УДК 519.246.8+519.254

ITERATIVE ALGORITHMS FOR WEIGHTED END-RANK TIME SERIES APPROXIMATION

Н.К. Звонарев
Санкт-Петербургский государственный университет, Математико-механический факультет
Россия, 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, Университетский пр., 28
E-mail: nikitazvonarev@gmail.com

Н.Э. Голяндина
Санкт-Петербургский государственный университет, Математико-механический факультет
Россия, 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, Университетский пр., 28
E-mail: nina@gistatgroup.com

Keywords: Time series, Cadzow iterations, End-rank Time Series, Weighted Total Least Squares, Oblique SVD-Factorization, Singular Spectrum Analysis

The problem of approximation of time series by end-rank series is considered in the paper. This is actual problem in signal processing tasks, partially, for extracting a signal in analysis of noised signals. After applying weigthed least-squares method, the optimization task arises, which don't have an exact solution. One of the numeric local-minimum search method (Cadzow iterations) is well-known. However, Cadzow iterations may work with specific weights only, which decreases while approaching edges of time series. In addition, it's naturally to take equal weights which build usual euclid metric. Therefore, a few new methods are constructed and researched with target of achieving equal or approximately equal weights. Questions of convergency, computational complexity and accuracy are considered for proposed methods. Methods are compared on the numeric example.

1. Introduction

Consider the task of extracting the signal $\mathbb{S} = (s_1, \ldots, s_N)$ from an observed noised signal $\mathbb{X} = \mathbb{S} + \mathbb{N}$, where $\mathbb{S}$ has some fixed structure, exactly, $\mathbb{S}$ is ruled by some *linear recurrent formula* (LRF) of order r:

$$s_n = \sum_{i=1}^{r} a_i s_{n-i}, \quad n = r+1, \ldots, N.$$

Generally, ruled-by-LRF series may be written in a parametric form $s_n = \sum_i P_i(n) \exp(\alpha_i n) \cos(2\pi\omega_i n + \psi_i)$. However, parametric approach for the task doesn't lead to good estimation of parameters due to their big amount and instability of estimators.

It's known that methods based on signal subspace estimation (subspace-based methods) works well. The basic idea of these methods as follows: let's fix window length L, $1 \le L \le N$, $K = N - L + 1$, and build trajectory matrix for series $\mathbb{S}$:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} s_1 & s_2 & \dots & s_K \\ s_2 & s_3 & \dots & s_{K+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ s_L & s_{L+1} & \dots & s_N \end{pmatrix}.$$

Notice that $\mathbf{S} \in \mathcal{H}$, where $\mathcal{H}$ is the set of Hankel matrixes with equal values on their anti-diagonals $i + j = \mathrm{const}$. If series are ruled by minimal LRF of order r, $r < \min(L, K)$, then $\operatorname{rank} \mathbf{S} = r < L$. So, $\mathbf{S}$ is Hankel matrix of low-rank r.

Let $\mathbf{X}$ be a trajectory matrix of series $\mathbb{X}$. Then the problem of estimation of $\mathbb{S}$ could be considered as the problem of approximation of matrix $\mathbf{X}$ by Hankel matrix of rank not greater than r:

$$(1) \qquad \|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\|_{\mathrm{F}}^2 \to \min_{\substack{\operatorname{rank} \mathbf{Y} \le r \\ \mathbf{Y} \in \mathcal{H}}}$$

A lot of papers are dedicated to this problem, e.g., [1, 2, 3, 4] and many other works, where the problem is called structured low rank approximation. Approaches of solving the problem are iterative, e.g., Cadzow iterations consist of alternating projections to the set of Hankel matrices and matrices of rank not greater than r. The target function isn't unimodal in such class of problems, and convergency to global minimum isn't guaranteed; despite this, problem (1) is considered to be well-researched, though it has many open answers yet.

Notice that the problem (1) is equivalent to the problem

$$(2) \qquad \sum_{i=1}^{N} w_i (x_i - y_i)^2 \to \min_{\substack{\mathbb{Y}: \operatorname{rank} \mathbf{Y} \le r \\ \mathbf{Y} \in \mathcal{H}}},$$

where

$$(3) \qquad w_i = \begin{cases} i & \text{for } i = 1, \dots, L-1, \\ L & \text{for } i = L, \dots, K, \\ N - i + 1 & \text{for } i = K+1, \dots, N. \end{cases}.$$

Weights on edges of series are less than in a center, i.e. (1) is a weighted least squares problem for series.

The aim of this paper is to consider methods which solve the problem (2) with various weights instead of w_i and compare methods in terms of precision of the signal $\mathbb{S}$ estimation. All described methods are iterative. If an estimate of the signal, which isn't ruled by LRF, is the point of interest then only the first iteration could be taken with aim of reduction of computational complexity. So, described methods are compared by precision of the signal estimation in the first iteration and in the limit. Notice than known Singular Spectrum Analysis (SSA) [5, 6, 7, 8, 9, 10] could be described as one iteration of Cadzow iterations.

Структура работы следующая. В разделе 2. рассматривается задача для матриц аппроксимации ганкелевыми матрицами неполного ранга. Описывается общая структура итеративных алгоритмов в виде попеременных проекций, приводятся методы построения проекторов, доказывается теорема о сходимости. В разделе 3. описывается связь между задачами аппроксимации временных рядов и матриц, соотношение между весами в постановках задачи взвешенного МНК. Раздел 4. посвящен предлагаемым алгоритмам аппроксимации временных рядов. В разделе 5. проводится численное сравнение алгоритмов на типичном примере. Работа завершается короткими выводами и обсуждением дальнейших направления развития в разделе 6.. В приложении приведено доказательство результатов о разделимости константного и синусоидального рядов, имеющих отношение к скорости сходимости некоторых из рассматриваемых алгоритмов.

2. Аппроксимация ганкелевыми матрицами неполного ранга

2.1. Общий алгоритм

В этом разделе рассмотрим задачу аппроксимации матрицы $\mathbf{X}$ ганкелевой матрицей неполного ранга по некоторой (полу)норме $\|\cdot\|$. Обозначим $\mathsf{R}^{L\times K}$ пространство матриц размера L на K, $\mathcal{M}_r \subset \mathsf{R}^{L\times K}$ множество матриц ранга, не превосходящего r, $\mathcal{H} \subset \mathsf{R}^{L\times K}$ — множество ганкелевых матриц. Заметим, что $\mathcal{M}_r$ не является ни линейным, ни даже выпуклым множеством. Однако, $\mathcal{M}_r$ является мультипликативным, т.е. если $\mathbf{Z} \in \mathcal{M}_r$, то и $a\mathbf{Z} \in \mathcal{M}_r$ для любого a. Пространство $\mathcal{H}$ является линейным.

Задача имеет вид

$$\|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\| \to \min_{\mathbf{Y}}, \text{ где } \mathbf{Y} \in \mathcal{H} \cap \mathcal{M}_r. \tag{4}$$

Чтобы привести схему алгоритма для решения данной задачи, введем проекторы на соответствующие подпространства по норме $\|\cdot\|$, $\Pi_{\mathcal{M}_r}$ — проектор на $\mathcal{M}_r \subset \mathsf{R}^{L\times K}$, $\Pi_{\mathcal{H}}$ — проектор на $\mathcal{H}$. Оба проектора являются ортогональными, так как для ортогональности достаточно того, чтобы пространство было мультипликативным. Заметим, что результат проектирования на пространство матриц неполного ранга может быть неоднозначно определен, однако в дальнейшем будем предполагать, что в случае неоднозначности выбрано произвольное значение из допустимых.

Предложение 1. *Пусть $\mathcal{X}$ — гильбертово пространство, $\mathcal{M}$ — мультипликативное подмножество, $\Pi_{\mathcal{M}}$ — оператор проектирования на $\mathcal{M}$. Тогда для любого $x \in \mathcal{X}$ выполняется теорема Пифагора: $\|x\|^2 = \|x - \Pi_{\mathcal{M}}x\|^2 + \|\Pi_{\mathcal{M}}x\|^2$.*

Доказательство предложения 1. В силу мультипликативности можно представить множество $\mathcal{M}$ в виде $\mathcal{M} = \bigcup_{l\in\mathcal{L}} l$, где $\mathcal{L}$ — множество всех прямых, лежащих в $\mathcal{M}$ и проходящих через 0, и $l \cap m = 0$ для любых $l, m \in \mathcal{L}$, $l \neq m$. Тогда операция проектирования может быть записана так: вначале мы выбираем прямую l такую, что $\operatorname{dist}(x, l) \to \min\limits_{l \in \mathcal{L}}$, после чего $y = \Pi_{\mathcal{M}} x$ — это ортогональная проекция x на прямую l, которая является линейным подпространством. Получаем нужное свойство.

Для решения задачи (4) можно использовать итеративный метод попеременных проекций в виде

$$\mathbf{Y}_{k+1} = \Pi_{\mathcal{H}} \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k, \text{ где } \mathbf{Y}_0 = \mathbf{X}. \tag{5}$$

Докажем теорему относительно сходимости данного метода.

Теорема 1. *Пусть пространство $\mathcal{M}_r$ является замкнутым в топологии, порождаемой нормой $\|\cdot\|$. Тогда*

1. $\|\mathbf{Y}_k - \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k\| \to 0$ *при* $k \to +\infty$, $\|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k - \mathbf{Y}_{k+1}\| \to 0$ *при* $k \to +\infty$.
2. *Существует сходящаяся подпоследовательность матриц* $\mathbf{Y}_{i_1}, \mathbf{Y}_{i_2}, \ldots$ *такая, что ее предел* $\mathbf{Y}^*$ *лежит в* $\mathcal{M}_r \cap \mathcal{H}$.

Доказательство теоремы 1. Воспользуемся неравенствами [11]

$$\|\mathbf{Y}_k - \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k\| \geq \|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k - \mathbf{Y}_{k+1}\| \geq \|\mathbf{Y}_{k+1} - \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_{k+1}\|. \tag{6}$$

1. Согласно неравенствам (6), последовательности $\|\mathbf{Y}_k - \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k\|$, $k = 1, 2, \ldots$, и $\|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k - \mathbf{Y}_{k+1}\|$, $k = 1, 2, \ldots$, являются невозрастающими. Очевидно, они ограничены снизу нулем. Поэтому они имеют одинаковый предел c, опять же согласно (6).

   Докажем, что $c = 0$. Предположим противное: существует $d > 0$ такое, что для любого $k = 1, 2, \ldots$: $\|\mathbf{Y}_k - \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k\| > d$, $\|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k - \mathbf{Y}_{k+1}\| > d$. Согласно предложению 1, справедливо следующее:

   $$\begin{gathered}\|\mathbf{Y}_k\|^2 = \|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k\|^2 + \|\mathbf{Y}_k - \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k\|^2 = \\ \|\mathbf{Y}_k - \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k\|^2 + \|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k - \mathbf{Y}_{k+1}\|^2 + \|\mathbf{Y}_{k+1}\|^2.\end{gathered}$$

   Таким образом, $\|\mathbf{Y}_{k+1}\|^2 < \|\mathbf{Y}_k\|^2 - 2d^2$. Расписывая неравенство аналогично дальше, получим, что для любого $j = 1, 2, \ldots$: $\|\mathbf{Y}_{k+j}\|^2 < \|\mathbf{Y}_k\|^2 - 2jd^2$. Возьмем любое k, например $k = 1$, и $j = \lceil \|\mathbf{Y}_k\|^2 / (2d^2) \rceil + 1$. Тогда $\|\mathbf{Y}_{k+j}\|^2 < 0$, чего не может быть.

2. Рассмотрим последовательность $(\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k)$, $k = 1, 2, \ldots$. Она ограничена, так как $\|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Z}\| \leq \|\mathbf{Z}\|$ и $\|\Pi_{\mathcal{H}} \mathbf{Z}\| \leq \|\mathbf{Z}\|$ для любого $\mathbf{Z} \in \mathsf{R}^{L \times K}$ (это справедливо, например, и по предположению 1). Тогда мы можем выбрать из нее сходящуюся подпоследовательность $(\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_{i_k})$, $\mathbf{Y}^*$ — ее предел, при этом $\|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_{i_k} - \mathbf{Y}_{i_k+1}\| = \|\Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_{i_k} - \Pi_{\mathcal{H}} \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_{i_k}\| \to 0$ при $k \to +\infty$. Учитывая, что $\|\mathbf{Z} - \Pi_{\mathcal{H}} \mathbf{Z}\|$ — композиция непрерывных отображений, получаем, что $\|\mathbf{Y}^* - \Pi_{\mathcal{H}} \mathbf{Y}^*\| = 0$, а зная, что $\mathcal{M}_r$ — замкнутое множество, получаем, что $\mathbf{Y}^* \in \mathcal{M}_r \cap \mathcal{H}$. Осталось заметить, что последовательность $(\Pi_{\mathcal{H}} \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_{i_k})$ — сходящаяся, так как $\Pi_{\mathcal{H}}$ — непрерывное отображение, и ее предел равен $\mathbf{Y}^*$. Получаем, что $\mathbf{Y}_{i_k+1}$ — требуемая подпоследовательность.

Ниже мы будем рассматривать нормы, порожденные взвешенным фробениусовым скалярным произведением в виде

$$(7)\qquad \langle \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \rangle_M = \sum_{l=1}^{L} \sum_{k=1}^{K} m_{l,k} y_{l,k} z_{l,k}.$$

Известно, что относительно обычной фробениусовской нормы пространство $\mathcal{M}_r$ является замкнутым и, следовательно, утверждения теоремы 1 верны и в случае взвешенной фробениусовской нормы при всех $m_{l,k} > 0$.

2.2. Вычисление проекторов

Будем рассматривать норму $\|\cdot\|_{\mathbf{M}}$, порожденную (7).

Проектор $\Pi_{\mathcal{H}}$. Несложно показать, что проектор $\Pi_{\mathcal{H}}$ можно вычислить явным образом согласно следующему утверждению.

Предложение 2. *Для* $\widehat{\mathbf{Y}} = \Pi_{\mathcal{H}} \mathbf{Y}$

$$\hat{y}_{ij} = \frac{\sum_{l,k: l+k=i+j} m_{l,k} y_{l,k}}{\sum_{l,k: l+k=i+j} m_{l,k}}.$$

Явный вид проектора $\Pi_{\mathcal{M}_r}$ в общем случае не получить. Рассмотрим различные случаи.

Случай явного вида проектора $\Pi_{\mathcal{M}_r}$. Сначала рассмотрим случай, когда проектор можно выписать явно. Пусть все веса $m_{ij} = 1$. Обозначим в этом специальном случае $\Pi_r = \Pi_{\mathcal{M}_r}$. Хорошо известно, что проектор $\Pi_r \mathbf{Y}$ вычисляется как сумма первых компонент сингулярного разложения матрицы $\mathbf{Y}$: пусть $\mathbf{Y} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^{\mathrm{T}}$, где $\mathbf{U}$ — ортогональная матрица порядка $L \times L$, $\mathbf{\Sigma}$ — квазидиагональная матрица порядка $L \times K$ с неотрицательными диагональными элементами, расположенными в невозрастающем порядке, $\mathbf{V}$ — ортогональная матрица порядка $K \times K$. Пусть для определенности $L \leq K$, $\Sigma = (\sigma_1, \ldots, \sigma_L)$ — вектор, состоящий из диагональных элементов матрицы $\mathbf{\Sigma}$. Обозначим $\mathbf{\Sigma}_r = (\sigma^r_{lk})$ матрицу:

$$\sigma^r_{ij} = \begin{cases} \sigma_i & \text{при } i = j, i \leq r, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Тогда проекцию можно вычислить следующим образом: $\Pi_r \mathbf{Y} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma}_r \mathbf{V}^{\mathrm{T}}$. Следующее предложение описывает случаи, когда нахождение проектора сводится к применению оператора Π_r.

Предложение 3. *Пусть существует симметричная, неотрицательно определенная матрица* $\mathbf{C}$ *порядка* $K \times K$*, такая что* $\|\mathbf{Y}\|_{\mathbf{M}} = \mathrm{tr}(\mathbf{Y}\mathbf{C}\mathbf{Y}^{\mathrm{T}})$*. Предположим также, что пространство столбцов матрицы* $\mathbf{Y}$ *лежит в пространстве столбцов матрицы* $\mathbf{C}$*. Тогда*

$$(8)\qquad \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y} = (\Pi_r \mathbf{B})(\mathbf{O}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}})^{\dagger},$$

где $\mathbf{O}_{\mathbf{C}}$ *— такая матрица, что* $\mathbf{C} = \mathbf{O}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}} \mathbf{O}_{\mathbf{C}}$*,* $\mathbf{B} = \mathbf{Y}\mathbf{O}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}}$*,* $(\mathbf{O}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}})^{\dagger}$ *обозначает псевдообратную матрицу Мура-Пенроуза к матрице* $\mathbf{O}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}}$*.*

Доказательство предложения 3. Доказательство является прямым следствием того, что рассматриваемая норма порождается косоугольным скалярным произведением в пространстве строк матрицы $\mathbf{Y}$, см. детали в [12].

Замечание 1. *Заметим, что условия предложения 3 могут быть выполнены, только если матрица* $\mathbf{C}$ *диагональная.*

Проектор $\Pi_{\mathcal{M}_r}$ в общем случае. Так как в явном виде проектор не находится, то в общем случае используются итеративные алгоритмы. Один из них описан в [13]. Обозначим $\odot$ поэлементное умножение матриц.

Алгоритм 1. ***Вход****: исходная матрица* $\mathbf{Y}$*, ранг* r*, матрица весов* $\mathbf{M}$*, критерий остановки STOP.*

Результат*: Матрица* $\widehat{\mathbf{Y}}$ *как оценка* $\Pi_{\mathcal{M}_r}\mathbf{Y}$*.*

1. $\mathbf{Y}_0 = \mathbf{Y}$, $k = 0$.
2. $\mathbf{Y}_{k+1} = \Pi_r(\mathbf{Y} \odot \mathbf{M} + \mathbf{Y}_k \odot (\mathbf{U} - \mathbf{M}))$, *где* $\mathbf{U} \in \mathsf{R}^{L\times K}$, $\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$,

   $k \leftarrow k + 1$.
3. *Если STOP, то* $\widehat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y}_k$.

Заметим, что в случае, когда m_{ij} равняется 0 или 1, алгоритм является EM-алгоритмом [13], соответственно, для него выполнены свойства EM-алгоритмов и он сходится к локальному минимуму в задаче поиска проектора. В случае нулевых весов формально неважно, какие значения стоят в матрице на этих местах. Однако для сходимости алгоритма это может быть существенно.

3. Временные ряды и задача аппроксимации матриц

3.1. Постановка задачи для временных рядов

Рассмотрим временной ряд $\mathbb{X} = (x_1, \ldots, x_N)$ длины $N \geq 3$. Зафиксируем длину окна L, $1 < L < N$, положим $K = N - L + 1$. Также рассмотрим последовательность векторов:

$$X_i = (x_i, \ldots, x_{i+L-1})^{\mathrm{T}}, \qquad i = 1, \ldots, K. \tag{9}$$

L-Траекторной матрицей ряда $\mathbb{X}$ называется матрица $\mathbf{X} = [X_1 : \ldots : X_K]$.

Определение 1. *Пусть* $0 \leq r \leq L$*. Будем говорить, что ряд* $\mathbb{X}$ имеет L-ранг r*, если ранг его* L*-траекторной матрицы* $\mathbf{X}$ *равен* r*.*

Заметим, что ряд $\mathbb{X}$ может иметь L-ранг r только тогда, когда

$$r \le \min(L, N - L + 1). \tag{10}$$

Скажем, что при фиксированном r длина окна L является *допустимой*, если для нее выполнено условие (10).

В дальнейшем будет предполагаться, что L не превосходит K, так как транспонирование не изменит ситуацию, а строчный ранг матрицы равен ее столбцовому рангу.

Пусть X_N — множество всех временных рядов длины N, X_N^r — множество всех временных рядов длины N L-ранга, не превосходящего r. Для заданных исходного временного ряда $\mathbb{X} \in \mathsf{X}_N$, длины окна L, $1 < L < N$, и r, удовлетворяющего условию (10), рассмотрим задачу:

$$f_q(\mathbb{Y}) \to \min_{\mathbb{Y} \in \mathsf{X}_N^r}, \quad f_q(\mathbb{Y}) = \sum_{i=1}^{N} q_i (x_i - y_i)^2, \tag{11}$$

где y_i — i-е измерение ряда $\mathbb{Y}$, а $q_1, \ldots, q_N$ — некоторые неотрицательные веса, $q_i \ge 0$, $i = 1, \ldots, N$. Нас больше всего интересует случай, когда целевая функция $f(\mathbb{Y}) = \rho^2(\mathbb{X}, \mathbb{Y})$ — квадрат евклидова расстояния в R^N. Она совпадает с $f_q(\mathbb{Y})$ при $q_i = 1$, $i = 1, \ldots, N$.

Пусть $\mathbb{X}$ — временной ряд длины N, а $\mathbf{X} \in \mathcal{H}$ — его траекторная матрица, где $\mathcal{H}$ — множество всех ганкелевых матриц размера $L \times K$. Тогда между X_N — множеством всех временных рядов длины N и $\mathcal{H}$ можно построить отображение $\mathcal{T}$, действующее по правилу

$$\mathcal{T}(\mathbb{X}) = \mathbf{X} : \hat{x}_{l,k} = x_{l+k-1}, \quad \mathbf{X} = (\hat{x}_{l,k}), \quad \mathbb{X} = (x_1, \ldots, x_N).$$

Нетрудно заметить, что это отображение является биективным.

Так как есть взаимно-однозначное соответствие между пространство рядов и ганкелевыми матрицами, задачу (11) можно записать на матричном языке.

Поправка. Для численного поиска решения оптимизационной задачи (4) нам понадобится следующий теоретический факт. Рассмотрим $\mathcal{X}$ — гильбертово пространство со скалярным произведением $\langle \cdot, \cdot \rangle$, $\mathcal{M}$ — мультипликативное подмножество. Пусть элемент x лежит в $\mathcal{X}$, y лежит в $\mathcal{M}$. Рассмотрим проекцию y^* элемента x на прямую $l = \{\alpha y : \alpha \in \mathsf{R}\}$:. Тогда поправка y^* имеет вид

$$y^* = \mathcal{A}(y) = y \frac{\langle x, y \rangle}{\langle y, y \rangle}. \tag{12}$$

При этом выполняется $\|x - y^*\| \le \|x - y\|$.

Таким образом, при решении задачи (11) для аппроксимации $x = \mathbb{X} \in \mathsf{X}_N$, если есть некоторое приближение $y = \mathbb{Y} \in \mathsf{X}_N^r$ к решению этой оптимизационной задачи, то его можно улучшить (по крайней мере, не ухудшить), применив (12) и получив ряд $\mathbb{Y}^* = \mathcal{A}(\mathbb{Y})$, который назовем *поправкой* $\mathbb{Y}$.

3.2. Эквивалентные целевые функции задачи (11)

В пространстве рядов целевая функция явным образом задается через (полу)скалярное произведение

$$\langle \mathbb{Y}, \mathbb{Z} \rangle_q = \sum_{i=1}^{N} q_i y_i z_i, \tag{13}$$

где q_i — положительные (неотрицательные) веса.

Рассмотрим два (полу)скалярных произведения в пространстве матриц, являющихся расширениями обычного фробениусова скалярного произведения.

Введем

$$\langle \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \rangle_{1,\mathbf{M}} = \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{K} m_{i,j} y_{i,j} z_{i,j}. \tag{14}$$

для матрицы $\mathbf{M}$ с положительными (неотрицательными) элементами и

$$\langle \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \rangle_{2,\mathbf{C}} = \mathrm{tr}(\mathbf{Y}\mathbf{C}\mathbf{Z}^{\mathrm{T}}) \tag{15}$$

для положительно определенной (или неотрицательно определенной для полунормы) матрицы $\mathbf{C}$.

Заметим, что если матрица $\mathbf{M}$ состоит из всех единиц, т.е. $m_{i.j} = 1$, и если $\mathbf{C}$ — единичная матрица, то оба скалярных произведения совпадают с обычным фробениусовым.

Предложение 4. *1. Пусть* $\mathbf{Y} = \mathcal{T}(\mathbb{Y})$, $\mathbf{Z} = \mathcal{T}(\mathbb{Z})$. *Тогда* $\langle \mathbb{Y}, \mathbb{Z} \rangle_q =< \mathbf{Y}, \mathbf{Z} >_{1,\mathbf{M}}$ *тогда и только тогда, когда*

$$q_i = \sum_{\substack{1 \le l \le L \\ 1 \le k \le K \\ l+k-1=i}} m_{l,k}. \tag{16}$$

2. Для диагональной матрицы $\mathbf{C} = \mathrm{diag}(c_1, \ldots, c_K)$, $\langle \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \rangle_{1,\mathbf{M}} = \langle \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \rangle_{2,\mathbf{C}}$ *тогда и только тогда, когда*

$$m_{l,k} = c_k. \tag{17}$$

Доказательство предложения 4. Для доказательства первой части утверждения заметим, что

$$\langle \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \rangle_{1,\mathbf{M}} = \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{K} m_{i,j} y_{i+j-1} z_{i+j-1},$$

Доказательство второй части следует из того, что для диагональной матрицы $\mathbf{C}$

$$\langle \mathbf{Y}, \mathbf{Z} \rangle_{2,\mathbf{C}} = \sum_{l=1}^{L} \sum_{k=1}^{K} c_k y_{l,k} z_{l,k}.$$

Следствие 1. *Если все веса $m_{i,j} = 1$, то веса q_i равны w_i, задаваемым в (3).*

Заметим, что вторая матричная норма с диагональной матрицей $\mathbf{C}$ является частным случаем первой. Однако, ценность записи первой нормы в виде второй состоит в том, что аппроксимация матрицами меньшего ранга по первой норме — это сложная задача при неравных весах $m_{i,j}$, а аппроксимация по второй норме — естественная задача, решаемая с помощью косоугольного сингулярного разложения.

Замечание 2. *Таким образом, если выполнено условие (16) и все веса q_i и $m_{i,j}$ ненулевые, то задача (11) эквивалентна задаче*

$$f_{\mathbf{M}}(\mathbf{Y}) \to \min_{\mathbf{Y} \in \mathcal{M}_r \cap \mathcal{H}}, \quad f_{\mathbf{M}}(\mathbb{Y}) = \|\mathbf{X} - \mathbf{Y}\|_{\mathbf{M}}.$$

4. Алгоритмы

В этом разделе приведем все рассматриваемые алгоритмы для решения задачи (11). В модели ряда $\mathbb{X} = \mathbb{S} + \mathbb{N}$, где $\mathbb{S}$ — ряд конечного ранга r, $\mathbb{N}$ — шум, будем рассматривать результат работы алгоритма как оценку сигнала $\mathbb{S}$.

4.1. Алгоритм Cadzow

Этот алгоритм служит для аппроксимации траекторной матрицы по норме $\|\cdot\|_{\mathbf{M}}$ с весами $m_{ij} = 1$ (т.е. решению задачи (1)), что по следствию 1 соответствует задаче (2) с весами w_i, задаваемыми (3). Алгоритм был предложен в [1]. Его недостатком является то. что веса w_i не являются равными, на краях они меньше, чем в середине. Заметим, что чем меньше длина окна. тем ближе веса к равным.

Алгоритм 2 (Cadzow)**.** ***Вход***: *Временной ряд $\mathbb{X}$, длина окна L, ранг r, критерий остановки STOP1 (например, заданное число итераций).*

Результат: *Ряд $\widehat{\mathbb{S}}$ как оценка аппроксимации $\mathbb{X}$ рядом конечного ранга r.*

1. $\mathbf{Y}_0 = \mathcal{T}\mathbb{X}$, $k = 0$.
2. $\mathbf{Y}_{k+1} = \Pi_{\mathcal{H}} \Pi_{\mathcal{M}_r} \mathbf{Y}_k$, $k \leftarrow k + 1$.
3. *Если STOP1, то* $\widehat{\mathbb{S}} = \mathcal{T}^{-1}\mathbf{Y}_k$.

4.2. Алгоритм Weighted Cadzow

Пусть веса $q_i = 1$. Тогда, по предложению 4, эквивалентные матричные веса могут иметь вид

$$m_{l,k} = \frac{1}{q_{l+k-1}} \tag{18}$$

Алгоритм 3 (Weighted Cadzow)**.** ***Вход:*** *Временной ряд $\mathbb{X}$, длина окна L, ранг r, критерии остановки STOP1 для внешних итераций и STOP2 для внутренних.*

Результат: *Ряд $\widehat{\mathbb{S}}$ как оценка аппроксимации $\mathbb{X}$ рядом конечного ранга r.*

1. $\mathbf{Y}_0 = \mathcal{T}\mathbb{X}$, $k = 0$.
2. *Получение $\widehat{\mathbf{Z}}$ по алгоритму 1 с критерием остановки STOP2, примененному к $\mathbf{Y}_k$ для оценивания $\Pi_{\mathcal{M}_r}\mathbf{Y}_k$.*
3. $\mathbf{Y}_{k+1} = \Pi_{\mathcal{H}}\widehat{\mathbf{Z}}$, $k \leftarrow k + 1$.
4. *Если STOP1, то $\widehat{\mathbb{S}} = \mathcal{T}^{-1}\mathbf{Y}_k$.*

4.3. Алгоритм Extended Cadzow

Постановка задачи в этом алгоритме несколько отличается от общей постановки задачи. Формально, мы продлеваем ряд в обе стороны на $L-1$ точек некоторыми значениями, приписывая им вес 0, т.е. считая их пропусками. Таким образом, расширенный ряд $\widetilde{\mathbb{X}}$ будет иметь длину $N + 2L - 2$, а его траекторная матрица $\widetilde{\mathbf{X}}$ будет иметь размер L на $N + L - 1$.

Для нового расширенного ряда мы применяем общую схему с весами $m_{i,j} = \mathcal{T}\mathbb{I}$, где ряд $\mathbb{I}$ имеет значения 1 на местах исходного ряда и значения 0 на местах пропусков, то есть

$$m_{i,j} = \begin{cases} 1 & 1 \le i + j - L \le N, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Алгоритм 4 (Extended Cadzow)**.** ***Вход:*** *Временной ряд $\mathbb{X}$, длина окна L, ранг r, критерии остановки STOP1 для внешних итераций и STOP2 для внутренних, значения, которыми дополнен ряд слева и справа, $\mathbb{L}_{L-1}$ и $\mathbb{R}_{L-1}$.*

Результат: *Ряд $\widehat{\mathbb{S}}$ как оценка аппроксимации $\mathbb{X}$ рядом конечного ранга r.*

1. $\mathbf{Y}_0 = \mathcal{T}\widetilde{\mathbb{X}}$, *где* $\widetilde{\mathbb{X}} = (\mathbb{L}_{L-1}, \mathbb{X}, \mathbb{R}_{L-1})$, $k = 0$.
2. *Получение $\widehat{\mathbf{Z}}$ по алгоритму 1 с критерием остановки STOP2, примененному к $\mathbf{Y}_k$ для оценивания $\Pi_{\mathcal{M}_r}\mathbf{Y}_k$.*
3. $\widetilde{\mathbf{Y}}_{k+1} = \Pi_{\mathcal{H}}\widehat{\mathbf{Z}}$, $k \leftarrow k + 1$.
4. *Если STOP1, то $\widehat{\mathbb{S}} = \mathcal{T}^{-1}\mathbf{Y}_k$, где $\mathbf{Y}_k$ состоит из столбцов матрицы $\widetilde{\mathbf{Y}}_k$ с L-го по N-ый.*

4.4. Алгоритмы Oblique Cadzow

Эти алгоритмы могут быть применены, если выполнены условия предложения 3.

Алгоритм 5 (Oblique Cadzow). ***Вход:*** *Временной ряд* $\mathbb{X}$, *длина окна* L, *ранг* r, *матрица* $\mathbf{C} = \mathrm{diag}(c_1, \ldots, c_K)$, *где* $K = N - L + 1$, *критерий остановки STOP1.*

Результат: *Ряд* $\widehat{\mathbb{S}}$ *как оценка аппроксимации* $\mathbb{X}$ *рядом конечного ранга* r.

1. $\mathbf{Y}_0 = \mathcal{T}\mathbb{X}$, $k = 0$.
2. $\mathbf{Y}_{k+1} = \Pi_{\mathcal{H}}\Pi_{\mathcal{M}_r}\mathbf{Y}_k$, $k \leftarrow k+1$, *где* $\Pi_{\mathcal{M}_r}$ *задан формулой* (8).
3. *Если STOP1, то* $\widehat{\mathbb{S}} = \mathcal{T}^{-1}\mathbf{Y}_k$.

Так как исходно задачей является аппроксимация временного ряда с равными весами, поставим задачу нахождения соответствующей матрицы $\mathbf{C}$. Оказывается такой невырожденной матрицы не существует, поэтому рассмотрим несколько вариантов.

4.4.1. Алгоритм Cadzow (α). Найдем такую матрицу $\mathbf{C}$, чтобы полунорма $\|\cdot\|_{\mathbf{C}}$ соотносилась с расстоянием с единичными весами $f_q(\mathbb{Y}) = f(\mathbb{Y})$, встречающимся в (11), то есть для $\mathbf{M}$ выполнялись условия предложения 3 и равенство (16) при $q_i = 1$, $i = 1, \ldots, N$.

Воспользуемся следующей леммой.

Лемма 1 ([14]). *Пусть* $\mathbb{X} \in \mathsf{X}_N$, $\mathbf{X} = \mathcal{T}(\mathbb{X}) \in \mathsf{R}^{L\times K}$. *Если* $h = N/L$ *— целое, тогда* $\mathrm{tr}(\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{X}^{\mathrm{T}}) = \mathbb{X}^{\mathrm{T}}\mathbb{X}$, *где* $\mathbf{C}$ *— диагональная матрица со следующими диагональными элементами:*

$$c_k = \begin{cases} 1, & \textit{если} \quad k = jL+1 \quad \textit{для некоторого} \quad j = 0, \ldots, h-1, \\ 0, & \textit{в противном случае} \end{cases}.$$

Существенная проблема, которая встречается при этом подходе — нулевые элементы на диагоналях матрицы $\mathbf{C}$. Таким образом, ранг матрицы $\mathbf{C}$ заведомо меньше K. В [14] предложено заменить нули на диагоналях на некоторое малое α, чтобы исправить проблему.

Положим

$$c_k = \begin{cases} 1, & \text{если} \quad k = jL+1 \quad \text{для некоторого} \quad j = 0, \ldots, h-1, \\ \alpha, & \text{в противном случае,} \end{cases} \tag{19}$$

Это исправляет проблему ранга, но, как будет видно дальше на численных примерах, делает сходимость метода, решающего задачу (11), медленной.

Будем называть алгоритм 5 с матрицей $\mathbf{C}$, заданной в (19), алгоритмом Cadzow(α).

Вырожденный случай $\alpha = 0$. Используя соотношение (17) и взяв $\mathbf{C}$ с $\alpha = 0$, мы получим следующую $\mathbf{M}$:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \cdots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, расстояние берется только по h столбцам вместо K, а домножение на $\mathbf{O}_{\mathbf{C}}^{\mathrm{T}}$ обнуляет у матрицы $\mathbf{C}$ $K-h$ столбцов.

Замечание 3. *Оптимизационная задача с $\alpha=0$ соответствует поиску произвольной, не обязательно ганкелевой, матрицы ранга, не превосходящего r, ближайшей по фробениусовой норме к матрице*

$$\begin{pmatrix} x_1 & x_{L+1} & \cdots & x_K \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ x_L & x_{2L} & \cdots & x_N \end{pmatrix}. \tag{20}$$

Эта задача отличается от задачи аппроксимации рядами конечного ранга.

При $\alpha=1$ метод Cadzow(α) совпадает с обычным методом Cadzow.

4.4.2. Алгоритм Cadzow с $\widehat{\mathbf{C}}$. Подойдем к задаче со стороны матриц: найдем матрицу $\mathbf{C}$ такую, что полученная норма $\|\cdot\|_{\mathbf{C}}$ будет наиболее близка к матрице $\mathbf{M}$, полученной в (18). Как уже упоминалось, нас устроит только диагональная $\mathbf{C}$. Рассмотрим множество $\mathsf{Z}^{L\times K}\subset\mathsf{R}^{L\times K}$ — матрицы, у которых элементы в столбцах равны. Разумным выбором станет матрица $\mathbf{Z}\in\mathsf{R}^{L\times K}$, $\mathbf{Z}=(z_{l,k})$, $z_{l,k}=c_k$ такая, что

$$\|\mathbf{M}-\mathbf{Z}\|\to\min_{\mathbf{Z}\in\mathsf{Z}^{L\times K}}.$$

Решение сводится к усреднению элементов матрицы $\mathbf{M}$ по столбцам. В итоге, полученная матрица $\widehat{\mathbf{C}}$ будет иметь следующие диагональные элементы:

$$\hat{c}_k=\frac{1}{L}\sum_{l=1}^{L}m_{l,k}. \tag{21}$$

Будем называть алгоритм 5 с матрицей $\mathbf{C}=\widehat{\mathbf{C}}$, алгоритмом Cadzow $\widehat{\mathbf{C}}$.

4.4.3. Соответствие между алгоритмами и весами q_i в (11). Обозначим веса $q(\alpha)$ и $\hat{q}_i$, которые порождаются матрицей $\mathbf{C}$ в алгоритмах Cadzow (α) и Cadzow с $\widehat{\mathbf{C}}$ соответственно.

Справедливы следующие утверждения.

Предложение 5. *Пусть $h=N/L$ — целое, и матрица $\mathbf{C}$ — диагональная с диагональными элементами, заданными в (19), где $0\le\alpha\le1$. Тогда веса $q_i(\alpha)$, определенные в (16), выглядят следующим образом:*

$$q_i(\alpha)=\begin{cases}1+(i-1)\alpha & \text{для } i=1,\ldots,L-1,\\ 1+(L-1)\alpha & \text{для } i=L,\ldots,K-1,\\ 1+(N-i)\alpha & \text{для } i=K,\ldots,N.\end{cases}$$

Доказательство предложения 5. Достаточно просуммировать c_k число раз, равное размеру i-й побочной диагонали.

Предложение 6. *Матричные веса $\hat{c}_k$, определенные в (21), равны*

$$\hat{c}_k=\begin{cases}\frac{1}{L}\left(\frac{k}{L}+\sum_{j=k}^{L-1}\frac{1}{j}\right), & k=1,\ldots,L-1,\\ \hat{c}_{N-k+1,N-k+1}, & k=K-L+2,\ldots K,\\ 1/L, & \text{в противном случае.}\end{cases}$$

Доказательство предложения 6. Достаточно подставить в (21) $m_{l,k}$, определенные в (18).

Для иллюстрации того, как выглядят веса $\hat{q}_i$, сформулируем утверждение в условиях, которые упрощают доказательство.

Предложение 7. *Пусть $N \geq 4(L-1)$. Тогда веса $\hat{q}_i$, определенные в (16), выглядят следующим образом:*

$$\hat{q}_i = \begin{cases} \frac{i(i+1)}{2L^2} + \frac{i}{L}(1 + H_{L-1} - H_i), & 1 \leq i \leq L-1, \\ 1 + \frac{2iL-i-i^2}{2L^2} + \frac{L-i}{L}(H_{L-1} - H_{i-L}), & L \leq i \leq 2L-1, \\ \hat{q}_{N-i+1}, & N-2L+2 \leq i \leq N, \\ 1, & \textit{в противном случае}, \end{cases}$$

где $H_0 = 0$, а $H_i = \sum_{j=1}^{i} 1/j$ — i-е гармоническое число.

Доказательство предложения 7. Для $1 \leq i \leq L-1$, имеем

$$\hat{q}_i = \sum_{j=1}^{i} \hat{c}_j = \sum_{j=1}^{i} \frac{1}{L}\left(\frac{j}{L} + \sum_{k=j}^{L-1} 1/k\right) = \frac{i(i+1)}{2L^2} + \frac{1}{L}\sum_{k=1}^{L-1}\sum_{j=1}^{\min(k,i)} 1/k =$$

$$= \frac{i(i+1)}{2L^2} + \frac{1}{L}\sum_{k=1}^{L-1}\frac{\min(k,i)}{k} = \frac{i(i+1)}{2L^2} + \frac{i}{L}(1 + H_{L-1} - H_i).$$

Для $L \leq i \leq 2L-1$, тоже используя изменение порядка суммирования, получаем

$$\hat{q}_i = \sum_{j=1}^{L} \hat{c}_{i-L+j} = \sum_{j=i-L+1}^{L-1} \hat{c}_j + \frac{i-L+1}{L} =$$

$$= \frac{i-L+1}{L} + \frac{1}{L^2}\sum_{j=i-L+1}^{L-1} j + \frac{1}{L}\sum_{j=i-L+1}^{L-1}\sum_{k=j}^{L-1} 1/k =$$

$$= \frac{i-L+1}{L} + \frac{2iL- = i - i^2}{2L^2} + \frac{1}{L}\sum_{k=i-L+1}^{L-1}\sum_{j=i-L+1}^{k} 1/k =$$

$$= 1 + \frac{2iL-i-i^2}{2L^2} + \frac{L-i}{L}(H_{L-1} - H_{i-L}).$$

Для правой части ряда веса будут симметрично отраженными, а для центральной необходимо L раз просуммировать $\hat{c}_k = 1/L$.

Отнормированные веса $q_i(\alpha)$ (так, чтобы сумма была равна 1) при $\alpha = 1$ (стандартный алгоритм Cadzow), $\alpha = 0$ (равные веса q_i) и $\alpha = 0.1$, а также $\hat{q}_i$ при $N = 40$, $L = 8$ представлены на рисунке 1.

4.5. Комментарии к алгоритмам. Сравнение

Итак, в дальнейшем будем рассматривать и сравнивать методы Weighted Cadzow, Extended Cadzow, Cadzow (α), $0 < \alpha \leq 1$, совпадающий с обычным методом Cadzow при $\alpha = 1$, и Cadzow с $\widehat{\mathbf{C}}$. Заметим, что длина окна L является параметром всех рассматриваемых методов.

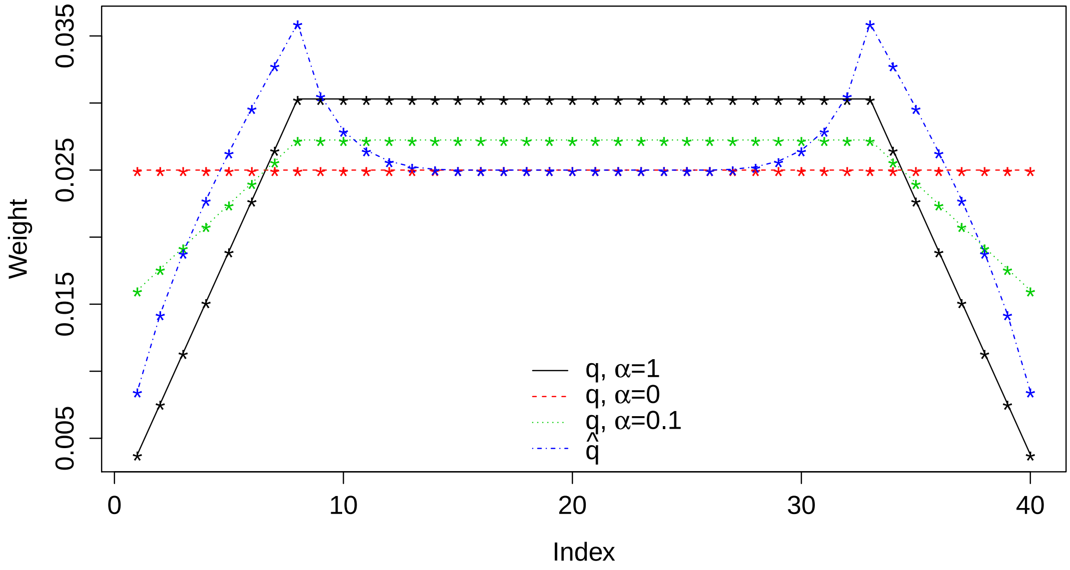

Рис. 1. Веса ряда

- Все методы итеративные и, вообще говоря, они не обязаны сходится к глобальному экстремум в задаче МНК (теоретически, даже сходимость можно иметь место только по подпоследовательностям; однако, во всех проведенных численных экспериментах сходимость имела место). Поэтому сравнение методов, даже решающих одну и ту же задачу, по точности имеет смысл.

- Сходимость методов по подпоследовательностям имеет место в предположении, что внутренние задачи проектирования в методах Weighted и Extended Cadzow решаются точно. Это напрямую следует из утверждения теоремы 1 для всех методов кроме Extended Cadzow, у которого веса являются частично нулевыми. Однако заметим, что матрицы $\tilde{\mathbf{Y}}_k$, которые содержат столбцы матриц $\Pi_{\mathcal{M}_r}\mathbf{Y}_k$ с L-го по N-ый и каждый элемент которых имеет положительный вес, являются матрицами ранга, не превосходящего r, их фробениусова норма не превосходит полунормы исходной матрицы: $\|\tilde{\mathbf{Y}}_k\|_F \le \|\Pi_{\mathcal{M}_r}\mathbf{Y}_k\|_{\mathbf{M}}$, следовательно, эта ограниченная последовательность и у нее существует сходящаяся к нужному множеству подпоследовательность.

- Нас интересует сравнение методов не по достигаемому минимуму в задаче МНК, а по точности оценивания выделяемого сигнала $\mathbf{S}$. Вполне возможно, что слишком хорошая аппроксимация исходного ряда может привести к переподгонке, результатом которой может явиться ухудшение качества оценивания сигнала.

- Методы Weighted Cadzow и Extended Cadzow решают задачу (11) с единичными весами q_i. Остальные методы решат задачу с весами, отличающимися от равных в той или иной степени.

- Однако каждая итерация методов Weighted Cadzow и Extended Cadzow отличается повышенной трудоемкостью, так как использует еще один итеративный алгоритм на каждой основной итерации.

- Трудоемкость методов определяется как трудоемкостью одной итерации, так и числом итераций. Поэтому с этой точки зрения скорость сходимости представляет значительный интерес.

- На примере обычного метода Cadzow, известно, что при решении реальных задач одна итерация может представлять значительный интерес, как по трудоемкости, так и по широкому спектру решаемых задач. А именно, одна итерация метода Cadzow — это известным метод Singular Spectrum Analysis (SSA), который умеет решать существенно большее число задач, чем сам итеративный метод. Поэтому представляет интерес также точность оценивания сигнала, выполненная с помощью одной итерации во всех рассматриваемых методах.

- В методе SSA есть понятие разделимости, которое определяет свойство метода (приближенно) находить сигнал по наблюдаемой сумме. Тем самым разделимость тесно связана с точностью первой итерации итеративного метода. В свою очередь, естественно предположить, что точность первой итерации связана со скоростью сходимости метода. Поэтому вопросы разделимости имеют отношение к скорости сходимости итеративных алгоритмов.

- Связь разделимости с длиной окна L для метода SSA хорошо изучена (см., например, [15]). А именно, оптимальная длина окна близка к половине длины ряда. Маленькие длины окна L приводят к плохой разделимости. Влияние параметра α в классе алгоритмов Cadzow (α) на разделимость исследуется в приложении (раздел 7.) на примере разделения константы и гармоники. Там показано, что малые значения α приводят к плохой разделимости, хотя именно они соответствуют примерно равным весам q_i в задаче (11). В целом, виден следующий эффект: параметры, соответствующие более равномерным весам, приводят к худшей разделимости.

- Вполне возможно, что хорошая скорость сходимости и точность оценивания сигнала являются свойствами, которые не выполняются одновременно, как в силу противоречия между равномерностью весов и разделимостью, так и потому что медленная сходимость вполне может привести к сходимости алгоритма к лучшему значению оптимизационной задачи.

Замечание 4. *Во всех алгоритмах к* $\widehat{\mathbb{S}}$ *можно применить поправку* (12), *где* $\|\cdot\|$ *— обычная евклидова норма независимо от алгоритма, так как она согласуется с задачей* (11) *с равными весами* q_i. *Полученные алгоритмы будем называть алгоритмами с поправкой. Например, результат работы* k*-й итерации алгоритма Cadzow можно записать как* $\widehat{\mathbb{S}}_k = \mathcal{T}^{-1}(\Pi_{\mathcal{H}}\Pi_{\mathcal{M}_r})^k\mathcal{T}\mathbb{X}$. *Тогда результат* k*-й итерации алгоритма Cadzow с поправкой имеет вид* $\widehat{\mathbb{S}}_k^* = \mathcal{A}(\widehat{\mathbb{S}}_k)$.

5. Численные эксперименты

В этом разделе мы приведем численные результаты, призванные продемонстрировать указанные выше выводы и соображения. Сравнение было проведено для случая выделения синуса и экспоненциально-модулированного синуса. Так как результаты, в целом, аналогичны, мы приведем только результаты, полученные для выделения гармонического ряда.

Был взят следующий сигнал:

$$\mathbb{S} = (s_1, \ldots, s_N), \qquad s_i = 5 \sin \frac{2\pi k}{6}, \quad k = 1, \ldots, N, \quad N = 40$$

и рассматривался ряд в виде $\mathbb{X} = \mathbb{S} + \mathbb{N}$, где $\mathbb{N}$ — гауссовский белый шум с математическим ожиданием 0 и дисперсией, равной 1. Точность оценивания сигнала оценивалась с помощью корня из среднего по точкам ряда и по 1000 реализациям ряда среднеквадратического отклонения (СКО) $\widehat{\mathbb{S}}$ от сигнала $\mathbb{S}$. Эту меру будем называть RMSE (root mean square error) оценки сигнала. Сравнение проводилось на одних и тех же реализациях исходного ряда. Результаты сравнения являются значимыми при уровне значимости 5%.

Рассмотрим сначала класс методов Oblique Cadzow, включающий в себя и обычный метод Cadzow. Рисунок 2 показывает одновременно скорость сходимости для разных значений параметра α и двух разных длин окна L. По оси x откладывается номер итерации, по оси y — RMSE оценки сигнала, деленное на число точек в ряде.

В пределе самым лучших оказался самый медленно сходящийся метод, а именно, из рассмотренных методов это Cadzow (0.1) с длиной окна $L = 8$. Этот метод также соответствует наиболее равномерным весам из рассматриваемых в примере. Заметим, что точность всех рассматриваемых методов различается не очень сильно, от 0.33 ($\alpha = 0.1$, $L = 8$) в лучшем случае до 0.37 в худшем ($\alpha = 1$, $L = 20$). Однако в первом случае ошибка 0.38 достигается уже на первой итерации, в то время как во втором для достижения ошибки 0.38 требуется около 4–5 итераций.

Рассмотрим более подробно распределение ошибки по элементам ряда При этом включим в рассмотрение и методы Extended и Weighted. В качестве критерия остановки STOP1 для основных итераций будем использовать в алгоритмах число итераций, равное 100 (полученные результаты можно считать предельными), а для внутренних итераций критерий STOP2 будет иметь вид $\frac{\|\mathbf{Y}_k - \mathbf{Y}_{k+1}\|^2}{LK} < 10^{-4}$. Начальные левые и правые добавленные точки $\mathbb{L}_{L-1}$ и $\mathbb{R}_{L-1}$ в методе Extended Cadzow строились с помощью векторного SSA прогноза [8, раздел 2.3.1].

Возьмем длину окна $L = 20$. На рисунках 3 и 4 по оси x откладывается номер точки ряда, а по оси y — RMSE от истинного значения сигнала в данной точке. Рисунок 3 показывает ошибки на первой итерации, а рисунок 4 — на итерации с номером 100. Видно, что в обоих случаях самым точным оказывается метод Extended Cadzow. Из методов, не имеющих внутренних итераций, на первой итерации выигрывают методы обычный Cadzow и Cadzow с $\widehat{\mathbf{C}}$. В пределе (после 100-й итерации результаты практически не меняются) наилучшим из них, что не удивительно после анализа рисунка 2, оказался Cadzow с $\alpha = 0.1$.

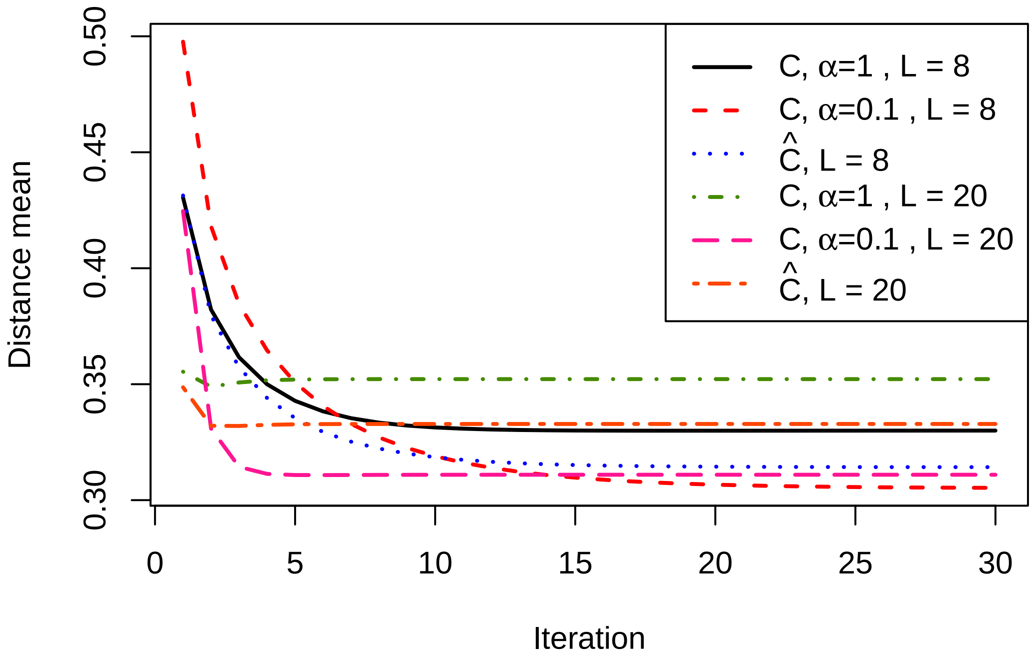

Рис. 2. RMSE оценки сигнала в зависимости от числа итераций.

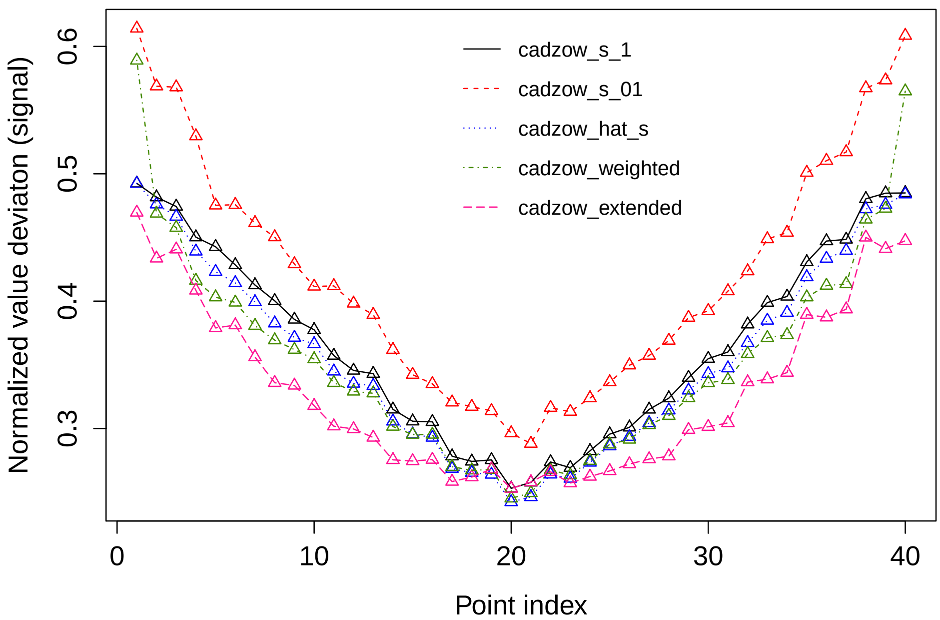

Рис. 3. RMSE оценки сигнала в каждой точке ряда на одной итерации.

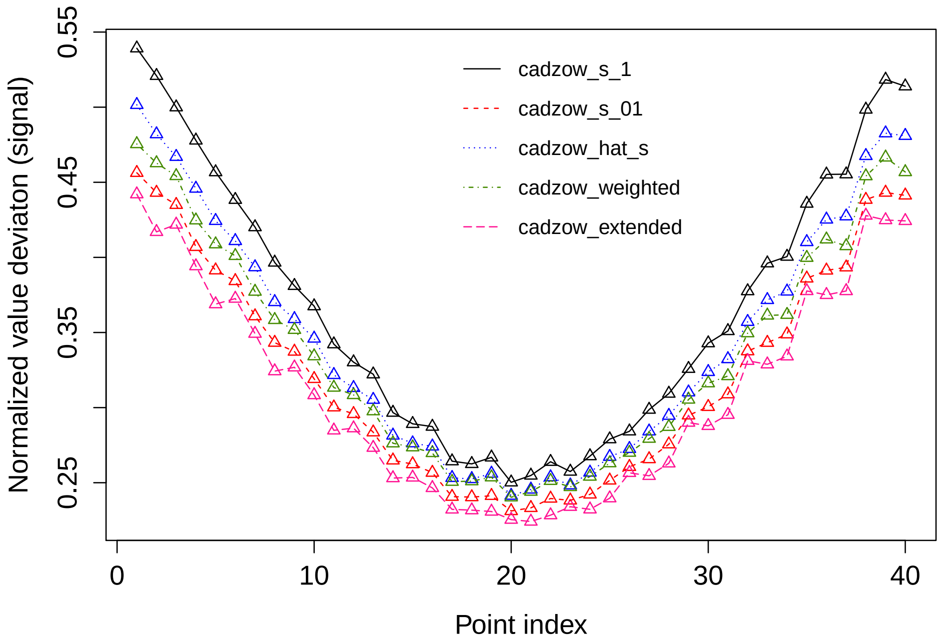

Рис. 4. RMSE оценки сигнала в каждой точке ряда на ста итерациях.

Приведем таблицу 1, где отражены результаты методов, а именно, RMSE как меры отклонения от сигнала и исходного ряда на одной и 100 итерациях. В таблице k — число итераций, $\mathbb{S}$ — сигнал, $\mathbb{X}$ — исходный ряд; $L = 20$. Таблица подтверждает выводы по сравнению методов по точности оценивания сигнала. Также видно, что качество аппроксимации исходного ряда не всегда согласуется с качеством оценивания сигнала. Например, для Cadzow с $\alpha = 0.1$ на первой итерации явно видна переподгонка. Однако в пределе упорядоченность точности аппроксимации и точности оценки сигнала одинаковые.

В таблице 2 содержатся аналогичные измерения для рядов с поправкой (см. замечание 4). Видно, что поправка влияет незначительно (графики для результатов методов с поправкой мы не приводим, так как визуально влияние поправки незаметно). Аппроксимацию ряда поправка улучшает (не ухудшает) во всех случаях, как и должно быть по ее построению. На точность оценивания сигнала поправка влияет неоднозначно. На 100-ой итерации она улучшает точность, а на 1-й результаты разные.

Таблица 1. Сравнение алгоритмов по RMSE.

P:	$\mathbb{S}$, $k = 1$	$\mathbb{X}$, $k = 1$	$\mathbb{S}$, $k = 100$	$\mathbb{X}$, $k = 100$
Cadzow, $\alpha = 1$	0.3758	0.9195	0.3782	0.9664
Cadzow, $\alpha = 0.1$	0.4329	0.7040	0.3311	0.9506
Cadzow $\hat{\mathbf{C}}$	0.3655	0.8925	0.3559	0.9583
Weighted Cadzow	0.3644	0.8891	0.3455	0.9549
Extended Cadzow	0.3361	0.9030	0.3189	0.9471

Таблица 2. Сравнение алгоритмов с поправкой по RMSE.

P:	$\mathbb{S}$, $T=1$	$\mathbb{X}$, $T=1$	$\mathbb{S}$, $T=100$	$\mathbb{X}$, $T=100$
Cadzow, $\alpha=1$	0.3714	0.9175	0.3667	0.9622
Cadzow, $\alpha=0.1$	0.4385	0.7023	0.3276	0.9493
Cadzow $\hat{\mathbf{C}}$	0.3626	0.8909	0.3478	0.9555
Weighted Cadzow	0.3640	0.8883	0.3380	0.9523
Extended Cadzow	0.3370	0.9030	0.3184	0.9469

6. Заключение

В работе были рассмотрены известные итеративные алгоритмы и предложены новые для аппроксимации ряда рядами конечного ранга с целью оценивания сигнала в зашумленном ряде по взвешенному методу наименьших квадратов.

Был рассмотрен довольно широкий набор алгоритмов с целью получить равные веса в МНК. В рассматриваемых алгоритмах равные веса удалось получить только с помощью вложенных итераций, которые сходятся только к локальному экстремуму и вдобавок делают алгоритм очень трудоемкими. Итеративные методы без вложенных итераций дают только приближенно равные веса.

Для рассматриваемого класса алгоритмов типа алгоритмов Cadzow была доказана сходимость внешних итераций алгоритмов по подпоследовательностям.

На примере зашумленного синуса с помощью моделирования были получены результаты по точности и скорости сходимости предлагаемых алгоритмов. Результаты показали, что самым точным оказывается самый трудоемкий метод. Были рассмотрены вопросы соотношения скорости сходимости, трудоемкости и точности методов. Акцент был сделан также на точности оценки с помощью одной итерации методов.

В дальнейшем предполагается провести расширенное численное и аналитическое исследование методов и получить более конкретные рекомендации по соотношению трудоемкости и точности алгоритмов.

Список литературы

1. Cadzow J. A. Signal enhancement: a composite property mapping algorithm // IEEE Trans. Acoust. 1988. Vol. 36, no. 1. P. 49–62.
2. Markovsky I. Low Rank Approximation: Algorithms, Implementation, Applications. Springer, 2011.
3. Usevich K., Markovsky I. Variable projection for affinely structured low-rank approximation in weighted 2-norms // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2014. Vol. 272, no. 0. P. 430 – 448.
4. Gillard J., Zhigljavsky A. Optimization challenges in the structured low rank approximation problem // Journal of Global Optimization. 2013. Vol. 57, no. 3. P. 733–751.
5. Broomhead D., King G. Extracting qualitative dynamics from experimental data // Physica D. 1986. Vol. 20. P. 217–236.

6. Vautard R., Yiou P., Ghil M. Singular-Spectrum Analysis: A toolkit for short, noisy chaotic signals // Physica D. 1992. Vol. 58. P. 95–126.
7. Elsner J. B., Tsonis A. A. Singular Spectrum Analysis: A New Tool in Time Series Analysis. Plenum, 1996.
8. Golyandina N., Nekrutkin V., Zhigljavsky A. Analysis of Time Series Structure: SSA and Related Techniques. Chapman&Hall/CRC, 2001.
9. Advanced spectral methods for climatic time series / M. Ghil, R. M. Allen, M. D. Dettinger et al. // Rev. Geophys. 2002. Vol. 40, no. 1. P. 1–41.
10. Golyandina N., Zhigljavsky A. Singular Spectrum Analysis for time series. Springer Briefs in Statistics. Springer, 2013.
11. Chu M. T., Funderlic R. E., Plemmons R. J. Structured low rank approximation // Linear Algebra and its Applications. 2003. Vol. 366, no. 0. P. 157 – 172. Special issue on Structured Matrices: Analysis, Algorithms and Applications.
12. Golyandina N., Shlemov A. Variations of singular spectrum analysis for separability improvement: non-orthogonal decompositions of time series. 2013. arXiv:1308.4022.
13. Srebro N., Jaakkola T. et al. Weighted low-rank approximations // ICML. Vol. 3. 2003. P. 720–727.
14. Gillard J., Zhigljavsky A. A. Stochastic algorithms for solving structured low-rank matrix approximation problems // Communication in Nonlinear Science and Numerical Simulation. 2014.
15. Golyandina N. On the choice of parameters in singular spectrum analysis and related subspace-based methods // Stat. Interface. 2010. Vol. 3, no. 3. P. 259–279.

7. Приложение: Разделимость константы и гармоники для двух алгоритмов Oblique Cadzow

Введем еще одну характеристику алгоритмов, показывающую, насколько хорошо они раскладывают временной ряд на его аддитивные компоненты. Основным применением описанных алгоритмов является задача оценки сигнала, поэтому данное качество нам важно для получения как можно более точной оценки.

Пусть $\mathbf{C} \in \mathsf{R}^{K\times K}$ — симметричная неотрицательно определенная матрица, $\mathbb{X}_1$ и $\mathbb{X}_2$ — два разных временных ряда длины N, $\mathbf{X}^1$, $\mathbf{X}^2$ — их траекторные матрицы. Тогда *коэффициентом корреляции i-го и j-го столбца* назовем следующую величину:

$$\rho^c_{i,j} = \frac{(X^1_i, X^2_j)}{\|X^1_i\|\|X^2_j\|}, \tag{22}$$

где X^k_i — i-й столбец матрицы $\mathbf{X}^k$, $k = 1, 2$, $(\cdot, \cdot)$ — евклидово скалярное произведение, $\|\cdot\|$ — евклидова норма. *Коэффициентом корреляции i-й и j-й строки* назовем следующую величину:

$$\rho^r_{i,j} = \frac{(X^{1,i}, X^{2,j})_\mathbf{C}}{\|X^{1,i}\|_\mathbf{C}\|X^{2,j}\|_\mathbf{C}}, \tag{23}$$

где $X^{k,i}$ — i-я строчка матрицы $\mathbf{X}^k$, $k = 1, 2$, а $(\cdot, \cdot)_\mathbf{C}$ — скалярное произведение с матрицей $\mathbf{C}$ в R^K, определенная следующим образом: $(X, Y)_\mathbf{C} = X\mathbf{C}Y^\mathsf{T}$, так как X, Y — вектор-строчки, $\|\cdot\|_{\mathbf{C}}$ — норма, порожденная этим скалярным произведением. Скажем, что ряды $\mathbb{X}_1$ и $\mathbb{X}_2$ *слабо ε—разделимы*, если

$$\rho = \max\left(\max_{1\le i,j\le K}|\rho^c_{i,j}|, \max_{1\le i,j\le L}|\rho^r_{i,j}|\right) < \varepsilon. \tag{24}$$

Нас будет интересовать порядок ε при различных матрицах $\mathbf{C}$ и рядах $\mathbb{X}_1 = (c, c, \ldots)$ — некоторая константа и $\mathbb{X}_2 = (\cos(2\pi\omega k), k = 1, 2, \ldots)$, а также при различных L и K при условии, что мы будем брать только $N = L + K - 1$ компонент ряда. Когда $\mathbf{C}$ единичная матрица, ответ известен: ε имеет порядок $1/\min(L, K)$, т.е. скорость сходимости имеет порядок $1/N$ при L, пропорциональном N. Этот результат может быть найден в [8, Раздел 6.1]. Он имеет отношение к точности первой итерации метода Cadzow.

В следующем утверждении рассматривается порядок разделимости для алгоритма Cadzow (α), введенном в разделе 4.4.1..

Предложение 8. *Пусть $\mathbb{X}_1 = (c, c, \ldots)$ — некоторая константа и $\mathbb{X}_2 = (\cos(2\pi\omega k), k = 1, 2, \ldots)$, где $0 < \omega < 0.5$, $L, K \to \infty$ так, что $h = h_L = N/L$, где $N = L + K - 1$, — целое, и $\mathbf{C}$ определена в алгоритме Cadzow (α), т.е. $\mathbf{C}$ — диагональная матрица со следующими диагональными элементами:*

$$c_k = \begin{cases} 1, & \text{если} \quad k = jL + 1 \quad \text{для некоторого } j = 0, \ldots, h-1, \\ \alpha, & \text{в противном случае,} \end{cases}$$

где $0 \le \alpha \le 1$. Тогда ρ имеет порядок $\max(\frac{1}{L}, \frac{(1-\alpha)C_{L,K}+\alpha}{(1-\alpha)N/L+\alpha K})$, где порядок $C_{L,K}$ может может меняться от $O(1)$ до $O(N/L)$ в зависимости от того, как K стремятся к бесконечности.

Доказательство предложения 8. Необходимо оценить порядки следующих величин:

$$\rho^c_{i,j} = \frac{\sum_{k=j}^{j+L-1}\cos(2\pi\omega k)}{\sqrt{L(\sum_{k=j}^{j+L-1}\cos^2(2\pi\omega k))}},$$

$$\rho^r_{i,j} = \frac{\sum_{k=1}^{K} c_k\cos(2\pi\omega(j+k-1))}{\sqrt{(\sum_{k=1}^{K} c_k)(\sum_{k=1}^{K} c_k\cos^2(2\pi\omega(j+k-1)))}}.$$

Для доказательства используем следующие факты:

$$\sum_{k=1}^{n}\cos(ak+b) = \csc(a/2)\sin(an/2)\cos\left(\frac{an+a+2b}{2}\right),$$

$$\sum_{k=1}^{n}\cos^2(ak+b) = \frac{1}{4}(\csc(a)\sin(2an+a+2b)- \\ -\csc(a)\sin(a+2b)+2n),$$

для любых вещественных a, b и положительного целого n. Таким образом, когда ряд $\mathbb{X}_2$ не представляет из себя константу, числитель в $\rho^c_{i,j}$ имеет порядок $O(1)$, а знаменатель — $O(L)$. Первая часть доказана, и ее доказательство целиком аналогично случаю, когда $\mathbf{C}$ — единичная матрица.

Для доказательства второй части выделим отдельно сумму по тем k, для которых $c_k = 1$:

$$\sum_{k=1}^{K} c_k \cos(2\pi\omega(j+k-1)) = (1-\alpha) \sum_{\substack{1\le k\le K:\\ c_k=1}} \cos(2\pi\omega(j+k-1)) +$$
$$+ \sum_{1\le k\le K} \alpha \cos(2\pi\omega(j+k-1)) = (1-\alpha)C_{L,K} + \alpha\, O(1),$$
$$\sum_{k=1}^{K} c_k = (1-\alpha)N/L + \alpha K,$$
$$\sum_{k=1}^{K} c_k \cos^2(2\pi\omega(j+k-1)) = (1-\alpha) \sum_{\substack{1\le k\le K:\\ c_k=1}} \cos^2(2\pi\omega(j+k-1)) +$$
$$+ \sum_{1\le k\le K} \alpha \cos^2(2\pi\omega(j+k-1)) = (1-\alpha)O(N/L) + \alpha\, O(K).$$

В худшем случае, если $L\omega$ целое, получаем, что $\cos(2\pi\omega(j+k-1))$ равно одной и той же константе независимо от j и k, и тогда $C_{L,K}$ имеет порядок $O(N/L)$.

Таким образом, даже в лучшем случае, когда $C_{L,K}$ имеет порядок $O(1)$, разделимость константы и синуса становится хуже, чем при обычном варианте: при α, близких к нулю, оптимальным выбором L будет $L \approx \sqrt{N}$, и, таким образом, получаем порядок разделимости $1/\sqrt{N}$.

Теперь рассмотрим алгоритм Cadzow с $\widehat{\mathbf{C}}$, введенный в разделе 4.4.2..

Предложение 9. *Пусть* $\mathbb{X}_1 = (c, c, \ldots)$ *— некоторая константа и* $\mathbb{X}_2 = (\cos(2\pi\omega k), k = 1, 2, \ldots)$*, где* $0 < \omega < 0.5$*,* $L, K \to \infty$ *и* $\mathbf{C}$ *определена в алгоритме Cadzow с* $\widehat{\mathbf{C}}$*. Тогда* ρ *имеет порядок* $\max\left(1/L, \frac{H_L}{\sqrt{NK}}\right)$ *при* $L, K \to \infty$*, где* H_L *—* L*-е гармоническое число.*

Доказательство предложения 9. Необходимо оценить порядки следующих величин:

$$\rho^c_{i,j} = \frac{\sum_{k=j}^{j+L-1} \cos(2\pi\omega k)}{\sqrt{L(\sum_{k=j}^{j+L-1} \cos^2(2\pi\omega k))}},$$
$$\rho^r_{i,j} = \frac{\sum_{k=1}^{K} \hat{c}_k \cos(2\pi\omega(j+k-1))}{\sqrt{(\sum_{k=1}^{K} \hat{c}_k)(\sum_{k=1}^{K} \hat{c}_k \cos^2(2\pi\omega(j+k-1)))}}.$$

Порядок $\rho^c_{i,j}$ уже был получен в доказательстве предложения 8, поэтому сразу перейдем к $\rho^r_{i,j}$. Рассмотрим корреляцию только первых строчек — для остальных доказательство будет целиком аналогичным. Рассмотрим числитель $\rho^r_{1,1}$:

$$\sum_{k=1}^{K} \hat{c}_k \cos(2\pi\omega k) = \sum_{k=1}^{L-1} \hat{c}_k \cos(2\pi\omega k) + \sum_{k=L}^{K-L+1} \frac{\cos(2\pi\omega k)}{L} +$$
$$+ \sum_{k=K-L+2}^{K} \hat{c}_k \cos(2\pi\omega k) = I_1 + I_2 + I_3,$$

который разбился на три части. Для I_2 справедлива оценка $O(1/L)$, а для I_3 доказательство аналогично доказательству для I_1:

$$|I_1| = \left| \sum_{k=1}^{L-1} \frac{1}{L} \left(\frac{k}{L} + \sum_{j=k}^{L-1} \frac{1}{j} \right) \cos(2\pi\omega k) \right| =$$
$$= \left| \sum_{k=1}^{L-1} \frac{k\cos(2\pi\omega k)}{L^2} + \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{L-1} \sum_{j=k}^{L-1} \frac{\cos(2\pi\omega k)}{j} \right| \leq$$
$$\leq \left| \sum_{k=1}^{L-1} \frac{k\cos(2\pi\omega k)}{L^2} \right| + \left| \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{L-1} \sum_{j=k}^{L-1} \frac{\cos(2\pi\omega k)}{j} \right|.$$

Используя тот факт, что

$$\sum_{k=1}^{n} k\cos(ak+b) = -\frac{1}{4}\csc^2(a/2)(-(n+1)\cos(an+b)+$$
$$+n\cos(an+a+b)+\cos b),$$

получаем:

$$\left| \sum_{k=1}^{L-1} \frac{k\cos(2\pi\omega k)}{L^2} \right| = O(1/L), \quad \left| \frac{1}{L} \sum_{k=1}^{L-1} \sum_{j=k}^{L-1} \frac{\cos(2\pi\omega k)}{j} \right| =$$
$$= \left| \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L-1} \sum_{k=1}^{j} \frac{\cos(2\pi\omega k)}{j} \right| \leq \left| \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{L-1} \frac{d}{j} \right| = O\left(\frac{H_L}{L} \right),$$

где d — некоторая константа.

Для знаменателя нужно рассмотреть следующие суммы:

$$\sum_{k=1}^{K} \hat{c}_k = N/L$$

по определению, а следующую составляющую просто оценить снизу:

$$\sum_{k=1}^{K} \hat{c}_k \cos^2(2\pi\omega(j+k-1)) \geq \sum_{k=1}^{K} \frac{1}{L} \cos^2(2\pi\omega(j+k-1)) = O\left(\frac{K}{L} \right).$$