УДК 519.254

Хромов Н. А., Голяндина Н. Э.

High-order MSSA для выделения сигнала

1. Введение. SSA (Singular Spectrum Analysis) [1] является распространённым методом анализа и прогноза временных рядов. Этот метод используется, в частности, для выделения сигнала, тренда и периодических компонент из временного ряда. Хотя в последнее время получили распространение методы машинного обучения (например, в [2] рассматривается задача прогноза с предобработкой временного ряда методом SSA перед применением нейронных сетей для прогноза), задача анализа недлинных временных рядов не теряет своей актуальности. Ряд методов рассматривает при этом конкретные модели для сигнала/тренда (например, в [3] рассматривается полиномиальная регрессия). Метод SSA не требует задания параметрической модели, поэтому он более универсальный. Однако, при этом метод SSA хорошо работает и с моделью сигнала в виде суммы комплексных экспонент или в виде суммы экспоненциально-модулированных гармоник в вещественном случае, что позволяет оценивать параметры в этих моделях.

Метод SSA основан на сингулярном разложении особой матрицы, построенной по временному ряду; она называется траекторной. Обобщение метода SSA на случай многомерных сигналов называется MSSA [4]. Для оценки параметров временного ряда в параметрической модели методов SSA и MSSA используется метод ESPRIT [5], который также основан на сингулярном разложении траекторной матрицы и относится к классу методов, основанных на подпространстве сигнала.

В работе [6] предлагается модификация метода ESPRIT, основанная тензорном сингулярном разложении траекторного тензора, и демонстрируется преимущество такой модификации при оценке параметров, в частности, частот. При этом для случая многомерного

Хромов Никита Андреевич – студент, Санкт-Петербургский государственный университет; e-mail: hromovn@mail.ru, тел.: +7(981)509-25-94

Голяндина Нина Эдуардовна – доцент, Санкт-Петербургский государственный университет; e-mail: n.golyandina@spbu.ru, тел.: +7(911)957-20-08

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 23-21-00222

временного ряда особой структуры преимущество наиболее очевидно. В данной работе мы рассматриваем аналогичную тензорную модификацию метода MSSA (HO-MSSA, где HO – сокращение от high order) для выделения сигналов из временных рядов. Целью работы является сравнение метода MSSA с его тензорной модификацией на временных рядах, аналогичных тем, что были рассмотрены в [6].

В разделе 2 описана модель рассматриваемых сигналов. В разделе 3 определены траекторная матрица и траекторный тензор, а также дано определение ранга сигнала. В этом разделе приведено утверждение о соотношении между матричным и тензорным рангами сигнала. В разделе 4 коротко описан метод MSSA и его тензорная модификация HO-MSSA для задачи выделения сигнала. Описание во всех разделах дано в более общей комплексной форме, хотя применять метод мы будем в вещественном случае. В разделе 5 описаны результаты численных сравнений.

2. Модель сигнала. Опишем рассматриваемые многомерные комплексные сигналы. Пусть дан одномерный временной ряд, состоящий из N комплексных значений s_n, $n = 0, 1, \ldots, N-1$, и пусть этот ряд представим в виде конечной суммы R экспоненциально-модулированных комплексных гармоник

$$s_n = \sum_{j=1}^{R} a_j e^{-\alpha_j n} e^{\mathrm{i}(2\pi\omega_j n + \varphi_j)}. \tag{1}$$

Параметрами модели являются амплитуды $a_j \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, фазы $\varphi_j \in [0, 2\pi)$, частоты $\omega_j \in [0, 1/2]$ и степени затухания $\alpha_j \in \mathbb{R}$.

Модель многомерного сигнала имеет вид набора P одномерных сигналов вида (1), то есть

$$s_n^{(p)} = \sum_{j=1}^{R(p)} a_j^{(p)} e^{-\alpha_j^{(p)} n} e^{\mathrm{i}\left(2\pi\omega_j^{(p)} n + \varphi_j^{(p)}\right)}, \tag{2}$$

где $n = 0, 1, \ldots, N-1$, а p ($1 \leqslant p \leqslant P$) отвечает за номер одномерного временного ряда. Далее мы будем рассматривать частный случай такой модели, при котором параметры $R(p)$, $\omega_j^{(p)}$ и $\alpha_j^{(p)}$ не зависят от номера ряда p:

$$s_n^{(p)} = \sum_{j=1}^{R} a_j^{(p)} e^{-\alpha_j n} e^{\mathrm{i}\left(2\pi\omega_j n + \varphi_j^{(p)}\right)}. \tag{3}$$

Это обосновано тем, что такая модель применяется в спектроскопии ядерного магнитного резонанса [7]. Кроме того, в работе [6] используется именно этот частный случай модели.

Замечание. В общем случае можно рассматривать модели временных рядов вида (1), в которых амплитуды являются ненулевыми многочленами, однако этот случай выходит за рамки этой работы.

3. Ряды конечного ранга и тензорные ранги. Одними из ключевых объектов в теории SSA являются *ряды конечного ранга.* В данном разделе мы изложим теорию, касающуюся рядов конечного ранга, а затем рассмотрим теорию тензорных рангов, и приведём утверждения, связывающие ранги рядов с рангами определенных тензоров.

3.1. Ряды конечного ранга. Введём несколько вспомогательных определений.

Определение 1. *Оператором вложения с длиной окна* L будем называть отображение, преобразующее временной ряд (возможно, комплексный) $(x_0, x_1, \ldots, x_{N-1})$ в ганкелеву матрицу размерности $L \times K$ $(K = N - L + 1)$ следующим образом:

$$\mathbb{H}_L\left((x_0, x_1, \ldots, x_{N-1})\right) = \begin{pmatrix} x_0 & x_1 & x_2 & \ldots & x_{K-1} \\ x_1 & x_2 & \iddots & \ldots & \vdots \\ x_2 & \iddots & \iddots & \ldots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & x_{N-2} \\ x_{L-1} & \ldots & \ldots & x_{N-2} & x_{N-1} \end{pmatrix}. \qquad (4)$$

Определение 2. *Траекторной матрицей одномерного временного ряда* $(x_0, x_1, \ldots, x_{N-1})$ *с длиной окна* L называется матрица $\mathbf{H}$, полученная применением оператора вложения с длиной окна L к данному временному ряду.

Определение 3. Ряд $(x_0, x_1, \ldots, x_{N-1})$ называется *рядом конечного ранга* d $(d < N/2)$, если для любой длины окна $L < N$ такой, что $\min(L, K) \geqslant d$, траекторная матрица этого ряда, построенная по данной длине окна, имеет ранг d.

Пример 1. Временной ряд вида (1) имеет ранг, равный количеству уникальных пар (α_j, ω_j) по всем j [8].

Определение 4. Рассмотрим многомерный временной ряд

$$\left(s_0^{(p)}, s_1^{(p)}, \ldots, s_{N-1}^{(p)}\right), \quad p = 1, 2, \ldots, P.$$

Построим для каждого одномерного ряда $\left(s_n^{(p)}\right)_{n=0}^{N-1}$ траекторную матрицу с длиной окна L:

$$\mathbf{H}_p = \mathbb{H}_L\left(s_0^{(p)}, s_1^{(p)}, \ldots, s_{N-1}^{(p)}\right).$$

Тогда *траекторной матрицей данного многомерного ряда с длиной окна* L называется матрица $\mathbf{H}$, полученная приписыванием матриц $\mathbf{H}_p$ друг за другом по столбцам:

$$\mathbf{H} = [\mathbf{H}_1 : \mathbf{H}_2 : \ldots : \mathbf{H}_P]. \tag{5}$$

Замечание. Ранг многомерного ряда определяется аналогично рангу одномерного ряда с заменой траекторной матрицы одномерного ряда на траекторную матрицу многомерного ряда.

Пример 2. Многомерный временной ряд вида (2) имеет ранг, равный количеству уникальных пар $(\alpha_j^{(p)}, \omega_j^{(p)})$ по всем j и p [8].

Пример 3. Так как $\cos(2\pi\omega n+\varphi_n) = \left(e^{2\pi \mathrm{i}\omega n+\varphi_n} + e^{-2\pi \mathrm{i}\omega n-\varphi_n}\right)/2$, то ранг ряда

$$s_n = Ae^{\alpha n}\cos(2\pi\omega n + \varphi) \tag{6}$$

с $A \neq 0$ равен 2, если $\omega \in (0, 1/2)$ и равен 1, если $\omega \in \{0, 1/2\}$.

Пример 4. Пусть ряд представляется в виде суммы M экспоненциально-модулированных гармоник

$$s_n = \sum_{j=1}^{M} A_j e^{\alpha_j n}\cos(2\pi\omega_j n + \varphi_j), \tag{7}$$

где $A_j \neq 0$. Обозначим

$$r(\omega) = \begin{cases} 1, & \omega \in \{0, 1/2\}, \\ 2, & \text{иначе}, \end{cases}$$

тогда ранг ряда (7) равен сумме $\sum_{(\omega,\alpha)\in\Omega} r(\omega)$, где Ω – множество уникальных пар (ω_j, α_j) по всем j.

3.2. Тензорные ранги.

Определение 5. *Векторами тензора* $\mathcal{A} \in \mathbb{C}^{I_1\times I_2\times\ldots\times I_M}$ *по измерению* n называются векторы вида $\left(\left(a_{i_1 i_2\ldots i_{n-1} k i_{n+1}\ldots i_M}\right)_{k=1}^{I_n}\right)^{\mathrm{T}}$, где индексы i_j фиксированы.

Определение 6. *n-Рангом* тензора $\mathcal{A}$ называют размерность линейной оболочки, построенной по векторам этого тензора по измерению n. Обозначение: $\mathrm{rank}_n(\mathcal{A})$.

Определение 7. *Траекторным тензором многомерного временного ряда*

$$\left(x_0^{(p)}, x_1^{(p)}, \ldots, x_{N-1}^{(P)}\right), \quad p = 1, 2, \ldots, P,$$

с длиной окна L называется тензор $\mathcal{H} \in \mathbb{C}^{L \times K \times P}$ $(K = N - L + 1)$, элемент h_{lkp} которого равен $x_{l+k-2}^{(p)}$. То есть слой траекторного тензора с номером p по третьему измерению получается как траекторная матрица, построенная по ряду с номером p с длиной окна L:

$$\mathcal{H}_{\cdot\cdot p} = \mathbb{H}_L\left(\left(x_0^{(p)}, x_1^{(p)}, \ldots x_{N-1}^{(p)}\right)\right). \tag{8}$$

Основываясь на виде траекторного тензора многомерного ряда, можно доказать следующее утверждение, связывающее понятие многомерного ряда конечного ранга и понятие n-рангов траекторного тензора этого ряда.

Утверждение 1. *(Об n-рангах траекторного тензора многомерного ряда конечного ранга)* Пусть временной ряд

$$\left(x_0^{(p)}, x_1^{(p)}, \ldots, x_{N-1}^{(p)}\right), \quad p = 1, 2, \ldots, P,$$

имеет ранг d в терминах MSSA, тогда для траекторного тензора $\mathcal{H}$, построенного по любой длине окна $L < N$ такой, что $\min(L, K) \geqslant d$, выполняется $\mathrm{rank}_1(\mathcal{H}) = \mathrm{rank}_2(\mathcal{H}) = d$, а 3-ранг этого тензора равен рангу матрицы, в строках которой записаны заданные одномерные ряды.

4. Методы для оценки сигнала. Пусть дан некоторый многомерный сигнал вида (3). В работе [6] рассматривается задача оценки параметров ω_j и α_j такого ряда, мы же будем рассматривать задачу оценки значения самого сигнала по наблюдаемому зашумлённому сигналу. В качестве шума можно рассматривать нерегулярные колебания вокруг нуля. Мы будем рассматривать реализации независимого гауссовского шума с нулевым математическим ожиданием и одинаковой дисперсией для разных рядов.

4.1. MSSA. Приведём алгоритм MSSA для решения задачи оценки многомерного сигнала по зашумлённому ряду.

На первом шаге выбирается длина окна L и по ней строится траекторная матрица $\mathbf{H}$ (5) данного многомерного ряда. Эту матрицу можно представить в виде её сингулярного разложения (SVD)

$$\mathbf{H} = \sum_{j=1}^{d} \sigma_j U_j V_j^{\mathrm{H}}, \tag{9}$$

где $d = \operatorname{rank}(\mathbf{H}) \geqslant \min(L, K)$, σ_j – сингулярные числа матрицы $\mathbf{H}$, верхний индекс H обозначает эрмитово сопряжение, а матрицы $\mathbf{U} = [U_1 : U_2 : \ldots : U_d] \in \mathbb{C}^{L\times d}$ и $\mathbf{V} = [V_1 : V_2 : \ldots : V_d] \in \mathbb{C}^{K\times d}$ унитарные.

Если на данный сигнал воздействует шум, то траекторная матрица будет матрицей полного ранга и тогда рассматривается наилучшее приближение траекторной матрицы матрицей заданного ранга $r < d$:

$$\widehat{\mathbf{H}} = \sum_{j=1}^{r} \sigma_j U_j V_j^{\mathrm{H}}. \tag{10}$$

Последний шаг алгоритма – восстановление, заключается в усреднении каждой матрицы $\widehat{\mathbf{H}}_p$ по побочным диагоналям, то есть

$$\widetilde{s}_n^{(p)} = \frac{1}{|M_n|} \sum_{i,j\in M_n} \widehat{h}_{ij}^{(p)}, \quad n = 0, 1, \ldots, N-1, \tag{11}$$

где $M_n = \{(i,j) : i + j - 2 = n, 1 \leqslant i \leqslant L, 1 \leqslant j \leqslant K\}$, а $\widehat{h}_{ij}^{(p)}$ – элементы матрицы $\widehat{\mathbf{H}}_p$. Результат такого усреднения $\widetilde{s}_n^{(p)}$ считается оценкой сигнала $s_n^{(p)}$.

4.2. High-Order MSSA. В работе [6] была предложена тензорная модификация алгоритма ESPRIT для оценки параметров многомерных сигналов. В этом разделе мы приведём расширение этого алгоритма для решения задачи выделения сигнала из многомерных рядов.

Рассматриваем многомерный временной ряд с сигналом вида (3). На первом шаге выбирается длина окна $1 < L < N$ и по данному ряду строится траекторный тензор многомерного ряда $\mathcal{H}$ (8). Затем траекторный тензор представляется в виде своего HO-SVD [9]

$$\mathcal{H} = \sum_{l=1}^{d_1} \sum_{k=1}^{d_2} \sum_{p=1}^{d_3} c_{lkp} U_l^{(1)} \circ U_k^{(2)} \circ U_p^{(3)}. \tag{12}$$

Из примера 2 и утверждения 1 следует, что при некоторых условиях на N и L 1- и 2-ранги траекторного тензора будут равны количеству уникальных пар $(\alpha_j^{(p)}, \omega_j^{(p)})$ по всем j и p, а 3-ранг будет равен рангу матрицы, в строках которой записаны заданные одномерные ряды. Если во временном ряде присутствует шум, то у траекторного тензора будут максимальные n-ранги, и тогда выбираются параметры r и r_3 и строится приближение траекторного тензора с 1- и 2-рангами, равными r, и 3-рангом, равным r_3:

$$\widehat{\mathcal{H}} = \sum_{l=1}^{r} \sum_{k=1}^{r} \sum_{p=1}^{r_3} \sigma_{lkp} U_l^{(1)} \circ U_k^{(2)} \circ U_p^{(3)}. \tag{13}$$

Последний шаг алгоритма аналогичен по смыслу шагу восстановления в алгоритме MSSA и заключается в усреднении матриц-слоёв $\widehat{\mathcal{H}}_{\cdot\cdot p}$ полученного приближения вдоль побочных диагоналей $l + k = \mathrm{const}$.

5. Численные сравнения. В данном разделе приведем результаты численных сравнений метода MSSA с его тензорным аналогом HO-MSSA. Точность выделения сигнала сравнивалась с помощью RMSE оценки сигнала по 1000 реализациям шума. Сравнение проводилось на одних и тех же реализациях шума, все различия значимы при уровне значимости 0.05.

5.1. Сигнал с одинаковыми фазами. Пусть временной ряд имеет вид

$$x_n^{(p)} = c_1^{(p)} e^{-0.01n} \cos(2\pi 0.2n) + c_2^{(p)} e^{-0.02n} \cos(2\pi 0.22n) + \varepsilon_n^{(p)}, \tag{14}$$

где $n = 0, 1, \ldots, 24$, $p = 1, 2, \ldots, 12$, $\varepsilon_n^{(p)}$ – последовательность независимых нормальных случайных величин со стандартным отклонением $\sigma = 0.02$.

Будем сравнивать точность выделения сигнала при выборе оптимальных для каждого метода длин окна (для MSSA $L = 22$, для HO-MSSA $L = 20$). Ранг сигнала в обоих случаях равен 4, а 3-ранг траекторного тензора равен 2. Соответственно, число компонент для оценки сигнала в MSSA будем выбирать равным 4, число компонент по первым двум измерениям в HO-MSSA тоже равным 4, а по третьему измерению – 2. В таблице 1 в первой строке приведены значения RMSE оценок многомерного сигнала (14) методами MSSA и HO-MSSA. Видно, что метод HO-MSSA отделил сигнал с бóльшей точностью, чем метод MSSA, что аналогично результатам, полученным в работе [6] для точности оценок параметров сигнала.

5.2. Сигнал с линейно меняющимися фазами. Пусть временной ряд имеет вид

$$\begin{aligned} x_n^{(p)} =& c_1^{(p)} e^{-0.01n} \cos(2\pi 0.2n + p\pi/6) \\ &+ c_2^{(p)} e^{-0.02n} \cos(2\pi 0.22n + p\pi/9) + \varepsilon_n^{(p)}, \end{aligned} \tag{15}$$

где $n = 0, 1, \ldots, 24$, $p = 1, 2, \ldots, 12$, $\varepsilon_n^{(p)}$ – последовательность независимых нормальных случайных величин со стандартным отклонением $\sigma = 0.02$.

Будем сравнивать точность выделения сигнала при выборе оптимальных для каждого метода длин окна (для обоих методов оптимальное $L = 21$). Ранг сигнала в обоих случаях равен 4, а 3-ранг траекторного тензора равен 4. Соответственно, число компонент для оценки сигнала в MSSA будем выбирать равным 4 и число компонент по всем измерениям в HO-MSSA тоже равным 4.

Таблица 1. RMSE оценки многомерного сигнала

	MSSA	HO-MSSA
сигнал (14)	0.0107	0.0079
сигнал (15)	0.00924	0.00918

Во второй строке таблицы 1 приведены значения RMSE оценок многомерного сигнала (15) методами MSSA и HO-MSSA. Видно, что метод HO-MSSA отделил сигнал с бóльшей точностью, чем метод MSSA, однако это преимущество уменьшилось по сравнению со случаем равных фаз.

6. Заключение. В работе было показано, что тензорный вариант HO-MSSA для выделения многомерного сигнала дал точность выше, чем обычный MSSA. Соответственно, в следующих исследованиях имеет смысл развивать теорию метода HO-MSSA для увеличения точности оценивания сигнала и его компонент.

Литература

1. Golyandina N., Nekrutkin V., Zhigljavsky A. A. Analysis of Time Series Structure - SSA and Related Techniques. Chapman and Hall/CRC, 2001. 320 p.

2. Ежов Ф. В. Исследование гибридных моделей нейронных сетей с применением SSA на примере реальных данных // Процессы управления и устойчивость. 2022. Т. 9, № 1. С. 223–231.

3. Головкина А. Г., Козынченко В. А., Клименко И. С. Метод последовательных приближений для построения модели динамической полиномиальной регрессии // Вестник Санкт-Петербургского университета. Прикладная математика. Информатика. Процессы управления. 2023. Т. 18, Вып. 4. С. 487–500.

4. Golyandina N., Zhigljavsky A. Singular Spectrum Analysis for Time Series. Springer Berlin, Heidelberg, 2020. 146 p.

5. Roy R., Kailath T. ESPRIT-estimation of signal parameters via rotational invariance techniques // IEEE Transactions on Acoustics, Speech, and Signal Processing. 1989. Vol. 37(7). P. 984–995.

6. Papy J. M., De Lathauwer L., Van Huffel S. Exponential data fitting using multilinear algebra: the single-channel and multi-channel case // Numerical Linear Algebra with Applications. 2005. Vol. 12(8). P. 809–826.

7. Van Huffel S., Chen H., Decanniere C., Van Hecke P. Algorithm for Time-Domain NMR Data Fitting Based on Total Least Squares // Journal of Magnetic Resonance. 1994. Vol. 110(2). P. 228–237.

8. Степанов Д. В., Голяндина Н. Э. Варианты метода «Гусеница»-SSA для прогноза многомерных временных рядов // Труды IV Международной конференции «Идентификация систем и задачи управления» SICPRO'05. 2005. С. 1831–1848.

9. De Lathauwer L., De Moor B., Vandewalle J. A Multilinear Singular Value Decomposition // SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications. 2000. Vol. 21(4). P. 1253-1278.