

1. Построение тензора и его разложение

Дан временной ряд f длины N

$$f = (f_1, f_2, \dots, f_N).$$

Выбираются два натуральных параметра $I, L : I + L - 1 \leq N$, по ним высчитывается третий параметр $J = N - I - L + 2$. С учётом этих параметров строится траекторный тензор \mathcal{X} размерности $I \times L \times J$ следующим образом

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

Слои тензора будут иметь следующий вид

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_{:,j} &= \begin{pmatrix} f_j & f_{j+1} & \dots & f_{j+L-1} \\ f_{j+1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ f_{j+I-1} & \dots & \dots & f_{j+I+L-2} \end{pmatrix}, \\ \mathcal{X}_{:,l} &= \begin{pmatrix} f_l & f_{l+1} & \dots & f_{l+J-1} \\ f_{l+1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ f_{l+I-1} & \dots & \dots & f_{l+I+J-2} \end{pmatrix}, \\ \mathcal{X}_{i,:} &= \begin{pmatrix} f_i & f_{i+1} & \dots & f_{i+J-1} \\ f_{i+1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ f_{i+L-1} & \dots & \dots & f_{i+L+J-2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

К полученному тензору применяется HOSVD [1] — тензорное разложение, являющееся продолжением SVD на большие размерности. Результатом разложения является набор из одного тензора \mathcal{Z} размерности $I \times L \times J$ и трёх ортогональных матриц $\mathbf{U}^{(1)}$, $\mathbf{U}^{(2)}$, $\mathbf{U}^{(3)}$ размерностей $I \times I$, $L \times L$, $J \times J$ соответственно.

Этот набор удовлетворяет равенству

$$\mathcal{X} = \mathcal{Z} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \times_3 \mathbf{U}^{(3)},$$

где \times_n — произведение тензора на матрицу по n -му измерению. Оно определяется следующим образом: пусть \mathcal{A} — тензор размерности $I_1 \times I_2 \times \dots \times I_K$, \mathbf{U} — матрица размерности

$J_n \times I_n$, тогда $\mathcal{A} \times_n \mathbf{U}$ — тензор размерности $I_1 \times I_2 \times \dots \times I_{n-1} \times J_n \times I_{n+1} \times \dots \times I_K$, который считается по формуле

$$(\mathcal{A} \times_n \mathbf{U})_{i_1 i_2 \dots i_{n-1} j_n i_{n+1} \dots i_K} = \sum_{i_n=1}^{I_n} a_{i_1 i_2 \dots i_{n-1} i_n i_{n+1} \dots i_K} u_{j_n i_n}.$$

Обозначим за $\mathcal{Z}_{i_n=\alpha}$ подтензор тензора \mathcal{Z} , полученный фиксированием индекса $i_n = \alpha$. Тензор \mathcal{Z} удовлетворяет следующим свойствам:

1. подтензоры $\mathcal{Z}_{i_n=\alpha}$ и $\mathcal{Z}_{i_n=\beta}$ ортогональны для всех возможных значений n, α, β : $\alpha \neq \beta$:

$$\langle \mathcal{Z}_{i_n=\alpha}, \mathcal{Z}_{i_n=\beta} \rangle = 0 \quad \alpha \neq \beta,$$

2. подтензоры расположены в порядке убывания их нормы Фробениуса:

$$\|\mathcal{Z}_{i_n=1}\| \geq \|\mathcal{Z}_{i_n=2}\| \geq \dots \geq \|\mathcal{Z}_{i_n=I_n}\|$$

для всех возможных значений n .

Обозначим $\sigma_i^{(n)} = \|\mathcal{Z}_{i_n=i}\|$ и будем называть $\sigma_i^{(n)}$ i -м собственным числом тензора \mathcal{X} по измерению n . Векторы $\mathbf{U}_i^{(n)}$ будем называть i -м собственным вектором тензора \mathcal{X} по измерению n .

2. Свойства TSSA

Вычисление HOSVD тензора \mathcal{A} с N размерностями сводится к вычислению SVD на N матрицах $\mathbf{A}_{(n)}$, которые вычисляются развёртыванием (?unfolding) тензора по n -му измерению [1]. Другими словами, если \mathcal{A} — тензор размерности $I_1 \times I_2 \times \dots \times I_N$, то его развёртывание по n -му измерению — это матрица $\mathbf{A}_{(n)}$ размерности $I_n \times I_{n+1} I_{n+2} \dots I_N I_1 I_2 \dots I_{n-1}$, в которой элемент $a_{i_1 i_2 \dots i_N}$ тензора содержится в строке i_n и столбце с номером равным

$$(i_{n+1} - 1)I_{n+2}I_{n+3} \dots I_N I_1 I_2 \dots I_{n-1} + (i_{n+2} - 1)I_{n+3}I_{n+4} \dots I_N I_1 I_2 \dots I_{n-1} + \dots + (i_N - 1)I_1 I_2 \dots I_{n-1} + (i_1 - 1)I_2 I_3 \dots I_{n-1} + (i_2 - 1)I_3 I_4 \dots I_{n-1} + \dots + i_{n-1}.$$

К каждой из полученных матриц применяется SVD, в результате чего получаются N матриц $\mathbf{U}^{(n)}$, составленных из левых сингулярных векторов соответствующих развёртываний. Затем находится тензор сингулярных чисел

$$\mathcal{Z} = \mathcal{A} \times_1 \mathbf{U}^{(1)\text{H}} \times_2 \mathbf{U}^{(2)\text{H}} \dots \times_N \mathbf{U}^{(N)\text{H}}.$$

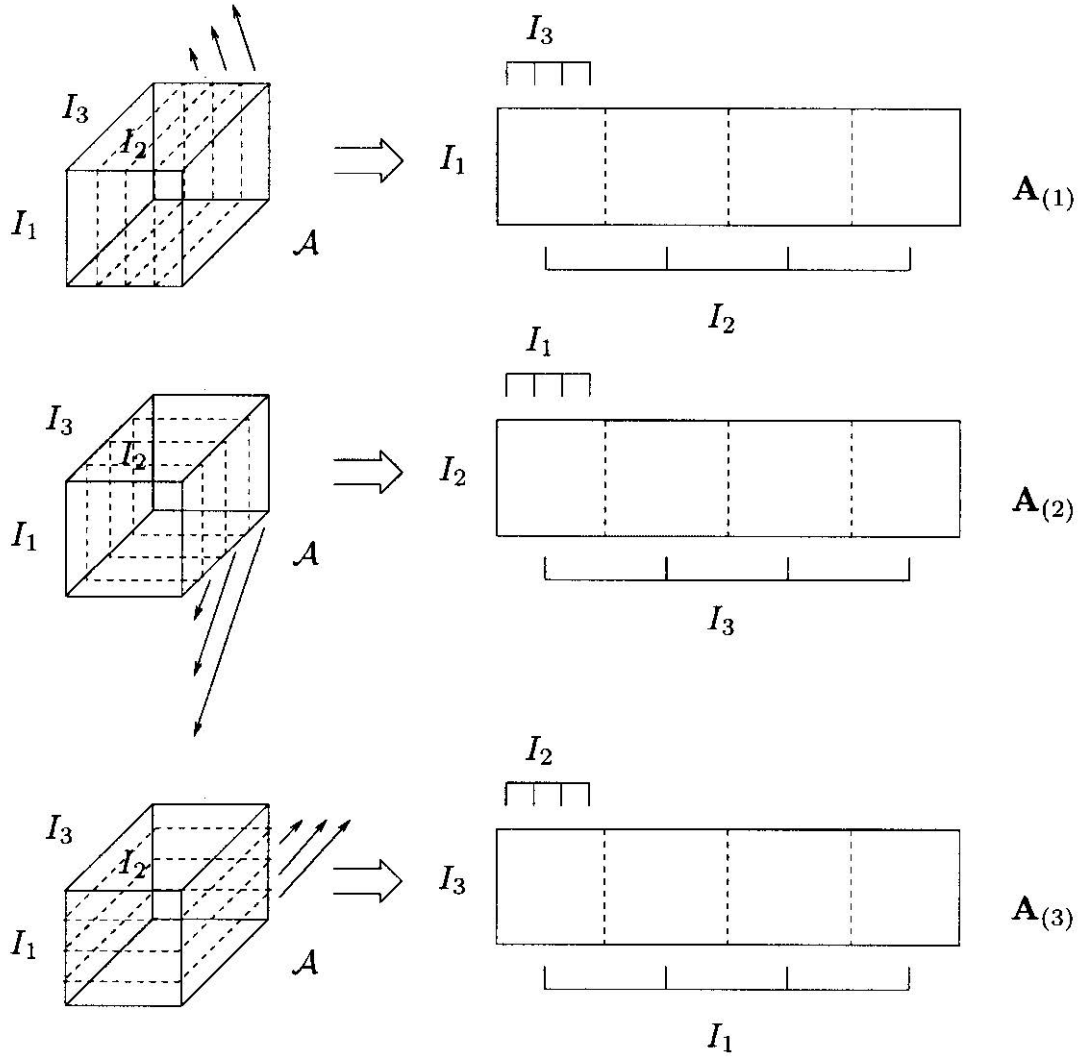


Рис. 1. Развёртывание тензора \mathcal{A} размерности $I_1 \times I_2 \times I_3$ в матрицы $\mathbf{A}_{(1)}$, $\mathbf{A}_{(2)}$, $\mathbf{A}_{(3)}$ размерностей $I_1 \times (I_2 I_3)$, $I_2 \times (I_3 I_1)$, $I_3 \times (I_1 I_2)$ соответственно

В результате получается искомое разложение

$$\mathcal{A} = \mathcal{S} \times_1 \mathbf{U}^{(1)} \times_2 \mathbf{U}^{(2)} \dots \times_N \mathbf{U}^{(N)}.$$

Исходя из того, что вычисление HOSVD сводится к вычислению стандартного SVD, многие свойства SSA переносятся на многомерный случай непосредственно.

Утверждение 2.1. Пусть ряды F_1 и F_2 длины N слабо I и L -разделимы, $F = F_1 + F_2$, тогда существует такое тензорное сингулярное разложение траекторного тензора \mathcal{X} ряда F , что его можно разбить на две части, являющиеся тензорными сингулярными разложениями траекторных тензоров рядов F_1 и F_2 .

Доказательство. Рассмотрим развёртывание траекторного тензора \mathcal{X} размерности $I \times L \times J$ по первому измерению $I = \mathbf{X}_{(I)}$. Самую левую его подматрицу размерности $I \times L$

обозначим $\tilde{\mathbf{X}}_{(I)}$, она является траекторной матрицей ряда F , обрезанного по $I + L - 1$ -й элемент, с длиной окна I . Обозначим траекторные матрицы рядов, получаемых из F_1 и F_2 обрезанием по $I + L - 1$ -му элементу, с длиной окна I за $\tilde{\mathbf{X}}_{(I)}^1$ и $\tilde{\mathbf{X}}_{(I)}^2$ соответственно.

Так как по условию ряды F_1 и F_2 слабо I -разделимы, то по свойствам SSA существует сингулярное разложение матрицы $\tilde{\mathbf{X}}_{(I)}$, которое равно сумме сингулярных разложений матриц $\tilde{\mathbf{X}}_{(I)}^1$ и $\tilde{\mathbf{X}}_{(I)}^2$. Обозначим матрицы, составленные из левых сингулярных векторов каждого из разложений, за $\mathbf{U}^{(I)}$, $\mathbf{U}_1^{(I)}$ и $\mathbf{U}_2^{(I)}$ соответственно. Тогда столбцы этих матриц также будут левыми сингулярными векторами матриц $\mathbf{X}_{(I)}$, $\mathbf{X}_{(I)}^1$ и $\mathbf{X}_{(I)}^2$ соответственно. Кроме того, сохраняются и ненулевые сингулярные числа, а правые сингулярные векторы однозначно вычисляются через левые сингулярные векторы и сингулярные числа.

Таким образом для матрицы $\mathbf{X}_{(I)}$ нашли сингулярное разложение, совпадающее с суммой некоторых сингулярных разложений $\mathbf{X}_{(I)}^1$ и $\mathbf{X}_{(I)}^2$. Прodelываем аналогичные действия с развёртываниями по оставшимся двум измерениям (в случае развёртывания по измерению L пользуемся слабой L -разделимостью рядов, при развёртывании по измерению J — сначала транспонируем полученную левую подматрицу, затем пользуемся слабой I -разделимостью, и в качестве столбцов $\mathbf{U}^{(J)}$, $\mathbf{U}_1^{(J)}$, $\mathbf{U}_2^{(J)}$ берём правые сингулярные тройки в соответствующих разложениях).

В результате получаем такое тензорное сингулярное разложение \mathcal{X} , что

$$\begin{aligned}\mathcal{X} &= \mathcal{Z} \times_1 \mathbf{U}^{(I)} \times_2 \mathbf{U}^{(L)} \times_3 \mathbf{U}^{(J)} \\ &= \mathcal{Z}_1 \times_1 \mathbf{U}_1^{(I)} \times_2 \mathbf{U}_1^{(L)} \times_3 \mathbf{U}_1^{(J)} + \mathcal{Z}_2 \times_1 \mathbf{U}_2^{(I)} \times_2 \mathbf{U}_2^{(L)} \times_3 \mathbf{U}_2^{(J)}.\end{aligned}$$

□

3. Другие разложения

Помимо HOSVD, существует ещё одно разложение тензора в сумму тензоров 1 ранга: CANDECOMP-PARAFAC (CP) [2, 3]. Это разложение нам не подходит, так как количество компонент в этом разложении равно тензорному рангу, который в общем случае не удовлетворяет одному из основных свойств SSA: ранг траекторного тензора, построенного по сумме двух рядов может оказаться больше, чем сумма рангов траекторных тензоров, построенных на каждом из этих рядов.

Кроме того можно рассмотреть следующий случай. В терминах CP ряды $f_1^{(i)} = 3$, $f_2^{(i)} = \sin(2\pi i/3)$ имеют тензорные ранги 1 и 3 соответственно, а у ряда $f^{(i)} = f_1^{(i)} + f_2^{(i)}$

ранг равен 3. Притом ни один из элементов разложения не даёт константный ряд, то есть разделения константного ряда от синуса не произошло, хотя в теории SSA эти ряды являются сильно разделимыми при условии делимости всех измерений на период синуса.

```
s <- rep(3, 132)
p <- tssa3(s, rank = 1, I = 42, L = 45)
```

```
##      |
```

```
print(p$cp$conv)
```

```
## [1] TRUE
```

```
rec <- t3.reconstruct(p, list(1))
mse(rec[[1]], s)
```

```
## [1] 5.438359e-30
```

```
s <- sin(2 * pi * 0:132 / 3)
p <- tssa3(s, 2, 45, 45)
```

```
##      |
```

```
print(p$cp$conv)
```

```
## [1] FALSE
```

```
rec <- t3.reconstruct(p, list(1:2))
mse(rec[[1]], s)
```

```
## [1] 0.03323903
```

```
s <- sin(2 * pi * 0:132 / 3)
p <- tssa3(s, 3, 45, 45)
```

```
##      |
```

```
print(p$cp$conv)
```

```
## [1] TRUE
```

```
rec <- t3.reconstruct(p, list(1:3))
mse(rec[[1]], s)
```

```
## [1] 1.446833e-16
```

```
s.const <- 3
s.sin <- sin(2 * pi * 0:132 / 3)
p <- tssa3(s, 3, 45, 45)
```

```
##      |
```

```
print(p$cp$conv)
```

```
## [1] TRUE
```

```
print(p$modes)
```

```
## $I
```

```
## [1] 45
```

```
##
```

```
## $L
```

```
## [1] 45
```

```
##
```

```
## $J
```

```
## [1] 45
```

```
rec <- t3.reconstruct(p, list(1, 2, 3))  
mse(rec[[1]], s.const)
```

```
## [1] 9.121703
```

```
mse(rec[[2]], s.const)
```

```
## [1] 9.052367
```

```
mse(rec[[3]], s.const)
```

```
## [1] 9.126835
```

Возможно можно добиться лучших результатов, используя CP, если строить тензор по ряду другим образом и подбирать другие параметры разложения, но тогда этот метод будет в меньшей степени похожим на SSA.

Список литературы

1. De Lathauwer Lieven, De Moor Bart, Vandewalle Joos. A Multilinear Singular Value Decomposition // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. — 2000. — Vol. 21, no. 4. — P. 1253–1278. — Access mode: <https://doi.org/10.1137/S0895479896305696>.
2. Harshman Richard A. Foundations of the PARAFAC procedure: Models and conditions for an "explanatory" multi-model factor analysis. — 1970. — Vol. 16. — P. 1–84.
3. Carroll J. Douglas, Chang Jih Jie. Analysis of individual differences in multidimensional scaling via an n-way generalization of "Eckart-Young" decomposition // Psychometrika. — 1970. — Vol. 35. — P. 283–319.