

強化学習に基づいた加速劣化試験に関する研究

Accelerated Degradation Testing Based on Reinforcement Learning

中央大学大学院 理工学研究科
経営システム工学専攻 長塚研究室
21N7100014G 川井基嗣

1 序論

信頼性評価は、製品の品質を向上させるために非常に重要な課題である。従来の寿命試験は、製品の寿命を評価するために、故障までの時間データを記録するだけであった。製品によっては、現実的な時間で故障が発生しない場合、故障までの時間データが十分に得られないことが考えられる。このような場合、製品の劣化が信頼性に関係する品質特性があれば、劣化データを収集することにより、より多くの情報を得ることができる。通常、そういった場合により高いストレスレベルで品質特性のデータを収集する、加速劣化試験 (ADT) が行われる。加速劣化試験を実施するためには、事前に適切な劣化モデルや試験計画を決定する必要がある。

加速劣化試験を用いる一例としてリチウムイオン電池が挙げられるが、リチウムイオン電池容量の劣化モデルには、非線形ドリフト項をもつ Wiener 過程に基づく劣化モデルがよく用いられている。[2] において、ランダム効果、ユニット内変動、測定誤差を考慮した劣化モデルが提案されている。試験計画を行う際には、通常、劣化モデルの未知のパラメータが含まれており、モデルのパラメータ値を推定する必要がある。[2] では、プロファイル対数尤度関数の最適化に EM アルゴリズムを適用することで、パラメータ推定を行っている。しかし、著者の研究により、初期値依存問題がみられることが分かっている。

また、従来の加速劣化試験の試験計画では、既に観測されている試験ユニットを i 個、各ユニットの劣化測定値を時刻 $t_{i,1} \leq t_{i,2} \leq \dots \leq t_{i,m}$ に得られるとした時、全ての設計点は、 i 個の試験ユニットの観測時点 $t_{i,m}$ から計算された最適基準を最適化することによって選択される。この方法では、 $t_{i,m}$ 時点の評価しか用いておらず、それ以降の評価は、試験計画に考慮していない。

そこで、本研究における一つ目の目的として、劣化モデルのパラメータ推定について、ベイズ最適化による初期値推測を用いた手法を提案する。同時に、リチウムイオン電池の容量劣化データに対する、適切な劣化モデル

の選択についての検討も行う。

本研究における二つ目の目的として、直後の設計点の評価だけでなく将来の設計点における評価も考慮するために、強化学習を用いた最適計画の手法の提案を行う。また、強化学習の代表的な手法である Q 学習を用いた場合、強化学習における「状態」の数が多いとき、状態行動空間の爆発が起きてしまうことが考えられる。そこで、提案手法では、ニューラルネットワークによって行動価値関数を算出する、DQN (Deep Q-Network) を用いる。本研究においては、試験の計画として、温度を共変量とするリチウムイオン電池の容量劣化データを用いて、各試験ユニットに対し、どのような温度を設定して試験を行うか計画する。

2 従来研究：劣化モデル

2.1 ランダム効果モデル

リチウムイオン電池容量の劣化モデルの研究において、ユニット間変動、ユニット内変動、測定誤差を考慮した、非線形ドリフト項をもつ Wiener 過程に基づく劣化過程モデルがよく用いられている [2]。本研究においては、温度を共変量とするリチウムイオン電池の容量劣化データを使用するため、ドリフト項にアレニウスの法則を用いたモデルを用いる [1]。

温度に関する応力レベル S_k 、時刻 t における、リチウムイオン電池容量の劣化過程 $\{Y(t | S_k), t \geq 0\}$ は以下のように表される。

$$Y(t | S_k) = \eta_k \Lambda(t) + \sigma_B B(\Lambda(t)) + \varepsilon, \quad (1)$$

ここで、 η_k は応力レベル S_k に基づくドリフトパラメータ、 $\Lambda(t)$ はドリフト関数、 σ_B は拡散係数、 $B(\cdot)$ は標準ブラウン運動を表す。 ε は測定誤差を表し、任意の時刻で $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma_\varepsilon^2)$ の独立同分布に従うと仮定する。なお、 σ_ε^2 は測定誤差の分散とする。本研究では、ドリフト関数に、 $\Lambda(t) = t, t^b, (e^{bt} - 1)$ の 3 種類を用いて、それぞれ比較を行う。

また、異なるアイテム間の不均質性を表すランダム

効果モデルとするために、 η_k を以下のように仮定する。

$$\eta_k = \alpha \exp\left(-\frac{\beta}{S_k}\right), \quad \alpha \sim N(\mu_\alpha, \sigma_\alpha^2). \quad (2)$$

ここで、 α は平均 μ_α 、分散 σ_α^2 の正規分布に従うとし、 β は温度パラメータで、定数である。

2.2 ランダム効果モデルのパラメータ推定

この節では、最尤法を用いたモデルのパラメータ $\theta = (\mu_\alpha, \sigma_\alpha^2, \beta, b, \sigma_B^2, \sigma_\epsilon^2)$ の推定について、紹介する。 N 個のユニットを試験し、各ユニットの劣化測定値が時刻 $t_{i,1} \leq t_{i,2} \leq \dots \leq t_{i,m}$ に得られるとする。また、温度によるストレスレベルを $S_1 \leq S_2 \leq \dots \leq S_d$ とし、それぞれの温度 S_k で実験したユニット数を n_k ($\sum_{k=1}^d n_k = N$, $k = 1, \dots, d$) とする。 $i = 1, \dots, n_k$, $j = 1, \dots, m$ とするとき、ストレスレベル S_k の下で、 i 番目のユニットの時刻 $t_{i,j}$ における劣化経路は、以下の式で与えられる。

$$Y_i(t_{i,j} | S_k) = \eta_k \Lambda(t_{i,j}) + \sigma_B B(\Lambda(t_{i,j})) + \epsilon_{i,j}. \quad (3)$$

$\Lambda = (\Lambda(t_{i,1}), \Lambda(t_{i,2}), \dots, \Lambda(t_{i,m}))'$, $\mathbf{Y}_{ik} = (Y_i(t_{i,1} | S_k), Y_i(t_{i,2} | S_k), \dots, Y_i(t_{i,m} | S_k))'$, $\mathbf{Y} = (\mathbf{Y}'_{11}, \dots, \mathbf{Y}'_{n_1 1}, \mathbf{Y}'_{12}, \dots, \mathbf{Y}'_{n_2 2}, \dots, \mathbf{Y}'_{1d}, \dots, \mathbf{Y}'_{n_d d})'$ とすると、Wiener 過程の性質より、 \mathbf{Y}_{ik} は平均 $\mu_\alpha e^{-\beta/S_k} \Lambda$ 、分散 $\Sigma_k = \sigma_\alpha^2 e^{-2\beta/S_k} \Lambda \Lambda' + \Omega$ の多変量正規分布に従う。このとき、 $\Omega = \sigma_B^2 \mathbf{Q} + \sigma_\epsilon^2 \mathbf{I}_m$ で、 \mathbf{I}_m は m 次元の単位行列とする。 \mathbf{Q} は、以下の式で表される。

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} \Lambda(t_{i,1}) & \Lambda(t_{i,1}) & \dots & \Lambda(t_{i,1}) \\ \Lambda(t_{i,1}) & \Lambda(t_{i,2}) & \dots & \Lambda(t_{i,2}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Lambda(t_{i,1}) & \Lambda(t_{i,2}) & \dots & \Lambda(t_{i,m}) \end{bmatrix}.$$

したがって、 $\theta = (\mu_\alpha, \sigma_\alpha^2, \beta, b, \sigma_B^2, \sigma_\epsilon^2)$ の対数尤度関数は以下で与えられる。

$$\begin{aligned} \ell(\theta | \mathbf{Y}) &= -\frac{N m \ln(2\pi)}{2} - \sum_{k=1}^d \frac{n_k}{2} \ln |\Sigma_k| \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^d \sum_{i=1}^{n_k} \left(\mathbf{Y}_{ik} - \mu_\alpha e^{-\beta/S_k} \Lambda \right)' \\ &\quad \times \Sigma_k^{-1} \left(\mathbf{Y}_{ik} - \mu_\alpha e^{-\beta/S_k} \Lambda \right) \end{aligned} \quad (4)$$

このとき、 $|\Sigma_k| = |\Omega| (1 + \sigma_\alpha^2 e^{-2\beta/S_k} \Lambda' \Omega^{-1} \Lambda)$, $\Sigma_k^{-1} = \Omega^{-1} - (\sigma_\alpha^2 e^{-2\beta/S_k} / (1 + \sigma_\alpha^2 e^{-2\beta/S_k} \Lambda' \Omega^{-1} \Lambda)) \Omega^{-1} \Lambda \Lambda' \Omega^{-1}$ である [3]。

ランダム効果モデルのパラメータ推定では、最大化の際に多くの局所的最適解が生じる可能性がある [4]。

最適化アルゴリズムを適用して対数尤度関数を数値的に最大化する場合、得られる解は初期値に大きく依存するため、適切な初期値を設定することが重要である。

3 提案手法 1

本研究では、2.2 節で紹介したランダム効果モデルにおける対数尤度関数について、ベイズ最適化を用いた最大化手法を提案する。ベイズ最適化を用いることで大域的最適化を行うことができ、初期値依存の問題を解決出来ると考えられる。

以下の 2 つの方法でパラメータ推定を行い、対数尤度や AIC を評価に用いて比較する。

従来手法 : [4] におけるプロファイル対数尤度関数の最適化に EM アルゴリズムを適用することで、パラメータ推定を行う。

提案手法 1 : 対数尤度関数 (4) 式が最大になる点をベイズ最適化により求める。ベイズ最適化から得られた点を初期値とし、対数尤度関数が最大になる点を Nelder-Mead 法により求める。

4 劣化モデル、提案手法 1 の評価

従来手法と提案手法 1 のパラメータ推定方法について比較するために、[5] で公開しているリチウムイオン電池の容量劣化データを用いて評価を行う。これらは、リチウムイオン電池の充放電サイクルに伴う容量劣化データであり、共変量として温度を含んだデータである。それぞれ一定の温度の負荷を与えたデータとなっており、25°C で実験したユニットが 8 個、35°C、45°C で実験したユニットが 2 個ずつ用意されており、合計 12 個からなるデータである。また、(2.1.1) 式における、異なるドリフト関数 $\Lambda(t) = t, t^b, e^{bt} - 1$ をもつ劣化モデル、それぞれに対してパラメータ推定を行い、実データに対して当てはまりの良いドリフト関数についても検討する。ここでは、ドリフト関数 $\Lambda(t) = t, t^b, e^{bt} - 1$ をもつ劣化モデルを、それぞれモデル 1 (M_1)、モデル 2 (M_2)、モデル 3 (M_3) とする。

各モデルにおけるパラメータの推定結果を表 1 から表 6 に示す。

表 1: M_1 のパラメータ推定結果

	μ_α	σ_α^2	β	σ_B^2	σ_ϵ^2
従来手法	19.1854	2.3199e-4	631.10	0.0496	1.5319e-7
提案手法	19.1866	2.3195e-4	631.10	0.0495	3.3745e-11

表 2: M_1 における各最適化手法の実行結果

	対数尤度	AIC
従来手法	12.4112	-14.8224
提案手法 1	12.4126	-14.8252

表 3: M_2 のパラメータ推定結果

	μ_α	σ_α^2	β	b	σ_B^2	σ_ϵ^2
従来手法	23.2613	11.2282	600.72	0.3019	9.8773	8.2331e-5
提案手法	24.8112	7.6711	583.69	0.3412	10.6881	8.2332e-6

表 4: M_2 における各最適化手法の実行結果

	対数尤度	AIC
従来手法	76.1294	-140.2588
提案手法 1	78.9816	-145.9632

表 5: M_3 のパラメータ推定結果

	μ_α	σ_α^2	β	b	σ_B^2	σ_ϵ^2
従来手法	1.4100e-13	0	531.21	0.8912	3.7528e-10	8.0672e-16
提案手法 1	5.1945	0.4772	621.81	0.0191	11.8192	3.7422e-10

表 6: M_3 における各最適化手法の実行結果

	対数尤度	AIC
従来手法	-4177.3867	8354.7735
提案手法 1	-31.9377	73.8753

対数尤度関数, AIC の値から, 当てはまりが良いモデルは, ドリフト関数が t^b で表される M_2 であることがわかる. M_2 と比べ, M_1 のようなドリフト関数が線形のモデルでは, 当てはまりが悪いことが分かる. また, 従来手法において, M_3 は最適解が見つけれられたとは言えない. 関数の形が複雑であるほど, 初期値設定に依存し, 最適化が困難であると考えられる.

また, 提案手法 1 において, 全てのモデルに対し対数尤度関数が大きく AIC の値が小さくなっていることから, 適切な初期値を設定したうえでパラメータ推定が行えているといえるだろう.

しかし, σ_α^2 や σ_B^2 のような分散成分のパラメータの推定値が, いずれも大きくなってしまっている. この原因として, 温度以外の未観測の共変量がある可能性が考えられる. リチウムイオン電池には, States of Charge (SoC) などの劣化に大きな影響を及ぼすような共変量があると考えられるが, このデータでは, その情報が開示されていない. 今後, そういった共変量をもつリチウムイオン電池の劣化データで, 解析を行う必要があると考えられる.

5 従来研究: 加速劣化試験の計画

本章では, [1] における, 加速劣化試験の計画について紹介する. 第 2 章から第 4 章にかけて扱ってきたように, 劣化モデルでは, パラメータをランダム効果として考えることが主流であるが, 第 5 章以降では, パラメータはすべて固定効果として考える. 加速劣化試験の計画では, 履歴データからパラメータ θ を推定し, 寿命分布の q 分位数を最も効率よく推定するために, 応力レベル (温度) をどのように選択するが問題とな

る. この研究では, 第 4 章の結果を踏まえ, (1) 式の劣化モデルにおけるドリフト関数には $\Lambda(t) = t^b$ を用いることとする. また, 今回の研究では, 固定効果モデルとして, η_k を二つ仮定する. それぞれを用いる劣化モデル M_r を, モデル 4 (M_4), モデル 5 (M_5) とする. また, それぞれのモデルで用いるパラメータ $\theta^{(r)}$ ($r = 4, 5$) を, それぞれ, $\theta^{(4)} = (\alpha, \beta, b, \sigma_B^2, \sigma_\epsilon^2)$, $\theta^{(5)} = (\alpha_0, \alpha_1, \alpha_{11}, b, \sigma_B^2, \sigma_\epsilon^2)$ とおく. 二つの η_k は, 以下のとおりである.

アレニウスの法則を用いたモデル (M_4) を以下に示す. α, β は, それぞれ温度パラメータで, 定数である.

$$\eta_k^{(4)} = \alpha \exp\left(-\frac{\beta}{S_k}\right). \quad (5)$$

次に, 2 次モデル (M_5) を以下に示す. $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_{11}$ は, それぞれ 2 次モデルに用いる温度パラメータで, 定数である.

$$\eta_k^{(5)} = (\alpha_0 + \alpha_1 S_k + \alpha_{11} S_k^2). \quad (6)$$

なお, パラメータ推定法は, 本論に記載している.

6 提案手法 2

加速劣化試験の目的は, 履歴データからパラメータ $\theta^{(r)}$ を推定し, 選択する応力レベル (温度) における寿命分布の q 分位数を最も効率よく推定を行うことである. そのために, 寿命分布の q 分位数の推定量の漸近分散が小さくなるような設計点を求めることが必要である.

そこで提案手法では, DQN において, 報酬 r_t として漸近分散を即時報酬として捉え, 以下のように定義する. なお, 漸近分散の値の最小化を行うために, マイナスをかけて最大化を行う.

$$r_t = -\widehat{AVAR}(\hat{t}(q)) \quad (7)$$

ここで, $\widehat{AVAR}(\hat{t}(q))$ は寿命分布の q 分位数の推定量 $\hat{t}(q)$ の漸近分散である. DQN や使用したハイパーパラメータの設定, 寿命分布の q 分位数の漸近分散の導出は, 本論に記載している.

7 提案手法の評価

従来手法 [1] と, 提案手法 2 の比較をするために, 実データ [5] を用いた評価を行う. まず, モデル 4 とモデル 5 において, 提案手法 1 でパラメータ推定を行う. そして, その結果を元に, 新たに 20 個の試験計画を行うことを想定する. 本研究の設計点の候補は, $[S_1, S_2, S_3] = [25, 35, 45]$ とし, それぞれの温度 S_k における実験ユニット数を n_k ($\sum_{k=1}^3 n_k = 20$) とする. 得られた最適設計における, 寿命分布の 10% 分位数の漸近分散の値

を比較する. 表 7, 8, 9 に M_4, M_5 のパラメータ推定の結果を示し, 表 10, 表 11 に最適設計の結果を示す.

表 7: M_4, M_5 の最適化の実行結果

	α	β	b	
モデル 4	25.2093	583.39	0.3260	
	σ_B^2	σ_ϵ^2	対数尤度	AIC
	12.8186	3.7527e-11	74.33	-138.66
	α_0	α_1	α_{11}	b
モデル 5	2.5376	1.4953e-6	2.1853e-10	0.2229
	σ_B^2	σ_ϵ^2	対数尤度	AIC
	9.8750	1.7839e-10	117.43	-222.87

表 8: M_4 の試験計画の実行結果

	n_1	n_2	n_3	Avar
従来手法	9	6	5	927.20
提案手法 2	9	6	5	927.20

表 9: M_5 の試験計画の実行結果

	n_1	n_2	n_3	Avar
従来手法	8	7	5	724.81
提案手法 2	8	7	5	724.81

表 7 より, 対数尤度と AIC の値から, 当てはまりが良いモデルは 2 次モデル表される M_5 であることがわかる. 第 4 章で示した対数尤度, AIC の値と比較しても, 提案手法 1 を用いて, 適切な初期値を設定した上でパラメータ推定が行えているといえるだろう.

表 8, 9 より, 設計の割り当てが等しいことから, 漸近分散の値が等しくなっていることがわかる. 本研究では, 選ぶ設計点の数が少ないことから, 先行研究の手法でも容易に最適な設計を得ることができている. 今回は, 温度しか共変量を考慮していないかつ設計点候補が少なかった. 選ぶ設計点の数が増え, 最適化が難しくなった場合に, DQN を用いた提案手法は有用性があると考えられる.

8 結論と今後の課題

本研究では, 初期値選択でベイズ最適化を用いるパラメータ推定方法と, DQN を用いた, 将来の設計点に対する評価も考慮する加速劣化試験の計画手法を提案した. まず, 提案手法 1 を用いて, リチウムイオン電池の容量劣化モデルのパラメータ推定を行った. 初期値依存の問題を解決し, 対数尤度関数や AIC の値から, M_1, M_2, M_3 の全てにおいて, 良い結果を示したと言える. トренд関数が t^b で示される M_2 のモデルの当てはまりが良いことが分かった.

また, 同じデータに対し, 提案手法 2 を用いて, 加速劣化試験の計画を提案した. 得られた寿命分布の 10%

分位数の推定量の漸近分散を用いて評価を行った. その結果, 提案手法 2 は比較手法と同等の結果を示した. これは, 今回使用したデータが共変量として温度しか含んでおらず, 最適化が容易だった可能性がある. 共変量が増えた場合や, 行動の候補をさらに増やしたい場合には, 提案手法 2 が有用である可能性が考えられる.

今後の課題を, 以下に 3 つあげる.

まず, 設計点と報酬を得るたびにパラメータ推定を逐次的なアプローチを取る必要があったが, 本研究では考慮できていない. このアプローチを取ることで, さらに効率良く将来の価値を考慮した最適設計が行えると考えられる. パラメータ推定値を逐次的に更新し, 逐次的な最適設計を行うことが一つ目の課題として挙げられる.

二つ目の課題として, ほかのデータへの適応が挙げられる. リチウムイオン電池の共変量を含むデータとして, 本研究では, 温度を含むデータを使用した. 提案手法 1 や提案手法 2 において, 他の共変量を含んだデータを用いることが課題としてあげられる. 提案手法 1 では, 分散成分のパラメータの推定値が大きくなってしまったため, 他のデータでも有用性を確かめる必要がある. また, 加速劣化試験の計画に関しても, 共変量が増えることで, 最適な設計が難しくなることが考えられる. その場合に, 強化学習を用いた提案手法 2 は最適な設計に有用である可能性がある.

三つ目の課題として, ランダム効果モデルを用いて試験計画を行うことが挙げられる. 本研究では, 提案手法 1 の評価にはランダム効果モデルを用いたが, 提案手法 2 の評価には固定効果モデルを用いた. その理由として, 寿命分布の q 分位数の推定量の漸近分散を求める際に必要なフィッシャー情報行列の算出が困難であることがあげられる. 今後, 汎用性を広げるために, ランダム効果モデルを用いた試験計画を行う必要がある.

参考文献

- [1] Chen, Z., Li, S., and Pan, E. (2016). "Optimal Constant-Stress Accelerated Degradation Test Plans Using Nonlinear Generalized Wiener Process", *Mathematical Problems in Engineering*, (1), pp.1–11.
- [2] Peng, C. Y., and Tseng, S. T. (2009). "Mis-Specification Analysis of Linear Degradation Models", *IEEE Transactions on Reliability*, vol.58 pp.444-455.
- [3] Rencher, A., (2002). "Methods of Multivariate Analysis. Hoboken", New Jersey
- [4] Tang, S., Yu, C., Sun, X., Fan, H., and Si, X., (2019). "A Note on Parameters Estimation for Nonlinear Wiener Processes With Measurement Errors", *IEEE Access*, 7, 176756–176766.
- [5] Zhang, Y. et al., (2020). "Identifying degradation patterns of lithium ion batteries from impedance spectroscopy using machine learning", *Nat. Commun.* (11), pp.1–6.