

構造未知システムのモデリング手法*

菊 田 章**
神 谷 祐 二**

(昭和57年4月30日受理)

A Modeling Technique for a System of Unknown Structure

by Akira KIKUTA and Yuji KAMIYA

This paper proposes a technique for modeling a system of which the structure is unknown. The algorithm of this technique belongs to the method of successive determination of variables.

This proposed technique is applied to two simple illustrative examples. The results obtained are compared with those obtained by the revised GMDH (Group Method of Data Handling) algorithm using the Prediction Sum of Squares (PSS) as a criterion for model selection and the GSM (Group Method and Structural Modeling) algorithm respectively.

1. ま え が き

現実のシステムにおいて、その入出力関係の構造は、複雑な多変数・非線形性を程することが多く、システムの構造をあらかじめ仮定してモデル化することは、一般に困難であると思われる。複雑で構造未知なシステムのモデリング方法論として、システムの入出力データをもとにモデル化を行なう GMDH (Group Method of Data Handling)¹⁾ が提案され、その後各種改良形 GMDH^{1)~4)} が報告されている。GMDH 手法は、ブラックボックスタイプのモデリング手法であるが、少ない入出力データで複雑な多変数・非線形系の同定・予測が可能であること、多変数のわりには計算量が少なくアルゴリズムが安定である、といった特徴を有している。しかし、GMDH 及び改良形 GMDH 手法によって得られるモデルは、部分表現式あるいは最適な部分表現式を多層に積み重ねているために、一般に高次で複雑になり過ぎる嫌いがああり、入出力関係を直接的に表現しようとする膨大な記憶容量を要するなどの欠点を有している。本稿での目的は、構造未知なシステムの入出力データが与えられている場合に、そのシス

* 計測自動制御学会北海道支部学術講演会 (昭和57年2月) 及び昭和57年電気学会全国大会 (昭和57年4月) で一部発表

** 北見工業大学電気工学科

テムの入出力関係の構造をより低次で得ること、得られたモデルの入出力関係を直接的に表現することである。本稿では、GMDH 手法の変数の組合せの原理と変数選択の評価規範に赤池氏の情報量規準 AIC (Akaike's Information Criterion)⁵⁾ とを用いて、比較的簡単なアルゴリズムによる逐次変数導入型のモデリング手法を提案している。次に、本手法を簡単な同定問題に適用し、その結果を予測平方和 (Prediction Sum of Squares, PSS)⁶⁾ を用いる改良形 GMDH²⁾ 及び GSM (Group Method and Structural Modeling)⁴⁾ アルゴリズムによって得られた結果とそれぞれ比較することにより本手法の有効性を確かめている。

2. 重回帰モデルと変数の自己選択規範としての情報量規準 AIC

入出力データが N 組で $(k-1)$ 変数からなる重回帰モデルは

$$y = a_1 + a_2 x_1 + a_3 x_2 + \cdots + a_k x_{k-1} + \varepsilon \quad (1)$$

と表わされる。ここで、 $x_i (i=1, \dots, k-1)$ は入力変数、 y は出力変数、 ε は平均 0 分散 σ^2 の正規分布にしたがう互いに独立な残差項を表わす。赤池氏の情報量規準 AIC⁵⁾ は

$$\text{AIC} = -2 (\text{最大対数尤度}) + 2 (\text{未知パラメータ数}) \quad (2)$$

として定義され、第 1 項はモデルのデータへの適合の良さを、第 2 項は未知パラメータの数を与えており第 1 項と第 2 項とのトレード・オフになっている。この定義によれば、最小の AIC 値を与えるものが最良のモデル (最小 AIC 推定) とされ、もし 2 つのモデルが同程度に適合しているならば、第 1 項は等しいので第 2 項のパラメータ数が少ない方が良いモデルであることを示している。ところで、(1) 式で表わされる重回帰モデルに対する情報量規準 AIC は、その対数尤度関数 $l(\theta)$ が

$$l(\theta) = -\frac{N}{2} \log_e (2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N \varepsilon_i^2 \quad (3)$$

ここで、 θ は未知パラメータで $\theta^T = [a_1 \ a_2 \ \cdots \ a_k]$

で与えられることから

$$\text{AIC}_k = N \log_e (\text{RSS}/N) + 2k + C \quad (4-1)$$

となる。ただし

$$\text{RSS} = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4-2)$$

$$\hat{y}_i = a_1 + \sum_{j=1}^{k-1} a_{j+1} x_{ji} \quad (4-3)$$

ここで、 y_i は出力変数 y の i 番目の観測値、 \hat{y}_i は N 組のすべてのデータを用いて得られる (4-3) 式の重回帰式から計算される回帰推定値、RSS は残差平方和 (Residual Sum of Squares)、 C は項数に無関係な定数でありデータ数が等しい場合の相対評価として用いるときは零とみな

することができる。以下では、重回帰モデルに取り込む変数をシステムチックに構成し、その変数の自己選択規準に AIC を用いて AIC 値を最小にするモデルの構造及びパラメータを決定するアルゴリズムを考える。

3. 変数の自己選択規準に AIC を用いる逐次変数導入型モデリングのアルゴリズム

ここでは、入力変数を x_1, x_2, \dots, x_n , 出力変数を y として、その入出力データが N 組で与えられているものとする。

[1] ステップ 1

項数を $k=2$ として、(5) 式の回帰モデルを考える。

$$y = a_1 + a_2 x_i \tag{5}$$

(5) 式に対応する正規方程式

$$(X^T X) A = X^T Y \tag{6}$$

ここで、

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{i1} \\ 1 & x_{i2} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{iN} \end{bmatrix}, \quad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

から、(7) 式の行列 Φ を構成する。

$$\Phi = \begin{bmatrix} \overbrace{k} & \overbrace{1} & \overbrace{k} \\ k \left(\begin{array}{c|c|c} \widehat{X^T X} & \widehat{X^T Y} & \widehat{\mathbf{I}} \\ \hline \widehat{Y^T X} & \widehat{Y^T Y} & 0 \end{array} \right) & & \end{bmatrix} \tag{7}$$

行列 Φ の最下行は、残差平方和 RSS を計算するために付け加えたものである。(7) 式の最初の k 列の対角要素をピボットにして掃き出し法を適用すると、 $(k+1)$ 列目に (5) 式の未知パラメータ及び残差平方和が得られる。したがって、すべての入力変数 $x_i (i=1, \dots, n)$ に対して行列 Φ を計算し、AIC 値を最小とする変数を見出し、(7) 式から (8) 式を得る。

$$\Phi = \begin{bmatrix} \overbrace{k} & \overbrace{1} & \overbrace{k} \\ k \left(\begin{array}{c|c|c} \widehat{\mathbf{I}} & \widehat{(X^T X)^{-1} X^T Y} & \widehat{(X^T X)^{-1}} \\ \hline 0 & \widehat{Y^T Y - Y^T X (X^T X)^{-1} X^T Y} & \widehat{-Y^T X (X^T X)^{-1}} \end{array} \right) & & \end{bmatrix} \tag{8}$$

[2] ステップ 2

(7) 式の行列 Φ にさらに変数 x_j を組み込んだとき、 $B^T = [x_{j1} x_{j2} \dots x_{jN}]$ として (7) 式は

$$\Phi = \begin{matrix} & \overbrace{\begin{matrix} k & 1 & 1 & k & 1 \end{matrix}} & \\ \begin{matrix} k \\ 1 \\ 1 \end{matrix} & \left(\begin{array}{cc|cc|c} X^T X & X^T B & X^T Y & \mathbf{I} & 0 \\ \hline B^T X & B^T B & B^T Y & 0 & 1 \\ \hline Y^T X & Y^T B & Y^T Y & 0 & 0 \end{array} \right) & \end{matrix} \quad (9)$$

と書ける。この行列 Φ の最初の k 列の対角要素をピボットにして掃き出し法を適用し、計算機の記憶容量の節約を考え最初の k 列を削除すると行列 Φ は (10-1) 式の様に見える。

$$\Phi = \begin{matrix} & \overbrace{\begin{matrix} 1 & 1 & k & 1 \end{matrix}} & \\ \begin{matrix} k \\ 1 \\ 1 \end{matrix} & \left(\begin{array}{cc|cc} M_1 & M_4 & M_7 & 0 \\ \hline M_2 & M_5 & M_8 & 1 \\ \hline M_3 & M_6 & M_9 & 0 \end{array} \right) & \end{matrix} \quad (10-1)$$

ここで、

$$\left. \begin{aligned} M_4 &= (X^T X)^{-1} X^T Y \\ M_6 &= Y^T Y - Y^T X (X^T X)^{-1} X^T Y \\ M_7 &= (X^T X)^{-1} \\ M_9 &= -Y^T X (X^T X)^{-1} \end{aligned} \right\} \quad (10-2)$$

$$\left. \begin{aligned} M_1 &= M_7 X^T B \\ M_2 &= B^T (B - X M_1) \\ M_3 &= Y^T (B - X M_1) \\ M_5 &= B^T (Y - X M_4) \\ M_8 &= -B^T X M_7 = -M_1^T \end{aligned} \right\} \quad (10-3)$$

即ち、(10-1) 式を求めるとき (10-2) 式は行列 B を組み込む以前にすでに求められており、行列 B を組み込むときには (10-3) 式を計算するだけでよい。次に、operation 1~3 のアルゴリズムを定義する。

operation 1: この操作においては、変数の増加を行なう。即ち、行列 Φ にさらに変数を取り入れた場合に AIC 値が減少するならばその変数を取り入れる。まず、取り入れようとする変数から (10-3) 式を計算し (10-1) 式の行列 Φ を作成する。この変数を取り入れた場合の残差平方和 RSS は

$$\text{RSS} = M_6 - M_2^{-1} M_5 M_3 \quad (11)$$

として計算できるので、AIC 値が減少しない場合には行列 Φ に対して掃き出し法を適用する必要はない。AIC 値が減少する場合には行列 Φ の M_2 をピボットにして 1 列目を掃き出し (12) 式の操作を行なう。

$$\left. \begin{array}{l} \left[\begin{array}{c|c|c} M_4 - M_1 M_2^{-1} M_5 & M_7 - M_1 M_2^{-1} M_8 & -M_1 M_2^{-1} \\ \hline M_2^{-1} M_5 & M_2^{-1} M_8 & M_2^{-1} \end{array} \right] \Rightarrow [M_4 \vdots M_7] \\ [M_6 - M_3 M_2^{-1} M_5 \vdots M_9 - M_3 M_2^{-1} M_8 \vdots -M_3 M_2^{-1}] \Rightarrow [M_6 \vdots M_9] \\ [X \vdots B] \Rightarrow X, \quad k = k+1 \end{array} \right\} \quad (12)$$

ここで、 \Rightarrow は左側の行列を右側の行列に置き換えることを示しており、各行列の右側の M_4, M_7, M_6, M_9, X はそれぞれ左側の M_4, M_7, M_6, M_9, X の拡大行列となる。

operation 2: この操作においては、変数の減少を行なう。即ち、行列 Φ に取り入れられている変数の中からある変数を削除した場合に AIC 値が減少するならば、その様な変数の中で AIC 値の減少分が最も小さい変数を削除する。(10-1) 式の行列 Φ の i 番目 (i 行目) の変数を削除の対象とする場合、削除後の残差平方和 RSS は

$$RSS = M_6 - \Phi^{-1}(i, i+2) \Phi(i, 2) \Phi(k+2, i+2) \quad (13)$$

として計算できるので、まず AIC 値が減少しかつ AIC 値の減少分の最も小さい変数を見出す。その変数が j 番目 (j 行目) であるとすれば、 $\Phi(j, j+2)$ をピボットにして行列 Φ の ($j+2$) 列目を掃き出し、 j 行目と ($j+2$) 列目を削除し行列 Φ のサイズを縮小する。同時に、行列 X の j 列目も削除しそのサイズを縮小する。項数は $k = k-1$ とする。以上の操作を AIC 値が減少しなくなるまで行なう。

operation 3: この操作においては、行列 Φ に取り入れられる変数の個数が計算機の記憶容量を考慮して指定された最大項数より大きくなった場合、本アルゴリズムの続行が不可能になるのを回避するために 1 変数の削除を行なう。即ち、行列 Φ に取り入れられる変数の個数が $k = \text{最大項数} + 1$ になった場合、1 変数削除して AIC 値が最小になるようにする。この操作が終了した時点で項数 $k = \text{最大項数}$ となる。

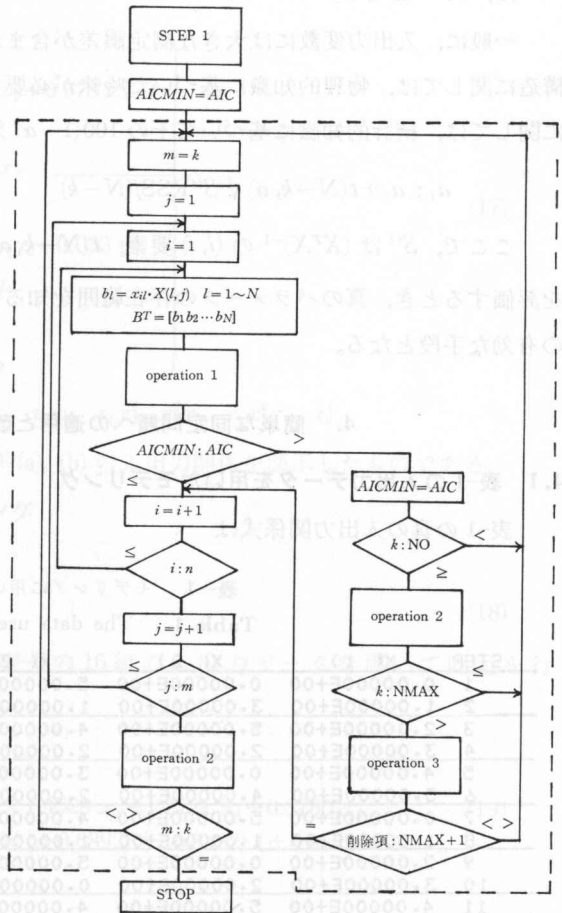


図-1 逐次変数導入型モデリングアルゴリズム

以上よりステップ2のアルゴリズムを図-1の点線で囲まれた部分で構成す

Fig. 1. The modeling algorithm with successive determination of variables.

る。ここで、NOは変数の減少を行なう操作に入るための指定項数である。NOは大きく指定することが望ましいが、大き過ぎると変数の組合せが膨大になる可能性も有しており適度に与えられねばならない。NMAXは指定最大項数で計算機の記憶容量を考慮してできる限り大きく指定することが望ましい。

[3] 停 止

停止は、ステップ2において行列Φに取り入れられている変数と入力変数との非線形結合により構成される変数が全く行列Φに取り入れられない場合で、かつ変数の削除も行なわれない場合である。このとき、AIC値が非常に小さければ真のシステム構造に類似した結果が期待される。

以上の結果、変数の自己選択規準にAICを用いる逐次変数導入型モデリングのアルゴリズムは、図-1となる。

一般に、入出力変数には大きな測定誤差が含まれるものであるから、同定されたモデルの構造に関しては、物理的知識に基づいた吟味が必要である。さらに、推定されたパラメータ値に関しては、統計的知識に基づいてその100(1-α)%信頼区間⁶⁾

$$a_i; a_i \pm t(N-k, \alpha) \sqrt{S^{ii}RSS/(N-k)} \tag{14}$$

ここで、 S^{ii} は $(X^T X)^{-1}$ の (i, i) 要素、 $t(N-k, \alpha)$ は自由度 $(N-k)$ のt分布の100α%点を評価するとき、真のパラメータの存在範囲を知る手掛りとなり、モデルの構造を吟味する際の有効な手段となる。

4. 簡単な同定問題への適用と改良形GMDHとの比較

4.1 表-1の入出力データを用いたモデリング

表-1の真の入出力関係式は

表-1 モデリングに用いられたデータ
Table 1. The data used for modeling

STEP	X(1)	X(2)	X(3)	X(4)	Y
1	0.00000E+00	0.00000E+00	5.00000E+00	5.00000E+00	4.40000E+00
2	1.00000E+00	3.00000E+00	1.00000E+00	4.00000E+00	2.60000E+00
3	2.00000E+00	5.00000E+00	4.00000E+00	3.00000E+00	1.30000E+01
4	3.00000E+00	2.00000E+00	2.00000E+00	2.00000E+00	4.40000E+00
5	4.00000E+00	0.00000E+00	3.00000E+00	1.00000E+00	4.40000E+00
6	5.00000E+00	4.00000E+00	2.00000E+00	0.00000E+00	9.60000E+00
7	0.00000E+00	5.00000E+00	4.00000E+00	1.00000E+00	1.02000E+01
8	1.00000E+00	1.00000E+00	1.00000E+00	2.00000E+00	1.00000E+00
9	2.00000E+00	0.00000E+00	5.00000E+00	3.00000E+00	6.20000E+00
10	3.00000E+00	2.00000E+00	0.00000E+00	4.00000E+00	1.70000E+00
11	4.00000E+00	5.00000E+00	4.00000E+00	5.00000E+00	1.60000E+01
12	5.00000E+00	3.00000E+00	1.00000E+00	4.00000E+00	5.80000E+00
13	0.00000E+00	0.00000E+00	3.00000E+00	3.00000E+00	1.70000E+00

Input-output relation ; $Y = (0.1 + 0.2X_1 + 0.3X_2 + 0.4X_3)^2 + \Delta$

$$y = (0.1 + 0.2 x_1 + 0.3 x_2 + 0.4 x_3)^2 \quad (15)$$

として表わされるものとする。ここでは、表-1の13組の入出力データを用いて同定を行なう。

(a) 本手法による結果

$$\begin{aligned} \hat{y} = & -0.0571 + 0.1125 x_1 + 0.1309 x_3 + 0.0251 x_1^2 + 0.1042 x_2^2 + 0.1403 x_3^2 + 0.1210 x_1 x_2 \\ & (\pm 0.2377) \quad (\pm 0.1537) \quad (\pm 0.1340) \quad (\pm 0.0229) \quad (\pm 0.0313) \quad (\pm 0.0244) \quad (\pm 0.0384) \\ & + 0.1595 x_1 x_3 + 0.2419 x_2 x_3 + 0.0117 x_3 x_4 + 0.0043 x_1 x_2^2 - 0.0081 x_1 x_2 x_3 \\ & (\pm 0.0319) \quad (\pm 0.0455) \quad (\pm 0.0158) \quad (\pm 0.0178) \quad (\pm 0.0216) \end{aligned} \quad (16)$$

ここで、カッコ内の数字は推定されたパラメータ値の95%信頼区間を表わしている。アンダーラインを付した変数は入出力関係式に一致している変数を示している。

(b) 予測平方和 (PSS) を用いる改良形 GMDH による結果

weight: 0.520

$$\left. \begin{aligned} & \text{1-st layer} \\ & y_1 = 4.171 - 3.632 x_2 + 0.258 x_1 x_2 + 0.973 x_2^2 \\ & y_2 = 0.237 + 0.996 x_3 + 0.365 x_2^2 \\ & y_4 = 1.198 + 0.960 x_3 + 0.461 x_1 x_3 \\ & \text{2-nd layer} \\ & z_1 = -0.534 + 0.932 y_2 + 0.060 y_2 y_4 - 0.033 y_2^2 \\ & z_2 = -0.935 + 0.868 y_1 + 0.282 y_4 \\ & \text{3-rd layer} \\ & \hat{y} = -0.080 + 0.571 z_1 + 0.442 z_2 \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

モデルに含まれる変数; $x_2, x_3, x_2^2, x_3^2, x_1 x_2, x_1 x_3, x_1 x_3^2, x_2^2 x_3, x_1 x_2^2 x_3, x_4^2$

図-2は、モデリングに用いた表-1及び(a), (b)の入出力関係を図示したものである。

4.2 表-2の入出力データを用いたモデリング

表-2の真の入出力関係式は

$$y = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 \quad (18)$$

として表わされるものとする。ここでは、表-2の16組の入出力データを用いて同定を行なう。

(a) 本手法による結果

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 5.3932 + 1.3081 x_1 + 1.1068 x_2 + 1.4529 x_3 + 1.2121 x_4 + 0.3760 x_5 \\ & (\pm 16.9539) \quad (\pm 0.6354) \quad (\pm 0.6556) \quad (\pm 0.6892) \quad (\pm 0.8422) \quad (\pm 0.6529) \end{aligned} \quad (19)$$

(b) GSM による結果

$$\hat{y} = 22.567 + 1.9262 x_2 + 1.4376 x_3 + 0.38201 x_4 \quad (20)$$

図-3は、モデリングに用いた表-2及び(a), (b)入出力関係を図示したものである。

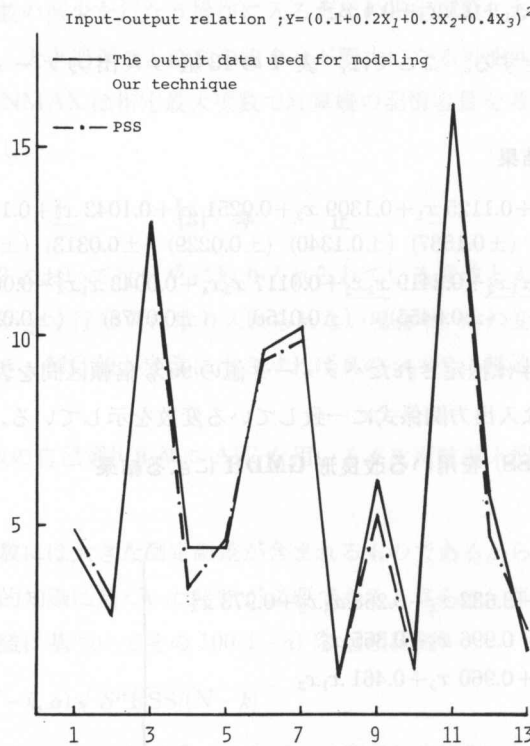


図-2 本手法と予測平方和 (PSS) を用いる改良形 GMDH による評価の比較

Fig. 2. Comparison of an estimation by our technique and it by the revised GMDH using the Prediction Sum of Squares (PSS).

表-2 モデリングに用いられたデータ

Table 2. The data used for modeling

STEP	X(1)	X(2)	X(3)	X(4)	X(5)	Y
1	1.24260E+01	9.93800E+00	1.02900E+01	9.96500E+00	1.07590E+01	6.41120E+01
2	1.01110E+01	9.96100E+00	1.22720E+01	1.04940E+01	6.81500E+00	6.38640E+01
3	1.16840E+01	1.07800E+01	1.11470E+01	8.79200E+00	1.02530E+01	6.31410E+01
4	1.06960E+01	1.04200E+01	1.05290E+01	8.98000E+00	9.90000E+00	6.12110E+01
5	9.73300E+00	8.40300E+00	1.13430E+01	9.55300E+00	9.88500E+00	5.75480E+01
6	9.46300E+00	9.65500E+00	9.77100E+00	9.71800E+00	1.11330E+01	5.94410E+01
7	9.24200E+00	1.03890E+01	1.01830E+01	9.10800E+00	9.88900E+00	5.90240E+01
8	1.14080E+01	1.23630E+01	1.01150E+01	9.72300E+00	1.03920E+01	6.33800E+01
9	9.33200E+00	8.72400E+00	9.20500E+00	8.77000E+00	1.08450E+01	5.53560E+01
10	9.22100E+00	9.78800E+00	1.06780E+01	8.76100E+00	1.08440E+01	5.82550E+01
11	9.78900E+00	9.87700E+00	9.94300E+00	9.66800E+00	1.00420E+01	5.96820E+01
12	9.22500E+00	1.05470E+01	8.41600E+00	1.08840E+01	8.80100E+00	5.63960E+01
13	1.02410E+01	1.13250E+01	1.11580E+01	1.03490E+01	1.07710E+01	6.30920E+01
14	1.10640E+01	8.81300E+00	8.48600E+00	1.06060E+01	9.03100E+00	5.82370E+01
15	1.07680E+01	1.09940E+01	9.99100E+00	8.89300E+00	1.09770E+01	6.18810E+01
16	9.06400E+00	1.14610E+01	8.85300E+00	1.19290E+01	1.11900E+01	6.23790E+01

Input-output relation ; $Y=X_1+X_2+X_3+X_4+X_5+\Delta$

以上の結果, 本手法で同定されたモデルは, 予測平方和 (PSS) を用いる改良形 GMDH 及び GSM アルゴリズムにより得られたモデルよりもシステム構造をよりとらえており, モデルに含まれる変数も比較的低次であることが示された。

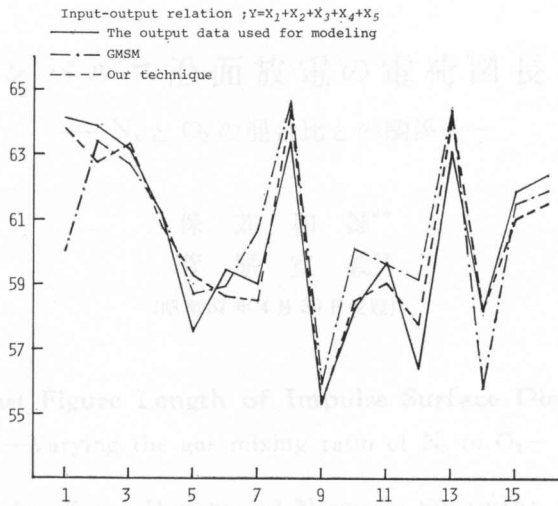


図-3 本手法と GMSM による評価の比較

Fig. 3. Comparison of an estimation by our technique and it by the GMSM.

5. 結 言

本稿では、GMDH 手法に比べてアルゴリズムが比較的簡単な逐次変数導入型モデリング手法を提案した。次に、本手法を簡単な同定問題に適用して、原データから非常に物理モデルに類似したシステム構造が得られることを示し、改良形 GMDH [2], [4] により得られた結果と比較して、本手法によって得られたモデルは物理モデルに対する類似・同定精度の点で優れていること、より低次であることが確認された。本手法によって得られるモデルの構造は、原データの統計的性質に依存するが、データ数が十分に多くなればその依存性は小さくなるものと思われる。

参 考 文 献

- 1) 池田・榎木： GMDH (発見的自己組織化法) と複雑な系の同定・予測、計測と制御, Vol. 14, No. 2, p. 185-195 (1975).
- 2) 田村・近藤： モデル選択の評価規準に予測平方和 (PSS) を用いる改良形 GMDH, 計測自動制御学会論文集, Vol. 14, No. 5, p. 519-524 (1978).
- 3) 近藤・田村： 情報量規準 AIC を用いて中間表現式を自己選択する改良形 GMDH, 計測自動制御学会論文集, Vol. 15, No. 4, p. 466-471 (1979).
- 4) 両部・大和・渋谷・榎木： GMSM によるセメント・プラントのシステム解析, システムと制御, Vol. 23, No. 10, p. 587-593 (1979).
- 5) 赤池： 情報量規準 AIC とは何か, 数理科学, No. 153 (1976).
- 6) 奥野ほか： 統多変量解析法, 日科技連 (1980).