不定な線形方程式に従うデータ点からの曲面の生成法
Surface Generation from Data Points Satisfying Indeterminate System of Linear Equations

○寒野 善博 [*1]
Yoshihiro KANNO

[*1] 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

データ駆動型の計算力学の手法は，Kirchdoerfer and Ortiz [10] を契機として，多くの研究がなされてきている [2,3,4,5,6,7,9,11,12,13]．構造物の静的な釣合い解析では，釣合い解は，(i) 応力と外力の釣合い式，(ii) ひずみと変位の適合条件，(iii) 応力とひずみの構成則，の 3 つの条件で定まる．このうち，(iii) の構成則いについては，従来，経験的なモデル化とそのモデルに含まれるパラメータの値の調整を行って，材料実験のデータを近似するものを得る．Kirchdoerfer and Ortiz [10] の提案は，このようなモデルに代わり，材料実験のデータそのものを用いて釣合い解析を行うというものである．具体的には，(i) と (ii) を満たす応力とひずみの組のうち，材料実験のデータ集合に（ある意味で）最も近いものを解とみなす．ここで，応力とひずみの組とデータ集合との距離は，その組から最も近いデータ点までの（重み付きの）Euclid 距離として定義されている．

Kirchdoerfer and Ortiz [10] の考え方は，その後，多くの研究で踏襲されている [2,3,11,12,13]．しかし，データ集合に含まれるデータ点のうち，1 点のみの情報しか用いていないため，もしその点が大きな誤差をもつ場合には計算結果が大きな影響を受けてしまう [6]．また，疎なデータ集合に対しては妥当な解が得られにくい [7]，などの問題点がある．

Kirchdoerfer and Ortiz [10] とは異なるデータ駆動型の手法として，Ibañez *et al.* [4,5] は局所線形埋め込み (locally linear embedding, LLE) [14] を用いた釣合い解析法を提案した．LLE は，多様体学習とよばれる機械学習の手法の 1 つである．データ点が空間内にあまねく存在するのではなく，空間よりも次元の小さい多様体上に存在している場合に，その多様体を見出すことを多様体学習とよぶ．Ibañez *et al.* [4,5] の手法は，材料実験のデータ点が，応力とひずみの組の空間の中の多様体上に存在するという視点に立ったものである．

LLE は，構成則に対して，局所的な 1 次モデルを求めているとみなせる．一方で，釣合い解析の反復計算では，大域的な非線形モデルが得られている方が便利である．このため，著者は，カーネル法 [1] に基づき，与えられたデータ点がほぼ載る曲面を求める手法を提案した [8]．また，これを釣合い解析に応用し，既存の手法 [4,10] よりも妥当な解が得られることを数値実験で示した [9]．

以上の議論では，データ集合として，材料の応力とひずみの組が与えられていることを想定している．Leygue *et al.* [12] は，物理実験において応力は直接的に計測できないことが多いことに着目し，構造物に作用する外力とそれに対応する変位の組がデータ集合として与えられたことを想定し，Kirchdoerfer and Ortiz [10] の手法をこの問題設定に拡張した．その後，Leygue *et al.* [12] の手法は，実際の物理実験のデータ [2] や動的な問題 [13] に適用されている．しかし，この手法は，基本的な考え方が Kirchdoerfer and Ortiz [10] と同じであるため，前述の問題点も共有していると考えられる．そこで，本稿では，カーネル法に基づく提案手法 [8,9] を，Leygue *et al.* [12] の問題設定に拡張する．

2. 問題設定

文献 [8,9] では，データ集合 $\{(\check{x}^{(1)}, \check{y}^{(1)}), \dots, (\check{x}^{(r)}, \check{y}^{(r)})\}$ が与えられたとき，これらのデータ点がほぼ載る曲面を求めることを考えた．ただし，ここでは簡単のためデータは

日本建築学会情報システム技術委員会
第44回情報・システム・利用・技術シンポジウム論文集，299-302，2021年12月，京都
Proceedings of the 44th Symposium on Computer Technology of Information, Systems and Applications，AIJ，299-302，Dec.，2021，Kyoto

2 次元であるとし，$\check{x}^{(i)} \in \mathbb{R}, \check{y}^{(i)} \in \mathbb{R}$ $(i = 1, \ldots, r)$ とする．釣合い解析の文脈では，$\check{x}^{(i)}$ はひずみに，$\check{y}^{(i)}$ は応力に，それぞれ対応する．このとき，データ点がほぼ載る曲線を求めることは，条件

$$f(\check{x}^{(i)}, \check{y}^{(i)}) \simeq 0, \quad i = 1, \ldots, r$$

を満たす関数 $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ をみつけることに対応する．ただし，文献[8,9]と同様に，x の値を決めると条件 $f(x, y) = 0$ を満たす y の値が一意に決まるような曲線に限定して考える．

以下では，1 節で述べたように，構造物の節点外力と節点変位の組がデータ集合として与えられた場合を考える．データ集合を $\{(\check{\boldsymbol{v}}^{(1)}, \check{\boldsymbol{w}}^{(1)}), \ldots, (\check{\boldsymbol{v}}^{(r)}, \check{\boldsymbol{w}}^{(r)})\}$ で表す．ただし，$\check{\boldsymbol{v}}^{(i)} \in \mathbb{R}^n$ が節点変位に，$\check{\boldsymbol{w}}^{(i)} \in \mathbb{R}^n$ が節点外力に，それぞれ対応し，n は節点変位の自由度を表す．このとき，応力とひずみがほぼ載る曲線を求める問題は，条件

$$\boldsymbol{x}^{(i)} = C\check{\boldsymbol{v}}^{(i)}, \qquad i = 1, \ldots, r, \tag{1}$$

$$D\boldsymbol{y}^{(i)} = \check{\boldsymbol{w}}^{(i)}, \qquad i = 1, \ldots, r, \tag{2}$$

$$f(x_e^{(i)}, y_e^{(i)}) \simeq 0, \quad i = 1, \ldots, r;\ e = 1, \ldots, m \tag{3}$$

を満たす関数 $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ をみつけることに対応する．ただし，$C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ は適合行列に対応し，$D \in \mathbb{R}^{n \times m}$ は釣合い行列に対応する．ここで，構造物の形状は既知であると想定するので，C および D は定行列である．したがって，(1) より，$\boldsymbol{x}^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r)$ も与えられたデータとみなすことができる．一方で，通常は $m > n$ であるので，(2) は不定な線形方程式である．つまり，$\check{\boldsymbol{w}}^{(i)}$ から $\boldsymbol{y}^{(i)}$ を一意に決めることはできない．

3. データ点から曲面を生成するための最適化問題

文献[8,9]と同様に，求めたい曲線の式を

$$f(x, y) = \alpha(x)x + \beta(x)y - \gamma(x) = 0 \tag{4}$$

の形で表す．そして，$\alpha(x), \beta(x), \gamma(x)$ は，Gauss カーネル

$$\kappa(s, t) = \exp(-\zeta\|s - t\|^2)$$

を用いて

$$\alpha(x) = \sum_{i=1}^{r}\sum_{e=1}^{m} \kappa(\check{x}_e^{(i)}, x)\alpha_e^{(i)},$$

$$\beta(x) = \sum_{i=1}^{r}\sum_{e=1}^{m} \kappa(\check{x}_e^{(i)}, x)\beta_e^{(i)},$$

$$\gamma(x) = \sum_{i=1}^{r}\sum_{e=1}^{m} \kappa(\check{x}_e^{(i)}, x)\gamma_e^{(i)}$$

と表す．条件 (1), (2), (3) が成り立つように $\alpha_e^{(i)}, \beta_e^{(i)}, \gamma_e^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r;\ e = 1, \ldots, m)$ の値をうまく定めることが目標である．ただし，正規化条件

$$\sum_{i=1}^{r}\sum_{e=1}^{m} \|(\alpha_e^{(i)}, \beta_e^{(i)}, \gamma_e^{(i)})\|^2 = 1 \tag{5}$$

を課す．

曲線の式 $f(x, y) = 0$ に対する誤差の 2 乗和は

$$\sum_{i=1}^{r}\sum_{e=1}^{m} (\alpha(\check{x}_e^{(i)})x_e^{(i)} + \beta(\check{x}_e^{(i)})y_e^{(i)} - \gamma(\check{x}_e^{(i)}))^2 \tag{6}$$

である．この関数を最小化するようにパラメータを決めるのが最小 2 乗法であるが，パラメータ $\alpha_e^{(i)}, \beta_e^{(i)}, \gamma_e^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r;\ e = 1, \ldots, m)$ は多数あるので，文献[8,9]と同じ正則化を施す．つまり，$\eta > 0$ を正則化のパラメータとして，

$$\eta\kappa(\check{x}_{e'}^{(j)}, \check{x}_e^{(i)}) \left\| \begin{bmatrix} \alpha_e^{(i)} \\ \beta_e^{(i)} \\ \gamma_e^{(i)} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \alpha_{e'}^{(j)} \\ \beta_{e'}^{(j)} \\ \gamma_{e'}^{(j)} \end{bmatrix} \right\|^2 \tag{7}$$

の総和をペナルティとして目的関数に加える．

さらに，2 節の末尾で述べたように，(2) を満たす $\boldsymbol{y}^{(i)}$ は無数にある．このため，$\boldsymbol{y}^{(i)}$ に対して Tikhonov 正則化

$$\theta \sum_{i=1}^{r} \|\boldsymbol{y}^i\|^2 \tag{8}$$

を施す．ただし，$\theta > 0$ は正則化のパラメータである．

未知数 $\alpha_e^{(i)}, \beta_e^{(i)}, \gamma_e^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r;\ e = 1, \ldots, m)$ をすべて並べたベクトルを $\boldsymbol{w}$ で表す．(6) と (7)（の i, j, e, e' に関する総和）と (8) の和を整理すると，ある行列 H および M を用いて

$$\|H\boldsymbol{w}\|^2 + \zeta\boldsymbol{w}^\top M\boldsymbol{w} + \theta\sum_{i=1}^{r}\|\boldsymbol{y}^i\|^2 \tag{9}$$

の形に書くことができる．ただし，M は対称な定行列である．このようにして，解きたい問題は，制約 (1), (2), (5) の下で目的関数 (9) を最小化する最適化問題として定式化できる．

4. 交互最小化による解法

目的関数 (9) に含まれる H は，未知数 $\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{y}^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r)$ に依存する．したがって，この目的関数は非凸であり，3 節で定式化した最適化問題を直接的に解くことは容易ではない．そこで，発見的解法として，交互最小化を適用する．

提案する交互最小化では，$\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{y}^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r)$ を固定した下での最小化と，$\alpha_e^{(i)}, \beta_e^{(i)}, \gamma_e^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r;\ e = 1, \ldots, m)$（つまり，$\boldsymbol{w}$）を固定した下での最小化を，交互に繰り返す．

まず，$\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{y}^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r)$ を固定し，$\boldsymbol{w}$ に関して最小化する場合を考える．解きたい最適化問題は，次のように整理できる：

$$\begin{aligned} &\text{Minimize} && \|H\boldsymbol{w}\|^2 + \zeta \boldsymbol{w}^\top M \boldsymbol{w} \\ &\text{subject to} && \|\boldsymbol{w}\|^2 = 1. \end{aligned}$$

ここで，$\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{y}^{(i)}$ を固定しているため H は定行列であるから，目的関数は $H^\top H + \zeta M$ の 2 次形式である．したがって，最適解は行列 $H^\top H + \zeta M$ の最小固有値に対応する固有ベクトルである．

次に，$\boldsymbol{w}$ を固定し，$\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{y}^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, r)$ に関して最小化する場合を考える．この場合，各 $i = 1, \ldots, r$ に対して独立に最適化を行うことができ，解きたい最適化問題を整理すると次のようになる：

$$\begin{aligned} &\text{Minimize} && \sum_{e=1}^{m} (\alpha(\check{x}_e^{(i)}) x_e^{(i)} + \beta(\check{x}_e^{(i)}) y_e^{(i)} - \gamma(\check{x}_e^{(i)}))^2 + \theta \|\boldsymbol{y}^i\|^2 \\ &\text{subject to} && \boldsymbol{x}^{(i)} = C\check{\boldsymbol{v}}^{(i)}, \\ &&& D\boldsymbol{y}^{(i)} = \check{\boldsymbol{w}}^{(i)}. \end{aligned}$$

これは，等式制約のみをもつ最適化問題であるので，Lagrange 乗数法を用いて解くことができる．特に，目的関数が凸 2 次関数であり，制約は線形制約のみであるから，Lagrange 乗数法を適用すると線形方程式を解くことで最適解を得ることができる．

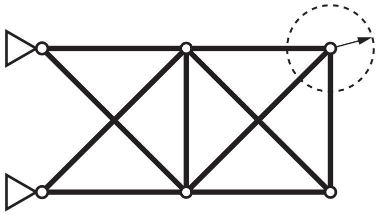
このように，交互最小化の各ステップは，容易に計算可能である．

5. 例題

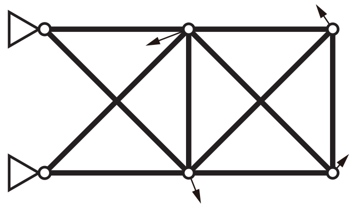
提案手法を，Figure 1 に示すトラスの釣合い解析に適用した．

まず，データ集合を次のように作成した．構成則を仮定し，いくつかの荷重に対してトラスの釣合い解析を行い，節点変位を求めた．荷重としては，Figure 1a のように右上の節点のみに外力を作用させるもの 15 パターン（外力の大きさは同じにして，角度を等間隔に変えた）と，Figure 1b のようにすべての節点にランダムに生成した外力を作用させるもの 15 パターンの，合計 30 パターンを用意した．

こうして得られた外力と変位の組に対して，提案手法を適用し，応力とひずみの組がほぼ載る曲線を推定した．その曲線を用いて，Figure 2 に示す荷重に対して釣合い解析を行った．ただし，λ は荷重係数である．Figure 3 の実線は，こうして得られた右下の節点の鉛直方向の変位である．一方，データ集合を作成した際に仮定した構成則を用いて釣合い解析を行うと，Figure 3 の点線が得られた．提案手法の結果は，この参照解によく一致している．



(a)



(b)

Figure 1. Loading conditions for generating input data.

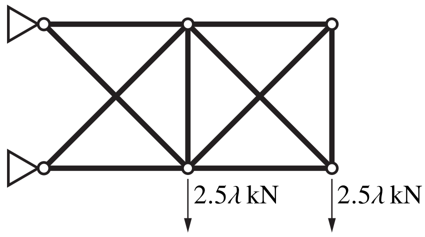


Figure 2. Loading condition for data-driven equilibrium analysis.

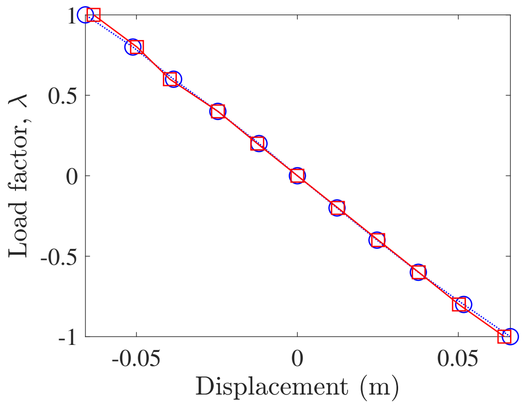


Figure 3. Nodal displacements obtained by the the proposed method (solid line) and the reference solution method (dotted line).

6. おわりに

弾性構造物の静的な釣合い解析において，変位と外力の組が与えられたとき，構成則をモデル化することなく釣合い解を求める手法について考察した．この手法は，データ点がある不定な線形方程式に従う際に，そのデータ点がほぼ載る曲面を求める問題と捉えることができる．文献[8,9]の

手法の拡張として，カーネル法を用いて解きたい問題を最適化問題として定式化した．この問題に交互最小化を適用すると，各ステップは固有値解析と線形方程式の求解という容易な計算に帰着されることを示した．さらに，提案手法を，人工的に生成したデータを用いたトラスの釣合い解析に適用した．

本稿では，簡単のため，トラスに限定して議論を行った．文献[8,9]と同様に考えれば，提案手法を連続体などのトラス以外の構造形式に拡張することは容易である．

謝辞　この研究は，鹿島学術振興財団，JST CREST Grant No. JPMJCR1911 および科研費 (17K06633, 21K04351) 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) M. Dalémat, M. Coret, A. Leygue, E. Verron: Measuring stress field without constitutive equation. *Mechanics of Materials*, **136**, Article No. 103087 (2019).
3) 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).
4) 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).
5) 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).
6) 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).
7) Y. Kanno: Data-driven computing in elasticity via kernel regression. *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, **8**, 361–365 (2018).
8) 寒野 善博 : カーネル法に基づくデータ点からの曲面の生成法．第 43 回情報・システム・利用・技術シンポジウム，日本建築学会, 2020 年 12 月, オンライン開催.
9) Y. Kanno: A kernel method for learning constitutive relation in data-driven computational elasticity. *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics*, **38**, 39–77 (2021).
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) A. Leygue, R. Seghir, J. Réthoré, M. Coret, E. Verron, L. Stainier: Non-parametric material state field extraction from full field measurements. *Computational Mechanics*, **64**, 501–509 (2019).
14) S. T. Roweis, L. K. Saul: Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, **290**, 2323–2326 (2000).