モンテカルロ法によるディリクレ問題への非線形回帰の応用

北口景子　(指導教員：吉田裕亮)

1　はじめに

ある平面状の鉄板を考えたとき，鉄板の境界における温度が定まっていれば，熱平衡状態にある鉄板内部の温度分布は完全に定まる．このような，温度分布を求める問題は,「ディリクレ問題」と呼ばれている．ディリクレ問題を厳密に解くには，微分方程式を用い，いわゆる「調和関数」と呼ばれる関数を求めることになる．しかし，実際には鉄板の温度分布のおおよその値が求まれば事足り，厳密解を必要としない状況も少なくない．本研究では，より少ない計算量でおおよその温度分布を定める手法を考えることにする．ランダム・ウォーク原理によって求めた値（ランダム近似解）を非線形カーネル回帰によって平滑化することにより十分な近似値が保たれることを，ランダム・ウォークの回数，サンプルの点の数の変化と共に考察する．

2　ディリクレ問題

ある領域 Ω の境界に境界条件

$$\Phi(x,y)\mid_{\partial\Omega}=f(x,y)$$

を与えて，内部では

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Phi(x,y)+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\Phi(x,y)=0$$

を満たす関数 Φ を求める境界値問題は，ディリクレ問題といわれる．ここで，Φ は「調和関数」と呼ばれる関数である．

平衡温度分布に関する確率的モデルを構成するために有効なものとして，次の調和関数の重要な性質がある．

2.1　平均値原理

平衡温度状態にある平面板の内点を P とし，P を中心とする円周を C とする．C 上の点がすべてこの平面板の内点になっているとき，P における温度は C 上の温度の平均値に一致する．

平面上の正方格子での離散型平均値原理は，平衡温度状態にあると考える平面板を格子状に区切る．内部格子点の温度は，それに最も近い他の 4 つの格子点の温度の平均値に一致するという表現ができる．

2.2　ランダム・ウォーク原理

2.1 と同様に，平面板に正方格子を考える．平面板の境界について，値は与えられているものとする．ここで，格子に沿って，ランダムに選んだ方向（各内部格子点ごとで 4 つの方向がある）に動く運動およびその結果としての路を「格子に沿うランダム・ウォーク」とよぶ.「ランダムに選ぶ」というのは，どの格子点でもそれぞれの方向に 1/4 ずつの確率で移動することを意味する．このランダム・ウォークを用いて，内部格子点での温度を計算するためには，次のような性質を利用する．

すなわち，内部格子点 P からスタートするランダム・ウォークを n 回行う．それぞれのランダム・ウォークが最初に到達した境界格子点での値を，$t_1^*, t_2^*, \cdots, t_n^*$ とする．このとき，平均値

$$\frac{t_1^*+t_2^*+\cdots+t_n^*}{n}$$

は n を十分に大きくすれば，P の温度に十分近くなる．これは，先の原理と異なり，1 つの内部格子点での温度を，他の内部格子点での温度を利用することなく求める方法である．

3　非線形カーネル回帰

本研究で用いる非線形回帰は，カーネル法である．カーネル法は，データを高次元のベクトル空間へ写像し，解析しやすいデータに変換するため，複雑な構造を持つ非線形データの数量化に有効な手法である．

$x=(\xi,\eta), x'=(\xi',\eta')$ の 2 つの二次元入力から計算される，カーネル関数 $k(x,x')$ を考える．ここではガウスカーネル

$$k(x,x')=\exp(-\beta \parallel x-x' \parallel^2) \tag{1}$$

を用いることにする．
ただし，$\parallel \parallel^2$ は， ベクトル z のユークリッドノルムの二乗とする．関数 k は，$x=x'$ のとき最大値 1 を取り，直観的には x と x' の近さを表す量になる．また，本研究において，パラメータ β はあらかじめ適当な値を決めておく．カーネル回帰では，x に対して

$$y=\sum_{j=1}^{n}\alpha_j k(x^{(j)},x) \tag{2}$$

という関数をあてはめる．与えられた x に対して，各サンプル $x^{(j)}$ との近さを測った $k(x^{(j)},x)$ を一つの成分と見て，それらを α_j という重みで足し合わせたモデルである．二乗誤差

$$r_k(y,x;\alpha)=(y-\sum_{j=1}^{n}\alpha_j k(x^{(j)},x))^2 \tag{3}$$

を最小にするように $\alpha=(\alpha_1,\ldots,\alpha_n)^T$ を決める．ここで，(i,j) 成分が $K_{ij}=k(x^{(j)},x^{(i)})$ である行列を

$$K=\begin{pmatrix} k(x^{(1)},x^{(1)}) & \ldots & k(x^{(n)},x^{(1)}) \\ k(x^{(1)},x^{(2)}) & \ldots & k(x^{(n)},x^{(2)}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x^{(1)},x^{(n)}) & \ldots & k(x^{(n)},x^{(n)}) \end{pmatrix} \tag{4}$$

とおくと，二乗誤差の総和は

$$R_k(\alpha)=\sum_{i=1}^{n}r_k(y_{(i)},x_{(j)};\alpha)=(y-K\alpha)^T(y-K\alpha) \tag{5}$$

と得られる．解は（K が正則行列なら）

$$\alpha = (K^T K)^{-1} K^T y \tag{6}$$

である．さらに，任意の x, x' に対して $k(x, x') = k(x', x)$ が成り立ち，K は対称行列となり，$K^T = K$ より $\alpha = K^{-1} y$ と書ける．このようにカーネル関数を使って拡張した式 (2) へのモデルのあてはめ，近似を，カーネル回帰と呼ぶ．

4　数値実験例

4.1　概要

熱平衡状態にあると考える平面板に，16×16 の格子，256 の内部格子点からなる正方格子を考える．平面板は，一辺は 100 に，他の 3 辺は 0 に保たれているものとする（図 1）．求める内部格子点（サンプル点）は， 内部の点からランダムに選出するものとする．

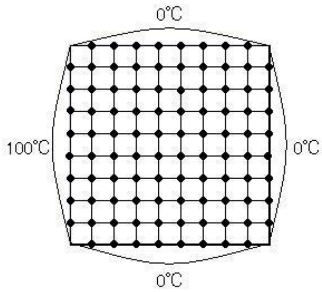

図 1: 境界値条件

4.2　結果

ここに挙げる実験例は，1 つのサンプル点につきランダム・ウォークを 16 回行い，設定した 256 のサンプル点のうち 25（約 10%）の内部格子点につきランダム近似解を求め，平滑化した結果である．まず，求めた 25 の内部格子点におけるランダム近似解は，図 2 のようになる．次に図 2 に示したデータを非線形カーネル回帰により平滑化したものが，図 3 である．これは，図 4 に示された真値と，視覚的にもあまり違いがないように感じられる．

また，今回行った実験における，条件の変化と，近似値と真値との差の関係は，表 1 のようになった．なお，表 1 に表すデータは，近似値と真値との差を二乗し，対数をとった値である．この結果から，ランダム・ウォークの回数や，求めるサンプル点の数の変化によっては，真値との差にあまり影響がないと考えられる．すなわち，ある程度条件が変化しても，非線形カーネル回帰による平滑化によれば真値との差はほぼ一定に近い値に保たれると分かった．

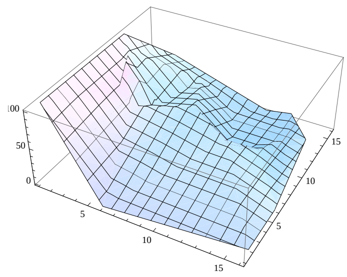

図 2 :ランダム近似解
（サンプル点数:25, ランダム・ウォーク回数:16）

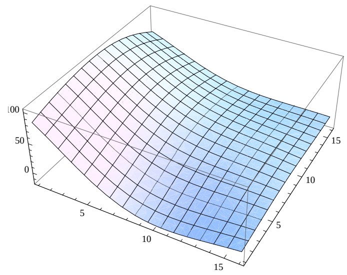

図 3 :非線形カーネル回帰による平滑化後

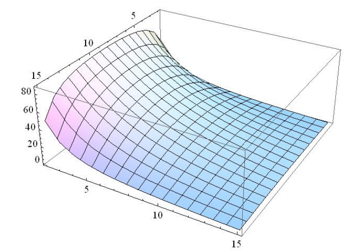

図 4 :真値（サンプル点数:256）

		ランダム・ウォークの回数 (回)			
		64	32	16	4
サンプル点数 (%)	63	4.49	4.51	4.58	4.68
	31	4.55	4.55	4.57	4.93
	10	4.73	4.55	4.83	5.22
	4	5.98	5.06	5.49	5.98

表 1 :近似値と真値の差

5　まとめと今後の課題

先の実験により，熱平衡状態にある平面板の温度分布を求めるディリクレ問題の解法として，ランダム・ウォーク原理と非線形カーネル回帰を応用することは有効な方法であると思われる．非線形カーネル回帰の平滑化により，少ない計算量でも真値にかなり良好な値が得られると思われる．今回の実験では，正方形の平面を用い，境界条件も単純な値を設定した．今後の課題としては，より複雑な形状の平面又は立体あるいはより複雑な境界条件をもつ場合でも，今回のような結果が得られるか実験を行い，確かめたい．

参考文献

[1] 赤穂昭太郎:カーネル多変量解析　非線形データ解析の新しい展開 (2008)