Тензорный анализ сингулярного спектра

Хромов Никита Андреевич, гр.20.Б04-мм

Санкт-Петербургский государственный университет
Прикладная математика и информатика
Вычислительная стохастика и статистические модели

Отчет по производственной практике (научно-исследовательская работа) (6 семестр)

Санкт-Петербург, 2023

Введение

Временной ряд длины N: $\mathsf{X} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$.
$\mathsf{X} = \mathsf{T} + \mathsf{P} + \mathsf{R}$.

Возможные задачи:

1. Выделение сигнала из ряда: нахождение $\mathsf{T} + \mathsf{P}$;
2. Отделение компонент сигнала: нахождение T и P.

Одним из методов решения этих задач является метод Singular Spectrum Analysis (SSA) Golyandina et al. (2001), Analysis of time series structure: SSA and related techiques.

Введение

SSA:	ряд X $\Rightarrow$	матрица $\mathbf{X}$	$\Rightarrow$	SVD	$\mathbf{X}$,
Tensor SSA:	ряд X $\Rightarrow$	тензор $\mathcal{X}$	$\Rightarrow$	тензорное разложение	$\mathbf{X}$.

- Примеры тензорных разложений:
  1. High-order singular value decomposition (HOSVD);
  2. Canonical polyadic decomposition (CPD).
- Для выделения сигнала и оценки его параметров в работе Papy et al. (2005) применялось HOSVD, и в работе De Lathauwer et al. (2011) применялось CPD.

Задача: изучить различные варианты тензорных разложений, применить их в задаче анализа временного ряда и сравнить результаты с SSA.

Из тензорных разложений первым было выбрано HOSVD, так как оно имеет наибольшее сходство с SVD.

Описание HOSDV

Пусть имеется тензор $\mathcal{A} \in \mathbb{C}^{I_1 \times I_2 \times \ldots \times I_M}$, тогда HOSVD $\mathcal{A}$:

$$\mathcal{A} = \sum_{i_1=1}^{I_1} \sum_{i_2=1}^{I_2} \ldots \sum_{i_M=1}^{I_M} \mathcal{Z}_{i_1, i_2, \ldots, i_M} U_{i_1}^{(1)} \circ U_{i_2}^{(2)} \circ \ldots \circ U_{i_M}^{(M)},$$

где

- $\mathbf{U}^{(n)} = \left[U_1^{(n)}, \ldots, U_{I_n}^{(n)} \right]$ — унитарные матрицы;
- Тензор $\mathcal{Z} \in \mathbb{C}^{I_1 \times I_2 \times \ldots \times I_M}$ удовлетворяет свойствам
  1. полная ортогональность:
  $$\langle \mathcal{Z}_{i_n=\alpha}, \mathcal{Z}_{i_n=\beta} \rangle = 0 \qquad \alpha \neq \beta,$$
  2. упорядоченность:
  $$\|\mathcal{Z}_{i_n=1}\| \geqslant \|\mathcal{Z}_{i_n=2}\| \geqslant \ldots \geqslant \|\mathcal{Z}_{i_n=I_n}\|.$$

Свойства HOSVD

Все свойства представлены в работе De Lathauwer et al. (2000).

- HOSVD — единственное M-ортогональное разложение.
- При $M = 2$ HOSVD совпадает с SVD.
- Пусть $\mathrm{rank}_n(\mathcal{A})$ — размерность пространства векторов измерения n тензора. Если в HOSVD тензора $\mathcal{A}$ r_n — наибольший индекс такой, что $\|\mathcal{Z}_{i_n=r_n}\| > 0$, то $r_n = \mathrm{rank}_n(\mathcal{A})$.
- $$\|\mathcal{A}\|^2 = \sum_{i=1}^{R_1}\left(\sigma_i^{(1)}\right)^2 = \sum_{i=1}^{R_2}\left(\sigma_i^{(2)}\right)^2 = \ldots = \sum_{i=1}^{R_M}\left(\sigma_i^{(M)}\right)^2 = \|\mathcal{Z}\|^2$$
  $$\sigma_i^{(n)} = \|\mathcal{Z}_{i_n=i}\|, \qquad R_n = \mathrm{rank}_n(\mathcal{A}).$$

Свойства HOSVD

- Векторы тензора $\mathcal{A}$ по измерению n в основном содержат вклады в направлении $U_1^{(n)}$, величина этого вклада равна $\sigma_1^{(n)^2}$. Следующий по величине вклад по измерению n достигается в направлении $U_2^{(n)}$, перпендикулярном $U_1^{(n)}$, с величиной $\sigma_2^{(n)^2}$, и т.д.
- Определим тензор $\hat{\mathcal{A}}$ отбрасыванием наименьших сингулярных значений $\sigma_{I'_n+1}^{(n)}, \sigma_{I'_n+2}^{(n)}, \ldots, \sigma_{R_n}^{(n)}$, тогда

$$\|\mathcal{A} - \hat{\mathcal{A}}\|^2 \leqslant \sum_{i_1=I'_1+1}^{R_1} \left(\sigma_{i_1}^{(1)}\right)^2 + \ldots + \sum_{i_M=I'_M+1}^{R_M} \left(\sigma_{i_M}^{(M)}\right)^2.$$

Описание метода HOSVD SSA

Имеется временной ряд $\mathsf{X} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$. Приведём формулировки алгоритма HOSVD SSA для решения различных задач.

Входные данные алгоритма: $I, L : 1 \leqslant I, L \leqslant N$, $I + L \leqslant N + 1$.

Траекторный тензор: тензор размерности $I \times L \times J = N - I - J + 2$, строится по ряду:

$$\mathcal{X}_{i,l,j} = x_{i+l+j-2} \qquad i \in \overline{1:I},\, l \in \overline{1:L},\, j \in \overline{1:J}.$$

Слои траекторного тензора:

$$\mathcal{X}_{,,j} = \begin{pmatrix} x_j & x_{j+1} & \cdots & x_{j+L-1} \\ x_{j+1} & x_{j+2} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_{j+I-1} & \cdots & \cdots & x_{j+I+L-2} \end{pmatrix}.$$

HOSVD SSA: отделение компонент сигнала

Задача: отделение компонент сигнала в ряде.

1. Вложение: выбор параметров I, L и построение по ним траекторного тензора $\mathcal{X}$;
2. Разложение: Проведение HOSVD траекторного тензора $\mathcal{X}$, получение его представления в виде

$$\mathcal{X} = \sum_{i=1}^{I} \sum_{l=1}^{L} \sum_{j=1}^{J} \mathcal{Z}_{i,l,j} \mathbf{U}_i^{(1)} \circ \mathbf{U}_l^{(2)} \circ \mathbf{U}_j^{(3)};$$

HOSVD SSA: отделение компонент сигнала

3. Группировка: разбиение множества индексов $\mathfrak{S} = \{1, 2 \ldots, \min(I, L, J)\}$ по смыслу на непересекающиеся множества $\mathfrak{S}_k$, $k \in \overline{1:m}$ и построение по этому разбиению тензоров

$$\mathcal{X}^{(\mathfrak{S}_k)} = \sum_{i\in\mathfrak{S}_k}\sum_{l\in\mathfrak{S}_k}\sum_{j\in\mathfrak{S}_k} \mathcal{Z}_{i,l,j}\mathbf{U}_i^{(1)} \circ \mathbf{U}_l^{(2)} \circ \mathbf{U}_j^{(3)}.$$

4. Восстановление: получение рядов $\mathsf{X}^{(k)} = \mathsf{X}^{(\mathfrak{S}_k)}$ по тензорам $\mathcal{X}^{(\mathfrak{S}_k)}$ посредством их усреднения вдоль плоскостей $i + l + j = \mathrm{const}$.

Результат алгоритма: набор рядов $\mathsf{X}^{(k)}$ таких, что

$$\mathsf{X} = \sum_{k=1}^{m} \mathsf{X}^{(k)}.$$

HOSVD SSA: отделение сигнала усечением HOSVD

Задача: выделение сигнала из ряда.

Способы реализации HOSVD SSA для решения этой задачи: усечение HOSVD и High-order orthogonal iteration (HOOI). Начнём с усечения HOSVD.

Первые два шага в этом алгоритме — вложение и разложение, были описаны выше.

3. Усечение: выбор ранга сигнала r и обнуление матриц-слоёв тензора $\mathcal{Z}$ с номерами $k > r$ по каждому измерению. Построение по этому усечению тензора $\hat{\mathcal{X}}$.
4. Восстановление: усреднение тензора $\hat{\mathcal{X}}$ вдоль плоскостей $i + l + j = \mathrm{const}$.

Результат алгоритма: полученный усреднением ряд $\hat{\mathsf{X}}$ будем считать сигналом.

HOSVD SSA: отделение сигнала с помощью HOOI

Задача: выделение сигнала из ряда.

Второй способ использует HOOI — метод приближения тензора другим тензором с меньшими значениями n-рангов. В отличие от усечения, этот метод является оптимальным.

Первый шаг алгоритма — вложение, совпадает с предыдущими алгоритмами, поэтому опишем его начиная со второго шага.

2. HOOI: Выбор ранга сигнала r и применение к $\mathcal{X}$ HOOI с набором n-рангов (r, r, r). Результат — оптимальное приближение тензором $\hat{\mathcal{X}}$ с n-рангами r.
3. Восстановление: усреднение тензора $\hat{\mathcal{X}}$ аналогично восстановлению в варианте с усечением.

Результат алгоритма: полученный усреднением ряд $\hat{\mathsf{X}}$ будем считать сигналом.

Свойства HOSVD SSA, разделимость рядов

Разделимость и ранг рядов являются важными понятиями в теории SSA. Рассмторим эти понятия для алгоритма HOSVD SSA

1. Разделимость рядов

Утверждение

Если временные ряды $\tilde{\mathsf{X}}$ и $\hat{\mathsf{X}}$ длины N слабо I- и L-разделимы в смысле теории SSA, то существует такое HOSVD траекторного тензора $\mathcal{X}$ ряда $\mathsf{X} = \tilde{\mathsf{X}} + \hat{\mathsf{X}}$, что его можно в виде суммы HOSVD траекторных тензоров рядов $\tilde{\mathsf{X}}$ и $\hat{\mathsf{X}}$.

Понятие слабой разделимости рядов из SSA применимо к тензорному случаю

Свойства HOSVD SSA, ранг ряда

2. Ранг ряда

Утверждение

Пусть временной ряд X *имеет конечный ранг* d *в терминах SSA. Тогда для любых значений параметров* I *и* L *таких, что*

$$d \leqslant \min(I, L, N - I - L + 2),$$

количество ненулевых сингулярных чисел по каждому измерению в HOSVD траекторного тензора $\mathcal{X}$ *этого ряда с параметрами* I *и* L *будет равно* d.

Понятие ранга ряда имеет тот же смысл в терминах HOSVD SSA, что и в стандартной теории SSA, причём ряды конечного ранга имеют одинаковые ранги в тензорном и стандартном случаях.

Примеры слабой разделимости

- Экспонента и косинус с экспоненциальной амплитудой: $\tilde{x}_n = e^{-\alpha n}\cos(2\pi n/T + \varphi)$, $\hat{x}_n = e^{\alpha n}$, $n \in \overline{1:N}$.

  Если $(N+2) \vdots T$, то при выборе I, L : $I + L < N + 1$, делящихся нацело на T $\tilde{\mathrm{X}}$ и $\hat{\mathrm{X}}$ слабо разделимы.
- Два косинуса: $\tilde{x}_n = \cos(2\pi\omega n + \varphi)$, $\hat{x}_n = \cos(2\pi\omega' n + \varphi')$, $0 < \omega < 1/2$. тогда ряд $\tilde{\mathrm{X}}$ отделим от ряда $\hat{\mathrm{X}}$ в смысле Tensor SSA тогда и только тогда, когда $\tilde{\mathrm{X}}$ и $\hat{\mathrm{X}}$ слабо разделимы тогда и только тогда, когда $\omega \neq \omega'$, $I, L, J > 2$ и $I\omega$, $I\omega'$, $L\omega$, $L\omega'$, $J\omega$, $J\omega'$ — целые числа.

В последнем примере при одинаковых амплитудах происходит смешение компонент и в теории SSA говорят, что наблюдается приближённая разделимость.
Как формализовать приближённую и точную разделимость в теории HOSVD SSA пока неясно.

Сравнение HOSVD SSA и Basic SSA

- $x_n = 2e^{0.035n}$, шум — белый гауссовский, $\sigma^2 = 2.25$;
- $x_n = 2 + 0.1n$, шум — белый гауссовский, $\sigma_1^2 = 2.25$,, $\sigma_2^2 = 0.04$;
- $x_n = 30\cos(2\pi n/12)$, шум — белый гауссовский, $\sigma^2 = 25$, и красный, $\delta = \sqrt{5}$, $\varphi_1 = 0.5, \varphi_2 = 0.9$.

Оценка точности — RMSE по 500 реализациям шума: X — ряд длины N, S_i — выделенный в i-м эксперименте сигнал, тогда

$$\mathrm{RMSE}(m) = \sqrt{\frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\mathrm{MSE}(\mathsf{S}_i, \mathsf{X})}, \qquad \mathrm{MSE}(\mathsf{S}, \mathsf{X}) = \sum_{k=1}^{N}(s_i - x_i)^2.$$

Во всех этих случаях метод SSA показал точность отделения сигнала выше, чем HOSVD SSA.

Сравнение HOSVD SSA и Basic SSA

Таблица: RMSE восстановленного с помощью SSA сигнала, порождённого косинусом. $N = 71$

вид шума \ L	12	24	30	36
белый, $\sigma^2 = 25$	1.82	1.42	**1.40**	1.42
красный, $\varphi = 0.5$	1.31	1.03	**1.01**	1.03
красный, $\varphi = 0.9$	1.88	1.37	**1.34**	1.36

Таблица: RMSE восстановленного с помощью HOSVD SSA с использованием HOOI сигнала, порождённого косинусом. $N = 71$

вид шума \ $I \times L$	12×12	12×24	12×30	24×24	24×30	30×36
белый, $\sigma^2 = 25$	1.63	1.53	1.56	1.65	1.62	**1.49**
красный, $\varphi = 0.5$	1.17	1.12	1.14	1.21	1.19	**1.08**
красный, $\varphi = 0.9$	1.56	1.42	1.44	1.54	1.51	**1.39**

Особый случай

Приведём особый пример, в котором HOSVD SSA оказался точнее базового SSA.

$x_n = \sin(2\pi n/3 + \pi/2)$, $n \in \overline{1:9}$.
Шум: красный с параметрами $\delta = 0.1$, $\varphi = 0.9$.

Таблица: RMSE восстановленного с помощью различных методов короткого сигнала, порождённого синусом.

SSA	HOSVD SSA (HOSVD)	HOSVD SSA (HOOI)
0.116	0.110	**0.095**

Заключение

Таким образом:

- Описан и реализован алгоритм HOSVD SSA.
- Выведены аналоги важных свойств SSA для метода HOSVD SSA.
- Описаны примеры использования метода.
- Проведено численное сравнение точности методов HOSVD SSA и SSA, найден особый случай.

Остаётся для изучения:

- Изучение причин возникновения особого случая.
- Определение точной и приближённой разделимости, нахождение метода отделения компонент при отсутствии точной.
- Возможность применения других тензорных разложений (CPD).
- Подтверждение результатов, утверждающих о преимуществах Tensor SSA над SSA.