで、一端の収束を見せたが、そこに至る過程は一つとは限らないと思う。そこで本論文では球の最密充填の最適解を探索する新たな試みを示す。

2 物理シミュレーションによる探索

3次元の球からではなく、2次元の円から

考える。中心の位置ベクトル $\vec{a}_i(x_i, y_i)$ ($i=1,2,3\cdots n$)、半径を r とする円を平面に敷き詰めていき、最も密な状態を求める。そこで、円を配置していくと考えずに、ランダムに配置した円がお互いに引き合うと考えることに

した。そこで、ある円 $\vec{a}_i$ と $\vec{a}_j$ の間に働く力を

$$F_{ij} = G \frac{m_i m_j}{|\vec{a}_j - \vec{a}_i|^2} \quad (1)$$

とする。これは、万有引力を用いた。 G は万有引力定数 m は質量となる。万有引力を用いたのは、質点が引き合うモデルとして最も自然であると判断したためである。よって円 $\vec{a}_i$ が $\vec{a}_j$ から受ける力は次のようになる。

$$\vec{F}_{ij} = G \frac{m_i m_j (\vec{a}_j - \vec{a}_i)}{|\vec{a}_j - \vec{a}_i|^3} \quad (2)$$

ここで、円 $\vec{a}_i$ は他のすべての円から力を受ける。よってある時間 t における $\vec{F}_{ij}$ ($j=1,2,3\cdots n$)の合成が $\vec{a}_i$ に働く力となり、以下のように規定される。

$$\vec{F}_i = \sum_{i \neq j, j=1}^n G \frac{m_i m_j (\vec{a}_j - \vec{a}_i)}{|\vec{a}_j - \vec{a}_i|^3} \quad (3)$$

この $\vec{F}_i$ と運動方程式を用いることで、ある時刻から微小時間後の $\vec{a}_i$ の位置を求めることができる。

$$\vec{a}_i = \iint_t \sum_{j=1, j \neq i}^n G \frac{m_j (\vec{a}_j - \vec{a}_i)}{|\vec{a}_j - \vec{a}_i|^3} \quad (4)$$

ある円 $\vec{a}_i$ を(4)式に従って一定の時間 t で移動させ、同じ操作を非同時的に他の円 $\vec{a}_i$ ($i=1,2,3\cdots n$)でもおこなう。それを繰り返すことで、平面に円を敷き詰める。

また、円同士は重ならないように動かなければならない。これは重なりを回避するのではなく、重なったと同時に $\vec{F}$ によらない斥力を鉛直逆方向へ生じさせる手法を用いた。

4 ニューラルネットワーク

を用いた探索

円の位置は他のすべての円から影響を受けて次の座標を決める。また、「円は最も密となる配置をとる」という目的と「円同士は重ならない」という条件のもとで自身の位置を決定しなくてはならない。

これは円の座標をニューロンと考えると、相互結合型ニューラルネットワークの考え方に酷似している。ニューラルネットワークという切り口で、この問題に取り組めないかと考えた。そこで、相互結合型ニューラルネットワークのモデルの内、ホップフィールド型ニューラルネットワークを用いることとした。このモデルはエネルギー関数を最小にしていくことで解を探索する。「最も密となる」という目的を満たす上で、その手法が応用できるのではないかと考えたため、このモデルを用いた。また、座標は連続値をとるため連続値ホップフィールドモデルとする。

連続値ホップフィールドモデルのダイナミクスは以下で定義される。

$$\frac{du_i(t)}{dt} = \sum_{j=0}^n w_{ij} x_j(t) - \theta_i(t) \quad i=1,2,\dots,n \quad (5)$$

$$x_i = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{-2u_i}{\mu_0}\right)} \quad (6)$$

(5)式にしたがってニューロンの内部状態 u_i を変化させ、 u_i を(6)式に代入することで出力を得る。また重みと閾値は、以下の定式化によって定めるエネルギー関数を元に定める。

円 a_i の x 座標と y 座標をそれぞれニューロン x_i 、 y_i の出力値とする。

まず、最適化問題の目的関数にあたる。「円同士が最も密となる配置をとる」について考える。これは円の配置と考えず、中心間の距離の総和をその尺度とすることとした。よって目的関数は

$$\sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2] \quad (7)$$

と表せる。これを最小にしていくことで、円が最も密になるのではないかと考えた。

次に「円同士は重ならない」という条件を考える。条件式は

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 \geq (2r)^2 \quad (8)$$

となるが、(6)は不等式となるため、ホップフィールド型ニューラルネットワークの条件式としては適さない。そこで、

$$(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 - (2r)^2 - s_{ij} = 0 \quad (9)$$

とする。 $s_{ij} \geq 0$ はニューロンの出力値で、制約式(7)が0となるように振舞う。

(5)式の目的関数と(7)式の制約条件を反映したニューラルネットワークのエネルギー関数として、

$$E = A \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2] + B \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 - (2r)^2 - s_{ij}]^2 \quad (10)$$

を導入する。第一項が正、第二項が正または0なので、第一項が最小で、第二項が0となる場合に、 E は最小となる。 A 、 B は正の定数で、 A の値を大きくすると、目的関数の値を小さくする解に収束しやすくなり、 B の値を大きくすると、制約条件を満たす解へ収束しやすくなる。

5 まとめ

物理シミュレーションによるものも、ホップフィールド型ニューラルネットワークによるものも、シミュレーションを用いた解の探索であって、論理的な最密充填問題の証明という点では、その関連性は今のところ見いだせない。ただ、皆無というわけではない。どちらの探索も、ケプラーが予想した「面心立方格子の配置になる」という条件は含んでおらず「円同士は近づいていく」「円同士は重ならない」という二つの条件によって円が配置されていく。にもかかわらず、それらがある一定の信頼性をもって、面心立方格子の配置に収束した場合、そこに関連性が無いとは言えないだろう。

「参考文献」

- 1)吉富康成「非線形科学入門ニューラルネットワーク」朝倉書店
- 2)松田聖「巡回セールスマン問題の高次の最適な定式化」電子情報通信学会論文誌
- 3) Richard Buckminster Fuller「Operating Manual for Spaceship EARTH」ちくま学芸文庫