BRITS : Bidirectional Recurrent Imputation for Time Series

DAHS
석사과정 김홍범

Part 1

Introduction

Part 1

Introduction

기존의 **time series imputation methods**들은 **Linear dynamics**등의 여러 가정이 필요하다는 한계점이 존재함

하지만 저자가 제안하는 **BRITS**는 **3**가지의 장점을 가지고 있음

1. 서로 연관성을 가지는 시계열 결측치 데이터를 다루는데 특화되어 있음
2. 시계열 데이터를 특정 가정이나 분포로 가정하지 않음
3. 데이터 기반의 결측치 처리 방법을 제안하고**,** 일반적인 환경에서 결측치 처리가 가능함

기존 연구의 한계점

1. 결측치를 통계 혹은 **ml** 기반으로 고치는 방향으로 접근함
2. 대부분의 연구들에서 결측치에 대한 강한 가정을 필요로 함**(**선형성**,** 통계 자료**, low-rankness** 등**)**

Part 1

Introduction

Technical contribution

- 결측치를 채우기 위해 **Bi-RNN** 모델을 사용함**,** 특별한 결측치 가정을 하지 않고 일반적 사용이 가능함
- 결측치를 변수로 가정함으로써 좀 더 정확한 **loss** 계산 및 정확도를 높임
- 기존 **RNN**의 **Vanishing gradient**를 방지하기 위하여 **bi-rnn**을 사용하였고 이를 통한 **delayed gradient**의 장점이 있음
- 결측치 처리와 **classification/regression**을 작업을 동시에 진행함으로써 **backpropagation**의 오류를 줄임 **(Multi-task learning algorithm)**
- **Real world** 데이터셋인 **air quality, health-care, human activity dataset**을 사용함으로써 **imputation** 및 **classification/regression** 모두에서 **SOTA**를 달성함

Part 2

Related Work

Part 2

Related work

MICE

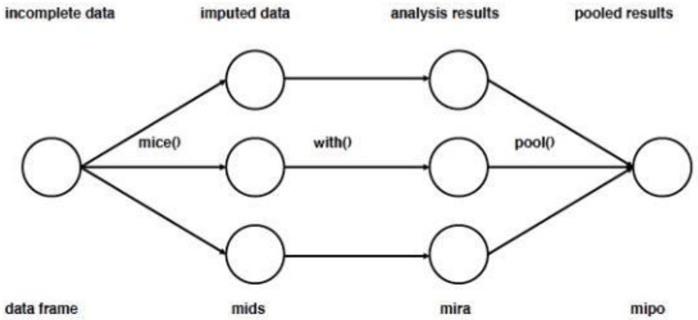


Figure 1: Main steps used in multiple imputation.

M-RNN

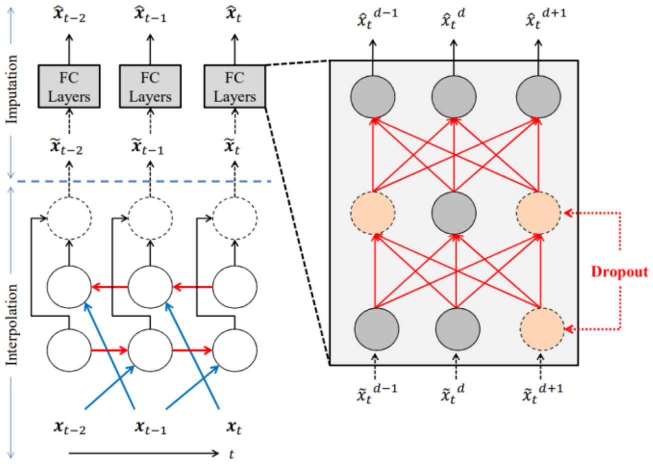


Figure 2: M-RNN Architecture. (Dropout is used for multiple imputations)

SAITS

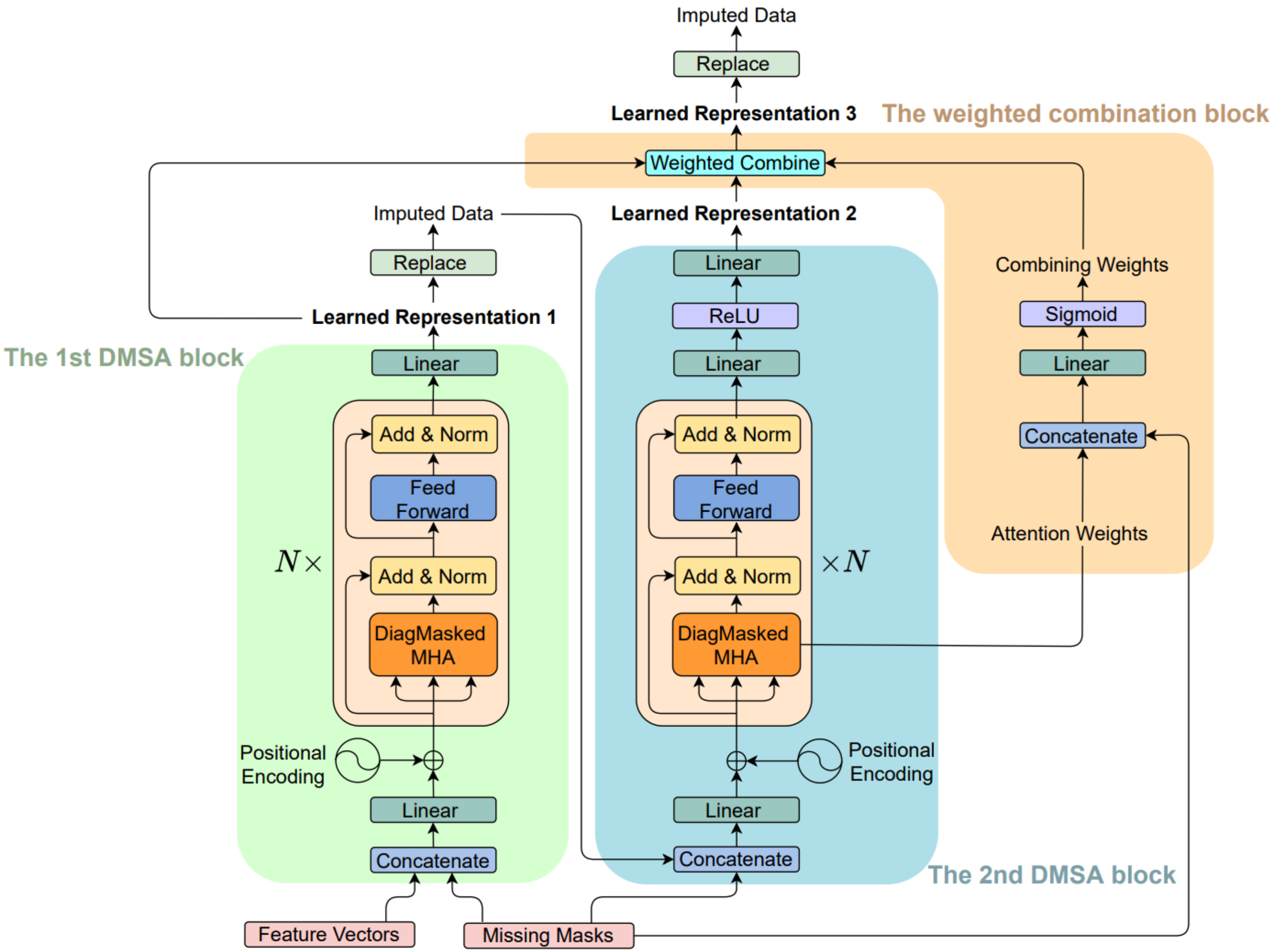


Figure 3: The SAITS model architecture.

Part 3

BRITS

Part 3

Preliminary

Definition 1 (Multivariate Time Series)

- X_T = sequence of T Observation data
- M_T = masking vector
- s_t = time gap between different timestamps
- δ_t^d = time gap from the last observation to the current timestamp

$$\mathbf{m}_t^d = \begin{cases} 0 & \text{if } x_t^d \text{ is not observed} \\ 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$\delta_t^d = \begin{cases} s_t - s_{t-1} + \delta_{t-1}^d & \text{if } t > 1, \mathbf{m}_{t-1}^d = 0 \\ s_t - s_{t-1} & \text{if } t > 1, \mathbf{m}_{t-1}^d = 1 \\ 0 & \text{if } t = 1 \end{cases}$$

Example

time series $\mathbf{X}$

31	/	/	32	27	22
6	17	/	/	/	13
/	107	/	87	66	90
$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	……			$\mathbf{x}_6$

masking vectors

1	0	0	1	1	1
1	1	0	0	0	1
0	1	0	1	1	1
$\mathbf{m}_1$	$\mathbf{m}_2$	……			$\mathbf{m}_6$

time gaps

0	2	7	9	5	1	$d=1$
0	2	5	7	12	13	$d=2$
0	2	5	7	5	1	$d=3$
δ_1	δ_2	……			δ_6	

$s_{1\ldots6}$= 0, 2, 7, 9, 14, 15

RITS-I

가장 단순하게 기본적인 **RNN**을 가정하고 **Imputation**을 진행해봄

- **RITS-I = Unidirectional Uncorrelated Recurrent Imputation**

Assumptions

1. **t**번째 **time step**에서 변수(데이터)들이 상관관계가 없음
2. 실제 값(x_t)은 그대로 검증을 위해 사용
3. 결측치들의 경우 **RNN**을 통해 나온 추정값($\hat{x}_t$)으로 대체하고**,** 미래의 관측값으로 검증

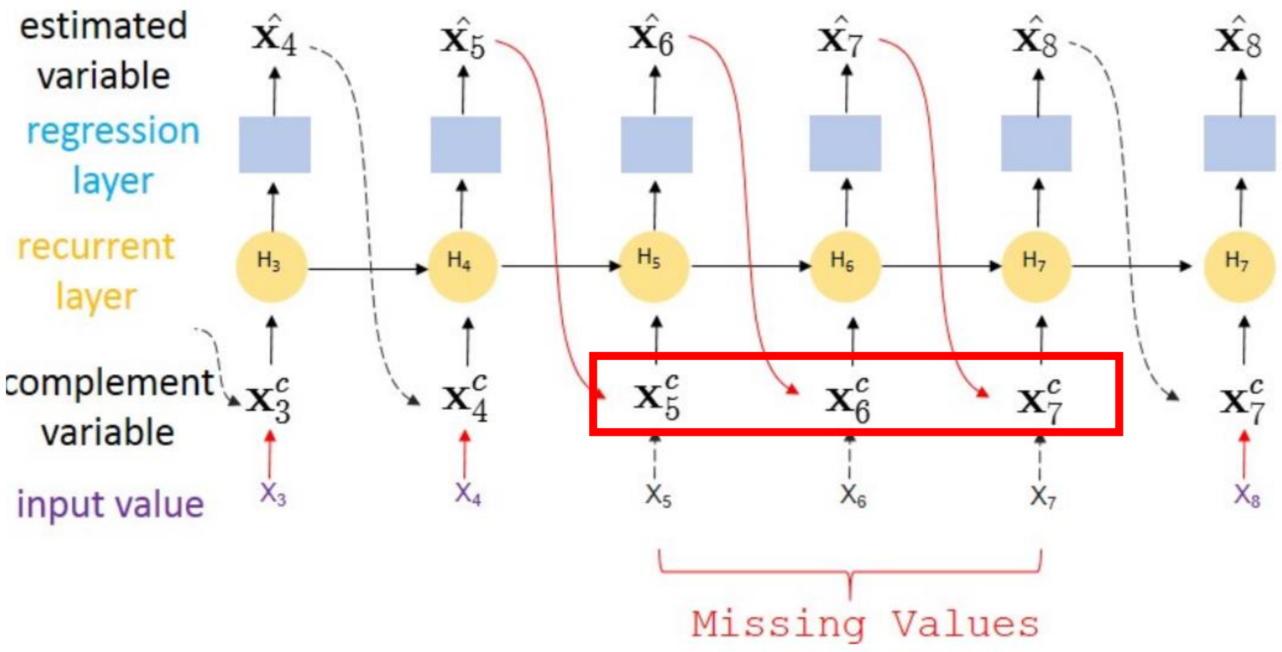


Figure 2: Imputation with unidirectional dynamics.

Part 3

RITS-I

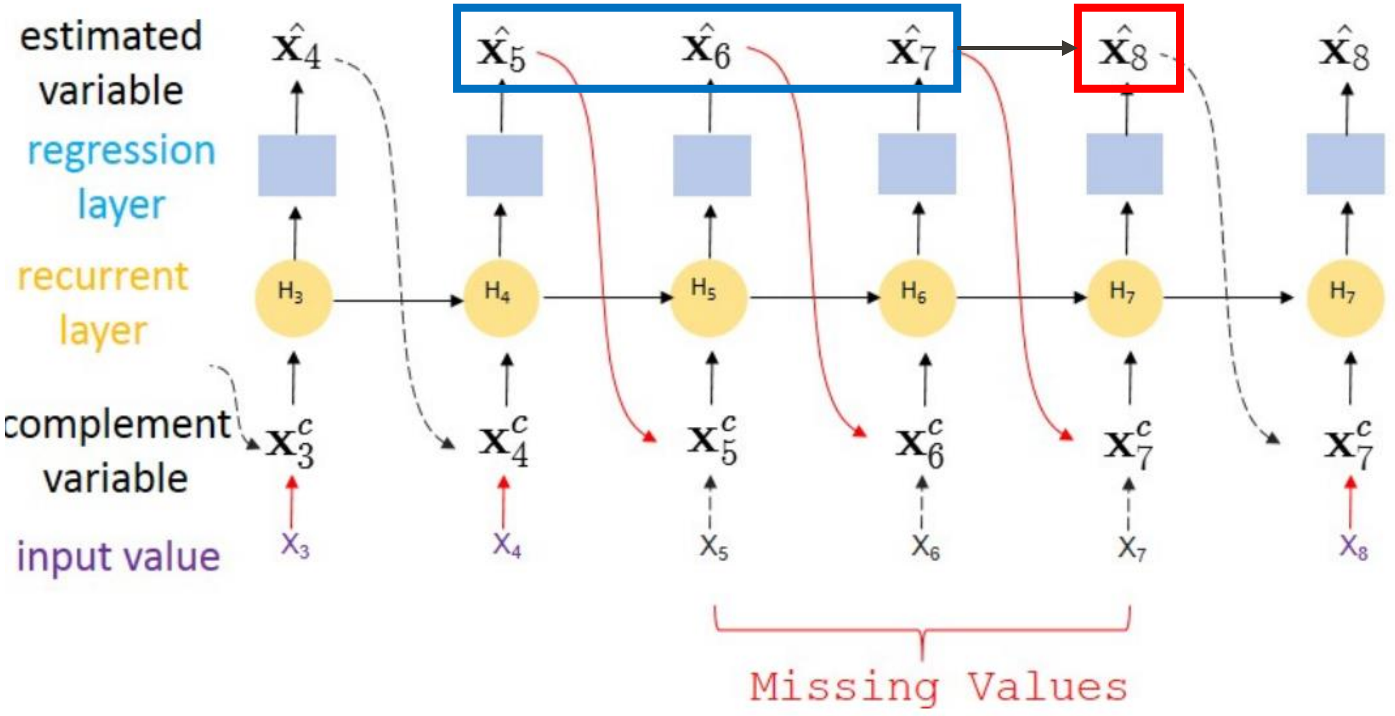


Figure 2: Imputation with unidirectional dynamics.

Estimation error(t_1 ~ t_4 , t_8) : loss function(loss(x, $\hat{x}$))
Estimation error(t_5 ~ t_7) : $\hat{x}_5$ ~ $\hat{x}_7$의 값들은 $\hat{x}_8$에 depend함
-> "delayed" error를 8번째에서 계산 가능함

RITS-I

Algorithm

$$\mathbf{h}_t = \sigma(\mathbf{W}_h \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{U}_h \mathbf{x}_t + \mathbf{b}_h),$$ → 기존 RNN과 동일

σ : sigmoid function, $\mathrm{W_h}$, $\mathrm{U_h}$, $\mathrm{b_h}$: parameters $\mathrm{h_t}$, : hidden state of previous time steps

Equation

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{x}}_t &= \mathbf{W}_x \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_x, && (1)\\
\mathbf{x}_t^c &= \mathbf{m}_t \odot \mathbf{x}_t + (1 - \mathbf{m}_t) \odot \hat{\mathbf{x}}_t, && (2)\\
\gamma_t &= \exp\{-\max(0, \mathbf{W}_\gamma \delta_t + \mathbf{b}_\gamma)\}, && (3)\\
\mathbf{h}_t &= \sigma(\mathbf{W}_h[\mathbf{h}_{t-1} \odot \gamma_t] + \mathbf{U}_h[\mathbf{x}_t^c \circ \mathbf{m}_t] + \mathbf{b}_h), && (4)\\
\ell_t &= \langle \mathbf{m}_t, \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{x}}_t) \rangle. && (5)
\end{aligned}
$$

Part 3

RITS-I

Equation

$$\hat{\mathbf{x}}_t = \mathbf{W}_x \mathbf{h}_{t-1} + \mathbf{b}_x, \tag{1}$$

Hidden state를 추정값($\hat{x}_t$)으로 대체하는 regression component임

$$\mathbf{x}_t^c = \mathbf{m}_t \odot \mathbf{x}_t + (1 - \mathbf{m}_t) \odot \hat{\mathbf{x}}_t, \tag{2}$$

결측값을 **(1)**에서 구한 값으로 대체함

$$\gamma_t = \exp\{-\max(0, \mathbf{W}_\gamma \delta_t + \mathbf{b}_\gamma)\}, \tag{3}$$

앞서 정의한 델타 값을 이용한 **missing pattern**으로서 **hidden state**를 줄여주는 역할을 하며**,** 추후 결측치의 패턴을 파악하는데 도움을 줌

$$\mathbf{h}_t = \sigma(\mathbf{W}_h[\mathbf{h}_{t-1} \odot \gamma_t] + \mathbf{U}_h[\mathbf{x}_t^c \circ \mathbf{m}_t] + \mathbf{b}_h), \tag{4}$$

(3)의 값을 이용하여 다음 **hidden state**를 예측함

$$\ell_t = \langle \mathbf{m}_t, \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{x}}_t) \rangle . \tag{5}$$

최종적으로 추정값과 실제값을 이용하여 **loss**를 계산함**,** L_e **= mean absolute error**

Part 3

RITS-I

Key point : RNN 이후 classification/regression을 추가로 진행함으로써 loss값을 계산함

$$\hat{\mathbf{y}} = f_{out}(\sum_{i=1}^{T} \alpha_i \mathbf{h}_i),$$

Accumulated loss

Min $\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} \ell_t + \mathcal{L}_{out}(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{y}})$, $\alpha_i = \frac{1}{T}$

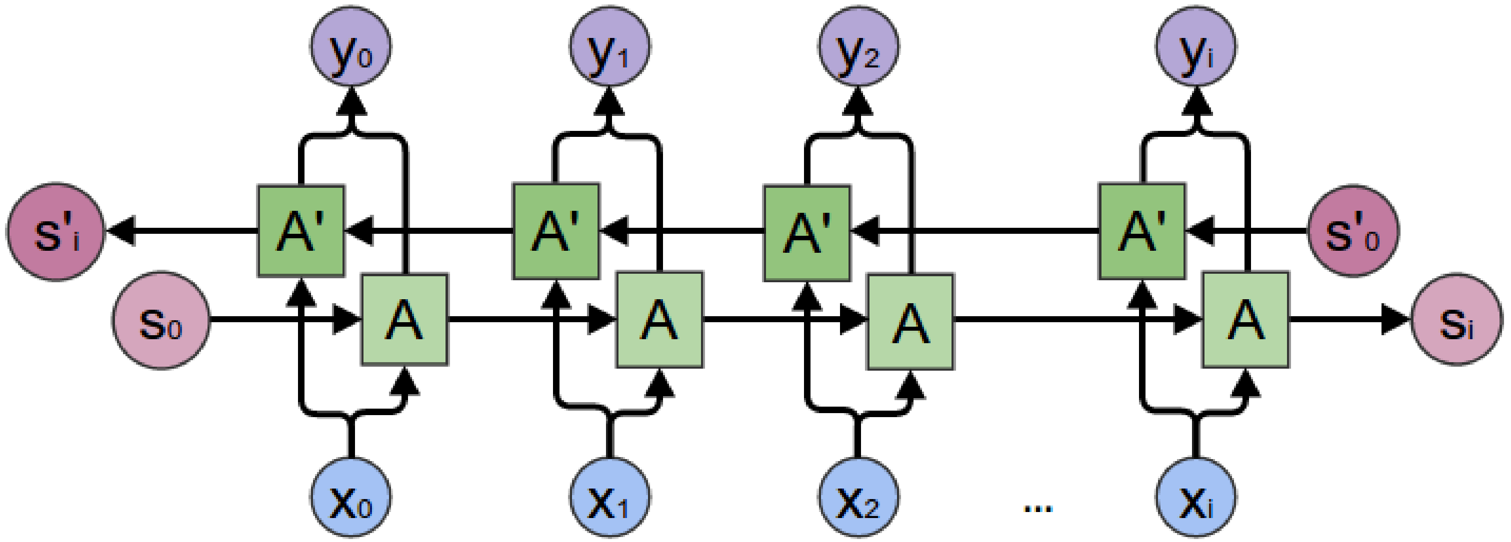
Original loss

Output loss(specific task)

Part 3

BRITS-I

RITS-I의 단점
결측치의 추정된 에러는 다음 **Epoch**전까지는 수정되지 않는다.
-> 모델의 수렴을 느리게 하고, 학습의 비효율을 불러일으킴 또한 **bias exploding** 문제를 일으킴



RITS-I에 **Bi-rnn**
구조만 추가함

해당 문제를 **bi-rnn**구조를 통해 해결함 **-> variable**은 **forward direction**뿐만 아니라 **backward direction** 두가지의 동시 영향을 받는다.

$$\ell_t^{cons} = \text{Discrepancy}(\hat{\mathbf{x}}_t, \hat{\mathbf{x}}'_t)$$

Loss = forward loss + backward loss + consistency loss

BRITS-I

BRITS-I의 단점

RITS-I, BRITS-I : 같은 **Time** 시점에서 관측치들이 서로 **uncorrelated**하다고 가정을 하고 진행한다.
하지만 실제 **real world**에서는 **feature**간에 **correlation**이 존재하고 이를 반영해야 한다.

BRITS-I

$\hat{x}_t$ **-> history - based estimation**

LOSS

$$\ell_t = \langle \mathbf{m}_t, \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{x}}_t) \rangle$$

BRITS

$\hat{z}_t$ **-> feature - based estimation**

Loss

$$\ell_t = \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{x}}_t) + \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{z}}_t) + \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{c}}_t).$$

Metric

$$\mathtt{MAE} = \frac{\sum_i |\mathtt{pred}_i - \mathtt{label}_i|}{N}, \quad \mathtt{MRE} = \frac{\sum_i |\mathtt{pred}_i - \mathtt{label}_i|}{\sum_i |\mathtt{label}_i|}.$$

BRITS

BRITS의 Equation

$$\hat{\mathbf{z}}_t = \mathbf{W}_z\mathbf{x}_t^c + \mathbf{b}_z, \tag{7}$$

$W_Z, b_Z \rightarrow correspoding\ parameters$

$$\beta_t = \sigma(\mathbf{W}_\beta[\gamma_t \circ \mathbf{m}_t] + \mathbf{b}_\beta) \tag{8}$$

마스킹 여부(temporal decay 동시 고려)

$$\hat{\mathbf{c}}_t = \beta_\mathbf{t} \odot \hat{\mathbf{z}}_t + (1 - \beta_\mathbf{t}) \odot \hat{\mathbf{x}}_t. \tag{9}$$

추정값 대체 여부 판단

$$\mathbf{c}_t^c = \mathbf{m}_t \odot \mathbf{x}_t + (1 - \mathbf{m}_t) \odot \hat{\mathbf{c}}_t \tag{10}$$

$$\mathbf{h}_t = \sigma(\mathbf{W}_h[\mathbf{h}_{t-1} \odot \gamma_t] + \mathbf{U}_h[\mathbf{c}_t^c \circ \mathbf{m}_t] + \mathbf{b}_h). \tag{11}$$

Hidden state 추정

BRITS의 loss

$$\ell_t = \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{x}}_t) + \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{z}}_t) + \mathcal{L}_e(\mathbf{x}_t, \hat{\mathbf{c}}_t).$$

Loss - (first step)

Loss - (second step)

Loss - (Third step)

Part 4

Experiments

Part 4

Dataset

Air Quality Data

- 2014/05/01 ~ 2015/04/30 : 베이징시의 공기 오염도를 측정함(13.3% missing value)
- Test data : 3,6,9월
- Training data : 나머지 데이터 사용

Health care Data

- MIMIC의 ICU Data 사용 : 35 feature (up to 78% missing value)
- Data: first 48 hours after patient's admission to ICU
- Imputation 뿐만 아니라 classification(death prediction)을 동시에 진행함

Human Activity data

- Walking, falling, sitting down 등 11가지의 활동 데이터(5명)
- 4가지의 센서들(왼, 오른 발목 등)에서 데이터를 수집함(30,917 time series data, 10% missing value)
- Imputation + classification task를 동시에 진행함
- 랜덤하게 10% ground truth를 생성한 후에 imputation 성능 측정을 진행함

Part 4

Results

Table 1: Performance Comparison for Imputation Tasks (in MAE(MRE%))

Method		Air Quality	Health-care	Human Activity
Non-RNN	Mean	55.51 (77.97%)	0.461 (65.61%)	0.767 (96.43%)
	KNN	29.79 (41.85%)	0.367 (52.15%)	0.479 (58.54%)
	MF	27.94 (39.25%)	0.468 (67.97%)	0.879 (110.44%)
	MICE	27.42 (38.52%)	0.510 (72.5%)	0.477 (57.94%)
	ImputeTS	19.58 (27.51%)	0.390 (54.2%)	0.363 (45.65%)
	STMVL	12.12 (17.40%)	/	/
RNN	GRU-D	/	0.559 (77.58%)	0.558 (70.05%)
	M-RNN	14.05 (20.16%)	0.445 (61.87%)	0.248 (31.19%)
Ours	RITS-I	12.45 (17.93%)	0.385 (53.41%)	0.240 (30.10%)
	BRITS-I	11.58 (16.66%)	0.361 (50.01%)	0.220 (27.61%)
	RITS	12.19 (17.54%)	0.292 (40.82%)	0.248 (31.21%)
	BRITS	**11.56 (16.65%)**	**0.278 (38.72%)**	**0.219 (27.59%)**

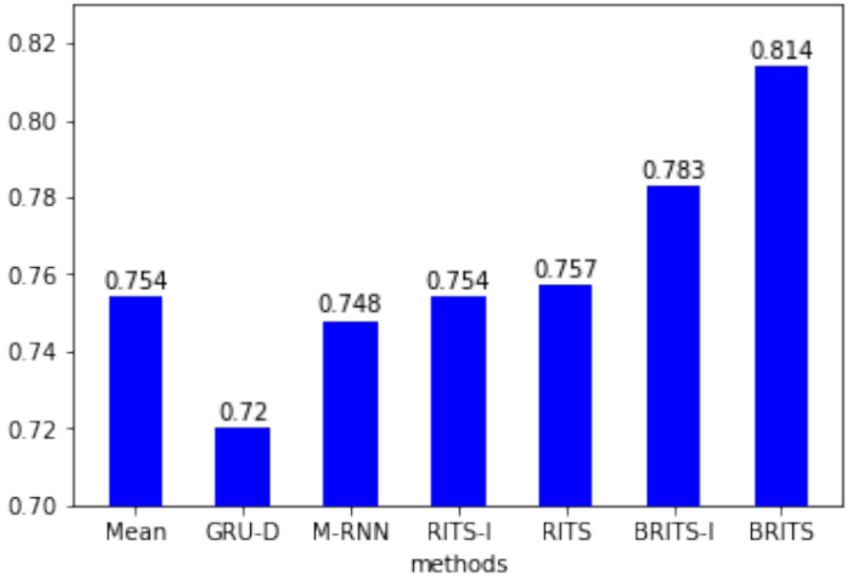
Evaluation : 10% non missing values를 validation data로 사용

Part 4

Results

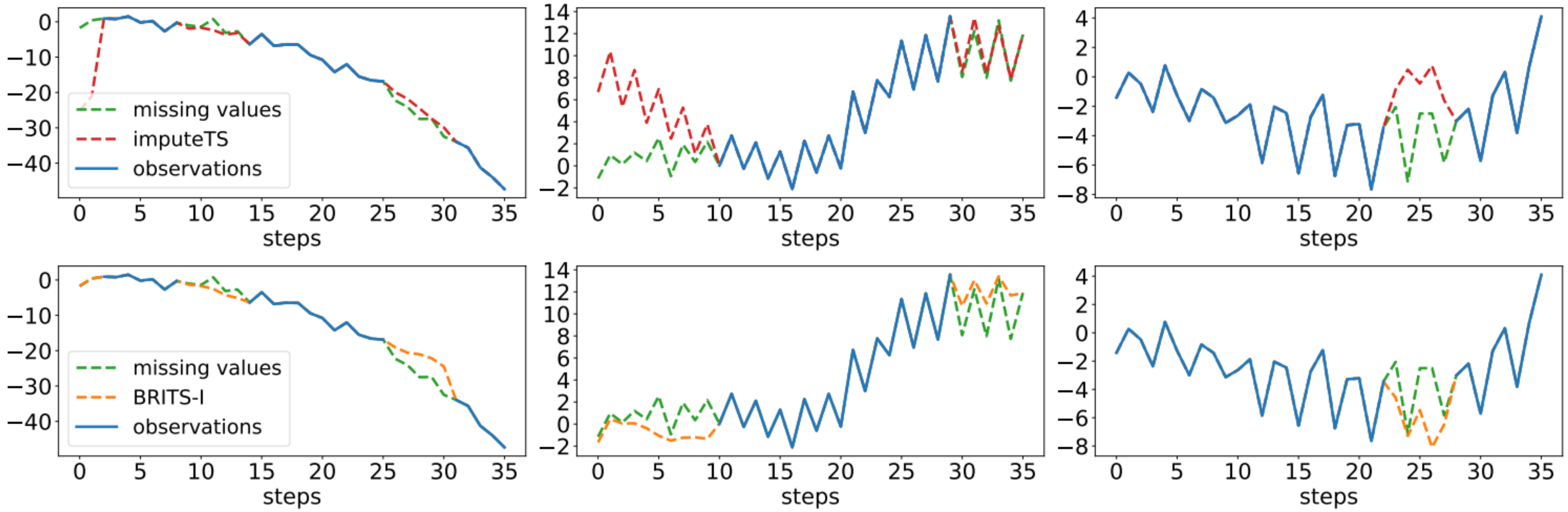
Table 2: Performance Comparison for Classification Tasks

Method	Health-care (AUC)	Human Activity (Accuracy)
GRU-D	0.834 ± 0.002	0.940 ± 0.010
M-RNN	0.817 ± 0.003	0.938 ± 0.010
RITS-I	0.821 ± 0.007	0.934 ± 0.008
BRITS-I	0.831 ± 0.003	0.940 ± 0.012
RITS	0.840 ± 0.004	0.968 ± 0.010
BRITS	$\mathbf{0.850 \pm 0.002}$	$\mathbf{0.969 \pm 0.008}$



Results

Appendix



- 가상의 데이터 생성 후 추가 성능 검증 진행

Part 4

Conclusion

1. 특정 분포를 가정하지 않고 **bi-rnn** 구조를 가지고 **missing value**를 학습 후 대체한다는 장점을 가지고 있는 모델임
2. **Bi-rnn** 구조에서 **missing value**를 **constant**가 아닌 **variables**로 취급함으로써 **delayed gradients** 효과를 불러일으키고 정확도를 상승시키는 효과를 냄
3. **Imputation**과 **classification/regression task**를 동시에 진행함으로써 각각의 **task**에서 높은 **sota** 성능을 보임

의문점

1. **Imputation**과 **classification/regression**을 동시에 진행하였는데**,** 해당 방법론에 대한 명확한 근거가 제시되어 있지 않고**, SOTA** 성능을 동시 달성했다고만 언급됨

References

https://towardsdatascience.com/understanding-bidirectional-rnn-in-pytorch-5bd25a5dd66
http://arxiv.org/pdf/2202.08516v2.pdf (SAITS)
https://arxiv.org/pdf/1805.10572v1.pdf (BRITS)
https://arxiv.org/pdf/1711.08742v1.pdf (M-RNN)
https://onlinelibrary.wiley.com/doi/epdf/10.1002/sim.4067 (MICE)

THANK YOU