

# Ensemble Online Support Vector Regression

## EOSVR

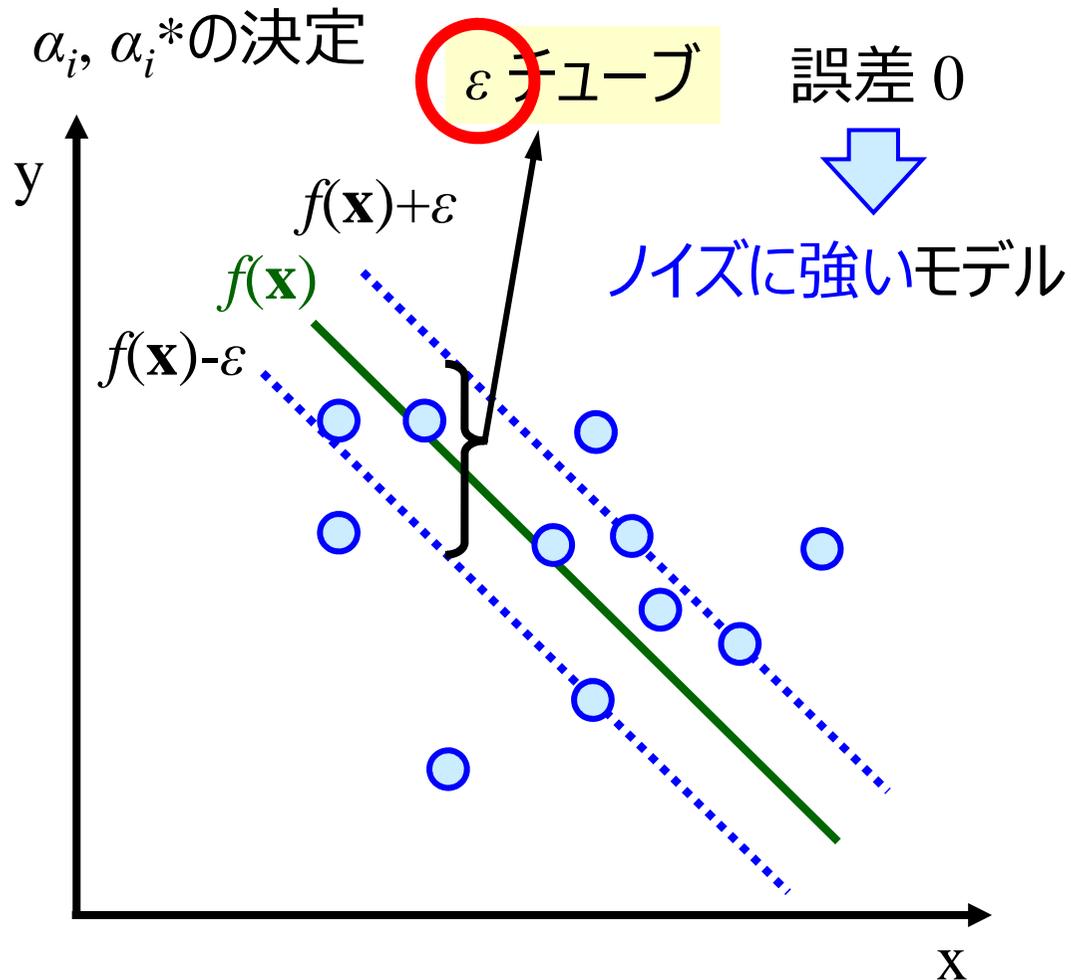
明治大学 理工学部 応用化学科  
データ化学工学研究室 金子 弘昌

# EOSVR とは？

- ✓ Ensemble Online Support Vector Regression (EOSVR) [1]
- ✓ Moving Window (MW) 型の適応型ソフトセンサー
  - 適応型ソフトセンサー: <https://datachemeng.com/adaptivesoftsensors/>
- ✓ ハイパーパラメータがいろいろな値の Support Vector Regression (SVR) モデルを更新しながら予測
  - 複数のモデルで、いろいろなプロセス状態に対応することを期待
  - SVR: <https://datachemeng.com/supportvectorregression/>
- ✓ 直近の予測結果に基づいて、モデルごとに重みを計算
- ✓ 予測値に重みをつけて最終的な予測値を計算
- ✓ 予測値のばらつきで、最終的な予測値の信頼性も検討可能

# Support Vector Regression (SVR)

SVRの回帰式 
$$f(\mathbf{x}^{(j)}) = \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) K(\mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{x}^{(i)}) + c$$



$\alpha_i, \alpha_i^*$ の範囲

$$0 \leq \alpha_i \leq C$$

$$0 \leq \alpha_i^* \leq C$$

モデルの複雑度を調整

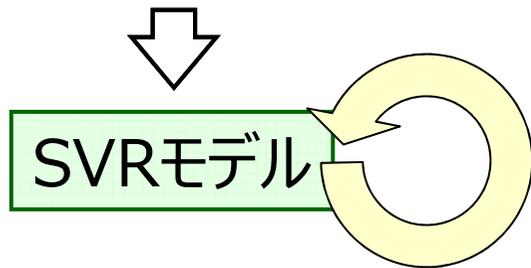
カーネル関数  $K$

$$K(\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{x}^{(j)}) = \exp(-\gamma \|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}^{(j)}\|^2)$$

非線形回帰モデル

# ハイパーパラメータの設定と OSVR

$\varepsilon$ ,  $C$ ,  $\gamma$  を設定 (例: 5-fold クロスバリデーション)



新しい測定データにより更新  
… Online SVR (OSVR) [1,2]

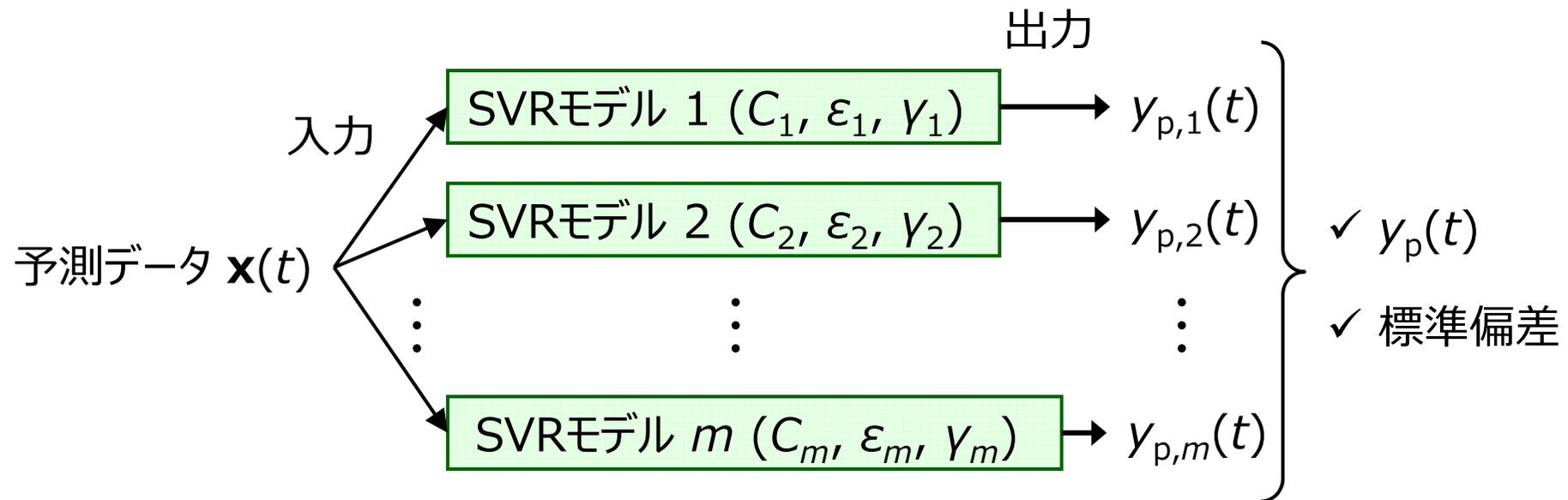
補足: いわゆる Moving Window SVR  
(MWSVR)、OSVR では効率的に  
SVR モデルを更新可能

一つのパラメータの組で、すべてのプロセス状態に対応できる訳ではない！



アンサンブル学習 (Ensemble learning) の活用

- [1] J. Ma, J. Theliler, S. Perkins, Neural Comput, 15, 2683-2703, 2003
- [2] H. Kaneko, K. Funatsu, Comput. Chem. Eng., 58, 288-297, 2013



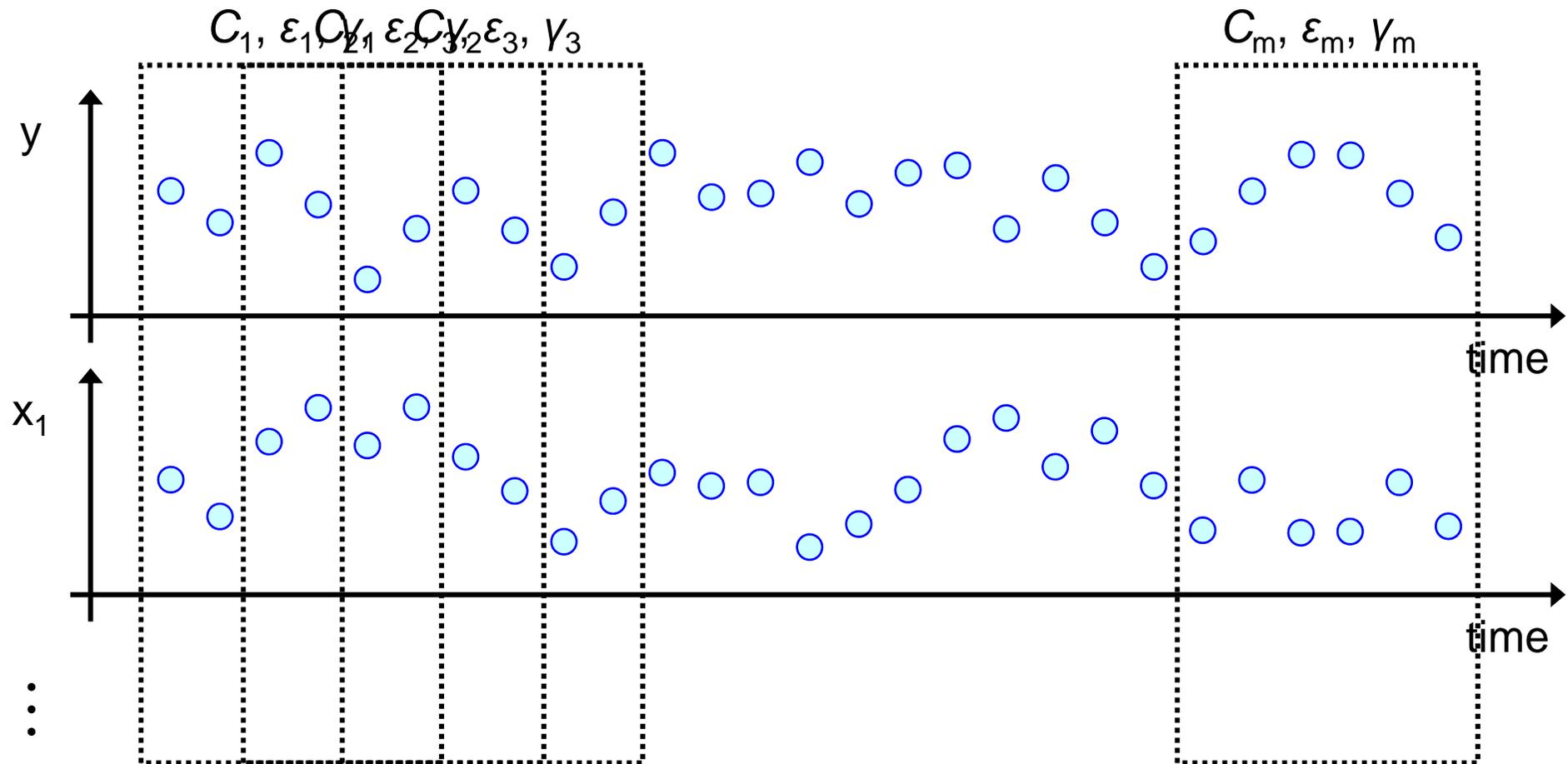
$$\text{重み} : \frac{1}{\text{RMSE}^2}$$

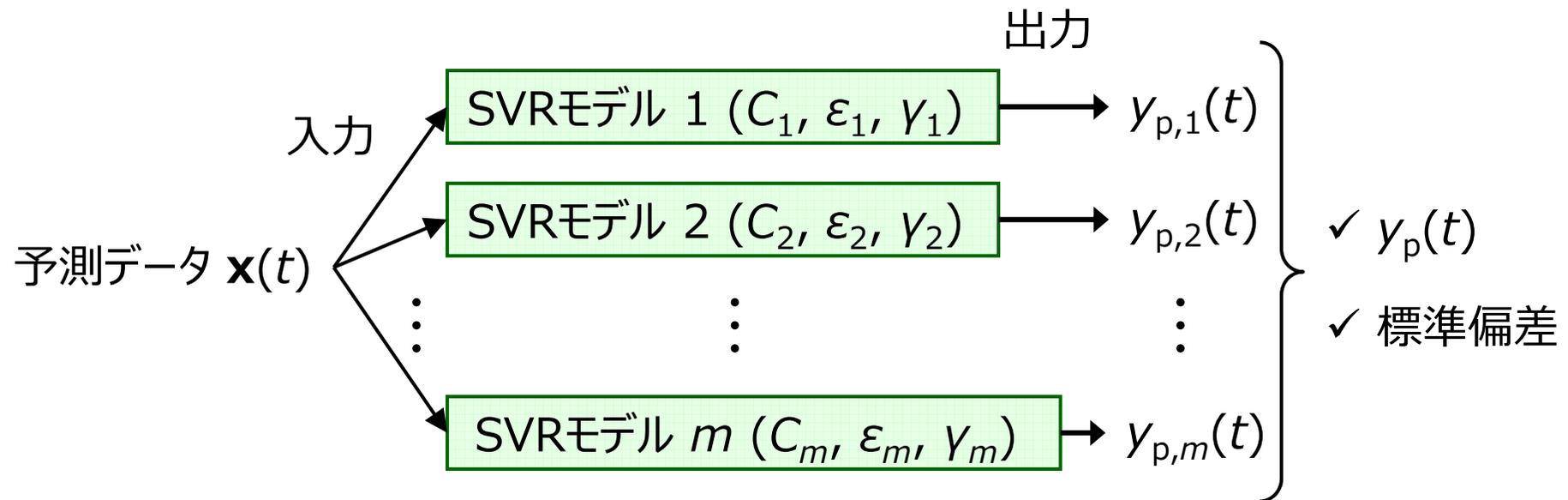
(直近のデータを使用して計算)

# 色々なハイパーパラメータの組の求め方

時間幅ごとに、その範囲のみのデータセットでクロスバリデーションにより最適化

➡ 局所的なプロセス状態に合うようなパラメータ値を獲得

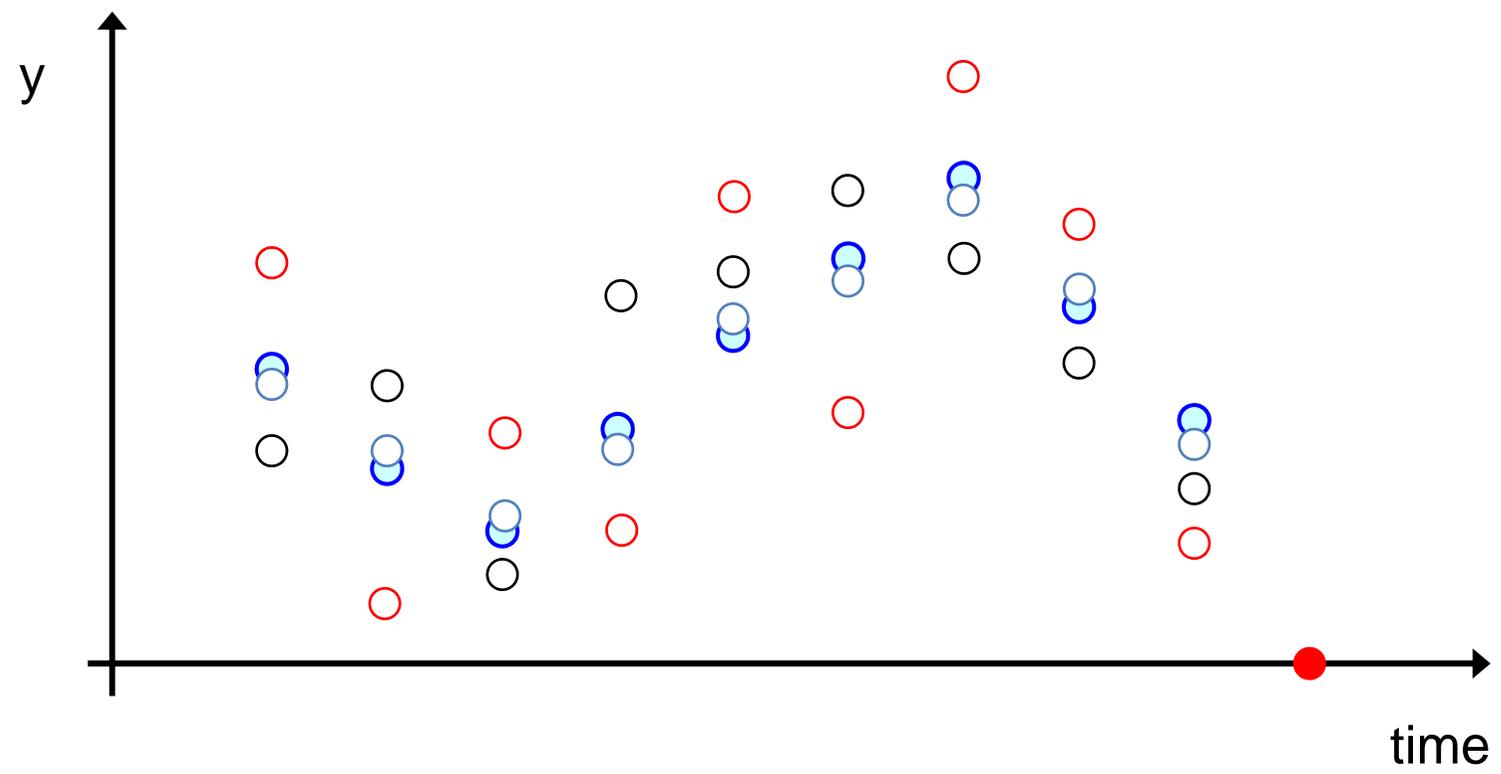




$$\text{重み} : \frac{1}{\text{RMSE}^2}$$

(直近のデータを使用して計算)

# RMSE の計算 1



モデル1の結果    モデル2の結果    モデル3の結果

RMSE	大	小	大
重み： $\frac{1}{RMSE^2}$	小	大	小

# RMSE の計算 2

✓ 直近のデータセットの  $\text{RMSE}_{\text{midknn}}$  [1] とする

[1] H. Kaneko, K. Funatsu, J. Chem. Inf. Model., 53, 2341-2348, 2013  
DOI: 10.1021/ci4003766.

# EOSVR まとめ

- ✓ 時間的に局所的なプロセス状態に最適化された、いろいろなパターンのハイパーパラメータ値で、複数の SVR モデルを準備
- ✓ それぞれの SVR モデルを最新のサンプルを用いて更新
  - MW モデル
- ✓ 各 SVR モデルにより予測された値に、直近の予測誤差が小さいほど大きくなるように計算された重み付けて平均した値を、最終的な予測値とする
  - プロセス状態ごとに、同じ状態で最適化されたハイパーパラメータをもつ SVR モデルほど予測値への寄与が大きくなる