Причинно-ориентированное снижение размерности для анализа данных нейроинтерфейсов

Владимиров Э.А.

Московский физико-технический институт

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

2025

Причинно-следственный анализ в данных высокой размерности

Проблема

- Нелинейные, лагированные во времени зависимости не выявляются корреляцией и линейной регрессией.
- Высокая размерность данных усиливает мультиколлинеарность и усложняет поиск причинно-следственной связи

Цель исследования

Найти компактное и интерпретируемое скрытое пространство, в котором причинное воздействие $\mathbf{X} \to \mathbf{Y}$ обнаруживается устойчиво и статистически значимо.

Предлагаемая модель **CaSCA**

Предлагается подход CaSCA – Канонический анализ каузальных подпространств.
CaSCA проецирует данные на два взаимно ортогональных подпространства: **каузальное**, где лагированное представление $\mathbf{X}$ максимально предсказывает $\mathbf{Y}$, и **реконструктивное**, которое объясняет оставшуюся дисперсию сигналов.

Основная идея метода CaSCA

Ключевая мысль:
CaSCA строит общее латентное пространство, где первом этапе извлекаются низкоразмерные причинные компоненты, а во втором — восстанавливается остальная вариативность данных.

Постановка задачи каузального снижения размерности

Даны два синхронных многомерных временных ряда
$\mathbf{X}_t \in \mathbb{R}^{n_x}, \ \mathbf{Y}_t \in \mathbb{R}^{n_y}, \quad t = 1, \dots, T.$
Общий энкодер каждой строки

$$\varphi_{\text{enc}} : \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_y} \to \mathbb{R}^m, \quad \psi_{\text{enc}} : \mathbb{R}^{n_x} \times \mathbb{R}^{n_y} \to \mathbb{R}^m$$

создаёт скрытые представления

$$\mathbf{P}_t = \varphi_{\text{enc}}(\mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_t), \qquad \mathbf{Q}_t = \psi_{\text{enc}}(\mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_t).$$

Разбиение скрытого пространства. $m = d_c + d_r$,
$\mathbf{P}_t = \left[\mathbf{P}_t^c \,\middle|\, \mathbf{P}_t^r\right], \ \mathbf{Q}_t = \left[\mathbf{Q}_t^c \,\middle|\, \mathbf{Q}_t^r\right], \ \mathbf{P}_t^c, \mathbf{Q}_t^c \in \mathbb{R}^{d_c}, \ d_c \ll d_r \ll \min(n_x, n_y).$
Декодеры и реконструкция.

$$\widehat{\mathbf{X}}_t = \varphi_{\text{dec}}(\mathbf{P}_t), \qquad \widehat{\mathbf{Y}}_t = \psi_{\text{dec}}(\mathbf{Q}_t).$$

Постановка задачи каузального снижения размерности

Необходимо построить *низкоразмерное* и *причинно-информативное* латентное пространство, в котором

- причинные компоненты $(\mathbf{P}_t^{\mathrm{c}}, \mathbf{Q}_t^{\mathrm{c}})$ максимально объясняют влияние $\mathbf{X}_{t-\tau} \to \mathbf{Y}_t$;
- реконструктивные компоненты $(\mathbf{P}_t^{\mathrm{r}}, \mathbf{Q}_t^{\mathrm{r}})$ сохраняют оставшуюся дисперсию сигналов;

Задача моделирования

Найти преобразования $\varphi_{\text{enc}}, \psi_{\text{enc}}, \varphi_{\text{dec}}, \psi_{\text{dec}}$ и задержку $\tau^{\star}$, минимизируя

$$\mathcal{L} = \lambda_{\text{rec}}\big(\|\mathbf{X}_t - \widehat{\mathbf{X}}_t\|_F + \|\mathbf{Y}_t - \widehat{\mathbf{Y}}_t\|_F\big) + \lambda_{\text{c}}\, \mathcal{L}_{\text{c}}\big(\mathbf{P}_{t-\tau}^{\mathrm{c}}, \mathbf{Q}_t^{\mathrm{c}}\big),$$

- $\mathcal{L}_{\text{c}}$ — любая мера зависимости (корреляция/CCM).
- Сканируем $\tau = [0, \dots, \tau_{\max}]$, чтобы найти задержку.

Предположения.

- Аттрактор допускает задержанное вложение при умеренном шуме.
- Вся значимая причинная информация содержится в d_c-мерном подпространстве.

Критерии качества модели снижения размерности

1. Устранение мультиколлинеарности

Максимальный Variance Inflation Factor (VIF) $\max\limits_j \dfrac{1}{1 - R_j^2}$

Condition Number $\max(\varkappa(\mathbf{P}_t^\mathsf{T}\mathbf{P}_t), \varkappa(\mathbf{Q}_t^\mathsf{T}\mathbf{Q}_t)) = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}$

Чем меньше — тем более устойчивы линейные модели в скрытом пространстве

2. Точность реконструкции сигналов

$$\mathrm{RMSE}_X = \sqrt{\frac{1}{T}\sum_t \|\widehat{\mathbf{X}}_t - \mathbf{X}_t\|^2} \text{ (аналогично для } \mathbf{Y}\text{)}$$

Explained Variance Ratio — доля дисперсии, восстановленная декодером

3. Прогностическая полезность причинных эмбеддингов

(i) модель Y_t по собственным лагам $\mathbf{Y}_{t-\tau}$

(ii) модель Y_t по $\mathbf{Y}_t$ и исходным $\mathbf{X}_t$

(iii) модель Y_t по $\mathbf{Y}_t$ и причинным эмбеддингам $\mathbf{P}_t^{\mathrm{c}}$

$$\Delta\mathrm{Score} = \mathrm{Perf}(\text{модель (iii)}) - \max\{\mathrm{Perf}((\mathrm{i})), \mathrm{Perf}((\mathrm{ii}))\}$$

- Perf — снижение RMSE / рост R^2 или F1 (для классификации)

Алгоритм CaSCA

CaSCA: причинно-ориентированное снижение размерности

Require: Временные ряды $\mathbf{X}_t \in \mathbb{R}^{T\times n_x}$, $\mathbf{Y}_t \in \mathbb{R}^{T\times n_y}$, лаги $\mathcal{T}$, размерности d_c, d_{hid}

Ensure: Каузальные проекции $\mathbf{P}^{\mathrm{c}}_t, \mathbf{Q}^{\mathrm{c}}_t$, реконструктивные проекции $\mathbf{P}^{\mathrm{r}}_t, \mathbf{Q}^{\mathrm{r}}_t$

Шаг 1. *Автовыбор лага*

for $\tau \in \mathcal{T}$ **do**

  $\rho(\tau) \leftarrow \mathrm{corr}\big(\mathrm{CCA}_1(\mathbf{X}_{t-\tau}, \mathbf{Y}_t)\big)$

end for

$\tau^\star \leftarrow \arg\max_\tau \rho(\tau)$

Шаг 2. *Канонический блок (каузальный)*

$\big[\mathbf{W}^{\mathrm{c}}_x, \mathbf{W}^{\mathrm{c}}_y\big] \leftarrow \mathrm{CCA}\big(\mathbf{X}_{t-\tau^\star}, \mathbf{Y}_t,\ d_c\big)$

$\mathbf{P}^{\mathrm{c}}_t \leftarrow \mathbf{X}_t\mathbf{W}^{\mathrm{c}}_x,\ \mathbf{Q}^{\mathrm{c}}_t \leftarrow \mathbf{Y}_t\mathbf{W}^{\mathrm{c}}_y$

Шаг 3. *Дефляция остатка*

$\mathbf{X}_{\text{res}} \leftarrow \mathbf{X}_t - \mathbf{P}^{\mathrm{c}}_t\mathbf{W}^{\mathrm{c}\top}_x,\ \mathbf{Y}_{\text{res}} \leftarrow \mathbf{Y}_t - \mathbf{Q}^{\mathrm{c}}_t\mathbf{W}^{\mathrm{c}\top}_y$

Шаг 4. *PCA-блок (реконструктивный)*

$\mathbf{W}^{\mathrm{r}}_x \leftarrow \mathrm{PCA}\big(\mathbf{X}_{\text{res}},\ d_r\big),\ \mathbf{W}^{\mathrm{r}}_y \leftarrow \mathrm{PCA}\big(\mathbf{Y}_{\text{res}},\ d_r\big)$

$\mathbf{P}^{\mathrm{r}}_t \leftarrow \mathbf{X}_{\text{res}}\mathbf{W}^{\mathrm{r}}_x,\quad \mathbf{Q}^{\mathrm{r}}_t \leftarrow \mathbf{Y}_{\text{res}}\mathbf{W}^{\mathrm{r}}_y$

Теоретические свойства модели CaSCA

Теорема (ортогональность и блочная дисперсия)

Пусть после центрирования данные приведены к единичной ковариации $\Sigma_{XX} = I_p$, $\Sigma_{YY} = I_q$. Тогда проекции $\mathbf{P}_t^c, \mathbf{P}_t^r$ и ортогональные веса $\mathbf{W}_x^c, \mathbf{W}_x^r$ модели обладают следующими свойствами:

1. ***Ортогональность весов:*** $W_x^{\mathrm{c}\top} W_x^{\mathrm{r}} = 0_{d_c \times d_r}$ *и аналогично для Y-блока.*
2. ***Разложение ковариации:*** $I_p = \mathbf{W}_x^{\mathrm{c}} \Sigma_{pp}^{\mathrm{cc}} \mathbf{W}_x^{\mathrm{c}\top} + \mathbf{W}_x^{\mathrm{r}} \Sigma_{pp}^{\mathrm{r}r} \mathbf{W}_x^{\mathrm{r}\top}$ *(кросс-блочные элементы обнуляются).*
3. ***Независимость латентных координат:*** $\mathbf{P}_t^{\mathrm{c}\top} \mathbf{P}_t^{\mathrm{r}} = 0_{d_c \times d_r}$, *т.е. причинные и реконструктивные факторы некоррелированы.*

Интерпретация.

Причинные оси $\mathbf{W}^{\mathrm{c}}$ изолируют подпространство, достаточное для прогноза $\mathbf{Y}_t$ по $\mathbf{X}_{t-\tau}$.

Реконструктивные оси W^{r} содержат оставшуюся дисперсию, не мешая оценке причинных связей.

Блочное разложение дисперсии упрощает downstream-модели: $\mathbf{P}_t^{\mathrm{c}}$ используется в регрессии/классификации, $\mathbf{P}_t^{\mathrm{r}}$ — в реконструкции и фильтрации шума.

Расширение 1: переход в траекторное пространство

Вместо исходных наблюдений $\mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_t$ строим их отложенные векторы и применяем **CaSCA** уже к этим псевдонаблюдениям. Это раскрывает внутреннюю динамику системы и улучшает выявление причинных лагов.

Require: временные ряды $\{\mathbf{X}_t\}_{t=1}^{T}, \{\mathbf{Y}_t\}_{t=1}^{T}$, лаговое окно E, τ

Шаг 1. *Построение траекторий*

1: $\mathbf{X}_t^{(\mathrm{traj})} = \left[\mathbf{X}_t, \mathbf{X}_{t-\tau}, \ldots, \mathbf{X}_{t-(E-1)\tau}\right]$

2: Аналогично $\mathbf{Y}_t^{(\mathrm{traj})}$

Шаг 2. *Применение CaSCA*

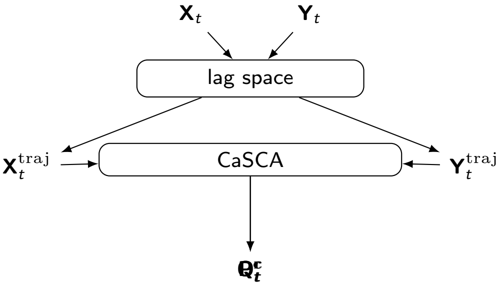
3: $(\mathbf{P}^{\mathrm{c}}, \mathbf{P}^{\mathrm{r}}, \mathbf{Q}^{\mathrm{c}}, \mathbf{Q}^{\mathrm{r}}) \leftarrow \mathrm{CaSCA}\big(\mathbf{X}^{(\mathrm{traj})}, \ \mathbf{Y}^{(\mathrm{traj})}\big)$

Шаг 3. *Восстановление сигналов*

4: $\widehat{\mathbf{X}}_t = \overline{\mathbf{X}} + \mathbf{P}_t^{\mathrm{c}} W_x^{\mathrm{c}^\top} + \mathbf{P}_t^{\mathrm{r}} W_x^{\mathrm{r}^\top}$

5: аналогично $\widehat{\mathbf{Y}}_t$

Расширение 1: переход в траекторное пространство



Выигрыш: фазовое пространство Такенса «распутывает» нелинейные зависимости, и CaSCA находит «чистые» причинные координаты даже при длинных лагах.

Параметры E, τ подбираются *autocorrelation* или *false-nearest-neighbors*.

Расширение 2: Риманово скрытое пространство

Мотивация

- EEG-сигналы многоканальны, шумны и содержат коррелированные компоненты.
- Ковариационные матрицы каналов естественно живут на многообразии SPD(n).
- Проекция в касательное пространство = «локальная евклидизация»: работает линейная CaSCA.

Пошаговый алгоритм

1. **XdawnCovariance.** *Из* N каналов формируем $n \ll N$ пространственных паттернов $\mathbf{\Sigma}_t \in \mathrm{SPD}(n)$ внутри окна Δt.
2. **Log-Tangent.**

$$\mathbf{C}_t = \log\left(\mathbf{\Sigma}_\star^{-1/2}\, \mathbf{\Sigma}_t\, \mathbf{\Sigma}_\star^{-1/2}\right) \in T_{\mathbf{\Sigma}_\star} \mathrm{SPD}(n),$$

где $\mathbf{\Sigma}_\star$ — геометрическое среднее.

Ключевая идея

Ковариации EEG являются точками на кривой SPD-многообразия; перевод в касательное пространство делает их «плоскими», после чего CaSCA отделяет *динамически-причинные* направления от *реконструктивного шума*.

Итоговые преимущества

Устойчивость к масштабированию и к артефактам отдельных электродов.

Геометрически корректная обработка SPD-данных.

Улучшенная предсказательная точность

Расширение CaSCA на глубокие сети

Заменяем линейную пару $\varphi_{\text{enc}}, \psi_{\text{enc}}$ на двухголовый **Cross-Attention** (CA) – она одновременно учится находить канонические представления, реализует задержки благодаря механизмам self-attention.

Модель *Deep-CaSCA*

Кодеры: $(P_t^c, P_t^r) = \Phi_\theta(\mathbf{X}_{1:t}),\ (Q_t^c, Q_t^r) = \Psi_\theta(\mathbf{Y}_{1:t})$ — трансформеры с CA-блоками.

Декодеры: $\widehat{\mathbf{X}}_t = \Phi_\theta^{-1}(P_t^r),\ \widehat{\mathbf{Y}}_t = \Psi_\theta^{-1}(Q_t^r)$.

Функция потерь:

$$\mathcal{L} \;=\; \lambda_{\mathsf{rec}} \big[\|\mathbf{X} - \widehat{\mathbf{X}}\|_F + \|\mathbf{Y} - \widehat{\mathbf{Y}}\|_F \big] \;+\; \lambda_{\mathsf{c}}\, \underbrace{\big(1 - \mathrm{corr}(P^c, Q^c)\big)}_{\text{«CCM–loss»}}$$

где `corr` вычисляется батчево.

Расширение CaSCA на глубокие сети

Теорема (Эквивалентность CA и CCA)

Пусть $\mathrm{CA}_k(\mathbf{X}, \mathbf{Y})$ *— одноголовая cross-attention без нелинейностей с k ключами. Если* $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$ *предварительно whiten-ированы, то выходные представления* $U = \mathrm{CA}_k(\mathbf{X}, \mathbf{Y}),\ V = \mathrm{CA}_k(\mathbf{Y}, \mathbf{X})$ *максимизируют выборочную корреляцию так же, как первые k канонических пар CCA.*

Cross-attention обучается поворачивать скрытое пространство так, чтобы каждая голова совпадала с каноническим направлением; сам механизм self-attention неявно реализует сдвиги $\mathbf{X}_{t-\tau} \to \mathbf{X}_t$.

Регуляризатор Сугихары: вспоминаем метод

Сходящийся перекрестный анализ

Теневое вложение:

$$M_{X,t} = \left(X_t,\, X_{t-\tau},\, \ldots,\, X_{t-(E-1)\tau}\right) \;\in\; \mathbb{R}^E,$$

где E — размерность вложения, τ — временной лаг.

Реконструкция:

$$\widehat{Y}_t | M_{X,t} = \sum_{i=1}^{k} w_i \, Y_{n_i},$$

здесь n_i — индексы ближайших соседей точки $M_{X,t}$ в пространстве M_X, а w_i — веса, зависящие от расстояния до $M_{X,t}$.

Критерий причинности:

$$\rho_{X \to Y} = \mathrm{corr}\Big(Y_t,\, \widehat{Y}_t | M_{X,t} \Big).$$

Если при увеличении размера "библиотеки" (множества рассматриваемых соседей) $\rho_{X \to Y}$ *сходится монотонно*, считается, что $\mathbf{X}(t)$ влияет на $\mathbf{Y}(t)$.

Регуляризатор Сугихары: статистические тесты сходимости

Проверяем, что $\rho_{X\to Y}(L)$ «устойчиво растёт» при увеличении длины библиотеки L

Шаг 1. Формируем последовательность оценок

$$\rho_{X\to Y}(L_0),\ \rho_{X\to Y}(L_1), \dots, \rho_{X\to Y}(L_{\max}), \quad L_0 = E,\ L_{\max} = T.$$

Шаг 2. *Тест Кендалла τ* — проверяем наличие значимого монотонного тренда $\rho_{X\to Y}(L_i) \nearrow$ при росте L_i.

$$H_0:\ \tau = 0 \quad \Longrightarrow \quad p_\tau < \alpha \ \text{(тренд есть)}$$

Шаг 3. *Тест Фишера ΔZ* — оцениваем, отличается ли $\rho_{X\to Y}(L_{\max})$ от $\rho_{X\to Y}(L_0)$ статистически значимо:

$$Z \ = \ \frac{\operatorname{atanh} \rho(L_{\max}) - \operatorname{atanh} \rho(L_0)}{\sqrt{\dfrac{1}{L_{\max} - 3} + \dfrac{1}{L_0 - 3}}}, \qquad p_Z < \alpha.$$

Решение. Считаем кросс-мап подтверждённым, если одновременно p_τ и p_Z меньше порога α (обычно $\alpha = 0.05$).

Регуляризатор Сугихары: обучение с учётом динамики

Цель CaSCA+CCM. Обучаемые параметры энкодеров/декодеров φ, ψ и весов A, B минимизируют

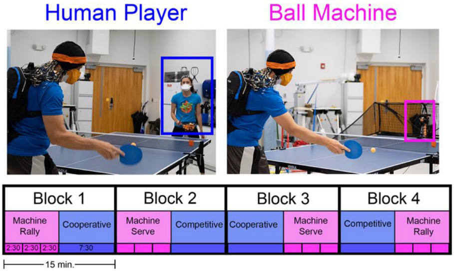
$$\boxed{\mathcal{L} = \lambda_{\text{rec}} \underbrace{\left(\|\mathbf{X}_t - \widehat{\mathbf{X}}_t\|_F + \|\mathbf{Y}_t - \widehat{\mathbf{Y}}_t\|_F\right)}_{\mathcal{L}_{\text{rec}}} + \lambda_\rho \underbrace{\left(-\rho^{\text{CCM}}_{X\to Y}(A,B)\right)}_{\text{causal score}} + \lambda_{\text{mono}} P^{\text{mono}} + \lambda_{\text{gap}} P^{\text{gap}}}$$

1. $\rho^{\text{CCM}}_{X\to Y}(A,B) = \operatorname{corr}\Big(Y_t,\ \widehat{Y}_t \mid M_{X,t}(A)\Big)$ — «skill» перекрёстной реконструкции (чем он выше, тем сильнее причинное влияние $X \to Y$).
2. $P^{\text{mono}} = \sum_{i=2}^{|\mathcal{L}|} \text{softplus}\Big(\rho(L_{i-1}) - \rho(L_i) + \varepsilon\Big)$ — штраф за любое *немонотонное* уменьшение CCM-корреляции при увеличении объёма библиотеки
3. $P^{\text{gap}} = \text{softplus}\Big(\delta - \Delta z\Big), \quad \Delta z = z\big(\rho(L_{\max})\big) - z\big(\rho(L_{\min})\big), \quad z(p) = \frac{1}{2}\ln\frac{1+p}{1-p}$ — штраф, если преобразованный прирост корреляции между минимальной и максимальной библиотеками меньше заданного порога δ.

Вычислительный эксперимент на данных ЭЭГ - ИИМ

Данные

У 25 участников были записаны показания ЭЭГ, ИИМ, МРТ во время игры в настольный теннис. С каждым участником было сыграно 4 сессии, длительность каждой из них составляет 7-10 минут.



Выносится на защиту

1. **Метод CaSCA.** Предложен причинный метод снижения размерности, выделяющий отдельное латентное подпространство для причинных компонент и обеспечивающий точную реконструкцию сигналов.
2. **Теоретические гарантии.** Доказано ортогональное разложение выборочной ковариации и строгая разделимость вариации на «причинный» и «реконструктивный» блоки в ортогональном пространстве состояний.
3. **Четыре расширения.** Разработаны модификации метода в траекторном, римановом и глубоком обучающих пространствах, а также регуляризатор CCM, вводящий динамическое ограничение Сугихары через дифференцируемый штраф.
4. **Выборка критериев оценки.** Сформулирован комплекс метрических показателей (мультиколлинеарность, реконструкция, улучшение качества прогноза) для объективного сравнения методов причинного анализа.
5. **Вычислительный эксперимент.** Проведены тесты на двух наборах данных (два IMU-датчика и EEG-IMU). CaSCA и его глубинная версия показали стабильное превосходство над PCA, CCA, PLS, LiNGAM и рядом современных CRL-подходов в исходном и траекторном пространствах.