

最小 2 乗法によるポロノイ図あてはめ

東京大学 大学院情報理工学系研究科 数理情報学専攻
神田 毅 (Takeshi Kanda) 杉原 厚吉 (Kokichi Sugihara)

Department of Mathematical Informatics,
Graduate School of Information Science and Technology,
University of Tokyo

概要. 平面分割図形を近似するポロノイ図を求める問題 — すなわち「ポロノイ図あてはめ問題」 — が研究されており、成果が得られている。本原稿では、このうちの 1 つの PB 法に着目して改良し、この方法の性質を調べて他の方法にない利点を見い出す。そして、この改良 PB 法を自然界の平面分割図形に適用し、ここで得られた目的関数値が具体的にいくつ程度なら「ポロノイ図らしい」と結論できるのかという問題点にも、数値実験によって答える。

さらに、ポロノイ図あてはめ問題の拡張として「断面ポロノイ図あてはめ問題」を新しく提案する。まずこの問題を定義して、反復解法を試して、現時点での問題点について述べる。

1 はじめに — ポロノイ図あてはめ問題とは? —

ポロノイ図の応用の 1 つとして、自然のものにせよ人口的なものにせよ、現実に見られる平面分割図形をポロノイ図だとみなしてモデル化して解析することがある。ここで言う平面分割図形とは、例えば細胞の断面、ひび割れ、行政区画のような、平面上の領域をいくつかの小領域に区切ってできている図形のことである。そして、それらの平面分割図形のポロノイ図らしさを定量化することによって、なんらかの情報を得たい。そのために、与えられた平面分割図形を最も良く近似するポロノイ図を求めるが、この問題を「ポロノイ図あてはめ問題」と呼ぶことにする。この問題は、「近い」の意味をどう解釈するかによっていくつかの種類が考えられ、過去に数種類の解法と応用例が得られている。

1.1 2次元のポロノイ図の定義

2次元ポロノイ図 [7] とは、平面上に与えられた点集合 $\{P_1, P_2, \dots, P_N\}$ に対して、その中でどの点に最も近いかによって平面を分割して作った図形で、図 1 がその例である。なお、ポロノイ図を作る時に与えるこれらの点を母点と呼ぶ。

1.2 ポロノイ図あてはめ問題の定義

ポロノイ図あてはめ問題は以下のように定義される。後に実験例として示す図 4~7 は、ある方法でポロノイ図あてはめを行なった例である。一点鎖線が与えられた平面分割図形、

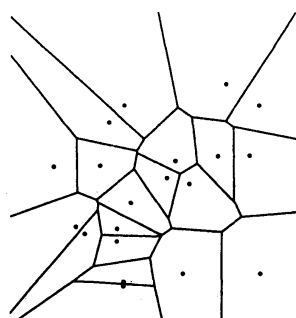


図 1: ポロノイ図の例

黒丸が配置された母点、実線がそれらの母点から生成されるポロノイ図である。この問題の「近い」の意味は曖昧だが、この点は解法が与えられると同時に明確になる。

ポロノイ図あてはめ問題

平面分割図形 \mathcal{R} が x - y 平面上に与えられていて、 N 個の多角形領域 $\{\mathcal{R}_n \mid n = 1, 2, \dots, N\}$ からなっているとす。この時、それに近いポロノイ図を作る母点の座標 $P_n(x_n, y_n)$ ($n = 1, 2, \dots, N$) を求めよ。

1.3 ポロノイ図あてはめの用途

例えば、この問題は、地理情報処理の分野で行政区画の解析に用いられている [8]。具体的に言うと、学校区や選挙区などのポロノイ図に近い方が好ましいと言われる形が、実際にどの程度ポロノイ図に近いかを数値で表し、区分けの公平さの指標として用いている。

また、ポロノイ図に近いと言われる形は自然界にたくさんあり、これらの形が実際にどの程度ポロノイ図に近いかが数値化されている。なお、分割図形の動きのシミュレーションのために近似としてポロノイ図が利用される [3] [5] [9] が、その近似の有効性を示すためにもポロノイ図らしさの定量化が行なわれる。ここで「近い」と判定されれば、母点の位置の情報を持つだけでこうした形を近似的に表現していることになり、細胞、なわばりなどが互いに等しい勢力を持って隣の領域を押し退けて広がろうとする中で、なるべく隣から遠ざかろうとする場合の境界の振舞いや、1つの細胞もしくはなわばりの主が突然死亡した場合の境界の振舞いなどを、容易にシミュレートできる。

1.4 ポロノイ図あてはめ法の種類

既存のポロノイ図あてはめ法には、与えられた平面分割図形と生成されるポロノイ図の食い違いの面積を、母点を動かす最急降下法によって極小化するもの [8]、ポロノイ辺は両側の2母点を結ぶ線分の垂直二等分線であるという性質を用いて、線形計画法によって与えられた図形がポロノイ図か否かを判定するもの [1] [2] があり、これらは [7] でも紹介されている。他にも、簡便なポロノイ図らしさの指標として Δ 値 [4] が知られている。

2 改良 PB 法 — 今回提案するポロノイ図あてはめ法 —

ここでは、[1] の方法の目的関数値を直接ポロノイ図らしさの尺度として利用できるよ
うに改良を加える。既存の PB 法では図形の位相構造を無視した形の目的関数が作れて、し
かも、その最小化は単に連立 1 次方程式の最小 2 乗解を得ることに対応するという理由で、
解を求めるのが容易であるという特徴を持っていた。具体的には、ポロノイ図を各反復ごと
に構成する必要も、その他の幾何的計算をする必要もなかった。その性質は、改良 PB 法で
もそのまま保たれる。そして、食い違い面積極小化の方針には見られない顕著な利点につい
て言及する。

2.1 手順

ポロノイ図あてはめ問題における「近い」の意味を「元の平面分割図形 (図 2 の点線) の
辺が、その両側の領域 \mathcal{R}_i と \mathcal{R}_j に対応する母点 P_i と P_j を結んだ線分 (同実線) の垂直 2 等
分線に近くなっている」こととする。まず、図 2 のように、領域 \mathcal{R}_i と \mathcal{R}_j に対応する母点
をそれぞれ $P_i(x_i, y_i)$ 、 $P_j(x_j, y_j)$ とする。また、領域 \mathcal{R}_i と \mathcal{R}_j が共有する辺を \mathcal{R}_i が左側
となるように向き付けした時の始点を V_{ij} 、その座標を (a_{ij}, b_{ij}) とする。その境界辺の長さ
は l_{ij} とする。この定義によれば、この辺の終点は必然的に V_{ji} と名付けられ、その座標は
 (a_{ji}, b_{ji}) となる。また、1 つの頂点は複数本の辺の頂点であるため、名前も複数個持つこと
になるが、図 2 ではそのうちの 1 つだけが書かれている。さらに、 P_i 、 P_j から直線 $V_{ij}V_{ji}$
に下ろした垂線の長さを、それぞれ h_{ij} 、 h_{ji} とし、その 2 垂線の足の間の距離を d_{ij} とする。

ここで、元の平面分割図形の境界辺を与える領域番号の対の集合を

$$\mathcal{E} \equiv \{(i, j) \mid |\mathcal{R}_i| \cap |\mathcal{R}_j| \neq \phi, i < j\} \quad (1)$$

と定義しておく。そして、平面分割図形の辺長の総和

$$L \equiv \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} l_{ij} \quad (2)$$

も定義して、平面分割図形全体の面積は今までと同様に S とし、非垂直性の尺度 p を

$$p \equiv \frac{\sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} l_{ij} d_{ij}^2}{\sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} l_{ij}} \bigg/ \frac{S}{N} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{N}{L S} \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \frac{1}{l_{ij}} \left(\overrightarrow{V_{ij}V_{ji}} \cdot \overrightarrow{P_iP_j} \right)^2 \\ &= \frac{N}{L S} \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \frac{1}{l_{ij}} I_{ij}^2 \end{aligned} \quad (4)$$

で定義し、非 2 等分性の尺度 b を

$$b \equiv \frac{\sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} l_{ij} (h_{ij} - h_{ji})^2}{\sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} l_{ij}} \bigg/ \frac{S}{N} \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{N}{LS} \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \frac{1}{l_{ij}} (2 \Delta V_{ij} V_{ji} P_i - 2 \Delta V_{ji} V_{ij} P_j)^2 \\
&= \frac{N}{LS} \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \frac{1}{l_{ij}} O_{ij}^2 \tag{6}
\end{aligned}$$

で定義する。ただし、式が煩雑になるのを防ぐために、途中で

$$I_{ij} \equiv (a_{ji} - a_{ij})(x_j - x_i) + (b_{ji} - b_{ij})(y_j - y_i), \tag{7}$$

$$O_{ij} \equiv -(b_{ji} - b_{ij})(x_i + x_j) + (a_{ji} - a_{ij})(y_i + y_j) + 2(a_{ij}b_{ji} - a_{ji}b_{ij}) \tag{8}$$

とおいた。なお、 ΔABC は、折れ線 ABC が左に折れる時に正となるような、3 角形 ABC の符号付き面積とする。式 (4)、(6) は無次元量となっており、ともに 1 次式の 2 乗和の形をしていて凸である。

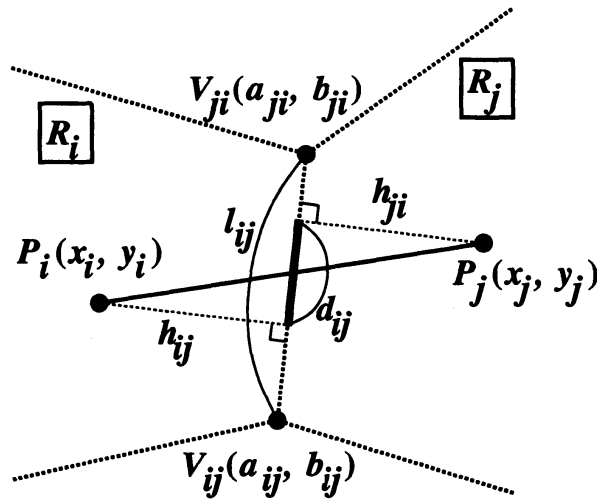


図 2: 垂直性・2等分性の定義のための記号

そして、このようにして得た非垂直性の尺度 p 、非 2 等分性の尺度 b の加重和を最小化する。具体的には、目的関数

$$\begin{aligned}
&f(x_1, y_1, x_2, y_2, \dots, x_N, y_N) \\
&\equiv (1 - k)p + kb \tag{9} \\
&= \frac{N}{LS} \left[(1 - k) \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \frac{1}{l_{ij}} \{(a_{ji} - a_{ij})(x_j - x_i) + (b_{ji} - b_{ij})(y_j - y_i)\}^2 \right. \\
&\quad \left. + k \sum_{(i,j) \in \mathcal{E}} \frac{1}{l_{ij}} \{(b_{ji} - b_{ij})(x_i + x_j) - (a_{ji} - a_{ij})(y_i + y_j) - 2(a_{ij}b_{ji} - a_{ji}b_{ij})\}^2 \right] \tag{10}
\end{aligned}$$

を最小化することにする。 k は $0 \leq k \leq 1$ を満たす範囲で自由に選ぶ値とし、**2 等分性重視度**と呼ぶことにする。なお、 p も b も未知数 $\{x_n, y_n \mid n = 1, 2, \dots, N\}$ に関する 1 次式の 2 乗和なので、この問題は簡単に解ける。

2.2 元の PB 法からの改良点

元の PB 法 [1] は、ポロノイ図か否かの判定に用いられていた。一方、改良 PB 法では、目的関数値をそのままポロノイ図らしき尺度とみなせるようにした。具体的には、以下の性質を持つ (図 3 参照)。

- 合同な分割図形で辺の与えられ方が異なるだけの場合に p 、 b は不変。… (a)
- 相似拡大しただけの場合に p 、 b は不変。… (b)
- 座標系に依存しない。… (c)

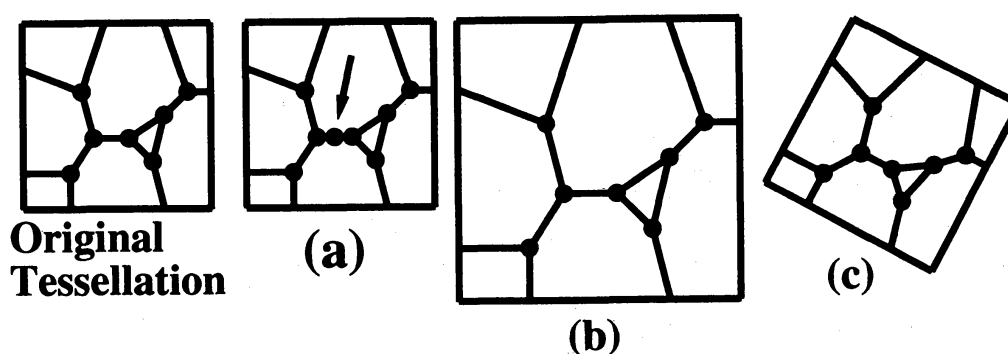


図 3: p や b の値を等しくしたい平面分割図形の組

2.3 PB 法が食い違い面積極小化より優れている点

また、改良 PB 法は、以下の点では食い違い面積極小化の方法 [8] より優れている。

- 局所最適解が大域的最適解であり、反復法で容易に解ける。
- その反復の過程で、幾何学的な処理を必要としない。
- 容易に高次元に拡張できる (4 節参照)。
- 微小領域を加えることによる目的関数値の変化は微小であるため、ポロノイ図らしさを定量化する際に、微小領域を無視するかしないかで迷う必要がない。

3 改良 PB 法の適用例

ここでは、改良 PB 法を自然界の平面分割図形に適用し、得られた目的関数値が具体的にいくつ程度なら「ポロノイ図らしい」と結論できるのかという問題点にも、数値実験によって答える。

3.1 サンプルの分割図形

ここでは、改良 PB 法を実際の自然界の平面分割図形に適用する。なお、サンプルの平面分割図形として、[10]に掲載されたトウモロコシ、蜂の巣の断面、石鹸の泡の断面、地面のひび割れの写真を元に、手作業で境界の位置を測って得たものを用いた。

そして、表 1にはその結果得られた目的関数値をまとめた。この時の母点とそのポロノイ図を重ねて示したのが図 4、図 5、図 6、図 7であり、一点鎖線が与えられた平面分割図形、黒丸が得られた母点、実線がそれらの母点によって生成されたポロノイ図である。見た目でもよくあてはまっている図 5の「蜂の巣」において、表 1に示した目的関数値も小さくなっている。

表 1: 平面分割図形サンプル 4 種に対する PB 法の目的関数値 ($k = 0.5$)

2 等分性重視度 $k = 0.5$ の場合	非垂直性 p	非 2 等分性 b	目的関数値 $f = 0.5 p + 0.5 b$
トウモロコシ	0.0733	0.0281	0.0507
蜂の巣	0.0061	0.0026	0.0043
セッケン	0.0371	0.0301	0.0336
ひび割れ	0.0233	0.0133	0.0183

3.2 改良 PB 法の目的関数値の標準値

ここでは、実際に得られた目的関数値を評価するために、その標準値を実験的に得る。具体的には、(1) ランダムな分割図形に対するポロノイ図らしさ尺度、(2) ポロノイ図らしくない分割図形に対するポロノイ図らしさ尺度、(3) 境界短縮操作後の分割図形に対するポロノイ図らしさ尺度を、計算機実験で測定した。ここでポロノイ図らしさを測定した分割図形のサンプルの作成手順は以下の通りである(図 8参照)。(1) は、一様にばらまかれた 100 母点のポロノイ図の頂点をランダムウォークさせて得た。なお、分割図形の各領域が凸になるという制限を設けたものと、単に自己交差がなければ良いという制限しか設けていないものの、2 種類の場合を考えた。(2) は、一様にばらまかれた 100 母点のポロノイ図から出発して、各頂点について改良 PB 法の目的関数値が最も急速に大きくなる方向に意図的に、微小距離だけ動かすという操作を、目的関数値がこれ以上大きくならないところまで続けて得た。つまり、この操作では、頂点を微小距離移動させる反復毎に改良 PB 法を適用している。(3) は、元の分割図形の各領域の面積を変えないという制限の下で、なるべく境界の総長を小さくするという操作で、文献 [6] に示されている。今回は(1)の分割図形から出発してこの境界短縮操作を行なった。この操作では、分割図形の各領域は必ず凸になる。

そして、それぞれのカテゴリーで、別個に生成した分割図形 100 個に対する改良 PB 法の目的関数値の第 1 四分位点と第 3 四分位点を、表 2にまとめた。これらの値は、実際の平面分割図形がポロノイ図らしいかどうかを考える時の目安となるであろう。例えば表 1に示された値は、表 2に示された標準値よりも小さく、図 4、図 5、図 6、図 7の平面分割図形のサンプルはポロノイ図らしいと考えられる。

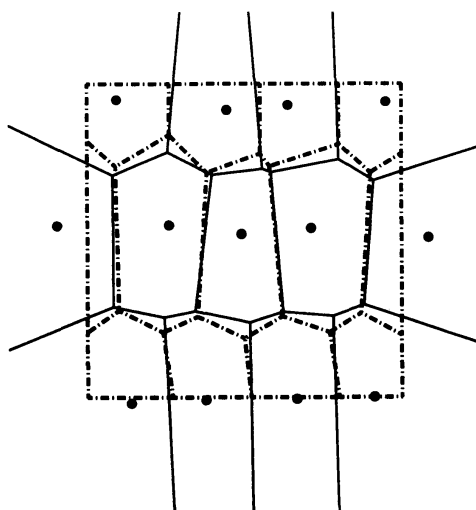


図 4: トウモロコシ

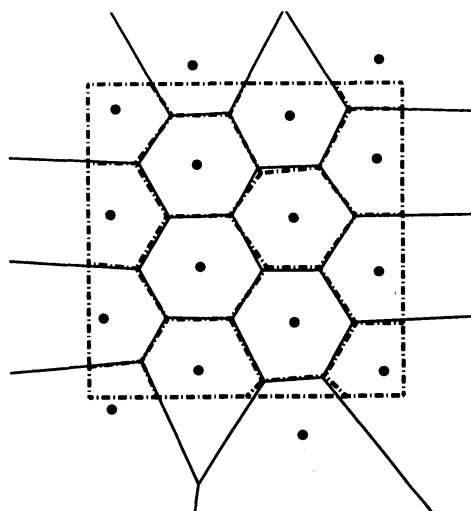


図 5: 蜂の巣

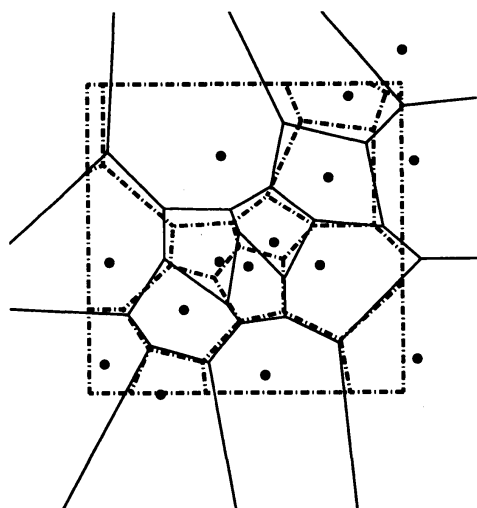


図 6: 石鱗

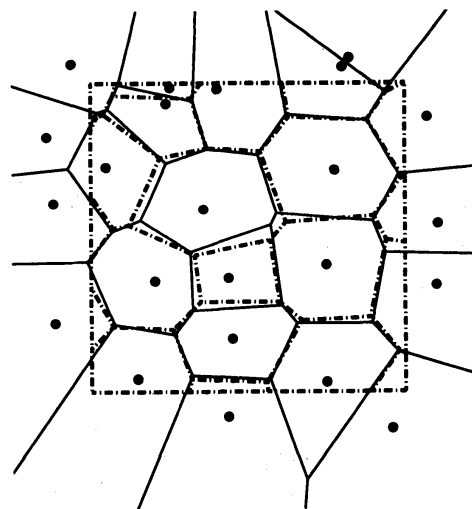
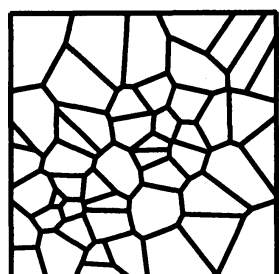


図 7: ひび割れ

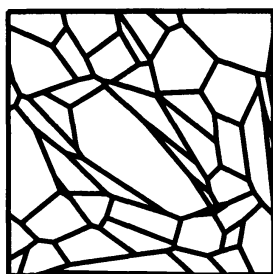
表 2: PB 法の目的関数値の標準値 (第 1 四分位点 ~ 第 3 四分位点)

	改良 PB 法の目的関数値 f
(1) ランダムな分割図形	凸: 0.09 ~ 0.14 非凸: 0.28 ~ 0.42
(2) ポロノイ図らしくない分割図形	凸: 0.11 ~ 0.17
(3) 境界短縮操作後の分割図形	0.06 ~ 0.10
ポロノイ図	0

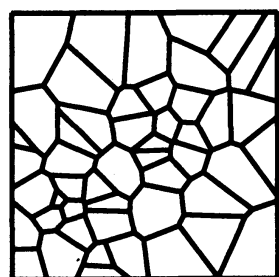
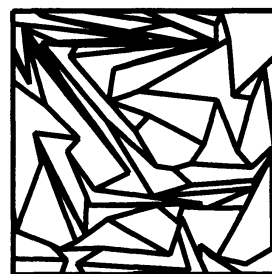


ポロノイ図

⇒

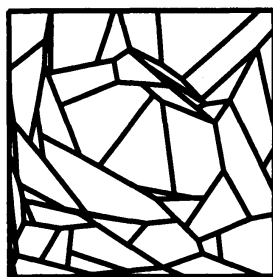
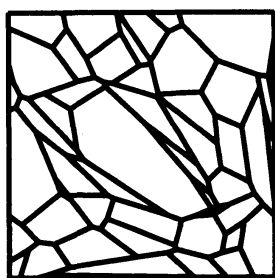
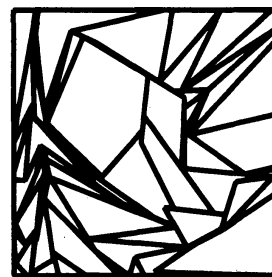


(1) ランダムウォーク (凸 / 非凸)



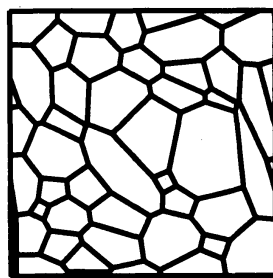
ポロノイ図

⇒

(2) f を大きく (凸 / 非凸)

ランダムウォーク (凸)

⇒



(3) 境界短縮操作 (凸)

図 8: 分割図形の各種サンプルの作成

4 断面ポロノイ図あてはめ問題

ここでは、ポロノイ図あてはめ問題の拡張として「断面ポロノイ図あてはめ問題」を新しく提案する。まずこの問題を定義して、反復解法を提案して、現時点での問題点について述べる。

4.1 断面ポロノイ図あてはめ問題の定義

断面ポロノイ図あてはめ問題は以下のように定義される(図9参照)。なお、断面ポロノイ図とは、ここでは3次元のポロノイ図の2次元的な断面のことを指すことにする。

断面ポロノイ図あてはめ問題

Λ 枚の平面分割図形 \mathcal{R}_λ ($\lambda = 1, 2, \dots, \Lambda$) が3次元空間内に与えられていて、それぞれ N_λ ($\lambda = 1, 2, \dots, \Lambda$) 個の多角形領域 $\{\mathcal{R}_{\lambda n} \mid n = 1, 2, \dots, N_\lambda\}$ ($\lambda = 1, 2, \dots, \Lambda$) からなっているとす。それらに近い断面ポロノイ図を作る母点の3次元座標 $P_n(x_n, y_n, z_n)$ ($n = 1, 2, \dots, N$) を求めよ。ただし、 N は

$$N \leq N \leq \bar{N} \quad (11)$$

を満たす範囲で選ぶものとする。ただし、

$$N \equiv \max_{\lambda=1, 2, \dots, \Lambda} N_\lambda, \quad \bar{N} \equiv \sum_{\lambda=1, 2, \dots, \Lambda} N_\lambda \quad (12)$$

である。

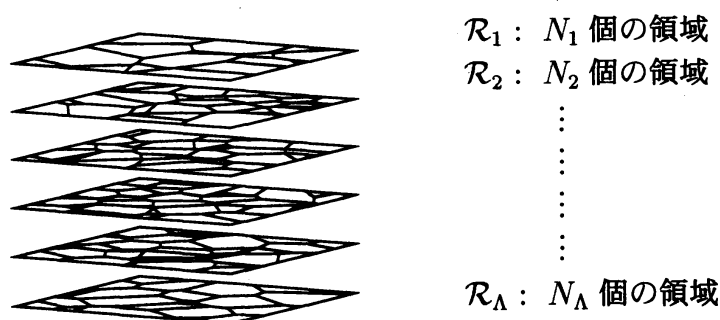


図 9: 断面ポロノイ図あてはめ問題の例

この問題において、配置する母点数や断面間の対応関係は一般には自明でないが、現状ではそれらが既知として扱っている。

4.2 断面ポロノイ図あてはめ問題の反復解法の適用例

今回、詳細は略すが、断面ポロノイ図あてはめ問題の反復解法を構成した。

計算機実験で適用してみると図 10 のようになった。単位体積当たり 100 点の密度の母点集合による 3 次元ポロノイ図に対して、単位正方形の断面を $z = 0$ と $z = 0.01$ の 2 箇所ですとったものを問題例に用い、全ての断面における領域同士の対応関係が完全にわかっていると仮定して、断面ポロノイ図あてはめを実行した。一点鎖線は与えられた断面、白丸は断面を生成する元となった母点で、この問題の解となるもの、黒丸へ続く曲線は初期解からの解の更新の様子、そして黒丸は得られた母点配置、点線は真の解と求めた解との間のずれ、細い実線は黒丸の母点配置を仮定した時の断面ポロノイ図である。

図 10 の簡単な例ではうまく解けているが、今回の解法による限り、より一般の状況では

- 層の間の幅が狭いと、3 次元領域分割の境界面の法線ベクトルの推定に誤差が入る。
- 1 層にしか見えていない領域があると扱えない。

などの問題点が生じる。

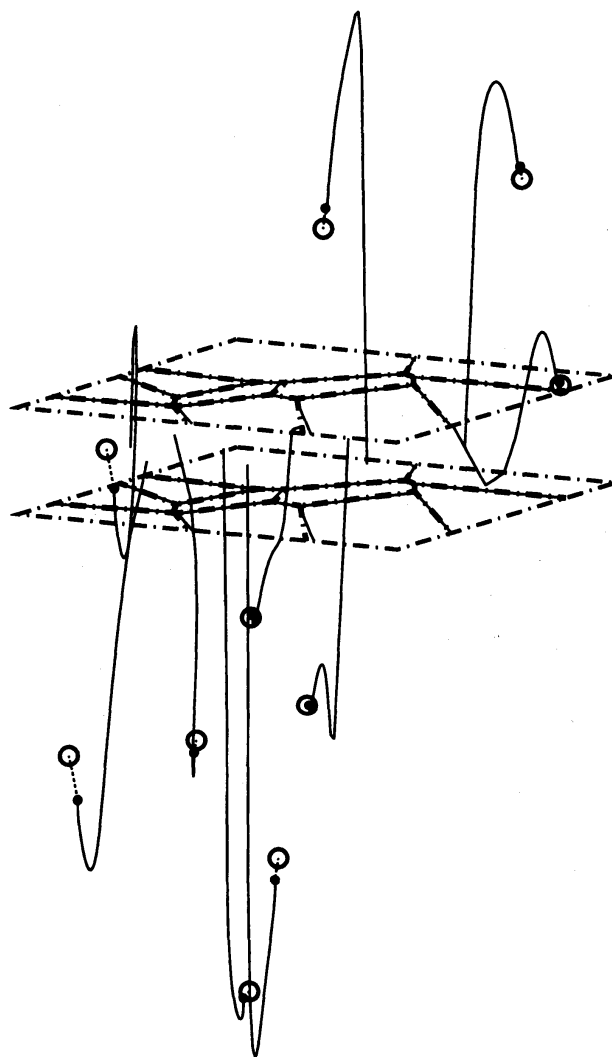


図 10: 断面ポロノイ図あてはめ問題の反復解法の適用例

5 結論

本原稿の結論をまとめると以下ようになる。

- ボロノイ図あてはめ問題の PB 法を、目的関数値がそのままボロノイ図らしさの尺度とみなせるように改良した。
- 計算機実験によって、その目的関数値の標準値を得た。
- 計算の容易さ (特に高次元の場合) 以外に、改良 PB 法が食い違い面積極小化の方針との比較で優れている点を挙げた。
- 断面ボロノイ図あてはめ問題を新しく定式化し、反復解法を試した。

参考文献

- [1] D. G. Evans, S. M. Jones: Detecting Voronoi (Area-of-Influence) Polygons, *Mathematical Geology*, Vol. 19, No. 6, pp. 523–537, 1987.
- [2] D. Hartvigsen: Recognizing Voronoi Diagrams with Linear Programming, *ORSA Journal on Computing*, Vol. 4, No. 4, pp. 369–437, Fall 1992.
- [3] M. Hasegawa and M. Tanemura: On the Pattern of Space Division by Territories, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, Vol. 28, Part B, pp. 509–519, 1976.
- [4] H. Honda: Description of Cellular Patterns by Dirichlet Domains: The Two-Dimensional Case, *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 81, pp. 745–759, 1979.
- [5] H. Honda: Establishment of Epidermal Cell Columns in Mammalian Skin: Computer Simulation, *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 81, pp. 745–759, 1979.
- [6] H. Honda: How Much Does the Cell Boundary Contract in a Monolayered Cell Sheet?, *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 84, pp. 575–588, 1980.
- [7] A. Okabe, B. Boots, K. Sugihara, S.-N. Chiu: *Spatial Tessellations — Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*, Second Edition, John Wiley & Sons, 2000.
- [8] A. Suzuki, M. Iri: Approximation of a Tessellation of the Plane by a Voronoi Diagram, *Journal of the Operations Research Society of Japan*, Vol. 29, No. 1, pp. 69–97, 1986.
- [9] M. Tanemura and M. Hasegawa: Geometrical Models of Territory, *Journal of Theoretical Biology*, Vol. 82, pp. 477–496, 1980.
- [10] パット・マーフィー 著, ウィリアム・ニール 写真, 津田晴美 訳: *バイ・ネイチャーズ・デザイン 大自然のかたち, フレックスファーム*, 1995.