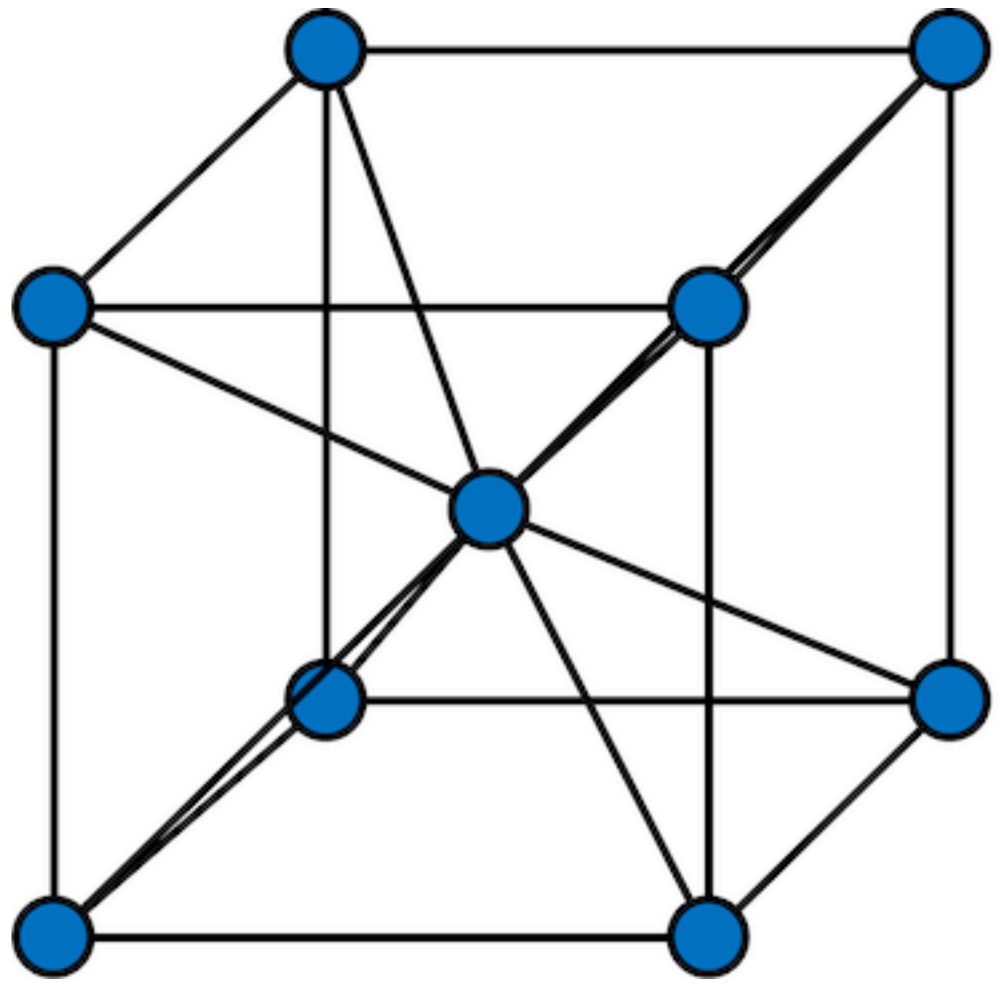
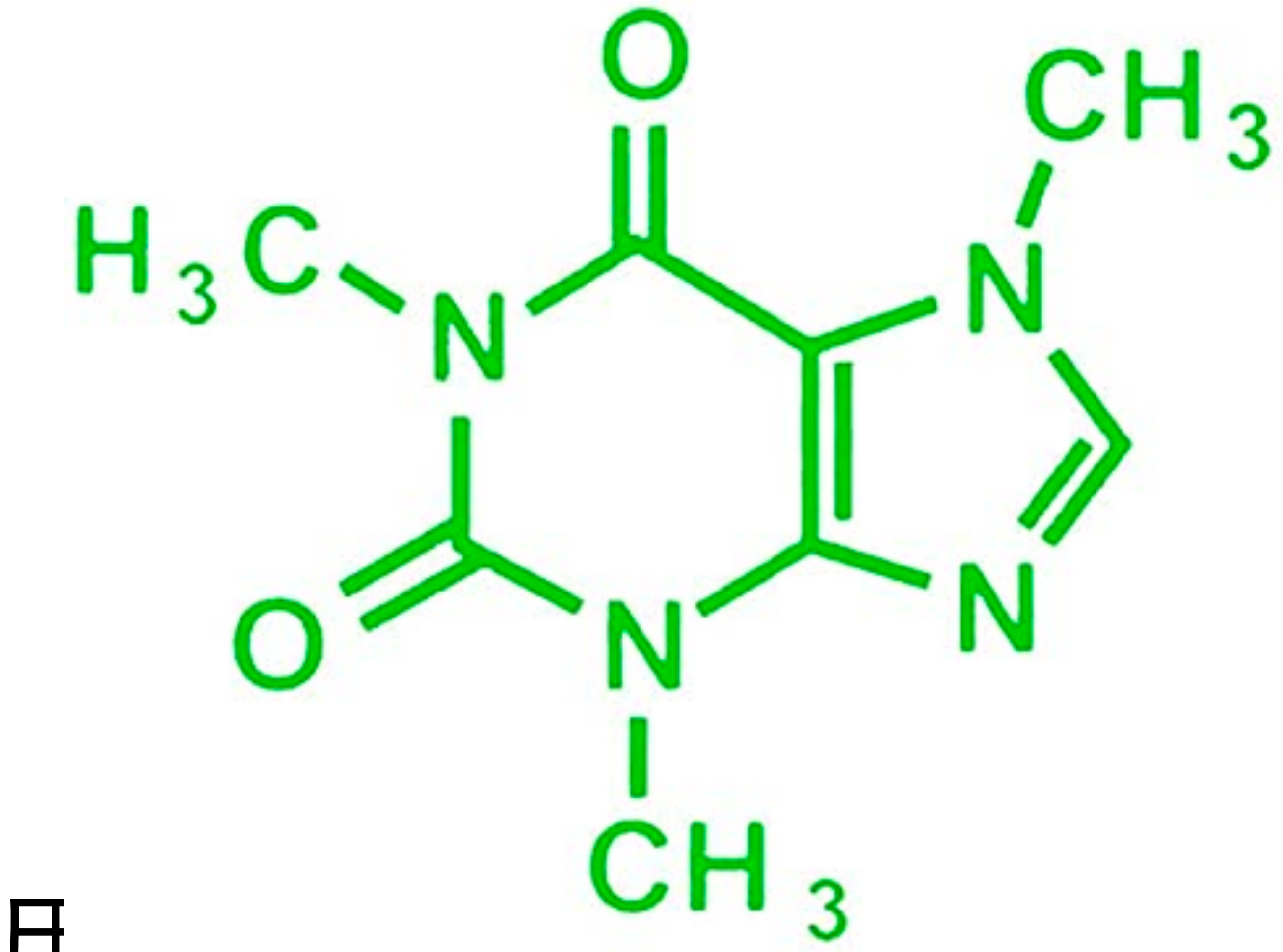
情報と幾何学

〜Voronoi分割を例に〜

かたちと情報

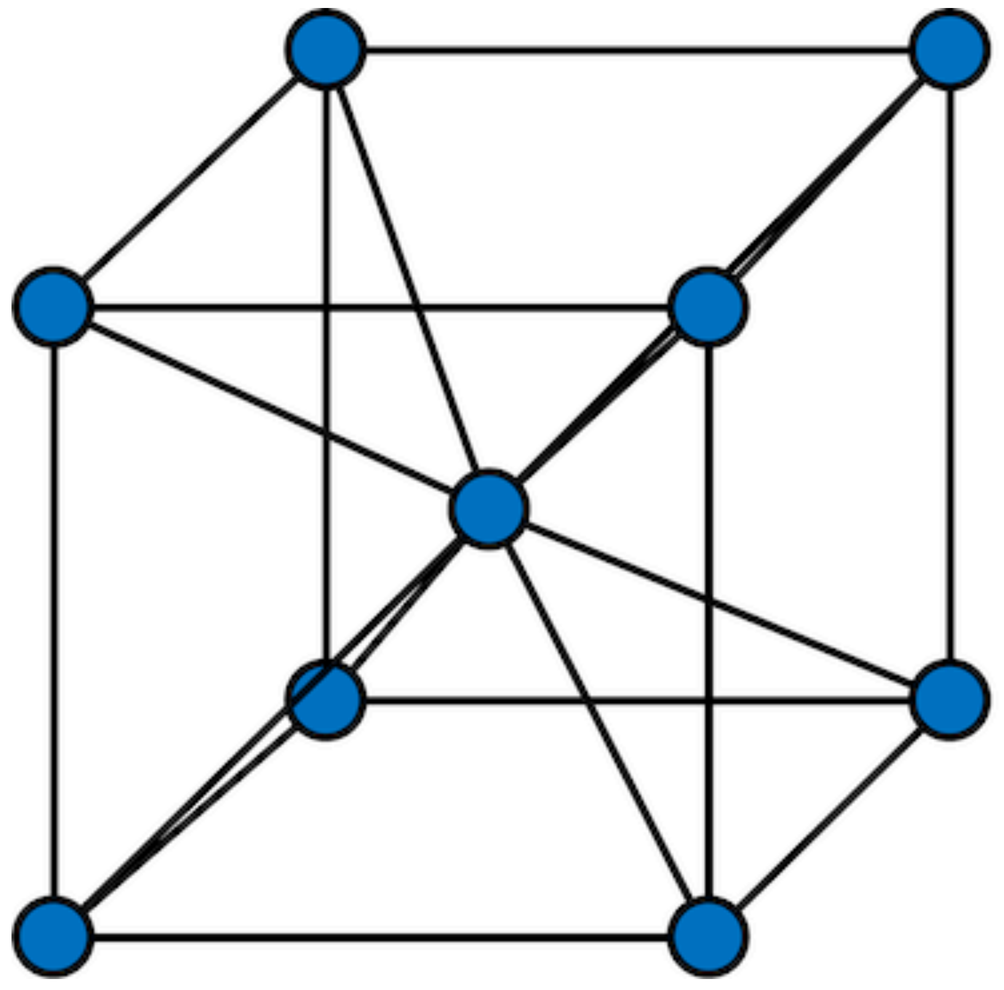


- 物質は原子からできている。
- 原子の並びが、ものの性質に大きな影響を与える。

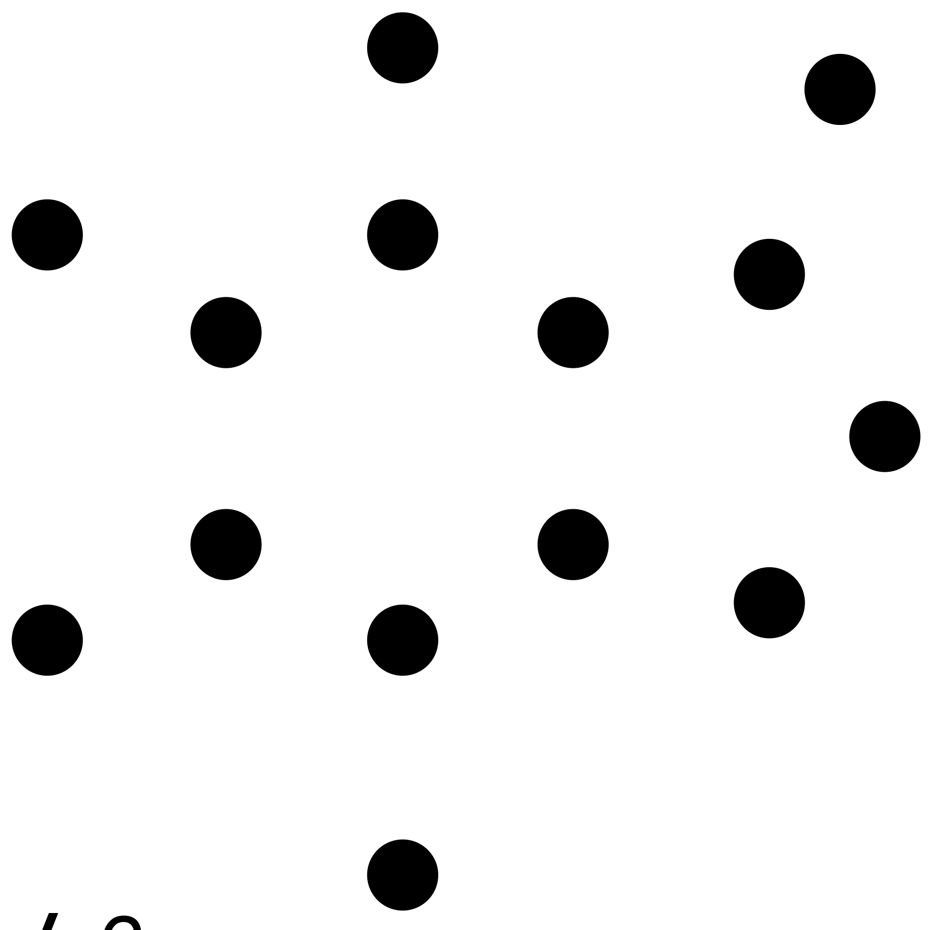


    - 水と氷と水蒸気
- 影響範囲: 近いものほど大きな影響を受ける。
    - クーロン力: $1/r$, 双極子間力: $1/r^3$, Lennard-Jones相互作用: $1/r^6$
- 結合は形の目安。しかし、結合がない場合には、形が表現できない。

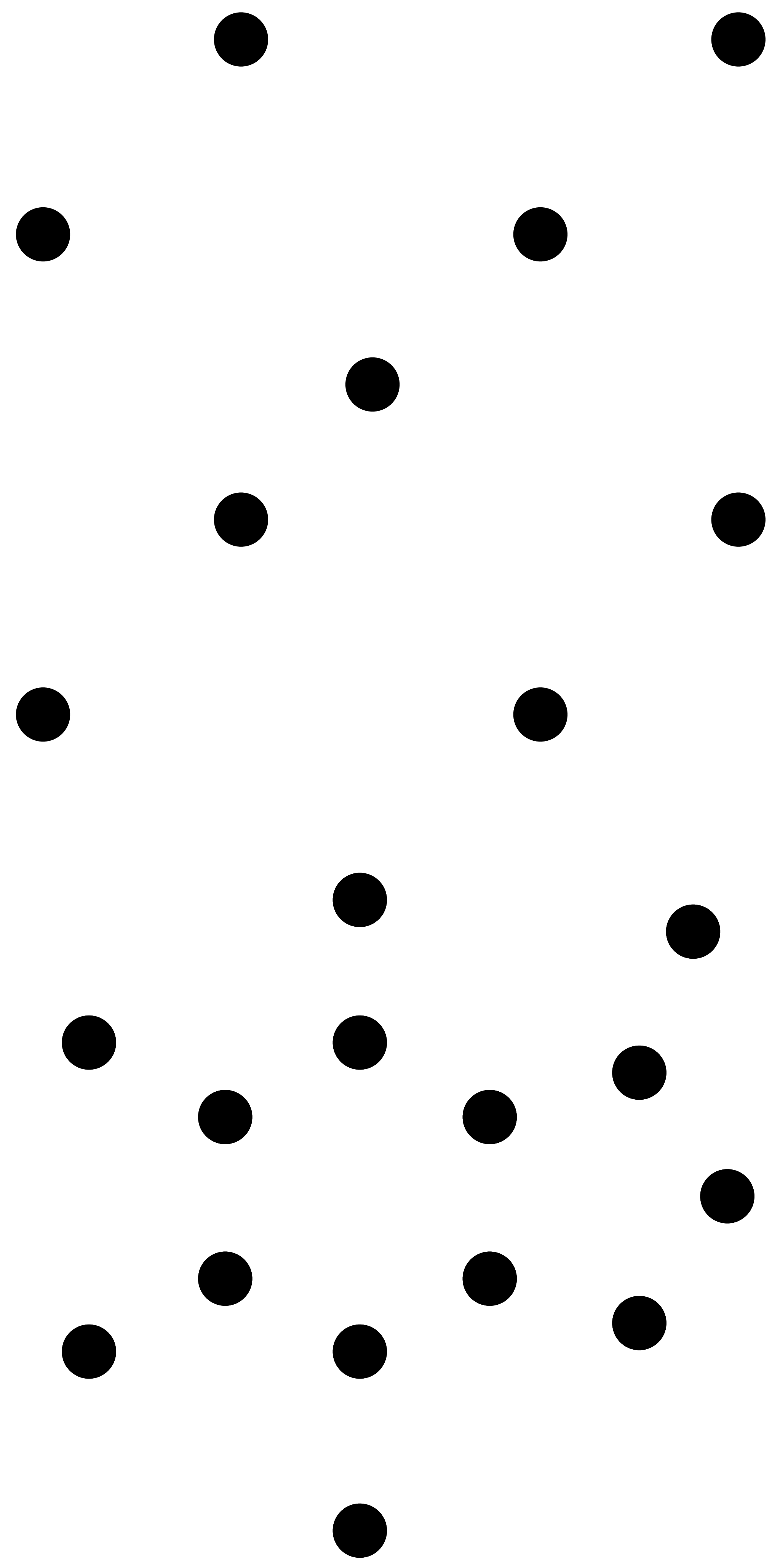
かたちと情報



- 物質は原子からできている。
- 原子の並びが、ものの性質に大きな影響を与える。
  - 水と氷と水蒸気
- 影響範囲: 近いものほど大きな影響を受ける。
  - クーロン力: 1/r, 双極子間力: $1/r^3$, Lennard-Jones相互作用: $1/r^6$
- 結合は形の目安。しかし、結合がない場合には、形が表現できない。



- 結合を定義するには、相互作用を知る必要がある。
- もっと原理的な、点の配置だけから形をとらえたい。
- X線回折は一つの手段。
  - 点のならびの周期性を捕えられる=構造因子
  - ただし、周期的でないと捕捉されない。



いきなり実験

- トレーにドリルで穴を空ける。
- 塩をそそぐ。
- 生じる形を観察する。
- 稜線を上からみるとどんな形に見えるか。

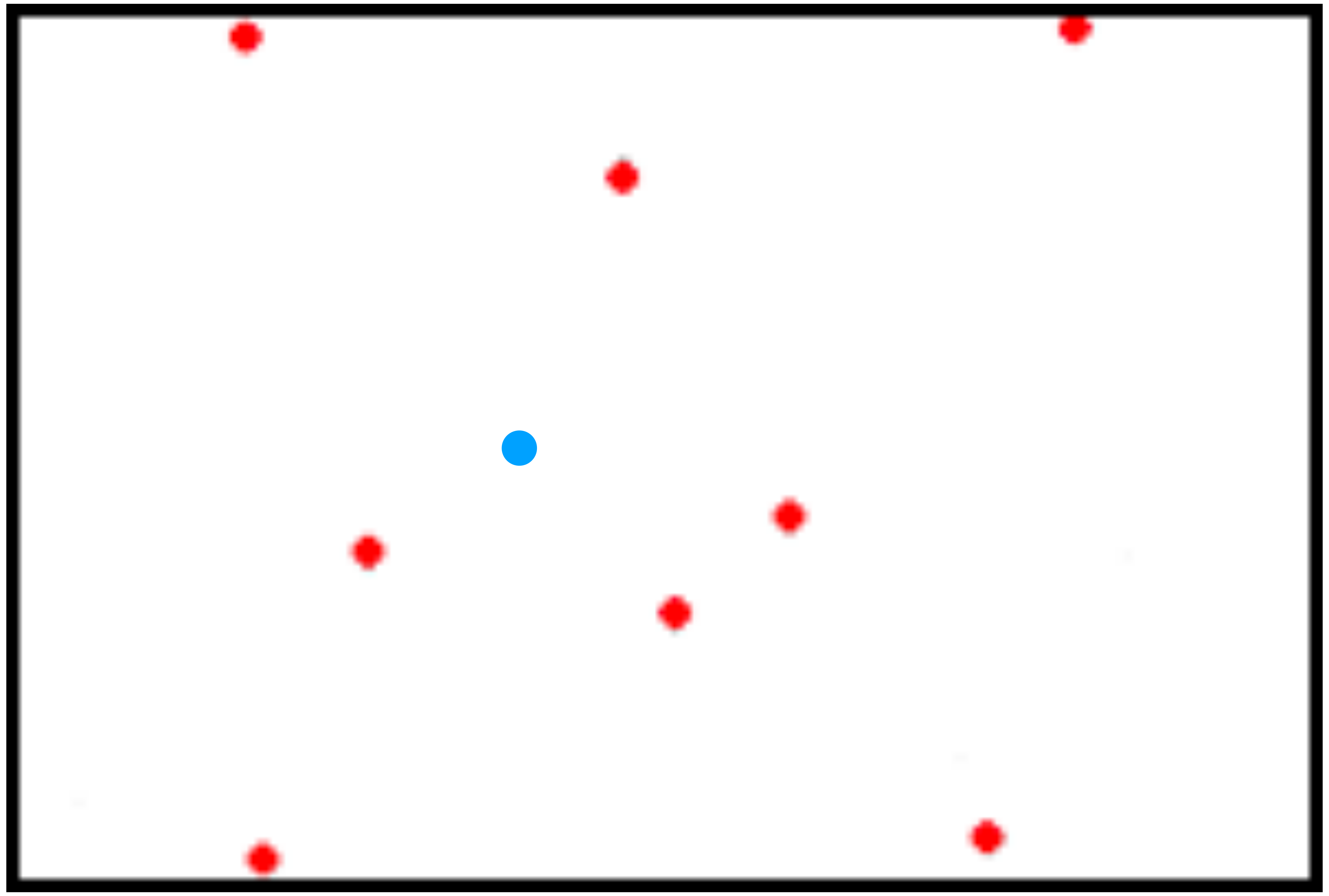
最近接郵便局問題

- あなた●はどの郵便局●を使うべきか。

https://www.pasco.co.jp/recommend/word/word048/

最近接郵便局問題

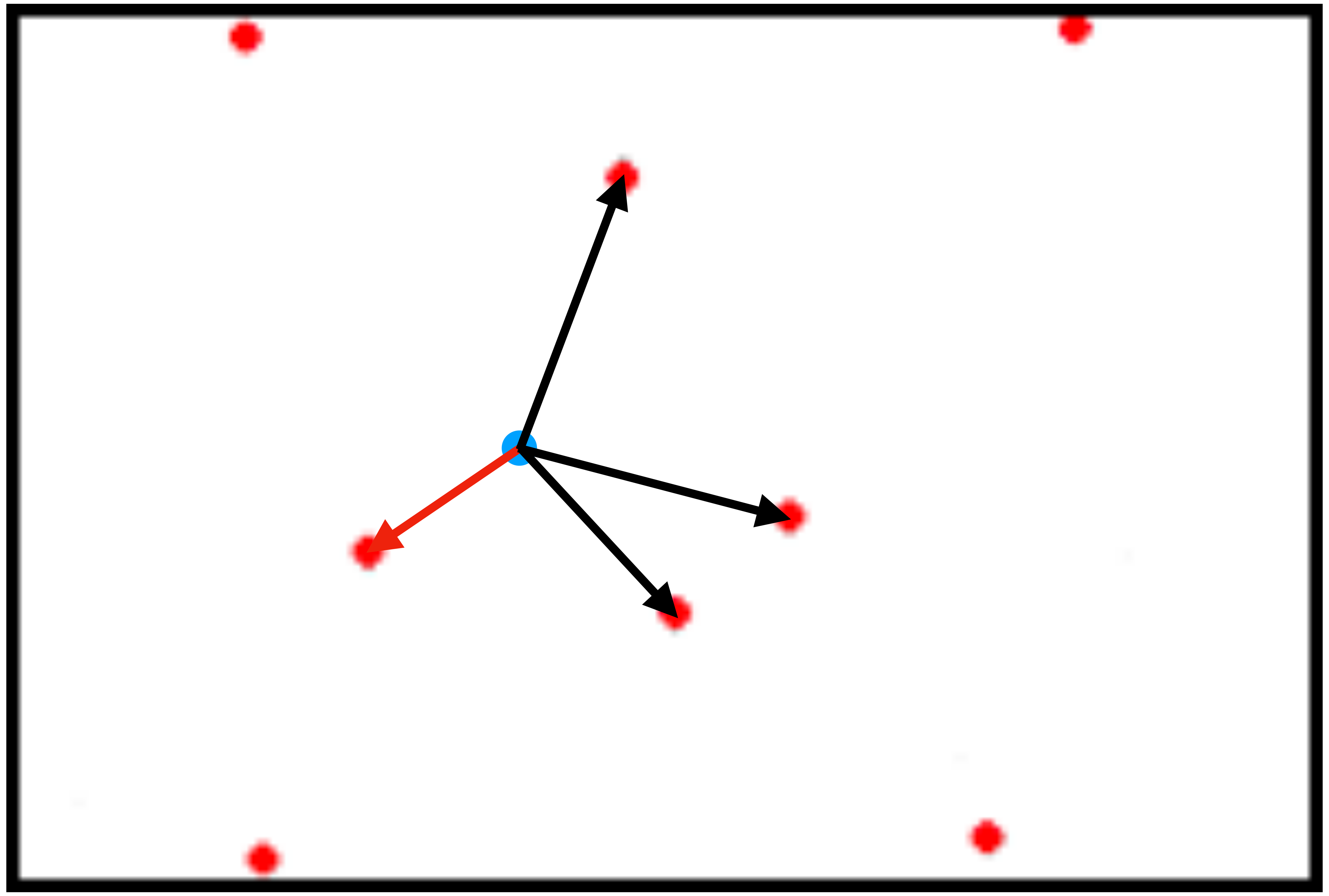
- あなた●はどの郵便局●を使うべきか。



https://www.pasco.co.jp/recommend/word/word048/

最近接郵便局問題

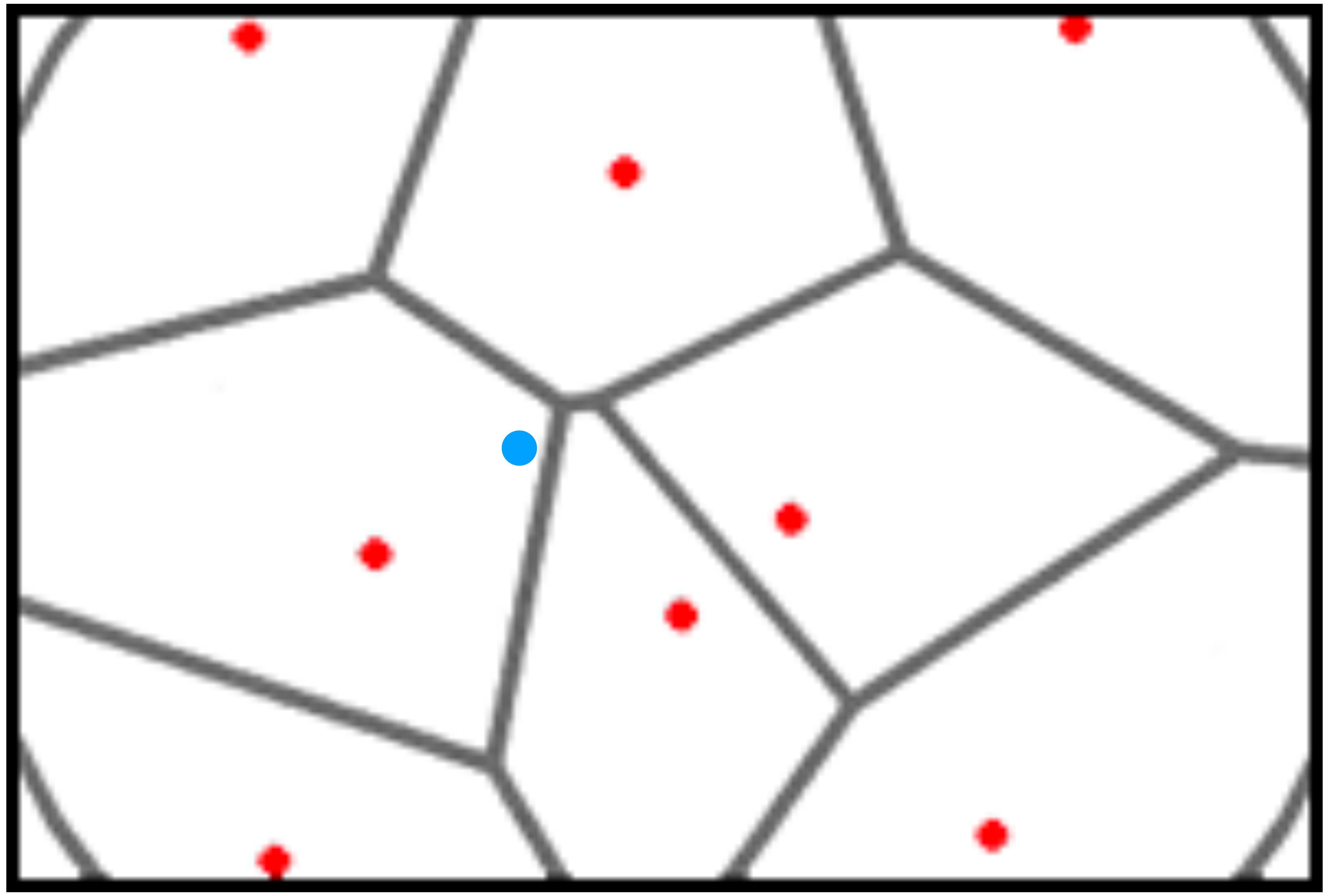
- あなた●はどの郵便局●を使うべきか。



https://www.pasco.co.jp/recommend/word/word048/

最近接郵便局問題

- あなた●はどの郵便局●を使うべきか。



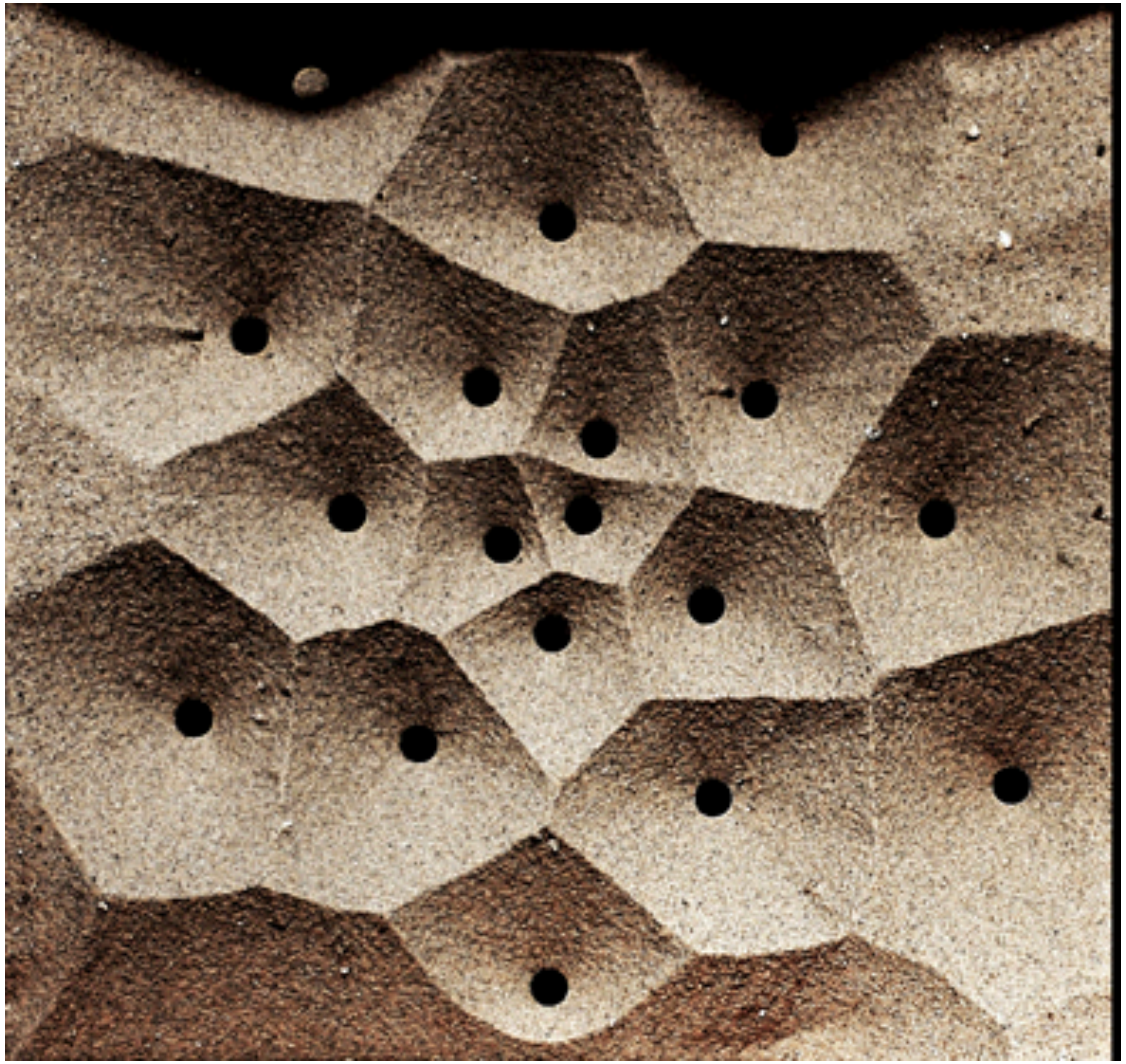
2つの●の間に二等分線(面)を引く。
空間が領域に区切られる。
各領域には1つだけ●が含まれる。
"●のテリトリー"

ボロノイ領域(ボロノイ多角形)

https://www.pasco.co.jp/recommend/word/word048/

砂+板+穴

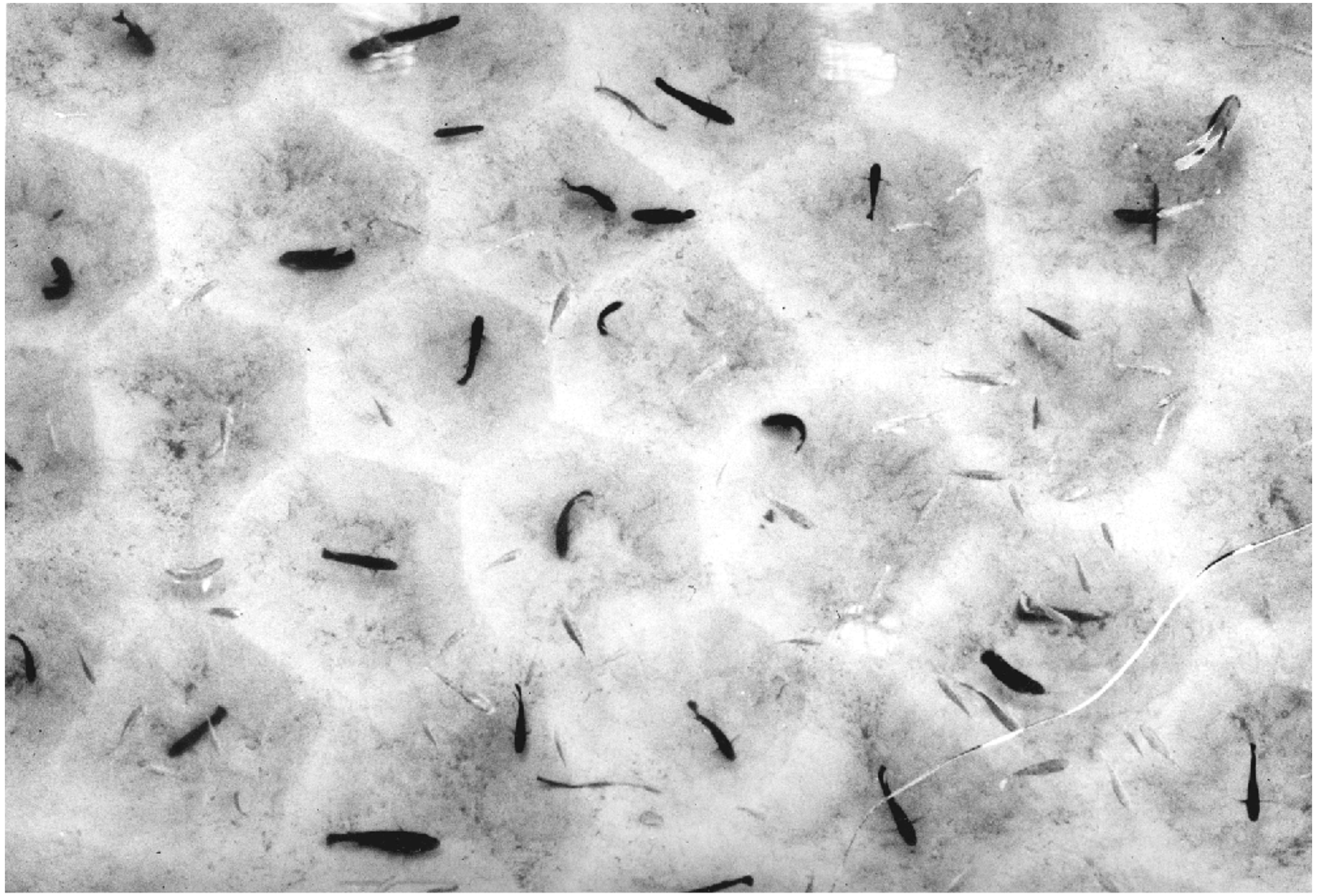
- より近い穴から砂は落ちる。
- 等距離の位置に稜線が生じる。



https://discourse.mcneel.com/t/sand-form-finding/72969

生物のテリトリー

Tilapia mossambicaの場合



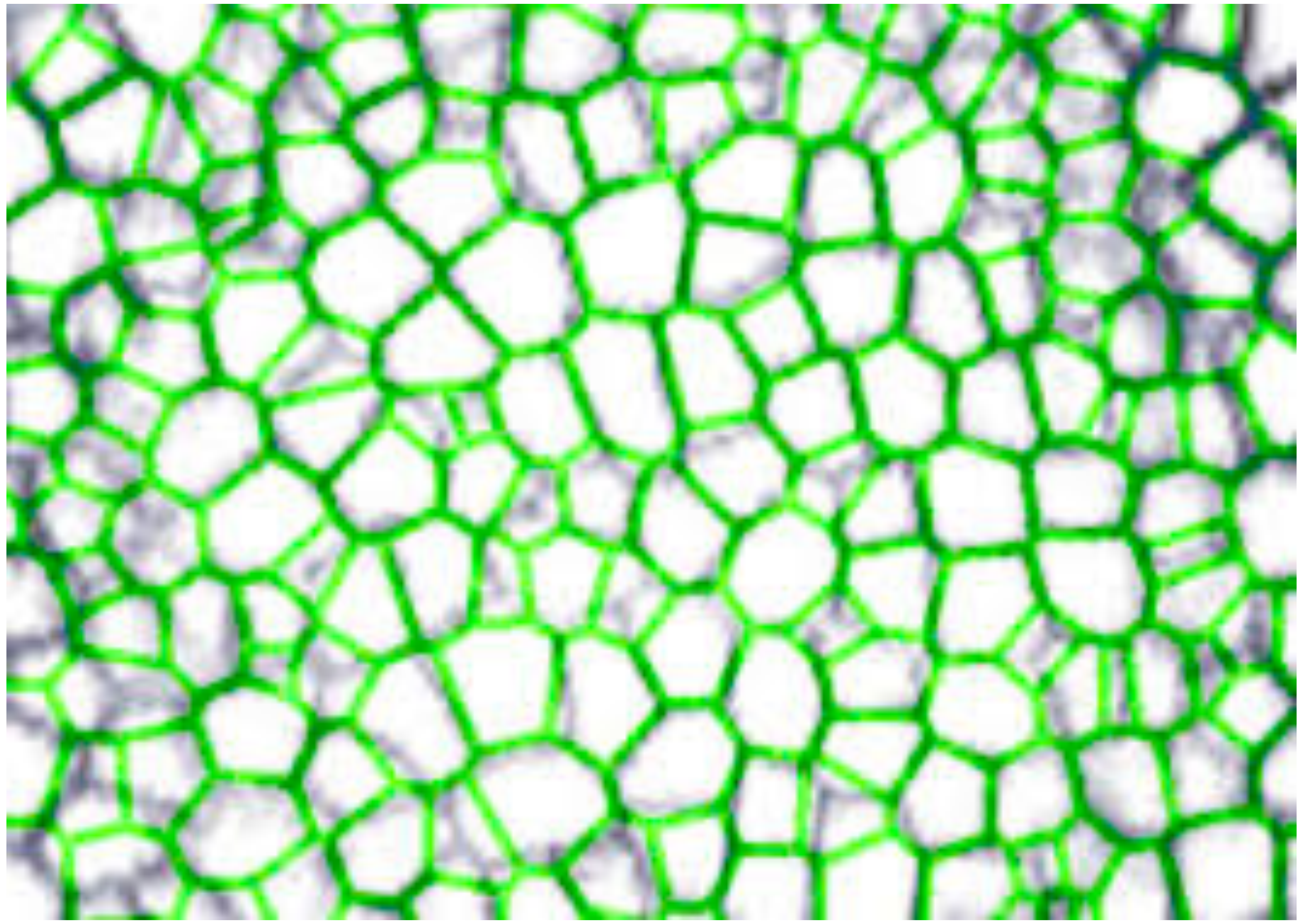
Du, Q. et al. “Centroidal Voronoi Tessellations: Applications and Algorithms.” SIAM Rev. 41 (1999): 637-676.

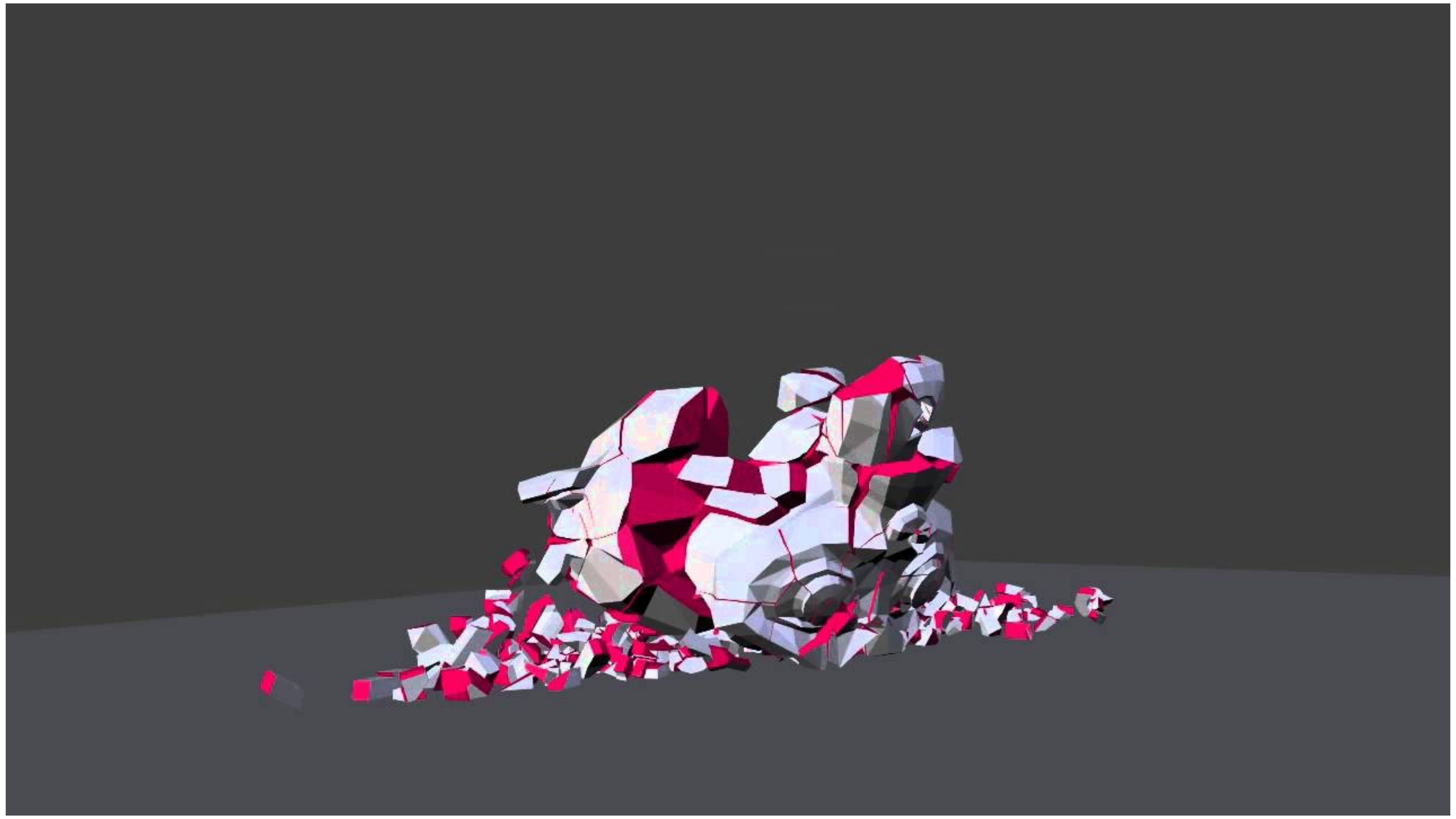
http://yomotsu.net/blog/2015/07/26/voronoi.html

トンボの翅、キリンの模様、…

3次元

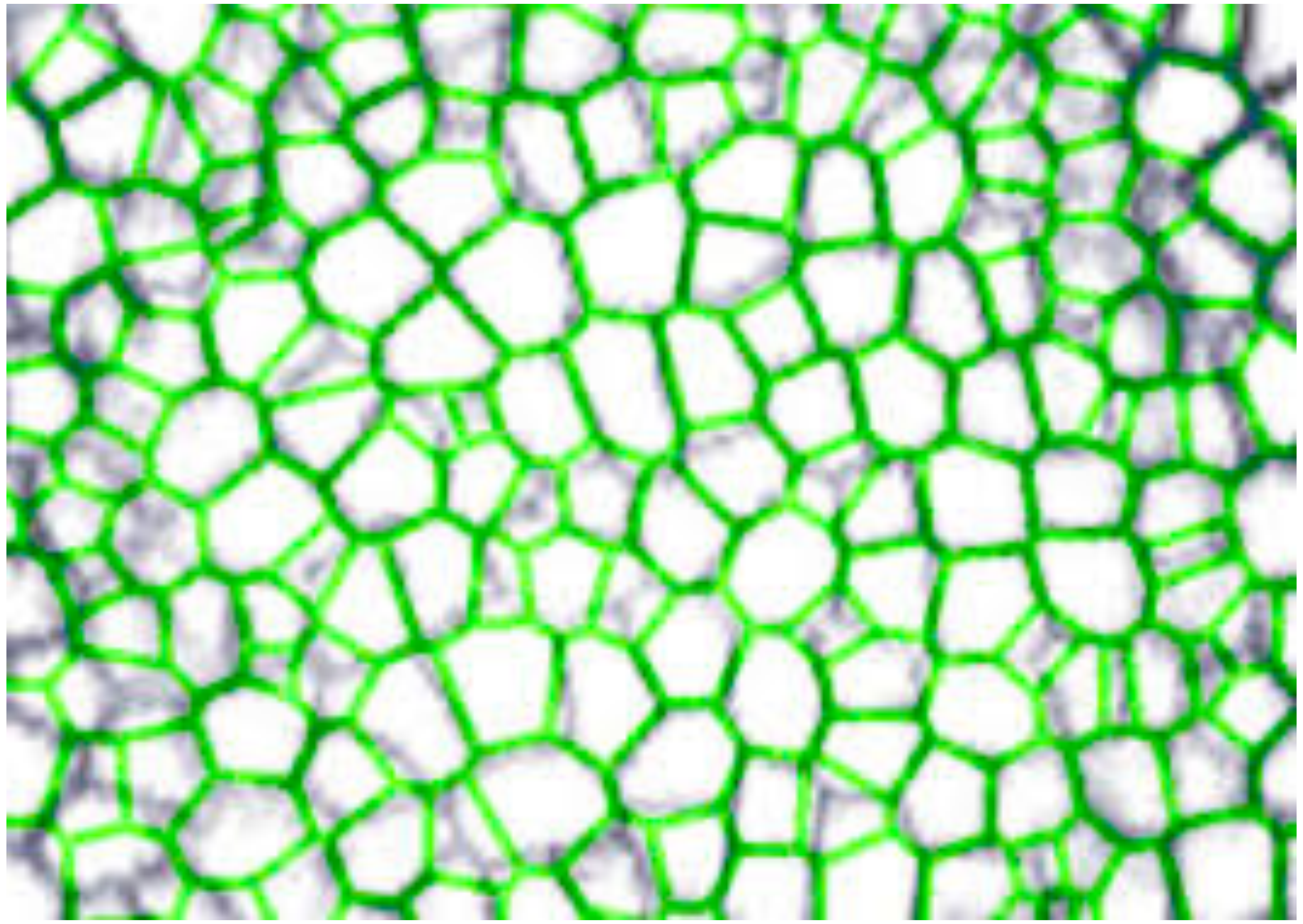
細胞、破壊のCG

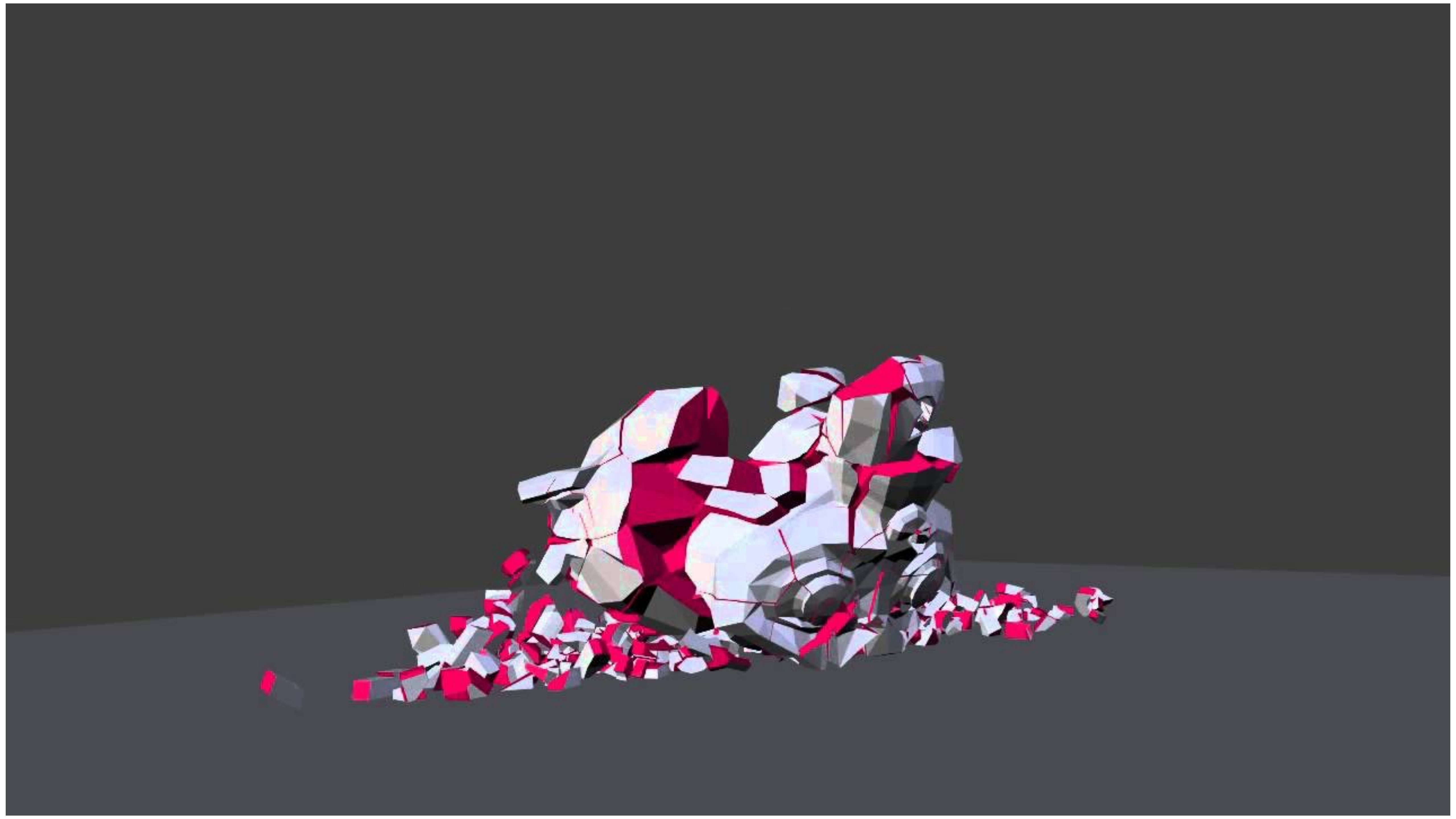




3次元

細胞、破壊のCG





点の配置の背後にある「構造」を知る

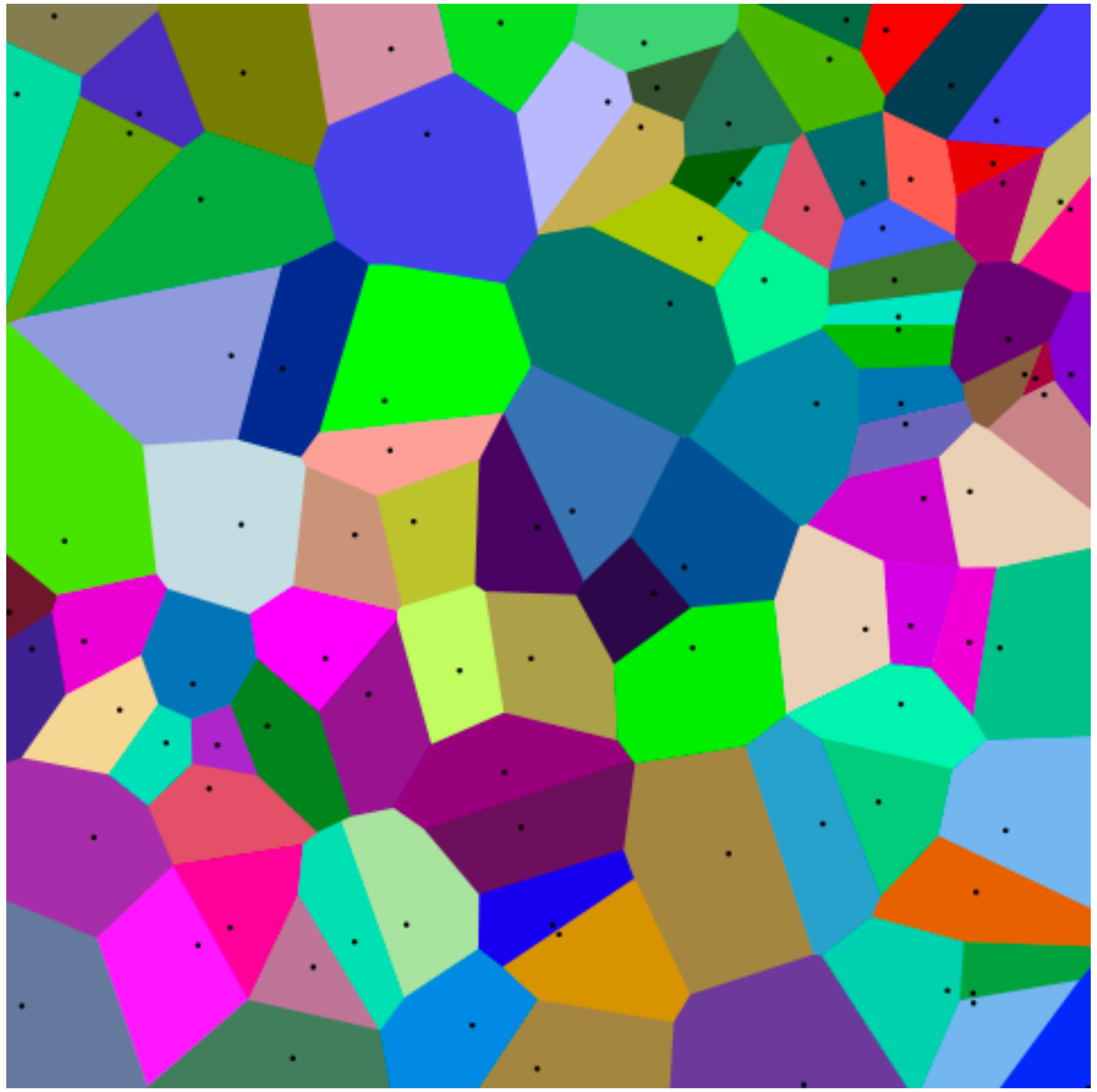
- 空間に点が配置される。
- 周期的な場合もあれば周期的でない場合もある。(結晶 vs 液体)
- 結合がある場合もあればない場合もある。(有機物 vs vdW結晶)

- 点の配置だけから、空間配置の特徴を知る→ボロノイ分割

ボロノイ図

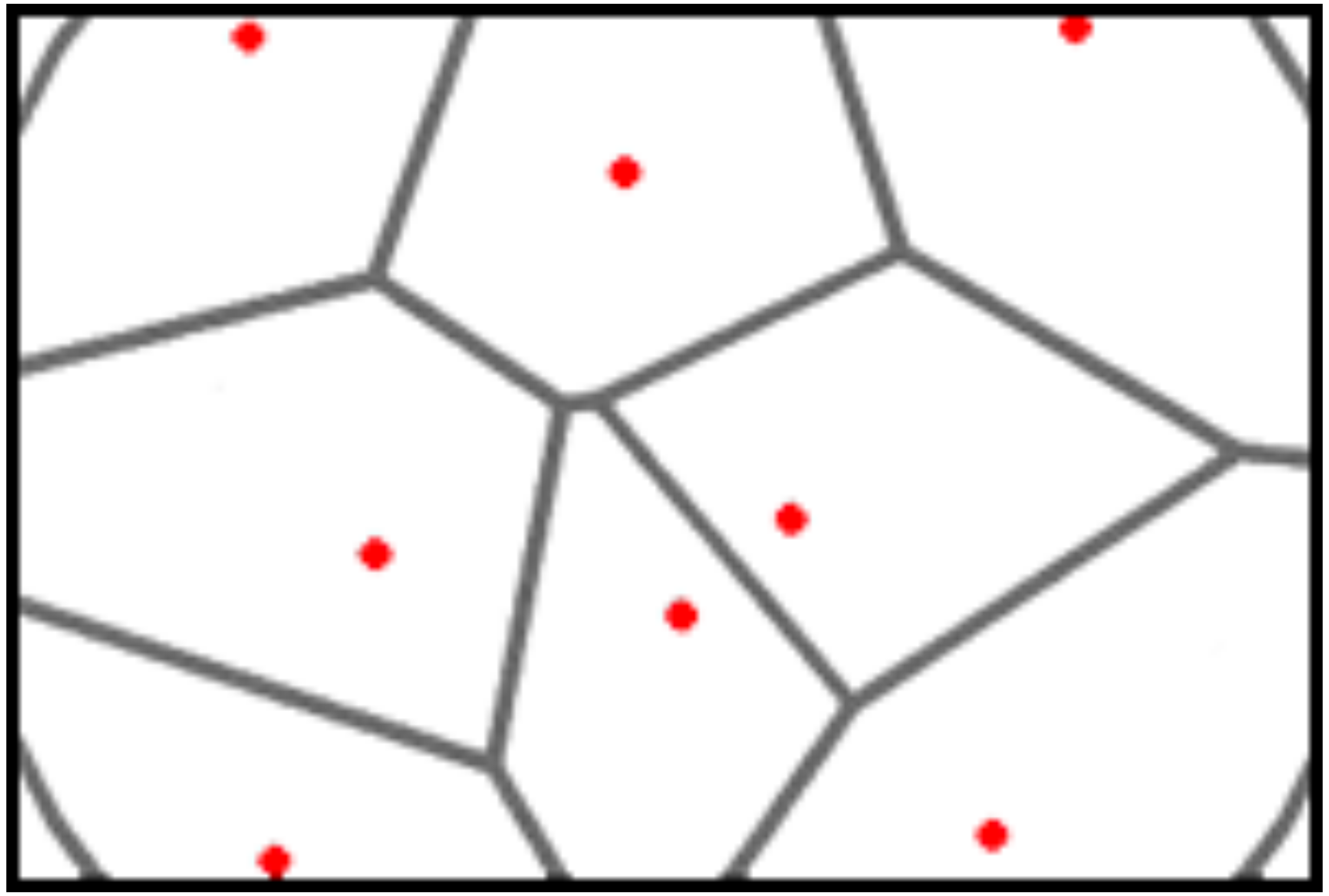
Voronoi diagram

- 「ボロノイ図（ボロノイず、英: Voronoi diagram）は、ある距離空間上の任意の位置に配置された複数個の点（母点）に対して、同一距離空間上の他の点がどの母点に近いかによって領域分けされた図のことである。」



ボロノイ図の特徴

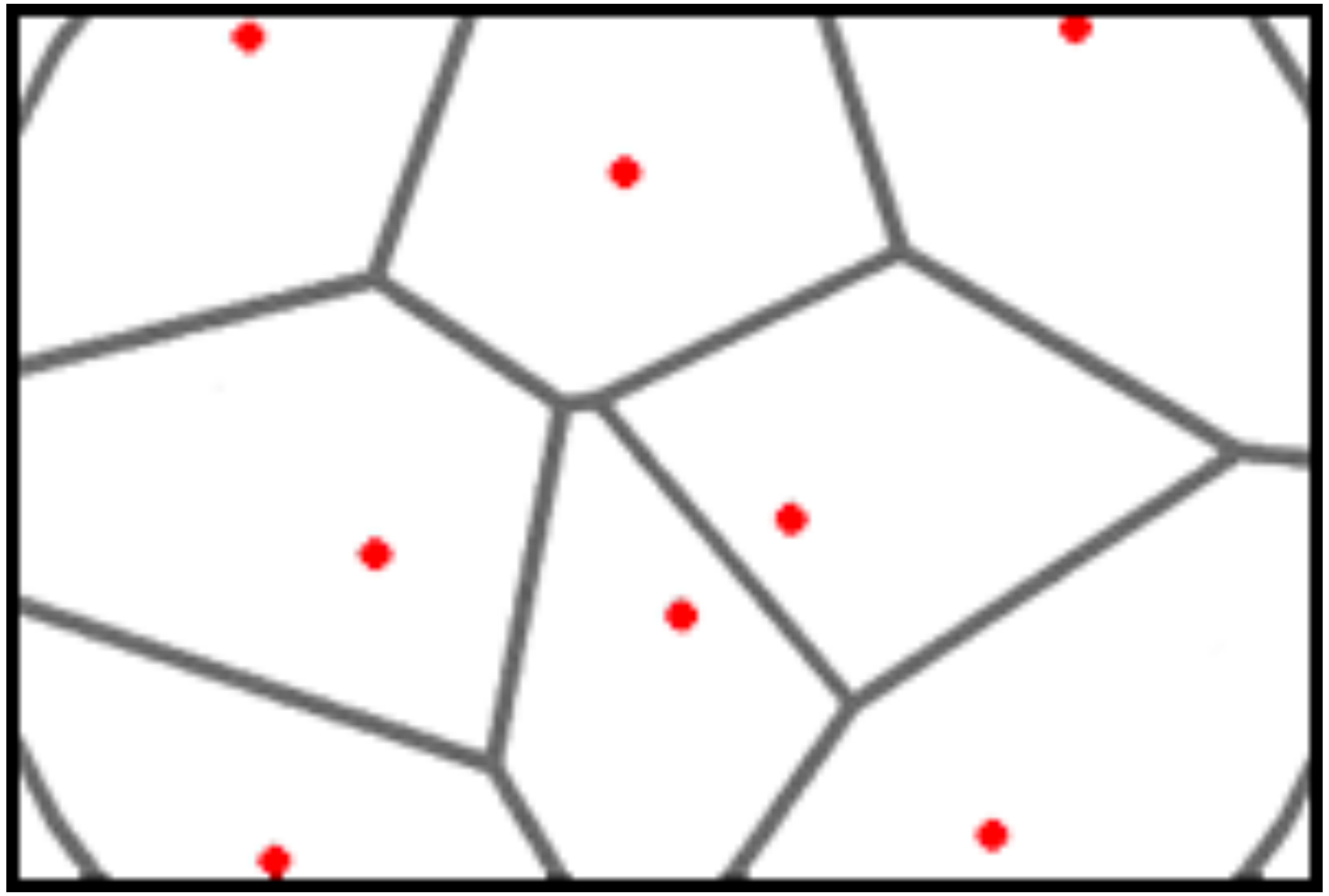
Voronoi diagram



ボロノイ図の特徴

Voronoi diagram

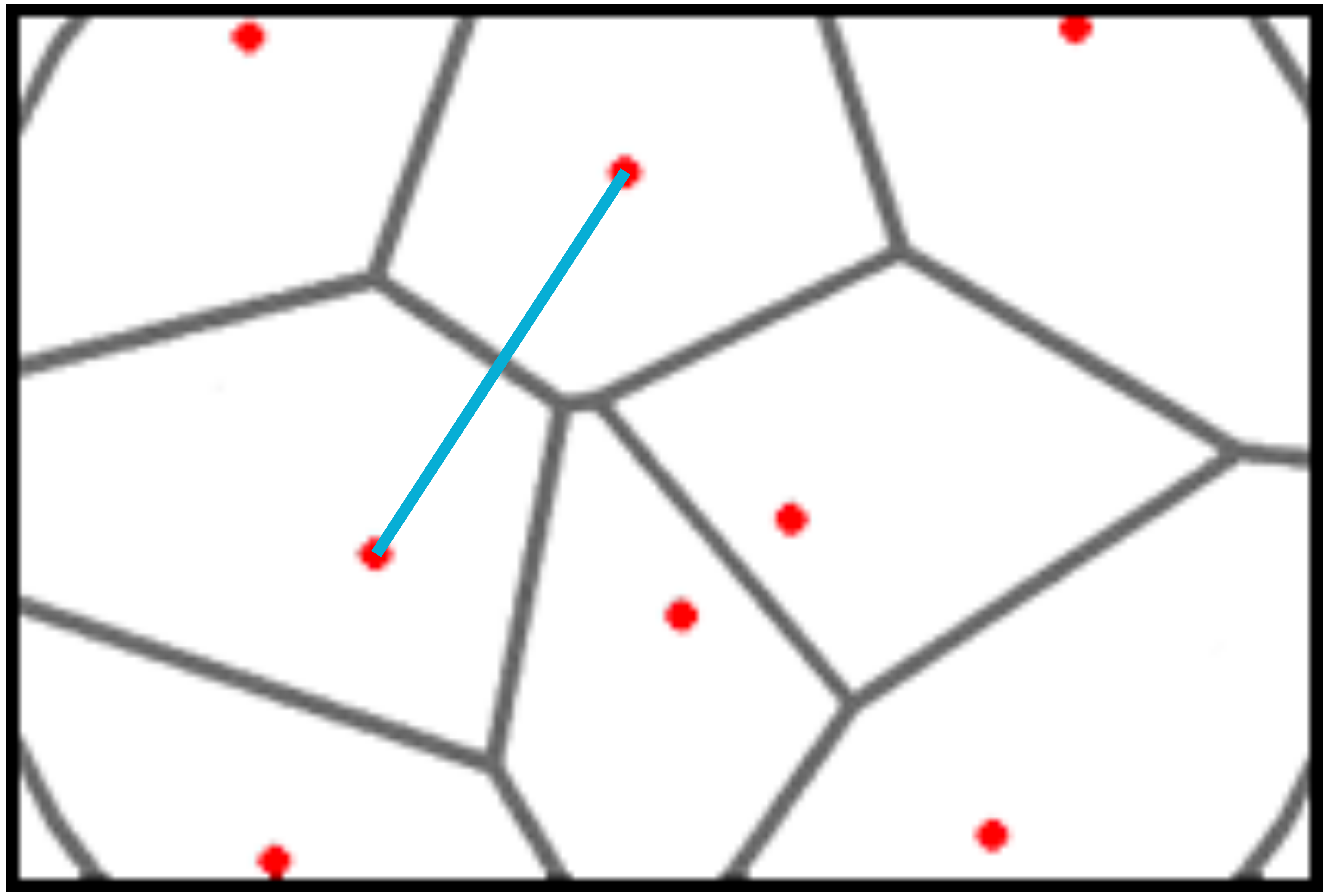
- 点の集合によって規定される。



ボロノイ図の特徴

Voronoi diagram

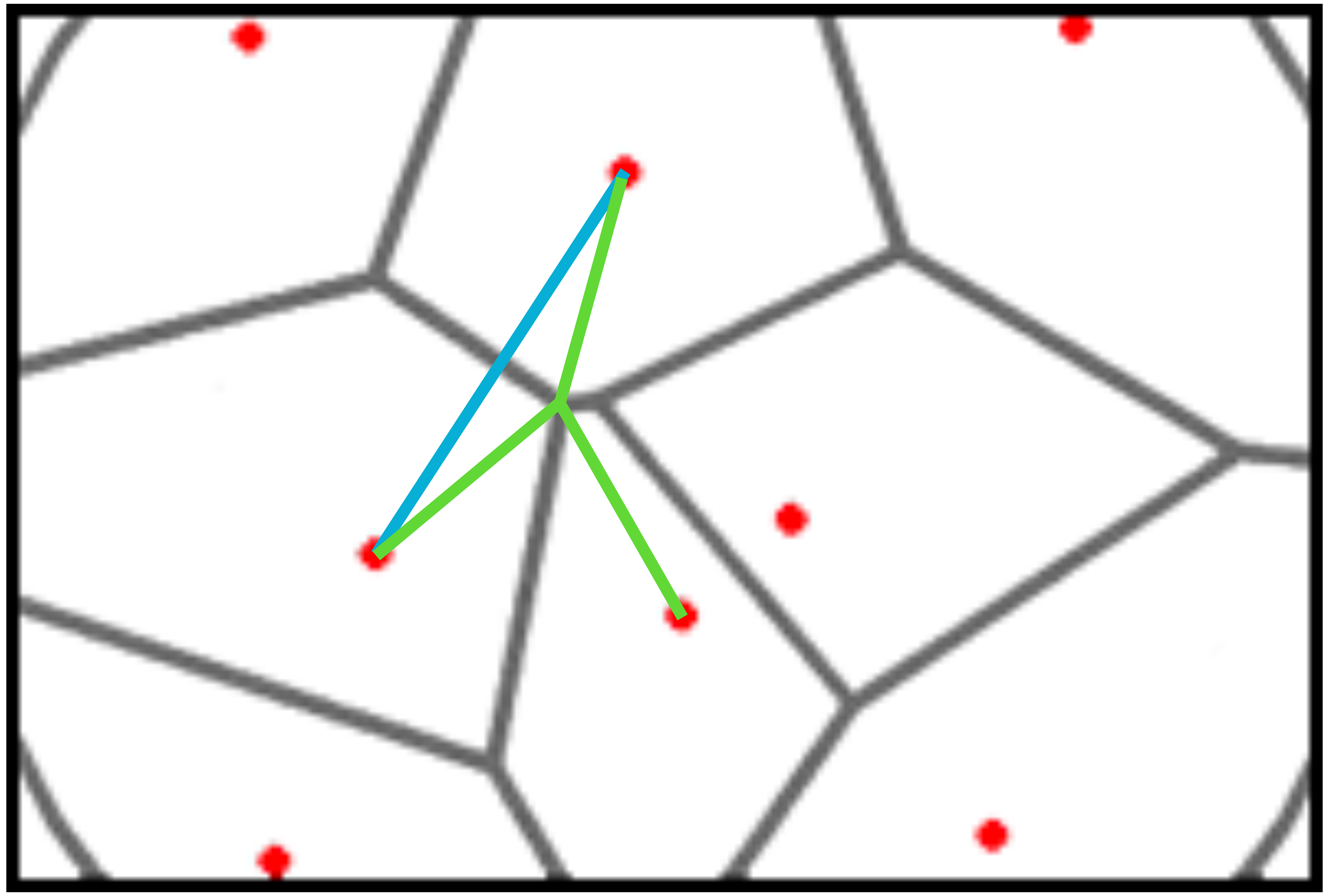
- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」



ボロノイ図の特徴

Voronoi diagram

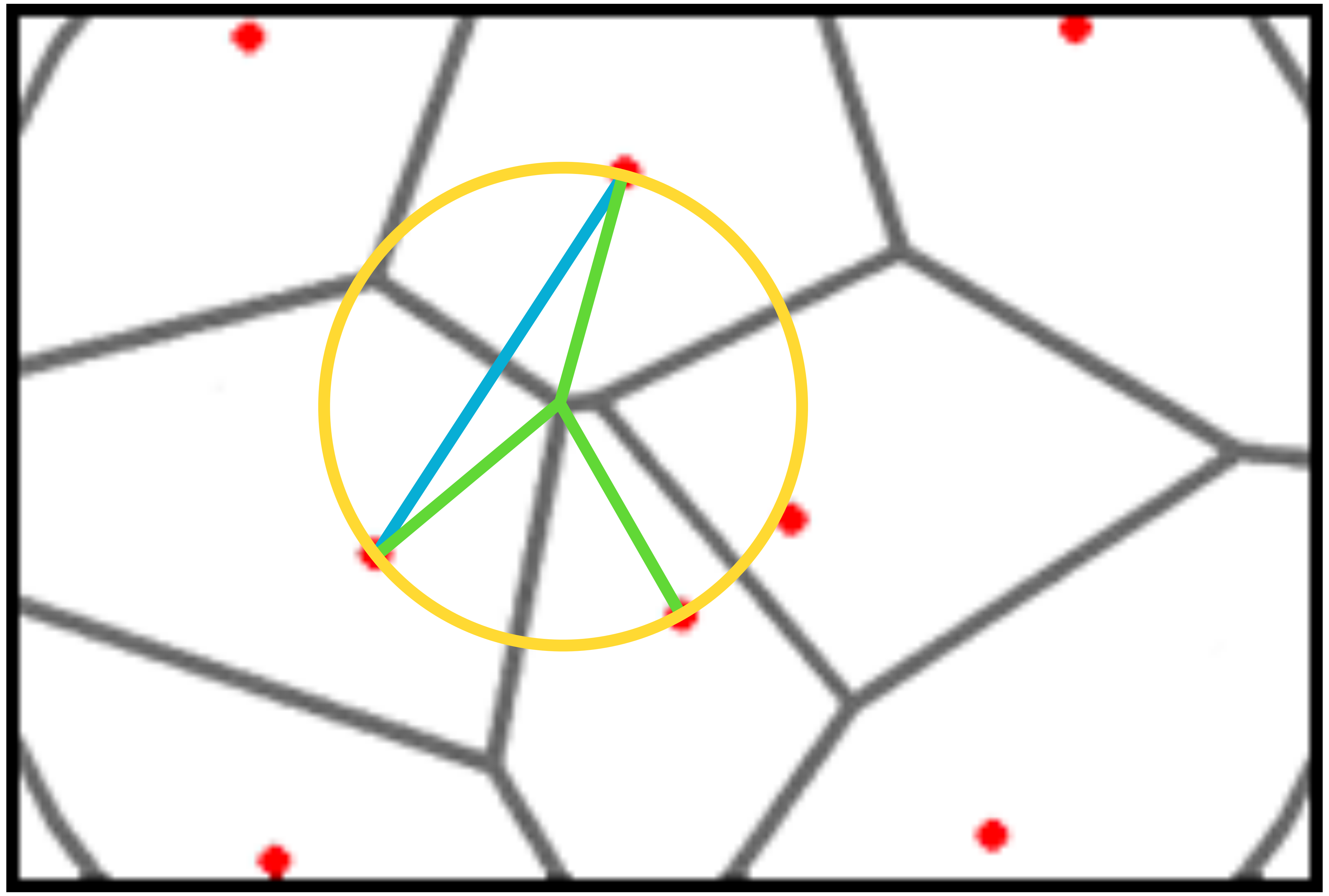
- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」
- 角(頂点)は、3つの点から等距離



ボロノイ図の特徴

Voronoi diagram

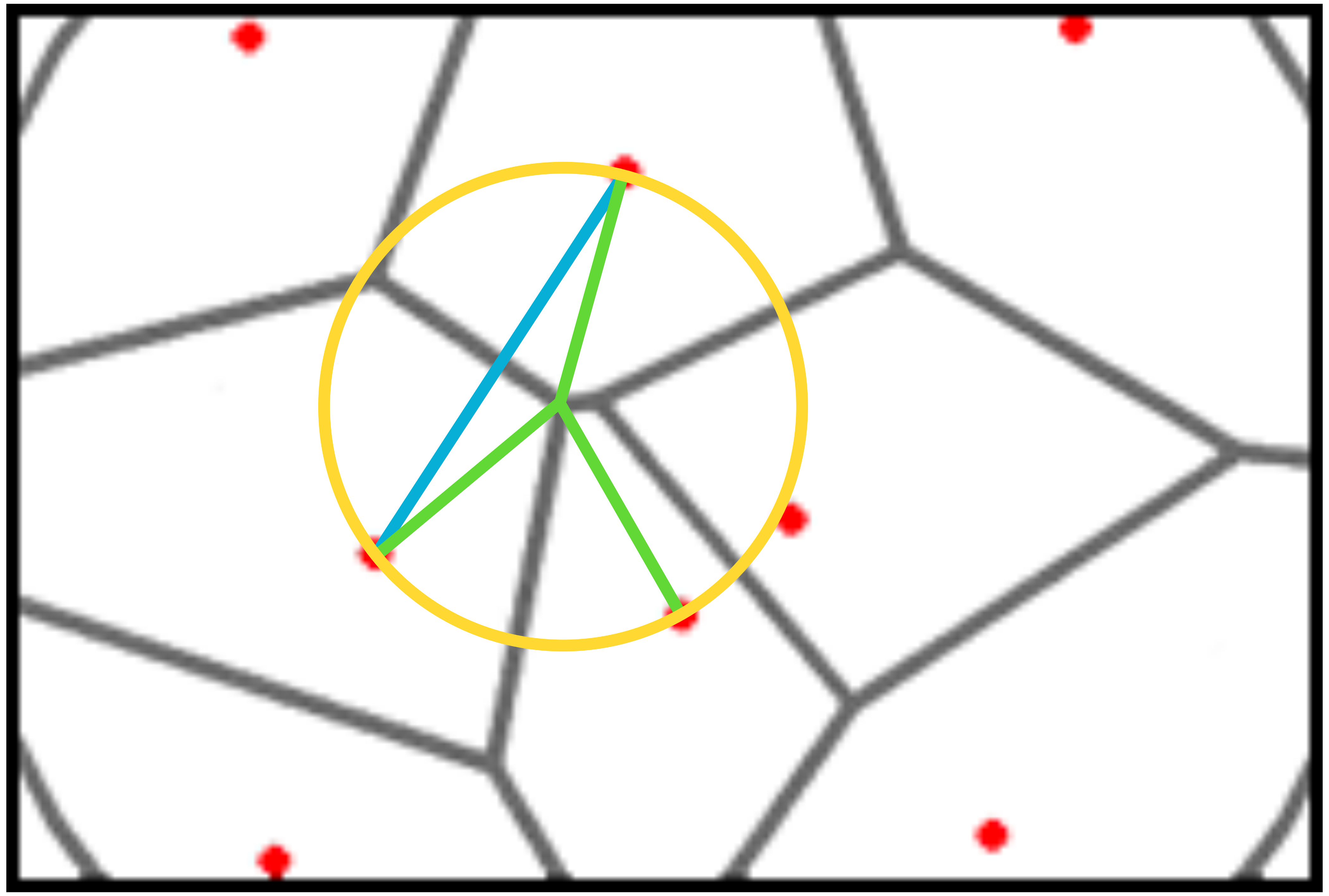
- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」
- 角(頂点)は、3つの点から等距離
- 頂点を中心として、3つの点を通る円が描ける。



ボロノイ図の特徴

Voronoi diagram

- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」
- 角(頂点)は、3つの点から等距離
- 頂点を中心として、3つの点を通る
  円が描ける。
- <u>円のなかには、ほかの点は含まれない。</u>

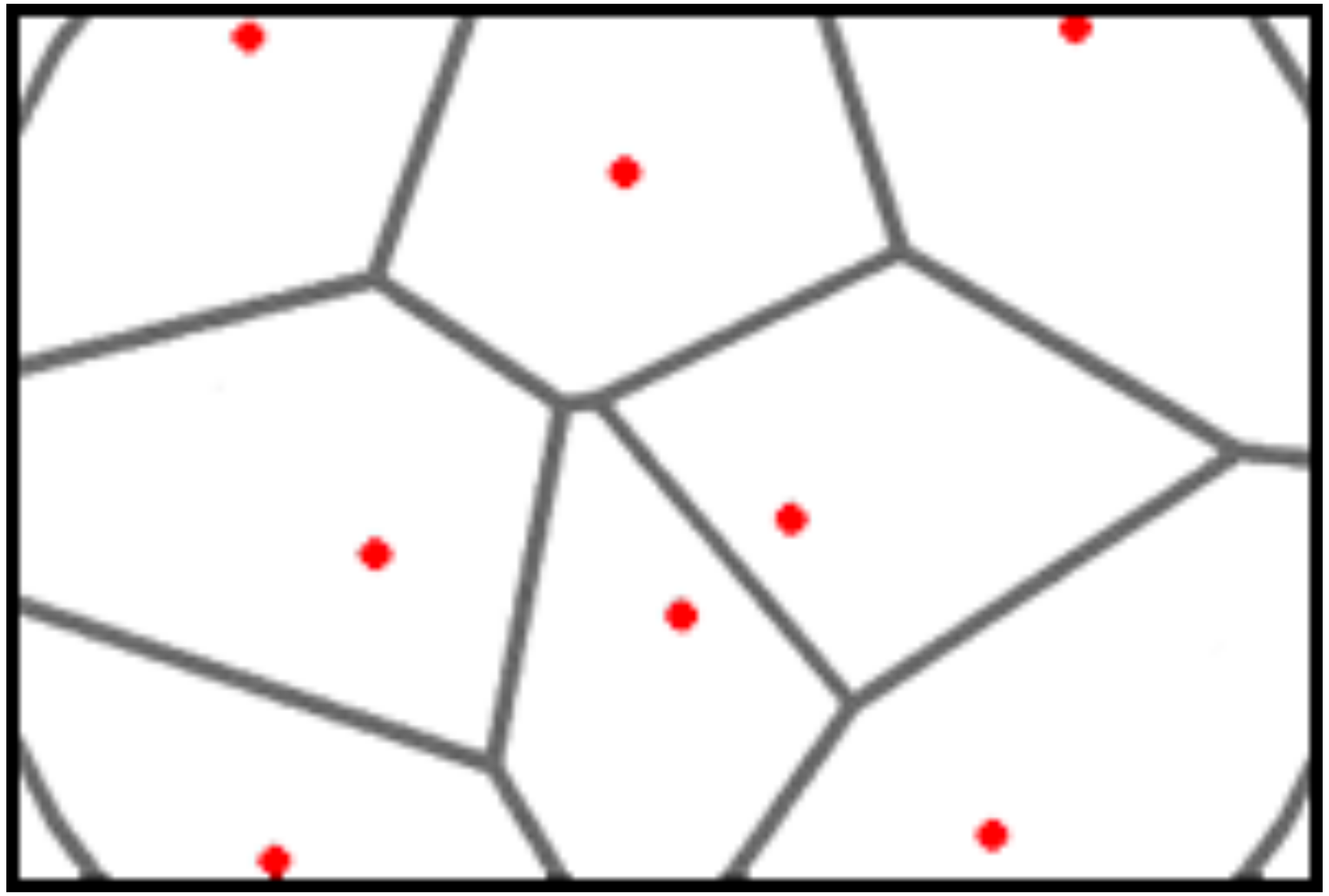


練習問題1
Exercise 1

- ボロノイ図を描く。

ボロノイ図の特徴

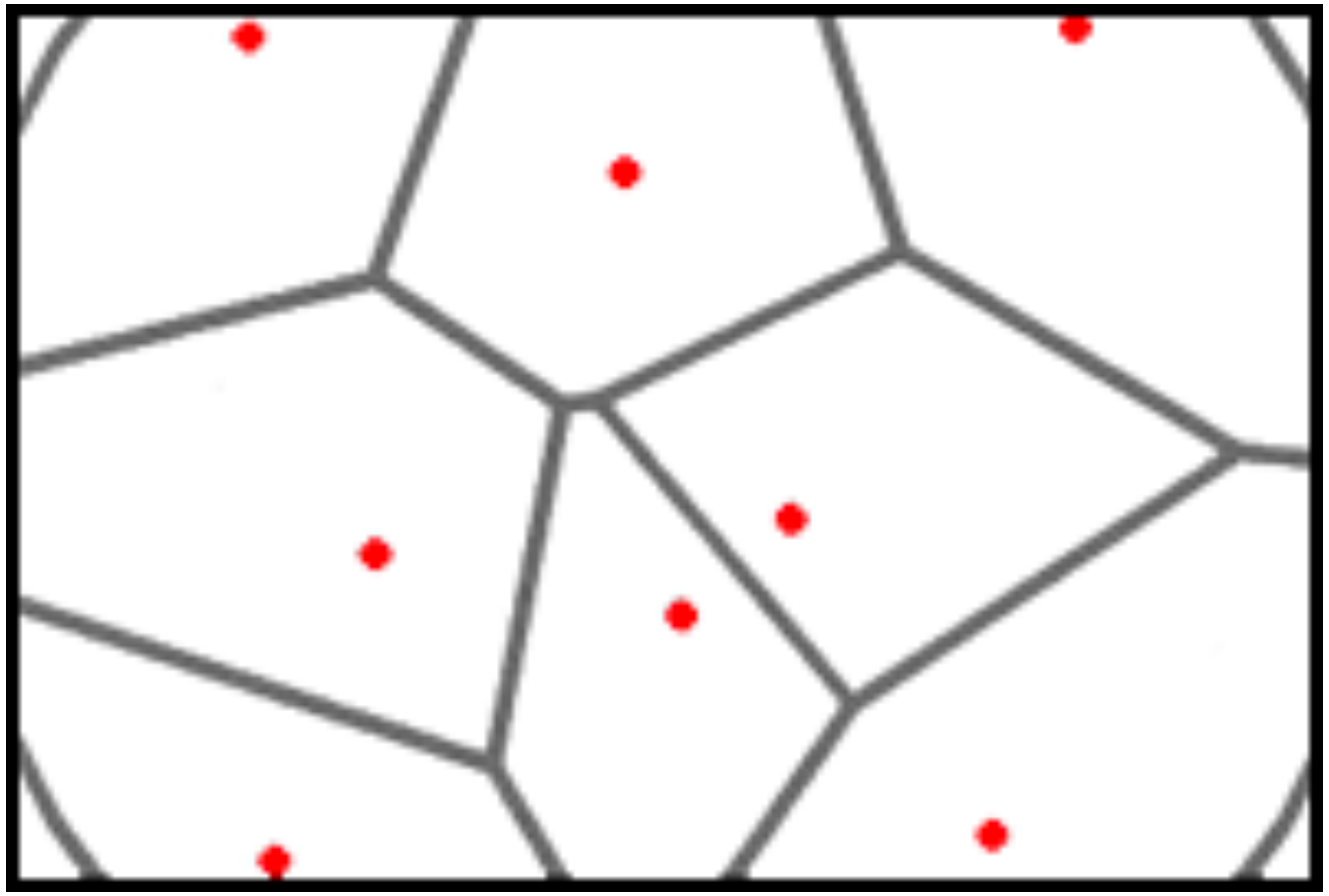
Voronoi diagram



ボロノイ図の特徴

Voronoi diagram

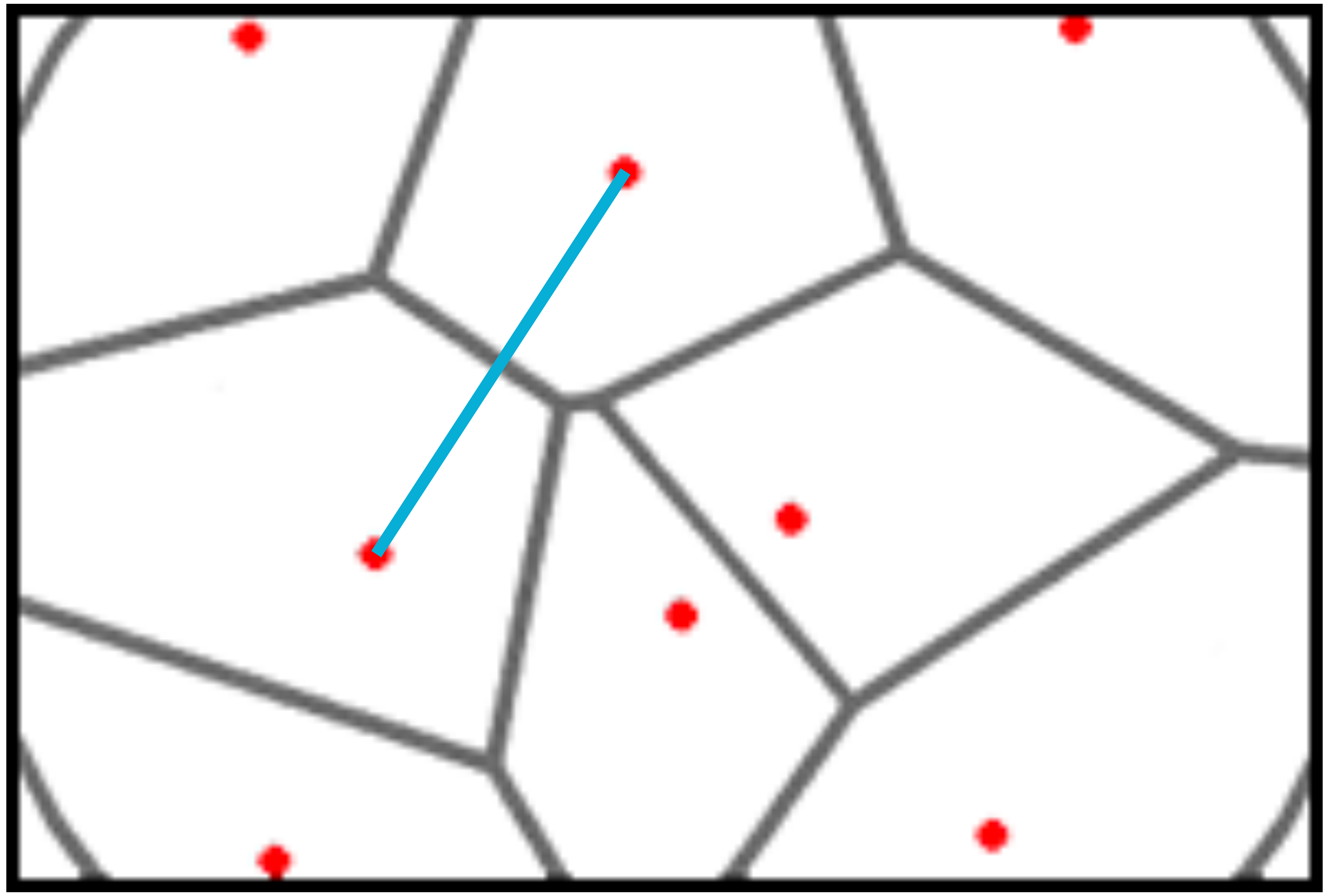
- 点の集合によって規定される。



ボロノイ図の特徴

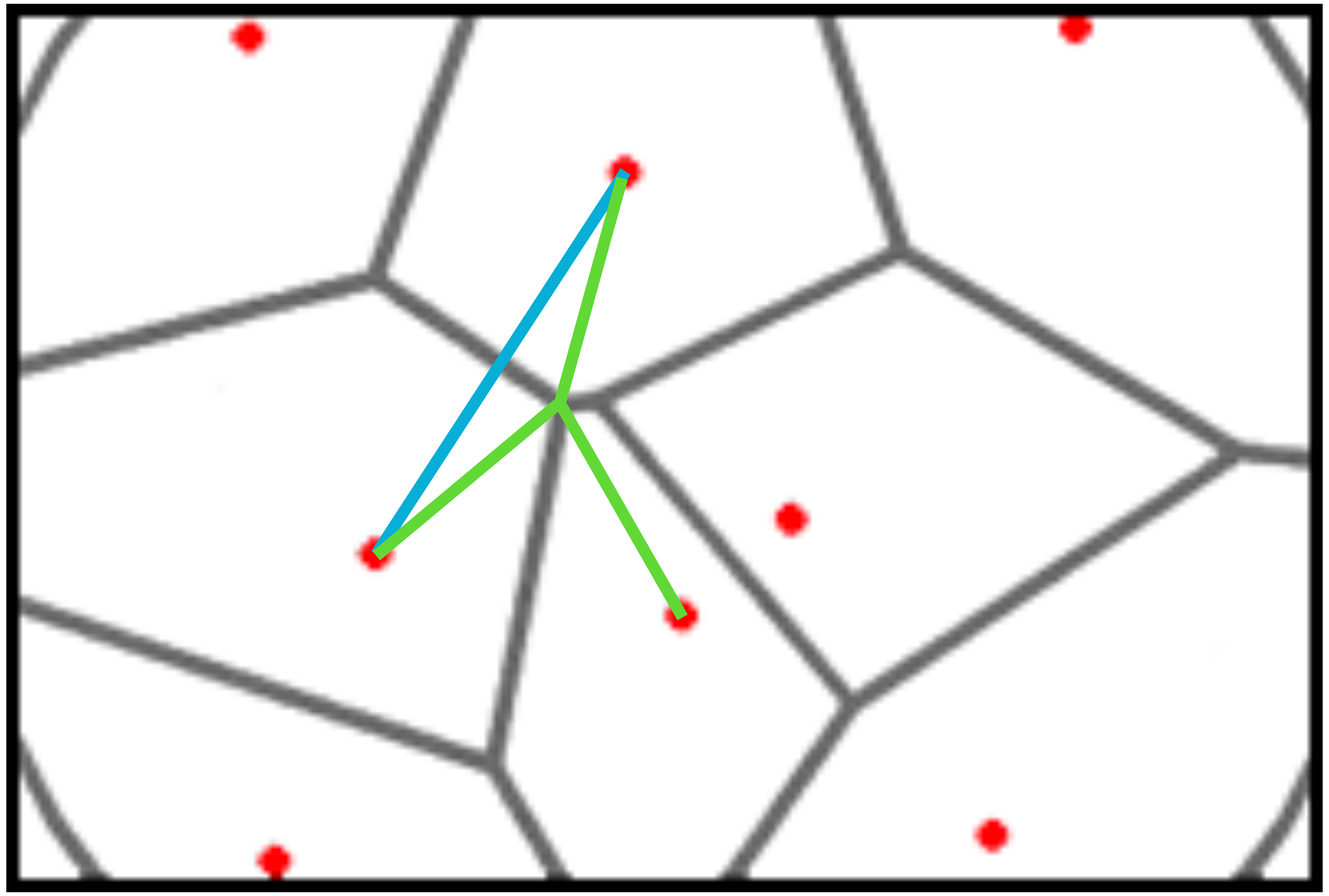
Voronoi diagram

- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」



ボロノイ図の特徴
Voronoi diagram

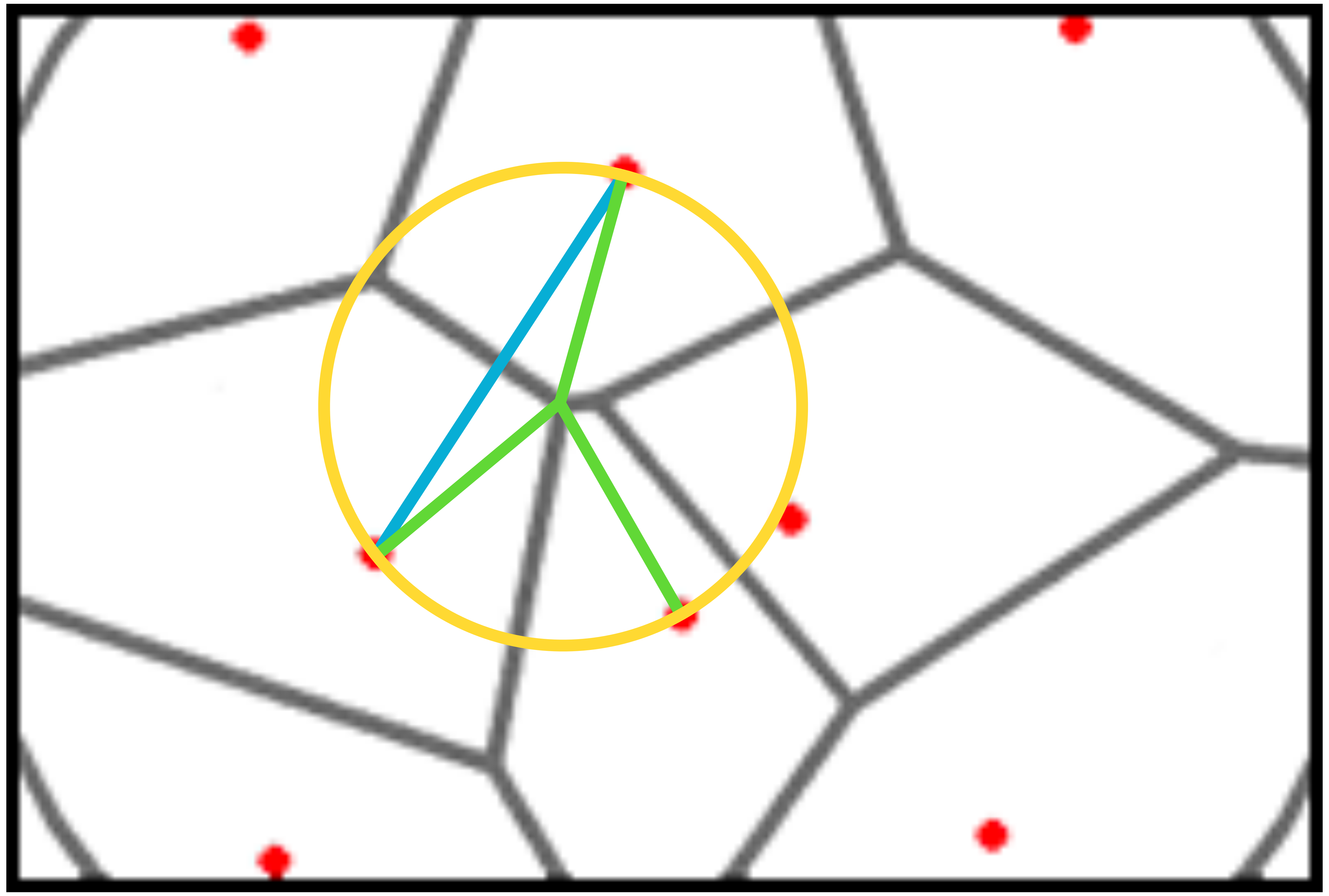
- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」
- 角(頂点)は、3つの点から等距離



ボロノイ図の特徴

Voronoi diagram

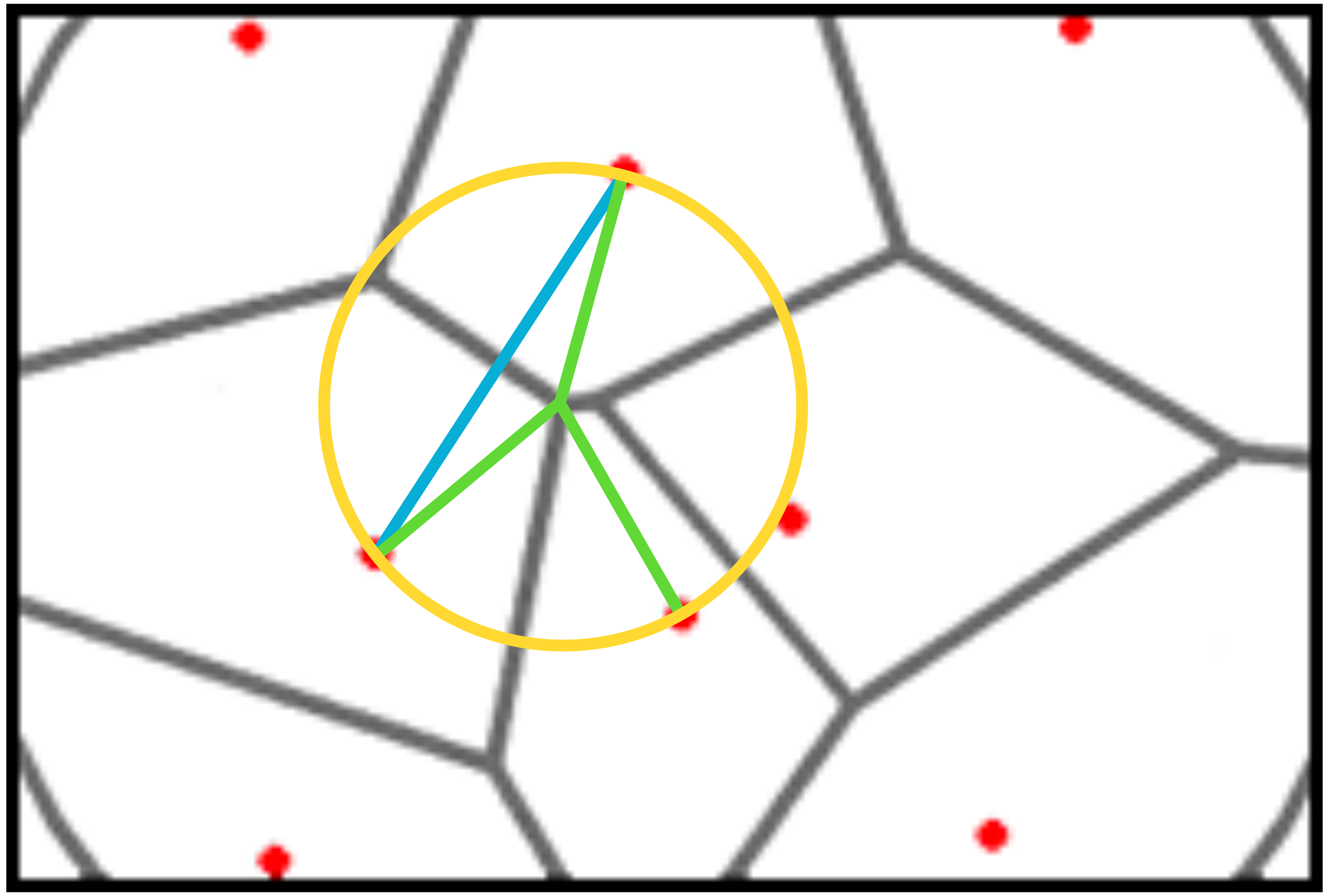
- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」
- 角(頂点)は、3つの点から等距離
- 頂点を中心として、3つの点を通る円が描ける。



ボロノイ図の特徴

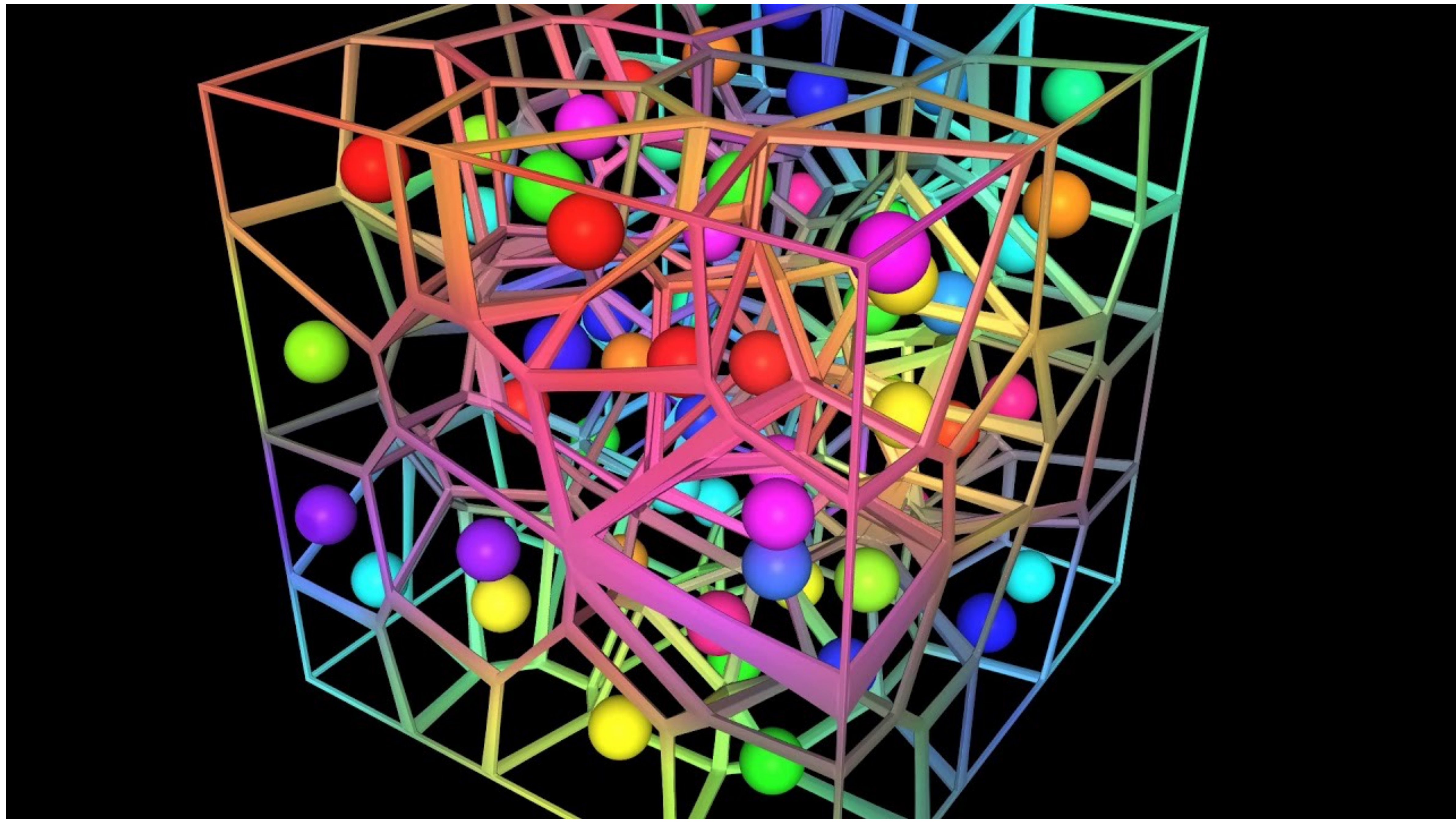
Voronoi diagram

- 点の集合によって規定される。
- 境界線(辺)は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分線」
- 角(頂点)は、3つの点から等距離
- 頂点を中心として、3つの点を通る
  円が描ける。
- <u>円のなかには、ほかの点は含まれない。</u>



ボロノイ図の特徴 (3次元)

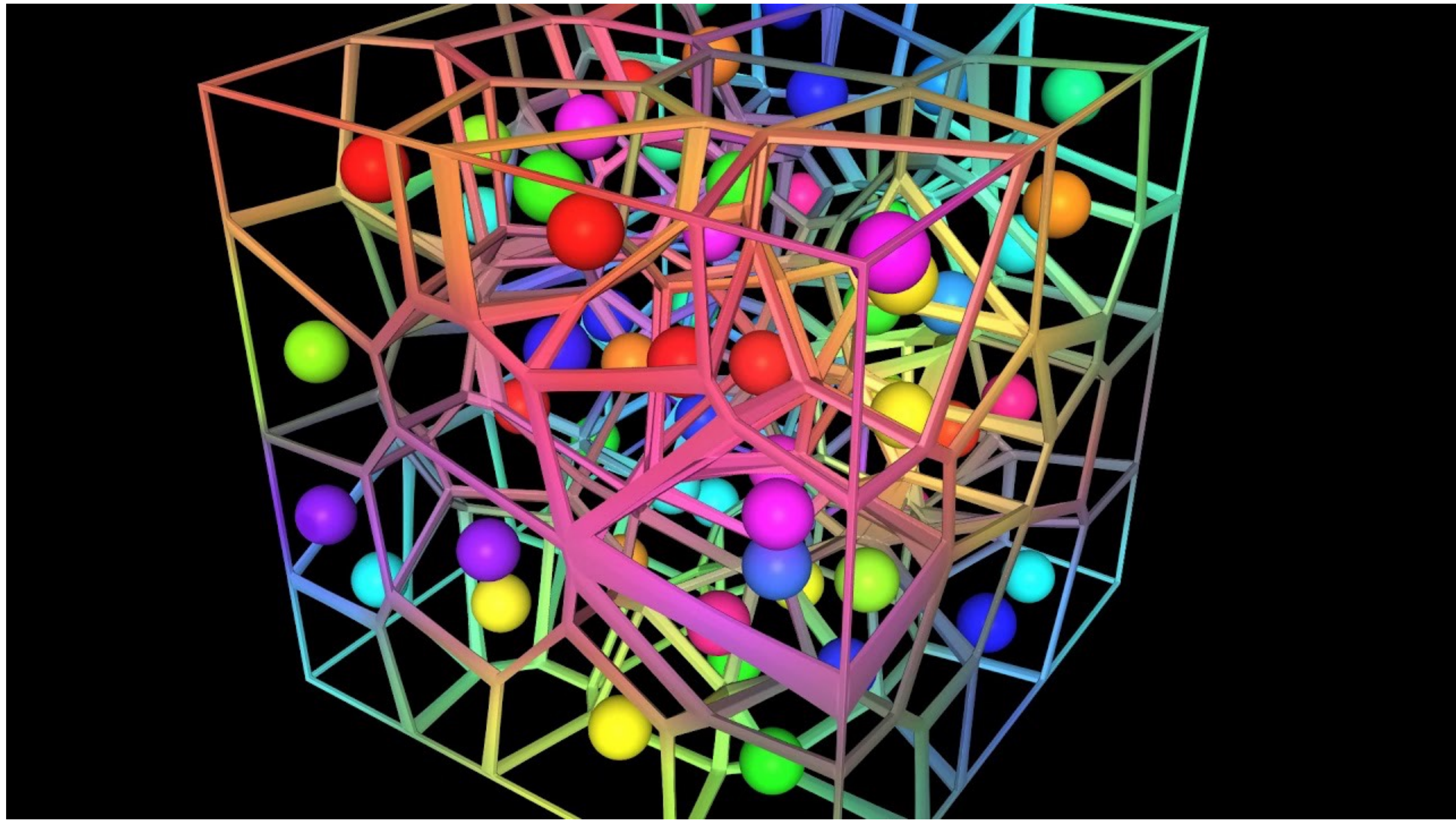
Voronoi diagram



https://www.youtube.com/watch?v=d9y9EZSYJbw

ボロノイ図の特徴 (3次元)
Voronoi diagram

- 点の集合によって規定される。

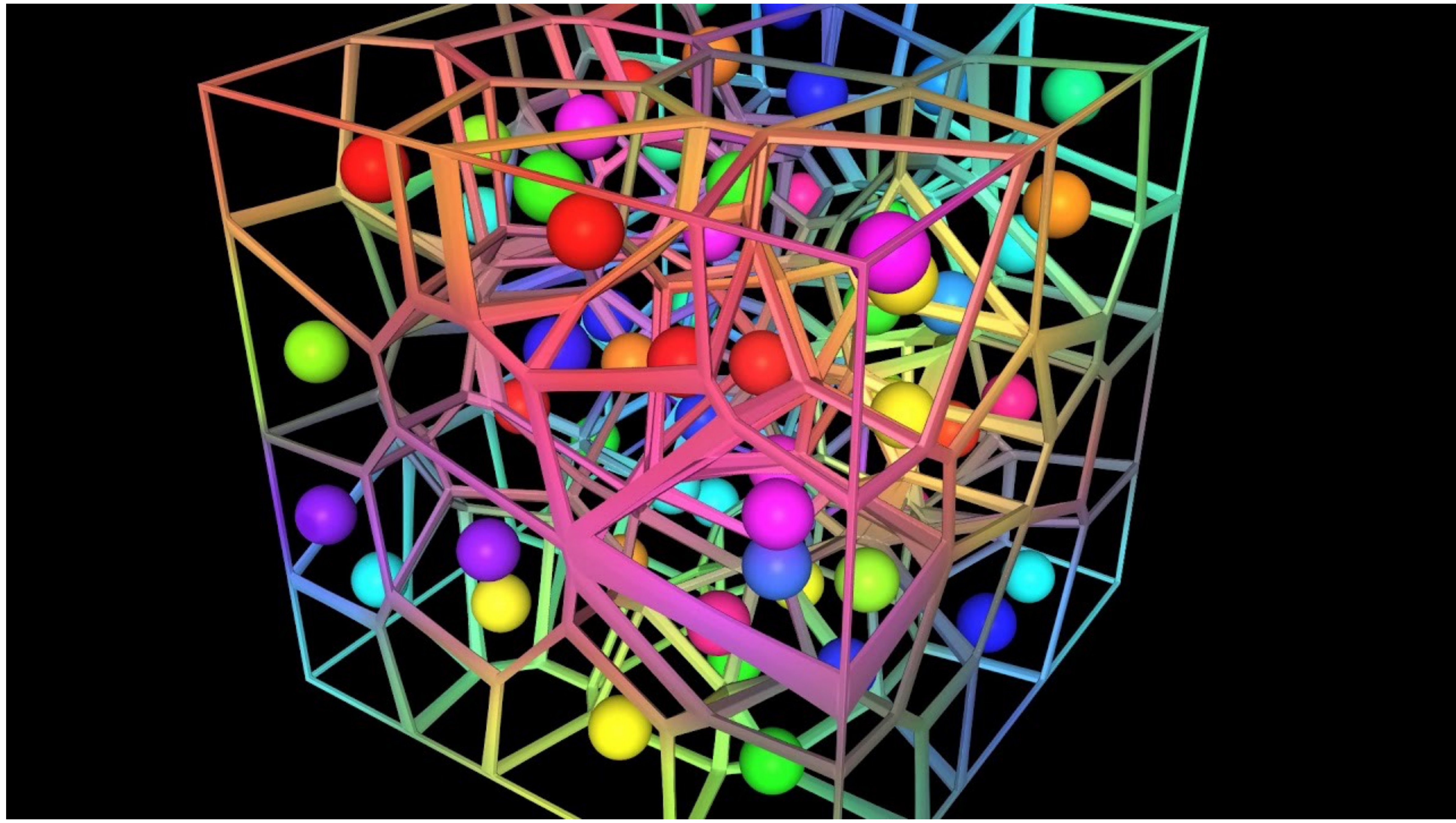


https://www.youtube.com/watch?v=d9y9EZSYJbw

ボロノイ図の特徴 (3次元)

Voronoi diagram

- 点の集合によって規定される。
- 境界**面**は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分**面**」

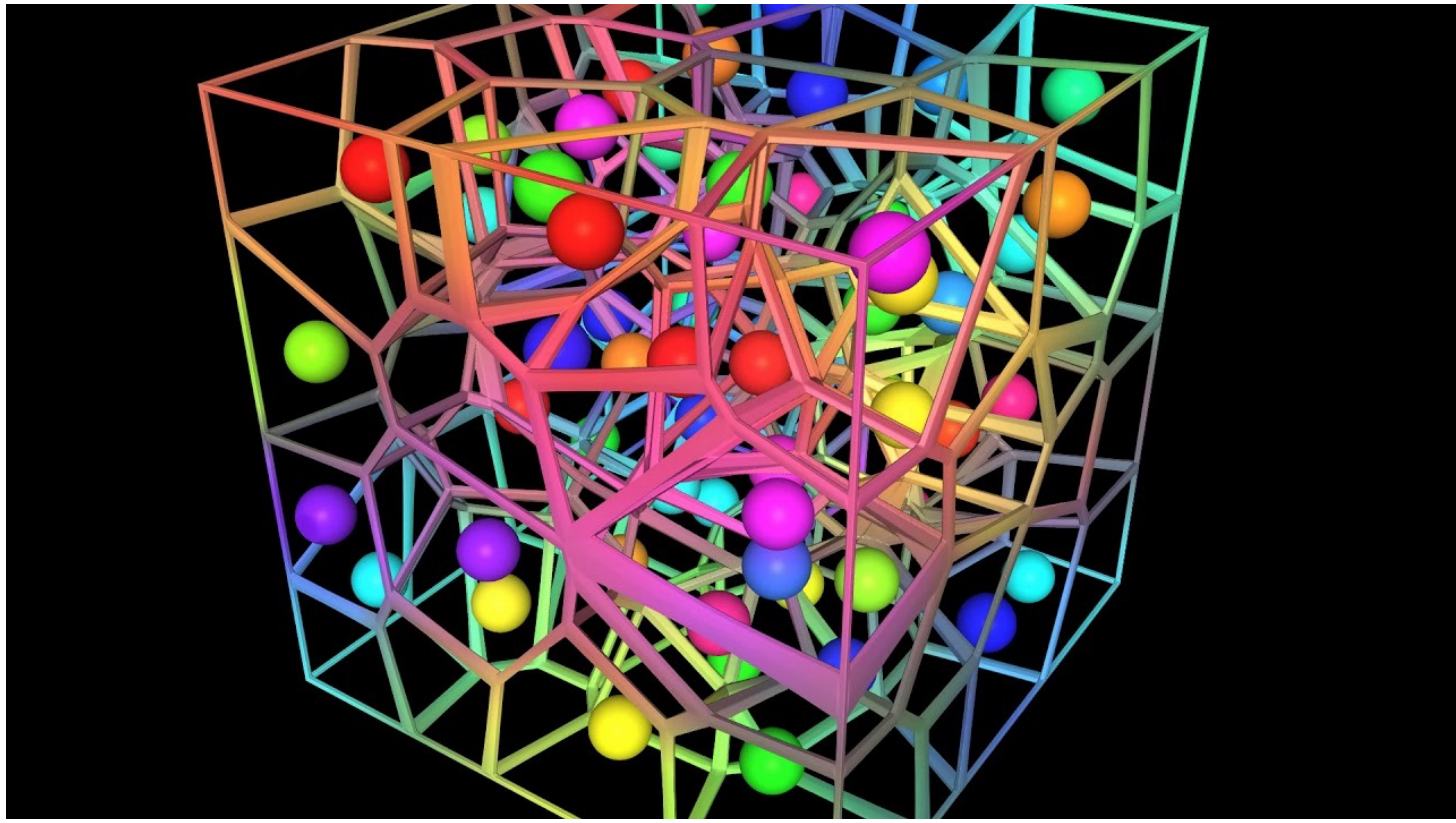


https://www.youtube.com/watch?v=d9y9EZSYJbw

ボロノイ図の特徴 (3次元)

Voronoi diagram

- 点の集合によって規定される。
- 境界**面**は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分**面**」
- 角(頂点)は、**4**つの点から等距離

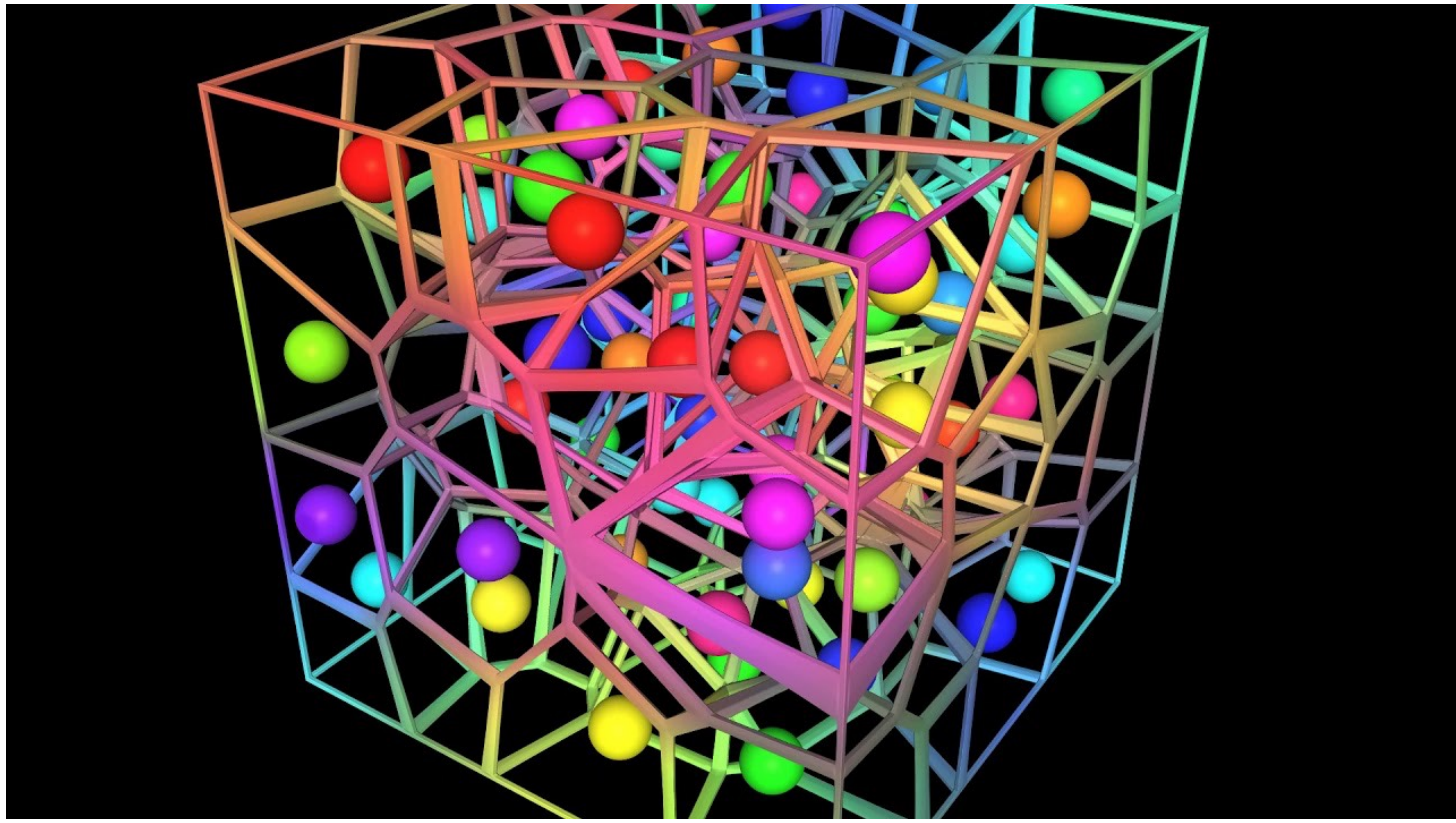


https://www.youtube.com/watch?v=d9y9EZSYJbw

ボロノイ図の特徴 (3次元)

Voronoi diagram

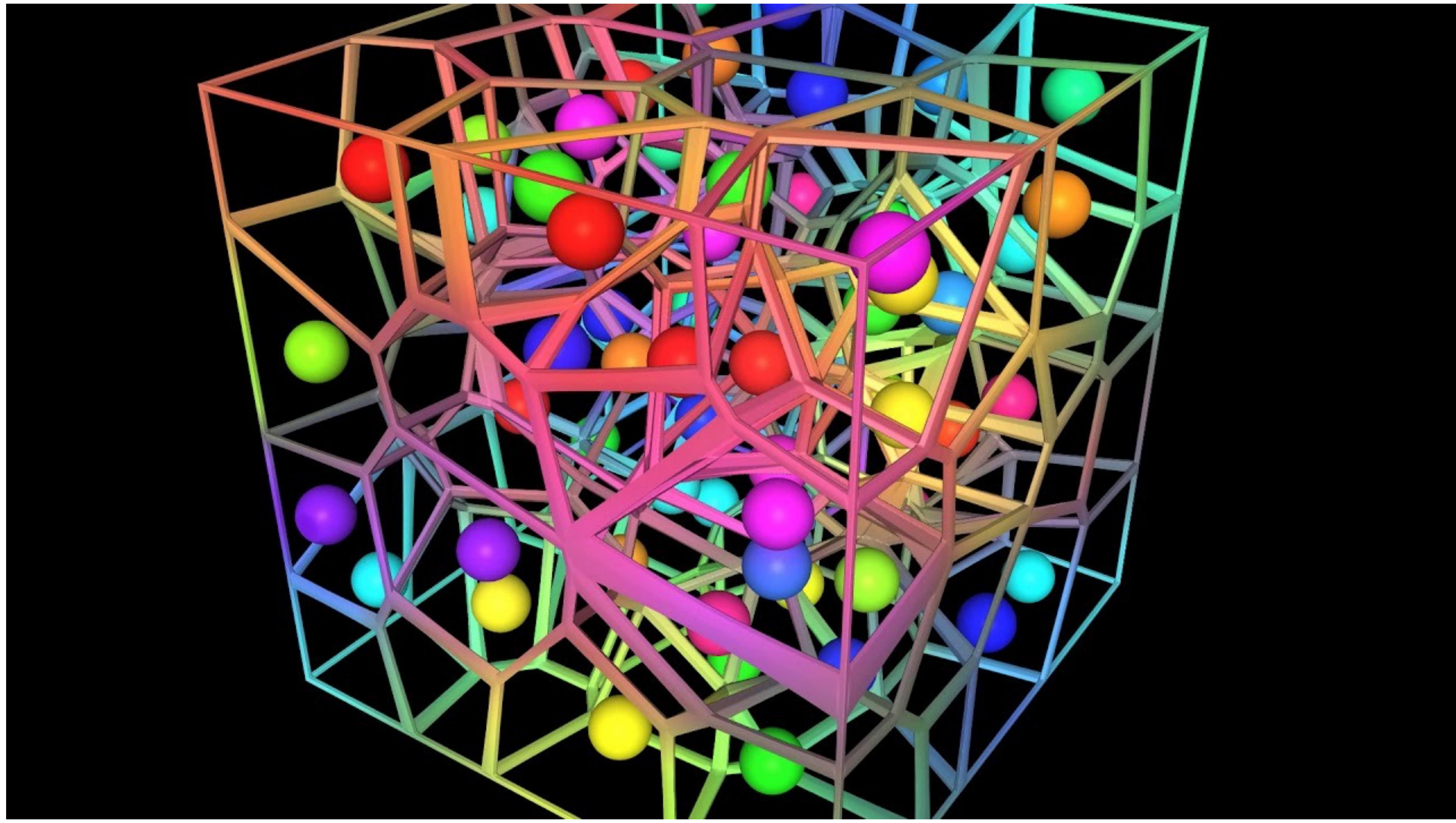
- 点の集合によって規定される。
- 境界**面**は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分**面**」
- 角(頂点)は、**4**つの点から等距離
- 頂点を中心として、**4**つの点を通る
  球が描ける。



https://www.youtube.com/watch?v=d9y9EZSYJbw

ボロノイ図の特徴 (3次元)
Voronoi diagram

- 点の集合によって規定される。
- 境界**面**は、2つの点から等距離
「2点をつなぐ線分の垂直二等分**面**」
- 角(頂点)は、**4**つの点から等距離
- 頂点を中心として、**4**つの点を通る
球が描ける。
- **球**のなかには、ほかの点は含まれない。

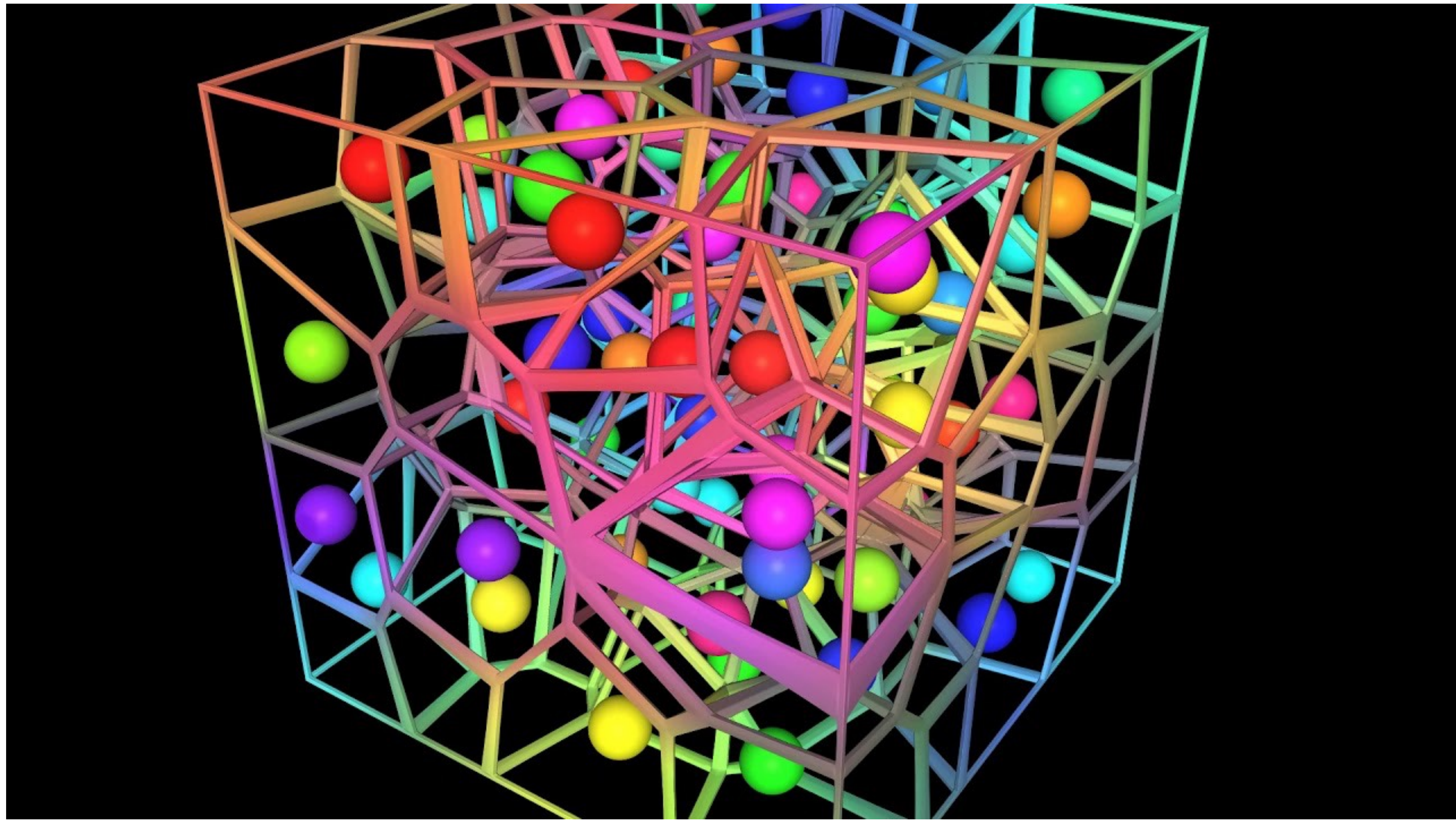


https://www.youtube.com/watch?v=d9y9EZSYJbw

ボロノイ図の特徴 (3次元)

Voronoi diagram

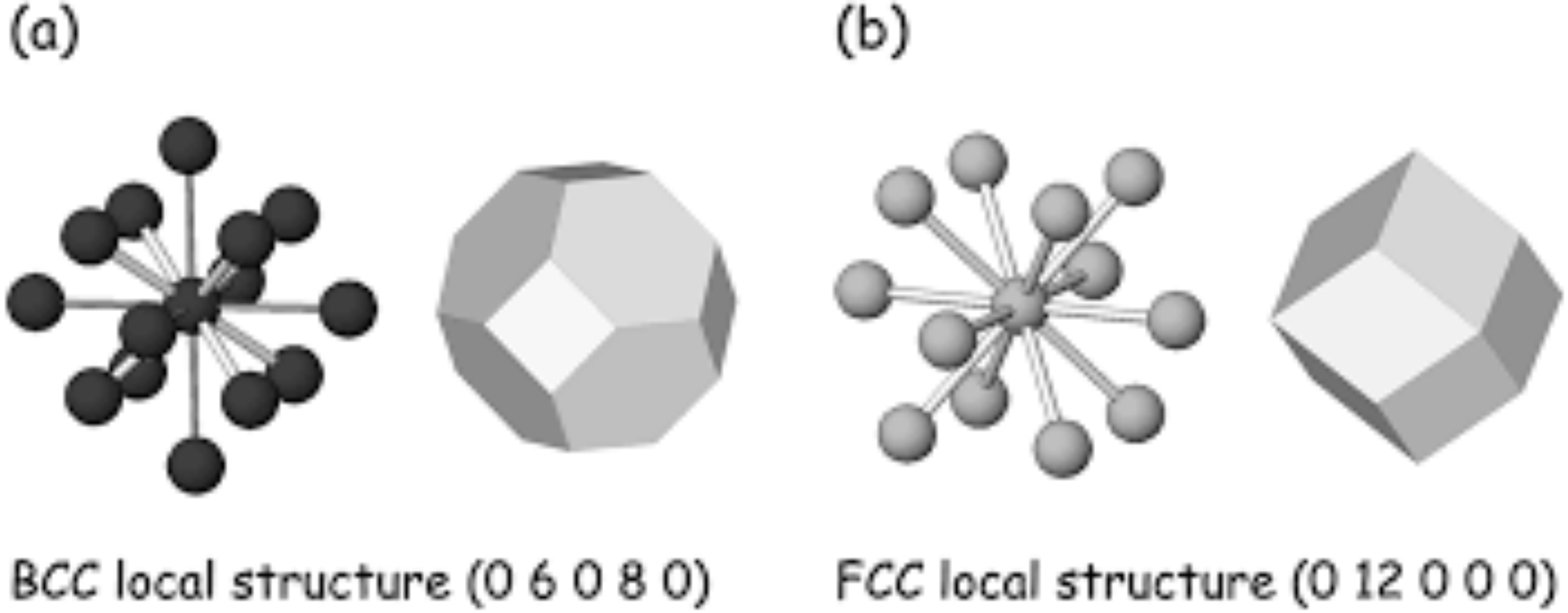
- 点の集合によって規定される。
- 境界**面**は、2つの点から等距離
  「2点をつなぐ線分の垂直二等分**面**」
- 角(頂点)は、**4**つの点から等距離
- 頂点を中心として、**4**つの点を通る
  球が描ける。
- **球**のなかには、ほかの点は含まれない。



https://www.youtube.com/watch?v=d9y9EZSYJbw

結晶格子のボロノイ胞 – Wigner-Seitz胞

- 結晶のなかで、各原子が占めるテリトリーを表現する方法。
  - 結合を定義しなくても、原子配置のみから構造を識別できる。



https://ci.nii.ac.jp/naid/40018810790

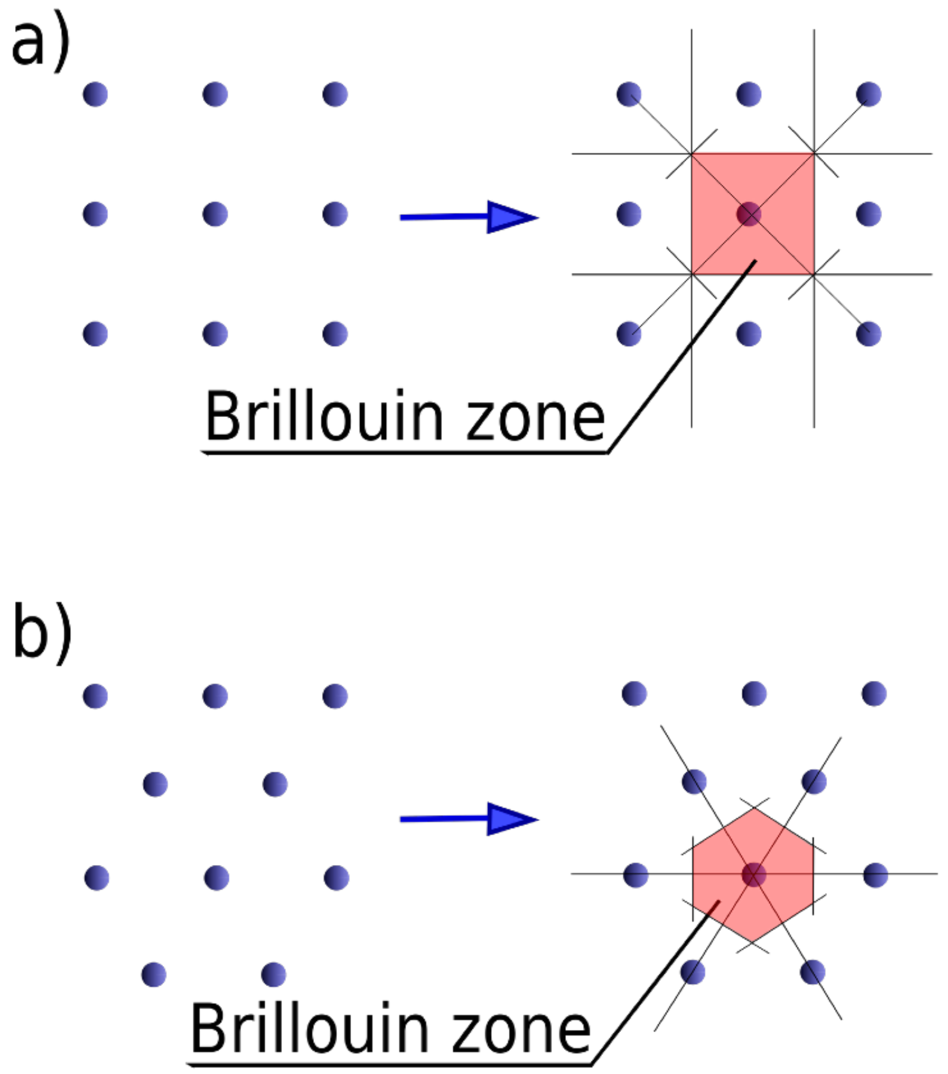
Yagasaki T,Matsumoto M,Tanaka H
J. Chem. Phys. 150, 214506 (2019).

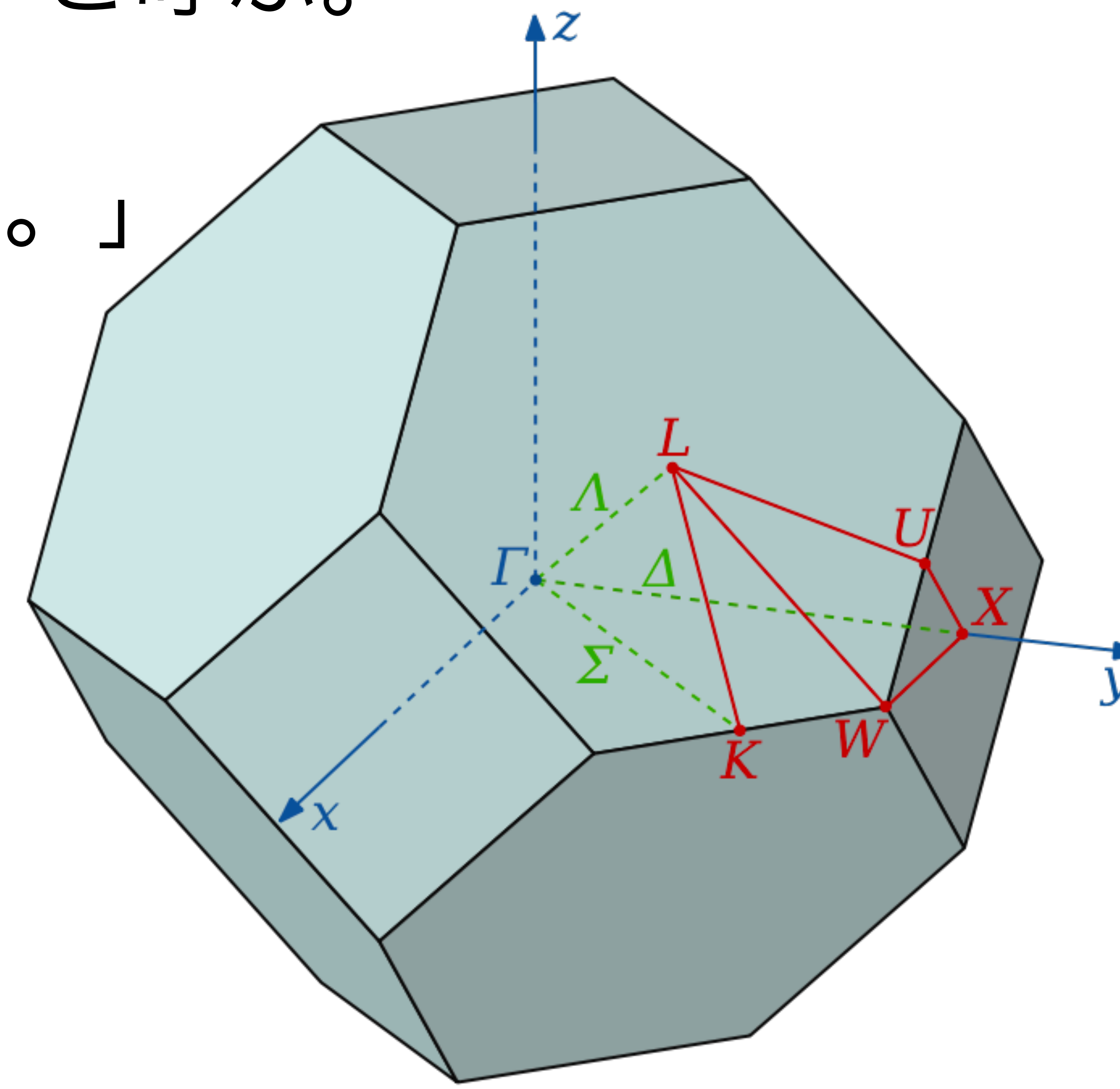
液体のボロノイ胞

- 液体のなかで、各分子が占める体積は、周囲の分子の配置の変化に応じて変動する
→ボロノイ胞の体積は、分子ごとの局所体積とみなせる。

逆格子のボロノイ胞 - ブリユアンゾーン

- 逆格子の格子点は、結晶の周期構造の情報を示している。
- 逆格子の原点を含むボロノイ胞を(第一)ブリユアンゾーンと呼ぶ。
- 「電子のエネルギーバンド理論などの説明に便利である。」(Wikipedia)

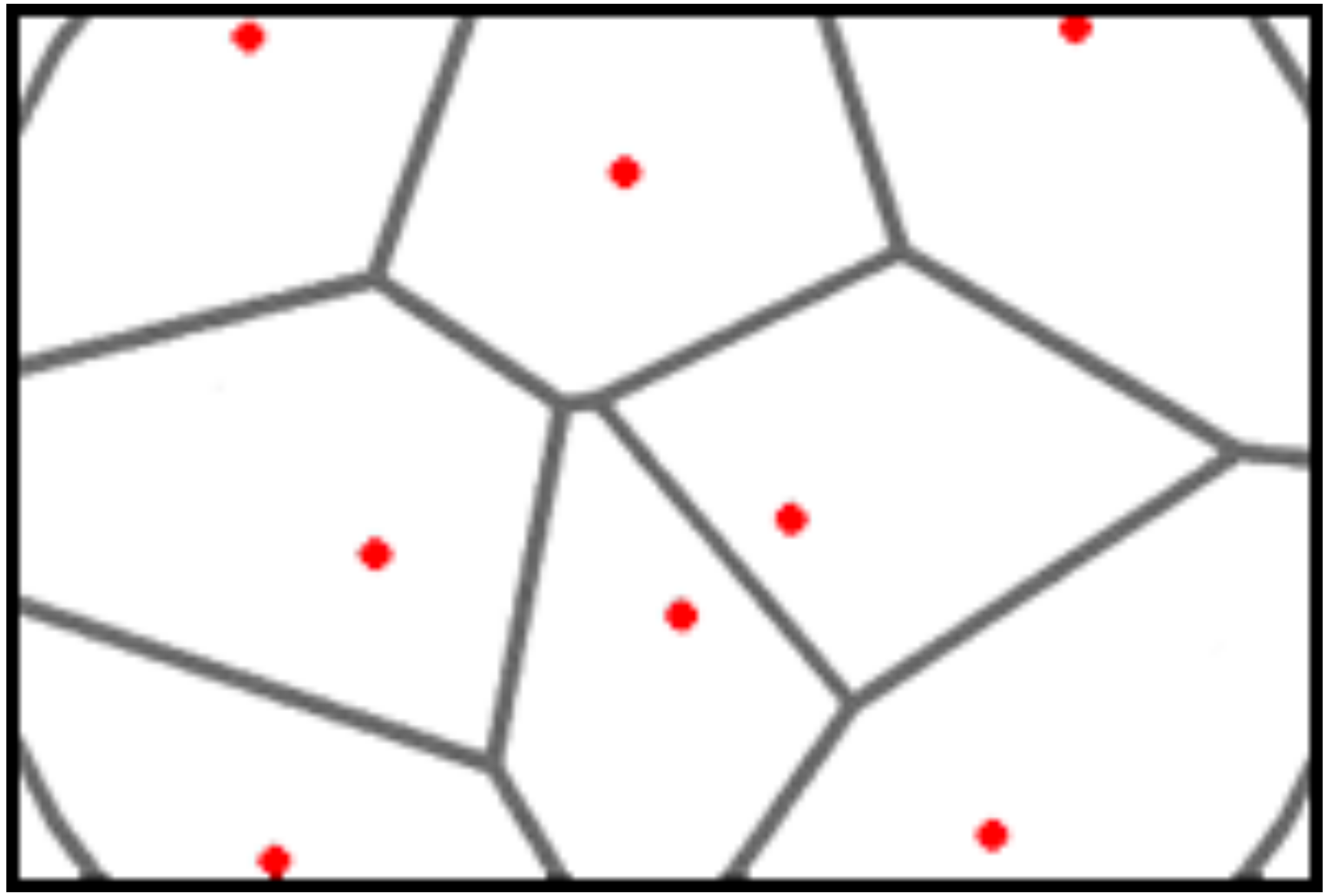




ボロノイ図とドロネー図

Voronoi and Delaunay diagrams

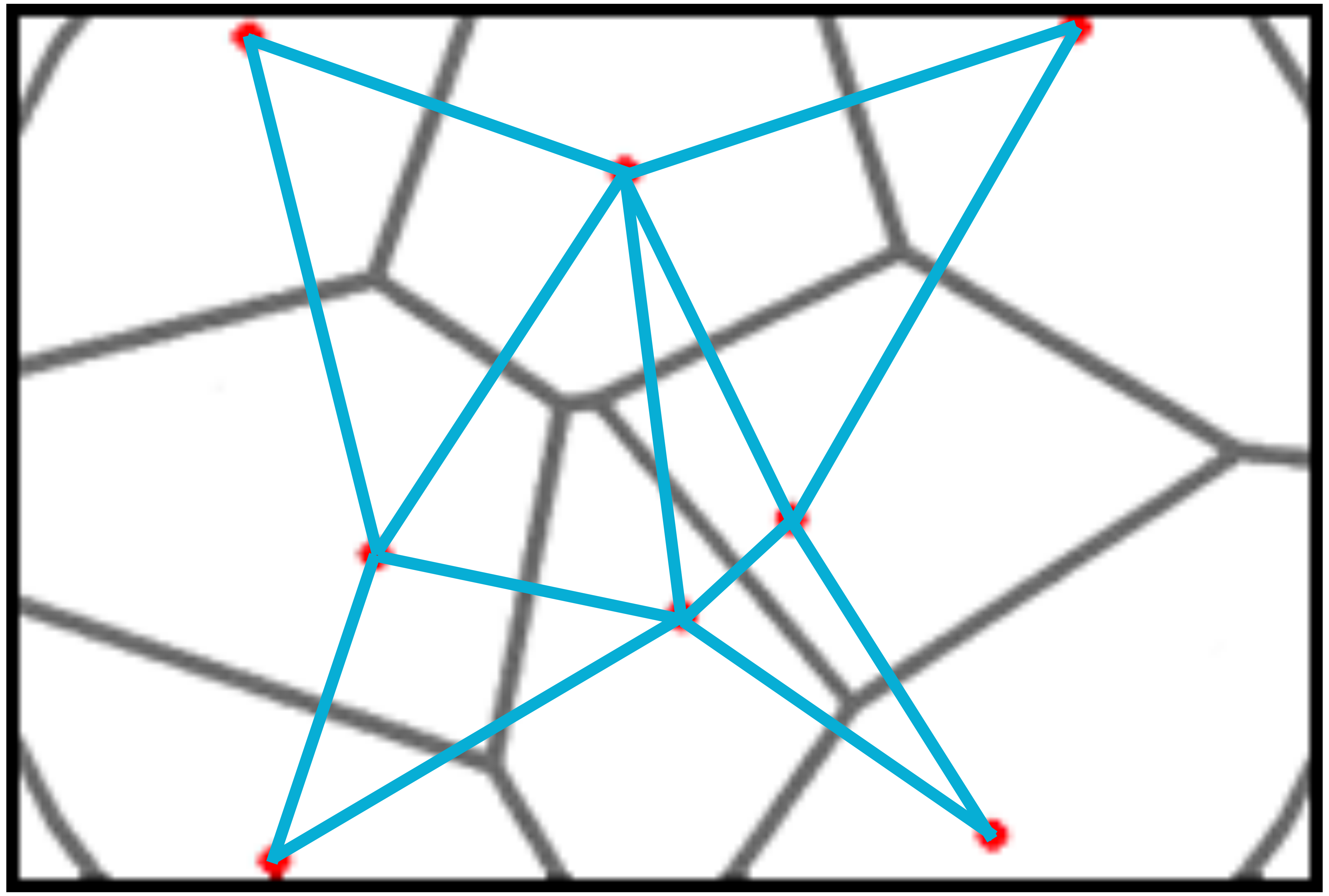
- 境界線によって隣接する2つの点同士をつないでいくと、多数の三角形が描ける。これをドロネー図と呼ぶ。
- それぞれの三角形の3つの頂点は、1つのボロノイ頂点を中心とする円周上にある。
- ボロノイ図とドロネー図は<u>双対</u>の関係; 片方が描ければ、もう片方は簡単に描ける。
- 3次元の場合には、四面体になる。



ボロノイ図とドロネー図

Voronoi and Delaunay diagrams

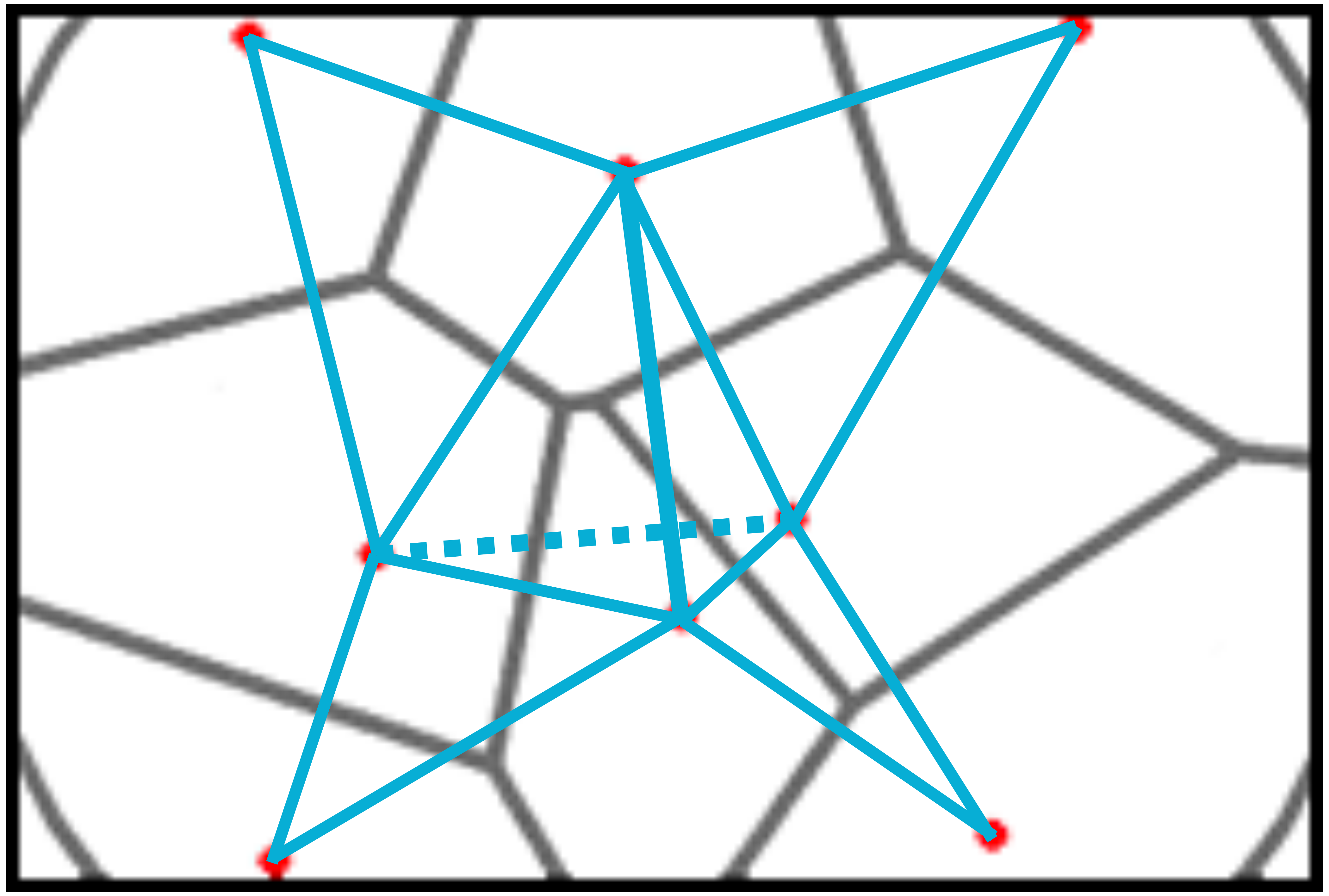
- 境界線によって隣接する2つの点同士をつないでいくと、多数の三角形が描ける。これをドロネー図と呼ぶ。
- それぞれの三角形の3つの頂点は、1つのボロノイ頂点を中心とする円周上にある。
- ボロノイ図とドロネー図は双対の関係;片方が描ければ、もう片方は簡単に描ける。
- 3次元の場合には、四面体になる。



ボロノイ図とドロネー図

Voronoi and Delaunay diagrams

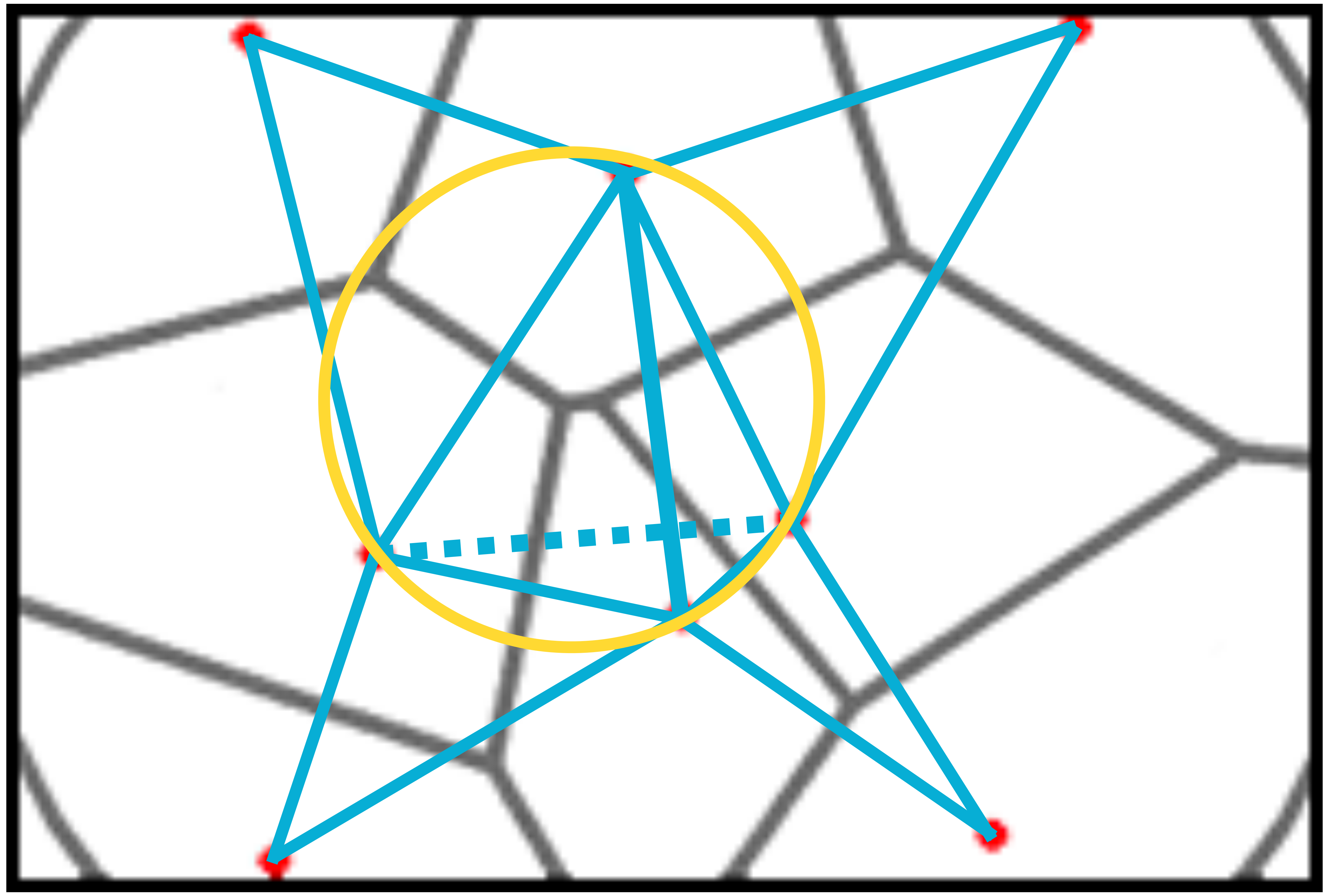
- 一見すると、ドロネー図のほうが簡単に描けそうに見える。
- しかし三角形の描き方は一通りでなさそうだ。太線と点線、どちらが正しい?
- 判定するには、それぞれの三角形の外接円を実際に描いてみるほかない。
- 全部の可能な三角形について、外接円をすべて描くしかない、のか?



ボロノイ図とドロネー図

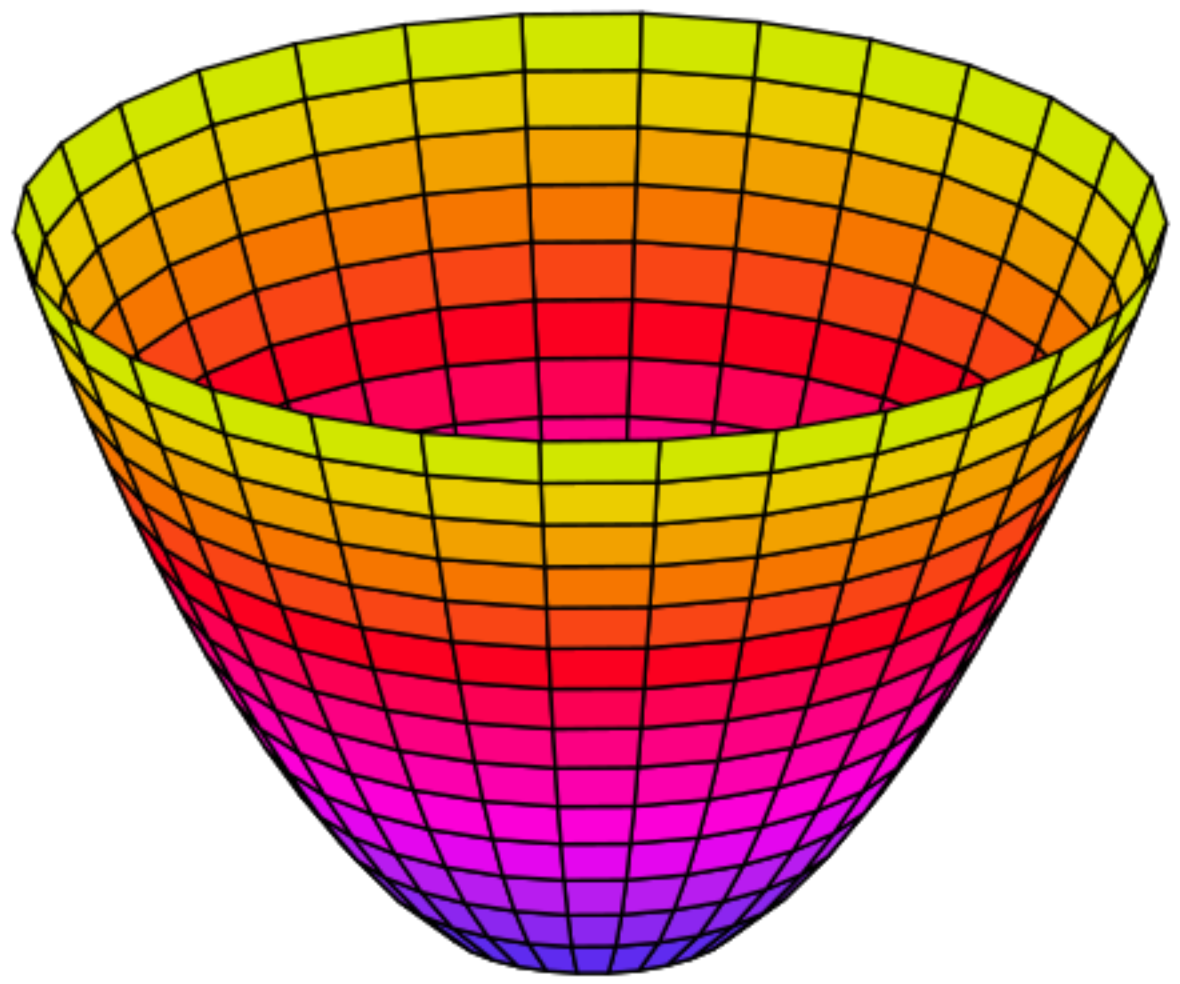
Voronoi and Delaunay diagrams

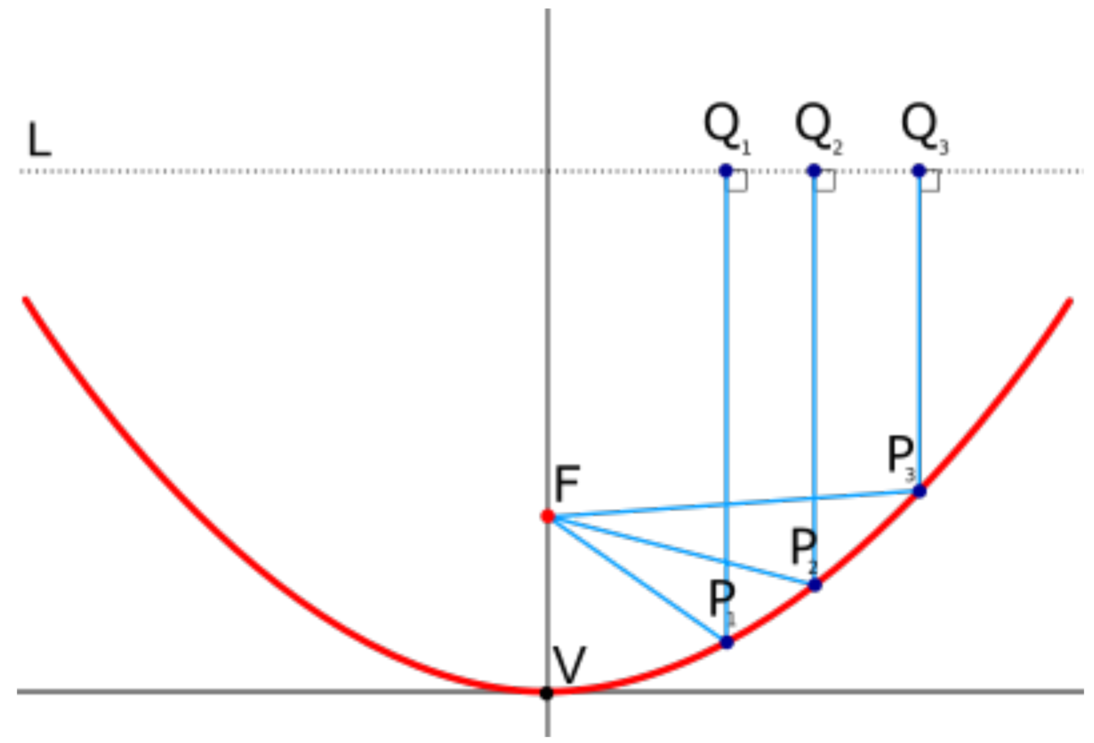
- 一見すると、ドロネー図のほうが簡単に描けそうに見える。
- しかし三角形の描き方は一通りでなさそうだ。太線と点線、どちらが正しい?
- 判定するには、それぞれの三角形の外接円を実際に描いてみるほかない。
- 全部の可能な三角形について、外接円をすべて描くしかない、のか?



回転放物面
Paraboloid

- 回転放物面: 二次元の放物線$z=x^2$を、z軸まわりで回してできる曲面 $z = x^2 + y^2$
- 回転放物面鏡は、z軸方向からの平行光線を一点に集光する「パラボラアンテナ」

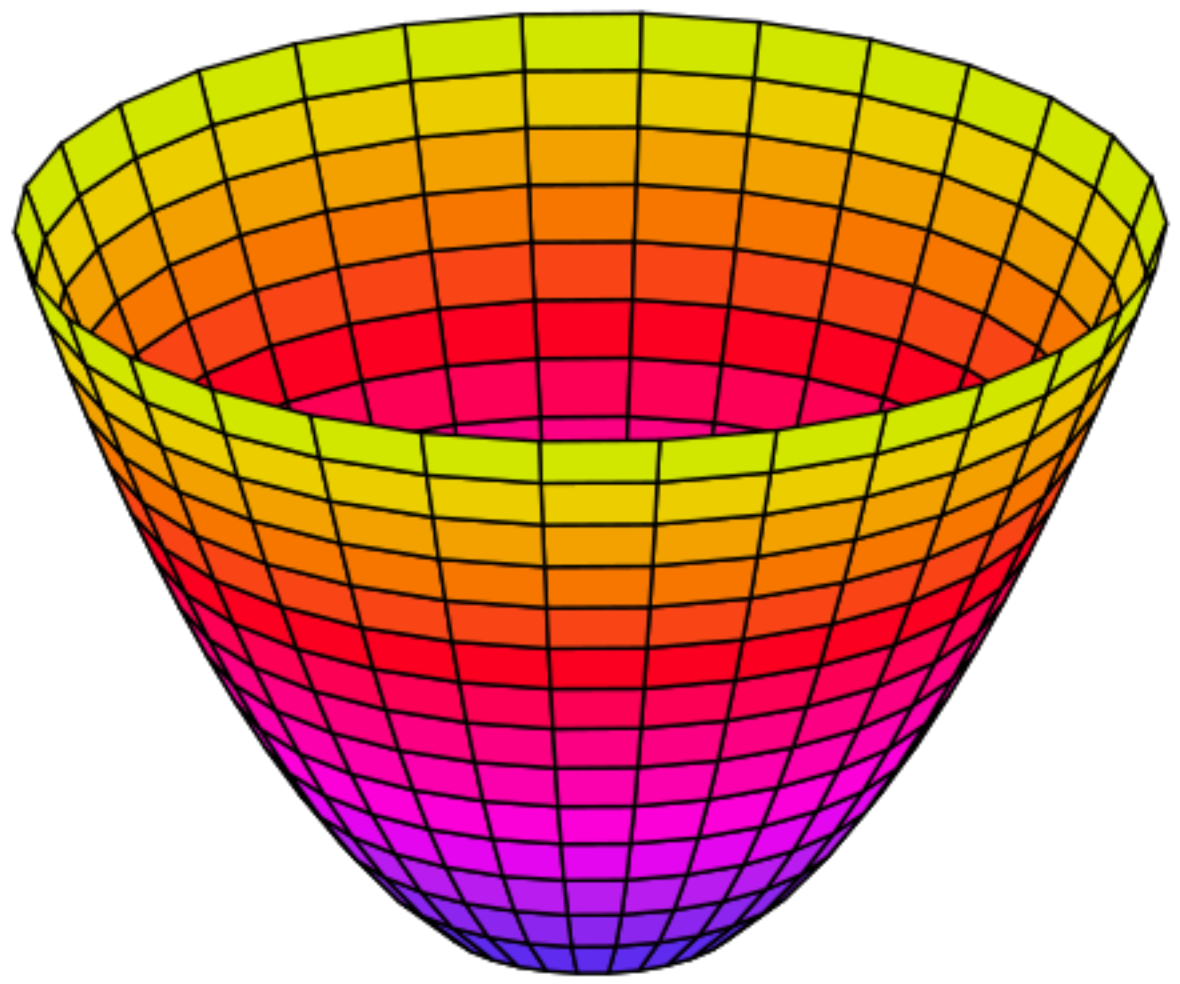


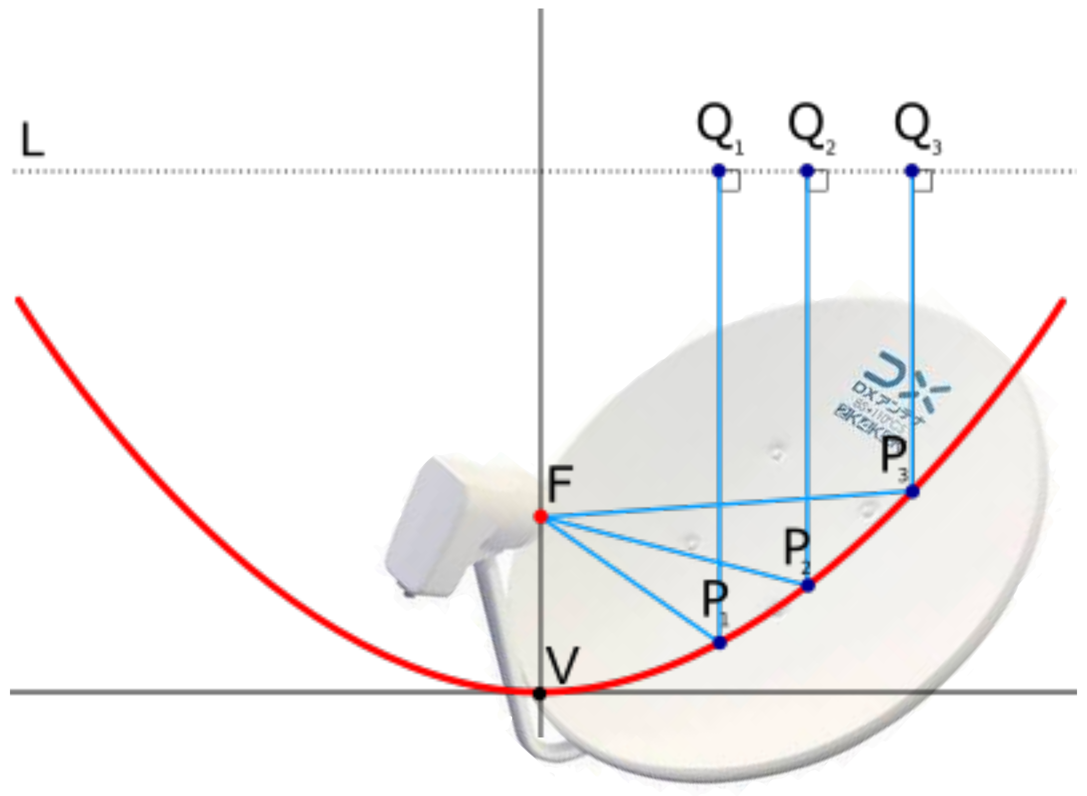


回転放物面

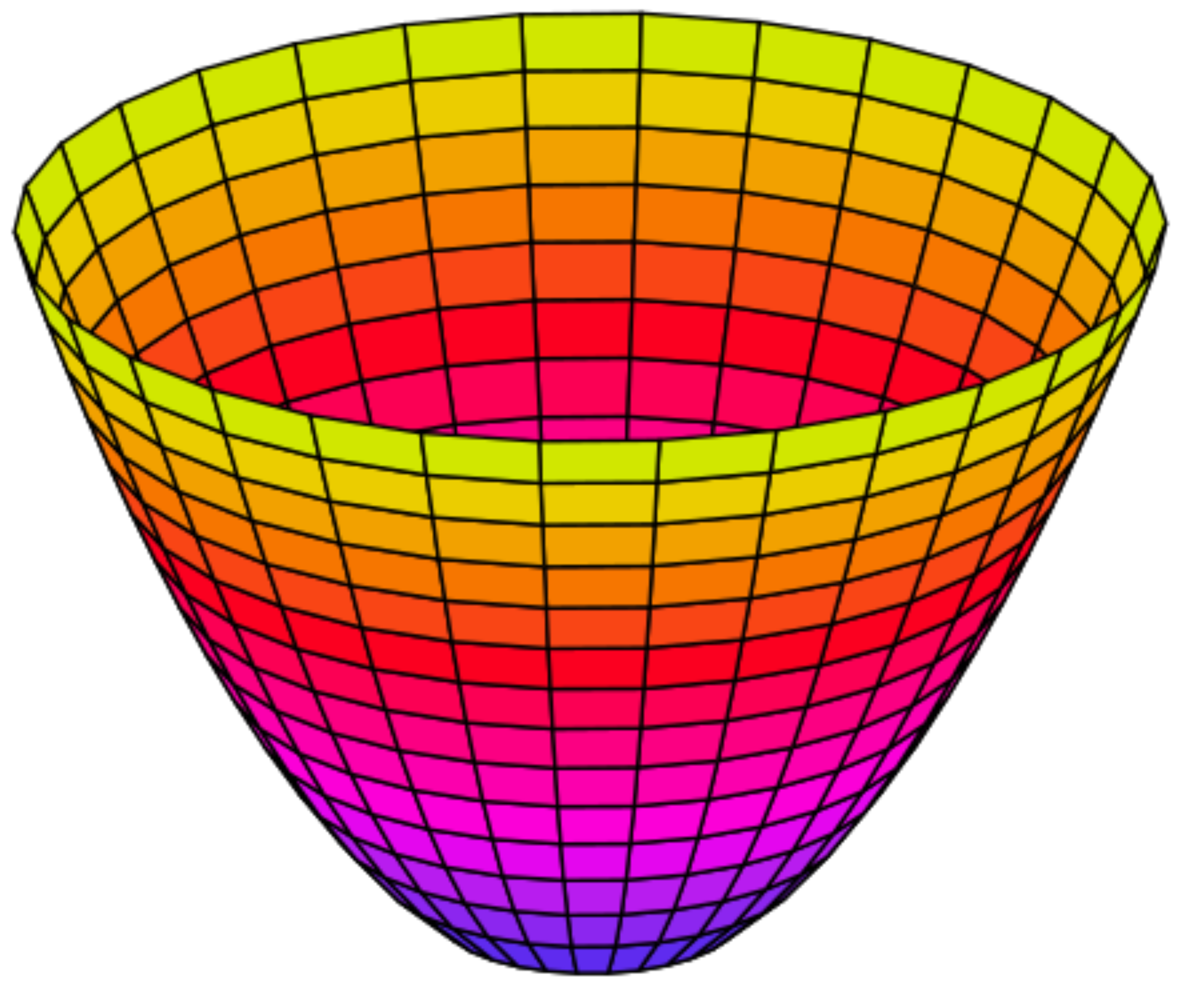
Paraboloid

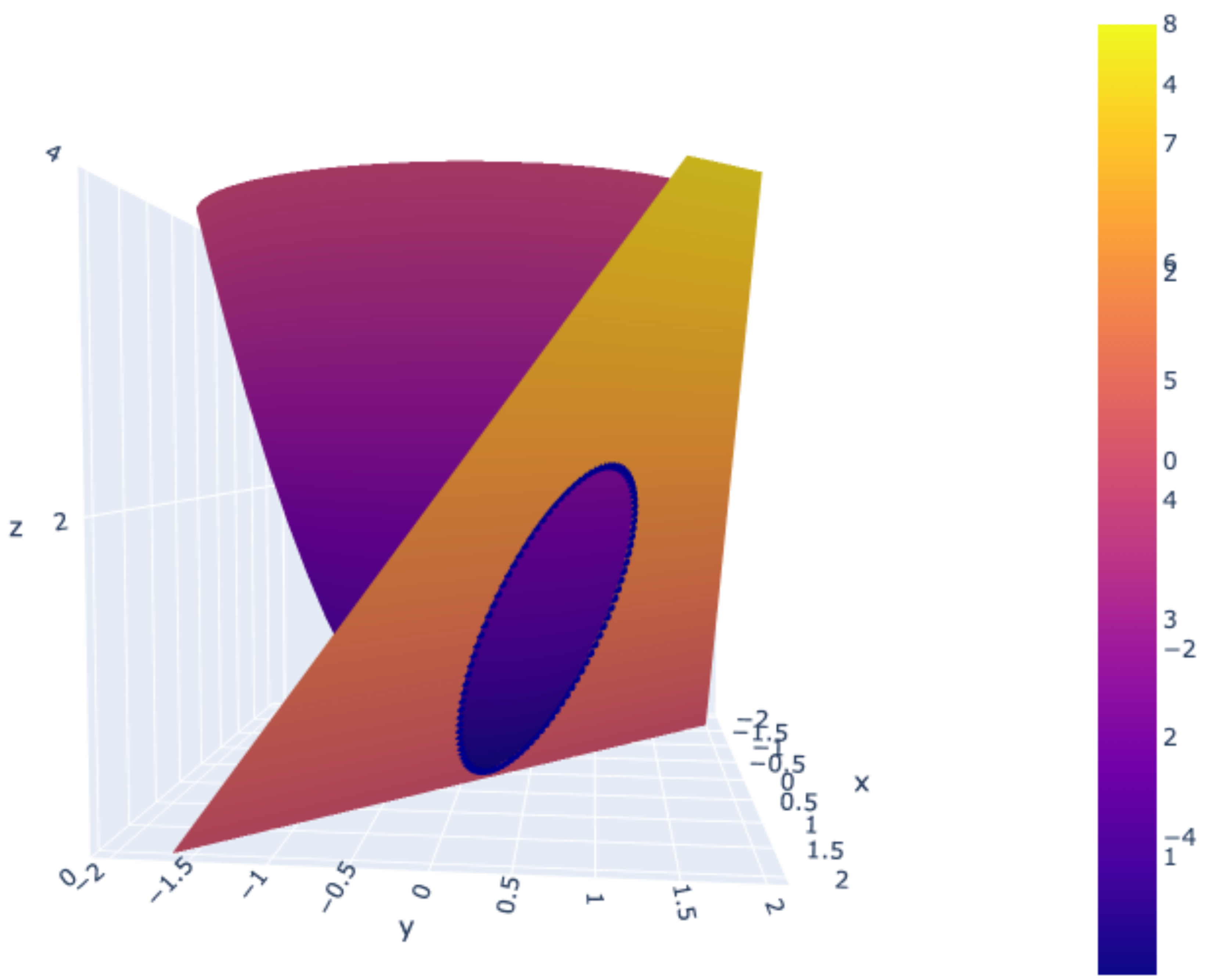
- 回転放物面: 二次元の放物線$z=x^2$を、z軸まわりで回してできる曲面
  $z = x^2 + y^2$
- 回転放物面鏡は、z軸方向からの平行光線を一点に集光する「パラボラアンテナ」





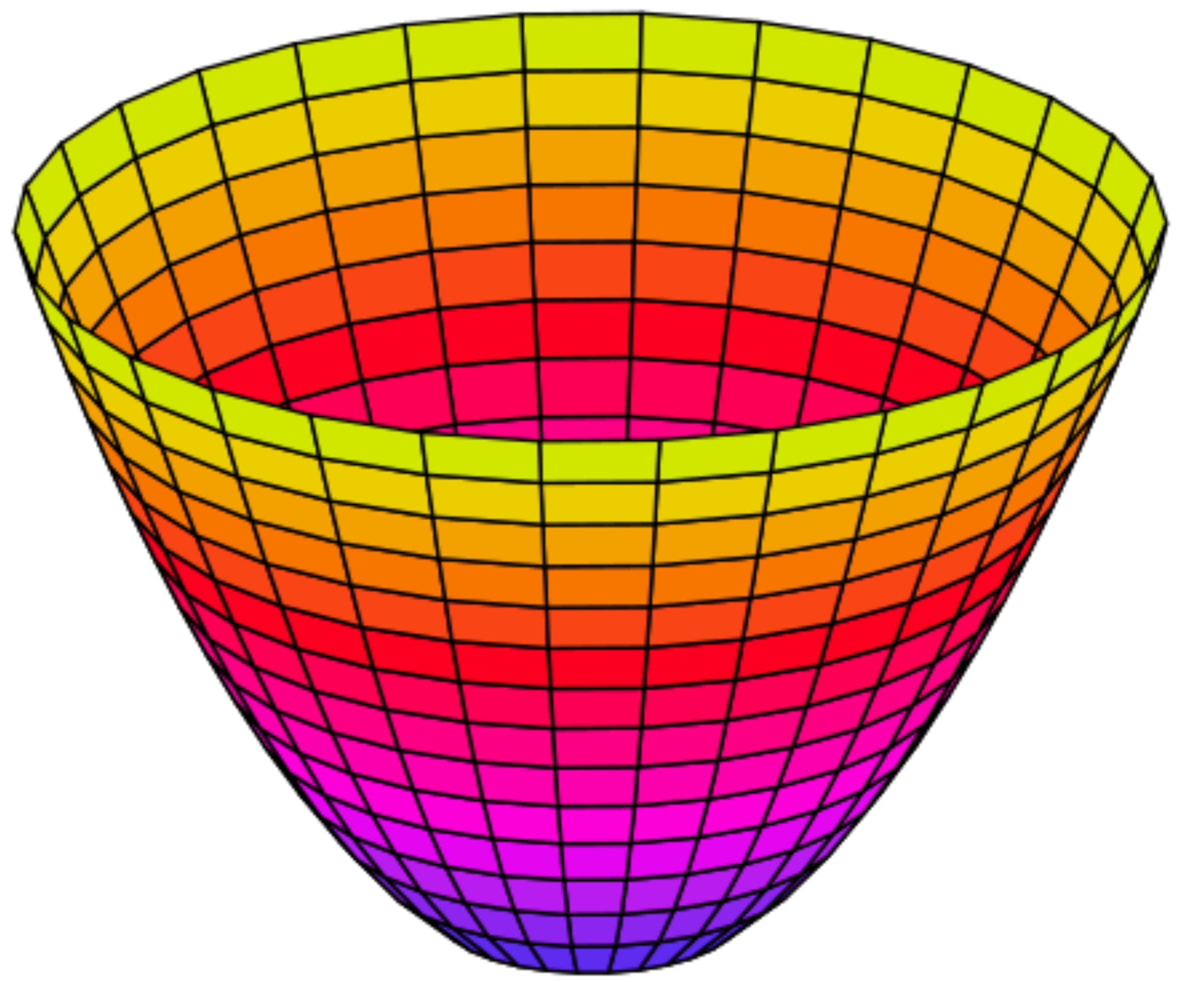
回転放物面の切断

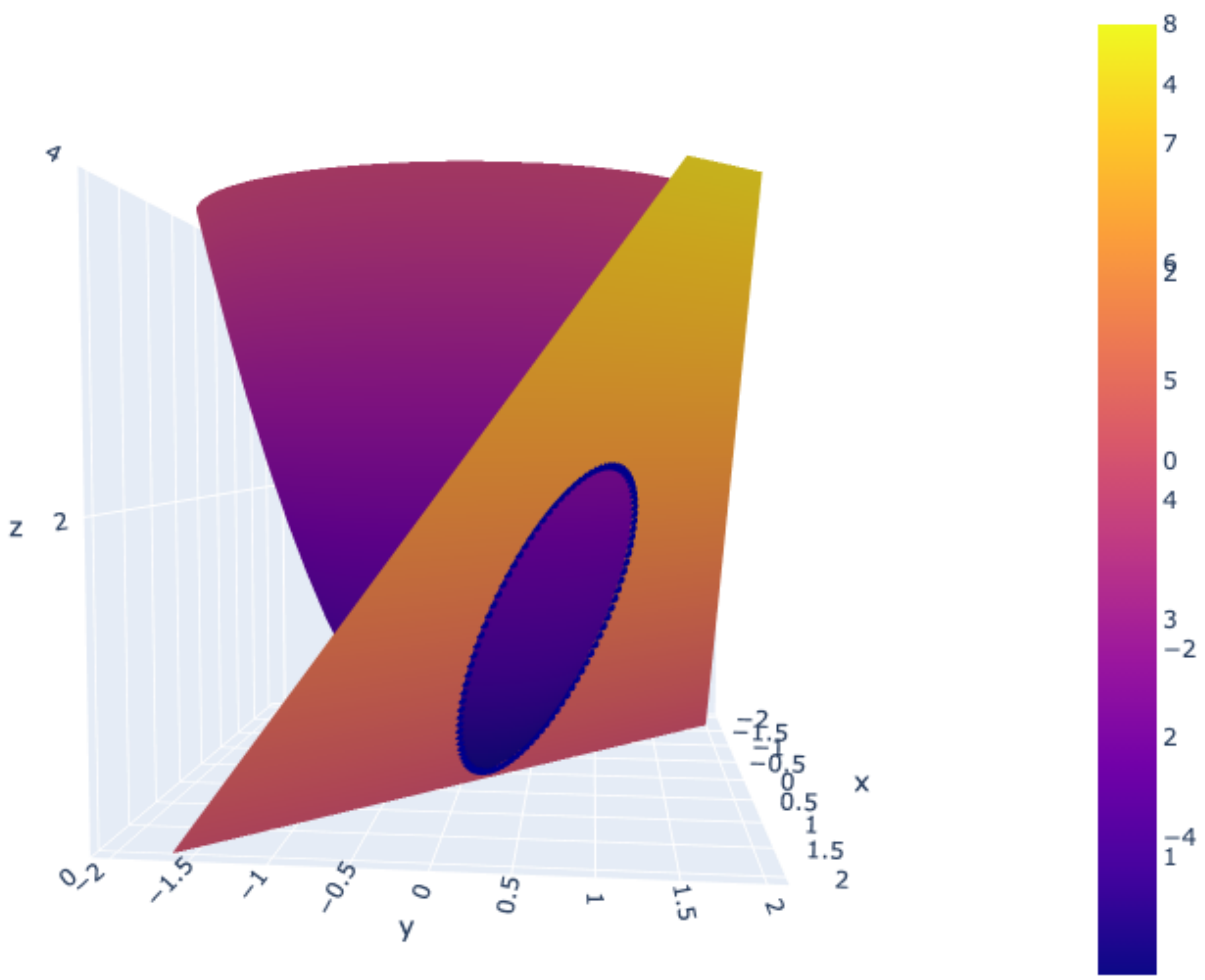




回転放物面の切断

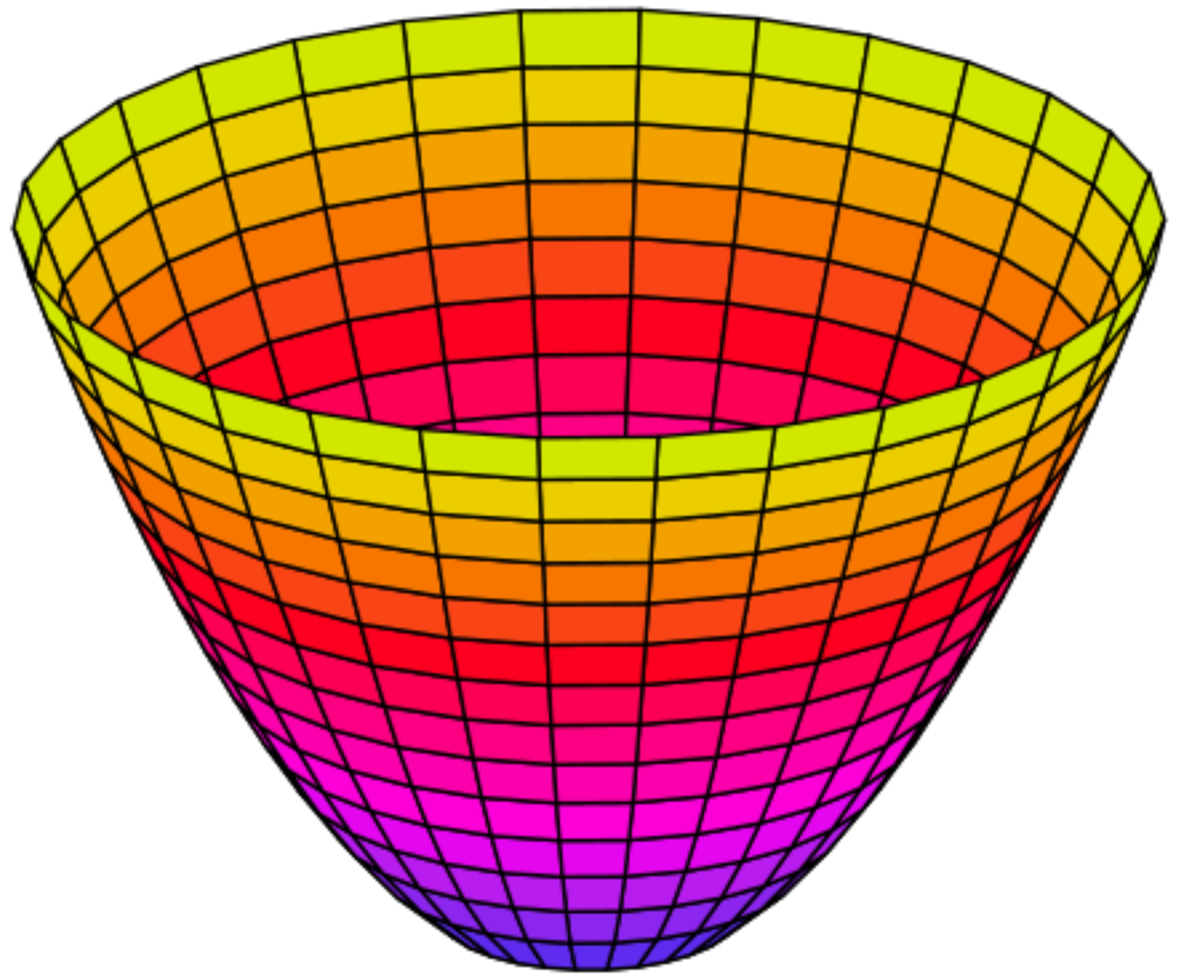
- 回転放物面を水平に切断すると?

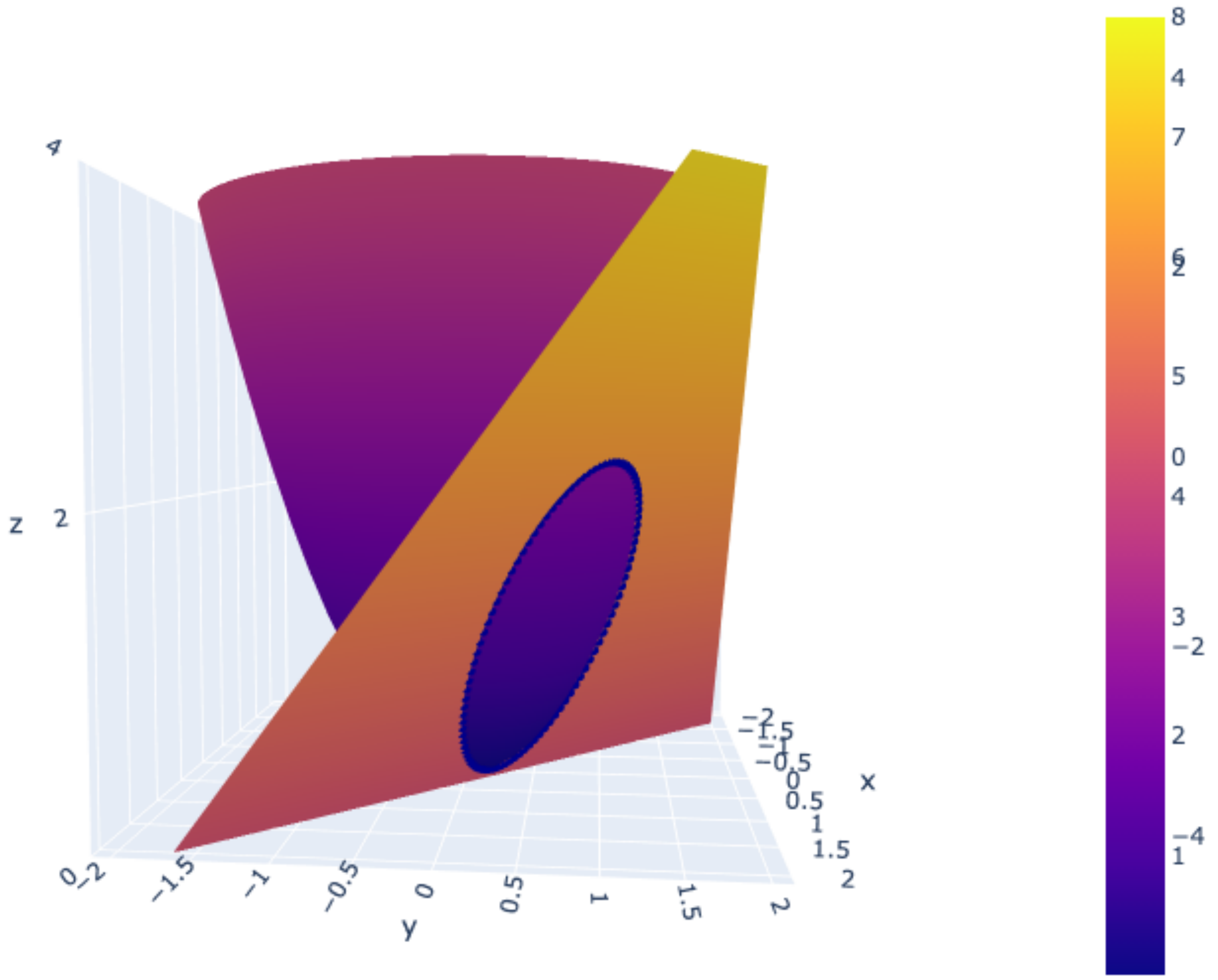




回転放物面の切断

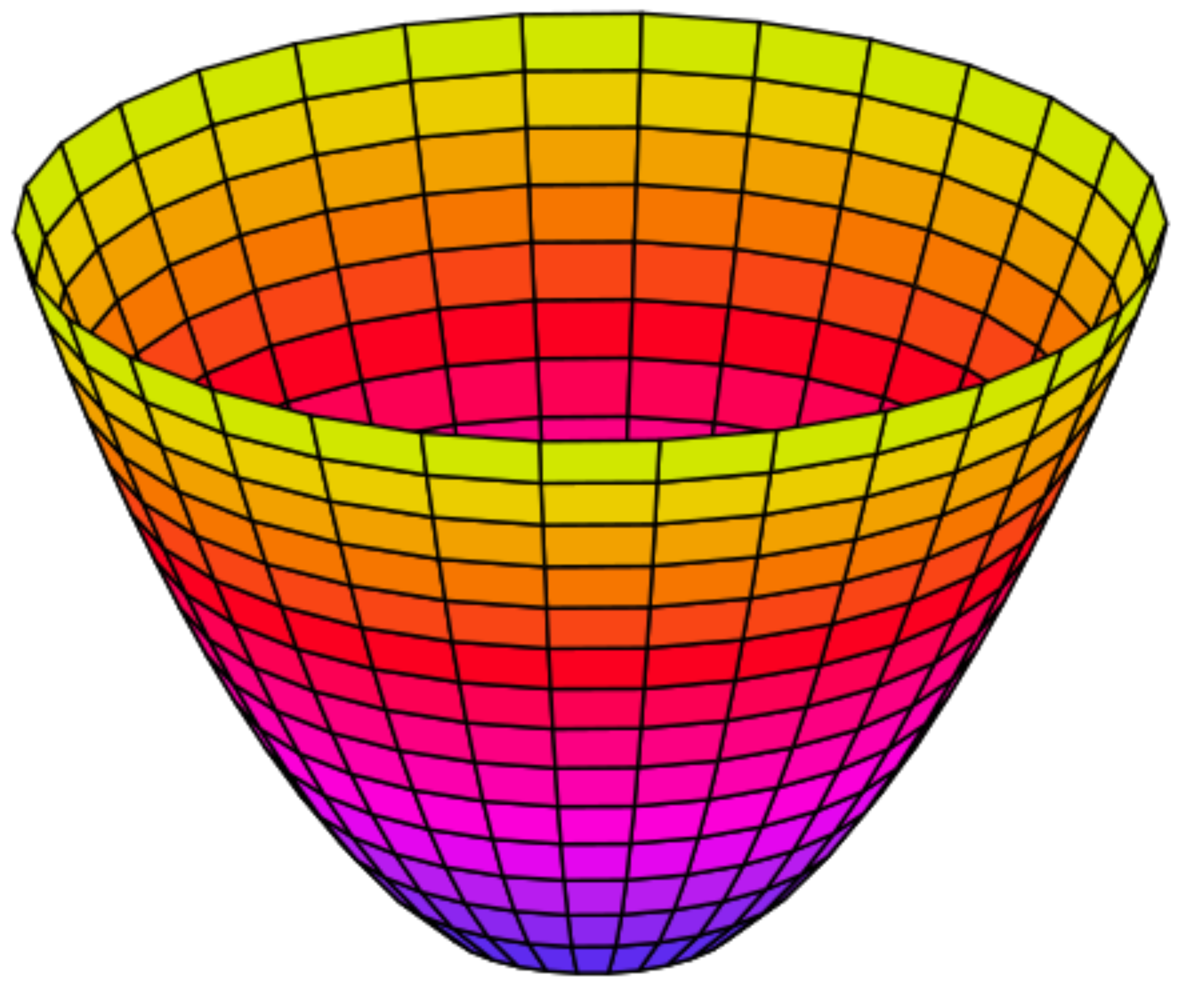
- 回転放物面を水平に切断すると?
  - 切り口は円になる。

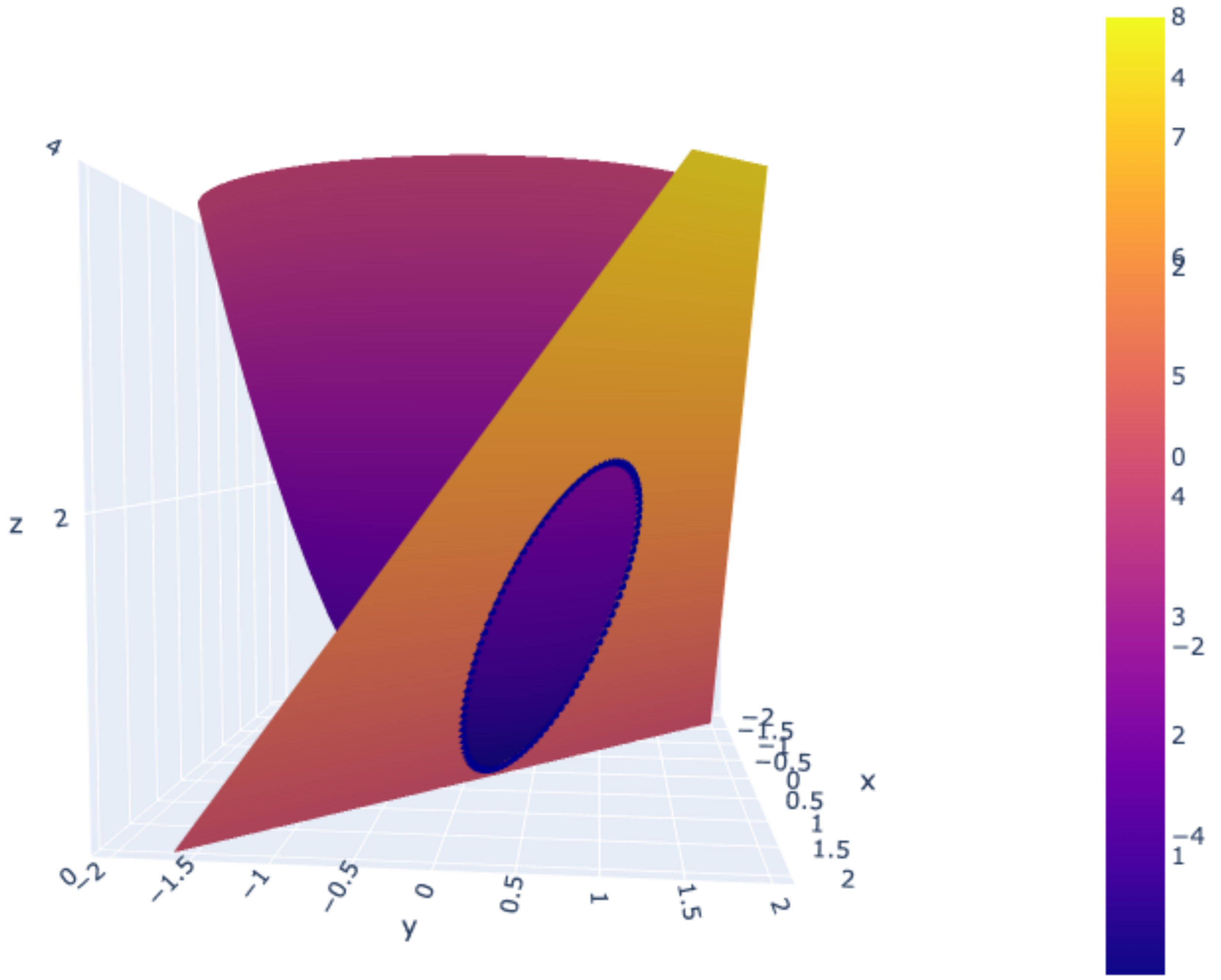




回転放物面の切断

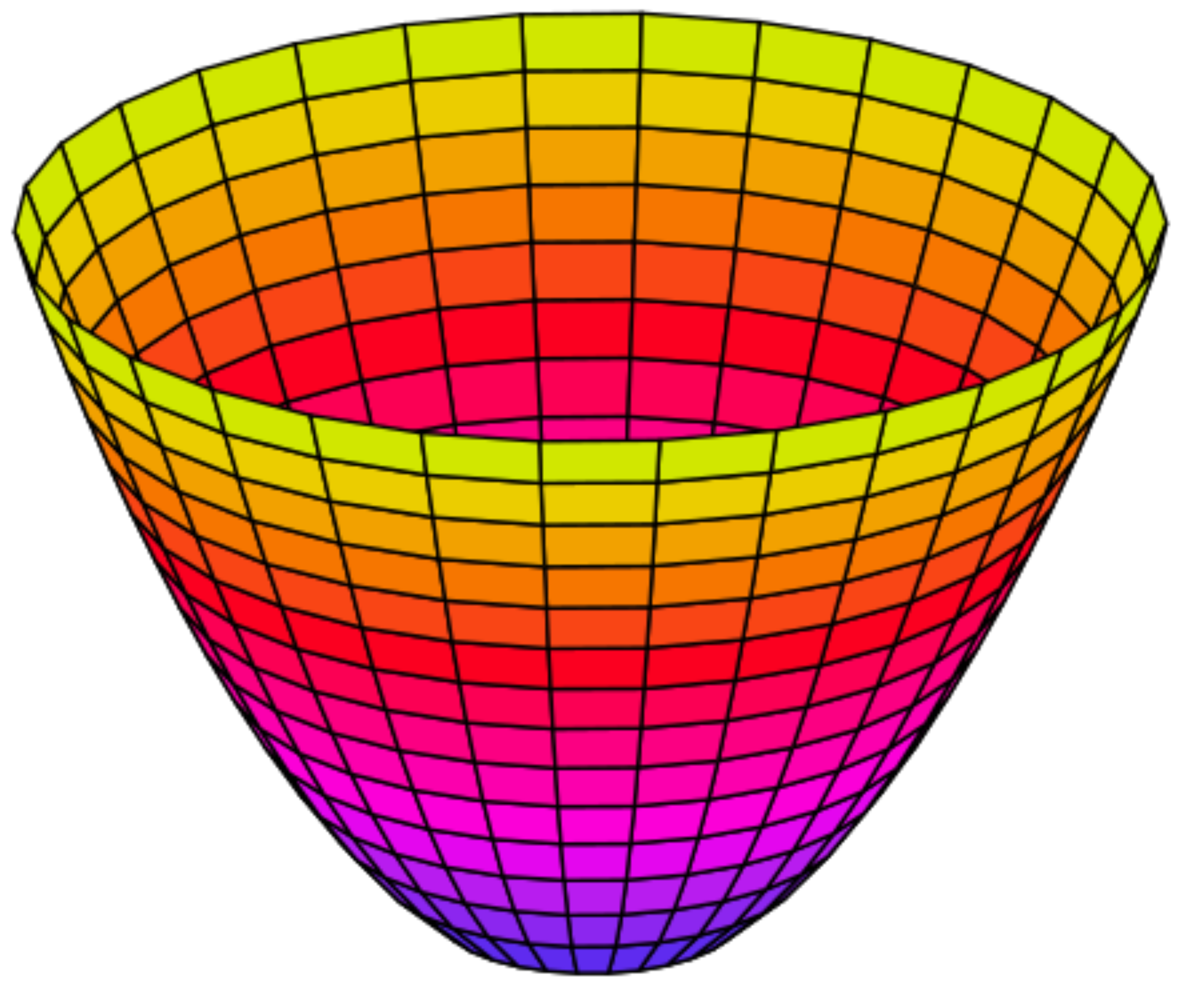
- 回転放物面を水平に切断すると?
    - 切り口は円になる。
- 回転放物面を斜めに切断すると?

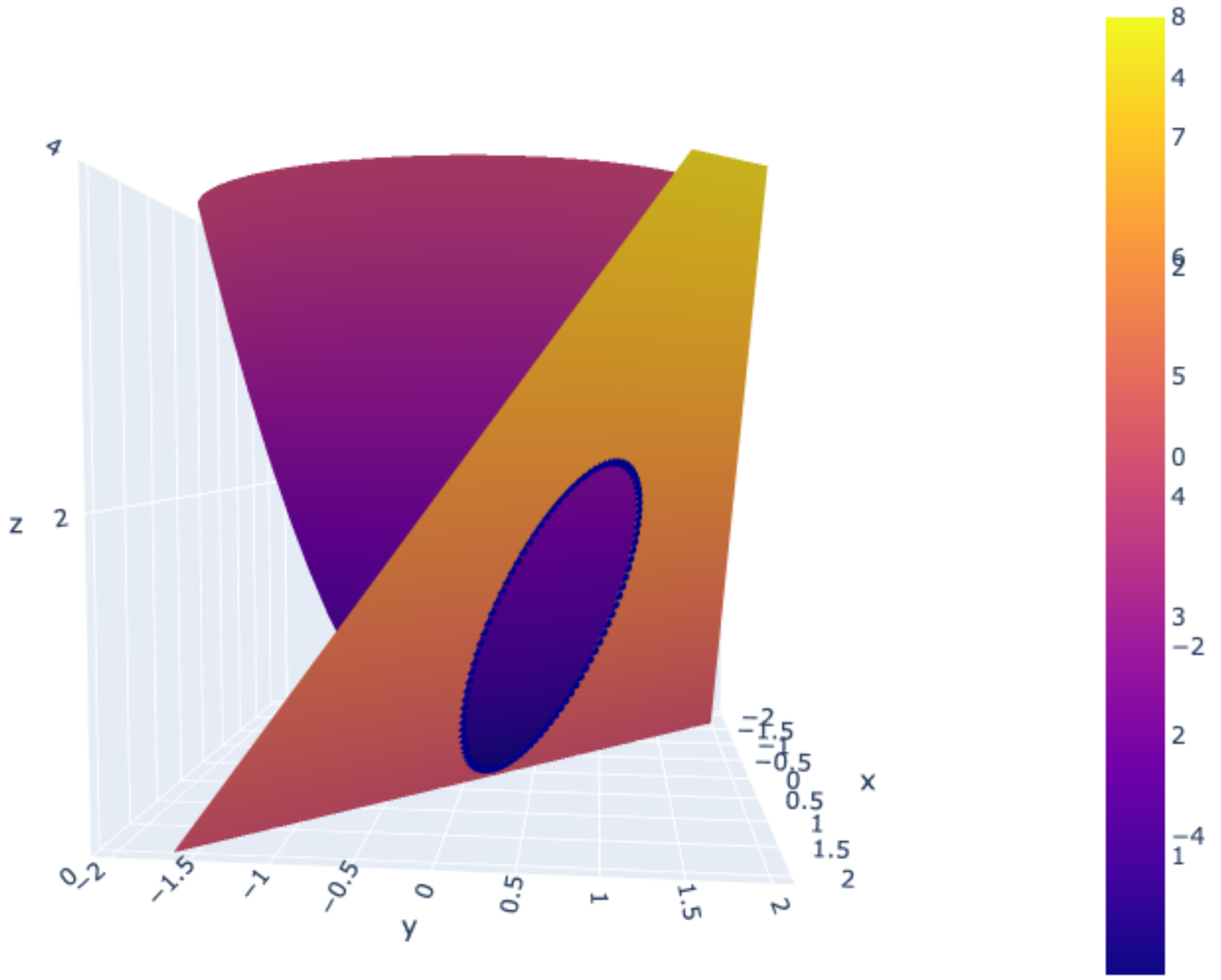




回転放物面の切断

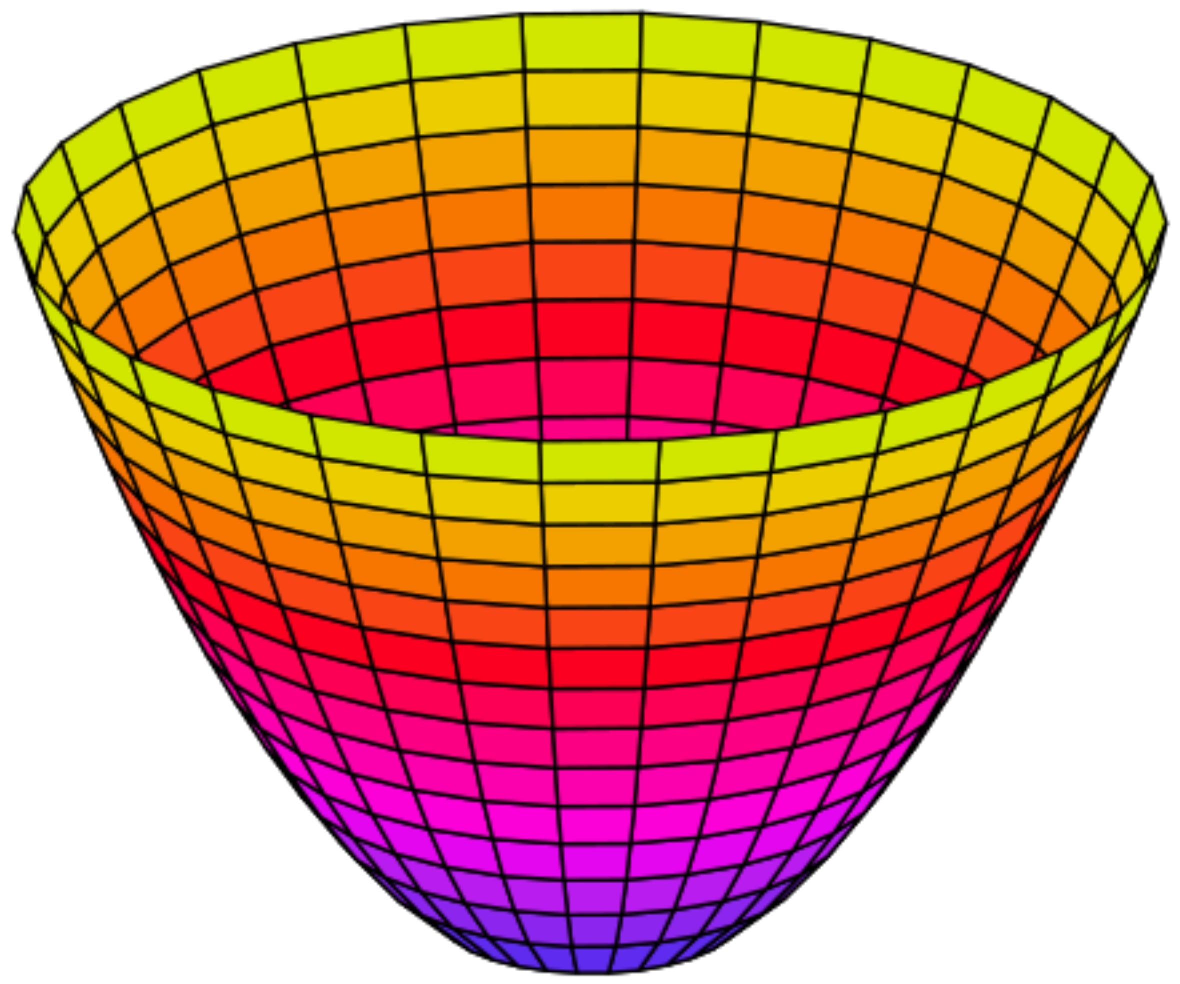
- 回転放物面を水平に切断すると?
    - 切り口は円になる。
- 回転放物面を斜めに切断すると?
    - 切り口は楕円になる。

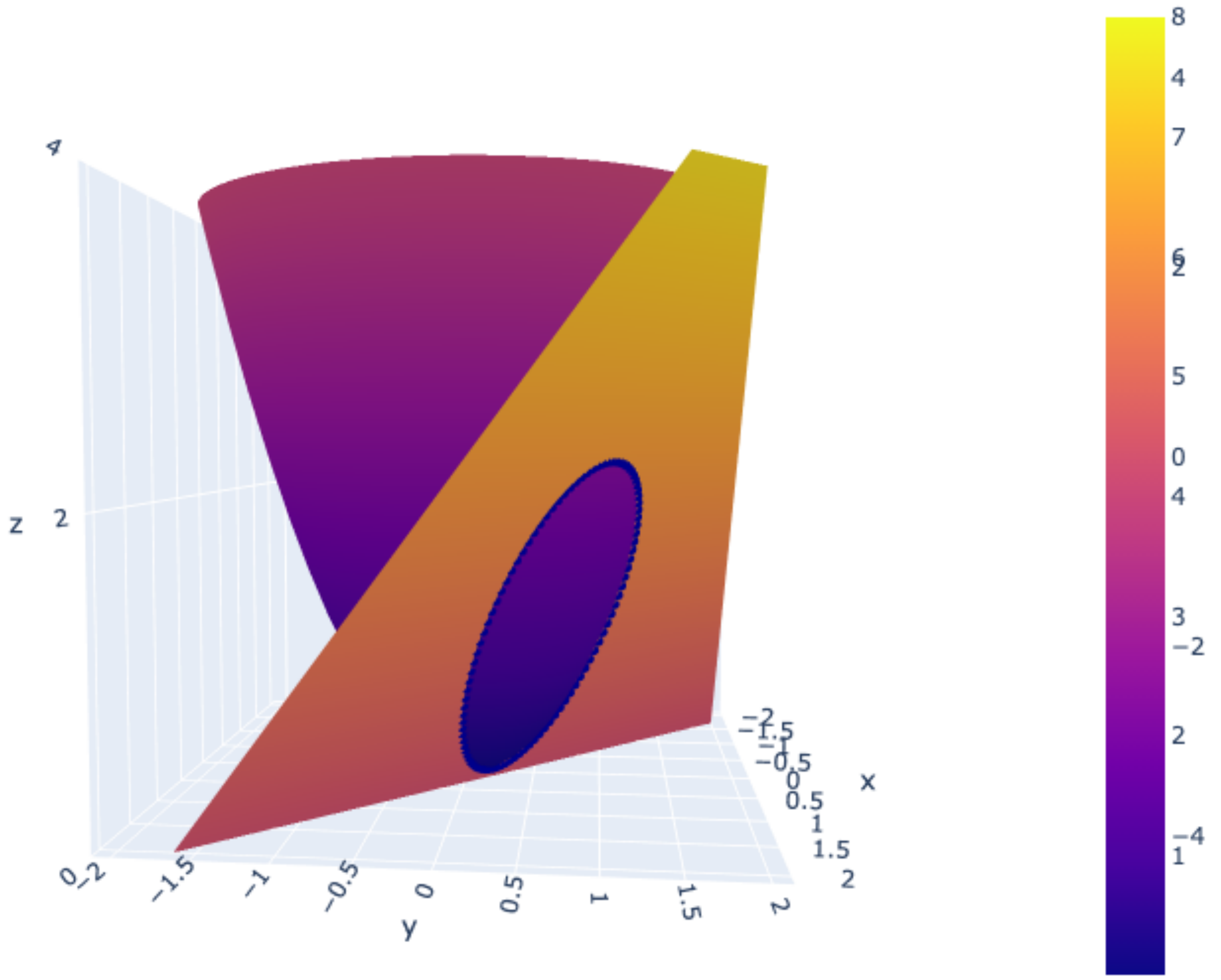




回転放物面の切断

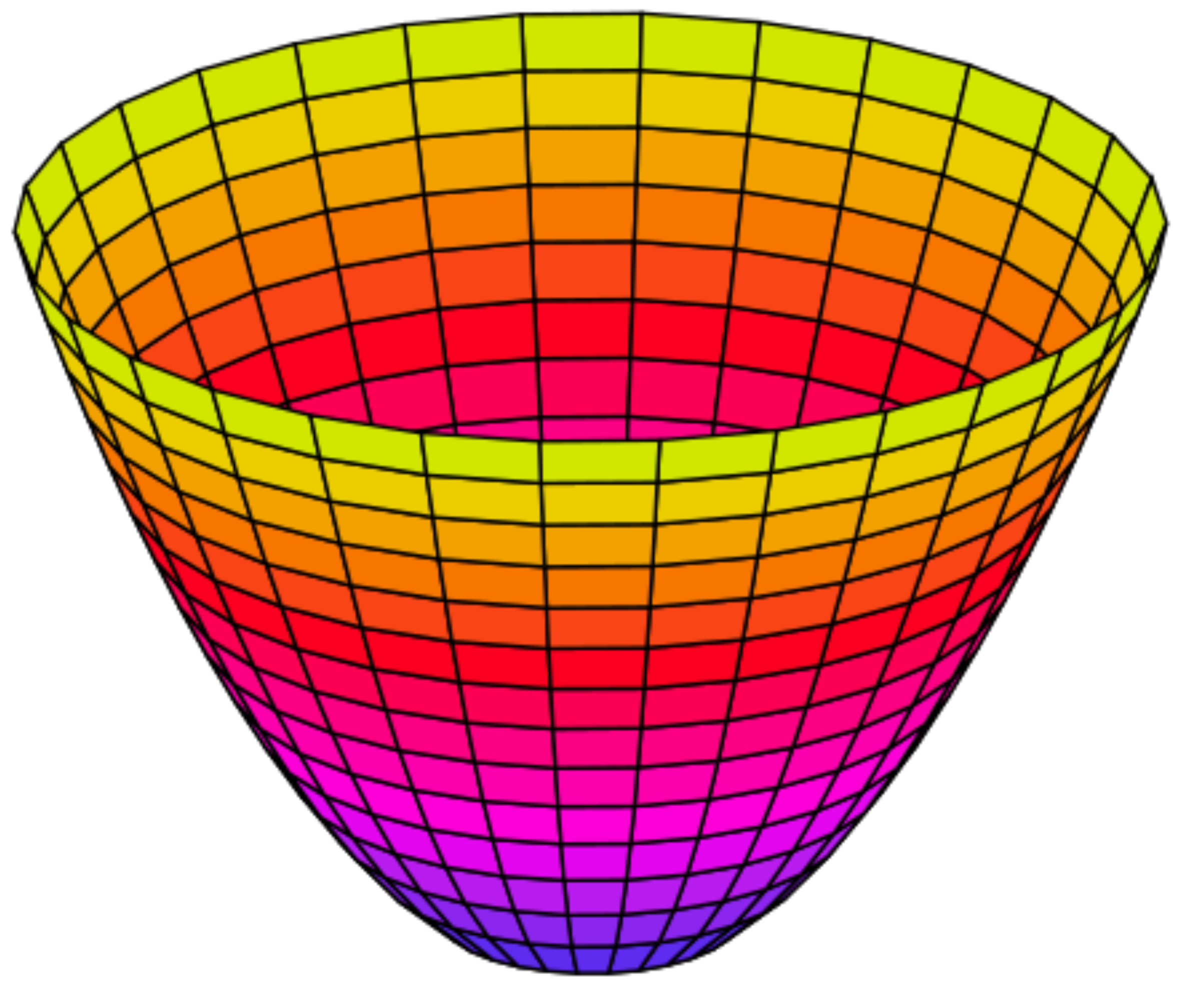
- 回転放物面を水平に切断すると?
  - 切り口は円になる。
- 回転放物面を斜めに切断すると?
  - 切り口は楕円になる。
- 切り口をz軸方向から見ると?

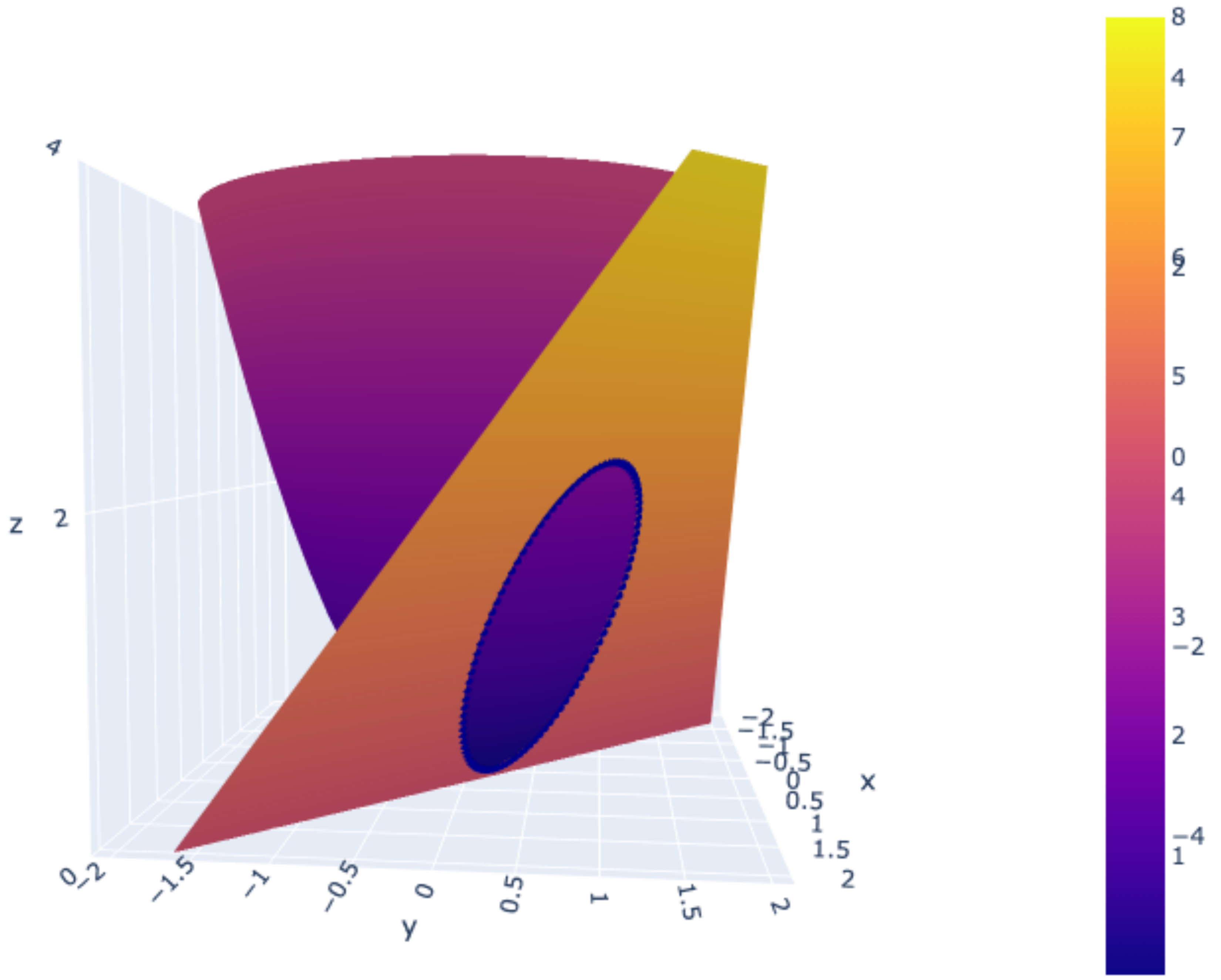




回転放物面の切断

- 回転放物面を水平に切断すると?
  - 切り口は円になる。
- 回転放物面を斜めに切断すると?
  - 切り口は楕円になる。
- 切り口をz軸方向から見ると?
  - 円に見える!?





証明

Proof

- 放物面の方程式 $z = x^2 + y^2$
- 平面の方程式 $z = ax + by + c$
- 放物面と平面の交線は、これらを同時にみたす。$x^2 + y^2 = ax + by + c$
- ちょっと式変形すると、$\left(x - \dfrac{a}{2}\right)^2 + \left(y - \dfrac{b}{2}\right)^2 = \dfrac{a^2 + b^2 + 4c}{4}$

  つまり、中心$\left(\dfrac{a}{2}, \dfrac{b}{2}\right)$、半径$\dfrac{\sqrt{a^2 + b^2 + 4c}}{2}$の円。

円の中心と半径

python

```
def center_and_radius(a,b,c):
    "平面z=ax+by+cと放物面z=x**2+y**2の交線のxy平面への射影"
    radius = (a**2 + b**2 + 4*c)**0.5/2
    center = (a/2, b/2)
    return center, radius
```

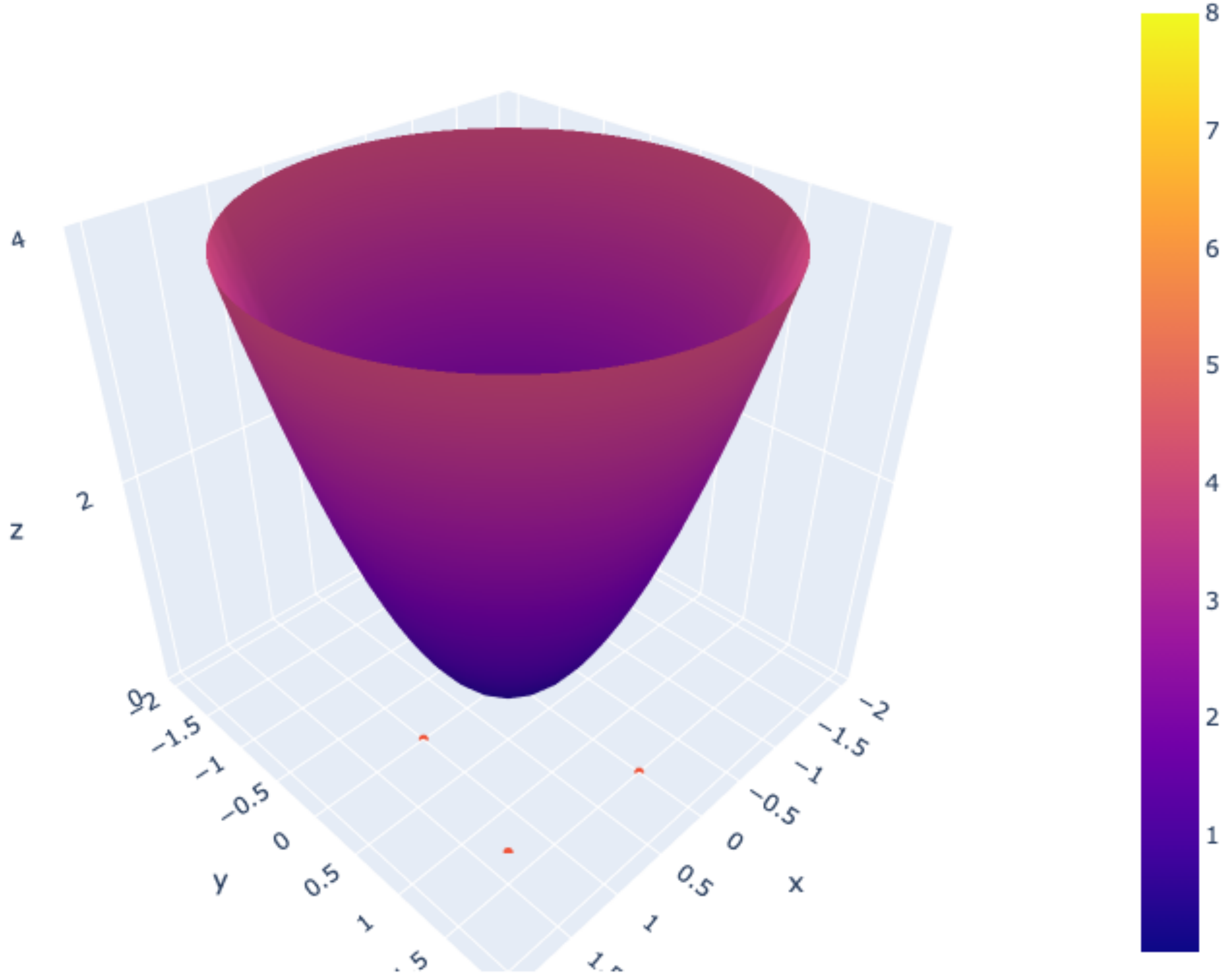
で?

So what?

- ドロネー図を描きたい点を、放物面上に「持ち上げる」

- そのうちの3点A,B,Cを通る平面で、放物面を切る。切り口は楕円。

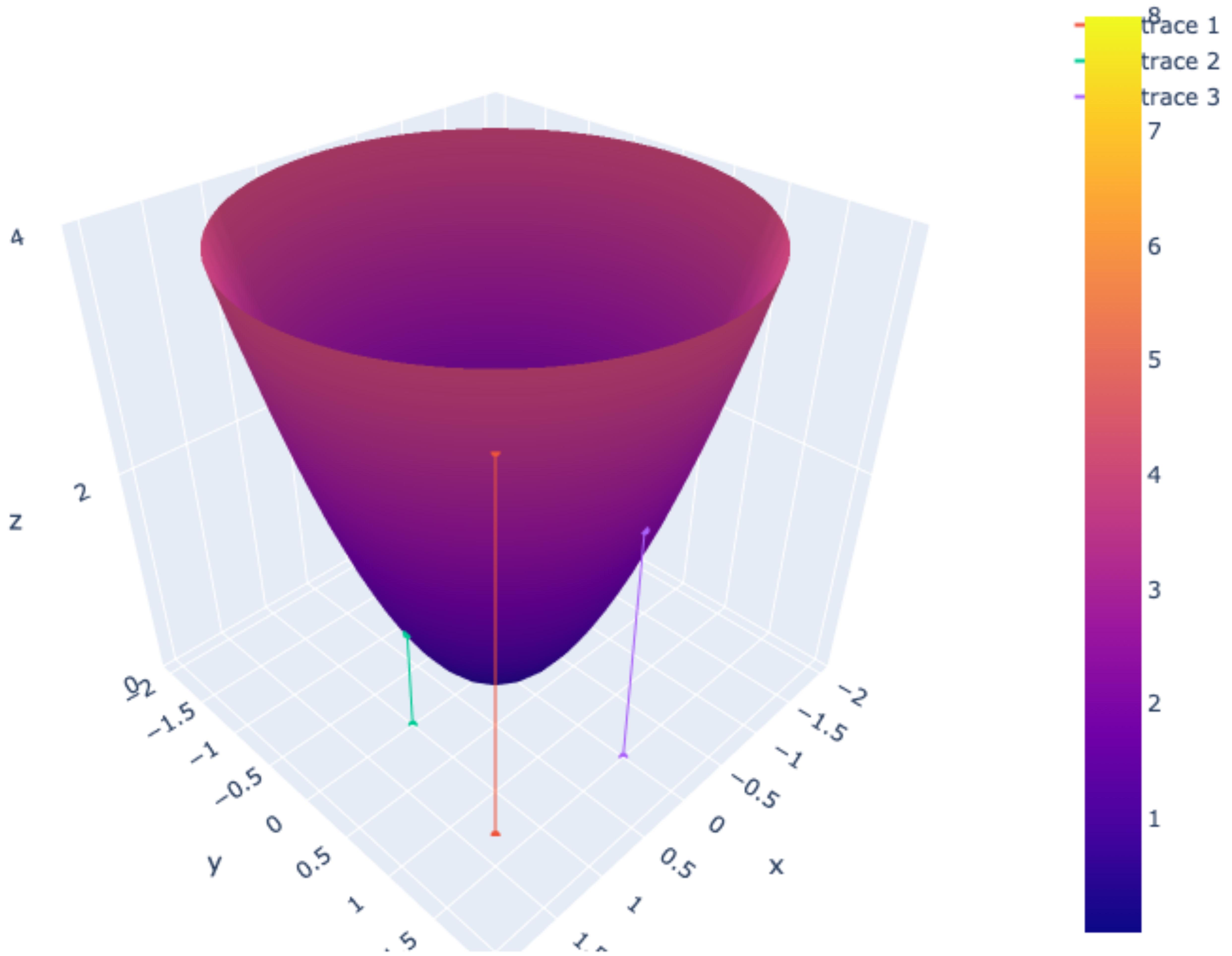
- 切り口をxy平面に戻すと、切り口は円に戻り、その円はA,B,Cを通る!



で?

So what?

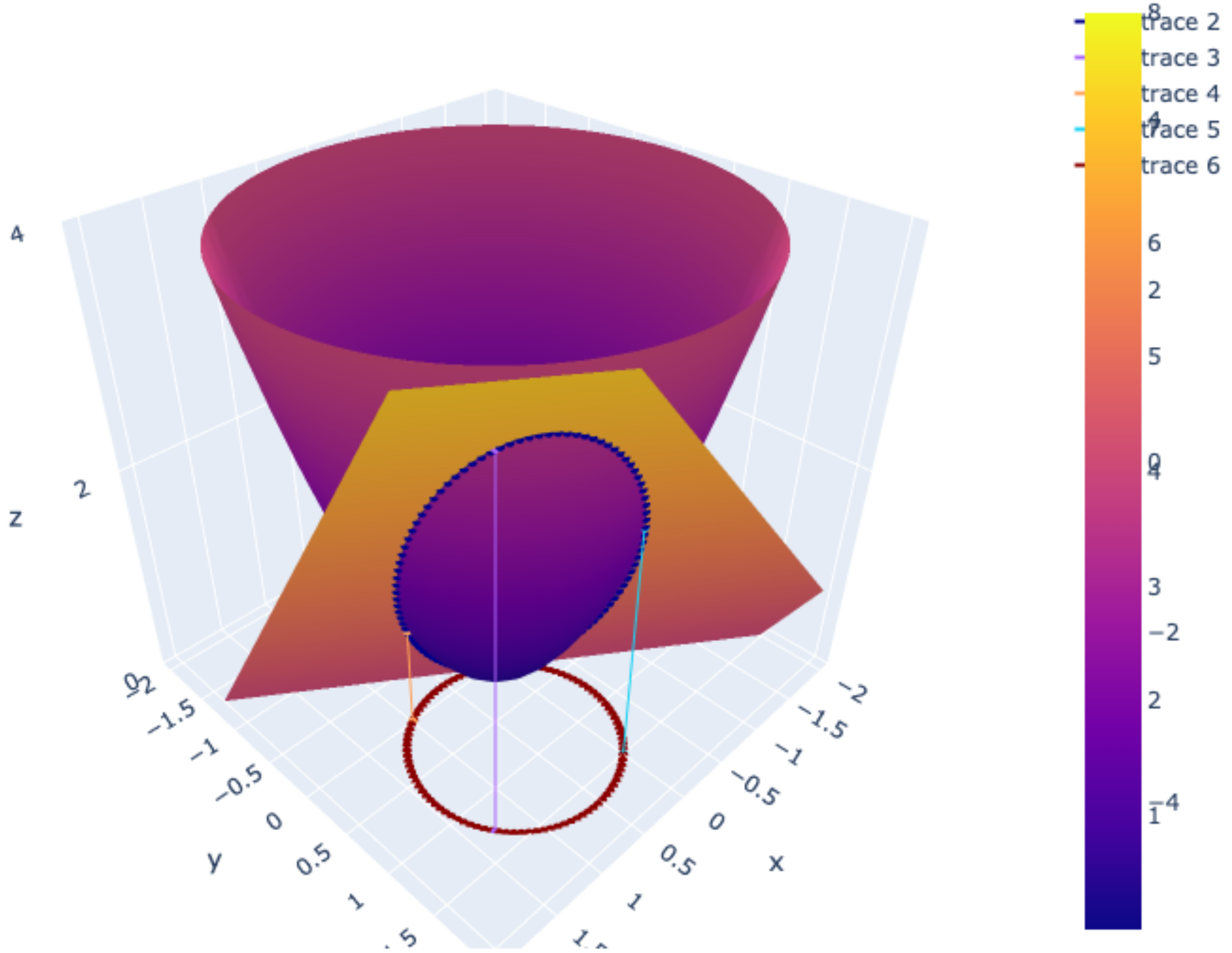
- ドロネー図を描きたい点を、放物面上に「持ち上げる」
- そのうちの3点A,B,Cを通る平面で、放物面を切る。切り口は楕円。
- 切り口をxy平面に戻すと、切り口は円に戻り、その円はA,B,Cを通る!



で?

So what?

- ドロネー図を描きたい点を、放物面上に「持ち上げる」
- そのうちの3点A,B,Cを通る平面で、放物面を切る。切り口は楕円。
- 切り口をxy平面に戻すと、切り口は円に戻り、その円はA,B,Cを通る!



で、で?

So, so what?

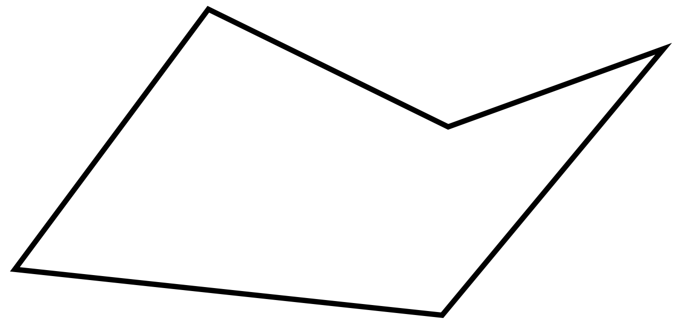
- 3点を通る円を求めるのに、そんな面倒なことしなくても、点の座標から直接方程式を立てて解けばいいじゃないか。

➡点の数が増えてくると、そのありがたみが実感できる。

凸包

Convex hull

- 「与えられた集合を含む最小の凸集合である。例えば X がユークリッド平面内の有界な点集合のとき、その凸包は直観的には X を輪ゴムで囲んだときに輪ゴムが作る図形として視認することができる。」(Wikipedia)
    - 2次元の凸包: 長方形、三角形、etc. ⇔非凸包:



    - 三次元の凸包: 正多面体、球、etc.⇔非凸包: ドーナッツ、茶碗、etc.
    - <u>接線(接平面)が、ふたたび自分自身と交わらない。</u>

ドロネー分割の再構成

Reconstruction of Delaunay tessellation

- xy平面上の三角形ABCと、点Pを考える。
- ABCを通る円をDとする。
- ABCを放物面にもちあげたものをA'B'C'とする。これらを通る平面をTとする。
- Dは放物面上の楕円D'に移される。
- A', B', C'と、D'の周上の点は、すべて平面T上にある。
- Dの内部にあった点は、すべてD'の内部に持ち上げられ、Tより「外側」になる。

- Dの外部にあった点は、すべて、D'の外部に持ち上げられ、Tより「上側」になる。
- もし点Pが、Dの内側にあれば、三角形ABCはドロネー三角形ではない。
- もし点Pが、Dの内側にあれば、P'はTより下側になる。

- 点の集合Q={A,B,C,D,E, ...}を使って三角形を作る。
- 三角形iを放物面に持ちあげると、持ち上げた頂点を通る平面T_iが定まる。
- 三角形iがDelaunay三角形である必要十分条件は、
Qのすべての頂点の放物面への持ち上げが、平面T_iの上側にあること。
- Qのすべての頂点の放物面への持ち上げが作る凸包の面は、この条件を満足する。

で、で、で?
So, so, what?

- 二次元の点集合のDelaunay三角形を知りたいなら、
- 点を三次元の放物面に持ちあげ、
- 凸包を作り、
- それを二次元に戻すと、できあがり。
- Delaunay三角形の外接円の中心をつなぐとVoronoi図ができる。
- (3次元の点集合なら、4次元の放物面$w = x^2 + y^2 + z^2$に持ちあげ、4次元凸包を作る)

空間の3点を通る平面

Equation of a plane passing through spatial 3 points

- 平面の方程式$z = ax + by + c$。
  x方向の勾配a、y方向の勾配b、(0,0)での切片
- これが$(x_1, y_1, z_1), (x_2, y_2, z_2), (x_3, y_3, z_3)$を通る。つまり、
  $z_1 = ax_1 + by_1 + c, z_2 = ax_2 + by_2 + c, z_3 = ax_3 + by_3 + c$を同時に満たす
- $$\begin{pmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & 1 \\ x_2 & y_2 & 1 \\ x_3 & y_3 & 1 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix}$$

空間の3点を通る平面

python+numpy

```
import numpy as np
def plane(p1,p2,p3):
    "p1,p2,p3を通る平面z=ax+by+cの係数a,b,cを返す"
    x1,y1,z1 = p1
    x2,y2,z2 = p2
    x3,y3,z3 = p3
    A = np.array([[x1,y1,1],[x2,y2,1],[x3,y3,1]])
    X = np.array([z1,z2,z3])
    # Aの逆行列とXのドット積
    abc = np.linalg.inv(A) @ X
    return abc
```

実用

Application

- 理屈上は簡単になっても、3次元の点の作図は面倒。
- Pythonのscipy.spatial.Delaunayを使う。

python+numpy+scipy

```python
from scipy.spatial import Delaunay
import numpy as np

points = np.array([[0, -0.1],
                   [0, 1.1],
                   [1.2, 0],
                   [1, 1]])
tri = Delaunay(points)
print(tri.__dict__)
```

```
{'_qhull': None,
 'paraboloid_scale': 0.5479452054794519,
 'paraboloid_shift': -0.005479452054794521,
 'simplices': array([[2, 3, 0], [3, 1, 0]], dtype=int32),
 'neighbors': array([[ 1, -1, -1], [-1,  0, -1]], dtype=int32),
 'equations': array([[ 0.49314377,  0.34383678, -0.79911544,  0.03438368],
       [ 0.39322352,  0.44182418, -0.80632913,  0.04418242]]),
 'coplanar': array([], shape=(0, 3), dtype=int32),
 'good': array([1, 1], dtype=int32),
 'nsimplex': 2,
 '_transform': None,
 '_vertex_to_simplex': None,
 '_vertex_neighbor_vertices': None,
 'vertices': array([[2, 3, 0], [3, 1, 0]], dtype=int32),
 '_points': array([[ 0. , -0.1],
       [ 0. ,  1.1],
       [ 1.2,  0. ],
       [ 1. ,  1. ]]),
 'ndim': 2,
 'npoints': 4,
 'min_bound': array([ 0. , -0.1]),
 'max_bound': array([1.2, 1.1]),
 'furthest_site': False}
```

単体

Simplex

- 1次元の線分、2次元の三角形、3次元の四面体…
  各次元で、線分の組みあわせでできる最も基本的な図形のことを
  単体 Simplexと呼ぶ(複数形はSimplices)。

- 「数学、とくに位相幾何学において、n 次元の単体（たんたい、英: simplex）とは、「r ≤ n ならばどの r + 1 個の点も r − 1 次元の超平面に同時に含まれることのない」ような n + 1 個の点からなる集合の凸包のことで、点・線分・三角形・四面体・五胞体といった基本的な図形の n 次元への一般化である。」
  (Wikipedia)

三角形分割の使い道

- 内挿が簡単
  頂点での(何かの)値が定まっている
  と、三角形の内部の任意の点での値は
  その比例配分で内挿できる。

- 三元系の相図

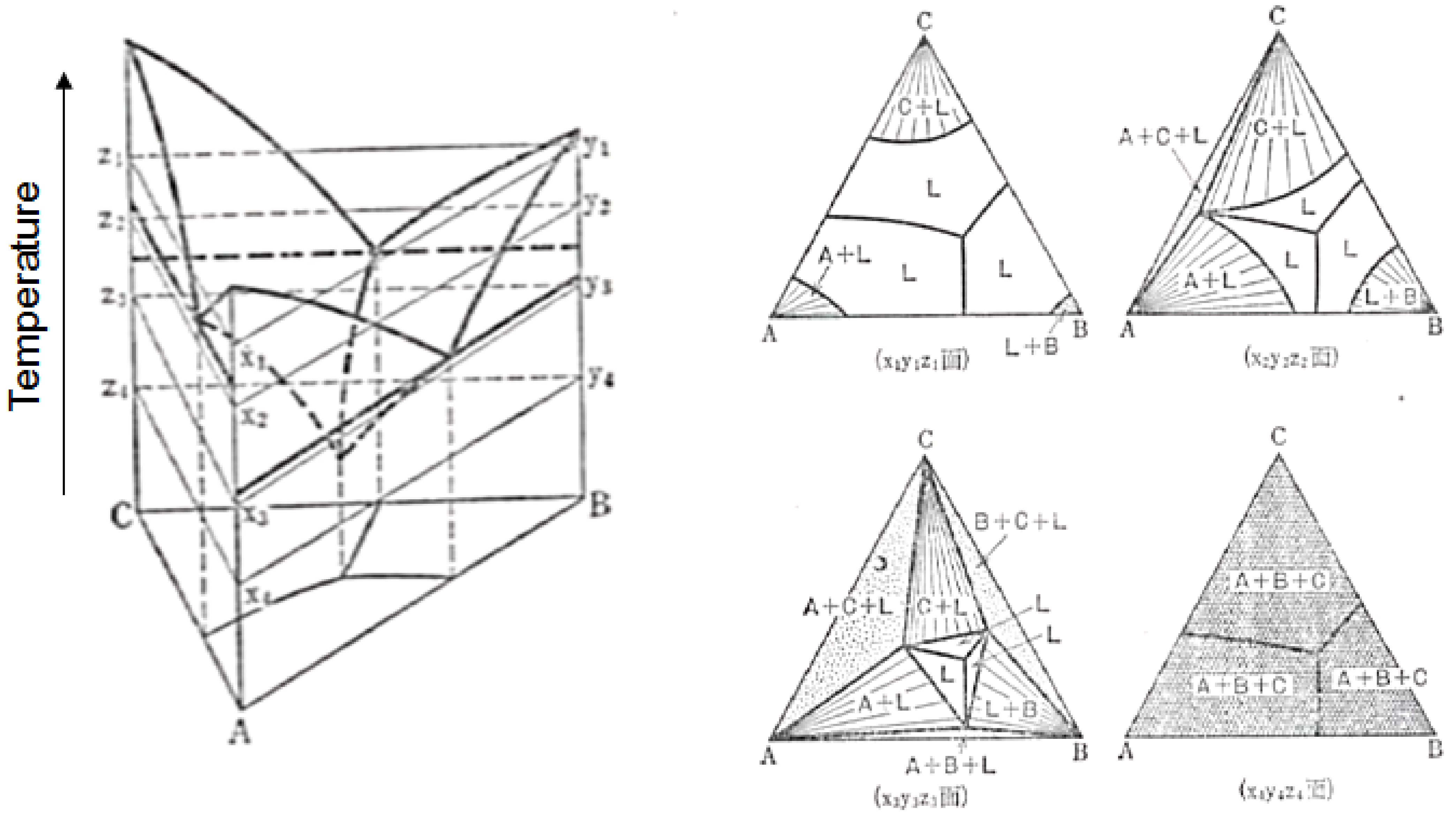


図 4.1　3 元系状態図と各温度における等温断面図

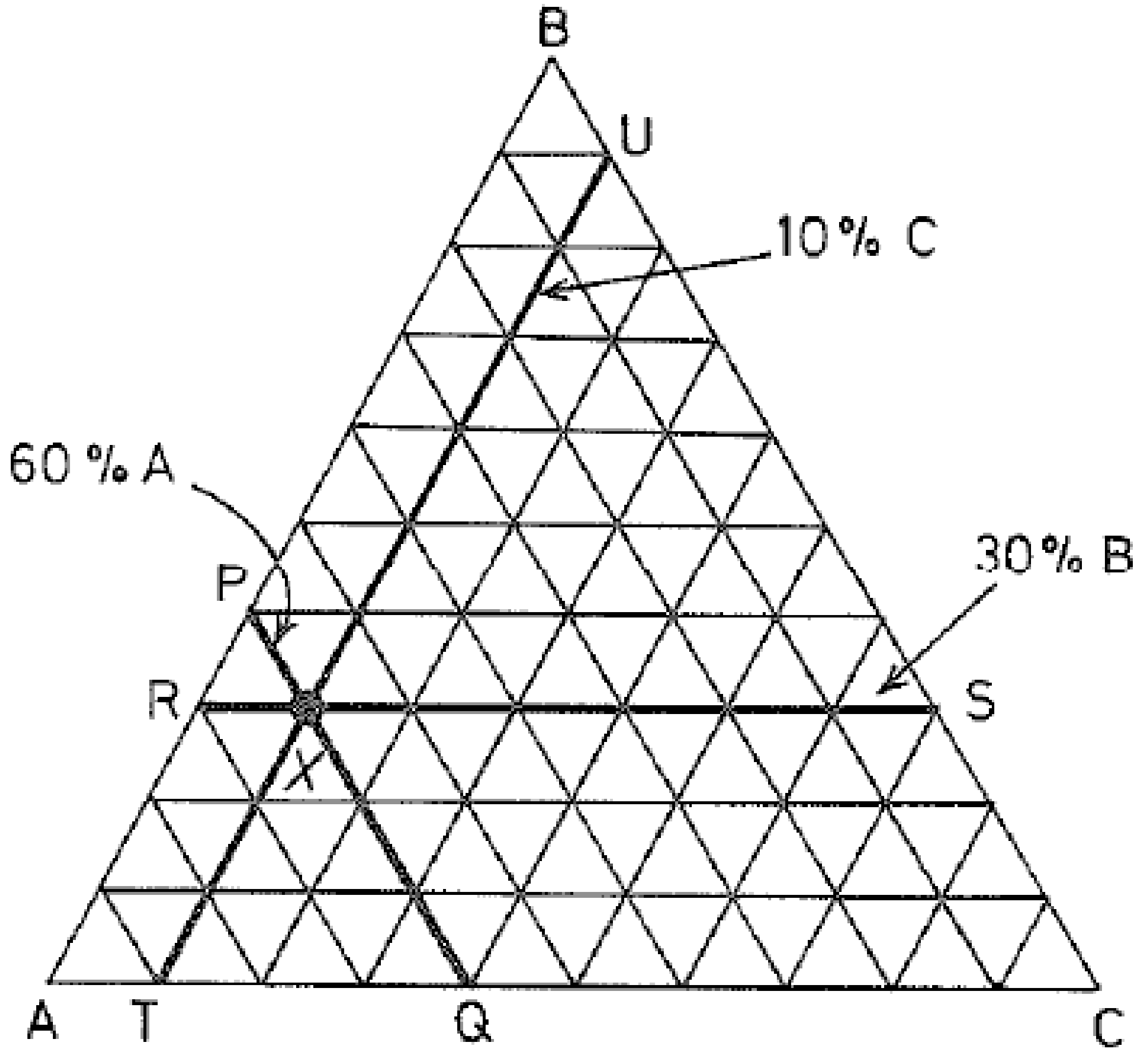


図 4.2　Gibbs の三角形

http://www.numse.nagoya-u.ac.jp/P6/kobashi/img/file5.pdf