Санкт-Петербургский государственный университет

Прикладная математика и информатика

Отчет по учебной практике 3 (научно-исследовательской работе) (семестр 6)

Метод Монте-Карло SSA для многомерных временных рядов

Выполнил:

Потешкин Егор Павлович

группа 20.Б04-мм

Научный руководитель:

к. ф.-м. н., доцент

Голяндина Нина Эдуардовна

Кафедра Статистического Моделирования

Санкт-Петербург

2023

Оглавление

Введение . . . 3

Глава 1. Метод MSSA . . . 4

1.1. Описание метода . . . 4

1.2. Модификации метода . . . 6

1.3. Выбор длины окна . . . 7

Глава 2. Метод Monte-Carlo MSSA . . . 9

2.1. Постановка задачи . . . 9

2.2. Одиночный тест . . . 9

2.3. Множественный тест . . . 10

2.4. Выбор векторов для проекции . . . 11

2.5. Численное сравнение методов . . . 12

Заключение . . . 17

Введение

TODO

Глава 1

Метод MSSA

1.1. Описание метода

Метод Multivariate Singular Spectrum Analysis (сокращенно MSSA) состоит из четырех этапов: *вложения*, *разложения*, *группировки* и *диагонального усреднения*. Пусть $N_d > 2$, $d = 1, \ldots, D$. Рассмотрим вещественнозначные ненулевые одномерные временные ряды $F^{(d)} = (f_1^{(d)}, f_2^{(d)}, \ldots, f_{N_d}^{(d)})$. Составим из этих рядов $F = \{F^{(d)}\}_{d=1}^{D}$ — D-канальный временной ряд с длинами N_d, $d = 1, \ldots, D$.

1.1.1. Вложение

Выберем параметр L, называемый *длиной окна*, $1 < L < \min(N_1, \ldots, N_D)$. Для каждого ряда $F^{(d)}$ рассмотрим $K_d = N - L + 1$ векторов вложения $X_i^{(d)} = (f_{i-1}^{(d)}, \ldots, f_{i+L-2}^{(d)})^{\mathrm{T}}$, $1 \leqslant j \leqslant K_d$ и составим *траекторную матрицу* $\mathbf{X}^{(d)} = [X_1^{(d)} : \ldots : X_{K_d}^{(d)}]$. Обозначим $K = \sum_{d=1}^{D} K_d$. Результатом этапа вложения является матрица размера $L \times K$

$$\mathbf{X} = [\mathbf{X}^{(1)} : \ldots : \mathbf{X}^{(D)}]. \tag{1.1}$$

1.1.2. Разложение

Задача этапа разложения — разбить траекторную матрицу $\mathbf{X}$ в сумму матриц ранга 1. В базовой версии MSSA используется сингулярное разложение (SVD).

Положим $\mathbf{S} = \mathbf{X}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}$. Пусть λ_i — собственные числа, а U_i — ортонормированная система векторов матрицы $\mathbf{S}$. Упорядочим λ_i по убыванию и найдем p такое, что $\lambda_p > 0$, а $\lambda_{p+1} = 0$. Тогда

$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^{p} \sqrt{\lambda_i} U_i V_i^{\mathrm{T}} = \sum_{i=1}^{p} \mathbf{X}_i,$$

где $V_i = \mathbf{X}^{\mathrm{T}} U_i / \sqrt{\lambda_i}$. Тройку $(\sqrt{\lambda_i}, U_i, V_i)$ принято называть i-й собственной тройкой сингулярного разложения, $\sqrt{\lambda_i}$ — сингулярным числом, U_i — левым сингулярным вектором, а V_i — правым сингулярным вектором. Отметим, что левые сингулярные векторы имеют размерность L, а правые сингулярные вектора — размерность K.

1.1.3. Группировка

На этом шаге множество индексов $I = \{1, \ldots, p\}$ разбивается на m непересекающихся множеств $I_m, \ldots, I_m$ и матрица $\mathbf{X}$ представляется в виде суммы

$$\mathbf{X} = \sum_{k=1}^{m} \mathbf{X}_{I_k},$$

где $\mathbf{X}_{I_k} = \sum_{i \in I_k} \mathbf{X}_i$.

1.1.4. Диагональное усреднение

Финальным шагом MSSA является преобразование каждой матрицы $\mathbf{X}_{I_k}$, составленной в разделе 1.1.3, в D-канальный временной ряд.

Пусть $\mathbf{Y} = (y_{ij})$ — матрица размера $L \times K$. Положим $L^* = \min(L, K)$, $K^* = \max(L, K)$ и $N = L + K - 1$. Пусть $y^*_{ij} = y_{ij}$, если $L < K$, и $y^*_{ij} = y_{ji}$ иначе. *Диагональное усреднение* переводит матрицу $\mathbf{Y}$ в ряд $g_1, \ldots, g_N$ по формуле

$$g_k = \begin{cases} \dfrac{1}{k} \displaystyle\sum_{m=1}^{k} y^*_{m,k-m+1}, & \text{при } 1 \leqslant k < L^* \\ \dfrac{1}{L^*} \displaystyle\sum_{m=1}^{L^*} y^*_{m,k-m+1}, & \text{при } L^* \leqslant k \leqslant K^* \\ \dfrac{1}{N-k+1} \displaystyle\sum_{m=k-K^*+1}^{N-K^*+1} y^*_{m,k-m+1}, & \text{при } K^* < k \leqslant N \end{cases}$$

Из (1.1) следует, что $\mathbf{X}_{I_k}$ можно представить в следующем виде:

$$\mathbf{X}_{I_k} = [\mathbf{X}^{(1)}_{I_k} : \ldots : \mathbf{X}^{(D)}_{I_k}].$$

Тогда, чтобы получить D-канальный временной ряд, применим диагональное усреднение к каждой матрице $\mathbf{X}^{(d)}_{I_k}$, $d = 1, \ldots, D$.

1.1.5. Частный случай

При $D = 1$ F — одномерный временной ряд, и приведенный выше алгоритм совпадает с алгоритмом Basic SSA, описанный в работе (TODO ссылка).

1.2. Модификации метода

1.2.1. Тёплицев MSSA

В случае анализа стационарных рядов можно улучшить базовый метод, используя другое разложение. Для начала введем следующее понятие.

Определение 1. Пусть $F = (f_1, \ldots, f_N)$ — одномерный временной ряд и L — фиксированное. **Тёплицевой L-ковариационной матрицей** называют матрицу $\widetilde{\mathbf{C}}$ с элементами

$$\widetilde{c}_{ij} = \frac{1}{N-|i-j|} \sum_{n=1}^{N-|i-j|} f_n f_{n+|i-j|}, \quad 1 \leqslant i, j \leqslant L.$$

Пусть теперь $F = \{F^{(d)}\}_{d=1}^{D}$ — D-канальный временной ряд , каждый канал которого имеет одинаковую длину N, $K = N - L + 1$. Тогда можно получить разложение $\mathbf{X}$ двумя способами:

1. Пусть $\widetilde{\mathbf{C}}_1, \ldots, \widetilde{\mathbf{C}}_D$ — тёплицевы матрицы для каждого канала. Рассмотрим $\widetilde{\mathbf{C}} = \sum_{d=1}^{D} \widetilde{\mathbf{C}}_d$. Найдем ортонормированные собственные векторы $H_1, \ldots, H_L$ матрицы $\widetilde{\mathbf{C}}$ и разложим траекторную матрицу $\mathbf{X}$ следующим образом:
$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^{L} \sigma_i H_i Q_i^{\mathrm{T}}, \tag{1.2}$$
где $Z_i = \mathbf{X}^{\mathbf{T}} U_i$, $Q_i = Z_i / \|Z_i\|$ и $\sigma_i = \|Z_i\|$.

2. Можно рассмотреть блочную матрицу размера $DK \times DK$:
$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \mathbf{T}_{1,1} & \mathbf{T}_{1,2} & \cdots & \mathbf{T}_{1,D} \\ \mathbf{T}_{2,1} & \mathbf{T}_{2,2} & \cdots & \mathbf{T}_{2,D} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{T}_{D,1} & \mathbf{T}_{D,D} & \cdots & \mathbf{T}_{D,D} \end{pmatrix}.$$
Элементы каждого блока $\mathbf{T}_{lk}$ имеют вид
$$t_{ij}^{(lk)} = \frac{1}{\tilde{N}} \sum_{n=\max(1,1+i-j)}^{\min(N,N+i-j)} f_n^{(l)} f_{n+j-i}^{(k)}, \quad 1 \leqslant i, j \leqslant K,$$
где $\tilde{N} = \min(N, N+i-j) - \max(1, 1+i-j) + 1$. Найдя ортонормированные собственные векторы $Q_1, \ldots, Q_{DK}$ матрицы $\mathbf{T}$, получаем разложение
$$\mathbf{X} = \sum_{i=1}^{DK} \sigma_i H_i Q_i^{\mathrm{T}}, \tag{1.3}$$
где $Z_i = \mathbf{X} Q_i$, $H_i = Z_i / \|Z_i\|$ и $\sigma_i = \|Z_i\|$.

Шаги группировки и диагонального усреднения можно оставить в том виде, в котором они представлены в разделе 1.1.3 и в разделе 1.1.4.

Для конкретности, будем называть первый метод Sum, а второй — Block. Стоит отметить, что в Sum собственные векторы матрицы $\widetilde{\mathbf{C}}$ — аналоги левых сингулярных векторов матрицы $\mathbf{X}$, в то время как в Block собственные векторы матрицы $\mathbf{T}$ — аналоги правых сингулярных векторов.

1.3. Выбор длины окна

Посмотрим на точность базового и модифицированных методов, для разных значений параметра L, на подобии работы (**TODO** ссылка). Рассмотрим следующий двухканальный временной ряд: $(F^{(1)}, F^{(2)}) = (H^{(1)}, H^{(2)}) + (N^{(1)}, N^{(2)})$, где $H^{(1)}$, $H^{(2)}$ — гармоники, а $N^{(1)}$, $N^{(2)}$ — независимые реализации гауссовского белого шума. *Гауссовский белый шум* — стационарный случайный процесс, имеющий нормальное распределение. Как и в (**TODO** ссылка), пусть $N = 71$, дисперсия шумовых компонент $\sigma^2 = 25$, число повторений равно 10000. Рассмотрим 2 случая:

Случай 1	$L = 12$	$L = 24$	$L = 36$	$L = 48$	$L = 60$
MSSA	3.18	1.83	1.59	**1.47**	2.00
SSA	3.25	**2.01**	**2.00**	**2.01**	3.25
Sum	3.17	1.75	1.44	**1.32**	**1.33**
Block	1.39	**1.26**	**1.25**	1.33	1.97
Случай 2	$L = 12$	$L = 24$	$L = 36$	$L = 48$	$L = 60$
MSSA	6.91	3.77	3.07	**2.88**	3.84
SSA	3.23	**2.01**	**2.00**	**2.01**	3.23
Sum	6.88	3.65	2.64	2.37	**2.27**
Block	4.47	3.67	**3.22**	**3.23**	3.8

Таблица 1.1. MSE восстановления сигнала.

1. Одинаковые периоды:

$$h_n^{(1)} = 30\cos(2\pi n/12), \quad h_n^{(2)} = 20\cos(2\pi n/12), \quad n = 1, \ldots N.$$

2. Разные периоды:

$$h_n^{(1)} = 30\cos(2\pi n/12), \quad h_n^{(2)} = 20\cos(2\pi n/8), \quad n = 1, \ldots N.$$

В таблице 1.1 представлены результаты восстановления сигнала для разных L. Данные для методов SSA и MSSA были взяты из работы (TODO ссылка). Наиболее точные результаты для каждого метода были выделенны жирным шрифтом. Как видим из таблицы 1.1, в обоих случаях метод Sum показывал наилучший результат для $L > (N+1)/2$, в то время как метод Block наиболее точен при длине окна, близкой к половине длины рядя, причем оба метода в случае одинаковых периодов показывают лучше результат, чем MSSA.

Глава 2

Метод Monte-Carlo MSSA

2.1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу поиска сигнала (не случайной составляющей) в многоканальном временном ряде. Нулевая гипотеза H_0 — отсутствие сигнала (ряд состоит из чистого шума). Тогда альтернатива H_1 — ряд содержит сигнал, например, периодическая составляющая.

Определение 2. Случайный вектор $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \ldots, \xi_N)$ называют красным шумом с параметрами φ и δ, если $\xi_n = \varphi\xi_{n-1} + \delta\varepsilon_n$, где $0 < \varphi < 1$, ε_n — белый гауссовский шум со средним значением 0 и дисперсией 1 и ξ_1 имеет нормальное распределение с нулевым средним и дисперсией $\delta^2/(1-\varphi^2)$.

В данной главе под шумом будем подразумевать именно красный. Также будем рассматривать только односторонние критерии.

2.2. Одиночный тест

Пусть $\boldsymbol{\xi} = \{\boldsymbol{\xi}^{(d)}\}_{d=1}^{D}$ — D-канальный красный шум. Зафиксируем длину окна L и обозначим траекторную матрицу ряда $\boldsymbol{\xi}$ как $\boldsymbol{\Theta}$. Рассмотрим вектор $W \in \mathbb{R}^L$ такой, что $\|W\| = 1$. Введем величину

$$p = \|\boldsymbol{\Theta}^{\mathrm{T}} W_k\|^2.$$

Статистикой критерия является величина

$$\widehat{p} = \|\mathbf{X}^{\mathrm{T}} W\|^2.$$

Если вектор W — синусоида с частотой ω, то $\widehat{p}$ отражает вклад частоты w в исходный ряд.

Рассмотрим алгоритм статистического критерия проверки наличия сигнала в ряде с проекцией на один вектор W, описанный в работе (TODO).

Алгоритм 1. Одиночный тест

1. Построить статистику критерия $\widehat{p}$.

2. Построить доверительную область случайной величины p: интервал от нуля до γ-квантиля.

3. Если $\widehat{p}$ не попадает в построенный интервал — H_0 отвергается.

Построенная доверительная область называется *прогнозируемым интервалом* с уровнем доверия γ.

В большинстве случаев, распределение p неизвестно. Поэтому оно оценивается методом Монте-Карло: берется G реализаций случайной величины $\boldsymbol{\xi}$, для каждой вычисляется p и строится эмпирическое распределение. В связи с этим описанный выше алгоритм называют методом Monte-Carlo SSA.

2.3. Множественный тест

Пусть теперь частоты периодических компонент неизвестны (что не редкость на практике), но известен диапазон частот и нужно проверить, что в ряде присутствует сигнал с хотя бы одной частотой из заданного диапазона. Тогда нулевая гипотеза H_0 о том, что ряд не содержит сигнала ни на одной из частот из рассматриваемого диапазона, а альтернатива H_1 — ряд содержит сигнал с хотя бы одной частотой, принадлежащей рассматриваемому диапазону.

Пусть $W_1, \ldots, W_H$ — вектора для проекции. В таком случае нужно построить H предсказательных интервалов по выборкам $P_k = \{p_{ki}\}_{i=1}^{G}$ с элементами

$$p_{ki} = \|\Xi_i^{\mathrm{T}} W_k\|^2, \quad i = 1, \ldots, G;\ k = 1, \ldots, H, \tag{2.1}$$

где G — количество суррогатных реализаций $\boldsymbol{\xi}$, Ξ_i — траекторная матрица i-й реализации $\boldsymbol{\xi}$.

В работе (TODO) подробна описана роблема многократного тестирования, когда вероятность ложного обнаружения периодической составляющей для одной из рассматриваемых частот (групповая ошибка I рода) неизвестна и значительно превышает заданный уровень значимости (частота ошибок одиночного теста), и ее решение. Приведем модифицированный алгоритм построения критерия в случае множественного тестирования, который будем использовать в дальнейшем.

Алгоритм 2. Multiple MC-SSA

1. Для $k = 1, \ldots, H$ вычисляется статистика $\widehat{p}_k$, выборка $P_k = \{p_{ki}\}_{i=1}^{G}$, ее среднее μ_k и стандартное отклонение σ_k.

2. Вычисляется $\eta = (\eta_1, \ldots, \eta_G)$, где

$$\eta_i = \max_{1 \leqslant k \leqslant H} (p_{ki} - \mu_k)/\sigma_k, \quad i = 1, \ldots, G.$$

3. Находится q_k как выборочный $(1-\alpha)$-квантиль η.

4. Нулевая гипотеза не отвергается, если

$$\max_{1 \leqslant k \leqslant H} (\widehat{p}_k - \mu_k)/\sigma_k < q.$$

5. Если H_0 отвергнута, вклад W_k (и соответствующей частоты) существенен, если $\widehat{p}_k$ превосходит $\mu_k + q w_k \sigma_k$. Таким образом, $[0, \mu_k + q w_k \sigma_k]$ считаются скорректированными интервалами прогнозирования.

2.4. Выбор векторов для проекции

Для начала отметим, что в одномерном случае можно рассматривать как проекции на собственные вектора, так и на факторные — не имеет значения, поскольку это ни на что кроме размерности не влияет. А в многомерном случае это не так по построению матрицы (1.1), поэтому их нужно рассматривать по-отдельности.

Перечислим основные способы выбора векторов для проекции. Первый вариант — рассматривать собственные вектора теоретической матрицы красного шума. При рассмотрении собственных векторов матрица, разложение которой дает эти собственные векторы имеет вид $\sum_{d=1}^{D} \{\varphi^{|i-j|}\}_d$, а при рассмотрении факторных векторов матрица имеет вид $\mathrm{diag}_{d=1,\ldots,D}\{\varphi^{|i-j|}\}_d$. Такой вариант в обоих случаях дает точный критерий при любой длине окна.

Второй вариант — рассматривать собственные или факторные вектора матрицы $\mathbf{X}$. Этот вариант вообще радикальный, но, используя поправку, описанную в работе (TODO ссылка), можно сделать такой критерий точным.

Определение 3. ROC-кривая — это кривая, задаваемая параметрически

$$\begin{cases} x = \alpha_I(\alpha) \\ y = \beta(\alpha) \end{cases}, \quad \alpha \in [0, 1],$$

где $\alpha_I(\alpha)$ — функция зависимости ошибки первого рода α_I от уровня значимости α, $\beta(\alpha)$ — функция зависимости мощности β от уровня значимости α.

С помощью ROC-кривых можно сравнивать по мощности неточных (в частности радикальных) критериев. Отметим, что для точного критерия ROC-кривая совпадает с графиком мощности.

2.5. Численное сравнение методов

В одномерном случае было установлено, что если вместо SVD разложения матрицы $\mathbf{X}$ использовать тёплицево, то радикальность критерия уменьшается. Установим, что будет в многомерном случае, если использовать модификации, описанные в разделе 1.2.1. Пусть количество каналов равно двум, количество суррогатных реализаций красного шума $G = 1000$. Для оценки ошибки первого рода, будем рассматривать красный шум с параметрами $\varphi = 0.7$ и $\delta = 1$, а для оценки мощности будет рассматривать

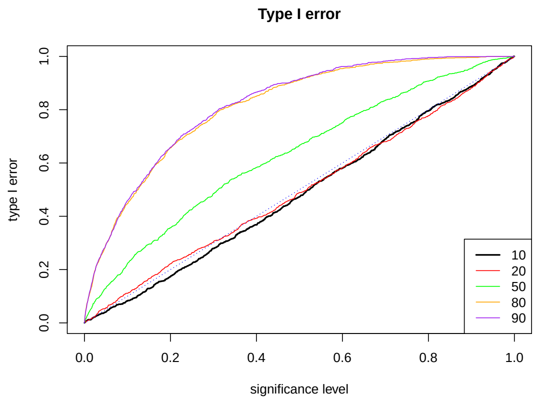
$$f_n^{(1)} = f_n^{(2)} = \cos(2\pi\omega n), \quad n = 1, \ldots, 100,$$

где $\omega = 0.075$.

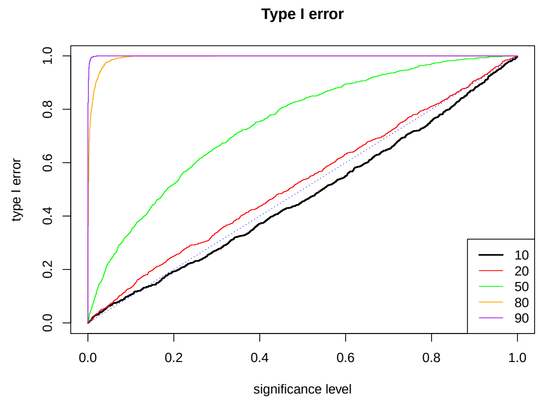
Построим графики ошибки первого рода и ROC-кривые для каждой длины окна $L = 10$, 20, 50, 80, 90. Будем воспринимать ROC-кривую как график мощности критерия, к которому была применена поправка, описанная в (TODO ссылка).

На рис. 2.1 и 2.2 векторы для проекции были взяты из разложения (1.2). На рис. 2.1 видно, что при $L > 20$ метод радикальный, а наибольшая мощность достигается при $L = 90$. На рис. 2.2 отчетливо заметно, что метод радикальный для всех L. Наибольшая мощность наблюдается при $L = 90$, но отметим, что из-за слишком большой ошибки первого рода построить ROC-кривую на промежутке $[0{,}3)$ для $L = 50$ и на всем промежутке для $L = 10$ и $L = 20$ не получилось.

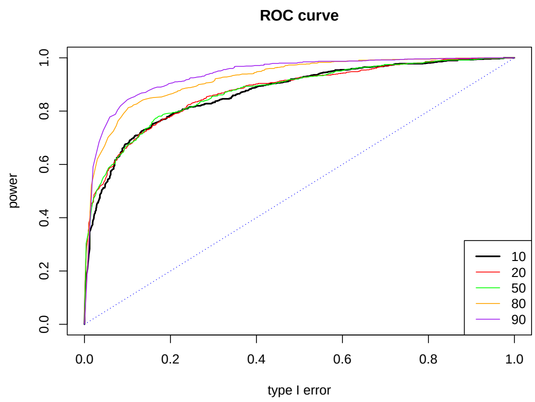
На рис. 2.3 и 2.4 векторы для проекции были взяты из разложения (1.3). Если рассматривать проекцию на собственные векторы, то на рис. 2.3 видно, что метод радикальный, а наиболее оптимальным значением длины окна будет $L = 20$. Проекция на факторные векторы также дает радикальный критерий, как видно на рис. 2.4. Наибольшая мощность наблюдается при $L = 80$, но из-за слишком большой ошибки первого рода ROC-кривую для $L = 10$ и $L = 20$, для которых метод, предположительно, имеет бóльшую мощность, удалось построить не на всем промежутке.



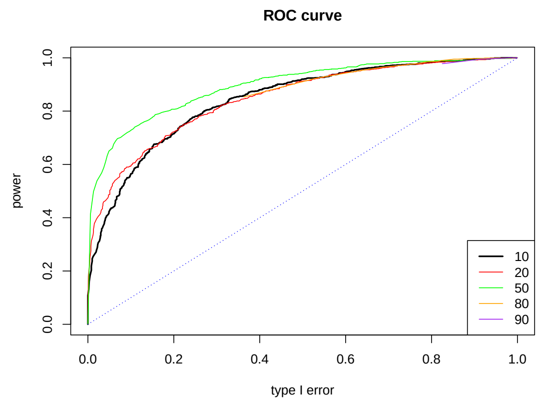
(*а*) Ошибка первого рода (Sum).



(*б*) Ошибка первого рода (базовый MSSA).

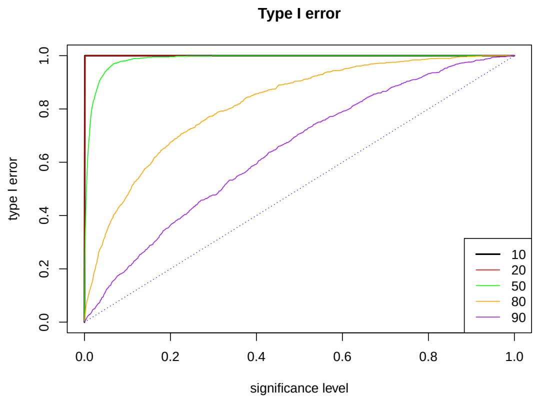


(*в*) ROC-кривая (Sum).

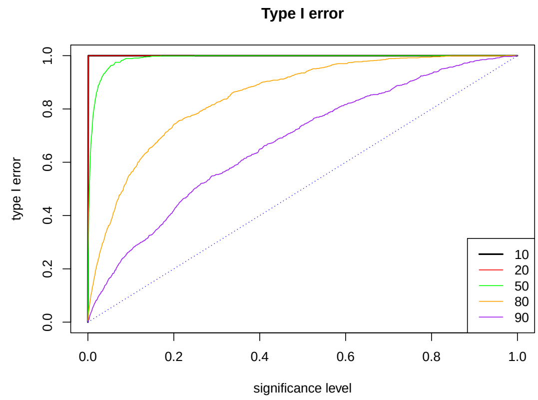


(*г*) ROC-кривая (базовый MSSA).

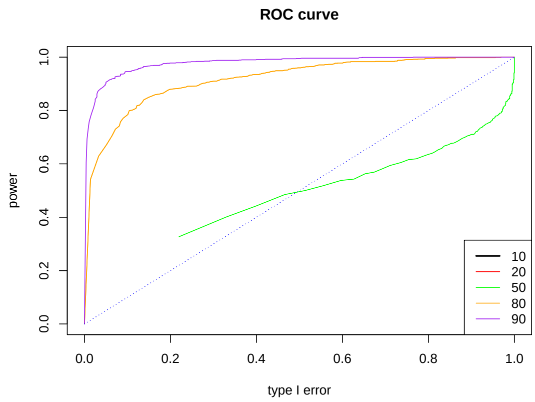
Рис. 2.1. Сравнение методов Sum и базового MSSA (проекция на собственные векторы).



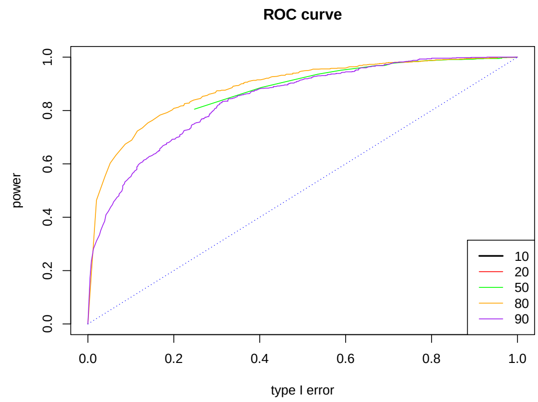
(*а*) Ошибка первого рода (Sum).



(*б*) Ошибка первого рода (базовый MSSA).

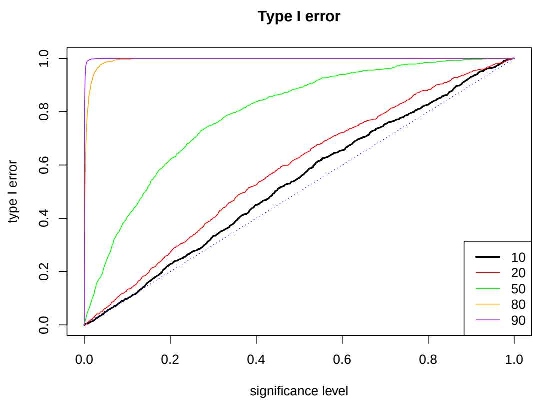


(*в*) ROC-кривая (Sum).

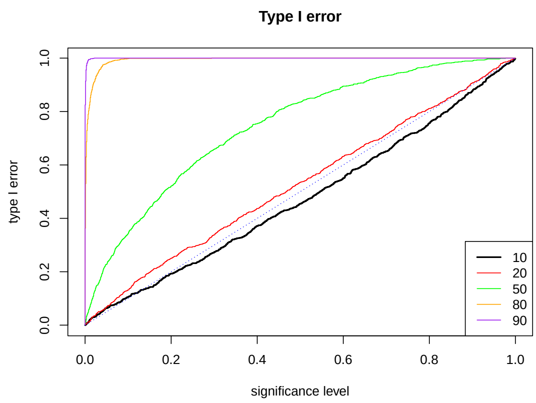


(*г*) ROC-кривая (базовый MSSA).

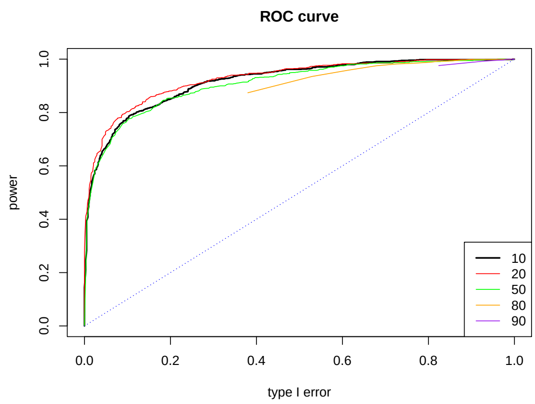
Рис. 2.2. Сравнение методов Sum и базового MSSA (проекция на факторные векторы).



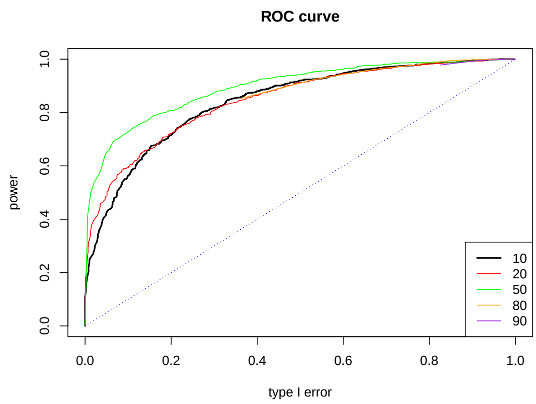
(*а*) Ошибка первого рода (Block).



(*б*) Ошибка первого рода (базовый MSSA).

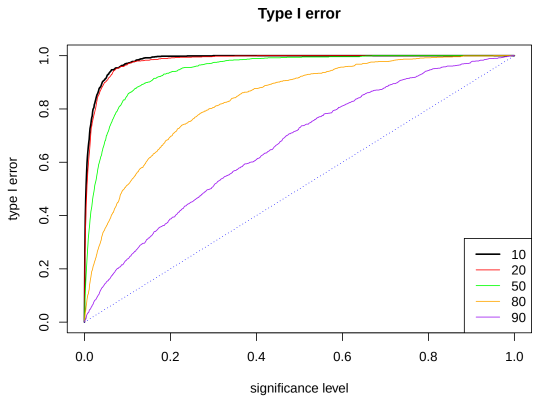


(*в*) ROC-кривая (Block).

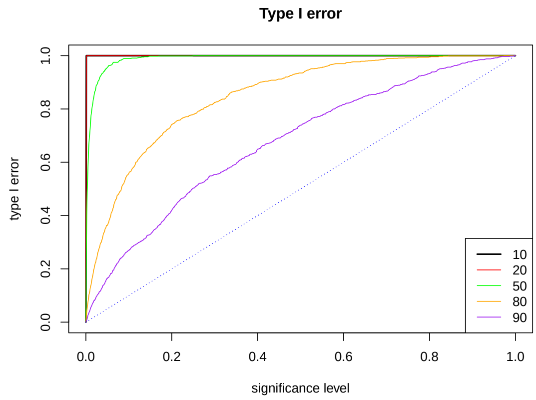


(*г*) ROC-кривая (базовый MSSA).

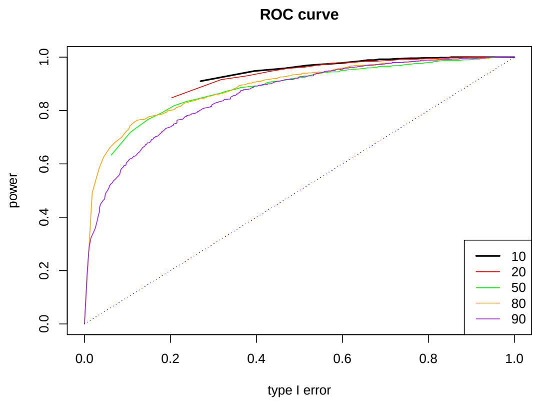
Рис. 2.3. Сравнение методов Block и базового MSSA (проекция на собственные векторы).



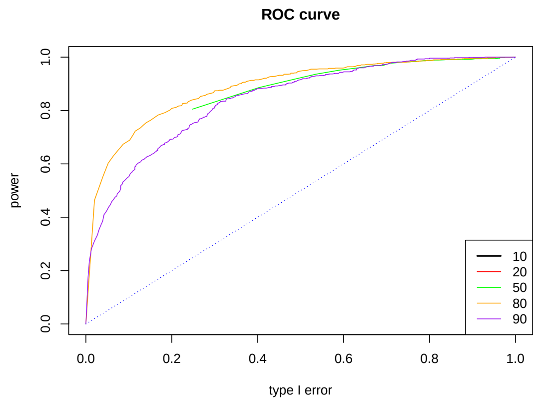
(*а*) Ошибка первого рода (Block).



(*б*) Ошибка первого рода (базовый MSSA).



(*в*) ROC-кривая (Block).



(*г*) ROC-кривая (Block).

Рис. 2.4. Сравнение методов Block и базового MSSA (проекция на факторные векторы).

Заключение

TODO