

機械学習を用いたヒートポンプ性能予測における特 微量選択の影響解析

江口, 順紹
九州大学大学院総合理工学府総合理工学専攻機械・システム理工学メジャー

<https://hdl.handle.net/2324/7178756>

出版情報：九州大学, 2023, 修士, 修士
バージョン：
権利関係：



令和5年度

修士論文

機械学習を用いたヒートポンプ性能予測における

特徴量選択の影響解析

九州大学大学院総合理工学府

総合理工学専攻

機械・システム理工学メジャー

熱エネルギー変換システム学研究室

江口 順紹

指導教員 宮崎 隆彦

提出年月日 令和6年2月6日

目次

第 1 章 序論	1
1.1 研究背景	1
1.2 次世代冷媒の開発の現状	5
1.3 R32 冷媒を用いたヒートポンプサイクル	5
1.4 機械学習	8
1.5 従来の研究	9
1.5.1 R32 冷媒に関する従来の研究	9
1.5.2 機械学習に関する従来の研究	9
1.6 本研究の目的および本論文における構成	13
第 2 章 機械学習手法	14
2.1 線形回帰アルゴリズム	15
2.2 ステップワイズ線形アルゴリズム	16
2.3 回帰木アルゴリズム	16
2.4 サポートベクターマシンアルゴリズム	18
2.4.1 線形 SVM 回帰:主問題の式	18
2.4.2 線形 SVM 回帰:双対問題の式	19
2.4.3 非線形 SVM 回帰:主問題の式	20
2.4.4 非線形 SVM 回帰:双対問題の式	21
2.5 ガウス過程回帰アルゴリズム	23

2.6 アンサンブルアルゴリズム	2 6
2.6.1 バギング木(Bagged Trees, BT)	2 6
2.6.2 最小二乗ブースティング (LSBoost)	2 6
第 3 章 機械学習のセットアップ	2 8
3.1 データ収集	2 8
3.1.1 装置の説明	2 8
3.1.2 動作条件	3 0
3.1.3 測定データからの各種パラメーターの算出	3 2
3.1.3.1 圧縮機諸効率の算出	3 2
3.1.3.2 暖房能力および冷房能力の算出	3 3
3.1.3.3 成績係数の算出	3 4
3.1.3.4 熱交換器内の温度分布の算出	3 5
3.1.3.5 体積能力の算出	3 7
3.2 機械学習モデリング	3 8
3.2.1 特徴量の選定方法	3 8
3.2.1.1 実験ベースの特徴量選定	4 1
3.2.1.2 測定データに関する特徴量選定	4 2
3.2.1.3 ピアソン積率相関係数に関する特徴量選定	4 3
3.2.1.4 MRMR 手法による特徴量選定	4 5
3.2.2 モデル評価	4 8
3.2.3 データの前処理	4 8
3.2.2 ハイパーパラメーター設定	4 9

第4章 結果と考察	5 0
4.1 実験ベース手法に基づく特徴量選定	5 0
4.1.1 モデル評価指標	5 0
4.1.2 残差プロット	5 3
4.1.3 データサイズ	5 6
4.2 測定データに基づく特徴量選定	6 0
4.2.1 モデル評価指標	6 0
4.2.2 残差プロット	6 3
4.2.3 データサイズ	6 7
4.3 ピアソン積率相関係数に基づく特徴量選定	7 4
4.3.1 モデル評価指標	7 4
4.3.2 残差プロット	7 6
4.3.3 データサイズ	8 2
4.4 MRMR 手法による特徴量選定	8 6
4.4.1 モデル評価指標	8 6
4.4.2 残差プロット	8 9
4.4.3 データサイズ	9 4
第5章 総括	9 8
謝辞	9 9
参考文献	1 0 0

添字

adi	: 断熱圧縮
all	: 総合
bubble	: 沸点
c	: 冷房条件
COMPR	: 圧縮機
COND	: 凝縮器
cycle	: サイクル
d	: 圧縮機吐出
EVA	: 蒸発器
EXP	: 膨張弁
h	: 暖房条件
HEX	: 熱交換器全体
ideal	: 理想
in	: 入口
INV	: インバータ
LOSS	: 損失
M	: 機械
out	: 出口
P.D.	: 圧力損失
PIPE	: 接続配管
R	: 冷媒
s	: 圧縮機吸込
system	: システム全体
vol	: 体積
W	: 熱源

第1章 序論

1.1 研究背景

現代社会において、空調機や冷凍機などの冷凍空調機器は、快適で効率的な生活を支える不可欠な存在となっている。これらの機器は、私たちの住環境や仕事場において安定した温度を提供し、快適な生活環境を実現していることから、冷蔵や冷凍技術は食品保存や物流分野においても欠かせないものとなり、多岐にわたる産業において生産性の向上に寄与している。しかしながら、近年の気候変動により世界各地で気温上昇が進行している状況が懸念されており、この気温上昇は、特に熱帯地域や都市部などで強く現れ、生活環境や健康への影響が顕著になっている。こうした状況下で、冷房や冷蔵・冷凍の重要性は一層増してくるだろう。気温の上昇により冷却技術の需要が増加する中で同時にその使用が地球環境に与える影響も深刻化している。中でも冷凍、空調、ヒートポンプ等の作動流体として用いられる冷媒の種類やその取り扱いにおいて、環境への悪影響が指摘され始めている。

過去に使用されていた冷媒として CFC(クロロフルオロカーボン)は熱力学的に安定しており、不燃性・無毒で高い気体密度と化学的な安定性を持っていたが、CFC の利用が問題視されるようになったのは、オゾン層の破壊が関連していたからだ。CFC が大気中に放出されると、成層圏で紫外線によって分解され、塩素原子が遊離し、塩素原子がオゾン分子と反応し、オゾン層を破壊する過程が進んでしまう。オゾン層の保護のために、1987 年に「オゾン層を破壊する物質に関するモントリオール議定書」が採択され、CFC の生産・消費が段階的に規制されることになった。日本では 1988 年に制定されたオゾン層保護法に基づき、1995 年に全廃した。他方でその代替物質として、塩素原子の一部または全部を水素原子で置換した HCFC (ハイドロクロロフルオロカーボン) や HFC (ハイドロフルオロカーボン) が開発された。HCFC は CFC よりもオゾン層破壊係数 (ODP) が小さいが、それでもオゾン層に影響を与えるため、日本では、オゾン層保護法により、1996 年以降段階的に生産・消費量を削減し、2020 年に全廃された。HFC にはオゾン層破壊効果はないが (ODP=0)、二酸化炭素の何倍の温室効果を持つかを表した地球温暖化係数 (GWP) が非常に高い温室効果ガスとして、2016 年にモントリオール議定書の改正案(キガリ改正)において生産・消費の規制対象となった。そこでキガリ改正に基づき、日本では 2019 年に施行されたオゾン層保護法の一部改正による代替フロン(注)の生産・輸入の規制が始まり、2036 年までに 85%を削減することが義務付けられた。具体的な削減スケジュールを図 1.1.a に示す。また、1997 年に定められた京都議定書に続き、2015 年のパリ協定の枠組みを受け、世界各国は温室効果ガスの

排出量を取り決められた。パリ協定による世界各国の温室効果ガス削減目標を図 1.2 に示す。この図から見てわかるように、日本を含めた主要国にも目標が定められ、2050 年カーボンニュートラルに向けてはその排出量を実質ゼロにすることが求められている。このように温室効果ガスの中で排出量が増加傾向にある代替フロン¹の排出抑制対策は非常に厳格であり、今後ますます強化されることが予測される。特に、CFC から HFC への移行は、オゾン層破壊の防止という観点から行われたが、HFC 自体が強力な温室効果ガスであることが明らかになり、新たな課題が浮かび上がっている。しかし現行の熱交換器や冷却システムでは、まだまだ代替フロンである HFC 系冷媒が主流を占めており、この状況では、環境負荷の低減や気候変動への対応が十分に達成されているとは言い難く、オゾン層を破壊せず、温室効果も小さい次世代冷媒への転換および機器の技術開発と社会実装の加速が喫緊の課題となっている。

一方で、次世代冷媒候補として考えられているもので、地球温暖化への影響が極めて少ない物質も存在する。しかし、これらの次世代冷媒の実用化には技術的ハードルが高く、機器性能の維持や安全性の確保が課題となっている。これが世界的に見ても次世代冷媒を使用した冷凍空調機器がまだ実用化されていない主な理由の一つである。特に、燃焼性や化学的不安定性などの安全性面での課題が解決されていないと、実際の使用においてリスクが生じる可能性があり、それが実用化の障害となってしまう。現状次世代冷媒の基本特性評価や使用時の安全性評価・リスク評価に関する標準的な手法が確立されておらず、これが実用化の妨げとなっている。これらを解決するため、有望な冷媒候補の継続的な発掘と性能向上や安全性の確保に関する研究開発、国際規格化・標準化、製品化に向けた一層の取り組みが不可欠である。ところが次世代冷媒開発には膨大な各組成比の組み合わせの実験試験を繰り返すこと、そして低 GWP 冷媒を採用した機器の実機性能を高精度に解析できる性能解析技術の開発と、それらのシミュレーションによる性能評価を行うことは多大な時間と費用がかかってしまう。そのため、より効率的で費用対効果の高い次世代冷媒選択方法の必要性が浮き彫りになっている。取り分け大規模な熱システムは非常に複雑であり、熱流体解析ソフトなどのツールを使用してシステムの詳細な情報を予測することはしばしば困難である。多くの場合、相関関係はシステム性能の粗い推定値しか提供することができない。このような課題に対処するためには、新たなアプローチが求められており、それが機械学習の有用性が浮かび上がってくる。

機械学習は、人工知能研究とコンピュータ・ハードウェアの進歩に伴い、最新の予測ツ-

ルとして注目を浴びている。これにより、熱システムの複雑性に挑戦し、実験試験にかかる膨大な時間と費用を大幅に削減できる可能性がある。機械学習がもたらす最大の利点は、大量のデータからパターンや相関関係を抽出し、これを元に未知のデータに対する予測を行う能力である。次世代冷媒の基本特性には多くの因子が関与しており、これらを複雑な相互作用を考慮してモデル化するのは難しかったが、機械学習を用いた予測モデルはこれらの相互作用を高度に理解し、緻密な評価を可能にした。この手法により、新しい冷媒の開発や評価プロセスが迅速かつ効果的に進められ、さらなる実験試験の回数を減少させつつ、エネルギー効率や環境への影響を最小限に抑える次世代冷媒の導入に寄与している。これら機械学習の活用により、次世代冷媒の開発はより持続可能で効率的な方向に進展していくに違いない。

	開発途上国 第1グループ(注1)	開発途上国 第2グループ(注2)	先進国(注3)
基準年	2020-2022 年	2024-2026 年	2011-2013 年
基準値 (CO2 換算)	各年の HFC 量の平均+ HCFC の基準値の 65%	各年の HFC 量の平均+ HCFC の基準値の 65%	各年の HFC 量の平均+ HCFC の基準値の 15%
凍結年	2024 年	2028 年(注4)	なし
第1段階	2029 年 ▲10%	2032 年 ▲10%	2019 年 ▲10%
第2段階	2035 年 ▲30%	2037 年 ▲20%	2024 年 ▲40%
第3段階	2040 年 ▲50%	2042 年 ▲30%	2029 年 ▲70%
第4段階			2034 年 ▲80%
最終削減	2045 年 ▲80%	2047 年 ▲85%	2036 年 ▲85%

図 1.1 キガリ改正議定書による HFC 生産・消費量の段階的な削減スケジュール

各国比較		
	中期目標	長期目標
EU	2030年少なくとも▲55%（1990年比） ※欧州理事会（12月10・11日）合意 ※2013年比▲44%相当	<u>2050年カーボンニュートラル</u> ※複数の前提を置いた8つのシナリオを分析
英国	2030年までに少なくとも▲68%（1990年比） ※2013年比▲55.2%相当	<u>2050年少なくとも▲100%（1990年比）</u> ※一定の前提を置いた3つのシナリオを提示
米国	パリ協定離脱 → バイデン次期大統領は2050年までの <u>GHG排出ネットゼロ</u> を表明	
中国	2030年までに排出量を削減に転じさせる、 GDPあたりCO ₂ 排出量を2005年比65%超削減 （前者は今年の国連総会、後者は気候野心サミット 2020で習主席が表明）	<u>2060年カーボンニュートラル</u> （今年の国連総会で習主席が表明）

図 1.2 各国の温室効果ガスの削減目標

1.2 次世代冷媒の開発の現状

次世代の新冷媒には前節で記述した GWP 値が低いことに加え, 様々な条件が要求される. オゾン層破壊係数 (ODP) がゼロであり, GWP 値が低いことが求められる環境面 (Environment performance). 現行冷媒と同等の性能, または LCCP (Life cycle climate performance) 評価でも傑出しているという性能面 (Energy efficient). そして冷媒製造に費用が掛からず, 新興国においても許容できるかどうかなどの経済面 (Economic feasibility). 毒性や可燃性リスクが低いなどの安全面 (Safety). 次世代の新冷媒は, これらの頭文字をとった 3E+S を満たさなければならない.

しかし, これら全ての要求を完全に満たし, かつ設計, 管理する上で取り扱い易い純冷媒の発見は, 安全許容な範囲で可燃性の条件緩和等を講じた上でも非常に困難である. そのような状況下で, 構成物質それぞれの冷媒の特性を生かしたり, または冷媒の持つ不利な特性を冷媒混合により緩和させたりといった思想から, 混合冷媒に次世代冷媒開発への活路を見出す動きもみられる. いずれにせよ, 産業界においては純冷媒, 混合冷媒を含めた様々な冷媒の開発および提案を行い, 学术界においては物性の測定, 燃焼性の評価等, 産学一体となって次世代冷媒の問題に取り組んでいる.

1.3 R32 冷媒を用いたヒートポンプサイクル

基本的なヒートポンプサイクルは主に圧縮機, 凝縮器, 膨張弁および蒸発器で構成される. 図 1.3 および図 1.4 に基本的なヒートポンプサイクルの概略図を P-h 線図および T-s 線図に示す. 図におけるサイクルの過程は, 1→2: 圧縮機による等エントロピー過程, 2→3: 凝縮器での凝縮過程, 3→4: 膨張弁による等エンタルピー過程および 4→1: 蒸発器での蒸発過程となっている. 2 から 3 の凝縮過程の冷媒からの放熱で暖房を, 4 から 1 の蒸発過程の冷媒の吸熱で冷房, 冷蔵を行う.

一般に, ヒートポンプサイクルの省エネルギー性能を評価する指標のひとつとして, 成績係数 COP (Coefficient of Performance) がよく用いられる. 成績係数とは, 出力である熱負荷を, 入力である投入エネルギーで除した値であり, 単位消費エネルギー当たりの熱負荷を表している. ゆえに, この数値が大きいほど省エネルギー性に優れる. 暖房能力を Q_h , 冷房 (冷蔵) 能力を Q_c , 消費電力を E とすると, システム全体の暖房成績係数 COP_h および冷房 (冷蔵) 成績係数 COP_c は式(1.1)および(1.2)で表される.

$$COP_h = \frac{Q_h}{E} \quad (1.1)$$

$$COP_c = \frac{Q_c}{E} \quad (1.2)$$

また, 圧縮機への投入エネルギーを入力としたサイクル成績係数がある. それは比エンタルピーから成績係数を算出することができ, 状態点 1, 2, 3 および 4 における比エンタルピーをそれぞれ h_1, h_2, h_3 および h_4 とすると, COP_h および COP_c は式(1.3)および(1.4)で表される. 理想的な断熱圧縮サイクル, あるいは完全密閉型の圧縮機を用いる場合は, 式(1.5)が成立する.

$$COP_h = \frac{h_2 - h_3}{h_2 - h_1} \quad (1.3)$$

$$COP_c = \frac{h_1 - h_4}{h_2 - h_1} \quad (1.4)$$

$$COP_h = 1 + COP_c \quad (1.5)$$

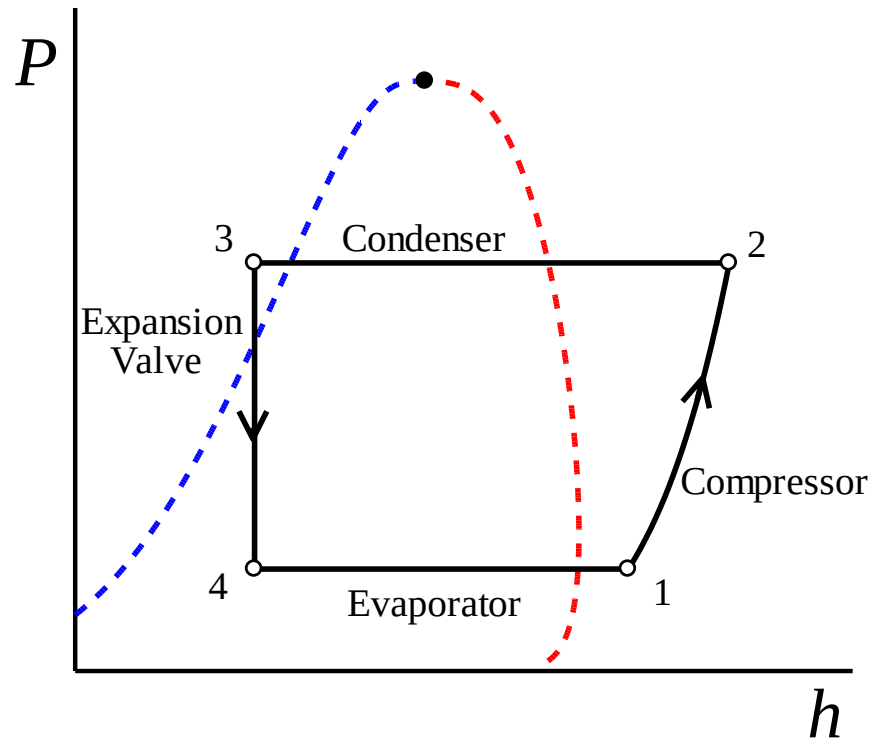


図 1.3 ヒートポンプサイクルの概略図 P-h 線図

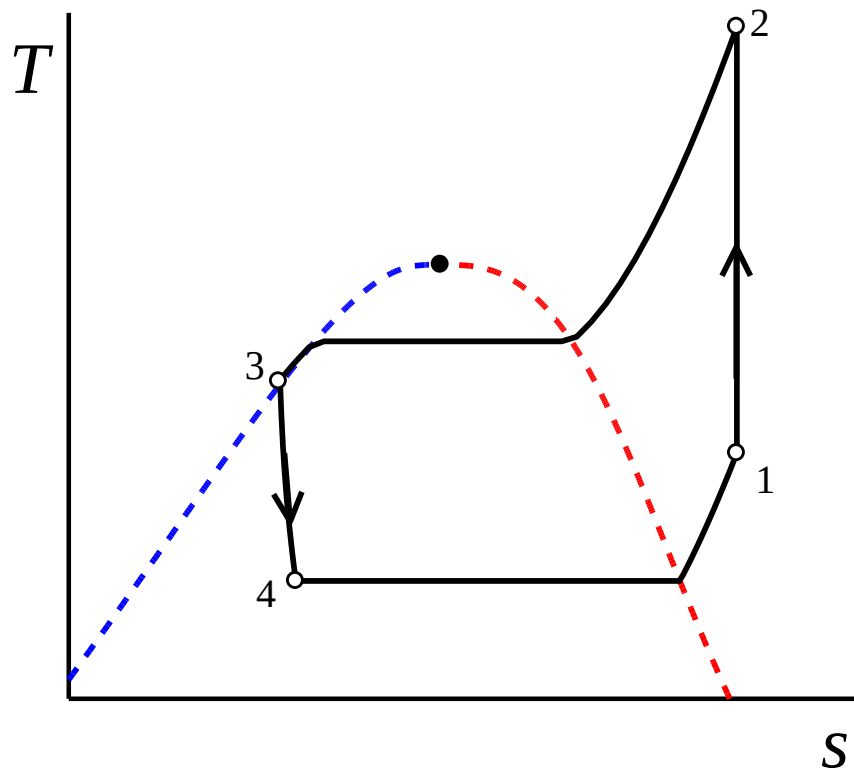


図 1.4 ヒートポンプサイクルの概略図 T-S 線図

1.4 機械学習

機械学習は近年急速に発展し、AI やディープラーニングなどの研究分野で注目されている。機械学習はコンピューターシステムによるデータからの学習、パターンや知識を抽出、未知のデータに対する予測や意思決定を行えるようにするための手法である。ルールベースではなく、データからパターンを学習することが特徴で、学習データを基に未知のデータに対する一般的な予測を行う。中でもディープラーニングは、機械学習の一分野であり、多層のニューラルネットワークを使用して複雑なタスクに対処することができる。このアプローチは大量のデータを用いて自動的に特徴を学習し、非常に複雑な特徴や階層的な表現を捉えることができることから、高度な認識や予測が可能となる。このためディープラーニングは非常に強力な手法であるが、モデルを学習させるための非常に大量のデータと、データを高速に処理するための GPU である計算資源が必要になってくる。

一方で機械学習では、手動で特徴を設計したり、適切なアルゴリズムを選択したりすることができる。また、比較的小規模なデータセットでも有効な結果を得ることができるため、これにより問題によっては機械学習がより実用的であり、計算資源やデータの入手が難しい状況にも適していることがある。柔軟性が高く、手動で特徴を設計できる点も機械学習の利点であり、異なる問題やデータに対して適切な手法を選択できる点も重要だ。機械学習が効果的に発揮される状況として、1 大規模なデータセットが利用可能な場合があげられる。機械学習は、多くのデータからパターンを学習することで効果を発揮することができるからだ。2 複雑な非線形関係を持つ問題がある場合である。機械学習は非線形な関係や複雑なパターンを学習できるため、問題が複雑であるほど有効だからだ。3 特定の問題に対する明確なアルゴリズムが存在しない場合だ。一部の問題は伝統的なアルゴリズムや手法では難解であることがある。機械学習はデータから自動的に特徴を学習し、問題に適したモデルを構築するため、このした複雑な問題に適しているのである。4 変数が多く、複雑な相互作用がある場合である。多くの変数が相互に影響し合うような複雑なシステムにおいて、機械学習はパターンを見つけ出しやすく、予測精度が向上するからだ。5 動的な環境や変化するデータに対応する必要がある場合である。機械学習の応用は広範で、医療診断、金融取引の予測、自動運転車の制御など、多岐にわたる。一方でデータの品質やバイアス、倫理的懸念などが挙げられ、またモデルの透明性や解釈可能性に関する問題もあり、慎重な利用と倫理的な考慮が求められている。これらの課題に対処しつつ、機械学習は未来の技術進化と社会変革をけん引している。

1.5 従来の研究

1.5.1 R32 冷媒に関する従来の研究

ODP の観点から CFC と HCFC は生産・消費が全廃された。同様の熱力学特性を持つ近共沸混合冷媒 R410A は HCFC の代替品として提案され[1], 冷凍および空調の分野で広く使用されている。しかし, これは近年 GWP の観点から生産・消費の規制対象となった。このような状況下, R410A の構成成分である R32 が代替品として有力視された。

He ら[2]によれば, 代替作動流体として使用される R32 の利点は, 主に以下の側面に反映されると述べられている: 有利な熱力学特性, 満足のいくサイクル性能, 環境への優しさ, 良好な安全性, および低コスト[3], [4], [5], [6]. 結果によると, R32 は R410A の 71%と少ない充填量で済み, GWP も R410A の 3 分の 1 と低い。CO₂ 排出量に換算すると, R32 の排出削減率は R22 の 77.6%であり, R410A の 2.5%より明らかに大きい。さらに, R32 は比熱容量が大きく, 熱伝導率が高いため, 熱伝導を高めることができる。そして R32 の動的粘着性のより小さい係数は流れの圧力降下を減らすことができる。他の一般的な冷媒と比較して, R32 はより高い気化潜熱およびより高い凝縮圧力を有する。以上のことから, 熱力学特性において, R32 の流動伝熱性能は R410A よりも優れており, 冷凍システムの充填量を減らすことができると結論づけられた。

1.5.2 機械学習に関する従来の研究

数学的アルゴリズムによる機械学習はシステム特性のモデリングと予測に大きなメリットをもたらすため, 工学応用, 医学, 数学や物理学などの基礎科学など, 様々な分野で利用されている。特に熱伝達を含む多くの工学分野でますます人気が高まっている。Matthew ら[7]は機械学習を使用した低次数モデルの構築, 熱伝達係数と圧力損失の予測, 熱伝達のリアルタイム解析の実行の取組をレビューし, 過去 10 年間の機械学習分野の発展は, 熱伝達とその応用を含む工学科学の全領域に大きな影響を与えてきたとまとめている。冷凍システムと熱マネジメントシステムに関する機械学習モデルの使用も増加の一途を辿っている。

ヒートポンプシステムでは重要なコンポーネントである圧縮機は, 蒸気圧縮冷凍システムの中で最も多くのエネルギーを消費する冷凍システムである。Ledesma ら[8]は, 複数の人工ニューラルネットワーク(ANN)を使用して往復コンプレッサの質量流量, 吐出温度, 消費電力を予測しました。質量流量の ANN モデルは, 吐出温度と消費電力のモデルと比較して最も高い精度を持っており, 吐出温度の ANN モデルの精度が最も低いことも示し

た. Wan ら[9]は質量流量予測のために圧縮機モデルをケーススタディとして、フィールドテストとモデリング作業を統合する新しいアプローチを説明した. 3 つの物理ベースのモデル(20 係数モデル, 効率ベースモデル, および効率ベース 20 係数モデル)と 機械学習 ベースのモデル (ニューラル ネットワーク (NN), サポート ベクター回帰 (SVR), ランダムフォレスト (RF)) を比較した. すべての機械学習モデルは, 定常状態データの予測では良好に機能しましたが, コンプレッサー動作の最初の数秒間の過渡データを予測できなかった. この問題は, CNN を使用し, 時間を入力変数として使用することで軽減された. CNN モデルは, 相対平均誤差 2% で過渡データを予測する結果となった.

熱交換器では凝縮器での凝縮過程の冷媒からの放熱で暖房, 蒸発器での蒸発過程の冷媒の吸熱で冷房を行う部分であり, 熱交換器の性能を予測するために機械学習が一般的に使用される. Díaz ら[10]によって熱交換器の性能予測に初めてニューラルネットワークを使用し, コンパクトなフィンチューブシステムでは, ニューラルネットワークは, 利用可能な相関関係に基づく従来手法よりもはるかにばらつきが少なく, 2 流体間の全体的な熱伝達率を予測できると結論付けている. Ertunc ら[11]は人工ニューラルネットワーク (ANN) を学習モデルとした, 凝縮器熱除去率, 冷媒質量流量, 圧縮機出力, 圧縮機モーターへの電力入力, および性能係数の予測に. 入力特徴量として蒸発器負荷, 水と空気の流量, 凝縮器入口での空気の乾球温度と湿球温度を三択した. 予測値は, 相関係数が 0.933~1.000, 平均相対誤差が 1.90~4.18%, 二乗平均誤差が非常に小さく, 実験値とよく一致した. 一方で, 複数の学習モデルを導入した Behnam[12]らは小規模蒸発凝縮器の熱伝達率と全熱伝達率の予測において多層パーセプトロン人工ニューラルネットワーク (ANNMLP) 以外にもサポートベクトル回帰 (SVR), 決定木 (DT), ランダムフォレスト (RF) モデルを含む 4 つの機械学習モデルを採用した研究を行った. 各モデルには, 入口湿球温度と乾球温度, サンプ内の水温, 凝縮器の飽和温度, 冷媒質量流量, 空気質量流量を含む 6 つ入力を用意した. その結果, ANNMLP, SVR, RF モデルの順で汎化能力が高いことが示された. また, データセットサイズの影響から, データセットサイズが小さい場合には, SVR が熱伝達率を予測するのに最適なモデルであることが示された. さらに, RF モデルによる特徴の重要度分析により, 冷媒流量が最も影響力のあるパラメーターであることが明らかになった. 残った DT モデルは過学習の問題に悩まされ, 蒸発凝縮器の性能予測には推奨できないと結論付けた. 次に異なる冷媒を使用し, 2 タイプの熱交換器の性能予測を行ったのは Tarabkhah ら[13]である. 多層パーセプトロン人工ニューラルネットワーク (ANNMLP), サポートベクトル回帰 (SVR), K

最近傍 (KNN), 極端勾配ブースティング (XGBoost) を含む 4 つの異なる機械学習モデルを用いて, 水平管および傾斜管における R134a および R1234yf 凝縮流の熱伝達率 (HTC) と摩擦圧力損失 (FPD) を予測した. 彼らによれば, 最良のモデルでは, ANNMLP によって HTC を平均絶対パーセンテージ誤差 (MAPE) 7.01% で推定できることが示され, 質量速度と傾斜角度がそれぞれ HTC と FPD の予測に最も影響を与えるパラメーターとして同定された.

各コンポーネント以外にもシステムやサイクル全体のパフォーマンスを機械学習ベースの方法を使用して予測することもできる. ニューラルネットワークを使用した Swider ら [14] や Navarro-Esbrí ら [15] は 2000 年代初頭から冷凍機の成績係数 (COP) と冷却負荷の予測を行なった. 冷凍・空調・ヒートポンプ (RACHP) システムにおける人工ニューラルネットワーク (ANN) ベースの研究の包括的なレビューが Mohanraj [16] によって概説されている. ここでは ANN は RACHP アプリケーションにおいて, 許容できる精度でうまく使用できることが確認された. また, ANN モデルの限界と RACHP 分野における将来の研究範囲も強調された. Rashidi ら [17] は R600 冷媒を使用したエジェクタ冷凍サイクルの熱力学解析において, 人工ニューラルネットワーク (ANN) ベースとし, 熱交換器内の温度差 (ΔT) と発電機の圧力 (P_g) が, 性能係数, 発電機と凝縮器の熱量, エジェクタのエントレインメント比, ポンプ仕事に及ぼす影響を調べた. Pektezel ら [18] は MLP (多層パーセプトロン), SVM (サポートベクターマシン), DT (決定木) の機械学習アルゴリズムを用いて, 冷凍システムの性能パラメーターを予測した. その結果, SVM 法が最も少ない誤差ですべてのパラメーターを予測した. テストセットを用いた COP 予測で検出された MAE (平均絶対誤差) 値は, SVM, MLP, DT でそれぞれ 0.0317, 0.0324, 0.0989 であり, SVM は他の機械学習手法と比較して性能指標の予測において優れていることが明らかにした. Wang ら [19] は電気自動車用ヒートポンプについて, EVI (Economized Vapor Injection) を用いた R134a ヒートポンプの暖房能力と COP を予測するために, ベース推定に SVR (サポートベクトル回帰), アンサンブル手法に Adaboost.R2 を用い, 入力特徴量の選定をシステムの動作原理と相関分析に基づいて行なった.

RACHP システムにおけるシステムの最適化とその制御は, 運転状況下での高効率の性能を達成する役割を果たす. 中でも運転中のリアルタイム性能計測・監視は, 高価な性能計測装置や性能算出に必要な各種監視センサーの追加設置が必要となり困難である. また状態方程式を使用して熱力学特性を計算すると, 通常, 計算コストが高くなり, 物理ベースのモ

デルの使用が妨げられる可能性があります。それらに対し,Shin ら[20]によると,人工ニューラルネットワーク,サポートベクターマシン,ランダムフォレスト,K-最近傍モデルを用いて空冷ヒートポンプシステムの性能予測モデルを開発・検証し,実際のシステムに組み込んだ。運転中の予測精度は R^2 (決定係数)が 0.9954,性能変化は約 2.49~3.9 の範囲で観測された。開発した性能予測モデルにより,リアルタイムの性能を確認することができ,システムの故障診断や最適制御に活用できると示唆している。

1.6 本研究の目的および本論文における構成

冷凍空調分野では次世代冷媒開発のための大量の各組成比の組み合わせの実験研究、蒸発凝縮器及び圧縮機の性能解析、さまざまな設計、動作、制御の側面を評価する実験研究等を繰り返すことは膨大な時間と大規模な熱システムの構築の費用が必要不可欠である。さらに熱流体解析ソフトや CFD モデリングなどのシミュレーションの場合、シミュレーションのための専門的な知識や様々な条件、古典的な実験相関式に関する情報収集が必要である。

一方で他の手法に比べて機械学習は、システムの包括的な理解や熱伝達現象など蒸発凝縮器の内部メカニズムに関する高度な専門知識を必要とせず、複雑な数学的伝熱解析も不要である。機械学習を用いれば、各種計測器、センサーを通じて取得したデータからシステムパラメーター間の数学的相関関係を生成することによって結果を分類または予測することが可能である。

本研究の目的は、機械学習を用いて、少ない入力特徴量で低コストかつ高精度なヒートポンプサイクルの成績係数（COP）予測モデルを作成することである。そこで本研究では 6 つの機械学習手法を中心に、入力する特徴量セットの予測に対する影響を、モデルの性能指標に基づく各種モデルの比較、残差プロット、データサイズの観点から評価を行った。また、入力特徴量の 4 選定方法も相関分析と重要度からのアプローチを試みた。

そこで本研究はヒートポンプサイクルの性能を機械学習の活用により効率的で正確に予測する方法、さらにデータ収集、特徴量選定、学習モデルの選定、トレーニング、評価を通じて、予測学習モデルの最適化の方法に着目し評価を行った。

本論文は本章を含め、全 5 章から構成される。以下に本論文の構成を記載する。

第 1 章では、本研究の研究背景および従来研究についてまとめ、ヒートポンプサイクルの特性、本研究の目的と概要を述べた。

第 2 章では、機械学習手法について説明し、本研究で用いた学習アルゴリズムについて記述した。

第 3 章では、機械学習セットアップにおいて、学習データ収集に関する説明をした。また、測定データの動作条件やモデル学習の特徴量選定方法、機械学習モデリング方法について説明した。

第 4 章では、予測モデルの評価と比較について述べ、様々な入力特徴量、データサイズによる影響を検討した。

第 5 章では、本論文の結論をまとめ、総括した。

第2章 機械学習手法

機械学習はデータ駆動型モデルがシステムパラメーター間の数学的相関関係を生成することによって結果を分類または予測するプロセスである。機械学習手法自体には物理的な説明はないが、トレーニング過程で使用する機能は完全に物理的なものになる可能性がある。物理ベースのパラメーターが機械学習の入力として選択されると、その出力に対する入力特徴量の物理効果を獲得できる。機械学習モデルの精度が高いのは、さまざまな特徴量間の複雑な相関関係を解読する人工知能の高い能力によるものである。したがって、機械学習技術は入力と出力の間に強いつながりを作ることができ、その結果は古典的な実験関連で計算されたものよりもはるかに正確である。

機械学習手法として線形回帰(Linear Regression, Linear)、ステップワイズ線形(Stepwise)、回帰木(Regression Trees, RT)、サポートベクターマシン(Support Vector Machines, SVM)、ガウス過程回帰(Gaussian Process Regression, GPR)アンサンブル(Bagged Trees, BT)を使用した。本研究では、MATLAB (Ver.R2023a) を使用し、予測モデルの開発には Regression Learner App[21]を使用した。Regression Learner App は、回帰モデルにデータ予測を学習させる。このアプリを使用すると、データの調査、特徴量の選択、検証方式の指定、モデルの学習、および結果の評価を行うことができる。自動化された学習を実行して、線形回帰モデル、回帰木、ガウス過程回帰モデル、サポートベクターマシン、効率的に学習させた線形回帰モデル、カーネル近似モデル、回帰木のアンサンブルなど最適な回帰モデルのタイプを探索できる。図 2.1 に回帰モデルの一般的なワークフローを示す。

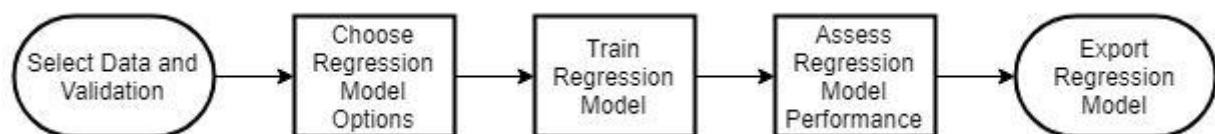


図 2.1 回帰モデルの一般的なワークフロー

2.1 線形回帰アルゴリズム

線形回帰モデルは,1 つの従属変数 y と 1 つ以上の独立変数 X の関係を記述する.連続予測子変数は,共変量とも呼ばれ,カテゴリカル予測子変数は因子とも呼ばれる.また,線形の予測子がモデルパラメーターに含まれており,解釈が容易であり,予測が高速である.これらの特徴のため,線形回帰モデルははじめに試すモデルとして一般的であるが,このモデルは形式が非常に制約されているので,多くの場合に予測精度が低くなることもある.

多重線形回帰モデルは次の式ようになる.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \cdots + \beta_p X_{ip} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.1)$$

n は観測数, y_i は i 番目の応答であり, β_k は k 番目の係数で, β_0 はモデルの定数項である. X_{ij} は j 番目の予測子変数 $j = 1, \dots, p$ の i 番目の観測値で, ε_i は i 番目のノイズ項, つまり確率的誤差のことである.

モデルに含まれている予測子変数が 1 つだけ ($p = 1$) である場合, そのモデルは単純な線形回帰モデルと呼ばれ, 通常, 線形回帰モデルは次の式のモデルになりなる.

$$y_i = \beta_0 + \sum_{k=1}^K \beta_k f_k(X_{i1}, X_{i2}, \dots, X_{ip}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.2)$$

ここで, $f(\cdot)$ は独立変数 X_{ij} のスカラー値関数である. 関数 $f(x)$ の形式に制限はなく, 非線形関数や多項式になることもある. 線形回帰モデルにおける線形性は, 係数 β_k の線形性を意味し, 応答変数 y は, 係数 β_k の線形関数を表す. 表 2.1 に線形回帰モデルのハイパーパラメーターのオプションを示す.

表 2.1 線形回帰モデルのハイパーパラメーターのオプション

ハイパーパラメーター	説明
項	線形: 予測変数の定数項と線形項
	交互作用: 定数項, 線形項, 予測変数の間の交互作用項
	純粋な 2 次: 定数項, 線形項, および予測変数のそれぞれにおいて純粋に 2 次的な項
	2 次: 定数項, 線形項および 2 次項 (交互作用を含む)

2.2 ステップワイズ線形アルゴリズム

ステップワイズ線形は、応答変数の説明としての各項の統計的な重要性に基づき、線形または一般化線形モデルの項を追加したり削除したりするための体系的な方法である。この方法は、まず指定される初期モデルから開始して、徐々により大きいまたはより小さいモデルの説明能力を比較していく。小さなモデルを作成するには、定数モデルから開始し、大きなモデルを作成するには、多数の項を含むモデルから開始する。通常、大きなモデルのほうが元のデータへの近似で測定される誤差は少なくなりますが、新しいデータを予測する際にはメリットがない可能性がある。表 2.2 にステップワイズ線形モデルのハイパーパラメータのオプションを示す。

表 2.2 ステップワイズ線形モデルのハイパーパラメータのオプション

ハイパーパラメータ	説明
初期項	ステップワイズ手順の初期モデルに含める項を指定する。[定数],[線形],[交互作用],[純粋な 2 次] および [2 次] から選択できる。
項の上限	ステップワイズ手順でモデルに追加できる項の最高次数を指定する。
最大ステップ数	ステップワイズ手順で試行できる、異なる線形モデルの最大数を指定する。学習を高速化するには、ステップの最大数の削減を試す。ステップの最大数を小さくすると、適切なモデルを見つける可能性が低くなる。

2.3 回帰木アルゴリズム

回帰木は、データの特徴を基にして分類または回帰のタスクを遂行するモデルである。このアルゴリズムは、ツリー構造を利用してデータの構造を分解し、分岐と条件に基づいて意思決定を行う。回帰木アルゴリズムは最も有益な分割をもたらす特徴を見つけることから行われ、各ノードで最適な特徴を選択して分割していくことで、データを 2 つのグループに分割し、ツリーが形成される。この手順は、「ルート・ノード」と名付けられた回帰木のトップ・ノードから、停止基準が満たされるまで、サンプルを分割するためのボトム・リーフへと進行する。

分類木の場合、各葉ノードにはその部分データが最も優勢なクラスになるようにデータが分類される。新しいデータがツリーを下ると、各ノードで質問に答え、最終的に到達する葉ノードのクラスが予測結果となる。これにより、新しいデータがどのクラスに属するかを

容易に予測できる。一方で、回帰木の場合は、各葉ノードにはその部分データの平均値や中央値が含まれる。新しいデータがツリーを下ると、各ノードで質問に答え、最終的に到達する葉ノードの値が予測結果となり、これにより、数値を予測する回帰タスクにも利用される。

回帰木の大きな利点は、可視化が容易であり、モデルがどのように意思決定を行っているかが直感的に理解できることである。特徴の重要性を把握しやすく、説明可能性が高い点が、様々な分野での利用に寄与している。

回帰木は訓練データセットにおいて許容可能な性能予測を示すが、この方法はオーバーフィッティングの問題に敏感である。オーバーフィッティングを回避するために、木の最大深さの制限、木の葉の最大数の制限、内部ノードを分割するのに必要な最小サンプル数の制限などのプルーニング手法を適用することができる。表 2.3 に回帰木モデルのハイパーパラメーターのオプションを示す。

表 2.3 ステップワイズ線形モデルのハイパーパラメーターのオプション

ハイパーパラメーター	説明
最小リーフサイズ	- 各葉ノードの応答の計算に使用する学習標本の最小数を指定する - 多くの小さい葉がある複雑な木は、学習データに対して非常に正確であるが、過適合になる傾向がある。 - 少数の大きい葉がある粗い木では学習精度が高くない。しかし、代表的なテスト セットの精度に学習精度が近づく可能性がある
代理決定分岐	- 欠損データがある場合のみ、決定分岐に代理を使用するよう指定する。 [代理決定分岐]を[オン]に設定した場合、回帰木では最大 10 個の代理分岐が各枝ノードで探索される。 [代理決定分岐] を [すべて検索] に設定した場合、回帰木ではすべての代理分岐が各枝ノードで探索される。

2.4 サポートベクターマシンアルゴリズム

SVM 分析は分類と回帰のための一般的な機械学習ツールで, Vapnik ら[22]が 1992 年にはじめて提案した. SVM 回帰はカーネル関数に依存するので, ノンパラメトリックな手法と考えられる.

2.4.1 線形 SVM 回帰:主問題の式

一連の学習データがあり, x_n は, 観測した応答変数 y_n と N 個の観測値が含まれている多変量のセットとする. また次の線形関数を求めるとする.

$$f(x) = x'\beta + b \quad (2.3)$$

そして, この関数を可能な限りフラットにするとします. これには, ノルムの値 $(\beta'\beta)$ が最小になる $f(x)$ を求める必要があります. これは, 次を最小化する凸最適化問題として定式化される.

$$J(\beta) = \frac{1}{2}\beta'\beta \quad (2.4)$$

これには, すべての残差が ε より小さいという条件があり, 方程式の形式では次のようになる.

$$\forall n: |y_n - (x_n'\beta + b)| \leq \varepsilon \quad (2.5)$$

すべての点についてこれらの制約を満たす関数 $f(x)$ は存在しない可能性がある. 実行不可能制約に対処するには, 各点にスラック変数 ξ_n および ξ_n^* を導入する. スラック変数は必要な条件を満たしたまま ξ_n と ξ_n^* の値まで回帰誤差の存在を許容するので, このアプローチは SVM 分類におけるソフト マージンの概念に似ている. スラック変数を含めると, 主問題の式として目的関数は次のようになる.

$$J(\beta) = \frac{1}{2}\beta'\beta + C \sum_{n=1}^N (\xi_n + \xi_n^*) \quad (2.6)$$

これには, 次の条件が適用される.

$$\forall n: y_n - (x'_n \beta + b) \leq \varepsilon + \xi_n \quad (2.7)$$

$$\forall n: (x'_n \beta + b) - y_n \leq \varepsilon + \xi_n^* \quad (2.8)$$

$$\forall n: \xi_n^* \geq 0 \quad (2.9)$$

$$\forall n: \xi_n \geq 0 \quad (2.10)$$

定数 C はボックス制約で、イプシロンのマージン(ε)の範囲外にある観測値に課されるペナルティを制御する正の数値であり、過適合の防止（正則化）に役立つ。この値は、 $f(x)$ のフラットさと、 ε より大きい逸脱を許容する最大量の間のトレードオフを決定する。

線形の ε 許容損失関数は、観測値からの距離が ε 以内である誤差を、ゼロに等しいものとして扱うことにより無視する。損失は、観測値 y と ε 境界の間の距離に基づいて測定され、正式な表記は次のとおりである。

$$L_\varepsilon = \begin{cases} 0 & \text{if } |y - f(x)| \leq \varepsilon \\ |y - f(x)| - \varepsilon & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.11)$$

2.4.2 線形 SVM 回帰:双対問題の式

前述した最適化問題は、ラグランジュ双対形式化で解くと計算が簡単になる。双対問題の解は、主問題の解に対する下限を与える。主問題と双対問題の最適値は同じである必要はない。この差は双対性ギャップと呼ばれている。問題が凸型で制約適格性条件を満たす場合、主問題に対する最適な解の値は双対問題の解によって与えられる。

双対問題の式を得るには、各観測値 x_n について非負の乗数 a_n および a_n^* を導入することにより、主問題の関数からラグランジュ関数を作成する。これにより双対問題の式が得られ、次を最小化することになる。

$$L_{(a)} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (a_i - a_i^*)(a_j - a_j^*) x'_i x_j + \varepsilon \sum_{i=1}^N (a_i + a_i^*) + \sum_{i=1}^N y_i (a_i^* - a_i) \quad (2.12)$$

以下の制約に従う。

$$\sum_{n=1}^N (a_n - a_n^*) = 0 \quad (2.13)$$

$$\forall n: 0 \leq a_n \leq C \quad (2.14)$$

$$\forall n: 0 \leq a_n^* \leq C \quad (2.15)$$

次の方程式を使用すると, パラメーター β を学習観測値の線形結合として完全に表すことができる.

$$\beta = \sum_{n=1}^N (a_n - a_n^*) x_n \quad (2.16)$$

新しい値の予測に使用する関数は, サポートベクターのみに依存する.

$$f(x) = \sum_{n=1}^N (a_n - a_n^*) (x_n' x) + b \quad (2.17)$$

カルーシュ・キューン・タッカー(KKT)相補性条件は, 最適な解を得るために必要な最適化制約である. 線形 SVM 回帰の場合, これらの条件は次のようになる

$$\forall n: a_n (\varepsilon + \xi_n - y_n + x_n' \beta + h) = 0 \quad (2.18)$$

$$\forall n: a_n^* (\varepsilon + \xi_n^* + y_n - x_n' \beta - h) = 0 \quad (2.19)$$

$$\forall n: \xi_n (C - a_n) = 0 \quad (2.20)$$

$$\forall n: \xi_n^* (C - a_n^*) = 0 \quad (2.21)$$

これらの条件は, 完全にイプシロン チューブの内部にあるすべての観測値にラグランジュ乗数 $a_n = 0$ および $a_n^* = 0$ があることを示す. a_n または a_n^* のいずれかがゼロではない場合, 対応する観測値はサポートベクターと呼ばれる.

2.4.3 非線形 SVM 回帰: 主問題の式

一部の回帰問題は, 線形モデルを使用して適切に表すことはできない. このような場合は, ラグランジュ双対形式を使用して, 前述した手法を非線形関数に拡張できる. 非線形 SVM

回帰モデルを得るには、ドット積 $x_1'x_2$ を非線形カーネル関数 $G(x_1', x_2) = \langle \varphi(x_1), \varphi(x_2) \rangle$ に置き換える。ここで、 $\varphi(x)$ は x を高次元空間にマッピングする変換する。表 2.4 にカーネル関数を示す。

表 2.4 カーネル関数

カーネル名	カーネル関数
線形(ドット積)	$G(x_j, x_k) = x_j'x_k$
ガウス	$G(x_j, x_k) = \exp(-\ x_j - x_k\ ^2)$
多項式	$G(x_j, x_k) = (1 + x_j'x_k)^q$ ここで、 q は集合 $\{2, 3, \dots\}$ に含まれる。

グラム行列は、 $g_{i,j} = G(x_i, x_j)$ という要素が含まれている n 行 n 列の行列であり、各要素 $g_{i,j}$ は、 φ で変換した予測子の内積と等しくなる。しかしカーネル関数を使用して直接グラム行列を生成できるので、 φ が既知である必要はない。非線形 SVM では、この方法を使用して、変換した予測子空間で最適な関数 $f(x)$ を求める。

2.4.4 非線形 SVM 回帰:双対問題の式

非線形 SVM 回帰の双対問題の式では、予測子の内積 $(x_i'x_j)$ をグラム行列の対応する要素 $(g_{i,j})$ に置き換える。表 2.5 に SVM モデルのハイパーパラメーターのオプションを示す。非線形 SVM 回帰では、次を最小化する係数を求める。

$$L(a) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (a_i - a_i^*)(a_j - a_j^*) G(x_i, x_j) + \varepsilon \sum_{i=1}^N (a_i + a_i^*) + \sum_{i=1}^N y_i (a_i - a_i^*) \quad (2.22)$$

これには次の条件が適用される。

$$\sum_{n=1}^N (a_n - a_n^*) = 0 \quad (2.23)$$

$$\forall n: 0 \leq a_n \leq C \quad (2.24)$$

$$\forall n: 0 \leq a_n^* \leq C \quad (2.25)$$

新しい値の予測に使用される関数は以下に等しくなる。

$$f(x) = \sum_{n=1}^N (a_n - a_n^*) G(x_j, x) + b \quad (2.26)$$

KKT 相補性条件は次のようになる.

$$\forall n: a_n(\varepsilon + \xi_n - y_n + f(x_n)) = 0 \quad (2.27)$$

$$\forall n: a_n^*(\varepsilon + \xi_n^* + y_n - f(x_n)) = 0 \quad (2.28)$$

$$\forall n: \xi_n(C - a_n) = 0 \quad (2.29)$$

$$\forall n: \xi_n^*(C - a_n^*) = 0 \quad (2.30)$$

表 2.5 SVM モデルのハイパーパラメーターのオプション

ハイパーパラメーター	説明
カーネル関数	カーネル関数は[ガウス]または放射基底関数(RBF)カーネル,[線形]カーネル(解釈が最も容易),[2 次] カーネル,[3 次] カーネルから選択できる.
ボックス制約モード	・ボックス制約は,残差が大きい観測値に対するペナルティを制御する. ・[ボックス制約モード]を[自動]に設定した場合,ヒューリスティック手法を使用してボックス制約が選択される.モデルを微調整するには,[手動]に設定し,ボックス制約を手動で指定する.
イプシロンモード	・イプシロン(ε)の値より小さい予測誤差は無視され,ゼロに等しいものとして扱われる. ・[イプシロン モード]を[自動]に設定した場合,ヒューリスティック手法を使用してカーネルスケールが選択される.モデルを微調整するには,[手動]に設定し,イプシロンの値を手動で指定する.
カーネルスケールモード	・カーネルスケールは,カーネルが有意に変化する予測子のスケールを制御する. ・[カーネルスケールモード]を[自動]に設定した場合,ヒューリスティック手法を使用してカーネルスケールが選択される.モデルを微調整するには,[手動]に設定し,カーネルスケールを手動で指定する.
データの標準化	予測子は,標準化によって平均が 0,標準偏差が 1 になるように変換されます.標準化により,任意のスケールに対する依存性が予測子から除去される.

2.5 ガウス過程回帰アルゴリズム

ガウス過程回帰では、関数の空間に対する確率分布を使用して応答がモデル化される、ノンパラメトリックなカーネルベースの確率モデルである。

未知の分布から抽出された $\{(x_i, y_i); i = 1, 2, \dots, n\}$ という学習セットがあると仮定する。ここで、 $x_i \in \mathbb{R}^d$ および $y_i \in \mathbb{R}$ であるとき、GPR モデルは与えられた新しい入力ベクトル x_{new} と学習データから応答変数 y_{new} の値を予測するときにおいて、線形回帰モデルは、次のような形式になる。

$$y = x^T \beta + \varepsilon \quad (2.31)$$

このとき $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ である。誤差分散 σ^2 と係数 β は、データから推定される。GPR モデルでは、ガウス過程 (GP) による潜在変数 $f(x_i)$, $i = 1, 2, \dots, n$ と明示的な基底関数 h を導入することにより応答を求める。潜在変数の共分散関数は応答の滑らかさを捕らえ、基底関数は入力 x を p 次元の特徴空間に射影する。

GPR はどの有限個のサブセットも結合ガウス分布になる一連の確率変数である。

$\{f(x), x \in \mathbb{R}^d\}$ が GP である場合、 n 個の観測値 $x_1, x_2, \dots, x_n$ が与えられると、確率変数 $f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)$ の同時分布はガウス分布になります。GP は平均関数 $m(x)$ と共分散関数 $k(x, x')$ によって定義されます。つまり $\{f(x), x \in \mathbb{R}^d\}$ がガウス過程である場合、 $E(f(x)) = m(x)$ および $\text{Cov}[f(x), f(x')] = E[\{f(x) - m(x)\}\{f(x') - m(x')\}] = k(x, x')$ である。

次のようなモデルについて考える。

$$h(x)^T \beta + f(x) \quad (2.32)$$

ここで、 $f(x) \sim GP(0, k(x, x'))$ つまり $f(x)$ は、共分散関数 $k(x, x')$ をもつゼロ平均 GP から派生している。 $h(x)$ は $\mathbb{R}^d$ における元の特徴ベクトル x を $\mathbb{R}^d$ における新しい特徴ベクトル $h(x)$ に変換する一連の基底関数である。 β は基底関数の係数から構成される p 行 1 列のベクトルである。このモデルは GPR モデルを表す。応答 y のインスタンスは次のようにモデル化できる。

$$P(y_i|f(x_i), x_i) \sim N(y_i|h(x_i)^T\beta + f(x_i), \sigma^2) \quad (2.33)$$

したがって, GPR モデルは確率モデルである. 各観測値 x_i について潜在変数 $f(x_i)$ を導入したので, GPR モデルはノンパラメトリックになる. ベクトル形式では, このモデルは次と等価である.

$$P(y|f, X) \sim N(y|H\beta + f(x_i), \sigma^2 I) \quad (2.34)$$

ここで, 次のようになる.

$$X = \begin{pmatrix} x_1^T \\ x_2^T \\ \vdots \\ x_n^T \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, H = \begin{pmatrix} h(x_1^T) \\ h(x_2^T) \\ \vdots \\ h(x_n^T) \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

GPR モデルにおける潜在変数 $f(x_1), f(x_2), \dots, f(x_n)$ の同時分布は次のようになり, 線形回帰モデルに近くなっている.

$$P(f|X) \sim N(f|0, K(X, X)) \quad (2.36)$$

ここで, $K(X, X)$ は次のようになる.

$$K(X, X) = \begin{pmatrix} k(x_1, x_1) & k(x_1, x_1) & \cdots & k(x_1, x_1) \\ k(x_1, x_1) & k(x_1, x_1) & \cdots & k(x_1, x_1) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_1, x_1) & k(x_1, x_1) & \cdots & k(x_1, x_1) \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

通常, 共分散関数 $k(x, x')$ は一連のカーネルパラメーターまたはハイパーパラメーター θ によりパラメーター表現される. 多くの場合 θ に依存することを明示的に示すため, $k(x, x')$ は $k(x, x'|\theta)$ と記述される. 表 2.6 にガウス過程回帰モデルのハイパーパラメーターのオプションを示す.

表 2.6 ガウス過程回帰モデルのハイパーパラメーターのオプション

ハイパーパラメーター	説明
基底関数	基底関数は、ガウス過程回帰モデルの事前平均関数の形式を指定する。[ゼロ],[定数]および[線形]から選択できる。
カーネル関数	カーネル関数は、予測子値間の距離の関数として応答の相関を決定する。[有理二次],[二乗指数],[Matern5/2], [Matern3/2]および[指数]から選択できる。
等方性カーネルを使用	等方性カーネルを使用する場合、すべての予測子について相関長のスケールが同じになり、非等方性カーネルの場合、相関長のスケールが予測子変数ごとに異なる。
カーネルモード	・[カーネルスケール]および[信号標準偏差]というカーネルパラメーターの初期値を手動で指定できる。信号標準偏差は応答値の事前標準偏差であり、既定ではカーネルパラメーターが初期値を開始点として局所的に最適化される。 ・[カーネルスケールモード]を[自動]に設定した場合、ヒューリスティック手法を使用してカーネルパラメーターが選択される。[手動]に設定した場合、初期値を指定できる。
シグマモード	・観測値のノイズ標準偏差[シグマ]の初期値を手動で指定できる。既定では、観測値のノイズ標準偏差が初期値を開始点として最適化される。 ・[シグマ モード]を[自動]に設定した場合、ヒューリスティック手法を使用して観測値の初期ノイズ標準偏差が選択される。[手動]に設定した場合、初期値を指定できる。
データの標準化	予測子は、標準化によって平均が0,標準偏差が1になるように変換されます。標準化により、任意のスケールに対する依存性が予測子から除去される。
数値パラメーターの最適化	GPR モデルの数値パラメーターが自動的に最適化される。最適化されるパラメーターは、[基底関数]の係数、カーネルパラメーター[カーネルスケール]および[信号標準偏差],および観測値のノイズ標準偏差[シグマ]である。

2.6 アンサンブルアルゴリズム

アンサンブル回帰木は、重みを付けた複数の回帰木の組み合わせから構成される予測モデルです。一般に、複数の回帰木を組み合わせると予測の性能が向上します。

2.6.1 バギング木(Bagged Trees, BT)

RT のバギングアンサンブルはランダムフォレスト(RF)[23]と呼ばれ、ランダムベースの平均化法を用いて最終的なターゲットを予測する。フォレスト内の各 RT はブートストラップ法（すなわち、置換を伴うランダムサンプリング）を用いて構築される。ブートストラップ法とは、データセットの各ポイントが同じ確率でサンプリングされ、データセットのサブセットで複数回サンプリングできる方法である。このことは、一度サンプリングされたデータ点はデータセットに戻され、再度サンプリングできることを意味する。RF はそのランダムな性質により、RT よりも一般化可能であるデータセットに対して決定木などの弱学習器をバギングするには、データセットのブートストラップ複製を多数生成し、この複製に対して決定木を成長させます。N 個の観測値から N 個を復元抽出法で無作為に選択することにより、各ブートストラップ複製を取得します（N はデータセットのサイズ）。さらに、アンサンブル内のすべての木で各決定分岐の予測子が無作為に選択できます。これはランダムフォレストと呼ばれる手法で、バギング木の精度が向上することが知られています。既定では、各分岐に対して無作為に選択する予測子の個数は、分類の場合は予測子の個数の平方根、回帰の場合は予測子の個数の 3 分の 1 です。ブートストラップされたデータセットを構築し、特徴のランダムなサブセットに基づいてサンプルを分割するためのサンプル選択プロセスにおけるランダム性は、ツリーの違いを保証し、したがって汎化能力を高める。

2.6.2 最小二乗ブースティング(LSBoost)

最小二乗ブースティングはアンサンブル回帰を当てはめます。ステップごとに、アンサンブルは新しい学習器を、実際に観測された応答とこれまでに学習させたすべての学習器を対象に集約された予測との差分に当てはめる。アンサンブルは近似によって平均二乗誤差を最小化する。LearnRate パラメーターを渡すことによって、LSBoost を縮小で使用する。既定の設定では、このパラメーターは 1 に設定されており、アンサンブルは最大速度で学習を行う。LearnRate を 0 から 1 までの値に設定した場合は、アンサンブルはすべての新しい学習器を $y_n - \eta f(x_n)$ に当てはめる。ここで、 y_n は、観測された応答であり、 $f(x_n)$ は、これま

で観測値 x_n について学習を行ったすべての弱学習器から集約された予測である.ちなみに η は学習率である. 表 2.7 にガバギング木モデルのハイパーパラメーターのオプションを示す.

表 2.7 ガバギング木モデルのハイパーパラメーターのオプション

ハイパーパラメーター	説明
最小リーフサイズ	・各葉ノードの応答の計算に使用する学習標本の最小数を指定する ・多くの小さい葉がある複雑な木は, 学習データに対して非常に正確であるが, 過適合になる傾向がある. ・少数の大きい葉がある粗い木では学習精度が高くない. しかし, 代表的なテスト セットの精度に学習精度が近づく可能性がある
学習器の数	学習器を増やすと精度が向上するが, 当てはめに時間がかかる可能性がある.
学習率	ブースティング木の場合に縮小学習率を指定します. 学習率を 1 未満に設定すると, アンサンブルでは学習反復数を増加させる必要がありますが, 多くの場合に精度が向上する.
サンプリングする予測子の数	・木学習器の各分割についてランダムに選択する予測子の数を指定する. ・[すべて選択] に設定した場合, 使用可能なすべての予測子が使用され, [範囲を設定] に設定した場合, ボタンをクリックするかボックスに正の整数値を入力して値を指定できる.

第3章 機械学習のセットアップ

3.1 データ収集

本研究のモデル学習に用いる入力データは竹里らによって収集されたデータを使用した。その為、使用実験装置と測定データの算出方法を一部引用する。詳細な説明は[24]に記載されている。

3.1.1 装置の説明

図 3.1 に実験装置の概略,図 3.2 に実験装置の写真を示す。実験装置は熱源流体に水を用いた蒸気圧縮式ヒートポンプであり,冷媒ループと熱源ループから構成される。冷媒ループは,スクロール式圧縮機,油分離器,凝縮器,電子膨張弁,蒸発器からなり,図中では赤線および青線で示した。熱源水ループは,恒温槽,熱交換器およびポンプからなり,図中では黒線で示した。

冷媒ループでは,圧縮機により圧縮された高温高压の冷媒蒸気が,油分離器で冷凍機油と分離された後,凝縮器で熱源水との熱交換により過冷液状態となる。その後,過冷状態の冷媒液は膨張弁によって減圧され気液二相状態となり,蒸発器で熱源水と熱交換して過熱蒸気状態となり圧縮機へと戻る。測定機器類は,圧縮機の出入口,凝縮器の出入口,電子膨張弁入口および蒸発器の出口に冷媒の温度と圧力測定用の熱電対および圧力センサーが設けられている。また,凝縮器と膨張弁の間には冷媒流量を測定するための質量流量計が設置されている。

熱源水ループでは,低温熱源側および高温熱源側のいずれにおいても,恒温槽からポンプにより吐出された熱源水は,熱交換器で冷媒と熱交換した後,再び恒温槽へと戻る。各恒温槽のポンプの下流側には体積流量計が設置されており,熱交換器出入口には温度測定用の熱電対が設けられている。

各センサーから送られた測定データは,データアキュイジションユニット(MX100,YOKOGAWA)により収集され,イーサネットケーブルを介してコンピュータに取り込まれる。システムが定常状態になったことを確認した後,全チャンネルのサンプリングを2秒間隔で3分間,計90回行った。また,各チャンネルの測定値は,サンプリングした値の平均値とした。

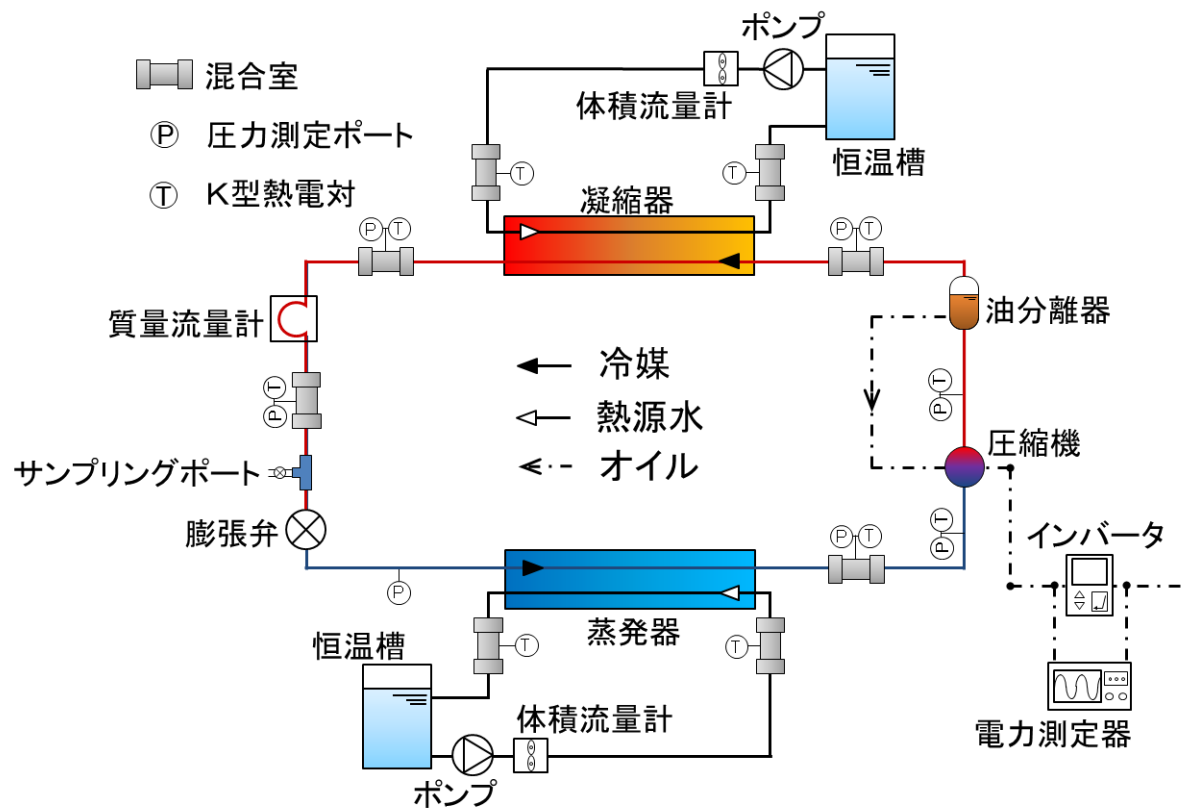


図 3.1 実験装置概略

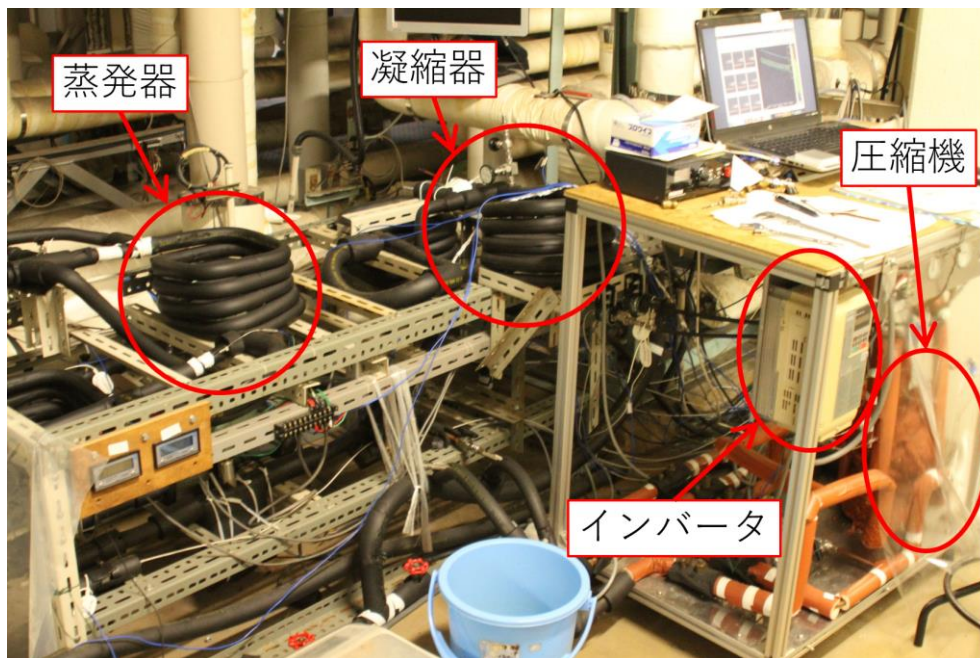


図 3.2 実験装置

3.1.2 動作条件

表 3.1.a, b, c に第 3.1.1 項で示した HFC32 冷媒における評価実験の実験条件を示す。暖房条件における冷媒充填量を 0.53kg, 0.55kg, 0.58kg, 0.60kg, 0.62kg, 0.65kg, 0.71kg および 0.74kg の 8 条件ごとで、熱交換量は凝縮器熱源水の受熱量より算出し、1.6kW から 2.6kW までは 0.2kW ごとに計 6 点の合計 54 回の実験を行った。冷媒充填量過熱度はいずれの条件においても蒸発器出口の値であり、4 (±1) K に設定した。

表 3.1.a 実験条件

	冷媒充填量 [kg]	熱源水温度 [°C]		熱交換量 [kW]	過熱度 [K]
		凝縮器側	蒸発器側		
暖房条件	0.53	20 → 45	15 → 9	1.6	4 (±1)
				1.8	
				2.0	
				2.2	
				2.4	
				2.6	
暖房条件	0.55	20 → 45	15 → 9	1.6	4 (±1)
				1.8	
				2.0	
				2.2	
				2.4	
				2.6	

表 3.1.b 実験条件

	冷媒充填量 [kg]	熱源水温度 [°C]		熱交換量 [kW]	過熱度 [K]
		凝縮器側	蒸発器側		
暖房条件	0.58	20 → 45	15 → 9	1.6	4 (±1)
				1.8	
				2.0	
				2.2	
				2.4	
				2.6	
暖房条件	0.60	20 → 45	15 → 9	1.6	4 (±1)
				1.8	
				2.0	
				2.2	
				2.4	
				2.6	
暖房条件	0.62	20 → 45	15 → 9	1.6	4 (±1)
				1.8	
				2.0	
				2.2	
				2.4	
				2.6	

表 3.1.c 実験条件

	冷媒充填量 [kg]	熱源水温度 [°C]		熱交換量 [kW]	過熱度 [K]
		凝縮器側	蒸発器側		
暖房条件	0.65	20 → 45	15 → 9	1.6	4 (±1)
				1.8	
				2.0	
				2.2	
				2.4	
				2.6	
暖房条件	0.71	20 → 45	15 → 9	1.6	4 (±1)
				1.8	
				2.0	
				2.2	
				2.4	
				2.6	

3.1.3 測定データからの各種パラメーターの算出

3.1.3.1 圧縮機諸効率の算出

圧縮機の運転性能を評価するために,断熱圧縮効率 η_{adi} , 圧縮機の機械効率 η_{M} およびインバータ効率 η_{INV} それぞれの値を式(3.1),(3.2)および(3.3)から算出する. そして前述 3 つの効率の積で表される式(3.4)で示す総合効率 η_{all} を定義して評価を行った. また,体積効率 η_{vol} を式(3.5)により算出し,合わせて評価を行った. 体積効率とは圧縮機のピストン押しのけ量に対する実際の吸込量の比のことである.

$$\eta_{\text{adi}} = \frac{h_{\text{d,ideal}} - h_{\text{s}}}{h_{\text{d}} - h_{\text{s}}} \quad (3.1)$$

$$\eta_M = \frac{m_R(h_d - h_s)}{E_{\text{COMPR}}} \quad (3.2)$$

$$\eta_{\text{INV}} = \frac{E_{\text{COMPR}}}{E_{\text{INV}}} \quad (3.3)$$

$$\eta_{\text{all}} = \eta_{\text{adi}} \cdot \eta_M \cdot \eta_{\text{INV}} \quad (3.4)$$

$$\eta_{\text{vol}} = \frac{m_R}{\rho_{R,s} \cdot N \cdot v_{\text{COMPR}}} \quad (3.5)$$

ここで、 h_d および h_s はそれぞれ圧縮機出入口の冷媒比エンタルピーであり、 $h_{d,\text{ideal}}$ は等エントロピー圧縮時における理想的な圧縮機出口の冷媒比エンタルピー、 m_R は冷媒の質量流量、 E_{COMPR} および E_{INV} はそれぞれ圧縮機およびインバータへの実際の投入電力である。また、 $\rho_{R,s}$ は圧縮機入口の冷媒密度、 N は圧縮機回転数、 v_{COMPR} は圧縮機シリンダ容積である。

3.1.3.2 暖房能力および冷房能力の算出

暖房能力（凝縮器熱負荷） $Q_{W,\text{COND}}$ および冷房能力（蒸発器熱負荷） $Q_{W,\text{EVA}}$ は熱源水側の収支に関する式(3.6)および(3.7)によりそれぞれ求められる。

$$Q_{W,\text{COND}} = m_{W,\text{COND}} C_{p,W,\text{COND}} (T_{W,\text{COND},\text{out}} - T_{W,\text{COND},\text{in}}) + Q_{\text{LOSS}} \quad (3.6)$$

$$Q_{W,\text{EVA}} = m_{W,\text{EVA}} C_{p,W,\text{EVA}} (T_{W,\text{EVA},\text{in}} - T_{W,\text{EVA},\text{out}}) + Q_{\text{LOSS}} \quad (3.7)$$

ここで、 $m_{W,\text{COND}}$ および $m_{W,\text{EVA}}$ はそれぞれ凝縮器側および蒸発器側の熱源水における質量流量であり、測定された体積流量に熱源水の熱交換器入口密度をかけることにより算出している。 $C_{p,W,\text{COND}}$ および $C_{p,W,\text{EVA}}$ はそれぞれ凝縮器側および蒸発器側の熱源水における平均定圧比熱であり、 $T_{W,\text{COND},\text{out}}$ 、 $T_{W,\text{COND},\text{in}}$ 、 $T_{W,\text{EVA},\text{out}}$ および $T_{W,\text{EVA},\text{in}}$ は凝縮器側の熱源水出入口および蒸発器側の熱源水出入口における温度である。 Q_{LOSS} は熱源水と外気との温度差により発生する熱損失であり、実験前段階として事前に検定を行い補正している。なお、熱損失検定方法は付録 D に示す。

また、暖房能力 $Q_{R,\text{COND}}$ および冷房能力 $Q_{R,\text{EVA}}$ は冷媒側の熱収支に関する式(3.8)および(3.9)からそれぞれ求めることができる。

$$Q_{R,\text{COND}} = m_R (h_{R,\text{COND},\text{in}} - h_{R,\text{COND},\text{out}}) \quad (3.8)$$

$$Q_{R,\text{EVA}} = m_R (h_{R,\text{EVA},\text{out}} - h_{R,\text{EVA},\text{in}}) \quad (3.9)$$

ここで、 m_R はそれぞれ冷媒質量流量であり、 $h_{R,COND,out}$, $h_{R,COND,in}$, $h_{R,EVA,out}$ および $h_{R,EVA,in}$ は凝縮器出入口および蒸発器出入口における冷媒比エンタルピーである。

ここで示した暖房能力 $Q_{W,COND}$ および $Q_{R,COND}$, また冷房能力 $Q_{W,EVA}$ および $Q_{R,EVA}$ は、それぞれ理論的には同じ値となるはずである。しかし、外気温の影響や物性値の違いにより若干差異が生じる。

3.1.3.3 成績係数の算出

システム全体における暖房条件の成績係数 $COP_{h,system}$ および冷房条件の成績係数 $COP_{c,system}$ はそれぞれ式(2.10)および(2.11)により求める。

$$COP_{h,system} = \frac{Q_{W,COND}}{E_{INV}} \quad (2.10)$$

$$COP_{c,system} = \frac{Q_{W,EVA}}{E_{INV}} \quad (2.11)$$

ここで、 E_{INV} はインバータ投入電力である。システム全体における成績係数は、熱負荷（熱源水側から算出）をインバータ投入電力で除して算出している。

サイクルにおける暖房条件の成績係数 $COP_{h,cycle}$ および冷房条件の成績係数 $COP_{c,cycle}$ はそれぞれ式(2.12)および(2.13)により求める。

$$COP_{h,cycle} = \frac{Q_{R,COND}}{m_R(h_d - h_s)} = \frac{COP_{h,system}}{\eta_{INV} \cdot \eta_M} * \frac{Q_{R,COND}}{Q_{W,COND}} \quad (2.12)$$

$$COP_{c,cycle} = \frac{Q_{R,EVA}}{m_R(h_d - h_s)} = \frac{COP_{c,system}}{\eta_{INV} \cdot \eta_M} * \frac{Q_{R,EVA}}{Q_{W,EVA}} \quad (2.13)$$

サイクルにおける成績係数は熱負荷（冷媒側から算出）を冷媒圧縮仕事で除して算出している。ここで、 h_d は圧縮機吐出における冷媒比エンタルピー、 h_s は圧縮機吸込における冷媒比エンタルピーである。なお、冷媒圧縮仕事はインバータおよび圧縮機での損失の影響を除いた作動流体に投入した仕事量なので、システム全体における成績係数をインバータ効率および圧縮機の機械効率、ヒートバランスで除しても算出できる。

3.1.3.4 熱交換器内の温度分布の算出

凝縮器および蒸発器内部の温度分布より冷媒と熱源水の温度差を考察するために、 $T-Q$ 線図を用いた。図 3.3 に熱交換器内の温度分布を $T-Q$ 線図の概略図で示す。図において上の高温側が凝縮器、下の低温側が蒸発器における冷媒および熱源水の温度分布である。本研究で用いた熱交換器は対向流型熱交換器であるため、冷媒および熱源水は図の矢印の向きに流れる。

凝縮器側において、冷媒は 1-2 区間では蒸気単相、2-3 区間では気液二相、3-4 区間では液単相として扱う。本研究では冷媒および熱源水は凝縮器の出入口において圧力および温度を測定しているので、凝縮器内部の温度は計算より推定する。計算方法は以下の通りである。

熱交換器内温度の計算方法

1. 測定した冷媒の圧力および温度により出入口における冷媒の比エンタルピーおよび比エントロピーを算出する。
2. 出入口の圧力および比エンタルピーを 100 等分し、凝縮器内部の圧力および比エンタルピーを算出する。その際、冷媒の圧力変化は比エンタルピー変化に比例すると仮定し算出する。
3. 算出した凝縮器内部の圧力および比エンタルピーより、温度を算出する。
4. 同様に凝縮器内部の熱源水の比エンタルピーおよび温度を算出する。その際、熱源水の圧力は大気圧（=101.325kPa）で一定とする。
5. 算出した比エンタルピーおよび冷媒流量により、凝縮器内部の熱負荷を計算する。

蒸発器側において、冷媒は 5-6 区間では気液二相、6-7 区間では蒸気単相として扱う。本研究では蒸発器出口において温度を測定しており、蒸発器入口では圧力および膨張弁入口の比エンタルピー値より温度を算出している。したがって、凝縮器と同様の計算方法により、蒸発器内部の温度および熱負荷を算出する。

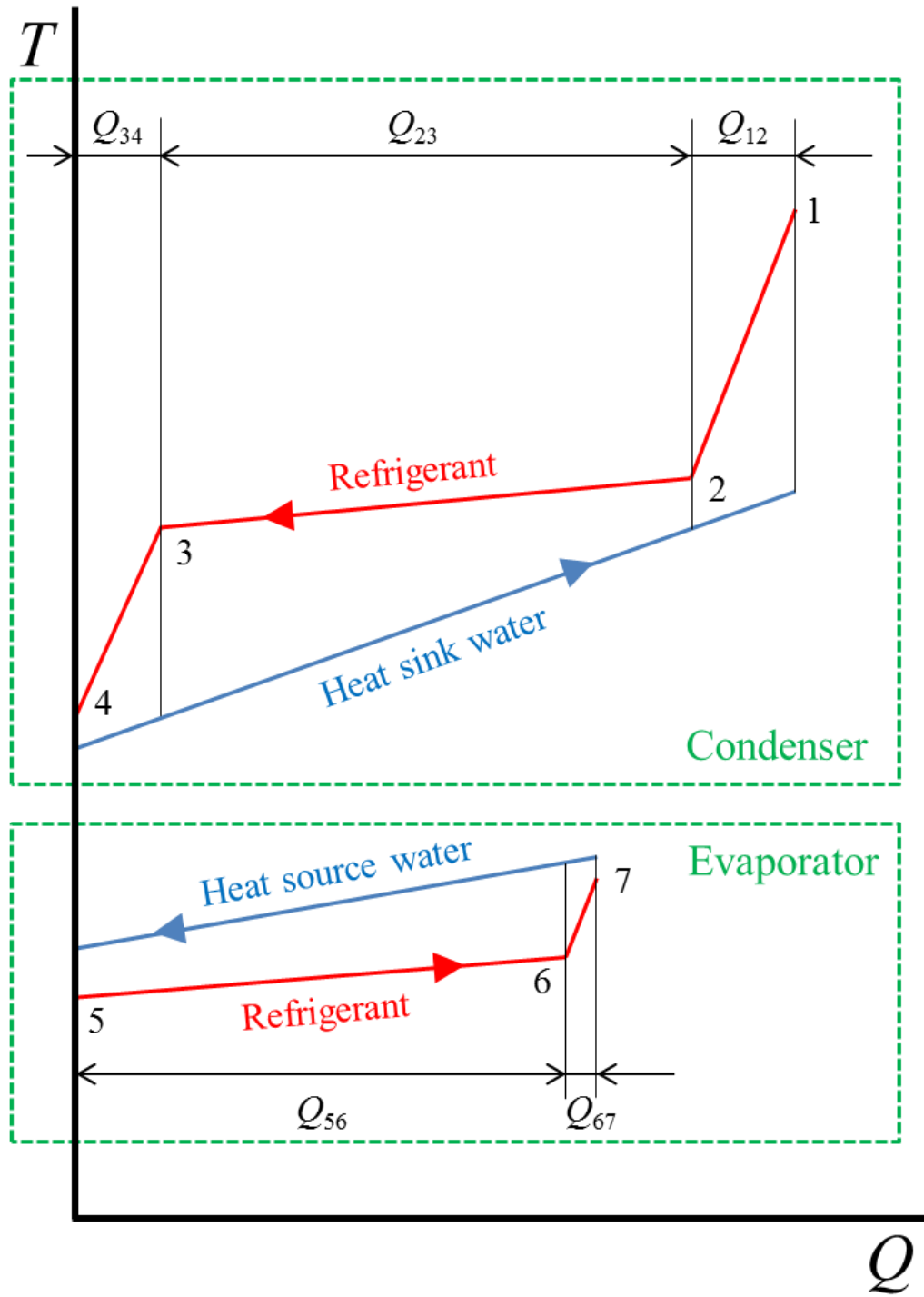


図 3.3 熱交換器内の温度分布

3.1.3.5 体積能力の算出

冷媒が単位体積あたりに運搬することのできる熱量として、体積能力という概念が存在する。加熱および冷却（冷凍）の体積能力はそれぞれ以下の式(2.30)および(2.31)で表される。

$$VC_{\text{COND}} = \rho_s (h_{\text{R,COND,in}} - h_{\text{R,COND,out}}) \quad (3.14)$$

$$VC_{\text{EVA}} = \rho_s (h_{\text{R,EVA,out}} - h_{\text{R,EVA,in}}) \quad (3.15)$$

体積能力は圧縮機入口の冷媒蒸気密度と、加熱では冷媒の凝縮器出入口の比エンタルピー差、冷却（冷凍）では蒸発器出入口の比エンタルピー差との積で表され、体積能力が大きいほど単位体積あたりに多くの熱量を運搬できるため、同熱負荷において圧縮機回転数がより小さくなる。また、体積能力が大きいほど圧縮機の小型化が期待でき、体積能力はサイクル特性を評価するにあたって重要な要素の一つとなる。

3.2 機械学習モデリング

3.2.1 特徴量の選定方法

機械学習モデルの性能は,入力する特徴量の適切な選択に大きく依存する.入力特徴量の数が少なすぎると,モデルが複雑なデータを適切に捉えられない可能性があり,これがアンダーフィッティングの原因となる.一方で,特徴の数が多すぎると,モデルがオーバーフィッティングしてしまい,未知のデータに対する汎化性能が低下してしまう.さらに,入力特徴量はモデル学習の収束と速度に大きな影響を与える.適切な特徴セットは,正確な予測のモデルアルゴリズムにつながる.一方,冗長性,無関係性,またはノイズの多いデータを含む不適切なデータセットは,信頼できる結果を得る機会を減少させる.様々な特徴の重みは互いに等しくなく,他の特徴よりも重要なものもあることは明らかである.特徴量の中には予測に影響を与えないものもある.より少ない入力でモデルをシンプルにすることで,計算コストは急激に低下する.その結果,有用な特徴を認識することが重要になる.本研究では適切かつ効率的,実用的な特徴量選択方法として4つの特徴量選定方法に焦点を当てた.項3.1で述べた収集されたデータの各種パラメーターを表3.2に示す.

表 3.2.a 各種パラメーター

特徴量	単位	最小	最大
M	[kg]	0.533	0.741
Qh_w	[kW]	1.599866	2.605492
Qh_r	[kW]	1.636174	2.664394
Qr_w	[kW]	1.410767	2.283426
Qr_r	[kW]	1.422893	2.293713
QCR/QCS	[-]	5.701807	6.267462
QER/QES	[-]	1.010646	1.034369
Pd	[kPa]	1.000231	1.017089
Ps	[kPa]	2575.981	2770.596

表 3.2.b 各種パラメーター

特徴量	単位	最小	最大
Pd/Ps	[-]	1013.63	1052.18
Td	[K]	355.3555528	362.2645098
SH	[K]	355.3556	362.2645
DT	[K]	3.097462	6.18834
Wr	[kg/h]	2.083992	22.89409
η_{inv}	[-]	18.2421	32.80948
η_M	[-]	0.890938	0.918634
η_{adi}	[-]	0.927877	0.984389
η_{vol}	[-]	0.61862	0.688366
N	[Hz]	0.931489	0.951912
ΔP_{cond}	[kPa]	36.6	65.9
ΔP_{eva}	[kPa]	5.036378	12.84074
P_{inv}	[kW]	4.043912	15.31916
P_{comp}	[kW]	0.316	0.517
P_r	[kW]	0.2822	0.4747
$\ln \Delta T_{c_vap}$	[K]	0.263301	0.467289
$\ln \Delta T_{c_tp}$	[K]	7.501231	13.77649
$\ln \Delta T_{c_liq}$	[K]	6.240355	10.00616
UAc_{vap}	[W/K]	6.420901	20.15997
UAc_{tp}	[W/K]	24.24076	47.80369

表 3.2.c 各種パラメーター

特徴量	単位	最小	最大
UA _{c_liq}	[W/K]	146.1693	272.2299
lnΔT _{e_tp}	[K]	1.294426	50.97855
lnΔT _{e_vap}	[K]	1.949641	3.087556
UA _{e_tp}	[W/K]	2.201991	5.383251
UA _{e_vap}	[W/K]	600.4367	794.9187
Q _{h_loss}	[kW]	4.967582	18.39413
Q _{r_loss}	[kW]	0.006498	0.021959
W _{c_w}	[L/h]	-0.06628	-0.0413
T _{w_cin}	[°C]	54.61523	89.44199
T _{w_cout}	[°C]	19.92794	20.04989
W _{e_w}	[L/h]	44.94852	45.07051
T _{w_ein}	[°C]	192.3566	320.5087
T _{w_eout}	[°C]	14.96482	15.06605
T _{c_cout}	[°C]	8.954098	9.04334
T _{e_eout}	[°C]	21.14192	39.34444
T _{atm}	[°C]	105.4762	167.981
VC _{cond_actual}	[kJ/m ³]	8519.552	8714.08
VC _{eva_actual}	[kJ/m ³]	7744.781	8783.872
density _{R,s}	[kJ/m ³]	5.06725	9.113744

3.2.1.1 実験ベースの特徴量選定

1 つ目は実験試験に基づく選定である(実験ベース手法).これは実際の実験試験を想定したものであり,実験者が実験条件の設定や実験機器の初期設定を基準とした方法である.表 3.3 に実験ベースの特徴量セットを示す. 合計 11 の特徴量がある.今回のヒートポンプサイクルは条件特徴量:熱源水温度(凝縮器側出入口, 蒸発器側出入口),過熱度,熱交換量(凝縮器側,蒸発器側),それに加え,運転特徴量:冷媒質量流量, 冷媒充填量, 圧縮機周波数, 最後に環境特徴量: 室内温度を選択している.

表 3.3 実験ベースの特徴量

入力特徴量		単位	範囲
冷媒充填量	M	[kg]	0.533 - 0.741
熱源水側暖房能力	Qh_w	[kW]	1.599866 - 2.605492
熱源水側冷房能力	Qr_w	[kW]	1.410767 - 2.283426
過熱度	SH	[K]	355.3556 - 362.2645
冷媒質量流量	Wr	[kg/h]	2.083992 - 22.89409
圧縮機周波数	N	[Hz]	0.931489 - 0.951912
凝縮器側入口熱源 水温度	Tw_cin	[°C]	54.61523 - 89.44199
凝縮器側出口熱源 水温度	Tw_cout	[°C]	19.92794 - 20.04989
蒸発器側入口熱源 水温度	Tw_ein	[°C]	192.3566 - 320.5087
蒸発器側出口熱源 水温度	Tw_eout	[°C]	14.96482 - 15.06605
室内温度	T_atm	[°C]	105.4762 - 167.981

3.2.1.2 測定データに関する特徴量選定

次に, サイクル実験から得られたデータ(測定データ)の中から特徴量を選定する手法である. 測定データを第 3.2.1.1 項で示した実験ベースの特徴量との組み合わせによる, さまざまな特徴量セットを形成した. 項 3.1.3 で示した各種パラメーターの様な複雑で高度なデータ処理を行わずに, センサーや計測機器の使用によって得られた生データだけを組み合わせることで低コストの入力特徴が選択できる. 表 3.4, 表 3.5 に測定データの特徴量と実験ベースの特徴量と測定データの特徴量セットをそれぞれ示す.

表 3.4 測定データの特徴量

測定データの特徴量		単位	範囲
圧縮機出口圧力	Pd	[kPa]	1.000231 - 1.017089
圧縮機入口圧力	Ps	[kPa]	2575.981 - 2770.596
圧縮機出口温度	Td	[K]	355.3555528 - 362.2645098
インバータ入力	P_inv	[kW]	4.043912 - 15.31916
凝縮器熱源水流量	Wc_w	[L/h]	-0.06628 - -0.0413
蒸発器熱源水流量	We_w	[L/h]	44.94852 - 45.07051
凝縮器出口温度	T_cout	[°C]	8.954098 - 9.04334
蒸発器出口温度	T_eout	[°C]	21.14192 - 39.34444

表 3.5 実験ベースの特徴量と測定データの特徴量セット

条件	特徴量セット	特徴量数
1	実験ベースの特徴量 + Pd, Ps	13
2	実験ベースの特徴量 + Td, P_inv	13
3	実験ベースの特徴量 + Wc_w, We_w	13
4	実験ベースの特徴量 + T_cout, T_eout	13
5	実験ベースの特徴量 + Pd, Ps, Td, P_inv	15
6	実験ベースの特徴量 + Wc_w, We_w, T_cout, T_eout	15
7	Pd, Ps, Td, P_inv, Wc_w, We_w, T_cout, T_eout (測定データのみの特徴量)	8
8	実験ベースの特徴量 + 測定データの特徴量	19

3.2.1.3 ピアソン積率相関係数に関する特徴量選定

3 つ目はピアソン積率相関係数[25]を使用して,ヒートポンプ性能を目的変数とし,各特徴量との相関を持つか決定する手法である.ピアソン相関係数は統計学において,2 つの連続変数間の線形な関係の程度を評価する指標である。この係数は,-1 から 1 の範囲の値を取り,変数間の相関の方向と強さを示す。具体的には,正の相関は片方の変数が増加するともう一方も増加する傾向があり,負の相関は片方が増加するともう一方が減少する傾向がある。相関がない場合は 0 である.ピアソン相関係数は,変数 X と変数 Y の共分散を変数の標準偏差の積で割って求められる.これにより,変数の単位に依存せず,標準化された相関係数が得られる.ただし,ピアソン相関係数は線形な関係を前提とする。ピアソン相関係数はそれぞれ以下の式(3.16),(3.17)および(3.18)によって求められる.また図 3.4, 表 3.6 にヒートポンプ性能とのピアソン相関係数の絶対値とそれに基づく特徴量セットをそれぞれ示す。

便宜上, ピアソン相関係数の絶対値の平均値以上の特徴量から,上から 3 つを基本セットとし,特徴量を 1 つずつ追加していくことで特徴量セットを作成した。

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (3.16)$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad (3.17)$$

$$r_{xy} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3.18)$$

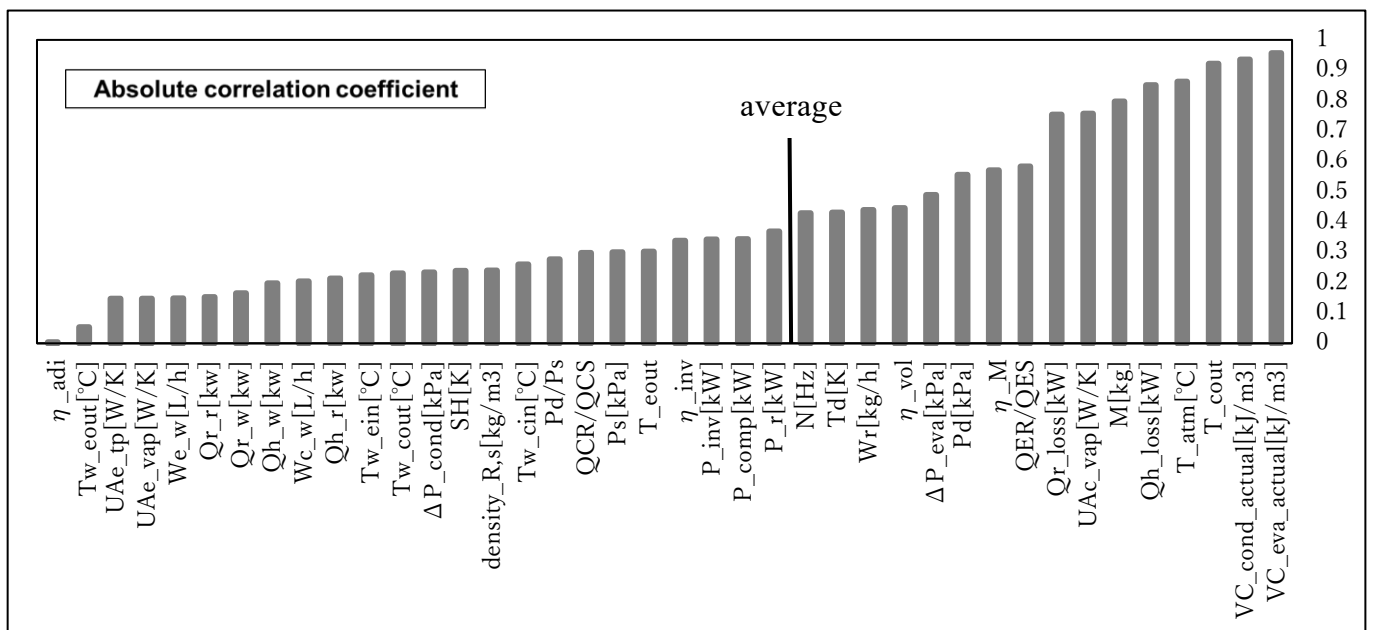


図 3.4 ヒートポンプ性能とのピアソン相関係数の絶対値

表 3.6 ピアソン相関係数に基づく特徴量セット

条件	特徴量セット	特徴量数
1	VC_cond_actual, VC_eva_actual , T_cout	3
2	条件 1 + T_atm	4
3	条件 2 + Qh_loss	5
4	条件 3 + M	6
5	条件 4 + UAc_vap	7
6	条件 5 + Qr_loss	8
7	条件 6 + QER/QES	9
8	条件 7 + η_M	10
9	条件 8 + Pd	11
10	条件 9 + ΔP_{eva}	12
11	条件 10 + η_{vol}	13
12	条件 11 + Wr	14
13	条件 12 + Td	15
14	条件 13 + N	16

3.2.1.4 MRMR 手法による特徴量選定

4 つ目は最小冗長性最大関連性 (Minimum Redundancy Maximum Relevance, MRMR) に基づく特徴量を選定する方法である。(MRMR 手法).MRMR は,特徴量選択のための統計的手法であり,高次元データの中から最も有益な特徴量のサブセットを見つけ出すために使用される.特に,過学習を防ぎつつモデルの性能を最適化するのに役立つ.MRMR の基本的な考え方は,特徴量のサブセットを選択する際に,そのサブセットが目的変数との相互情報量が最大でありながら(最大関連性 (Maximum Relevance)),特徴量同士の相互情報量が最小であるようにすることである(最小冗長性 (Minimum Redundancy)).つまり,選択した特徴量が目的変数との関連性が高く,かつ選択された特徴量同士が冗長性を持たないようにする.この手法は,情報理論に基づいており,特徴量同士の相互情報量を計算し,その中から最も有益な特徴量を選択する.

相互情報量 (Mutual Information) は,2 つの確率変数間の依存性や関連性を測る指標である.これは,一方の変数の観測値が他方の変数の観測値に対してどれだけの情報を提供するかを示す.具体的には,変数間の同時確率と個々の確率分布から導き出され,以下のような性質がある.相互情報量が高いほど,変数同士の依存性が強いことを示し,一方が分かれば他方も分かるような場合,相互情報量は大きくなる.逆に,相互情報量が低い場合,変数同士は独立している可能性が高まる.相互情報量は非負の値を取り,変数同士が独立している場合にのみ 0 となる.具体的な計算式は,離散確率変数 X と目的変数 Y の相互情報量 I は式(3.18)により求める.

$$I(x, y) = \sum_{i,j} p(x_i, y_j) \log \frac{p(x_i, y_j)}{p(x_i)p(y_j)} \quad (3.19)$$

MRMR アルゴリズムの目的は,目的変数 y に関して V_l (S の関連性) を最大化し, W_l (S の冗長性) を最小化する特徴量の最適なセット S を検出することである. V_l を最大化は選ばれた特徴量の集合 S が,目的変数 y との関連性が最大化されるように選ばれます.言い換えれば, S の中の特徴量が目的変数と強い関連性を持つことが重視される. W_l を最小化は同時に, S の中の特徴量同士の冗長性が最小化されるように選ばれる.冗長性は,選ばれた特徴量同士が相互に似ている場合に高くなる.したがって, S の中の特徴量同士が互いに独立であるか,冗長性が最小限になるように選ばれる.ここで, V_l と W_l は相互情報 I を

使用して次の式(3.20)および(3.21)に定義される.

$$V_I = \frac{1}{|S|} \sum_{x_i \in S} I(x_i, y) \quad (3.20)$$

$$W_I = \frac{1}{|S|^2} \sum_{x_i, x_j \in S} I(x_i, x_j) \quad (3.21)$$

MRMR は式(3.20),(3.21)の条件を同時に最適化することで得られる. 関連性と冗長性のバランスを取るため, 今回は関連性と冗長性を Ding ら[26]による Mutual Information Quotient (MIQ)の値を使用した特徴量の選別を行った.(MIQ 基準). 便宜上, MRMR の値が大きい特徴量の上から 3 つを基本セットとし,特徴量を 1 つずつ追加していくことで特徴量セットを作成した

MIQ 基準の MRMR は以下の式で(3.22)から算出する. 図 3.5,表 3.7 に MIQ 基準の MRMR 手法による特徴量のランク付けと MRMR 手法に基づく特徴量セットをそれぞれ示す.

$$\max_{x_i \in S^c} \frac{I(x_i, y)}{\frac{1}{|S|} \sum_{x_j \in S} I(x_i, x_j)} \quad (3.22)$$

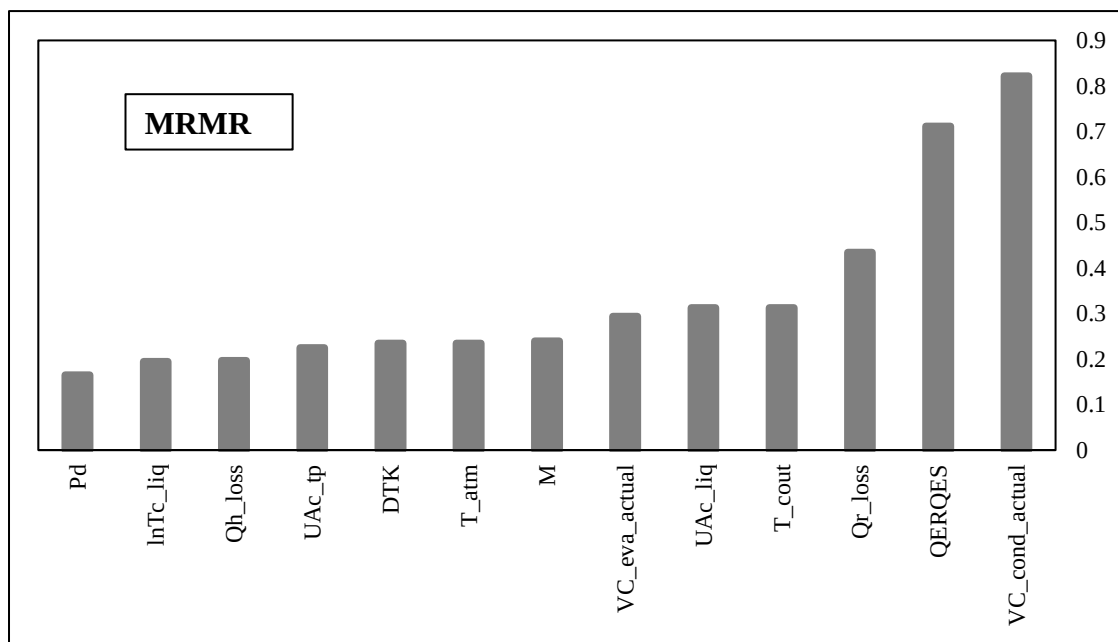


図 3.5 MIQ 基準の MRMR 手法による特徴量のランク付け

表 3.7 MRMR 手法に基づく特徴量セット

条件	特徴量セット	特徴量数
1	VC_cond_actual, QERQES, Qr_loss	3
2	条件 2 + T_cout	4
3	条件 3 + UAc_liq	5
4	条件 4 + VC_eva_actual	6
5	条件 5 + M	7
6	条件 6 + T_atm	8
7	条件 7 + DT	9
8	条件 8 + UAc_tp	10
9	条件 9 + Qh_loss	11
10	条件 10 + lnTc_liq	12
11	条件 11 + Pd	13

3.2.2 モデル評価

この研究では、モデルの性能を評価するために主な統計指標として3つの評価指標、すなわち決定係数(R^2)と二乗平均平方根誤差(root mean square error, RMSE)、残差を用いている。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (3.23)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}} \quad (3.24)$$

$$r = y_i - \hat{y}_i \quad (3.24)$$

ここでの y_i , $\hat{y}_i$, $\bar{y}$, N はそれぞれ実験データ, 予測値, 実験データの平均, サンプル数を示す。また, 決定係数は常に1より小さく, 通常は0より大きくなる。学習済みモデルを, 応答の平均に等しいモデルと比較。この定数モデルよりモデルが劣っている場合, 決定係数は負になる。平方根平均二乗誤差.RMSE は常に正であり, 単位は応答の単位に一致する。残差は応答値と予測された応答値の差である。

さらにモデルの性能評価に追加的な情報として, 予測精度以外にも, 実用的な観点から学習時間も考慮した。短い学習時間は, モデルの効率性や実用性に対する重要な指標となる。

3.2.3 データの前処理

MATLAB Regression Learner App ではデータファイルを読み込み, そこから目的変数を指定, その他すべてパラメーターを入力特徴量として使用される。同時に使用する検証スキームのタイプも指定する。機械学習では, 検証は特に重要な役割を果たす。これは, 学習されたモデルの予測能力を分析し, オーバーフィッティングを防ぐのに役立つ。今回選択した検証スキームは12分割のK分割交差検証を適用した。K分交差検証は分割数としてkを選択すると, 次の処理が行われる。①データをk個の互いに素な集合に分割する。②各検証分割についてa 学習分割観測値 (検証分割外の観測値) を使用してモデルを学習させる。b 検証分割データを使用してモデルの性能を評価する。③すべての分割について平均の検証誤差を計算する。このようにすると, データセット全体を使用して学習をさせた最終的なモデルの予測精度を適切に推定できる複数の当てはめが必要であるが, すべてのデータを効率的に使用するので, 小規模なデータセットに適している。今回は全体データの75%はトレーニング

グ用にランダムに選択され、残りのデータの 25%は汎化テスト検証に使用される。また、機械学習のモデリングを進める前に、データの標準化が必要である。標準化とは、データの平均が 0、標準偏差が 1 になるようにスケールを変更することである。標準化によって、ある特徴が他の特徴を大きく上回ることを防ぐことができる。回帰タスクでは、標準化は交互作用項を含むモデルの多重共線性の問題を削減するのに役立つ。

3.2.2 ハイパーパラメーター設定

学習させる特定のモデルのタイプを選択した後、別の詳細オプションを選択してモデルを調整する。ハイパーパラメーターの調整は機械学習アルゴリズムにおいて重要であり、その精度や収束に大きな影響を与える。

第4章 結果と考察

本章では、第 3.2.1 項で述べた実験条件下のヒートポンプサイクル実験から取得したデータにも基づき、4つの種類の入力特徴量の選定方法の違いについて考察していく。主に、モデル評価を精度指標や残差プロット、異なるデータサイズの観点から、その影響について言及する。

4.1 実験ベース手法に基づく特徴量選定

本節では、機械学習モデルの評価指標である決定係数(R^2)と二乗平均平方根誤差(RMSE)のスコア結果や、応答値から予測値との差をプロットした残差プロットの結果を用いて、実験試験に基づいた特徴量セットを入力とする予測モデルについて考察する。

4.1.1 モデル評価指標

実験条件に基づいた特徴量セットのヒートポンプ性能予測における、ハイパーパラメータの値を表 4.1、モデルの評価指標を表 4.2 に示す。また図 4.1 にヒートポンプ性能予測に対する異なる学習モデルの評価指標比較を示す。

モデルの評価指標グラフから、実験ベース手法による特徴量セットでは、ステップワイズ線形モデルがトレーニング及びテストのスコア結果が最も高いことが分かった。トレーニング結果と比べてテスト結果が低い場合、その差が大きいときは汎化性能の低下が考えられ、過学習の可能性がある。今回は R^2 と MRSE 共に差が小さいので、最も新たなデータに対して高い予測精度を有していると考えられる。一方で条件 2,3,4,6 にみられるようにトレーニング結果と比べてテスト結果が高い場合、単純に汎化性能が高いと思われる。つまり新たなデータに対して適用できている。しかし、どのモデルも条件 1 の結果より低く、SVM モデルは一段とスコアが低下した。

テスト結果に重点を置いたとき、ガウス過程回帰の R^2 が 0.9312、RMSE が 0.049694 とステップワイズ線形の 0.93416、0.048614 の次にスコアが高く、その差も小さいとわかる。また条件 3～6 からスコアの差が大きくなっている。

表 4.1 ハイパーパラメーターの値

Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定	ロバスト線形
	項 ロバストオプション	線形 オン
ステップワイズ線形	事前設定	ステップワイズ線形
	初期項	線形
	項の上限	交互作用
	最大ステップ数	1000
RT	事前設定	複雑な木
	最小リーフサイズ	4
	代理決定分岐	オフ
SVM	事前設定	2 次 SVM
	カーネル関数	2 次
	カーネルスケール	自動
	ボックス制約	自動
	イプシロン	自動
	データの標準化	はい
GPR	事前設定	Matern 5/2GPR
	基底関数	定数
	カーネル関数	Matern 5/2
	等方性カーネルを使用	はい
	カーネルスケール	自動
	信号標準偏差	自動
	シグマ	自動
	データの標準化	はい
	数値パラメーターの最適化	はい
アンサンブル	事前設定	バギング木
	最小フリーサイズ	8
	学習器の数	30
	サンプリングする特徴量数	すべて選択

表 4.2 モデルの評価指標

condition	model	train		test	
		RMSE	R ²	RMSE	R ²
1	Stepwise	0.032102	0.95904	0.048614	0.93416
2	GRP	0.06515	0.83129	0.049694	0.9312
3	RT	0.053679	0.88547	0.055469	0.91428
4	BT	0.063815	0.83814	0.059896	0.90005
5	Liner	0.044144	0.92254	0.063343	0.88821
6	SVM	0.073763	0.78374	0.081017	0.81713

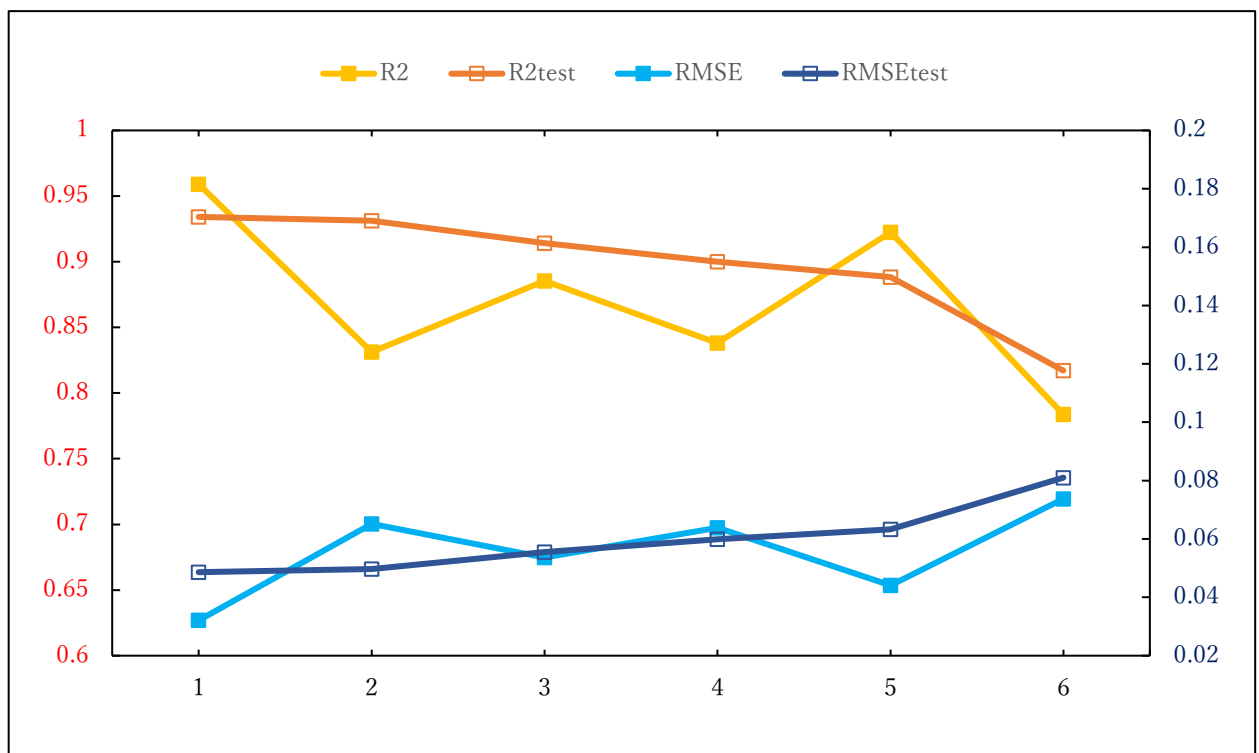


図 4.1 ヒートポンプ性能予測に対する異なる学習モデルの評価指標比較

4.1.2 残差プロット

推定されたヒートポンプ性能の予測値と実際のデータとの差をプロットした残差プロットの各種学習モデルである.図 4.2.a にステップワイズ線形モデル, 図 4.2.b にガウス過程回帰モデル, 図 4.2.c に回帰木モデル, 図 4.2.d にバギング木モデル, 図 4.2.e に線形回帰モデル, 図 4.2.f にサポートベクターマシンモデルの残差プロットを示す. 青色で四角のマークがトレーニングデータによる残差, 赤色で三角のマークがテストデータによる残差を表している.

図 4.2.a を見てみるとトレーニング及びテストの残差が大体 5 %以内にクラスタしており,ばらつきが小さい.またトレーニングデータの最大残差が 0.135,テストデータの最大誤差が 0.111 であるため,ステップワイズ線形モデルは 15%以内の予測精度であると分かる.ばらつきが小さいことから,トレーニングの残差 0.135 とテストの残差 0.111 と 0.092 は外れ値であると考えられる.

図 4.2.b , 図 4.2.c を見てみると全体の残差プロットに分散均一性があり,テストの残差を見れば 10%以内の予測精度があるものの, 5% を超えるようなクラスタが多くあることが分かる.ガウス過程回帰においては,トレーニングの残差-0.190 が外れ値であると考えられる.

図 4.2.d , 図 4.2.f ではサンプル番号の 1~10 に大きなばらつきが集中しており,サンプル番号 10 以降も 5%を超えるようなクラスタが多くあることが分かる.この偏ったばらつきは学習モデルの改善の余地があるということである.さらにサポートベクターマシンモデルに関してはトレーニングの残差-0.260 と非常に大きな外れ値もあり,この外れ値も同様にモデル改善が必要であることがいえる.

図 4.2.e を見てみると,サンプル番号 13 からは残差が 5%以内にクラスタしており,ステップワイズ線形モデルと同じ特性が見られる.しかし,サンプル番号の 1~13 に大きなばらつきが集中していることから,項 4.1.1 で示されたモデル性能指数の低減はこの偏ったばらつきが寄与していると考えられる.

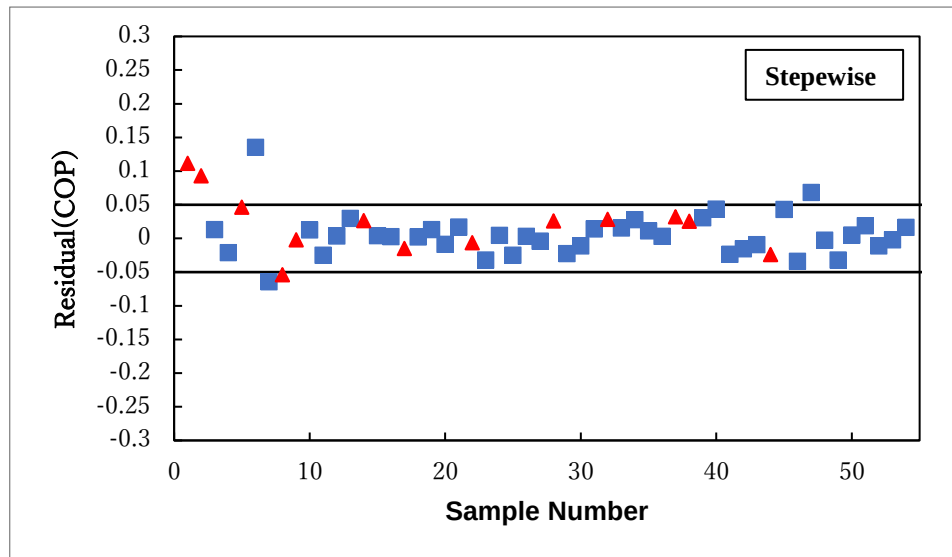


図 4.2.a ステップワイズ線形の残差プロット

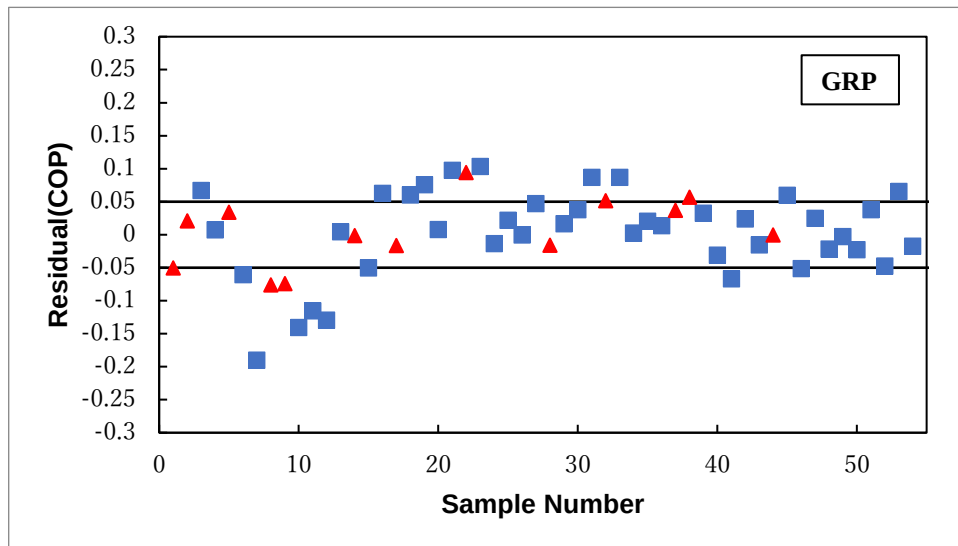


図 4.2.b ガウス過程回帰の残差プロット

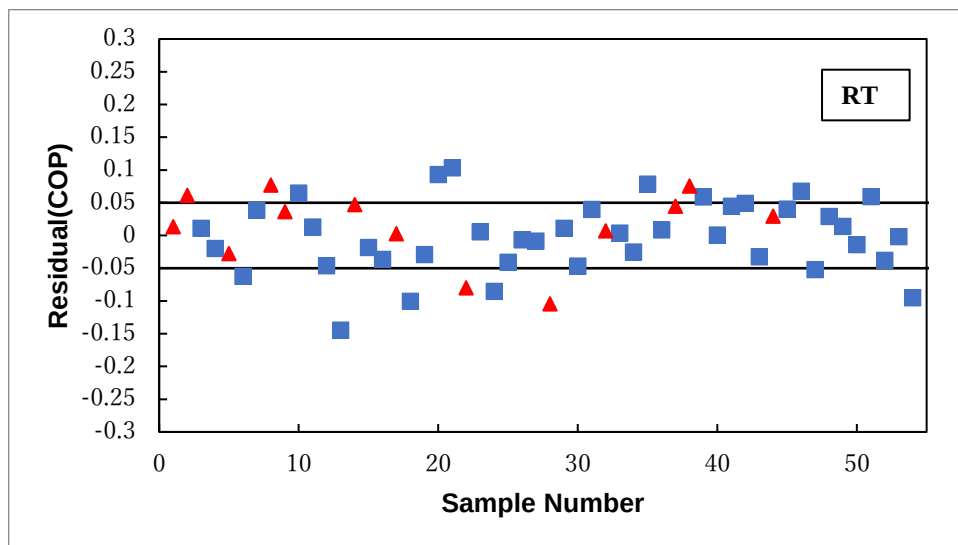


図 4.2.c 回帰木の残差プロット

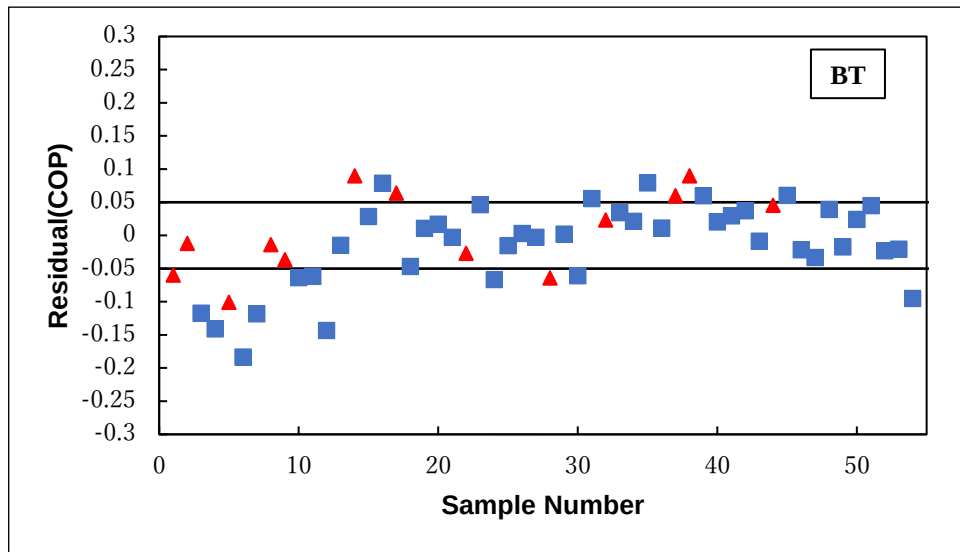


図 4.2.d バギング木の残差プロット

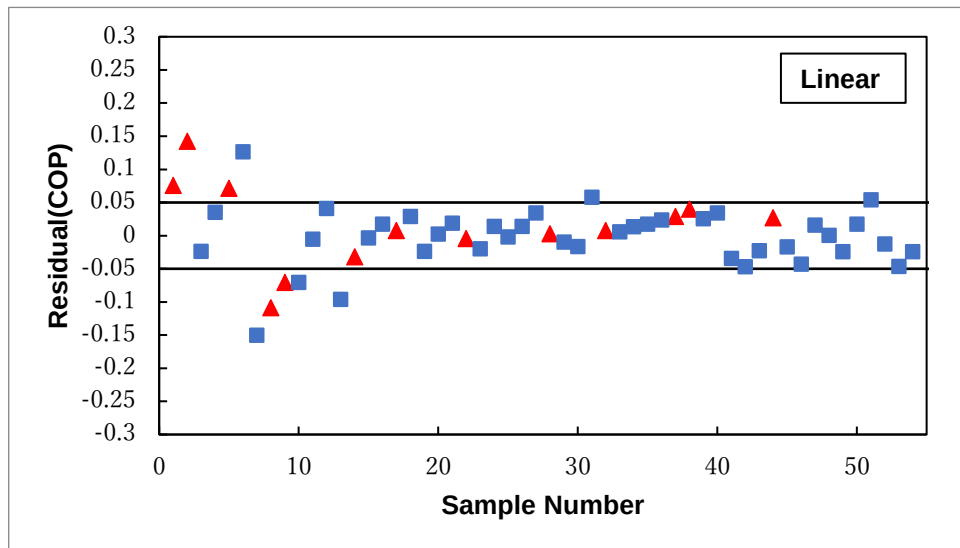


図 4.2.e 線形回帰の残差プロット

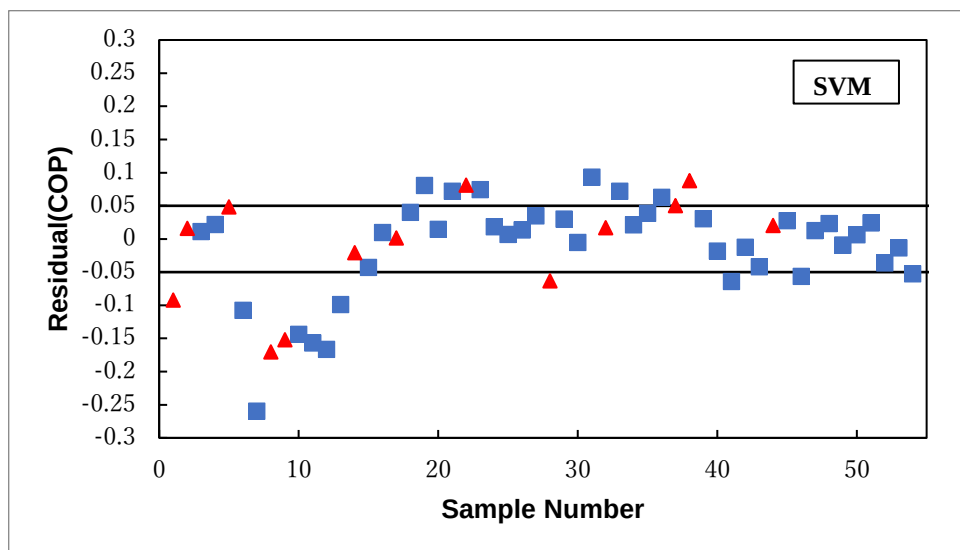


図 4.2.f サポートベクターマシンの残差プロット

4.1.3 データサイズ

表 4.3 にデータサイズの増減に対する学習時間の影響と、各データサイズにおいて、表 4.1 で示したハイパーパラメーターと異なったものだけを表 4.4 に示す。また図 4.3 にデータサイズの増減に対するモデル性能指標の影響を示し、図 4.3.a~f にステップワイズ線形モデル、ガウス過程回帰モデル、サポートベクターマシンモデル、線形回帰モデル、回帰木モデル、バギング木モデルをそれぞれ示す。

表 4.3 からステップワイズ線形モデルがトレーニングデータからモデルに学習させる時間が最もかかった。これはステップワイズ線形モデルが初期モデルから学習を開始して、徐々により大きいまたはより小さいモデルの説明能力を比較していくためであると考えられる。また、データサイズの増加の影響も他のモデルと比べて大きい。一方でガウス過程回帰モデルやサポートベクターマシンモデル、線形回帰モデル、回帰木モデルやバギング木モデルは学習に有する時間は小さく、データサイズの変化にもあまり影響は受けない。

次に図 4.3.a からステップワイズ線形モデルの性能指標はデータサイズの影響は比較的小さいと考えられ、データサイズが 260~390 はトレーニング及テスト結果のスコアがわずかに上昇した。後の 540~650 はデータサイズの増加に伴い、トレーニング結果が上昇したがテスト結果が低下した。これは、データサイズが増えたことによるモデルの複雑さが増したことが寄与していると考えられ、過学習が起きている可能性がある。図 4.3.b ,c ,e ,f からデータサイズが 390 の時に R^2 と MRSE のスコアがピークとなり、それ以降はデータサイズが増えるとともに低下していった。ステップワイズ線形モデルと同様にモデルの複雑さによる過学習が考えられる。図 4.3.d からテスト結果においてデータサイズが 260 の時ピークだったが、一方でトレーニング結果がとても悪いことから、このサイズは適していないと考える。

以上のことから、実験ベース特徴量セットのヒートポンプ性能予測に対するデータサイズは 390 が適していると考えられる。

表 4.3 データサイズによる学習時間の影響

DATA SIZE	Learning Time					
	Stepwise	GRP	SVM	Liner	RT	BT
260	25.407	1.9654	2.5356	3.0878	0.69602	4.6601
390	29.971	2.4899	1.4099	5.1025	0.94399	4.6605
520	38.955	1.847	1.3885	1.7588	0.74913	3.8295
650	49.472	1.6846	0.94765	1.9448	1.727	4.3454

表 4.4 各データサイズのハイパーパラメーターの値

データサイズ		260	
Model		ハイパーパラメーター	
線形回帰		事前設定 項	交互作用線形 線形
GPR		ロバストオプション 事前設定 カーネル関数	オフ 二乗指数 GPR 二乗指数
データサイズ		390	
Model		ハイパーパラメーター	
線形回帰		事前設定 項	線形 線形
GPR		ロバストオプション 事前設定 カーネル関数	オフ 二乗指数 GPR 二乗指数
SVM		事前設定 カーネル関数	線形 SVM 線形
データサイズ		520	
Model		ハイパーパラメーター	
GPR		事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数

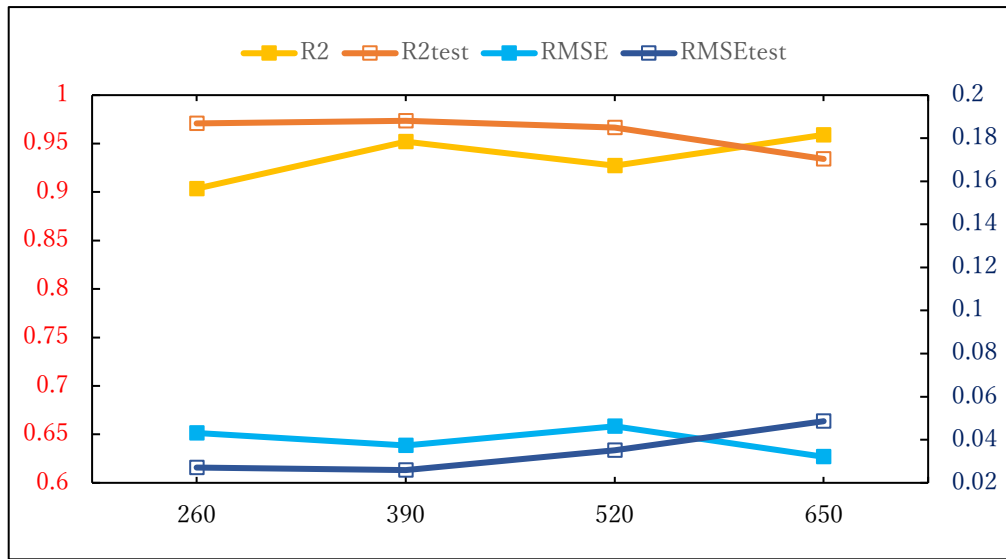


図 4.3.a ステップワイズ線における各データサイズの評価指標

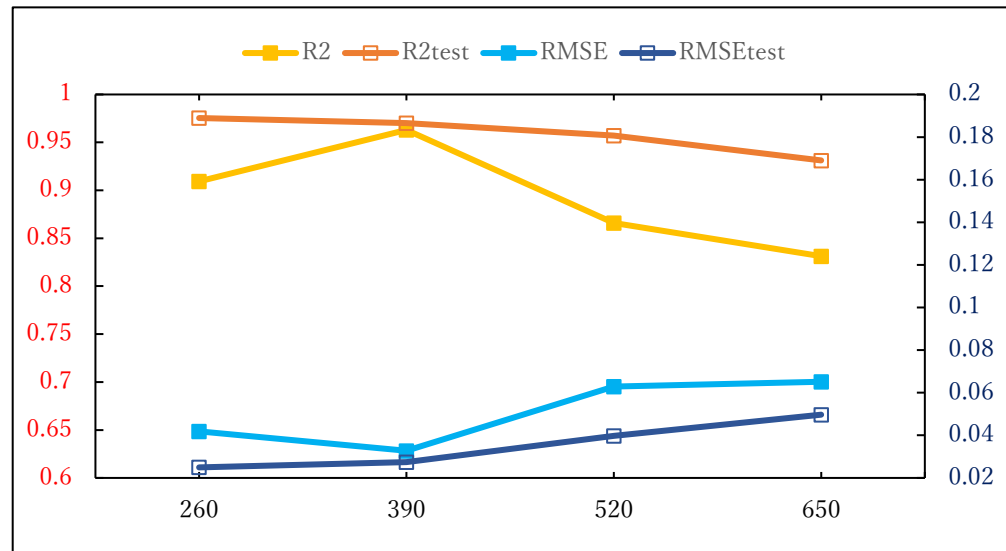


図 4.3.b ガウス過程回帰における各データサイズの評価指標

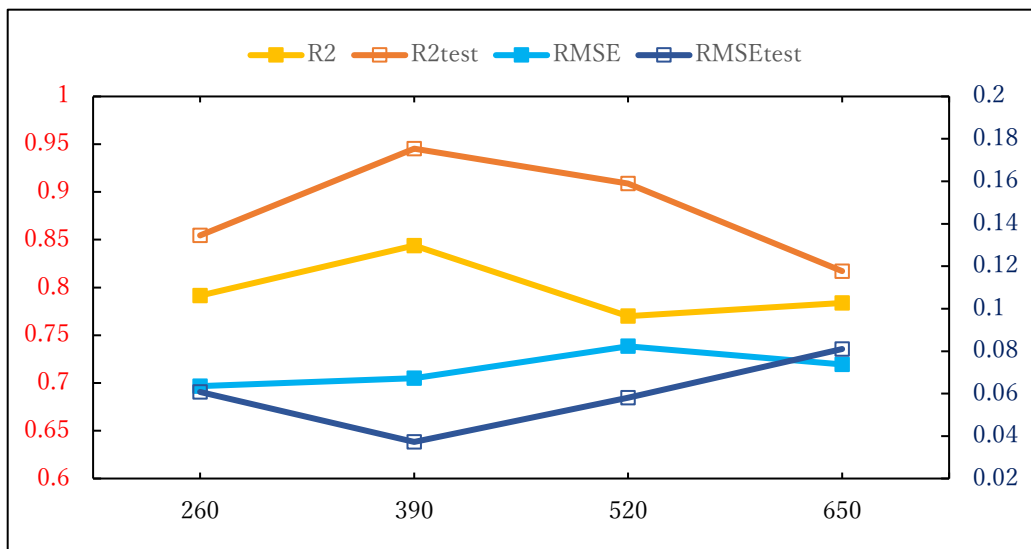


図 4.3.c サポートベクターマシンにおける各データサイズの評価指標

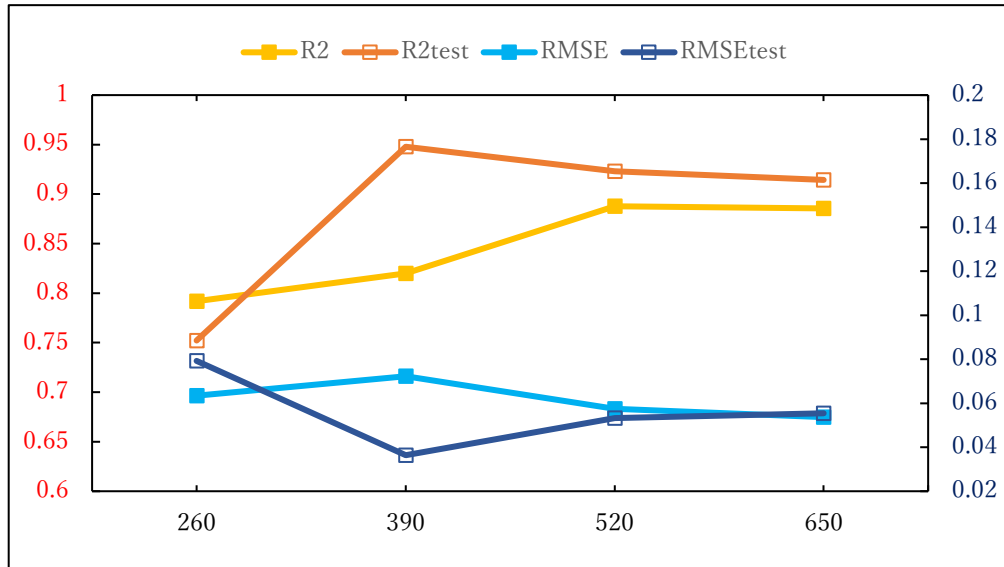


図 4.3.d 線形回帰における各データサイズの評価指標

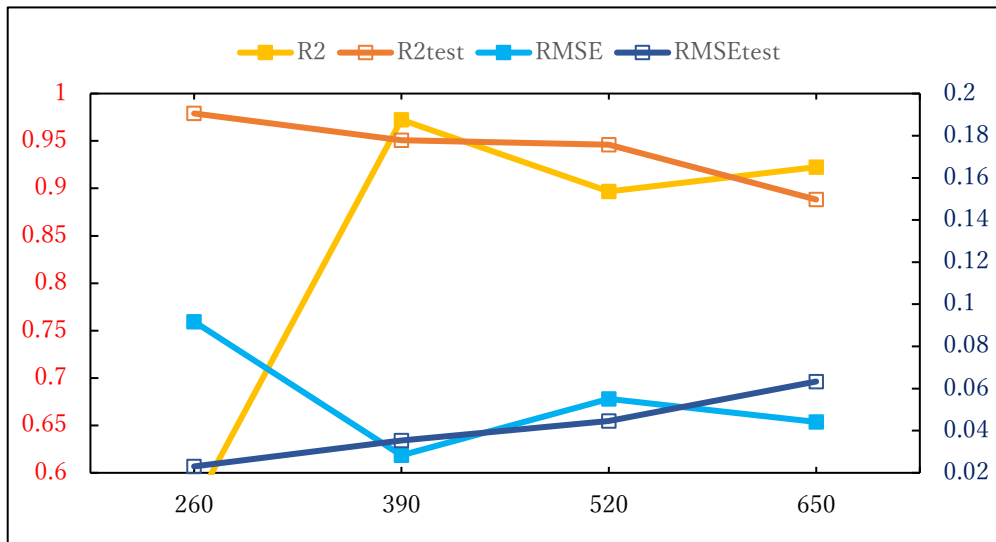


図 4.3.e 回帰木における各データサイズの評価指標

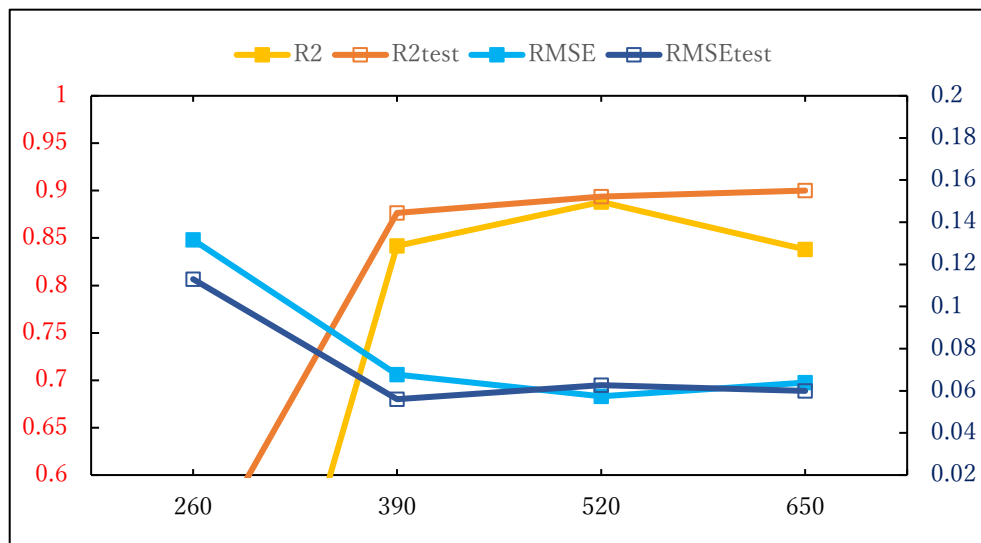


図 4.3.f バギング木における各データサイズの評価指標

4.2 測定データに基づく特徴量選定

本節では、機械学習モデルの評価指標である決定係数(R^2)と二乗平均平方根誤差(RMSE)のスコア結果や、応答値から予測値との差をプロットした残差プロットの結果を用いて、サイクル実験から収集した特徴量と実験ベースの特徴量との組み合わせによる、さまざまな特徴量セットを入力とする予測モデルについて考察する。

4.2.1 モデル評価指標

実験ベースの特徴量と測定データに基づいた特徴量セットの組み合わせによるヒートポンプ性能予測における、ハイパーパラメーターの値を表 4.1 で示した値と異なったものだけを表 4.5、モデルの評価指標を表 4.6 に示す。また図 4.4 にヒートポンプ性能予測に対する異なる特徴量セットの評価指標比較を示す。

図 4.4 を見てみると、実験ベースの特徴量セットに異なる 2 つの測定特徴量を追加していた場合は、凝縮器及び蒸発器の出口温度セットが性能指標のスコア結果が良かった。要因としては、ヒートポンプ性能が熱交換器の熱負荷を圧縮機仕事で除して算出するため、予測したいヒートポンプ性能の目的変数と熱交換器出口温度の説明変数に線形的な関係が予測に対して強く影響したことが考えられる。また、この条件での学習モデルがステップワイズ線形と、線形の予測子がモデルパラメーターに含まれており、線形的な関係を仮定しているモデルであったことから説明がつく。つまり線形関係の熱交換器出口温度はヒートポンプ性能予測に有効な特徴量と考えられる。

他方で、条件 3 においては評価指標の R^2 と MRSE の両方が一段と低いことが分かる。同様にテスト結果において、凝縮器側熱源水流量と蒸発器側熱源水流量の特徴量を含む条件 6 も条件 5 と比べてスコアが低減している。凝縮器側熱源水流量と蒸発器側熱源水流量は実験ベースの特徴量セットとは適さない可能性がある。

条件 1,2 から圧縮機出入口圧力、インバータ入力と圧縮機出口温度の特徴量セットの順にテスト結果の上昇が見られる。さらに、インバータ入力と圧縮機出口温度の特徴量セットにおいては最も有効な熱交換器出口温度ともわずかにスコアが低いだけである。測定データに基づく特徴量のみの条件 7 の結果が最も高かったのは、性能予測に有効な熱交換器出口温度と、その次に有効なインバータ入力と圧縮機出口温度の特徴量が入力されたからと考える。

条件 8 から入力特徴量の数が増加するにつれて、スコアが良くなる傾向がある。より多く

の入力特徴量が適合するモデルの予測能力を高める可能性が高い。

以上から実験ベースの特徴量セットとの組み合わせは熱交換器出口温,そして評価指標では測定データに基づく特徴量のみのセットが適していると分かる。

表 4.5 ハイパーパラメーターの値

条件 1・条件 6		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定	線形
	項	線形
	ロバストオプション	オフ
条件 2		
Model	ハイパーパラメーター	
GPR	事前設定	二乗指数 GPR
	基底関数	定数
	カーネル関数	二乗指数
	等方性カーネルを使用	はい
	カーネルスケール	自動
	信号標準偏差	自動
	シグマ	自動
	データの標準化	はい
	数値パラメーターの最適化	はい
条件 3・条件 4・条件 7		
Model	ハイパーパラメーター	
ステップワイズ線形	事前設定	ステップワイズ線形
	初期項	線形
	項の上限	交互作用
	最大ステップ数	1000
条件 5・条件 8		
Model	ハイパーパラメーター	
GPR	事前設定	二乗指数 GPR
	基底関数	定数
	カーネル関数	二乗指数
	等方性カーネルを使用	はい
	カーネルスケール	自動
	信号標準偏差	自動
	シグマ	自動
	データの標準化	はい
	数値パラメーターの最適化	はい

表 4.6 モデルの評価指標

condition	model	train		test	
		RMSE	R ²	RMSE	R ²
1	Liner	0.037922	0.94645	0.033207	0.9642
2	GRP	0.07593	0.78532	0.027647	0.97518
3	Stepwise	0.047003	0.91774	0.045203	0.93365
4	Stepwise	0.031833	0.96227	0.024233	0.98093
5	GRP	0.069044	0.82249	0.021248	0.98534
6	Liner	0.020442	0.98444	0.027866	0.97479
7	Stepwise	0.012448	0.99423	0.009209	0.99725
8	GRP	0.012805	0.99389	0.014384	0.99328

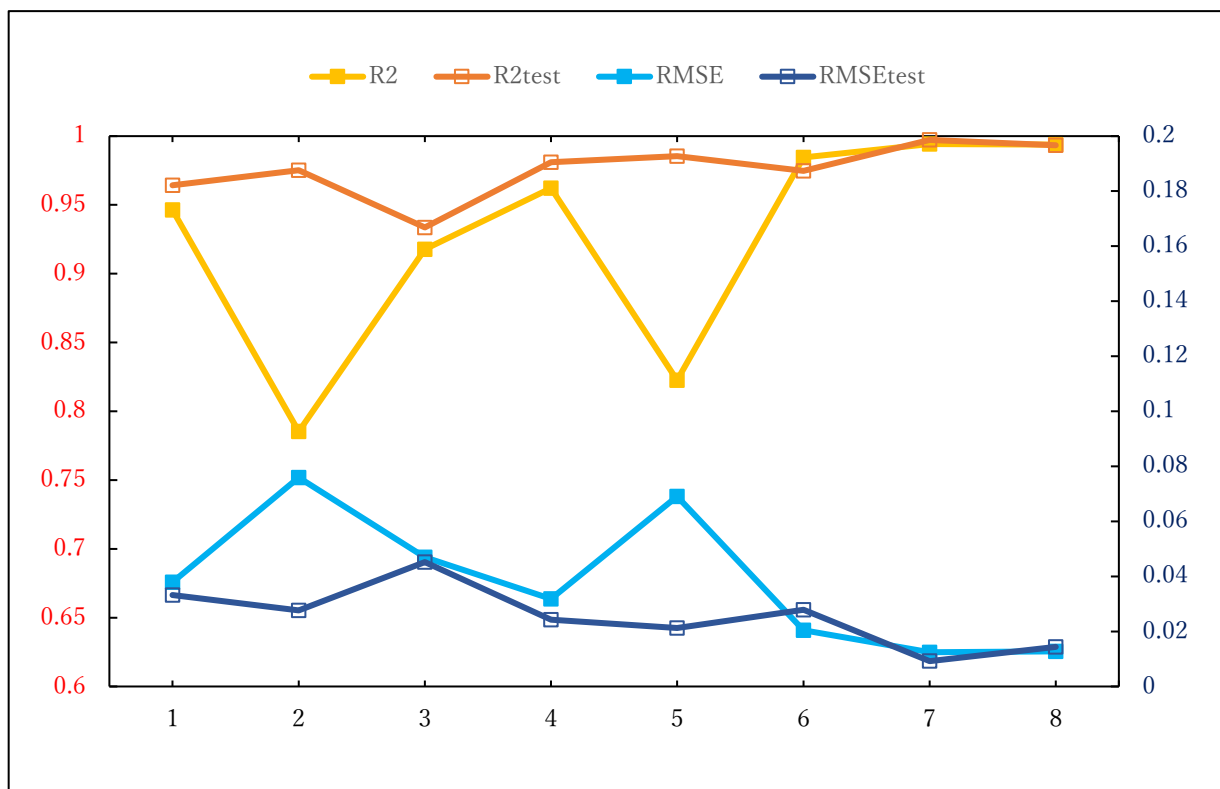


図 4.4 ヒートポンプ性能予測に対する異なる学習モデルの評価指標比較

4.2.2 残差プロット

図 4.5.a~h に条件 1~8 の残差プロットを示す.青色で四角のマーカがトレーニングデータによる残差,赤色で三角のマーカがテストデータによる残差を表している.

図 4.5.a~d を見てみると,条件 4, 条件 2, 条件 1, 条件 3 の順でトレーニング及びテストの残差が大きくクラスタしており,項 4.2.1 で示した評価指標と同様の結果を表している.トレーニング結果において,条件 1~3 にはサンプル番号 6 に 0.145, 0.177,0.197 と非常に大きな外れ値が存在していることが分かる.また,サンプル番号の前半に大きなばらつきが集中して偏っており,モデル改善の余地があると考ええる.しかし,条件 4 は小さい外れ値はあるものの,全体的に均等にクラスタしていることが分かる.トレーニングの残差において,最大誤差も -0.095 とモデル予測精度が 10%であり,テストの残差では約 5%の精度を有している.

図 4.5.e, f を見てみると,条件 5 は条件 1~3 と同様の大きな外れ値があるが,テスト結果の残差ではほとんど $\pm 5\%$ 以内であることから,汎化性能が高いと考えられる.一方で,条件 6 は全体的にばらつきが小さい,かつ残差に分散均一性がある.しかし,テストの残差はトレーニングの残差と比べてばらつきが大きくなってしまっており,汎化性能の低下が見られる.これは, 項 4.2.1 で述べた予測に適していない特徴量の凝縮器側熱源水流量と蒸発器側熱源水流が入力されたことが要因と考える.

図 4.5.g, f を見てみると,条件 7,8 はばらつきが非常に小さく,ばらつきの偏りや外れ値がないことから,ヒートポンプ性能予測が正確にできていると考えられる.またトレーニング結果及びテスト結果の残差が 5%以内の精度である. 条件 7 では凝縮器側熱源水流量と蒸発器側熱源水流が入力されているが,性能予測に適している凝縮器及び蒸発器の出口温度セットとインバータ入力・圧縮機出口温度セットがそれ以上に予測に対して影響を与えたと考える. 条件 8 では項 4.2.1 で示したように,入力特徴量が増えることでモデルの予測能力を高めたと考える.

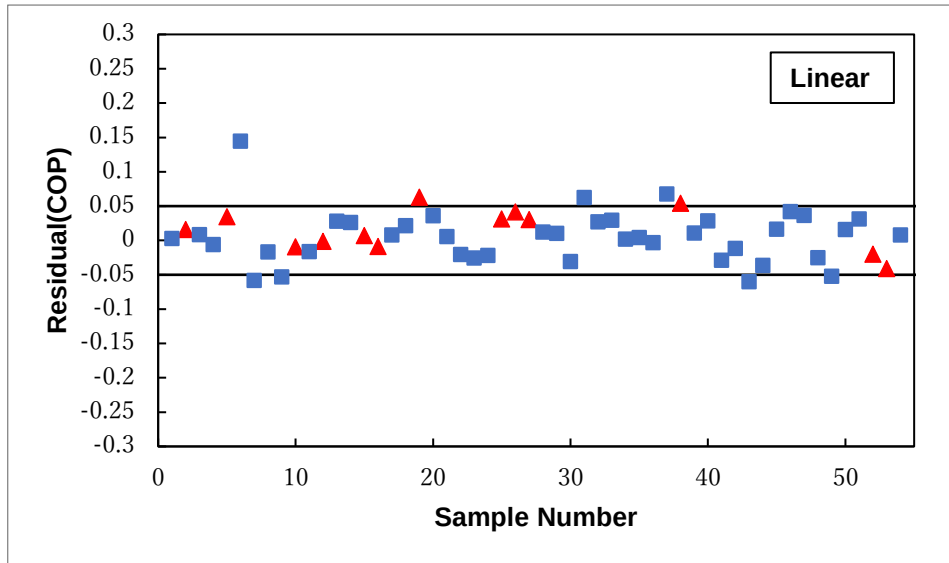


図 4.5.a 線形回帰の残差プロット

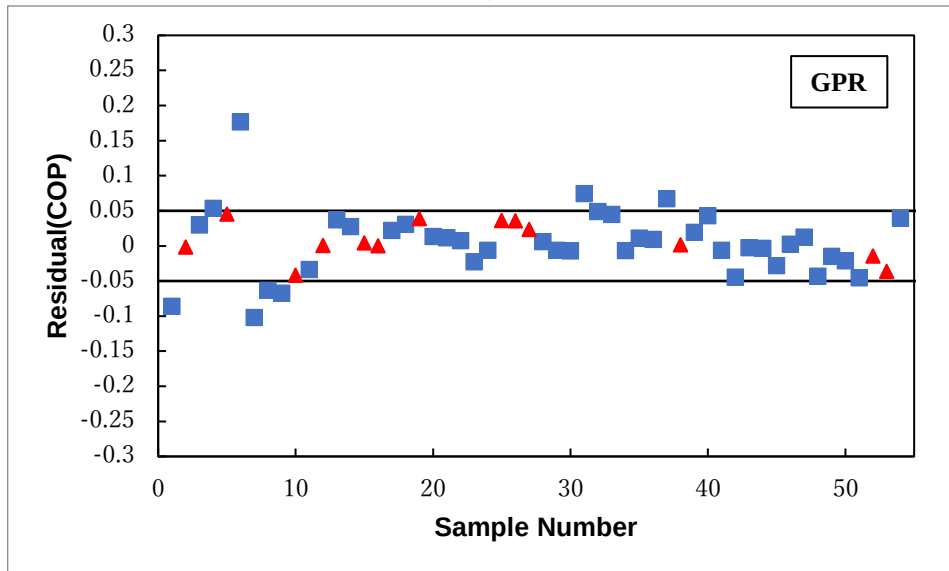


図 4.5.b ガウス過程回帰の残差プロット

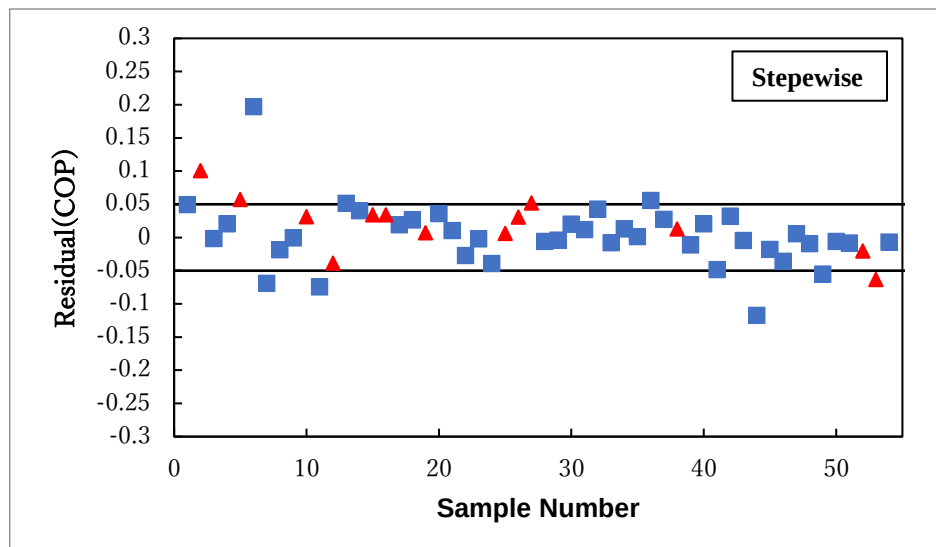


図 4.5.c ステップワイズ線形の残差プロット

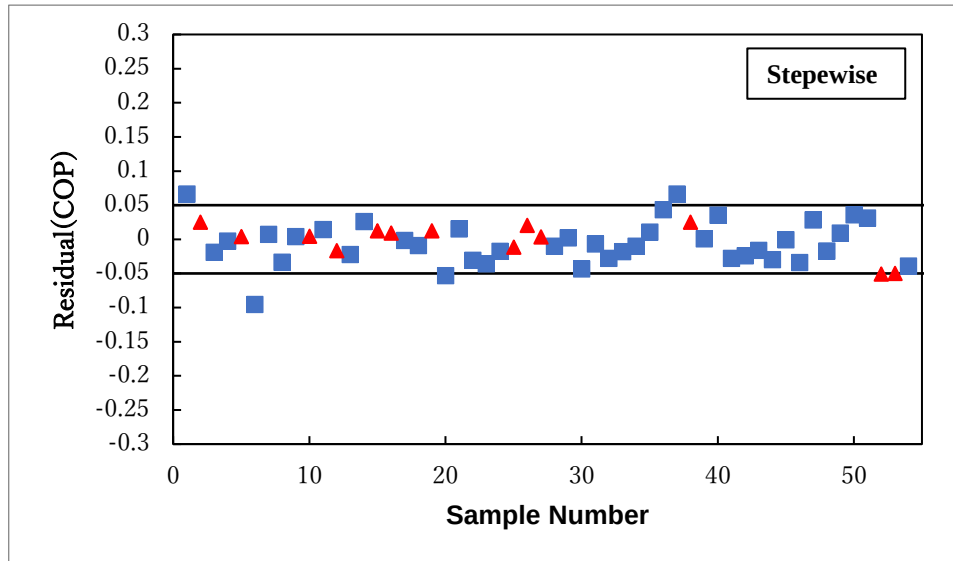


図 4.5.d ステップワイズ線形の残差プロット

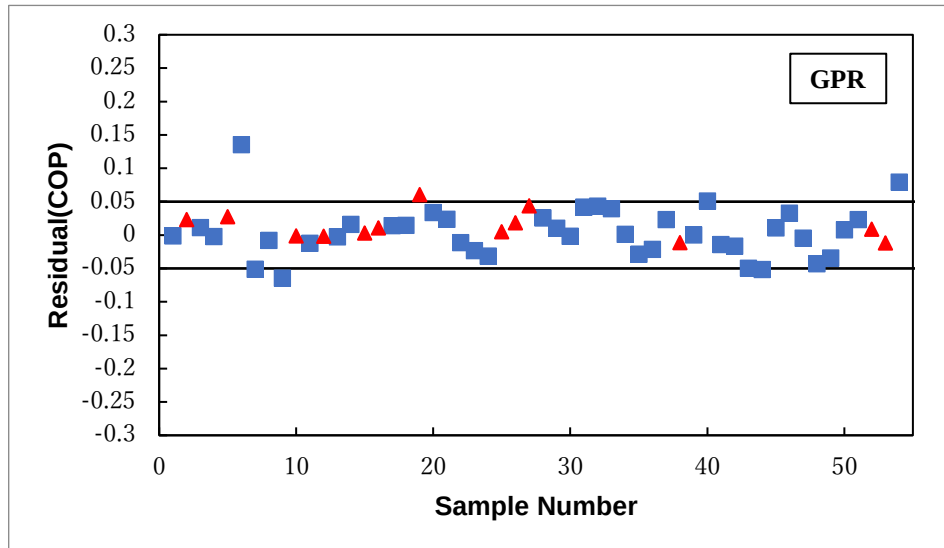


図 4.5.e ガウス過程回帰の残差プロット

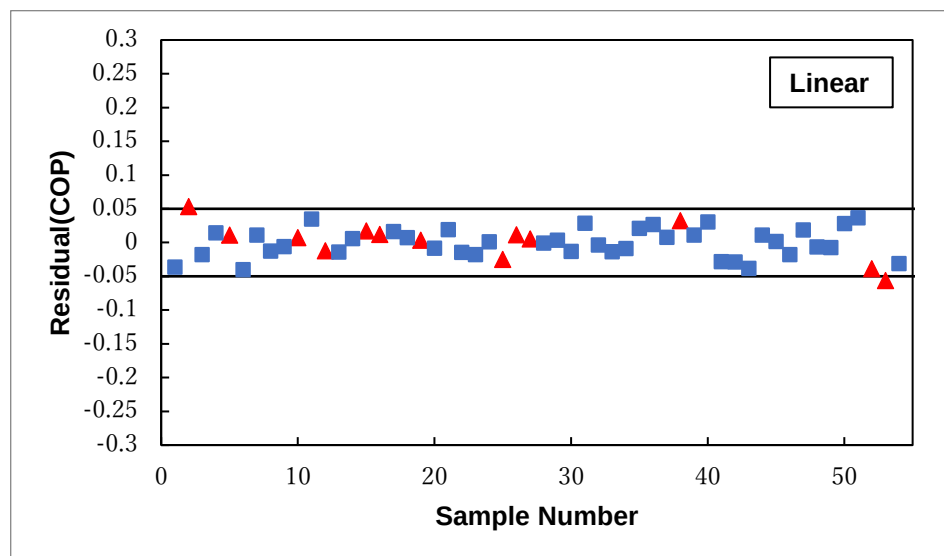


図 4.5.f 線形回帰の残差プロット

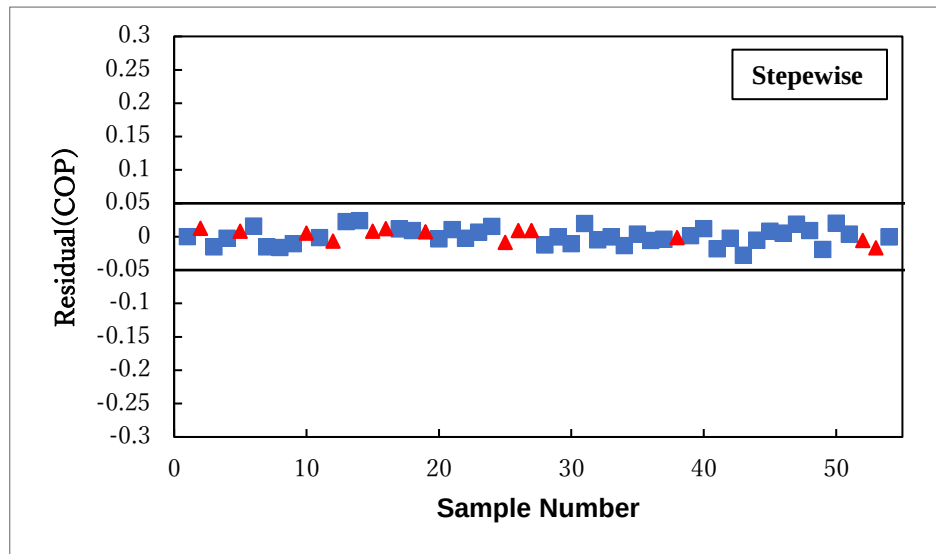


図 4.5.g ステップワイズ線形の残差プロット

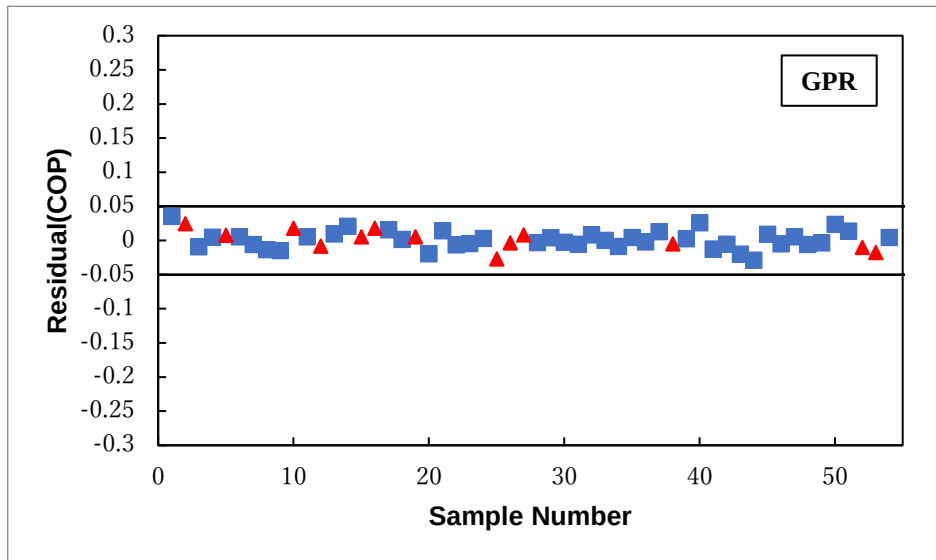


図 4.5.f ガウス過程回帰の残差プロット

4.2.3 データサイズ

ここでは、項 4.2.1 で熱交換器出口温度が実験ベースの特徴量セットとの組み合わせに適していると示した条件 4 と、最も評価指標が高かった条件 7 を重点に置いた。

表 4.7.a, 表 4.7.b に条件 4, 条件 7 のデータサイズの増減に対する学習時間の影響と、各データサイズにおいて、表 4.1.1 で示したハイパーパラメーターと異なったものだけを表 4.8.a, 表 4.8.b に示す。さらに図 4.6, 図 4.7 に条件 4, 条件 7 のデータサイズの増減に対するモデル性能指標の影響を示し、図 4.6.a~f, 図 4.7. a~f にステップワイズ線形モデル、ガウス過程回帰モデル、サポートベクターマシンモデル、線形回帰モデル、回帰木モデル、バギング木モデルをそれぞれ示す。

条件 4 において、表 4.7.a から項 4.1.3 で述べたようにステップワイズ線形モデルが最も学習時間が長かった。次に、図 4.6.a~f からデータサイズが最も少ない 250 場合にステップワイズ線形とサポートベクターマシン、バギング木は評価指標が低い結果となった。データサイズが増えるとそれに伴い上昇した。一方で、ガウス過程回帰と線形回帰、回帰木はデータサイズに大きく影響を受けなかった。サポートベクターマシンと回帰木を除いたモデルは全体を通して、データサイズが 590 の時に R^2 と MRSE の両方の結果がピークであった。

次に条件 7 において、条件 4 と同様にステップワイズ線形モデルが最も学習時間が長い結果となった。続いて図 4.7. a~f から、ステップワイズ線形とガウス過程回帰と線形回帰はデータサイズの増減に影響されず、非常に高いスコア結果であった。サポートベクターマシンはデータサイズが小さいときと大きいときはそれぞれでスコアの低下が見られ、条件 4 と似た結果となっている。加えて、回帰木とバギング木はデータサイズが小さいときの条件下では性能予測には適していないとわかる。最後に全体を通して、評価指標が各種モデルで高い結果だったのは、モデルのアルゴリズムより入力特徴量がヒートポンプ性能予測に有効な特徴量が多かったからだと考える。また、条件 7 は各データサイズが 80 と、差の変化が小さいことも要因の一つだと考える。

表 4.7.a 条件 4 におけるデータサイズによる学習時間の影響

DATA SIZE	Learning Time					
	Stepwise	GRP	SVM	Liner	RT	BT
250	25.654	3.7174	1.3648	2.9524	0.88149	4.1437
420	42.128	0.81445	1.737	5.4012	0.84689	3.1603
590	49.144	1.5316	1.3613	1.4734	0.70836	2.8683
760	51.715	3.8044	4.0614	6.191	3.0151	4.9117

表 4.8.a 条件 4 における各データサイズのハイパーパラメーターの値

データサイズ		250	
Model		ハイパーパラメーター	
線形回帰		事前設定 項	交互作用線形 線形
GPR		事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数
SVM		事前設定 カーネル関数	3 次 SVM 3 次
データサイズ		420	
Model		ハイパーパラメーター	
線形回帰		事前設定 項	線形 線形
GPR		事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数
データサイズ		760	
Model		ハイパーパラメーター	
線形回帰		事前設定 項	線形 線形
SVM		事前設定 カーネル関数	3 次 SVM 3 次

表 4.7.b 条件 7 におけるデータサイズによる学習時間の影響

DATA SIZE	Learning Time					
	Stepwise	GRP	SVM	Liner	RT	BT
240	7.8191	0.83329	0.78656	5.9077	0.81239	2.1466
320	8.8767	1.0977	0.74307	5.7567	0.69315	7.1199
400	10.886	0.89173	0.72518	0.89173	0.98282	2.1228
480	14.095	3.9903	1.7206	3.5922	2.2605	3.8329

表 4.8.b 条件 7 における各データサイズのハイパーパラメーターの値

データサイズ 240		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定 項	線形 線形
SVM	事前設定 カーネル関数	線形 SVM 線形
データサイズ 320		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定 項	線形 線形
SVM	事前設定 カーネル関数	3 次 SVM 3 次
RT	事前設定 最小リーフサイズ	中程度の木 12
データサイズ 400		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定 項	線形 線形
GPR	事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数
SVM	事前設定 カーネル関数	3 次 SVM 3 次

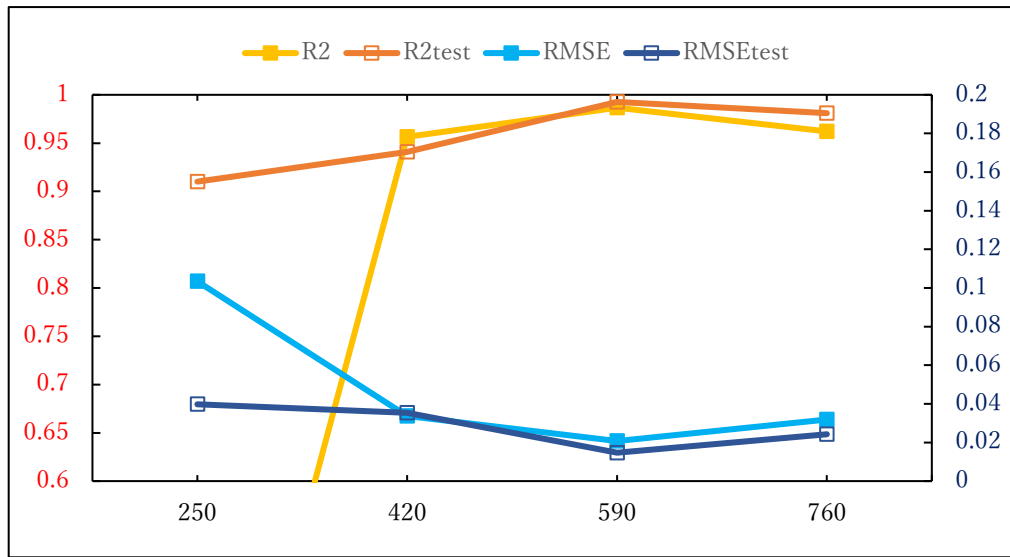


図 4.6.a ステップワイズ線における各データサイズの評価指標

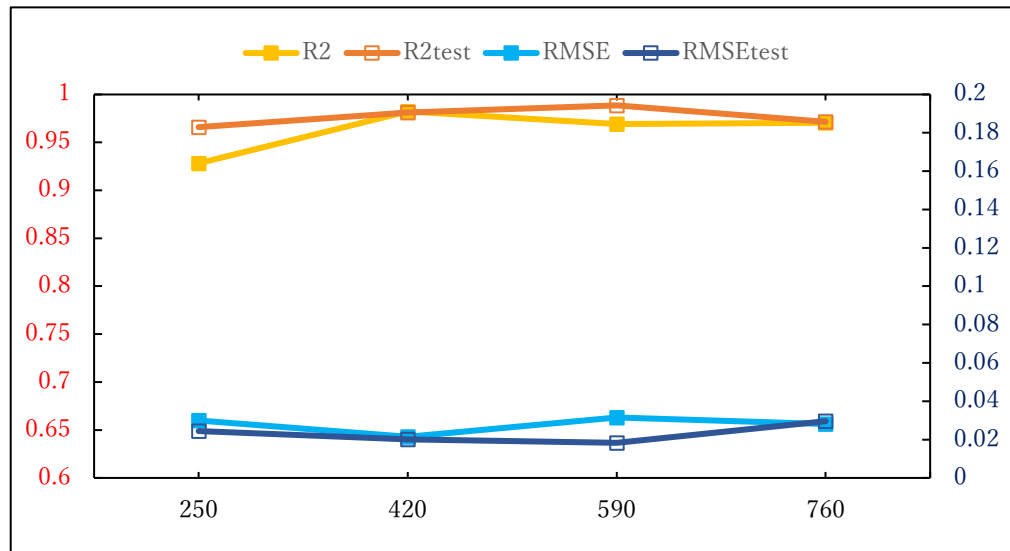


図 4.6.b ガウス過程回帰における各データサイズの評価指標

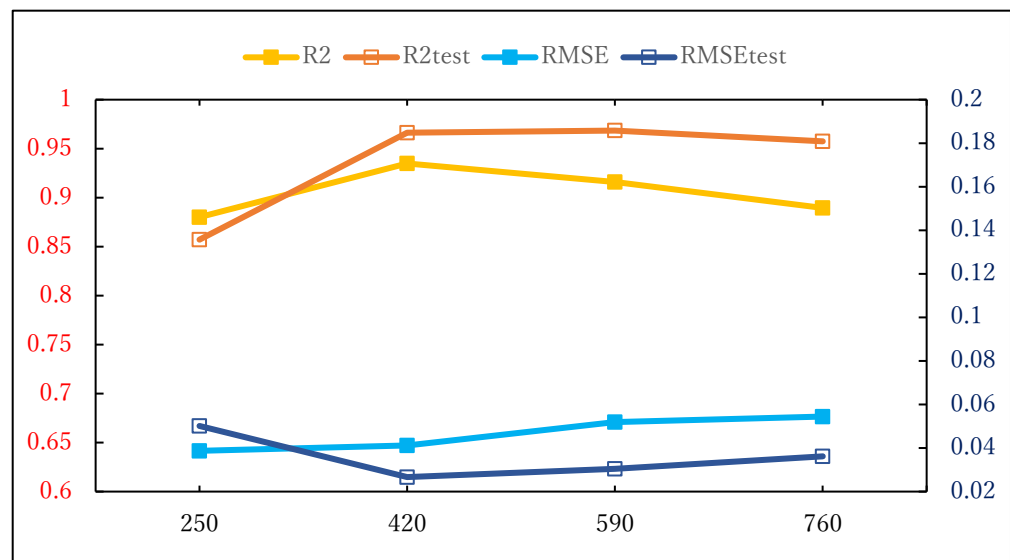


図 4.6.c サポートベクターマシンにおける各データサイズの評価指標

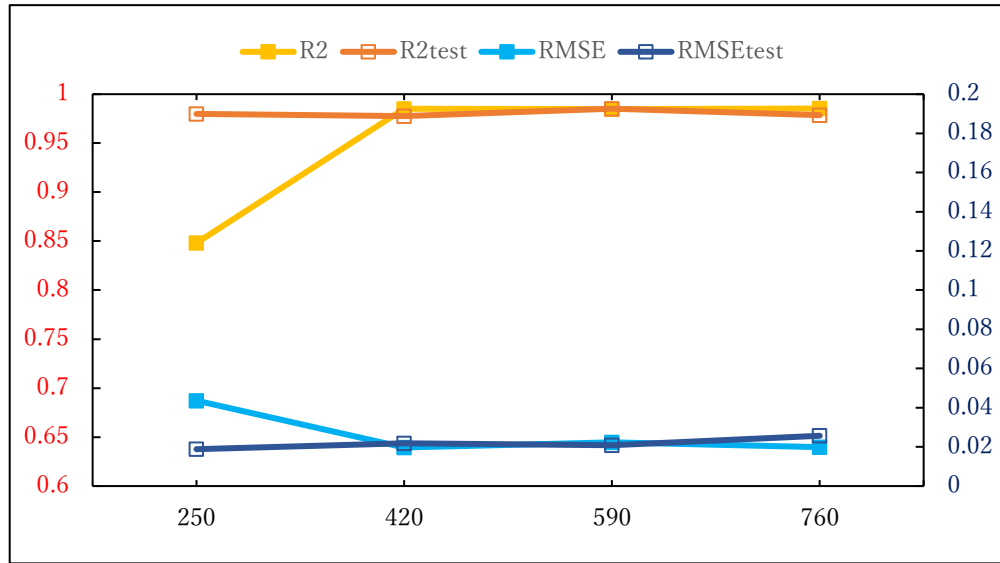


図 4.6.d 線形回帰における各データサイズの評価指標

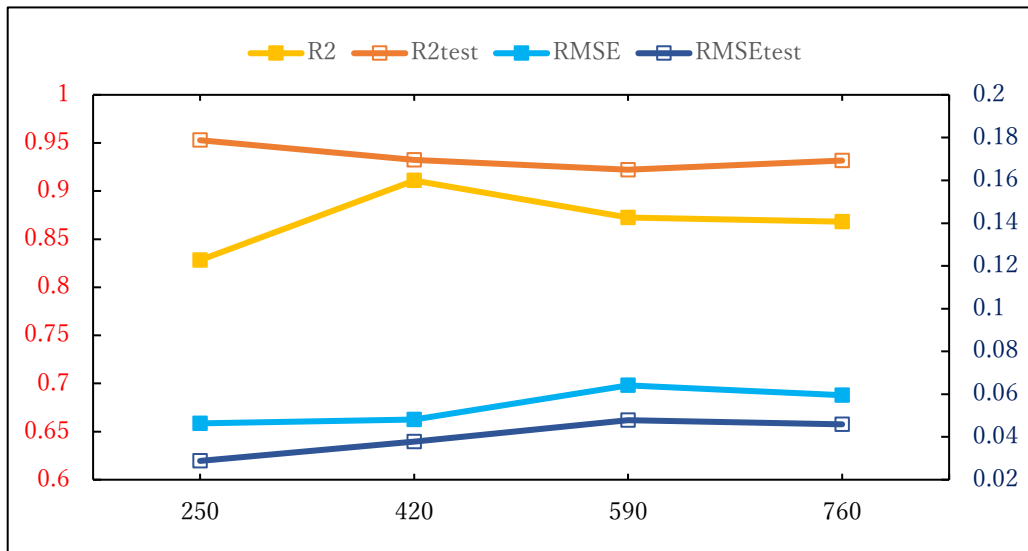


図 4.6.e 回帰木における各データサイズの評価指標

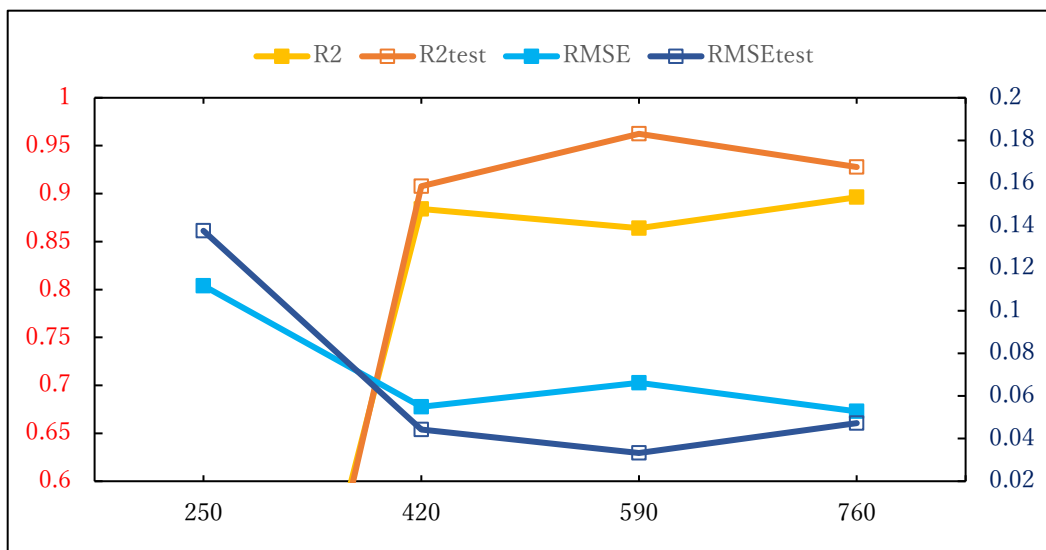


図 4.6.f バギング木における各データサイズの評価指標

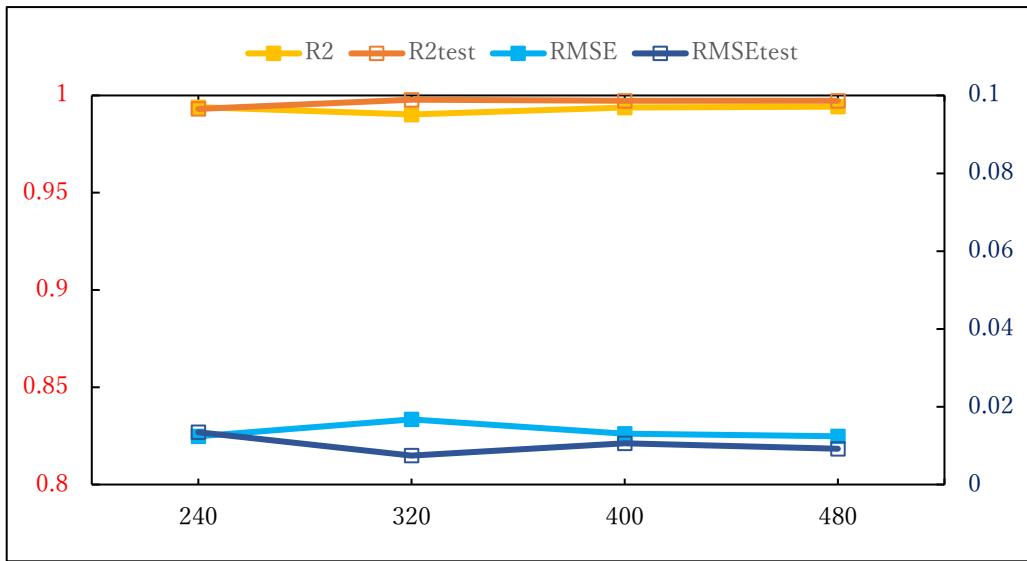


図 4.7.a ステップワイズ線における各データサイズの評価指標

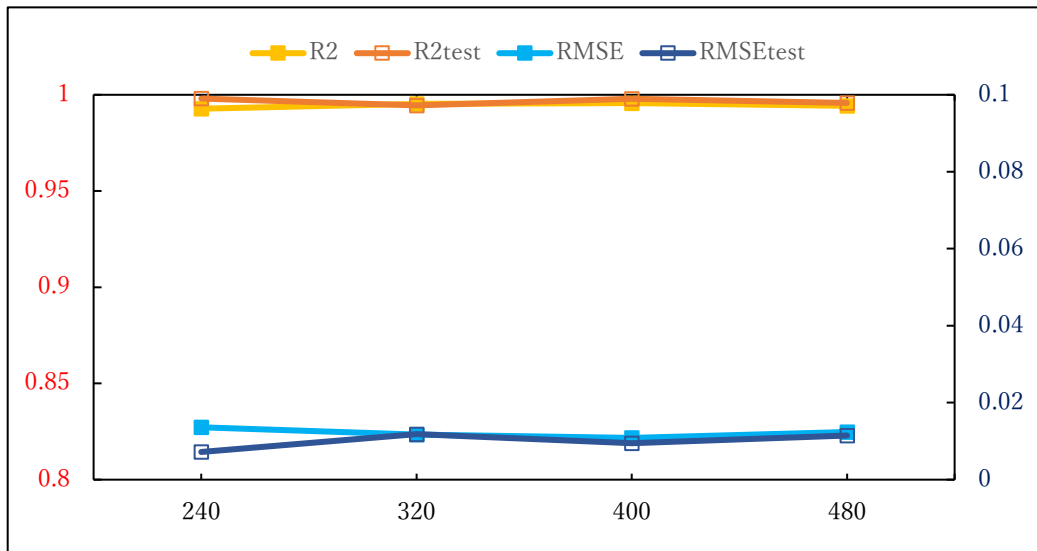


図 4.7.b ガウス過程回帰における各データサイズの評価指標

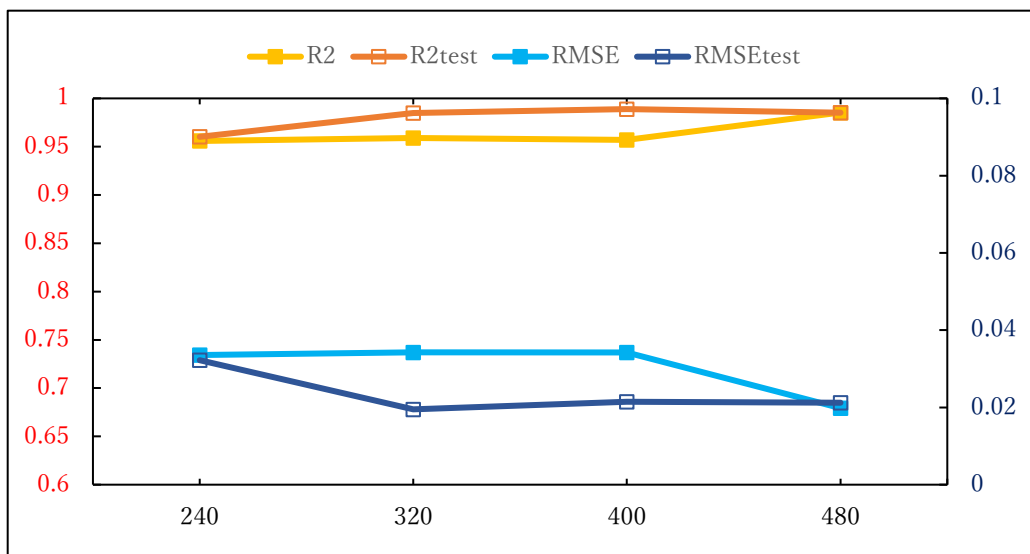


図 4.7.c サポートベクターマシンにおける各データサイズの評価指標

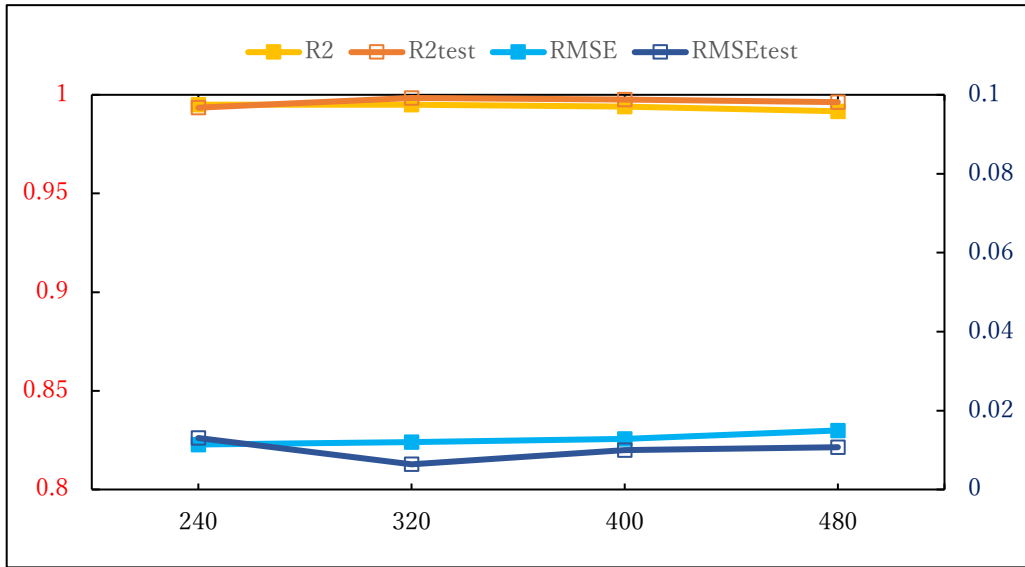


図 4.7.d 線形回帰における各データサイズの評価指標

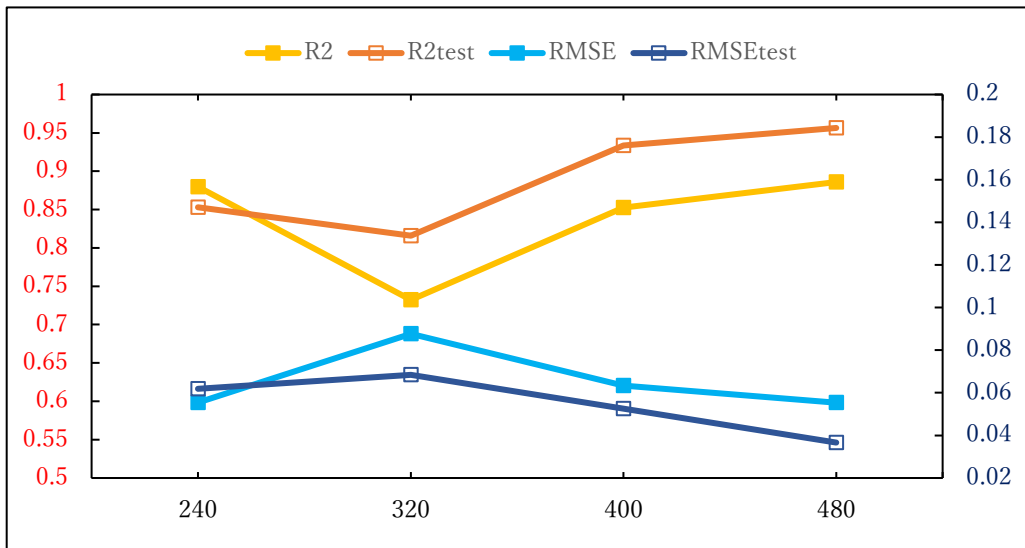


図 4.7.e 回帰木における各データサイズの評価指標

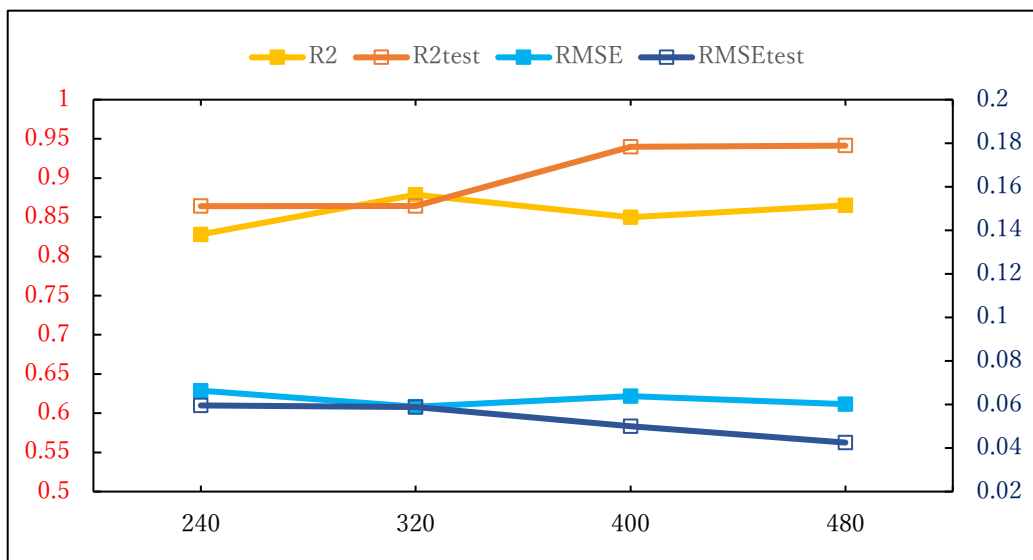


図 4.7.f バギング木における各データサイズの評価指標

4.3 ピアソン積率相関係数に基づく特徴量選定

本節では、機械学習モデルの評価指標である決定係数(R^2)と二乗平均平方根誤差(RMSE)のスコア結果や、応答値から予測値との差をプロットした残差プロットの結果を用いて、ピアソン積率相関係数を使用した、さまざまな特徴量セットを入力とする予測モデルについて考察する。

4.3.1 モデル評価指標

ピアソン積率相関係数に基づいた特徴量セットのヒートポンプ性能予測における、ハイパーパラメーターの値を表 4.1.1 で示した値と異なったものだけを表 4.8、モデルの評価指標を表 4.9 に示す。また図 4.8 にヒートポンプ性能予測に対する異なる特徴量セットの評価指標比較を示す。図 4.8 を見てみると、全体的に評価指標の結果が高く、ヒートポンプ性能の予測にはピアソン相関係数を用いた入力特徴量が有効的だとわかる。条件 1~4 までは入力する特徴量の増加に伴い、スコアの上昇が見られた。しかし、条件 5~10 の間はスコアが高くならず横ばいであり、特徴量の増加が影響されなかった。条件 5~10 は図 3.4 の相関係数の絶対値のグラフと比較すると、蒸発器ヒートバランス以降で相関係数の絶対値が一段下がった後、減少量が緩やかになっている箇所が該当する。つまり、目的変数との線形な関係の程度が小さい特徴量では性能予測の評価指標の上昇に与える影響が小さいと考える。一方で、入力される相関係数の絶対値が小さい特徴量である条件 11,13,14 は、スコアの上昇が見られた。これはより多くの入力特徴量が適合するモデルの予測能力を高めた可能性が高いと考える。

表 4.8 ハイパーパラメーターの値

条件 1・条件 4・条件 8・条件 9・条件 10・条件 12		
Model	ハイパーパラメーター	
GPR	事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数
条件 3・条件 5		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定 項 ロバスト オプション	交互作用線形 交互作用 オフ

表 4.9 モデルの評価指標

condition	model	train		test	
		RMSE	R ²	RMSE	R ²
1	ガウス過程回帰	0.03424	0.95644	0.030199	0.96927
2	ステップワイズ線形回帰	0.033096	0.9593	0.026371	0.97656
3	線形回帰	0.023742	0.97906	0.025777	0.97761
4	ガウス過程回帰	0.022558	0.98109	0.02104	0.98508
5	線形回帰	0.025	0.97678	0.017981	0.9891
6	SVM	0.029508	0.96765	0.020107	0.98638
7	ステップワイズ線形回帰	0.028982	0.96879	0.022756	0.98255
8	ガウス過程回帰	0.023281	0.97986	0.018339	0.98867
9	ガウス過程回帰	0.024577	0.97756	0.017341	0.98987
10	ガウス過程回帰	0.024392	0.9779	0.018416	0.98857
11	ステップワイズ線形回帰	0.023814	0.97893	0.014651	0.99277
12	ガウス過程回帰	0.017175	0.98904	0.018943	0.98791
13	ステップワイズ線形回帰	0.018273	0.98759	0.011094	0.99585
14	ステップワイズ線形回帰	0.019219	0.98628	0.007396	0.99816

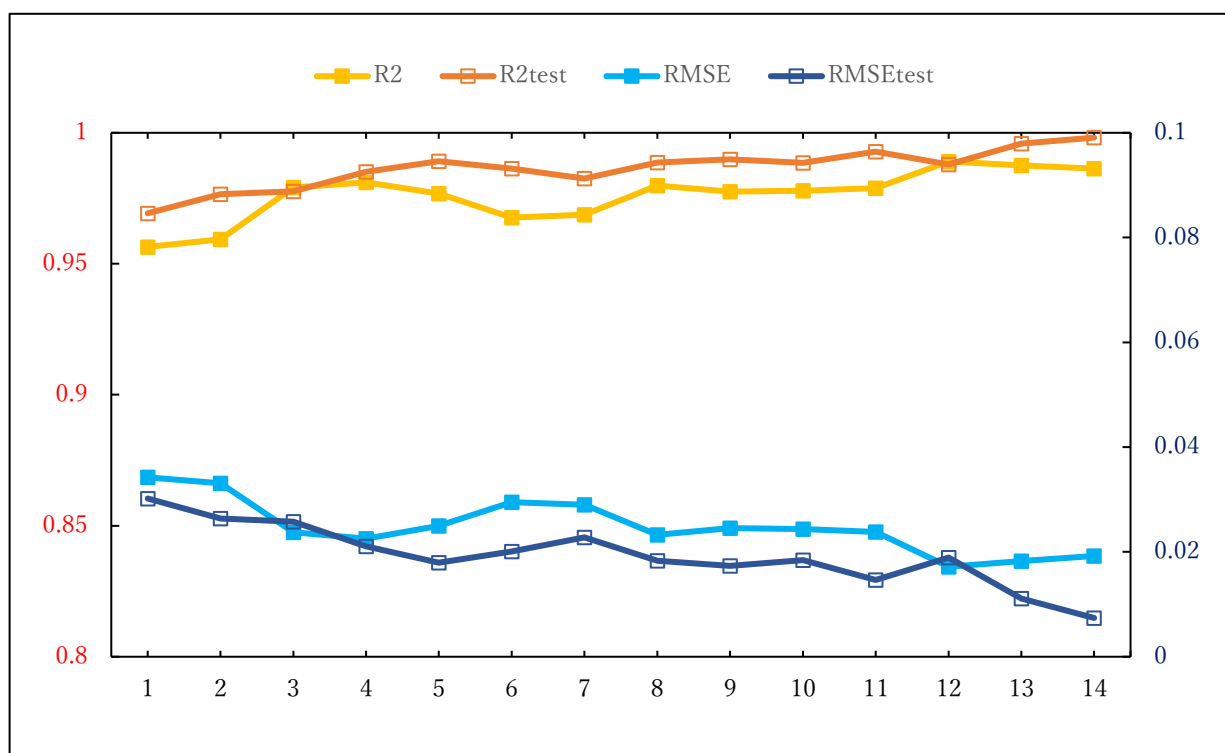


図 4.8 ヒートポンプ性能予測に対する異なる学習モデルの評価指標比較

4.3.2 残差プロット

図 4.9.a ~ n に条件 1 ~ 8 の残差プロットを示す.青色で四角のマーカがトレーニングデータによる残差,赤色で三角のマーカがテストデータによる残差を表している.

図 4.9.a ~ d からトレーニング及びテストの残差のばらつきが小さくなっている.また同様に外れ値の大きさも小さくなっている.これは予測精度が上がっているからである.

次に図 4.9.d ~ j から,ガウス過程回帰,線形回帰,サポートベクターマシン,ステップワイズ線形と学習モデルが変わっているが,どの学習モデルも予測精度が 5%以内に収まるようになって来ている.しかし,項 4.3.1 で述べたように,入力する特徴量が増えても大きな変化がなく,残差プロットを比較しても同じ事がいえる.

さらに, 図 4.9.j ~ n から,赤色のテストの残差は条件 5 のときからばらつきが小さかったが条件 10 以降は青色のトレーニングの残差もばらつきが小さく,非常に高いスコアであることが分かる.しかし,条件 5 以降は特徴量の増加に対して精度の上昇率がとても小さい.計算コストを考慮する場合は,条件 5 がピアソン積率相関係数に基づく性能予測には適していると考ええる.

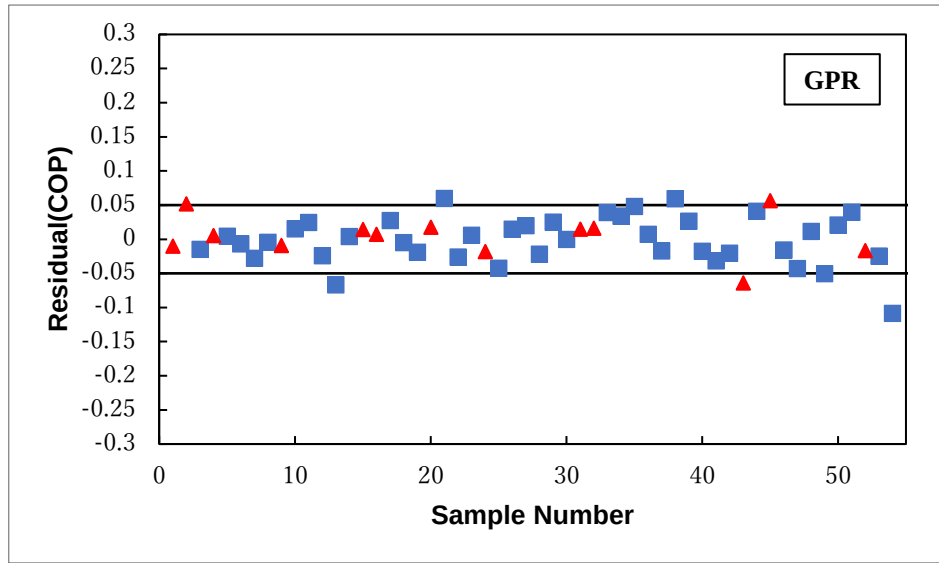


図 4.9.a ガウス過程回帰の残差プロット

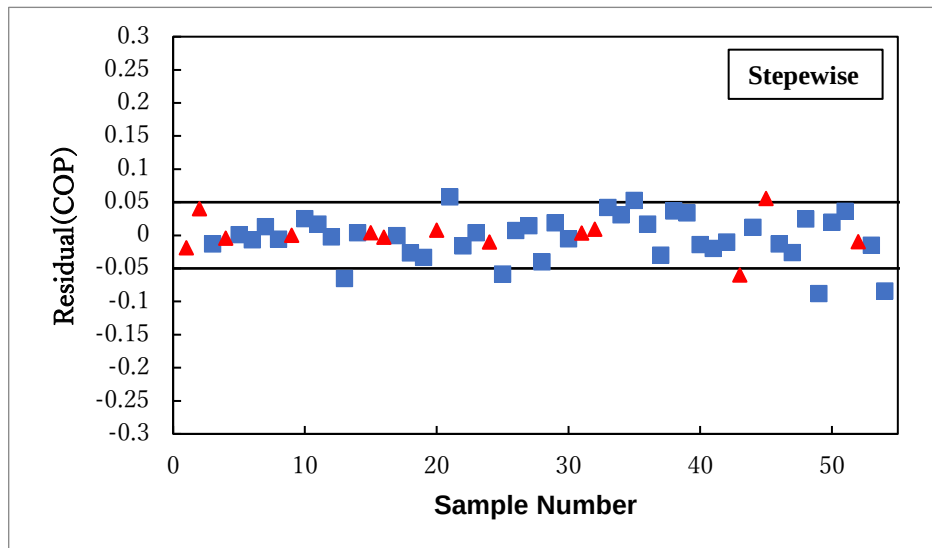


図 4.9.b ステップワイズ線形の残差プロット

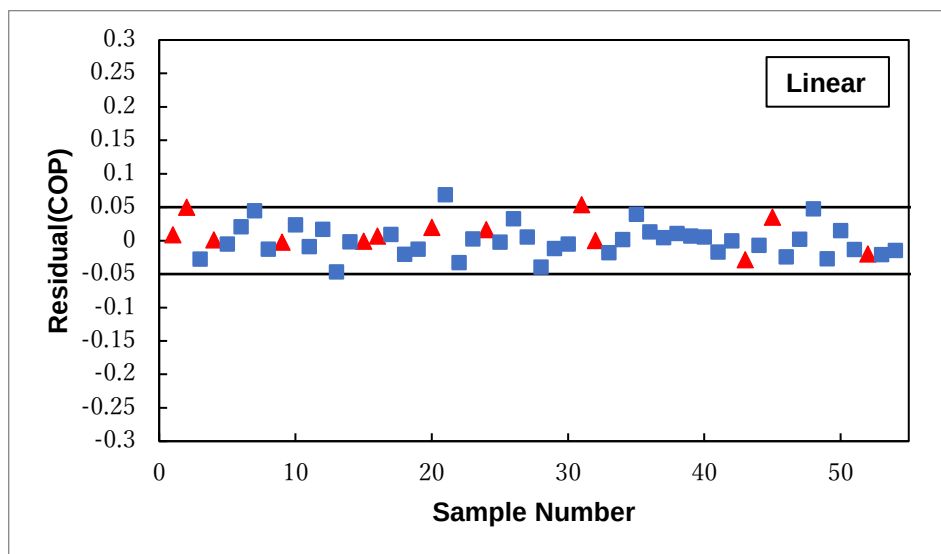


図 4.9.c 線形回帰の残差プロット

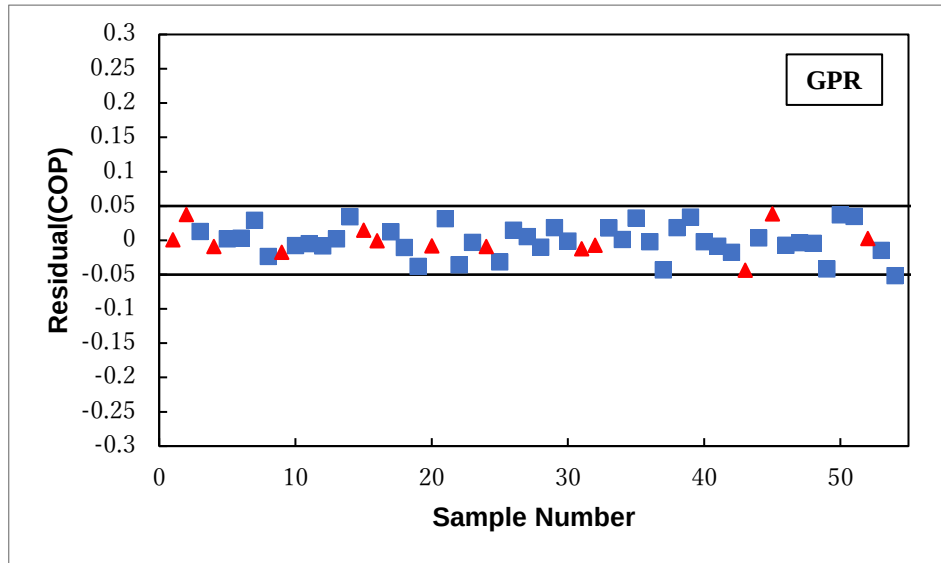


図 4.9.d ガウス過程回帰の残差プロット

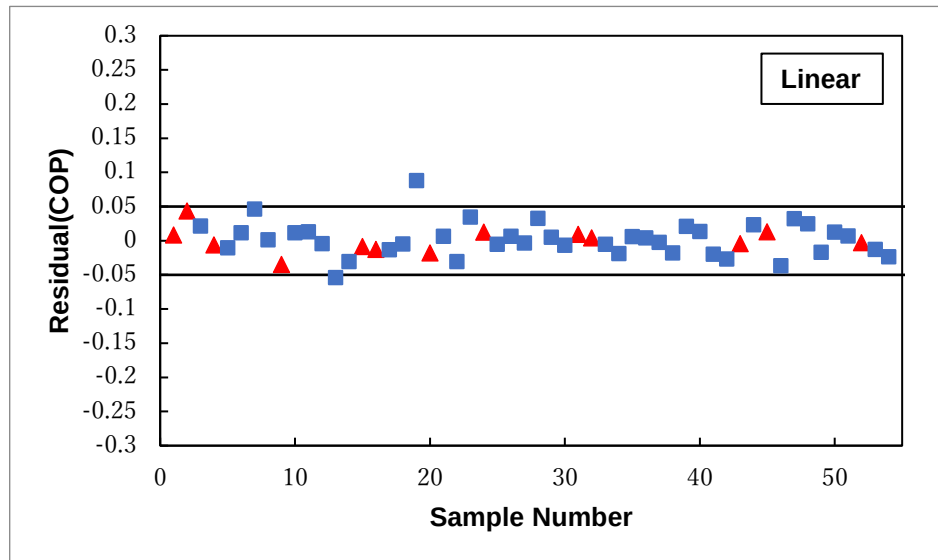


図 4.9.e 線形回帰の残差プロット

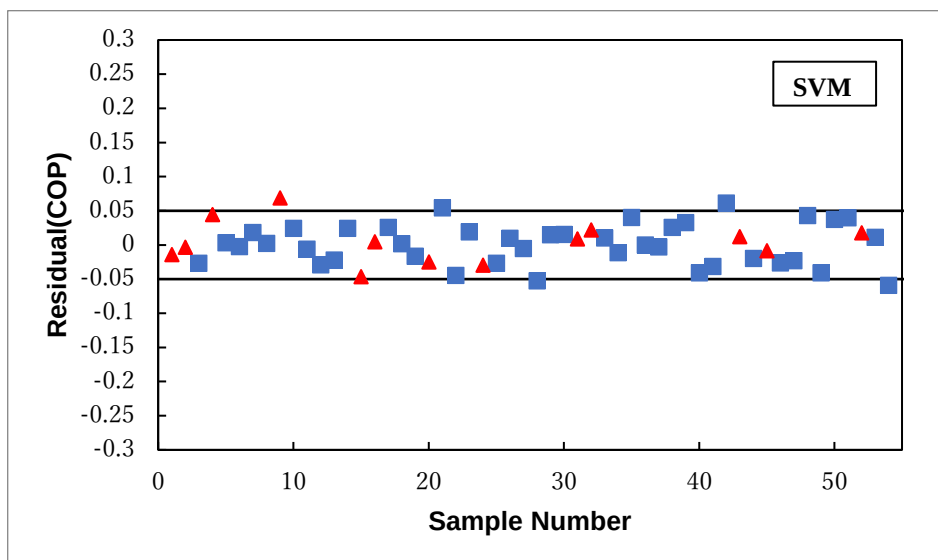


図 4.9.f ステップワイズ線形の残差プロット

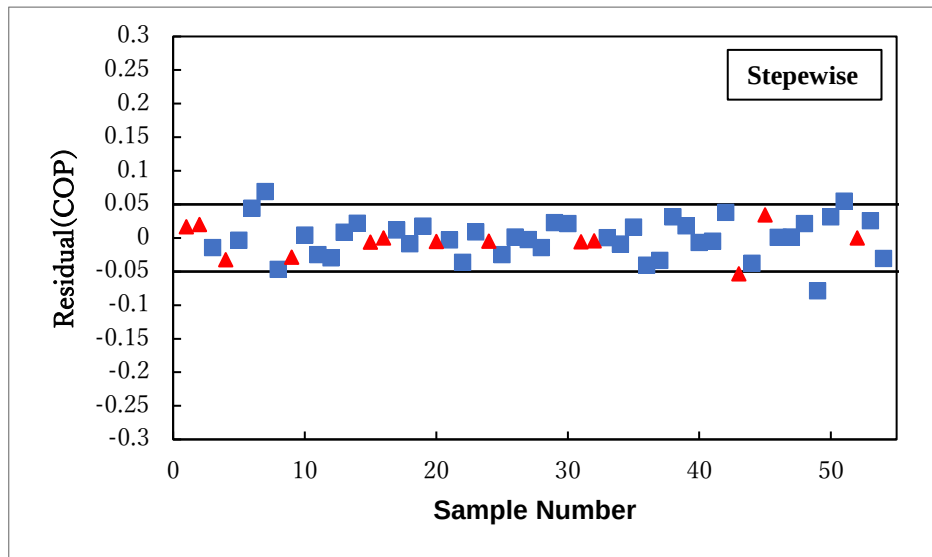


図 4.9.g ステップワイズ線形の残差プロット

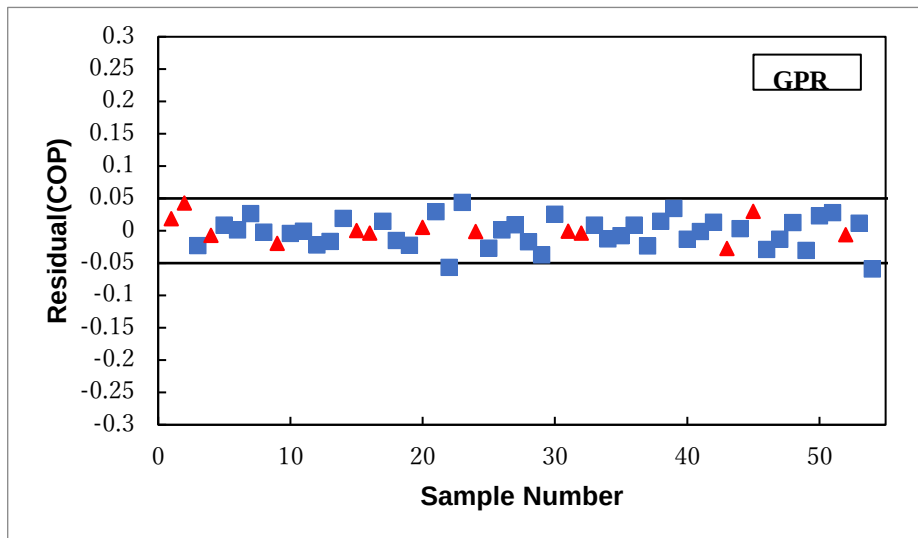


図 4.9.h ガウス過程回帰の残差プロット

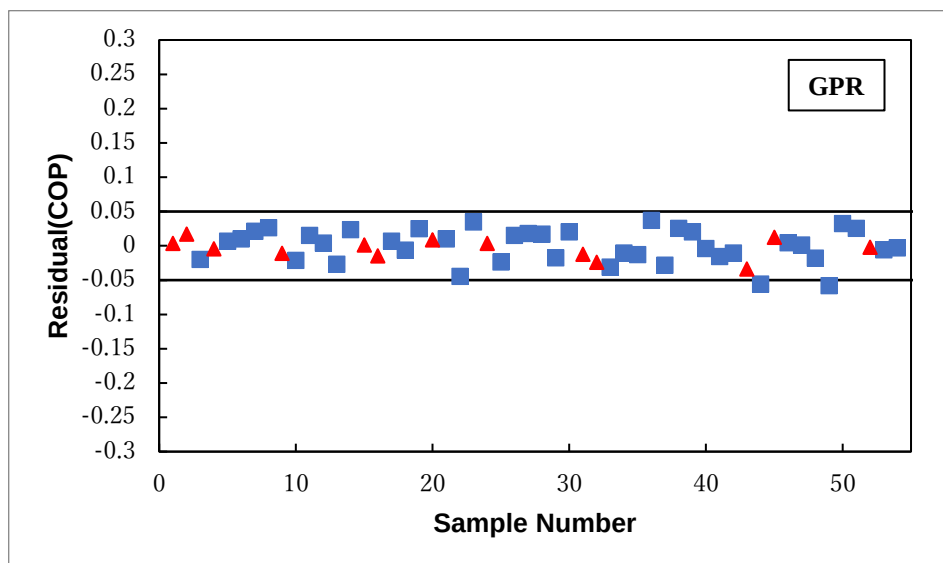


図 4.9.i ガウス過程回帰の残差プロット

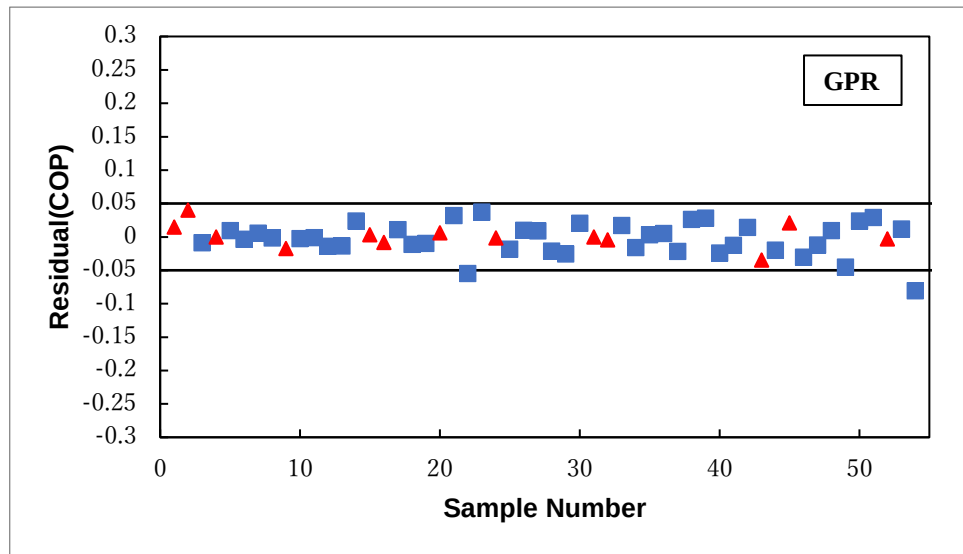


図 4.9.j ガウス過程回帰の残差プロット

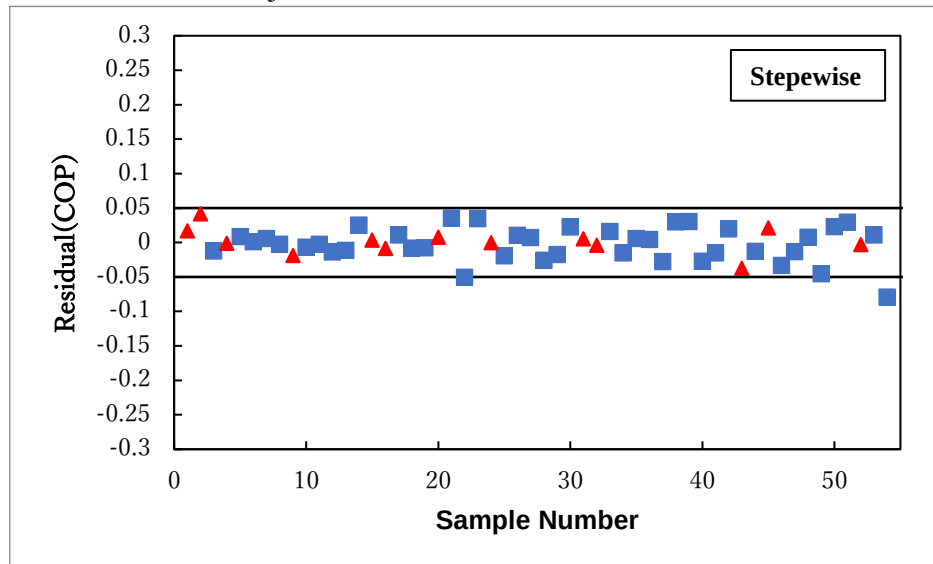


図 4.9.k ステップワイズ線形の残差プロット

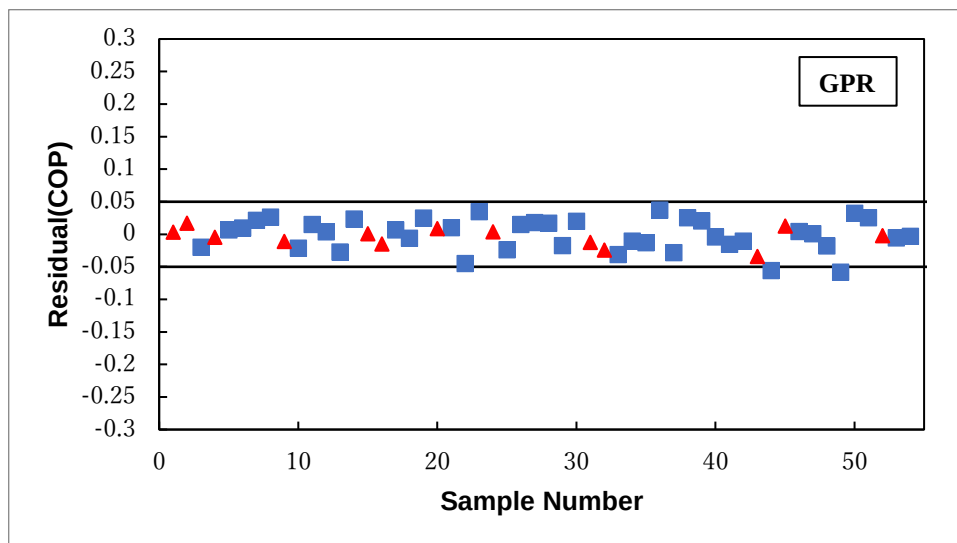


図 4.9.l ガウス過程回帰の残差プロット

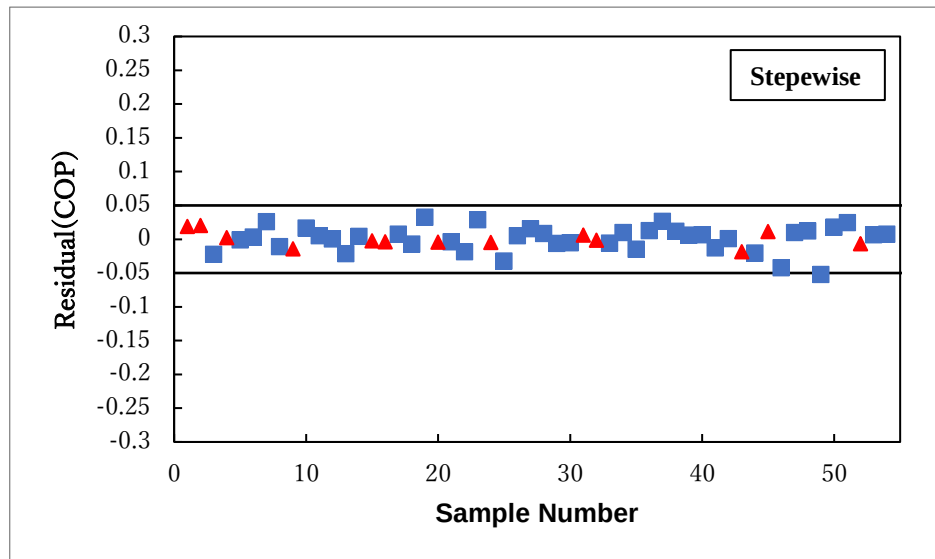


図 4.9.m ステップワイズ線形の残差プロット

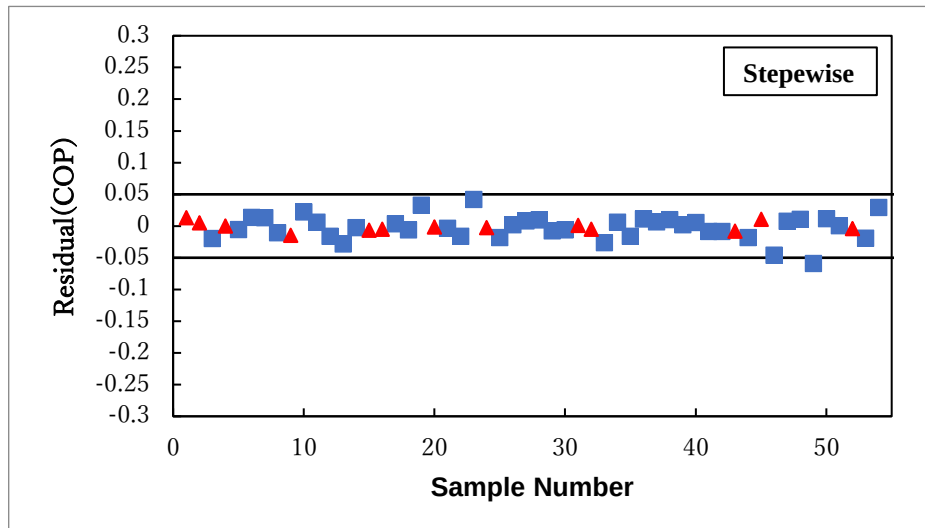


図 4.9.n ステップワイズ線形の残差プロット

4.3.3 データサイズ

ここでは、ピアソン相関係数に基づく特徴量セットの中で項 4.3.2,で示した特徴量数が 7 つの条件 5 について述べる.表 4.10 にデータサイズの増減に対する学習時間の影響と,各データサイズにおいて,表 4.1.1 で示したハイパーパラメーターと異なったものだけを表 4.11 に示す.またデータサイズの増減に対するモデル性能指標の影響を図 4.10.a~f にそれぞれ示す.

項 4.1.3 , 4.2.3 からステップワイズ線形はデータサイズの増加によって学習時間も増加する傾向があった.しかし, 表 4.10 を見てみると,データサイズが 360 まではデータサイズが増えても学習時間にあまり変化がなく,データサイズが小さいときは学習時間に与える影響が小さいと考えられる.

次に図 4.10 からデータサイズ 200 と小さい場合はトレーニング結果及びテスト結果のスコアが全体的に低くなっている.

図 4.10.a~d からステップワイズ線形,ガウス過程回帰,サポートベクターマシン,線形回帰の性能指標は非常に高く,またデータサイズの影響は比較的小さいと考えられ,データサイズが 280~430 でトレーニング及テスト結果の R^2 はがわずかに変化した程度だった.

一方で図 4.10.e,f から MRSE の結果において,データサイズが増えると高くなってしまい,精度が悪くなっている.データサイズが 430 では R^2 と MRSE の改善が見られ,回帰木とバギング木はある程度のデータサイズが必要であると考えられる.

最後に全体を通して,評価指標が各種モデルで高い結果だったのは,モデルのアルゴリズムの特性より入力特徴量がヒートポンプ性能予測に有効な特徴量が多かったからだと考える.また,各データサイズが 80 と,差の変化が小さいことも要因の一つだと考える.さらにピアソン相関係数による特徴量セットの条件 5 ではヒートポンプ性能予測は 280 程度のサイズ帯から予測スコアが高くなることが分かった.

表 4.10 条件 5 におけるデータサイズによる学習時間の影響

DATA SIZE	Learning Time					
	Stepwise	GRP	SVM	Liner	RT	BT
200	11.764	3.8035	0.95913	1.6602	0.93335	4.1702
280	11.247	1.9235	1.6279	1.3548	0.90131	4.3511
360	11.207	0.95913	1.0849	1.4723	0.94901	3.3069
430	17.025	6.2895	6.3419	9.1303	6.1009	6.8652

表 4.11 条件 5 における各データサイズのハイパーパラメーターの値

データサイズ		200	
Model		ハイパーパラメーター	
GPR		事前設定 カーネル関数	指数 GPR 指数
SVM		事前設定 カーネル関数 カーネル関数	中程度のガウス SVM ガウス 2.6
データサイズ		280	
Model		ハイパーパラメーター	
GPR		事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数
データサイズ		360	
Model		ハイパーパラメーター	
GPR		事前設定 カーネル関数	二乗指 GPR 二乗指数
SVM		事前設定 カーネル関数	線形 SVM 線形
データサイズ		430	
Model		ハイパーパラメーター	
線形回帰		事前設定 項 ロバストオプション	交互作用線形 交互作用 オフ
GPR		事前設定 カーネル関数	指数 GPR 指数

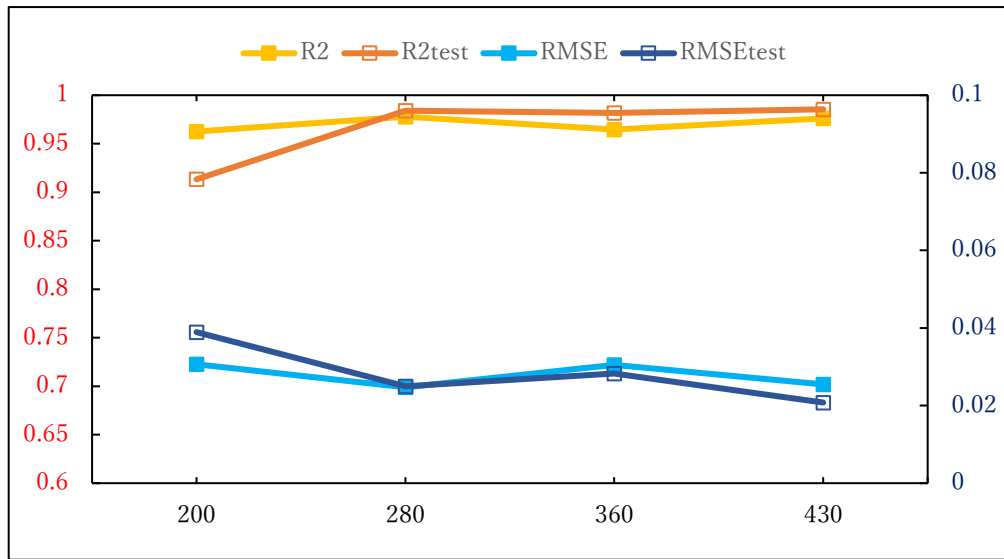


図 4.10.a ステップワイズ線における各データサイズの評価指標

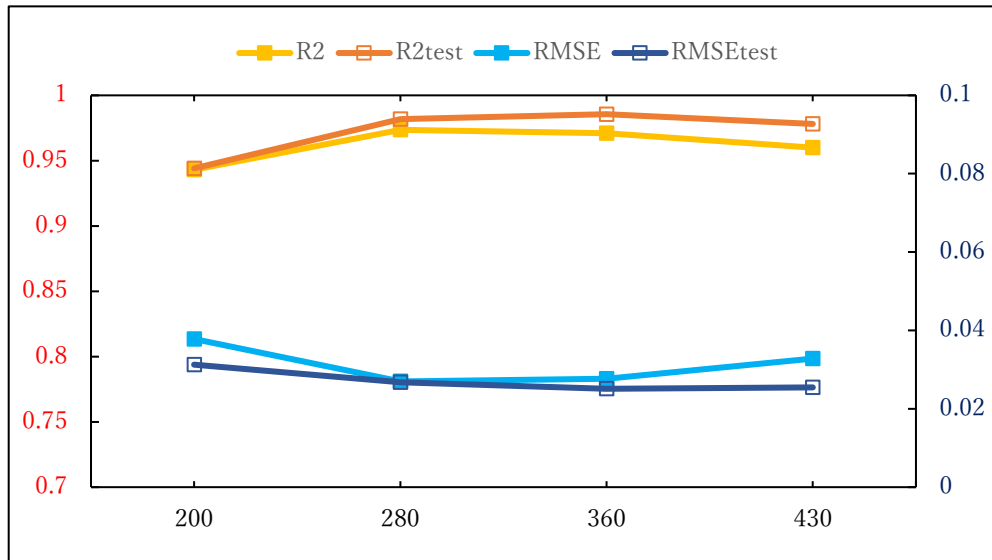


図 4.10.b ガウス過程回帰における各データサイズの評価指標

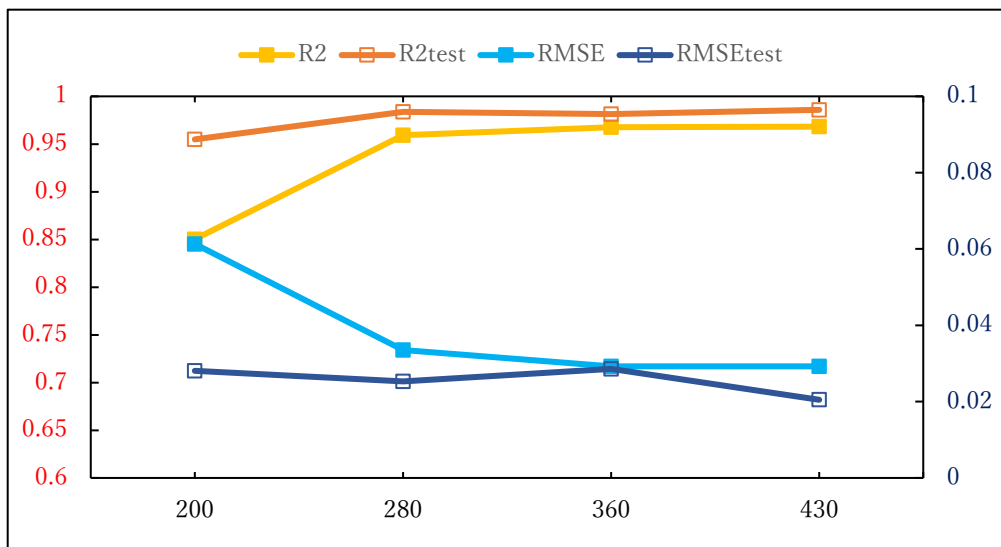


図 4.10.c サポートベクターマシンにおける各データサイズの評価指標

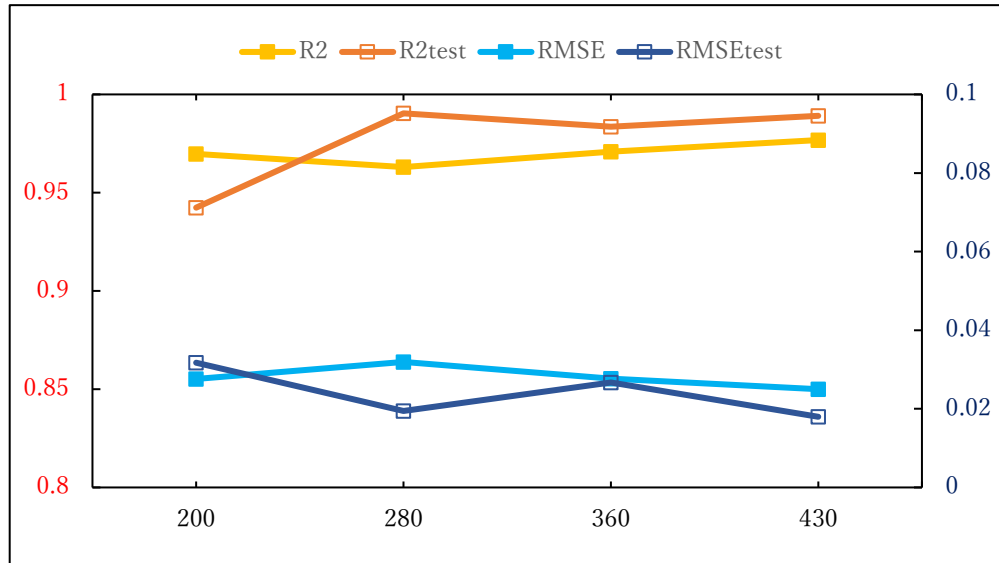


図 4.10.d 線形回帰における各データサイズの評価指標

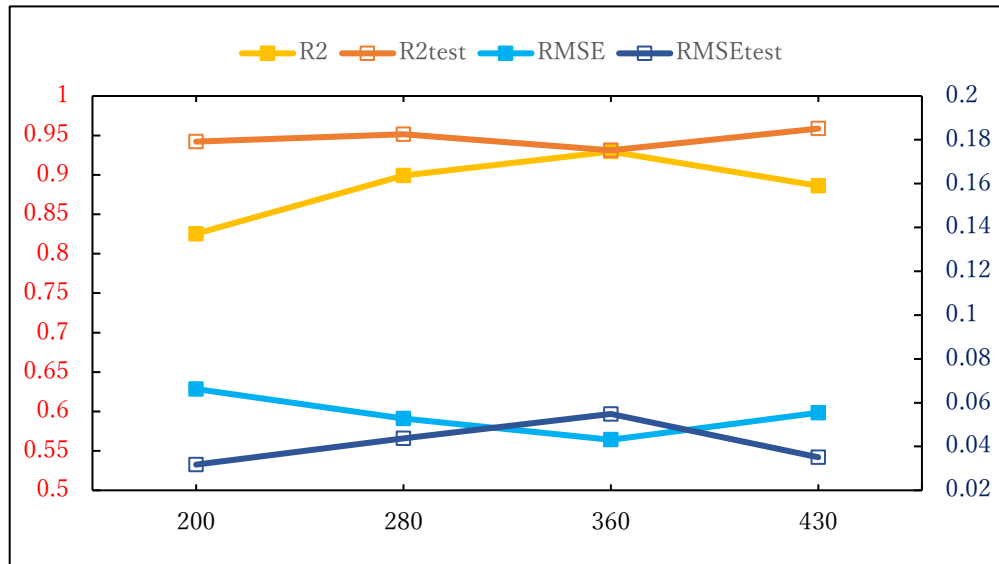


図 4.10.e 回帰木における各データサイズの評価指標

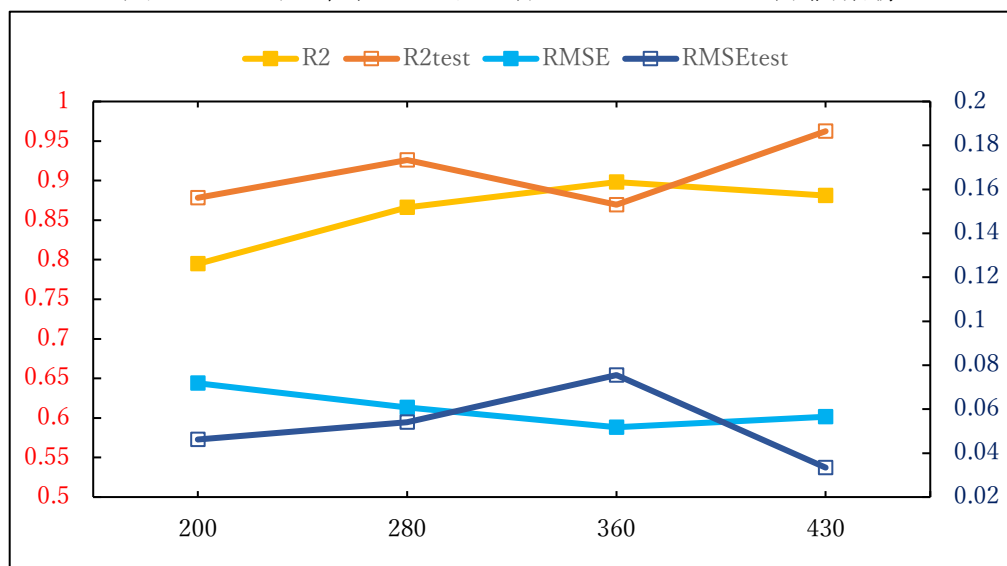


図 4.10.f バギング木における各データサイズの評価指標

4.4 MRMR 手法による特徴量選定

本節では、機械学習モデルの評価指標である決定係数(R^2)と二乗平均平方根誤差(RMSE)のスコア結果や、応答値から予測値との差をプロットした残差プロットの結果を用いて、MRMR 手法を使用した、さまざまな特徴量セットを入力とする予測モデルについて考察する。

4.4.1 モデル評価指標

MRMR 手法に基づいた特徴量セットのヒートポンプ性能予測における、ハイパーパラメータの値を表 4.12、モデルの評価指標を表 4.13 に示す。また図 4.11 にヒートポンプ性能予測に対する異なる特徴量セットの評価指標比較を示す。

図 4.11 を見てみると評価指数である R^2 と MRSE の結果は全体的に高い。このことは予測モデルに対して適切に入力する特徴量が選定されている結果であり、特徴量選定法に MRMR 手法が適していると考ええる。また、評価指標分布から特徴量数に依存しておらず、入力する特徴量をただ増やすことよりも適切な特徴量を選定することが有効である可能性がある。テスト結果において、条件 1 と条件 2 からスコアが小程度の増加が見られ、これは MRMR の値が多少大きい特徴量の凝縮器出口温度が入力されたことが寄与していると考ええる。しかし、それ以降の条件 2 からはスコアの増加が微少である。これも同様に MRMR の値が寄与していると考えられ、凝縮器出口温度以降の特徴量は MRMR の値の差が小さいことが分かる。

表 4.12 ハイパーパラメーターの値

条件 1・条件 2		
Model	ハイパーパラメーター	
SVM	事前設定	中程度のガウス SVM
	カーネル関数	ガウス
	カーネルスケール	3.6
条件 3・条件 5		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定	交互作用線形
	項	交互作用
	ロバストオプション	オフ
条件 4・条件 8		
Model	ハイパーパラメーター	
ステップワイズ線形	事前設定	ステップワイズ線形
	初期項	線形
	項の上限	交互作用
	最大ステップ数	1000
条件 6・条件 7		
Model	ハイパーパラメーター	
GRP	事前設定	Matern 5/2GPR
	カーネル関数	Matern 5/2
条件 7・条件 9・条件 10		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定	ロバスト線形
	項	線形
	ロバストオプション	オン
条件 11		
Model	ハイパーパラメーター	
SVM	事前設定	中程度のガウス SVM
	カーネル関数	ガウス
	カーネルスケール	3.6

表 4.13 モデルの評価指標

condition	model	train		test	
		RMSE	R ²	RMSE	R ²
1	SVM	0.052193	0.91062	0.026697	0.96575
2	SVM	0.044962	0.93367	0.021625	0.97753
3	線形回帰	0.040424	0.94638	0.020693	0.97942
4	ステップワイズ線形回帰	0.03533	0.95904	0.020773	0.97926
5	ガウス過程回帰	0.032116	0.96616	0.02128	0.97824
6	ガウス過程回帰	0.031689	0.96705	0.020931	0.97895
7	線形回帰	0.032558	0.96522	0.018303	0.9839
8	ステップワイズ線形回帰	0.02964	0.97117	0.017057	0.98602
9	線形回帰	0.031279	0.9679	0.016882	0.9863
10	線形回帰	0.024999	0.97949	0.016623	0.98672
11	SVM	0.030266	0.96994	0.016325	0.98719

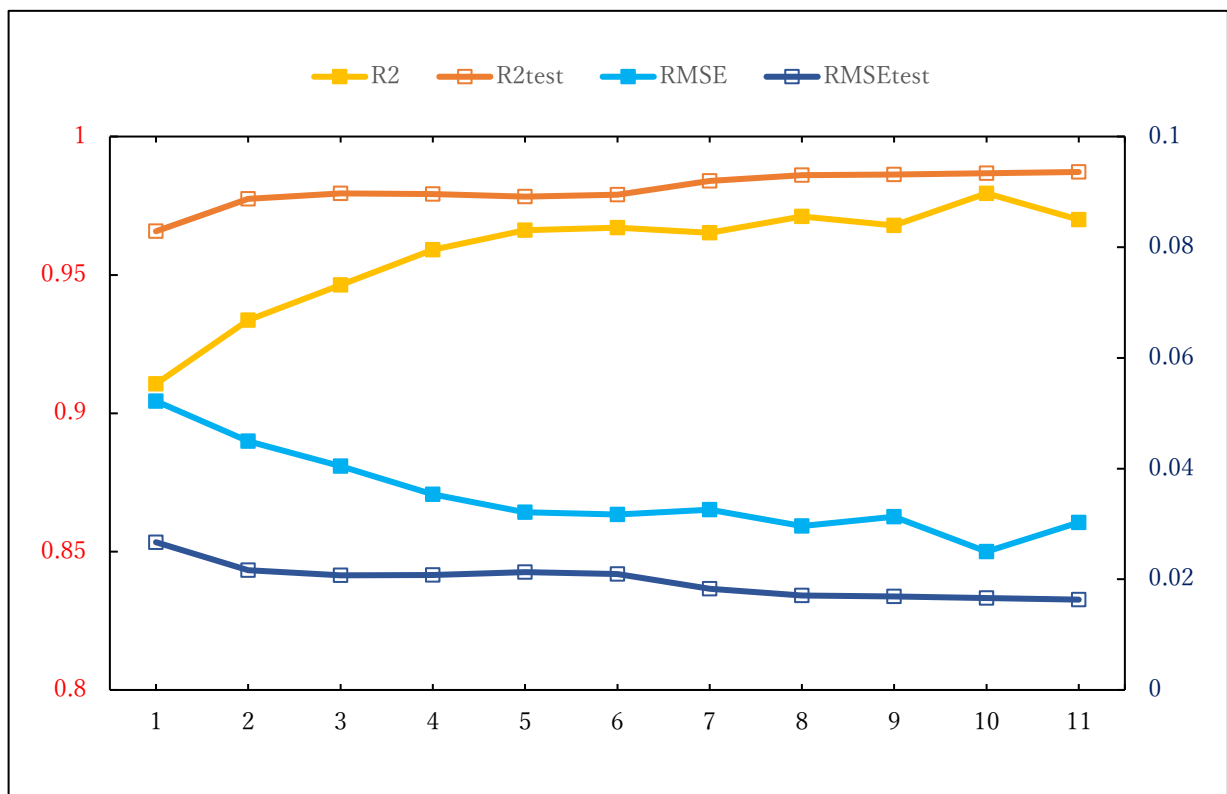


図 4.11 ヒートポンプ性能予測に対する異なる学習モデルの評価指標比較

4.4.2 残差プロット

図 4.13.a ~ k に条件 1 ~ 11 の残差プロットを示す.青色で四角のマーカがトレーニングデータによる残差,赤色で三角のマーカがテストデータによる残差を表している.

図 4.13.a ~ c から,トレーニングの残差にわずかなばらつきと,最大残差の絶対値が 0.139, 0.121, 0.112 の外れ値が見られ,予測精度が 15%以内の結果となった.また,条件 1,2 においては,テストの残差が 5%を超える予測精度であった.

図 4.13.d ~ k から,トレーニングデータの残差には多少の外れ値があるが,トレーニング及びテストの残差に分散均一性が見られることから,モデルに妥当性が持てると考える.特に条件 7 からはテスト残差のばらつきがとても小さく,予測精度も 5%以内である.

以上のことから,ヒートポンプ性能予測に関して,入力特徴量を MRMR 手法で選定する場合,より少ない入力で高いスコアと予測精度を得ることができる.一方で,MRMR の高い値を入力できない場合はモデル性能の向上はあまり見込めず,特徴量を増やして目的変数の適合性を上げることで微少ではあるがモデル性能を向上できる .

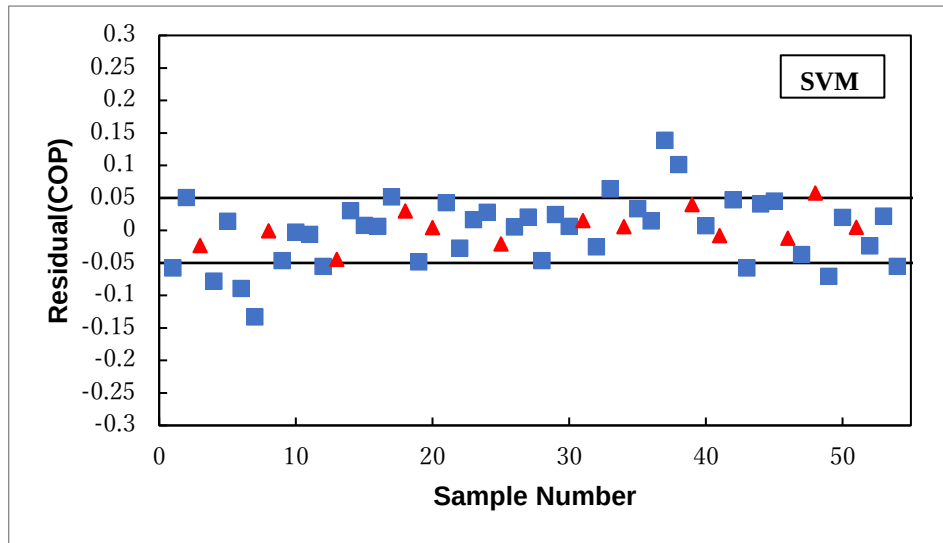


図 4.13.a サポートベクターマシンの残差プロット

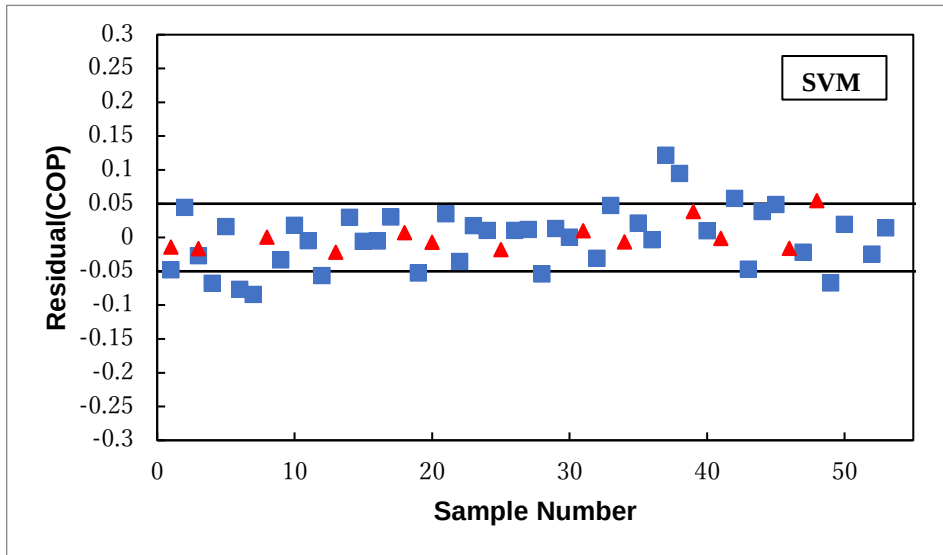


図 4.13.b サポートベクターマシンの残差プロット

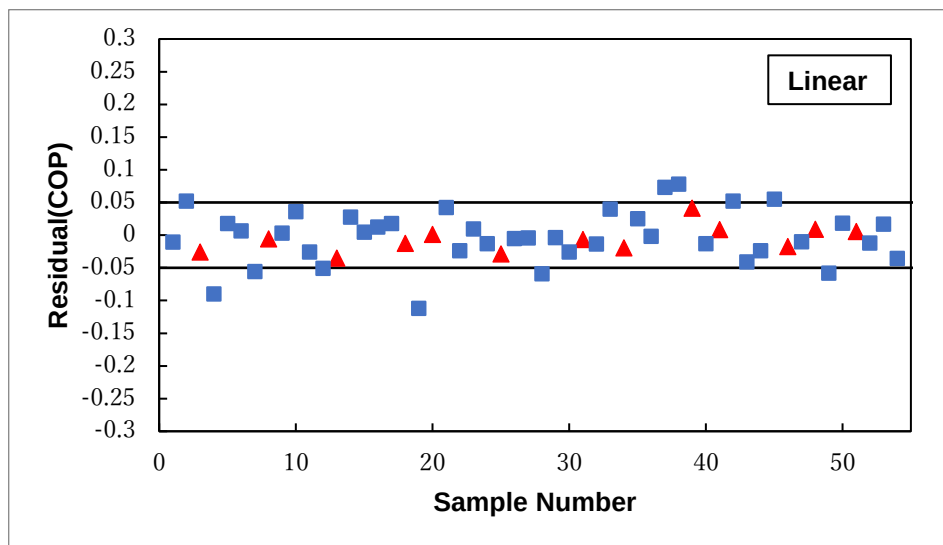


図 4.13.c 線形回帰の残差プロット

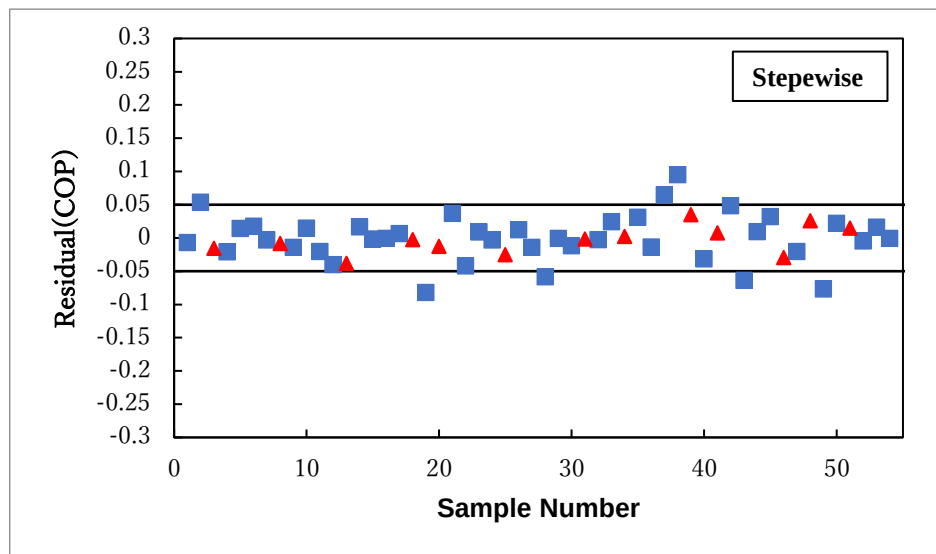


図 4.13.d ステップワイズ線形の残差プロット

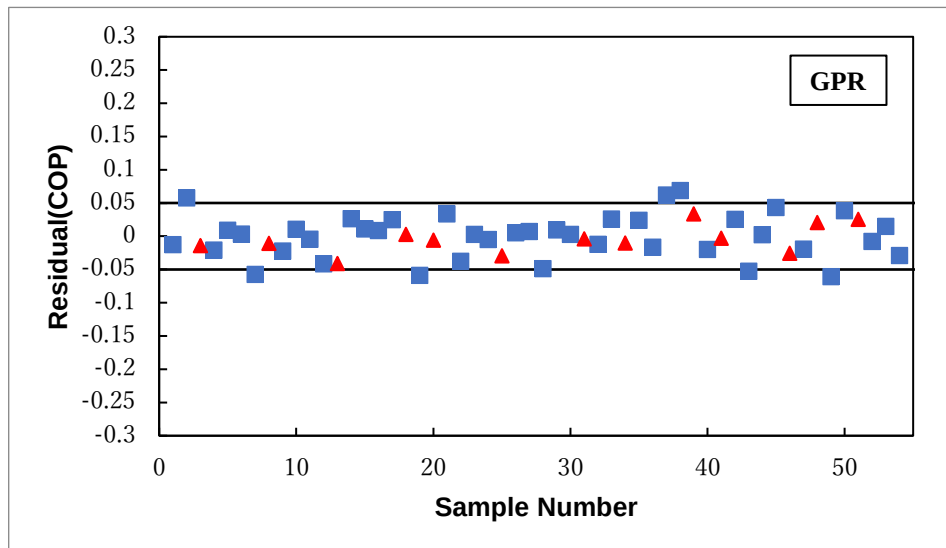


図 4.13.e ガウス過程回帰の残差プロット

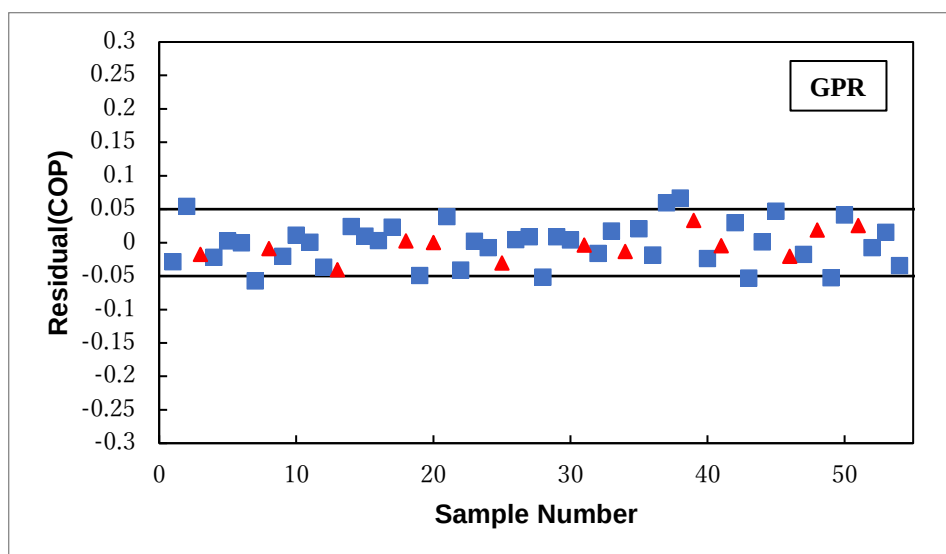


図 4.13.f ガウス過程回帰の残差プロット

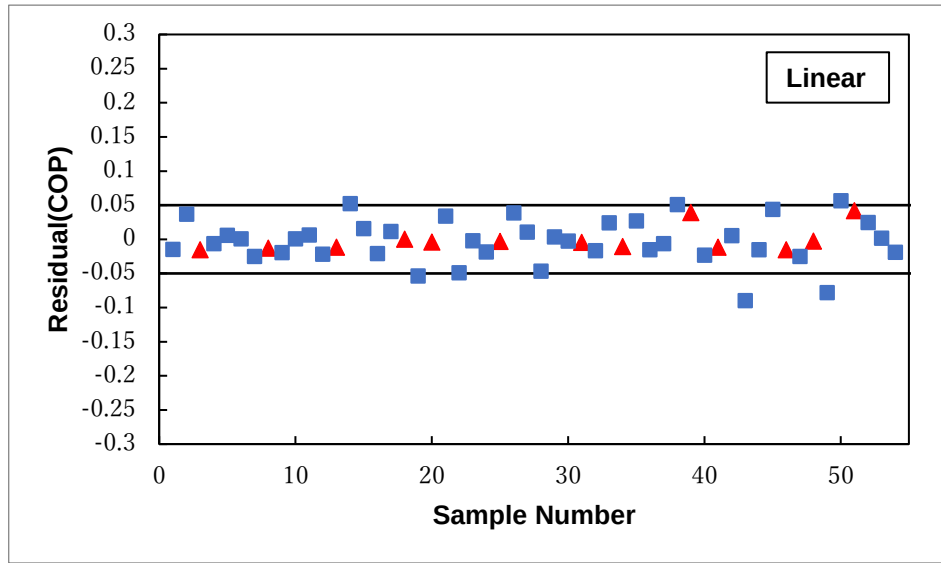


図 4.13.g 線形回帰の残差プロット

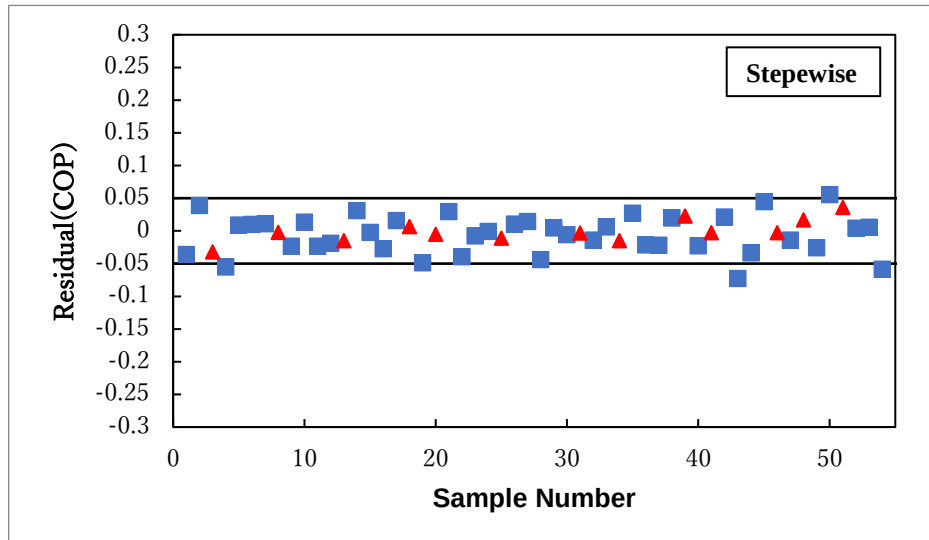


図 4.13.h ステップワイズ線形の残差プロット

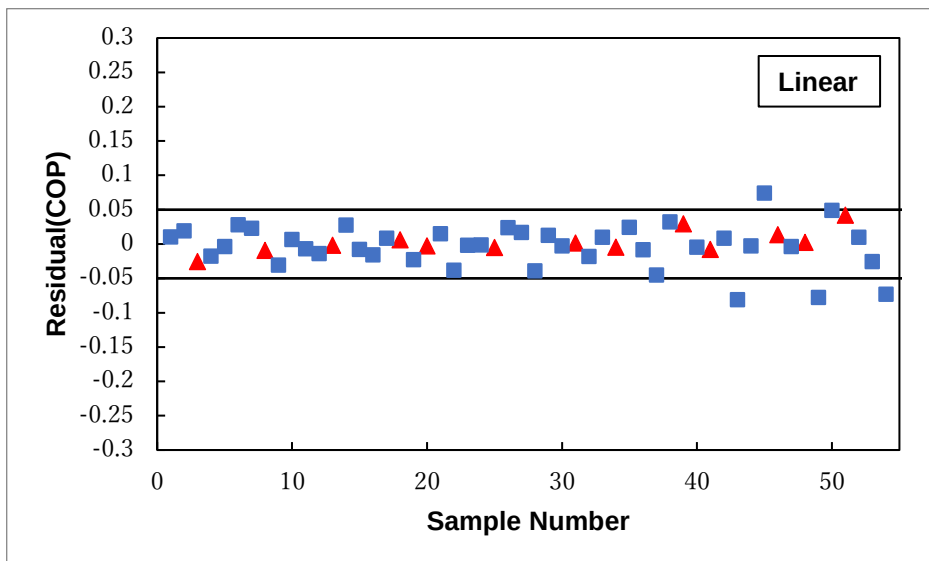


図 4.13.i 線形回帰の残差プロット

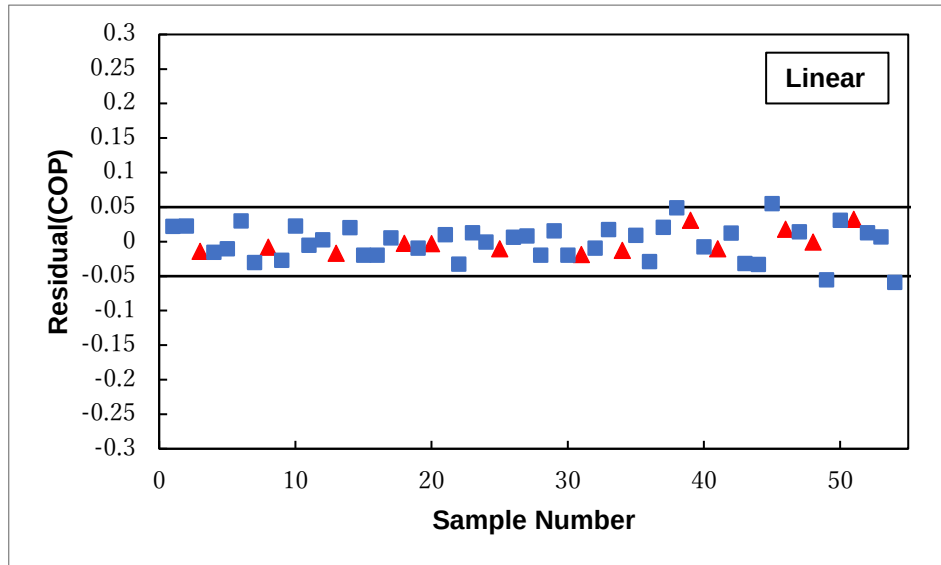


図 4.13.j 線形回帰の残差プロット

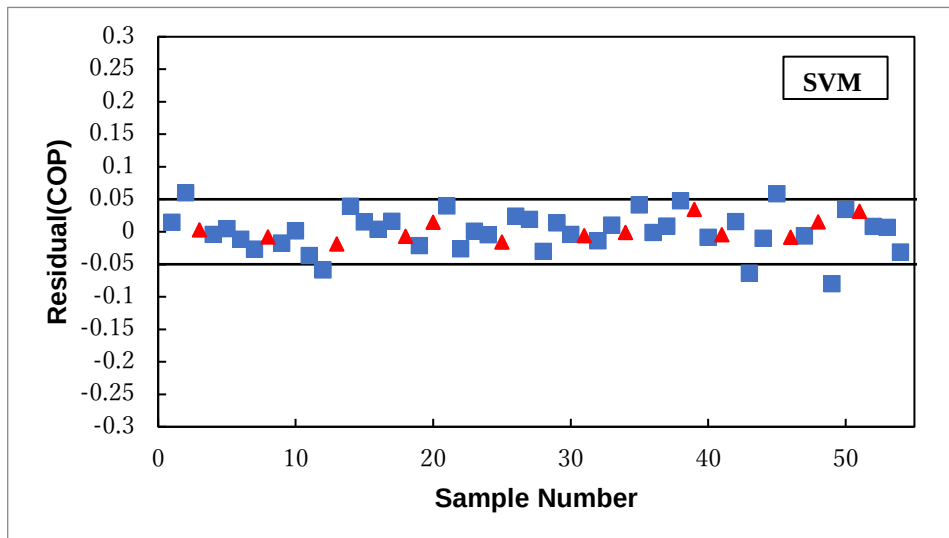


図 4.13.k サポートベクターマシンの残差プロット

4.4.3 データサイズ

ここでは, MRMR 手法に基づく特徴量セットの中に項 4.4.2 で示したテスト残差の精度が 5%かつ条件 7 以降特徴量数を増やしても精度上昇率が微少であったため,条件 7 について述べる.表 4.14 にデータサイズの増減に対する学習時間の影響と,各データサイズにおいて,表 4.1.1 で示したハイパーパラメーターと異なったものだけを表 4.15 に示す.またデータサイズの増減に対するモデル性能指標の影響を図 4.14.a~f にそれぞれ示す.

表 4.14 を見てみると, ステップワイズ線形モデルに対するデータサイズの影響が小さい.これは項 4.3.3 で述べたようにステップワイズ線形モデルには小さいデータサイズの場合は学習時間にあまり影響しない可能性がある.さらに,同じようなデータサイズでも入力する特徴量数の大小で学習時間への影響も変化することが分かる.

図 4.14.a~d からデータサイズ 200 におけるトレーニング結果の評価指標が,一段と低い.特にステップワイズ線形モデルが顕著に表している.しかし,テスト結果の評価指標は高く,未知のデータに対しての汎化性能が高いといえる.データサイズが 430 のときトレーニング及テスト結果の MRSE が低下しており,この現象は項 4.3.3 でも同様に起きていることから,これに関してはさらなる追加検証が必要であると考ええる.

他方で図 4.14.e,f からデータサイズが小から中程度の場合では評価指標は低く,最もスコアが高かったデータサイズ 430 でもステップワイズ線形,ガウス過程回帰,サポートベクターマシン,線形回帰に比べて予測性能が低い.このことから回帰木とバギング木は MRMR 手法に基づく特徴量セットによるヒートポンプ性能予測に適していないとわかる.

表 4.14 条件 7 におけるデータサイズによる学習時間の影響

DATA SIZE	Learning Time					
	Stepwise	GRP	SVM	Liner	RT	BT
200	17.494	2.9689	1.6332	5.4403	0.90047	3.3594
310	20.461	2.1869	3.4787	1.9732	0.89334	3.0754
430	16.33	2.7817	3.054	2.8784	2.7166	3.8861
540	19.247	2.0734	1.5185	2.21	0.77035	3.9168

表 4.15 条件 7 における各データサイズのハイパーパラメーターの値

データサイズ 200		
Model	ハイパーパラメーター	
線形回帰	事前設定 項	線形 線形
GPR	事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数
データサイズ 310		
Model	ハイパーパラメーター	
GPR	事前設定 カーネル関数	二乗指数 GPR 二乗指数
SVM	事前設定 カーネル関数	線形 SVM 線形
データサイズ 430		
Model	ハイパーパラメーター	
GPR	事前設定 カーネル関数	二乗指 GPR 二乗指数
SVM	事前設定 カーネル関数	線形 SVM 線形

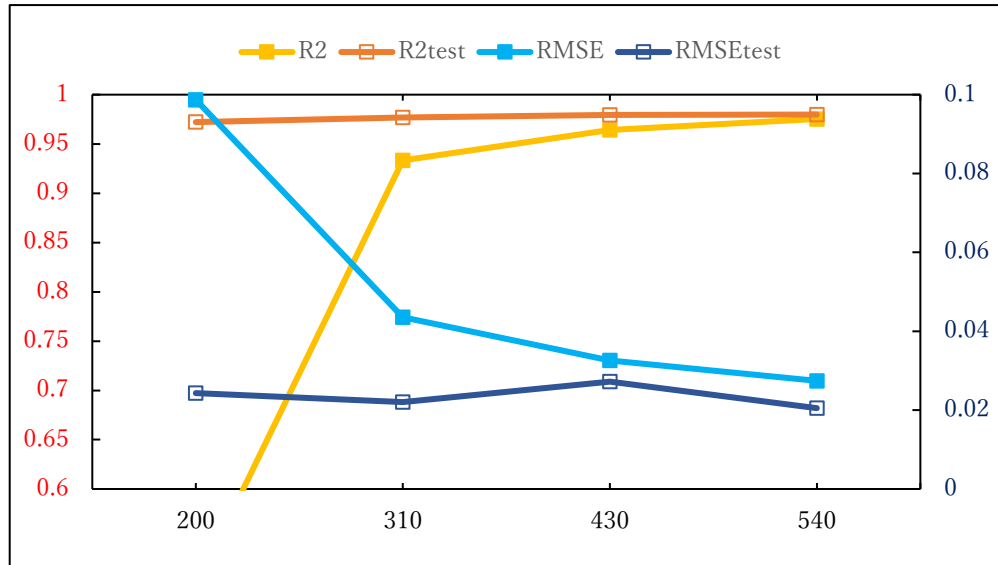


図 4.14.a ステップワイズ線における各データサイズの評価指標

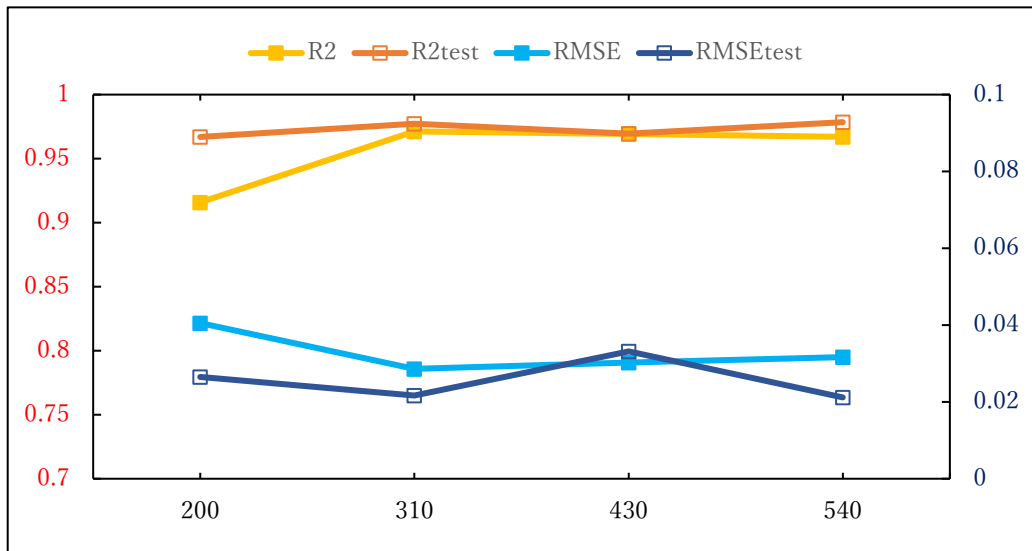


図 4.14.b ガウス過程回帰における各データサイズの評価指標

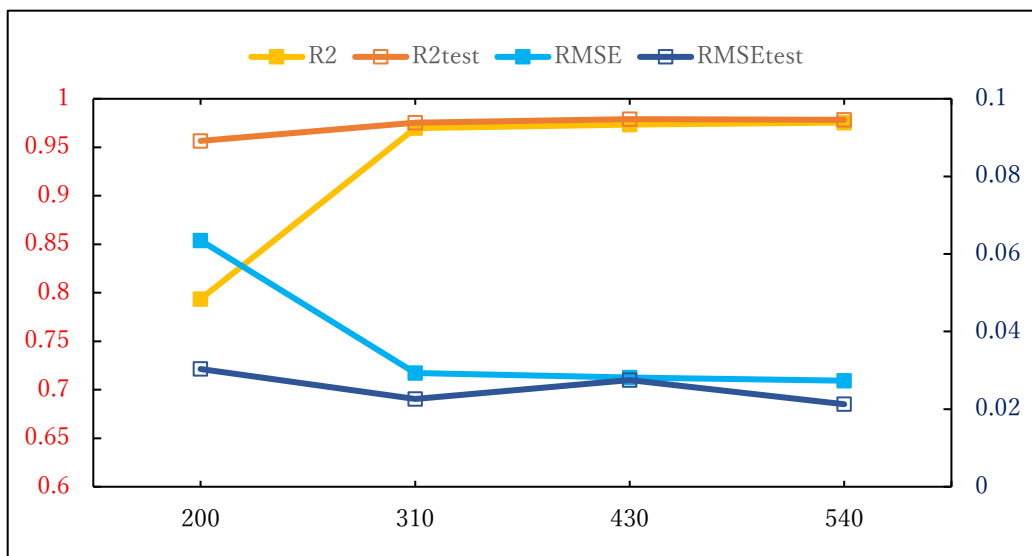


図 4.14.c サポートベクターマシンにおける各データサイズの評価指標

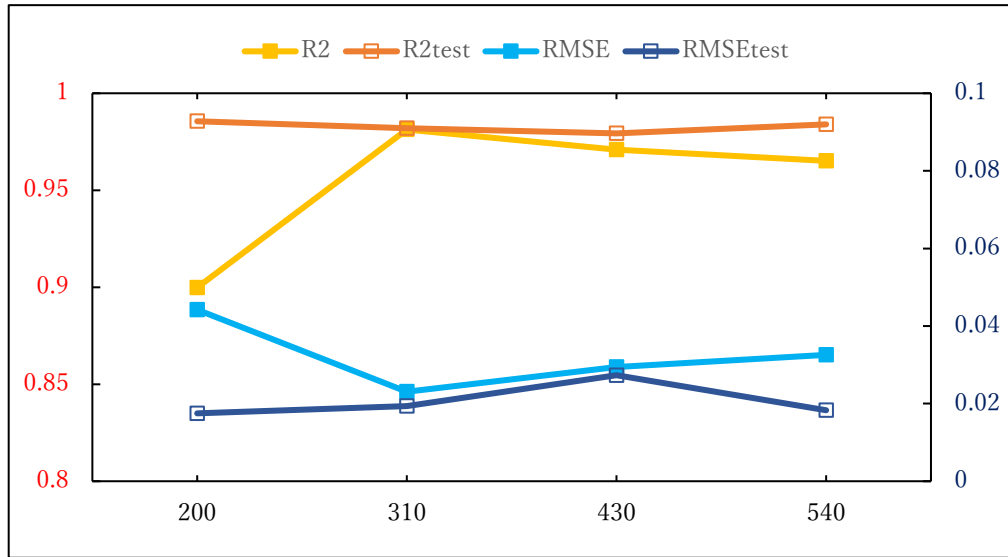


図 4.14.d 線形回帰における各データサイズの評価指標

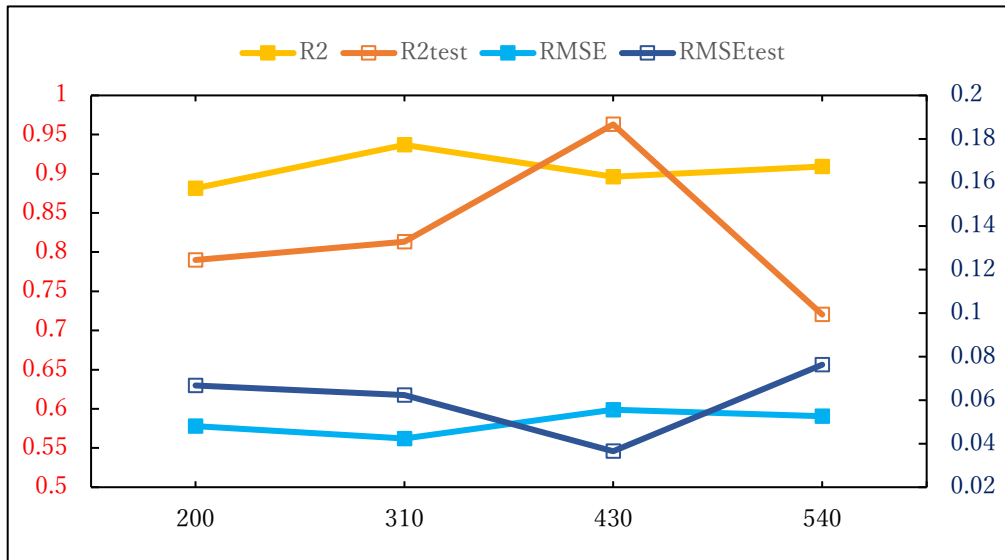


図 4.14.e 回帰木における各データサイズの評価指標

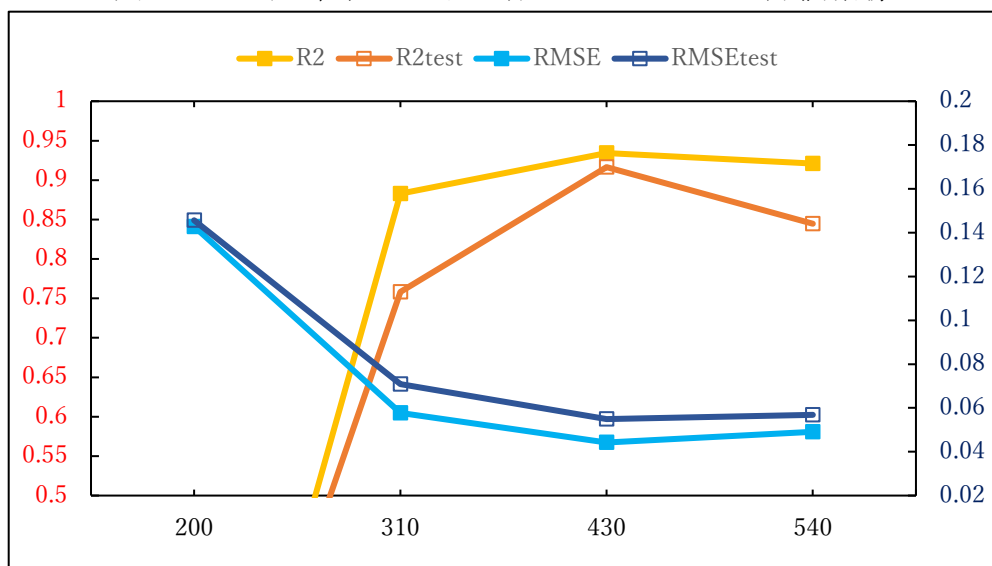


図 4.14.f バギング木における各データサイズの評価指標

第5章 総括

本論文は、機械学習を用いた R32 冷媒のヒートポンプ性能の予測を行ない、モデル学習における入力特徴量の異なる選定方法により、モデルの性能指標に基づく各種モデルの比較、残差プロット、データサイズの観点から評価を行った。以下に本研究で得られた内容を考察し、その結果を取りまとめたものを要約する。

- (1) 実験ベース、実験ベースと測定データの組み合わせ、ピアソン相関係数に基づく選定法、MRMR 手法の各種選択方法を比較すると、ピアソン相関係数が最適な入力特徴量の選定方法であった。
- (2) ピアソン相関係数による特徴量選択において、条件 14 のステップワイズ線形モデルが最高の汎化能力を示し、ヒートポンプ性能の予測における RMSE test と R^2 test 値はそれぞれ 0.007396 と 0.99816 であった。またステップワイズ線形モデルのテスト結果に対する最大残差は約 1.4%であった。これはステップワイズ線形モデルに線形の予測子がモデルパラメーターに含まれており、線形な関係を仮定しているモデルであった。その為、入力する特徴量が目的変数との相関関係が高い特徴量を選定する手法に適しており、高い精度だったと考える。
- (3) 凝縮器出口温度と蒸発器出口温度はヒートポンプ性能の予測精度を左右する要素の一つである。実験ベースの特徴量セットに異なる 2 つの測定特徴量を追加していった場合、凝縮器及び蒸発器の出口温度セットが性能指標のスコア結果が良かった。要因としては、ヒートポンプ性能が熱交換器の熱負荷を圧縮機仕事で除して算出するため、予測したいヒートポンプ性能の目的変数と熱交換器出口温度の説明変数に線形的な関係が予測に対して強く影響したことが考えられる。また、この条件での学習モデルがステップワイズ線形モデルであったことから説明がつく。つまり線形関係の熱交換器出口温度はヒートポンプ性能予測に有効な特徴量と考えられる。
- (4) ステップワイズ線形モデルはデータサイズの増減に対する学習時間の影響が最も大きく、学習時間が他のモデルと比べ最長であった。これはステップワイズ線形モデルが初期モデルから学習を開始して、徐々に大きいまたはより小さいモデルの説明能力を比較していくためであると考えられる。

謝辞

九州大学大学院総合理工学研究院教授 宮崎 隆彦先生には、本研究の遂行にあたり、数多くの的確かつ有益な御指導、御鞭撻を賜りました。本論文の作成についても、丁寧な御指導、御鞭撻を賜りました。ここに、深く感謝の意を表し心から厚く御礼申し上げます。

九州大学大学院総合理工学研究院准教授 Kyaw Thu 先生には、本研究の遂行にあたり、数多くの貴重なご指導、ご鞭撻を賜りました。ここに、深く感謝の意を表し心から厚く御礼申し上げます。

九州大学大学院総合理工学研究院 高田 信夫技術専門職員には、本研究を遂行する上で特に装置、機械、部品などの技術的な面のみならず研究室の生活において、数多くの御助言、御協力を賜りました。ここに、心から深く御礼申し上げます。

九州大学大学院総合理工学府環境エネルギー工学専攻宮崎研究室に所属する,Chairunnisa さん, Mansoor Abdul Aziz さん,Duha Hammad さん,Motaz Mabrok Mohamed Salama さん,Zhaosheng Yang さん,Yu Hao さん,Seo Sang Won さん,Marco Reyes Lao さん,Haoulomou Pepe さん,Sannan Salabat Butt さん,Xuetao Liu さん,Denis Mutebi さん,Mojtaba Purjam さん,陳 昊楠 さん,Yang Cheng さん,You Cheng さん,Li Guangyao さん,柴 甲子さん,Zhao Peng さん, Wu Yitong さん, Fujita Daido さん, 中津 秀彬さん, 溝部 幸輝さん, 松尾 康介さん, 盧 琛さん, Alaa Itaiwi さん, 邢峻溪さん, 周盈辛さん, Isha Sameen さん, 磯永 隆志さん, 工藤 徳人さん, 有馬 太希さん, 脇上 敦史さん, 永瀬 太希さん, 藤本 大樹さんには、多大なるご助言およびご協力を頂きました。心より御礼申し上げます。

研究室秘書 大和 裕理さんには、事務的な手続きの他、公私に渡り親切な御助言を賜るとともに御激励をいただきました。ここに深く感謝の意を表し、心より御礼申し上げます。

最後に、最も深い感謝の意を捧げたいのは、家族に対してです。この学生生活を終えるにあたり、終始温かく見守り、応援し、支えてくれた家族に心から深く感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Jean-Louis Comlan Fannou, Clément Rousseau, Louis Lamarche, Stanislaw Kaji, A comparative performance study of a direct expansion geothermal evaporator using R410A and R407C as refrigerant alternatives to R22, *Applied Thermal Engineering*, Volume 82, 2015, Pages 306-317
- [2] Guogeng He, Sai Zhou, Dongdong Li, Dehua Cai, Sikai Zou, Experimental study on the flow boiling heat transfer characteristics of R32 in horizontal tubes, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Volume 125, 2018, Pages 943-958
- [3] A. Cavallini, G. Censi, D. Del Col, L. Doretti, G.A. Longo, L. Rossetto, Experimental investigation on condensation heat transfer and pressure drop of new HFC refrigerants (R134a, R125, R32, R410A, R236ea) in a horizontal smooth tube, *International Journal of Refrigeration*, Volume 24, Issue 1, 2001, Pages 73-87
- [4] B.O. Bolaji, Experimental study of R152a and R32 to replace R134a in a domestic refrigerator, *Energy*, Volume 35, Issue 9, 2010, Pages 3793-3798.
- [5] Lizhi Jia, Wufeng Jin, Yan Zhang, Experimental study on R32 leakage and diffusion characteristic of wall-mounted air conditioners under different operating conditions, *Applied Energy*, Volume 185, Part 2, 2017, Pages
- [6] Hung M. Pham, R32 And HFOs As Low-GWP Refrigerants For Air Conditioning, 2012
- [7] Hughes, M. T., Kini, G., and Garimella, S. (October 18, 2021). "Status, Challenges, and Potential for Machine Learning in Understanding and Applying Heat Transfer Phenomena." *ASME. J. Heat Transfer*. December 2021.
- [8] Sergio Ledesma, J.M. Belman-Flores, J.M. Barroso-Maldonado, Analysis and modeling of a variable speed reciprocating compressor using ANN, *International Journal of Refrigeration*, Volume 59, 2015, Pages 190-197
- [9] Hanlong Wan, Tao Cao, Yunho Hwang, Se-Dong Chang, Young-Jin Yoon, Machine-learning-based compressor models: A case study for variable refrigerant flow systems, *International Journal of Refrigeration*, Volume 123, 2021, Pages 23-33.
- [10] Gerardo Díaz, Mihir Sen, K. T. Yang & Rodney L. McClain, Simulation of Heat Exchanger Performance by Artificial Neural Networks, Volume 5, 1999, Pages 195-208

- [11]H.M. Ertunc, M. Hosoz, Artificial neural network analysis of a refrigeration system with an evaporative condenser, *Applied Thermal Engineering*, Volume 26, Issues 5–6, 2006, Pages 627-635.
- [12]Pooria Behnam, Meysam Faegh, Mohammad Behshad Shafii, Mehdi Khiadani, A comparative study of various machine learning methods for performance prediction of an evaporative condenser, *International Journal of Refrigeration*, Volume 126, 2021, Pages 280-290.
- [13]Shaghayegh Tarabkhah, Behrang Sajadi, Mohammad Ali Akhavan Behabadi, Prediction of heat transfer coefficient and pressure drop of R1234yf and R134a flow condensation in horizontal and inclined tubes using machine learning techniques, *International Journal of Refrigeration*, Volume 152, 2023, Pages 256-268.
- [14]D.J. Swider, M.W. Browne, P.K. Bansal, V. Kecman, Modelling of vapour-compression liquid chillers with neural networks, *Applied Thermal Engineering*, Volume 21, Issue 3, 2001, Pages 311-329.
- [15]J. Navarro-Esbrí, V. Berbegall, G. Verdu, R. Cabello, R. Llopis, A low data requirement model of a variable-speed vapour compression refrigeration system based on neural networks, *International Journal of Refrigeration*, Volume 30, Issue 8, 2007, Pages 1452-1459.
- [16]M. Mohanraj, S. Jayaraj, C. Muraleedharan, Applications of artificial neural networks for refrigeration, air-conditioning and heat pump systems—A review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Volume 16, Issue 2, 2012, Pages 1340-1358
- [17]M.M. Rashidi, A. Aghagoli, R. Raoofi, Thermodynamic analysis of the ejector refrigeration cycle using the artificial neural network, *Energy*, Volume 129, 2017, Pages 201-215.
- [18]Oguzhan Pektezeli, Halil Ibrahim Acar, Experimental comparison of R290 and R600a and prediction of performance with machine learning algorithms, Volume 29, 2023 - Issue 5, Pages 508-522
- [19]Yufeng Wang, Wanyong Li, Ziqi Zhang, Junye Shi, Jiangping Chen, Performance evaluation and prediction for electric vehicle heat pump using machine learning method, *Applied Thermal Engineering*, Volume 159, 2019, 113901
- [20]Ji-Hyun Shin, Young-Hum Cho, Machine-Learning-Based Coefficient of Performance Prediction Model for Heat Pump Systems, Volume 12 Issue 1
- [21]MathWorks, Regression Learner App, <https://www.mathworks.com/help/stats/regression->

learner-app.html?s_tid=CRUX_lftnav(最終閲覧日：2024年2月1日)

- [22]Vapnik, V. The Nature of Statistical Learning Theory. Springer, New York, 1995
- [23]Breiman, L. "Random Forests." Machine Learning 45, 2001, pp. 5 – 32
- [24]竹里光世, HFO1234yf および CO₂ を含む低 GWP 混合冷媒を用いたヒートポンプのサイクル性能評価に関する実験的研究, 九州大学, 2019
- [25]Karl Pearson, VII. Mathematical contributions to the theory of evolution.—III. Regression, heredity, and panmixia, Volume 187, 1896
- [26]Ding, C., and H. Peng. "Minimum redundancy feature selection from microarray gene expression data." Journal of Bioinformatics and Computational Biology. Vol. 3, Number 2, 2005, pp. 185–205