Применение Recurrent Sigmoid Piecewise нейрона для прогнозирования временных рядов

Введение

Постановка задачи

Имеется временной ряд $x_1, ..., x_N$, сгенерированный некоторым вероятностным процессом $\{X_t\}$ с неизвестными совместными распределениями:

$$p(x_{t+k}, x_t, x_{t-1}, ..., x_{t-n}).$$

Процесс $\{X_t\}$ может быть как стационарным так и нестационарным. Если процесс нестационарный - в общем случае данная задача прогнозирования не имеет решения, так как вероятностные распределения нестационарного ряда в теории могут "меняться" как угодно, и распределения в будущем могут не иметь ничего общего с распределениями, на основе которых был сгенерирован имеющийся временной ряд. Однако на практике изменение вероятностных распределений нестационарных процессов с течением времени не происходит совершенно случайным образом. Поэтому прогнозирующие модели, оцененные на имеющемся в наличии временном ряде, обычно работают удовлетворительно на протяжении определенного периода времени даже при условии нестационарности соответствующего процесса.

Необходимо использовать данный временной ряд для нахождения прогнозирующей модели вида:

$$\hat{x}_{t+k} = f^*(x_t, ..., x_{t-n}),$$

которая минимизирует математическое ожидание ошибки:

$$f^* = argmin_f\{E_{p(x_{t+k}, x_t, x_{t-1}, ..., x_{t-n})}[L(f(x_t, ..., x_{t-n}), x_{t+k})]\},$$

где $L : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ - функция ошибки. Часто используется либо квадратическая $L(x, y) = (x - y)^2$ либо абсолютная ошибка $L(x, y) = |x - y|$. Поскольку рассчитать настоящее математическое ожидание невозможно (соответствующие вероятностные распределения неизвестны), вместо него используется среднее значение функции ошибки на тестовой подвыборке временного ряда:

$$f^* = argmin_f\{\frac{1}{M}\sum_{t=N-k-M+1}^{N-k} L(f(x_t, ..., x_{t-n}), x_{t+k})\}$$

.

Основные существующие методы прогнозирования

Линейные модели на основе модели ARIMA.
Модель ARIMA(p,d,q) это модель для описания временного ряда X_t следующего вида:

$$\Delta^d X_t = c + \sum_{i=1}^{p} a_i \Delta^d X_{t-i} + \sum_{j=1}^{q} b_j \varepsilon_{t-j} + \varepsilon_t,$$

где:

- ε_t - стационарный временной ряд, представляющий собой шум с нулевым математическим ожиданием;
- $c, a_1, ..., a_p, b_1, ..., b_q$ - параметры модели;
- Δ^d - оператор разности временного ряда порядка d (последовательное взятие d раз разностей первого порядка — сначала от временного ряда, затем от полученных разностей первого порядка, затем от второго порядка и т. д.).

Существуют разные методы для построения прогнозирующих ARIMA моделей, 2 наиболее известных - это линейная регрессия и методология Бокса-Дженкинса. Линейная регрессия заключается в построении частного случая ARIMA модели вида:

$$X_t = \sum_{i=1}^{p} a_i X_{t-i} + a_0,$$

где вектор параметров $\vec{a} = [a_0, a_1, ..., a_p]$ оценивается с помощью метода наименьших квадратов:

$$\vec{a} = (A^T A)^{-1} A^T b,$$

где A, b - матрица и вектор получаемые из исходного временного ряда применяя скользящее окно размера p.
Методология Бокса-Дженкинса позволяет оценивать полную ARIMA модель, но часто требует "экспертного вмешательства" для определения параметров p, q, d, так как существуют различные тесты для их определения, и необходимо выбирать тот либо иной тест и критические значения выбранного теста.
Искусственные нейронные сети.

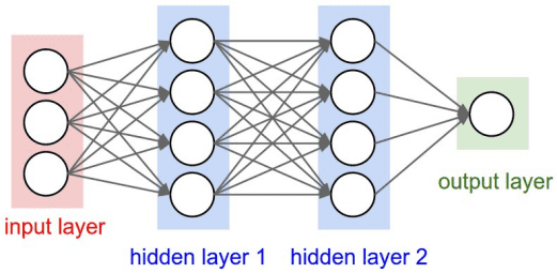
Искусственные нейронные сети представляют собой систему взаимосвязанных искусственных нейронов, где каждый нейрон обычно реализует простую функцию вида:

$$f(x; w) = u(w \cdot x); x, w \in \mathbb{R}^n$$

где $u : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ - некоторая нелинейная функция, называемая функцией активации. Наиболее популярные функции активации:

- $ReLU(x; w) = max(0, w \cdot x)$
- $\sigma(x; w) = \frac{1}{1+e^{-w \cdot x}}$
- $tanh(x; w) = tanh(w \cdot x) = \frac{2}{1+e^{-2w \cdot x}} - 1$

В контексте задачи прогнозирования популярными являются искусственные нейронные сети прямого распространения (feedforward neural network) со структурой вида:



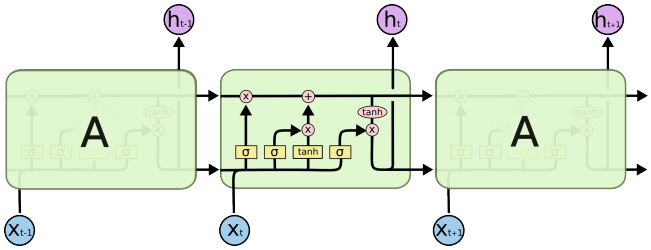
которые по сути являются нелинейной вариацией AR-модели: $X_t = f(X_{t-1}, ..., X_{t-p})$ - где f - функция, реализуемая нейронной сетью. Настройка параметров нейронной сети, также называемая обучением, обычно производится применением некоторой вариации алгоритма градиентного спуска:

- Для относительно небольших сетей и временных рядов можно применять алгоритм Левенберга-Марквардта, который на практике часто находит значение параметров, близкое к оптимальному, и делает это значительно быстрее других алгоритмов (опять же, при условии небольшого количества параметров и длины временного ряда).
- Для больших сетей но относительно коротких временных рядов часто применяют "стандартный" алгоритм градиентного спуска либо его модификации типа алгоритма Adam, LBFGS, где градиент рассчитывается сразу для всего временного ряда.
- Для больших сетей и длинных временных рядов используются "пакетные" вариации алгоритмов из предыдущего пункта, в которых на каждой итерации градиент рассчитывается только для определенного под-множества - "пакета" данных.

Кроме оптимизации непосредственно параметров нейронной сети с заданной структурой также необходимо определить саму структуру сети. Кроме варианта применения определенных эвристик для "ручного" задания структуры также возможно применение алгоритмов автоматического подбора структуры: наиболее популярными являются алгоритмы обучения с подкреплением, эволюционные алгоритмы и алгоритмы "семейства" МГУА.

Рекуррентные нейронные сети.

В задачах обработки естественного языка, таких как построение языковых моделей, автоматический перевод текста и пр. хорошо себя "зарекомендовали"рекуррентные нейронные сети на основе Long Short Term Memory (LSTM) и/или Gated Recurrent Unit (GRU) нейронов. Данные нейроны имеют схожую структуру, которая позволяет уменьшить влияние проблемы затухающего/взрывающегося градиента при обучении рекуррентных моделей с использованием Backpropagation Through time (BPTT) алгоритма на длинных последовательностях. За счет этого, на практике, сети с этими нейронами более стабильны в обучении и имеют большую "точность"при работе на длинных последовательностях. LSTM-нейрон имеет следующую структуру:



Полное математическое описание классического LSTM нейрона:

$$f_t = \sigma(W_f \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_f)$$

$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_i)$$

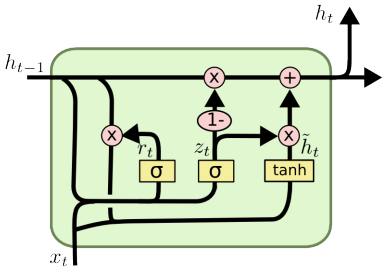
$$\tilde{C}_t = tanh(W_C \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_C)$$

$$C_t = f_t * C_{t-1} + i_t * \tilde{C}_t$$

$$o_t = \sigma(W_o \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_o)$$

$$h_t = o_t * tanh(c_t)$$

GRU нейрон это, по сути, упрощенная версия LSTM нейрона:



$$z_t = \sigma\left(W_z \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$r_t = \sigma\left(W_r \cdot [h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$\tilde{h}_t = \tanh\left(W \cdot [r_t * h_{t-1}, x_t]\right)$$
$$h_t = (1 - z_t) * h_{t-1} + z_t * \tilde{h}_t$$

В данном нейроне вектор выходов h_t так же "выполняет" роль вектора контекста, и используются следующие блоки:

- Блок обновления $z_t(x_t, h_{t-1}; W_z)$, рассчитывающий веса в диапазоне $(0, 1)$, которые применяются для рассчета нового вектора выходов (и, одновременно, контекста) h_t исходя из вектора-кандидата $\tilde{h}_t$ и предыдущего вектора h_{t-1}
- Блок "релевантности" $r_t(x_t, h_{t-1}; W_r)$, рассчитывающий веса в диапазоне $(0, 1)$, которые определяют "релевантность"/"важность" значений предыдущего выходного вектора h_{t-1} при рассчете вектора-кандидата для нового выходного вектора $\tilde{h}_t$
- Блок рассчета вектора-кандидата новых выходов $\tilde{h}_t(x_t, h_{t-1}, r_t; W)$
- Блок рассчета нового вектора выходов $h_t(h_{t-1}, \tilde{h}_t, z_t)$ как взвешенной суммы соответствующих значений из предыдущего вектора h_{t-1} и нового вектора-кандидата $\tilde{h}_t$, где веса для значений под индексом i выбираются как $1 - z_t[i]$ и $z_t[i]$ соответственно.

Гибридные модели, boosting, bagging.
ДОПОЛНИТЬ

Recurrent Sigmoid Piecewise (RSP) нейрон

В данной работе предлагается новая модель рекуррентного нейрона Recurrent Sigmoid Piecewise (RSP), в основе которой лежит Sigmoid Piecewise (SP) нейрон со следующей математической моделью:

$$SP(x; w_+, w_-, s, k) = \frac{w_+ \cdot x}{1 + e^{-k(s \cdot x)}} + \frac{w_- \cdot x}{1 + e^{k(s \cdot x)}}$$

Используя обозначение сигмоидального нейрона:

$$\sigma(x; s) = \frac{1}{1 + e^{s \cdot x}}$$

и $k = 1$ получаем:

$$SP(x; w_+, w_-, s) = \sigma(x; s)(w_+ \cdot x) + \sigma(x; -s)(w_- \cdot x)$$

Используя равенство $\sigma(x; -s) = 1 - \sigma(x; s)$:

$$SP(x; w_+, w_-, s) = (1 - \sigma(x; s))(w_- \cdot x) + \sigma(x; s)(w_+ \cdot x)$$

Если вместо одного SP нейрона описывается слой из N нейронов, то вместо векторов w_+, w_-, s будут использоваться матрицы W_+, W_-, S:

$$SP(x; W_+, W_-, S) = (1 - \sigma(x; S)) * (W_- \cdot x) + \sigma(x; S) * (W_+ \cdot x)$$

Введя обозначения $z = \sigma(x; S)$, $a = W_- \cdot x$ и $b = W_+ \cdot x$ получаем:

$$SP(x) = (1 - z) * a + z * b$$

Что очень похоже на блок рассчета нового вектора выходов в нейроне GRU:

$$h_t = (1 - z_t) * h_{t-1} + z_t * \tilde{h}_t$$

Таким образом, слегка изменив SP нейрон, можно получить его рекуррентную версию, Recurrent Sigmoid Piecewise (RSP) нейрон, который принимает на вход вектор $p_t = [h_{t-1}, x_t]$ и выдает h_t:

$$h_t = RSP(p_t; W_+, W_-, S) = (1 - \sigma(p_t; S)) * (W_- \cdot p_t) + \sigma(p_t; S) * (W_+ \cdot p_t)$$

Либо же, по аналогии с LSTM/GRU нейронами, мат. модель RSP нейрона можно записать в несколько этапов/блоков:

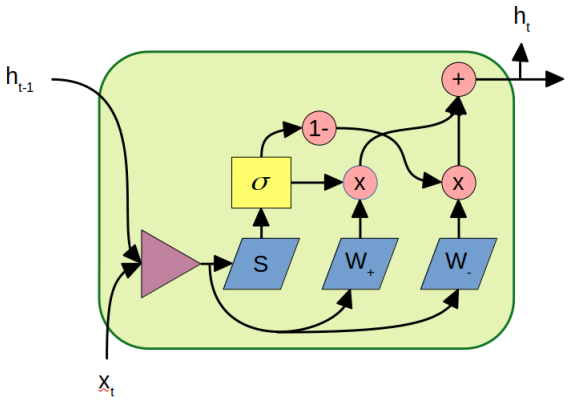
$$z_t = \sigma(S \cdot [h_{t-1}, x_t])$$

$$q_t = W_- \cdot [h_{t-1}, x_t]$$

$$\tilde{h}_t = W_+ \cdot [h_{t-1}, x_t]$$

$$h_t = (1 - z_t) * q_t + z_t * \tilde{h}_t$$

И представить их в виде структурной схемы:



Поверхностно сравнив RSP нейрон с LSTM и GRU нейронами можно сделать следующие наблюдения:

- Математическая модель RSP нейрона проще (используется лишь один нелинейный сигмоидальный блок) чем модели LSTM и GRU нейронов. В задаче прогнозирования временных рядов более простые модели часто предпочтительны на практике.
- При этом, RSP так же как и LSTM и GRU нейроны позволяет забывать определенные значения в векторе контекста при необходимости.

Применение рекуррентных сетей на основе RSP нейронов для прогнозирования временных рядов

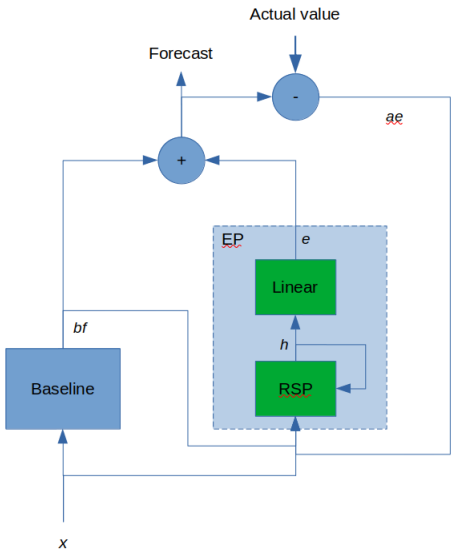
Стандартную линейную ARMA модель можно обобщить следующим образом:

$$X_t = \varepsilon_t + f(X_{t-1}, ..., X_{t-p}) + g(\varepsilon_{t-1}, ..., \varepsilon_{t-q}),$$

где $f : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}, g : \mathbb{R}^q \to \mathbb{R}$ - некоторые функции, в общем случае нелинейные. Наиболее общее описание нелинейной ARMA модели будет иметь вид:

$$X_t = \varepsilon_t + f(X_{t-1}, ..., X_{t-p}, \varepsilon_{t-1}, ..., \varepsilon_{t-q}),$$

где $f : \mathbb{R}^{p+q} \to \mathbb{R}$ - нелинейная функция. На основе этого обобщения предлагается следующая схема прогнозирования временных рядов:

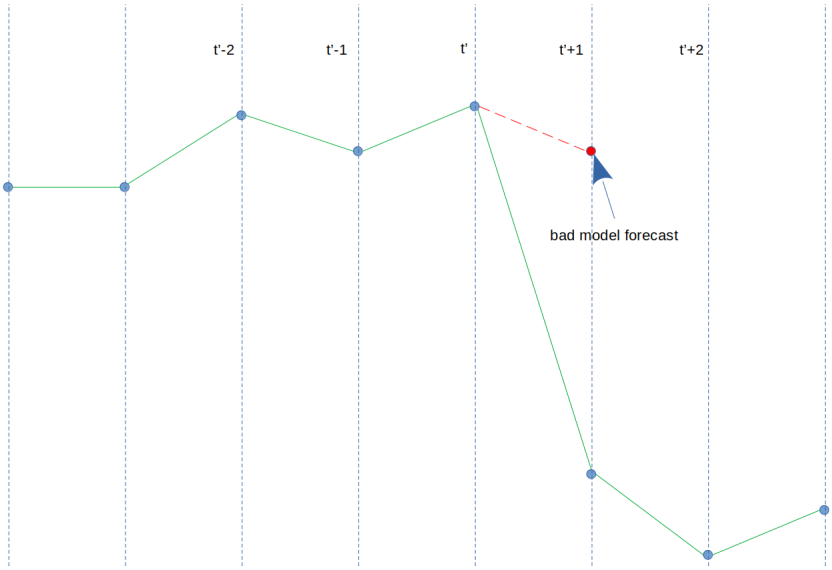


где:

- x - входной вектор, предыдущие значения часового ряда (либо нескольких рядов)

- **Baseline** - "базисная" прогнозирующая модель, рассчитывающая начальную оценку прогноза, например линейная регрессия; соответственно b_t - базисное значение прогноза в момент времени t
- **EP** - error prediction блок, рассчитывающий оценку ошибки прогноза $\hat{e}_t$ базисного метода на основе: входного вектора, самого значения базисного прогноза и настоящей ошибки прогноза с предыдущего шага
- Базисный прогноз b_t и оценка ошибки $\hat{e}_t$ складываются для получения финального прогноза: $f_t = b_t - \hat{e}_t$
- На следующем шаге прогнозирования $t+1$ также рассчитывается настоящая ошибка прогноза с предыдущего шага $e_{t+1} = f_{t+1} - x_{t+1}$ и передается в блок рассчета ошибки прогноза текущего шага
- Блок рассчета ошибки состоит из RSP нейрона и простого линейного слоя. По своей математической модели RSP нейрон может "естественным"способом рассчитывать новое значение коррекции как взвешенную сумму предыдущей ошибки и нового значения контекста.

Основным отличием данной прогнозирующей схемы от обычного использования прогнозирующей модели является блок предсказания ошибки. По сути, данный блок является нелинейной вариацией MA блока в модели ARMA. Использование этого блока позволяет схеме динамически реагировать на изменения в качестве прогноза базисной модели. Например, пускай для некоторого момента времени t' получена достаточно большая ошибка прогноза $e_{t'+1} = f_{t'+1} - x_{t'+1}, e_{t'+1} > 0$, то есть прогноз модели оказался значительно больше реального значения. Одной из возможных причин может быть неожиданный для модели скачок "вниз"временного ряда:

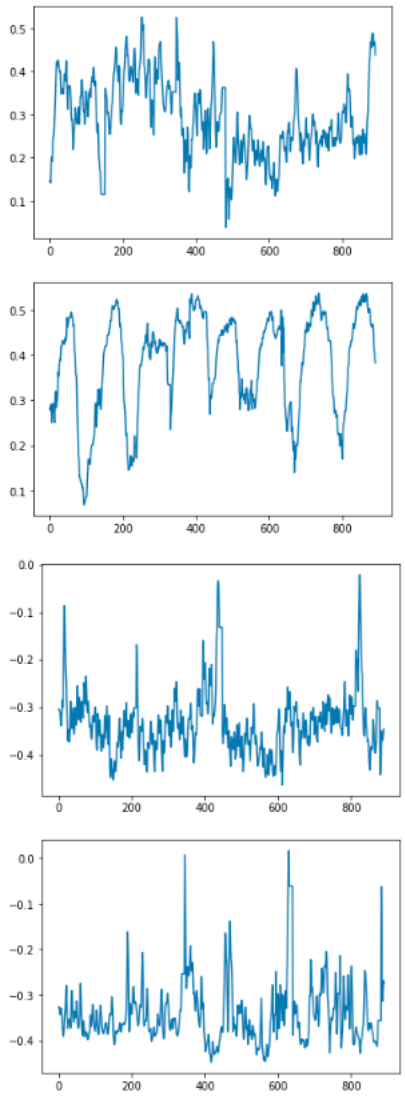


В таком случае можно ожидать, что в момент времени $t'+1$ прогноз базисной модели также окажется больше, и блок ПО сможет его скорректировать путем предсказания оценки ошибки $\hat{e}_{t'+2} > 0$. И наоборот - при неожиданном скачке "вверх"на шаге t' будет получена большая негативная ошибка прогноза $e_{t'+1} < 0$ - тогда на шаге $t'+1$ прогноз базисной модели может также быть меньше реального значения, и блок ПО сможет его скорректировать путем предсказания оценки ошибки $\hat{e}_{t'+2} < 0$. Преимущества данной схемы:

- В качестве базисной модели можно брать прогнозирующую модель, полученную в результате применения любого существующего метода прогнозирования, и таким образом в процессе обучения EP блок будет пытаться только улучшать прогноз базисной модели.
- Рассчет настоящего значения ошибки прогноза с предыдущего шага (шагов) в теории дает возможность EP блоку динамически "реагировать"на изменения в качестве прогноза.
- Мат. модель RSP нейрона естественным образом подходит для рассчета некоторой ошибки прогноза.
- В теории возможно поэтапное обучение EP и базисного блоков - на первом этапе обучаем параметры EP блока, на втором - фиксируем их и обучаем параметры базисного блока и т.д.

Практические примеры использования рекуррентных RSP сетей

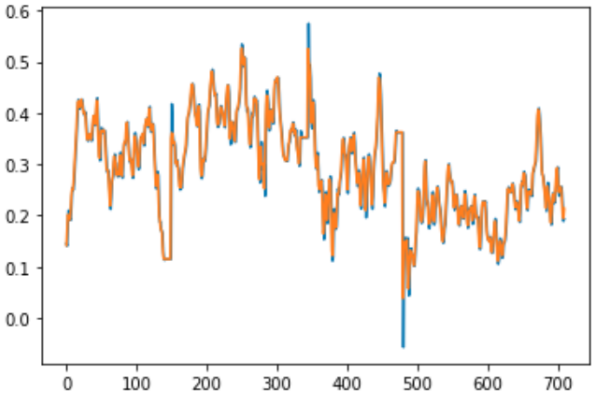
Для тестирования использовались показатели сердечного ритма 4 разных пациентов в разных состояниях:



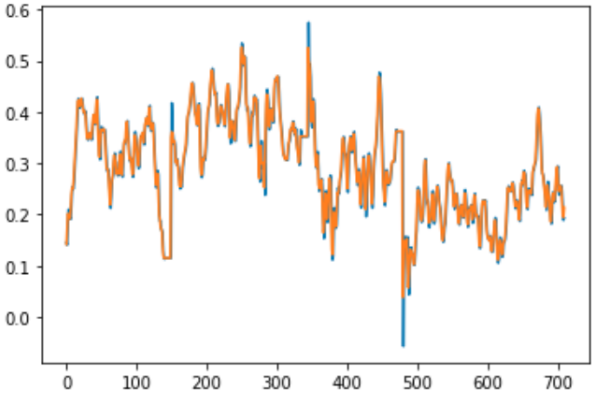
Построив "базисную"модель - оптимальный линейный предиктор получаем следующие среднеквадратические ошибки прогноза на обучающей и тестовой выборке (усредненный по всем 4 пациентам):

$$L_{train}^{baseline} = 0.0004731$$
$$L_{test}^{baseline} = 0.00048$$

Пример прогнозов линейного предиктора для одного пациента на обучающей:



и тестовой:



выборках.

После "фиксации"базисного предиктора, добавления блока корекции на основе RSP нейрона и обучения его параметров получаем следующие значения среднеквадратических ошибок:

$$L_{train}^{new} = 0.0004442$$

$$L_{test}^{new} = 0.00046$$

что соотвествует приблизительно 5% уменьшению среднеквадратической ошибки прогноза.

РАСШИРИТЬ ЭТУ ЧАСТЬ

Выводы и дальнейшие направления работы