Порождающие модели для прогнозирования наборов временных рядов

Карпеев Глеб Андреевич

Московский физико-технический институт

Научный руководитель: д.ф-м.н. В. В. Стрижов

2025

Порождающие модели для прогнозирования наборов временных рядов

Предлагается метод прогнозирования временных рядов с высокой ковариацией и дисперсией

Задача:

Выбрать оптимальную модель для прогнозирования матрицы ковариаций между временными рядами

Предлагаемое решение:

1. Строится пространство матриц ковариаций. Метрика удовлетворяет условию Мерсера.
2. Выполняется прогноз матрицы ковариаций.
3. Восстановление набора временных рядов из пространства матриц ковариаций.

Теоретическая основа генеративного моделирования

1. **Римановы порождающие модели** Построение диффузионных процессов на многообразиях SPD-матриц. *Riemannian Score-Based Generative Modelling*
   V. De Bortoli et al., NeurIPS 2022
2. **Score-based подход** Источник для базового метода score-based моделей. *Generative Modeling by Estimating Gradients*
   Y. Song, S. Ermon, NeurIPS 2019
3. **Обратная диффузия** Используется для вывода уравнения обратной диффузии в римановых многообразиях. *Time Reversal of Diffusion Processes*
   P. Cattiaux et al.

Задача прогнозирования набора временных рядов

Ставится задача прогнозирования набора временных рядов $\mathbf{x}_t = [x_{1t}, \dots, x_{nt}]^\mathsf{T}$ с высокой ковариацией и дисперсией. В каждый момент времени набор временных рядов ставится в соответствие матрица ковариаций

$$\mathbf{C}_t = \frac{1}{t-1} \mathbf{Y}_t \mathbf{Y}_t^\mathsf{T},$$

где $\mathbf{Y}_t = [\mathbf{x}_1 - \mu_t, \dots, \mathbf{x}_t - \mu_t]$, $\mu_t = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^{t} \mathbf{x}_i$.
Найти отображение в пространстве $\mathrm{Sym}^+(n)$:

$$f : \underbrace{\mathbf{C}_t}_{\text{Текущая ковариация}} \mapsto \underbrace{\mathbf{C}_{t+\Delta}}_{\text{Прогноз}}$$

с минимальной геодезической ошибкой:

$$\mathcal{L} = \mathbb{E}\left[d_{Riem}(\mathbf{C}_{t+\Delta}^{true}, f(\mathbf{C}_t))\right]$$

Порождающие модели для матриц ковариаций

Score-based модель: Итеративный метод генерации SPD-матриц через стохастическую диффузию (зашумление) и денойзинг с оценкой градиента плотности.

Процесс зашумления для $\mathbf{C}_t \in \mathrm{Sym}(n)$

$$d\mathbf{C}_t = \underbrace{-\mathbf{C}_t dt}_{\text{Дрейф}} + \underbrace{\sqrt{2} d\mathbf{B}_t}_{\text{Диффузия}}, \quad \mathbf{C}_0 \sim p_0(\mathbf{C})$$

где $\mathbf{B}_t$ - броуновское движение в $\mathrm{Sym}(n)$

Обратный процесс генерации

$$d\mathbf{C}_t^{gen} = \underbrace{\left[\mathbf{C}_t^{gen} + 2\nabla_{\mathbf{C}} \log p_{T-t}(\mathbf{C}_t^{gen})\right] dt}_{\text{Дрейф с коррекцией}} + \sqrt{2} d\mathbf{B}_t$$

Градиент score $\nabla_{\mathbf{C}} \log p_t$ обучается нейросетью
Начальное условие: $\mathbf{C}_0^{gen} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \epsilon \mathbf{I})$

Риманова геометрия пространства ковариационных матриц

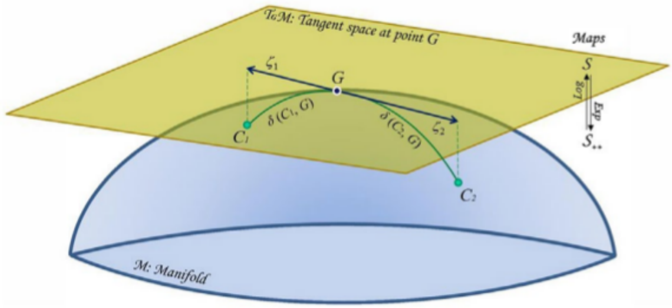
Метрика и расстояния в $\mathrm{Sym}^+(n)$

Аффинно-инвариантная метрика: $\langle \mathbf{A}, \mathbf{B} \rangle_{\mathbf{C}} = \mathrm{tr}(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B})$

Геодезическое расстояние: $d(\mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2) = \| \log(\mathbf{C}_1^{-1/2}\mathbf{C}_2\mathbf{C}_1^{-1/2}) \|_F$

Логарифмическое отображение

$\mathrm{Log}_{\mathbf{G}}(\mathbf{C}) = \mathbf{C}^{1/2} \log(\mathbf{C}^{-1/2}\mathbf{G}\mathbf{C}^{-1/2})\mathbf{C}^{1/2}$



Римановы порождающие модели

Ключевое улучшение: Учет геометрии SPD-многообразия и сохранение положительной определённости.

Модифицированный процесс диффузии

$$d\mathbf{C}_t = \underbrace{-\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{C}} U(\mathbf{C}_t)dt}_{\text{Риманов дрейф}} + \underbrace{d\mathbf{B}_t^M}_{\text{Риманов шум}}$$

Потенциал $U(\mathbf{C})$

Броуновское движение $\mathbf{B}_t^M$ согласовано с метрикой

Условное прогнозирование матриц ковариаций

Метод семплирования

1. Инициализация гауссовским шумом:

$$\mathbf{C}_{t+\Delta}^{(0)} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \sigma^2(\Delta)\mathbf{I}\right) \cap \mathrm{Sym}^+(n)$$

2. Итеративное уточнение через обратный SDE:

$$\mathbf{C}_{t+\Delta}^{(k+1)} = \mathrm{Solver}\Big(s_\theta(\cdot, \tau_k, \mathbf{C}_t), \mathbf{C}_{t+\Delta}^{(k)}, \tau_k\Big), \quad k = 0, ..., K-1$$

3. Проекция на многообразие SPD:

$$\mathbf{C}_{t+\Delta}^{gen} = \mathrm{Proj}_{\mathrm{Sym}^+}\left(\mathbf{C}_{t+\Delta}^{(K)}\right)$$

Вычислительный эксперимент [Синтетические данные]

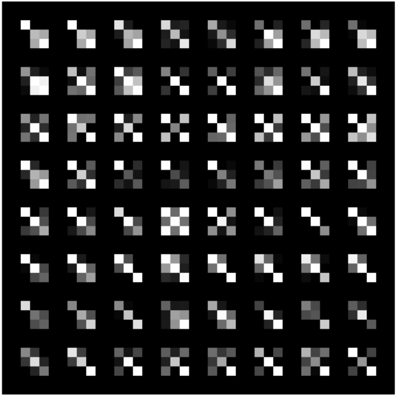


Рис.: Матрицы ковариаций, семплированные SGM

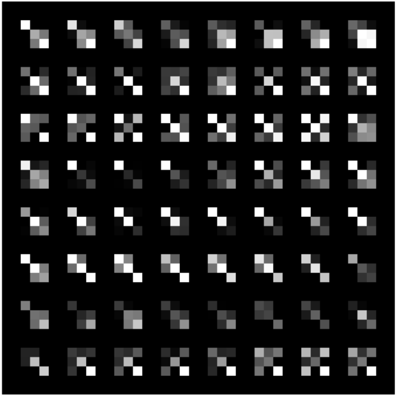


Рис.: Реальные матрицы ковариаций

MAPE предложенного метода генерации матриц: 2, baseline: 4.6

Выносится на защиту

1. Предложен метод, который выполняет кодирование временных рядов с помощью матрицы ковариаций, выполняет прогноз, а затем выполняет декодирование полученной матрицы.
2. MAPE предложенного метода генерации матрицы попарных ковариаций методом SGM - 2, у baseline - 4.6