

球面上の最適配置の問題

統計数理研究所 種 村 正 美

(受付 1998 年 6 月 30 日; 改訂 1998 年 8 月 25 日)

要 旨

本論では、球面上に均等に分布する点配置の問題について議論する。球面上のミニマクス最適問題と最小エネルギー問題について論じた後、これらと原理的に全く異なる、最適配置を得るための新しい方法を提案する。

新しい方法を「球面調節法」とよぶ。まず、球面調節法は点の個数が少ない場合、ポアソン初期配置から大局的最適配置を生成できることを示す。また、球面調節法は、広範囲の点の個数に対して局所的最適配置を生成するためにも有用であることが示される。

最後に、われわれの新しい方法は、注意深く選ばれた良い配置を初期条件に用いると、その配置を改良したより良い配置が得られることが示される。その一例として、反発相互作用の下でマルコフ連鎖モンテカルロ法によって作られた平衡配置が、球面調節法で改善されることが示される。

キーワード：球面調節法、最小エネルギー解、マルコフ連鎖モンテカルロ法、ミニマクス解、Voronoi 分割。

1. はじめに

球面上に与えられた個数の点をできるだけ均等にばらまきたいという問題がある。たとえば、地球上にある種の観測施設を可能な限り均等に配置して、地球内部の活動(マントル対流など)を探るとか、通信衛星を地表から一定の高さの球面に、均等に配備して地表のいたるところで通信が可能となるようにするなどという要求があるだろう。生物の球状組織形成のモデルとしても有用であるし、球面上の有限要素法を計画するために、最適な球面三角形分割が必要となることも考えられる。

本論では、まず球面上の最適点配置のこれまでの研究を概観する。次節では 2 種類の最適性に基づく現在までの少数個の点に対する研究について概観する。続いて、われわれは最適配置生成の新しいアルゴリズムを提出し、その有効性について検証する。そして、できるだけ具合の良い配置を広範囲の点の個数に対して求めるための工夫について議論し、球面上の配置の規則性を測る規準をいくつか導入してそれらの規準に基づいて、われわれの新しいアルゴリズムの良さを論じる。

2. 球面上の最適点配置：これまでの研究

球面の上で、できるだけ均等に配置された点のパターンを求めるという問題は、古くは Newton に遡ると言われているが、それは「13 個の球の問題」と呼ばれるもので、一つの球に

同じサイズの他の球が最大何個接触できるかを論ずるものである。この問題の解は12個であることを Schütte and van der Waerden (1953) が示した (後述)。

2.1 球面上のミニマクス点配置

いま, 3次元空間に原点 O を設定したとき, O を中心とする単位球面を \mathcal{S} で表す。そして, \mathcal{S} の上に N 個の点が配置されているとする。 N 個の点の位置を $X_N = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ で表す。 x_1, x_2, \dots は単位ベクトルでもある。このとき, 球面上の最適点配置は,

与えられた N 個の点の可能な配置の中で, 点間の球面距離¹の最小値が最大となるもの

$$(2.1) \quad \max_{X_N} \min_{i < j} |x_i - x_j|$$

と定める。その最大値を a_N で表す。ここで, $|a - b|$ は2点 a, b 間の球面距離を表す。また, (2.1) の $\min_{i < j}$ は異なる添字のあらゆる組 (i, j) ($1 \leq i, j \leq N$) の中での最小値を表し, \max_{X_N} はあらゆる配置 X_N に対する最大値を表す。

上のミニマクス最適配置の問題はしばしば「Tammeの問題」とも呼ばれる (Tamme (1930), Erber and Hockney (1991))。

以下では, $N \geq 2$ の場合を考える。まず $N=2$ の場合, 最適の配置は自明であろう (2点をそれぞれ \mathcal{S} の北極と南極に置けばよい)。このとき, $a_2 = \pi$ である。

2.1.1 少数個の点に対するミニマクス配置

$3 \leq N \leq 9$ の場合のミニマクス最適配置は, Schütte and van der Waerden (1951) が巧妙な方法で求めている。彼らの方法は興味深いので, その概略を示そう。

まず, a_N を一辺の長さとする球面正三角形を考え, その内角を a_N とすると, a_N, a_N の間に

$$(2.2) \quad \cos a_N = \frac{\cos a_N}{1 - \cos a_N}$$

が成立し,

$$(2.3) \quad a_N \leq \frac{N}{N-2} \cdot \frac{\pi}{3}$$

が成立する (Fejes Tóth (1972) も参照)。ここで, $N=3, 4, 6$ および 12 に対して等号が成り立つ。したがって, $N=3, 4, 6, 12$ に対しては厳密な意味での a_N および a_N の値が得られる (表1(a)参照)。また, $N=5, 6$ に対して, $a_5 = a_6 = \pi/2$ であることが背理法から示される (Fejes Tóth (1972), Peter Frankl・前原 (1991) も参照)。

$N=7, 8, 9$ に対する a_N の値については, Schütte and van der Waerden は球面距離がちょうど最小球面距離 a である点対を結んでできるグラフを考察することによって求めた。このグラフにおいて, すべての辺は長さが a である。もし, ある頂点が他のいずれの頂点とも辺によって連結されていなければ, それを孤立点と呼ぶ。また, すべての頂点に関して, それらを球面 \mathcal{S} の上で移動することによって, 他の頂点との距離を増大させることが不可能な場合, このグラフを既約グラフという。Schütte and van der Waerden は, $N=7, 8, 9$ に対して, 最大グラフ (辺の長さが $a = a_N$ となるグラフ) は, 孤立点をもたず, 三角形と四角形のみからなる既約グラフであることを証明し, そのことから a_N を求めた。Schütte and van der Waerden (1951) の後 Danzer (1963) が同様の方法で, $N=10, 11$ に対する a_N を求め, $N=9$ から $N=12$ の間のギャップを埋めている。

$N=13$ に対しては Schütte and van der Waerden (1953) が $a_{13} < \pi/3$ を証明して, 「13個の

球の問題」を否定的に解決した。すなわち、一つの球に接触できる同じサイズの球の最大個数は12個であることを示した。

これら以外の N について、条件(2.1)の意味での最適配置が得られているのはごく限られており、 $N \leq 32$ に対して、予想が与えられているだけである(Fejes Tóth (1972) 参照)。 $N \geq 100$ のような大きな N に対しては、厳密な最適配置を求めるのは極めて困難である。その事情は、2次元平面上の単位正方形のような有限領域に N 個の点を互いにできるだけ離れて位置するように配置する問題以上に、球面が有限な非ユークリッド空間であり、しかも境界をもたないという事情も作用していると考えることができる。

2.1.2 一定半径の球帽の最密充填とミニマクス点配置との関係

単位球面上に一定半径の球帽²を互いに重ならないように詰めていくと、球面は最大どれくらいの割合が球帽で埋められるかというのが、球面の最密充填問題である。

充填された球帽の面積の総和と単位球面の面積の比を充填密度と呼び、 D で表す。この D の数値を求めることと同時に球帽の配置も重要である。

球帽の最密充填問題は、上述の球面上のミニマクス点配置の問題と密接に関連している。すなわち、球面上の最適点配置の問題では、予め点の個数が与えられているのに対し、球帽の最密充填問題においては、球帽の半径が予め与えられている点異なる。しかし、それぞれの問題の解が得られた時点では、たとえば、最適点配置におけるミニマクス解 a_N および対応する点配置が、最密充填問題においてそれぞれ球帽の直径および球帽の中心を与えることになる。そして、最密充填密度 D は、球帽の面積が $2\pi(1 - \cos(a_N/2))$ となる(付録 A.1 (A.2) 式参照)から

表1(a). $2 \leq N \leq 12$ に対するミニマクス解.

N	a_N	a_N (数値)	D
2	π	3.141593	1.000000
3	$2\pi/3$	2.094395	0.750000
4	$\cos^{-1}(-1/3)$	1.910633	0.845299
5	$\pi/2$	1.570796	0.732233
6	$\pi/2$	1.570796	0.878680
7	$\cos^{-1}(\cot(4\pi/9) \cdot \cot(2\pi/9))$	1.359080	0.777483
8	$\cos^{-1}((\sqrt{8}-1)/7)$	1.306527	0.823582
9	$\cos^{-1}(1/3)$	1.230959	0.825765
10	—	1.154479	0.810139
11	$\cos^{-1}(1/\sqrt{5})$	1.107149	0.821421
12	$\cos^{-1}(1/\sqrt{5})$	1.107149	0.896095

表1(b). $2 \leq N \leq 12$ に対する最小エネルギー解 (Erber and Hockney (1991)).

N	d_N	D	Coulomb
2	3.141593	1.000000	0.500000
3	2.094395	0.750000	1.732051
4	1.910633	0.845299	3.674235
5	1.570796	0.732233	6.474691
6	1.570796	0.878680	9.985281
7	1.256637	0.668441	14.452977
8	1.251299	0.757668	19.675288
9	1.207589	0.795658	25.759987
10	1.134387	0.782939	32.716949
11	1.021708	0.702200	40.596451
12	1.107149	0.896095	49.165253

$$(2.4) \quad D = \frac{N \cdot 2\pi(1 - \cos(a_N/2))}{4\pi} = \frac{N}{2} \left(1 - \cos \frac{a_N}{2}\right)$$

で与えられる。

球帽の最密充填問題と球面上のミニマクス点配置が互いに同等となるのは、特別な半径の値（すなわち $a_N/2$ ）の球帽の場合だけで、それ以外の半径に対しては、最密充填における球帽の中心は対応する個数 N の最適点配置とは異なるかも知れない。具体例として、球面半径 r が $a_8/2 \leq r \leq a_8/2$ の範囲にある場合、最密充填の球帽の個数は 8 であるが、球帽の中心の配置は、 $N=8$ に対応する最適点配置からずれても構わないことになる。それゆえ、上述の二つの問題が同等であるとの見方は正しくないことを注意しておく。

表 1 に少数個の点に対する球面ミニマクス解および次項で述べる球面最小相互作用エネルギー解を与える。表 1 (a) では、 $2 \leq N \leq 9$ および $N=12$ に対しては Schütte and van der Waerden (1951) のミニマクス最適の厳密解を a_N の欄に示し、 $N=10, 11$ に対しては Danzer (1963) の厳密解 ($N=11$) および数値解 ($N=10$) を与えた。 D は、球面ミニマクス最小距離 a_N を直径とする球帽による充填密度 (2.4) を与える。

2.2 最小相互作用エネルギー配置

点間に反発型相互作用を考え、全エネルギーが最小となる配置が最適な点配置であるという考え方が古くから提案されてきている（最近の文献については Saff and Kuijlaars (1997) を参照のこと）。

N 個の点の位置を前と同様 $X_N = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ で表し、2 点 x_i, x_j の間に働く反発型相互作用ポテンシャルを $\phi(r_{ij})$ ($r_{ij} = |x_i - x_j|$ は 2 点 x_i, x_j 間の球面距離) とするとき、

$$(2.5) \quad E_N(X_N) = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \phi(r_{ij})$$

が最小となる配置 $X_N^* = \{x_1^*, x_2^*, \dots, x_N^*\}$ が最適配置であるとする。この条件は、最初に述べたミニマクス最適条件 (2.1) とは異なることに注意する必要がある。すなわち、条件 (2.1) では、点間の最短距離が最大になるという条件であって、隣接する点同士の位置関係だけが問題であったが、上の条件 (2.5) においては、すべての点間の位置関係が問題になりうるからである。

相互作用エネルギーを最小にする配置を求める問題においても、これまで発表された多くの研究は少数個の点の場合だけである。多くの研究は相互作用ポテンシャル

$$(2.6) \quad \phi(r) = \frac{1}{r^m}$$

の形が用いられてきている。その理由は、 $m=1$ の場合はちょうど正電荷が各点に置かれているとしたときのクーロンポテンシャルに対応すること、また、 m を変化させることによってどのような最適解が得られるかに興味があること、さらには $m \rightarrow \infty$ のとき、直径 $d=1$ の剛体球帽に対応することにより、球帽の最密充填との関係がとれること、などが挙げられる。その際、ポテンシャルにスケール因子を取り入れることによって、球帽の直径を可変にすることができ、Erber and Hockney (1991) はクーロンポテンシャルエネルギーに関して最小となる配置を $2 \leq N \leq 65$ に対して計算している。その結果の一部を表 1 (b) に与えた。表 1 (b) において、 D の欄は d_N を直径とする球帽の充填密度を与え、“Coulomb” の欄は、クーロンポテンシャルに関して最小のエネルギー値を表す。表 1 (a), (b) を比較すると、いくつかの N に対してミニマ

クス解 a_N と最小エネルギー解 d_N が食い違いを示しているが、その理由は上述の通りである。

3. 球面上の位置調節法

前節ではごく少数の N に対して、球面ミニマクス最小距離 a_N が知られていることを述べた。しかし、任意の N に対して、数学的に厳密な意味での a_N の値およびそれに対応する点配置を求めることは困難であると思われる。同様なことは球面最小エネルギー配置についても言えた。しかし、与えられた N に対して、適度により配置を求めることは可能であろう。ここでは、そのような方法について考える。

3.1 重心位置調節法

平面上で任意に与えられた初期点配置から、規則配置を生成する方法として、われわれは以前、Voronoi 多角形分割を用いた位置調節法を提案した (Hasegawa and Tanemura (1976), Tanemura and Hasegawa (1980))。それは、平面上の生息地における動物のなわばり形成の幾何学的モデルとして提出したもので、その概略は所与の点配置に対して Voronoi 多角形分割を行い、各点の現在位置をその Voronoi 多角形の重心方向に移動して新しい位置を得るというプロセスを反復させる方法である。これは、動物個体が周囲の個体との相互作用の結果、なわばり中心の位置を初期の配置から次第に安定な配置に変化させていく様子をモデル化したものである。

上記の平面上の位置調節法によれば、任意の初期配置から規則的な六角形に近い Voronoi 多角形による平面分割に対応する点配置が得られた。しかも、Poisson ランダム初期配置のような乱れた構造から、全体がほぼ一様な等間隔の規則的な点配置へ比較的少数回の反復で到達するという特徴があった。すなわち、位置調節法は最適解へのステップ幅が最適解から離れた場所では大きく、最適解に急速に近づくという特徴があり、これらは最適問題の反復法において好ましいとされる性質であった。

そこで、球面上においても上記の位置調節法と同様の方法が、球面上のある種の最適点配置を求めるのに有効と考えられる。その最適性は2節で述べた2種の最適性とは原理的に異なるものとなるはずである。

球面上の位置調節法として、まず平面の位置調節法を単純に拡張したものを考える。いま、原点を O とする単位球面 S の上に時刻 t における点配置 $X(t) = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_N(t)\}$ が与えられているとする。この配置 $X(t)$ に対して球面 Voronoi 分割を施す。ある点 $x_i(t)$ の球面 Voronoi 多角形 (以下では、混乱のない限り「球面」を省略して、単に Voronoi 多角形または Voronoi セルと表す) の頂点を巡回的に A_1, A_2, \dots, A_k で表し、これらに対応する O を始点とする単位ベクトルをそれぞれ b_1, b_2, \dots, b_k で表す。ここで、 k は点 $x_i(t)$ の Voronoi セルの辺数で、本来なら k_i と添字をつけるべきであるが、記号が煩雑になるので省略する。このとき、なわばり形成の位置調節法を単純に球面上に拡張した方法は、次の時刻 $t+1$ のいま注目している点の位置 $x_i(t+1)$ を

$$(3.1) \quad x_i(t+1) = \frac{\sum_{j=1}^k b_j}{|\sum_{j=1}^k b_j|}$$

と置き、すべての点に対して得られた新しい配置 $X(t+1)$ に関する Voronoi 分割を時刻 $t+1$ における分割とするものである。ある初期配置 $X(0)$ から出発して、上の式 (3.1) を反復適用して、適切な終了規則で最終配置を求める方法を球面上における「重心位置調節法」とよぶことにする。

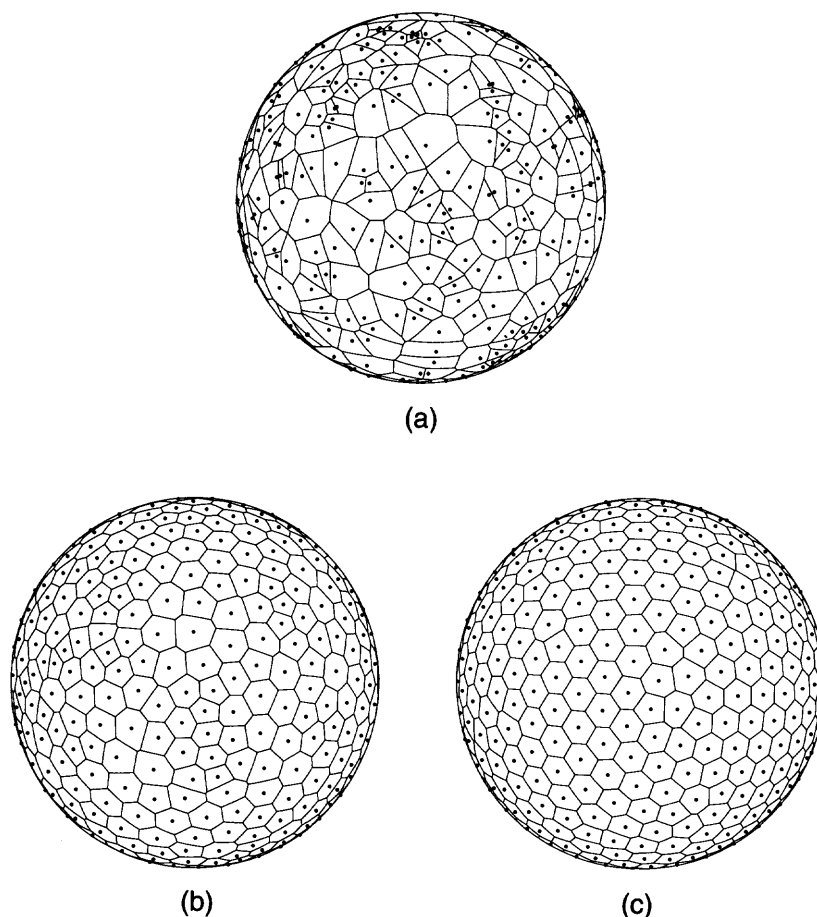


図1. $N=500$ に対する調節法の計算の一例. (a) Poisson ランダム配置, (b) 重心位置調節法の結果, (c) 球面調節法の結果. 点配置は黒丸で示され, それぞれの配置に対して Voronoi 分割が示されている. (b) および (c) は同一の初期配置 (a) を用いている. 図は半球面 (北半球) の正射影である.

重心位置調節法からどのような配置が実現されるかを, 計算機実験で調べた. 図1 (a) に示したのは, $N=500$ に対する Poisson ランダム配置の点の分布の例とその Voronoi 分割である. 図では半球面 (たとえば北半球) の正射影のみが示されている (以下, 同様). 球面上で一様ランダム配置を乱数を用いて求める方法を参考のために付録 A.2 に与えた. 図1 (a) の配置を初期配置として, 重心位置調節法で得られた最終配置とその Voronoi 分割を図1 (b) に示す.

図1 (c) には同一の初期配置 (図1 (a)) から生成された, 後述の球面調節法による最終配置とその Voronoi 分割を与えてある. 図1 (b) においては, 点配置の疎密が見られ, Voronoi セルの形・面積にバラツキがあるため, 仮にある種の最適性は満たしていたとしてももっと改良の余地がありそうに考えられる. しかし, この配置は重心位置調節法による限り, 改善されない. すなわち, 図1 (b) を初期配置として, 再び重心位置調節法を適用しても配置に変化が見られないのである.

この例から, 重心位置調節法はたとえばミニマクス最適条件 (2.1) に関して良好な配置を与えることが期待できないと予想される. 平面上では (3.1) に相当するアルゴリズムによって,

大きさのほぼ等しい正六角形が全領域にわたって得られたことを考えると、この結果は意外な感があるが、これは球面の特性と見なされるべきであろう。

3.2 球面調節法

そこで、新しい方法が望まれるのであるが、もっと望ましい配置を生成するための条件は、多角形の面積・辺長のバラツキを抑え、できるだけ等辺長多角形に近づくようなメカニズムを取り入れることであろう。そのために、単に Voronoi 多角形の頂点の重心を $\mathbf{x}_i(t+1)$ と置くのではなく、多角形の頂点の代わりに、隣接する 2 頂点と注目する頂点とで構成される球面三角形に関して、それと面積が同一の二等辺三角形を考えて、その仮想的な頂点に関する重心をとればよいと考えられる。

そこで、いま、ある時刻 t における単位球面上のある点 $\mathbf{x}_i(t)$ に対する Voronoi 多角形の頂点を先ほどと同様、巡回的に A_1, A_2, \dots, A_k で表し、これらに対応する (球中心を始点とする) 単位ベクトルをそれぞれ $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_k$ で表す。ここで k はこの多角形の辺数である。さらに、 \mathbf{b}_j' は頂点 \mathbf{b}_j を $\triangle \mathbf{b}_{j-1} \mathbf{b}_j \mathbf{b}_{j+1}$ と面積の等しい二等辺三角形 $\triangle \mathbf{b}_{j-1} \mathbf{b}_j' \mathbf{b}_{j+1}$ に仮想的に置き換えた頂点と定める (図 2 参照)。そのとき、次の時刻 $t+1$ の注目する点の位置 $\mathbf{x}_i(t+1)$ を

$$(3.2) \quad \mathbf{x}_i(t+1) = \frac{\sum_{j=1}^k \mathbf{b}_j'}{\left| \sum_{j=1}^k \mathbf{b}_j' \right|}$$

と置き、すべての点に対して得られた新しい配置に関する Voronoi 分割を時刻 $t+1$ における分割とする方法である。ここで上式の分母は新しい点 $\mathbf{x}_i(t+1)$ が再び単位ベクトルとなることを保証している。

頂点 \mathbf{b}_j を三角形の底辺 $\mathbf{b}_{j-1} \mathbf{b}_{j+1}$ を固定して面積不変となるように動かすとき、この頂点の描く軌跡は Lexell の円となる (Fejes Tóth (1972), Peter Frankl・前原 (1991))。この Lexell の円は \mathcal{S} 上の 3 点 $(-\mathbf{b}_{j-1}, \mathbf{b}_j, -\mathbf{b}_{j+1})$ で定められる。Lexell の円は、平面における平行線に相当し、一般に大円ではないことに注意しておく。

われわれは、(3.2) 式による計算法を「球面調節法」と呼ぶ。この方法によって、位置の調節が進行するにつれて各点が各々の Voronoi セルの重心に移動するとともに、Voronoi 分割が次第に等辺の多角形を実現するような最適化が進行することが期待できる。

球面調節法が、前節の重心位置調節法に比べてどの程度最適性が改良されるかの一例を、表 2 に与える。表 2 には、図 1 (a), (b), (c) について Voronoi セルの辺数の分布および面積分布の平均と標準偏差が与えてある。図 1 (c) を図 1 (b) と比べると違いは歴然としていて、球面

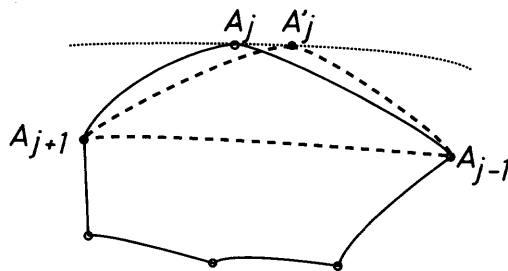


図 2. 球面調節法の計算法の模式図。頂点 A_j (単位ベクトル \mathbf{b}_j を併記する) の代わりに $A_j'(\mathbf{b}_j')$ を仮想的に設定する。仮想的な頂点 $A_j'(\mathbf{b}_j')$ は三角形 $\triangle A_{j-1} A_j A_{j+1}$ と等面積の二等辺三角形 $\triangle A_{j-1} A_j' A_{j+1}$ の頂点として定める。破線は頂点 $A_j'(\mathbf{b}_j')$ を底辺 $A_{j-1} A_{j+1}(\mathbf{b}_{j-1} \mathbf{b}_{j+1})$ を固定して三角形の面積が不変となるように球面上で動かすときの軌跡で、Lexell の円である (本文参照)。

表2. $N=500$ に対する球面上の位置調節法の実験結果 (Voronoi 分割の辺数分布と面積分布のまとめ)。

k	Poisson	重心位置調節法	球面調節法
3	6	0	0
4	59	16	0
5	134	125	43
6	144	231	426
7	86	113	31
8	49	13	0
9	17	2	0
10	3	0	0
11	1	0	0
12	1	0	0
平均辺数	5.976	5.976	5.976
標準偏差	1.39120	0.86222	0.38396
平均面積	0.0251327	0.0251327	0.0251327
標準偏差	0.0132818	0.0056377	0.0014005

多角形の面積および辺数のバラツキが図1(c)の方が(b)に比べて小さいことは表2にも数値として表れている。ここで、表2の平均辺数の値が、すべての場合に5.976である理由は、Eulerの多面体定理から導かれる付録A.3(A.7)式において $N=F=500$ と置けば得られる。また、平均面積がすべての場合に、一定値 $4\pi/N=0.0251327\cdots$ となるのは自明であろう。いずれにしても、球面調節法の結果は、重心位置調節法の結果に比較して分布のバラツキが格段に小さくなることは明白である。

3.3 球面調節法の一つの応用

D'Arcy Thompson (1963) には深海に生息する放散虫 (*Aulonia hexagona*) の骨格構造の E. Haeckel による見事なスケッチが掲載されている。放散虫の骨格は多角形による球面分割のネットワーク構造を示しており、各多角形の面積がほぼ等しく、学名が示すとおり大多数が六角形となる特徴を持っている。この構造の形成過程を発生生物学的に論じるのは非常に困難で

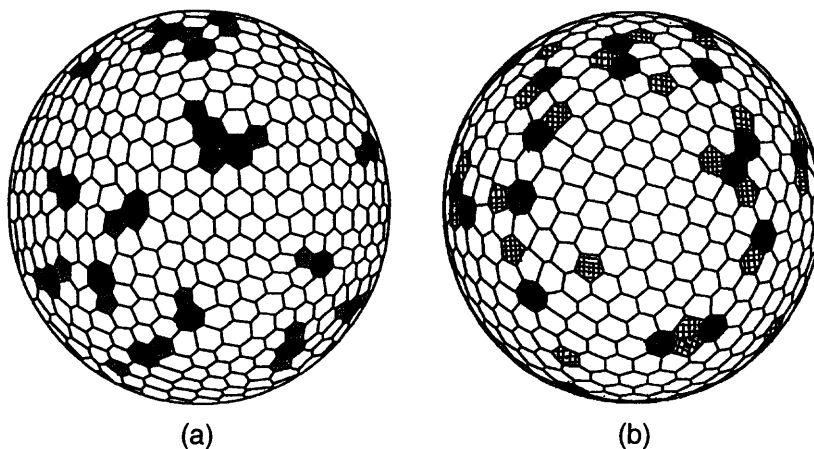


図3. (a) 放散虫 *Aulonia hexagona* の骨格の E. Haeckel による模写から得られた多角形分割 (Tarnai (1989)). (b) 球面調節法モデルによる放散虫データに対応するシミュレーション結果の Voronoi 分割。印のない多角形はすべて六角形、薄い網掛けは五角形、濃い網掛けは七角形を表す。

あるが、その代わりに球面ネットワークが構造的安定性や骨格物質の経済的効率性などある種の最適性を満たすように形成されているとする議論は可能であろう。

そこで球面上の点系が、ある初期配置から出発して徐々に位置を調節することによって放散虫の骨格構造のような配置が実現されたとするパターン形成のモデルが考えられる。われわれは、二つの放散虫データに対して球面調節法のシミュレーション結果がそれぞれ極めてよく一致することを多角形の辺数分布に関する χ^2 -適合度検定によって示した(種村(1992), Tanemura(1998))。その一例を図3に与える。図3(a)は放散虫の Haeckel によるスケッチの模式図(Tarnai(1989)から採用)で、図3(b)は図3(a)から推定された N の値($N=620$)に対して、初期配置を Poisson ランダム配置とする球面調節法によって得られた配置とその Voronoi 分割を表す。

この図から、観測されたパターン(図3(a))とシミュレーション結果(図3(b))の多角形の空間分布の様子も互いに似通っていることがわかる。すなわち、5角形と7角形はたいてい隣接して分布しているところは、両者に共通している。

3.4 小さい N に対する球面調節法

上で提案した(3.2)式に基づく球面調節法は、任意の N に対してミニマクス最適配置や最小エネルギー最適配置とは原理的に異なった、球面上の最適点配置を求めるために利用できることがわかるが、最初に比較的小さい N に対してどのような結果が得られるかは興味あるところである。われわれは、 $N=12, 14, 15, 16, 20, 32$ および 40 に対して、Poisson 初期配置から得られる大局的最適配置を調べた。 $N=12$ に対しては厳密な球面正12面体が Poisson 配置から得られた。図4(a)にその最終配置の例を示す。図では点配置(黒丸)のほかに Voronoi 多角形分割が示されており、各面には最小球面距離 $a_{12}=1.107149$ を直径とし、各点を中心とする球帽が描かれている。図から分かるとおり、球帽は互いに隣接する面の球帽と接している。 $N=20$ の場合、球面調節法としての大局的最適配置は5角形が12個でそのうち8個および4個がそれぞれ互いに等面積であり、6角形は8個でそのうちそれぞれ4個ずつが等面積である。また、5角形は12個が一つの閉じたサイクルを成して連結しており、各点を中心とする球面直径 0.804661 の球帽は連結する2つの5角形において互いに接している。さらに $N=32$ の場合は、図4(c)に示すとおり、サッカーボール型をしており、5角形が12個、6角形が20個である。そして、5角形はすべて合同な正5角形であり、6角形は互いに合同でそれぞれ2種の辺長をもつ。また、球面直径 0.65236 の各点を中心とする球帽は、当然すべての5角形に内接する。この構造は、頂点が炭素原子に対応すると仮定すれば、60個の炭素原子から成る球状炭素分子 C_{60} (たとえば Kroto et al. (1985) 参照) と位相幾何学的に同一の構造をしている。10数年前に発見され、化学の分野で話題になった C_{60} 分子と同じ構造が、われわれの球面調節法から Poisson 配置を初期配置として形成されることは興味深い。

少数個の点の場合、初期配置が Poisson ランダムであるとき、どのような最終配置が得られるかを独立な実験を繰り返すことによって系統的に調べてみよう。表3に球面調節法で得られた $12 \leq N \leq 40$ の範囲のいくつかの N に対する計算機実験の結果を与える。これらの実験ではすべての点の一つの半球の上に集中しないという条件の下で Poisson 配置を作成した。 $N=12, 14, 15$ の場合、それぞれ200回の独立な実験の結果、最終配置はそれぞれ一通りであった。しかし、 $N=16, 20, 32, 40$ においては、それぞれ複数の最終配置があることが表3から分かる。 $N=16$ の場合、500回の独立な実験でほぼ同程度の百分率で2通りの配置が得られた。 $N=40$ の場合は、多数の局所最適配置が出現して、百分率の大きなものでもせいぜい5%程度であった。この傾向は N が大きくなるほど強くなり、真の大局的最適配置を求めることは非常に困難であると予想される。実際、 $N=50$ の場合、200回の試行で複数の同一の最終配置が得られたのは1

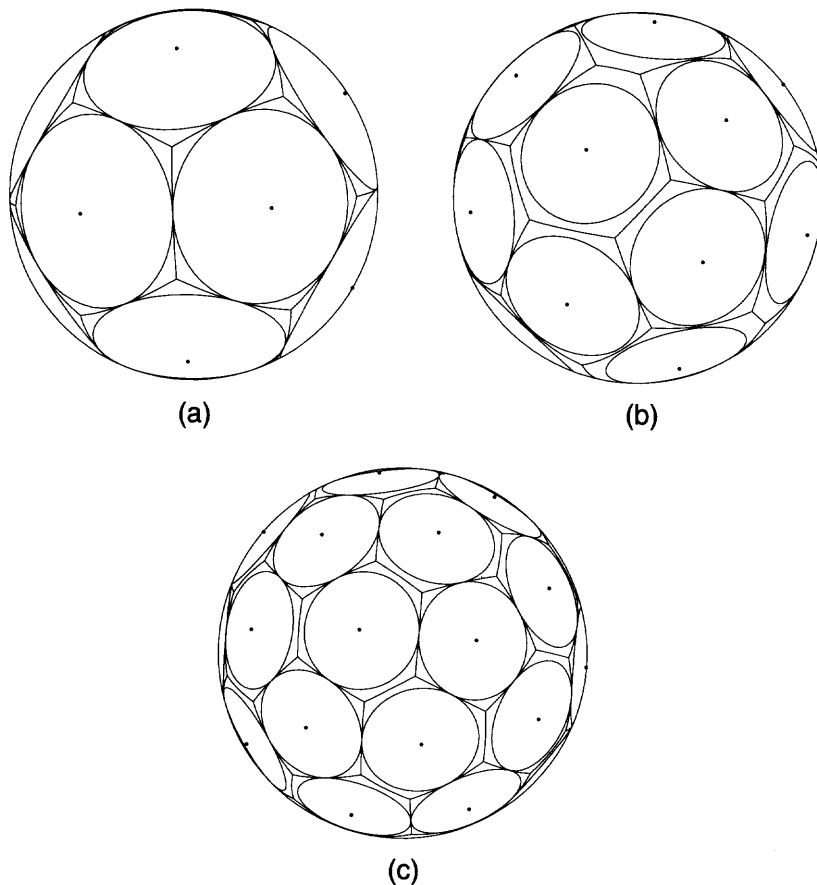


図4. 少数個の点に対する球面調節法の計算の一例。(a) $N=12$, (b) $N=20$, (c) $N=32$. それぞれの配置に対して Voronoi 分割が示されており, 最小球面距離を直径とする球帽が, 各点を中心として描かれている。

回のみであった。

3.4.1 配置の規則性の評価規準

表3にはいくつかの数値が示されている。これらはいずれも最終的に得られた配置が, どの程度の規則性をもつかの規準を表している。

まず, D の欄は点間の最小球面距離を直径とする球帽の充填密度 (2.4) である。これは前述の通り, ミニマクス最適の意味でどの程度の最適性であるかの規準にもなっている。 $N=12$ の場合, $D=0.896095$ は表1の D の数値と一致する。表3では複数の最終配置が存在する N に対しては D の大きい順序に並べてある。

表3の $\Lambda_N(\lambda_N)$ の欄は, Voronoi 分割の辺長の総和を表す。単位球面を $N(\geq 3)$ 個の等面積の凸部分に分割するネットワークの総辺長を Λ_N とおくと,

$$(3.3) \quad \Lambda_N \geq 6(N-2) \cos^{-1} \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \cdot \frac{N}{N-2} \cdot \frac{\pi}{6} \right) = \lambda_N$$

が成り立つ (Fejes Tóth (1972) 参照)。(3.3) において等号は $N=4, 6, 8, 12$ に対して成り立

表 3. Poisson 初期配置に対する球面調節法の少数個の点の実験結果.

N	D	$\Lambda_N(\lambda_N)$	$\Delta_N(\delta_N)$	ベクトル和	百分率	実験回数	種数
12		(21.89183)	(33.21446)			200	1
	0.896095	21.89183	33.21446	0.00000	100.0		
14		(23.79709)	(36.87032)			200	1
	0.741102	23.92152	37.07201	0.00000	100.0		
15		(24.69469)	(38.57507)			200	1
	0.670246	24.84082	38.81756	0.00000	100.0		
16		(25.56080)	(40.21073)			500	2
	0.708257	25.66523	40.38940	0.00000	47.8		
	0.681006	25.89259	40.71057	0.00000	52.2		
20		(28.76573)	(46.19652)			1000	≥ 8
	0.798491	29.01247	46.56526	0.00000	19.3		
	0.794936	28.99769	46.53989	0.00000	1.1		
	0.778213	29.18926	46.81140	0.00000	0.8		
	0.750921	29.06783	46.64605	0.07073	6.6		
	0.730723	29.09735	46.69245	0.04688	53.5		
	0.606697	29.24228	46.90553	0.26654	8.4		
	0.578063	29.13480	46.80911	0.03319	4.2		
	0.576552	29.11096	46.74148	0.13861	6.1		
		(36.73996)	(60.77472)				
32		(36.73996)	(60.77472)			1000	≥ 51
	0.843622	36.90052	61.03332	0.00000	46.3		
	0.738948	36.99904	61.17593	0.00000	14.1		
	0.714592	37.01772	61.20357	0.00000	1.4		
	0.712982	37.07384	61.27999	0.01374	5.9		
	0.689489	37.07555	61.29074	0.11121	3.3		
	0.668941	37.06563	61.28699	0.23465	2.2		
	0.661812	37.04776	61.25628	0.17879	3.6		
	0.636365	37.09526	61.31904	0.36003	3.0		
	others	—	—	—	20.2		
40		(41.20763)	(68.81695)			500	> 200
	0.769488	41.39512	69.11814	0.00000	5.2		
	0.740607	41.53944	69.33181	0.00000	0.8		
	0.736436	41.43723	69.18167	0.15124	2.2		
	0.722342	41.49678	69.27089	0.07548	1.4		
	0.717056	41.52782	69.31678	0.14139	1.2		
	0.708450	41.48420	69.24882	0.14208	5.4		
	0.702290	41.55730	69.35737	0.10265	1.4		
	0.693834	41.55828	69.35399	0.26439	1.4		
	others	—	—	—	81.0		

つことが知られている。われわれは (3.3) 式を、必ずしも等面積の凸部分への分割でない Voronoi セル分割の場合に拡張して適用してみようと思う。すなわち、 Λ_N は球面 Voronoi 分割の総辺長を表すものとし、それを任意の N について (3.3) の右辺の λ_N の値と比べてどの程度近いかを調べることによって点配置の規則性の規準とするのである。

表 3 ではそれぞれの N に対して λ_N の値が () 内に示されていて、球面調節法によって得られた配置に対する Λ_N の値が得られた配置ごとに示されている。 $N=12$ の場合、(3.3) の等号が成り立つことから、得られた配置が球面正 12 面体であることが裏付けられる。その他の N では λ_N に一致するものは存在しないが、それでも Λ_N の観測値の多くは () 内の理論値に非常に近いことは驚きである。また、われわれの行ったすべての N に対する配置における計算の経験から、等面積でない球面 Voronoi 分割に対して不等式 (3.3) の反例は現れなかったため、(3.3)

がかなり一般的に成立すると考えられる。

また、球面 Voronoi 分割の双対グラフである球面 Delaunay 分割の総辺長 Δ_N に対して

$$(3.4) \quad \Delta_N \geq 3(N-2) \cos^{-1} \left(\frac{\cos \alpha_N}{1 - \cos \alpha_N} \right) \equiv \delta_N; \quad \alpha_N = \frac{N}{N-2} \cdot \frac{\pi}{3}$$

も成立することが予想される。ここで、等号は (3.3) と同様に $N=4, 6, 8, 12$ に対して成り立つ。(3.4) はもちろん不等式 (3.3) とは独立な関係式ではないが、同一の点配置に関して Δ_N は Λ_N とは互いに異なった側面の特徴を表していて、 Δ_N が δ_N からどの程度違うかが配置の規則性の尺度になり得る。

表3ではそれぞれの N に対して λ_N と同様に δ_N の値が () 内に与えられている。そして球面調節法の最適配置のおおのに対して Δ_N の観測値が与えられている。 $N=12$ に対しては $\Delta_N = \delta_N$ が成立することが200回のすべての実験で確認される。われわれは $10 \leq N \leq 5000$ のいくつかの N に対して (3.4) を計算したが予想 (3.4) をくつがえすような例は現れなかった。

もう一つの点配置の尺度として、点位置ベクトルの総和の絶対値

$$(3.5) \quad \left| \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i \right|$$

を考える。表3の「ベクトル和」はこれを表す。Erber and Hockney (1991) は (3.5) を「双極子モーメント」と呼んでいる。(3.5) は配置の規則性の度合いを表すものではないが、配置が規則的であることが前提である場合、(3.5) が小さい方が配置の対称性が高いことを表すことは確かである。われわれはこの意味で「ベクトル和」の絶対値を用いる。

表3では、 $N=12, 14, 15, 16$ の場合、すべての配置について (3.5) が数値計算誤差の範囲内でゼロであり、 $N=20, 32, 40$ の場合は (3.5) がゼロの配置は他の配置に較べて、他の規準 D , Λ_N , および Δ_N のすべてに関しても配置の規則性が高いことが分かる。

3.5 ステップ幅

われわれの球面調節法は、ランダムな初期配置から準規則配置 (局所的最適配置) に向かうとき、1ステップあたりの移動量が特にランダム配置に近いほど大きい。それを図5に例示する。

図5 (a), (b) にはそれぞれ $N=12$ および $N=1000$ の場合の球面調節法による1ステップあ

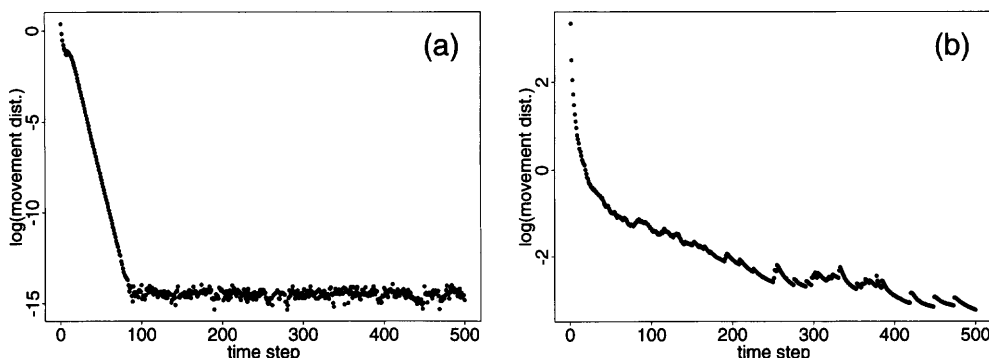


図5. 球面調節法におけるステップ幅の時間変化の例。(a) $N=12$, (b) $N=1000$. 横軸はステップ数, 縦軸はステップ幅 (1ステップあたりの移動量) の対数を表す。

たりの移動量（1ステップあたりの移動球面距離のすべての点に関する総和。これを「ステップ幅」とよぶ）の対数の時間変化が示されている。いずれの場合も、初期配置はPoisson配置である。ステップ幅は初期の時刻から急激に減少していく様子がいずれの場合にも見られる。 $N=12$ の場合、ステップ幅は最初の減少から途中でほぼ指数関数的に（図では直線的に）一気に減少し、時刻 $t=100$ あたりから定常に達したように見える。これはこの例では $t=100$ 以降は最適配置（しかも大局的最適解）に到達したことを意味し、見かけ上定常に見えるのは計算の数値誤差の限界に達したからである。 $N=12$ の場合は、表3で示されたようにすべての実験で大局的最適解に達している。実験ごとに異なるのはステップ幅の指数関数的減少の開始時刻だけであるが、すべての実験において $t=500$ までに収束している。

$N=1000$ の場合は、Poisson配置を出発点としてステップ幅は緩やかに減少するが、それでも時刻 t に対して超1次の変化である。 $N=1000$ のすべての実験では $t=1000$ まで行ったが、図では $t=500$ までの経過が示してある。この場合、 $N=12$ の場合とは異なってステップ幅は計算精度の限界までに減少しないまま定常に達する。この傾向は、 $N>50$ のほとんどの実験において見られ、得られた最終配置は大局的最適解でなく、局所的最適解であることを示唆している。

球面調節法において、初期のステップ幅が大きいこと、そしてステップ幅が超1次の変化を示すことが分かったが、これは最適のアルゴリズムとして好ましい性質とされている。その意味で、球面調節法は球面上の最適点配置を求める方法として、望ましい性質を備えていると言える。

3.6 大きい N に対する良好な局所的最適配置

球面調節法によって、小さい N に対しては時には大局的最適解が得られること、また大きい N に対しては多くの場合、局所的最適解が得られることが示されたが、局所的最適解が得られる場合は複数の最適解が存在することが予想される。特に N が大きい場合ほど、局所最適解は多数になり、その個数は N に関して指数関数的に増大することが十分予想できる。そのため、できるだけ良好な（すなわち、できるだけ大局的最適解に近い）配置を求めるための工夫が大きい N に対して必要になる。

われわれは以下の実験では $N=200, 500, 1000, 1500, 2000$ および5000と設定した。それぞれの場合に統計的な性質を調べるために独立な実験を繰り返したが、標本数 n はそれぞれの N に対応して $n=25, 10, 10, 10, 5, 5$ である。

3.6.1 Poisson 初期配置に対する球面調節法

小さい N ($12 \leq N \leq 50$) に対しては、われわれはもっぱらPoisson初期配置を用いて実験を行ってきた。そこで、大きい N に対してもPoisson初期配置を用いたとき、どのような配置が得られるかをまず調べてみる必要があるであろう。

Poisson初期配置に対しては、 N が大きくなると安定な配置に到達するには反復回数 T がある程度大きいことが必要であるが、 N が大きくなるにつれて計算時間がかかることから $200 \leq N \leq 1500$ の場合は $T=1000$ 、 $N=2000$ のとき $T=900$ 、そして $N=5000$ に対して $T=500$ として実験した。これらの設定で、ステップ幅の時間変化をモニターした結果、いずれの場合も事実上安定配置に達していることが確認された。

図6には $N=2000$ の場合の一例が与えられている。図6(a)はPoisson初期配置から球面調節法の $T=900$ 回の反復で得られた点配置（黒丸）とそのVoronoi分割である。この例においてはVoronoi分割は5角形、6角形および7角形のみから成り、それぞれ $F_5=170$ 、 $F_6=1672$ 、 $F_7=158$ であった。ここで記号 F_5 、 F_6 、 F_7 はそれぞれ5、6、7角形の面数を表す（付録A.3参照）。したがって、6角形が8割以上を占めていることが分かる。 $N=2000$ に対する独立な他の実験でもほぼ同様の結果である。図6(b)は同じ点配置に対する球面Delaunay分割を表す。こ

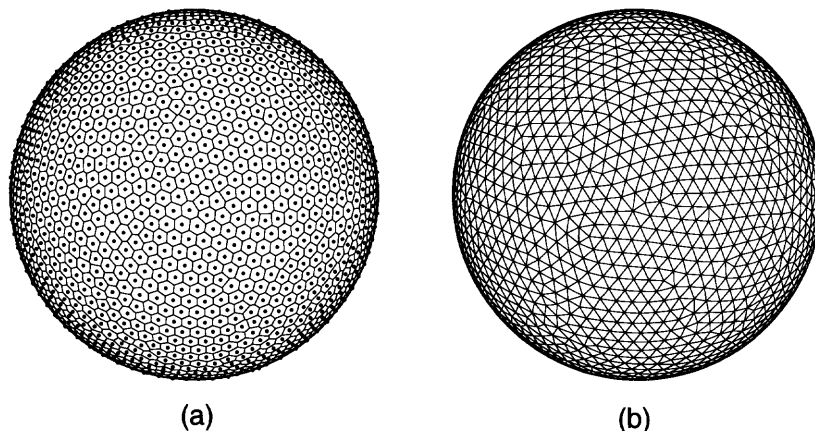


図6. Poisson 初期配置に対する $N=2000$ の球面調節法の計算例. (a) 点配置とその球面 Voronoi 分割. (b) (a) の配置に対する球面 Delaunay 分割.

の図において頂点は配置された点に対応するので、点の配列の整列具合がひと目で分かる。

3.6.2 相互作用モデルに対する MCMC 法

Poisson 初期配置とは別の初期配置を球面調節法に適用すればどのような最終配置が得られるかが次の興味である。そこで、別の配置生成法として、点間に反発型の相互作用を考え、モンテカルロ法で平衡配置を実現することが考えられる。この方法は、 N が小さい場合に前述の (2.5) 式に基づく最小相互作用エネルギー配置を求めることと密接に関連するが、大きい N に対しては (2.5) の意味で大局的最適解を求めることは、ミニマクス最適解およびわれわれの球面調節法の大局的最適解の問題と同様の困難を伴う。そのため、ここでは相互作用モデル $\phi(r)$ に基づいて Poisson 配置より良好な初期配置を生成することを目的とする。

相互作用モデル $\phi(r)$ の下で平衡な配置を実現するための方法の一つに Markov Chain Monte Carlo 法 (略して MCMC 法) がある。それは、相互作用 $\phi(r)$ に対する平衡分布

$$(3.6) \quad f(X_N; \phi) = \exp\left(-\beta \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \phi(|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|)\right) / Z$$

を Markov 連鎖で実現する計算法である。 $f(X_N; \phi)$ は Gibbs 分布とよばれ、 Z は規格化因子 (分配関数) である。MCMC 法の計算法についてはたとえば, Binder and Heermann (1992) に詳細がある。しかし、球面上での Gibbs 分布の理論と MCMC 法の計算法に関する文献は筆者の知る範囲では見当たらない。(3.6) において β は一つのパラメータで、統計物理学では絶対温度の逆数に比例するので、ここでは「逆温度」と呼ぶことにする。

われわれは、 $\phi(r)=1/r^2$ の型の相互作用を用いていくつかの N に対して $\beta=1$ とおいて有限温度の MCMC 法の計算機実験を行ってみた。いずれの実験においても初期配置として Poisson 初期配置による球面調節法の結果を用いた。相互作用をクーロンポテンシャル $\phi(r)=1/r$ とせず $\phi(r)=1/r^2$ としたのは、後者が前者に比較して相互作用範囲が短距離であって、クーロンポテンシャルの最小エネルギー配置と較べていくぶんミニマクス最適に近い配置が得られることが予想できるため、最適性の二つの規準の関連が見い出される可能性があるからである。また、逆温度 β = 有限値とした理由は、MCMC 法の計算の途中で配置の更新が行われるようにするためである。 $\beta \rightarrow \infty$ (すなわち極低温) とすると、所与の初期条件に対してエネルギーの最小の配置が得られることは確かであるが、それが大局的最適解に近いことは必ずしも保証

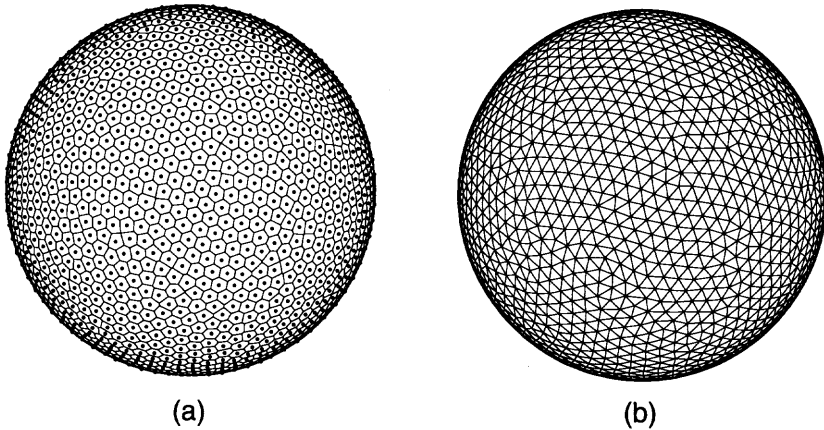


図7. 相互作用ポテンシャル $\phi(r)=1/r^2$ に対する有限温度 Markov Chain Monte Carlo 法による配置 ($N=2000$). (a) 点配置とその球面 Voronoi 分割. (b) (a)の配置に対する球面 Delaunay 分割.

されず、しかも初期条件に強く依存すると考えられる。それに対して β を有限値と設定すれば、任意の初期条件に対して大局的最適解に近づく経路が残されることになる。

図7には $N=2000$ の場合の、図6の配置を初期条件として有限温度 MCMC 法 ($\beta=1$) で求めた平衡配置の一例が示されている。図7(a)は MCMC 法の $T=2000$ ステップの反復によって得られた点配置 (黒丸) とその Voronoi 分割を示す。この例では Voronoi 分割はやはり 5, 6, 7 角形から成り、面数分布は $(F_5, F_6, F_7)=(133, 1746, 121)$ であった。この例では図6(a)に較べて 6 角形が増加し、5, 7 角形が減少したことがわかる。図7(b)は図6(b)と同様、球面 Delaunay 分割であるが、図6(b)と比較すると図7(b)の方が整列性が少し向上したことが見られる。

3.6.3 MCMC 法の平衡配置を初期配置とする球面調節法

続いて、有限温度 MCMC 法で得られた平衡配置を初期条件として球面調節法を適用すればどのような配置が得られるかを実験した。 $N=200$ に対しては球面調節法の反復回数は $T=400$, $500 \leq N \leq 2000$ に対して $T=300$, そして $N=5000$ に対して $T=150$ とした。

図8にはここで述べた方法で得られた局所的最適配置の $N=2000$ の場合の例が示されている。図8(a)は有限温度 MCMC 法で得られた図7(a)の点配置を初期配置として球面調節法で得られた点配置とその Voronoi 分割である。ここでは、面数の分布は図7(a)からさらに変化して $(F_5, F_6, F_7)=(91, 1830, 79)$ であり、6 角形が 9 割以上を占めている。しかも、それらの多くは正 6 角形に近い。図8(b)は同じ点配置の Delaunay 分割であり、点の整列性が図6(b), 図7(b)よりも高いことが見てとれる。

3.6.4 配置の規則性の比較

図6-図8を見比べれば $N=2000$ の場合の例として、MCMC 法の平衡配置を初期条件とする球面調節法によって得られた点配置が、Poisson 初期配置による球面調節法の結果や、有限温度 ($\beta=1$) MCMC 法の結果に比べて、配置の規則性が高いことが判明する。この結果がすべての N について、またすべての標本について成り立つのかどうかは、配置の規則性の規準を設定して、その統計分布を調べる必要がある。

われわれは表3においてすでに、球帽の充填密度 D でミニマクス最適の意味での配置の規則性を、そして球面 Voronoi 分割のネットワークの総辺長 L_N および球面 Delaunay 分割の総辺長 L_N でも配置の規則性を考察した。ここでもこれら 3 つの規準を用いて $200 \leq N \leq 5000$ に対

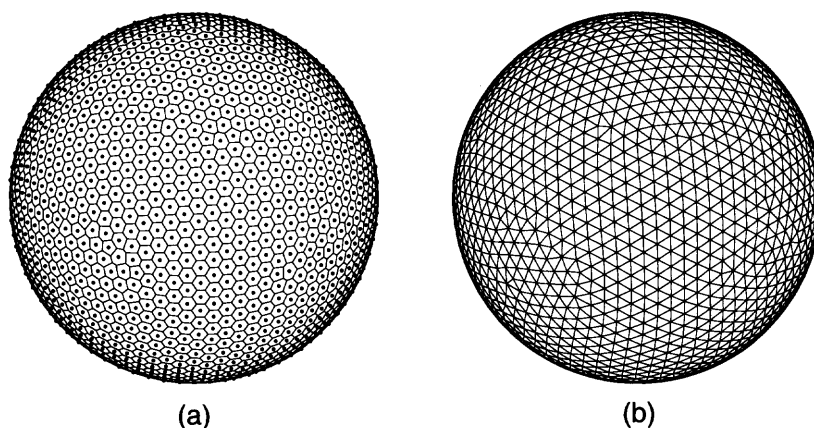


図8. 有限温度 MCMC 法の平衡配置を初期配置とする球面調節法の計算例 ($N=2000$). (a) 図7(a)の配置を初期配置として球面調節法を適用して得られた点配置とその球面 Voronoi 分割. (b) (a)の配置に対する球面 Delaunay 分割.

表4. 点間最小球面距離を直径とする球帽の充填密度 (D), N の欄の () 内はサンプル数. それぞれの N に対する2つの数字のうち, 上が平均値, 下が不偏標準偏差を表す.

N	球面調節法 I ¹	有限温度 MCMC ²	球面調節法 II ³
200	0.61111	0.47186	0.63857
(25)	± 0.04490	± 0.02980	± 0.02149
500	0.62131	0.55053	0.64597
(10)	± 0.01256	± 0.02113	± 0.02092
1000	0.58258	0.59330	0.65005
(10)	± 0.02285	± 0.02879	± 0.01689
1500	0.59550	0.61471	0.63511
(10)	± 0.00909	± 0.01439	± 0.02780
2000	0.58813	0.62839	0.63921
(5)	± 0.01794	± 0.01633	± 0.01289
5000	0.56497	0.65291	0.62855
(5)	± 0.01597	± 0.00556	± 0.01028

¹ 球面調節法 I : Poisson 初期配置に対する最終配置

² 有限温度 MCMC : 相互作用 $\phi(r)=1/r^2$, 逆温度 $\beta=1$ の MCMC 法の平衡配置

³ 球面調節法 II : 初期配置が有限温度 MCMC の平衡配置のときの最終配置

する上述の3種類の方法で得られた球面上の点配置を比較してみたい。

表4には点間の最小球面距離を直径とする球帽の充填密度 D の値をそれぞれの方法で $200 \leq N \leq 5000$ のそれぞれの N に対して計算した結果の平均と不偏標準偏差が与えられている。表4において「球面調節法 I」は Poisson 初期配置による球面調節法で得られた配置を示し, 「有限温度 MCMC」は相互作用 $\phi(r)=1/r^2$ で逆温度 $\beta=1$ の結果, そして「球面調節法 II」は「有限温度 MCMC」の配置を初期配置としたときの球面調節法の結果をそれぞれ表す。球帽の充填に関しては, すべての N に対して「球面調節法 I」の結果が「球面調節法 II」の結果に比して密度が低いことがまず分かる。そして, 「有限温度 MCMC」の結果は $N=200, 500$ に対しては他の方法の結果より充填密度が低い, $N=5000$ のとき, 他の方法に較べて充填密度は最大と

なっている。この表から、球面調節法は初期条件として Poisson 配置よりも有限温度 MCMC 法の平衡配置を用いる方がすべての N に対して充填密度の意味で、より良好な配置を生成できることがわかる。また、 $200 \leq N \leq 2000$ に対しては球面調節法は有限温度 MCMC 法の配置を改良できたが、 $N=5000$ に対しては充填密度はむしろ低下した。このことは、球帽の充填密度に関して球面調節法が有限温度 MCMC 法の平衡配置を改良できるのは N に依存することを示唆している。

次に、表 5 では球面 Voronoi 分割の総辺長 Λ_N について平均と不偏標準偏差が示されている。表 5 において λ_N の欄にそれぞれの N に対する (3.3) の右辺の値を示した。すべての実験において Λ_N が λ_N より下回ることはないこと、すなわち不等式 (3.3) が経験的に成立することが確認できた。 Λ_N に関しては、「球面調節法 II」の結果はつねに「球面調節法 I」の結果より小さくなることが表 5 から分かる。また、「球面調節法 I」と「有限温度 MCMC」との結果の N 依存性は表 4 における結果と類似で、 $200 \leq N \leq 1000$ の間は「球面調節法 I」の結果の方が「有限温度 MCMC」に対して小さいが、 $1500 \leq N \leq 5000$ では逆の関係になる。「球面調節法 II」は、今度は明確にすべての N に対して「有限温度 MCMC」の平衡配置を改良できた。

最後に表 6 には球面 Delaunay 分割の総辺長 Δ_N の平均と不偏標準偏差がまとめてある。表

表 5. 球面 Voronoi 分割の総辺長 (Λ_N)。各欄の数値および標題の意味については表 4 参照。 λ_N はそれぞれの N に対する (3.3) 式の右辺の値を表す。

N	λ_N	球面調節法 I	有限温度 MCMC	球面調節法 II
200	93.0755	93.8958	95.4502	93.8204
(25)		± 0.0946	± 0.1496	± 0.0900
500	147.3852	148.4518	149.2456	147.9409
(10)		± 0.1012	± 0.0817	± 0.0620
1000	208.5377	210.1621	210.2491	209.2376
(10)		± 0.0875	± 0.0696	± 0.0503
1500	255.4478	257.2812	257.2508	256.2859
(10)		± 0.0890	± 0.1076	± 0.0570
2000	294.9901	297.0734	296.9889	296.0184
(5)		± 0.1366	± 0.3272	± 0.1805
5000	466.4898	469.8462	468.6336	467.7853
(5)		± 0.0512	± 0.1767	± 0.1104

表 6. 球面 Delaunay 分割の総辺長 (Δ_N)。各欄の数値および標題の意味については表 4 参照。 δ_N はそれぞれの N に対する (3.4) 式の右辺の値を表す。

N	δ_N	球面調節法 I	有限温度 MCMC	球面調節法 II
200	160.0708	161.3586	163.6690	161.2397
(25)		± 0.1438	± 0.2159	± 0.1349
500	254.5575	256.2509	257.3494	255.4454
(10)		± 0.1567	± 0.2465	± 0.0962
1000	360.6881	363.2700	363.3784	361.8079
(10)		± 0.1364	± 0.1090	± 0.0775
1500	442.0323	444.9497	444.8675	443.3776
(10)		± 0.1457	± 0.1585	± 0.0915
2000	510.5774	513.9023	513.7142	512.2249
(5)		± 0.2152	± 0.4983	± 0.2794
5000	807.7560	813.1519	811.2368	809.8495
(5)		± 0.0789	± 0.2547	± 0.1767

6において δ_N の欄に(3.4)の右辺の値が与えてある。ここでも、すでに述べたとおり不等式(3.4)が確認できた。3種類の方法に関する Δ_N の観測値の結果は定性的に表5の結果と同じであり、「球面調節法II」が球面Delaunay分割の総辺長の意味で最良の配置を生成することが分かる。

以上の結果から、「球面調節法II」で得られた配置は3つの配置の規則性規準に関して、ほぼ全般的に他の方法よりも良好な局所的最適解を与えることが分かった。球帽の充填密度 D に関しては $N=5000$ の場合、「有限温度MCMC」の方が高い密度の配置が得られたが、実際に配置を描いてみるとVoronoi分割、Delaunay分割の図を比較して有限温度MCMC法の平衡配置より「球面調節法II」の配置の方が点の整列性が向上していること、またVoronoiセルの6角形の辺長分布の変動係数(不偏標準偏差と平均との比)が小さくなること、したがって正6角形により近いことが確認された。

結局、われわれの球面調節法は初期配置としてある程度規則的な点配置を選べば、任意の N に対して最終的に良好な局所最適配置を得ることができるといえるだろう。また、球面調節法がVoronoi分割の総辺長を必ずしも最適の目的関数としていないにも関わらず、得られた配置は実質的に球面Voronoi分割やDelaunay分割の総辺長が短いことが明らかになった。

4. おわりに

本論では、任意の個数の点に対する球面上の最適配置を求める方法について考察した。そして、球面調節法が比較的具合のよい配置を得る方法であり、しかも大きなステップ幅をもつアルゴリズムとして、最適計算として好ましい性質も備えていることを示した。

また、任意の個数に対して真に最適の配置とは何かは、最適の条件によっても異なることを明らかにし、球面調節法は球面上のVoronoiネットワークの長さをできるだけ短くするアルゴリズムであることも明らかになった。その際、できるだけ具合のよい配置を求めるためには初期配置が比較的具合のよい配置であれば、球面調節法によってより球面ネットワーク長の短い配置が得られる。そして、この方法を用いることにより、点配置の整列性が向上することが判明した。

前節では、相互作用モデルによって、有限温度のMarkov Chain Monte Carlo法で得られた配置を初期配置とすれば、最適性が向上することを示したが、ここで、その温度をもっと下げて得られた配置を初期配置とすることを考えてみよう。

今までは、MCMC法の温度として $\beta=1$ において計算機実験を行ってきたことはすでに述べたとおりである。ここで、エネルギー単位は相互作用ポテンシャル $\phi(r)=1/r^2$ が球面距離 $r=1$ に対して $\phi(1)=1$ となるようにとってある。そこで、もっと極端に低温の条件 $\beta=10^{20}$ を設定して $N=200$ の場合に、実験を5回行った。ここで、MCMCシミュレーションの初期配置として、表6に挙げた $N=200$ のPoisson初期配置から得られた球面調節法の結果を用いた。この実験の結果、MCMCシミュレーションの最終配置は、有限温度MCMC法の結果(表4, 5, 6参照)に較べて配置の規則性が向上した。また、この極低温MCMC法で得られた配置を初期条件として球面調節法を適用した結果、有限温度MCMC法の配置を初期配置とした場合に比較して、配置の規則性が向上した。しかし、同様の実験を $N=500$ の場合に実行してみたところ、極低温MCMC法で得られた配置は、 $N=200$ の場合と同様に配置の規則性が上がったが、それらの配置を初期配置として球面調節法を適用した結果は、むしろ有限温度MCMC法の配置を初期配置とするよりも配置の規則性は低下した。

上の経験から、われわれの球面調節法は初期配置として、Poissonランダム配置を採用するよりも、反発型相互作用ポテンシャルによるMCMC法で得られる配置を採用する方が、最終配置

は最適性の良い配置が得られるが、有限温度 MCMC 法と極低温 MCMC 法のいずれが良いかは N に依存すると言える。

本論で取り上げた最適配置の計算法とはまったく異なる方法として、Baumgardner and Frederickson (1985) は、正 20 面体に対応する球面正三角形分割をよりどころにして各面を細分割することによって球面三角網を得る方法を提案している。しかし、この方法は任意の N に対して三角網が得られるわけではないこと、また、元の正 20 面体の構造が残るという問題点がある。さらに、分割が細かくなればなるほど点配置の均一性が失われて、正 20 面体の頂点近傍では密度が高く、面の中央付近では密度が低くなる傾向がある。

最後に、 $N \rightarrow \infty$ のとき、最適点配置がどのようなになるかの予想について述べておこう。今まで、見てきたように N が大きくなるにつれて球面上の Voronoi 多角形分割において六角形の割合が増えてきた。したがって、 $N \rightarrow \infty$ のとき、一般的には、六角形が圧倒的に多数となることが予想される。しかし、それは平面の六角形分割とは様子が異なるはずである。すなわち、まず球面における幾何学的制約からすべての多角形が六角形になることは不可能であって、少なくとも 12 個の五角形が含まなければならない。これは付録 A.3 で示すように Euler の多面体定理から出る結論である。すなわち、(A.11) 式によって、すべての面を六角形にすることは不可能で(すべての $F_k (k \neq 6)$ をゼロにすることは出来なくて)、少なくとも $F_5 = 12$ が必要だからである。そこで、これらの 12 個の五角形が球面上で均等に例えば正 20 面体の頂点の位置に分布するとすれば、球面の多角形分割は平面の六角形分割とは様子が異なる。模式的には Baumgardner and Frederickson (1985) の提示した配置に近いことになるだろう。

注

¹球面上の 2 点 P, Q の球面距離とは、 P, Q を通る大円(すなわち、 P, Q と原点 O を通る平面と球面 \mathcal{S} との交叉で定まる円)の P, Q で区切られる 2 つの円弧のうち、劣弧の長さのこと。

²球面上の円を球帽という。より厳密には、球面 \mathcal{S} 上の一点 P を中心として、 P からの球面距離が r 以下の点の集合を中心 P 、球面半径 r の球帽という。

謝 辞

本研究は統計数理研究所共同研究会 (3-共会-6)、統計数理研究所共同研究 (9-共研-6) の一部である。有益なコメントをいただいた査読者に感謝します。

付 録

A.1 球帽の面積

球帽を $K(\mathbf{z}, r)$ で表す。ここで、 \mathbf{z} は単位球面 \mathcal{S} における球帽 K の中心で、 r は K の球面距離半径である。簡単のために、 K の中心 \mathbf{z} が北極、すなわちデカルト座標で $(0, 0, 1)$ であると仮定する。

\mathcal{S} の面積要素 $d\sigma$ が $d\sigma = \sin \theta d\theta d\phi$ で与えられることに注意すると、 K の面積 $|K|$ は積分

$$(A.1) \quad |K| = \int_0^{2\pi} \int_0^r \sin \theta d\theta d\phi$$

で与えられる。この結果、 $|K|$ の公式

$$(A.2) \quad |K| = 2\pi(1 - \cos r)$$

が得られる。

A.2 単位球面 \mathcal{S} の上の一様ランダム点を求める

単位球面 \mathcal{S} 全体で一様サンプリングを考える前に、付録 A.1 で示したように中心が北極である球帽 K におけるサンプリングをまず考える。 K における θ , ϕ の一様分布の確率密度を $f(\theta, \phi)$ とする。そのとき、

$$\int_0^{2\pi} \int_0^r f(\theta, \phi) d\theta d\phi = 1$$

が成立する。ここで、 r は付録 A.1 と同様 K の球面距離半径である。この式を、付録 A.1 から得られる関係式

$$\frac{\int_0^{2\pi} \int_0^r \sin \theta d\theta d\phi}{2\pi(1 - \cos r)} = 1$$

と比較すると、

$$f(\theta, \phi) = \frac{\sin \theta}{2\pi(1 - \cos r)} \equiv g(\theta)h(\phi)$$

なる関係式を得る。ここで、密度関数 $g(\theta)$ および $h(\phi)$ は条件式 $\int_0^r g(\theta) d\theta = 1$ および $\int_0^{2\pi} h(\phi) d\phi = 1$ を満足するように定められ、 $g(\theta) = \sin \theta / (1 - \cos r)$ および $h(\phi) = 1 / (2\pi)$ で与えられる。

ここで、 $g(\theta)$, $h(\phi)$ のそれぞれの分布関数 $G(\theta)$, $H(\phi)$ を考えると、これらは

$$G(\theta) = \int_0^\theta g(t) dt = \int_0^\theta \sin t dt / (1 - \cos r) = (1 - \cos \theta) / (1 - \cos r),$$

$$H(\phi) = \int_0^\phi h(u) du = \phi / (2\pi)$$

で与えられる。

さて、 ξ と η をそれぞれ $0 \leq \xi \leq 1$ および $0 \leq \eta \leq 1$ の範囲で一様分布する乱数とする。われわれは ξ , η の値は適当な乱数発生アルゴリズム (または統計数理研究所が所有する物理乱数発生器のような乱数発生装置) によって得られると仮定する。すると、 $\xi = G(\theta)$ と置くことによって分布関数 G に従う θ の標本値が得られる。同様に、分布関数 H に従う ϕ の標本値が η から求められる。したがって、北極を中心とする球帽 K の上で一様ランダムに分布する点の標本値 (θ_0, ϕ_0) は

$$(A.3) \quad \theta_0 = \cos^{-1}\{1 - (1 - \cos r)\xi\}, \quad \phi_0 = 2\pi\eta$$

によって得られる。

単位球面 \mathcal{S} は半径 $r = \pi$ の球帽であることから、結局 \mathcal{S} 上で一様分布する θ_0 , ϕ_0 の値は $(0, 1)$ 上の一対の一様乱数 (ξ, η) から

$$(A.4) \quad \theta_0 = \cos^{-1}(1 - 2\xi), \quad \phi_0 = 2\pi\eta$$

によって与えられることがわかる。

A.3 Euler の多面体定理と球面 Voronoi 多角形の平均辺数

凸多面体 P の面の個数を F , 辺数を E , そして頂点数を V とする。このとき、 F , E , V の間に

$$(A.5) \quad F - E + V = 2$$

が一般的に成立する。これを Euler の多面体定理という (たとえば, Fejes Tóth (1972) 参照)。

さて, いま単位球面 \mathcal{S} の上に与えられた N 個の点の配置 $X = \{x_1, \dots, x_N\}$ に対する球面 Voronoi 分割を考える。そのとき, 一つの点 x_i に注目し, この点で \mathcal{S} に接する平面 H_i を描く。さらに, x_i の球面 Voronoi 多角形に隣接する多角形に対応する点に対して同様の平面を描き, それらが H_i を切りとってできる (平面) 多角形を考えると, これは x_i の球面 Voronoi 多角形を球の中心 O に関して面 H_i の上に投影したものである。この操作をすべての点について行くと, 結局一つの凸多面体を得られるが, それは点配置 X の球面 Voronoi 分割と同位相であることがわかる。

任意に与えられた配置 X に対して, 球面 Voronoi 分割の各頂点からは一般に 3 個の辺が出ている。もしも, 4 個以上の辺が出る頂点が存在すれば配置を微小変位させることによって 3 個の辺をもつ頂点に帰着させることが可能である (例えば, Tanemura et al. (1983) 参照)。したがってつねに

$$(A.6) \quad 3V = 2E$$

が球面 Voronoi 分割に対して, それゆえ, これと同位相の凸多面体に対して成立する。この関係式を上 Euler の多面体定理 (A.5) に代入して変形すると, 球面 Voronoi 多角形の平均辺数

$$(A.7) \quad \frac{2E}{F} = 6 - \frac{12}{F}$$

が得られる。ここで, 左辺が多角形の平均辺数を表す理由は, 凸多面体の辺を各面に割り当てるために 2 倍の辺数が必要だからである。

ところで, 凸多面体の各面をその辺数で分類し, 辺数 k の面の個数を F_k ($k \geq 3$) で表すと,

$$(A.8) \quad F = \sum_{k=3}^{\infty} F_k = F_3 + F_4 + F_5 + F_6 + F_7 + \dots$$

が成り立つ。また, 辺数に関して

$$(A.9) \quad 2E = \sum_{k=3}^{\infty} kF_k = 3F_3 + 4F_4 + 5F_5 + 6F_6 + 7F_7 + \dots$$

も成立する。したがって, (A.8), (A.9) を (A.7) を用いて変形すれば辺数 k の面の個数 F_k の間に次の関係式

$$(A.10) \quad \sum_{k=3}^{\infty} (6-k)F_k = 12$$

が得られる。これを変形すれば

$$(A.11) \quad 3F_3 + 2F_4 + F_5 = 12 + F_7 + 2F_8 + \dots$$

となり, 6 角形の面の個数は他の辺数をもつ面数に無関係であることが分かる。

参 考 文 献

- Baumgardner, J. R. and Frederickson, P. O. (1985). Icosahedral discretization of the two-sphere, *SIAM J. Numer. Anal.*, **22**, 1107-1115.
- Binder, K. and Heermann, D. W. (1992). *Monte Carlo Simulation in Statistical Physics: An Introduction*, Springer, Berlin.
- D'Arcy Thompson, W. (1963). *On Growth and Form*, 2nd ed., Reprinted, Cambridge University Press, Cambridge.
- Danzer, L. (1963). Endliche Punktmengen auf der 2-Sphäre mit möglichst großem Minimalabstand, Habilitationsschrift, Universität Göttingen (英訳: Danzer, L. (1986). Finite point-sets on S^2 with minimum distance as large as possible, *Discrete Math.* **60**, 3-66).
- Erber, T. and Hockney, G. M. (1991). Equilibrium configurations of N equal charges on a sphere, *J. Phys. A*, **24**, L1369-L1377.
- Fejes Tóth, L. (1972). *Lagerungen in der Ebene, auf der Kugel und im Raum*, Chapter 5, 6, Springer, Heidelberg (『配置の問題——平面, 球面および空間における』, 第5, 6章, みすず書房, 東京).
- Hasegawa, M. and Tanemura, M. (1976). On the pattern of space division by territories, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **28**, 509-519.
- Kroto, H. W., Heath, J. R., O'Brien, S. C., Curl, R. F. and Smalley, R. E. (1985). C_{60} : Buckminsterfullerene, *Nature*, **318**, 162-163.
- Peter Frankl, 前原 潤 (1991). 『幾何学の散歩道——離散・組合せ幾何入門——』, 第5章, 共立出版, 東京.
- Saff, E. B. and Kuijlaars, A. B. J. (1997). Distributing many points on a sphere, *Math. Intelligencer*, **19**, 5-11.
- Schütte, K. and van der Waerden, B. L. (1951). Auf welcher Kugel haben 5, 6, 7, 8 oder 9 Punkte mit Mindestabstand Eins Platz?, *Math. Ann.*, **123**, 96-124.
- Schütte, K. and van der Waerden, B. L. (1953). Das Problem der dreizehn Kugeln, *Math. Ann.*, **125**, 323-334.
- Tammes, R. M. L. (1930). On the origin of number and arrangement of the places of exit on the surface of pollen grains, *Recueil des Travaux Botaniques Néerlandais*, **27**, 1-84.
- 種村正美 (1992). 球面における配置の問題, 『球面上の形態形成と情報処理』(研究代表者: 小川 泰), 統計数理研究所共同研究リポート, No. 37, 54-74.
- Tanemura, M. (1998). Random packing and tessellation network on the sphere, *Forma*, **13** (to appear).
- Tanemura, M. and Hasegawa, M. (1980). Geometrical models of territory I. Models for synchronous and asynchronous settlement of territories, *Journal of Theoretical Biology*, **82**, 477-496.
- Tanemura, M., Ogawa, T. and Ogita, N. (1983). A new algorithm for three-dimensional Voronoi tessellation, *J. Comput. Phys.*, **51**, 191-207.
- Tarnai, T. (1989). Buckling patterns of shells and spherical honeycomb structures, *Comput. Math. Appl.*, **27**, 639-652.

Problems of Optimal Configuration of Points on the Sphere

Masaharu Tanemura

(The Institute of Statistical Mathematics)

In this paper, problems of evenly spaced configuration of points on the sphere are discussed. After introducing the mini-max optimal problem and the minimum energy problem on the sphere, a new method of obtaining an optimal configuration is proposed under an utterly different principle.

The new method is called a spherical adjustment method. It is first shown that the spherical adjustment method is useful for generating a global optimal configuration of a small number of points. Then, it is shown that the new method is also useful for generating local optimal configurations of points for a wide range of the number of points.

It is also shown that, by carefully selecting a good configuration as an initial condition, our new method is able to improve the equilibrium configurations of points, for instance, which are generated by Markov Chain Monte Carlo method under a repulsive interaction potential.