

平成 26 年度 共同利用研究報告書

平成 27 年 2 月 1 日

九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所長 殿

所属・職名 トヨタ自動車株式会社・主幹

提案者 氏名 ^(ふりがな) 渡邊 ^{わたなべ} 智 ^{さとし}

下記の通り共同研究の報告をいたします。 記

	※整理番号		20140010	
1.研究計画題目	境界モデル手法の研究			
2.種別 (○で囲む)	c.短期共同研究			
3.研究代表者	氏名 ^(ふりがな)	渡邊 ^{わたなべ} 智 ^{さとし}		
	所 属	トヨタ自動車株式会社	職 名	主幹
	部局名	エンジン先行制御システム開発部		
	連絡先			
e-mail		TEL		
4.研究実施期間	平成 26 年 5 月 29 日 (木曜日) ~平成 26 年 5 月 30 日 (金曜日) 平成 26 年 12 月 11 日 (木曜日) ~平成 26 年 12 月 12 日 (金曜日)			

5.参加者数・参加者リスト (*別紙「共同利用研究報告書作成上の注意」参照)

(a,b は参加者数のみ記入し, 集会参加者リストを添付. c.の非公開プログラム参加者と d.は参加者リストに記入. c.は公開プログラムを含めた全参加者数を記入し, 公開プログラム参加者リストを添付.)

参加者数 : (第 1 回) 15 人, (第 2 回) 23 人

参加者リスト (a,b は記入不要, c.は非公開プログラム参加者, d.は共同研究参加者を記入)

^(ふりがな) 氏名	所属	職名	^(ふりがな) 氏名	所属	職名

6.本研究で得られた成果の概要

第 1 回の短期共同研究では, 自動車エンジン開発側から, (1-1) 「境界モデル」を含むエンジン適合の一つである Model Based Calibration (MBC) と呼ばれる開発手法の詳細, (1-2) 自動車エンジンの数理モデルと得られるデータの動的特性の有無, (1-3) エンジンが正常に動作するパラメータの集合である, 運転可能領域の構築法の詳細, などが説明された. これに基づき, (1-A) 運転可能領域の数学的定式化の必要性, (1-B) 静的(定常)データを前提にした場合は統計的手法が有効, (1-C) 要因ごとに運転可能領域を定める関数を作るのが有用, (1-D) データの領域を区分的に分割して, 領域ごとで有効な(入力)変数を見つける, などが議論された. その後 Study Group Workshop 2014 では, ベンチマーク問題を提供してもらい, 特に(1-A)と(1-B)について議論を続けた.

第 2 回の短期共同研究では, 第 1 回の議論を踏まえて, (2-1) 境界の表示は, 陰関数表示を利用した方が開発に有用, (2-2) 動的システムを扱う, あるいは, 動的データとして扱うなら, スパース推定などを適用してできるだけ必要な変数を落とした方がよい, (2-3) 得られたデータに対してロジスティック回帰を適用することで確率的に捉えることで境界の表示の自由度や効率的なデータ生成が可能になる, などが議論された.

また, Study Group Workshop 2014 の後に, 参加者の一人である九州大学数理学府修士 1 年の青山遼くんがトヨタ自動車株式会社のインターンシップに参加し, 境界モデルに対するロジスティック回帰の有用性を議論した. この結果を第 2 回の短期共同研究で発表した. このように, 研究の成果だけでなく, 大学と産業界の人的交流も実現できた. 今回の短期共同研究の成果は「第二回制御部門マルチシンポジウム」(計測自動制御学会 制御部門主催)で青山遼くんが発表予定である.

平成 26 年度短期共同研究「境界モデルの研究」の報告書

研究代表者：渡邊 智 (トヨタ自動車株式会社)
大畠 明 (トヨタ自動車株式会社)
佐藤 正浩 (本田技術研究所)
下城 孝名子 (本田技術研究所)
脇 隼人 (九州大学 IMI)

1 短期共同研究の実施概要

申請時にも記載した通り、議論する時間を確保するために 2 回に分けさらに IMI のイベントと組み合わせることで下記の通り実施した。

1. 境界モデル手法の研究 (第 1 回)

- 日時：平成 26 年 5 月 29 日 (木) 13:30 - 30 日 (金) 16:45
- 場所：九州大学 伊都キャンパス 数理学研究教育棟 3 階中セミナー室 7
- プログラム：下記の通り

表 1: 境界モデル手法の研究 (第 1 回) のプログラム

時間	講演者	講演タイトル
29 日 13:30 - 15:00	下城 孝名子 (本田技術研究所)	ガソリンエンジンの動的モデリングの概要と境界探索の必要性
29 日 15:15 - 17:00	佐藤 正浩 (本田技術研究所)	エンジンの境界把握における現状の課題と今後の期待
30 日 10:30 - 12:00	大畠 明 (トヨタ自動車株式会社)	自動車エンジンの運転可能境界の把握とその制御応用
30 日 13:30 - 15:00	渡邊 智 (トヨタ自動車株式会社)	境界ベンチマークおよび境界近傍制御ベンチマーク問題
30 日 15:15 - 16:45	参加者全員	講演内容や今後の方針について

- 参加者数：大学 (教員 7 名, 学生 3 名), 企業 (5 名), 計 15 名

2. Study Group Workshop 2014

「Boundary Model Identification for Automotive Engine Control Systems」というタイトルで、大畠氏 (トヨタ自動車) と下城氏 (本田技術研究所) に問題提供をしていただき、境界モデル手法の研究 (第 1 回) で紹介された内容、特に、境界モデルの数学的定式化と境界モデル作成の数学・数理工学技術について議論した。

3. インターンシップ

境界モデル手法の研究 (第 1 回) に参加していた青山遼君 (九州大学大学院数理学府修士 1 年) がトヨタ自動車のインターンシップに 8 月末から一ヶ月間参加し、大畠氏・渡邊氏の指導のもと境界モデル手法の研究 (第 1 回) で議論された内容に取り組んだ。

4. Forum “Math-for-Industry” 2014

大畠氏(トヨタ自動車)に Forum “Math-for-Industry” 2014 において短期共同研究「境界モデルの研究」について紹介していただき、その際にも関係者数名で議論・情報交換を行った。

5. 境界モデル手法の研究(第2回)

- 日時：平成26年12月11日(木) 13:30 12日(金) 19:00
- 場所：九州大学 伊都キャンパス 数理学研究教育棟 3階中セミナー室7
- プログラム：下記の通り

表 2: 境界モデル手法の研究(第2回)のプログラム

時間	講演者	講演タイトル
11日 14:00 - 15:30	落合 啓之(九州大学 IMI)	境界とは何か、そして境界をどのように表すか
11日 16:00 - 17:30	岩瀬 将美(東京電機大学)	自動車エンジン運転状態の解析ツールとしてのプラントモデリングおよびシステム同定
12日 10:30 - 12:00	青山 遼(九州大学 数理学府)	自動車エンジンの境界モデリングについて
12日 13:30 - 15:00	立川 尚義, 角川 博紀(トヨタ自動車株式会社)	境界を考慮したディーゼルエンジンの適合値導出手法の紹介
12日 15:30 - 17:00	原田 真悟(マツダ株式会社)	mazdaにおけるディーゼルエンジン開発のMBCと境界モデルの課題
12日 17:00 - 19:00	参加者全員	IMI 短期共同研究のまとめと今後について

- 参加者数：大学(教員8名, 学生7名), 企業(8名), 計23名

6. 平成27年2月末発行予定のマス・フォア・インダストリ研究所ニュースレター(第5号)の記事の執筆

今回の短期共同研究についての概要や感想・コメント、脇氏、渡邊氏、下城氏に書いてもらいA4で1ページほどの記事にまとめた。本短期共同研究およびIMI短期共同研究システムの宣伝になるのではないかと思う。

7. 本研究結果をまとめて、2015年3月4日から7日まで東京電機大学で開催される「第二回制御部門マルチシンポジウム」(計測自動制御学会 制御部門主催)に参加し、「自動車エンジン制御システムにおける境界モデリング」というタイトルで青山遼君(九州大学大学院数理学府)が講演する予定である。講演のために6ページ程度原稿を作成したので、この報告書と合わせて提出する。

なお、境界モデル手法の研究(第1回)および(第2回)以外の出張旅費、招聘経費は本短期共同研究に割り当てられた経費以外の九州大学大学院数理学府、IMIの経費を利用している。

2 境界モデルについて

近年、自動車エンジン開発に対してユーザーから安全性や経済性に関する要求だけでなく、環境負荷低減などの社会的な要求も強まっている。そういった要求に基づく自動車エンジンを開発するためにエンジン適合と呼ばれる適合試験が必要になる。適合試験で要求を満たすようにエンジンの開発が進められるが、要求が多くなればなるほど、開発システムや工程が複雑になる。一方で、開発期間および開発コストの削減も要求されることもあり、短期間・低コストの自動車エンジン開発が強く望まれている。そのため、エンジン適合を効率良く実施する必要があり、近年では、Model Based Calibration (MBC) と呼ばれる開発手法が広く用いられている。

MBC は実験計画や応答曲面の作成、実車評価など幾つかの工程から構成されており、各工程でエンジン制御システムに関連する対象物を数理モデル化し、統計・最適化・制御手法を適用して様々な要求を満たす適合値を導出する手法である。エンジンが様々な物理現象を含んだ非線形な動的システムであるため、各プロセスの数理モデルが場合によってはエンジンを正確にモデル化できず、手法を適用した結果が必ずしもエンジンに有用でないこともある。現状では、エンジン開発者自身の技能・能力に頼っている部分もある。

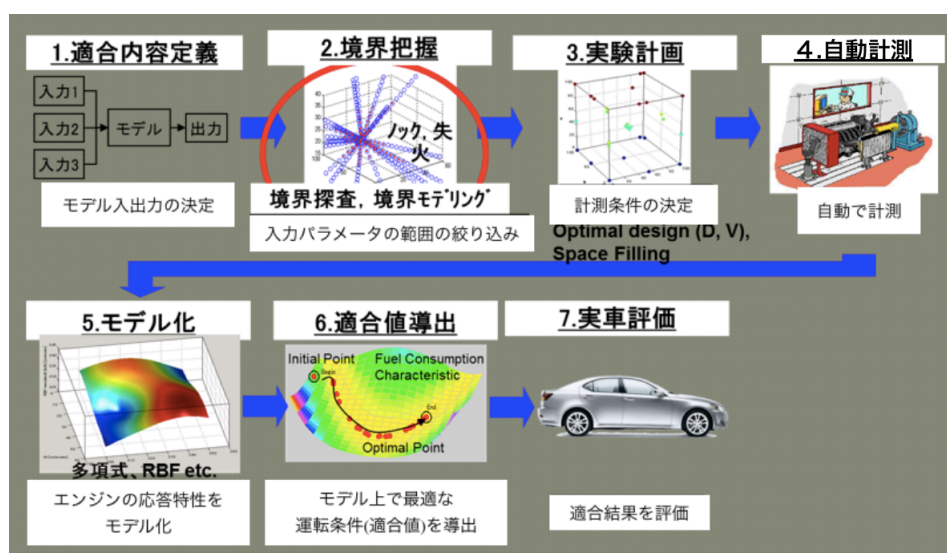


図 1: MBC の概要 (渡邊氏 (トヨタ自動車) 提供)

境界モデルとは、MBCの工程の一つでありエンジン制御システムのために決められた入出力パラメータに対して、エンジンの運転可能領域を作成する工程である。(図1では「2.境界把握」に対応する。)その次の工程である実験計画において、境界モデルから運転可能な入出力パラメータを抽出し、さらに精密に計測することでエンジンの挙動・性能を調べる。低燃費で高性能なエンジンを開発するためには、この領域の境界の近傍で運転可能な入出力パラメータを抽出する必要があり、領域のより正確な把握が求められている。一方、境界モデルを作成するためには、試作エンジンに対して様々な入出力パラメータを試して運転可能かどうかを観測する必要があり、一回の観測に時間がかかるため開発時間を考慮すると、多くの入出力パラメータを試すことはできず、結果として正確な領域作成ができないのが現状である。

3 境界モデル手法の研究 (第1回)

この短期共同研究では、まずは自動車エンジン開発の情報を提供することを目標とし、組織委員のトヨタ自動車・本田技術研究所の方に開発現場の現状を話していただき、数学的問題点を抽出することと今後(特に Study Group Workshop 2014)の議論する内容を検討した。議論・検討の内容は以下の通りである:

- 自動車エンジン開発の現状: 燃費や安全性などの利用者からの要求, 自動車業界や車内からの開発期間の短縮・コストの圧縮の要求, CO₂, NO_x 削減などの社会的要求, さらには, 国際化や他国での利用を見据えた開発, など様々な要求があり, 様々な観点から「効率の良い自動車エンジン開発」が求められている。一方で, 様々な要求に応えるために開発が複雑化していて, 開発コストが増加している
- 「効率の良い自動車エンジン開発」のために近年 Model Based Calibration (MBC) が主流となっていて実験計画, 回帰, 動的モデリング, 最適化など様々な数学・数理科学技術を利用して自動車エンジンの数理モデルを構築し, エンジン開発の効率化を実現している。
- MBC は主に次の工程で構成されている: 1. 入出力定義, 2. 境界モデル, 3. 実験計画, 4. 自動計測, 5. モデリング(最適化), 6. Map 作成, 7. 実車評価。

境界モデルは, エンジンが運転可能となる入出力パラメータの領域を定め, 実験計画の計測点を選ぶ際に必要となる。

- 試作エンジンに対して様々な入出力パラメータを試し運転可能領域を同定する。現在, 入力のパラメータの数は5から13程度ではあるが, パラメータ数が増えると運転可能領域を同定するために必要なデータ数は増加するが, 一方でデータを取るためには, 一点あたり数分かかるため, データをたくさん取ることができず結果として同定された運転可能領域は精度の悪いものとなる。
- 境界モデルを作成するために, 凸包やサポートベクターマシンがすでに提案されている。しかし, 凸包を取るのとは簡単ではあるが運転可能領域が凸包である保証はなく, 得られる運転可能領域が十分でない可能性がある。
- 大島氏・渡邊氏によって, Simlink を利用した自動車エンジンのシミュレータを公開していて, このシミュレータで得られる入出力パラメータを利用して議論・検討することができる。
- 境界モデルを作成した後の動的モデルに関連する数学・数理科学技術の適用例の紹介があった。

この短期共同研究で次のような意見が出た:

- 領域をうまく分割することで, 分割された領域で有効なパラメータを限定することができるかもしれない。
- 非凸で扱いやすい(例えば領域を規定する関数が微分可能など) 領域を同定するために, 動径基底関数などを利用してはどうか。
- 運転可能領域を作成する際に, 出力は運転可能(0)あるいは運転不可能(1)となっている。出力値を決める基準が複数ある場合(例えばエンジン失火とロックなど), それぞれの要因で運転可能領域を作成し, その共通部分を実際の運転可能領域としはどうか。

- 適切な (非線形かもしれない) 変数変換を適用することで運転可能領域を凸領域にできる可能性があるかもしれない。

4 境界モデル手法の研究 (第2回)

境界モデル手法の研究 (第1回) の議論に基づき, 大学からは数学的視点からの境界モデルについて落合氏 (九州大学 IMI) に, パラメータ数を減らすという観点で Model Reduction とその応用について岩瀬氏 (東京電機大学) に講演していただいた。また, 自動車エンジン開発の現場から立川氏 (トヨタ自動車) と原田氏 (マツダ株式会社) に講演していただいた。さらに, インターンシップで大畠氏・渡邊氏に指導していただいた青山くん (九州大学大学院数理学府) に, ロジスティック回帰の適用について講演していただいた。

議論・検討の内容は以下の通りである:

- 境界の数学的表示として陰関数を用いたほうがよさそう。例えば, $H = \{u : h(u) \leq 0\}$ であれば, $h(u) = 0$ など。
- オンライン技術の考え方を利用すれば, 要因ごとに境界を作成し, それを利用して次の探索点の候補を探すことで効率化につながるかもしれない。
- 境界の可視化では境界の勾配の情報を利用することができるかもしれない。これは, 摂動に対して鋭敏な変数と鈍感な変数に分けることに対応する。
- 時系列モデルに対しても LASSO などのスパース推定による Model Reduction が有効である。
- 物理モデルによる自動車エンジン制御と非線形サポートベクターマシンやサポートベクターマシンによる3つ以上のクラスの分類の紹介
- ロジスティック回帰による境界モデリングで運転可能領域を確率で理解ができる。
- ロジスティック回帰においては, 運転可能領域を定めるしきい値の取り方に自由度があり, その自由度を開発でうまく利用できるかもしれない。

今後の課題としては以下の点が挙げられた:

- 動的な境界モデルの構成。静的な境界モデルに関してはロジスティック回帰の適用が有効であるが, 動的な場合はまだわからない。
- 説明変数を選択するために Model Reduction を適用する。幾つかの方法が提案されているが, 非線形動的モデルに適した Model Reduction を調査・検討すべきである。
- 上記に関連して, 適切な変数変換をすることで領域を例えば凸などの扱いやすい領域に変形できないか検討したい。開発者の勘や経験と組み合わせられると面白いかもしれない。

5 まとめ

短期共同研究やその他 IMI のイベントを通して行った議論・検討を元に 2015 年 3 月 4 日から 7 日まで東京電機大学で開催される「第二回制御部門マルチシンポジウム」(計測自動制御学会 制御部門主催)に参加し、「自動車エンジン制御システムにおける境界モデリング」というタイトルで青山遼君(九州大学大学院数理学府)が講演する予定である。この講演のために作成した予稿を短期共同研究の報告書として合わせて提出する。

自動車エンジン制御システムにおける境界モデリング

○青山 遼 (九州大学), 脇 隼人 (九州大学), 大島 明 (トヨタ自動車), 渡邊 智 (トヨタ自動車), 佐藤 正浩 (本田技術研究所), 下城 孝名子 (本田技術研究所)

Boundary Modeling for Automotive Engine Control Systems

*R. Aoyama (Kyushu University), H. Waki (Kyushu University),
A. Ohata (Toyota Motor Corporation), S. Watanabe (Toyota Motor Corporation),
M. Sato (Honda R&D Co., Ltd.), K. Shimojo (Honda R&D Co., Ltd.)

Abstract— The current driving force of developing automotive engine system is to improve fuel efficiency. For the goal, we need to know more details on behavior of the engines for knocking, misfire and temperature, etc, in the process of boundary modeling. To this end, we need to acquire and analyze much data on these of engines efficiently. In this report, we propose a nonlinear logistic regression for more precise boundary modeling, and show some numerical results on data obtained from a simulator of engines.

Key Words: Boundary modeling, logistic regression, regularization, model based calibration

1 はじめに

近年, 自動車エンジン開発において利用者から安全性や経済性の要求だけでなく, CO₂ や NO_x などの環境負荷低減など社会的な要求も高くなっている. また, これらだけでなく企業内部からも開発期間やコストの削減を要求されることもある. これらの多種多様な要求に基づく自動車エンジンの開発には効率の良いエンジン開発が必要不可欠であり, Model Based Calibration (MBC) と呼ばれる開発手法が広く用いられるようになった.

MBC は境界モデリングや実験計画, 応答曲面の作成, 実車評価など幾つかの工程から構成されており, 各工程でエンジン制御システムに関連する対象物を数理モデル化し, 統計・最適化・制御手法を適用して様々な要求を満たす自動車エンジンを開発する手法である. しかしながら, MBC においてもまだ開発者の高い技能に依存している部分が多くあり, 短期間・低コストの自動車エンジン開発につながっていないのが現状である.

本稿では, MBC の一つの工程である境界モデリングに着目して, 運転可能領域を作成する方法として非線形ロジスティックモデルの適用を提案し, その有用性を議論する. 境界モデリングの主な目的は高精度な境界モデルを作ることによって効率の良い実機計測のための実験計画に役立てることである. 境界モデリングが重要視されるようになった背景として, エンジンの技術向上に伴う入力変数の増加などから計測時間が膨大になり新たな手法を取り入れることが必要となったことが挙げられる.

本稿で提案する非線形ロジスティックモデルの利点として, (i) 得られる非線形ロジスティックモデルによって, 非凸な領域でも表現ができる, (ii) 領域に対して確率的な考え方ができる, ということが挙げられる. 現行の境界モデリングとしてデータ点に対して凸包をとることが一般的である. 凸包をとる利点として, すでにアルゴリズムやソフトウェアが提案・公開されているこ

とや, わかりやすいという点が挙げられる. 一方, 表現可能な領域形状が凸に限定されるという短所もある. また, 運転不可能点は使用せず運転可能点のみから凸包を生成することから, 境界を精度良く近似するのに必要な実験点数が増加し, 開発期間やコストの増加につながる恐れがある.

本稿は, 次のような構成になっている. 2 節では, 非線形ロジスティックモデルを紹介する. 3 節では, どのように非線形ロジスティックモデルを適用するか述べ, 具体的なデータを利用してその有用性を議論する. 4 節では, 本稿の議論のまとめを行なう.

2 準備

本節では, 境界モデリングで用いるロジスティック回帰³⁾ に関して基本的なことを述べる.

2.1 ロジスティックモデル

任意の p 次元ベクトル $x = (x_1, \dots, x_p)$ に対して, $0 < y < 1$ を満たす実数 y を出力する次の関数をロジスティックモデルという.

$$y = \pi(x) := \frac{1}{1 + \exp\left(-w_0 - \sum_{j=1}^p w_j x_j\right)}. \quad (2.1)$$

ここで, w_0, \dots, w_p は与えられた実数である. (2.1) において y は 0 から 1 までの実数を取りうるので, y を確率とみなすことができる. この考え方が, ロジスティックモデルの基本となる. ロジスティックモデルは 2 値反応データ解析でよく用いられる. ここで 2 値反応データ解析とは, p 次元入力 x に対して反応したか否かを $\{0, 1\}$ の 2 値に対応させた出力を y とした入出力データに対する解析である.

ロジスティック回帰は, 与えられた n 個の入出力データ $(x^1, y^1), \dots, (x^n, y^n)$ に対して, (2.1) のパラメータ w_0, \dots, w_p を決める. (2.1) の関数が非線形であることや, データに誤差などが入ることを考えると, すべての

データで (2.1) を満たす係数を解析的に求めることは困難である。

データからロジスティックモデルのパラメータ w_0, \dots, w_p を求めるためには、最尤法を用いるのが一般的である。最尤法は、各データ (x^i, y^i) がある確率分布に従って得られたという仮定のもとに、入力 x^i に対して出力 y^i が得られる確率を最大化するようなパラメータ w_0, \dots, w_p を決定する方法である。Fig. 1 では、青丸は $y = 0$ 、赤米印は $y = 1$ の出力データであり、それらの入出力データに対してロジスティック回帰を適用して求められた $y = \pi(x)$ を描いている。

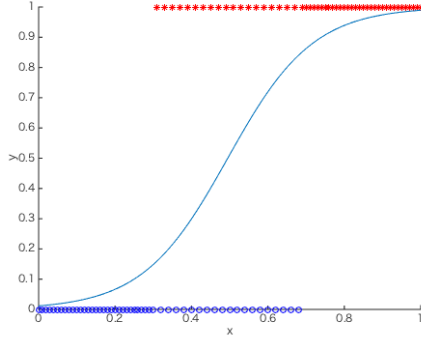


Fig. 1: ロジスティックモデル (2.1) の例

ロジスティック回帰に対する最尤法では、データ (x^i, y^i) がベルヌーイ分布に従っていると仮定する。ベルヌーイ分布とは、確率変数 Y が 0 と 1 の 2 点で値をとる離散型確率変数であり、確率分布は確率 π に対して

$$f(y|\pi) = \pi^y(1-\pi)^{1-y}, \quad y \in \{0, 1\}$$

で与えられる。 $w = (w_0, w_1, \dots, w_p)^T$, $x^i = (1, x_1^i, \dots, x_p^i)^T$ に対して、 π^i ($i = 1, \dots, n$) を

$$\pi^i := \frac{1}{1 + \exp(w^T x^i)}$$

と定めると、尤度関数

$$L(w) := \prod_{i=1}^n f(y^i|\pi^i) = \prod_{i=1}^n (\pi^i)^{y^i} (1 - \pi^i)^{1-y^i}$$

で与えられ、この尤度関数を最大化することでパラメータ w を求める。通常、尤度関数を最大化する代わりに、対数尤度関数と呼ばれる次の関数を最大化する。最大解はどちらも変わらないことに注意する。

$$\begin{aligned} \ell(w) &:= \log(L(w)) \\ &= \sum_{i=1}^n (y^i w^T x^i - \log(1 + \exp(w^T x^i))). \end{aligned}$$

この場合、制約なし凹関数最大化問題なので、最急降下法やニュートン法など良く知られた最適化手法で対数尤度関数の最大解を見つけることができる。

2.2 非線形ロジスティックモデル

任意の p 次元ベクトル $x = (x_1, \dots, x_p)$ に対して、0 から 1 までの実数 y を出力する次の関数を非線形ロジ

スティックモデルという。

$$y = \pi(x) := \frac{1}{1 + \exp\left(-\sum_{j=0}^m w_j b_j(x)\right)}. \quad (2.2)$$

ここで、 w_0, \dots, w_m は与えられた実数であり、 $b_0(x) = 1$, $b_1(x), \dots, b_m(x)$ は x の関数であり、基底関数と呼ばれる。ロジスティックモデル (2.1) との違いは基底関数 $b_j(x)$ ($j = 1, \dots, m$) が非線形関数であるという点である。非線形ロジスティック回帰もロジスティック回帰と同様に最尤法を適用してパラメータ w_0, \dots, w_m を求める。対数尤度関数 $\ell(w)$ は次で与えられる。

$$\ell(w) := \sum_{i=1}^n (y_i w^T b(x^i) - \log(1 + \exp(w^T b(x^i)))).$$

ここで、 $w = (w_0, \dots, w_m)^T$, $b(x^i) = (b_0(x^i), \dots, b_m(x^i))^T$ である。基底関数 $b(x^i)$ が $(m+1)$ 次元数値ベクトルであることに注意すると、この場合も対数尤度関数 $\ell(w)$ は凹関数になるので、ニュートン法などの数値最適化を適用することでパラメータ w を求めることができる。

本稿では基底関数 $b_j(x)$ として動径基底関数を採用した。動径基底関数とは、ベクトル x と中心ベクトル μ_j の間のユークリッド距離 $\|x - \mu_j\|_2$ に依存する非線形関数である。動径基底関数としてよく知られているものに、ガウス型基底関数がある。 $\mu_j \in \mathbb{R}^p$ と $h_j > 0$ に対して、ガウス型基底関数は次で与えられる：

$$b_j(x) = \exp\left(-\frac{\|x - \mu_j\|_2^2}{2h_j^2}\right) \quad (j = 1, \dots, m).$$

ここで、 μ_j は基底関数の位置を定める中心ベクトルで、 h_j は関数の広がり程度を表す量である。中心ベクトル μ_j や広がりを表す h_j の決め方は、 k -平均法³⁾を用いることなどが提案されている。本稿では $\mu_j = x^i$, h_j は中心を μ_j とする円の半径で、入力データ x^i が 3 点入るように定めた。

2.3 非線形ロジスティック回帰に対する正則化

ロジスティック回帰あるいは非線形ロジスティック回帰を適用すると、最尤法においてしばしば最大解 w が発散する、あるいは最大解が複数存在する場合がある。このような場合、非線形ロジスティックモデルが不良設定であると呼ばれ、解が有限で一意になるように非線形ロジスティックモデルに対して操作する必要がある。代表的な操作が正則化であり、非線形ロジスティックモデルから得られる対数尤度関数 $\ell(w)$ に対して、

$$\ell_\lambda(w) := \ell(w) - \lambda R(w)$$

と正則化項 $R(w)$ を追加する操作である。ここで、 $\lambda > 0$ であり正則化パラメータと呼ばれる。 λ はモデルの適合度と曲線(曲面)の滑らかさを調整する。正則化項 $R(w)$ としてよく次の関数を用いられる。

$$R_1(w) := \sum_{j=1}^m |w_j|, \quad R_2(w) := \sum_{j=1}^m w_j^2$$

$R_1(w)$ は最適なパラメータ w が疎となることが知られている一方で、 $l_\lambda(w)$ が微分不可能な凹関数になることから、本稿では $R_2(w)$ を用いる。

3 境界モデリングに対する非線形ロジスティックモデルの適用

3.1 境界モデリング

境界モデリングとは、エンジン入出力を定義した後にエンジンが安定して動作する入力変数の領域を定めることである。境界モデリングによって定まる領域を運転可能領域と呼ぶ。より正確な運転可能領域を定めることで、次のステップの実験計画の精度が向上する。

3.2 非線形ロジスティックモデルの適用

エンジンの挙動を示す動的システムとして、次のシステムを考える。

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, u, w) \\ y = g(x, u, v) \end{cases}$$

ここで、 x が状態変数、 u が入力変数、 w が外乱、 y が観測量、 v が観測外乱である。本来ならば、 f と g の特性から運転可能領域を決定すべきであるが、ここではそれらを複雑な物理システムとみなし、入力 u と観測量 y から運転可能領域を定めることを考える。そのため、観測量 y は、与えられたしきい値 α に対して、 α 以下になった場合エンジンが安定して動作すると判断し $y = 0$ と定め、そうでなければ $y = 1$ と定める。このような設定のもとで、非線形ロジスティックモデルを利用して運転可能領域を求める。つまり、非線形ロジスティックモデルで求められた関数 $y = \pi(u)$ に対して、運転可能領域 H をしきい値 α を用いて、

$$H := \{u : \pi(u) \leq \alpha\}$$

と定める。非線形ロジスティックモデルの出力を確率とみなせることから、運転可能領域 H はエンジンが安定して動作しない確率が α 以下の領域、とみなすことができる¹。また、非線形な基底関数 $b_j(u)$ を用いることで、運転可能領域 H は非凸な領域を表現できる。

3.3 非線形ロジスティックモデルの適用例

MATLAB を用いて非線形ロジスティックモデルの有用性を議論する。数値実験の詳細は以下の通りである。

- 本節で利用している入出力データはエンジンシミュレータ²⁾⁴⁾で生成した。入力は点火時期、吸気圧、EGR 率、バルブタイミング、エンジン回転数を、出力はノック指標値を用いた。
- 入出力データを基準化し、全て $[0, 1]$ の範囲に収めた。
- 全データの 8 割を訓練データとして非線形ロジスティック回帰を適用し、非線形ロジスティックモデ

¹ただし、新たなデータに対して $\pi(u) < \alpha$ を満たすからといってエンジンが安全に動くとは限らない。あくまでも確率的な考え方である。

ル $y = \pi(u)$ を作成した後、残り 2 割のデータを検証データとして、そのモデルの正答数と誤答数を計算した。

- 結果を表す図について、訓練データにおいて $y = 0$ ならば青丸、 $y = 1$ ならば赤米印、検証データにおいて $y = 0$ ならば緑丸、 $y = 1$ ならば黄米印で表した。
- 入出力データ (u, y) に対する正答数や誤答数を次のように分類した。
 - $\pi(u) \leq \alpha$ かつ $y = 0$ を True Positive (TP)
 - $\pi(u) \leq \alpha$ かつ $y = 1$ を False Positive (FP)
 - $\pi(u) > \alpha$ かつ $y = 0$ を False Negative (FN)
 - $\pi(u) > \alpha$ かつ $y = 1$ を True Negative (TN)

なお、(FP) と (FN) は両方とも入出力データ (u, y) の判別を間違えているが、境界モデリングでは (FN) よりも (FP) を避けたい²。

- 入出力データが非線形ロジスティックモデル $y = \pi(x)$ としきい値 $\alpha = 0.5$ に対して、(TP) あるいは (TN) であれば正答と判定し、(FP) あるいは (FN) であれば誤答と判定した。
- 正則化パラメータ λ を変化させながら計測した。

3.3.1 2 入力 1 出力データに対する結果

入力データとして点火時期、吸気圧を、出力データとしてエンジンのノック指標値を用いた。EGR 率、バルブタイミング、エンジン回転数は固定した。2 入力データを用いてエンジンシミュレータから 180 点の出力データを生成し、そのうち 144 点を訓練データとして非線形ロジスティック回帰を適用した。

Fig. 2 と Fig. 3 は正答数の多い $\lambda = 1.0 \times 10^0$ と $\lambda = 1.0 \times 10^{-4}$ に対して、入力データと非線形ロジスティックモデル $y = \pi(u)$ の等高線を記載したものである。Table. 1 は訓練データ 144 点から正則化パラメータ λ を変えて求めた非線形ロジスティックモデルに対して、検証データ 36 点を適用した正答数と誤答数の集計である。Table. 1 から、正則化パラメータ λ を 1.0×10^0 以下にすると正答数が多くなるのがわかる。しかし、Fig. 2 と Fig. 3 におけるロジスティックモデルの描く境界は全く異なり、しきい値 α を変化させることで $\lambda = 1.0 \times 10^0$ の場合は正答数に大きな変化がみられ、 $\lambda = 1.0 \times 10^{-4}$ の場合は正答数に変化がみられないことが推測できる。

²(FP) に分類された入出力データ (u, y) は、非線形ロジスティックモデル $y = \pi(u)$ では入力データ u が運転可能領域にあるため、その後の実験計画などで、この点や近傍の点が採用される可能性がある。このデータは本来は運転可能領域にないので、採用されるとエンジンに悪影響を及ぼす可能性がある。

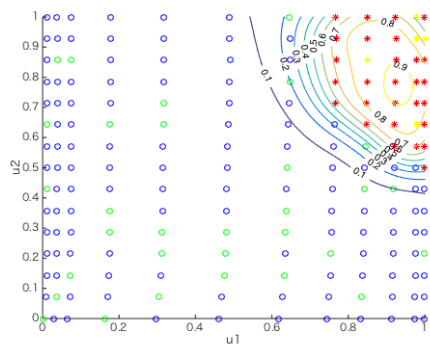


Fig. 2: 2入力1出力データに対して正則化パラメータ $\lambda = 1.0 \times 10^0$ で求めた非線形ロジスティックモデルの等高線

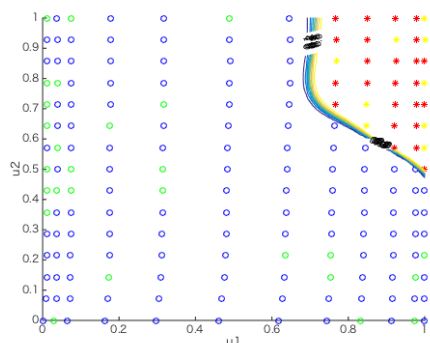


Fig. 3: 2入力1出力データに対して正則化パラメータ $\lambda = 1.0 \times 10^{-4}$ で求めた非線形ロジスティックモデルの等高線

3.3.2 3入力1出力データに対する結果

入力データとして点火時期, 吸気圧と EGR 率を, 出力データとしてノック指標値を用いた. バルブタイミング, エンジン回転数は固定した. 3変数の入力データを用いてエンジンシミュレータから 360 点の出力データを生成し, そのうち 288 点を訓練データとして非線形ロジスティック回帰を適用した.

Table. 2 は訓練データ 288 点から正則化パラメータ λ を変えて求めた非線形ロジスティックモデルに対して, 検証データ 72 点を適用した正答数と誤答数の集計である. Table. 3 は, Table. 2 において正答数の多い $\lambda = 1.0 \times 10^0$ と $\lambda = 1.0 \times 10^{-4}$ を固定して, しきい値 α を変化した正答数と誤答数の集計である. 3.3.1 節と同様に, Table. 2 から正則化パラメータ λ を 1.0×10^0 以下にすると正答数が増えることがわかり, Table. 3 から正則化パラメータ λ が大きい方がしきい値 α の影響を大きく受けることがわかる.

3.3.3 5入力1出力のデータに対して

入力データとして点火時期, 吸気圧, EGR 率, バルブタイミング, エンジン回転数を, 出力データとしてノック指標値を用いた. 5変数の入力データを用いてエンジンシミュレータから 3050 点の出力データを生成し, そのうち 2040 点を訓練データとしてロジスティック回帰を適用した.

Table. 4 は訓練データ 2040 点から正則化パラメータ

λ	TP	TN	FP	FN
1.0×10^4	27	0	9	0
1.0×10^3	29	0	7	0
1.0×10^2	31	0	5	0
1.0×10^1	32	0	4	0
1.0×10^0	31	5	0	0
1.0×10^{-1}	32	3	1	0
1.0×10^{-2}	29	6	1	0
1.0×10^{-3}	30	6	0	0
1.0×10^{-4}	27	9	0	0
0	27	3	3	3

Table 1: 2入力1出力の検証データ 36 点に対する正答数と誤答数

λ	TP	TN	FP	FN
1.0×10^4	51	0	22	0
1.0×10^3	55	0	17	0
1.0×10^2	59	0	13	0
1.0×10^1	57	3	12	0
1.0×10^0	59	11	1	1
1.0×10^{-1}	56	13	2	1
1.0×10^{-2}	58	13	0	1
1.0×10^{-3}	59	12	0	1
1.0×10^{-4}	55	17	0	0
0	57	11	1	3

Table 2: 3入力1出力の検証データ 72 点に対する正答数と誤答数

λ を変えて求めた非線形ロジスティックモデルに対して, 検証データ 610 点を適用した正答数と誤答数の集計である. Table. 4 から, 正則化パラメータ λ を 1.0×10^0 以下にすると正答数が増えるが, 小さくとり過ぎると再び誤答数が増えることがわかる. このデータに対しては $\lambda = 1.0 \times 10^{-2}$ での正答数が 1 番多い.

4 考察

4.1 しきい値 α の取り方

3 節の結果から, 正則化パラメータ λ が大きい方がしきい値 α の影響を受けやすいことがわかった. これは正則化パラメータ λ を大きくとり過ぎるために正則化最尤法によって求まる回帰係数 w の取り得る範囲が小さくなったことから起こる. Fig. 4 と Fig. 5 はそれぞれ Fig. 2 と Fig. 3 の非線形ロジスティックモデルを 3次元プロットしたものである. Fig. 4 は Fig. 5 に比べてグラフの勾配が緩やかである. したがって, Fig. 4 ではしきい値 α を変更すると正答数や誤答数が変化し, Fig. 5 ではしきい値 α を変更しても正答数や誤答数に変化がないことがわかる. これは Table. 3 の結果と一致する.

4.2 正則化パラメータと過適合

3 節の結果から, 正則化パラメータ λ をある程度小さくすることで, 正答数が増えることがわかった. こ

α	$\lambda = 1.0 \times 10^0$				$\lambda = 1.0 \times 10^{-4}$			
	TP	TN	FP	FN	TP	TN	FP	FN
0.1	50	12	0	10	55	17	0	0
0.2	56	12	0	4	55	17	0	0
0.3	57	11	1	1	55	17	0	0
0.4	58	11	1	2	55	17	0	0
0.5	59	11	1	1	55	17	0	0
0.6	60	11	1	0	55	17	0	0
0.7	60	8	4	0	55	17	0	0
0.8	60	4	8	0	55	17	0	0
0.9	60	0	12	0	55	17	0	0

Table 3: Table. 2 の λ を固定して α を変化させたときの正答数と誤答数

λ	TP	TN	FP	FN
1.0×10^3	322	0	288	0
1.0×10^2	320	0	290	0
1.0×10^1	327	0	283	0
1.0×10^0	283	130	153	89
1.0×10^{-1}	206	217	68	119
1.0×10^{-2}	214	245	32	119
1.0×10^{-3}	181	250	34	145
1.0×10^{-4}	173	255	28	154
1.0×10^{-5}	192	248	33	137
1.0×10^{-6}	178	230	49	153

Table 4: 5 入力 1 出力の検証データ 610 点に対する正答数と誤答数

ここで、ある程度という表現を用いたのは小さくとり過ぎると過適合を起こす可能性があることを示唆している。つまり、訓練データに合うモデル $y = \pi(u)$ はできるが、このモデルの予測精度は、必ずしもよくない複雑なモデル式になってしまうということである。これは正則化パラメータ λ を小さくとり過ぎるために正則化最尤法によって求まる回帰係数 w の取り得る範囲が大きくなったことから起こる。Fig. 6 は 2 入力 1 出力のデータに対して正則化項無しの最尤法を用いて回帰係数を求めた、過適合を起こしている非線形ロジスティックモデル $y = \pi(u)$ の等高線を描いている。この図から $y = \pi(u)$ の予測精度が良くないことが推測できる。正則化パラメータ λ を小さくとり過ぎないことで過適合を避けられることが知られている³⁾。実際、Table. 4 では $\lambda = 1.0 \times 10^{-2}$ の正答数が 1 番多い。

5 まとめ

本稿では、自動車エンジン制御における境界モデリングに対して非線形ロジスティックモデルを提案し、シミュレータデータに対する数値結果を紹介した。海外の研究事例としてサポートベクターマシンの適用例¹⁾もある。非線形ロジスティックモデルとサポートベクターマシンではどちらが良いのかあるいは、得られる境界がどのように違うのか検討する必要がある。

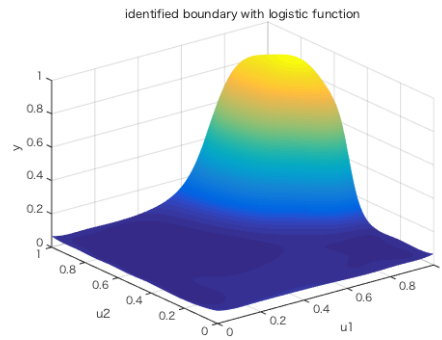


Fig. 4: Fig. 2 の非線形ロジスティックモデル $y = \pi(u)$

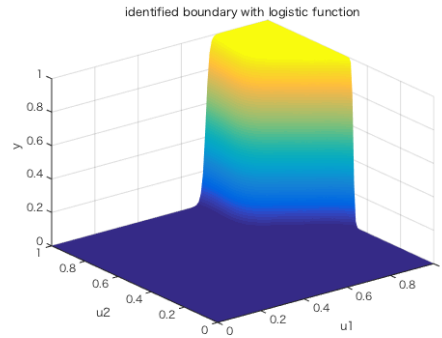


Fig. 5: Fig. 3 の非線形ロジスティックモデル $y = \pi(u)$

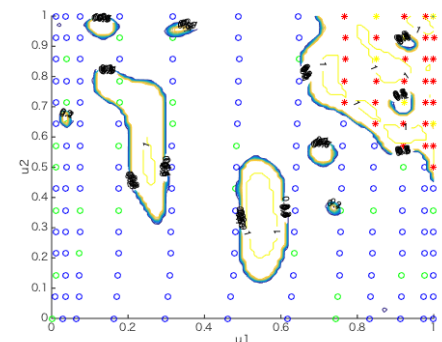


Fig. 6: 2 入力 1 出力データに対する過適合の例

謝辞

本稿の議論は、平成 26 年 IMI 短期共同研究「境界モデル手法の研究」(代表者: 渡邊智)での議論に基づいている。議論の機会を与えてくれた九州大学マス・フォア・インダストリ研究所拠点担当者に深く感謝する。

参考文献

- 1) Nataša Kieft, René Linsen, Thomas Bäck, Evaluation of support vector machines as a design space description method in automotive applications, 6th Conference on Simulation and Testing for Automotive Electronics, 123/139 (2014)
- 2) Satoru Watanabe, Akira Ohata, Benchmark problem for near boundary operation control for automotive engine, 6th Conference on Simulation and Testing for Automotive Electronics, 101/110 (2014)
- 3) 小西 貞則, 多変量解析入門, 岩波書店 (2010)
- 4) 渡邊智, 加古純一, 境界モデリングと境界近傍制御ベンチマーク問題, 計測と制御 53-8, 677/682 (2014)