

研究終了報告書

「計算調和解析学に基づく形状データ解析の深化」

研究期間：2021 年 10 月～2024 年 3 月

研究者：古賀 一基

1. 研究のねらい

一般に曲面などの形状データに対する定量的な解析手法は Computer-Aided Design (CAD)をはじめとする幅広い工学・産業への応用を持ち、近年の予測データ科学の発展を背景にますますその重要性を増している。これに関して、形状データ同士の類似性を測る手法としてこれまでに Hausdorff 距離や Wasserstein 距離といった幾何学に由来する概念の応用が提案されている。しかし一般に、これらの距離の現実的な計算では大きな近似を施した粗い問題のみを解くことが可能である。そこで本研究では、3 次元形状データ解析の新たなフレームワークを計算調和解析学の視点から提案し、その一般性と精密さにより当該分野における新しいスタンダードを確立することがねらいである。

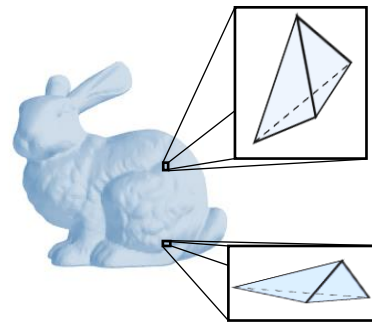


図 1 図形のデータ表現

本研究の目的に関連して、報告者はこれまでに平面閉曲線のパラメータ変換に関する不変量として弧長変数の Fourier 係数を定義し、その離散化に計算調和解析学における非一様高速 Fourier 変換(以下、NUFFT)の構造を発見した。これにより平面閉曲線に対してパラメータ表示の選択によらない曲線同士の高速な比較アルゴリズムを提案した。しかし、その基礎となる図形の上の Fourier 変換の存在は空間のトポロジーに依存するから、このような不変量に基づく着想を曲面といった高次元の場合へ拡張する際に本質的な困難が生じる。

そこで本研究では Fourier 解析の舞台を一つ高い次元に移し、二つのオブジェクトをある共通の空間に配置し形状データ間の定量的比較を定式化する。より具体的には、二つの幾何学的対象を Dirac のデルタ関数のような測度と同一視しその Fourier 変換を通じた比較を実行する。この発想の下では形状データそのものの Fourier 変換を用いて定義される超関数ノルムによりオブジェクト間の定量的比較が統一的に可能となる。さらに、本研究が提案するアルゴリズムを GPU 等のメニーコア・プロセッサ上で並列化し、統計的機械学習を含む広い分野において実用的なオープンソースソフトウェアとしての実装を目指す。

2. 研究成果

(1) 概要

ACT-X 研究期間では「1. 研究のねらい」の計画を以下の3つの研究テーマに分けて実施した。

- ① 単体上の Gauss 型数値積分公式
- ② 超関数ノルムの検討と数値実験
- ③ データ間距離の Gromov 型最適化

研究テーマ①では与えられた形状データの Hausdorff 測度、特に 3 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^3$ 内の単体からなる曲面に対応する surface measure の Fourier 変換を計算するため、単体上の Gauss 型数値積分公式の構成とその適用によって生じる点群の高速な足し合せを検討した。その結果各単体のパラメータ表示と累次積分を通じた 1 次元の Gauss-Legendre 公式の適用と NUFFT による高速化を実現し、単体に対する Fourier 変換の厳密公式を使った手法と比較して 18 倍程度の高速化を実現した(5. 主な研究成果リスト(1) -2)。

上述のアルゴリズムは単体で構成された曲面の Fourier 変換を与えることから、研究テーマ②ではそのデータと Plancherel の定理を用いて定義される負の正則性に関する Sobolev ノルムを計算する曲面間の比較手法を提案した。また提案したアルゴリズムを単位球面 S^2 とその離散化との比較に応用することで精度および効率性について検証した(5. 主な研究成果リスト(1) -2)。

一方、研究テーマ②が提案する距離概念は空間における二つのオブジェクトの相対的な位置関係に依存する。そこで、研究テーマ③ではこのような二つの対象間の距離の等長変換に関する最小化(Gromov 型の最適化問題)を連続最適化問題として定式化し数値的に解くことを試みた。しかし、定式化によって得られた最適化問題は一般に非凸な目的関数を持ち、まず大域解が存在しうる十分大きな有界領域においてよい初期予測を探索する手法が求められることが明らかになった。この目的のために研究テーマ②のアルゴリズムについて計算量の削減を検討する必要が生じ研究テーマ③は未達成に終わった。

(2) 詳細

研究テーマ①「単体上の Gauss 型数値積分公式」

3 次元空間における形状データの表現には三角形や四面体といった単体が基本要素として広く用いられている。このように区分的に平坦なデータに対しては複数の先行研究で単体の Hausdorff 測度に対する厳密な Fourier 変換公式が導かれているが、その計算機実装においては足し合せの困難さと強い数値不安定性が指摘されている。そこで本研究では、先行研究が提案した厳密公式を単体上の Gauss 型数値積分公式で置き換え、3 次元空間における単体の Fourier 変換に対し安定かつ高速な計算アルゴリズムを提案した。このとき、任意の単体は頂点の組から定まるパラメータ表示によってある標準的な単体と対応づけられるから、実際には後者について目的の数値積分公式を構成すれば十分である。そこで研究提案時点では、正三角形上の Gauss 型数値積分公式を正四面体上に拡張し、形状データ全体にわたる足し合わせを NUFFT によって大幅に高速化することを目的とした。

具体的な実施を通じて研究テーマ①に関し判明したのは、正四面体上の Gauss 型数値積分公式と比較して累次積分を通じた低次元公式の適用が有効でありうるという点である。すなわち、その計算に連続最適化が不可欠な高次元公式に対し、すでに非反復的な計算法が知られている 1 次元公式によって高次の数値積分公式を容易に構成することができる。これは形状データを構成する単体にサイズが大きいものが含まれている場合に特に重要である。そこで本研究では、累次積分を通じた Gauss-Legendre 公式の適用を各単体へ行い、数値積分の適用によって生じた点群の Fourier 変換の計算を NUFFT の GPU 実装である cuFINUFFT によって厳密公式を用いた先行研究に比べ 18 倍程度の高速化に成功した(5. 主な研究成果リスト(1) -2)。

研究テーマ②「超関数ノルムの検討と数値実験」

研究テーマ①の成果は単体を基本要素とする形状データの Fourier 変換を高精度に近似する。そこで、この波数空間の情報を用いて二つのオブジェクト間の差を定量化する距離概念を検討し、その性能を検証するための数値実験を行った。このとき、形状データが点群や曲面を表す場合は通常の関数として取り扱えないから、Plancherel の定理を通じて定義される負の正則性に関する Sobolev ノルムといった緩増加超関数に対して定義される概念が有効である。さらに本研究では具体的な数値実験の例として、厳密な Fourier 変換と豊富な離散化が知られている単位球面が特に重要である。また研究提案時点では、Fourier 変換からノルムを計算する際の複雑性を避けるため、形状データを全空間 $\mathbb{R}^3$ ではなくトーラス $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ 内部に配置して解析を行うことを想定していた。

しかし、研究の実施では 3 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^3$ に配置された 2 つのコンパクト曲面の比較という申請時の設定よりも理想的な状況でアルゴリズムの提案・実装に成功した。ここでコンパクト性は surface measure がなめらかな Fourier 変換を持つことを保証し、全空間における Sobolev ノルムの台形公式による近似が当初想定したトーラス $\mathbb{R}^3/\mathbb{Z}^3$ 上での計算と同程度の高精度で実現される。また提案したアルゴリズムを単位球面 S^2 とその離散化との比較に応用することで精度および効率性について検証した(5. 主な研究成果(1) -2)。

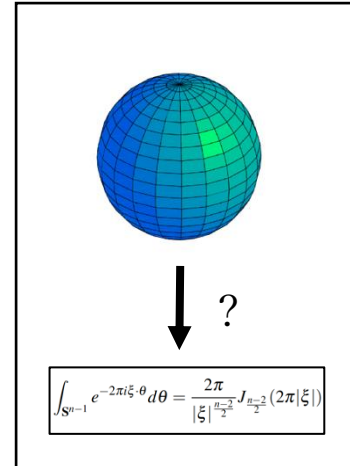


図 2 曲面の Fourier 変換

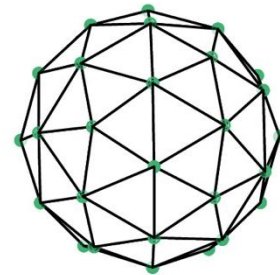


図 3 単体による球の離散化

研究テーマ③「データ間距離の Gromov 型最適化」

研究テーマ②が提案する距離概念は空間における二つのオブジェクトの相対的な位置関係に依存するが、一般の形状データ解析ではそのような配置の任意性に依存しない比較がしばしば重要である。本研究ではこのような二つの対象間のある距離を等長変換に関して最小化する問題を Gromov 型の最適化問題と呼び、研究テーマ②が提案する距離の Gromov 型最小化問題を連続最適化問題として定式化し解くことを試みた。特に研究提案時点では、このような小自由度の連続最適化問題における目的関数の勾配ベクトルおよび Hesse 行列の一般公式を導き、それらを用いたアルゴリズムを信頼領域法から検討しその性能を評価することを目指した。

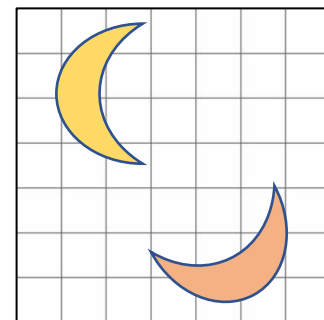


図 4 同一図形の異なる配置

しかし、定式化によって得られた最適化問題は一般に非凸な目的関数を持ち、また大域解に収束が期待される初期予測を理論的考察から得ることが難しい。そこで、まず大域解が存在する十分大きな有界領域においてよい初期予測を探索する手法が求められ、この目的のために研究テーマ②のアルゴリズムについて計算量の削減を検討する必要が生じ未達成に終わった。

研究テーマ④「平面閉曲線の効率的な離散化とその質的評価手法」

研究計画外の成果として、本研究課題の出発点である平面閉曲線の離散化と比較手法について大幅な精緻化を達成した。この成果は、第一に平面閉曲線の複雑さを表す関数から equidistribution の意味でパラメータと弧長との対応関係を構成し、第二にその対応関係が定めるパラメータ表示を弧長変数 Fourier 係数という不変量から復元するという2つのステップからなる。この中間データとしての不変量は、パラメータ表示間の質的比較をそれらの離散化が不変量を復元する速さの比較を通じて初めて可能にした(5. 主な研究成果(1) -1)。

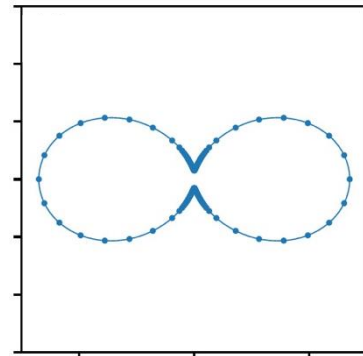


図 5 非一様な曲線の離散化

3. 今後の展開

本研究は 3 次元形状データに関しそれらの統一的な比較方法を計算調和解析学の視点から提案することを目的とし、ACT-X 実施期間においてその最も基本的な構成要素を定式化から計算論に至るまで確立することに成功した。しかし、Gromov 型最適化問題のように当初予定していた課題のうち未達成のものも残されているため、これらの研究テーマに今後 2 年程度のスパンで取り組む予定である。

一方、本研究の成果は数値シミュレーションといった古典的分野を超えてより実用的な問題への応用可能性を有している。例えば、近年生物物理学の分野において共焦点蛍光イメージングにより得られたデータから細胞の形状を復元する試みが曲面の Fourier 解析的な表現を用いてなされている。また他方で、現在のコンピュータグラフィックス分野では与えられた光学的情報から元の形状データを再構成する逆レンダリングが盛んに研究され、本研究が提案するアルゴリズムがそのタスク群における新しいツールとなることが期待される。そこで本研究の今後の展開として、これらの応用分野における活用に ACT-X 終了後 5 年程度の期間で取り組む。

4. 自己評価

ACT-X の研究期間では最終的な目標である Gromov 型最適化アルゴリズムの実現が未達成として残ったものの、研究計画の一部を申請時の構想に沿ってさらに理想的な形で実現することに成功した。また得られた成果の応用促進を目的としたオープンソースソフトウェアの実装も未達成部分として残っており、社会実装の視点では課題が残ることとなった。

一方、ACT-X の研究実施を通じて研究課題の理論的側面および応用可能性についてより豊富な知見を持つ研究者とのコネクションを新たに獲得することができた。その中で「3. 今後の展開」で述べたコンピュータグラフィックスへの応用につながる知見も得られ、さらにそれを自らの研究自体に反映することができ、本研究の成果を応用研究および社会実装につなげるための重要なステップを ACT-X 研究期間中に達成することができた。

5. 主な研究成果リスト

(1) 代表的な論文(原著論文)発表

研究期間累積件数: 2件

1. K. Koga, Numerical reparametrization of periodic planar curves via curvature interpolation, *SIAM J. Sci. Comput.*, **44(3)**, A1703–A1722 (2022)

なめらかな平面閉曲線のパラメータ表示を equidistribution の意味で構成する数値的アルゴリズムを提案した。また数値実験として流体界面の特異点形成を模したテストケースに適用し、実際に離散化の空間解像度が大幅に改善されることを定量的に示した。

2. K. Koga, Computing weak distance between the 2-sphere and its nonsmooth approximations, *SIAM J. Sci. Comput.*, in press (2023)

3 次元 Euclid 空間 $\mathbb{R}^3$ に埋め込まれた 2 つのコンパクト曲面を定量的に比較するためのアルゴリズムを提案した。また提案したアルゴリズムを非一様高速 Fourier 変換による高速化と GPU 上での並列化を含めて実装し、単位球面 S^2 とその Icosahedral discretization との定量的比較に応用した。

(2) 特許出願

研究期間全出願件数: 0 件(特許公開前のものも含む)

(3) その他の成果(主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等)

口頭発表

- 1 古賀一基, 曲率補間を通じた平面閉曲線のパラメータ変換と質的評価について, 日本応用数理学会 2022 年度年会, 札幌市, 2022 年 9 月 8 日.
- 2 古賀一基, 弱い距離概念を用いた形状データの比較, 数学と諸分野の連携にむけた若手数学者交流会 2023, 東京都, 2023 年 3 月 14 日.
- 3 古賀一基, 球面とその離散化との間の弱い比較について, 日本数学会 2023 年度秋季総合分科会, 仙台市, 2023 年 9 月 23 日.