Восстановление пропущенных значений временного ряда

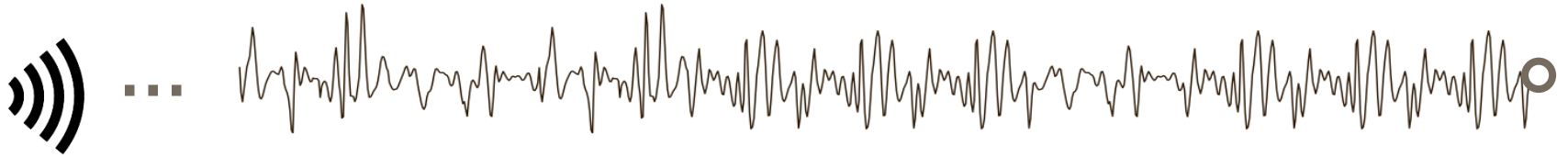
Ничто не бьет человека в лоб с такой силой,
как пропущенное им мимо ушей.

Ю. Слободенюк

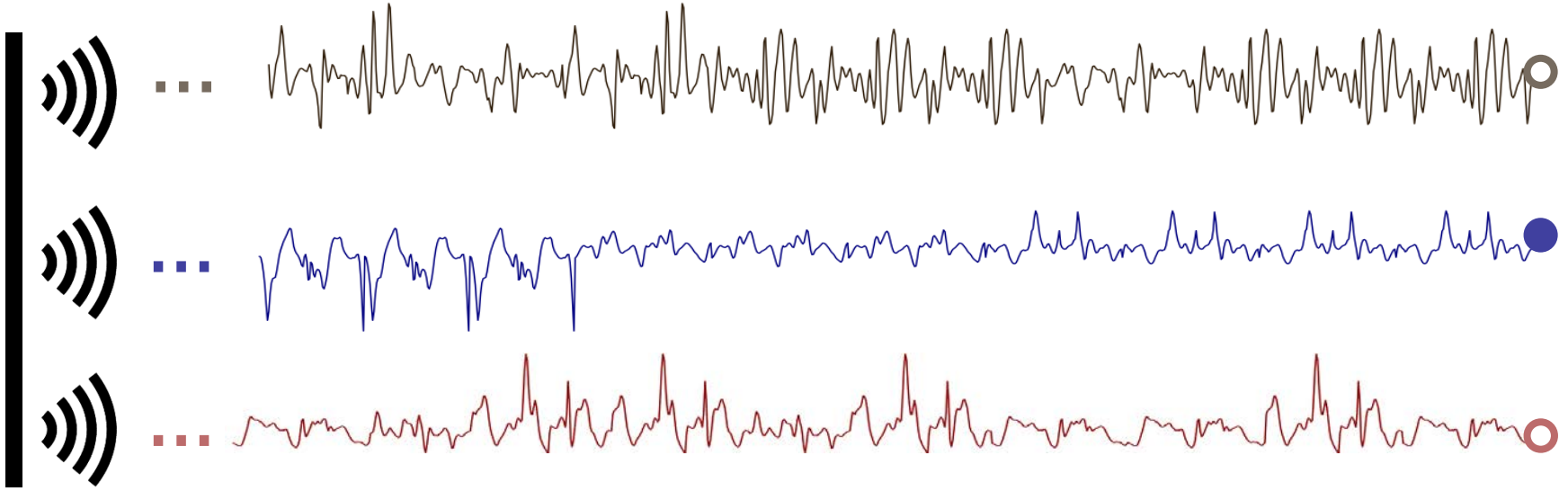
Содержание

Восстановление потокового ряда в режиме реального времени

Одномерный ряд



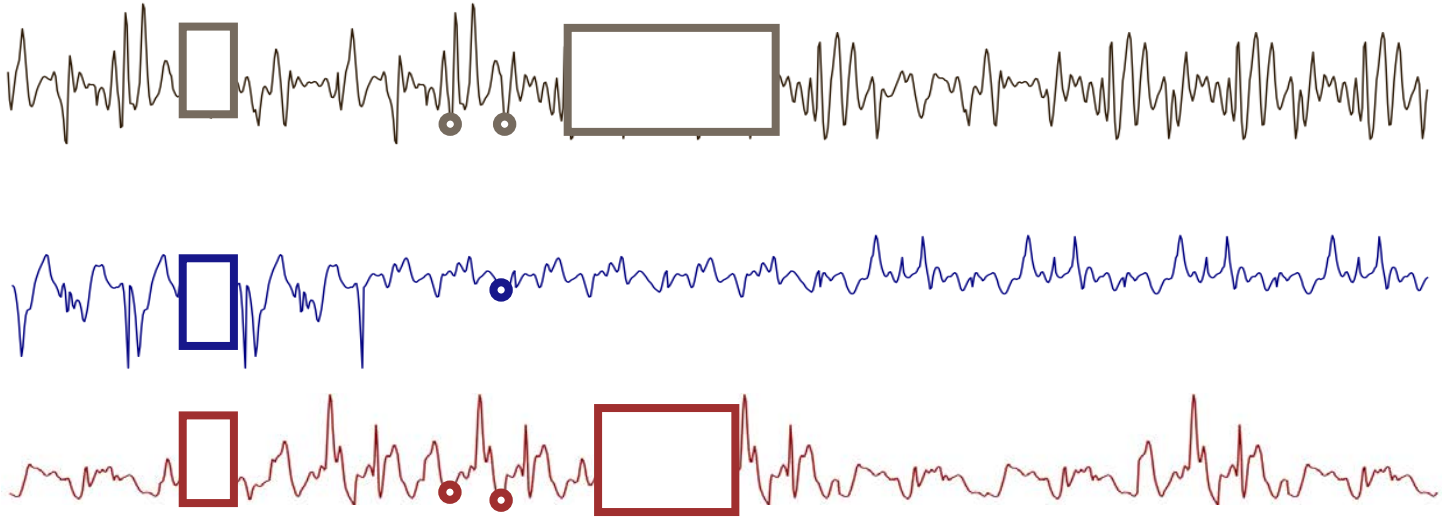
Многомерный ряд



Восстановление ряда (в режиме офлайн)

Одномерный ряд

Многомерный ряд



Механизмы формирования пропущенных значений

- *MCAR (Missing Completely At Random)*, совершенно случайный пропуск

  Вероятность пропуска не зависит от имеющихся и пропущенных данных

- *MAR (Missing At Random)*, случайный пропуск

  Вероятность пропуска не зависит от пропущенных данных, но зависит от имеющихся данных

- *MNAR (Missing Not At Random)*, неслучайный пропуск

  Вероятность пропуска зависит от пропущенных данных

Датчик может выходить из строя независимо от дня недели, времени суток, температуры и др.

В выходные дни
датчик может выходить из строя

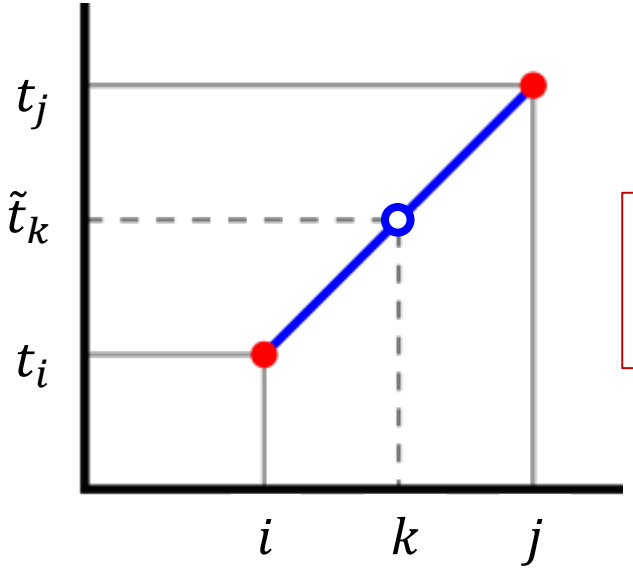
В дни с очень низкой/высокой температурой
датчик может выходить из строя

Классификация методов восстановления

- *Интерполяция* – заполнение пропусков на основе функции(-й), синтезируемой на основе известных значений
- *Сглаживание* – заполнение пропусков на основе среднего значения или др. статистических мер
- *Машинное обучение*
  - Аналитические алгоритмы (обучение без учителя)
  - Нейросетевые методы

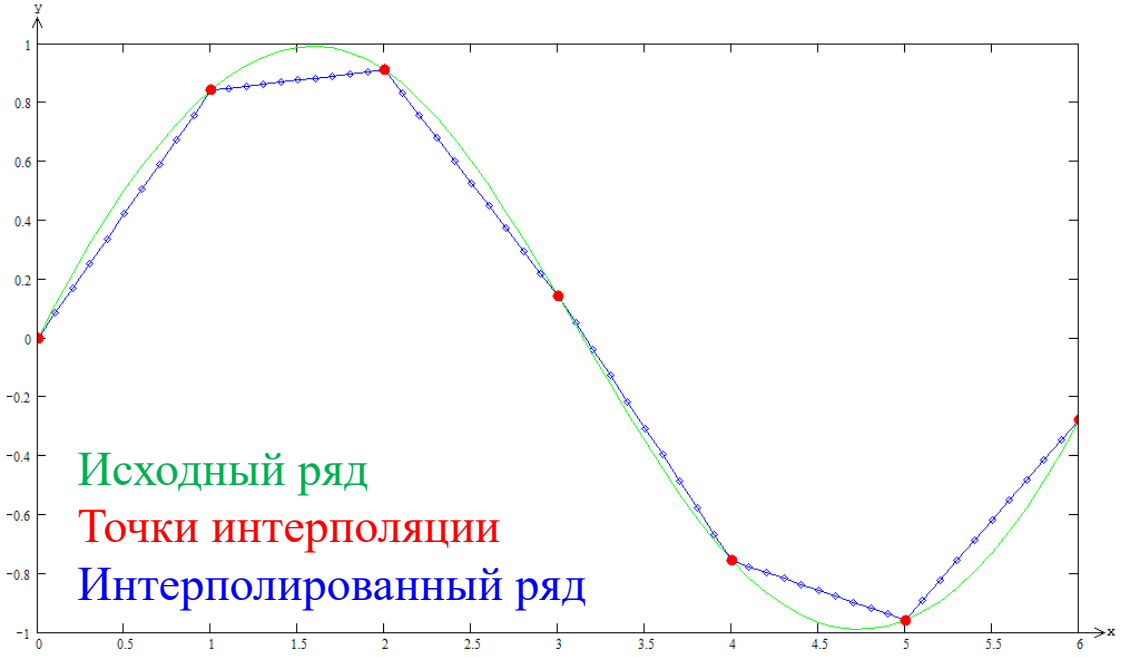
Линейная интерполяция

- На соседних точках $[i, k, j]$ $(t_k = \text{NULL})$ функция $t(k)$ заменяется прямой, проходящей через точки (i, t_i) и (j, t_j), которая задается уравнением $\frac{t-t_i}{t_j-t_i} = \frac{k-i}{j-i}$



$$\tilde{t}_k \approx t_i + \frac{t_j - t_i}{j - i}(k - i)$$

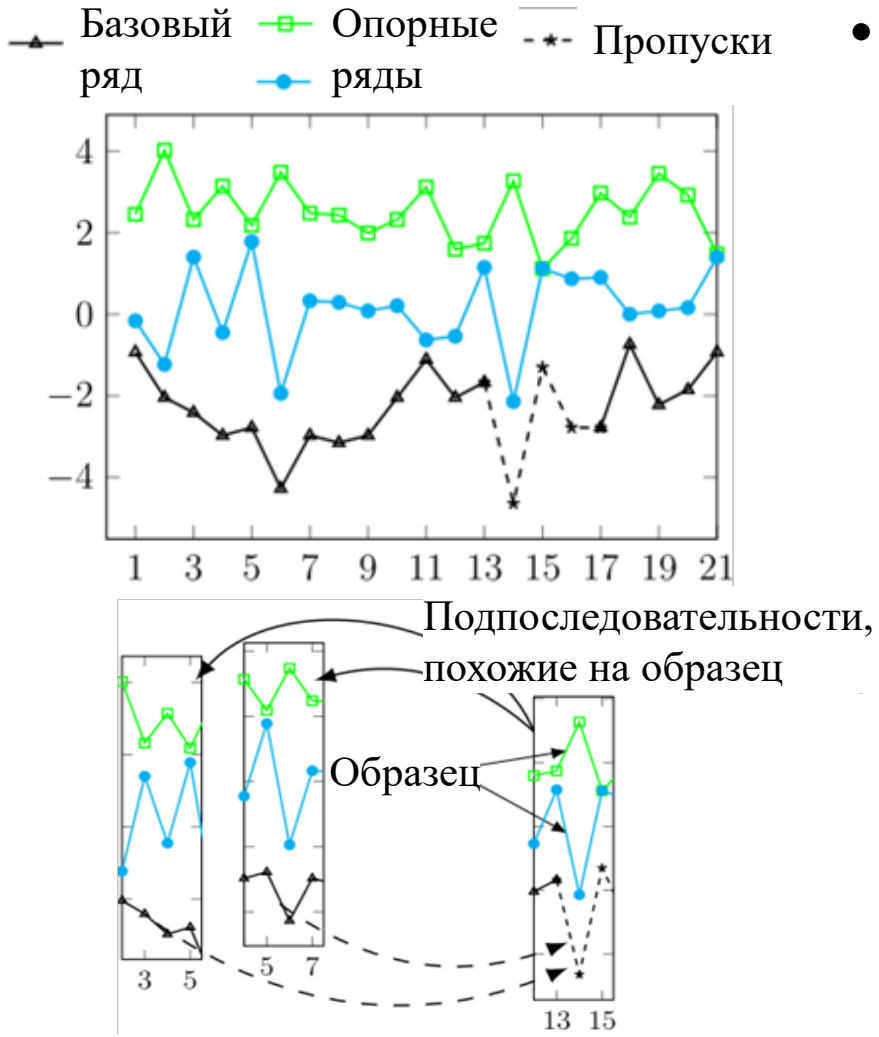
- Приближенное представление ряда в виде кусочно-линейной функции



Содержание

- Постановка задачи
- Классификация методов восстановления
- **Аналитические методы восстановления**
- Нейросетевые методы восстановления
- Оценка точности восстановления

Восстановление на основе шаблонов



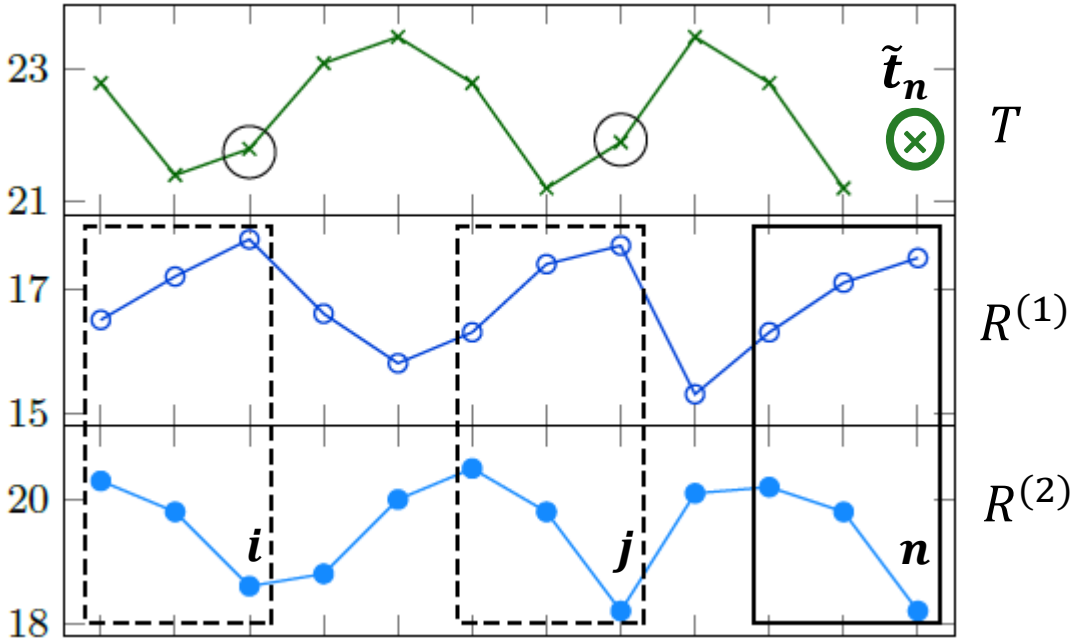
- **Основные идеи**
  - Базовый ряд (base time series) может иметь пропуски
  - Опорные ряды (reference time series) не имеют пропусков
  - Высокое сходство между базовым и опорными рядами
  - При обнаружении пропуска для каждого опорного ряда определяется образец – набор точек, захватывающих момент (для офлайн) или предшествующих моменту (для онлайн) пропуска
  - В опорных рядах выполняется поиск по образцу
  - Точки найденных шаблонов используются для синтезирования пропусков (усреднение и др.)

Параметры

- Длина образца влияет на точность и производительность: маленькая длина – потеря точности (особенно для нецикличных рядов), большая длина – возрастание затрат на поиск
- Способ поиска шаблона, мера схожести, число искомых шаблонов

TKCM (Top-k Case Matching)

Wellenzohn K. *et al.* Continuous imputation of missing values in streams of pattern-determining time series. EDBT 2017.



Число шаблонов:	$k = 2$
Длина образца:	$\ell = 3$
Число опорных рядов:	$d = 2$
Якорные точки шаблонов:	i, j
Множество якорных точек:	$\mathbf{A}, \lvert\mathbf{A}\rvert = k$

- Найти k наиболее похожих шаблонов
  - шаблон не содержит момент пропуска
  - шаблоны не пересекаются между собой
  - отличие между шаблонами и образцами минимально

$$\triangle = \sum_{i \in \mathbf{A}}^{k} \delta\left(R_{i,\ell}, R_{n-\ell+1,\ell}\right) \to \min$$

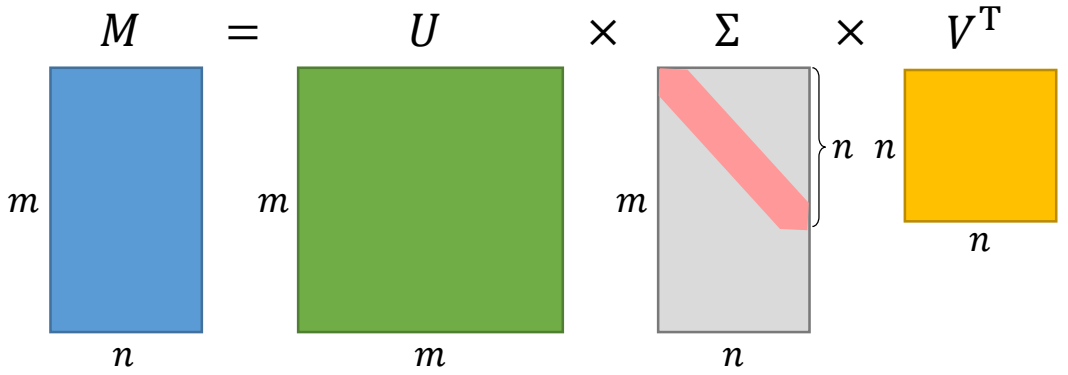
$$\delta(R_{i,\ell}, R_{n-\ell+1,\ell}) = \sqrt{\sum_{p=1}^{d} \sum_{q=0}^{\ell} (r_{i-q}^{(p)} - r_{n-q}^{(p)})^2}$$

- Восстановить усреднением значений в якорных точках

$$\tilde{t}_n = \frac{1}{k} \sum_{i \in \mathbf{A}}^{k} t_i$$

Сингулярное разложение (SVD, Singular Value Decomposition)

- Сингулярное разложение матрицы $M \in \mathbb{R}^{m \times n}$
  $M = U \cdot \Sigma \cdot V^{\mathrm{T}}$
- Матрица левых сингулярных векторов $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$
  унитарная: $UU^{\mathrm{T}} = E$
- Матрица правых сингулярных векторов $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$
  унитарная: $VV^{\mathrm{T}} = E$
- Матрица сингулярных элементов $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$
  $$\forall i \neq j \; \Sigma_{ij} = 0,$$
  $\forall i = j \; \Sigma_{ij}$ – сингулярное число матрицы M
- $\sigma \in \mathbb{R}_+$ – сингулярное число матрицы M, если:
  - $\exists u \in \mathbb{R}^m, v \in \mathbb{R}^n \; \|u\| = \|v\| = 1$
    (левый и правый сингулярные векторы);
  - $Mv = \sigma u \wedge M^{\mathrm{T}} u = \sigma v$



SVD: пример

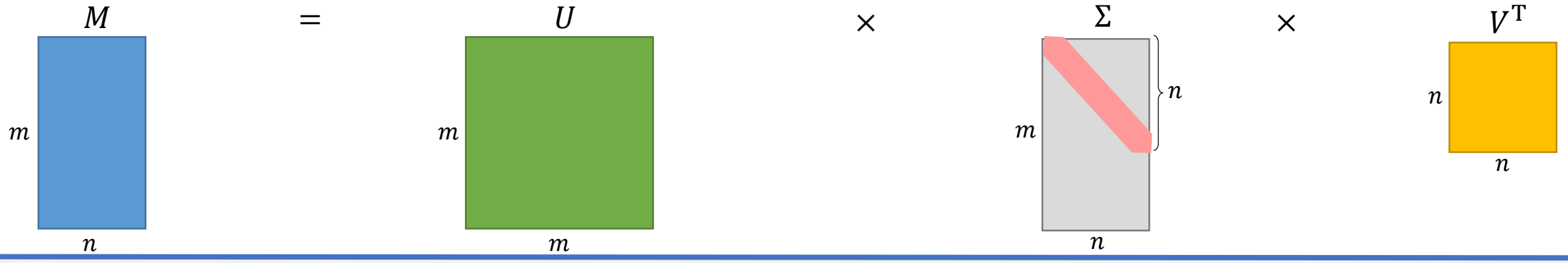
$$M = U \times \Sigma \times V^{\mathrm{T}}$$

$$\begin{pmatrix} 12 & 4 & 8 \\ 16 & 20 & 10 \\ 6 & 2 & 14 \\ 18 & 10 & 6 \\ 8 & 12 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.33848 & 0.351065 & -0.397266 & 0.194769 & -0.752615 \\ 0.652286 & -0.352317 & 0.367604 & -0.524378 & -0.200726 \\ 0.275838 & 0.836263 & 0.350746 & -0.0898933 & 0.305735 \\ 0.500512 & -0.0815744 & -0.670821 & 0 & 0.54114 \\ 0.365178 & -0.215952 & 0.366092 & 0.824022 & 0.0835092 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 41.4183 & 0 & 0 \\ 0 & 11.805 & 0 \\ 0 & 0 & 8.07244 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0.678058 & 0.0336574 & -0.734238 \\ 0.587628 & -0.62488 & 0.514022 \\ 0.441509 & 0.779995 & 0.443483 \end{pmatrix}$$

Нормализованные собственные вектора матрицы $M \times M^{\mathrm{T}}$

$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$,
$\lambda_1, \dots, \lambda_n$ -- собственные значения матрицы $M \times M^{\mathrm{T}}$

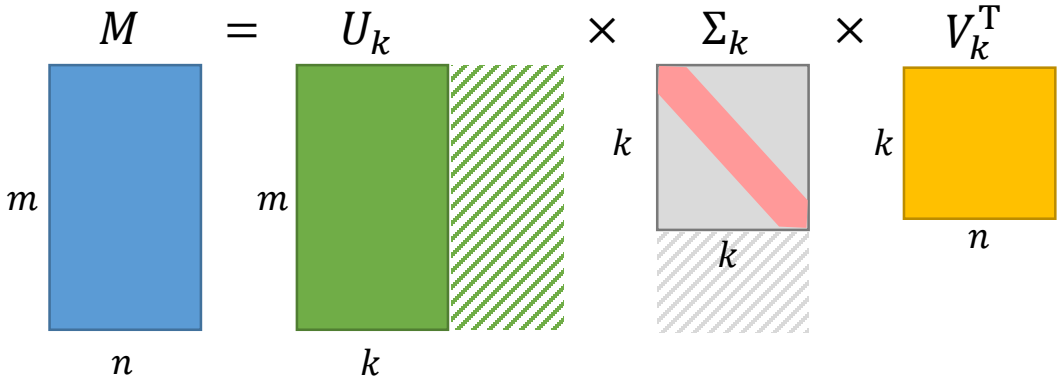
Нормализованные собственные вектора матрицы $M^{\mathrm{T}} \times M$



Сокращенное сингулярное разложение (Reduced SVD)

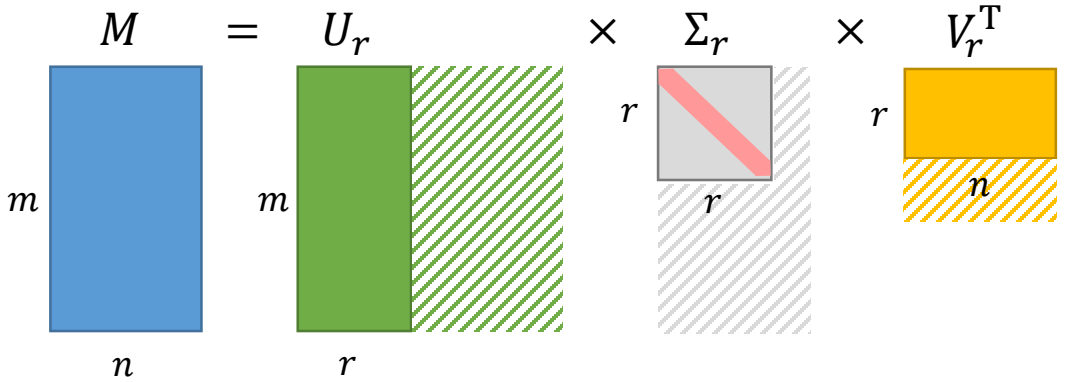
«Тонкое» разложение (Thin SVD)

$\boldsymbol{k} = \min(m,n) \ll \max(m,n)$



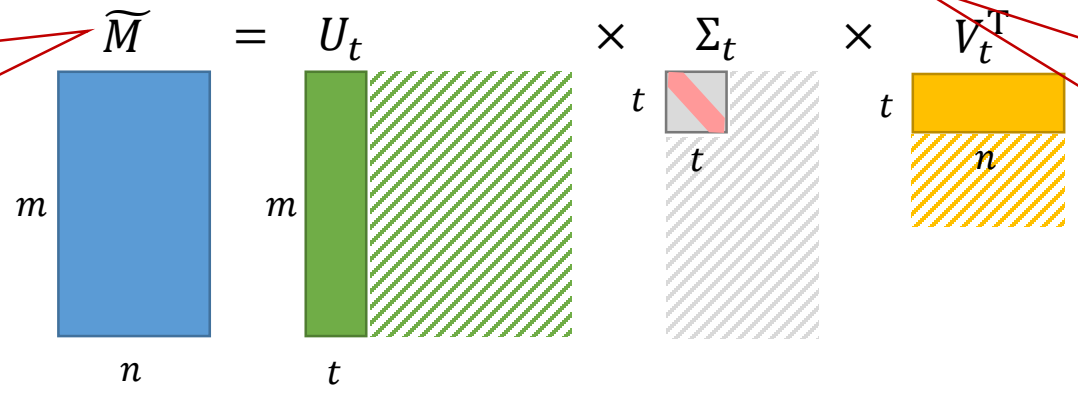
Компактное разложение (Compact SVD)

$\boldsymbol{r} \ll \min(m,n)$



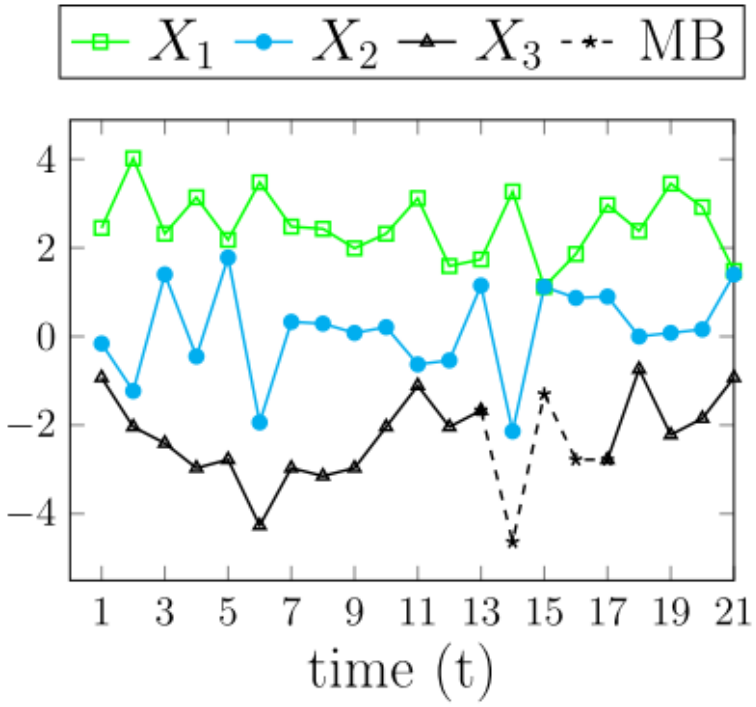
Усеченное разложение (Truncated SVD): $\boldsymbol{t} \ll r$

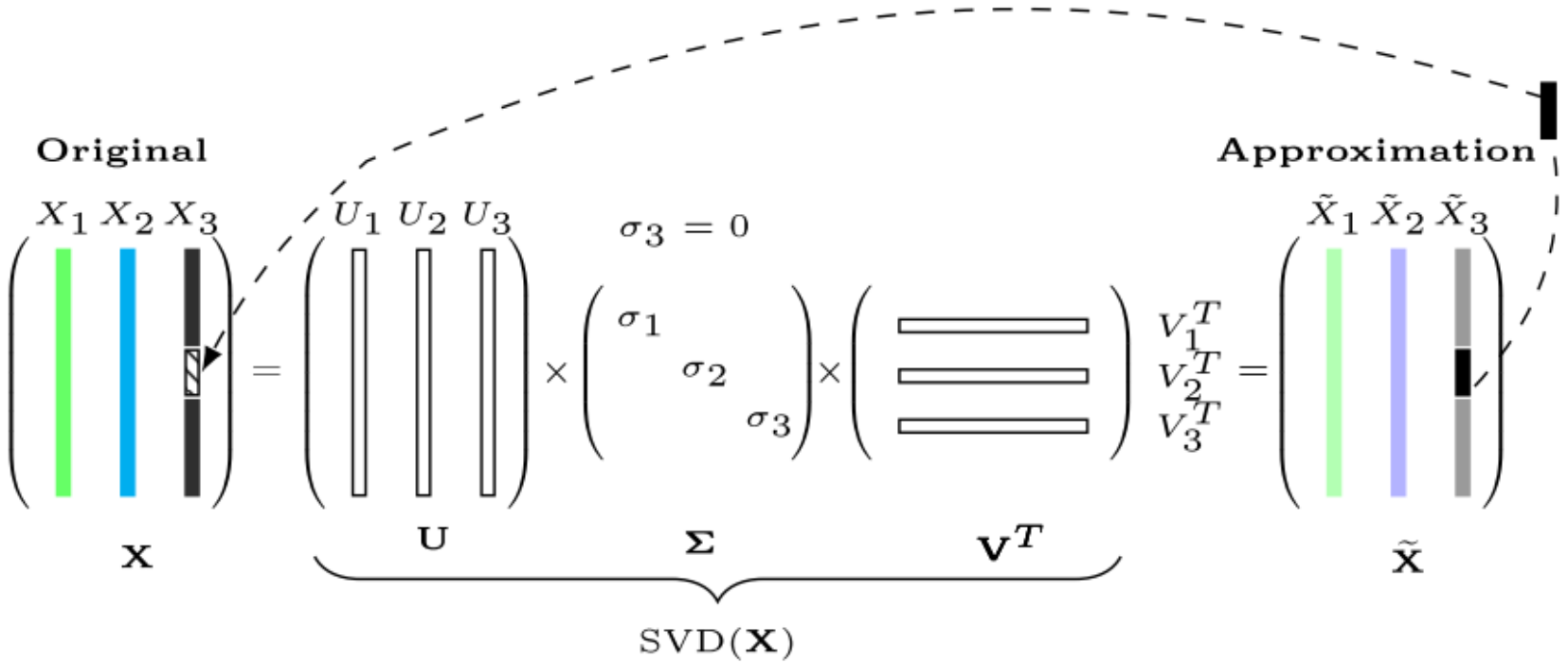
Приближение исходной матрицы матрицей меньшего ранга



Вычисления только для $\boldsymbol{t}$ наибольших сингулярных значений (остальные отсекаются)

Восстановление на основе матричного разложения





Содержание

BRITS (Bidirectional Recurrent Imputation for Time Series)

Cao W. *et al.* BRITS: Bidirectional recurrent imputation for time series. NeurIPS 2018.

NAOMI (Non-AutOregressive Multiresolution Imputation)

Liu Y. *et al.* NAOMI: Non-autoregressive multiresolution sequence imputation. NeurIPS 2019. 11236–11246. https://dl.acm.org/doi/10.5555/3454287.3455295.

GAIN (Generative Adversarial Imputation Networks)

Yoon J. *et al*. GAIN: Missing data imputation using generative adversarial nets. ICML 2018. Proc. of Machine Learning Research. 2018. 80, 5675–5684.

E^2GAN (End-to-End Generative Adversarial Network)

Luo Y. *et al.* E^2GAN: End-to-End generative adversarial network for multivariate time series imputation. IJCAI 2019. 3094–3100. https://doi.org/10.24963/ijcai.2019/429

Содержание

Метрики точности восстановления

- Средняя квадратичная ошибка
  MSE, Mean Squared Error
- Средняя абсолютная ошибка
  MAE, Mean Absolute Error
- Коэффициент детерминации
  $\mathbf{R^2}$, квадрат коэффициента корреляции
- Средняя абсолютная процентная ошибка
  MAPE, Mean Absolute Percentage Error
- Корень средней квадратичной ошибки
  RMSE, Root Mean Square Error
- Симметричная MAPE
  SMAPE, Symmetric MAPE
- Средняя абсолютная масштабированная ошибка
  MASE, Mean absolute scaled error

Средняя квадратичная ошибка (Mean Squared Error)

$$MSE = \frac{1}{h}\sum_{i=1}^{h}(t_i - \tilde{t}_i)^2$$

- Полезна, когда важно минимизировать большие ошибки (большие ошибки штрафуются сильнее, чем маленькие)
- Неустойчива к выбросам. Затрудняет интерпретацию результатов (ошибка в квадрате)
- Если важно минимизировать среднюю ошибку без учета величины ошибок, то лучше использовать MAE. Если важно минимизировать процентную ошибку, то лучше использовать MAPE или SMAPE

Средняя абсолютная ошибка (Mean Absolute Error)

$$MAE = \frac{1}{h}\sum_{i=1}^{h}|t_i - \tilde{t}_i|$$

- Полезна, когда важно минимизировать среднюю ошибку без учета величины ошибок и когда выбросы не являются серьезной проблемой
- Преимущества по сравнению с MSE
  - Более устойчива к выбросам: не штрафует большие ошибки сильнее, чем маленькие
  - Облегчает интерпретацию результатов: измеряет ошибку в тех же единицах, что и исходные данные
- Недостатки по сравнению с MSE
  - Может быть менее чувствительна к изменениям в данных и не давать достаточно большого веса большим ошибкам

Коэффициент детерминации

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{h}(t_i - \tilde{t}_i)^2}{\sum_{i=1}^{h}(t_i - \bar{t})^2}$$

- Измеряет долю дисперсии спрогнозированной/восстановленной части ряда в общей дисперсии ряда. Соответствует нормированной среднеквадратичной ошибке
- Если $R^2 \approx 1$, то модель/алгоритм хорошо объясняет данные. Если $R^2 \approx 0$, то качество прогноза сопоставимо с константным предсказанием
- Завышенное качество при малом количестве данных или наличии в данных выбросов и/или неслучайных ошибок (систематические ошибки измерения и др.). Неадекватное сравнение моделей при использовании ими разных наборов переменных

Средняя абсолютная процентная ошибка (Mean Absolute Percentage Error)

$$MAPE = 100\% \cdot \frac{1}{h} \sum_{i=1}^{h} \frac{|t_i - \tilde{t}_i|}{|t_i|}$$

- Метрика с простой интерпретацией: ошибка прогноза составляет MAPE от фактических значений
- Полезна, когда прогнозные значения имеют разный масштаб или положительные и отрицательные отклонения прогноза от фактических значений влияют на результат одинаково
- Неустойчива к выбросам. Может давать некорректные результаты, когда фактические значения близки к нулю

Корень средней квадратичной ошибки (Root Mean Square Error)

$$RMSE = \sqrt{MSE} = \sqrt{\frac{1}{h}\sum_{i=1}^{h}(t_i - \tilde{t}_i)^2}$$

- Среднеквадратическое отклонение прогноза от фактического значения. Чем меньше RMSE, тем лучше качество прогноза
- Неустойчива к выбросам. Может давать некорректные результаты, когда фактические значения близки к нулю
- Одна из наиболее часто используемых метрик

Симметричная MAPE (SMAPE, Symmetric MAPE)

$$SMAPE = \frac{1}{h}\sum_{i=1}^{h} 2 \cdot \frac{|t_i - \tilde{t}_i|}{|t_i| + |\tilde{t}_i|}$$

- Средняя относительная ошибка прогноза в процентах.
  Чем меньше SMAPE, тем лучше качество прогноза
- Полезна, когда прогнозные значения имеют разный масштаб или положительные и отрицательные отклонения прогноза от фактических значений влияют на результат одинаково
- Неустойчива к выбросам. Может давать некорректные результаты, когда фактические значения близки к нулю

Средняя абсолютная масштабированная ошибка (Mean absolute scaled error)

$$MASE = \frac{\frac{1}{h}\sum_{i=1}^{h}|t_i - \tilde{t}_i|}{\frac{1}{h-1}\sum_{i=2}^{h}|t_i - prev(t_i)|}$$

- Измеряет MAE в единицах фактических значений ряда, нормированную на MAE наивного прогноза (предыдущее значение ряда)
- Позволяет сравнивать качество восстановления/прогноза *разных* рядов
- Если $MASE < 1$, то прогноз лучше, чем наивный прогноз, $MASE = 1$ – не лучше, $MASE > 1$ – хуже. Например,
  - $MASE = 0.5$: MAE прогноза в 2 раза меньше, чем MAE наивного прогноза
  - $MASE = 2$: MAE прогноза в 2 раза больше, чем MAE наивного прогноза

Метрики точности восстановления: резюме

Метрика	Применение
MSE	• Важно минимизировать большие ошибки • Неустойчива к выбросам, может давать завышенную оценку качества модели
MAE	• Важно минимизировать ср. ошибку, независимо от ее размера. Менее чувствительна к выбросам, чем MSE • Менее чувствительна к изменениям в данных, чем MSE. Может не давать большого веса большим ошибкам
R^2	• Оценка соответствия модели данным в целом. Сравнение качества нескольких моделей • Неустойчива к выбросам. Отсутствие возможности сравнения моделей с разными наборами переменных
MAPE	• Важно минимизировать процентную ошибку. Сравнение качества моделей на разных временных рядах • Неустойчива к выбросам, может давать некорректные результаты, когда фактические значения близки к нулю
RMSE	• Важно минимизировать большие ошибки. Сравнение качества моделей на одном временном ряде • Неустойчива к выбросам, может давать некорректные результаты, когда фактические значения близки к нулю
SMAPE	• Важно минимизировать процентную ошибку. Сравнение качества моделей на одном временном ряде • Неустойчива к выбросам, может давать некорректные результаты, когда фактические значения близки к нулю
MASE	• Сравнение качества модели с качеством наивного прогноза. Сравнение качества моделей на разных рядах • Неустойчива к выбросам

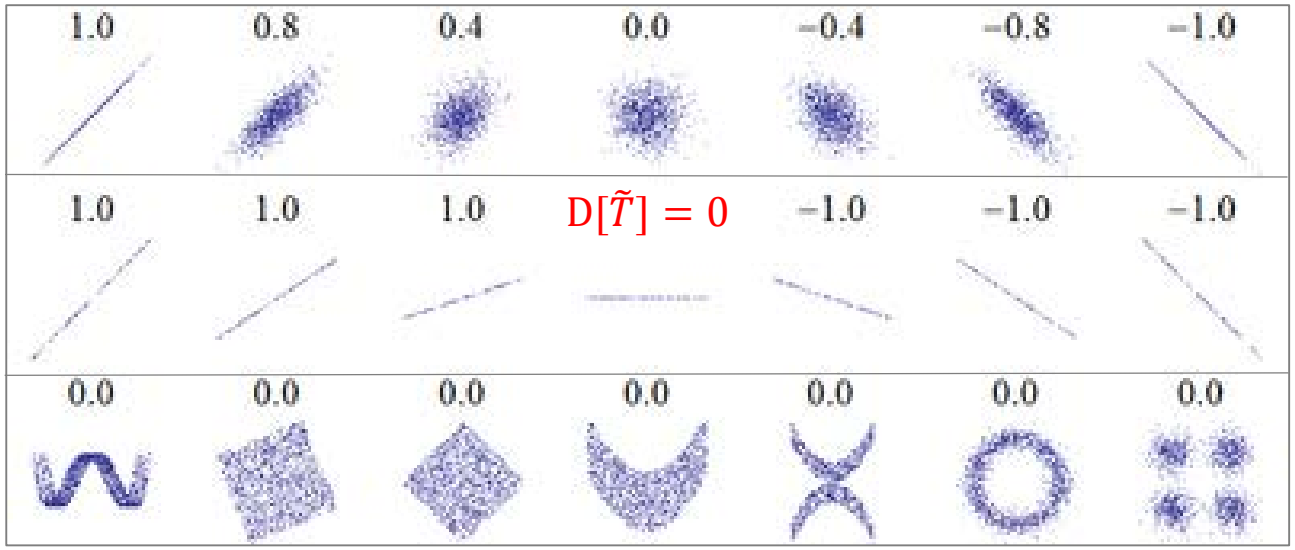
Дополнительный показатель: корреляции Пирсона и Спирмена

$$Pearson(T,\tilde{T}) = \frac{\sum_{i=1}^{h} t_i \tilde{t}_i - h\mu_T \mu_{\tilde{T}}}{h\sigma_T \sigma_{\tilde{T}}}$$

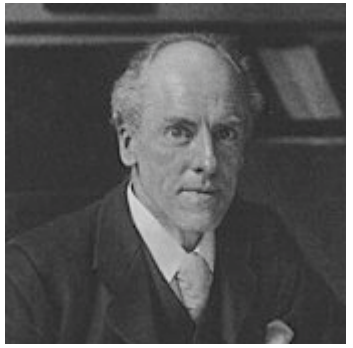
$$Spearman(T,\tilde{T}) = Pearson(r(T), r(\tilde{T}))$$

Шкала Чеддока силы корреляции

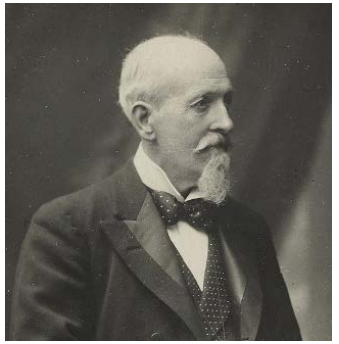
$+1.0$	идеальная положительная
$+0.9$	очень сильная положительная
$+0.7$	сильная положительная
$+0.4$	умеренная положительная
$+0.1$	слабая положительная
0.0	отсутствие корреляции
-0.1	слабая отрицательная
-0.4	умеренная отрицательная
-0.7	сильная отрицательная
-0.9	очень сильная отрицательная
-1.0	идеальная отрицательная



1-я строка: линейная зависимость
2-я строка: линейная зависимость с наклоном
3-я строка: нелинейная зависимость

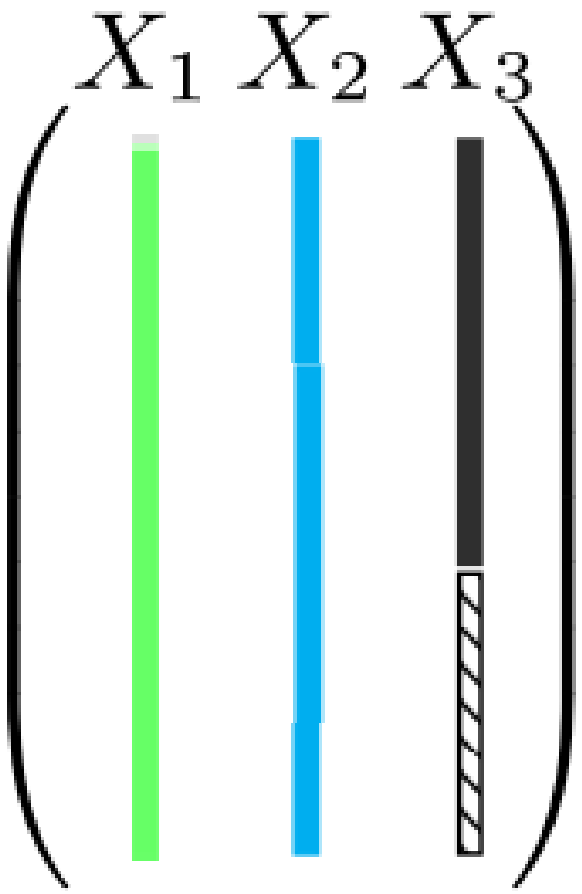


Карл Пирсон (Karl Pearson)
1857-1936



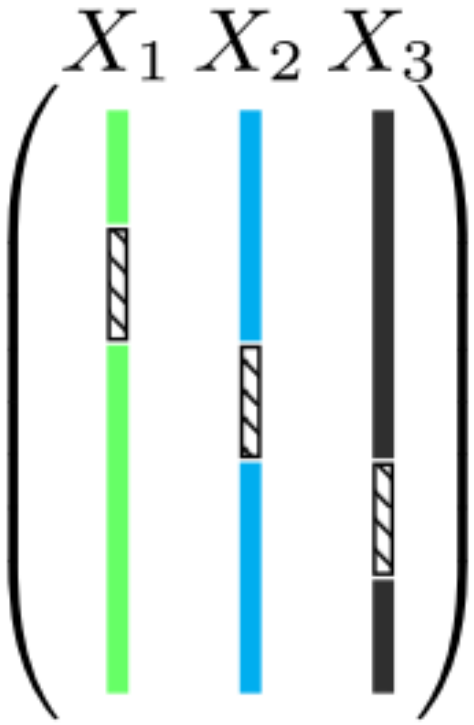
Чарльз Спирмен (Charles Spearman)
1863-1945

Сценарии оценки точности восстановления: режим реального времени

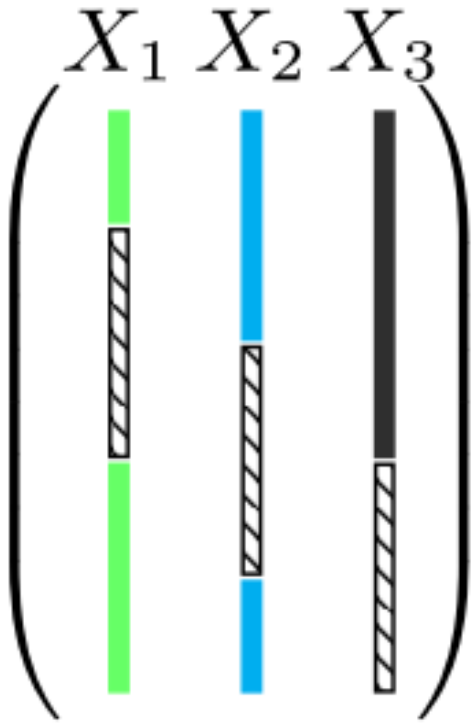


- Гиперпараметры:
  - длина блока пропущенных значений (доля длины ряда)
  - количество временных рядов-координат, в которых имеются блоки пропущенных значений (доля от размерности)
- Обучающая и тестовая выборки не должны пересекаться

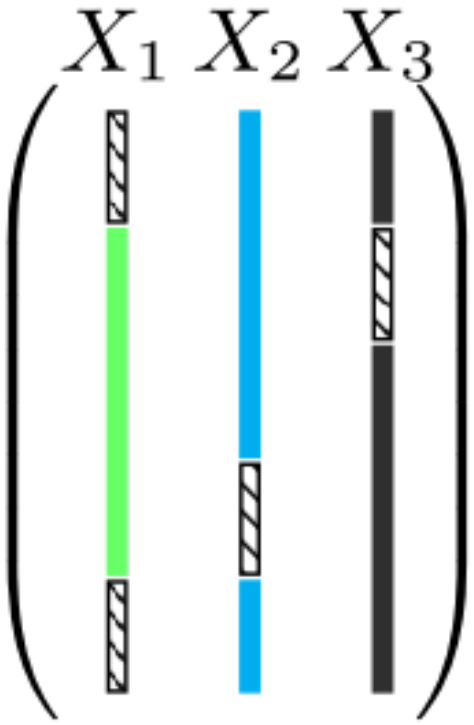
Сценарии оценки точности восстановления: режим офлайн



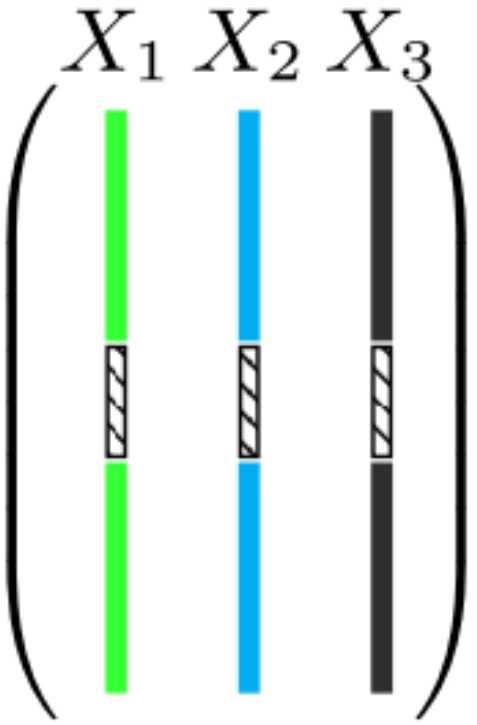
Дизъюнкция (Disjoint)



Перекрытие (Overlap)



Случайность (MCAR)

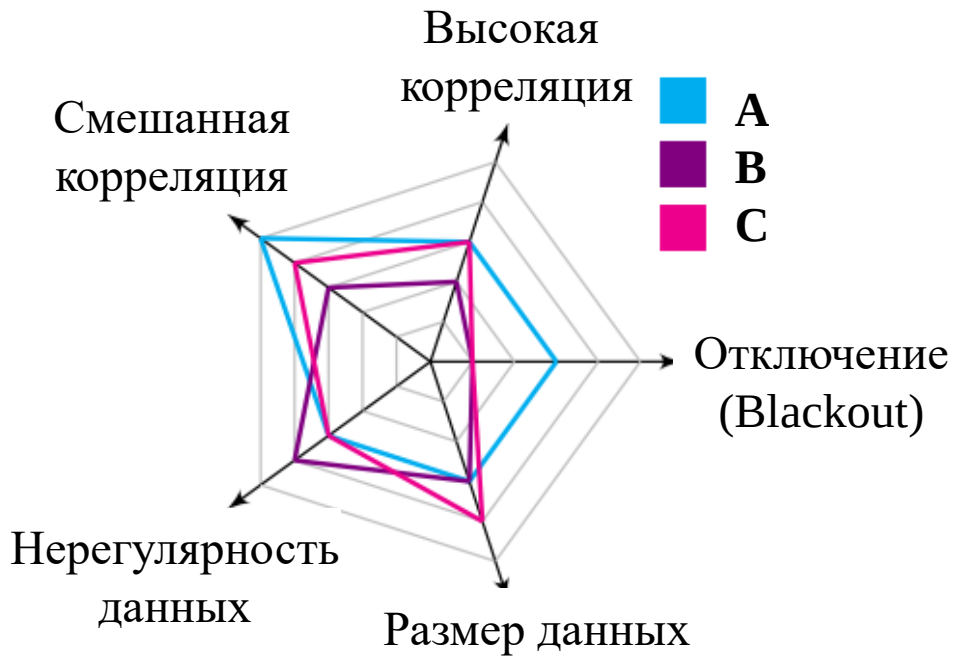


Отключение (Blackout)

Гиперпараметры: длина блока, количество координат

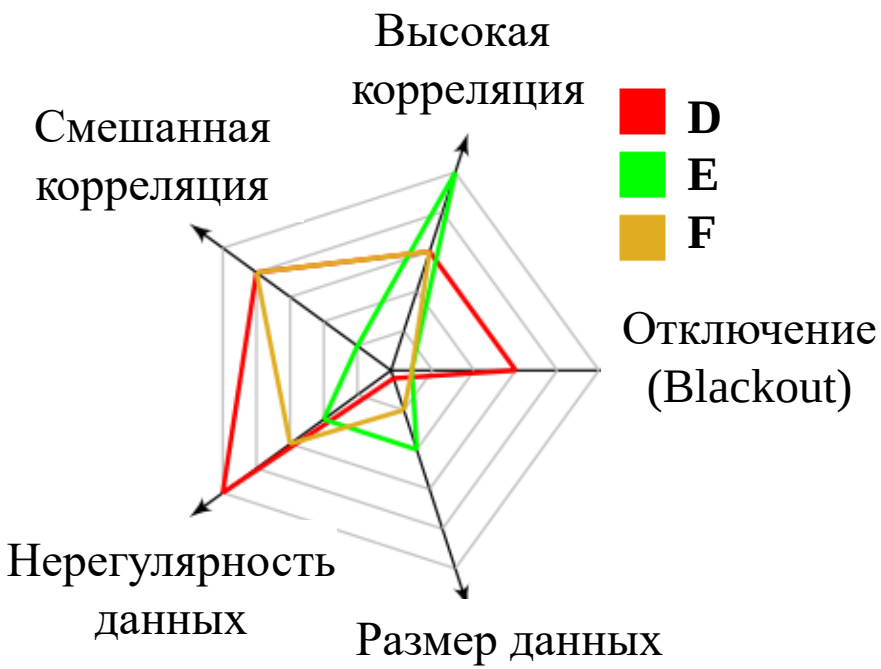
Подбор алгоритма восстановления

Точность восстановления



- ***Высокая корреляция:*** между рядами-координатами
- ***Смешанная корреляция*:** много случаев однократной высокой/низкой и положительной/отрицательной корреляции

Быстрота восстановления



- ***Нерегулярность данных*:** флуктуации, выбросы, пики и др.
- ***Отключение*:** режим Blackout
- ***Размер данных*:** количество и длина рядов

Литература

1. Khayati M., Lerner A., Tymchenko Z., Cudre-Mauroux P. Mind the gap: An experimental evaluation of imputation of missing values techniques in time series. Proc. VLDB Endow. 2020. 13(5), 768–782. https://doi.org/10.14778/3377693377383
2. Khayati M., Arous I., Tymchenko Z., Cudre-Mauroux P. ORBITS: Online recovery of missing values in multiple time series streams. Proc. VLDB Endow. 2020. 14(3). 294–306. https://dl.acm.org/doi/10.14778/3430915.3430920
3. Fang C., Wang C. Time series data imputation: A survey on deep learning approaches. https://doi.org/10.48550/arXiv.2011.11347