

機関番号：14301

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008 ～ 2010

課題番号：20500012

研究課題名（和文） 図形充填問題に対するプラットフォームモデルの構築

研究課題名（英文） Construction of Plat-form Models for the Problem of Packing Geometrical Objects

研究代表者

永持 仁 （ NAGAMOCHI HIROSHI ）

京都大学・大学院情報学研究科・教授

研究者番号：70202231

研究成果の概要（和文）：

本研究では、2次元あるいは3次元の物体を充填する Multi-sphere Scheme を提案し、その構成要素の設計や図形や描画に関する基礎理論の研究を行った。3次元物体の三角形メッシュデータからグラフ論的な解析の下で直接、球集合近似データを構築する方法を得た。また、Multi-sphere Scheme に対する3D インターフェイスを作成し、実験結果の可視化ができるようになった。2次元における矩形のパッキングを厳密に解くソフトウェアの性能を改良し、未解決であったベンチマーク問題を世界で初めて解くことに成功している。基礎理論の結果として、任意の3点連結の分解構造を2次元のグラフ描画を使ったデータ構造の発見や3次元の非凸多面体の作るグラフの特徴付けに関する理論的研究成果が得られた。特に後者の結果は、80年前に得られた Steinitz の定理を非凸多面体の場合へ初めて拡張することに成功した成果である。

研究成果の概要（英文）：

In this study, we proposed “Multi-sphere Scheme” to efficiently pack given two- or three-dimensional objects in a compact space, designed all the components of the scheme, and investigated fundamental theory on geometrical packings and graph drawings. We designed an algorithm that can directly transform given triangle-mesh data into data for Multi-sphere Scheme based on a graph-theoretical analysis. We developed a 3D visual interface for Multi-sphere Scheme, by which we can easily check computational results in a visualized form. We greatly improved our solver for packing rectangles so that a long-standing open benchmark instance is solved for the first time by our new solver. As for the theory part, we found a 2D representation of triconnected graphs so that a useful triconnected decomposition can be easily obtained, and a characterization of the graphs of non-convex polytopes in a certain class. In particular, the latter result is the first such result since Steinitz’ theorem, a characterization of the graphs of convex polytopes is found 80 years ago.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,300,000	390,000	1,690,000
2009年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・情報学基礎

キーワード：可視化，詰め込み問題，パッキング，アルゴリズム，最適化，機械学習，グラフ描画，準ニュートン法

1. 研究開始当初の背景

複数の2次元図形，3次元物体を重なりなく配置，移動させるための計算は，機械部品の板取や服の型紙の配置などの部材取合せ，VLSI配置，モーションプランニング，情報可視化，タンパク質のドッキング/フォルディング問題など多くの応用分野に現れる．例えば，タンパク質のドッキング問題では，二つのタンパク質（あるいはタンパク質と薬剤等の化学物質）が安定して噛み合う位置を求めることが問題である．ここで，位置の安定性を表現したエネルギー関数の最小化を行うことも求められるが，タンパク質のように複雑な立体構造を持つ物体の噛み合わせを求めることは，計算機科学の観点から見るとそれだけで挑戦的な問題である．この噛み合わせ問題だけを取り上げて高性能のアルゴリズムを開発するには計算機科学における計算幾何，アルゴリズム理論の研究者が高度なアルゴリズム設計手法を駆使する必要がある．しかし，現状のタンパク質のドッキング問題に対する汎用のソルバー[1, 2]には，アルゴリズム論の観点からは性能に疑問の残る図形配置アルゴリズムが組み入れられているにすぎない．

図形の配置問題を純粋に対象とした研究は主に2次元図形のストリップパッキング問題である．この問題では幅の固定された容器に，与えられた複数の2D図形を重なりなく配置し，必要となる容器の長さをできるだけ短くする問題である．充填する図形が矩形に限り，図形の配置角度が水平に限定されている場合であっても，ストリップパッキング問題は計算量理論の観点でNP-困難と呼ばれる問題のクラス（このクラスの問題を多項式時間で厳密に解くことは不可能と予想されている）に属することが知られている．矩形ストリップパッキングに対しては近似アルゴリズムの研究成果があり，また商用のソフトウェアも数多く開発されている[3, 4]．しかし，矩形以外の不規則な形状の図形を充填する問題や，配置角度が自由である場合に対するアルゴリズムの開発はまだ進んでいなかった[5, 6]．

[1] CASP (CASP2)
<http://predictioncenter.llnl.gov/casp2/>

Casp2.html

- [2] CAPRI <http://capri.ebi.ac.uk/>
- [3] Ace Cutting Optimizer (Adelaide Computer Energy, 2002, Australia).
- [4] Real Cut 2D (Optimal Programs, 2004, U. S. A./U. K.).
- [5] E. Hopper, B. C. H. Turton: A review of the application of meta-heuristic algorithms to 2D strip packing problems, *Artificial Intelligence Review* 16 (4) (2001) 257-300.
- [6] G. Wascher, H. Haussner, H. Shumann: An improved typology of cutting and packing problems, Working Paper 24, Faculty of Economics and Management, Guericke University Magdeburg (2004).
- [7] Herman et al.: Graph Visualization and Navigation in Information Visualization, *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics*, vol.6 (2000) 24-43.

2. 研究の目的

2次元図形，3次元物体を重なりなく配置させる状況を含む問題は，科学・医療技術の多くの分野に現われているが，複雑な形状の物体の配置問題はそれ自体非常に難しい問題であり，これを解く高速アルゴリズムの開発は，非線形最適化，計算幾何，計算量理論，データ構造論などの種々の研究領域にまたがって行う必要がある．しかし，現状では，それぞれの応用分野ごとに簡便に設計された配置アルゴリズムが利用されているだけである．そこで，複雑な形状の複数の物体を最適に配置させる高速なアルゴリズムは，多くの科学・医療技術の分野の発展に重要な役割を果たすと考えられる．このために，我々は，非線形最適化，計算幾何，アルゴリズム論の最新の結果に基づき，Multi-sphere Scheme と呼ぶ，図形配置問題を汎用的に解く新しいアルゴリズムの枠組み(scheme)の完成を目指している．

これまで，2次元の不規則な形状物体の自由回転のもとでのストリップパッキング問題に対しては殆ど研究例がない．自由回転を許すと No Fit Polygon が有効に利用できなくなり，重なり度合いを計算する手間が劇的

に増加してしまう。特に3次元において自由回転を許した問題を直接数学的に定式化すると膨大な変数を必要とし、複雑な形状の物体の配置を実用的な計算時間で見つけ出すのはもはや不可能である。これらの難点を克服するために、我々は、円同士（球同士）の重なり具合の計算は、配置角度によらず高速に行えることに着目し、与えられた2D図形（3D物体）を適当な円（球）の集合で近似した後、制約なしの非線形連続最適化問題に定式化する方法として Multi-sphere Scheme を提案している。

Multi-sphere Scheme においては、剛体だけでなく、関節部を持つ変形可能な物体も取り扱うことができる。特に、タンパク質の球モデルはそのまま Multi-sphere Scheme に乗るため、将来的にはタンパク質のフォルディング問題への適用も期待できる。さらに図形を配置する際の制約を Multi-sphere Scheme の中に自然に組み入れることもできる。配置する図形ごとに自由回転、平行移動など配置に関する条件を個別に指定することができる。配置条件の扱える Multi-sphere Scheme は、VLSI の配置問題や情報の可視化問題など、異なるアイテム間に配置条件を持つ応用分野へ広く適用することが可能である。この他、グラフ構造などのデータの2次元、3次元への埋め込みや可視化されたデータからの情報の抽出に関しても基礎的な研究を合わせて行う。

3. 研究の方法

Multi-sphere Scheme の汎用解法を構築するためには、円（球）による近似法、局所解の計算法、探索領域の走査法、幾何構造を用いたデータ構造の開発が必要である。さらに、図形間の位置情報を取り入れたモデルに拡張することを目指している。研究期間内には、幾何構造を用いたデータ構造を開発や他の非線形連続最適化法の実装により、局所解の計算法を高速化し、数万～数十万個の球を持つ問題例が扱えるようにすること、解空間の効率的な探索法を開発し、大域的にも良質な解の発見を行うことを達成し、Multi-sphere Scheme の基本的な枠組みを完成させる。この間、タンパク質のドッキング問題、モーシヨンプランニング、情報可視化で現れる問題例に対して開発中のアルゴリズムスキームを適用し、スキームの改良、拡張を行っていく。提案する図形配置アルゴリズム Multi-sphere Scheme の構築要素は、以下の通りであると考えている。

(1) 与えられた図形を円・球の集合で近似す

るアルゴリズム、
(2) 局所最適解を求める非線形連続最適化アルゴリズム、
(3) 大域的に良質な解を見出すための解空間探索ヒューリスティック、
(4) アルゴリズムを高速化させるための幾何的データ構造、
(5) グラフ構造/配置条件を付加するための工夫。

まず、(3)の解空間探索ヒューリスティックの開発を行い、Multi-sphere Scheme の基本形である(1)-(4)を完成させることを目指す。次に、Multi-sphere Scheme 全体のエンジン部分を担う(2)の局所最適解を求める非線形連続最適化アルゴリズムの改良・開発を行う。この点を少し詳しく述べると、Multi-sphere Scheme は、円・球同士の貫通深度の合計値をペナルティ関数とする制約なし非線形連続最適化問題の局所最適解を求めることを基本操作としている。このペナルティ関数は微分可能であるため、準ニュートン法や共役勾配法などの非線形連続最適化の手法を適用することにより、局所最適解を効率的に求めることができる。計算機実験を通じて、図形をどのように円や球で近似するのが計算効率を向上させる上で望ましいかの知見を得た後、これをもとにして(1)円・球の集合で近似するアルゴリズムの改良を行う。さらに、(5)グラフ構造/配置条件を付加するための工夫にも着手し、情報可視化、モーシヨンプランニングの確率ロードマップ法への適用、タンパク質のドッキング問題への適用を試みる。確率ロードマップ法への応用としては、確率ロードマップ法で最初に行われる configuration 空間における経路点 (milestone) のランダムサンプリングにおいて、サンプル点の実行不可能（物体の衝突が生じている）である場合に、その近くの点で実行可能な点を探し出すことが Multi-sphere Scheme を使うことで容易になる。よって、Multi-sphere Scheme を使って、確率ロードマップにおいて経路点の選出を少なし、生成すべきセグメント数を減らすことができると期待できる。この他、三角形メッシュ、非凸多面体のグラフ論的構造、グラフの平面埋め込み、可視化されたグラフからの情報抽出などに関する基礎研究も合わせて行う。

4. 研究成果

本研究では、2次元あるいは3次元の物体を充填する高速アルゴリズムが配置に関する

種々の制約条件に応じて柔軟に設計できるスキームとして Multi-sphere Scheme を提案し、その構成要素としてのモジュールの設計やその構築のための基礎理論の研究とその応用を行った。Multi-sphere Scheme のモジュールとして中心的な役割を果たす局所最適化モジュールは、与えられた配置から重なりを減らす解を非線形計画問題の局所最適解として求めるものであり、これについては、準ニュートン法の適用の他、衝突判定を空間のスラブ分割を利用して行うアルゴリズムを開発することで高い性能を発揮できている。Multi-sphere Scheme の他のモジュールとして、与えられた物体の円や球による近似表現を算出するモジュール、大域的最適解を探索するモジュールなどの設計を主に学生の卒業論文、修士論文の研究として行っており一定の改良の成果を得ている。特に、3次元物体の三角形メッシュデータからグラフ論的な解析の下で直接、球集合近似データを構築することができている。また、Multi-sphere Scheme に対して、インターフェイスを作成し、実験を通じた方法の改良過程を可視化することができるようになり、数値データ上には現れにくい状況についても直観的に理解ができ、アルゴリズムの設計・改良を効率化させることができるようになった。このインターフェイスに関する説明はホームページで紹介している。

この他、海外の研究者との共同研究の形で、グラフを図形表現の道具と見たときの2次元、3次元における描画方法についての研究を行うなど基礎理論においても多くの結果を得ることができた。例えば、任意の3点連結の分解構造を2次元のグラフ描画を使ったデータ構造として表現できる結果は、連結グラフへの3分割を高速かつ容易に行えるようにした重要な理論的結果の一つである。グラフの描画に関する研究については、海外共同研究者 Hong Seokhee 博士との協力のもと、2次元非凸直線描画問題の新しい結果や3次元の非凸多面体の作るグラフの特徴付けに関する理論的研究成果が得られた。特に後者の結果は、80年前に得られた Steinitz の定理を非凸多面体の場合へ初めて拡張することに成功した成果である。2次元における矩形のパッキングを厳密に解くソフトウェアの性能の改良を続け、核となる分枝限定アルゴリズムに新しい限定操作を組み入れることで、これまで誰も解くことのできなかつたベンチマーク問題を世界で初めて解くことに成功し、本研究で得られたこのパッキ

ングソルバーは現在世界最高速のものである。この他、2部グラフの可視化に基づく分類器の研究を進め、決定木やサポートベクターマシンと遜色のない結果が得られている。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計15件)

- ① E. Morsy, H. Nagamochi: 査読有 Approximating capacitated tree-routings in networks, Journal of Combinatorial Optimization, 21(2) (2011) 254-267.
- ② H. Nagamochi: 査読有 Cop-robber guarding game with cycle robber region, Theoretical Computer Science, 412 (2011) 383-390.
- ③ S. Ota, E. Morsy, H. Nagamochi: 査読有 A plane graph representation of a triconnected graph, Theoretical Computer Science, 411 (2010) 3979-3993.
- ④ T. Fukunaga, H. Nagamochi: 査読有 Network design with weighted degree constraints, Discrete Optimization, 7 (2010) 246-255.
- ⑤ Y. Karuno, H. Nagamochi, X. Wang: 査読有 Optimization problems and algorithms in double-layered food packing systems, Journal of Advanced Mechanical Design, Systems, and Manufacturing, Vol. 4, No. 3, 2010, 605-615.
- ⑥ S.-H. Hong, H. Nagamochi: 査読有 Approximation algorithms for minimizing edge crossings in radial drawings, Algorithmica, vol. 58, no. 2, 2010, 478-497.
- ⑦ S.-H. Hong, H. Nagamochi: 査読有 A linear-time algorithm for symmetric convex drawings of internally triconnected planar graphs, Algorithmica, vol. 58, no. 2, 2010, 433-460.
- ⑧ E. Morsy, H. Nagamochi: 査読有 Approximation to the minimum cost edge installation problem, IEICE Transactions, E93-A, no. 4, April 2010, 778-786.
- ⑨ S.-H. Hong, H. Nagamochi: 査読有 An algorithm for constructing star-shaped drawings of plane graphs, Computational Geometry Theory and Applications, vol. 43, no. 2, February 2010, pp. 191-206.
- ⑩ H. Nagamochi: 査読有 Minimum degree orderings, Algorithmica, vol. 56, no. 1, 2010, 17-34.
- ⑪ T. Ishii, Y. Akiyama, H. Nagamochi: 査読有 Minimum augmentation of

edge-connectivity between vertices and sets of vertices in undirected graphs, *Algorithmica*, vol. 56, no. 4, 2010, 413-436

⑫ S.-H. Hong, H. Nagamochi 査読有 An algorithm for constructing star-shaped drawings of plane graphs, *Computational Geometry Theory and Applications*, vol. 43, no. 2, February 2010. pp. 191-206,

⑬ M. Kenmochi, T. Imamichi, K. Nonobe, M. Yagiura, H. Nagamochi 査読有 Exact algorithms for the 2-dimensional strip packing problem with and without rotations, *European Journal of Operational Research*, 198(1) (2009). 73-83

⑭ T. Imamichi, M. Yagiura, H. Nagamochi 査読有 An iterated local search algorithm based on nonlinear programming for the irregular strip packing problem, *Discrete Optimization*, vol. 6, no. 4, November 2009. pp. 345-361,

⑮ A. Kawaguchi, H. Nagamochi 査読有 Drawing slicing graphs with face areas, *Theoretical Computer Science*, 410(11), (2009). 1061-1072

[学会発表] (計 16 件)

① K. Haraguchi, S.-H. Hong, H. Nagamochi Multiclass visual classifier based on bipartite graph representation of decision tables, *Learning and Intelligent Optimization Conference (LION 4)*, January 18-22, 2010. Venice, Italy

② Y. Karuno, H. Nagamochi, A. Shurbevski: Approximation algorithms for a cyclic routing problem of grasp-and-delivery robots, *SCIS and ISIS 2010, Joint 5th International Conference on Soft Computing and Intelligent Systems and 11th International Symposium on Advanced Intelligent Systems*, Okayama, Dec. 12, 2010.

③ T. Ohshima, P. Eumthurapojn, L. Zhao, H. Nagamochi: An algorithm framework for the time-dependent point-to-point shortest path problem, *The China-Japan Joint Conference on Computational Geometry, Graphs and Applications (CGGA 2010, Dalian)* November 3 in Dalian, China 2010

④ M. Xiao, T. Fukunaga, H. Nagamochi: FPTAS's for some cut problems in weighted trees, *The 4th International Frontiers of*

Algorithmics Workshop (FAW 2010), August 11, 2010, at Wuhan University, Wuhan, China,

⑤ Y. Karuno, H. Nagamochi, A. Nakashima, K. Yamashita: Heuristics for scheduling problems on identical machines like storage allocation, *IEEE INDIN 2010*, 13 July 2010, Osaka, Japan,

⑥ K. Haraguchi, S.-H. Hong, H. Nagamochi: Multiclass visual classifier based on bipartite graph representation of decision tables, *Learning and Intelligent Optimization Conference (LION 4)*, January 18, 2010. Venice, Italy,

⑦ T. Fukunaga, H. Nagamochi: Network design with weighted degree constraints, *Third Annual Workshop on Algorithms and Computation (WALCOM 2009)*, February 18 (2009), Indian Statistical Institute, Kolkata, India,

⑧ S. Karakawa, E. Morsy, H. Nagamochi, Minmax tree cover in the Euclidean space, *Third Annual Workshop on Algorithms and Computation (WALCOM 2009)*, February 18 (2009) Indian Statistical Institute, Kolkata, India,

⑨ S. Umetani, K. Matsumoto, H. Nagamochi One-dimensional cutting stock problem for a paper tube industry, *The 6th ESICUP Meeting*, March 26, 2009, Valencia, Spain.

⑩ T. Imamichi, Y. Arahori, H. Nagamochi Efficient branch-and-bound algorithms for one-dimensional contiguous bin packing problem and two-dimensional strip packing problem, *The 6th ESICUP Meeting*, March 26, 2009, Valencia, Spain.

⑪ S.-H. Hong, H. Nagamochi Toward characterization of vertex-edge graphs of three-dimensional nonconvex polyhedra, *6th Japanese-Hungarian Symposium on Discrete Mathematics and Its Applications* May 16, 2009 in Budapest, Hungary

⑫ J. Wang, J. Gim, M. Sasaki, L. Zhao, H. Nagamochi Efficient approximate algorithms for the beacon placement and its dual problem, *Korea-Japan Joint Workshop on Algorithms and Computation*, Kookmin University in Seoul, Korea, July 4, 2009,

⑬ K. Haraguchi, S.-H. Hong, H. Nagamochi Bipartite graph representation of multiple decision table classifiers, *Fifth Symposium on Stochastic Algorithms,*

Foundations and Applications (SAGA 2009),
Sapporo, Japan October 26, 2009,

⑭ K. Haraguchi, S.-H. Hong, H. Nagamochi
Visualization can improve multiple
decision table classifiers, The 6th
International Conference on Modeling
Decisions for Artificial Intelligence
(MDAI 2009), November 30, 2009, Awaji
Island, Japan.

⑮ S.-H. Hong, H. Nagamochi Upward
star-shaped polyhedral graphs, The 20th
International Symposium on Algorithms and
Computation (ISAAC 2009), December 16,
2009, in Hawaii, USA,
913-922.

⑯ K. Okumoto, T. Fukunaga, H. Nagamochi
Divide-and-conquer algorithms for
partitioning hypergraphs and submodular
systems, The 20th International Symposium
on Algorithms and Computation (ISAAC 2009),
December 16, 2009, in Hawaii, USA

〔図書〕 (計 2 件)

① 茨木, 石井, 永持: グラフ理論 連結構造
とその応用, 朝倉書店, 2010 年総ページ (324
ページ)

② Hiroshi Nagamochi, Toshihide Ibaraki
Algorithmic Aspects of Graph
Connectivities (Encyclopedia of
Mathematics and Its Applications)
Cambridge University Press, 2008.
P. 392

6. 研究組織

(1) 研究代表者

永持 仁 (NAGAMOCHI HIROSHI)
京都大学・大学院情報学研究科・教授
研究者番号 : 70202231

(2) 研究分担者

福永 拓郎 (FUKUNAGA TAKURO)
京都大学・大学院情報学研究科・助教
研究者番号 : 60452314

(3) 連携研究者

()

研究者番号 :