

Kernel SOMによる燃料電池の視覚的損傷評価

Visual Damage Evaluation of Fuel Cells by Kernel SOM

福井 健一*1 北川 哲平*2 佐藤 一永*3 水崎 純一郎*4 沼尾 正行*1
 Ken-ichi Fukui Teppei Kitagawa Kazuhisa Sato Junichiro Mizusaki Masayuki Numao

*1大阪大学 産業科学研究所

The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University

*2大阪大学 大学院情報科学研究科

Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University

*3東北大学 工学研究科

School of Engineering, Tohoku University

*4東北大学 多元物質科学研究所

Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University

We have developed the foundation for analysis of vast amount of damage events utilizing Self-Organizing Map (SOM). Firstly, we validated the performance of Kullback-Leibler divergence based Kernel SOM for damage events. Then, the damage process of Solid Oxide Fuel Cell (SOFC) was reasonably visualized by our method. Finally, the mechanical effects were inferred by utilizing KeyGraph. This research can contribute by visual data mining to reliability of the fuel cells.

1. はじめに

燃料電池は直接、化学反応により電気を取り出すため、高効率、低公害なエネルギーデバイスである。その中でも固体酸化燃料電池 (Solid Oxide Fuel Cells: SOFC) は、70%近い発電効率を有し注目を集めており、世界の多くの企業や研究機関において実用化に向けた研究が進められている。しかし、SOFCは高温 (600°C~1000°C)、高酸化・還元環境という過酷な環境で発電するため、化学的劣化に加え物理的劣化が懸念されている。実際、運転中の熱膨張や還元膨張により、電解質や電極材のき裂やはく離が生じることが確認されている。しかしながら、SOFCの物理的劣化に関する研究は、化学的劣化に比べて極めて遅れており、近年、国内外で研究が開始されたばかりである [水崎 09]。

物理的劣化に関して、物理シミュレーションにより応力を解析する研究 [Sato 10] も行われているが、SOFCのように複合材から成り温度によって状態が変化する対象の損傷「過程」までは把握できていない。そこで、観測される損傷信号 (弾性波) から対応する損傷の種類を推定することになる。しかし、燃料電池内部の損傷状況をその場で観察することは困難であるため、個々の損傷信号に対する正解を得ることができず、教師あり学習により損傷事象の分類モデルを構築するアプローチは取れない。そのため本研究は、視覚的データマイニングにより、燃料電池の専門家が発見的に損傷の種類を特定することを支援し、損傷過程を視覚的に把握することを目的としている。

本研究では、データ分布の可視化と同時に特徴空間の量子化による大局的な評価が可能な自己組織化マップ (Self-Organizing Map: SOM) [Kohonen 95] に着目した。まず損傷事象に適した類似度を SOM に導入し分類性能を向上させた [福井 10]。そして、SOMによる可視化空間上の事象の出現確率密度の時間変化を推定することで、損傷過程の可視化を行った [Fukui 10, Fukui 11a]。さらに、損傷事象の共起関係から構成部材間の力

学的影響関係の推定を行った [北川 11]。

このような損傷過程の可視化や力学的影響の推定技術は、専門家の損傷メカニズム解明を支援すると共に、運用時の監視の基盤や、部材や形状の選定など安定な SOFC 開発に役立つ。本研究は、視覚的データマイニングにより、高変換効率・低公害な SOFC の健全性に関して環境に貢献する。

2. 損傷過程の可視化

2.1 自己組織化マップの特長

SOMは教師なし競合型ニューラルネットワーク学習のひとつであり、データ点間の類似関係を保存した低次元マップを生成する。SOMは大規模かつ複数種が混在する損傷の評価に対して以下に述べる利点がある。

大局的評価 類似する事象は同様の損傷から発生したと考えられる。そのため、損傷事象のクラスは、損傷のタイプ (部材とその破壊モード) に対応する。さらに、マップ上での事象の出現確率密度から大まかな損傷過程を捉えることができる。

探索的分析 計測された大量の損傷事象の集合の全体像を直感的に把握することができ、さらに特徴的な事象や発生頻度の高い事象など、利用者はマップを通じて探索的に個別の事象について分析を行うことができる。

なお、本研究では損傷事象に適した類似度を導入するために Kernel SOM [Lau 06] を用いている。

2.2 損傷事象間の類似度

損傷の特性は、破壊モードや材料の種類と状態により信号の周波数スペクトルに大きく反映される。ここで、周波数スペクトルの離散点をベクトルとし、ユークリッド距離に代表される大域的な構造表現のみが可能な距離を用いた場合、全ての離散点の誤差が2乗で効いてくるため、周波数スペクトルの鋭いピークの横方向のずれが距離に対して鋭敏に反映されてしまい、分布形状を捉えるのは難しい。

連絡先: 福井健一, 大阪大学産業科学研究所, 〒567-0047 大阪府茨木市美穂ヶ丘8-1, TEL:06-6879-8426/FAX:06-6879-8428, E-mail:fukui@ai.sanken.osaka-u.ac.jp

そこで本研究では、周波数スペクトルの分布形状の類似性を適切に捉えるため、局所的な構造表現が可能な距離として、確率分布間の距離である Kullback-Leibler (KL) 情報量に基づいたカーネル関数 [Moreno 03] を SOM に導入した。

2.3 模擬データによる定量的性能評価

実際の SOFC における損傷は観察困難であるため、木片のき裂音などを集音した模擬損傷データ (5 クラス, 125 サンプル) を用意し, KL 情報量に基づいた SOM の分類性能を評価した。なお, 分類性能尺度は SOM の可視化空間上での隣接性も考慮するように拡張した F 値および純度など [Fukui 11b] を用いている。

図 1 に結果の一部を示す。本手法は、ガウス関数などいくつかの標準的なカーネル関数を用いた Kernel SOM や通常の SOM よりも良い分類性能を示した [福井 10]。言い換えると、周波数スペクトルの離散点に対して、ユークリッド距離に基づく方法は、カーネルにより非線形変換を施したとしても大差はなく、この結果は KL 情報量により局所構造を評価している効果が得られていると考えられる。この結果から、本手法は SOFC の損傷事象に対しても良好な性能が期待できる。

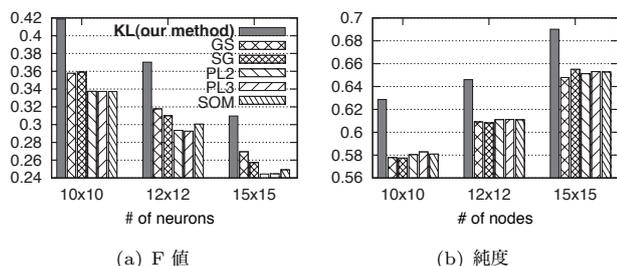


図 1: 模擬データに対する分類性能評価。ガウシアンカーネル (GS), シグモイドカーネル (SG), 2 次の多項式カーネル (PL2), 3 次の多項式カーネル (PL3) を用いた Kernel SOM, および通常 SOM(SOM) との比較。

2.4 燃料電池の損傷試験

SOFC 損傷試験装置の断面模式図を図 2 に示す。SOFC としては標準的な構成である。まず、この試験では電池セルの支持材であるガラスシールを融解させるために 800°C まで上昇させ、約 10 時間運転した後、約 50 時間かけて室温まで降下させた*1。そして、広帯域圧電型トランスデューサ*2を用いて、Acoustic Emission (AE) と呼ばれる超音波を含む弾性波により損傷を計測した。サンプリングレートは 1MHz であるため、観測可能周波数は最大 500kHz である。

2.5 前処理

1. AE 事象の切り出し まず、連続的に計測される AE 信号から、損傷に起因する信号部分の切り出しを行う。単純な閾値による方法では、電気的なノイズに対する適切な閾値の設定や、損傷規模に応じた可変長の信号の切り出しが難しいことが問題となる。そこで本研究では、統計量に基づいた Kleinberg のバースト抽出法 [Kleinberg 02] を応用した。本手法は、AE の活動量を状態としたオートマトンモデルの最尤状態系列を求めることで、定常的

*1 本損傷試験では意図的に温度を下げることで損傷を起こしたことに注意しておく。そのため、この実験から得られた知識は SOFC の実用化に直接はつながらない。しかし、提案手法の有用性を示すには十分な実験である。

*2 PAC UT-1000, URL: <http://www.pacndt.com>

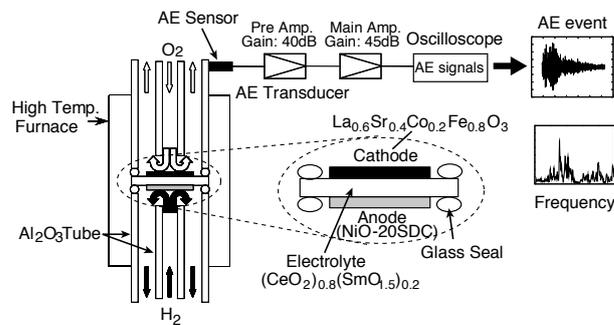


図 2: SOFC 損傷試験装置

なノイズ状態から任意長の損傷事象部分を抽出可能である。パラメータ設定は必要なものの、パラメータの変化に対して抽出結果は頑健であり、容易にパラメータ設定可能である。本手法により、60 時間分の SOFC 損傷試験データから 1429 個の AE 事象が抽出された。

2. Kernel SOM への入力準備 抽出した各 AE 事象に対してフーリエ変換により離散周波数スペクトルを得る。スペクトルの外形が重要であるため、スムージング処理を施した。そして、KL 情報量を用いるため積分値が 1 になるように正規化を行い、Kernel SOM への入力ベクトルとした。

2.6 損傷事象の発生密度推定

SOM により捉えたデータ分布の低次元空間と時間軸を含めた空間で、事象の出現確率の密度推定を行った。損傷事象に関して出現確率密度の分布形状を事前に知ることは困難であるため、ノンパラメトリックな方法であるカーネル密度推定を用いた。密度推定のカーネル関数にはガウス関数を用いて、クロスバリデーションにより最適なパラメータを推定した。

2.7 損傷過程の可視化結果

Kernel SOM による可視化空間と時間軸で事象の出現確率密度推定を行った結果を図 3 に示す。図は特徴的な時刻におけるスナップショットを示している。x-y 平面は Kernel SOM による事象の類似関係を保存したマップであり、z 軸はある時点における対応する事象プロトタイプの出現確率密度を示している。なお、t は実時間ではなく、AE 事象のカウント数である。

図から各時点で頻出する事象の領域が変化していく様子が分かる。SOFC の専門家により、対応する AE 事象の波形、周波数スペクトル、その時の温度を参照することで各頻出領域の物理的解釈を行ってもらった結果、整合性を持って説明可能な解釈が得られた。本研究により、従来は専門家も知り得なかった各時点で頻出する損傷部材の特定に初めて成功した。

3. 共起分析による力学的影響関係の推定

3.1 KeyGraph

KeyGraph [大澤 99] は事象間の共起関係をグラフ形式で表現することで、系の潜在的なダイナミクスを表面化する方法である。KeyGraph の構成は、島と呼ばれる高頻度・高共起度の基礎的要因の抽出と、橋と呼ばれる単独では高頻度ではなくても基礎的要因と共起する重要事象の抽出の 2 段階から成る。

KeyGraph も SOM 同様に、対象に関するモデルを用いない発見的な方法であること、また抽出結果の可視化による探索的分析の支援であることから、KeyGraph を採用した。

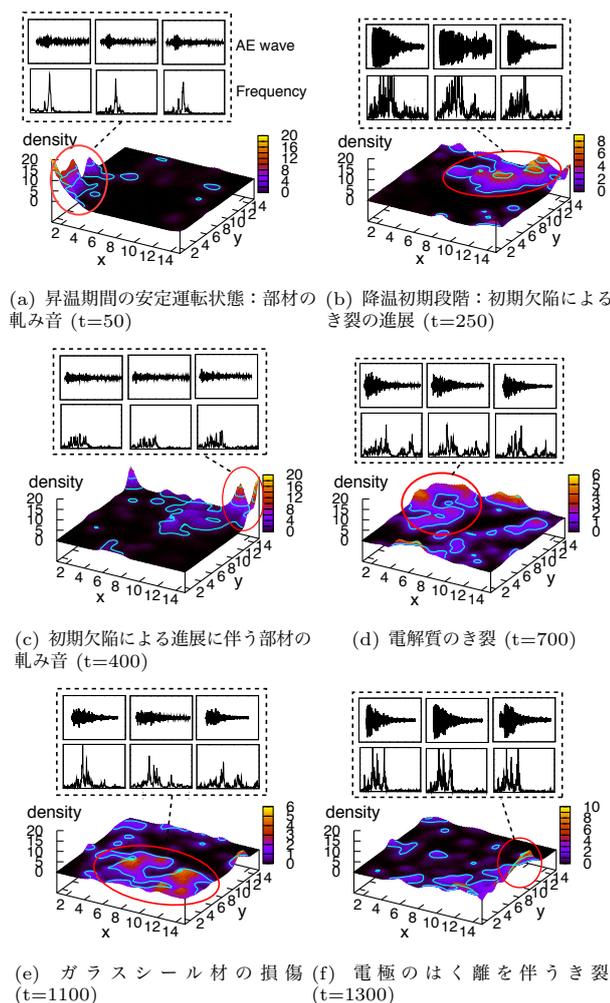


図 3: Kernel SOM による SOFC の損傷過程の可視化結果と解釈

3.2 損傷事象データへの適用

Ohsawa は地震の履歴データに KeyGraph を適用し、活断層間の潜在的な影響関係に関する分析を行っている [Ohsawa 02]. そこでは、各地震の履歴は震源地付近の活断層に割り当てられ、活断層の記号系列データとして扱われている。一方、本研究が対象とする SOFC において、各 AE 事象に対応する損傷部材を特定するのは困難である。そこで、SOM による量子化によって得られたプロトタイプ、すなわち SOM のニューロンノードを類似事象を代表する記号とした。これにより、2.7 節の SOM による可視化結果と対応付けることで、KeyGraph の結果を解釈することができる。我々はこの非記号データへの適用方法を Essential Event Extractor (E³) 法と名付けた [北川 11].

また、ある閾値以上のエネルギーを持つ AE 事象が生じるとエネルギーが解放され内部状態がリセットさせると仮定して、一連の AE 事象系列を、共起を判定する単位であるバスケットに分割した。

3.3 力学的影響関係の推定結果

KeyGraph による損傷事象の共起グラフの出力結果を図 5 に示す。なお、KeyGraph の出力には、Polaris^{*3}を用いた。

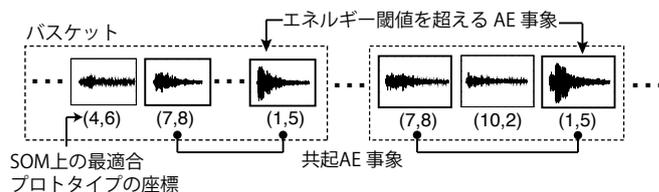


図 4: 一連の損傷事象系列への分割と共起損傷事象の例

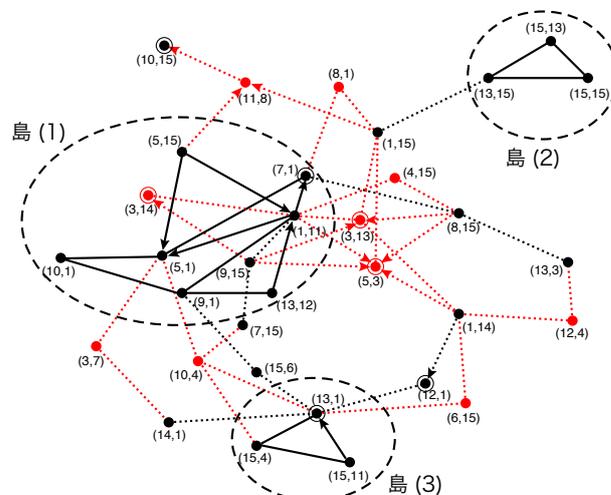


図 5: KeyGraph による損傷事象の共起グラフ

図の黒ノードは高頻度の基礎的要因を示し、赤ノードは基礎的要因と共起する稀な重要事象を示している。黒ノードは大きく 3 つの島に分かれ、島 (1):初期欠陥によるき裂の進展の終盤から電解質のき裂を経て、ガラスシールの損傷の序盤、島 (2):初期欠陥のき裂の進展に伴う軋み音、島 (3):ガラスシールの損傷の終盤から電極材のはく離を伴うき裂に対応している。

また、各プロトタイプの発生密度推定の時間変化から、影響関係の方向を推定した。すなわち、プロトタイプ事象の頻度発生期間に前後関係が存在する場合、先に頻出した事象から後の事象に影響を及ぼしていると仮定し、KeyGraph の結果に影響関係の方向を示す矢印を付与した。そして、影響関係の方向が得られた各ノード対とエッジを、意味解釈が可能な Kernel SOM の可視化空間に戻した。その結果を図 6 にまとめる。

推定された結果は、専門家の知見と照らし合わせて妥当な結果であった。特徴的な結果としては、様々な損傷のうちで唯一、電解質と初期欠陥によるき裂の進展に相互作用が見られた。また、電解質と電極材は構造上つながっているにも関わらず、力学的な作用は得られなかった。この結果は専門家にとっても新しい知見であり、今後さらなる破壊メカニズムの解明に向けて、重要な知見を得たと言える。

4. 課題と展望

4.1 燃料電池側から

本研究で用いた損傷試験データは、起動から停止までの 1 サイクル分であるため、得られた推定結果を物理現象として確認するためには、同条件で複数回試験を行うことで再現性を確認する必要がある。また、異なる実験条件下で比較分析を行うことで、さらなる破壊メカニズムの解明も期待できる。さらに、複数の AE センサによる位置同定や、アクティブセンサによ

*3 <http://www.chokkan.org/software/polaris/>

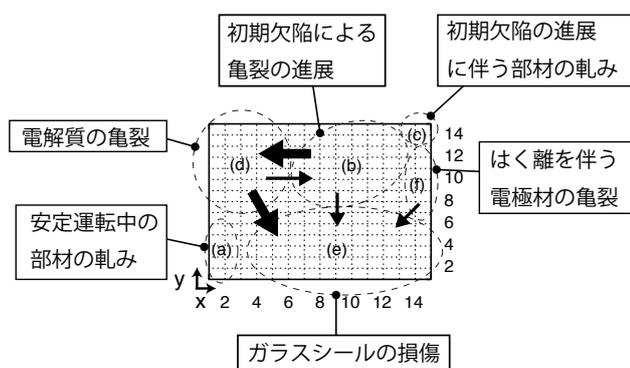


図 6: Kernel SOM による可視化空間上での力学的影響関係の推定結果

る周波数応答を活用することで現象の把握精度の向上も現在検討中である。

一方、監視目的としては、ユーザインターフェースを充実させると共に、蓄積されたデータベースの汎用性、すなわち異なる条件で得られた損傷過程をどの範囲まで参照可能なのか、について研究が必要である。

4.2 AI 側から

本稿では、KeyGraph により力学的影響関係を推定したが、実数値データである AE 信号を SOM により量子化して KeyGraph に適用した。それに対して、我々は実数値空間上の頻出パターン抽出法の研究も行っている [稲場 11]。従来の頻出パターン抽出は、KeyGraph と同様に記号データを対象としているが、[稲場 11] は実数値空間上のデータに対して、頻出パターンに寄与するクラスタを発見しつつパターン抽出を同時に行うように拡張している。これにより、類似度のみを基にしたクラスタに対して頻出パターン抽出を行うのと比較して、高精度に損傷パターンを抽出することが期待できる。

また、AI のさらなる貢献としては、これらの基礎技術を基に、燃料電池の運転制御や実験計画（仮説-検証サイクル）の支援への展開も考えられる。

5. 知的非破壊検査法として

従来、AE 信号を用いた非破壊検査に関する研究は、比較的単純な構成の材料を対象に、材料力学を基盤として、材料の特性と AE 信号の関係に関する理論や実験的な検証が主な興味の対象であった [仲佐 94]。それに対して本研究は、データマイニング技術によりデータを整理することで、従来は扱うことが困難であった複合材や状態が変化する複雑な対象まで非破壊検査の適用範囲を広げている。両者は対立するものではなく、AI 技術は従来の非破壊検査の増幅機能の役割を果たしていると言える。特に、AE 信号から部材間の力学的影響関係の推定まで踏み込んだ研究は他に類を見ない。

6. おわりに

本研究では、自己組織化マップ (SOM) に基づく方法により、燃料電池の損傷過程の可視化に成功した。ここで、損傷事象の分類性能を向上させるため、周波数スペクトル間の類似度として Kullback-Leibler 情報量を Kernel 法を用いて SOM に導入した。次に、KeyGraph により損傷事象の共起関係を分析することで、構成部材間の力学的影響関係の推定に成功した。

謝辞

本研究は、「ナノマクロ物質・デバイス・システム創製アライアンス」特別経費（文部科学省）、および科学研究費補助金若手研究 (B)(21700165) の支援を受けて行われた。

参考文献

- [Fukui 10] Fukui, K., Sato, K., Mizusaki, J., and Numao, M.: Kullback-Leibler Divergence Based Kernel SOM for Visualization of Damage Process on Fuel Cells, in *Proc. 22th IEEE International Conference on Tools with Artificial Intelligence (ICTAI-10)*, Vol. 1, pp. 233–240 (2010)
- [Fukui 11a] Fukui, K., Akasaki, S., Sato, K., Mizusaki, J., Moriyama, K., Kurihara, S., and Numao, M.: Visualization of Damage Progress in Solid Oxide Fuel Cells, *Journal of Environment and Engineering*, Vol. 6, No. 3, pp. 499–511 (2011)
- [Fukui 11b] Fukui, K. and Numao, M.: Topographic Measure Based on External Criteria for Self-Organizing Map, in *Proc. 8th Workshop on Self-Organizing Maps (LNCS 6731)*, pp. 131–140 (2011)
- [Kleinberg 02] Kleinberg, J.: Bursty and Hierarchical Structure in Streams, *Data Mining and Knowledge Discovery (Selected Papers from the 8th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining —Part II)*, Vol. 7, No. 4, pp. 372–397 (2002)
- [Kohonen 95] Kohonen, T.: *Self-Organizing Maps*, Springer-Verlag (1995)
- [Lau 06] Lau, K. W., Yin, H., and Hubbard, S.: Kernel Self-Organising Maps for Classification, *Neurocomputing*, Vol. 69, pp. 2033–2040 (2006)
- [Moreno 03] Moreno, P. J., Ho, P. P., and Vasconcelos, N.: A Kullback-Leibler Divergence Based Kernel for SVM Classification in Multimedia Applications, *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, Vol. 16, pp. 1385–1392 (2003)
- [Ohsawa 02] Ohsawa, Y.: KeyGraph as Risk Explorer from Earthquake Sequence, *Journal of Contingencies and Crisis Management*, Vol. 10, No. 3, pp. 119–128 (2002)
- [Sato 10] Sato, K., Yashiro, K., Kawada, T., Yugami, H., Hashida, T., and Mizusaki, J.: Fracture Process of Nonstoichiometric Oxide Based Solid Oxide Fuel Cell under Oxidizing/Reducing Gradient Conditions, *Journal of Power Sources*, Vol. 195, pp. 5481–5486 (2010)
- [稲場 11] 稲場 大樹, 福井 健一, 佐藤 一永, 水崎 純一郎, 沼尾 正行: 実数値空間上の頻出パターン最大化によるパターン抽出法, 第 25 回人工知能学会全国大会 (JSAI2011) (2011)
- [水崎 09] 水崎 純一郎: 固体酸化物燃料電池 (SOFC) の最近の進展, 課題そして展望, in *Ceramics Japan*, 第 44 巻, pp. 262–266, 日本セラミックス協会 (2009)
- [大澤 99] 大澤 幸生, Benson, N. E., 谷内田 正彦: KeyGraph: 語の共起グラフの分割・統合によるキーワード抽出, *電子情報通信学会論文誌*, Vol. J82-D-I, No. 2, pp. 12–18 (1999)
- [仲佐 94] 仲佐 博裕: アコースティックエミッションの理論と実際, 地人書館 (1994)
- [福井 10] 福井 健一, 赤崎 省悟, 佐藤 一永, 水崎 純一郎, 森山 甲一, 栗原 聡, 沼尾 正行: カーネル SOM による損傷評価のための隣接性を考慮した分類性能評価, *情報処理学会論文誌 数理モデル化と応用*, Vol. 3, No. 1, pp. 36–48 (2010)
- [北川 11] 北川 哲平, 福井 健一, 佐藤 一永, 水崎 純一郎, 沼尾 正行: キーグラフと SOM を用いた稀な重要事象抽出による燃料電池の損傷評価, *情報処理学会論文誌 数理モデル化と応用*, Vol. 4, No. 2, pp. 1–12 (2011)