HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	非線形最適化を用いた図形の充填問題の解法
Author(s)	今道, 貴司
Description	ERATOセミナ2010 : No.20. 2010年9月27日
Relation	2010年度科学技術振興機構ERATO湊離散構造処理系プロジェクト講究録. p.139-146.
Issue Date	2011-06
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/48465
Type	conference presentation
File Information	20_all.pdf

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

ERATO セミナ 2010 - No. 20

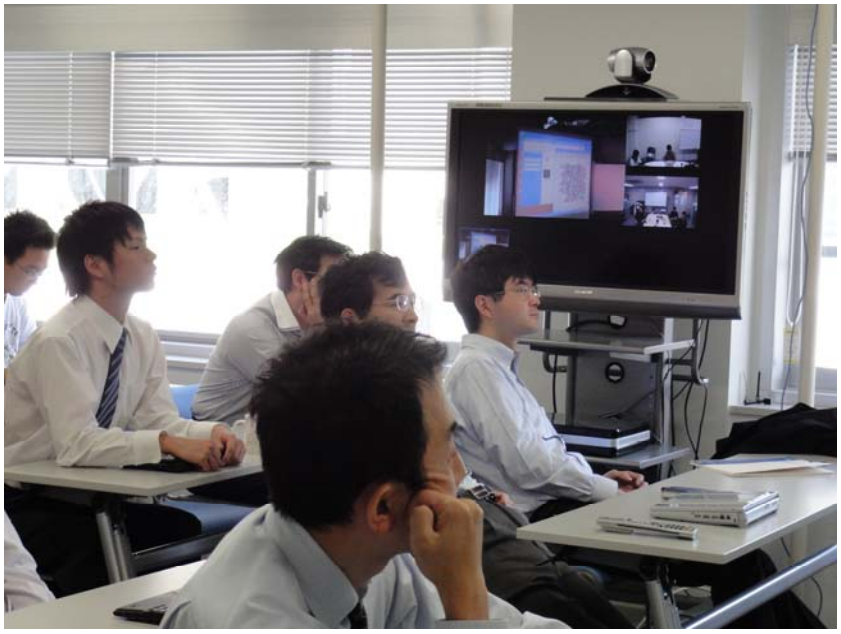
非線形最適化を用いた図形の充填問題の解法

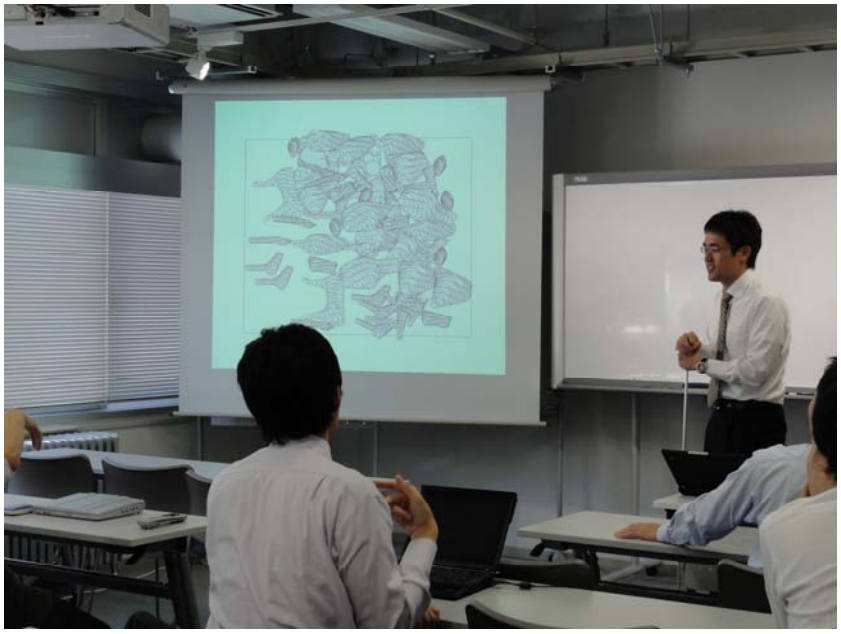
今道貴司
IBM 東京基礎研究所

2010/9/27

概要

図形の充填問題とは、与えられた図形を容器の中に図形の衝突がないように配置する問題である。図形の種類、配置の制約、容器の形状などにより様々なバリエーションがあり、広く応用のある重要な問題である。本発表では、図形同士の衝突や図形の容器からの突出にペナルティをかけ、その総和を非線形最適化の手法を用いることで、配置を改善する手法の紹介をする。適用例として、多角形の充填問題、道路ラベルの配置問題、タンパク質の充填問題などの結果を紹介する





非線形最適化を用いた 図形の充填問題の解法

今道 貴司

IBM 東京基礎研究所 数理科学
imamichi@jp.ibm.com

ERATO 湊離散構造処理系プロジェクト

2010 年 9 月 27 日

*本研究は京都大学情報学研究科所属時に行なったものです。

目次

- 充填問題の紹介
- 多球近似法
  - フレームワークの紹介
  - 非線形最適化手法を用いた重複度の最小化
  - 実験結果
    - 図形の自由回転充填
    - ラベルの再配置
- まとめ

図形の充填問題

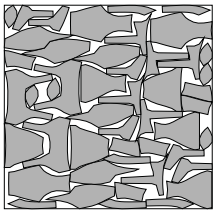
与えられた図形を容器内に重複がないように詰め込む

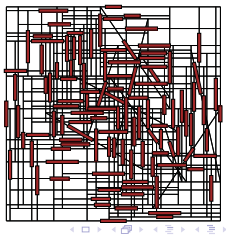
- 次元: 2, 3
- 物体の形状: (2D) 長方形, 多角形; (3D) 直方体, 多面体, 球集合
- 容器の形状: (2D) 長方形, 多角形; (3D) 直方体, 多面体, なし
- 物体の回転: なし, 固定角度 (90 度, 180 度など), 自由回転
- 目的関数: 容器の大きさ, 物体の数や大きさ, 物体間の距離の総和

- NP 困難
- (目標) 汎用的なフレームワークの構築

図形の充填問題の応用

- 布の型紙の配置
- 破れた文書の復元
- 宝石のカット
- タンパク質のドッキング
- 可視化 (ラベルの再配置)

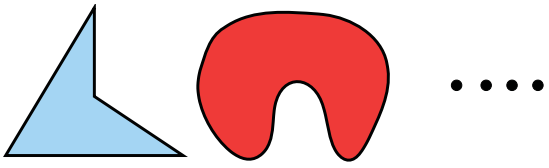




多球近似法

物体の自由回転型充填 (容器は長方形, 直方体; 目的関数なし)

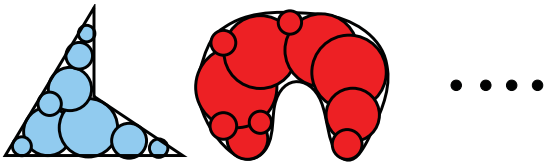
1. 各物体を球集合で近似
2. 球集合の充填問題を解く
3. 元の物体の配置に変換



多球近似法

物体の自由回転型充填 (容器は長方形, 直方体; 目的関数なし)

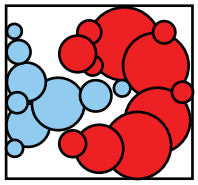
1. 各物体を球集合で近似
2. 球集合の充填問題を解く
3. 元の物体の配置に変換



多球近似法

物体の自由回転型充填 (容器は長方形, 直方体; 目的関数なし)

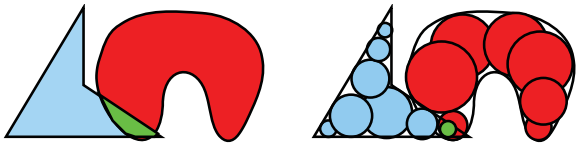
1. 各物体を球集合で近似
2. 球集合の充填問題を解く
3. 元の物体の配置に変換



物体の球集合による近似

利点

1. 物体の衝突判定が容易
2. 球の貫通深度の計算が容易 (元の物体の貫通深度とは異なる)
3. 物体の様々な移動を扱うことが可能 (平行移動, 方向指定, 自由回転)



元の物体　　球集合による近似

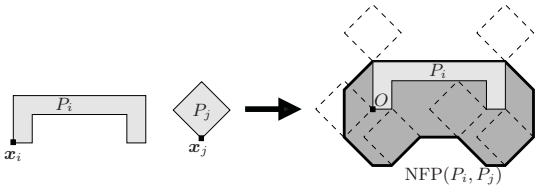
関連研究

Bitmap 近似 (Babu & Babu 1999); Scanline 近似 (Okano 2002)

2 次元での多角形の重複判定

No-fit polygon: $\mathrm{NFP}(P_i, P_j)$

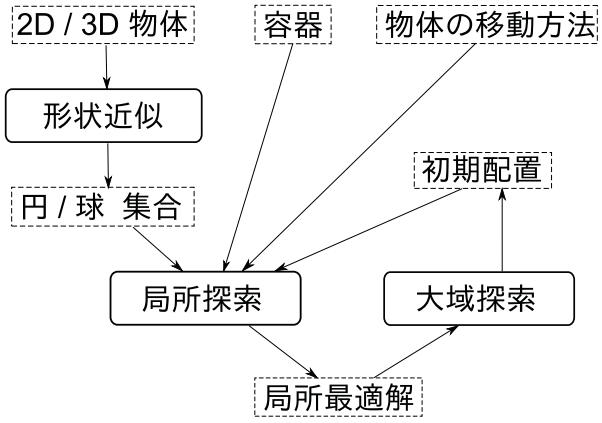
- P_i の参照点の位置 $\boldsymbol{x}_i$ を原点に固定
- P_j が P_i に重複するときの P_j の参照点の位置 $\boldsymbol{x}_j$ の集合



問題点

- 回転, 曲面を扱いにくい.
- 3 次元では NFP の計算がさらに複雑になる. $O(m^3n^3)$

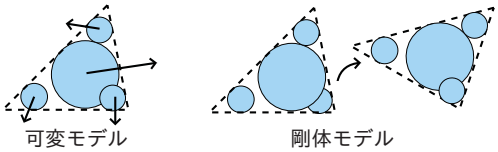
多球近似法の構造



物体モデル

物体を球の集合で近似

- 可変モデル: 各球が独立に移動
- 剛体モデル: 同一物体内の球は相対距離を維持



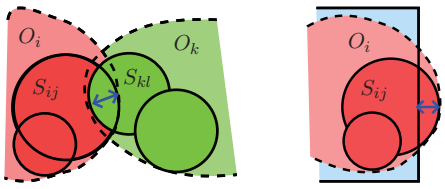
可変モデル　　剛体モデル

関連研究

- 剛体モデルによる衝突判定 (Hubbard 1996)
- 剛体モデルを用いたシミュレーション (Ferrez 2001)
- *Deformable necklace* モデル (Agarwal et al. 2004)

剛体モデルのペナルティ最小化問題 (PMP)

- 各物体の移動方法を指定
- 探索中の物体同士の衝突, 物体の容器からの突出を許容
- 物体同士の衝突ペナルティ
- 物体の容器からの突出ペナルティ
- ペナルティの総和の最小化問題として定式化
- ペナルティ 0 の配置は実行可能な配置



球集合の配置の求め方

局所探索

1. 初期配置を受ける
2. L-BFGS 法を適用して, ペナルティ最小化問題 (PMP) を解く
3. 局所最適な配置を得る

結果の配置は初期配置に依存する

大域探索

- 様々な初期配置に対して局所的アルゴリズムを適用し, よりよい配置を求める (例: 反復局所探索法)

関連研究

- 複数円の円容器への充填 (Wang et al. 2002)
- 多角形の長方形容器への充填 (Imamichi et al. 2007)

局所探索と大域探索

局所探索: RIGIDQN

- 全ての物体を同時かつ微小に移動させる
- ペナルティ最小化問題を L-BFGS で解くことで実現

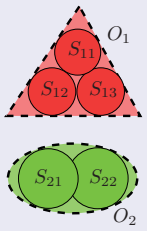
大域探索: ILS_RIGID

1. 初期配置を生成
2. **while** タイムリミット内 **do**
3. 　　暫定解から物体を二つランダムに選び, 交換と回転
4. 　　全ての物体を同時に移動 (RIGIDQN)
5. 　　局所最適な配置を得る
6. 　　**if** 新しい配置が改善解 **then** 暫定解を更新 **end if**
7. **end while**

剛体モデルの定式化 (2 次元の自由回転)

入力

- 物体: $\mathcal{O} = \{O_1, \ldots, O_m\}$
- 円集合: $O_i = \{S_{i1}, \ldots, S_{in_i}\}$
- 円 S_{ij}: 中心 $\boldsymbol{c}_{ij}$, 半径 r_{ij}
- 容器 (長方形): $C = [l_x, u_x] \times [l_y, u_y]$
- 物体 O_i の参照点: $\boldsymbol{r}_i = \sum_{j=1}^{n_i} \boldsymbol{c}_{ij}/n_i$



変数

- 物体 O_i の変数: $\boldsymbol{v}_i = (x_i, y_i, \theta_i) \in \mathbb{R}^3$
  参照点の位置 $(x_i, y_i)^{\mathsf{T}}$; 回転角 θ_i
- 変数全体: $\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_m) \in \mathbb{R}^{3m}$

物体の移動 (2 次元の自由回転)

回転行列

$$R_2(\theta)O = \{R_2(\theta)\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in O\}$$
$$R_2(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

物体 O_i 内の点 $\boldsymbol{x}$ の移動 (平行移動と参照点の周りを回転)

$$\Lambda_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_i = (x, y, \theta)) = R_2(\theta)(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{r}_i) + (x, y)$$

移動後の円 S_{ij} とその中心の位置

$$\boldsymbol{c}_{ij}(\boldsymbol{v}_i) = \Lambda_i(\boldsymbol{c}_{ij}, \boldsymbol{v}_i)$$
$$S_{ij}(\boldsymbol{v}_i) = \{\Lambda_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_i) \mid \boldsymbol{x} \in S_{ij}\}$$

他の物体の移動方法

- Λ_i を変えることで物体の移動方法を設定
- Λ_i が微分可能なら L-BFGS 法が適用可能

平行移動 (変数 $\boldsymbol{v}_i = (x_i, y_i)$)

$$\Lambda_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_i) = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{v}_i$$
$$\frac{\partial \Lambda_i(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{v}_i)}{\partial x_i} = (1, 0)$$

移動方向指定の平行移動 (移動方向 $\boldsymbol{d}_i$, 変数 t_i)

$$\Lambda_i(\boldsymbol{x}, t_i) = \boldsymbol{x} + t_i \boldsymbol{d}_i$$
$$\frac{\partial \Lambda_i(\boldsymbol{x}, t_i)}{\partial t_i} = \boldsymbol{d}_i$$

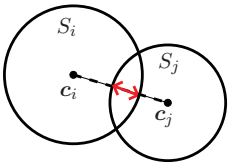
球の貫通深度

貫通深度: $\delta(S_i, S_j)$

任意の方向への平行移動を許したときの,
2 つの重複する図形を分離するのに必要な最短の距離.

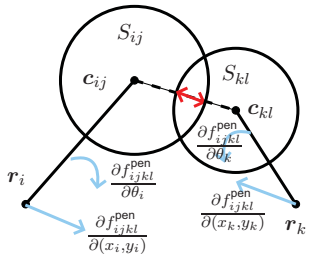
S_i と S_j がともに円の場合の貫通深度

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 0, & \text{if } S_i \cap S_j = \emptyset, \\ r_i + r_j - \|\boldsymbol{c}_i - \boldsymbol{c}_j\|, & \text{otherwise.} \end{cases}$$



衝突ペナルティ

$$f_{ijkl}^{\mathrm{pen}}(\boldsymbol{v}) = [\delta(S_{ij}(\boldsymbol{v}_i), S_{kl}(\boldsymbol{v}_k))]^2$$



剛体モデルのペナルティ最小化問題

$$\begin{aligned}
\text{minimize} \quad & F_{\mathrm{rigid}}(\boldsymbol{v}) = \overbrace{\sum_{1\le i<k\le m}\sum_{j=1}^{n_i}\sum_{l=1}^{n_k} f_{ijkl}^{\mathrm{pen}}(\boldsymbol{v})}^{\text{物体同士の衝突}} + \overbrace{\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n_i} f_{ij}^{\mathrm{pro}}(\boldsymbol{v})}^{\text{容器からの突出}}, \\
\text{subject to} \quad & \boldsymbol{v} = (\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_m) \in \mathbb{R}^{3m}, \\
\text{where} \quad & \\
& f_{ijkl}^{\mathrm{pen}}(\boldsymbol{v}) = [\delta(S_{ij}, S_{kl})]^2, \\
& f_{ij}^{\mathrm{pro}}(\boldsymbol{v}) = [\delta(S_{ij}, \mathrm{cl}(\overline{C}))]^2.
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial f_{ijkl}^{\mathrm{pen}}(\boldsymbol{v})}{\partial \boldsymbol{v}_i} = -2\delta(S_{ij}(\boldsymbol{v}_i), S_{kl}(\boldsymbol{v}_k)) \cdot \frac{\partial \boldsymbol{c}_{ij}(\boldsymbol{v}_i)^{\mathsf{T}}}{\partial \boldsymbol{v}_i} \cdot \frac{\boldsymbol{c}_{ij}(\boldsymbol{v}_i) - \boldsymbol{c}_{kl}(\boldsymbol{v}_k)}{\|\boldsymbol{c}_{ij}(\boldsymbol{v}_i) - \boldsymbol{c}_{kl}(\boldsymbol{v}_k)\|}$$

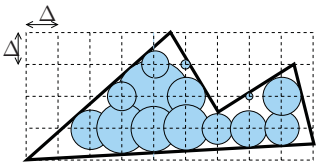
充填問題への適用

問題例

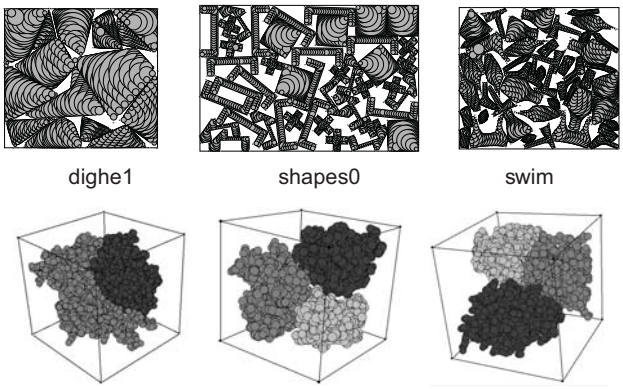
- (2 次元) 非凸多角形の長方形の容器への充填
- (3 次元) たんぱく質の立方体の容器への充填

多角形の近似

1. 多角形の包含矩形を長さ $\Delta = \sqrt{\text{面積}/100}$ のマス目に区切る
2. 直線の交点を左下から順に見て, 多角形に内接する円を置く
3. 無駄な円を削除する

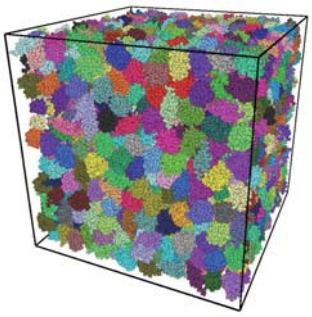


固定容器への充填の結果



巨大問題例 (準ニュートン法を 1 回のみ適用)

- mol2: 物体数 3, 総球数 1948, 平均球数 649.3
- mol2 の 500 組の問題例 (総球数 約 100 万個)
- 容器の辺の長さ 330; 計算時間 883 秒 (271 ステップ)



ラベルの配置の重複除去

- 入力: ラベルの配置
- 出力: ラベルの無衝突の配置
- 最終配置と初期配置の差は小さい方が望ましい

関連研究

- Force-directed method
- Voronoi diagram method
- Constrained optimization method

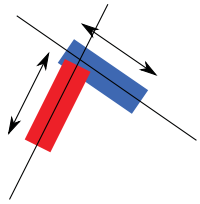
多くの手法が長方形が平行移動する場合のみを扱う

$\Rightarrow$ 多球近似法の局所探索を適用することで, 長方形以外のラベルや, 平行移動以外の移動方法を扱う

問題 1

2 次元の長方形の方向指定の平行移動

- ラベル: 長方形 (傾くことがある)
- 移動方向 (線分)
- 移動方法: 各ラベルは線分に沿って平行移動



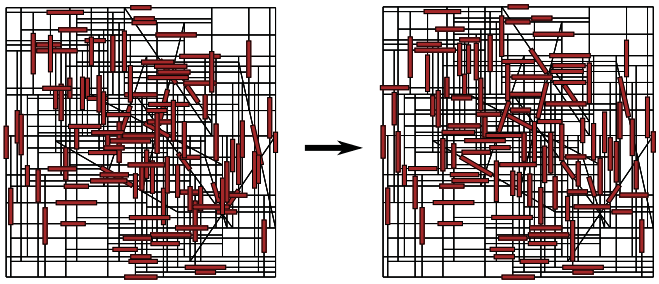
問題 2

3 次元の多属性ラベルの平行移動と自由回転

- ラベル: とげ付き球
- 移動方法: 平行移動と回転

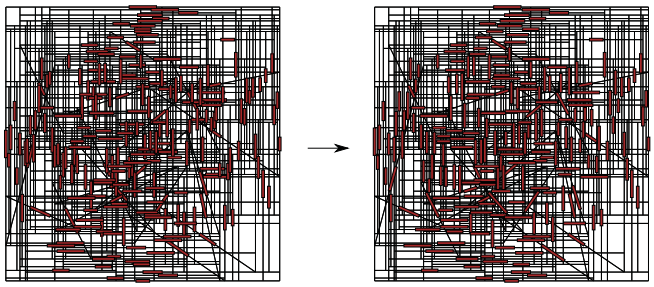
問題 1 の実験結果

- ラベル数 = 147; 総円数 = 4818; 0.43 sec



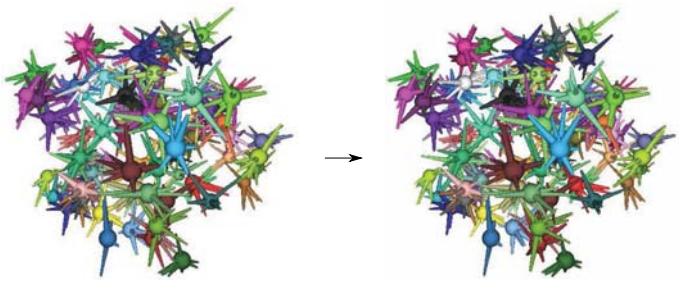
問題 1 の実験結果

- ラベル数 = 222; 総円数 = 6773; 1.5 sec



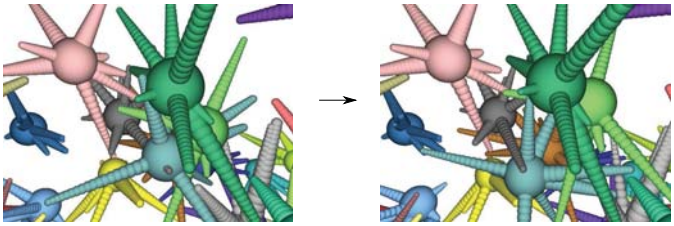
問題 2 の実験結果

- ラベル数 = 100; 総球数 = 20100; 1.7 sec



問題 2 の実験結果

- ラベル数 = 100; 総球数 = 20100; 1.7 sec



まとめ

- 非線形最適化の手法を図形の充填問題に適用する手法の紹介
  - 図形の衝突度合いの総和の最小化
- 多球近似法
  - 多角形以外の図形や、回転も扱うことができる汎用のフレームワーク
  - ラベルの再配置などへの応用

多球近似法の今後の課題

- 入力図形を近似する方法
- 関節のある図形の扱い
- ロボットのモーションプランニング
- タンパク質のドッキング・フォルディング