修士論文 要旨

再生核ヒルベルト空間上の求積・補間に用いる良い点配置の効率的生成法

数理情報学専攻 48-186211　大城隆之介
指導教員　田中健一郎准教授

1　はじめに

科学技術計算においては，線型作用素の近似は基本的な道具である．近年再生核ヒルベルト空間を用いる手法が，高次元の関数に対しても有効に働く手法として注目されている [1, 2]．現在研究されている手法は点を逐次追加する手法が主で，数値積分や補間に用いる点数が少ない状況で点の偏りが見られるなど様々な課題が存在する．本論文では，点追加の方法に代えて，点配置を改善していくことにより線型作用素の近似問題である数値積分公式と関数補間に用いる点配置の生成を目標とする．数値積分法においては現状これらの課題の全ては解決されていないが，少ない点数でも偏りの少ない点配置を得ることができた．また，関数補間については離散エネルギー最小化によって点配置を得る手法 [3] についての理論解析も行なった．

2　数値積分

2.1　はじめに

数値積分は数値解析学において重要なテーマの一つとなっている．数値積分では積分を有限個の点 $\{x_k\}$ と重み $\{w_k\}$ を用いて以下のように近似する．

$$\int f(x)\mathrm{d}\mu(x) \approx \sum_k w_k x_k \tag{1}$$

高次元積分においては近年再生核ヒルベルト空間上の求積法が注目を集めている．

2.2　既存研究

Kernel Herding, Sequential Bayesian Quadratue といった手法が存在する [1, 4, 5]．これらの手法は一定の成功を収めているが，高次元非凸最適化問題．任意の領域への適用，精度の理論解析が課題となっている．

2.3　提案手法

2.3.1　提案手法１：点交換法

$g_\mu(\xi) := \|\xi-\mu\|^2$ と定める．方法 1 は次の通りである．

1. 初期点をランダムに選ぶ
2. 既に選ばれている $x_1^{(t)},\ldots,x_N^{(t)}$ の中から $Q_{K,\mu,X_N^{(t)}}(x) := f_{X_N^{(t)}} - f_\mu$ を最大にするものを選んで x_{out} とする
3. $Q_{K,\mu,X_N^{(t)}}(x)$ の最小化元を E の中から選んで x_{in} とする
4. $X_N^{(t+1)} = X_N^{(t)} \setminus \{x_{\mathrm{out}}\} \cup \{x_{\mathrm{in}}\}$ と更新する
5. 以上の方法を適当な収束条件が満たされるまで繰り返し，得られた点 $\{x_1,\ldots,x_N\}$ を用いて $I_N = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \delta_{x_i}$ とする

定理 2.1. N を標本点の数とし，手法 1 の t 回の繰り返しの後に得られる数値積分作用素を $I^{(t)}$ とする．また，$\mu \in \mathcal{P} := \mathrm{cl\,conv}\{\delta_x \mid x \in E\}$ および $\|\delta_x\| = 1\ (\forall x \in E)$ が成り立つとする．このとき次の不等式が成り立つ：

$$g_\mu\left(I^{(t)}\right) \leq \frac{4}{N} + \left(g_\mu\left(I^{(0)}\right) - \frac{4}{N}\right)\left(1-\frac{1}{N}\right)^t. \tag{2}$$

2.3.2　提案手法２：点移動法

手法 2 ではまず最初に N 点 $x_1,\ldots,x_N$ をランダムに選ぶ．そしてその中から一点 x_j をランダムに選び，$-\nabla_{x_j} g_\mu(\sum_i \delta_{x_i}/N)$ の方向に移動させる．この移動を十分回数行った後の点 $x_1,\ldots,x_N$ を用いて $I_N = \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}/N$ を数値積分公式として用いる．この手法では非凸最適化問題を繰り返し解かなくて良い．

2.4　数値実験

本節では数値実験結果を示す．$E = [0,1]\times[0,1]$, $K(x,y) = \exp(-\|x-y\|^2/l^2)$, $l = 0.03$ とし，方法 1,2 を実装した．方法 1 では，E を 101×101 の等間隔格子上の点を用いて離散化し，最適化問題の解の探索範囲として用いた．図 1 に点の数と最悪誤差の二乗の関係を示す．この結果は方法 1 の理論解析と整合的である．方法 2 については理論的な結果は得られていないが，結果からは，方法 2 の有効性が伺われる．

3　関数補間

3.1　はじめに

関数の近似は科学技術計算において重要な手法の一つである．関数の補間手法としてカーネルを用いた補間が高次元で有効な手法として近年注目されている．

3.2　既存研究

カーネルを用いた補間は点配置が最悪誤差に影響するため，どのような点を選ぶのが良いかについて多く

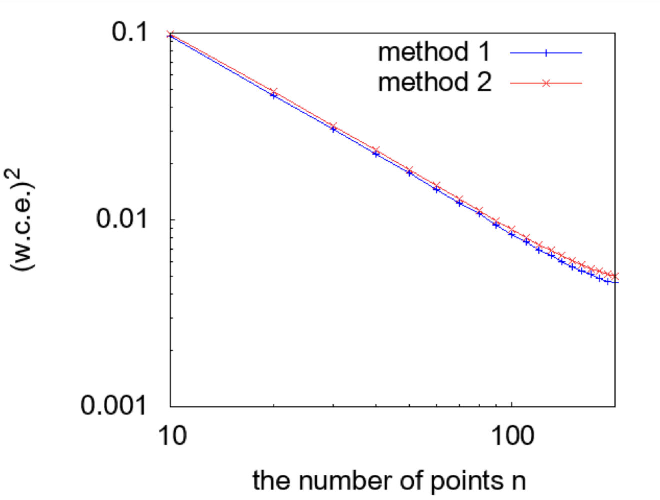

図 1. 点の数と最悪誤差の２乗の関係

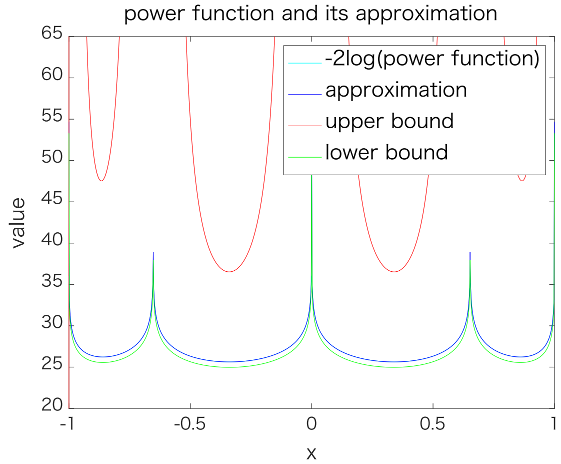

図 2. power function と近似値, power function の上界と下界

の研究がなされている．代表的な手法として f-greedy, P-greedy, f/P-greedy が存在する [2, 6]．これらの手法は全て補間に用いる点を逐次的に追加していく手法になっており，現状非凸最適化問題，power function の計算，少ない点数での点配置の偏り，理論解析が不十分であるといった問題点がある．これらを改善するために離散エネルギー最小化によるアプローチが提案されている [3]．この手法では 1 次元ガウシアンカーネルを適切に近似することにより power function を扱いやすい形に近似することができる．この手法の理論解析を行う上でカーネルを近似することによって得られる power function の近似の評価が必要だが現状なされていない．

3.3 本研究

本研究ではカーネルの近似による power function の近似比の下界および上界を導出した．数値実験から下界は比較的良いが上界はあまり良いものではないことが観察された．

3.4 数値実験

本節では power function，近似 power function，近似 power function から推測される power function の上界値および下界値を示す．本実験では，$E = [-1, 1]$, $K(x, y) = \exp(-(x-y)^2/(2l^2))$, $l = 5$, $N = 5$ として離散エネルギー最小化 [3] を実装した．図 2 は前述の 4 つの値を示している．下界は良い近似になっているが，上界はあまり良い近似ではない．

4 おわりに

本研究では再生核ヒルベルト空間に含まれる関数に対して，新たな求積公式の設計法を考えた．提案手法においては，数値積分に用いる点を逐次追加するのではなく，点を交換していくことによりより良い点配置を得た，手法 1 については理論評価も得た．任意の領域におけるアルゴリズムに改良することが今後の課題である．また，関数補間に用いる点の選択法の一つである離散エネルギー最小化の理論的解析のために必要な power fucntion の近似比の上界と下界を一つ求めた．数値実験より，下界は比較的良い値が得られていることが確認されたが，パラメータによる影響も大きく一層の研究を要する．また，離散エネルギー最小化の手法 [3] は現状 1 次元の場合にしか適用できない．高次元でも実行可能な手法を得ることが今後の課題である．

参考文献

[1] M. Welling, “Herding dynamic weights for partially observed random field models,” in *Proceedings of the Twenty-Fifth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, UAI ’09, pp. 599–606, AUAI Press, 2009.

[2] S. De Marchi, R. Schaback, and H. Wendland, “Near-optimal data-independent point locations for radial basis function interpolation,” *Advances in Computational Mathematics*, vol. 23, no. 3, pp. 317–330, 2005.

[3] T. Karvonen, S. Särkkä, and K. Tanaka, “Kernel-based interpolation at approximate fekete points,” 2019.

[4] F. Huszár and D. Duvenaud, “Optimally-weighted herding is bayesian quadrature,” in *Proceedings of the Twenty-Eighth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, UAI’12, pp. 377–386, AUAI Press, 2012.

[5] Y. Chen, M. Welling, and A. Smola, “Super-samples from kernel herding,” in *Proceedings of the Twenty-Sixth Conference on Uncertainty in Artificial Intelligence*, UAI’10, pp. 109–116, AUAI Press, 2010.

[6] S. Müller, *Complexity and stability of kernel-based reconstructions.* PhD thesis, Dissertation, Georg-August-Universität Göttingen, Institut für Numerische und Angewandte Mathematik, Lotzestrasse 16-18, D-37083 Göttingen, 2009.