

バッテリー電圧推定を目的とした機械学習モデル における精度評価指標の提案

Proposal of Evaluation Metric for Machine Learning Model
for Battery Voltage Estimation

川 原 卓 磨¹
Takuma KAWAHARA

佐 藤 優 気²
Yuki SATO

佐 藤 功 二²
Koji SATO

要 旨

リチウムイオンバッテリーの電圧を推定する機械学習モデルの評価を目的として、アレニウス則に基づいた精度指標を新たに構築し、機械学習モデルの優劣を判断できるか検証した。機械学習モデルとして、データが存在しない領域で離散的な推定をするモデルと、連続的な推定が可能なモデルの二種類を選定した。その上で電動車から収集したフローティングカーデータを基に温度が離散的なデータを生成し、モデルの学習と評価をおこなった。その結果、一般的に用いられる評価指標であるテストデータに対する誤差評価では、二種類のモデルの評価結果に明確な差が出ないことを確認した。その一方で、我々が新たに構築したアレニウス則に基づいた評価指標では、モデル評価の差がより明確となることを確認した。本指標の導入により、収集データが限られる場合でも機械学習モデルの評価が可能となり、機械学習モデルを活用したバッテリー電圧推定技術の実用化に向けて前進できた。

ABSTRACT

In order to evaluate a machine learning model that estimates the voltage of a lithium-ion battery, we built a new accuracy evaluation metric based on the Arrhenius law, and tested it to see if it could be used to judge the relative merits of machine learning models. Two types of machine learning model were selected. One was a type that performed discrete estimates in regions where data are not available, while the other was capable of performing continuous estimation. Then, discrete temperature data based on floating car data collected from electric vehicles were generated, and the models were trained and evaluated. The results confirmed that the commonly used evaluation metric for evaluating deviation from test data showed no clear differences in evaluation results between the two model types. On the other hand, the authors' new evaluation metric based on the Arrhenius law showed clearer differences in the evaluations of the two models. Implementing this metric made it possible to evaluate a machine learning model even with limited collected data, thereby advancing the practical application of battery voltage estimation technology using machine learning models.

1. まえがき

Hondaは2050年カーボンニュートラルの実現に向けて、バッテリー電気自動車(以下BEV)・燃料電池車の開発を進めている。BEVのエネルギーストレージとして、リチウムイオンバッテリー(以下バッテリー)が広く採用されている⁽¹⁾。一般的にバッテリーは温度などの使用環境条件や車両からの要求エネルギー条件に応じて過電圧(閉回路電圧と開回路

電圧の差)が変化し出力可能なエネルギーが変化することが知られている^{(2), (3)}。任意の条件下におけるバッテリーの過電圧を高精度に推定できれば、あらゆる環境下においてBEVの航続可能距離を高精度に求めることにつながり、電欠のリスク低減や電欠に対するお客様の不安解消に貢献できると考える。

近年、実際に走行している車両からデータ(フローティングカーデータ)を大量に取得できるようになり、バッテ

¹ 先進パワーユニット・エネルギー研究所

E-mail: takuma_kawahara@jp.honda

² 株式会社テクノプロ テクノプロ・デザイン社

りの Big Data と機械学習を活用したバッテリー電圧推定技術の研究が盛んにおこなわれている⁽⁴⁾⁻⁽⁶⁾。先行研究事例として、電動バスから収集したバッテリーの時系列データを基に、Deep Learning を活用して電圧を推定するアルゴリズムを構築した研究が報告されている⁽⁴⁾。Shuangqi Li らは、時系列データを基に生成したテストデータで電圧推定精度を検証した結果、絶対パーセント誤差 (MAPE) 2.42% で電圧を推定可能であったと報告している。また、他の先行研究事例として、充放電試験装置でバッテリーの充放電サイクル試験をおこない、収集したデータを基に機械学習でバッテリーの電圧と温度を推定するアルゴリズムを構築した研究も報告されている⁽⁵⁾。Manh-Kien Tran らは収集したデータの 30% をテストデータとして活用し精度を検証した結果、決定木モデルは決定係数 0.99 で電圧と温度を推定可能であったと報告している。我々は、機械学習は複数因子が関与する非線形なバッテリーの電圧挙動を高精度に再現可能な技術であるとして、注目している。

しかし、実際に適用する場合には、市場においてバッテリーがどのように使われるか、十分な検証が必要である。例えば BEV、ハイブリッド、プラグインハイブリッドといったパワーユニットの形式や、シティコミューターか長距離移動用などの車両の特性によって、バッテリーの使用条件が異なることが想定される。さらには、学習データが十分に得られないことも考えられる。このようなバッテリーの使用状況の相違から、機械学習のアルゴリズムタイプによって、推定精度に違いが出ると思われる⁽⁷⁾。そのため、車両の特性や市場によって異なるバッテリーの使われ方データの特性に対応した、適切な機械学習手法を選択する必要があると考える。

本研究では、機械学習モデルの評価に電気化学の知見を活用する試みをおこなった。その結果として本稿では、一般に知られている化学反応法則であるアレニウス則を用いて、バッテリー電圧推定の機械学習モデルを評価する手法を提案する。

2. 課題とアプローチ

2.1. データによる課題

機械学習モデルは演えきのに推定値を算出する物理モデルとは異なり、収集したデータを基に帰納的にデータの傾向を学習し推定値を算出する手法である。そのため、収集データが存在しない条件での推定は、精度が低下する可能性がある。

一例として Fig. 1 に、収集データが存在しない領域で機械学習モデルがどのような推定をするか比較した結果を示す。比較した機械学習モデルはタイプの異なる以下四種類のモデルであり、説明変数は x 、目的変数は y で共通である。

- ・ Random Forest Regressor (RF)
- ・ K-Nearest Neighbors Regressor (KNN)
- ・ Gaussian Process Regressor -RBF kernel (GP)
- ・ Support Vector Regressor -RBF kernel (SVR)

ここで RF と KNN はデータが存在しない領域で離散的な推定をおこなうモデル、GP と SVR は連続的な推定が可能なモデルの代表例として示した。

Fig. 1 図中の破線は $y = x^2$ の真のトレンドを、点線は機械学習モデルの推定値を表している。また、丸点は学習データ、四角点はハイパーパラメータチューニング用の検証データを表しており、共に真のトレンドから離散的にサンプリングしたものである。この結果より、いずれの機械学習モデルでもデータが存在する条件では真のトレンドに近い値で推定できていることが確認できる。一方、学習・検証データが存在しない条件に関して、RF と KNN の推定値は真のトレンドから逸脱していることが確認できる。RF は学習データを参考に決定木のノード分岐を生成しデータの傾向を学習するため、学習データが離散的に与えられると推定値が離散的となる性質がある。KNN は学習データ中の近傍データを基に推定値を算出するアルゴリズムであるため、RF と同様に学習データが離散的に与えられると推定値が離散的となる性質がある。よって、真のトレンドが連続的に変化する場合、RF と KNN はデータが存在していない条件で真のトレンドからかい離する傾向となる。GP と SVR に関しては、検証データが存在しない範囲でも推定値が真のトレンドから逸脱していないことが確認できる。これは、推定値が連続的な値となる GP と SVR の性質が、連続的な真のトレンドを学習するために効果的に作用

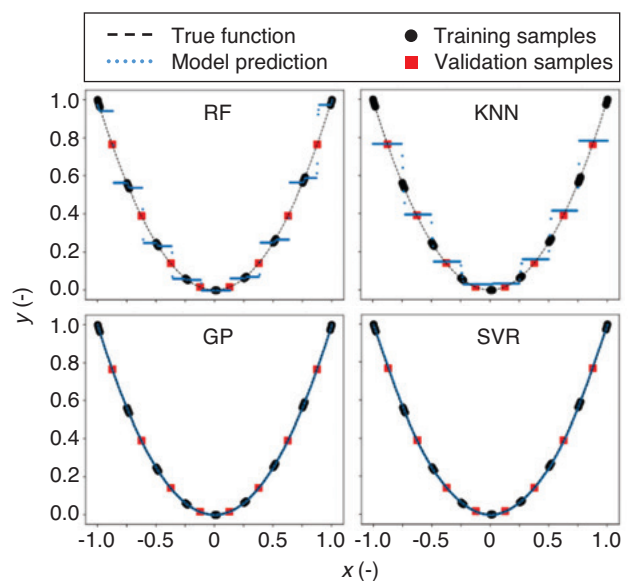


Fig. 1 Comparison of estimation results of machine learning models when data are given discretely

したためと考える。本結果から、機械学習モデルが真のトレンドを学習できているかを検証するためには、離散的なデータでの検証のみでは不十分であり、説明変数を連続的に変化させた上での網羅的な検証が必要である。

2.2. アプローチ

前節に記載したように、機械学習モデルを活用したバッテリー電圧推定技術を適用するためには、機械学習モデルを連続的かつ網羅的に評価をおこなうという課題を解決する必要があると考える。

本課題への対応として、フローティングカーデータをあらゆる条件で網羅的に収集して、機械学習モデルの検証を網羅的に実施するアプローチが考えられる。しかし、フローティングカーデータから得られる条件は車両の使用環境に大きく依存する。例えば、温度データは車両が使用される気候に依存し、低温から高温まで連続的かつ網羅的にデータを得られる保証がない。そのため、必要十分なデータを収集するために大量の車両と長期間のデータ蓄積が必要となる可能性がある。実用性の観点からそのアプローチは現実的ではないため、別のアプローチによる検証が必要である。

上記の課題を解消するため、本稿で我々は電気化学的知見を用いた新たな評価指標を提案する。本評価指標は、仮想的に生成した連続的かつ網羅的なデータを機械学習モデルに入力し、その出力値の入力データに対する応答を評価するものである。入力データを仮想的に生成する場合、モデル出力値に対応する真の値は存在していないため、出力値と真の値の誤差を定量化することは不可能である。しかしながら、入力データの変化に対する出力値の応答は、電気化学的な理論式でトレンドを表現することが可能である。提案するアプローチは、入力データの変化に対するモデルの出力値の応答と理論式とを比較することで、定量的な評価指標を算出するものである。

本研究では収集したフローティングカーデータをもとに、温度が離散的なデータを生成し、四種類の機械学習モデル (RF, KNN, GP, SVR) の学習と評価をおこなった。その上で、学習データが離散的に与えられた場合に、離散的な推定をおこなう RF, KNN と連続的に推定が可能な GP, SVR の差を判断できるか検証した。

3. 検証のフロー

Fig. 2 に本研究全体の検証フローの概略を示す。解析全体は Step 1: モデルの学習, Step 2: モデルの評価、の二つのステップで構成した。Step 1 では、車両から収集したバッテリーのフローティングカーデータを基に、機械学習モデルの学習に必要なデータを生成した。その上で、四種類の機械学習モデル (RF, KNN, GP, SVR) の学習を

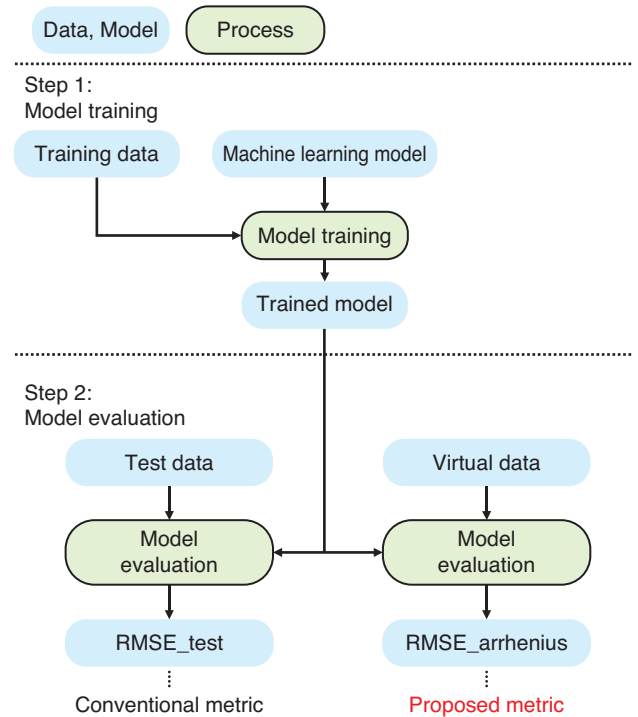


Fig. 2 Flowchart of entire evaluation in this study

おこなった。Step 2 では学習済の機械学習モデルの精度を、一般的な評価指標と新たに提案する評価指標とで定量化した。

以下本稿においては、第 4 章で Step 1 について詳細を記述する。第 5 章では Step 2 について、二つの評価指標の詳細を説明する。第 6 章では検証結果を示した上で、双方の評価指標の違いを議論する。最後に第 7 章で本研究の結論を述べる。

4. モデルの学習

Step 1 は、以下のプロセスで構成した。

- (1) 学習データの生成
- (2) 機械学習モデルの学習

本章では、各プロセスの詳細を記述する。

4.1. 学習データの生成

本研究では、Plug-in Hybrid 車から収集したバッテリーのフローティングカーデータ (レコード数 21,765,370) を活用して、学習データを生成した。データ収集対象の車両は、使用開始後 30 日以内の車両であり、初期からのバッテリー性能変化が小さい車両である。収集したデータ項目はバッテリーの過電圧、温度、電流、開回路電圧である。本研究の目的は、離散的なデータで学習した機械学習モデルに対して、モデルの優劣を適切に判断可能な評価指標を見出すことである。そのため上記データを基に離散的なデータを

生成し、モデルの学習データとして使用した。本研究では離散化は温度に対しておこない、 ± 0.5 deg. C の幅で -20, -10, 0, 10, 20, 30, 40 deg. C のデータを各々500レコードずつランダムに抽出した。抽出したデータの温度分布は Fig. 3 に示す通りである。

4.2. 機械学習モデルの学習

バッテリーの過電圧を推定するモデルの構造を Fig. 4 に示す。車両から取得したデータと機械学習モデルを用いて、バッテリーの過電圧を推定する。機械学習モデルの説明変数は開回路電圧、電流、温度の3変数であり、目的変数と説明変数は時間が同期しているデータとした。機械学習モデルは教師あり回帰モデルの内、タイプの異なる四種類のモデルを採用した。学習データが存在しない領域の推定値が離散的になる機械学習モデルとして RF, KNN を採用し、学習データが存在しない領域でも推定値が連続的になる機械学習モデルとして、GP, SVR を採用した。機械学習モデルのハイパーパラメータは学習データを活用して Hold-out 法で最適化をおこない決定した。最適化したパラメータを Table 1 に記す。なお Table 1 に記載していないその他のハイパーパラメータは、scikit-learn 1.0.1 の既定のものを用いた⁽⁸⁾。

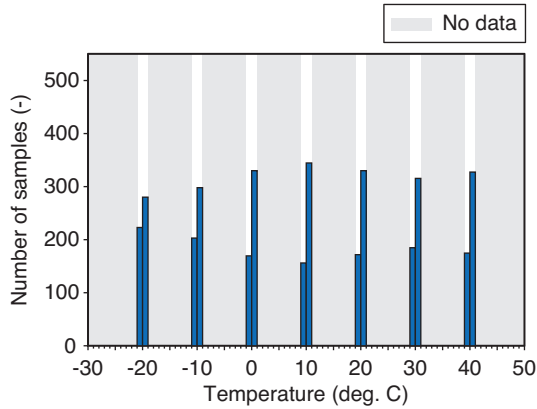


Fig. 3 Frequency histogram for temperature of training data

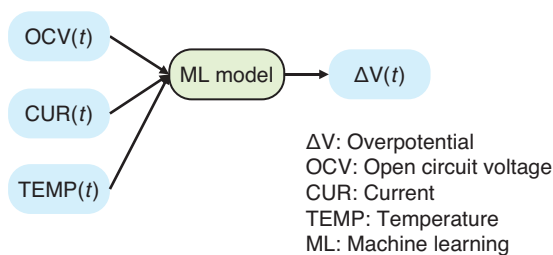


Fig. 4 Structure of machine learning model

Table 1 Optimized hyperparameters of machine learning models

ML model	Hyperparameters
RF	n_estimators: 10; max_depth: 50
KNN	n_neighbors: 6; weights: uniform
GP	kernel function: RBF length_scale: 200; length_scale_bounds: fixed
SVR	kernel function: RBF epsilon: 0.01

5. モデルの評価

Step 2 では、一般的に用いられる評価指標と、新たに提案する評価指標の差を検証するため、以下二つの指標で学習済モデルの精度を評価した。

(1) テストデータに対する精度

(2) 過電圧が従う理論式に対する精度

本章では、各評価指標の詳細を記述する。

5.1. テストデータに対する精度

テストデータに対する精度は、Fig. 5 に示すフローにより定量化した。なお、本評価指標は機械学習モデルの精度評価において一般的に採用されているものである。まず、テストデータの説明変数を学習済モデルに入力し、モデルの推定値を取得する。その上で、モデルの推定値とテストデータの目的変数を比較し、推定誤差を算出する。推定誤差は、以下の式(1)で表される平均二乗平方根誤差(RMSE)で定量化した。

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (f_i - y_i)^2} \quad (1)$$

ここで n は総レコード数、 f は機械学習モデルの推定値、 y はテストデータの目的変数の値である。以降、本評価指標を $RMSE_{test}$ と表記する。

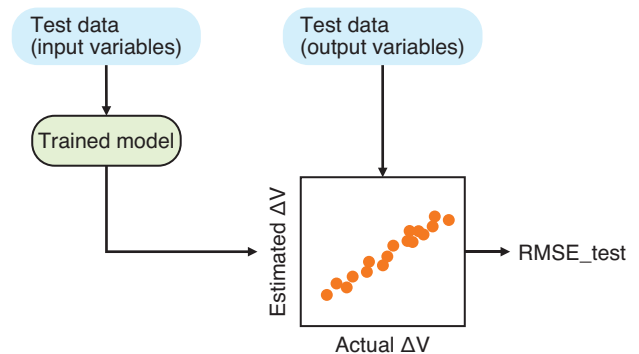


Fig. 5 Flow chart of evaluation of $RMSE_{test}$

テストデータは、学習データの生成と同様に、フローティングカーデータから±0.5 deg. C の幅で-20, -10, 0, 10, 20, 30, 40 deg. C のものを各々500レコードずつランダムに抽出した (Fig. 6). 但し、学習データで抽出したデータとは重複しないように抽出した。

5.2. 過電圧が従う理論式に対する精度

過電圧が従う理論式に対する精度は、Fig. 7 に示すフローにより定量化した。なお、本評価指標は機械学習モデルを連続的かつ網羅的に評価する目的で、今回新たに提案する評価指標である。本研究では、理論的な式を比較的簡易的に定めることができる、過電圧の温度依存性を評価の対象とした。

評価は連続的かつ網羅的に説明変数データを生成した上で、生成したデータを学習済モデルに入力し、モデルの推定値を取得した。次に横軸を入力した仮想データの温度値、縦軸をモデルの推定値としてプロットした。その結果

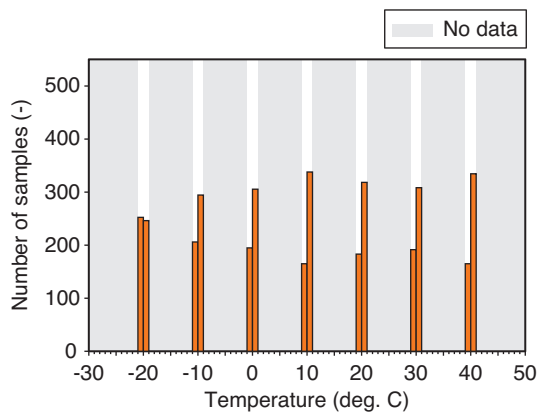


Fig. 6 Frequency histogram for temperature of test data

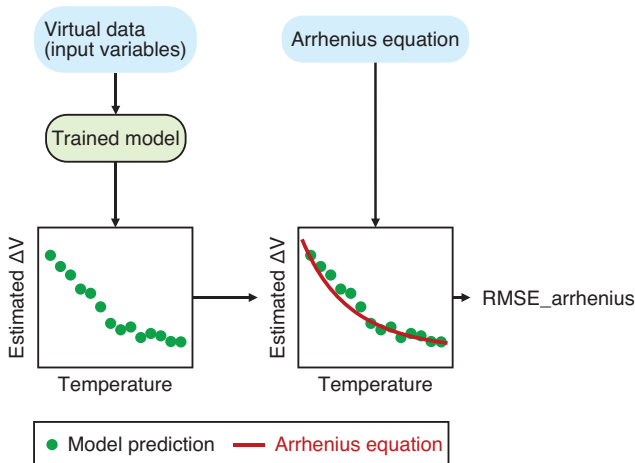


Fig. 7 Flow chart of evaluation of RMSE_arrhenius

に対して、アレニウスの式から導いた関数でフィッティングをおこない、その誤差を RMSE で定量化した。以降、本評価指標を RMSE_arrhenius と表記する。

仮想データは、バッテリーの想定使用条件範囲内において連続的に条件を変化させて生成した。具体的には、以下のパターン (各温度 671 パターン) でデータを生成した。

- ・ 電流: 0.5 から 1.5 C, 0.1 C ごと (11 パターン)
- ・ 開回路電圧: 3.5 から 4.1 V, 0.01 V ごと (61 パターン)
- ・ 温度: -20 から 40 deg. C, 1 deg. C ごと (61 パターン)

生成したデータの温度分布を Fig. 8 に示す。テストデータの温度分布である Fig. 6 と比較して、データが連続的かつ網羅的であることが確認できる。各温度の全パターンにおける機械学習モデルの平均推定値を、各温度の代表値として採用した。

機械学習モデル推定値の温度依存性の評価のための理論式はアレニウスの式を活用した。バッテリーの内部抵抗のうち、界面電荷移動抵抗やイオン拡散速度の低下に伴う抵抗の温度依存性は、アレニウスの式に従うことが知られている⁽⁹⁾。一方で集電体や電極中の導電材を流れる電流の電気抵抗はアレニウスの式に従わない。これら抵抗の温度依存性を考慮し、過電圧の温度依存性は、アレニウスの式に定数項を加えた以下の式 (2) に従うと考えた。

$$\Delta V = A \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) + \Delta V_0 \quad (2)$$

ここで、 ΔV は過電圧、 R は気体定数、 T は温度、 E_a は活性化エネルギー、 A は温度に依存しない係数、 ΔV_0 はアレニウスの式に従わない過電圧を表現する定数である。機械学習モデルの推定値の温度依存性を、式 (2) でフィッティングする際の最適化パラメータは A , E_a , ΔV_0 である。

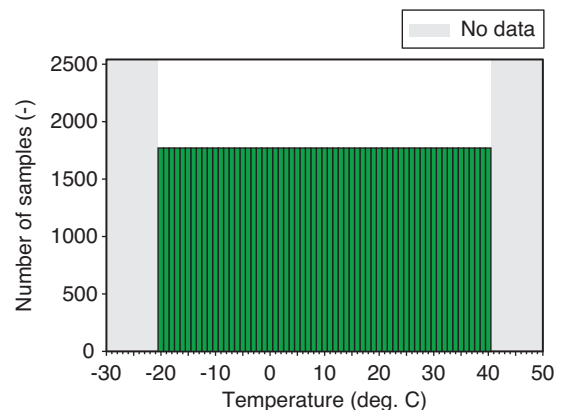


Fig. 8 Frequency histogram for temperature of generated data

6. 結果と考察

データがない領域で離散的な推定をおこなうモデル RF, KNN と、データがない領域でも連続的な推定が可能なモデル GP, SVR との優劣を判断できるかを検証するため、Fig. 9 に四種類の機械学習モデルを二種類の評価指標で評価した結果を示す。なお、学習データとテストデータの生成において、ランダムパターン（ランダムシード）を 32 回繰り返して学習と検証を実施した。また、RMSE 32 回分の平均を機械学習モデルごとに Table 2 に整理して示す。本結果から、RMSE_test に関しては、RF, KNN の誤差（平均 20.8 mV）と GP, SVR の誤差（平均 20.4 mV）の差が小さく、優劣の判断ができないことが確認できた。一方で、今回新たに提案した指標である RMSE_arrhenius では、RF, KNN の誤差（平均 12.3 mV）は GP, SVR の誤差（平均 1.2 mV）に比べ 10 倍大きく算出され、両者の差が明確に判断できることを確認した。

機械学習モデルの予測値とテストデータの実測値を比較した結果を Fig. 10 に示す。なお、本結果ではランダムパ

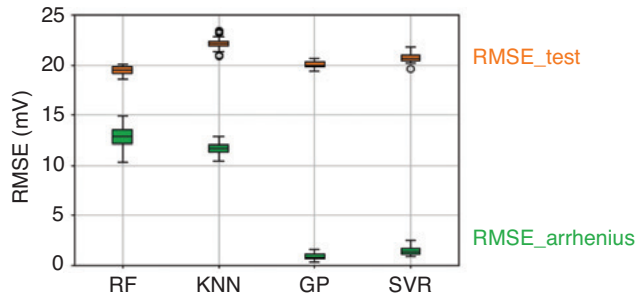


Fig. 9 Evaluation results of machine learning models

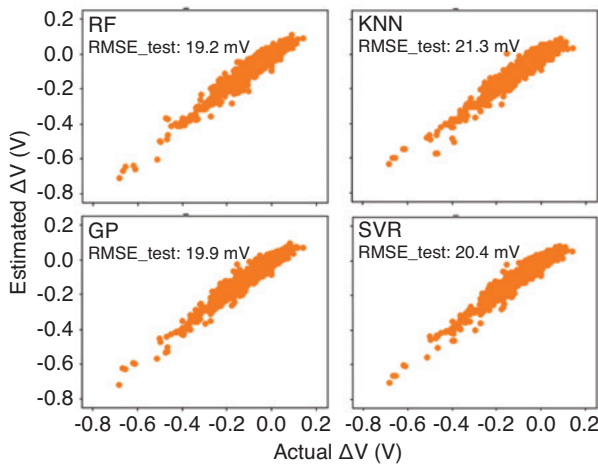


Fig. 10 Comparison of estimations of machine learning models with actual values of test data

Table 2 Evaluation results of machine learning models

ML model	RMSE_test	RMSE_arrhenius
RF	Average: 20.8 Standard deviation: 1.4	Average: 12.3 Standard deviation: 1.1
KNN		
GP	Average: 20.4 Standard deviation: 0.5	Average: 1.2 Standard deviation: 0.5
SVR		

(Unit: mV)

ターンを一つに固定してある。この結果から、テストデータに対する推定において、各モデルにおいて特徴的な傾向は確認できず、各モデル差が無いと判断した。テストデータの温度範囲は、学習済モデルの温度範囲と同様であるため、全てのモデルがデータの傾向を適切に学習できたことが理由と考える。

機械学習モデルの推定値の温度依存性と式 (2) との比較結果を Fig. 11 に示す。ここで丸点は学習済モデルに仮想データを入力して得られた推定結果の、1 deg. C ごとの平均値である。実線は、式 (2) で上記平均値をフィッティングしたものである。この結果から、RF, KNN は、GP, SVR と比較してモデルの推定値が温度変化に対して不連続に変化しており、式 (2) から予測される理論値から相対的に明らかに逸脱していることが確認できた。一方で、GP, SVR は、モデルの推定値が温度変化に対して、連続に変化しており、低温から高温にかけて、式 (2) とよく一致していることが確認できた。

本結果より、従来の評価指標 (RMSE_test) ではデータが存在しない領域での精度の優劣を判断できなかったが、新たに提案した評価指標 (RMSE_arrhenius) では、優劣を明確に判断できることを確認した。

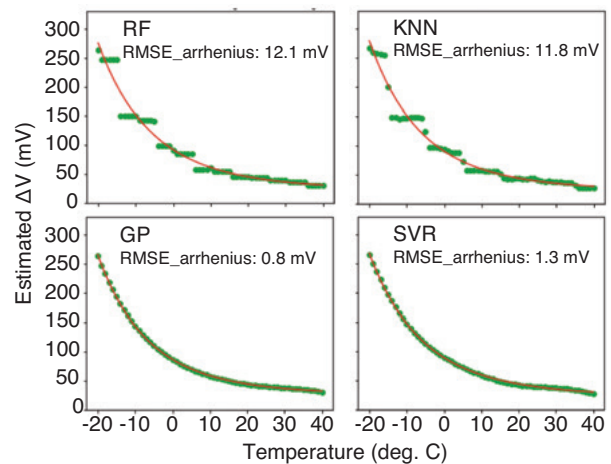


Fig. 11 Temperature dependence of machine learning model estimations compared to curves predicted from Arrhenius equation

7. まとめ

本稿では、機械学習を活用したバッテリー電圧推定モデルの評価に関し、電気化学的な理論式(アレニウスの式)に基づいた評価指標を新たに提案した。我々は車両から収集したデータをもとに、温度が離散的なデータを生成し四種類の機械学習モデル(RF, KNN, GP, SVR)の学習と評価をおこなった。その結果、従来の評価指標(テストデータに対するRMSE)ではRF, KNNとGP, SVRの差が明確に判断できない一方で、提案する新たな評価指標では差が明確に判断できることを明らかにした。

従来の評価指標を用いた機械学習モデルの評価では、モデルの評価に大量の車両から長期間のデータを収集することが必要であり、実用性の観点から課題があった。しかし、提案する評価指標により、収集データが限られる場合でも機械学習モデルの評価が可能となり、機械学習モデルを活用したバッテリー電圧推定技術の実用化に前進できたと考える。本研究においては、理論的な式を簡易的に定めることができる、過電圧の温度依存性を評価に活用した。しかしながらトレンドを表現できる支配的な理論式を定めることができれば、他の変数(電流、充電率など)も評価に活用が可能であると考え。今後の研究においては、過電圧の温度依存性だけでなく、その他の変数の依存性評価も進めていく予定である。

参考文献

- (1) Chian, T. Y., Wei, W. L. J., Ze, E. L. M., Ren, L. Z., Ping, Y. E., Abu Bakar, N. Z., Faizal, M., Sivakumar, S.: A Review on Recent Progress of Batteries for Electric Vehicles, International Journal of Applied Engineering Research, Vol. 14, No. 24, p. 4441-4461, (2019)
- (2) Vidal, C., Gross, O., Gu, R., Kollmeyer, P., Emadi, A.: xEV Li-Ion Battery Low-Temperature Effects—Review, IEEE Transactions on Vehicular Technology, Vol. 68, No. 5, p. 4560-4572, (2019)
- (3) Meyer, N., Whittall, I., Christenson, M., Loisel-Lapointe, A.: The Impact of Driving Cycle and Climate on Electrical Consumption & Range of Fully Electric Passenger Vehicles, EVS26 - International Battery, Hybrid and Fuel Cell Electric Vehicle Symposium, (2012)
- (4) Li, S., Li, J., He, H., Wang, H.: Lithium-ion battery modeling based on Big Data, Energy Procedia, Vol. 159, p. 168-173, (2019)
- (5) Tran, M.-K., Panchal, S., Chauhan, V., Brahmabhatt, N., Mevawalla, A., Fraser, R., Fowler, M.: Python-Based

Scikit-Learn Machine Learning Models for Thermal and Electrical Performance Prediction of High-Capacity Lithium-Ion Battery, Int. J. Energy Res., Vol. 46, Issue 2, p. 786-794, (2022)

- (6) Heinrich, F., Klapper, P., Pruckner, M.: A comprehensive study on battery electric modeling approaches based on machine learning, Energy Informatics, Vol. 4, Article No. 17, (2021)
- (7) 国立研究開発法人産業技術総合研究所:機械学習品質マネジメントガイドライン 第2版, (2021)
- (8) <https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.tree.DecisionTreeRegressor.html#sklearn.tree.DecisionTreeRegressor>, 2021/1/15
- (9) Rangarajan, S. P., Barsukov, Y., Mukherjee, P. P.: In Operando Impedance Based Diagnostics of Electrode Kinetics in Li-Ion Pouch Cells, Journal of The Electrochemical Society, Vol. 166, No. 10, A2131-A2141, (2019)

■ 著 者 ■



川原 卓磨



佐藤 優気



佐藤 功二