計測自動制御学会論文集
Vol.45, No.6, 305/312（2009）

一次差分信号とバギングCAN2を用いるモデル切り替え型予測制御によるRCA洗浄液の温度制御

黒 木 秀 一*・越 山 陽 平**・湯 野 洋 司**

Temperature Control of RCA Cleaning Solutions via Model Switching Predictive Control Using First-difference Signals and Bagging CAN2

Shuichi Kurogi*, Yohei Koshiyama** and Hiroshi Yuno**

The RCA cleaning method is the industry standard way for cleaning silicon wafers, and the temperature control is important for a stable cleaning performance. However, the difficulty lies in the fact that the RCA solutions cause nonlinear and time-varying exothermic chemical reactions. So far, the MSPC (model switching predictive controller) using the CAN2 (competitive associative net 2) has been developed and the effectiveness has been validated. However, we have observed that the control performance, such as the settling time and the overshoot, does not always improve with the increase of the number of learning iterations for the CAN2. To solve this problem, we introduce the bagging method for the CAN2 and first-difference signals for effectively embedding the bagging method. The effectiveness and the performance of the present method are examined by means of numerical experiments.

Key Words: temperature control of RCA cleaning solutions, first-difference signals, bagging competitive associative net, piecewise linear approximation of nonlinear and time-varying system

1. はじめに

競合連想ネットCAN2 (Competitive Associative Net 2) は，競合ネット[1]と連想ネット[2]の機能を統合して構成したニューラルネットであり，非線形関数を学習して区分的線形関数として近似する能力をもち，その有効性は関数近似，制御，降水量推定，時系列予測などへの応用で示されている[3)~8)]．特に，国際会議NIPS2004のEvaluating Predictive Uncertainty Challengeにおいては，この手法を用いた結果，われわれはregression winnerに選ばれた[6]．区分的線形近似を行なう手法はCAN2以外にもいくつか提案されているが[9),10)]，それらの区分領域の学習は，K近傍法[9]やSOM学習法[10]など各区分領域内での訓練入力ベクトルと中心ベクトルとの距離の二乗和の最小化に基づいているのに対し，CAN2では競合学習を用いて訓練誤差を最小化することにより行なわれる．これはCAN2がより直接的に訓練誤差を小さくする手法であり，これによりCAN2の性能の高さが得られていると考えられる．

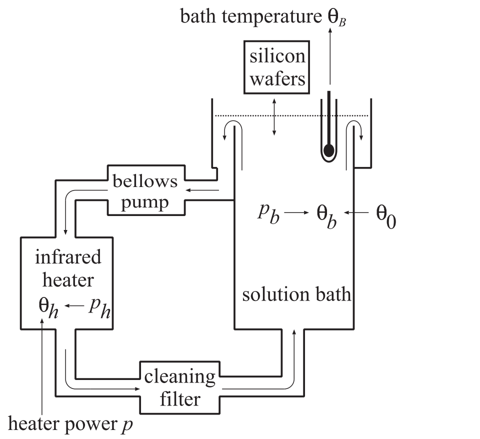


Fig. 1 Schematic diagram of the RCA cleaning system

このような区分的線形近似能力の応用として，われわれはこれまでRCA洗浄液の温度制御への応用を試みてきた[4),5)]．ここでRCA洗浄とは，半導体製造行程でシリコンウエハを洗浄するために開発された手法であり，現在多くの企業で用いられている．この洗浄においては洗浄液をある一定温度に保つ温度制御が安定した洗浄性能を得るために重要であるが，使用する洗浄液はSPM (硫酸過水：硫酸H_2SO_4と過酸化水素水H_2O_2の混合液) など，混合時に非線形かつ時変な発熱化学反応を伴うものが多い．さらに洗浄液は非常に強い腐食

* 九州工業大学大学院工学研究院　北九州市戸畑区仙水町 1–1
** 九州工業大学大学院工学府　北九州市戸畑区仙水町 1–1
* Faculty of Engineering, Kyushu Institute of Technology, 1–1 Sensui-cho, Tobata-ku, Kitakyushu
** Graduate School of Engineering, Kyushu Institute of Technology, 1–1 Sensui-cho, Tobata-ku, Kitakyushu
（Received January 7, 2009）
（Revised June 3, 2009）

作用をもつため，RCA 洗浄システム（**Fig. 1** 参照）は，石英ガラスでできた洗浄槽，ベローズポンプ，赤外線ヒータ，フッソ樹脂でできた配管，テフロン被覆管に入れた温度計などから構成されている．このような構成により，プラントの入出力間には大きくかつ変動する無駄時間が生じ，温度制御は非常に困難となる．

このような系を制御するため，従来から PID 制御やその変形が使用されている．しかしそれらの方法ではさまざまな液体や異なる動作環境に対してその制御パラメタを調節することが非常に困難である．パラメタのオートチューニング法[11]なども使用されているが，それらは制御対象が線形時不変であることを仮定しており，上述の非線形時変系に適用して得た値をそのまま用いることはできず，実際現場では最終的には試行錯誤により求めている．一方，非線形時変系を扱うことのできるロバスト制御や適応制御などの応用も考えられるが，そのためには使用する制御法に即した RCA 洗浄プラントのモデル化，解析，制御系設計を行なう必要があり，それほど容易ではなく，これまでに適用された例はない．そこでわれわれは非線形時変系の入出力関係を CAN2 を用いて学習して制御するためのモデル切替型予測制御 (MSPC: Model Switching Predictive Controller) を開発してきた．この MSPC においてCAN2 は，プラントの過去の入出力データから複数の線形モデルを学習するとともに，制御の各時刻においては適切な線形モデルを選択することに使用される．この CAN2 により選択されるモデルは線形であるので，一般化予測制御 (GPC: GeneralizedPredictiveControl) に適用することにより，プラントへの操作量が効率よく求まる．これまで，CAN2 の学習をある程度行なうことにより，整定時間やオーバーシュートなどの制御性能の仕様を満たす結果を得ることができている．しかしこれまでの研究で，CAN2 の学習回数を増加させても制御性能が必ずしも改善されない現象が観測され，その問題解決を検討してきた．ここで CAN2 の学習回数とは，温度制御シミュレーションを一行程行なって訓練データを取得し，その訓練データを CAN2 でオフライン学習する，という制御と学習の繰り返し回数を意味する．このことより，この現象は，訓練データに前回の制御結果に依存した変動成分が含まれており，CAN2 がその訓練データを過学習することにより発生した可能性が考えられる．そこで訓練データの過学習に対処する手法としてクロスバリデーションを用いる手法[5]やアンサンブル学習を用いる手法[8]を開発し，ある程度の結果が得られているが，十分な理論的検討や問題解決には至っていない．

本稿では，過学習の問題を解決する手法として，単一学習機械による予測に含まれる変動成分を減少させる働きのあるバギング[12),13)]を適用することを試みる．さらにバギングによる学習性能の向上を制御性能の向上に結びつけるために一次差分信号を用いる手法を導入する．次章では従来手法，特に CAN2 とユニット選択法について説明し，**3** ではバギング CAN2 と一次差分信号を導入し，それらを用いる一般化予測制御について説明する．**4** では実験結果を示し，本手法の有効性を検討する．

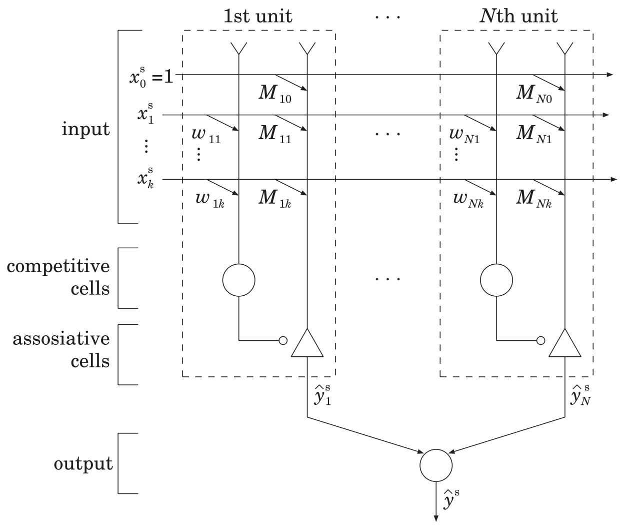


Fig. 2 Schematic diagram of the CAN2 for learning

2. 従来手法と問題点

2.1 学習すべき関数

RCA 洗浄システム（Fig. 1）へのヒータ入力 $p(t)$ と洗浄槽の出力温度 $\theta_B(t)$ は周期 T_v でサンプリングされ，離散時刻 $j\ (=0,1,2,\cdots)$ における入力 $u(j)=p(jT_v)$ と出力 $y(j)=\theta_B(jT_v)$ の関係が

$$y(j)=f(\boldsymbol{x}(j))+d(j) \tag{1}$$

と表わされるとする．ここで，

$$\boldsymbol{x}(j)\triangleq(y(j-1),\cdots,y(j-k_y),\\ u(j-1),\cdots,u(j-k_u))^T \tag{2}$$

であり，k_y と k_u は正定数，$f(\boldsymbol{x}(j))$ は $\boldsymbol{x}(j)$ の関数，および $d(j)$ は観測雑音とする．

2.2 CAN2

CAN2 は N 個のユニットをもち，各ユニット $U_i\ (i=1,2,\cdots,N)$ は荷重 (列) ベクトル $\boldsymbol{w}_i\triangleq(w_{i1},\cdots,w_{ik})^T\in\mathbb{R}^{k\times1}$ と連想行列 (行ベクトル) $\boldsymbol{M}_i\triangleq(M_{i0},M_{i1},\cdots,M_{ik})\in\mathbb{R}^{1\times(k+1)}$ をもつ (**Fig. 2** 参照)．CAN2 は (1) 式の入力 $\boldsymbol{x}(j)$ と出力 $y(j)$ を学習し，未知入力 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}}=\boldsymbol{x}(l)$ に対する出力 $y^s=f(\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}})$ を

$$\hat{y}^{\mathrm{s}}\triangleq\boldsymbol{M}_c\widetilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{s}} \tag{3}$$

により予測する．ここで，$\widetilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{s}}\triangleq(1,(\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}})^T)^T$ は (3) 式の線形近似におけるバイアス項を生成するために $\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}}$ に 1 を付加したベクトルである．また $\widetilde{\boldsymbol{x}}^s$ および $\widehat{y}^s$ は CAN2 の入出力を表わし，添字 s は関数 f の入出力 $\boldsymbol{x}(j)$ および $y(j)$ と区別するためのものである．また添字 c は競合により選択されたユニットを表わし，後述する (**2.4** 参照)．

2.3 制御と学習の繰り返し

本手法においては，微分方程式で表わされた RCA 洗浄シ

ステムのプラントモデル[4]を用いて，制御シミュレーションと CAN2 によるオフライン学習を十分な制御性能が得られるまで行なった後，実際の RCA 洗浄システムに適用する．具体的にはつぎのように制御と学習を繰り返し行なう．なお，第 1 回目の制御シミュレーションにおいては，CAN2 の $\boldsymbol{w}_i$ と $\boldsymbol{M}_i$ には適当な初期値を設定して行なう．

(1) 制御：　学習後の（または初期設定された）CAN2 を用いて RCA 洗浄液温を設定温度まで上昇させて一定に保つ一行程の制御シミュレーションを行ない，訓練データセット $D^n = \{(\boldsymbol{x}(j), y(j)) \mid j = 1, 2, \cdots, n)\}$ を得る．

(2) 学習：　訓練データセット D^n に対する (3) 式による近似の二乗平均誤差を最小化するオフライン学習を行ない，$\boldsymbol{w}_i$ と $\boldsymbol{M}_i$ を更新する．

2.4　ユニット選択法

上記の (2) の学習には，これまでに良好な成果が得られている CAN2 のバッチ学習法[7]を適用する．このバッチ学習時においては (3) 式の c の選択は次式により行なう．

$$c = \underset{i \in I}{\operatorname{argmin}} \; \|\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}} - \boldsymbol{w}_i\|^2. \tag{4}$$

一方，従来の制御時のユニット選択は，時刻 j において

$$c = \underset{i \in I}{\operatorname{argmin}} \sum_{l=j-N_e}^{j-1} \|y(l) - \boldsymbol{M}_i \widetilde{\boldsymbol{x}}(l)\|^2, \tag{5}$$

により行なう[3]．ここで，$N_e\ (\geq k)$ は正の定数である．制御時にこの選択法を用いる主な理由は以下のとおりである．まず (5) 式は，数時刻前から現時刻までのプラントの出力を最もよく線形近似する連想行列 $\boldsymbol{M}_c$ を選択することになるので数時刻後の予測出力もこの $\boldsymbol{M}_c$ を用いることができると考えられる．一方, (4) 式で $\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{x}(j) = (y(j-1), \cdots, y(j-k_y, \cdots))$ を用いると，訓練データに含まれる $y(j)\ (j = 1, 2, \cdots)$ の軌道とほとんど同じ制御を行なう場合には機能するが，初期温度，周囲の温度や湿度などの影響で $y(j)$ の軌道や系のパラメタが変化した場合にはうまく機能しない可能性があること，および考えられる初期値やパラメタ変動に対する制御軌道をすべて訓練データとして学習させればよいかも知れないが現実的でないことなどから，従来手法においては制御時に (4) 式ではなく (5) 式を用いてユニット選択していた．

2.5　従来手法の問題点

従来手法では学習回数の増加とともに制御性能が必ずしも改善されない場合があるなどの問題があった．以下，いくつかの要因を指摘する．

2.5.1　制御時に選択される連想行列の縮退

(1) 式を係数行列（行ベクトル）$\boldsymbol{A} = (a_0, a_1, \cdots, a_{k_y+k_u})$ を用いて $y(j) \simeq \boldsymbol{A}\widetilde{\boldsymbol{x}}(j)$ と線形近似し，制御時のユニット選択の (5) 式に代入すると

$$c = \underset{i \in I}{\operatorname{argmin}} \sum_{l=j-N_e}^{j-1} \|(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{M}_i)\widetilde{\boldsymbol{x}}(l)\|^2, \tag{6}$$

が得られる．この式は，$(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{M}_c)\widetilde{\boldsymbol{x}}(l) \simeq 0$ かつ $\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{M}_c$ となる縮退した $\boldsymbol{M}_c$ が選択され，(3) 式による予測誤差は大きくなる可能性があることを示唆する．この縮退を除くには N_e を十分大きくする必要があるが，N_e が大き過ぎると即応性が低下するので調整が必要である．

2.5.2　時変系に対する k_y と k_u の設定

RCA 洗浄システムのプラントモデル[4]においては，洗浄槽の温度 $\theta_B(t)$ は時変パラメタをもつ微分方程式で表わされるので，(1) 式における $y(j) = \theta_B(jT_v)$ の関数 $f(\cdot)$ も時変パラメタをもつと考えられる．このとき，入出力対 $(\boldsymbol{x}_j, y_j = f(\boldsymbol{x}_j) + d(j))\ (j = 1, 2, \cdots)$ の学習で問題となるのは，異なる離散時刻 j と $l\ (\neq j)$ において，$\boldsymbol{x}(j) = \boldsymbol{x}(l)$ かつ $f(\boldsymbol{x}(j)) \neq f(\boldsymbol{x}(l))$ となる場合である．一方，本制御問題における理想的な出力 $y(j) = \theta_B(jT_v)$ は，初期温度から許容誤差範囲内のオーバーシュートを経て目標温度に到達する一過性の軌跡となる（**Fig. 3** 参照）ので，この出力を $k_y \geq 2$ として (2) 式の $\boldsymbol{x}(j)$ に組み込むと，$j \neq l$ に対して $\boldsymbol{x}(j) \neq \boldsymbol{x}(l)$ となり，上記の時変関数の学習の問題は生じないことになる．ただし，適切な k_y の大きさはその他の要因，たとえば，学習や制御の安定性や最適性など，にも依存するので，実際には，k_y や k_u は試行錯誤により決定していた．

2.5.3　訓練データ中の変動成分の過学習

本手法での学習と制御の繰り返しにおいては，各回の訓練データには前回の制御結果に依存した変動成分が含まれており，CAN2 がその訓練データを過学習することにより予測性能が劣化する可能性が考えられる．

3. 提 案 手 法

前章で述べた従来手法の問題点に対処するために，バギングと一次差分信号を用いる手法を提案する．

3.1　バギング CAN2

訓練データセット D^n 内のデータを，重複を許してランダムに $n\alpha$ 回リサンプリングして構成した b 個のバグ（多重集合またはブートストラップ標本集合ともいう）を $D^{n\alpha^\sharp, l}\ (l \in I^b = \{1, 2, \cdots, b\})$ とする．ここで，$\alpha\ (> 0)$ はバグサイズ比，すなわちバグと訓練データセットの要素数の比を表わし，l はバグの番号を表わす．それぞれのバグに対して学習機械 (CAN2) を独立に学習させた後，バギング予測を

$$\hat{y}^{\mathrm{s}} = \frac{1}{b} \sum_{l \in I^b} \hat{y}^{\mathrm{s},l} = \overline{\boldsymbol{M}} \widetilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{s}} \tag{7}$$

により行なう．ここで $\hat{y}^{\mathrm{s},l} = \boldsymbol{M}_c^l \widetilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{s}}$ はバグ $D^{n\alpha^\sharp, l}$ を学習した CAN2 による予測，$\overline{\boldsymbol{M}} = (1/b) \sum_{l \in I_b} \boldsymbol{M}_c^l$ は第 l バグに対して (4) 式で選ばれる連想行列 $\boldsymbol{M}_c^l$ の平均を表わす．

3.2　一次差分信号を用いるユニット選択法と予測

バギングは入力 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}}$ に対する予測 $\hat{y}^{\mathrm{s},l} = \boldsymbol{M}_c^l \widetilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{s}}$ をすべてのバグ $(l = 1, 2, \cdots, b)$ について平均することにより，訓練データに含まれる予測のバラツキなどを少なくして予測性能の向上を行なうものなので，$\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}}$ を用いない (5) 式のユニット選択法は予測性能向上には結びつかない．そこで，(4) 式の

選択法を用いる制御手法として，一次差分信号をつぎのように導入する．まず (1) 式が線形関数

$$y(j) = a_0 + \sum_{l=1}^{k_y} a_l y_l(j-l) + \sum_{l=1}^{k_u} b_l u_l(j-l) \qquad (8)$$

により表わされるとする．ここで観測雑音 $d(j)$ は簡単のため省略した．すると，上式から，入出力の一次差分 $\Delta u(j) \triangleq u(j) - u(j-1)$ と $\Delta y(j) \triangleq y(j) - y(j-1)$ を用いて

$$\begin{aligned}\Delta y(j) &= \sum_{l=1}^{k_y} a_l \Delta y_l(j-l) + \sum_{l=1}^{k_u} b_l \Delta u_l(j-l) \\ &\equiv f^{(1)}(\Delta \boldsymbol{x}(j))\end{aligned} \qquad (9)$$

が得られる．ここで，

$$\begin{aligned}\Delta \boldsymbol{x}(j) \triangleq (&\Delta y(j-1), \cdots, \Delta y(j-k_y), \\ &\Delta u(j-1), \cdots, \Delta u(j-k_u))\end{aligned} \qquad (10)$$

は $\boldsymbol{x}(j)$ の一次差分であり，$f^{(1)}(\cdot)$ は一次差分関数を表わす．今，バギング CAN2 への入出力を $\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}} = \Delta \boldsymbol{x}(j)$ と $y^{\mathrm{s}} = \Delta y(j)$ として訓練データを $j = 1, 2, \cdots$ について学習させるとすると，制御時の時刻 j における入力 $\Delta u(j+l)$ $(l \geq 0)$ に対する $\Delta y(j+l)$ の予測 $\widehat{\Delta y}(j+l)$ が $l = 1, 2, \cdots$ の順に，

$$\begin{aligned}\widehat{\Delta y}(j+l) = &\sum_{m=1}^{k_y} \overline{M}_m \widehat{\Delta y}(j+l-m) \\ &+ \sum_{m=1}^{k_u} \overline{M}_{k_y+m} \Delta u(j+l-m),\end{aligned} \qquad (11)$$

により得られる．ここで，$l \leq 0$ のとき $\widehat{\Delta y}(j+l) = \Delta y(j+l)$ とする．また $\overline{M}_m$ はバギング予測を行なうための (7) 式の連想行列 $\overline{\boldsymbol{M}}$ の第 m 成分である．するとプラントの出力は

$$\hat{y}(j+l) = y(j) + \sum_{m=1}^{l} \widehat{\Delta y}(j+m) \qquad (12)$$

により予測できる．

以上の定式化に基づき，提案手法では，学習時と制御時に $\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}} = \Delta \boldsymbol{x}(j)$ として (4) 式のユニット選択法を用いるとともに，各制御時刻においては，選択された連想行列を用いて従来手法と同様に一般化予測制御 (GPC)（付録 **A** または文献 3) 参照）を適用することとする．

3.3 提案手法による従来手法の問題点への対処

提案手法は前節で述べた従来手法における問題点に以下のように対処している．まず，2.5.1 で指摘した連想行列の縮退は (4) 式を用いると起こらず，2.5.3 で指摘した訓練データ中の変動成分の過学習はバギング法を用いることにより軽減されると考えられる．さらに，**2.4** で指摘した $\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{x}(j)$ として (4) 式を用いる場合の問題点はつぎの (i) と (ii) のように解決され，2.5.2 で指摘した問題は (iii) のように対処できると考えられる．

(i) (8) 式の定数項 a_0 が周囲の温度や湿度などの影響で訓練時と異なっても，(4) 式の選択法はその影響を受けないとともに，(12) 式による予測は制御時刻 j での a_0 を含む $y(j)$ を使用するので，制御時の a_0 の変動にうまく対処できると考えられる．

(ii) 訓練データに含まれる出力軌道 $y(j)$ に対し，制御時の出力の部分軌道 $y_b(l)$ が $y_b(l+m) = y(j+m) + b$ $(m = 1, 2, \cdots, k_y)$ のようにバイアス b だけ異なる状況が生じたとき，$\Delta y_b(l+m) = \Delta y(j+m)$ となるので，$\Delta y(j)$ の学習結果を $\Delta y_b(l)$ の予測に用いることができる．

(iii) 一次差分関数 $f^{(1)}(\cdot)$ が時変関数の場合，$j \neq l$ に対して $\Delta \boldsymbol{x}(j) = \Delta \boldsymbol{x}(l)$ かつ $f^{(1)}(\Delta \boldsymbol{x}(j)) \neq f^{(1)}(\Delta \boldsymbol{x}(l))$ となる可能性がある．そのような場合，$\Delta \boldsymbol{x}(j)$ の次元をある程度大きくすることにより，$f^{(1)}(\cdot)$ を時不変関数として近似できることを，以下に示す．まず，離散時刻 j における出力 $\Delta y(j)$ が

$$\Delta y(j) \simeq \boldsymbol{A}'(j)\ \Delta \boldsymbol{x}(j, k'_y, k'_u) \qquad (13)$$

で線形近似できるとする．ここで，$\Delta \boldsymbol{x}(j, k'_y, k'_u)$ は (10) 式で k_y と k_u をそれぞれ k'_y と k'_u とした $\Delta \boldsymbol{x}(j)$ であり，$\boldsymbol{A}'(j)$ は $(k'_y + k'_u)$ 次元の時変の係数行列（行ベクトル）を表わす．今，$\boldsymbol{A}'(j)$ が時刻 j の変化に対して (一定または) 緩やかに変化するとし，$(k'_y + k'_u)$ 以上のある定数 k_a および任意の時刻 j に対し，$\boldsymbol{A}'(j) \simeq \boldsymbol{A}'(j-l)$ $(l = 1, 2, \cdots, k_a)$ となるとする．このとき，k'_y と k'_u をそれぞれ k_a ずつ大きくしたベクトル $\Delta \boldsymbol{x}(j, k_y, k_u) \triangleq \Delta \boldsymbol{x}(j, k'_y + k_a, k'_u + k_a)$ による $\Delta y(j)$ の近似

$$\Delta y(j) \simeq f^{(1)}(\Delta \boldsymbol{x}(j, k_y, k_u)) \qquad (14)$$

を考える．すると，まず，$\Delta \boldsymbol{x}(j, k_y, k_u)$ の要素には $m = 1, 2, \cdots, k_a$ に対する入力 $\Delta \boldsymbol{x}(j-m, k'_y, k'_u)$ とその出力 $y(j-m)$ が k_a 個含まれるので，$\Delta \boldsymbol{x}(j-m, k'_y, k'_u)$ が $m = 1, 2, \cdots, k_a$ $(\geq k'_y + k'_u)$ に対して線形独立なとき，$\Delta \boldsymbol{x}(j, k_y, k_u) \simeq \Delta \boldsymbol{x}(l, k_y, k_u)$ となる $\Delta \boldsymbol{x}(l, k_y, k_u)$ が存在するならば，$\boldsymbol{A}'(l) \simeq \boldsymbol{A}'(j)$ とならなければならない．さらに $\Delta \boldsymbol{x}(j, k_y, k_u) \simeq \Delta \boldsymbol{x}(l, k_y, k_u)$ の要素には $\Delta y(j) \simeq \boldsymbol{A}'(j)\ \Delta \boldsymbol{x}(j, k'_y, k'_u)$ と $\Delta y(l) \simeq \boldsymbol{A}'(l)\ \Delta \boldsymbol{x}(l, k'_y, k'_u)$ の入力 $\Delta \boldsymbol{x}(j, k'_y, k'_u) \simeq \Delta \boldsymbol{x}(l, k'_y, k'_u)$ も含まれるので，$y(l) \simeq y(j)$ とならなければならない．これは任意の $\Delta \boldsymbol{x} = \Delta \boldsymbol{x}(j, k_y, k_u) \simeq \Delta \boldsymbol{x}(l, k_y, k_u)$ に対して $\Delta y = \Delta y(j) \simeq \Delta y(l)$ がただひとつ決まる，すなわち，$\Delta y \simeq f^{(1)}(\Delta \boldsymbol{x})$ が時不変関数であることを意味する．たとえば，$k'_y = k'_u = 1$ に対しては，$k_a \geq k'_y + k'_u = 2$ および $k_y = k_u \geq 3$ とすればよい．ただし本制御問題における理想的な出力 $y(j)$（2.5.2 参照）の一次差分は，正，0，負，0 と一過性に順次変化するので，$(k_y, k_u) \lneqq (3, 3)$ でも $k_y \geq 2$ ならば良い制御性能が得られる可能性はある．

4. 数値実験と検討

RCA 洗浄プラントモデル [4] を用いた数値実験を行ない，提

案手法の性質と有効性を検討した．洗浄液は，発熱反応を起こす洗浄液の中で最も難しいとされる硫酸過水 (SPM) を用い，初期温度は 120°C，目標温度は 135°C とし，誤差許容範囲は ±2°C とした．また計測制御のサンプリング周期 $T = 0.25$ 秒と仮想サンプリング周期 $T_v = 27$ 秒とする仮想サンプリング法[4)]を用いた．ここで仮想サンプリング法とは，大きな遅れ時間や無駄時間に対処するため大きな（仮想サンプリング）周期 T_v で離散化したプラントモデル（(1) 式など）を用いて操作量の計算を行なうとともに，時変のパラメタ変動に対処するためより小さな周期 T ごとにその計算を行なって適用するものである．制御シミュレーションの一行程は実際のウエハ洗浄とほぼ同様に 8000 秒とした．したがって，学習の繰り返しごとの訓練データ数は約 32000 (=8000/0.25) 個である．GPC のパラメタ（(A. 1) 式参照）の値は，$N_1 = 1$, $N_2 = 11$, $N_u = 1$ とし，λ_u は一次差分法で 0.022，従来手法で 0.00495 とした．さらに，CAN2 のユニット数は $N = 5$, 従来手法の制御時のユニット選択式 (4) のパラメタは $N_e = 4$，バギング法のバグサイズ比は $\alpha = 0.03$, およびバグ数は $b = 30$ とした．これらのうち，主要なパラメタ値の制御性能への影響については **4. 3** で検討する．

4. 1　入出力と予測誤差の時間応答

制御と学習の繰り返し（**2. 3** 参照）が $n_{\mathrm{it}} = 100$ 回目のときの制御シミュレーションにおいて得られたヒータ入力 p, 洗浄槽温度出力 θ_B および予測誤差 E を Fig. 3 に示す．ここで，予測誤差 E は，離散時刻 $l = 1, 2, \cdots, j$ までのモデルプラントの出力 $y(l)$ と CAN2 による予測 $\widehat{y}(l)$ の二乗平均誤差

$$E = E(j) \triangleq \frac{1}{j} \sum_{l=1}^{j} \|\widehat{y}(l) - y(l)\|^2 \tag{15}$$

としている．また Fig. 3 (a) は従来手法 (conventional)，(b) は一次差分を導入した手法 (differential)，(c) は一次差分とバギングを導入した手法 (differential+bagging) を表わす．さらに，以下では，(b) を一次差分のみの手法，(c) を一次差分バギング法，(b) と (c) を合わせて一次差分法という．まず，各図の時刻 $t = 500 \sim 1000$ 秒の区間では入力 p が非常に小さいにもかかわらず，液温 θ_B が上昇しているが，これは発熱反応が起こっていることを示している．一方，$t > 2000$ 秒では入力 $p \simeq 60$%で液温がほぼ目標温度 $\theta_B \simeq 135$°C に保たれているが，これは発熱反応が終了し定常状態であることを示している．

つぎに，Fig. 3 (a) の予測誤差 E は (b) と (c) よりも大きいことがわかる (詳しくは後述の **Table 1** 参照)．これは 2. 5. 1 で述べたように (5) 式により縮退した連想行列が得られたため予測誤差が大きくなったのではないかと考えられる．なお，従来の研究においては，入力と出力が滑らかに変化するとき，制御性能が低くても E が小さい場合があった．しかし，Fig. 3 (a), (b), (c) の各図の右上方に示した整定時間 T_{S} とオーバーシュート θ_{O} は，(b) と (c) の一次差分法が (a) の従来手法と同程度の制御性能をもつことを示しており，一次

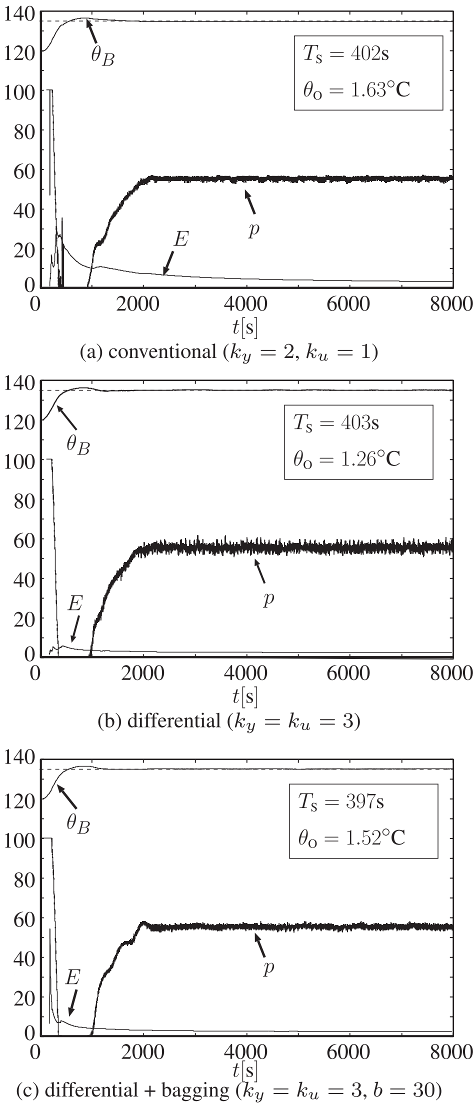


Fig. 3　Time course at the $n_{\mathrm{it}} = 100$th iteration controlled by (a) the conventional, (b) the differential and (c) the differential and bagging methods. The variables represent as follows; p[%]: the percentage input power relative to the maximum power (6000W), θ_B[°C]: the bath temperature measured, $E[10^{-4}(°\mathrm{C})^2]$: MSE (mean square prediction error), T_{S}[s]: the settling time, and θ_{O}[°C]: the overshoot.

差分（$\boldsymbol{x}^{\mathrm{s}} = \boldsymbol{\Delta x}(j)$）と (4) 式を用いるユニット選択法は有効であったと考えられる．

Fig. 3 の入力 p はどの手法においても細かく振動しているが，定常期間 ($t > 2000$) での振動幅を見ると，(c) では (b) よりも小さくなっていることがわかる．これは (c) において単一学習機械による予測のバラツキを小さくするバギングの機能が働いたものと考えられる．すなわち，訓練データに含まれるバラツキが $\boldsymbol{w}_i$ や $\boldsymbol{M}_i$ $(i \in I)$ に学習され，$\boldsymbol{w}_i$ を用いる (6) 式（または (4) 式）のユニット選択法が原因で p の振動幅が (b) で大きくなり，(c) ではバギングの機能が働いて小さくなっていることを示唆する．一方，(a) で振動が少ないのは，(5) 式のユニット選択法は $\boldsymbol{w}_i$ や $\boldsymbol{M}_i$ のバラツキの

Table 1 Control performance at $n_{\rm it} = 100$ for different (k_y, k_u). The units are $\theta_{\rm O}$[°C], $T_{\rm S}$[s] and $E[10^{-4}(°{\rm C})^2]$ at $t = 8000$. The notation "–" indicates the failure of the control.

	conventional			differential			differential + bagging		
(k_y, k_u)	$\theta_{\rm O}$	$T_{\rm S}$	E	$\theta_{\rm O}$	$T_{\rm S}$	E	$\theta_{\rm O}$	$T_{\rm S}$	E
$(1,1)$	5.51	1280	276	5.39	1271	7.4	8.34	1997	6.6
$(2,1)$	**1.63**	**402**	**2.9**	–	–	–	2.20	953	2.2
$(2,2)$	**0.84**	**426**	**2.9**	**0.91**	**438**	**2.0**	**1.88**	**392**	**2.0**
$(3,1)$	2.30	992	4.9	**1.06**	**419**	**2.3**	**0.63**	**405**	**2.1**
$(3,2)$	**1.85**	**405**	**2.0**	**1.84**	**392**	**1.8**	**1.50**	**399**	**1.8**
$(3,3)$	6.10	1321	8.0	**1.26**	**403**	**1.9**	**1.52**	**397**	**1.9**

影響を受けにくいのではないかと考えられる．

4.2 制御と学習の繰り返し回数に対する制御性能

まず，制御と学習の繰り返し回数が $n_{\rm it} = 100$ 回目における制御性能を，$1 \le k_y \le 3$ および $k_u \le k_y$ に対して求めたものを Table 1 に示す．従来手法では $(k_y, k_u) = (2, 1)$，一次差分を用いる手法では $(k_y, k_u) = (3, 3)$ の場合に許容誤差 2°C 以下の $\theta_{\rm O}$ の制御が達成されているが，その他の場合にも $\theta_{\rm O} \le 2$°C を満たしかつ十分小さな $T_{\rm S}$ が得られている場合もあることがわかる．

つぎに，$n_{\rm it}$ の増加に対する $\theta_{\rm O}$ と $T_{\rm S}$ の変化のようすを **Fig. 4** に示す．この図から $n_{\rm it}$ の増加とともに $\theta_{\rm O}$ と $T_{\rm S}$ が大きく変動する場合があり，それらは $n_{\rm it}$ に対する制御性能の性質としては好ましくないと考えられる．この見地から，従来手法 (Fig. 4 (a)) の $(k_y, k_u) = (2, 1)$ は，すべての $n_{\rm it}$ に対して $\theta_{\rm O} < 2$°C であり，十分小さい $T_{\rm S}$ が得られたパラメタであるといえる．ただし，$\theta_{\rm O}$ は下に凸，$T_{\rm S}$ は上に凸の緩やかな変動と，小さな振幅の小刻みな変動がある．$\theta_{\rm O} \le 2$°C で $T_{\rm S}$ をできるだけ小さくするという制御性能を向上させるために，GPC のパラメタ λ_u を調整して（4.3.1 参照），$T_{\rm S}$ を小さくできるが，$\theta_{\rm O}$ は逆に大きくなる．したがって，λ_u を調整して $\theta_{\rm O}$ を 2°C の近傍で変動するようにすると，$n_{\rm it}$ の増加とともに $T_{\rm S}$ が大きく変動する現象（Fig. 4 (a) の $(k_y, k_u) = (3, 2)$ の $30 < n_{\rm it} < 45$ 付近の $T_{\rm S}$ 参照）が起こる．なお，$n_{\rm it} > 30$ において，$(k_y, k_u) = (3, 1)$ や $(2, 2)$ に対する $\theta_{\rm O}$ や $T_{\rm S}$ の変動は小さく，λ_u を調整して，$T_{\rm S}$ を十分小さくすることができたが，それらの結果については紙数の都合上，割愛する．

一次差分のみを用いる手法 (Fig. 4 (b)) では $(k_y, k_u) = (3, 3)$ と $(3, 2)$ が $n_{\rm it} > 40$ で安定した結果を示しているが，ある程度の振幅をもつ小刻みな変動は観察される．これに対して，一次差分バギング法 (Fig. 4(c)) は $(k_y, k_u) = (3, 3)$, (3,2) および (2,2) で安定した結果が得られており，$n_{\rm it} > 40$ における小刻みな変動の振幅も他の手法より小さいことがわかる．

以上の結果は，一次差分バギング法は 3 つの手法の中で $\theta_{\rm O}$ と $T_{\rm S}$ の変動が最も小さいことを示しており，従来手法で $n_{\rm it}$ を増加させても制御性能が必ずしも改善されない問題を軽減する有効な手法であることを示している．

4.3 パラメタ値の制御性能への影響

以上の結果は，パラメタ値を適切に設定しなければ得られない．そこで，以下，本手法の主要なパラメタの値が制御性能に与える影響について検討する．

4.3.1 操作量変動項の重み λ_u

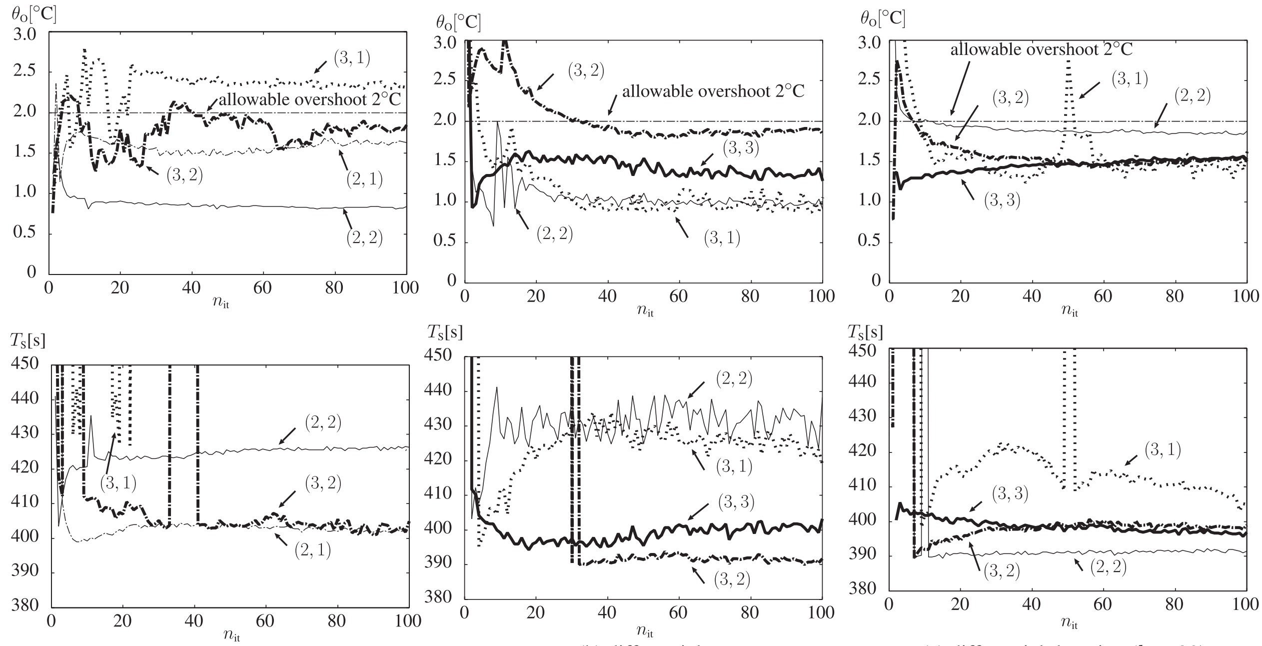
GPC のパラメタ λ_u は，本手法においては仮想サンプリング周期ごとの操作量の変動を抑える働きがある（(A. 1) 式参照）．逆に小さな λ_u は目標値と予測値の差を小さくするように機能するので（(A. 1) 式の第 1 項参照），結果として，小さな λ_u はオーバーシュート $\theta_{\rm O}$ を抑制する働きがあった．上記の実験で用いた λ_u の値は，$(k_y, k_u) = (3, 3)$ に対する一次差分のみを用いる手法と $(k_y, k_u) = (2, 1)$ に対する従来手法が，ほぼ同じ整定時間となるように調整した結果 (Table 1 参照)，それぞれ $\lambda_u = 0.022$ と 0.00495 となった．これは，一次差分法は従来手法より約 4（≃0.022/0.00495）倍大きな λ_u を用いても $\theta_{\rm O}$ を抑制できたことを意味するとともに，一次差分法の予測誤差 $E = 1.9$ (Table 1 参照) は従来手法の $E = 2.9$ よりも小さかったことと関係すると考えられるが，詳細な検討は今後の課題である．

4.3.2 バグサイズ比 α

バグサイズ比 α は，上述の見地から，$n_{\rm it}$ に対して安定した制御性能を示す値を設定すべきであるが，その明確な基準はない．そこでいくつかの α に対して，$n_{\rm it}$ に対する制御性能を求めた結果を **Fig. 5** (a) に示す．この図からは $\alpha = 0.7$ が，$n_{\rm it}$ の変化に対して $\theta_{\rm O} < 2$°C かつ安定して小さな $T_{\rm S}$ を実現しているので良い値であると考えられるが，われわれは，$\alpha = 0.03$ を用いることとした．これは，まず，バギング CAN2 の解析結果[13]によると，学習すべき関数の複雑さに比べて訓練データ数が非常に大きいときは，α が小さいほうが汎化能力が高いと考えられるとともに，$\alpha = 0.03$ に対する各バグ内のデータ数は $n\alpha = 960$ 個であり，$N = 5$ 個の区分領域をもつ区分的線形近似を行なうには十分大きいと考えられるからである．さらに，バグ内データ数は $\alpha = 0.7$ のときの $n\alpha = 22400$ 個の約 4%となるので学習時間がかなり節約できるという長所もある．また $n_{\rm it} = 100$ において最も小さな $T_{\rm S}$ が得られたこと，$n_{\rm it}$ の増加に対して $\theta_{\rm O}$ は緩やかに増加し，$T_{\rm S}$ は緩やかに減少するが，その変化の範囲はそれほど大きくなく，$n_{\rm it} = 200$ まで計算しても $\theta_{\rm O} = 1.57$°C と $T_{\rm S} = 396$s となったこと，および小刻みな変化の振幅も小さいことなどが挙げられる．

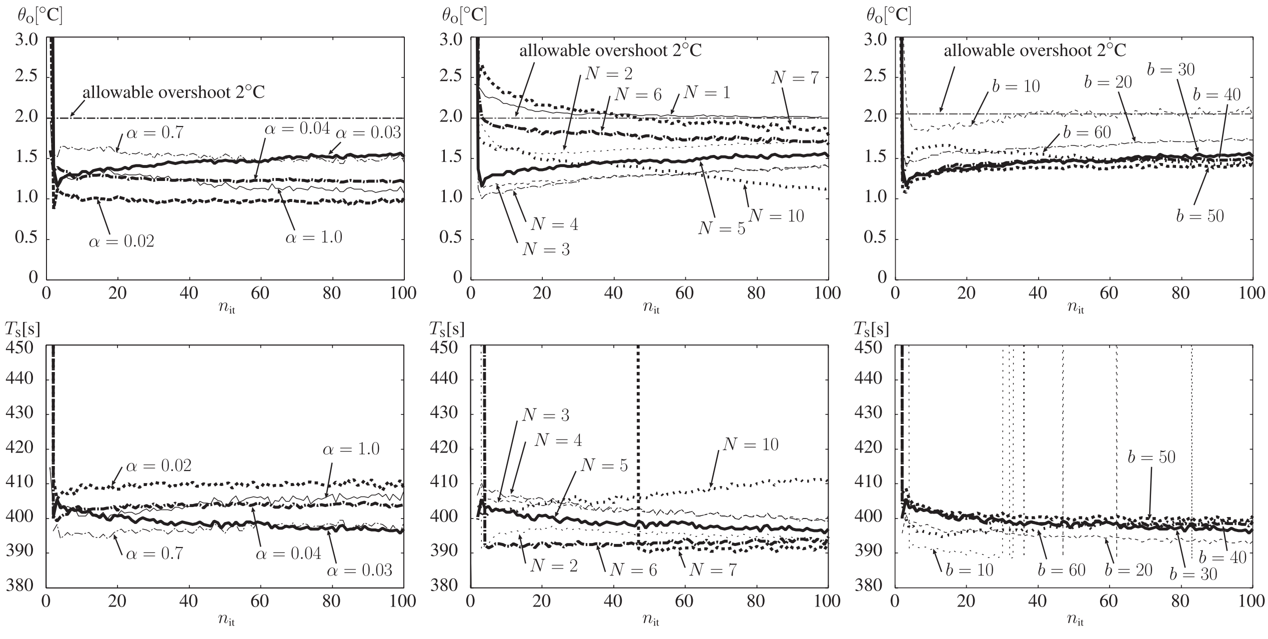
4.3.3 ユニット数 N

CAN2 のユニット数 N を 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10 とした場合の制御性能を Fig. 5 (b) に示す．なお，$N = 1$ の $T_{\rm S}$ はこの図の表示範囲に入らず，$n_{\rm it} = 100$ において $T_{\rm S} = 870$s であった．この図から，$2 \le N \le 6$ に対しては，$n_{\rm it}$ の増加とともに $\theta_{\rm O}$ と $T_{\rm S}$ はそれぞれある値に収束するような変化をしていることがわかるが，これは Fig. 5 (a) の α に対する変化と明らかに異なっている．バギング CAN2 による関数近似問題に対する解析[13]によると，α と N はともに，訓練デー



(a) conventional　(b) differential　(c) differential+bagging ($b = 30$)

Fig. 4　The overshoot $\theta_{\rm O}$ and the settling time $T_{\rm S}$ versus $n_{\rm it}$ for different methods. The 2-tuples indicate (k_y, k_u).



(a) $N = 5, b = 30$　(b) $\alpha = 0.03, b = 30$　(c) $\alpha = 0.03, N = 5$

Fig. 5　The overshoot $\theta_{\rm O}$ and the settling time $T_{\rm S}$ versus $n_{\rm it}$ for the differential and bagging method with $(k_y, k_u) = (3, 3)$ and different α, N and b

タから未知のデータを予測する場合の汎化能力を決定するパラメタとして捉えられるが，本制御問題においては，α と N は訓練データ自体を変化させるので，より複雑な機構で上記の性質の違いが生じていると考えられる．

4.3.4　バグ数 b

バグ数 b を 10, 20, $\cdots$, 60 と変化させた場合の制御性能の変化を Fig. 5 (c) に示す．これらの図から $b \geq 30$ でほぼ同じ制御性能に収束しており，バグ数 b を大きくするとバギング CAN2 の汎化誤差が収束するという解析結果[13]と整合する．しかし，α や N に対する上記の結果も考慮すると，大きな b によりバギング CAN2 の汎化能力が収束するので制御性能も収束したと単純に結論づけることはできない．バギング CAN2 の汎化能力と本制御手法における制御性能との関係のより詳細な機構解明は，今後の研究課題である．

5. 結　　論

本稿では，非線形時変の RCA 洗浄液の温度制御のために従来より開発してきた CAN2 を用いるモデル切替型予測制御の問題点として，従来のユニット選択法により得られた連想行列が縮退する問題，時変系に対する入力ベクトルの次元設定の問題，訓練データ中の変動成分を過学習する問題を指摘し，一次差分とバギングを用いる新しい手法によりそれらの問題に対処できることを示した．計算機実験により，従来手法では制御と学習の繰り返しの途中で制御性能が緩やかな凸変動や小刻みな変動をする場合があることを示し，一次差分とバギングを用いる手法により，その変動がより小さくなることを示した．バギング CAN2 の汎化能力と本制御手法による制御性能との関係はまだ不明な点があり，今後，検討すべき課題である．

参 考 文 献

1) D.E. Rumelhart and D. Zipser: A feature discovery by competitive learning, ed. D.E. Rumelhart, J.L. McClelland and the PDP Research Group, Parallel Distributed Processing, The MIT Press, Cambridge, **1**, 151/193 (1986)
2) T. Kohonen: Associative Memory, Springer Verlag (1977)
3) 黒木秀一，西田健：複数のモデルの学習と切り替えを行う競合連想ネットを用いる適応予測制御，計測自動制御学会論文集，**37**-3, 203/212 (2001)
4) 黒木，西田，信友，坂本，三股，伊藤：RCA 洗浄システムの熱モデルと洗浄液の適応予測温度制御，計測自動制御学会論文集，**37**-8, 754/762 (2001)
5) H. Tomisaki, S. Kurogi, N. Araki, T. Nishida, Y. Fuchikawa, M. Mimata and K. Itoh: Cross-validation of competitive associative nets for stable temperature control of RCA cleaning solutions, Proc. of ICONIP2005, 166/170 (2005)
6) http://predict.kyb.tuebingen.mpg.de/pages/home.php
7) 黒木，西田，渕川：バッチ学習型競合連想ネットとその性質，計測自動制御学会論文集，**42**-8, 916/925 (2006)
8) S. Kurogi, D. Kuwahara, H. Tomisaki, T. Nishida, M. Mimata and K. Itoh: Ensemble of competitive associative nets for stable learning performance in temperature control of RCA cleaning solutions, LNCS 4234, Proc. of ICONIP2006, 563/571 (2006)
9) J.D. Farmer and J.J. Sidorowich: Predicting chaotic time series, Phys. Rev. Lett. **59**, 845/848 (1987)
10) H. Ritter, T. Martinetz and K. Schulten: Neural computation and self-orgaizing maps, Addison and Wesley (1992)
11) 重政，市川：ディジタルプロセス制御系の閉ループ系オートチューニング方法，計測自動制御学会論文集，**20**-7, 592/599 (1984)
12) D. Opitz and R. Maclin: Popular ensemble methods – an empirical study, Journal of Artificial Intelligence Research **11**, 169/198 (1999)
13) 黒木秀一：バグサイズを可変とするバグ外推定による汎化能力向上，日本神経回路学会誌，**16**-2 (2009 年 6 月号掲載予定)

《付　　録》

A. バギング CAN2 を用いる一般化予測制御

従来の CAN2 と同様にバギング CAN2 においても，各制御時刻 j でプラントの出力を予測するための連想行列 $\overline{\boldsymbol{M}}$ が得られるので，従来手法[3]と同様に本手法でも一般化予測制御 (GPC) を以下のように適用することができる．まず最小化すべき評価関数を

$$J=\sum_{l=N_1}^{N_2}\widehat{e}^2(j+l)+\lambda_u\sum_{l=1}^{N_u}\widehat{\Delta u}^{\,2}(j+l-1), \quad \text{(A. 1)}$$

とする．ここで，$\widehat{e}(j+l)=y_d(j+l)-\widehat{y}(j+l)$ は目標出力 $y_d(j+l)$ と予測出力 $\widehat{y}(j+l)$ との差であり，N_1, N_2，N_u および λ_u は定数である．つぎに J を

$$J=\|\boldsymbol{y}_d-G\widehat{\boldsymbol{\Delta u}}-\boldsymbol{p}\|^2+\lambda_u\|\widehat{\boldsymbol{\Delta u}}\|^2 \quad \text{(A. 2)}$$

と変形する．ここで $\boldsymbol{y}_d=(y_d(j+N_1),\cdots,y_d(j+N_2))^T$, $\widehat{\boldsymbol{\Delta u}}=(\widehat{\Delta u}(j),\cdots,\widehat{\Delta u}(j+N_u-1))^T$ および $\boldsymbol{p}=(p(j+N_1),\cdots,p(j+N_2))^T$ である．さらに $p(j+l)$ は入力 $\widehat{\Delta u}(j+l)=0$ $(l=0,1,2,\cdots)$ に対する (11) 式と (12) 式から得られるプラントの固有応答 $\widehat{y}(j+l)$ である．また行列 $\boldsymbol{G}$ の i 行 j 列成分は $G_{ij}=g_{i-j+N_1}$ で与えられ，g_l は $\widehat{y}(j-l)=\widehat{u}(j-l)=0$ $(l<0)$ および $\widehat{u}(l)=1$ $(l\geq 0)$ に対する (11) 式と (12) 式から得られるプラントの単位ステップ応答 $\widehat{y}(j+l)$ である．すると J は

$$\widehat{\boldsymbol{\Delta u}}=(\boldsymbol{G}^T\boldsymbol{G}+\lambda_u\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{G}^T(\boldsymbol{y}_d-\boldsymbol{p}), \quad \text{(A. 3)}$$

により最小化され，この第 1 要素を用いて時刻 j における最適予測入力が $\widehat{u}(j)=u(j-1)+\widehat{\Delta u}(j)$ と求まる．

［著 者 紹 介］

黒 木 秀 一（正会員）

1980 年九州工業大学工学部電気工学科卒業．85 年東京工業大学大学院博士課程修了．同年より九州工業大学工学部・助手を経て 91 年同大助教授．現在，同大大学院工学研究院准教授．工学博士．主にニューラルネットの研究に従事．日本神経回路学会，電子情報通信学会などの会員．

越 山 陽 平（学生会員）

2007 年九州工業大学工学部機械知能工学科卒業．同年同大大学院博士前期課程進学．現在に至る．主にニューラルネットによる制御の研究に従事．

湯 野 洋 司（学生会員）

2008 年九州工業大学工学部機械知能工学科卒業．同年同大大学院博士前期課程進学．現在に至る．主にニューラルネットによる制御の研究に従事．