

# Locally-Weighted Partial Least Squares

LWPLS

局所PLS

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

# LWPLSとは？

## ✓非線形PLSの一つ

- PLS (Partial Least Squares) の詳細はこちら  
<https://datachemeng.com/partialleastsquares/>

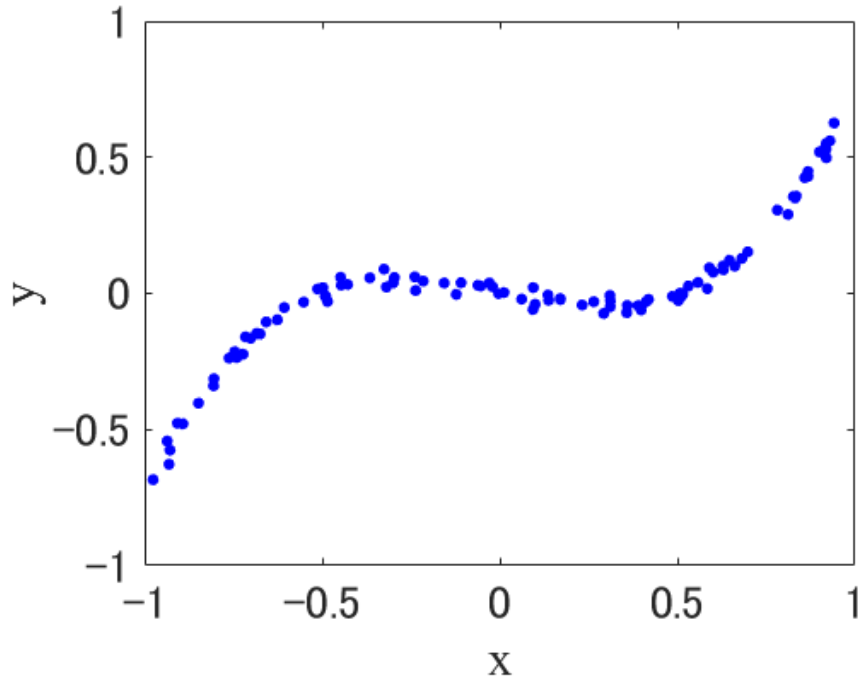
## ✓Just-In-Time (JIT) モデリングの一つ

- 目的変数の値を推定したいサンプルごとにモデリングする

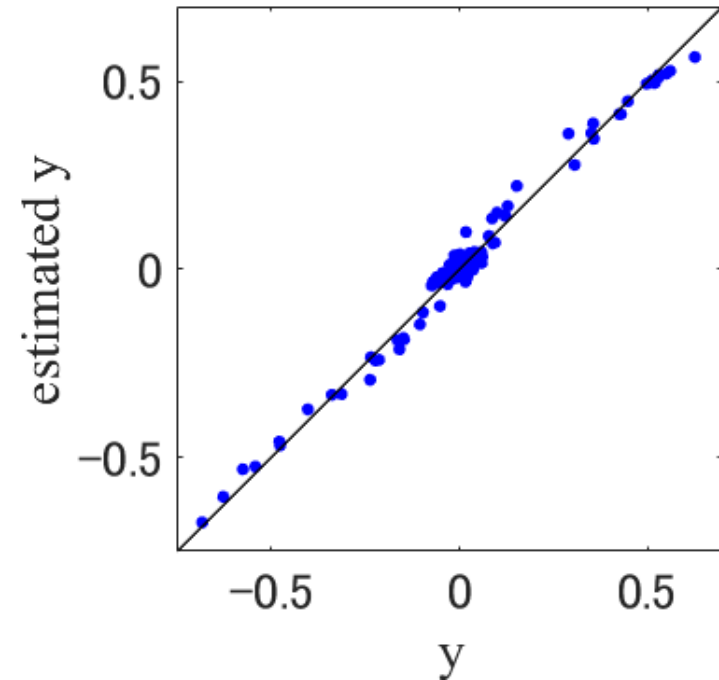
## ✓目的変数の値を推定したいサンプルに近いトレーニングデータほど大きい重みを付けてモデリングする

## ✓時系列データなど、説明変数と目的変数のデータセットのサンプルが増えていく場合に特に効果を発揮する

# LWPLS のイメージ

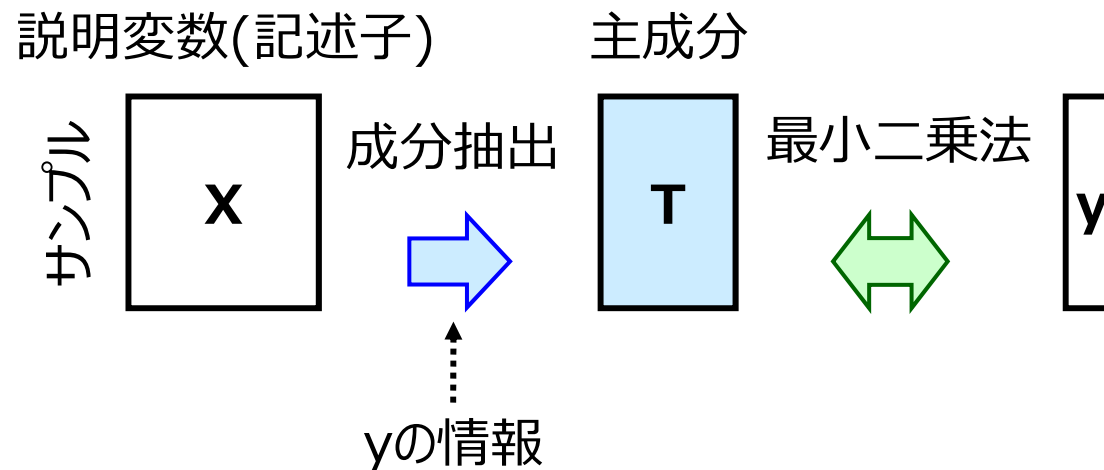


LWPLS



# PLS の復習 1/2

- ✓ PCA (Principal Component Analysis)
  - 主成分  $\mathbf{t}$  の分散 ( $\mathbf{t}^T \mathbf{t}$ ) が最大になるように主成分を抽出
- ✓ PLS (Partial Least Squares)
  - 主成分  $\mathbf{t}$  と目的変数  $\mathbf{y}$  との共分散 ( $\mathbf{t}^T \mathbf{y}$ ) が最大になるように主成分を抽出



# PLS の復習 2/2

**X**、**y** はオートスケーリング後 (平均0、標準偏差1)  
オートスケーリングについては [こちら](#)

$$\mathbf{X} = \sum_a^A \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^T + \mathbf{E} = \mathbf{TP}^T + \mathbf{E}$$

$$\mathbf{y} = \sum_a^A \mathbf{t}_a q_a + \mathbf{f} = \mathbf{Tq} + \mathbf{f}$$

- ✓  $A$  : PLS の成分数
- ✓  $\mathbf{t}_a$  :  $a$  番目の主成分
- ✓  $\mathbf{p}_a$  :  $a$  番目のローディング
- ✓  $\mathbf{E}$  :  $\mathbf{X}$  の残差

- ✓  $q_a$  :  $a$  番目の係数
- ✓  $\mathbf{f}$  :  $\mathbf{y}$  の残差

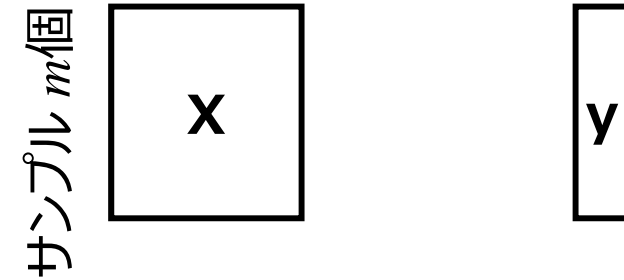
行列の表し方やローディングについては [こちら](#)

# LWPLS の前提

## ✓ トレーニングデータ

- $\mathbf{X}$  :  $m \times n$  の行列
- $\mathbf{y}$  :  $m \times 1$  のベクトル
  - $m$  : サンプルの数
  - $n$  : 説明変数 (記述子) の数

説明変数(記述子)  $n$  個



## ✓ 目的変数の値を推定したいサンプル (クエリ)

- $\mathbf{x}_q$  :  $1 \times n$  のベクトル

# トレーニングデータとクエリとの類似度行列 $\mathbf{U}$

トレーニングデータとクエリとの類似度行列  $\mathbf{U}$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_q^{(1)} & & & \mathbf{0} \\ & u_q^{(2)} & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & u_q^{(m)} \end{bmatrix} \quad u_q^{(i)} = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{x}_q\|}{\lambda s^{(i)}}\right)$$

$\mathbf{x}^{(i)}$  :  $i$  番目のトレーニングデータ

$s^{(i)}$  :  $\|\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}_q\|, \|\mathbf{x}^{(2)} - \mathbf{x}_q\|, \dots, \|\mathbf{x}^{(m)} - \mathbf{x}_q\|$  の標準偏差

$\lambda$  : 類似度調整用パラメータ (ハイパーパラメータ)

# トレーニングデータの平均化

$$\mathbf{X}_0 = \mathbf{X} - \mathbf{X}_w$$

$$\mathbf{y}_0 = \mathbf{y} - \mathbf{y}_w$$

$$\mathbf{X}_w = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{bmatrix} [x_{w,1}, x_{w,2}, \dots, x_{w,n}]$$

$$y_w = \frac{\sum_{i=1}^m u_q^{(i)} y^{(i)}}{\sum_{i=1}^m u_q^{(i)}}$$

$$x_{w,j} = \frac{\sum_{i=1}^m u_q^{(i)} x_j^{(i)}}{\sum_{i=1}^m u_q^{(i)}}$$

← クエリとの類似度で重み付き平均したもの





# 1成分目の計算

成分数  $a = 1$  のとき、

$$\mathbf{w}_a = \frac{\mathbf{X}_{a-1}^T \mathbf{U} \mathbf{y}_{a-1}}{\left\| \mathbf{X}_{a-1}^T \mathbf{y}_{a-1} \right\|}$$

$\mathbf{w}_a$  :  $a$  成分目のウェイトベクトル

$$\mathbf{t}_a = \mathbf{X}_{a-1} \mathbf{w}_a$$

$\mathbf{t}_a$  :  $a$  成分目のスコアベクトル

$$\mathbf{p}_a = \frac{\mathbf{X}_{a-1}^T \mathbf{U} \mathbf{t}_a}{\mathbf{t}_a^T \mathbf{U} \mathbf{t}_a}$$

$\mathbf{p}_a$  :  $a$  成分目のローディングベクトル

$$q_a = \frac{\mathbf{y}_{a-1}^T \mathbf{U} \mathbf{t}_a}{\mathbf{t}_a^T \mathbf{U} \mathbf{t}_a}$$

$q_a$  :  $a$  成分目の係数

## 2成分目の計算へ、そして繰り返し

下のように  $\mathbf{X}$  と  $\mathbf{y}$  をアップデート

$$\mathbf{X}_a = \mathbf{X}_{a-1} - \mathbf{t}_a \mathbf{p}_a^T \quad \mathbf{y}_a = \mathbf{y}_{a-1} - \mathbf{t}_a q_a$$

そして、 $a$  を  $a + 1$  として、再び p. 7 の計算をする

このように、p. 7 の計算と  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{y}$  のアップデートを繰り返して、  
2, 3, ... 成分目の計算をする

これにより、成分ごとのウェイトベクトル・ローディングベクトル・係数が  
得られる

# クエリの推定をする

$a$  成分目までを用いたときの、クエリの目的変数の推定値を、  
 $y_{q,a}$  とする

定数項を  $y_{q,0}$  として、p. 6 のクエリとの類似度で重み付き平均したもの  
 $y_w$  とする

$$y_{q,0} = y_w$$

# クエリの平均化

$$\mathbf{x}_{q,0} = \mathbf{x}_q - [x_{w,1}, x_{w,2}, \dots, x_{w,n}]$$

$x_{w,1}, x_{w,2}, \dots, x_{w,n}$  については、p. 6 参照

# 1成分目の計算

成分数  $a = 1$  のとき、

$$t_{q,a} = \mathbf{x}_{q,a-1} \mathbf{W}_a$$

## 2成分目の計算へ、そして繰り返し

下のように  $\mathbf{x}_q$  と  $y_q$  をアップデート

$$\mathbf{x}_{q,a} = \mathbf{x}_{q,a-1} - t_{q,a} \mathbf{p}_a^T \quad y_{q,a} = y_{q,a-1} - t_{q,a} q_a$$

そして、 $a$  を  $a + 1$  として、再び p. 11 の計算をする

このように、p. 11 の計算と  $\mathbf{x}_q$  と  $y_q$  のアップデートを繰り返して、  
2, 3, ... 成分目のクエリの推定値を計算する

# ハイパーパラメータをどうするか？

- ✓  $\lambda$  の値をどうするか？
- ✓ 何成分目の推定値を用いるか？

➡ クロスバリデーション + グリッドサーチ (網羅的な探索) で決める

クロスバリデーションについての詳細はこちら

<https://datachemeng.com/modelvalidation/>

✓ 候補の例

- $\lambda : 2^{-9}, 2^{-8}, \dots, 2^5$
- 成分数 : 1, 2, ..., 20

# どうやって実際にLWPLSを実行するか？

- ✓ LWPLS をするための MATLAB や Python のプログラムを作りました！
- ✓ LWPLSのデモと、クロスバリデーションでハイパーパラメータを最適化するデモも付いています！

<https://github.com/hkaneko1985/lwpls>