

ケプラー予想と数値計算

情報学科 Group 43

河邊昌彦
G99P043-4

内藤一兵衛
G99P094-1

八幡淳
G99P146-1

発表日：2001年6月7日

1 はじめに

長年の間、確固たる証明がなされていなかったケプラー予想が1997年、Thomas C. Halesによって証明された。興味深いことにその証明の中で数値計算の知識が使われているのである。以下で、その証明と数値計算との関わりについて説明する。

2 問題の説明と概要

ケプラー予想 「ケプラーの法則」で有名なヨハネス・ケプラーは、無限の空間において同半径の球の敷き詰めを行ったとき最も密な構造、すなわち最密充填が面心立方格子(図1, 2)であるという予想を立てた。実際に彼は確かな証明をしたわけではないがこれは正しいと考えられ、同様に六方最密構造(図3)も最密充填であることも構造面から推測された。しかし、この証明は非常に困難であり、長い間未解決の問題であった。

最密充填 「ケプラー予想」では、無限空間における最密充填は面心立方格子であると述べられている。しかし実際には、六方最密構造も同様に最密充填である。実は2つとも基本的には同じ構造をしている。この2つの違いは、有機化学におけるシス・トランス型の関係と類似している。どちらの構造もある1つの球に焦点をあわせると、それに接している球の数は12個である。また、充填密度も共に $\pi/\sqrt{18}$ である。

数値計算との関連 この証明の際には、構造的な問題点から場合分けが必要となる。詳しい場合分けは後述するが、この場合分けをしたものに関してそれぞれ証明をする。その中で使われるのが区間演算である。結果として

この区間演算の使用と計算機の進歩によって、「ケプラー予想」は証明されたのである。

3 ケプラー予想の定式化

3.1 概念定義

Delaunay 分割 ([1] p.2) 球の中心を頂点とする多面体で、空間全体を分割する(図4)。このとき、一意的に分割されるように一定の規則を設ける。この分割を Delaunay 分割といい、分割によってできた四面体を simplex と呼ぶ。

Delaunay star ([1] p.2) Delaunay 分割された空間で、ある球の中心 v とする。すると、 v の周りには、 v を共有する simplex が集まっている。これらの simplex の集合を Delaunay star と呼ぶ。即ち、Delaunay star $D^*(v)$ は、

$$D^*(v) = \{S \mid S \in \mathbf{S}, v \in S\} \quad (1)$$

と定義される。ただし、 \mathbf{S} は simplex 全体の集合である。

スコア ([1] pp.3-4) simplex S の体積を $\text{vol}(S)$ 、密度を $\delta(S)$ とし、 δ_{oct} を正八面体の密度とする。すると、

$$\Gamma(S) = \text{vol}(S) \cdot (\delta(S) - \delta_{oct}) \quad (2)$$

は、 S と全体の密度の関係を表す指標となる。これを S のスコアと呼ぶ。 $\Gamma(S)$ は、 S が単位正四面体である時に最大になり、そのときの値を $1pt$ とする。

\mathbb{R}^3 内の全ての Delaunay star のスコアが $8pt$ 以下ならば、全体の密度は $\pi/\sqrt{18}$ 以下である ([1] pp.7-8)。従って、“いかなる Delaunay star であっても、そのスコアは $8pt$ 以下である” ということが示されれば、ケプラー予想は証明されたことになる。

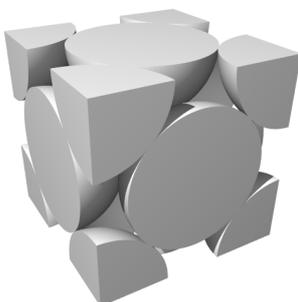


図 1: 面心立方格子 (1)

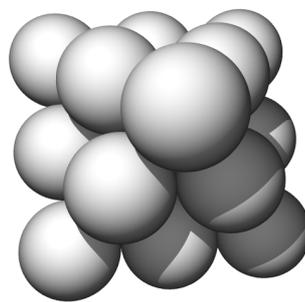


図 2: 面心立方格子 (2)

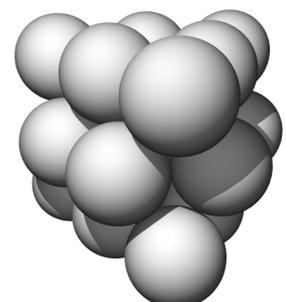


図 3: 六方最密構造

リージョン ([1] p.4) Delaunay star D^* の中心に単位球を考え、 D^* をこの単位球面上に放射状に投影する。すると、 D^* の辺は、球面上の弧に投影される。ただし、長さが 2.51 より長い辺は投影しないことにする。単位球面は、投影された弧によって分割される (図 5)。分割された領域をリージョンと呼ぶ。

3.2 証明の概略

5 ステップ ([1] pp.8–10) リージョンの形による場合分けで、証明は 5 個のステップに分かれる。そのそれぞれに関して、Delaunay star のスコアの上界が $8pt$ であることを示す。

9 条件 ([1] pp.21–26) ステップ 1 において、仮に、スコアが $8pt$ を越える Delaunay star があったとする。その Delaunay star は 9 個の条件を満たさなければならない。ある一つの Delaunay star だけがこれらの条件を満たすことができる。逆にいえば、それ以外の Delaunay star のスコアは $8pt$ 以下である。

24 面体 ([1] pp.26–28) 上で全ての条件を満たした Delaunay star は 24 面体である (図 6)。この場合に関しては、Delaunay star に含まれる simplex の辺の長さに関してさらに場合分けをする。その中では、例えば、simplex S の辺の長さを y_1, \dots, y_6 とし、

$$y_1 \in [2.2, 2.51], \quad y_2, \dots, y_6 \in [2, 2.51] \quad (3)$$

ならば

$$\Gamma(S) < 0.5pt \quad (4)$$

ということを用いて証明する。その結果、24 面体のスコアも $8pt$ 以下であることが示された。

4 区間演算を使った証明

4.1 区間演算の方法

スコア関数の整理 式 (2) を少し変形すると

$$\Gamma(S) = -\delta_{oct} \text{vol}(S) + \frac{1}{3} \sum_{i=0}^3 \text{sol}_i(S) \quad (5)$$

となる。 $\text{sol}_i(S)$ は S の頂点 i における立体角である。

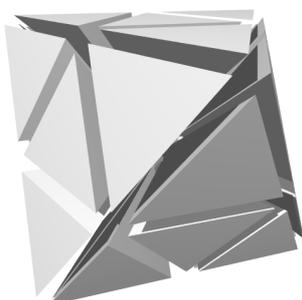


図 4: Delaunay 分割

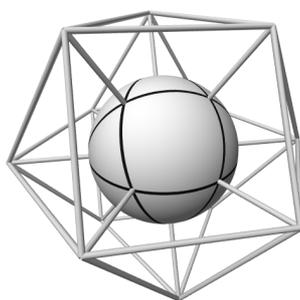


図 5: リージョン分割



図 6: 24 面体

y_i を S の辺の長さとおいているので、逆にいえば、辺の長さが決まれば S の形が決まる。つまり、 Γ は y_1, \dots, y_6 で表される事がわかる。

テイラー不等式 sol_i は立体角を表しているので逆三角関数で表される。しかし、逆三角関数は区間演算で計算できない。そこで、テイラー不等式を使うことにより多項式で近似して範囲を出すことにする。

一般の C^{n+1} 級の関数 $f(t)$ で考える。 a を中心とした $f(t)$ の n 次テイラー展開を $p_n(t)$ とし、 m, M を $f^{(n+1)}(t)$ の下界と上界、 $\alpha(t) = (t-a)^{n+1}/(n+1)!$ とすると、次のようになる。

$$\begin{cases} p_n(t) + \alpha(t)m \leq f(t) \leq p_n(t) + \alpha(t)M & (\alpha(t) > 0) \\ p_n(t) + \alpha(t)M \leq f(t) \leq p_n(t) + \alpha(t)m & (\alpha(t) < 0) \end{cases}$$

細分化 しかし、ここでそのまま範囲をいれると、 t が a から離れるにつれ、過大評価となってしまふ。そこで、細かく切って、その部分部分で多項式で近似し、そこで出た範囲の和集合を取って $f(t)$ の範囲とすることにす。

4.2 計算機による証明

アルゴリズム 与えられた y_1, \dots, y_6 の範囲でスコアを区間評価する。評価結果が $0.5pt$ 未満に収まらなければ、定義域を半分に分割し、それぞれを再帰的に計算する。

実行結果 定義域を 71640 個に分けた時、プログラムが止まった。このことにより、式 (3) においてケプラー予想が証明された。

5 まとめ

ケプラー予想の証明は、構造的に場合分けされる。その中の一つの場合を取り上げ、区間演算による証明を説明した。他の場合に関しても、同様に数値計算を使って証明されている。即ち、数値計算が証明の要となっているのである。

参考文献

- [1] Thomas C. Hales, “Sphere Packings I”, (1997)
- [2] Thomas C. Hales’ Home Page
<http://www.math.lsa.umich.edu/~hales/countdown/>