LA-6

数値微分法による シンプレクティック・レイトレーシングの汎用化

Generalization of a Symplectic Ray-Tracing by Numerical Differentials

佐藤 哲†
Tetsu Satoh

1 はじめに

情報科学の分野において，計算機による数値計算の品質が重視されるようになってきた．シンプレクティック数値解析法を用いて精度良く計算するシンプレクティック・レイトレーシングは，歪んだ4次元ブラックホール時空の可視化のために開発され，その後3次元空間の蜃気楼現象など他の力学系のコンピュータ・グラフィックス(CG)作成にも応用されてきた．しかし，ハミルトニアンと呼ばれるスカラー関数のサブルーチンさえ変更すれば様々なCGが作成可能とは言え，実際には人間がハミルトニアンの導関数を計算し，実装することが多かった．そこで本論分では，シンプレクティック・レイトレーシングの数学的厳密さを損なわないように自動的に微分値を計算し，ハミルトニアンのみを与えれば非線形光線追跡をする手法の提案をする．提案手法により，従来は導関数の実装が不可能だったような現象に対してもシンプレクティック・レイトレーシングが適用可能になる．

2 シンプレクティック・レイトレーシング

シンプレクティック・レイトレーシング[1]は，ハミルトン力学とシンプレクティック数値解析法を導入することで従来の非線形光線追跡法を拡張する手法である．光線が運動する時空の次元を問わないという特徴があるが，通常は3次元空間成分を抜き出して3次元CGを作成する．例えばブラックホール時空を可視化する際は8次元時空での光線追跡をするが，そのうちの3次元座標成分を使って空間に配置したオブジェクトとの交差判定をし，画面に描画する．描画に使用しなかった成分は，色情報やアイコン技術など情報可視化技術を使って表現する．図1に例を示す．本手法では，どんな次元，どんな現象が対象でも，次のハミルトンの正準方程式を使って光線の軌道を計算する：

$$\left\{\begin{array}{lcl}\dfrac{dp}{dt} & = & -\dfrac{\partial H}{\partial q}\\[2mm] \dfrac{dq}{dt} & = & \dfrac{\partial H}{\partial p}\end{array}\right. . \tag{1}$$

ここで，qは座標を表す変数，pはqに対応する運動量成分，tは(p,q)を決定するパラメータ，Hはハミルトニアンと呼ばれるスカラー関数である．光線を追跡するには，左辺のtによる微分を数値的に積分していくことになり，シンプレクティック・レイトレーシングは微分方程式(1)に対する$(p(t_0),q(t_0))$が与えられた時の初期値問題となる．ハミルトンの正準方程式の形が変わることはないので，ユーザはハミルトニアンの計算ルーチンのみを実装すれば，光線追跡のシミュレーションができる．

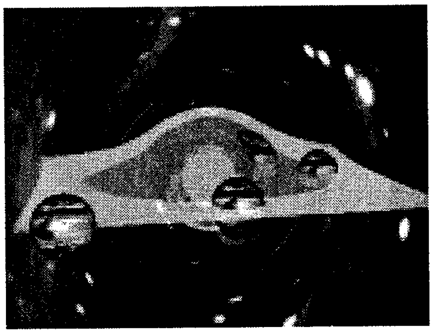

図1: シンプレクティック・レイトレーシングによるブラックホール時空の可視化の例

しかし，このシンプレクティック・レイトレーシング法の汎用性を損なわせるのが，式(1)の右辺である．数値的に微分方程式(1)を解くには，右辺をサブルーチンとして実装しなければならない．図1を作成するために用いたハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H \;=\; & \left(1-\frac{r_g}{r}\right)^{-1}\frac{{p_t}^2}{2}-\left(1-\frac{r_g}{r}\right)\frac{{p_r}^2}{2}\\ & -\frac{{p_\theta}^2}{2r^2}-\frac{{p_\phi}^2}{2r^2\sin^2\theta} \end{aligned} \tag{2}$$

というもので（文献[1]参照），式(2)を全ての成分で偏微分し，それをサブルーチン化した．実装上の問題だけではなく，ソフトウェア工学的にもプログラムの再利用性が落ちることは問題である．そこで，ハミルトニアンの自動偏微分のための手法について次節にて述べる．

3 シンプレクティック・レイトレーシングにおける計算機による導関数の計算法

ここでは，最も簡単なシンプレクティック数値解法の一つである陰的オイラー法について考える：

$$\left\{\begin{array}{lcl} p_{k+1} & = & p_k-\tau\dfrac{\partial H(p_k,q_{k+1})}{\partial q_{k+1}}\\[2mm] q_{k+1} & = & q_k+\tau\dfrac{\partial H(p_k,q_{k+1})}{\partial p_k}\end{array}\right. . \tag{3}$$

この公式は1次の精度を持ち，陰的な連立方程式なのでニュートン法などの反復法が必要となる．しか

†独立行政法人 通信総合研究所
けいはんな情報通信融合研究センター 画像グループ

し式 (3) の偏微分の値の精度が悪ければ，1 次の精度はおろかシンプレクティック数値解法ですらなくなってしまう．そこでまず考えられることは，2 次の精度を持つ中間差分

$$\frac{df(x)}{dx} \sim h^{(1)}(x,\Delta x) \equiv \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} \tag{4}$$

に対し，リチャードソン補外の一種

$$h^{(i+1)}(x,\Delta x) \equiv \frac{4^i h^{(i)}(x,\Delta x/2^i) - h^{(i)}(x,\Delta x)}{4^i - 1} \tag{5}$$

を適用していき精度を上げる手法がある（以下，この手法を単に差分法と呼ぶ）．また，この手法は変数の数によって微分したい関数の評価回数が指数関数的に増えるので，高速自動微分法 [2] の導入が考えられる．高速自動微分法は，例えば (x_1, x_2) というベクトルを考え，x_2 には x_1 を微分した値が入ると定義する．すると，加算，乗算は次のように定義される．

$$\begin{aligned}(x_1,x_2)+(y_1,y_2) &= (x_1+y_1, x_2+y_2)\\ (x_1,x_2)\times(y_1,y_2) &= (x_1y_1, x_1y_2+x_2y_1)\end{aligned} \tag{6}$$

他の演算も同様に定義され，微分の公式がベクトルの 2 番目の成分の計算ルーチンに実装されるため，差分法による数値微分と違い打ち切り誤差が生じない．例えば，x^2 と x の乗算結果は x^3 で，その微分は $3x^2$ であるが，上の計算規則を使うと $(x^2, 2x) \times (x, 1) = (x^3, 3x^2)$ と乗算を計算すると自動的に微分も計算される．シンプレクティック・レイトレーシングの場合，ハミルトニアンの値を計算すると，ハミルトニアンの導関数が全て同時に計算されることになる．

4 テスト実験

ここでは次のような簡単な力学系で計算精度や速度の検証をする．ハミルトニアンとしては，3 種巡回捕食系と呼ばれる力学系の特別な場合である

$$H = pq(p+q-1) \tag{7}$$

を用いる．このハミルトニアンによる軌道は，(p,q) が閉じた曲線を描くことが分かっており，発散するかどうかで数値計算の精度の目安になる．実験は，(A) 差分法+陽的オイラー法，(B) 高速自動微分法+陽的オイラー法，(C) 差分法+陰的オイラー法，(D) 高速自動微分法+陰的オイラー法，の 4 種類である．図 2 に (A) と (B) の結果を重ねたグラフを，図 3 に (C) と (D) の結果を重ねたグラフを示す．図 2 では二つのグラフは完全に重なり，どちらも閉曲線を描かず計算が破綻していることが分かる．図 3 は微かに 2 本の軌道にずれがあるが，どちらも閉曲線を描いている．数値計算の刻み幅は全て $\tau = 0.2$ であり，初期値は $(p,q) = (0.2, 0.2)$ である．計算は C 言語の double 精度で，差分法による数値微分は 8 次の精度を用いた．ハードウェアは Pentium III 800MHz の Linux マシンで，メモリは 1Gbyte，コンパイラは gcc で最適化オプションは付けていない．平面状で光線を 5 万ステップ追跡した場合，陽的な解法では計算は約 0.2 秒かかり，陰的なシンプレクティック

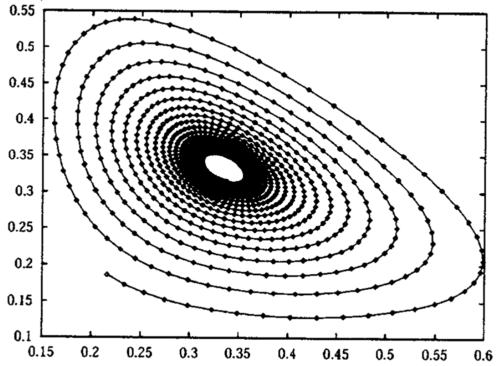

図 2: 陽的オイラー法による計算結果:実験 (A) 及び (B)

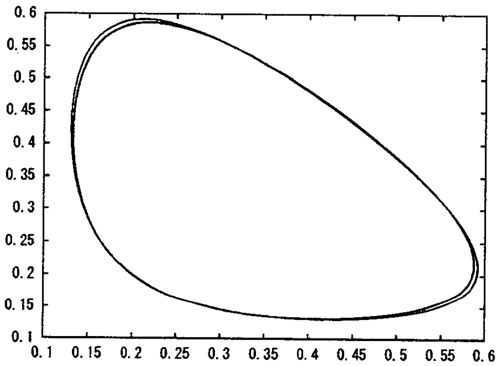

図 3: 陰的オイラー法による計算結果:実験 (C) 及び (D)

解法では差分法によるものが約 0.4 秒，高速自動微分法によるものが約 0.3 秒であった．

5 おわりに

同じ 1 次の精度を持つ数値解法を用いる場合でも，様々な結果が得られた．(A) と (B) の結果より非シンプレクティックな解法の安易な使用の危険性が分かり，(C) と (D) の結果より，数値微分法を用いてもシンプレクティック数値解法として有効に働くことが分かった．ハミルトニアンの複雑さで差分法と高速自動微分法の計算精度・計算時間の違いが出てくるため，必要に応じてどちらを使うか選択できるようにシンプレクティック・レイトレーシングに組み込まなければならない．ハミルトニアンの次元が低い場合は差分法が，高い場合は高速自動微分法を用いるのが適当なようである．また，今回は対象としなかった精度保証付き数値計算や無誤差演算法なども検討する必要がある．

参考文献

[1] 佐藤哲, 岩佐英彦, 竹村治雄, 横矢直和：高速シンプレクティック・レイトレーシング：入れ子宇宙の 可視化, 情処学論, Vol. 42, No. 10, pp. 2392–2402 (2001).

[2] Iri, M., Tsuchiya, T. and Hoshi, M.: Automatic Computation of Partial Derivatives and Rounding Error Estimates with Applications to Large-Scale Systems of Nonlinear Equations, *J. Computational and Applied Mathematics*, Vol. 24, pp. 365–392 (1988).