

# カーネル法に基づくデータ点からの曲面の生成法

## A Kernel Method for Surface Generation from Data Points

○ 寒野 善博 \*<sup>1</sup>

Yoshihiro Kanno

\*<sup>1</sup> 東京大学 数理・情報教育研究センター 教授 博士 (工学)

Professor, Mathematics and Informatics Center, The University of Tokyo, Dr. Eng.

キーワード：カーネル法；正則化付き最小2乗法；曲面の生成

**Keywords:** Kernel method; regularized least squares; generation of surface.

### 1. はじめに

周知のように、現在、理工学のみならずさまざまな分野において、データ駆動型の手法が展開されている<sup>13)</sup>。計算力学においても、Kirchdoerfer and Ortiz<sup>10)</sup>の論文が2016年に出版されたのを皮切りに、多くの研究が発表されてきている<sup>2,3,4,6,11,12)</sup>。

Kirchdoerfer and Ortiz<sup>10)</sup>の提案は、次のとおりである。構造物の静的な釣合い解析を考えると、その解は

(i) 外力と内力の釣合い式、

(ii) 変位とひずみの適合条件、

(iii) 材料に固有の構成則（応力・ひずみ関係）

の3つの条件から決まる。このうち、釣合い式はNewtonの運動の法則から導かれる物理法則であり、適合条件は幾何学的な関係性である。これに対して、構成則は、材料実験で得られたデータから経験的なモデル化を経て得られるものである。このモデルの代わりに、材料実験のデータに直接語ることで数値シミュレーションを行おうというのが、Kirchdoerfer and Ortiz<sup>10)</sup>の動機である。具体的には、力の釣合い式と適合条件を満たす応力とひずみの組のうち、材料実験の結果に（ある意味で）最も近いものを釣合い解として出力する。ここで、材料実験の結果は、応力とひずみの対の空間にあるデータ点の集合とみなせる。Kirchdoerfer and Ortiz<sup>10)</sup>は、ある応力とひずみの組からデータ集合までの「距離」を、その組から最も近いデータ点までの（重み付きの）Euclid距離として定義した。

Kirchdoerfer and Ortiz<sup>10)</sup>の考え方に沿った論文は、その後、数多く発表されている<sup>3,4,11,12)</sup>。これらの手法は、構成則のモデルを一切もたないという意味で、怠惰学習の一種

とみなせる。一方で、データ集合の中の（最も近い）1点のみの情報しか利用しないため、誤差や外れ値の影響を大きく受けたり<sup>7)</sup>、データ点の分布が疎な場合には妥当な解が得られにくい<sup>8)</sup>、Kirchdoerfer and Ortiz<sup>10)</sup>のアルゴリズムは最適解に収束する保証がない<sup>9)</sup>、などの問題点がある。

材料実験のデータ点は、応力とひずみの空間にくまなく存在するのではなく、通常はより低次元の多様体の上にあると考えられる。この点に着目して、Ibañez *et al.*<sup>5,6)</sup>は、多様体学習の手法の一つである局所線形埋め込み (locally linear embedding, LLE)<sup>14)</sup>を用いた釣合い解析法を提案した。この方法は $k$ 近傍 ( $k$ -nearest neighbor, kNN) に基づくが、kNNを用いた釣合い解析は収束する保証がない<sup>7)</sup>。これに対して、本稿では、釣合い解析のための反復計算の過程において使いやすい多様体の表現を得るために、カーネル法<sup>1)</sup>に基づく手法を提案する。

### 2. データ点からの曲面の生成

1節で述べたように、材料実験の結果を応力・ひずみ空間の点としたとき、この点がどのような関係式を満たしているかに興味がある。つまり、一般に、データ集合としていくつかの点が与えられたとき、その点が（ほぼ）載るような曲面（多様体）を求めたい。ただし、

データ点の集合を  $\{(\check{x}^{(1)}, \check{y}^{(1)}), \dots, (\check{x}^{(r)}, \check{y}^{(r)})\}$  とする。ただし、データの次元は  $\check{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^{n_1}$ ,  $\check{y}^{(i)} \in \mathbb{R}^{n_2}$  とし、 $n = n_1 + n_2$  とおく。また、これらのデータ点が載る曲面は、 $\mathbf{x}$  の値を決めると  $\mathbf{y}$  の値は一意に決まるものと仮定する。多様体学習の文献ではスイスロールとよばれるデータ集合が例題として扱われることが多い<sup>14)</sup>が、このようなデータは本稿の手法では扱えない。

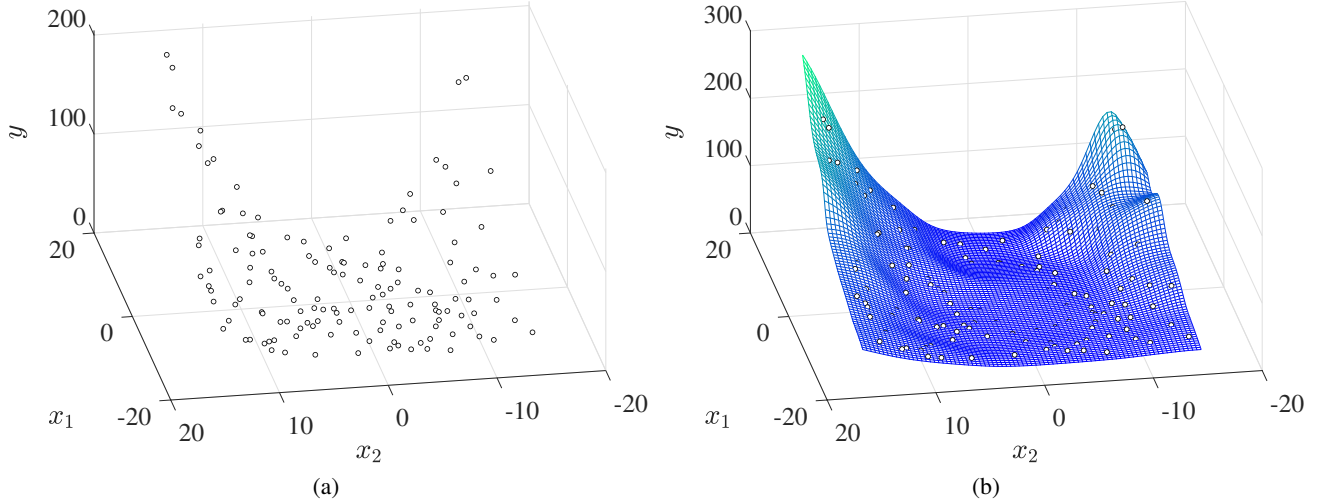


Figure 1. Numerical example (I). (a) Data set; and (b) surface obtained by the proposed method.

いま、求めたい曲面を

$$\{(\mathbf{x}, y) \in \mathbb{R}^n \mid \mathbf{a}_l(\mathbf{x})^\top \mathbf{x} + \mathbf{b}_l(\mathbf{x})^\top \mathbf{y} = c_l(\mathbf{x}) \ (l = 1, \dots, d)\} \quad (1)$$

の形で表す。データ点がこの曲面にほぼ載るように、 $\mathbf{a}_l(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{b}_l(\mathbf{x})$ ,  $c_l(\mathbf{x})$  および  $d$  を決めることが目標である。曲面を定めているパラメータ  $\mathbf{a}_l(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{b}_l(\mathbf{x})$ ,  $c_l(\mathbf{x})$  は、Gauss カーネル

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{s}) = \exp(-\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{s}\|^2) \quad (2)$$

を用いて

$$\mathbf{a}_l(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^r \kappa(\check{\mathbf{x}}^{(j)}, \mathbf{x}) \mathbf{a}_l^{(j)},$$

$$\mathbf{b}_l(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^r \kappa(\check{\mathbf{x}}^{(j)}, \mathbf{x}) \mathbf{b}_l^{(j)},$$

$$c_l(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^r \kappa(\check{\mathbf{x}}^{(j)}, \mathbf{x}) c_l^{(j)}$$

と表す。ただし、 $\mathbf{a}_l^{(j)}$ ,  $\mathbf{b}_l^{(j)}$ ,  $c_l^{(j)}$  は正規化条件

$$\sum_{j=1}^r \|(\mathbf{a}_l^{(j)}, \mathbf{b}_l^{(j)}, c_l^{(j)})\|^2 = 1 \quad (3)$$

と直交条件

$$\sum_{j=1}^r (\mathbf{a}_l^{(j)}, \mathbf{b}_l^{(j)}, c_l^{(j)})^\top (\mathbf{a}_{l'}^{(j)}, \mathbf{b}_{l'}^{(j)}, c_{l'}^{(j)}) = 0, \quad l \neq l'$$

を満たすように決める。

もし点  $(\check{\mathbf{x}}^{(i)}, \check{\mathbf{y}}^{(i)})$  が曲面 (1) 上であれば、各  $l$  に対して条件

$$\sum_{j=1}^r \kappa(\check{\mathbf{x}}^{(j)}, \check{\mathbf{x}}^{(i)}) \left( (\mathbf{a}_l^{(j)})^\top \check{\mathbf{x}}^{(i)} + (\mathbf{b}_l^{(j)})^\top \check{\mathbf{y}}^{(i)} - c_l^{(j)} \right) = 0$$

が成り立つ。したがって、この条件に対する誤差の2乗和は、

$$\sum_{i=1}^r \left[ \sum_{j=1}^r \kappa(\check{\mathbf{x}}^{(j)}, \check{\mathbf{x}}^{(i)}) \left( (\mathbf{a}_l^{(j)})^\top \check{\mathbf{x}}^{(i)} + (\mathbf{b}_l^{(j)})^\top \check{\mathbf{y}}^{(i)} - c_l^{(j)} \right) \right]^2 \quad (4)$$

と書ける。最小2乗法はこの関数を最小化するように  $\mathbf{a}_l^{(j)}$ ,  $\mathbf{b}_l^{(j)}$ ,  $c_l^{(j)}$  を決める。しかし、これは多数 ( $r$  個) のパラメータを決める予測問題となるため、何らかの正則化が必要である。

正則化として、曲面を定めるパラメータ  $\mathbf{a}_l^{(j)}$ ,  $\mathbf{b}_l^{(j)}$ ,  $c_l^{(j)}$  が局所的に大きく変化しないようにする。このためには、もし点  $\check{\mathbf{x}}^{(i)}$  と点  $\check{\mathbf{x}}^{(j)}$  が近くにあれば、 $\|\mathbf{a}_l^{(i)} - \mathbf{a}_l^{(j)}\|$ ,  $\|\mathbf{b}_l^{(i)} - \mathbf{b}_l^{(j)}\|$ ,  $\|c_l^{(i)} - c_l^{(j)}\|$  に対して大きなペナルティを与える。また、もし2点が遠くにあるならば、ペナルティは小さくてよい。いま、点  $\check{\mathbf{x}}^{(i)}$  と点  $\check{\mathbf{x}}^{(j)}$  が近くにあるほど、 $\kappa(\check{\mathbf{x}}^{(j)}, \check{\mathbf{x}}^{(i)})$  は大きな値をとるので、次の関数をペナルティ項として用いることが考えられる：

$$\gamma \sum_{i=1}^r \sum_{j=i+1}^r \kappa(\check{\mathbf{x}}^{(j)}, \check{\mathbf{x}}^{(i)}) \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{a}_l^{(i)} \\ \mathbf{b}_l^{(i)} \\ c_l^{(i)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \mathbf{a}_l^{(j)} \\ \mathbf{b}_l^{(j)} \\ c_l^{(j)} \end{bmatrix} \right\|^2 \quad (5)$$

ただし、 $\gamma (> 0)$  はペナルティの大きさを調整するハイパーパラメータである。

未知数  $\mathbf{a}_l^{(j)}$ ,  $\mathbf{b}_l^{(j)}$ ,  $c_l^{(j)}$  ( $j = 1, \dots, r$ ) をすべて並べたベクトルを、 $\mathbf{w}_l$  で表す。(4) と (5) の和を整理すると、ある定行列  $H$  および  $M$  を用いて

$$\|H\mathbf{w}_l\|^2 + \gamma \mathbf{w}_l^\top M \mathbf{w}_l \quad (6)$$

の形に書くことができる。ただし、 $M$  は対称行列である。

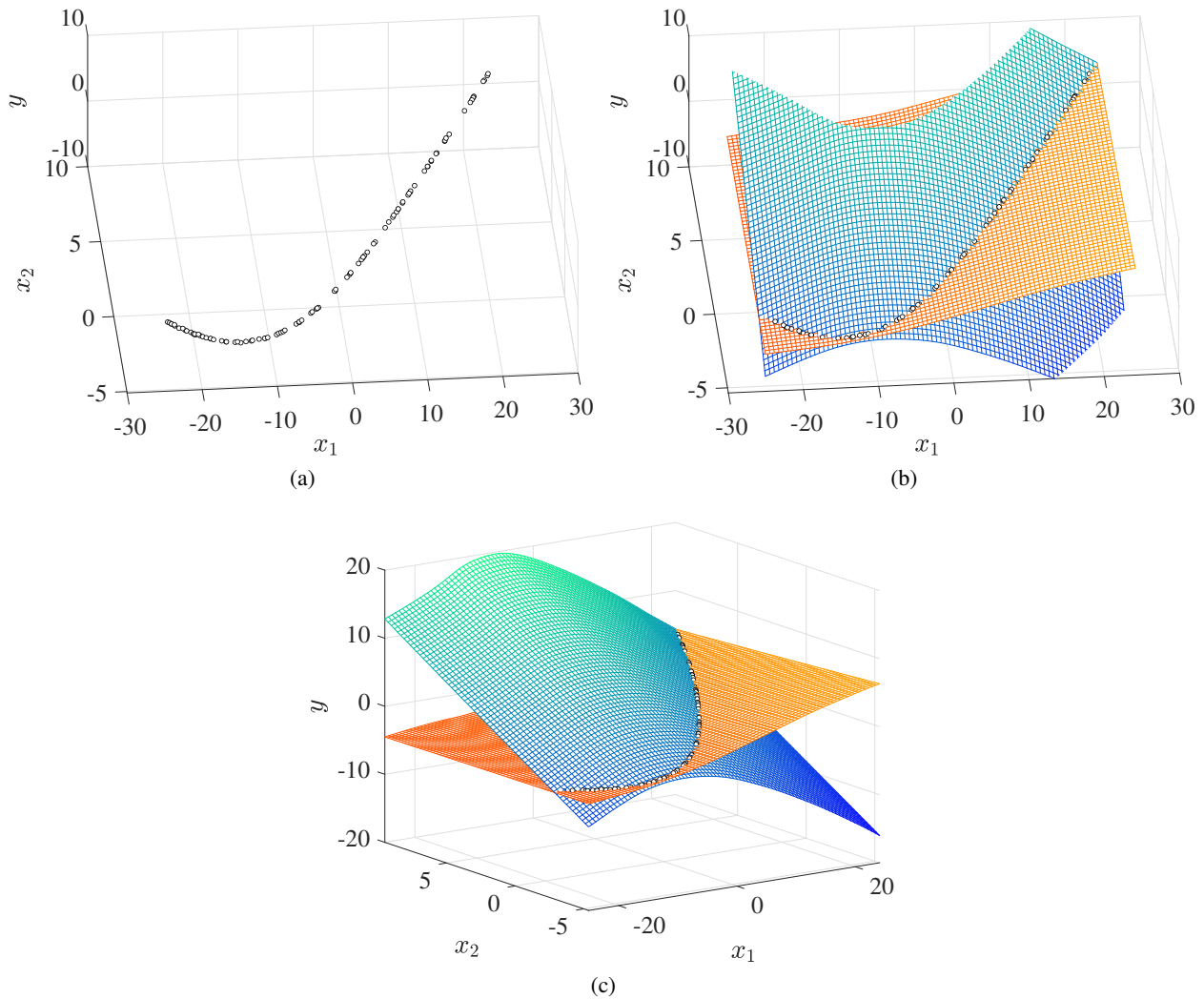


Figure 2. Numerical example (II). (a) Data set; (b) curved line obtained by the proposed method; (c) and overall view.

提案手法では、 $l = 1, 2, \dots$  の順に  $w_l$  を求める。曲面を定める式 (1) における  $d$  は、誤差  $\|Hw_d\|^2$  が閾値よりも大きくなるような最小の  $\bar{d}$  に対して  $d = \bar{d} - 1$  する。まず、 $w_1$  は、制約 (3) の下で 2 次形式 (6) を最小化するものである。固有値に関する最大最小定理 (Courant–Fischer の定理) より、 $w_1$  は対称行列  $H^T H + \gamma M$  の最小固有値に対応する固有ベクトルである。次に、 $w_2$  は制約  $\|w_2\|^2 = 1$  と  $w_1^T w_2 = 0$  の下で 2 次形式 (6) を最小化する解であるから、 $H^T H + \gamma M$  の 2 番目に小さい固有値に対応する固有ベクトルであることがわかる。このように、 $w_l$  は、対称行列  $H^T H + \gamma M$  の固有ベクトルとして容易に得ることができる。

### 3. 例題

Figure 1a は、3 次元空間 ( $n = 3$ ) におけるデータ集合の例である。ただし、 $n_1 = 2, n_2 = 1$  とし、データ点の数は  $r = 140$  である。Gauss カーネル (2) のパラメータを  $\alpha = 0.1$

とし、ペナルティ項のパラメータを  $\gamma = 500$  とすると、提案手法により Figure 1b の曲面が得られる。データ点の近くを通る滑らかな曲面が得られていることが、確認できる。

別のデータ集合の例を、Figure 2a に示す。ただし、 $n = 3, n_1 = 2, n_2 = 1, r = 100$  である。パラメータを  $\alpha = 0.05, \gamma = 100$  としたときに得られる解を、Figure 2b および Figure 2c に示す。この例では  $d = 2$  であり、3 次元空間内の曲線が 2 つの曲面の共通部分として得られている。

謝辞 この研究は、JST CREST Grant No. JPMJCR1911 および大林財団の助成を受けたものである。

### [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』. 岩波書店 (2008).
- 2) J. Ayensa-Jiménez, M. H. Doweidar, J. A. Sanz-Herrera, M. Doblaré: A new reliability-based data-driven approach for noisy experimental data with physical constraints. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **328**, 752–774 (2018).
  - 3) M. Dalémat, M. Coret, A. Leygue, E. Verron: Measuring stress field without constitutive equation. *Mechanics of Materials*, **136**, Article No. 103087 (2019).
  - 4) R. Eggersmann, T. Kirchdoerfer, S. Reese, L. Stainier, M. Ortiz: Model-free data-driven inelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **350**, 81–99 (2019).
  - 5) R. Ibañez, E. Abisset-Chavanne, J. V. Aguado, D. Gonzalez, E. Cueto, F. Chinesta: A manifold learning approach to data-driven computational elasticity and inelasticity. *Archives of Computational Methods in Engineering*, **25**, 47–57 (2018).
  - 6) R. Ibañez, D. Borzacchiello, J. V. Aguado, E. Abisset-Chavanne, E. Cueto, P. Ladeveze, F. Chinesta: Data-driven non-linear elasticity: constitutive manifold construction and problem discretization. *Computational Mechanics*, **60**, 813–826 (2017).
  - 7) Y. Kanno: Simple heuristic for data-driven computational elasticity with material data involving noise and outliers: a local robust regression approach. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, **35**, 1085–1101 (2018).
  - 8) Y. Kanno: Data-driven computing in elasticity via kernel regression. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, **8**, 361–365 (2018).
  - 9) Y. Kanno: Mixed-integer programming formulation of a data-driven solver in computational elasticity. *Optimization Letters*, **13**, 1505–1514 (2019).
  - 10) T. Kirchdoerfer, M. Ortiz: Data-driven computational mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **304**, 81–101 (2016).
  - 11) T. Kirchdoerfer, M. Ortiz: Data-driven computing in dynamics. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **113**, 1697–1710 (2018).
  - 12) A. Leygue, M. Coret, J. Réthoré, L. Stainier, E. Verron: Data-based derivation of material response. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **331**, 184–196 (2018).
  - 13) F. J. Montáns, F. Chinesta, R. Gómez-Bombarelli, J. N. Kutz: Data-driven modeling and learning in science and engineering. *Comptes Rendus Mécanique*, **347**, 845–855 (2019).
  - 14) S. T. Roweis, L. K. Saul: Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, **290**, 2323–2326 (2000).