



CSI-Lab



A Survey on Graph Neural Networks for Time Series: Forecasting, Classification, Imputation, and Anomaly Detection

PCC142 - Mineração de Dados

Prof: Anderson Almeida Ferreira

Aluno: Gabriel F. Costa

Vamos falar sobre...

1 ————— 2 ————— 3 ————— 4 ————— 5

Introdução

Revisão da
Literatura

Materiais e
Métodos

Resultados

Conclusão

Introdução

O alto volume de dados de séries temporais no século XXI, com fortes dependências temporais e espaciais, torna sua análise cada vez mais desafiadora.



Introdução

Limitação dos métodos tradicionais:

Modelos clássicos (ARIMA, VAR, etc.) e até mesmo redes neurais tradicionais (RNNs, CNNs, Transformers) possuem grande dificuldade em lidar com relações complexas entre múltiplas variáveis e dependências espaciais-temporais presentes em muitos cenários do mundo real, o que limita sua capacidade para prever, imputar ou detectar padrões de forma eficaz. Esses métodos assumem estrutura Euclidiana ou independência entre variáveis, o que não condiz com cenários reais.

Hipótese e solução:

O uso de Graph Neural Networks (GNNs) permite representar as dependências espaciais e temporais de forma explícita, utilizando grafos para estruturar os dados e melhor capturar padrões complexos.

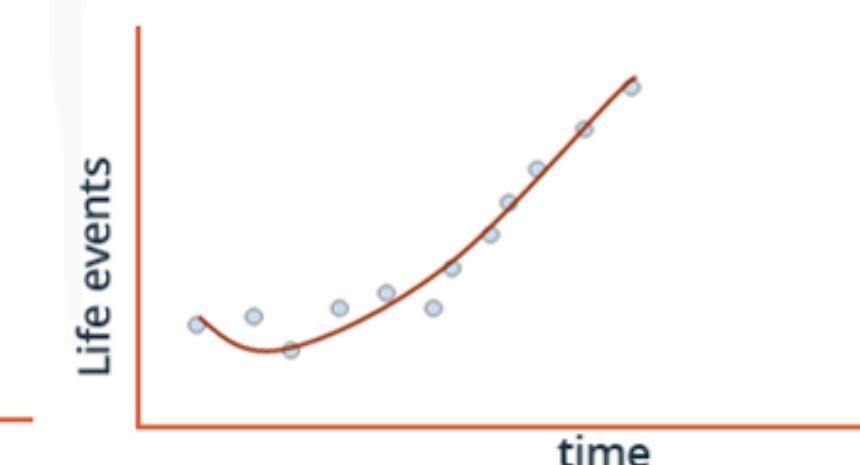
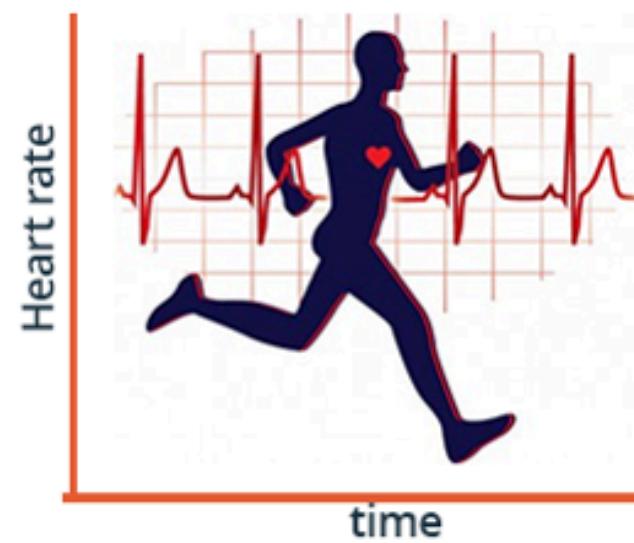
Introdução

Objetivos do artigo:

- Apresentar um *survey* abrangente e atual sobre o uso de GNNs para análise de séries temporais, incluindo as quatro principais tarefas:
 - Previsão (*forecasting*);
 - Classificação (*classification*);
 - Imputação (*imputation*);
 - Detecção de anomalias (*anomaly detection*).
- Fornecer uma taxonomia estruturada, discutir arquiteturas, aplicações e desafios.

What is a Time series?

Notion of a real world event as an abstraction of a sequence of timely activities.



Revisão da Literatura: Séries temporais

Revisão da Literatura: Séries temporais

1. Série Temporal Univariada
(amostrada regularmente):

$$\mathbf{X} = \{x_1, x_2, \dots, x_T\} \in \mathbb{R}^T$$

2. Série Temporal Univariada
(amostrada irregularmente):

$$\mathbf{X} = \{(t_1, x_1), (t_2, x_2), \dots, (t_T, x_T)\} \in \mathbb{R}^T$$

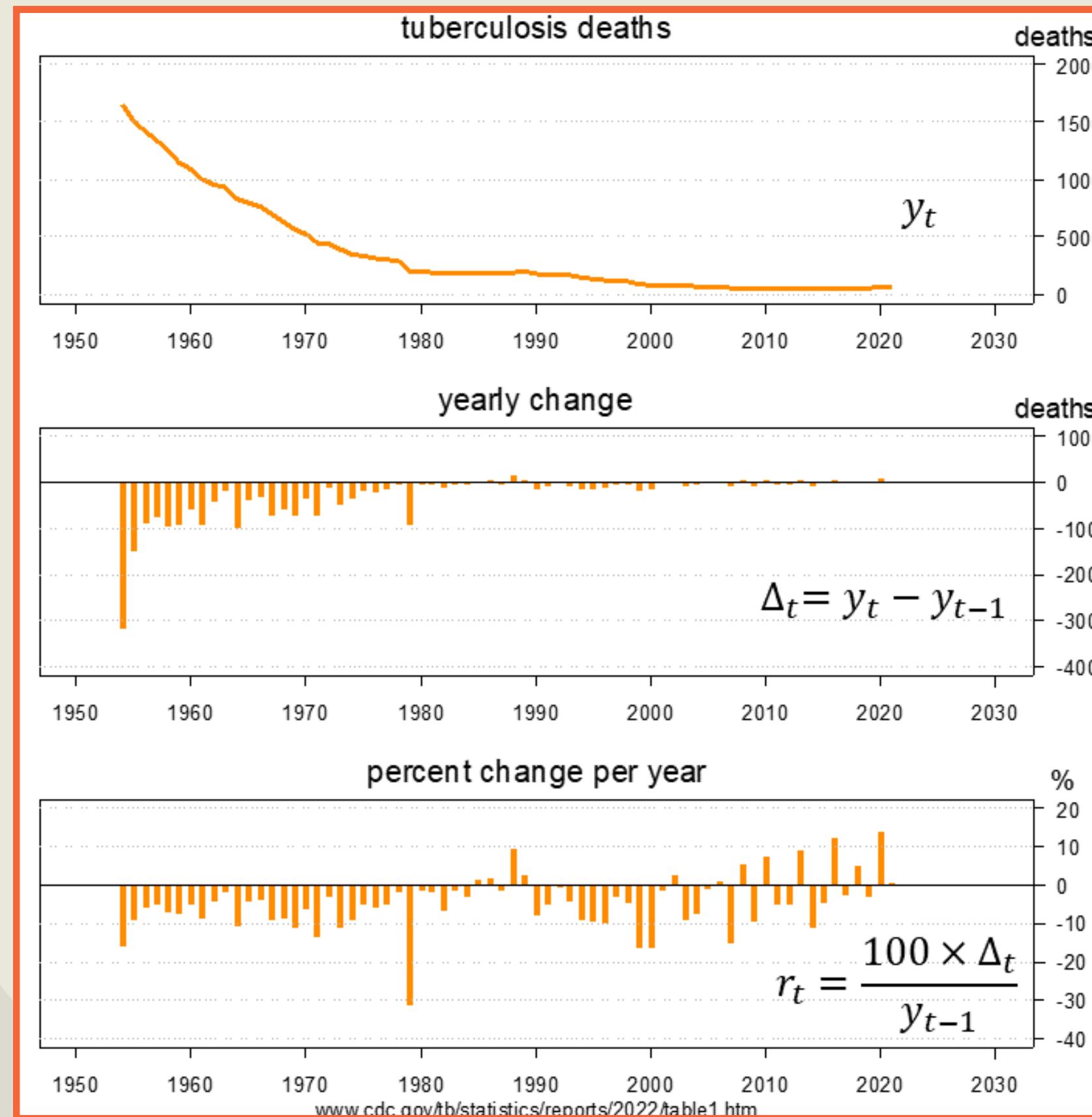
3. Série Temporal Multivariada
(amostrada regularmente):

$$\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_T\} \in \mathbb{R}^{N \times T}$$

4. Série Temporal Multivariada
(amostrada irregularmente):

$$\mathbf{X} = \{(t_1, \mathbf{x}_1), (t_2, \mathbf{x}_2), \dots, (t_T, \mathbf{x}_T)\} \in \mathbb{R}^{N \times T}$$

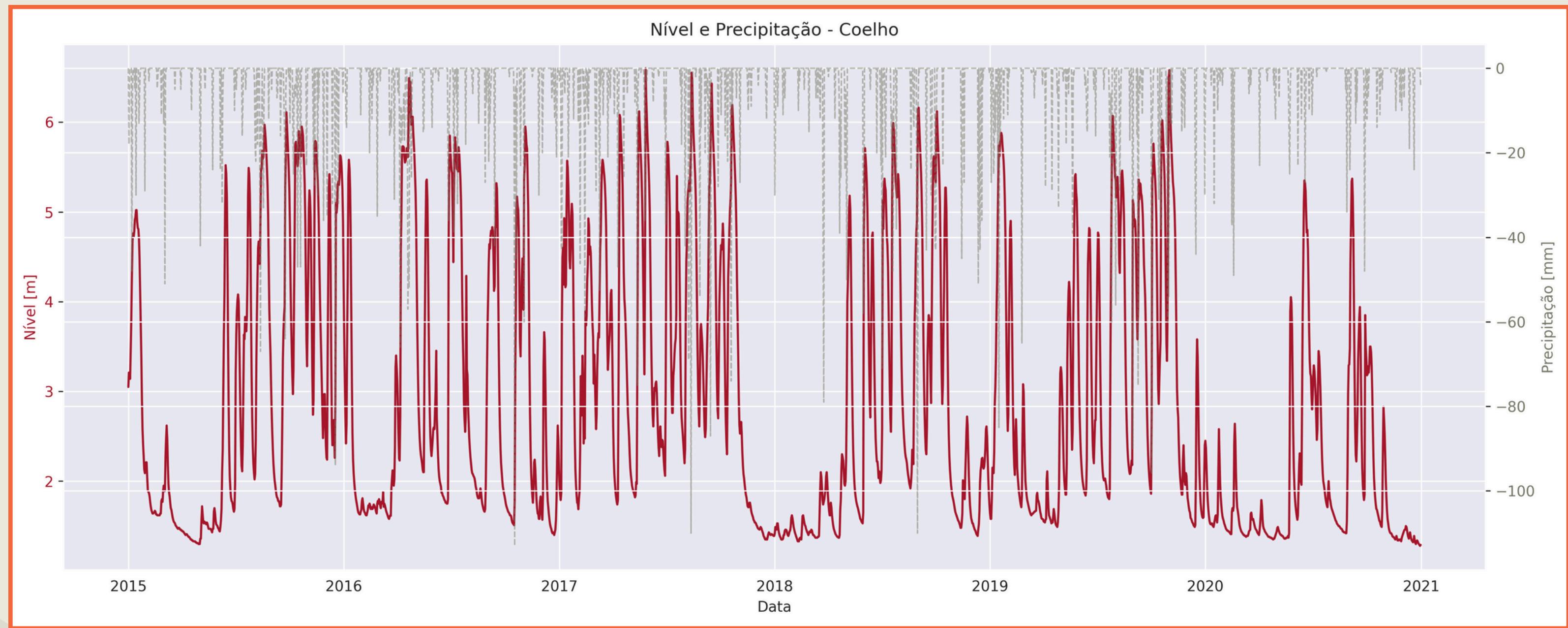
Revisão da Literatura: Séries temporais



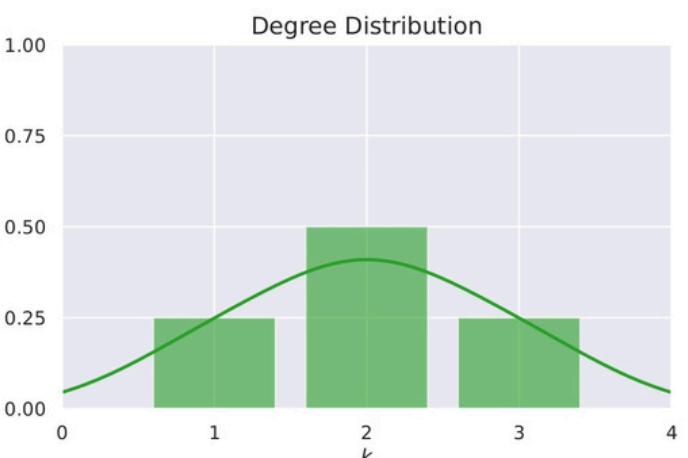
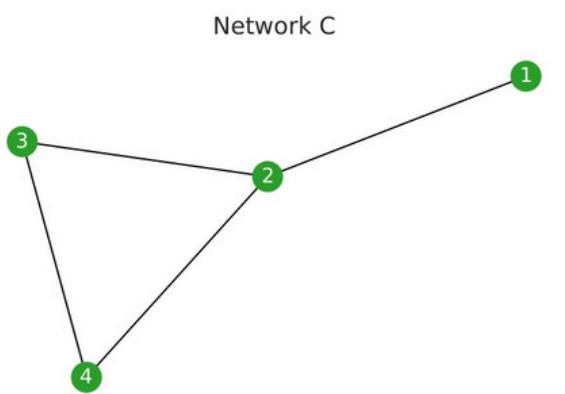
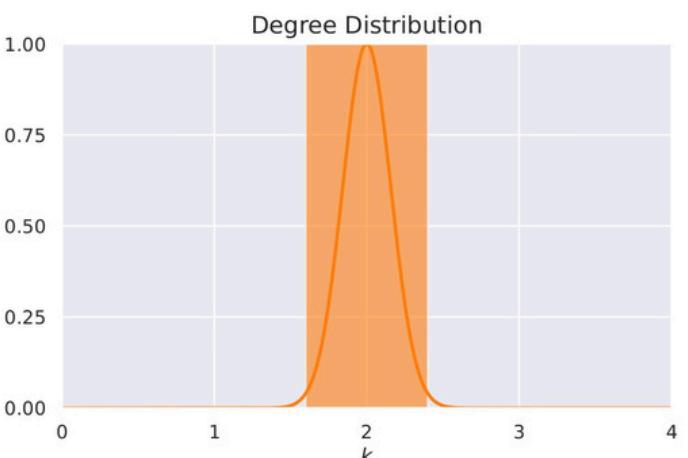
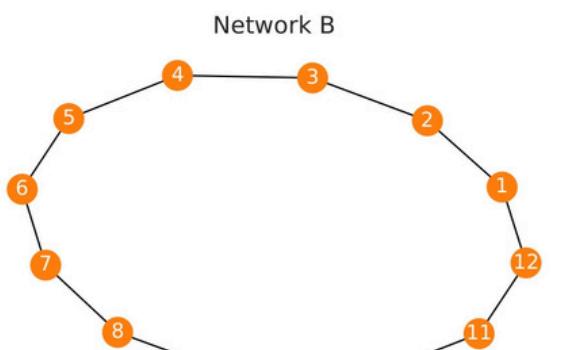
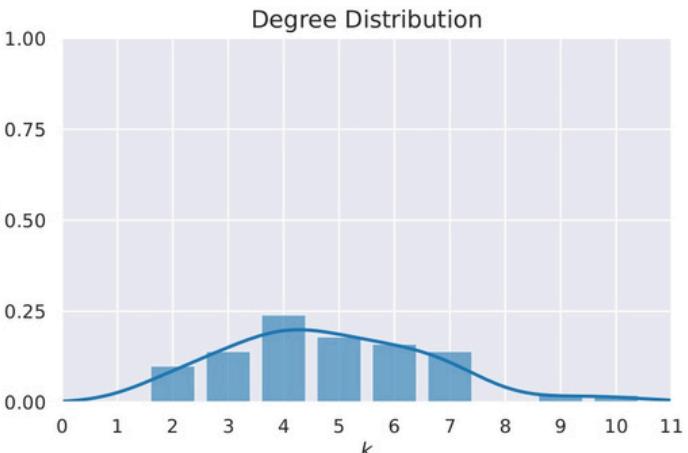
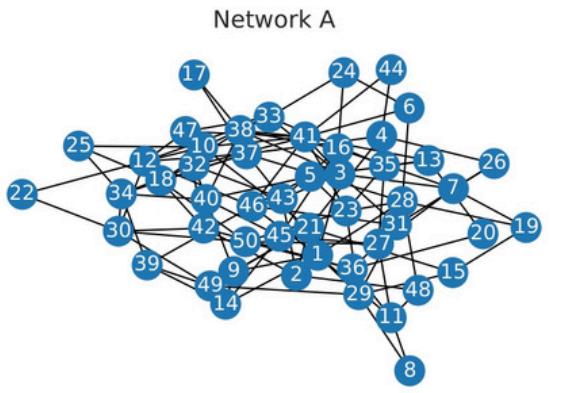
Exemplo de série temporal univariada amostrada regularmente: número de mortes por tuberculose nos Estados Unidos entre 1954 e 2021.

Revisão da Literatura: Séries temporais

Exemplo de série temporal multivariada amostrada regularmente: nível do Rio Negro (em metros) e precipitação de chuvas (em mm) entre 2015 e 2021 para uma única estação.



Revisão da Literatura: Grafos



Sumarização matemática para um grafo \mathbf{G} :

$$\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}),$$

$$\mathcal{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}, \quad 1 \leq i \leq N,$$

$$\mathcal{E} = \{(v_i, v_j) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}\}, \quad 1 \leq (i, j) \leq N,$$

$$N = |\mathcal{V}|,$$

$$L = |\mathcal{E}|.$$

Tipos de grafos:
Grafos podem ser classificados como
dirigidos ou **não dirigidos**, **ponderados** ou
não ponderados, e **estáticos** ou **dinâmicos**.

Revisão da Literatura: Matriz de adjacências

Uma descrição completa de um grafo pode ser dada via uma lista completa das arestas. Para fins matemáticos, frequentemente representamos uma rede através de sua **matriz de adjacência**. A matriz de adjacência de uma rede direcionada de N nós possui N linhas e N colunas, sendo seus elementos:

$$A_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se existe um link apontando do nó } i \text{ para o nó } j, \\ 0, & \text{se os nós } i \text{ e } j \text{ não estiverem conectados entre si.} \end{cases}$$

Para redes não direcionadas, $\mathbf{A}_{ij} = \mathbf{A}_{ji}$. (matriz simétrica). Algumas de suas aplicações envolvem: Aplicação: **Análise de conectividade, caminhos mínimos e comunidades de nós.**

Revisão da Literatura: Grafo atribuído

Um grafo atribuído é um grafo comum onde, além da estrutura (nós e arestas), cada nó possui um vetor de **atributos** ou **características**. Podemos estender nossa notação:

$$\mathcal{G} = (\mathcal{V}, \mathcal{E}, \mathbf{A}, \mathbf{X}),$$

$$\mathcal{V} = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}, \quad 1 \leq i \leq N,$$

$$\mathcal{E} = \{(v_i, v_j) \in \mathcal{V} \times \mathcal{V}\}, \quad 1 \leq (i, j) \leq N,$$

$$N = |\mathcal{V}|,$$

$$L = |\mathcal{E}|,$$

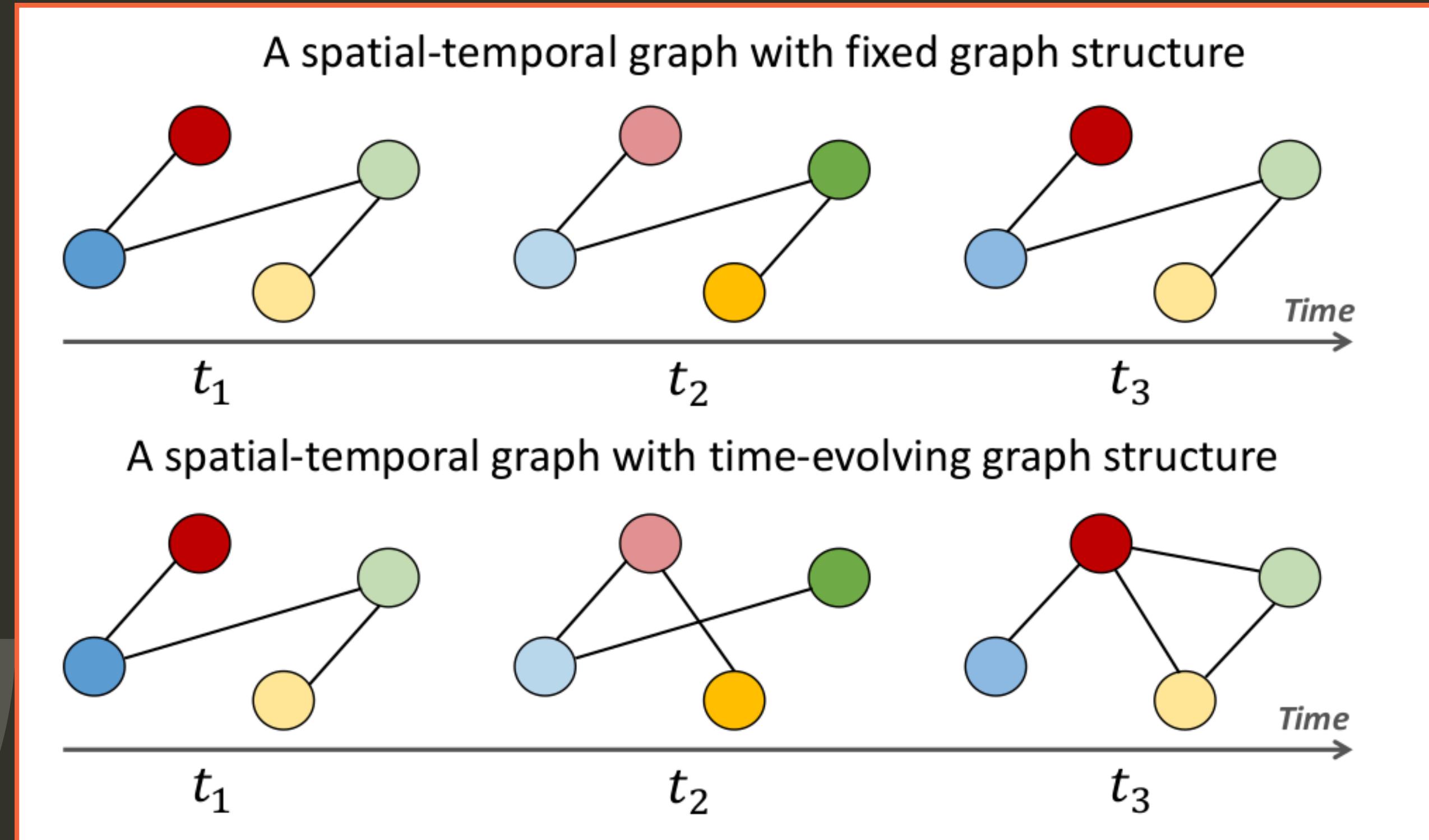
$$\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N},$$

$$\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^D, \quad 1 \leq i \leq N,$$

$$D = |\mathbf{x}|,$$

$$\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times D}.$$

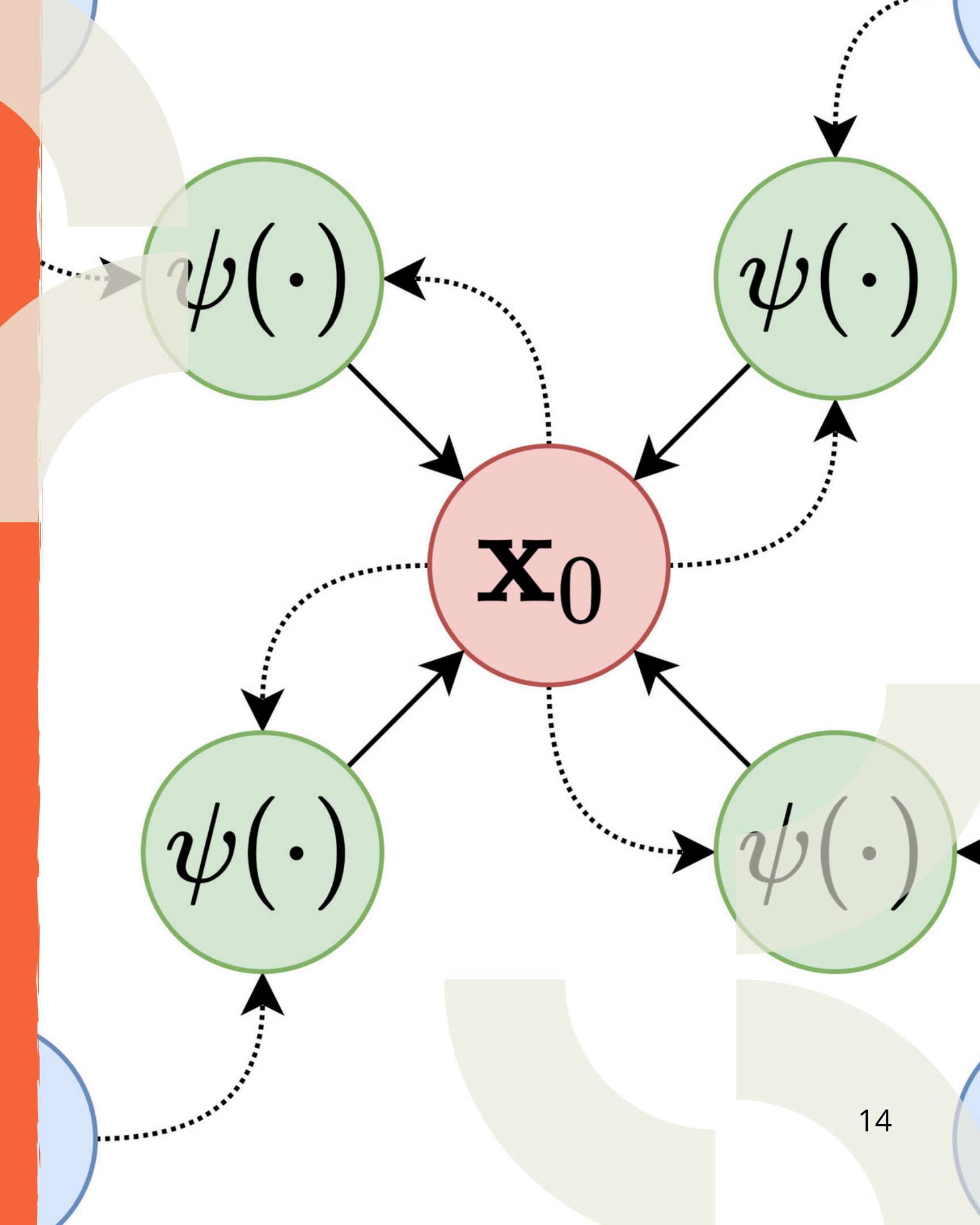
Revisão da Literatura: Grafos espaço-temporais e grafos estáticos x dinâmicos



- Dependências temporais (ao longo do tempo).
- Dependências espaciais/inter-variáveis (relações entre variáveis ou localizações).

Revisão da Literatura: GNNs (Graph Neural Networks)

GNNs são **redes neurais** projetadas para aprender representações em dados estruturados como **grafos**. Diferente de **RNNs**, **CNNs** ou **Transformers**, as GNNs operam sobre estruturas **não-euclidianas**, como **redes de sensores**, **sistemas de transporte**, **redes sociais** ou **séries temporais multivariadas estruturadas em grafos**.



Revisão da Literatura: Por que usar GNNs para séries temporais?

Séries temporais de muitos domínios possuem relações espaciais e interdependências complexas entre variáveis. Exemplo: sensores de tráfego em uma cidade, onde o valor de um sensor influencia diretamente seus vizinhos. As GNNs permitem modelar explicitamente essas relações:

- 1) Dependências entre variáveis (relações espaciais).**
- 2) Evolução ao longo do tempo (dependências temporais).**

Quando combinadas com módulos espaço-temporais, temos as chamadas ***Spatial-Temporal Graph Neural Networks (STGNNs)***, que são o foco do survey.

Revisão da Literatura: Funcionamento básico das GNNs

Cada **nó do grafo** possui uma representação vetorial, chamada de **embedding**, que resume as informações daquele nó. Durante o treinamento, cada nó atualiza seu embedding com base nas informações dos seus **vizinhos** no grafo. O processo ocorre em camadas, através de duas operações fundamentais:

- 1) **AGGREGATE**: Agrega informações dos embeddings dos vizinhos de cada nó.
- 2) **COMBINE**: Combina a informação agregada com o embedding atual do nó, gerando uma nova representação.

Ao repetir esse processo em várias camadas, os embeddings finais de cada nó incorporam tanto suas **informações locais** quanto as **dependências estruturais do grafo**, capturando relações complexas entre entidades.

Esses embeddings podem então ser usados para **prever, classificar, imputar ou detectar anomalias** nas séries temporais.

Revisão da Literatura: Funcionamento básico das GNNs

$$\mathbf{a}_i^{(k)} = \text{AGGREGATE}^{(k)} \left(\left\{ \mathbf{h}_j^{(k-1)} : v_j \in \mathcal{N}(v_i) \right\} \right),$$

$$\mathbf{h}_i^{(k)} = \text{COMBINE}^{(k)} \left(\mathbf{h}_i^{(k-1)}, \mathbf{a}_i^{(k)} \right).$$

$\mathbf{a}_i^{(k)}$ representa a informação agregada dos vizinhos do nó v_i na camada k , obtida através da função de agregação.

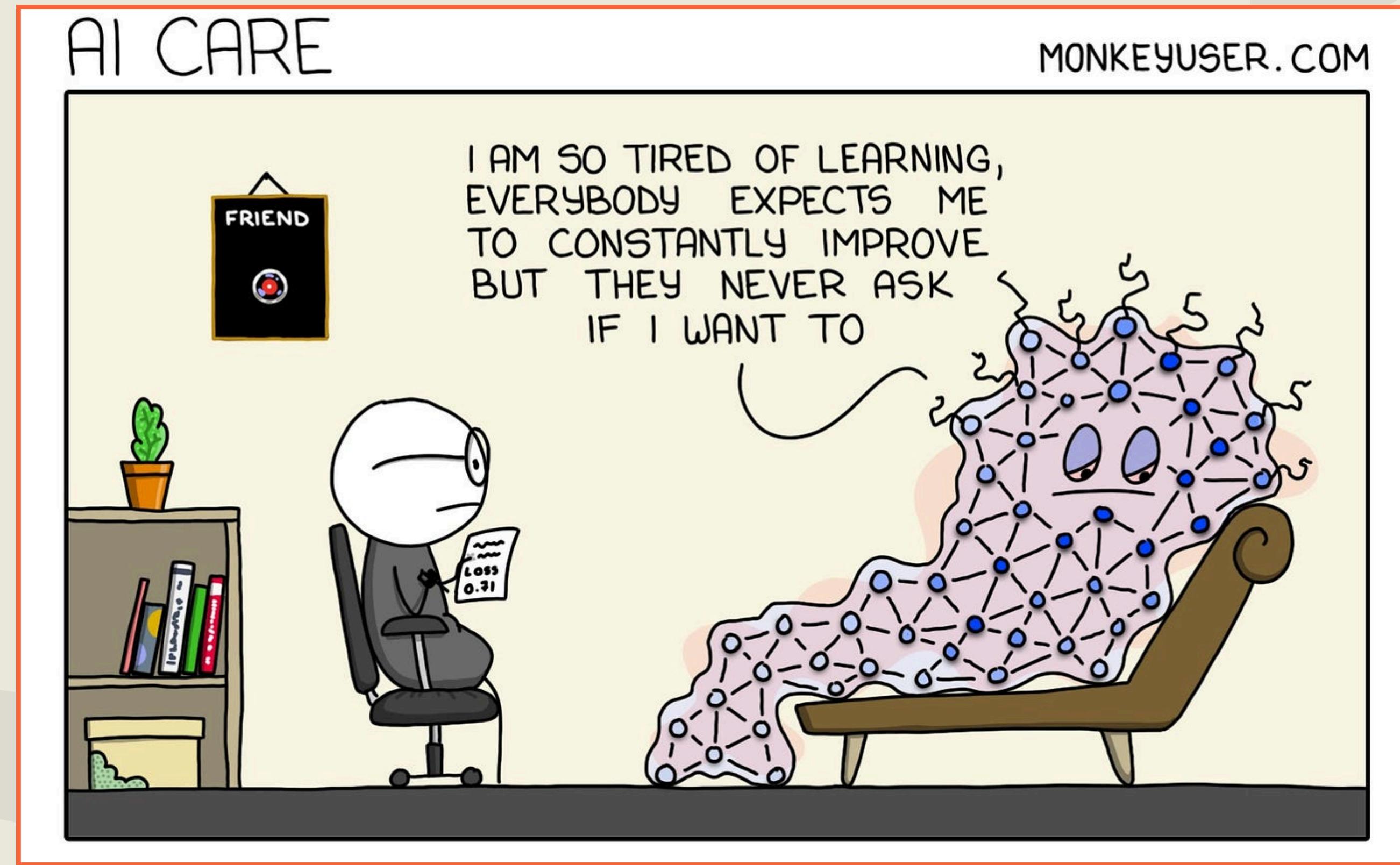
$\mathbf{h}_i^{(k)} \in \mathbb{R}^d$ é o embedding do nó v_i na k -ésima camada.

$\mathbf{h}_i^{(0)} = \mathbf{x}_i$, ou seja, o embedding inicial corresponde aos atributos originais do nó.

$\mathcal{N}(v_i)$ representa o conjunto de vizinhos do nó v_i .

As funções **AGGREGATE** e **COMBINE** são definidas pelo modelo, podendo envolver operações como **média**, **soma**, **concatenação** ou **mecanismos de atenção**.

Revisão da Literatura: GNNs



Revisão da Literatura: Como esse grafos são construídos?

Construção heurística

- **Proximidade Espacial:** conecta nós pela distância física (ex.: sensores próximos).
- **Conectividade Direta:** usa infraestrutura conhecida, como rede viária.
- **Similaridade de Séries:** liga séries com comportamento semelhante (correlação, DTW).
- **Relações Funcionais:** baseado em causalidade ou dependência funcional.

Construção aprendida (data-driven)

A é **aprendida automaticamente** durante o treinamento do modelo.

Técnicas comuns:

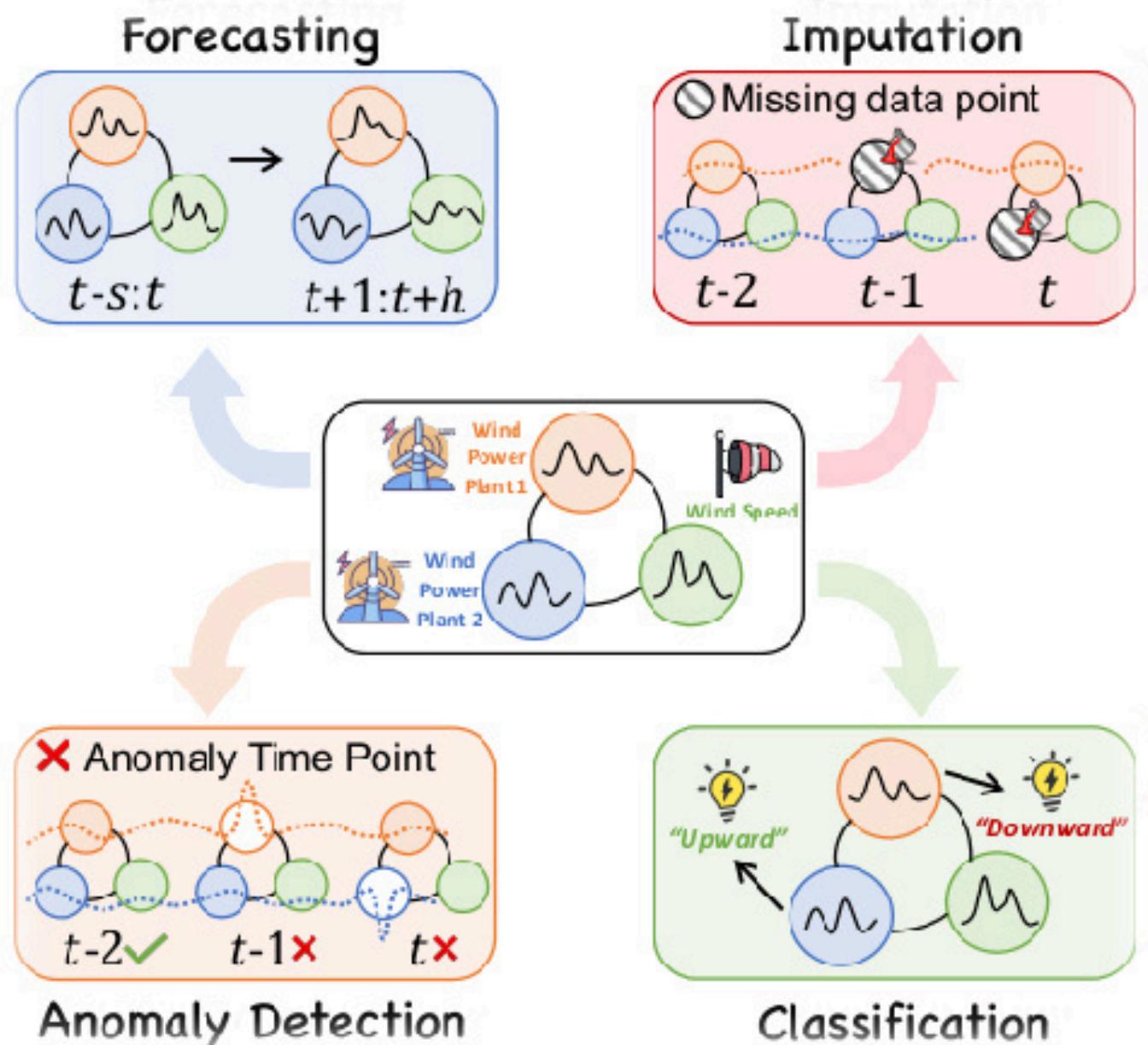
- **Similaridade entre embeddings aprendidos.**
- **Mecanismos de atenção que inferem relações.**
- **Distribuições probabilísticas sobre as conexões.**

Essa abordagem permite descobrir relações não explícitas ou ocultas nos dados.

Materiais e métodos: Taxonomia das Tarefas

Tarefa	Descrição
Previsão	Estimar valores futuros de séries temporais. Pode ser de curto ou longo prazo, uni ou multivariada.
Detecção de Anomalias	Identificar pontos ou subsequências fora do padrão. Pode envolver reconstrução, previsão ou análise relacional.
Imputação	Preencher valores ausentes nas séries, essencial em dados de sensores e aplicações práticas.
Classificação	Atribuir rótulos a séries ou subsequências conforme seus padrões.

Materiais e Métodos: Tarefas e séries temporais

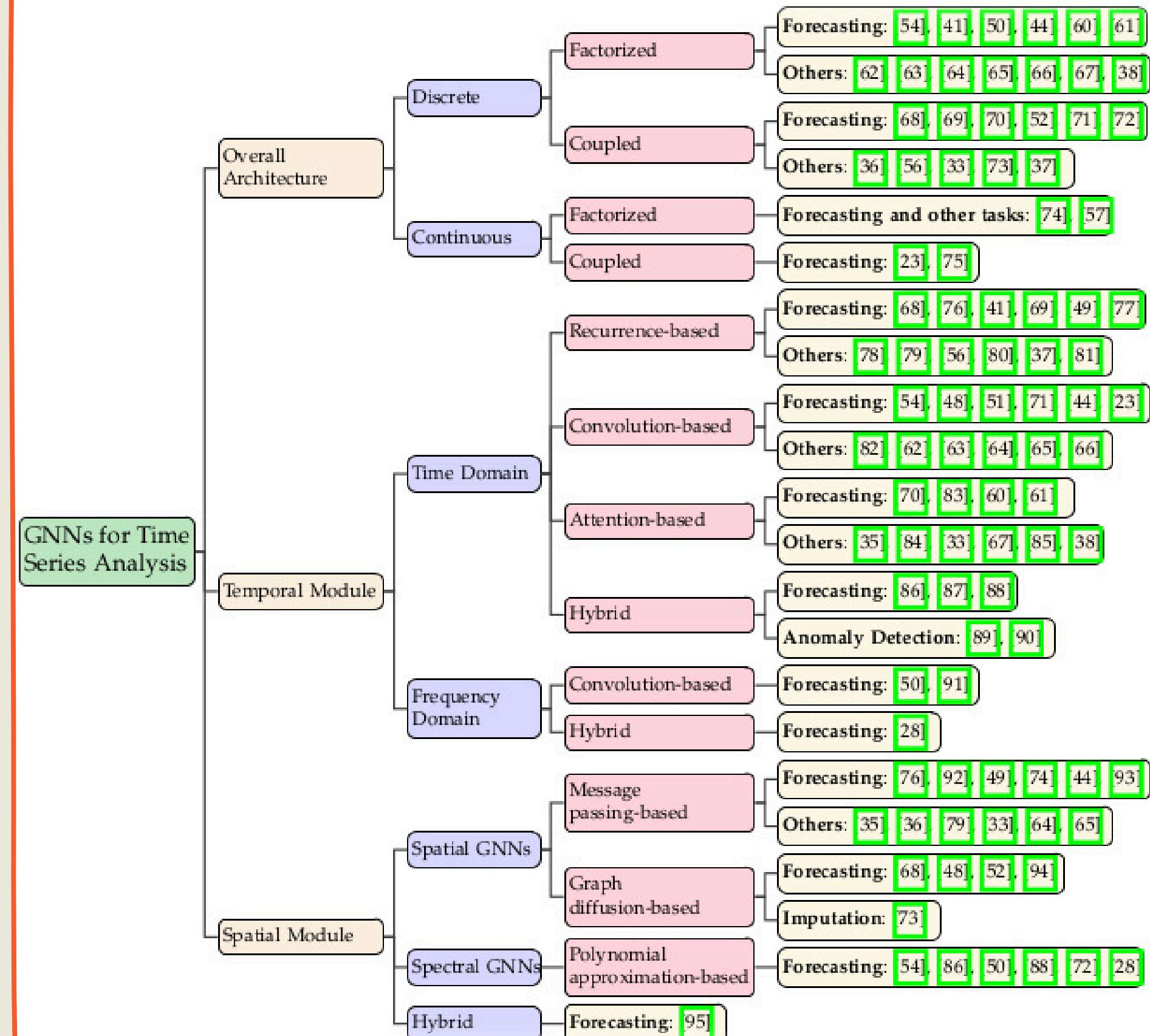


Materiais e Métodos: Arquitetura metodológica

A abordagem das **STGNNs** combina:

- ✓ **Módulo Espacial**
- ✓ **Módulo Temporal**
- ✓ **Arquitetura Global**

Objetivo: Capturar simultaneamente relações espaciais, temporais e estruturais das séries temporais complexas.



Materiais e Métodos: Módulo espacial

Responsável por capturar as **relações espaciais** entre variáveis ou localizações, aproveitando a estrutura do grafo, ou seja, as conexões entre os nós.

Técnicas:

✓ **GNNs Espaciais (baseadas em vizinhança)**

Cada nó atualiza sua representação com base nos seus vizinhos diretos.

Exemplo: **DCRNN** usa sensores de tráfego conectados de acordo com a distância geográfica.

✓ **GNNs Espectrais (domínio da frequência)**

Utilizam as propriedades espectrais do grafo, derivadas dos autovalores e autovetores da **matriz Laplaciana**. Isso permite capturar padrões globais de conectividade, semelhantes a uma análise de frequências em sinais clássicos.

Exemplo: **STGCN** aplica essa abordagem para previsão de fluxo de tráfego.

✓ **Modelos Híbridos**

Combinam técnicas espaciais e espectrais para explorar o melhor dos dois mundos.

Exemplo: **Graph WaveNet** integra **análise espectral** com **convoluçãoes temporais** para modelagem espaço-temporal mais eficiente.

Materiais e Métodos: Módulo temporal

Responsável por capturar dependências ao longo do tempo.

Mecanismos comuns:

- ✓ **RNNs (como GRU, LSTM)**

Ex.: **DCRNN** usa **GRU** para capturar dependências temporais em redes de tráfego.

- ✓ **Convoluçãoes Temporais**

Ex.: **STGCN** aplica convolução 1D ao longo do tempo.

- ✓ **Atenção (Transformers)**

Ex.: **GMAN** usa atenção espacial-temporal para previsão de tráfego.

- ✓ **Combinações**

Ex.: **MTGNN** combina convoluções temporais com aprendizado de estrutura do grafo.

Materiais e Métodos: Arquitetura global

Duas dimensões importantes:

✓ **Tempo**

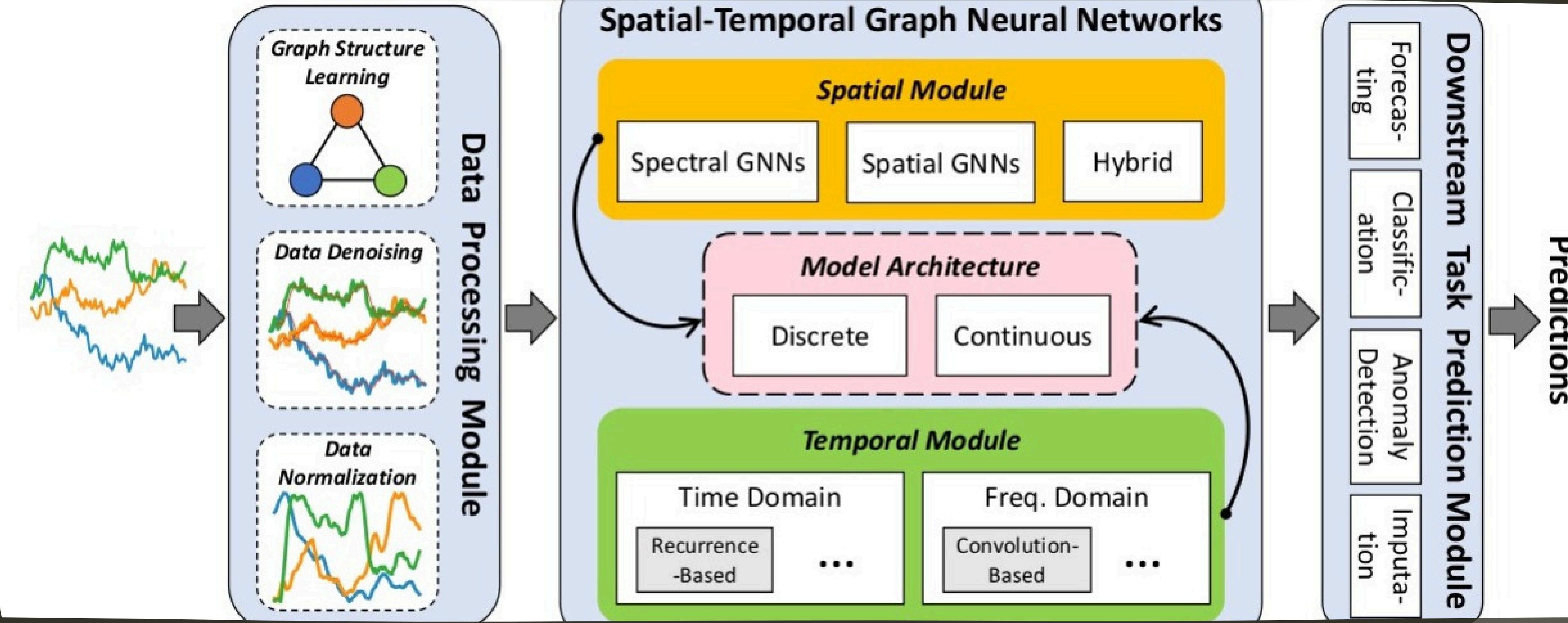
Discreta: Séries temporais com intervalos fixos.
Ex.: Dados de sensores coletados a cada minuto.

Contínua: Modelagem de eventos em tempo contínuo.
Ex.: Sistemas de monitoramento de saúde com registros irregulares.

✓ **Integração Espaço-Tempo**

Fatorada: Espaço e tempo processados separadamente.
Ex.: Alguns modelos aplicam GNN no espaço e RNN no tempo, de forma isolada.

Acoplada: Espaço e tempo modelados conjuntamente.
Ex.: GMAN modela interações espaço-temporais simultaneamente.



Materiais e Métodos: Pipeline geral para análise de séries temporais usando redes neurais de grafos

Materiais e Métodos: Dados do artigo

Embora o *survey* não realize experimentos próprios, ele destaca datasets amplamente utilizados na literatura, como:

✓ **METR-LA**

Dados de sensores de tráfego urbano em Los Angeles.

✓ **PEMS-BAY**

Sensores de tráfego na região da baía de São Francisco.

✓ **ECG e IoT**

Sinais biomédicos e dados de sensores para detecção de anomalias.

✓ **Dados meteorológicos e ambientais**

Sensores de temperatura, umidade, qualidade do ar, entre outros.

Esses conjuntos de dados são frequentemente usados nos trabalhos revisados, especialmente em tarefas de previsão e detecção de anomalias.

Resultados: Modelos para previsão de séries temporais com GNNs

Modelo	Estratégia Técnica	Exemplos de dados	Resultado/Avanço
DCRNN	GNN espacial + GRU temporal	METR-LA, PEMS-BAY	Previsão precisa de tráfego, captura dependências locais e temporais
STGCN	GNN espectral + convoluções temporais	METR-LA, PEMS-BAY	Modela padrões globais via propriedades espectrais do grafo
Graph WaveNet	Grafo aprendido + convoluções temporais	METR-LA, PEMS-BAY	Estrutura do grafo aprendida, melhora a flexibilidade do modelo
GMAN	Atenção espacial-temporal (multi-resolução)	METR-LA, PEMS-BAY	Captura padrões espaço-temporais em múltiplas escalas
MTGNN	Aprendizado do grafo + convoluções temporais	Dados multivariados	Grafo e relações entre séries aprendidos diretamente dos dados

Resultados: Modelos para detecção de anomalias em séries temporais com GNNs

Modelo	Estratégia Técnica	Exemplos de dados	Resultado/Avanço
MTAD-GAT	Atenção espacial-temporal	IoT multivariado	Detecta anomalias combinando relações espaciais e temporais
GDN	Grafo dinâmico + desvios estruturais	Dados industriais	Detecta anomalias explorando estrutura e variações locais
DyGraphAD	GNNs em grafos dinâmicos	Grafos temporais	Detecta anomalias considerando evolução da estrutura do grafo
GraphCAD	Grafo causal + aprendizado de anomalias	IoT e séries diversas	Modela relações causais para melhorar a detecção de anomalias

Resultados: Modelos para imputação de dados em séries temporais com GNNs

Modelo	Estratégia Técnica	Exemplos de dados	Resultado/Avanço
GRIN	Convoluçãoes temporais + aprendizado de grafo	Sensores de tráfego	Imputação robusta em redes de sensores
PriSTI	Imputação probabilística espaço-temporal	Dados ambientais	Considera incerteza e dependências espaciais

Resultados: Modelos para classificação de séries temporais com GNNs

Modelo	Estratégia Técnica	Exemplos de dados	Resultado/Avanço
Time2Graph+	Transforma séries em grafos	Dados genéricos	Explora estrutura do grafo para melhorar classificação
SimTSC	Similaridade estrutural baseada em grafos	Dados multivariados	Classificação baseada em comparação estrutural
RainDrop	Combinação de embeddings de séries e grafos	Dados de sensores	Integra espaço e tempo para classificação robusta

Resultados: Métricas para mensurar as tarefas

✓ Previsão

Métricas: MAE, RMSE, MAPE.

Como: Compara valores previstos com reais (ex.: fluxo de tráfego).

✓ Detecção de anomalias

Métricas: Precision, Recall, F1-score, AUC-ROC.

Como: Compara anomalias detectadas com rótulos reais.

✓ Imputação de dados

Métricas: MAE, RMSE, MAPE.

Como: Remove dados de propósito e avalia a imputação comparando com os reais

✓ Classificação

Métricas: Accuracy, Precision, Recall, F1-score.

Como: Compara rótulos previstos com rótulos reais.

Conclusão

Modelos baseados em **GNNs** demonstram **avanços consistentes na análise de séries temporais**, especialmente em cenários com **estrutura complexa**, como redes de tráfego, sensores ambientais e sistemas industriais.

- ✓ Na previsão, as GNNs capturam de forma eficiente dependências espaciais e temporais, superando limitações dos métodos tradicionais.
- ✓ Para detecção de anomalias, destacam-se pela capacidade de explorar tanto a estrutura do grafo quanto a evolução temporal, incluindo casos de grafos dinâmicos.
- ✓ Na imputação, abordagens baseadas em grafos lidam melhor com dados ausentes, respeitando as relações espaciais.
- ✓ Na classificação, a integração entre estrutura gráfica e séries temporais resulta em maior robustez e precisão.

Desafios em aberto:

- Falta de benchmarks padronizados dificulta comparações justas entre métodos.
- Construção automática de grafos ainda é uma limitação prática.
- Comparações métricas dos modelos em suas tarefas, quando um é melhor que outro.

O survey reforça o potencial das GNNs como ferramenta central para séries temporais complexas, mas destaca a necessidade de **pesquisas futuras nesses pontos críticos**.

Agradeço pela atenção!

Referências

1. Zhou, J., Zhang, Q., Liu, X., Zhou, C., Song, G., Zhang, C., & Yu, P. S. (2024). A Survey on Graph Neural Networks for Time Series. arXiv preprint arXiv:2305.17876.
2. Distill. (2021). A Gentle Introduction to Graph Neural Networks.
3. Nielsen, A. (2019). Practical Time Series Analysis: Prediction with Statistics and Machine Learning. O'Reilly Media.
4. Wu, Z., Pan, S., Chen, F., Long, G., Zhang, C., & Yu, P. S. (2020). A Comprehensive Survey on Graph Neural Networks. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 32(1), 4–24.