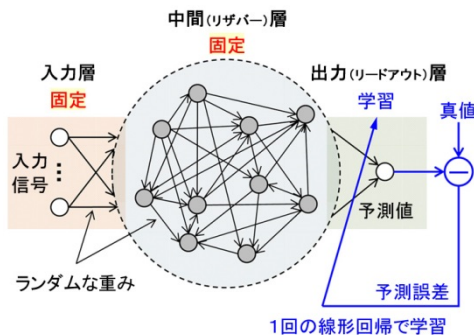


# 高速かつ高精度なソフトセンサ構築を可能とする 時系列予測技術“リザーバー計算”

“Reservoir Computing”- Time-series Prediction Method  
for Fast and Accurate Soft Sensor Modeling



高垣 俊介\*<sup>1</sup>  
Shunsuke Takagaki

立石 浩毅\*<sup>2</sup>  
Koki Tateishi

安東 弘泰\*<sup>3</sup>  
Hiroyasu Ando

極めて高速な学習を実現

化学プラントや産業プラントでは、直接計測できない状態量を推定する技術として“ソフトセンサ”が知られており、制御や監視などへの応用が進んでいる。近年、技術進展著しい深層学習技術をソフトセンサに適用することで高精度な推定を実現している一方で、その学習に多大な時間を要するとの課題があった。この課題に対し、高い推定精度を維持しつつ、極めて短時間で学習可能な“リザーバー計算”を用いたソフトセンサを構築した。本報では、リザーバー計算の概要と排煙脱硫装置における炭酸カルシウム濃度予測への適用事例について紹介する。

## 1. はじめに

近年、機械学習・深層学習などの AI 技術が急速に発展しており、AI 技術による未知の状態量の時系列予測について、産業課題への応用が活発に進められている。例えばプラント分野では、計測困難であるが重要な状態量が存在しており、そのような状態量をリアルタイムに予測するモデルを構築できれば、実センサの代替としての利用によるセンサ運用コスト低減や、異常検知や制御などへの応用によるプラント運用性向上が期待できる。このような実センサを代替する予測モデルは一般に“ソフトセンサ”と呼ばれ、AI 技術に基づく時系列予測モデルを過去に計測・収集した運転データによって学習することで、高精度に構築することが可能である。

AI 技術による時系列予測の代表的な手法として、深層学習モデルの一種である Recurrent Neural Network (RNN) などが知られている。しかしながら、RNN では一般的に膨大な量のモデル内部パラメータを繰り返し調整することで学習を行うため、長期間の運転データを学習する際に多大な学習時間を要する。このため、AI 技術を活用した高精度なソフトセンサの実用化において、(1)プラント現地に設置したエッジ PC を利用するなど、計算リソースが限られた状況下での学習では運転データのアンダーサンプリングや学習対象の限定といった対処が必要となり、収集データを十分に活用できない、及び(2)経時変化に伴うソフトセンサの更新作業にタイムリーに対応できないとの課題があった。

これらの課題を解決可能な時系列予測技術として“リザーバー計算”技術が挙げられ(2章で詳述)、その代表的な手法である Echo State Network (ESN)<sup>(1)</sup>は、時系列的なダイナミクスを高精度に表現可能な RNN の一種でありながら、内部パラメータの繰り返し調整が不要であり、学習時間が極めて短いことを特長とする。三菱重工業株式会社(以下、当社)ではこれまでに東北大学による学術指導のもと ESN の設計指針を整理し、実プラントの運転データへの適用検討を通して、ESN

\*1 デジタルイノベーション本部 CIS 部

\*2 デジタルイノベーション本部 CIS 部 主席チーム統括

\*3 東北大学 材料科学高等研究所 教授 工博

がソフトセンサ構築に有効であることを学習時間及び予測精度の両面で確認しており、本報にてその概要を紹介する。

## 2. リザーバー計算技術:ESN

リザーバー計算技術とは、(a)時系列的な入力データを高次元空間へ写像し、(b)その写像空間から所望の情報を読み出す、という考え方に基づいた時系列モデリング技術である。例えば、貯水池 (Reservoir) に小石を複数個投げ込んだとき、水面には複雑な波形が描かれるが、この波形に小石の情報(質量、形状、軌道など)が含まれていると解釈すれば、何らかの方法により波形から小石の情報を推定できると考えられる。“リザーバー計算”という名称はこの比喩に由来しており、“小石の運動→波形発生”という物理現象が(a)高次元空間への写像に、“水面の波形→小石の情報推定”が(b)情報の読み出しに対応しているといえる<sup>(2)</sup>。リザーバー計算は、(a)あらかじめ与えられた高次元空間への写像から、(b)いかに所望の情報を読み出すか、という点に焦点を当てており、この考え方をRNNに適用したものが、以下に述べるリザーバー計算の代表的手法であるESNである。

一般的なRNNとESNの構造及び学習方法を図1に概念的に示す。両者とも、ニューロンをネットワーク状に結合した構造を有する入力層、中間層、出力層の3層から構成されており、所望の入出力関係を満たすようにニューロンの結合の強さ(“重み”と呼ばれる)を調整し、学習を行う点で共通しているが、その学習方法は大きく異なる。一般的なRNNでは、“時系列データを逐次入力し、予測値を計算”→“予測誤差の評価に基づいて入力層、中間層、出力層すべての重みを同時に微調整”という一連の処理を、予測誤差が小さくなるまで繰り返すことで学習を行う。一方でESNでは、入力層と中間層の重みはあらかじめランダムな値に固定しておき、出力層を単純な線形結合層として、その重みのみを学習する。入力層と中間層の重みが固定されている場合、同じ入力データに対して中間層の出力=出力層への入力是不変であるから、出力層の重みの学習は線形回帰を一度実行するのみでよく、重みの繰り返し調整は不要となる。これにより、RNNと同様の複雑な時系列モデリングを実現しつつ、極めて高速な学習が可能であることがESNの大きな特長である。なお、ESNにおける中間層、出力層は、前段における(a)高次元空間への写像、(b)情報の読み出しにそれぞれ対応し、リザーバー層、リードアウト層と呼ばれる。

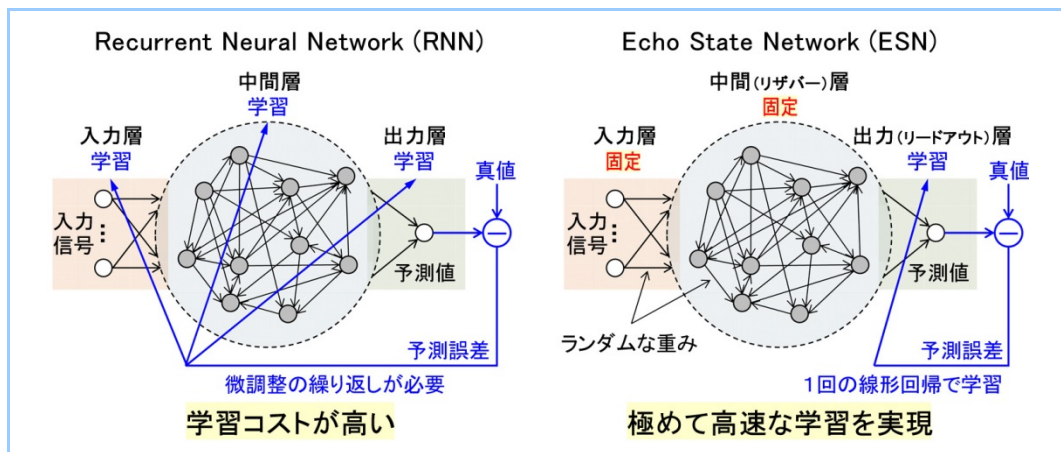


図1 一般的なRNNとESNの概念比較<sup>(2)</sup>

## 3. ESNの設計指針

一般的なESNの構造をブロック線図として図2に示す。入力データはベクトル量として与えられ、入力層では重み行列 $W_{in}$ による線形変換を行う。リザーバー層では活性化関数 $f$ を通してリザーバー状態と呼ばれるベクトル量に変換するが、この変換処理の過程に過去のリザーバー状態を利用することで、時系列的なモデリングが可能となっている。リードアウト層では、リザーバー状態を入

カデータと結合の上、重み行列 $W_{out}$ によって線形変換し、最終的な予測値を出力する。ESNは、この $W_{out}$ のみを学習対象とするシンプルな手法であるが、それゆえに、入出力関係を精度良く表現可能なモデルを得るためには、モデル構造の適切な事前設計が重要となる。本章では、ソフトセンサへの実用に適した ESN の設計指針について述べる。

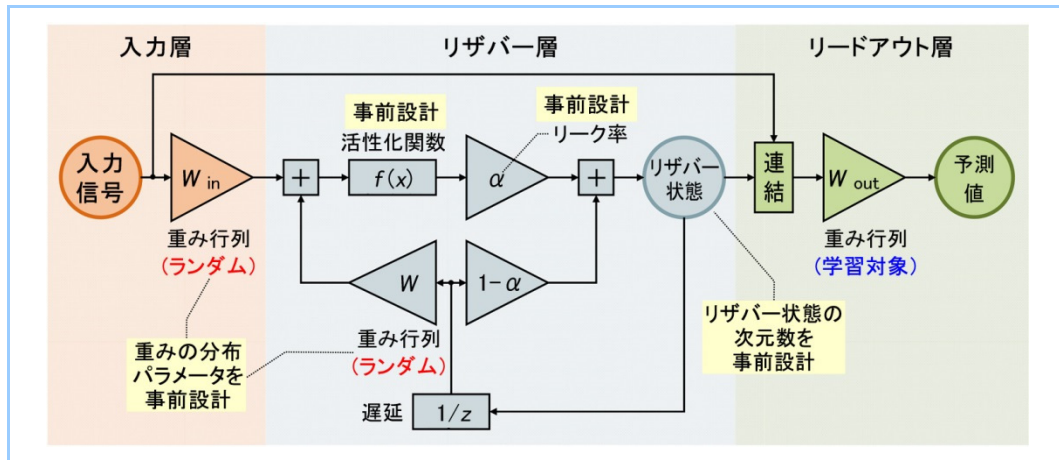


図2 一般的な ESN のブロック線図表現

### 3.1 ハイパーパラメータの自動調整

図2に示した ESN の構造は、リザーバー状態の次元数や入力層・リザーバー層のランダムな重みの分布パラメータ、表現するダイナミクスの速さを調整するパラメータ $\alpha$  (リーク率と呼ばれる)などによって(リードアウト層を除いて)決定される。これらのパラメータはハイパーパラメータと呼ばれ、その最適性は予測タスクに依存するが、経験的な調整指針がいくつか知られている<sup>(3)</sup>一方で明確な方法論は未確立であり、これまで手作業での調整を要していた。この課題に対し先行研究では、ベイズ最適化技術を適用したハイパーパラメータ調整の有効性が報告されており<sup>(4)</sup>、これによって自動調整での省力化が可能となっている。

### 3.2 適切な活性化関数の選択

ESN の表現力を高めるためには活性化関数として非線形関数を適用する必要があるが、 $\tanh$  関数が用いられることが一般的である。この  $\tanh$  関数は奇関数であるが、これに対し、 $\text{sinc}$  関数 ( $y = \sin(x)/x$ )などの偶関数を適用することで、特定の予測タスクにおいて ESN の予測精度を向上できることが知られている<sup>(5)</sup>。前節のハイパーパラメータと同様、活性化関数の最適性は予測タスクに依存するため、 $\tanh$  関数以外の活性化関数についても吟味を行い、適切に選択する必要がある。

### 3.3 マルチステップ先予測と線形補間

一般的な ESN では、等間隔に並んだ入力に対し1ステップ先の予測値を出力するが、予測対象のダイナミクスに対してステップ時間幅が小さい場合(細かい時間間隔のデータを用いて応答の遅い系をモデリングするケース)、予測対象の1ステップでの変化量は相対的に小さくなるため、実機データを用いた学習を行う際にノイズ成分の影響を受けやすくなる懸念がある。この問題への対策として、ESN では複数ステップ先の予測を行うよう学習しておき、現時刻の予測値との線形補間によって1ステップ先を予測することが考えられる。

### 3.4 モデルのアンサンブル

予測モデルを複数用意し、それらの予測値の平均値(あるいは中央値など)を、全体的なモデルの出力とする手法は“アンサンブル”と呼ばれ、機械学習・深層学習分野において予測の精度や安定性の向上を目的として一般的に用いられている技法である。ESN は入力層、リザーバー層の重みをランダムに固定するという原理上、予測の不安定化リスクを本質的に有しており、それを完全に回避することはできないが、アンサンブルによって一定のリスク低減が可能である。

上記の設計指針4項目について、その概念図を図3に示す。



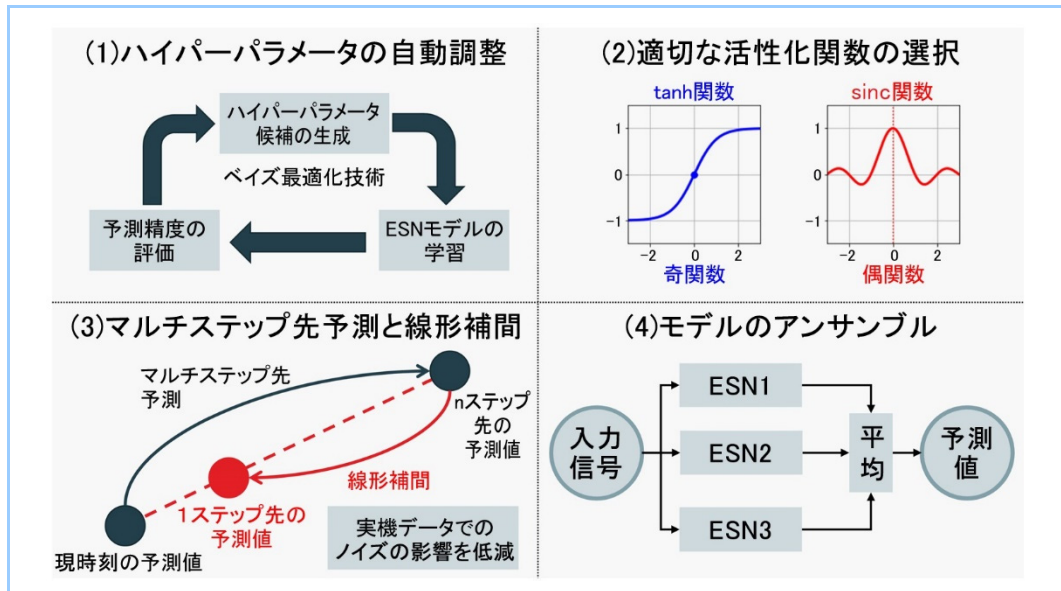


図3 ソフトセンサ構築に適した ESN の設計指針

## 4. プラント実機データによる検証

本章では、ESN によるソフトセンサ構築の有効性を検証するため、例題として排煙脱硫装置における炭酸カルシウム濃度予測問題への適用を検討した事例について述べる。当社の排煙脱硫装置については従来、吸収塔内の炭酸カルシウム濃度を計測し、運転監視・制御に用いるための分析計をお客様へ提供してきたが、サンプリング配管の詰まりなどにより、定期的な保守を要する。このことを背景に、AI 技術を用いた設備の運転・保守最適化、運用コスト低減を目的としたデジタルソリューション開発の一環として炭酸カルシウム濃度ソフトセンサの開発に取り組んでおり、これまでに深層学習手法を用いた高精度なソフトセンサを実現している<sup>(6)</sup>が、一方で、学習コストの面で課題があるため、ESN による高速かつ高精度なソフトセンサの学習を試みた。

試行においては、実在する排煙脱硫装置の運転データ約2か月分を用い、吸収塔入口/出口 SO<sub>2</sub> 濃度等、8個の説明変数による炭酸カルシウム濃度予測モデルを ESN によって学習した。この際、前章で述べた ESN の設計指針をそれぞれ適用、すなわち、活性化関数を sinc 関数とし(3.2 節)、15 ステップ先を予測する(3.3 節)ESN を、ハイパーパラメータを自動調整した(3.1 節)上で 10 個学習し、アンサンブルした(3.4 節)モデルを構築した。

この ESN による炭酸カルシウム濃度予測精度を交差検証によって評価し、1サンプルあたりのモデル学習時間とあわせて RNN の代表的な手法である Long Short-Term Memory (LSTM)<sup>(7)</sup>と比較した結果を図4に示す。ESN の予測精度は LSTM と同等以上でありながら、学習時間は LSTM の約 1/140 となっており、ESN によって高速かつ高精度なソフトセンサの学習が可能であることを実証できた。

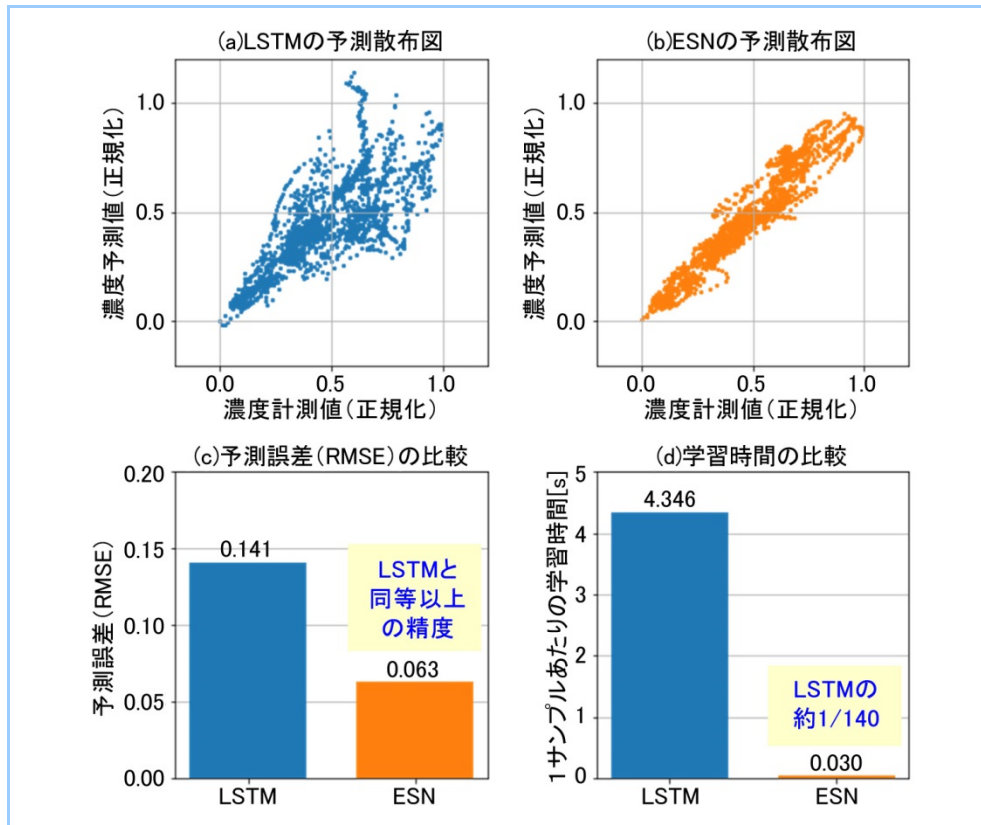


図4 炭酸カルシウム濃度予測問題における ESN と LSTM の予測精度・モデル学習時間

## 5. まとめ

本報では、高速かつ高精度な時系列予測技術であるリザーバー計算技術の代表的な手法である ESN について、ソフトセンサへの実用に適した設計指針を整理した。また、その設計指針を適用した ESN によって排煙脱硫装置の炭酸カルシウム濃度ソフトセンサの学習を試み、従来の深層学習手法と同等以上の精度を有するソフトセンサの学習を約 1/140 の時間で実現可能であることを示した。一方で、ESN を用いたソフトセンサについては、(1)重みのランダム性に起因する予測不安定化リスクのさらなる低減、(2)常設計器の撤去等により教師データが連続的に取得できない条件下での学習手法確立、などの課題が残されている。今後、これらの課題を解決可能な技術開発を行うとともに、当社製品への適用範囲拡大を推進していく。

## 参考文献

- (1) Jaeger, H., The “echo state” approach to analysing and training recurrent neural networks, German National Research Center for Information Technology Report Vol.148 (2001)
- (2) 田中剛平, リザーバーコンピューティングの概念と最近の動向, 電子情報通信学会誌 Vol.102 No.2 (2019) p.108-113
- (3) Lukoševicius, M., A practical guide to applying Echo State Networks, Neural Networks: Tricks of the Trade, Springer, (2012) p.659-686
- (4) Racca, A. et al., Robust optimization and validation of echo state networks for learning chaotic dynamics, Neural Networks Vol.142 (2021) p.252-268
- (5) Chang, H. et al., Effect of shapes of activation functions on predictability in the echo state network, arXiv preprint arXiv:1905.09419 (2019)
- (6) 安形友希子ほか, 重要インフラの高度保守運用を実現するインテリジェントソリューション TOMONI®, 三菱重工技報 Vol.59 No.3 (2022)
- (7) Hochreiter, S. et al., Long Short-Term Memory, Neural Computation Vol.9 No.8 (1997) p.1735-1780