

曲った空間上のモンテカルロ・シミュレーションに 基づく陰関数曲面のサンプリング

田中 覚* 森崎 暁夫* 中田 聡*
福田 康† 中村智晴*

* 福井大学工学部 † ビジュアルソフト

あらまし 陰関数曲面, すなわち方程式の形で定義された曲面をサンプリングするための, 確率過程を用いた新しい手法を提案する. 本手法では, 確率微分方程式を用いて曲った空間上の確率過程を定義し, これに基づいてモンテカルロ・シミュレーションを実行する. 本手法は陰関数曲面上に高速かつ一様にサンプル点を生成することができる. この論文では, 我々が導入する確率過程の定義と性質の記述から始めて, 生成されるサンプル点の一様性の分析, 複雑な曲面のサンプリング例などを述べる.

Sampling Implicit Surfaces Based on Monte Carlo Simulation on Curved Spaces

Satoshi TANAKA* Akio MORISAKI* Satoru NAKATA*
Yasushi FUKUDA† Tomoharu NAKAMURA*

*Faculty of Engineering, Fukui University
†Visualsoft

Abstract We propose a new stochastic method to sample implicit surfaces, i.e. surfaces defined with mathematical equations. In our method, we define a stochastic process on a curved surface based on a stochastic differential equation, and apply the stochastic process to Monte Carlo simulation, which generates sample points on the target implicit surface quickly and uniformly. In this paper, we describe definition and properties of the stochastic process, investigate uniformity of generated sample points, and apply our sampling method to complicated implicit surfaces.

1 はじめに

近年のコンピュータ・グラフィックス技術の発達に伴い, より複雑な形状を正確かつ高速にコンピュータ上で可視化したいという要求が高まりつつある. この要求に応えるひとつの方法は, 非線形方程式の形で定義された「陰関数曲面」の利用である. 陰関数曲面は, 形状的にも位相幾何学的にも複雑・多様な曲面を, 簡潔かつ正確に表現できる. また, 単純な基本プリミティブの組み合わせでは上手く表現で

きないような流麗な曲面を, 比較的簡単に表現する事が出来る.

陰関数曲面をコンピュータ上で可視化するには, これを定義する方程式を数値的に解き, その解を用いて, 曲面上に多数のサンプル点を (1) 高速に, かつ (2) 一様に生成する必要がある. この目的のための従来の手法のひとつに「粒子力学的方法」がある ([1], [2], [3], [4]). これは, 曲面上をニュートン力学に従って運動する多数の仮想粒子を考え, その多粒子系の平衡状態での粒子配置を数値的に

生成することにより、サンプル点群を得るものである。このサンプリング手法は、現在知られている手法の中で最も高速なものであり、曲面の対話的モデリングや変形する曲面のアニメーション作成に利用可能である。しかし、数百点から千点程度以上のサンプル点を生成しようとする、急速に計算が遅くなるという問題がある。これは、曲面上の粒子の拡散を個々の粒子間に働くポテンシャル力によって行うため、計算時間が粒子数、すなわち得られるサンプル点数の2乗に比例して増加することによる。

そこで本論文では、仮想粒子の拡散運動を、ニュートン力学系としてではなく、曲った空間上の確率過程を用いて実現する手法を提案する。これは曲面上のモンテカルロ・シミュレーションに基づくサンプリング手法である。仮想粒子は陰関数曲面上でブラウン運動をし、その軌跡がサンプル点となる。サンプリング計算は1粒子系でも実行可能であり、計算時間は軌跡の長さ、すなわち得られるサンプル点の数に比例して増加するにすぎない。また、得られるサンプル点は陰関数曲面上で一様に分布し、その事を確率分布関数を用いた数学的解析で示すこともできる。

2 曲った空間上の確率過程

2.1 確率微分方程式の定義

座標変数 $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots, q_d)$ で張られる d 次元 Euclid 空間 \mathbf{R}^d を考える。この空間の中で、拘束条件

$$F(\mathbf{q}) = 0, \quad (1)$$

を満たす点の集合として定義される陰関数曲面を考える。ここで、 $F(\mathbf{q})$ は2階微分可能な \mathbf{q} のスカラー関数とする。本節では、式(1)で定義される陰関数曲面上に閉じ込められた確率過程、すなわち拘束面上のブラウン運動を記述する確率微分方程式を定義し、その方程式の各項の意味を述べる。

まず、仮想的な時間変数 t を導入する。次に、仮想粒子の位置ベクトル \mathbf{q} の、 t に対する発展を記述

するものとして、以下のような確率微分方程式を立て、同時に、その解として確率過程を定義する。

$$dq_i(t) = dq_i^{(T)}(t) + dq_i^{(S)}(t) + dq_i^{(N)}(t). \quad (2)$$

ここで、右辺の各項は、それぞれ次式で与えられる。

$$dq_i^{(T)} \equiv \sum_{j=1}^d P_{ij} dw_j \quad (3)$$

(接平面方向の変位項),

$$dq_i^{(S)} \equiv -\frac{D}{|\nabla F|^2} \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \right) \text{Tr} \{ (\partial^2 F) \cdot P \} dt \quad (4)$$

(確率過程的補正項),

$$dq_i^{(N)} \equiv -KD \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \right) \frac{F}{|\nabla F|^2} dt \quad (5)$$

(法線方向の引力項).

式(3)は、接平面方向の変位項である。 $dw_j(t)$ は、以下のような統計的性質を持つガウス型白色雑音である。

$$\langle dw_i(t) \rangle = 0, \quad (6)$$

$$\langle dw_i(t) dw_j(t) \rangle = 2D \delta_{ij} dt. \quad (7)$$

D は拡散定数であり、正の定数である。また、 P_{ij} は拘束面上への射影演算子行列であり、次式で定義される。

$$P_{ij}(\mathbf{q}) \equiv \delta_{ij} - \frac{1}{|\nabla F(\mathbf{q})|^2} \frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial F}{\partial q_j}. \quad (8)$$

∇ は \mathbf{q} についての微分であり、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。射影演算子行列 P_{ij} は、ランダム変位ベクトル $d\mathbf{w}$ を拘束面上へ射影し、拘束面(1)の接平面方向へのランダム変位を実現する。

式(4)は確率過程的補正項である。 $(\partial^2 F)$ は行列であり、行列要素は $\partial^2 F(\mathbf{q}) / \partial q_i \partial q_j$ で与えられる。式(3)が生成する接平面方向へのランダム変位は、通常は微小な大きさであるが、ガウス型白色雑音の性質によって、まれに有限の大きさを取りうる。この場合、接平面方向への有限な大きさの飛び出しが起こり、確率過程の拘束面内への閉じ込めが壊れてしまう。式(4)で与えられる確率過程的補正項は、この飛び出しを補正する項である。この確率過程的補正項は $F(\mathbf{q})$ の2階微分を含み、これにより、確率過程に曲率の効果が取り入れられる。

式 (5) は法線方向の引力項である。正の定数 K は引力の強さを表すパラメータである。この引力項のおかげで、任意の初期条件から時間発展を始めても、確率変数 $\mathbf{q}(t)$ は急速に拘束面上に引き寄せられ、拘束面上での確率過程が実現される。これは数値計算の実行を容易にしてくれる。

確率微分方程式 (2) は、拘束条件付き量子力学系の効率的な数値シミュレーションのために文献 [5], [6] で提案されている方程式を基礎にして、これをより精密な数値計算が行なえるように改良したものである。

2.2 拘束面への閉じ込め

確率微分方程式 (2) の解が拘束条件 (1) を満足することは、簡単に証明することができる。関数 $F(\mathbf{q}(t))$ の微小時間発展 $dF(\mathbf{q}(t)) \equiv F(\mathbf{q}(t+dt)) - F(\mathbf{q}(t))$ を考え、確率過程論において良く知られた伊藤の公式 (dw_i が式 (7) より $dt^{1/2}$ 程度大きさであることをなど考慮した、修正された合成関数の微分公式 ([7], [8])) を用いれば、次式が得られる。

$$dF(\mathbf{q}(t)) = -KDF(\mathbf{q}(t)) dt. \quad (9)$$

これは、 F についてのランダムさを含まない閉じた方程式であるから、通常の積分公式を用いて解ける：

$$F(\mathbf{q}(t)) = F(\mathbf{q}(0)) \exp[-KDt]. \quad (10)$$

従って、時間 t の増大とともに、初期条件によらず、関数 $F(\mathbf{q}(t))$ の値は指数関数的に急速にゼロとなり、拘束条件 (1) が実現される。

図 1 は、半軸長 3, 2, 1 の 3 次元楕円面に対して、初期条件 $\mathbf{q}(0) = (100, 100, 100)$ で確率微分方程式 (2) を数値的に解き、得られた解を用いて関数 $F(\mathbf{q}(t))$ の時間発展を調べたものである。前述の理論どおりに急速に拘束条件が成立していることがわかる。

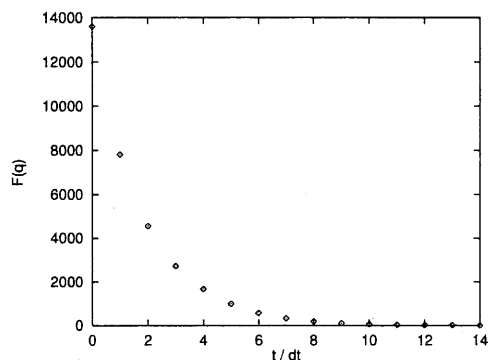


図 1: 初期条件によらない拘束条件の成立

2.3 定常状態における確率分布

確率微分方程式 (2) は、拘束面上での一様なブラウン運動を実現する。そして、拘束面の広さが有限であれば、定常状態が実現される。(拘束面が無限に広い場合は、可視化領域を考慮して、適当な境界条件を入れて有限化すれば良い。) 定常状態での確率分布測度は、以下のように計算される ([5], [8]):

$$d\mu = \prod_{A=1}^{d-1} dQ^A \sqrt{g}. \quad (11)$$

ここで、 Q^A は拘束面上の $d-1$ 次元の曲った空間を張る座標変数である。また、 g はこの曲った空間における計量テンソル

$$g_{AB} \equiv \sum_{i=1}^d \frac{\partial q_i}{\partial Q^A} \frac{\partial q_i}{\partial Q^B}, \quad (12)$$

の行列式である。

式 (11) は、拘束面上の $d-1$ 次元空間上の体積分測度に他ならない。これは、拘束面上の任意の微小領域において、確率微分方程式 (2) の解の出現確率が、その微小領域の体積 (拘束面上の微小面積) に比例する事を意味する。すなわち、確率微分方程式 (2) の解は、拘束面 (陰関数曲面) 上に均一に分布する。

数値実験として、半軸長 4 と 1 の楕円 $q_1^2/16 + q_2^2 = 1$ に対する確率微分方程式 (2) の数値解の分布を調べよう。楕円上の 1 次元空間を張る座標変数として

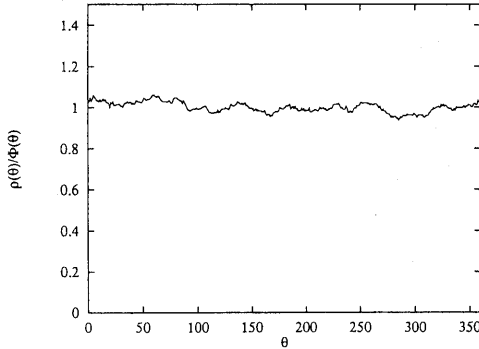


図 2: 楕円上のサンプル点分布の一様性

は、角度パラメータ θ を用いることができる。すなわち、 $q_1 = 4 \cos \theta$, $q_2 = \sin \theta$ である。計量テンソルの行列式は $g = 16 \sin^2 \theta + \cos^2 \theta$ となる。図 2 は各角度領域における数値解の出現頻度 $\rho(\theta)$ を求め、規格化した上で、これと理論的に予言される確率分布 $\Phi(\theta) = \sqrt{g} / \int \sqrt{g} d\theta$ の比を取ったものである。全ての角度領域において、比は 1 になり、体積分測度に比例する確率分布測度、すなわち一様性が実現していることがわかる。

3 陰関数曲面のサンプリング

3.1 サンプリング・アルゴリズム

陰関数曲面上のサンプル点を求める我々の手法は、確率微分方程式 (2) を数値的に解き、その解、すなわち確率過程の軌跡を集めてサンプル点とするというものである。言い換えれば、確率微分方程式 (2) に基づくモンテカルロ・シミュレーションを行うことにより、サンプル点を生成する。なお、確率微分方程式 (2) は、確率過程を拘束面上に閉じ込める機構を含んでいるが、それでも、差分化の影響で拘束面からのわずかな飛び出しは残る。これは、Newton 法などで補正する。

通常のモンテカルロ・シミュレーションと同様に、エルゴード定理により、背景にある確率過程の集合平均を与える確率規則と長時間平均を与える確率

規則は同等とみなすことができる。これと 2.3 節の議論より、1 つの粒子の 1 つのサンプル経路の軌跡を計算するだけで、陰関数曲面上に一様にサンプル点を生成することができる。

我々のサンプリング手法は、 $F(\mathbf{q})$ が 2 階微分可能であれば適用可能である。 $F(\mathbf{q})$ の関数形が複雑な場合、1 階及び 2 階微分の計算式を求めるのが大変であるが、その場合は数値微分を用いることもできる。また、2.2 節の議論より、初期条件を曲面上に選ぶ必要もない。また、我々の手法は、時間に対する微分方程式を解くというものであるから、粒子力学的方法の高速性をそのまま引き継いでいる。そして、サンプル点数が増えても計算時間はサンプル点数、すなわち軌跡の長さに比例して比例するにすぎない。

3.2 パラメータの選択

数値シミュレーションの実行においては、確率微分方程式 (2) に含まれる以下の 3 つのパラメータに値を与えねばならない: $D, K, \Delta t$.

D は通常 1 と置いて良い。これは、 D が常に Δt との積の形で現れるので、 D の値の選択を Δt の値の選択に吸収させることができるからである。 Δt の値の選択は要求される計算精度によるが、我々の数値実験によると、大きさが 1 程度の曲面のサンプリングを行う場合は、通常、0.005 から 0.01 程度の大きさで良い。正の定数 K は、理論上は任意の正の値で良いはずであるが、数値シミュレーションにおいては以下のように選択するのが最も効率が良い:

$$K = \frac{1}{D\Delta t} = \frac{1}{\Delta t}. \quad (13)$$

このように K を選んでおくと、法線方向の引力項 $dq_i^{(N)}$ は、Newton 法の 1 ステップにおける補正と同じことになる。

$$\Delta q_i^{(N)}(t) = -\frac{\partial F}{\partial q_i(t)} \frac{F(\mathbf{q}(t))}{|\nabla F(\mathbf{q}(t))|^2}. \quad (14)$$

これは、 $\mathbf{q}(t+\Delta t)$ を生成する前に、あらかじめ $\mathbf{q}(t)$ に対して 1 ステップだけの Newton 補正を施して

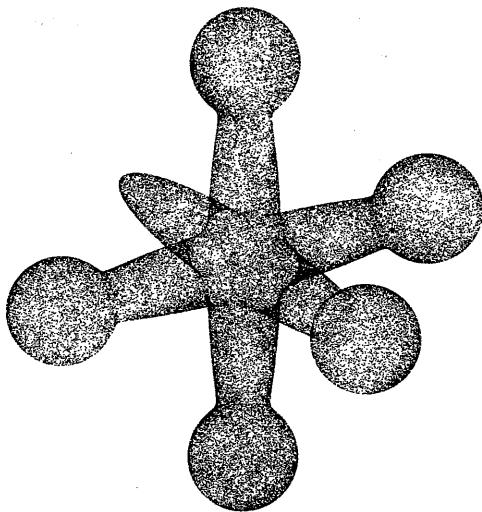


図 3: 複雑な凹凸のある曲面のサンプリング例

おくことに相当する。これにより、最終的なサンプル点を得るために $\mathbf{q}(t + \Delta t)$ に対して行なう本番の Newton 補正は非常に小さくてすむ。

以上のことより、数値シミュレーションを行う前にあらかじめ決めておかねばならないパラメータは、実質上 Δt のみである。

3.3 複雑な曲面のサンプリング例

図 3 は、多数のメタボールからなる複雑な凹凸を持つ陰関数曲面 [9] のサンプリング例である (5 万点)。また、図 4 は関数

$$F(\mathbf{q}) \equiv 1 - \frac{1}{(a^2 q_1^2 + a^2 q_2^2 + a^2 q_3^2)^6 - (b^8 q_1^8 + b^8 q_2^8 + b^8 q_3^8)^6} \quad (15)$$

($a = 1/2.3$, $b = 1/2$) を用いて定義される、多数の穴を持つ位相幾何学的に複雑な陰関数曲面 [9] のサンプリング例である (6 万点)。どちらの場合も、複雑な陰関数曲面上で一様なサンプリングが行われていることがわかる。

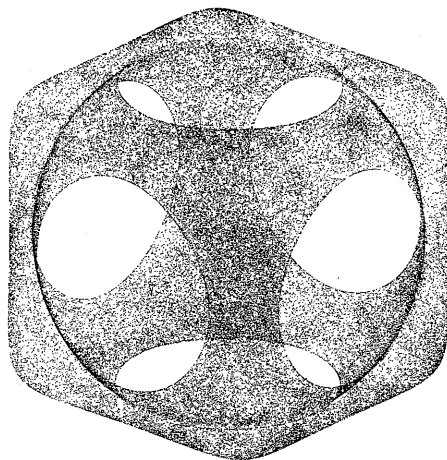


図 4: 多数の穴がある曲面のサンプリング例

4 おわりに

本論文では、我々は確率過程に基づく陰関数曲面のサンプリング手法を提案した。我々の手法は、確率微分方程式を用いて定義される曲った空間上の確率過程に基づいて、モンテカルロ・シミュレーションを行なうというものである。得られるサンプル点は陰関数曲面上で一様に分布する。また、我々の手法は $F(\mathbf{q})$ が 2 階微分可能であれば適用可能であり、初期条件を曲面上に選ぶ必要もないという、適用範囲が広く、実行が容易な手法である。

我々のサンプリング手法は、仮想粒子の時間発展を記述する微分方程式を解くというものであるから、前述のように、粒子力学的方法の高速性をそのまま引き継いでいる。ただし、前述のように、粒子力学的方法では多粒子系を用いねばならず、粒子間ポテンシャル力の計算時間が、求めるサンプル点の 2 乗に比例して増大する。このため、粒子力学的方法は、数百点から千点程度のサンプル点の生成に適していると思われる。一方、我々の手法では、粒子の拡散が陽に導入されるランダム変数によって実現されるため、1 粒子系での計算が可能であり、計算

時間はサンプル点数に比例して増大するにすぎない。このため、我々の手法は、数千点から1万点程度以上のサンプル点の生成に適している。

我々のサンプリング手法は、数百点から千点程度のサンプル点の生成には、むしろ不向きである。これは、仮想粒子の軌跡が陰関数曲面全体を覆うまでに、通常、数千回程度以上の解の更新を要するからである。これは、言い換えれば、エルゴード定理が成立する程度の長時間の時間発展を要するということである。

我々のサンプリング手法は、高速レンダリングや変形する曲面のアニメーションの作成にも有効と思われる。これらの点に関しては、現在研究が進行中である。

謝辞

本研究を進めるにあたり、数々の貴重な助言をいただいた福井大学の山本弘明教授と篠競氏に感謝致します。

参考文献

- [1] de Figueiredo, L.H., Gomes, J., Terzopoulos, D., and Velho, L., Physically-based methods for polygonization of implicit surfaces. *Proceedings of Graphics Interface '92*, CIPS, May 1992, pp.250-257.
- [2] Witkin, A., and Heckbert, P., Using particles to sample and control implicit surfaces. *Computer Graphics (Proceedings of SIGGRAPH '94)*, July 1994, 269-278.
- [3] de Figueiredo, L.H., and Gomes, J., Sampling implicit objects with physically-based particle systems. *Computers & Graphics*, 1996, 20(3), 365-375.
- [4] Elber, G., Line illustrations in computer graphics. *The Visual Computer*, 1995, 11(6), 290-296.
- [5] Namiki, M., Ohba, I., and Okano, K., Stochastic quantization of constrained systems. *Progress of Theoretical Physics*, 1984, 72(2), 350-365.
- [6] Namiki, M., Ohba, I., Okano, K., Rikihisa, M., and Tanaka, S., Numerical simulation of nonlinear σ -model by means of stochastic quantization method. *Progress of Theoretical Physics*, 1985, 73(1), 186-196.
- [7] Ikeda, N., and Watanabe, S., *Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes*, North-Holland Mathematical Library, North-Holland, Amsterdam, 1981.
- [8] Namiki, M. in collaboration with Ohba, I.; Okano, K., Yamanaka, Y., Kapoor, A. K., Nakazato, H., and Tanaka, S., *Stochastic Quantization*, Springer-Verlag, Berlin, 1992.
- [9] Heckbert, P. *SC Graphics Gems IV*, Academic Press, Inc. 1994.