Модели обнаружения зависимостей во временных рядах (проекции в латентные пространства)

1 Цель

Работа посвящена обнаружению причинно-следственных связей между разнородными временным рядами. Примеры зависимых разнородных временных рядов:

1. Эконометрические временные ряды.
2. Связь показателей ЭКГ и пульса (`http://smartlab.ws/component/content/article?id=60`)

Для обнаружения зависимостей между рядами в работе применяется два подхода: тест Гренджера и метод снижения размерности PLS. В обоих случаях для установления зависимости ряда $\mathbf{x}$ от ряда $\mathbf{y}$ сравнивается качество прогноза ряда $\mathbf{x}$ с и без использования ряда $\mathbf{y}$. В случае увеличения качества прогноза утверждается, что ряд $\mathbf{x}$ зависит от ряда $\mathbf{y}$.

2 Постановка задачи прогнозирования

Поставим задачу прогноза многомерного временного ряда.

Обозначим $\mathbf{X} = (\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(s)})^{\mathsf{T}}$ – заданный s-мерный временной ряд. Построим матрицу плана из сегментов ряда:

$$\begin{pmatrix} x_0^{(1)} & \dots & x_{n-1}^{(1)} \\ \vdots & & \\ x_0^{(s)} & \dots & x_{n-1}^{(s)} \end{pmatrix} = \mathbf{X}_{0\div(n-1)}. \tag{1}$$

Пусть $\mathbf{x}_n = \left(x_n^{(1)}, \dots x_n^{(s)}\right)^{\mathsf{T}}$ – значение ряда $\mathbf{X}$ в момент времени n. Построим прогноз $\hat{\mathbf{x}}$ ряда $\mathbf{X}$ в точке $\mathbf{x}_n$. Проделаем это k раз для различных обучающих выборок $\mathbf{X}^i_{\text{train}} = \mathbf{X}_{i\div(n+i-1)}$, $i = 0, \dots, (k-1)$. Получим k прогнозов $\hat{\mathbf{X}} = (\hat{\mathbf{x}}_n, \hat{\mathbf{x}}_{n+1}, \dots \hat{\mathbf{x}}_{n+k-1})$ ряда $\mathbf{X}$ в точках $\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_{n+1}, \dots \mathbf{x}_{n+k-1}$.

Прогностическая модель имеет вид

$$\hat{\mathbf{x}}_{t+1} = \mathbf{f}(\hat{\mathbf{w}}, \mathbf{x}_t, \mathbf{x}_{t-1}, \dots, \mathbf{x}_{t-L+2}),$$
$$\hat{\mathbf{w}} = \arg\min_{\mathbf{w}} S(\mathbf{w}, \mathbf{X}, \hat{\mathbf{x}}_n, \hat{\mathbf{x}}_{n+1}, \dots \hat{\mathbf{x}}_{n+k-1}) = S(\mathbf{w}, \mathbf{X}, \hat{\mathbf{X}}),$$

где функция потерь

$$S(\mathbf{w}, \mathbf{X}, \hat{\mathbf{X}}) = \sum_{i=0}^{k-1} \mathcal{L}(\mathbf{x}^{(1)}_{n+i}, \hat{\mathbf{x}}^{(1)}_{n+i}).$$

В данной работе в качестве прогностической модели $\mathbf{f}$ используется алгоритм многомерной гусеницы (MSSA-L). Функция $\mathbf{f}$ имеет вид:

$$\mathbf{f}(\hat{\mathbf{w}}, \mathbf{x}_t, \mathbf{x}_{t-1}, \dots, \mathbf{x}_{t-L+2}) = \begin{pmatrix} x_{t-L+2}^{(1)} & \dots & x_t^{(1)} \\ x_{t-L+2}^{(2)} & \dots & x_t^{(2)} \\ & \vdots & \\ x_{t-L+2}^{(s)} & \dots & x_t^{(s)} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{p}.$$

вектор коэффициентов $\mathbf{p}$ определяется алгоритмом многомерной гусеницы MSSA-L. Алгоритм MSSA-L подробнее описан в следующем разделе.

3 Алгоритм многомерной гусеницы (MSSA-L)

Алгоритм MMSA-L является обобщением на многомерный случай алгоритма гусеницы (SSA). Задача алгоритма MSSA-L состоит в представлении временного ряда в виде суммы интерпретируемых компонент. Это осуществляется в четыре шага: запись ряда в виде траекторной матрицы, сингулярное разложение этой матрицы, группировка компонент, полученных при сингулярном разложении, в интерпретируемые компоненты и восстановление временного ряда по каждой из интерпретируемых компонент.

По ряду (1) построим матрицу Ганкеля $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{L \times sK}$, $K = N - L + 1$:

$$\mathbf{H} = [\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_s],$$

где L – ширина окна, $\mathbf{H}_i \in \mathbb{R}^{L \times K}$ – матрица Ганкеля для ряда $\mathbf{x}^{(i)}$,

$$\mathbf{H}^{(i)} = \begin{pmatrix} x_0^{(i)} & x_1^{(i)} & \dots & x_{N-L}^{(i)} \\ x_1^{(i)} & x_2^{(i)} & \dots & x_{N-L+1}^{(i)} \\ & & \vdots & \\ x_{L-1}^{(i)} & x_L^{(i)} & \dots & x_{N-1}^{(i)} \end{pmatrix}.$$

По матрице Ганкеля $\mathbf{H}$ восстановим временной ряд $\mathbf{X}$. Метод многомерной гусеницы строит приближение $\mathbf{I}$ матрицы $\mathbf{H}$ меньшего ранга с помощью сингулярного разложения этой матрицы и восстанавливает ряд по матрице $\hat{\mathbf{H}}$. Сингулярное разложение матрицы $\mathbf{H}$ имеет вид

$$\mathbf{H} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V} = \sum_{i=1}^{d} \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^{\mathsf{T}}$$

где $\lambda_1, \dots, \lambda_d > 0$ – сингулярные числа матрицы $\mathbf{H}$, $\mathbf{u}_i$ и $\mathbf{v}_i$ – столбцы матриц $\mathbf{U}$ и $\mathbf{V}$. Тогда наилучшее приближение матрицы $\mathbf{H}$ матрицей ранга $r < d$ имеет вид :

$$\hat{\mathbf{H}} = \sum_{i=1}^{r} \lambda_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^{\mathsf{T}}$$

По матрице $\hat{\mathbf{H}}$ восстанавливается временной ряд $\mathbf{X}$ путем усреднения элементов, стоящих на антидиагонал

Алгоритм многомерной гусеницы также позволяет построить прогноз временного ряда в момент N по $(L-1)$ предыдущим значениям ряда. Алгоритм находит такой вектор коэффициентов $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^{(L-1)}$, что значения ряда $\mathbf{X}$ в момент N:

$$\mathbf{x}_N = \begin{pmatrix} x_{N-L+1}^{(1)} & \dots & x_{N-1}^{(1)} \\ x_{N-L+1}^{(2)} & \dots & x_{N-1}^{(2)} \\ & \vdots & \\ x_{N-L+1}^{(s)} & \dots & x_{N-1}^{(s)} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{Y} \cdot \mathbf{p} \tag{2}$$

Заметим, что коэффициенты $\mathbf{p}$ оказываются общими для всех компонент ряда $\mathbf{X}$.

Для каждого $i \in [1, r]$ обозначим $\tilde{\mathbf{u}}_i$ первые $(L-1)$ компонент столбца $\mathbf{u}_i$, π_i – последнюю компоненту столбца $\mathbf{u}_i$ и $\nu = \sum_{i=1}^{r} \pi_i^2$. Тогда вектор коэффициентов $\mathbf{p}$ вычисляется по формуле:

$$\mathbf{p} = \frac{1}{1 - \nu^2} \sum_{i=1}^{r} \pi_i \tilde{\mathbf{u}}_i \tag{3}$$

Заметим, что для одномерного временного ряда справедливы все приведенные соотношения при $s = 1$.

4 Тест Грэнджера

В работе для установления причинно-следственных связей предлагается использовать статистический тест Гренджера. Ниже приведен алгоритм теста Гренджера для проверки наличия зависимости одного временного ряда от другого. Пусть требуется проверить, зависит ли ряд $\mathbf{x}$ от ряда $\mathbf{y}$. Выдвинем гипотезу о независимости ряда $\mathbf{x}$ от ряда $\mathbf{y}$ и проверим ее. Делаем это следующим образом.

1. Строим прогноз ряда $\mathbf{x}$ без использования ряда $\mathbf{y}$ и находим значение функции потерь

$$S_{\mathbf{x}} = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{L}\left(\mathbf{x}_i, \hat{\mathbf{x}}_i\right),$$

   где n – длина тестовой выборки.

   Функцию $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}})$ выбираем в зависимости от распределения ошибок прогноза на тестовой выборке (**??**).

2. Строим прогноз ряда $\mathbf{x}$ с использованием ряда $\mathbf{y}$. Вычисляем для него значение функции потерь

$$S_{\mathbf{xy}} = \sum_{i=1}^{n} \mathcal{L}\left(\mathbf{x}_i, \hat{\mathbf{x}}_i\right).$$

3. Рассмотрим статистику

$$T(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{N-2k}{k} \cdot \frac{S_{\mathbf{x}} - S_{\mathbf{xy}}}{S_{\mathbf{xy}}},$$

   где N – длина обучающей выборки, k – размерность регрессионной модели. Статистика T имеет распределение $F(k, N-2k)$ (распределение Фишера с параметрами $(k, N-2k)$).

4. Если ряд $\mathbf{x}$ не зависит от ряда $\mathbf{y}$, то значения $S_{\mathbf{x}}$ и $S_{\mathbf{xy}}$ будут близки, а статистика $T(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ – незначима. Поэтому в случае больших значений статистики $T(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ отвергаем гипотезу о независимости ряда $\mathbf{x}$ от $\mathbf{y}$. Выберем некоторое критические значение t статистики $T(\mathbf{x}, \mathbf{y})$. Тогда критерий зависимости ряда $\mathbf{x}$ от ряда $\mathbf{y}$ выглядит следующим образом:

$$\text{Из } T(\mathbf{x}, \mathbf{y}) > t \quad \text{следует, что ряд } \mathbf{x} \text{ зависит от ряда } \mathbf{y}$$

5. Аналогично проверим зависимость ряда $\mathbf{x}$ от восстановленного (с помощью алгоритма MSSA-L) ряда $\hat{\mathbf{y}}$. Для этого используем статистику

$$T(\mathbf{x}, \hat{\mathbf{y}}) = \frac{N-2k}{k} \cdot \frac{S_{\mathbf{x}} - S_{\mathbf{x}\hat{\mathbf{y}}}}{S_{\mathbf{x}\hat{\mathbf{y}}}}.$$

Для более подробного изучения связи между временными рядами $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ вычисляем кросс–корреляционную функцию $\gamma_{\mathbf{xy}}(h)$

$$\gamma_{\mathbf{xy}}(h) = \frac{\mathsf{E}\left[\left(\mathbf{x}_t - \mu_{\mathbf{x}}\right)\left(\mathbf{y}_{t+h} - \mu_{\mathbf{y}}\right)\right]}{\sigma_{\mathbf{x}}\sigma_{\mathbf{y}}},$$

где E – математическое ожидание, μ – выборочное среднее, σ – выборочная дисперсия.

Если h^* соответствует максимальному значению кросс-корреляции, то говорят, что ряд $\mathbf{y}$ сдвинут на h^* относительно $\mathbf{x}$. Заметим, что если ряд $\mathbf{x}$ сдвинут на h_1 относительно ряда $\mathbf{y}$, а ряд $\mathbf{y}$ сдвинут на h_2 относительно ряда $\mathbf{z}$. То ряд $\mathbf{x}$ сдвинут на $h_3 = h_1 + h_2$ относительно ряда $\mathbf{z}$.

Пусть прогноз ряда $\mathbf{x}$ строится с использованием истории ряда $\mathbf{y}$ и пусть с помощью вычисления кросс-корреляции рядов $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ получено, что ряд $\mathbf{x}$ отстает от ряда $\mathbf{y}$ на h отсчетов времени. Тогда использование при прогнозе ряда $\mathbf{y}$, сдвинутого на h отсчетов назад, может повысить качество прогноза.

5 PLS

В этом подходе предлагается строить прогноз по некоторой истории ряда сразу в несколько последующих моментов времени.

Пусть $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{\mathbf{m}\times\mathbf{n}}$ – история временного ряда, $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{\mathbf{m}\times\mathbf{r}}$ – значения ряда в последующие моменты времени. Предполагается, что между строками матриц $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ существует линейная зависимость:

$$\mathbf{y} = \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\Theta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{\mathbf{n}},\ \mathbf{y} \in \mathbb{R}^{\mathbf{r}},$$

где Θ – матрица параметров модели, $\boldsymbol{\varepsilon}$ – вектор ошибок прогноза.

Ошибка прогноза вычисляется следующим образом:

$$S(\Theta, \mathbf{X}, \mathbf{Y}) = ||\mathbf{Y} - \mathbf{X} \cdot \Theta||_2^2 = \sum_{i=} ||\mathbf{y}_i - \mathbf{x}_i \cdot \Theta||_2^2$$

Для нахождения параметров модели Θ предлагается использовать метод частных наименьших квадратов PLS. Алгоритм PLS находит в латентном пространстве матрицу $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{m\times l}$, наилучшим образом описывающую матрицы $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$. Матрицы $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ проецируются в латентное пространство следующим образом:

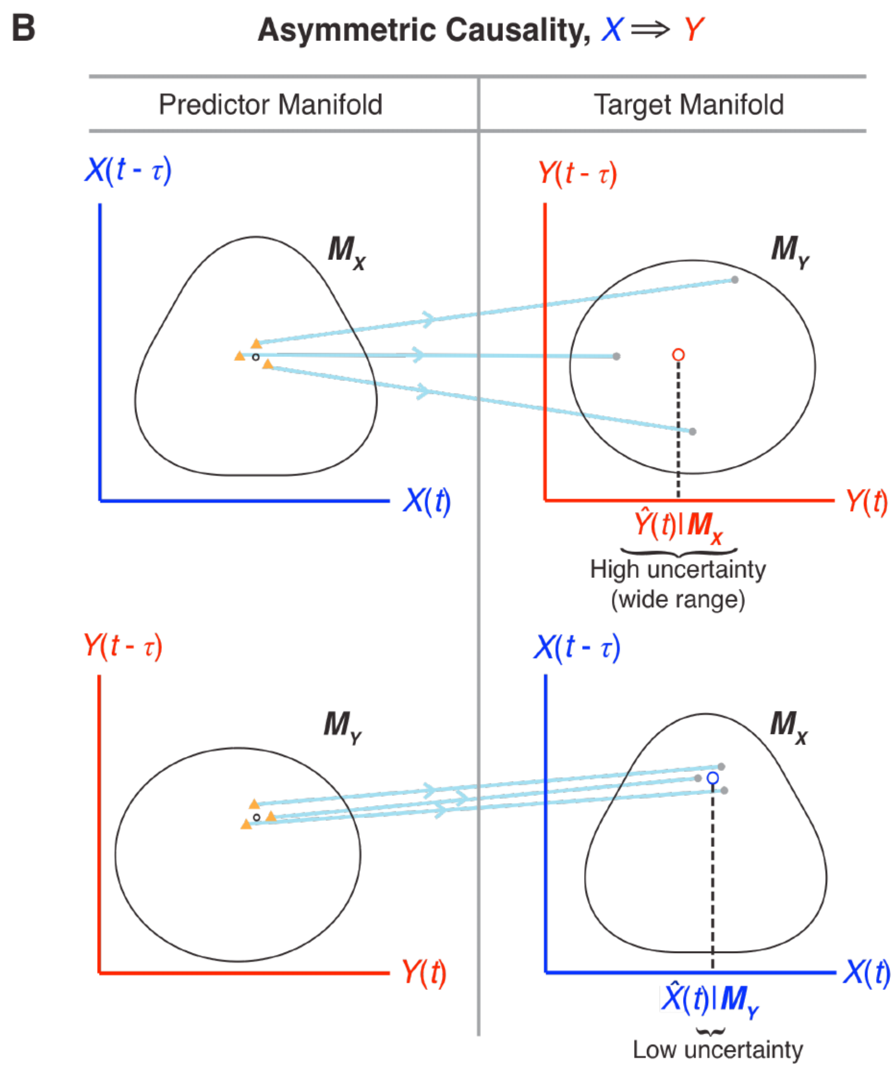
$$\mathbf{X} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}^T + \mathbf{F} = \sum_{k=1}^{l} \mathbf{t}_k \cdot \mathbf{p}_k^T + \mathbf{F}$$

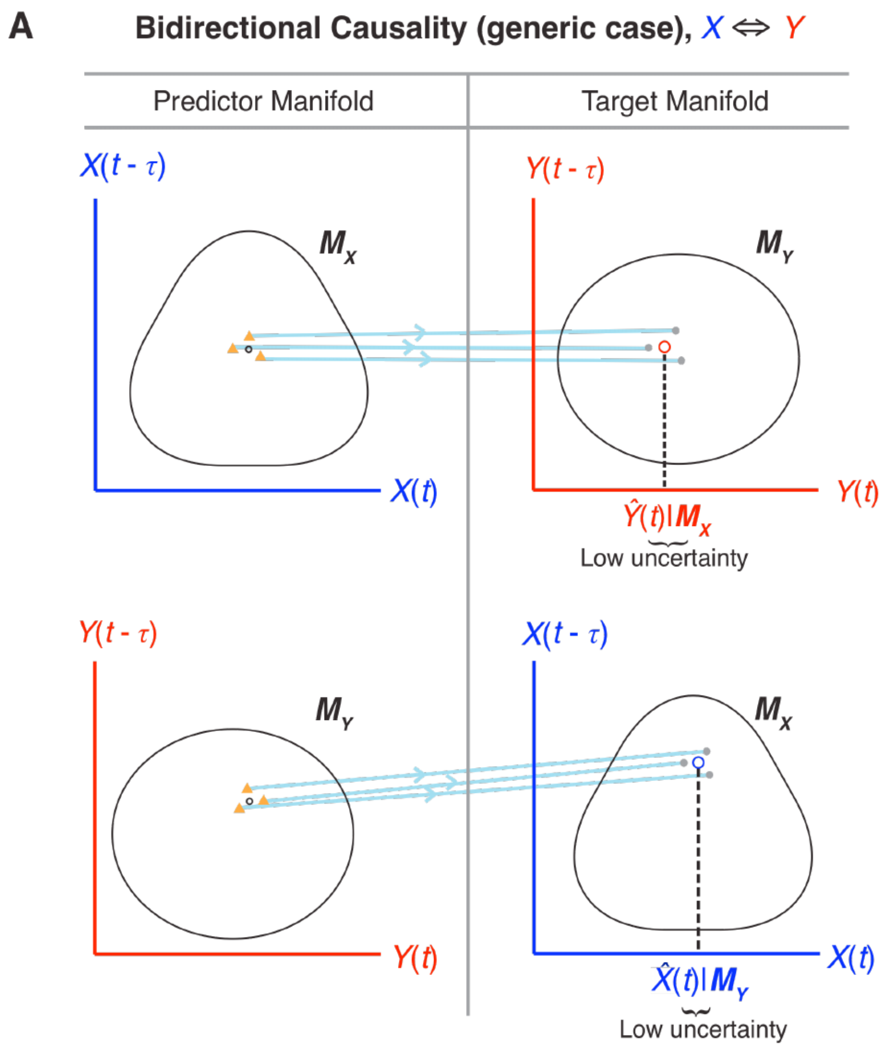
$$\mathbf{Y} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{Q}^T + \mathbf{E} = \sum_{k=1}^{l} \mathbf{t}_k \cdot \mathbf{q}_k^T + \mathbf{E}$$

где $\mathbf{T}$ — матрица совместного описания объектов и ответов в латентном пространстве, причём столбцы матрицы $\mathbf{T}$ ортогональны; $\mathbf{P}$, $\mathbf{Q}$ — матрицы перехода из латентного пространства в исходные пространства; $\mathbf{E}$, $\mathbf{F}$ — матрицы невязок.

Алгоритм PLS находит матрицы $\mathbf{T}, \mathbf{P}, \mathbf{Q}$, а также такую матрицу $\mathbf{W}$, что параметры модели можно вычислить по формуле

$$\Theta = \mathbf{W}(\mathbf{P}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{Q}^T$$


B
Asymmetric Causality, X ⟹ Y
Predictor Manifold
Target Manifold
X(t - τ)
X(t)
M_X
Y(t - τ)
Y(t)
M_Y
Ŷ(t) | M_X
High uncertainty
(wide range)
Y(t - τ)
Y(t)
M_Y
X(t - τ)
X(t)
M_X
X̂(t) | M_Y
Low uncertainty



Пусть $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ – s-мерные временные ряды.

Прогноз ряда $\mathbf{X}$ с помощью ряда $\mathbf{Y}$ строится следующим образом.

Строим вектора

$$\mathbf{x}_t = \left(\mathbf{X}_t, \mathbf{X}_{t-1}, \dots, \mathbf{X}_{t-(s-1)}\right), \quad t = 1 + (s-1), \dots, L$$

Находим $(s+1)$ ближайших соседей вектора $\mathbf{x}_t$. Обозначим их индексы через $t_1, \dots, t_{s+1}$. Тогда ближайшие соседи $\mathbf{x}_t$ это

$$\mathbf{x}_{t_i} = \left(\mathbf{x}_{t_i}, \mathbf{x}_{t_i-1}, \dots, \mathbf{x}_{t_i-(s-1)}\right), \quad i = 1, \dots, (s+1)$$

Прогноз $\hat{\mathbf{Y}}_t$ строится следующим образом

$$\hat{\mathbf{Y}}_t = \sum_{i=1}^{s+1} \mathrm{w}_i Y_{t_i}, \quad \text{где } t_i \text{– индексы ближайших соседей } \mathbf{x}_t$$

$$\mathrm{w}_i = \frac{u_i}{\sum_i u_i}, \quad u_i = \exp\left(\frac{||\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{t_i}||_2}{||\mathbf{x}_t - \mathbf{x}_{t_1}||_2}\right)$$

Аналогично строится прогноз ряда $\mathbf{X}$ с использованием ряда $\mathbf{Y}$.

Эксперимент проводился на временных рядах $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ длины L, следующего вида

$$\mathbf{X}_{t+1} = \mathbf{X}_t \cdot [r_x(1 - \mathbf{X}_t) - \beta_{x,y}\mathbf{Y}_t]$$

$$\mathbf{Y}_{t+1} = \mathbf{Y}_t \, [r_y(1 - \mathbf{Y}_t) - \beta_{y,x}\mathbf{X}_t]$$

При каждом построении прогноза коэффициенты $r_x, r_y, \beta_{x,y}, \beta_{y,x}$ выбирались случайно. Коэффициенты $\beta_{x,y}, \beta_{y,x}$ – из равномерного распределения на отрезке $[3.6, 4.0]$, коэффициенты r_x, r_y – из равномерного распределения на отрезке $[0, 0.5]$. При каждой длине рядов L ошибка прогноза усреднялась по всем наборам значений коэффициентов $r_x, r_y, \beta_{x,y}, \beta_{y,x}$.

На рисунке показана зависимость средней абсолютной ошибки прогноза в зависимости от длины рядов L. Видно, что ряд $\mathbf{X}$ лучше восстанавливается по ряду $\mathbf{Y}$, чем ряд $\mathbf{Y}$ по ряду $\mathbf{X}$.