

Санкт-Петербургский государственный университет

Прикладная математика и информатика

Отчет по учебной практике 4 (научно-исследовательской работе)

МОДИФИКАЦИИ МЕТОДА АНАЛИЗА СИНГУЛЯРНОГО СПЕКТРА ДЛЯ
АНАЛИЗА ВРЕМЕННЫХ РЯДОВ: CIRCULANT SSA И GENERALIZED SSA

Выполнил:

Погребников Николай Вадимович
группа 21.Б04-мм

Научный руководитель:

д. ф.-м. н., доц.

Голяндина Нина Эдуардовна

Кафедра Статистического Моделирования

Санкт-Петербург

2025

Содержание

1 Введение	3
2 Метод Singular spectrum analysis (SSA)	5
2.1 Алгоритм метода SSA	5
2.2 Свойства SSA	6
3 Метод Generalized singular spectrum analysis (GSSA)	10
3.1 Алгоритм метода GSSA	10
3.2 Свойства GSSA	11
4 Сравнение SSA и GSSA	13
4.1 Линейные фильтры	13
4.2 Отделение сигнала от шума	15
4.3 Фильтры в различных точках	15
5 Метод Circulant singular spectrum analysis (CiSSA)	18
5.1 Алгоритм метода CiSSA	18
5.2 Свойства	22
5.3 Обзор литературы	23
6 Различия SSA, CiSSA и Фурье	25
6.1 Автоматическая группировка	25
6.2 Собственные пространства	25
6.3 Точная разделимость	25
6.4 Асимптотическая разделимость	26
6.5 Выделение тренда	27
6.6 Отделение сигнала от шума	28
6.7 Разделение непериодических составляющих между собой	30
6.8 Преимущества и недостатки методов SSA, Фурье и CiSSA	30
6.9 Проверка алгоритмов на реальных данных	31
7 Многомерные варианты базового SSA	35
7.1 MSSA	35
7.2 2d-ssa	36
8 Метод Functional singular spectrum analysis (FSSA)	38
8.1 Алгоритм FSSA	38
8.2 Разделимость	40
9 Сравнение FSSA, MSSA, 2d-SSA	42
9.1 Численное сравнение	42
10 Заключение	44
11 Список литературы	

1 Введение

Временные ряды представляют собой упорядоченную последовательность данных, собранных или измеренных в хронологическом порядке. Они играют ключевую роль в анализе и прогнозировании различных явлений в таких областях, как экономика, финансы, климатология и медицина. Понимание эволюции этих явлений во времени критично для выявления тенденций, циклов и аномалий.

Для уточнения терминологии, следует отметить, что **временной ряд длины N** представляет собой упорядоченную конечную последовательность значений, которая записывается как $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$, где $N > 2$, $x_i \in \mathbb{R}$. Одним из основных аспектов анализа временных рядов является разделение их на составляющие компоненты. Среди таких компонентов важными являются **тренд**, который отражает медленно изменяющуюся долгосрочную динамику ряда, и **сезонность**, представляющая собой периодические колебания, вызванные повторяющимися факторами, такими как климатические или экономические циклы.

Для эффективного анализа и понимания структуры временных рядов разработаны различные методы, позволяющие разделить ряд на его компоненты. Существует два вида разделимости: **точная разделимость**, которая характеризует способность метода точно выделять отдельные компоненты ряда, и **асимптотическая разделимость**, которая описывается следующим образом:

Определение 1. Есть метод разделения ряда на компоненты с параметрами Θ , ряд $\mathbf{X} = \mathbf{X}^{(1)} + \mathbf{X}^{(2)}$. Существуют такой фиксированный набор параметров $\hat{\Theta}$ и последовательность $L = L(N)$, $N \rightarrow \infty$, что при разделении ряда на компоненты этим методом, $\hat{\mathbf{X}}^{(1)}$ является оценкой $\mathbf{X}^{(1)}$, при этом, $\text{MSE}(\mathbf{X}^{(1)}, \hat{\mathbf{X}}^{(1)}) \rightarrow 0$, где MSE — среднеквадратическая ошибка. Тогда ряды $\mathbf{X}^{(1)}$ и $\mathbf{X}^{(2)}$ называются асимптотически $L(N)$ -разделимыми данным методом.

Замечание 1. $\hat{\mathbf{X}}^{(2)} = \mathbf{X} - \hat{\mathbf{X}}^{(1)}$ является оценкой для $\mathbf{X}^{(2)}$, выполнено $\text{MSE}(\mathbf{X}^{(2)}, \hat{\mathbf{X}}^{(2)}) \rightarrow 0$.

Методы разделения временных рядов играют ключевую роль в выделении тренда, сезонности и других структурных компонентов, что позволяет глубже понять и моделировать временные зависимости.

В данной работе будут рассмотрены следующие постановки задачи разделения временных рядов:

1. Разделение временного ряда на компоненты, соответствующие определенным частотным диапазонам;
2. Разделение временного ряда на компоненты без привязки к частотным характеристикам, то есть в их исходном виде.

Анализ сингулярного спектра (**SSA** [5]) — метод, целью которого является разложение оригинального ряда на сумму небольшого числа интерпретируемых компонентов, таких как медленно изменяющаяся тенденция (тренд), колебательные компоненты (сезонность) и шум. Позволяет решать как задачу в формулировке 1, так и её обобщение, представленное в 2. При этом, базовый алгоритм метода **SSA** не требует стационарности ряда, знания модели тренда, а также сведений о наличии в ряде периодиках, а за счет своего аддитивного базиса позволяет подстраиваться под любой входной ряд.

В данном исследовании рассматриваются модификации **SSA**, предложенные другими авторами, а именно, **GSSA** [8] и **CiSSA** [1], **FSSA** [9].

GSSA отличается от базового **SSA** тем, что он добавляет веса на определенном этапе алгоритма **SSA**. В некоторых случаях это может оказаться полезным, в других — повлиять на разделимость в худшую сторону. Это исследование раскрывает смысловую ценность **GSSA** с точки зрения линейных фильтров и отмечает ситуации, где такой алгоритм предпочтительнее стандартного **SSA**.

В алгоритме **CiSSA** предложено решение задачи разделения временного ряда на заранее известные компоненты (задача в постановке 1), отвечающие конкретным периодикам. За счет этого можно автоматически группировать компоненты по частотам, однако именно поэтому алгоритм лишается адаптивности, которая имеется в **SSA**.

FSSA рассматривается как многомерная модификация **SSA**, основанная на скрещивании подходов функционального анализа и теории **SSA**.

Целью работы является описание модификаций в контексте теории **SSA** и на этой основе сравнение методов по теоретическим свойствам и численно.

Далее кратко опишем структуру работы. В разделе 2 рассматривается базовый метод **SSA** и его ключевые свойства. В секциях 3, 4 показан алгоритм **GSSA** и проведено сравнение с **SSA**. В следующих разделах 5, 6 представлен метод **CiSSA**, также с описанием его основных характеристик и проведено сравнение с **SSA**. Раздел 7 посвящен модификациям **MSSA** и **2d-SSA** базового **SSA** для использования его в многомерном случае. Затем в секциях 8, 9 рассматривается алгоритм **FSSA** и его сравнение с **2d-SSA**, **MSSA**. В заключительной секции 10 подведены основные итоги исследования.

В предыдущей научно-исследовательской работе было проведено сравнение алгоритмов **SSA** и **CiSSA** с точки зрения их способности к разделению временных рядов. Для этого была написана реализация алгоритма **CiSSA** на языке программирования R, проведено сравнение с методами **SSA** и преобразованием Фурье. Кроме того, была создана реализация алгоритма **GSSA** на языке R, и проведено сравнение его достоинств и недостатков с методом **SSA**.

В рамках текущего исследования было продолжено изучение указанных методов. Конкретнее, было рассмотрено влияние конкретной точки во времени на ошибку временного ряда для методов **GSSA** и **SSA**. Кроме того, список примеров для **CiSSA** был дополнен анализом сумм экспоненциально-модулированных гармоник. А также были изучены практические применения метода **CiSSA**. Наконец, было проведено численное сравнение методов **MSSA**, **2d-SSA** и **FSSA** с численной оценкой их эффективности.

2 Метод Singular spectrum analysis (SSA)

Рассмотрим базовый метод сингулярного спектрального анализа [5].

2.1 Алгоритм метода SSA

Пусть $N > 2$, вещественнозначный временной ряд $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ длины N . Базовый алгоритм **SSA** состоит из четырех шагов.

2.1.1 Вложение

Параметром этого шага является L — некоторое целое число (длина окна), $1 < L < N$. Строится L -траекторная матрица \mathbf{X} , состоящая из $K = N - L + 1$ векторов вложения:

$$\mathcal{J}(\mathbf{X}) = \mathcal{J}_{SSA}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_K \\ x_2 & x_3 & x_4 & \dots & x_{K+1} \\ x_3 & x_4 & x_5 & \dots & x_{K+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_L & x_{L+1} & x_{L+2} & \dots & x_N \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Полезным свойством является то, что матрица \mathbf{X} имеет одинаковые элементы на антидиагоналях. Таким образом, L -траекторная матрица является ганкелевой. \mathcal{J}_{SSA} называется оператором вложения.

2.1.2 Сингулярное разложение (SVD)

Результатом этого шага является сингулярное разложение (**SVD**) траекторной матрицы ряда.

Пусть $\mathbf{S} = \mathbf{X}\mathbf{X}^T$, $\lambda_1, \dots, \lambda_L$ — собственные числа матрицы \mathbf{S} , взятые в неубывающем порядке, и U_1, \dots, U_L — ортонормированная система собственных векторов, соответствующих собственным числам матрицы \mathbf{S} .

Определим $d = \max\{i : \lambda_i > 0\}$ и $V_i = \mathbf{X}^T U_i / \sqrt{\lambda_i}$. Тогда сингулярным разложением называется представление матрицы в виде:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_1 + \dots + \mathbf{X}_d = \sum_{i=1}^d \sqrt{\lambda_i} U_i V_i^T. \quad (2)$$

Набор $(\sqrt{\lambda_i}, U_i, V_i^T)$ называется i -й собственной тройкой разложения (2).

2.1.3 Группировка

На основе разложения (2) производится процедура группировки, которая делит все множество индексов $\{1, \dots, d\}$ на m непересекающихся подмножеств I_1, \dots, I_m . Это разбиение является параметром шага группировки.

Пусть $I = \{i_1, \dots, i_p\}$, тогда $\mathbf{X}_I = \mathbf{X}_{i_1} + \dots + \mathbf{X}_{i_p}$. Такие матрицы вычисляются для каждого $I = I_1, \dots, I_m$. В результате получаются матрицы $\mathbf{X}_{I_1}, \dots, \mathbf{X}_{I_m}$. Тем самым разложение (2) может быть записано в сгруппированном виде:

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_{I_1} + \dots + \mathbf{X}_{I_m}.$$

2.1.4 Диагональное усреднение

Пусть \mathbf{Y} — матрица размерности $L \times K$. $L^* = \min(L, K)$, $K^* = \max(L, K)$. Диагональное усреднение переводит матрицу \mathbf{Y} в временной ряд g_1, \dots, g_N :

$$g_k = \begin{cases} \frac{1}{k+1} \sum_{m=1}^{k+1} y_{m,k-m+2}^* & \text{для } 1 \leq k < L^*, \\ \frac{1}{L^*} \sum_{m=1}^{L^*} y_{m,k-m+2}^* & \text{для } L^* \leq k < K^* + 1, \\ \frac{1}{N-k} \sum_{m=k-K^*+2}^{N-K^*+1} y_{m,k-m+2}^* & \text{для } K^* + 1 \leq k \leq N. \end{cases}$$

После применения этой операции к матрицам $\mathbf{X}_{I_1}, \dots, \mathbf{X}_{I_m}$, получаются m новых рядов: $\tilde{\mathbf{X}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{X}}_m$. Результатом данного шага и всего алгоритма является разложение временного ряда $\mathbf{X} = \tilde{\mathbf{X}}_1 + \dots + \tilde{\mathbf{X}}_m$.

То же самое можно переписать в операторном виде:

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathcal{J}^{-1} \circ \Pi_{\mathcal{H}}(\tilde{\mathbf{X}}^{(k)}),$$

$$(\Pi_{\mathcal{H}} Y)_{ij} = \sum_{(l,k) \in A_s} y_{lk}/w_s, \quad (3)$$

где $s = i + j - 1$, $A_s = \{(l, k) : l + k = s + 1, 1 \leq l \leq L, 1 \leq k \leq K\}$ и $w_s = |A_s|$ обозначает количество элементов в множестве A_s . $\Pi_{\mathcal{H}}$ — оператор проектирования.

2.2 Свойства SSA

2.2.1 Ранг ряда

Зафиксируем ряд $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ длины $N > 3$ и длину окна L .

Рассмотрим базовый **SSA**. В процессе процедуры вложения получаем последовательность векторов вложения:

$$\mathbf{X}_i^{(L)} = \mathbf{X}_i = (x_{i-1}, \dots, x_{i+L-2}), \quad i = 1, \dots, K,$$

$\mathcal{L}^{(L)} = \mathcal{L}^{(L)}(\mathbf{X}) \stackrel{\text{def}}{=} \text{span}(\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_K)$ — траекторное пространство ряда \mathbf{X} . При этом, если $\dim \mathcal{L}^{(L)} = \text{rank } \mathbf{X} = d$, то будем говорить, что ряд \mathbf{X} имеет L -ранг d и записывать это как $\text{rank}_L = d$.

2.2.2 Точная разделимость

Пусть временной ряд $\mathbf{X} = \mathbf{X}^{(1)} + \mathbf{X}^{(2)}$ и задачей является нахождение этих слагаемых. В результате базового алгоритма **SSA** при $m = 2$ также получаем 2 ряда. Возникает вопрос: в каких случаях мы можем так выбрать параметр алгоритма L и так сгруппировать собственные тройки, чтобы получить исходные ряды без смешиваний? При выборе длины окна L каждый из рядов $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \mathbf{X}$ порождает траекторную матрицу $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \mathbf{X}$.

Определение 2. Будем говорить, что ряды $\mathbf{X}^{(1)}$ и $\mathbf{X}^{(2)}$ слабо L -разделимы, если пространства, порожденные строками $\mathbf{X}^{(1)}$ и $\mathbf{X}^{(2)}$ соответственно, ортогональны. То же самое должно выполняться для столбцов [5].

Если выполняется условие слабой L -разделимости, тогда существует такое сингулярное разложение траекторной матрицы \mathbf{X} ряда \mathbf{X} , что его можно разбить на две части, являющиеся сингулярными разложениями траекторных матриц рядов $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}$ [5].

Определение 3. Будем говорить, что ряды $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}$ сильно L -разделимы, если они слабо L -разделимы и после процедуры SVD множества сингулярных чисел траекторных матриц рядов не имеют совпадений [5].

Если выполняется условие сильной L -разделимости, тогда любое сингулярное разложение траекторной матрицы \mathbf{X} ряда \mathbf{X} можно разбить на две части, являющиеся сингулярными разложениями траекторных матриц рядов $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}$ [5]. Это будет означать, что для разложения ряда базовым методом SSA с $m = 2$ и таким L будет выполняться $MSE(\mathbf{X}^{(1)}, \hat{\mathbf{X}}^{(1)}) = 0$ (а значит и $MSE(\mathbf{X}^{(2)}, \hat{\mathbf{X}}^{(2)}) = 0$).

Рассмотрим таблицу, в которой знаком + отмечены пары рядов, для которых существуют параметры функций и параметры метода L и $K = N - L + 1$, при которых они разделимы (точно разделимы). Данная таблица 1 и условия разделимости с доказательствами взяты из книги [5].

Таблица 1: Точная разделимость

	const	cos	exp	exp cos	ak+b
const	-	+	-	-	-
cos	+	+	-	-	-
exp	-	-	-	+	-
exp cos	-	-	+	+	-
ak+b	-	-	-	-	-

Отметим, что + в таблице 1 для $\mathbf{X}_n^{(\cos_1)} = A_1 \cos(2\pi\omega_1 n + \varphi_1)$, $\mathbf{X}_n^{(\cos_2)} = A_2 \cos(2\pi\omega_2 n + \varphi_2)$ достигается, если $L\omega_1 \in \mathbb{N}$, $K\omega_1 \in \mathbb{N}$ или $L\omega_2 \in \mathbb{N}$, $K\omega_2 \in \mathbb{N}$, $\omega_1 \neq \omega_2$ [5].

Однако, по таблице 1 видно, что условия точной разделимости достаточно жесткие и вряд ли выполнимы в реальных задачах. Тогда появляется такое понятие, как асимптотическая разделимость.

2.2.3 Асимптотическая разделимость

Для любого ряда \mathbf{X} длины N определим $\mathbf{X}_{i,j} = (x_{i-1}, \dots, x_{j-1})$, $1 \leq i \leq j < N$. Пусть $\mathbf{X}^{(1)} = (x_0^{(1)}, \dots, x_{N-1}^{(1)}), \mathbf{X}^{(2)} = (x_0^{(2)}, \dots, x_{N-1}^{(2)})$. Тогда определим коэффициент корреляции следующим образом:

$$\rho_{i,j}^{(M)} = \frac{(\mathbf{X}_{i,i+M-1}^{(1)}, \mathbf{X}_{j,j+M-1}^{(2)})}{\|\mathbf{X}_{i,i+M-1}^{(1)}\| \|\mathbf{X}_{j,j+M-1}^{(2)}\|}.$$

Определение 4 ([5]). Ряды $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}$ называются ε -разделимыми при длине окна L , если

$$\rho^{(L,K)} \stackrel{\text{def}}{=} \max \left(\max_{1 \leq i,j \leq K} |\rho_{i,j}^{(L)}|, \max_{1 \leq i,j \leq L} |\rho_{i,j}^{(K)}| \right) < \varepsilon.$$

Определение 5 ([5]). Если $\rho^{(L(N), K(N))} \rightarrow 0$ при некоторой последовательности $L = L(N)$, $N \rightarrow \infty$, то ряды $X^{(1)}, X^{(2)}$ называются асимптотически $L(N)$ -разделимыми.

Как можно заметить по таблице 2, для гораздо большего класса функций асимптотическая разделимость имеет место [5].

Таблица 2: Асимптотическая разделимость

	const	cos	exp	exp cos	ak+b
const	-	+	+	+	-
cos	+	+	+	+	+
exp	+	+	+	+	+
exp cos	+	+	+	+	+
ak+b	-	+	+	+	-

2.2.4 Алгоритмы улучшения разделимости

Для **SSA** существуют алгоритмы улучшения разделимости. По заданному набору компонент, они позволяют более точно отделять временные ряды друг от друга. В данной работе будут использоваться методы EOSSA и FOSSA. Подробнее про них можно почитать в [3].

Кроме того, применение алгоритмов улучшения разделимости позволяет не только понизить ошибку разделения **SSA**, но и автоматически группировать компоненты в соответствии с заранее заданными частотами.

2.2.5 SSA как линейный фильтр

Разложение временного ряда методом **SSA** можно интерпретировать как применение линейных фильтров. Для дальнейшего исследования введем следующие определения.

Определение 6. Рассмотрим бесконечный временной ряд $X = (\dots, x_{-1}, x_0, x_1, \dots)$. Линейный конечный фильтр — это оператор Φ , который преобразует временной ряд X в новый по следующему правилу:

$$y_j = \sum_{i=-r_1}^{r_2} h_i x_{j-i}; \quad r_1, r_2 < \infty.$$

Набор коэффициентов h_i — импульсная характеристика фильтра.

Там, где не оговорено обратного, будем называть линейный конечный фильтр просто линейным фильтром.

Определение 7. Передаточная функция линейного фильтра Φ :

$$H_\Phi(z) = \sum_{i=-r_1}^{r_2} h_i z^{-i}.$$

Определение 8. Амплитудно-частотная характеристика (АЧХ) линейного фильтра Φ :

$$A_\Phi(\omega) = |H_\Phi(e^{i2\pi\omega})|.$$

АЧХ фильтра — это график или функция, которая показывает, как фильтр изменяет амплитуды (силу) разных частот входного сигнала.

Определение 9. Фазово-частотная характеристика ($\Phi \chi X$) линейного фильтра Φ :

$$\phi_\Phi(\omega) = \text{Arg} (H_\Phi(e^{i2\pi\omega})) .$$

Посмотрим, как это выглядит для косинуса. Пусть исходный ряд $X_{\cos} = \cos 2\pi\omega n$. Тогда:

$$y_j = A_\Phi(\omega) \cos(2\pi\omega j + \phi_\Phi(\omega))$$

Теперь рассмотрим алгоритм **SSA** с точки зрения линейных фильтров [6]. Пусть $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ — временной ряд длины N , $K = N - L + 1$, $L^* = \min(L, K)$. Пусть L будет длиной окна, а $(\sqrt{\lambda}, U, V)$ — одной из собственных троек. Определим диагональную матрицу $N \times N$:

$$\mathbf{D} = \text{diag}(1, 2, 3, \dots, L^* - 1, L^*, L^*, \dots, L^*, L^* - 1, \dots, 2, 1)$$

и матрицу $K \times N$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_L & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_L & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_L & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_L & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & u_1 & u_2 & u_3 & \cdots & u_L \end{pmatrix} .$$

Здесь $U = (u_1, \dots, u_L)$ — собственный вектор матрицы \mathbf{S} .

Теорема 1. Компонента временного ряда $\tilde{\mathbf{X}}$, восстановленная с использованием собственной тройки $(\sqrt{\lambda}, U, V)$, имеет вид:

$$\tilde{\mathbf{X}}^T = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{W}^T \mathbf{W} \mathbf{X}^T .$$

Доказательство. Доказательство можно найти в [6] (неплохо бы расписать). \square

Таким образом, для восстановления методом **SSA** средних точек (индексы от L до K) имеем следующий фильтр:

$$\tilde{x}_s = \sum_{j=-(L-1)}^{L-1} \left(\sum_{k=1}^{L-|j|} u_k u_{k+|j|}/L \right) x_{s-j}, \quad L \leq s \leq K. \quad (4)$$

Похожим образом можно переписать **SSA** через линейные фильтры для точек в начале и конце.

3 Метод Generalized singular spectrum analysis (GSSA)

В этом разделе описана модификация **SSA** на основе добавления определенных весов к строкам L -траекторной матрицы \mathbf{X} [8]. Это делается для уменьшения растекания частоты (spectral leakage). Авторы метода называют его обобщенным, поскольку базовый **SSA** является частным случаем **GSSA** с параметром $\alpha = 0$.

3.1 Алгоритм метода GSSA

Алгоритм **GSSA** сильно схож с базовым **SSA**. Пусть $N > 2$, вещественнозначный временной ряд $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ длины N . Фиксируется параметр $\alpha \geq 0$, отвечающий за веса:

$$\mathbf{w}^{(a)} = (w_1, w_2, \dots, w_L) = \left(\left| \sin \left(\frac{\pi n}{L+1} \right) \right| \right)^\alpha, \quad \text{для } n = 1, 2, \dots, L.$$

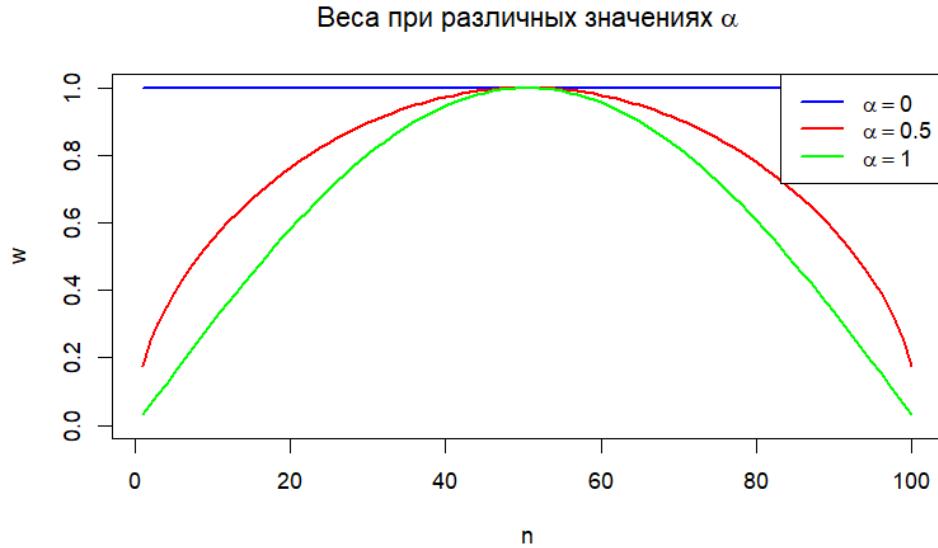


Рис. 1: График весов для различных значений α

3.1.1 Вложение

L — некоторое целое число (длина окна), $1 < L < N$. Строится L -траекторная матрица $\mathbf{X}^{(\alpha)}$:

$$\mathbf{X}^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} w_1 x_1 & w_1 x_2 & w_1 x_3 & \dots & w_1 x_K \\ w_2 x_2 & w_2 x_3 & w_2 x_4 & \dots & w_2 x_{K+1} \\ w_3 x_3 & w_3 x_4 & w_3 x_5 & \dots & w_3 x_{K+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_L x_L & w_L x_{L+1} & w_L x_{L+2} & \dots & w_L x_N \end{pmatrix}. \quad (5)$$

3.1.2 Сингулярное разложение (SVD)

Этот шаг такой же, как и в **SSA**, только матрица \mathbf{X} заменяется на $\mathbf{X}^{(\alpha)}$. Будем обозначать собственные тройки в этом случае так: $(\sqrt{\lambda^{(\alpha)}}, U^{(\alpha)}, V^{(\alpha)})$.

3.1.3 Группировка

В точности как в **SSA**. Тем самым, разложение может быть записано в сгруппированном виде:

$$\mathbf{X}^{(\alpha)} = \mathbf{X}_{I_1}^{(\alpha)} + \cdots + \mathbf{X}_{I_m}^{(\alpha)}.$$

3.1.4 Взвешенное диагональное усреднение

Поскольку траекторная матрица была изменена весами, то диагональное усреднение тоже будет зависеть от весов.

Пусть \mathbf{Y} — матрица размерности $L \times K$. Взвешенное диагональное усреднение переводит матрицу \mathbf{Y} в временной ряд g_1, \dots, g_N :

$$g_k = \begin{cases} \frac{1}{\sum_{n=1}^k w_n} \sum_{m=1}^{k+1} y_{m,k-m+2}^* & \text{для } 1 \leq k < L, \\ \frac{1}{\sum_{n=1}^L w_n} \sum_{m=1}^L y_{m,k-m+2}^* & \text{для } L \leq k < K+1, \\ \frac{1}{\sum_{n=k-K+1}^N w_n} \sum_{m=k-K+2}^{N-K+1} y_{m,k-m+2}^* & \text{для } K+1 \leq k \leq N. \end{cases}$$

Применяя данную операцию к матрицам $\mathbf{X}_{I_1}^{(\alpha)}, \dots, \mathbf{X}_{I_m}^{(\alpha)}$, получаются m новых рядов: $\mathbf{X}_1^{(\alpha)}, \dots, \mathbf{X}_m^{(\alpha)}$. Результатом данного шага и всего алгоритма является разложение временного ряда $\mathbf{X}_1^{(\alpha)} + \cdots + \mathbf{X}_m^{(\alpha)} = \mathbf{X}^{(\alpha)}$.

3.2 Свойства GSSA

3.2.1 Веса

Для минимизации эффекта спектрального размывания (spectral leakage), связанного с конечностью временного интервала наблюдений, к исходному ряду применялось оконное преобразование (tapering [11]). В качестве оконной функции используются степенные синус-косинусные веса (power-of-sine/cosine window).

Данное преобразование выполняет две ключевые функции:

1. Снижение краевых эффектов: умножение исходного ряда на убывающую к краям функцию $w(t)$;
2. Сглаживание периодограммы: веса используются для усреднения значений.

Такой подход позволяет более точно отделять компоненты ряда друг от друга.

3.2.2 Ранг ряда

Зафиксируем ряд $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ длины $N > 3$ и длину окна L .

В секции 2.2.1 было введено понятие ранга ряда для базового **SSA**. Теперь рассмотрим **GSSA** и поймем, что для того же ряда $\text{rank } \mathbf{X}^{(\alpha)} = \text{rank } \mathbf{X}$, а значит, что для **GSSA** также применимы понятия L -ранга ряда. Из вида (5) $\mathbf{X}^{(\alpha)}$ можно получить, что $\mathbf{X}^{(\alpha)} = \text{diag}(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_2, \dots, \mathbf{w}_L) \mathbf{X} = \text{diag}(\mathbf{w}^{(a)}) \mathbf{X}$. Поскольку матрица $\text{diag}(\mathbf{w}^{(a)})$ имеет ранг равный L , она диагональна, то и $\text{rank } \mathbf{X}^{(\alpha)} = \text{rank } \text{diag}(\mathbf{w}^{(a)}) \mathbf{X} = \text{rank } \mathbf{X}$.

3.2.3 GSSA как линейный фильтр

Аналогично **SSA**, метод **GSSA** можно переписать с помощью линейных фильтров. Пусть $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ — временной ряд длины N , $K = N - L + 1$, $L^* = \min(L, K)$. Пусть L будет длиной окна, а $(\sqrt{\lambda^{(\alpha)}}, U^{(\alpha)}, V^{(\alpha)})$ — одной из собственных троек. Определим диагональную матрицу $N \times N$:

$$\mathbf{D}^{(\alpha)} = \text{diag}(w_1, w_1 + w_2, \dots, \sum_{i=1}^{L^*-1} w_i, \sum_{i=1}^{L^*} w_i, \sum_{i=1}^{L^*} w_i, \dots, \sum_{i=1}^{L^*} w_i, \sum_{i=2}^{L^*} w_i, \dots, w_{L^*-1} + w_{L^*}, w_{L^*})$$

и две матрицы $K \times N$:

$$\mathbf{W}^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} u_1^{(\alpha)} & u_2^{(\alpha)} & u_3^{(\alpha)} & \cdots & u_L^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1^{(\alpha)} & u_2^{(\alpha)} & u_3^{(\alpha)} & \cdots & u_L^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & u_1^{(\alpha)} & u_2^{(\alpha)} & u_3^{(\alpha)} & \cdots & u_L^{(\alpha)} & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & u_1^{(\alpha)} & u_2^{(\alpha)} & u_3^{(\alpha)} & \cdots & u_L^{(\alpha)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & u_1^{(\alpha)} & u_2^{(\alpha)} & u_3^{(\alpha)} & \cdots & u_L^{(\alpha)} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{W}_w^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} w_1 u_1^{(\alpha)} & w_2 u_2^{(\alpha)} & w_3 u_3^{(\alpha)} & \cdots & w_L u_L^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_1 u_1^{(\alpha)} & w_2 u_2^{(\alpha)} & w_3 u_3^{(\alpha)} & \cdots & w_L u_L^{(\alpha)} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \cdots & \ddots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & w_1 u_1^{(\alpha)} & w_2 u_2^{(\alpha)} & w_3 u_3^{(\alpha)} & \cdots & w_L u_L^{(\alpha)} & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & w_1 u_1^{(\alpha)} & w_2 u_2^{(\alpha)} & w_3 u_3^{(\alpha)} & \cdots & w_L u_L^{(\alpha)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & w_1 u_1^{(\alpha)} & w_2 u_2^{(\alpha)} & w_3 u_3^{(\alpha)} & \cdots & w_L u_L^{(\alpha)} \end{pmatrix}.$$

Здесь $U = (u_1, \dots, u_L)$ — собственный вектор матрицы \mathbf{S} .

Теорема 2. Компонента временного ряда $\tilde{\mathbf{X}}$, восстановленная с использованием собственной тройки $(\sqrt{\lambda^{(\alpha)}}, U^{(\alpha)}, V^{(\alpha)})$, имеет вид:

$$\tilde{\mathbf{X}}^T = \mathbf{D}^{(\alpha)-1} \mathbf{W}^{(\alpha)T} \mathbf{W}_w^{(\alpha)T} \mathbf{X}^T.$$

Доказательство. Доказательство проводится аналогично доказательству теоремы 1. \square

Таким образом, для восстановления методом **GSSA** средних точек (индексы от L до K) имеем следующий фильтр:

$$\tilde{x}_s = \sum_{j=-(L-1)}^{L-1} \left(\sum_{k=1}^{L-|j|} u_k^{(\alpha)} u_{k+|j|}^{(\alpha)} w_k / \sum_{i=1}^L w_i \right) x_{s-j}, \quad L \leq s \leq K. \quad (6)$$

Похожим образом можно переписать **GSSA** через линейные фильтры для точек в начале и конце.

4 Сравнение SSA и GSSA

В данном разделе сравниваются алгоритмы базового **SSA** и **GSSA** с параметром $\alpha \neq 0$. Все вычисления, а также код метода **GSSA** можно найти в github репозитории [10].

4.1 Линейные фильтры

Чтобы понять их принципиальное отличие, рассмотрим методы с точки зрения линейных фильтров: по представлениям (4) и (6) можно построить амплитудно-частотные характеристики.

Рассмотрим временной ряд $X = \sin\left(\frac{2\pi}{12}x\right)$, $N = 96 \cdot 2 - 1$, $L = 48$. Построим АЧХ для α равных 0 (базовый **SSA**), $\frac{1}{2}$, 1, 2:

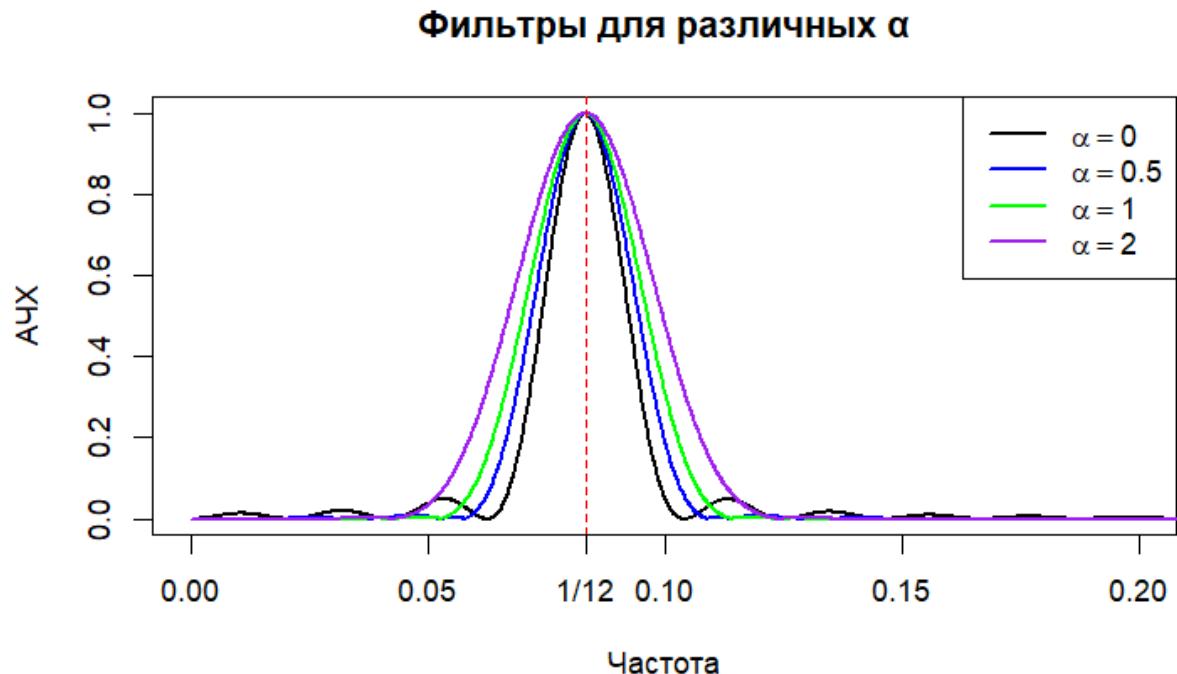


Рис. 2: АЧХ фильтров, отвечающих за $X = \sin\left(\frac{2\pi}{12}x\right)$, при разных α

На рисунке 2 показано, как фильтры ведут себя для различных значений параметра α . Для всех рассмотренных значений α фильтры подавляют частоты, значительно отличающиеся от частоты синуса $\omega = \frac{1}{12}$. При малых значениях α , таких как $\alpha = 0$, наблюдается волнообразное поведение фильтра, что указывает на частичное захватывание соседних частот, хотя и не близких к частоте синуса. С увеличением α это волнообразное поведение уменьшается, и фильтр начинает захватывать больше частот, максимально близких к $\frac{1}{12}$.

Таким образом, метод **GSSA** должен работать лучше **SSA** в случае, когда в временном ряде содержится пара периодических функций, частота одной из которых попадает в вершину волны АЧХ фильтра для другой функции. Например, добавим к $X_{\sin} = \sin\left(\frac{2\pi}{12}n\right)$ косинус с частотой $\frac{1}{19}$. Тогда $X = X_{\sin} + X_{\cos} = \sin\left(\frac{2\pi}{12}n\right) + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2\pi}{19}n\right)$, и можем рассмотреть АЧХ,

отвечающие за синус, при базовом **SSA** ($\alpha = 0$) и **GSSA** при $\alpha = \frac{1}{2}$. При этом, $N = 96 \cdot 2 - 1$, $L = 48$.

АЧХ для суммы фильтров собственных троек синуса

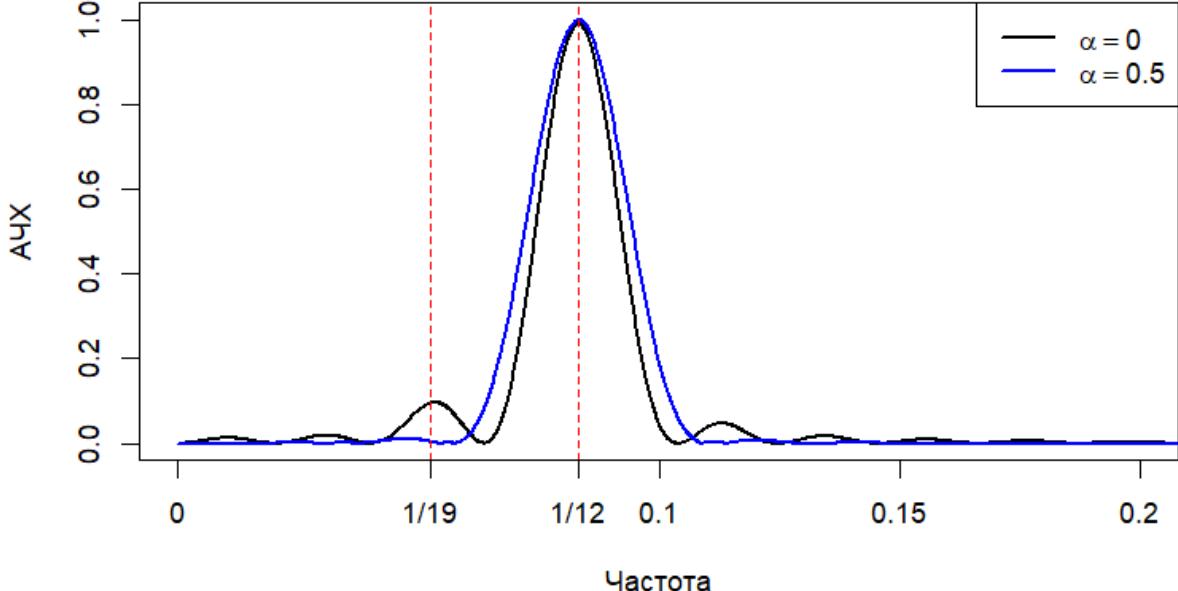


Рис. 3: Ряд $X = X_{\sin} + X_{\cos}$. АЧХ фильтров, отвечающих за $X_{\sin} = \sin(\frac{2\pi}{12}n)$, при разных α

По рисунку 3 заметно, что фильтр для синуса в базовом **SSA** также частично захватит периодику с частотой $\frac{1}{19}$, в то время, как **GSSA** не будет испытывать таких проблем. Сравним результаты по среднеквадратичной ошибке:

Таблица 3: MSE разложений ряда $X = X_{\sin} + X_{\cos}$ для **SSA** и **GSSA** с $\alpha = \frac{1}{2}$

Метод/Ошибка	X_{\sin}	X_{\cos}	X
SSA	5.15e-03	5.15e-03	6.01e-30
GSSA, $\alpha = 0.5$	3.68e-04	3.68e-04	9.53e-30

Как видно из таблицы 3, **GSSA** справился с разделением на порядок лучше **SSA**.

Однако, у **GSSA** есть другая проблема. Если добавить к ряду шум, то оба алгоритма будут воспринимать этот шум как что-то близкое к частотам периодик, содержащихся в исходном ряде. А поскольку **GSSA** захватывает больше частот, максимально близких к периодикам, то и больше шума попадет в компоненты, отвечающие за периодики.

Добавим к X шумовую компоненту: $X = X_{\sin} + X_{\cos} + X_{\text{noise}} = \sin(\frac{2\pi}{12}x) + \frac{1}{2} \cos(\frac{2\pi}{19}x) + \varepsilon_n$, где $\varepsilon_n \sim N(0, 0.1^2)$, $N = 96 \cdot 2 - 1$, $L = 48$. Проводилось 100 тестов, в таблице 4 указаны средние значения ошибки для одних и тех же реализаций шума.

Таблица 4: MSE разложений ряда $X = X_{\sin} + X_{\cos} + X_{\text{noise}}$ для **SSA** и **GSSA** с $\alpha = \frac{1}{2}$

Метод	X_{\sin}	X_{\cos}	X
SSA	5.68e-03	5.44e-03	7.48e-04
GSSA, $\alpha = \frac{1}{2}$	1.21e-03	1.25e-03	1.04e-03

По таблице 4 видно, что **GSSA** все же справился лучше **SSA**, однако порядок ошибки теперь одинаковый для рассмотрения косинуса или синуса. Но при этом, отделение сигнала от шума получилось лучше у **SSA**. Также был проведен парный t-критерий для зависимых выборок с целью проверки гипотезы о равенстве средних значений ошибки для каждой компоненты. В качестве нулевой гипотезы (H_0) предполагалось, что средние значения двух сравниваемых выборок равны. Критический уровень значимости был установлен на уровне $\alpha_{\text{hypothesis}} = 0.05$. Результаты анализа показали, что во всех случаях p -значение оказалось меньше 0.05, что позволяет отвергнуть нулевую гипотезу.

4.2 Отделение сигнала от шума

Сингулярное разложение матрицы обладает наилучшими аппроксимационными свойствами в смысле минимизации нормы Фробениуса (или спектральной нормы) для заданного ранга. Из этого следует, что разложение матрицы $\mathbf{S} = \mathbf{X}\mathbf{X}^T$ методом SVD будет наилучшим образом отделять сигнал от шума.

По результатам сравнений методов из таблиц 3 и 4, а также предыдущих рассуждений, получается, что есть смысл использовать базовый **SSA** для выделения сигнала, а уже сам сигнал разделять на различные компоненты с помощью **GSSA**.

Рассмотрим $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} + \mathbf{X}_{\text{noise}} = \sin\left(\frac{2\pi}{12}x\right) + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi}{19}x\right) + \varepsilon_n$, где $\varepsilon_n \sim N(0, 0.1^2)$, только теперь сначала применим **SSA**, а затем **GSSA**. $N = 96 \cdot 2 - 1$, $L = 48$ для обоих методов.

Таблица 5: $\mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} + \varepsilon_n$, $\varepsilon_n \sim N(0, 0.1^2)$, MSE оценок

Метод/Ошибка	\mathbf{X}_{\sin}	\mathbf{X}_{\cos}	\mathbf{X}
SSA	5.68e-03	5.44e-03	7.48e-04
GSSA , $\alpha = 0.5$	1.21e-03	1.25e-03	1.04e-03
SSA + GSSA , $\alpha = 0.5$	1.06e-03	1.12e-03	7.15e-04

Анализ данных, представленных в таблице 5, позволяет сделать вывод, что комбинирование алгоритмов привело к улучшению как в выделении полезного сигнала, так и в разделении компонент между собой. Полученные результаты демонстрируют более высокую точность по сравнению с данными, приведёнными в таблице 4.

Таким образом, по приведенным примерам можно сделать вывод, что **GSSA** позволяет улучшить разделимость периодических компонент ряда. Однако, вместе с тем, разложение будет захватывать большие шума в сравнении с базовым **SSA**.

4.3 Фильтры в различных точках

В зависимости от точек ряда, линейные фильтры будут отличаться друг от друга. Рассмотрим тот же пример $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} + \mathbf{X}_{\text{noise}} = \sin\left(\frac{2\pi}{12}x\right) + \frac{1}{2}\cos\left(\frac{2\pi}{19}x\right) + \varepsilon_n$, где $\varepsilon_n \sim N(0, 0.1^2)$.

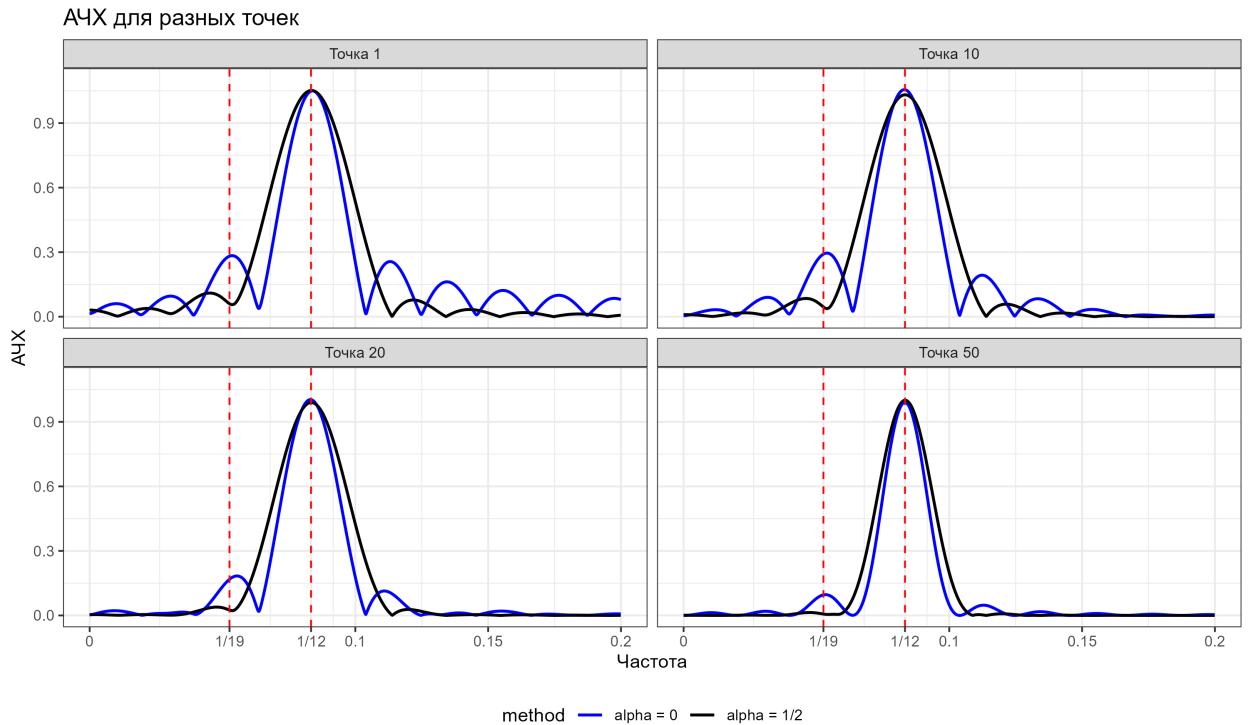


Рис. 4: Ряд $X = X_{\sin} + X_{\cos} + X_{\text{noise}}$. АЧХ фильтров в разных точках, отвечающих за $X_{\sin} = \sin\left(\frac{2\pi}{12}n\right)$, при разных α

По рисунку 4 видно, что когда точка s приближается по времени к средним точкам временного ряда ($L \leq s \leq K$), полоса пропускания фильтра становится уже, а также фильтр начинает все меньше и меньше захватывать соседние частоты.

Для этого примера также можно посмотреть на график средней MSE ошибки в зависимости от точки ряда. Эксперимент проводился 1000 раз.

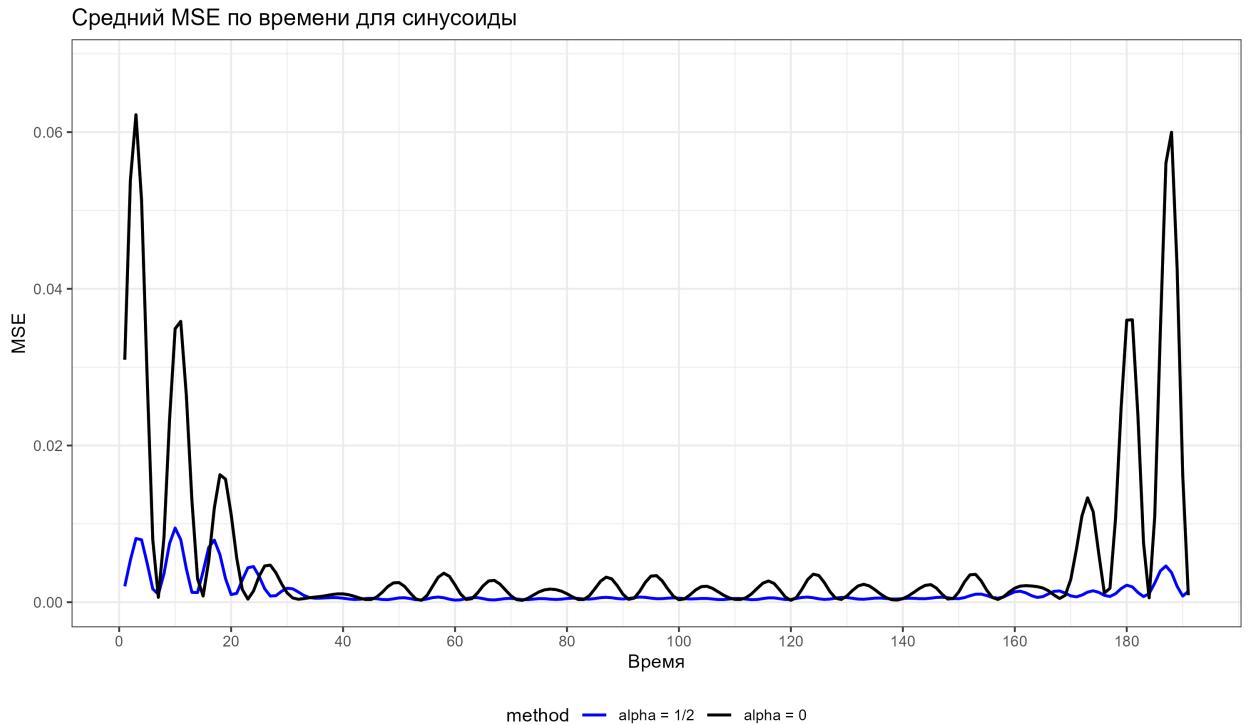


Рис. 5: Ряд $X = X_{\sin} + X_{\cos} + X_{\text{noise}}$. MSE ошибки выделения синуса в зависимости от точки ряда

Таким образом, можно сделать вывод, что разделимость также зависит от точки ряда. В средних точках достигаются наилучшие значения ошибки. Однако это не означает, что нужно брать маленькое L , поскольку чем больше длина окна, тем лучше происходит разделение компонент между собой в целом [5].

5 Метод Circulant singular spectrum analysis (CiSSA)

В этом разделе описана модификация **SSA** на основе циркулярной матрицы [1]. В отличие от базового **SSA**, в **CiSSA** для каждого конкретного L базис разложения остается одинаковым для любого входного временного ряда. Поскольку из-за этого повышается интерпретируемость каждой компоненты в разложении, авторы метода назвали **CiSSA** автоматизированной версией **SSA**. Причем автоматизированная в том смысле, что компоненты ряда группируются по частотам самим алгоритмом. Сначала будет рассмотрен метод только для стационарного случая, затем показана применимость модифицированной версии **CiSSA** при использовании нестационарного ряда.

Стационарность подразумевает неизменность статистических свойств ряда во времени. Определим это понятие формально [5].

Определение 10. Пусть $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_n, \dots)$ — временной ряд. Ряд \mathbf{X} называется стационарным, если существует функция $R_{\mathbf{X}}(k)$ ($-\infty < k < +\infty$) такая, что для любых $k, l \geq 1$

$$R_{\mathbf{X}}^{(N)}(k, l) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N x_{k+m} x_{l+m} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} R_{\mathbf{X}}(k - l). \quad (7)$$

Если (7) выполняется, тогда $R_{\mathbf{X}}$ называется ковариационной функцией стационарного ряда \mathbf{X} .

Теорема 3. Пусть $R_{\mathbf{X}}$ — ковариационная функция стационарного ряда \mathbf{X} . Тогда существует конечная мера $m_{\mathbf{X}}$, определенная на борелевских подмножествах $(-1/2, 1/2]$, такая, что

$$R_{\mathbf{X}}(k) = \int_{(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]} e^{i2\pi k\omega} m_{\mathbf{X}}(d\omega).$$

Мера $m_{\mathbf{X}}$ называется спектральной мерой ряда \mathbf{X} .

Доказательство. Доказательство в [5]. □

5.1 Алгоритм метода CiSSA

Данный алгоритм, как и **SSA**, состоит из четырех основных шагов.

Зафиксируем стационарный временной ряд \mathbf{X} состоящий из N элементов и выберем длину окна L .

5.1.1 Вложение

Такой же, как и в **SSA**. Считаем матрицу \mathbf{X} , заданную в (1).

5.1.2 Разложение

Для каждого $k = 1 : L$ вычисляются собственные векторы U_k :

$$U_k = L^{-1/2}(u_{k,1}, \dots, u_{k,L}), \text{ где } u_{k,j} = \exp\left(-i2\pi(j-1)\frac{k-1}{L}\right), \text{ причем } U_k = U_{L+2-k}^*,$$

где U^* — комплексное сопряжение вектора U .

Элементарное разложение

Для каждой частоты $w_k = \frac{k-1}{L}$, $k = 1 : \lfloor \frac{L+1}{2} \rfloor$, есть два собственных вектора: U_k и U_{L+2-k} . За частоту w_0 отвечает один собственный вектор — U_0 . Если же L — четное, то частоте $w_{\frac{L}{2}+1}$ будет соответствовать один вектор $U_{\frac{L}{2}+1}$.

Следовательно, индексы группируются следующим образом:

$$B_1 = \{1\}; B_k = \{k, L+2-k\}, \text{ для } k = 1 : \lfloor \frac{L+1}{2} \rfloor; B_{\frac{L}{2}+1} = \left\{ \frac{L}{2} + 1 \right\}, \text{ если } L \bmod 2 = 0.$$

Таким образом, получается элементарная группировка по частотам w_k :

$$\mathbf{X}_{B_k} = \mathbf{X}_k + \mathbf{X}_{L+2-k} = U_k U_k^H \mathbf{X} + U_{L+2-k} U_{L+2-k}^H \mathbf{X}, \text{ для } k = 1 : \lfloor \frac{L+1}{2} \rfloor;$$

$$\mathbf{X}_{B_{\frac{L}{2}+1}} = \mathbf{X}_{\frac{L}{2}+1} = U_{\frac{L}{2}+1} U_{\frac{L}{2}+1}^H \mathbf{X}, \text{ если } L \bmod 2 = 0,$$

где U^H — это комплексное сопряжение и транспонирование вектора U .

Пусть $d = \lfloor \frac{L+1}{2} \rfloor$, если $L \bmod 2 \neq 0$, иначе $d = \frac{L}{2} + 1$. Тогда результатом данного шага будет разложение исходной матрицы \mathbf{X} в сумму матриц \mathbf{X}_{B_k} , отвечающих периодикам с определенными частотами w_k :

$$\mathbf{X} = \sum_{k=1}^d \mathbf{X}_{B_k}.$$

5.1.3 Группировка

Такой же шаг, как и в базовом SSA. Однако группировка будет производиться на непересекающиеся подгруппы по частотам от w_k , которые находятся в диапазоне от 0 до 0.5. То есть, заранее заданному произвольному количеству непересекающихся диапазонов $I_i = [w_{i0}, w_{i1}]$, $w_{i0} \leq w_{i1}$ и $0 \leq w_{i0}, w_{i1} \leq 0.5$, строятся матрицы \mathbf{X}_{I_i} , в которые входят суммы \mathbf{X}_{B_k} , отвечающие частотам $w_k : w_{i0} \leq w_k \leq w_{i1}$.

5.1.4 Диагональное усреднение

Такой же шаг, как и в базовом SSA.

Замечание 2. U_k можно получить по аналогии с SSA.

Будем рассматривать временной ряд как выборку после эксперимента, а не как случайную величину. Соответственно, все формулы будут выборочными.

Определим автоковариации:

$$\hat{\gamma}_m = \frac{1}{N-m} \sum_{t=1}^{N-m} x_t x_{t+m}, m = 0 : (L-1).$$

На основе $\hat{\gamma}_m$ определим матрицу:

$$\hat{\gamma}_L = \begin{pmatrix} \hat{\gamma}_1 & \hat{\gamma}_2 & \dots & \hat{\gamma}_L \\ \hat{\gamma}_2 & \hat{\gamma}_1 & \dots & \hat{\gamma}_{L-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\gamma}_L & \hat{\gamma}_{L-1} & \dots & \hat{\gamma}_1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Данная матрица $L \times L$ называется Тэплицевой и используется в методе Toeplitz SSA (подробнее про данный метод можно прочитать в книге [5]). На ее основе составим циркулярную матрицу для алгоритма Circulant SSA [1]:

$$\hat{C}_L = \begin{pmatrix} \hat{c}_1 & \hat{c}_2 & \dots & \hat{c}_L \\ \hat{c}_2 & \hat{c}_1 & \dots & \hat{c}_{L-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \hat{c}_L & \hat{c}_{L-1} & \dots & \hat{c}_1 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $\hat{c}_m = \frac{L-m}{L}\hat{\gamma}_m + \frac{m}{L}\hat{\gamma}_{L-m}$, $m = 0 : L - 1$. Собственные числа матрицы \hat{C}_L , определенной в (9) задаются по формуле:

$$\lambda_{L,k} = \sum_{m=0}^{L-1} \hat{c}_m \exp\left(i2\pi m \frac{k-1}{L}\right), \quad k = 1 : L, \text{ причем } \lambda_{L,k} = \lambda_{L,L+2-k},$$

а собственные вектора, связанные с $\lambda_{L,k}$ — это векторы U_k .

Замечание 3. $U_k U_k^H + U_{L+2-k} U_{L+2-k}^H$ является оператором проектирования на подпространство, которое порождено синусами и косинусами с частотой $w_k = \frac{k-1}{L}$. Это пространство соответствует компонентам синусоидальной структуры временного ряда, связанных с конкретной частотой, выделяемой методом.

Доказательство. Рассмотрим на примере одного вектора-столбца $X_i = (x_i, \dots, x_{i+L})^T$, где $i = 1, \dots, K$. Возьмем для наглядности $i = 1$.

$$U_k = L^{-\frac{1}{2}} \left(1, e^{-i2\pi \frac{k-1}{L}}, e^{-i2\pi 2 \frac{k-1}{L}}, \dots, e^{-i2\pi (L-1) \frac{k-1}{L}} \right)^T,$$

$$U_k^H = L^{\frac{1}{2}} \left(1, e^{i2\pi \frac{k-1}{L}}, e^{i2\pi 2 \frac{k-1}{L}}, \dots, e^{i2\pi (L-1) \frac{k-1}{L}} \right).$$

$$L^{-\frac{1}{2}} c_k = U_k^H X_1 = x_1 + e^{i2\pi \frac{k-1}{L}} x_2 + e^{i2\pi 2 \frac{k-1}{L}} x_3 + \dots + e^{i2\pi (L-1) \frac{k-1}{L}} x_L.$$

$$X_1^k = c_k U_k = \left(c_k, c_k e^{-i2\pi \frac{k-1}{L}}, c_k e^{-i2\pi 2 \frac{k-1}{L}}, \dots, c_k e^{-i2\pi (L-1) \frac{k-1}{L}} \right)^T.$$

Таким образом, получилось проектирование на пространство синусов и косинусов, если разложить комплексную экспоненту. Если брать всю матрицу \mathbf{X} , выйдет K столбцов, спроектированных на данное пространство. \square

Замечание 4. В разделе 5.2.1 рассмотрена связь между матрицей \mathbf{X}_{B_k} и разложениями Фурье для векторов вложсения.

Нестационарный случай

Для применения данного алгоритма на нестационарных временных рядах, нужно применить процедуру расширения ряда. Как утверждается авторами статьи [1], после расширения, CiSSA можно применить к нестационарному ряду. Сама процедура расширения ряда \mathbf{X} производится с использованием авторегрессионной (AR) модели. Эта процедура позволяет предсказывать значения временного ряда за его пределами (экстраполяция) как вправом, так и влевом направлениях на заданное число шагов H . Таким образом, трендовая (нелинейная) компонента ряда будет выделяться заметно лучше. В ходе работы алгоритм выполняет следующие шаги:

- Определение порядка AR-модели:** Метод определяет порядок p AR-модели как целую часть от деления длины ряда N на 3. Это значение порядка модели p будет использовано для построения авторегрессионной модели на дифференцированном временном ряде;
- Построение дифференцированного ряда:** Временной ряд X сначала преобразуется в дифференцированный ряд dX , чтобы удалить трендовые компоненты;
- Построение AR-модели:** После этого для дифференцированного ряда вычисляются коэффициенты авторегрессионной модели A с использованием метода Юла-Уокера, основываясь на определенном ранее порядке p ;
- Правое расширение ряда:** С помощью AR-модели ряд dX прогнозируется на H шагов вправо. Затем возвращается к своему изначальному состоянию путем интегрирования dX . Получается расширение исходного ряда X на H шагов вправо;
- Левое расширение ряда:** Аналогично предыдущему пункту, ряд прогнозируется на H шагов влево;
- Возвращение расширенного ряда:** В конце метод возвращает расширенный временной ряд X_{extended} , который содержит как левое, так и правое расширение на H шагов от исходного ряда X .

Таким образом, алгоритм расширения ряда позволяет выполнять предсказания временного ряда по обе стороны от его границ, основываясь на авторегрессионной модели, построенной на дифференцированном ряде, что полезно для выделения тренда.

Расширение временного ряда IP values

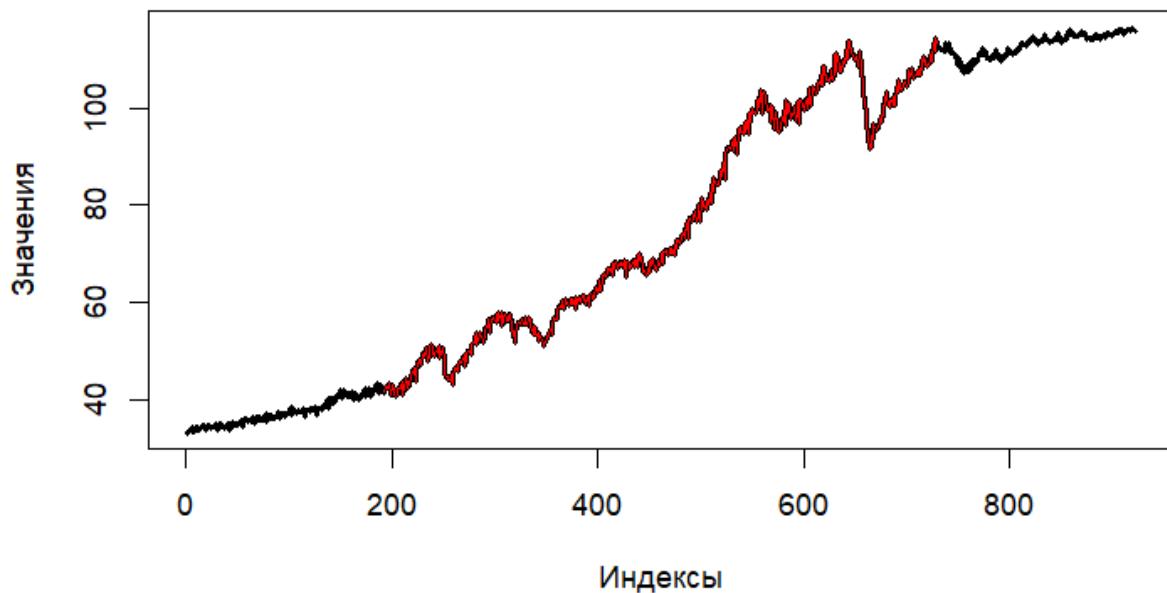


Рис. 6: Расширение временного ряда IP values. Красным показан настоящий ряд, черным — его расширение

Однако поскольку мы рассматриваем расширенный ряд, то и периодические компоненты будут строиться по нему. Поэтому в угоду лучшего выделения трендовой составляющей, будет несколько жертвоваться точность разделения периодических компонентов.

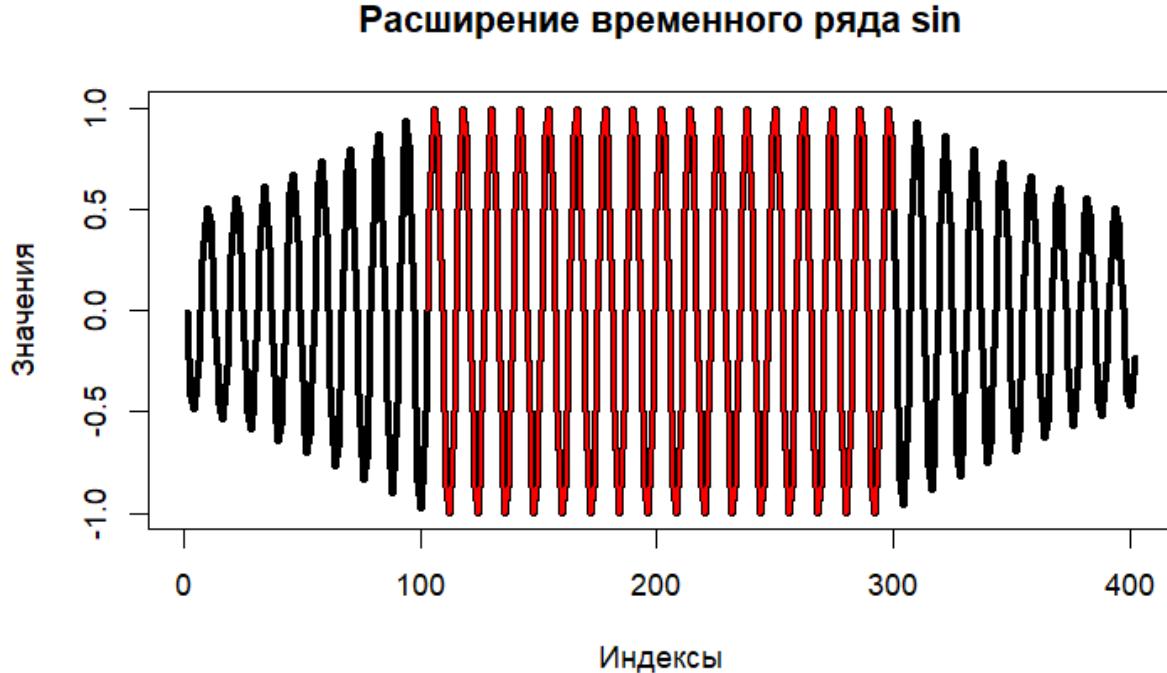


Рис. 7: Расширение временного ряда синуса. Красным показан настоящий ряд, черным — его расширение

На рисунке 7 видно, что синус расширился неправильно, от концов настоящего ряда до концов расширенного значения постепенно уменьшались. Как будет показано в секции 6, это повлияет на значения ошибки.

5.2 Свойства

5.2.1 Связь CiSSA с разложением Фурье

Для описания конечных, но достаточно длинных рядов можно использовать разложение Фурье. Пусть $\mathbf{X} = (x_1, \dots, x_N)$ — временной ряд

Определение 11. *Разложение*

$$x_n = c_0 + \sum_{k=1}^{\lfloor \frac{N+1}{2} \rfloor} (c_k \cos(2\pi nk/N) + s_k \sin(2\pi nk/N)), \quad (10)$$

где $1 \leq n \leq N$ и $s_{N/2} = 0$ для четного N , называется разложением Фурье ряда \mathbf{X} .

Таким образом, можно выделить компоненту ряда, отвечающую за частоту $w_k = \frac{k-1}{L}$, $k = 1 : \lfloor \frac{N+1}{2} \rfloor$;

Алгоритм **CiSSA** тесно связан с разложением Фурье. По замечанию 3 видно, что при вычислении $\mathbf{X}_{B_k} = \mathbf{X}_k + \mathbf{X}_{L+2-k} = U_k U_k^H \mathbf{X} + U_{L+2-k} U_{L+2-k}^H \mathbf{X}$, воспроизводится разложение Фурье для K векторов матрицы \mathbf{X} . Затем вычисляется диагональное усреднение \mathbf{X}_{B_k} . А именно, **CiSSA** можно представить так:

1. Вычисляем разложение Фурье для каждого вектора вложения L -траекторной матрицы \mathbf{X} , состоящей из $K = N - L + 1$ векторов. Получается K разложений Фурье по частотам $w_k = \frac{k-1}{L}, k = 1 : \lfloor \frac{L+1}{2} \rfloor$;
2. По получившимся разложениям Фурье усредняем значения для соответствующих x_i и частот w_k .

5.2.2 Точная разделимость

Поскольку данный метод является аналогом разложения Фурье, то в смысле сильной разделимости можно точно разделить ряд, в котором одной из компонентов является $\cos(2\pi\omega + \varphi)$ с частотой ω такой, что $L\omega = k \in \mathbb{N}$, или константа. Для сравнения, при применении базового **SSA**, условие накладывалось не только на $L\omega \in \mathbb{N}$, но и на $K\omega \in \mathbb{N}$.

Поэтому до применения алгоритма необходимо выделить интересующие частоты, то есть знать их заранее, и, исходя из них, выбирать значение L .

5.2.3 Асимптотическая разделимость

Асимптотическая разделимость в данном случае будет означать, что при увеличении L разбиение сетки будет увеличиваться, а значит, и частоты в сетке начнут сближаться к истинным частотам периодических компонентов (либо становиться равными им), что будет снижать ошибку вычислений.

То есть, в случае непопадания периода определенной компоненты в разбиение частот алгоритма, будет выполняться **CiSSA**-асимптотическая $L(N)$ -разделимость по определению 1.

5.3 Обзор литературы

В данной секции рассмотрены применения **CiSSA** на практике.

5.3.1 Cognitive Load Detection through EEG Lead-Wise Feature Optimization and Ensemble Classification

В статье [12] рассматриваются несколько наборов данных ЭЭГ под различной нагрузкой, два из которых наиболее значимы:

- **MAT (Mental Arithmetic Task)**: участие студентов в задаче на математический счёт.
- **STEW (Simultaneous Task EEG Workload)**: параллельное выполнение нескольких заданий.

Задача исследования заключалась в следующем:

- С помощью метода **CiSSA** (и других различных методов) разлагают исходные сигналы ЭЭГ на несколько компонент, каждая из которых несёт информацию о разных частотных диапазонах и временных структурах.

- После разложения из полученных компонент (или их комбинаций) вычисляют числовые признаки: энергетические, энтропийные и другие.
- Эти признаки затем подают на вход классификатору (например, k NN, SVM или другому алгоритму машинного обучения), чтобы автоматически определить уровень когнитивной нагрузки. Классификация может быть как бинарной (наличие/отсутствие нагрузки), так и многоуровневой (лёгкая/средняя/высокая нагрузка).

Таким образом, метод CiSSA был выбран в качестве одного из подходов разложения сигнала по частотам.

Выводом исследования является таблица 5 статьи [12], в которой авторы сравнивают по метрикам различные решения задачи. Подходы, связанные с **CiSSA**, являются не самыми наилучшими.

5.3.2 Application of visual stratigraphy from line-scan images to constrain chronology and melt features of a firn core from coastal Antarctica

В работе [2] исследовалось таяние ледников, а также анализировались данные визуальной стратиграфии (VS) для построения хронологии фирнового керна из прибрежной Антарктиды. Основной задачей было отделение долгосрочного тренда, связанного с изменением плотности фирна, от сезонных сигналов, обусловленных включениями пыли и морской соли. Для разложения сигнала по частотам был выбран алгоритм **CiSSA**. Длина окна была установлена равной 10, поскольку "дальнейшее её увеличение не оказывало существенного влияния на результаты".

Ключевые этапы анализа

- **Первая компонента (RC1):** отвечала за долгосрочный тренд, связанный с постепенным увеличением плотности фирна с глубиной;
- **Компоненты со второй по пятую (RC2-RC5):** отражали сезонность, обусловленную изменениями в содержании пыли и морских солей;
- **Остальные компоненты:** содержали шумовой сигнал и не учитывались в дальнейшем анализе.

Таким образом, метод CiSSA был использован как инструмент частотного разложения.

5.3.3 Выводы

В рассмотренных работах **CiSSA** используется как прикладной инструмент для разделения сигнала по частотам. В работе [12] это конкретные частоты, а для [2] это инструмент для выделения тренда. По целям использования алгоритмов, можно сделать вывод, что с таким же успехом можно было применить базовый **SSA** с автоматической группировкой по компонентам, как сказано в секции 2.2.4.

6 Различия SSA, CiSSA и Фурье

В данной секции проводится сравнение методов разложения временного ряда: базовый **SSA**, **SSA** с использованием EOSSA для улучшения разделимости, разложения Фурье и Фурье с расширением ряда, базового **CiSSA** и **CiSSA** с расширением ряда. Все вычисления, а также код метода **CiSSA** можно найти в github репозитории [10]

6.1 Автоматическая группировка

Авторы статьи [1] выделяют главным преимуществом то, что **CiSSA** автоматически разделяет компоненты ряда по частотам. Однако есть метод, позволяющий сделать автоматическое объединение частот по периодограмме в методе **SSA** [7]. При этом, прежде чем применять его, стоит выполнить процедуру улучшения разделимости. В данной работе будут использоваться методы EOSSA и FOSSA [3]. Отсюда следует, что все рассматриваемые в данной секции алгоритмы могут по заранее заданным диапазонам частотам выдать временные ряды, отвечающие за эти диапазоны.

6.2 Собственные пространства

Каждый алгоритм после группировки порождает построенными матрицами собственные подпространства. В случае базового **SSA** базис подпространств является аддитивным, то есть зависящим от X, L, N .

В случае **CiSSA** базис зависит только от L, N . Если зафиксировать данные параметры, и менять X , базис никак не поменяется.

На базис разложения Фурье влияет только N .

6.3 Точная разделимость

В свойствах методов были приведены классы функций и условия, при которых методы могут безошибочно разделить два ряда друг от друга. Сравним эти условия.

Разложение Фурье может отличить друг от друга периодические компоненты, попадающие в решетку его частот. Другими словами, разложением Фурье может быть точно разделен ряд $X = X_{w_1} + X_{w_2}$, где $X_{w_1} = A_1 \cos(2\pi w_1 n + \varphi_1)$, $X_{w_2} = A_2 \cos(2\pi w_2 n + \varphi_2)$ и $Nw_1, Nw_2 \in \mathbb{N}$, $w_1 \neq w_2$.

Похожие условия точной разделимости у метода **CiSSA**. С помощью данного алгоритма может быть точно разделен ряд $X = X_{w_1} + X_{w_2}$, где $X_{w_1} = A_1 \cos(2\pi w_1 n + \varphi_1)$, $X_{w_2} = A_2 \cos(2\pi w_2 n + \varphi_2)$, только $Lw_1, Lw_2 \in \mathbb{N}$, $w_1 \neq w_2$.

У алгоритма **SSA** для разделения $X = X_{w_1} + X_{w_2}$ накладываются более жесткие ограничения: $Lw_1, Lw_2, Kw_1, Kw_2 \in \mathbb{N}$, $w_1 \neq w_2$, $A_1 \neq A_2$. Однако также могут быть точно разделены ряды $X = X_{\exp_1} + X_{\exp_2} = A_1 \exp(\alpha_1 n) \cos(2\pi w_1 n + \varphi_1) + A_2 \exp(\alpha_2 n) \cos(2\pi w_2 n + \varphi_2)$, где $Lw_1, Lw_2, Kw_1, Kw_2 \in \mathbb{N}$, $w_1 \neq w_2$, $A_1 \neq A_2$, $\alpha_1 \neq \alpha_2$.

Пример. Будем разделять временной ряд $X = X_{\sin} + X_{\cos} = \sin \frac{2\pi}{12} n + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi}{3} n$. Рассмотрим разложения методов в лучшем и худшем случае. Для всех алгоритмов кроме базового **SSA** выделялись периодические компоненты по диапазонам $(w \pm \Delta)$, где $\Delta = \frac{1}{N+1}$, $w = \frac{1}{12}, \frac{1}{3}$.

Таблица 6: MSE ошибки разложений методов ряда $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos}$ в лучших и худших случаях

Метод	Параметры	MSE(\mathbf{X}_{\sin})	MSE(\mathbf{X}_{\cos})	MSE(\mathbf{X})
SSA	$L = 96, K = 96$ ($Lw, Kw \in \mathbb{N}$)	6.8e-30	1.5e-29	1.8e-29
SSA EOSSA, $r = 4$	$L = 96, K = 96$ ($Lw, Kw \in \mathbb{N}$)	1.5e-29	7.5e-30	2.0e-29
Fourier	$N = 96 \cdot 2$ ($Nw \in \mathbb{N}$)	1.7e-28	3.5e-28	5.1e-28
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2$ ($Nw \in \mathbb{N}$)	6.2e-04	2.6e-03	3.2e-03
CiSSA	$L = 96$ ($Lw \in \mathbb{N}$)	1.9e-29	5.3e-30	2.1e-29
CiSSA extended	$L = 96$ ($Lw \in \mathbb{N}$)	2.0e-04	8.6e-04	1.1e-03
SSA	$L = 96, K = 97$ ($Lw \in \mathbb{N}, Kw \notin \mathbb{N}$)	2.2e-06	2.2e-06	2.0e-29
SSA EOSSA, $r = 4$	$L = 96, K = 97$ ($Lw \in \mathbb{N}, Kw \notin \mathbb{N}$)	1.5e-29	8.8e-30	1.9e-29
Fourier	$N = 96 \cdot 2 - 1$ ($Nw \notin \mathbb{N}$)	9.4e-03	3.5e-03	1.3e-02
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2 - 1$ ($Nw \notin \mathbb{N}$)	1.1e-05	4.9e-04	4.9e-04
CiSSA	$L = 97$ ($Lw \notin \mathbb{N}$)	1.7e-02	7.0e-03	2.3e-02
CiSSA extended	$L = 97$ ($Lw \notin \mathbb{N}$)	2.4e-03	6.9e-04	3.1e-03

Таблица 6 подтверждает теоретические результаты. Кроме того, можно заметить, что разложение Фурье справляется лучше при невыполнении условий точной разделимости, чем **CiSSA**. Это объяснимо тем, что для разложения Фурье частоты делятся на N частей, а для **CiSSA** на L . В данном примере, разбиение сетки частот у разложения Фурье в два раза меньше, чем у **CiSSA** ($N = 96 \cdot 2, L = 96$). В условиях точной разделимости результаты примерно одинаковы.

Таким образом, условия на разделение синусов, слабее у методов **CiSSA** и Фурье, чем у **SSA**. Однако **SSA** может точно отличать друг от друга больше классов функций.

6.4 Асимптотическая разделимость

Как было сказано, асимптотически разделимы в методе **SSA** полиномы, гармонические функции (косинус, косинус помноженный на экспоненту) [5].

В алгоритме **CiSSA** при увеличении длины окна L меняется сетка разбиения частот. Из-за этого, даже если не удастся выбрать подходящее L , при котором будет точно отделить косинус, но постоянно его увеличивать, в конечном счете получится снизить ошибку выделения нужной компоненты косинуса, если брать соседние частоты с частотой компоненты. Однако в таком подходе есть две проблемы. Во-первых, в этом случае нужно выбирать диапазон частот, которые стоит объединить. Во-вторых, в реальности это труднореализуемо, слишком большое N и L придется выбрать, чтобы значимо снизить ошибку. Поэтому, при использовании **CiSSA** обязательно нужно заранее понимать, какие частоты интересуют. Аналогичная ситуация для разложения Фурье.

Как следствие асимптотической разделимости можно рассмотреть следующий пример: $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{e \cdot \sin} + \mathbf{X}_{e \cdot \cos} = e^{A_1 n} \sin(2\pi\omega_1 n) + e^{A_2 n} \cos(2\pi\omega_2 n)$.

Таблица 7: MSE разложений $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{e\cdot\sin} + \mathbf{X}_{e\cdot\cos}$ в худших и лучших случаях

Метод	Параметры	MSE ($\mathbf{X}_{e\cdot\sin}$)	MSE ($\mathbf{X}_{e\cdot\cos}$)	MSE (\mathbf{X})
SSA	(1) $L\omega_i \in \mathbb{N}, K\omega_i \in \mathbb{N}$	5.3e-05	5.3e-05	1.2e-27
SSA EOSSA	(2) $L\omega_i \in \mathbb{N}, K\omega_i \in \mathbb{N}, r = 4$	3.0e-28	4.4e-28	7.4e-29
Fourier	(3) $N\omega_i \in \mathbb{N}$	6.7e-02	1.4e-02	4.9e-02
CiSSA	(4) $L\omega_i \in \mathbb{N}$	3.8e-03	2.6e-02	1.5e-02
SSA	(5) $L\omega_i \in \mathbb{N}, K\omega_i \notin \mathbb{N}$	4.8e-04	4.8e-04	1.1e-27
SSA EOSSA	(6) $L\omega_i \in \mathbb{N}, K\omega_i \notin \mathbb{N}, r = 4$	2.8e-28	4.2e-28	7.5e-29
Fourier	(7) $N\omega_i \notin \mathbb{N}$	3.7e-02	1.1e-01	1.1e-01

Для параметров таблицы 7 выбраны такие значения:

Таблица 8: Конкретные параметры для таблицы 7

Случай	Значения
(1)	$N = 96 \cdot 2 - 1, L = 96, \omega_1 = \frac{1}{12}, \omega_2 = \frac{1}{3}, A_1 = 200, A_2 = 100$. Группы: $\mathbf{X}_{e\cdot\sin} - [1, 2]; \mathbf{X}_{e\cdot\cos} - [3, 4]$.
(2)	$N = 96 \cdot 2 - 1, L = 96, \omega_1 = \frac{1}{12}, \omega_2 = \frac{1}{3}, A_1 = 200, A_2 = 100$. Частоты: $\mathbf{X}_{e\cdot\sin} - [\omega_1 \pm \varepsilon]; \mathbf{X}_{e\cdot\cos} - [\omega_2 \pm \varepsilon], \varepsilon = 1/L$.
(3)	$N = 96 \cdot 2, \omega_1 = \frac{1}{12}, \omega_2 = \frac{1}{3}, A_1 = 200, A_2 = 100$. Частоты: $\mathbf{X}_{e\cdot\sin} - [\omega_1 \pm \varepsilon]; \mathbf{X}_{e\cdot\cos} - [\omega_2 \pm \varepsilon], \varepsilon = 1/N$.
(4)	$N = 96 \cdot 2 - 1, L = 96, \omega_1 = \frac{1}{12}, \omega_2 = \frac{1}{3}, A_1 = 200, A_2 = 100$. Частоты: $\mathbf{X}_{e\cdot\sin} - [\omega_1 \pm \varepsilon]; \mathbf{X}_{e\cdot\cos} - [\omega_2 \pm \varepsilon], \varepsilon = 1/L$.
(5)	$N = 96 \cdot 2 - 2, L = 96, \omega_1 = \frac{1}{12}, \omega_2 = \frac{1}{3}, A_1 = 200, A_2 = 100$. Группы: $\mathbf{X}_{e\cdot\sin} - [1, 2]; \mathbf{X}_{e\cdot\cos} - [3, 4]$.
(6)	$N = 96 \cdot 2 - 2, L = 96, \omega_1 = \frac{1}{12}, \omega_2 = \frac{1}{3}, A_1 = 200, A_2 = 100$. Частоты: $\mathbf{X}_{e\cdot\sin} - [\omega_1 \pm \varepsilon]; \mathbf{X}_{e\cdot\cos} - [\omega_2 \pm \varepsilon], \varepsilon = 1/L$.
(7)	$N = 96 \cdot 2 - 1, \omega_1 = \frac{1}{12}, \omega_2 = \frac{1}{3}, A_1 = 200, A_2 = 100$. Частоты: $\mathbf{X}_{e\cdot\sin} - [\omega_1 \pm \varepsilon]; \mathbf{X}_{e\cdot\cos} - [\omega_2 \pm \varepsilon], \varepsilon = 1/N$.

В таблице 7 первая половина является примерами с хорошими параметрами, а вторая – с плохими. Из неё видно, что **CiSSA** все же разделяет ряды, но не так хорошо, как это делает **SSA** или тем более **SSA** с EOSSA.

Теперь рассмотрим разложение непериодических компонент. Поскольку все непериодические компоненты относятся к частотам достаточно близким к нулю, то и разделить между собой непериодические компоненты методы **CiSSA** и Фурье не могут даже асимптотически, в отличие от **SSA**.

6.5 Выделение тренда

Рассмотрим, влияние непериодических компонент на разложение ряда.

Базовый алгоритм **SSA** может выделять трендовую составляющую за счет своего адаптивного базиса. Для алгоритмов **CiSSA** и разложения Фурье нужно применять процедуры расширения временного ряда, чтобы использовать их для выделения тренда.

Пример. Рассмотрим ряд из примера в секции 6.3 и добавим к нему тренд. $\mathbf{X} = \mathbf{X}_c + \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} = 1 + e^{\frac{n}{100}} + \sin \frac{2\pi}{12}n + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi}{3}n$. Кроме того, для всех алгоритмов кроме базового **SSA** выделялись периодические компоненты по диапазонам $(w \pm \Delta)$, где $\Delta = \frac{1}{N+1}$, $w = \frac{1}{12}, \frac{1}{3}$,

а непериодичность соответствовала диапазону частот $[0, \frac{1}{24})$. Будем искать экспоненту и константу по низким частотам, назовем это трендовой составляющей ряда.

Таблица 9: MSE разложений ряда $\mathbf{X} = \mathbf{X}_c + \mathbf{X}_e + \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos}$

Метод	Параметры	MSE($\mathbf{X}_c + \mathbf{X}_e$)	MSE(\mathbf{X}_{\sin})	MSE(\mathbf{X}_{\cos})	MSE(\mathbf{X})
SSA	$L = 96, K = 96$	6.1e-05	8.9e-07	5.2e-05	2.1e-28
SSA EOSSA, $r = 6$	$L = 96, K = 96$	1.7e-28	1.6e-29	8.7e-30	1.6e-28
Fourier	$N = 96 \cdot 2$	1.1e-01	6.1e-04	6.8e-03	1.1e-01
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2$	1.4e-03	1.3e-03	8.4e-03	9.6e-03
CiSSA	$L = 96$	5.3e-02	1.6e-05	4.9e-04	4.4e-02
CiSSA extended	$L = 96$	5.0e-04	2.1e-04	1.1e-03	6.0e-04
SSA	$L = 96, K = 97$	7.3e-05	4.2e-06	6.2e-05	1.1e-27
SSA EOSSA, $r = 6$	$L = 96, K = 97$	1.0e-27	2.3e-29	9.7e-30	9.5e-28
Fourier	$N = 96 \cdot 2 - 1$	1.2e-01	1.9e-02	2.2e-02	1.0e-01
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2 - 1$	2.7e-03	3.1e-04	3.1e-03	5.9e-03
CiSSA	$L = 97$	7.6e-02	4.1e-02	1.4e-02	1.1e-01
CiSSA extended	$L = 97$	5.8e-04	1.3e-02	2.0e-03	1.4e-02

По таблице 9 видно, что алгоритмы **CiSSA** и Фурье без модификаций достаточно плохо определяют тренд. Ситуация с выделением тренда улучшается при использовании процедуры расширения ряда, однако есть недостаток у такого решения. В примерах, рассматривающих для таблиц 6 и 9, можно заметить, что при применении расширения ряда ухудшается отделение периодических составляющих. Подобной проблемы нет с улучшением разделимости в методе **SSA**.

6.6 Отделение сигнала от шума

Рассмотрим влияние шума на результаты разделимости предыдущих примеров.

Пример. Вернемся к примеру из секции 6.3 и добавим к нему шум: $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} + \mathbf{X}_{\text{noise}} = \sin \frac{2\pi}{12}n + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi}{3}n + \varepsilon_n$, где $\varepsilon_n \sim N(0, 0.1^2)$. Кроме того, для всех алгоритмов кроме базового **SSA** выделялись периодические компоненты по диапазонам $(w \pm \Delta)$, где $\Delta = \frac{1}{N+1}$, $w = \frac{1}{12}, \frac{1}{3}$. Проводилось 100 тестов, в таблице 10 указаны средние значения ошибки для одних и тех же реализаций шума.

Таблица 10: MSE разложений ряда $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} + \mathbf{X}_{\text{noise}}$

Метод	Параметры	MSE(\mathbf{X}_{\sin})	MSE(\mathbf{X}_{\cos})	MSE(\mathbf{X})
SSA	$L = 96, K = 96$	2.9e-04	3.1e-04	5.9e-04
SSA EOSSA, $r = 4$	$L = 96, K = 96$	2.9e-04	3.1e-04	5.9e-04
Fourier	$N = 96 \cdot 2$	1.0e-04	1.1e-04	2.2e-04
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2$	1.2e-03	3.9e-03	5.1e-03
CiSSA	$L = 96$	1.6e-04	1.8e-04	3.4e-04
CiSSA extended	$L = 96$	6.6e-04	1.9e-03	2.5e-03
SSA	$L = 96, K = 97$	2.9e-04	3.1e-04	5.9e-04
SSA EOSSA, $r = 4$	$L = 96, K = 97$	2.9e-04	3.0e-04	5.9e-04
Fourier	$N = 96 \cdot 2 - 1$	1.8e-02	7.6e-03	2.6e-02
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2 - 1$	1.2e-03	8.4e-04	2.0e-03
CiSSA	$L = 97$	4.1e-02	1.2e-02	5.2e-02
CiSSA extended	$L = 97$	1.4e-02	3.0e-03	1.7e-02

По таблице 10 видно, что зашумление ряда сильно повлияло на ошибку, теперь она не является машинным нулем ни для одного из методов. Также был проведен парный t-критерий для зависимых выборок с целью проверки гипотезы о равенстве средних значений ошибки для каждой компоненты, попарно для всех методов. В качестве нулевой гипотезы (H_0) предполагалось, что средние значения двух сравниваемых выборок равны. Критический уровень значимости был установлен на уровне $\alpha = 0.05$. Результаты анализа показали, что во всех случаях, кроме сравнения **SSA** и **SSA** с EOSSA, p -значение оказалось меньше 0.05, что позволяет отвергнуть нулевую гипотезу.

Пример. Теперь вновь добавим трендовую составляющую к ряду: $\mathbf{X} = \mathbf{X}_c + \mathbf{X}_e + \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} + \mathbf{X}_{\text{noise}} = 1 + e^{\frac{x}{100}} + \sin \frac{2\pi}{12}x + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi}{3}x + \varepsilon_n$, где $\varepsilon_n \sim N(0, 0.1^2)$. Кроме того, для всех алгоритмов кроме базового **SSA** выделялись периодические компоненты по диапазонам $(w \pm \Delta)$, где $\Delta = \frac{1}{N+1}$, $w = \frac{1}{12}, \frac{1}{3}$, а непериодичность соответствовала диапазону частот $[0, \frac{1}{24}]$. Проводилось 100 тестов, в таблице 11 указаны средние значения ошибки для одних и тех же реализаций шума.

Таблица 11: MSE разложений ряда $\mathbf{X} = \mathbf{X}_{\sin} + \mathbf{X}_{\cos} + \mathbf{X}_c + \mathbf{X}_e + \mathbf{X}_{\text{noise}}$ методов

Метод	Параметры	MSE($\mathbf{X}_c + \mathbf{X}_e$)	MSE(\mathbf{X}_{\sin})	MSE(\mathbf{X}_{\cos})	MSE(\mathbf{X})
SSA	$L = 96, K = 96$	5.2e-03	2.9e-04	3.6e-04	5.2e-03
SSA EOSSA, $r = 6$	$L = 96, K = 96$	9.5e-04	2.9e-04	3.1e-04	1.5e-03
Fourier	$N = 96 \cdot 2$	1.2e-01	6.9e-04	7.2e-03	1.1e-01
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2$	3.0e-03	1.9e-03	9.6e-03	1.2e-02
CiSSA	$L = 96$	5.5e-02	1.7e-04	7.0e-04	4.6e-02
CiSSA extended	$L = 96$	2.7e-03	6.8e-04	2.1e-03	3.1e-03
SSA	$L = 96, K = 97$	5.5e-03	2.9e-04	3.7e-04	5.3e-03
SSA EOSSA, $r = 6$	$L = 96, K = 97$	9.3e-04	2.9e-04	3.1e-04	1.5e-03
Fourier	$N = 96 \cdot 2 - 1$	1.2e-01	1.9e-02	2.2e-02	1.0e-01
Fourier extended	$N = 96 \cdot 2 - 1$	4.7e-03	8.6e-04	3.0e-03	7.8e-03
CiSSA	$L = 97$	7.7e-02	4.1e-02	1.4e-02	1.1e-01
CiSSA extended	$L = 97$	2.7e-03	1.4e-02	3.3e-03	1.7e-02

Как видно из таблицы 11, разделения ухудшились, однако **SSA** с улучшением разделимости EOSSA отработал лучше всех, а хуже всех показали себя алгоритмы Фурье. Также был

проводен был проведён двухвыборочный t -критерий для зависимых выборок с целью проверки гипотезы о равенстве средних значений ошибки для каждой компоненты, попарно для всех методов. В качестве нулевой гипотезы (H_0) предполагалось, что средние значения двух сравниваемых выборок равны. Критический уровень значимости был установлен на уровне $\alpha = 0.05$. Результаты анализа показали, что во всех случаях, кроме сравнения синуса для базового **SSA** и **SSA** с EOSSA, а также синуса для Фурье и расширенного **CiSSA**, p -значение оказалось меньше 0.05, что позволяет отвергнуть нулевую гипотезу.

Таким образом, можно сделать вывод, что алгоритмы отделяют сигнал от шума примерно одинаково, когда ряд состоит из периодик и параметры правильно подобраны. Результаты не сильно изменяются для базового **SSA** и **SSA** с EOSSA. Для **CiSSA** и Фурье результаты ухудшаются. С добавлением трендовой составляющей ситуация меняется: для **SSA** результаты практически не ухудшаются, **CiSSA** с расширением показывает себя немного хуже **SSA**, остальные алгоритмы выдают значения ошибки на порядки большие.

6.7 Разделение непериодических составляющих между собой

Как удалось выяснить, все рассматриваемые алгоритмы могут выделять трендовую составляющую из ряда. Однако лишь **SSA** способен различить между собой две непериодических компоненты. Про скорость асимптотической разделимости для **SSA** можно подробнее узнать в книге [5]. Методы **CiSSA** и Фурье никаким образом не смогут отличить две непериодики между друг другом, поскольку они объединяют компоненты только по частотам. А двум непериодикам соответствуют одинаковые (низкие) наборы частот.

6.8 Преимущества и недостатки методов SSA, Фурье и CiSSA

Для наглядного отображения преимуществ каждого из этих методов составлены похожие по смыслу таблицы 12 и 13, где строки соответствуют методам, а столбцы — условиям (особым видам компонент ряда). Разделение на две таблицы объяснимо тем, что методам **SSA** и **CiSSA** важно, какие L и K выбраны у ряда, в то время как разложение Фурье волнует только N . На пересечении строк и столбцов указан знак, показывающий, достигается ли разделение компоненты: плюс (+) обозначает точное выполнение, знак стремления указывает на асимптотическое выполнение, а минус (-) — на отсутствие разделимости.

Обозначения:

- \cos — в ряде присутствуют только периодические компоненты вида $A \cos(2\pi wx + \varphi)$;
- X_{np1} — одна непериодическая компонента в ряде, остальные имеют период;
- X_{np} — несколько непериодических компонент в ряде, остальные имеют период, интересует разделение между непериодическими компонентами;
- group — автоматическая группировка по заданным частотам.

Таблица 12: Преимущества и недостатки методов **SSA**, **CiSSA**

Метод/Условие	$\cos, Lw \in \mathbb{N}, Kw \in \mathbb{N}$	$\cos, Lw \in \mathbb{N}, Kw \notin \mathbb{N}$	$\cos, Lw \notin \mathbb{N}, Kw \notin \mathbb{N}$	X_{np1}	X_{np}	group
SSA	+	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	-
SSA EOSSA	+	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	+
CiSSA	+	+	\rightarrow	-	-	+
CiSSA extended	+	+	\rightarrow	\rightarrow	-	+

Таблица 13: Преимущества и недостатки методов Fourier

Метод/Условие	$\cos, Nw \in \mathbb{N}$	$\cos, Nw \notin \mathbb{N}$	X_{np1}	X_{np}	group
Fourier	+	\rightarrow	-	-	+
Fourier extended	+	\rightarrow	\rightarrow	-	+

Большинство ситуаций из таблицы 12 и 13 уже были разобраны в предыдущих разделах. Так, столбцы, связанные с \cos , были разобраны в разделах 6.3 и 6.4. Ситуация с одной непериодической компонентой разобрана в 6.5, а с отделением нескольких непериодик в 6.7. Автоматическая группировка компонент по заранее заданным частотам в 6.1.

Анализ полученных результатов показывает, что **CiSSA** превосходит разложение Фурье как с расширением ряда, так и без него, во всех случаях, когда интересующие частоты совпадают с частотной решеткой алгоритмов. Если же частоты не совпадают, разложение Фурье может дать лучший результат благодаря более детальному разбиению частот. Кроме того, **SSA** с улучшением разделимости EOSSA продемонстрировал более высокую эффективность по сравнению со всеми ранее рассматриваемыми алгоритмами.

6.9 Проверка алгоритмов на реальных данных

Теперь рассмотрим реальные данные — месячные ряды промышленного производства (Industrial Production, IP), index 2010 = 100, в США. Данные промышленного производства полезны, поскольку оно указывается в определении рецессии Национальным бюро экономических исследований (NBER), как один из четырех ежемесячных рядов индикаторов, которые необходимо проверять при анализе делового цикла. Выборка охватывает период с января 1970 года по сентябрь 2014 года, поэтому размер выборки составляет $N = 537$. Источником данных является база данных IMF. Эти показатели демонстрируют различные тенденции, сезонность и цикличность (периодические компоненты, которые соответствуют циклам бизнеса). Данные IP также рассматривались в статье [1]. Применим как **CiSSA** с расширением ряда, так и **SSA** с автоматическим определением частот и улучшениями разделимости EOSSA и FOSSA с параметром $r = 30$ по следующим группам:

1. Трендовой составляющей должны отвечать низкие частоты, поэтому диапазон: $[0, \frac{1}{192}]$;
2. Циклы бизнеса по диапазонам: $[\frac{2}{192}, \frac{10}{192}]$;

3. Сезонность по частотам $\omega_k = 1/12, 1/6, 1/4, 1/3, 5/12, 1/2$;

На основе предыдущих требований взято $L = 192$.

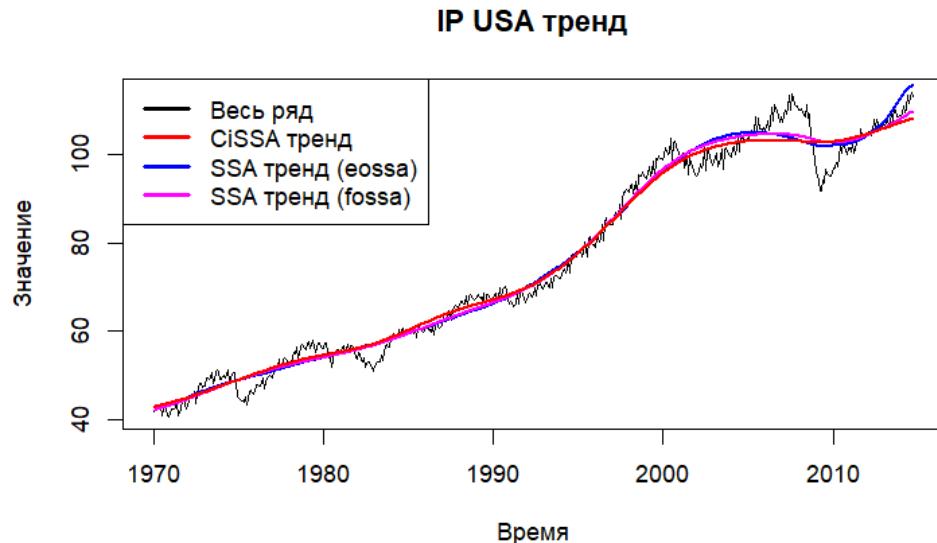


Рис. 8: Трендовая составляющая данных IP USA

При применении FOSSA улучшения разделимости алгоритм **SSA** выделяет тренд довольно похоже с **CiSSA**. Весь график **SSA** тренд EOSSA выглядит более изогнутым при визуальном сравнении с остальными.

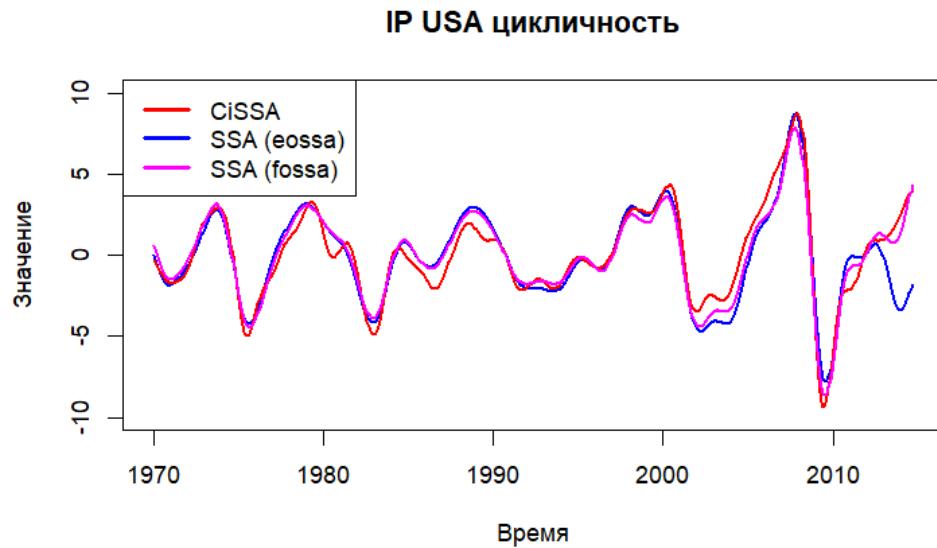


Рис. 9: Циклическая составляющая данных IP USA

Аналогичная тренду ситуация происходит с цикличностью. В случае EOSSA правый хвост

(значения ряда после 2010-ого года) смешался между цикличностью и трендом.



Рис. 10: Объединение тренда и цикличности IP USA

Как видно из графика 10, объединив тренд и цикличность получаем одинаковые результаты для всех рассматриваемых алгоритмов.

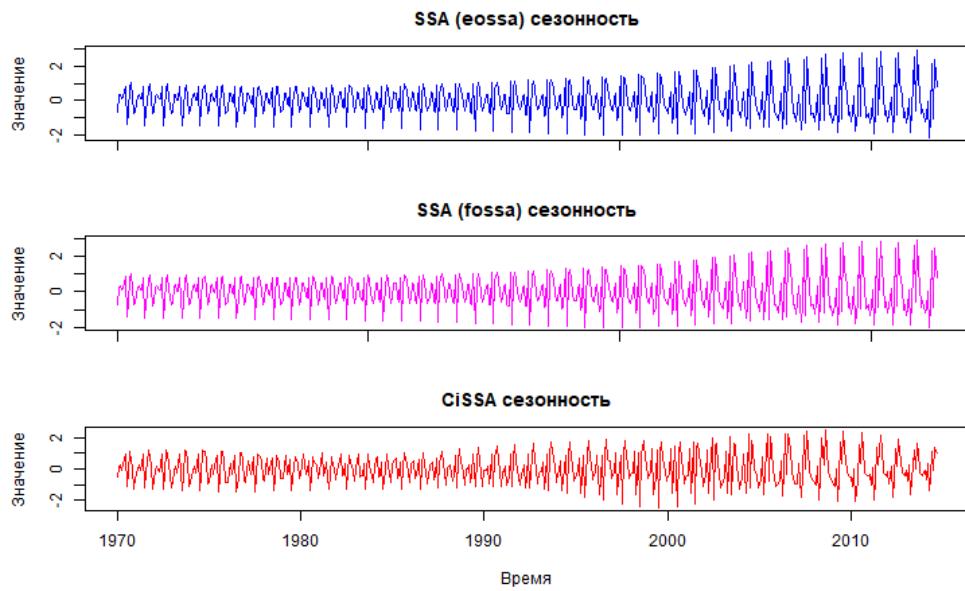


Рис. 11: Сезонная составляющая данных IP USA

Сезонность выглядит для всех алгоритмов похоже.

Шум же является нормальным во всех случаях.

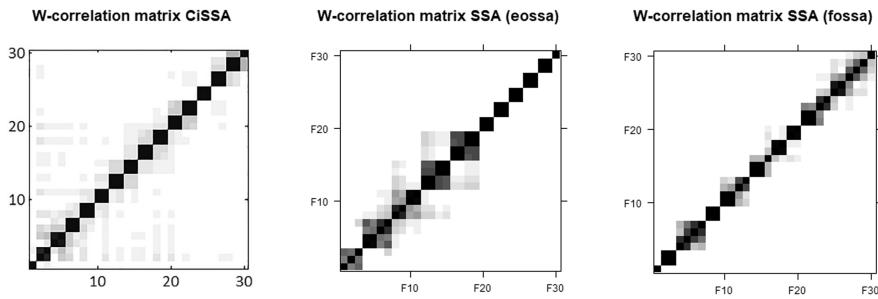


Рис. 12: Матрицы корреляций IP USA

По матрицам корреляции заметно, что при использовании **SSA** с улучшением разделимости EOSSA, смешиваются первые по значимости компоненты ряда (они и являются трендовыми и циклическими).

Таким образом, получились довольно похожие результаты в выделении тренда и цикличности при использовании **SSA** с FOSSA и **CiSSA**. Несколько иные результаты при **SSA** с EOSSA. Сезонная составляющая для всех алгоритмов выглядит схоже.

7 Многомерные варианты базового SSA

Временные ряды могут быть не только одномерными, но и многомерными, то есть представлять собой наборы связанных наблюдений. В данной работе рассматриваются две модификации базового **SSA**: **MSSA** и **2d-SSA**.

Под многомерным времененным рядом будем понимать систему s одномерных временных рядов $\mathbf{X} = (\mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(s)})$, где каждый ряд $\mathbf{X}^{(p)} = (x_1^{(p)}, \dots, x_{N_p}^{(p)})$ представляет собой последовательность числовых значений.

Под двумерным рядом будем понимать прямоугольную матрицу $\mathbf{X} = [x_{ij}] \in \mathbb{R}^{N_x \times N_y}$, содержащую наблюдения, упорядоченные по двум пространственным или иным измерениям (например, изображение).

7.1 MSSA

Рассмотрим многомерный временной ряд, то есть набор $\{\mathbb{X}^{(p)} = (x_j^{(p)})_{j=1}^{N_p}, p = 1, \dots, s\}$ из s временных рядов длины N_p , где $p = 1, \dots, s$.

Обозначим $\mathbb{X} = (\mathbb{X}^{(1)}, \dots, \mathbb{X}^{(s)})$ как исходные данные для алгоритма **MSSA** [4]. Общая схема алгоритма базового **SSA**. Необходимо лишь определить оператор вложения $\mathcal{J}_{\text{MSSA}}(\mathbb{X}) = \mathbf{X}$.

7.1.1 Вложение

Пусть L – длина окна, $1 < L < \min(N_p, p = 1, \dots, s)$. Для каждого временного ряда $\mathbf{X}^{(p)}$ формируем $K_p = N_p - L + 1$ векторов $\mathbf{X}_j^{(p)} = (x_j^{(p)}, \dots, x_{j+L-1}^{(p)})^T$, где $1 \leq j \leq K_p$. Обозначим $K = \sum_{p=1}^s K_p$. Траекторная матрица многомерного ряда \mathbf{X} – это матрица размера $L \times K$ следующего вида:

$$\mathcal{J}_{\text{MSSA}}(\mathbb{X}) = \mathbf{X} = [\mathbf{X}_1^{(1)} : \dots : \mathbf{X}_{K_1}^{(1)} : \dots : \mathbf{X}_1^{(s)} : \dots : \mathbf{X}_{K_s}^{(s)}] = [\mathbf{X}^{(1)} : \dots : \mathbf{X}^{(s)}],$$

где $\mathbf{X}^{(p)} = \mathcal{J}_{\text{SSA}}(\mathbf{X}^{(p)})$ – траекторная матрица одномерного ряда $\mathbf{X}^{(p)}$. Таким образом, траекторная матрица системы временных рядов имеет блочно-ганкелеву структуру. Заметим, что

$$\mathcal{J}_{\text{MSSA}}^{-1}(\mathbf{X}) = [\mathcal{J}_{\text{SSA}}^{-1}(\mathbf{X}^{(1)}) : \dots : \mathcal{J}_{\text{SSA}}^{-1}(\mathbf{X}^{(s)})].$$

7.1.2 Вложение

Аналогично базовому **SSA**.

7.1.3 Группировка

Аналогично базовому **SSA**.

7.1.4 Диагональное усреднение

Аналогично базовому **SSA** (3) определим оператор проектирования для **MSSA**:

$$\Pi_{\text{stacked}} \mathcal{H}(\mathbf{Y}) = [\Pi_{\mathcal{H}}(\mathbf{Y}^{(1)}) : \dots : \Pi_{\mathcal{H}}(\mathbf{Y}^{(i)})]$$

Тогда получаем восстановление с помощью $\mathcal{J}_{\text{MSSA}}^{-1} \circ \Pi_{\text{stacked}}$.

7.1.5 Комментарии

Собственные векторы U_i из SVD траекторной матрицы $\mathbf{X} = \sum_i \sqrt{\lambda_i} U_i V_i^\top$ формируют общее базисное пространство для всех временных рядов. Векторы факторов V_i содержат подкомпоненты $V_i^{(p)}$, соответствующие каждому ряду:

$$V_i = \begin{pmatrix} V_i^{(1)} \\ \vdots \\ V_i^{(s)} \end{pmatrix},$$

где $V_i^{(p)} \in \mathbb{R}^{K_p}$ принадлежит строковому пространству p -го ряда. U_i отражают общую структуру, $V_i^{(p)}$ — её проявление в отдельных рядах.

Кроме того, **MSSA** позволяет вычленить дополнительную информацию про структуру рядов, рассматривая их совместно.

7.2 2d-ssa

2d-SSA — это расширение базового **SSA** для двумерных массивов [4] (например, изображений). Данные представляются в виде матрицы:

$$\mathbf{X} = (x_{ij})_{i,j=1}^{N_x, N_y}, \quad \text{где } N_x \times N_y — \text{размер массива.}$$

Параметрами метода являются размеры окна (L_x, L_y) , где $1 \leq L_x \leq N_x$, $1 \leq L_y \leq N_y$.

7.2.1 Вложение

Как и в **MSSA**, нужно определить лишь $\mathcal{J}_{\text{2D-SSA}}$

1. Из массива \mathbf{X} выделяются все возможные подматрицы размера $L_x \times L_y$ с помощью скользящего окна.
2. Каждая подматрица $\mathbf{X}_{k,l}^{(L_x, L_y)}$ преобразуется в столбец: $\mathbf{X}_{k+(l-1)K_x} = \text{vec}(\mathbf{X}_{k,l}^{(L_x, L_y)})$.
3. Траекторная матрица строится как объединение этих столбцов:

$$\mathcal{J}_{\text{2D-SSA}}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} = [\mathbf{X}_1 : \dots : \mathbf{X}_{K_x K_y}].$$

Матрица \mathbf{X} имеет блочно-ганкелеву структуру:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_2 & \dots & \mathbf{H}_{K_y} \\ \mathbf{H}_2 & \mathbf{H}_3 & \dots & \mathbf{H}_{K_y+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{H}_{L_y} & \mathbf{H}_{L_y+1} & \dots & \mathbf{H}_{N_y} \end{pmatrix},$$

где каждая \mathbf{H}_j — ганкелевская матрица, построенная из столбцов \mathbf{X} .

7.2.2 Вложение

Аналогично базовому **SSA**.

7.2.3 Группировка

Аналогично базовому **SSA**.

7.2.4 Диагональное усреднение

Аналогично базовому **SSA**, только восстановление производится по соответствующим ганкелевым блокам матрицы \mathbf{X} .

7.2.5 Комментарии

Связь с **MSSA**: если $L_x = 1$ или $L_y = 1$, **2d-SSA** эквивалентен **MSSA** для временных рядов одинаковой длины. Поэтому его можно назвать обобщением **MSSA**.

Также при применении **2d-SSA** важен порядок следования строк и столбцов в \mathbf{X} , в отличие от **MSSA**.

8 Метод Functional singular spectrum analysis (FSSA)

Functional SSA – метод, предложенный для анализа функциональных временных рядов [9]. Предлагается объединить теорию многомерного функционального анализа главных компонент (MFPCA) и SSA.

Авторы метода **FSSA** сравнивают его с **MSSA** и динамическим функциональным анализом главных компонент (dFPCA), показывая преимущество использования **FSSA** результаты в разделении компонент функциональных данных, особенно для нестационарных рядов.

В данном разделе преимущественно используются обозначения из статьи [9] авторов метода. Рассмотрим, основные определения.

- **Функциональный временной ряд:** $\mathbf{y}_N = (y_1, \dots, y_N)^\top$, длина N , $y_i : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, $y_i \in \mathbb{H} = \mathcal{L}^2([0, 1])$ с $\langle x, y \rangle = \int_0^1 x(s)y(s)ds$.
- **Пространство \mathbb{H}^k :** Декартово произведение k копий \mathbb{H} .
Элемент $\mathbf{x} \in \mathbb{H}^k$: $\mathbf{x}(s) = (x_1(s), \dots, x_k(s))^\top$, $x_i \in \mathbb{H}$, $s \in [0, 1]$. Скалярное произведение: $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\mathbb{H}^k} = \sum_{i=1}^k \langle x_i, y_i \rangle$.
- **Тензорное произведение:** Для $x \in \mathbb{H}_1$, $y \in \mathbb{H}_2$, оператор $x \otimes y : \mathbb{H}_1 \rightarrow \mathbb{H}_2$, $(x \otimes y)h = \langle x, h \rangle y$, $h \in \mathbb{H}_1$.
- **Пространство $\mathbb{H}^{L \times K}$:** Линейное пространство операторов $\mathcal{Z} : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{H}^L$, заданных $[z_{i,j}]_{i=1, \dots, L}^{j=1, \dots, K}$,

$$\mathcal{Z}\mathbf{a} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^K a_j z_{1,j} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^K a_j z_{L,j} \end{pmatrix}, \quad z_{i,j} \in \mathbb{H}, \quad \mathbf{a} = (a_1, \dots, a_K) \in \mathbb{R}^K. \quad (11)$$

8.1 Алгоритм FSSA

Алгоритм сильно схож с базовым **SSA**.

Для целого числа $1 \leq L \leq N/2$ положим $K = N - L + 1$ и определим множество многомерных функциональных векторов в \mathbb{H}^L как

$$\mathbf{x}_j(s) := (y_j(s), y_{j+1}(s), \dots, y_{j+L-1}(s))^\top, \quad j = 1, \dots, K, \quad (12)$$

где \mathbf{x}_j обозначают функциональные L -сдвинутые векторы. Следующий алгоритм предоставляет результаты FSSA в четыре этапа.

8.1.1 Вложение

Траекторный оператор $\mathcal{X} : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{H}^L$.

$$\mathcal{X}\mathbf{a} := \sum_{j=1}^K a_j \mathbf{x}_j = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^K a_j y_j \\ \sum_{j=1}^K a_j y_{j+1} \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^K a_j y_{j+L-1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a} = (a_1, \dots, a_K)^\top \in \mathbb{R}^K. \quad (13)$$

Кроме того, $\mathcal{X} = \mathcal{T}\mathbf{y}_N$, где \mathcal{T} — оператор из \mathbb{H}^N в $\mathbb{H}_H^{L \times K}$. Вычисление $\mathcal{X}\mathbf{a}$ в заданной точке $s \in [0, 1]$ эквивалентно матричному произведению $\mathbf{X}(s)\mathbf{a}$, где $\mathbf{X}(s)$ — это $L \times K$ ганкелева матрица, заданная как

$$\mathbf{X}(s) = [\mathbf{x}_1(s), \dots, \mathbf{x}_K(s)]. \quad (14)$$

Оператор \mathcal{X} является ограниченным линейным оператором. Если определить $\mathcal{X}^* : \mathbb{H}^L \rightarrow \mathbb{R}^K$ как

$$\mathcal{X}^*\mathbf{z} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^L \langle y_i, z_i \rangle \\ \sum_{i=1}^L \langle y_{i+1}, z_i \rangle \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^L \langle y_{i+K-1}, z_i \rangle \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = (z_1, \dots, z_L)^\top \in \mathbb{H}^L, \quad (15)$$

то \mathcal{X}^* является сопряжённым оператором для \mathcal{X} .

8.1.2 Разложение

Определим оператор $\mathcal{S} : \mathbb{H}^L \rightarrow \mathbb{H}^L$ как $\mathcal{S} := \mathcal{X}\mathcal{X}^*$. Следовательно, для заданного $\mathbf{z} \in \mathbb{H}^L$ это означает, что

$$\mathcal{S}\mathbf{z} = \sum_{j=1}^K \sum_{i=1}^L \langle y_{i+j-1}, z_i \rangle \mathbf{x}_j = \sum_{j=1}^K \langle \mathbf{x}_j, \mathbf{z} \rangle_{\mathbb{H}^L} \mathbf{x}_j = \sum_{j=1}^K (\mathbf{x}_j \otimes \mathbf{x}_j) \mathbf{z}. \quad (16)$$

Для любого положительного i определим оператор $\mathcal{X}_i : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{H}^L$, заданный как

$$\mathcal{X}_i \mathbf{a} := \sum_{j=1}^K a_j (\psi_i \otimes \psi_i) \mathbf{x}_j = (\psi_i \otimes \psi_i) \sum_{j=1}^K a_j \mathbf{x}_j. \quad (17)$$

\mathcal{X}_i — элементарный оператор. Вычисление $\mathcal{X}_i \mathbf{a}$ в заданной точке $s \in [0, 1]$ эквивалентно матричному произведению $\mathbf{X}_i(s)\mathbf{a}$, где $\mathbf{X}_i(s)$ — это $L \times K$ матрица, заданная как

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_i(s) &:= [\langle \psi_i, \mathbf{x}_1 \rangle_{\mathbb{H}^L} \psi_i(s), \dots, \langle \psi_i, \mathbf{x}_K \rangle_{\mathbb{H}^L} \psi_i(s)] \\ &= [(\psi_i \otimes \psi_i) \mathbf{x}_1(s), \dots, (\psi_i \otimes \psi_i) \mathbf{x}_K(s)]. \end{aligned} \quad (18)$$

Элементарные операторы \mathcal{X}_i являются ограниченными операторами ранга один. Кроме того, \mathcal{X}_i декомпозируют траекторный оператор \mathcal{X} как

$$\mathcal{X} = \sum_{i=1}^{\infty} \mathcal{X}_i. \quad (19)$$

Следующая теорема предоставляет сингулярное разложение (SVD) траекторного оператора \mathcal{X} для получения соответствующих собственных троек $(\sqrt{\lambda_i}, \mathbf{v}_i, \psi_i)$ на этапе декомпозиции [9].

Теорема 4. Пусть $\{\psi_i\}_{i=1}^{\infty}$ и $\{\lambda_i\}_{i=1}^{\infty}$ — собственные элементы \mathcal{S} , и

$$\mathcal{S}^\dagger := \mathcal{X}^* \mathcal{X} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^L \langle y_i, y_i \rangle & \cdots & \sum_{i=1}^L \langle y_i, y_{i+K-1} \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^L \langle y_{i+K-1}, y_i \rangle & \cdots & \sum_{i=1}^L \langle y_{i+K-1}, y_{i+K-1} \rangle \end{bmatrix}. \quad (20)$$

Тогда сингулярное разложение траекторного оператора \mathcal{X} можно записать как

$$\mathcal{X} = \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \mathbf{v}_i \otimes \boldsymbol{\psi}_i, \quad (21)$$

где $\mathbf{v}_i = \left(\frac{\langle \boldsymbol{\psi}_i, \mathbf{x}_1 \rangle_{\mathbb{H}^L}}{\sqrt{\lambda_i}}, \dots, \frac{\langle \boldsymbol{\psi}_i, \mathbf{x}_K \rangle_{\mathbb{H}^L}}{\sqrt{\lambda_i}} \right)^{\top}$. Кроме того, для любого $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^K$, используя (21), мы имеем

$$\mathcal{X}\mathbf{a} = \sum_{i=1}^{\infty} \sqrt{\lambda_i} \langle \mathbf{v}_i, \mathbf{a} \rangle_{\mathbb{R}^K} \boldsymbol{\psi}_i, \quad (22)$$

где

- i) $\{\lambda_i\}_{i=1}^{\infty}$ — множество неубывающих собственных значений \mathcal{S}^{\dagger} , и
- ii) \mathbf{v}_i — соответствующие ортонормированные собственные векторы \mathcal{S}^{\dagger} , удовлетворяющие $\mathcal{X}\mathbf{v}_i = \sqrt{\lambda_i} \boldsymbol{\psi}_i$.

8.1.3 Группировка

Аналогично базовому **SSA**. Получается

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}_{I_1} + \mathcal{X}_{I_2} + \dots + \mathcal{X}_{I_m}. \quad (23)$$

8.1.4 Диагональное усреднение

Для заданного q ($1 \leq q \leq m$) используется $\mathcal{T}^{-1} : \mathbb{H}_H^{L \times K} \rightarrow \mathbb{H}^N$ для преобразования оператора \mathcal{X}_{I_q} из (23) в $\tilde{\mathbf{y}}_N^q$.

Поскольку $\mathcal{X}_{I_q} \in \mathbb{H}^{L \times K}$, сначала выполняется проекция на $\mathbb{H}_H^{L \times K}$, замкнутое подпространство $\mathbb{H}^{L \times K}$.

Элементы \mathcal{X}_{I_q} и $\tilde{\mathcal{X}}_{I_q}$ обозначаются $[x_{i,j}^q]$ и $[\tilde{x}_{i,j}^q]$. Метод диагонального усреднения обобщается на $\mathbb{H}^{L \times K}$, где

$$\tilde{x}_{i,j}^q = \frac{1}{n_s} \sum_{(l,k):l+k=s} x_{l,k}^q, \quad (24)$$

$s = i+j$, n_s — число пар (l, k) , таких что $l+k=s$. Проекция обозначается $\Pi_{\mathbb{H}} : \mathbb{H}^{L \times K} \rightarrow \mathbb{H}_H^{L \times K}$, и $\tilde{\mathcal{X}}_{I_q} = \Pi_{\mathbb{H}} \mathcal{X}_{I_q}$.

Как итог: $\tilde{\mathbf{y}}_N^q = \mathcal{T}^{-1} \tilde{\mathcal{X}}_{I_q}$.

8.2 Разделимость

Рассматривается $\mathbf{y}_N = \mathbf{y}_N^{(1)} + \mathbf{y}_N^{(2)}$, где $\mathbf{y}_N^{(i)} = \{y_1^{(i)}, \dots, y_N^{(i)}\}$, $i = 1, 2$, — функциональные временные ряды (FTS). Для фиксированной длины окна L для каждого ряда $\mathbf{y}_N^{(i)}$ обозначается $\{\mathbf{x}_k^{(i)}\}_{k=1}^K$ — последовательность функциональных сдвинутых векторов, $\mathcal{L}^{(i)}$ — линейное пространство, порождённое $\{\mathbf{x}_k^{(i)}\}_{k=1}^K$. Разделимость рядов $\mathbf{y}_N^{(1)}$ и $\mathbf{y}_N^{(2)}$ эквивалентна $\mathcal{L}^{(1)} \perp \mathcal{L}^{(2)}$, то есть $\langle \mathbf{x}_k^{(1)}, \mathbf{x}_{k'}^{(2)} \rangle_{\mathbb{H}^L} = 0$ для всех $k, k' = 1, \dots, K$.

Необходимое условие разделимости определяется через w-корреляцию. Взвешенное скалярное произведение рядов $\mathbf{y}_N^{(1)}$ и $\mathbf{y}_N^{(2)}$ задаётся как

$$\langle \mathbf{y}_N^{(1)}, \mathbf{y}_N^{(2)} \rangle_w = \sum_{i=1}^N w_i \langle y_i^{(1)}, y_i^{(2)} \rangle, \quad (25)$$

где $w_i = \min\{i, L, N - i + 1\}$. Ряды $\mathbf{y}_N^{(1)}$ и $\mathbf{y}_N^{(2)}$ называются w -ортогональными, если

$$\langle \mathbf{y}_N^{(1)}, \mathbf{y}_N^{(2)} \rangle_w = 0. \quad (26)$$

Теорема 5. *Разделимость рядов $\mathbf{y}_N^{(1)}$ и $\mathbf{y}_N^{(2)}$ влечёт их w -ортогональность [9].*

9 Сравнение FSSA, MSSA, 2d-SSA

В оригинальной работе **FSSA** [9] рассматривалось сравнение алгоритма с dPCA, **MSSA**. Однако, **2d-SSA** в данном сравнении не было, хотя он может показать результаты лучше, чем **MSSA**, за счет того, что более гибко можно рассматривать зависимость по второй переменной.

9.1 Численное сравнение

Рассматриваются функциональные временные ряды длины $N = 50, 100, 150$ и 200 , наблюдаемые в $n = 100$ фиксированных равноудаленных дискретных точках на $[0, 1]$ по следующей модели:

$$Y_t(s_i) = m_t(s_i) + X_t(s_i), \quad s_i \in [0, 1], i = 1, \dots, n, \text{ и } t = 1, \dots, N. \quad (27)$$

Для преобразования $\{Y_t(s_i)\}$ в гладкие (непрерывные) функциональные кривые применяется кубическая B-сплайн базисная функция с 15 степенями свободы. В данной модели $m_t(s)$ является периодической компонентой, определенной как

$$m_t(s) = e^{s^2} \cos(2\pi\omega t) + \cos(4\pi s) \sin(2\pi\omega t), \quad (28)$$

где ω — частота модели с тремя значениями ($\omega = 0, 0.1$ и 0.25).

В этом случае $\{X_t(s_i), t = 1, \dots, N \text{ и } i = 1, \dots, n\}$ генерируется из независимого гауссовского белого шума (GWN) с нулевым средним и стандартным отклонением, равным 0.1 .

Для сравнения производительности методов FSSA и MSSA рассматриваются три значения длины окна вдоль времени: $L = 20, 30$ и 40 . Для **2d-SSA** вдоль s длина окна равна 3 . Также везде используются первые две собственные компоненты. Разделения сравниваются по RMSE:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N \times n} \sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^n (Y_t(s_i) - \hat{Y}_t(s_i))^2},$$

где $\hat{Y}_t(s_i)$ — функциональный временной ряд, реконструированный каждым методом. Эксперимент повторяется 100 раз, и считается среднее значение RMSE.

Таблица 14: Результаты сравнения методов 2d-SSA, MSSA и FSSA при различных параметрах ω и N

ω	N	$L = 20$			$L = 30$			$L = 40$		
		2D-SSA	MSSA	FSSA	2D-SSA	MSSA	FSSA	2D-SSA	MSSA	FSSA
0.00	50	0.012	0.024	0.007	0.012	0.024	0.011	0.012	0.020	0.015
	100	0.014	0.023	0.006	0.012	0.021	0.006	0.010	0.017	0.006
	150	0.014	0.025	0.005	0.012	0.019	0.005	0.010	0.017	0.005
	200	0.014	0.027	0.005	0.012	0.020	0.004	0.010	0.017	0.004
0.10	50	0.015	0.028	0.009	0.014	0.026	0.011	0.014	0.021	0.014
	100	0.016	0.027	0.008	0.013	0.023	0.007	0.012	0.020	0.006
	150	0.014	0.027	0.005	0.013	0.022	0.005	0.011	0.019	0.005
	200	0.014	0.026	0.005	0.013	0.022	0.005	0.011	0.019	0.005
0.25	50	0.015	0.028	0.010	0.013	0.023	0.011	0.012	0.021	0.015
	100	0.015	0.027	0.007	0.014	0.024	0.007	0.012	0.020	0.007
	150	0.014	0.026	0.005	0.013	0.021	0.006	0.012	0.020	0.006
	200	0.014	0.026	0.006	0.012	0.022	0.005	0.011	0.019	0.004

По результатам таблицы 14 можно сказать, что **FSSA** действительно чаще справляется лучше в данной модели, чем **2d-SSA** и **MSSA**. **2d-SSA** в свою очередь показывает более хорошие результаты, в отличие от **MSSA**.

10 Заключение

В данной работе исследованы алгоритмы **SSA**, **GSSA** и **CiSSA**, а также многомерные модификации: **MSSA**, **2d-SSA**, **FSSA**. Проведено их сравнение теоретически, и полученные знания были проверены на реальных и смоделированных примерах с помощью языка R. Найдены недостатки и достоинства алгоритмов.

Алгоритм **GSSA** в сравнении с **SSA** лучше справляется с разделимостью компонент между друг другом. Однако это справедливо только тогда, когда в ряде нет шума. Метод **SSA** лучше будет справляться с задачей выделения сигнала.

При сравнении **CiSSA** и **SSA** также выяснилось, что **CiSSA** выделяет трендовую компоненту лучше, чем разложение Фурье, однако проигрывает в выделении периодик, особенно когда частота выделяемой компоненты не попадает в сетку частот методов.

Рассматривая **SSA** с улучшением разделимости и **CiSSA** на модельных примерах, видно, что по среднеквадратической ошибке **SSA** выигрывает у **CiSSA**. Кроме того, алгоритм **SSA** является более гибким: в нем адаптивный базис, есть дополнительные алгоритмы, которые довольно похоже приближают этот алгоритм к **CiSSA**, а также методы для автоматического выбора компонентов по частотам. Метод **CiSSA** является простым в использовании.

Алгоритм **FSSA** показывает численное преимущество над алгоритмами **MSSA** и **2d-SSA**.

Дальнейшими действиями является детальное сравнение алгоритмов **MSSA**, **2d-SSA** и **FSSA**.

Список литературы

- [1] Juan Bogalo, Pilar Poncela, and Eva Senra. Circulant singular spectrum analysis: A new automated procedure for signal extraction. *Signal Processing*, 177, 2020.
- [2] Rahul Dey, Meloth Thamban, Chavarukonam Madhavanpillai Laluraj, Kanthanathan Mahalinganathan, Bhikaji Laxman Redkar, Sudhir Kumar, and Kenichi Matsuoka. Application of visual stratigraphy from line-scan images to constrain chronology and melt features of a firn core from coastal antarctica. *Journal of Glaciology*, 69(273):179–190, 2023.
- [3] Nina Golyandina, Pavel Dudnik, and Alex Shlemov. Intelligent identification of trend components in singular spectrum analysis. *Algorithms*, 16(7):353, 2023.
- [4] Nina Golyandina, Anton Korobeynikov, and Anatoly Zhigljavsky. *Singular Spectrum Analysis with R*. 01 2018.
- [5] Nina Golyandina, Vladimir Nekrutkin, and Anatoly Zhigljavsky. *Analysis of Time Series Structure: SSA and Related Techniques*. Chapman and Hall/CRC, 2001.
- [6] Nina Golyandina and Anatoly Zhigljavsky. *Singular Spectrum Analysis for Time Series*. SpringerBriefs in Statistics. Springer Berlin Heidelberg, 2 edition, 2020.
- [7] Nina Golyandina and Polina Zhornikova. On automated identification in singular spectrum analysis for different types of objects, 2023.
- [8] Jialiang Gu, Kevin Hung, Bingo Wing-Kuen Ling, Daniel Hung-Kay Chow, Yang Zhou, Yaru Fu, and Sio Hang Pun. Generalized singular spectrum analysis for the decomposition and analysis of non-stationary signals. *Journal of the Franklin Institute*, Accepted/In Press, 2024.
- [9] Hossein Haghbin, Seyed Morteza Najibi, Rahim Mahmoudvand, Jordan Trinka, and Mehdi Maadooliat. Functional singular spectrum analysis, 2019.
- [10] Nikolay Pogrebnykov. SPbSU SSA coursework: Time series analysis. https://github.com/xSICHx/spbu_ssa_methods_coursework/tree/main, 2024.
- [11] E.W. Weisstein. *CRC Concise Encyclopedia of Mathematics*. CRC Press, 2002.
- [12] Jammisetty Yedukondalu, Kalyani Sunkara, Vankayalapati Radhika, Sivakrishna Kondaveeti, Murali Anumothu, and Yadadavalli Krishna. Cognitive load detection through eeg lead wise feature optimization and ensemble classification. *Scientific Reports*, 15, 01 2025.