Министерство образования и науки Российской Федерации
МОСКОВСКИЙ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ
(государственный университет)

ФАКУЛЬТЕТ УПРАВЛЕНИЯ И ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
КАФЕДРА ИНФОРМАТИКИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

Специализация 011600 «Прикладные физика и математика»

Газизов Ильнур Мансурович

МЕТОД ОЦЕНКИ РАЗВИТИЯ ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ПОМОЩЬЮ СКРЫТОЙ МАРКОВСКОЙ МОДЕЛИ

Магистерская диссертация

Научный руководитель
Солнцева-Чалей М.О.

Москва
2016 год

Содержание

Введение **4**

Актуальность работы 4

Описание прикладной области исследования 6

Цель работы 8

Глава 1. Динамическое искажение времени **10**

1.1 Алгоритм динамического искажения времени 10

1.2 Другие подходы к выравниванию временных рядов 15

Глава 2. Марковская модель непрерывного скрытого профиля **16**

2.1 Модели непрерывных профилей (CPM-модели) 16

2.2 Алгоритмы для скрытой марковской модели (HMM) 19

2.2.1 Алгоритм прямой и обратной рекурсии 20

2.2.2 Алгоритм Витерби 22

2.3 Выравнивание и масштабирование асинхронных временных рядов . . . 25

2.3.1 Состояния масштаба, времени и скрытая запись 26

2.3.2 Правдоподобие для набора наблюдаемых временнных рядов . . 30

2.4 EM-алгоритм 32

2.5 Обучение CPM-модели с помощью EM- алгоритма 36

2.5.1 Оценки предельных апостериорных вероятностей (E-шаг) 37

2.5.2 Оценки значений параметров CPM-модели (M-шаг) 37

2.5.3 Скрытая запись 37

2.5.4 Вариация эмиссии временного ряда с помощью HMM 38

2.5.5 Вероятности переходов между скрытыми состояниями 39

2.5.6 Глобальный параметр масштаба 41

2.6 Принятие решений при проектировании CPM-модели 42

2.6.1 Отношение CPM-модели и Input-Output HMM 43

2.6.2 Отношение алгоритма DTW и CPM-модели 43

Численный эксперимент **45**

Заключение **51**

Список использованной литературы **52**

Приложение **57**

Основные обозначения

$\mathbf{x}[i] = \{x[i;k],\ k = \overline{1,N}\}$ – наблюдаемый i-ый временной ряд длиной N, $(i = \overline{1,K})$.

$\mathbf{S} = \{s[j],\ j = \overline{1,M}\}$ – множество возможных скрытых состояний скрытой Марковской модели.

$\boldsymbol{\phi}[i] = \{\phi[i;k],\ k = \overline{1,\ N}\}$ – временная последовательность скрытых состояний.

$\mathcal{T}_{s[m],s[j]}$– вероятность перехода между состояниями $s[m]$ и $s[j]$.

$\mathcal{A}^{i}_{k,s[j]}$ – вероятность эмиссии элемента $x[i;k]$.

Введение

Актуальность работы

Анализ многомерных временных рядов (time series data analysis), в частности, цифровых сигналов, с помощью методов интеллектуального анализа данных (data mining) приобретает всё большую актуальность в связи с тем, что возникает необходимость выявления характерных особенностей, скрытых закономерностей, связей, паттернов и/или трендов в различных массивах данных [1]. Наиболее полно современные автоматизированные подходы к обработке больших массивов данных представлены в [2], где описываются вероятностные подходы к выявлению закономерностей в данных, как для случаев, в которых необходимо прогнозирование дальнейших значений на основании данных обучающей выборки, так и для случаев, когда в исходных данных ищутся скрытые закономерности и характерные паттерны. Так, в работах [3–5] методы data mining используются для выявления трендов во временных рядах.

В общем случае временные ряды представляют собой упорядоченный набор действительных значений, зафиксированных за равные промежутки времени, где каждому моменту времени соответствует своё значение. Наблюдаемый временной ряд $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ для $t = \{t_1, t_2, \ldots, t_n\}$ – это дискретная функция со значениями x_1 в момент времени t_1, x_2 в момент времени t_2 и так далее. Многомерные временные ряды, в отличии от одномерных, формируются более чем одной переменной. Временные ряды также можно разделить на стационарные и нестационарные. Стационарные временные ряды имеют постоянные во времени математическое ожидание и дисперсию, тогда как нестационарные не имеют характерного математического ожидания, которое может увеличиваться или уменьшаться с течением времени.

При анализе временных рядов и определения в них точных закономерностей важна правильная предварительная обработка исходных данных. Для этого необходимо восстановить утерянные значения, если при передаче часть информации была потеряна и/или устранить случайные искажения, помехи и шум. Возникающий при этом шум можно определить как случайную ошибку, которая обусловлена рядом причин таких, как неисправность измерительной аппаратуры и/или факторами окружающей среды [6].

Существуют различные статистические и вычислительные методы анализа данных, используемые при обработке временных рядов, измерений и сигналов, например анализ независимых компонент (Independent Component Analysis - ICA) [7]. Для анализа

одновременных (синхронных) наблюдаемых временных рядов может использоваться алгоритм SOBI (Second Order Blind Identification) [8]. В случае мультипликативного шума для его удаления требуется предварительное отбеливание фазы. При удалении части амплитудной информации посредством отбеливания фазы, сигнал остается распознаваемым. Но после отбеливания фазы анализ независимых компонентов должен основываться только на фазовом спектре, связанном со статистиками более высоких порядков, чем второй. В этом случае может испольоваться алгоритм FastICA [9].

При обработке сигналов широко применяются методы фильтрации. В этом случае также предполагается, что поведение наблюдаемой системы определяется ненаблюдаемыми (скрытыми состояниями) [10]. Если зависимость между вектором текущего состояния и вектором предыдущего состояния определяется динамическими уравнениями системы и шума модели [11], и система является линейной с гауссовым шумом, то для оценки скрытых состояний применяется фильтр Калмана [12–15], а для оценки состояний нелинейной системы – расширенный (нелинейный) фильтр Калмана [16], основанный на линеаризации первого порядка. Так, в работе [17] метод, основанный на фильтрации Калмана, применяется для выделения паттернов турбулентного потока при симуляции крупных вихрей (large-scale simulation). А в работе [18] фильтр Калмана и сглаживающее приближение используются для совмещения временных рядов из четырёх космических геодезических методов для реализации экспериментальной наземной системы координат.

В случае неодновременной и несинхронной записи наблюдаемых временных рядов, которые представляют одинаковые по содержанию процессы, но часто содержат искажения, влияющие на их интерпретацию, следует найти некоторую каноническую систему отсчета времени, в которой могут быть отображены все рассматриваемые временные ряды, чтобы их можно было сравнивать непосредственно друг с другом [19]. Так, например, в различных временных рядах продолжительность сегментов с практически нулевым сигналом может существенно меняться. Эта изменчивость возникает из-за того, что течение времени недостаточно точно контролируется во время записи временных рядов, или, если оно контролируется, измеряемое время не соответствует течению времени рассматриваемых реальных процессов.

Задача преобразования двух или более временных рядов в сравнимые друг с другом посредством изменения их относительной временной протяженности называется задачей выравнивания временных рядов (time-series alignment problem). Задача

выравнивания (aligning) наблюдаемых временных рядов и формирования из них компонент многомерных временных рядов полностью решается во временной области в результате предварительного анализа этих временных рядов с использованием динамического искажения времени (dynamic time warping, DTW) [20] и скрытых Марковских моделей (Hidden Markov Model, HMM) [19, 21, 22]. HMM применяются в широком спектре задач от выявления закономерностей в ДНК [23] до обнаружения нетипичных (опасных) событий на основании анализа шума сигнала при обработке зашумлённых аккустических сигналов [24].

Изучение различных газодинамических процессов в реакционных-способных смесях производится на основе регистрации сигналов, сопровождающих протекание этих процессов во времени, например, изменение давления, температуры и т.п. Это могут быть показания, зафиксированные датчиками давления при прохождении по газовой смеси взрывной волны. Такие данные представляют собой асинхронные временные ряды, обработка которых может выполняться методами data mining. В настоящей работе предлагается использование Марковской модели непрерывного скрытого профиля для исследования и оценки общих закономерностей протекания газодинамических процессов в водородно-воздушной смеси. Далее приводится описания прикладной области, для которой выполняется анализ.

Описание прикладной области исследования

Исследования газодинамических процессов при горении и взрыве водородно-воздушных смесей связаны с необходимостью прогнозирования особенностей возникновения взрывоопасных ситуаций при аварийных утечках водорода. Повышение достоверности прогнозирования является одной из главных проблем безопастности водородных систем при их использовании в транспортных средствах, силовых установках и энергоустановках, в том числе атомных. При хранении и использовании водорода его утечка и перемешивание с окружающим воздухом приводят к опасности возникновения горения и взрыва в замкнутых и загроможденных объемах, при этом характер и масштаб разрушений зависят от конкретных условий. Для обеспечения безопасности технологических процессов в энергосистемах, использующих или допускающих образование водородосодержащих воздушных смесей, необходимо знание закономерностей и критических условий распространения пламени и детонационно-подобных волн горения в реакционно-способных газовых смесях, выявляемых в объемах, моделирующих по форме и размерам реальные условия [25].

При моделировании нештатных ситуаций, приводящих к авариям в объемах, заполненных водородно-воздушными смесями, необходимо учитывать взрыв и сверхзвуковое горение, так как они являются наиболее опасными последствиями, возникающими при возгорании и ускоренном распространении пламени [26]. Результаты исследования процессов горения в установившихся режимах дефлаграции и детонации достаточно хорошо изучены, однако закономерности горения в наиболее опасных для реакционных объемов нестационарных режимах являются менее изученными. В реальной ситуации ограниченных объёмов распространение волн горения представляет собой последовательность нестационарных, в том числе переходных, режимов, обусловленных большим разнообразием нелинейно взаимодействующих между собой физико-химических процессов [27].

Нестационарные процессы горения определяются такими характеристиками как период индукции для смеси, параметры источника воспламенения в конкретных условиях инициирования, энергия и продолжительность инирующего импульса. Инициирующим источником может быть разряд, прямой поджиг, интенсивное механическое воздействие, а также ударные волны при их взаимодействии и отражении. Необходимо знание координат зоны максимального выделения энергии относительно начала воспламенения во фронте горения, ширины этой зоны и зависимости перечисленных факторов от параметров смеси.

Водород характеризуется в классических исследованиях как активно горящий газ и для него характерны малые энергии инициирования горения. Возникшее от слабого источника первичное горение заметно ускоряется на начальных стадиях формирования фронта. Фронт, являясь неустойчивым, порождает возмущения и потоки, которые в замкнутых и полузамкнутых объемах и объемах больших размеров создают зоны с параметрами, достаточными для возникновения вторичных очагов воспламенения и взрыва. Соответственно, возникающие вторичные нестационарные процессы характеризуются во многих случаях параметрами более высокими, чем параметры установившихся детонационных волн. В детонационном режиме горение локализуется в узкой зоне за ударной волной, так что скорость его распространения совпадает со скоростью ударной волны и может достигать нескольких километров в секунду [28].

Согласно модели Зельдовича-Неймана-Дёринга (Рис. 1) сжатие топливной смеси происходит мгновенно во фронте ударной волны. В результате скачкообразного увеличения температуры, в зоне индукции происходит воспламенение смеси. Далее смесь горит, пока полностью не преобразуется в продукты сгорания. При этом ударная волна порождает детонационную волну — газодинамический разрыв, на котором происходит и скачкообразное увеличение давления/плотности/температуры, и химические реакции превращения топливной смеси в продукты сгорания [29].

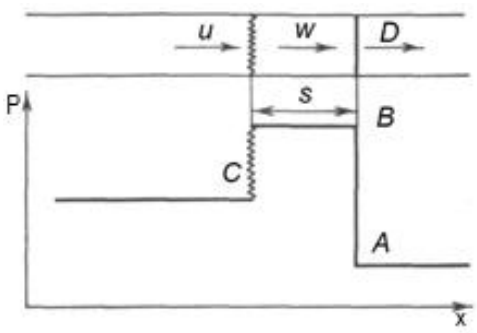


Рис. 1: Модель детонации Зельдовича-Неймана-Дёринга. D— детонационная волна, W — зона индукции, u — продукты сгорания, A-B— газодинамический разрыв, s — зона образования свободных радикалов, C — волна разрежения, в которой происходят химические реакции окисления

В настоящее время активное изучение газодинамических процессов горения и взрыва ведётся, главным образом,в результате проведения уникальных натурных экспериментов [30–32], в которых фиксируются зависимости величин давления от времени при различных концентрациях водорода в смеси и в условиях различной геометрии. Наряду с экспериментальными методами активно развивается изучение газодинамических процессов горения и взрыва с помощью методов математического моделирования [33–35]. В этой области особенно важно учитывать закономерности, выявляемые в экспериментальных данных, особенно на ранних стадиях развития процесса, поэтому исследование и анализ экспериментальных данных, выполненный с помощью методов data mining, представляет значительный интерес для выявления закономерностей процессов, полученных в натурных экспериментах, которые в дальнейшем могут использоваться для успешного моделирования этих процессов.

Цель работы

В настоящей работе рассматриваются различные алгоритмы, используемые для обработки данных, представленных асинхронными временными рядами. Марковская модель непрерывного скрытого профиля (CPM-модель) применяется для оценки закономерностей протекания газодинамических процессов в водородно-воздушной смеси. При данном подходе выравненные асинхронные временные ряды обрабатываются одновременно. Полученные результаты показывают характерную картину процесса распространения взрывной волны, сопровождаемой процессами горения смеси газов.

Целью настоящей работы является:

- изучение методов обработки данных, представленных временными рядами;
- применение CPM-модели для обработки сигналов, регистрируемых датчиками давления, являющихся зашумлёнными асинхронными временными рядами;
- создание комплекса программ, реализующего выбранный метод в среде MATLAB;
- обработка экспериментальных данных* с помощью созданного комплекса программ и анализ полученных результатов.

**В настоящей работе используются данные натурных экспериментов, проводимых в ФГБУН Объединённый институт высоких температур РАН, г.Москва.*

Глава 1. Динамическое искажение времени

1.1 Алгоритм динамического искажения времени

Алгоритм динамического искажения времени (Dynamic Time Warping – DTW) эффективен, как мера подобия временных рядов (time-series similarity measure), которая минимизирует эффекты временного сдвига и различного течения времени, и обеспечивает непрерывное преобразование временных рядов для обнаружения одинаковых форм с различными фазами. Единственное ограничение, накладываемое на временные ряды – это то, что они должны представлять временные зависимости в равноотстоящие моменты времени. Приведем описание DTW-алгоритма и его модификации [36]. Пусть имеются два временных ряда $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ с длинами N и M, соответственно:

$$\mathbf{x} = \{x[1],\, x[2],\, \ldots,\, x[j],\, \ldots,\, x[N]\},\ \mathbf{y} = \{y[1],\, y[2],\, \ldots,\, y[k],\, \ldots,\, y[M]\}. \qquad (1.1.1)$$

Чтобы оптимально выровнять два временных ряда, устанавливается соответствие между их элементами. Алгоритм начинается с построения матрицы локальных расстояний $\mathbf{d}$ размерностью $N \times M$, элементы которой $d[j,k]$ – это расстояния между элементами $x[j]$ и $y[k]$ двух временных рядов. В DTW-алгоритме могут использоваться различные локальные меры расстояния, например мера редактирования. Но, как правило, в этом алгоритме строится матрица локальных расстояний $\mathbf{d}$ на основе Евклидовой меры расстояния

$$d[j,k] = (x[j] - y[k])^2,\ j = \overline{1,N}\ ,\ k = \overline{1,M}. \qquad (1.1.2)$$

Если построена матрица локальных расстояний $\mathbf{d}$, DTW-алгоритм определяет путь искажения времени, который идет через области наименьших локальных расстояний – долины (“valleys") в двумерном представлении матрицы $\mathbf{d}$. Таким образом, задача выравнивания временных рядов $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ решается построением оптимального пути искажения времени $\boldsymbol{\phi}$ – линейного точечного отображения $\boldsymbol{\phi}[l] = (\boldsymbol{\phi}_{\mathbf{x}}[l],\, \boldsymbol{\phi}_{\mathbf{y}}[l])$, $l = \overline{1,K}$, где $\min(N,M) \leqslant K \leqslant N + M + 1$, которое определяет соответствие элементов этих временных рядов

$$x[j] \Leftrightarrow y[k],\ j = \boldsymbol{\phi}_{\mathbf{x}}[l],\ k = \boldsymbol{\phi}_{\mathbf{y}}[l],\ l = \overline{1,K}. \qquad (1.1.3)$$

Путь искажения времени удовлетворяет следующим условиям.

- Граничные условия: $\boldsymbol{\phi}[1] = (1,1)$ и $\boldsymbol{\phi}[K] = (N,M)$. Это означает, что путь искажения времени должен начинаться и кончаться в противоположных концах диагонали матрицы $\mathbf{d}$.

- Непрерывность (локальное ограничение): дано $\boldsymbol{\phi}[k] = (j,\, k)$, тогда $\boldsymbol{\phi}[k+1] =$

$(j',\, k')$, где $j' - j \leqslant 1$, $k' - k \leqslant 1$. Это заставляет путь искажения времени двигаться только к соседним элементам матрицы $\mathbf{d}$ локальных расстояний или по диагонали.

- Монотонность: дано $\boldsymbol{\phi}[k] = (j, k)$, тогда $\boldsymbol{\phi}[k+1] = (j',\, k')$, где $j' - j \geqslant 0$, $k' - k \geqslant 0$. Это предотвращает путь искажения времени от выбора нового элемента матрицы расстояний $\mathbf{d}$, более раннего во времени.

Имеется экспоненциально большое число путей искажения времени, которые удовлетворяют приведенным выше условиям, но только один путь – это путь с минимальным расстоянием. Если в DTW-алгоритме используется Евклидова мера локального расстояния (1.1.2), формула для минимального расстояния DTW $(\mathbf{x},\ \mathbf{y})$ выглядит подобно минимальной среднеквадратичной ошибке

$$\mathrm{DTW}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \min \left(\frac{\sqrt{\sum\limits_{l=1}^{K} \left(x(\boldsymbol{\phi}_{\mathbf{x}}[l]) - y(\boldsymbol{\phi}_{\mathbf{y}}[l])\right)^2}}{K} \right), \tag{1.1.4}$$

где нормализующая константа K компенсирует тот факт, что различные пути искажения времени имеют различную длину. Без этой коррекции, более короткие пути автоматически получают больший приоритет (который может быть, а может и не быть желаемым эффектом при решении этой задачи оптимизации). Фактически путь искажения времени с минимальным расстоянием (1.1.4) определяется посредством алгоритма динамического программирования. Аккумулированные расстояния хранятся в матрице $\mathbf{D}$, которая определяется на основе матрицы локальных расстояний (1.1.2) следующим образом:

1. Первая строка: $D[1; k] = \sum\limits_{l=1}^{k} d[1,\, l]$.

2. Первый столбец: $D[j;\ 1] = \sum\limits_{l=1}^{j} d[l,\, 1]$.

3. Остальные элементы матрицы $\mathbf{D}$ определяются посредством рекурсии

$$D[j;\, k] = d[j;\, k] + \min \begin{cases} D[j-1;\, k-1]; \\ D[j-1;\, k]; \\ D[j;\, k-1]. \end{cases} \tag{1.1.5}$$

Таким образом, вычисления матрицы **D** инициализируются как $D[1;\,1] = d[1;\,1]$. Когда определяются элементы первой строки матрицы **D**, рассматриваются только горизонтальные распространения пути. Аналогично, когда определяются элементы первого столбца матрицы **D**, рассматриваются только вертикальные распространения пути. Рекурсия (1.1.5) представлена на рис. 2. Результат рекурсии: $DTW(\mathbf{x},\,\mathbf{y}) = D[N,\,M]$. Реконструкция пути искажения времени требует, чтобы для каждого очередного определенного в результате рекурсии (1.1.5) элемента из **D** хранился указатель на родительский элемент, чтобы помнить, какой элемент из **D** был результатом минимального пути до этого. Путь искажения времени определяется из элемента $D[N, M]$ при проходе назад по этим указателям. DTW-алгоритм дает оптимальное решение за время порядка $O(N \cdot M)$, которое может быть улучшено посредством множественного масштабирования (multi-scaling) [37].

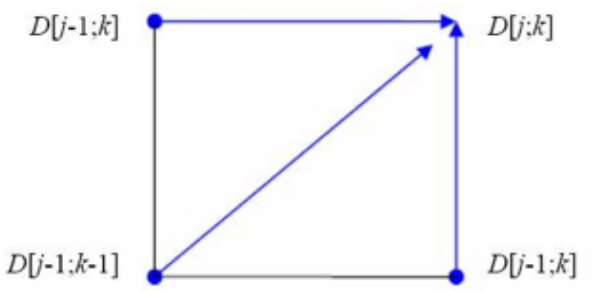


Рис. 2: Рекурсия (1.1.5) как отражение локального ограничения (условия непрерывности)

DTW-алгоритм может быть усовершенствован различными способами [38]. Эти способы наилучшим образом представляются посредством визуализации матрицы **d** локальных расстояний, и возможных путей искажения времени, идущих через нее. Предположим, имеется два временных ряда одинаковой длины.

Нейтральный путь искажения времени – это прямая линия с наклоном 45° через матрицу **d**. Если первый временной ряд в среднем быстрее, то наклон оптимального пути искажения времени будет больше 45°, и если он в среднем медленнее, то наклон оптимального пути искажения времени будет меньше 45°. Если относительная скорость временных рядов меняется со временем, то локально, наклон будет меняться со временем. Три стандартных способа усовершенствования DTW-алгоритма:

1. специфицировать минимальный/максимальный наклон пути искажения времени;
2. специфицировать максимальную полосу для пути искажения времени (например, насколько этот путь может отклоняться от нейтрального пути;
3. считать предпочтительным путь, состоящий из более коротких, либо долее длинных шагов.

Пример локального ограничения пути – это перечисление возможных точечных отображений $(i',\,j')$, из которых путь искажения времени был продолжен в $(i,\,j)$. Так,

использование точечных отображений $(i-1,\ j-1)$, $(i-1,\ j-2)$, $(i-2,\ j-1)$ как локального ограничения пути, приводит к следующему потенциальному результату: индексы некоторых элементов временных рядов могут быть пропущены в минимальном пути искажения времени. Это оправданно, если некоторые элементы выравниваемых временных рядов представляют случайные отклонения. При рассматриваемом локальном ограничении элементы матрицы $\mathbf{D}$ аккумулированных расстояний определяются посредством рекурсии

$$D[j;\ k] = d[j;\ k] + \min \begin{cases} D[j-1;\ k-1]; \\ D[j-1;\ k-2]; \\ D[j-2;\ k-1]. \end{cases} \tag{1.1.6}$$

Рекурсия (1.1.6) представлена на рис.3.

В процессе совершенствования DTW-алгоритма исследовано много локальных ограничений (условий непрерывности), включая ассиметричные, при которых оказывается существенным порядок временных рядов. Обзор различных локальных ограничений содержится в [39].

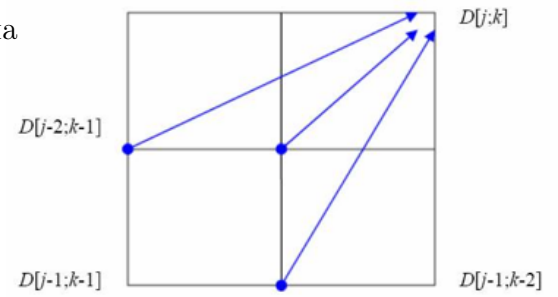


Рис. 3: Рекурсия (1.1.6) как отражение локального ограничения (условия непрерывности)

Преимущества DTW-алгоритма:

- адекватно выполняет выравнивание временных рядов с различным темпом временных изменений;
- дает предсказуемые результаты.

Проблемы, связанные с использованием DTW-алгоритма:

- при формировании пути искажения времени локальные ограничения (условия непрерывности) являются, до некоторой степени, произвольными;
- при одновременном выравнивании нескольких временных рядов только один временной ряд может использоваться в качестве шаблона (прототипа).

Из последнего замечания следует, что проблема выравнивания временных рядов плохо сформулирована. Для нее не существует единственного наилучшего решения. Например, если имеются временные ряды, представляющие записи речи нескольких дикторов с их собственным постоянным темпом, то неизвестно, какая шкала отсчета времени будет наилучшей для отображения всех временных рядов. С равным правом может использоваться шкала времени самого медленного, или самого быстрого из

дикторов, произносивших одну и ту же речь, или любая шкала времени между ними. Принцип «бритвы Оккама» (Occam's razor principle) утверждает, что среди прочих равных самым лучшим является самое простое решение. В рассматриваемой проблеме выравнивания временных рядов это означает, что шкала отсчета времени должна быть такой, в которой достигается наиболее простое отображение наблюдаемых временных рядов (в эту шкалу отсчета), при условии, что не страдает качество выравнивания временных рядов.

1.2 Другие подходы к выравниванию временных рядов

В работе [40] вводится модель кластеризации кривых (curve clustering model), в которой происходит обучение функции искажения времени $h(t)$ для каждого временного ряда посредством оценки ее относительной кривизны $w = \frac{D^2h}{Dh}$. Параметры относительной кривизны – это коэффициенты порядка 1 для B-сплайна, который обучается посредством оптимизации критерия в виде квадратичной ошибки со штрафной функцией, который измеряет расстояние между выровненным временным рядом и обученным шаблоном. Штрафная функция $\propto w^2$ назначает низкий штраф гладким функциям искажения (например, линейным), и высокий штраф извивающимся функциям (например, сильно линейным искажениям). Этот подход происходит из представления задачи выравнивания, как решения линейного стохастического дифференциального уравнения второго порядка. Шаблон регрессии (regression template) обучается по критерию «Прокрустово ложе» (Procrustes fitting criterion). Хотя это итеративное обучение шаблона может хорошо работать на практике, для него нет гарантии сходимости.

В работе [41] вводится вероятностная модель, которая совместно осуществляет кластеризацию и выравнивает кривые. Часть модели, ответственная за выравнивание, представляется как регрессия в виде B-сплайна, в которой зависимая переменная $\mathbf{y}[i]$ – это амплитуда измеренного сигнала, а вход $\mathbf{x}[i]$ – это вектор временных элементов (i индексирует выравниваемые входные вектора). Выравнивание реализуется регрессией посредством четырех параметров: $a[i]$, $b[i]$ – контролирующих масштабирование и смещение во времени, и $c[i]$, $d[i]$ – контролирующих масштабирование и смещение в пространстве амплитуд: $\mathbf{y}[i] = [a[i]\mathbf{x}[i] - b[i]]\beta[i] + d[i] + \varepsilon[i]$, где β – это коэффициенты регрессии и $\varepsilon[i]$ – это Гауссов шум с нулевым средним и ковариацией $\sigma^2[i]$, и $a[i]\mathbf{x}[i] - b[i]$ представляет матрицу регрессии (матрицу базиса сплайна) оцененную в преобразованном времени. Таким образом, метод учитывает изменения в масштабе сигнала при выравнивании. Отметим, что кроме коррекции времени, может потребоваться коррекция систематической разницы в амплитуде сигнала в каждом временном отсчете (соответствующем фиксированной частоте дискретизации времени). Это проблема нормализации. Модель непрерывного профиля (Continuous Profile Model (CPM)) позволяет решить обе эти проблемы.

Глава 2. Марковская модель непрерывного скрытого профиля

2.1 Модели непрерывных профилей (CPM-модели)

Для одновременного анализа наборов асинхронных временных рядов используются модели непрерывных профилей (Continuous Profile Models (CPM) [42]. В этих генеративных (производящих) моделях, каждый временной ряд, принадлежащий одному классу, генерируется в результате преобразования с шумом единственной скрытой записи (latent trace). Для временных рядов нескольких классов имеется одна скрытая запись на каждый класс, и временные ряды генерируются из соответствующей специфической для класса скрытой записи. Скрытая запись – это базовое представление без шума для набора дублирующих друг друга наблюдаемых временных рядов. Наблюдаемый временной ряд генерируется CPM-моделью при продвижении через последовательность скрытых состояний и эмиссии элемента этого временного ряда, как это происходит в скрытой Марковской модели (Hidden Markov Model (HMM)). Поскольку CPM-модель представляет собой скрытую Марковскую модель, здесь описаны ее наиболее существенные черты.

Скрытая Марковская модель используется для моделирования временных рядов с дискретными или непрерывными значениями, и представляется двумя способами:

1. как случайная машина с конечным числом состояний (переходы между состояниями случайные, также как и эмиссия символов из этих состояний);
2. как графическая модель, в которой скрытые/ненаблюдаемые состояния/переменные связаны друг с другом в направленной (ориентированной) цепочке, каждый скрытый узел которой имеет потомка, являющегося наблюдаемой переменной (рис.4).

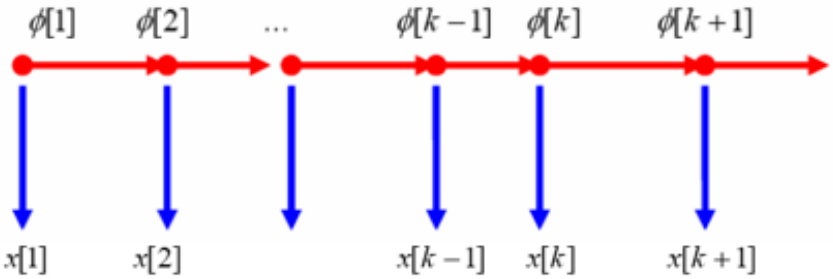


Рис. 4: Последовательность состояний скрытой Марковской модели и эмиссия элементов наблюдаемого временного ряда.

Представление скрытой Марковской модели, как графической модели, определяет для нее контекст родственных моделей в пространстве состояний (State Space Models) [43]. Например, метод Монте-Карло для Марковских цепей (Markov Chain Monte Carlo (MCMC)) используется, чтобы выполнить обучение/вывод [44] – [45]. Независимо от принятого представления, скрытая Марковская модель имеет следующие основные характеристики:

1. Наблюдаемые временные ряды генерируются при продвижении через случайную последовательность скрытых/ненаблюдаемых состояний, и в каждом скрытом состоянии происходит случайная эмиссия элемента временного ряда.
2. Генерируемое элемент наблюдаемого временного ряда зависит только от скрытого состояния в текущий момент времени, а скрытое состояние в текущий момент времени зависит только от предыдущего скрытого состояния (это называется Марковским свойством).
3. Вычисления эффективно выполняются посредством динамического программирования, которое повторно использует частичные вычисления взамен полных вычислений.

Подробное описание скрытой Марковской модели приведено в [46].

В CPM-модели каждое скрытое состояние представляет конкретной индекс скрытой записи, и эмиссия элемента из этого состояния зависит от элемента скрытой записи с этим индексом. Кроме этого, для учета изменения амплитуды в пределах временного ряда и между наблюдаемыми временными рядами, к состояниям скрытого времени добавляется набор состояний скрытого масштаба, которые определяют масштаб элемента временного ряда по отношению к соответствующему элементу скрытой записи. Таким образом, полное пространство скрытых состояний является произведением пространства состояний скрытого времени и пространства состояний скрытого масштаба. Наконец, каждый наблюдаемый временной ряд масштабируется постоянным глобальным фактором масштаба.

CPM-модель подобна скрытой Марковской модели профиля (Profile HMM), которая используется в молекулярной биологии для одновременного выравнивания нескольких дискретных последовательностей [47]. Profile-HMM-модель – это HMM-модель, переходы в которой ограничены состояниями 'Delete' и 'Insert', причем в первом состоянии отсутствует эмиссия. Имеется также ограничение переходов слева направо (например, можно продвигаться только вперед по последовательности).

Поэтому, вывод в Profile-HMM-модели линейный по числу состояний (а не квадратичный, как в случае общей HMM-модели). Несколько последовательностей являются входами Profile-HMM-модели при обучении. После этого Profile-HMM-модель содержит выдержку (квинтэссенцию) статистических свойств, разделяемых входными последовательностями. Можно представлять CPM-модель, как условный аналог Profile-HMM-модели для случая непрерывных данных. Ниже описаны алгоритмы для скрытой Марковской модели (HMM-модели).

2.2 Алгоритмы для скрытой марковской модели (HMM)

Пусть $\mathbf{x}[i] = \{x[i;k],\, k = \overline{1,\, N}\}$ – K наблюдаемых временных рядов длиной N (рис.4). Пусть набор возможных состояний скрытой Марковской модели $\mathbf{S} = \{s[j],\, j = \overline{1,\, M}\}$. Для наблюдаемого временного ряда $\mathbf{x}[i] = \{x[i;k],\, k = \overline{1,\, N}\}$ временная последовательность скрытых состояний $\boldsymbol{\phi}[i] = \{\phi[i;k],\, k = \overline{1,\, N}\}$ (рис.4), где $\phi[i;k] \in \mathbf{S}$. В Марковской модели вероятности переходов между состояниями $s[m]$ и $s[j]$ – $\mathcal{T}_{s[m],s[j]} \equiv p(\phi[i;k] = s[j] \mid \phi[i;k-1] = s[m])$ не зависят от номера i временного ряда. При условии, что скрытая последовательность $\boldsymbol{\phi}[i]$ в момент времени k имеет состояние $s[j]$, вероятность эмиссии $x[i;k]$ равна $\mathcal{A}^i_{k,s[j]} \equiv p(x[i;k] \mid \phi[i;k] = s[j])$. При наличии этой модели можно написать логарифм правдоподобия $\mathcal{L}$ наблюдаемых временных рядов. Поскольку состояния $\phi[i;k]$ – ненаблюдаемые, необходимо суммировать по всем их возможным значениям для вероятностей переходов между состояниями $\mathcal{T}_{s[m],s[j]}$ и вероятностей эмиссии $\mathcal{A}^i_{k,s[j]}$, параметры которых предстоит оценивать

$$
\begin{aligned}
\mathcal{L} &= \log\left(\prod_{i=1}^{K} p\left(\mathbf{x}[i] \;\mid\; \left\{\mathcal{T}_{s[m],\,s[j]}\right\}, \left\{\mathcal{A}^i_{k,\,s[j]}\right\}\right)\right) = \\
&= \sum_{i=1}^{K} \log\left(p\left(\mathbf{x}[i] \;\mid\; \left\{\mathcal{T}_{s[m],\,s[j]}\right\}, \left\{\mathcal{A}^i_{k,\,s[j]}\right\}\right)\right) = \\
&= \sum_{i=1}^{K} \log\left(\sum_{\boldsymbol{\phi}[i]} p\left(\mathbf{x}[i], \boldsymbol{\phi}[i] \;\mid\; \left\{\mathcal{T}_{s[m],\,s[j]}\right\}, \left\{\mathcal{A}^i_{k,\,s[j]}\right\}\right)\right) = \\
&= \sum_{i=1}^{K} \log\left(\sum_{\boldsymbol{\phi}[i]} p\left(\mathbf{x}[i] \;\mid\; \boldsymbol{\phi}[i], \left\{\mathcal{T}_{s[m],\,s[j]}\right\}, \left\{\mathcal{A}^i_{k,\,s[j]}\right\}\right) \times p\left(\mathbf{x}[i] \;\mid\; \left\{\mathcal{T}_{s[m],\,s[j]}\right\}\right)\right) = \\
&= \sum_{i=1}^{K} \log\left(\sum_{\boldsymbol{\phi}[i]} \mathcal{T}_{0,\phi[i;k]} \left(\prod_{i=1}^{N} \mathcal{A}^i_{k,\phi[i;k]}\right) \left(\prod_{i=1}^{N} \mathcal{T}_{\phi[i;k],\phi[i;k-1]}\right)\right).
\end{aligned}
\tag{2.2.1}
$$

Правдоподобие для одного временного ряда факторизуется на три множителя, как результат того, что условные вероятности неявных в HMM-модели зависят только от значений переменных на одном временном шаге. Первый член под логарифмом в (2.2.1) – это вероятность начала ряда в конкретном скрытом состоянии, второй – вероятность эмиссии конкретного символа в каждом состоянии и третий – вероятность переходов между состояниями. Это факторизованное представление правдоподобия позволяет лучше понять представленные ниже рекурсивные алгоритмы, поскольку становится ясно, что совместная вероятность формируется посредством:

1. определения вероятности начального состояния;

2. эмиссии символа;

3. перехода в новое состояние;

4. эмиссии символа; и т.д.

Для оценки параметров $\left\{\mathcal{T}_{s[m],s[j]}\right\}$, $\left\{\mathcal{A}^{i}_{k,s[j]}\right\}$ может использоваться максимум правдоподобия, но поскольку рассматривается модель со скрытыми переменными, ниже используется алгоритм ожидания-максимизации правдоподобия (the Expectation-Maximization algorithm) (называемый также алгоритмом Баума-Уолша (the Baum-Welch algorithm) в контексте скрытой Марковской модели). Однако чтобы использовать алгоритм ожидания-максимизации правдоподобия, необходимо вычислить предельные апостериорные вероятности каждого состояния $p(\phi[i;k] \mid \mathbf{x}[i])$ и определить вероятности переходов. Кроме этого, необходимо вычислить парные предельные апостериорные вероятности $p(\phi[i;k],\ \phi[i;k+1] \mid \mathbf{x}[i])$. Их вычисление в скрытой Марковской модели основано на алгоритме динамического программирования, в контексте этой модели называемого алгоритмом прямой и обратной рекурсии.

2.2.1 Алгоритм прямой и обратной рекурсии

Предположим необходимо вычислить правдоподобие наблюдаемых временных рядов при заданных значениях параметров (например, некоторые значения параметров вероятностей переходов и параметров вероятностей эмиссии).

Из (2.2.1) следует, что это вычисление включает суммирование по всем возможным последовательностям состояний $\boldsymbol{\phi}[i]$, с оценкой временной сложности $O(KM^N)$, где K – это число наблюдаемых временных рядов длиной N, M – это число скрытых состояний в модели. Но поскольку многие частичные пути являются общими для возможных последовательностей скрытых состояний, это вычисление может быть оптимизировано. Приведенный ниже алгоритм прямой и обратной рекурсии (Forward-Backward algorithm) выполняет необходимое суммирование с оценкой временной сложности $O(KMN)$ (если матрица переходов разреженная, временная оценка сложности будет меньше). Введем обозначение совместной вероятности $\alpha[i;\ k;\ j] \equiv p\left(x[i;\ 1],\ x[i;\ 2],\ ...,\ x[i;\ k],\ \phi[i;\ k] = s[j]\right)$. Для всех i и j, после инициализации

$$\alpha[i;1;j] \equiv \mathcal{A}^{i}_{1,\ s[j]}\ \mathcal{T}_{0,s[j]}$$

выполняется прямая рекурсия для $k = \overline{1,\ N}$:

$$\alpha[i;\ k;\ j] \equiv \mathcal{A}^{i}_{k,s[j]} \sum_{m=1}^{M} \alpha[i;\ k-1;\ m] \mathcal{T}_{s[m],s[j]}. \tag{2.2.2}$$

Если рекурсия (2.2.2) завершена, то можно вычислить

$$p(\mathbf{x}[i]) = \sum_{j=1}^{M} p\left(x[i;\ 1],\ x[i;\ 2],\ ...,\ x[i;\ N],\ \phi[i;\ N] = s[j]\right) = \sum_{j=1}^{M} \alpha[i;\ N;\ j] \tag{2.2.3}$$

Таким образом, логарифм правдоподобия $\mathcal{L}$ определяется как

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{K} \log\left(p(\mathbf{x}[i])\right) = \sum_{i=1}^{K} \log\left(\sum_{j=1}^{M} \alpha[i;\ N;\ j]\right). \tag{2.2.4}$$

Для вычисления предельных апостериорных вероятностей (marginals of the posterior) $p(\phi[i;k] \mid \mathbf{x}[i])$ и $p(\phi[i;k],\ \phi[i;k+1] \mid \mathbf{x}[i])$ используется формула Байеса и правила условной вероятности

$$\begin{aligned}
&p(\phi[i;k] = s[j] \mid \mathbf{x}[i]) = \frac{p\left(\mathbf{x}[i] \mid \phi[i;k] = s[j]\right) p\left(\phi[i;k] = s[j]\right)}{p(\mathbf{x}[i])} = \\
&= \frac{p\left(x[i;1]...x[i;k] \mid \phi[i;k] = s[j]\right) p\left(x[i;k+1]...x[i] \mid \phi[i;k] = s[j]\right) p\left(\phi[i;k] = s[j]\right)}{p(\mathbf{x}[i])} = \\
&= \frac{p\left(x[i;1]...x[i;k], \phi[i;k] = s[j]\right) p\left(x[i;k+1]...x[i] \mid \phi[i;k] = s[j]\right)}{p(\mathbf{x}[i])} \equiv \\
&\equiv \frac{\alpha[i;k;j] p\left(x[i;k+1], ..., x[i] \mid \phi[i;k] = s[j]\right)}{p(\mathbf{x}[i])}
\end{aligned} \tag{2.2.5}$$

и

$$\begin{aligned}
&p(\phi[i;k-1] = s[j], \phi[i,k] = s[m] \mid \mathbf{x}[i]) = \\
&= \frac{p\left(\mathbf{x}[i] \mid \phi[i;k-1] = s[j],\ \phi[i;k] = s[m]\right) p\left(\phi[i;k-1] = s[j],\ \phi[i;k] = s[m]\right)}{p(\mathbf{x}[i])} \equiv \\
&\equiv \frac{\alpha[i;k-1;j] p\left(x[i;k]...x[i,N] \mid \phi[i;k] = s[m]\right) \mathcal{T}_{s[j],s[m]}}{p(\mathbf{x}[i])}.
\end{aligned} \tag{2.2.6}$$

Вычисление совместных вероятностей $\beta[i;\ k;\ j] \equiv p(x[i;k+1],\ x[i;k+2],\ ...,x[i;N],\ \phi[i;k] = s[j])$ позволяет вычислить вероятности (2.2.5)–(2.2.6). Для всех k и j, выполняется инициализация

$$\beta[i;N;j] = 1$$

и обратная рекурсия для $k = \overline{N-1, 1}$

$$\beta[i;\ k;\ j] = \sum_{m=1}^{M} \mathcal{T}_{s[j],s[m]} \mathcal{A}^{i}_{k+1,s[m]} \beta[i;\ k+1;\ m] \tag{2.2.7}$$

Если выполнены прямая (2.2.2) и обратная (2.2.7) рекурсии, определяющие $\alpha[i;\ k;\ j]$ и $\beta[i;\ k;\ j]$, то предельные апостериорные вероятности (2.2.5) и (2.2.6) вычисляются по формулам

$$p(\mathbf{x}[i]) = \sum_{j=1}^{M} \alpha[i;\ N;\ j] \equiv \sum_{j=1}^{M} \alpha[i;k;j]\beta[i;k;j] \tag{2.2.8}$$

$$p(\phi[i;k] = s[j] \mid \mathbf{x}[i]) = \frac{\alpha[i;k;j]\beta[i;k;j]}{p(\mathbf{x}[i])} \tag{2.2.9}$$

$$p(\phi[i;k-1] = s[j],\ \phi[i;k] = s[m] \mid \mathbf{x}[i]) = \frac{\alpha[i;k-1;j]\mathcal{T}_{s[j],s[m]}\mathcal{A}^{i}_{k,s[m]}\beta[i;k;m]}{p(\mathbf{x}[i])} \tag{2.2.10}$$

Эффективные вычисления правдоподобия и предельных апостериорных вероятностей (2.2.9)–(2.2.10) необходимы, поскольку параметры оцениваются посредством алгоритма ожидания и максимизации правдоподобия. После того как это обучение завершено, представляет интерес апостериорная вероятность последовательности скрытых состояний $p(\phi \mid \mathbf{x}[i])$, которая определяет степень уверенности в том, что именно эта последовательность состояний генерирует наблюдаемый временной ряд. Тогда по максимуму апостериорной вероятности для каждого наблюдаемого временного ряда можно определить наиболее вероятную последовательность скрытых состояний (the maximum a posteriori (MAP) sequence). Как и выше, это выполняется посредством динамического программирования.

2.2.2 Алгоритм Витерби

Чтобы вычислить последовательность скрытых состояний для временного ряда с номером i по максимуму апостериорной вероятности (MAP state sequence) $\bar{\boldsymbol{\phi}}[i] = \underset{\boldsymbol{\phi}[i]}{\operatorname{argmax}}\, p(\boldsymbol{\phi}[i] \mid \mathbf{x}[i])$ следует, во-первых, учесть, что $p(\boldsymbol{\phi}[i] \mid \mathbf{x}[i]) \propto p(\boldsymbol{\phi}[i], \mathbf{x}[i])$, поскольку $p(\boldsymbol{\phi}[i] \mid \mathbf{x}[i]) = \frac{p(\boldsymbol{\phi}[i], \mathbf{x}[i])}{p(\mathbf{x}[i])}$. То есть, если найдена последовательность, которая дает наивысшее совместное правдоподобие, то это та же последовательность, что и полученная по максимуму апостериорной вероятности. Пусть $\rho[i;k;j]$ – вероятность наиболее правдоподобной частичной последовательности из начального момента времени в состояние $s[j]$ в момент времени k, т.е.

$$\rho[i;k;j] \equiv p\left(\bar{\boldsymbol{\phi}}[1], ..., \bar{\boldsymbol{\phi}}[k-1], \boldsymbol{\phi}[i;k] = s[j], x[i;1], ..., x[i;k]\right), \tag{2.2.11}$$

где $\bar{\boldsymbol{\phi}}[i;k]$ обозначает состояние в момент времени k вдоль наиболее правдоподобной последовательности состояний. Тогда если для всех j известно значение $\rho[i;N;j]$, легко найти последнее состояние в последовательности состояний по максимуму апостериорной вероятности (через совместную вероятность)

$$\bar{\boldsymbol{\phi}}[i;N] = s[m]\,,\ \text{где}\, m = \operatorname*{argmax}_j \rho[i;N;j].$$

Также, если для всех j известно значение $\rho[i;N-1;j]$, то можно найти второе из последних состояний последовательности скрытых состояний по максимуму апостериорной вероятности

$$\bar{\boldsymbol{\phi}}[i;N-1] = s[m]\,,\ \text{где}\, m = \operatorname*{argmax}_j \left(\rho[i;N-1;j]\cdot \mathcal{T}_{s[j],\bar{\phi}[i;N]}\right)\ \text{ и т.д.}$$

Таким образом, последовательность по максимуму апостериорной вероятности может быть вычислена прямой рекурсией, которая идентична α-рекурсии (2.2.2) за исключением того, что оператор суммирования заменяется оператором максимума. Также запоминается последовательность переходов между состояниями, которая приводит к максимуму на каждом временном шаге, и затем эта последовательность проходится назад, чтобы получить последовательность состояний по максимуму апостериорной вероятности $\bar{\boldsymbol{\phi}}[i]$. Для всех значений i и j производится инициализация

$$\rho[i;k;j] = \mathcal{A}^i_{1,s[j]}\cdot \mathcal{T}_{0,s[j]}$$

и выполняется рекурсия для $k=\overline{1,\,N}$

$$\rho[i;k;j] = \mathcal{A}^i_{k,s[j]} \max_m \left(\rho[i;k-1;m]\cdot \mathcal{T}_{s[m],s[j]}\right) \tag{2.2.12}$$

с сохранением обратных указателей

$$\tau[i;k;j] = \operatorname*{argmax}_m \left(\rho[i;k-1;m]\cdot \mathcal{T}_{s[m],s[j]}\right). \tag{2.2.13}$$

Затем заполняется последовательность состояний по максимуму апостериорной вероятности, начиная в момент времени $k=N$

$$\bar{\phi}[i;k] = s[j]\,,\ \text{где}\, j = \operatorname*{argmax}_m \left(\rho[i;N;m]\right),$$

и проходя назад для $k=\overline{N-1,\,1}$ через хранимые $\tau[i;k;j]$ (2.2.13) получаем

$$\bar{\phi}[i;k] = s[j]\,,\ \text{где}\, j = \operatorname*{argmax}_m \left(\tau[i;k+1;m]\right).$$

Этот алгоритм поиска последовательности состояний скрытой Марковской модели по максимуму апостериорной вероятности известен как алгоритм Витерби (the Viterbi algorithm) [48], [21].

2.3 Выравнивание и масштабирование асинхронных временных рядов

При обучении CPM-модели определяется скрытая запись (latent trace), вероятности переходов, управляющие Марковской эволюцией состояний времени и масштаба, суммарный уровень шума наблюдаемого временного ряда и его глобальный фактор масштаба. После обучения скрытая запись имеет более высокое разрешение по сравнению с ее копиями − наблюдаемыми временными рядами. Поэтому базовыми понятиями CPM-модели являются

1. Скрытая запись, являющаяся базовым представлением без шума для набора наблюдаемых временных рядов.
2. Полученное в результате обучения отображение наблюдаемого времени (времени, в котором записан наблюдаемый временной ряд) и скрытого времени, индексируемого скрытой записью. Отображение каждого наблюдаемого временного ряда в скрытое время CPM-модели обеспечивает выравнивание всех наблюдаемых временных рядов. Это отображение выполняется посредством скрытой Марковской модели.
3. При выполнении выравнивания во времени способность одновременного масштабирования наблюдаемого временного ряда (называемая нормализацией).

На рис.5 показан генеративный процесс CPM-модели. Скрытая запись (latent trace) $z = z(lt)$ показана жирной красной линией на верхней части рис.5. Синим пунктиром на нижней части рис.5 показана временная зависимость $x = x(t)$ в наблюдаемом времени t. Временной ряд, показанный знаками «+» на нижней части рис.5, генерируется случайным образом выбирая начальное скрытое время lt. Первый элемент временного ряда такой же элемент скрытой записи, но с Гауссовым шумом. Розовая стрелка между верхней и нижней частью рисунка соединяет обозначенный символом «+» первый элемент временного ряда с аддитивным Гауссовым шумом и отмеченный символом «+» соответствующий ему элемент скрытой записи. Затем, случайным образом, происходит переход к следующему моменту скрытого времени, и опять производится эмиссия элемента временного ряда, являющегося элементом скрытой записи в этот момент скрытого времени с аддитивным Гауссовым шумом. Этот процесс повторяется, пока не будет генерирован весь временной ряд. Однако, поскольку при выравнивании временных рядов происходит также их масштабирование, к состояниям скрытого времени добавляются состояния скрытого масштаба, которые показаны прерывистыми красными линиями на верхней части рис.5. Поэтому вместо

эмиссии элемента временного ряда со значением элемента скрытой записи с Гауссовым шумом, на рис.5 периодически производится эмиссия элемента временного ряда со значением элемента скрытой записи, умноженного на фактор масштаба, также с аддитивным Гауссовым шумом, что отмечено знаками «+» на прерывистых красных линиях масштаба. То есть вместо перехода из состояния скрытого времени в другое состояние скрытого времени, происходит переход из состояния ('скрытое время 1', 'скрытый масштаб 1') в другое состояние ('скрытое время 2', 'скрытый масштаб 2').

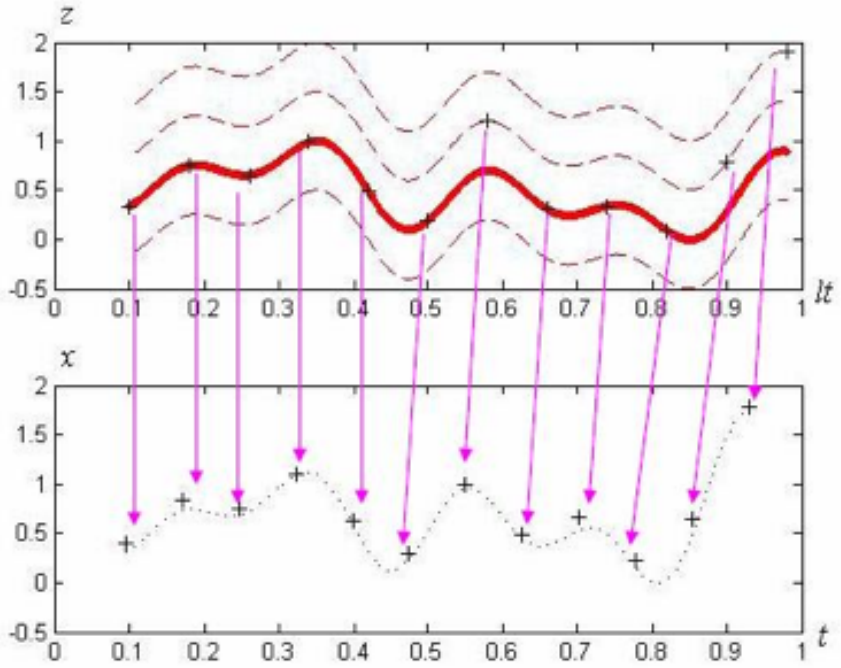


Рис. 5: Графическое представление генеративного процесса CPM-модели.

Отметим, что может возникать вырождение между состояниями скрытого масштаба и состояниями скрытого времени. Для заданного элемента наблюдаемого временного ряда CPM-модель может делать выбор между сдвигом его в скрытом времени, или изменением его состояния скрытого масштаба. Однако, при регуляризации CPM-модели и достаточном количестве наблюдаемых временных рядов для обучения скрытой записи это вырождение исчезает.

2.3.1 Состояния масштаба, времени и скрытая запись

Приведем формальное определение CPM-модели. Пусть имеются K наблюдаемых временных рядов со скалярными элементами

$$\mathbf{x}[i] = x[i;k],\ k = \overline{1,\ N[i]},$$

где частота дискретизации в пределах каждого $\mathbf{x}[i]$ не обязана быть постоянной, как она не обязана быть одинаковой для различных $\mathbf{x}[i]$. Для краткости обозначений считается, что $N[i] = N$, $i = \overline{1,\, K}$. Предполагается, что существует каноническое представление для набора дублирующих друг друга, наблюдаемых асинхронных временных рядов с Гауссовым шумом в виде скрытой записи. Она является базовой для этого набора временных рядов

$$\mathbf{z} = z[k],\, k = \overline{1,\, M}. \tag{2.3.1}$$

Каждый наблюдаемый временной ряд $\mathbf{x}[i]$ моделируется как неоднородная выборка элементов скрытой записи $\mathbf{z}$ (2.3.1), к которым применены преобразования масштаба. В идеале $M \gg N$, чтобы любой элемент наблюдаемого временного ряда $\mathbf{x}[i]$ в точности отображался в элемент скрытой записи $\mathbf{z}$. Поскольку разрешение скрытой записи $\mathbf{z}$ выше, чем у наблюдаемого временного ряда $\mathbf{x}[i]$, его наблюдаемое время может эффективно ускоряться или замедляться при продвижении вдоль скрытой записи, используя для этого большие или меньшие перескоки в скрытом времени, индексируемом скрытой записью.

Неоднородность выборки элементов и применение локального масштаба, используемые при генерации каждого наблюдаемого временного ряда на основе скрытой записи, определяются соответствующей ему последовательностью скрытых состояний CPM-модели. Каждое состояние в скрытой последовательности представляет собой пару состояние масштаба/состояние времени

$$\phi[i;k] = \{\tau[i;k],\, \chi[k]\}\,,\, k = \overline{1,\, N}. \tag{2.3.2}$$

Состояния времени $\tau[i;k]$, $k = \overline{1,\, N}$ принадлежат последовательности натуральных чисел $\overline{1,\, M}$, представляющих скрытое время, которое индексируется скрытой записью. Состояния масштаба $\chi[k]$, $k = \overline{1,\, N}$ принадлежат упорядоченному набору $\overline{1,\, M}$. Распределение вероятности эмиссии элементов наблюдаемого временного ряда $\mathbf{x}[i] = x[i;k]$, $k = \overline{1,\, N}$, производимых последовательностью скрытых состояний $\phi[i;k]$, $k = \overline{1,\, N}$ на основе скрытой записи $\mathbf{z} = z[k]$, $k = \overline{1,\, M}$, имеет вид

$$p\left(x[i;k] \mid \mathbf{z}, \phi[i;k],\, u[i], \sigma[i]\right) \equiv \mathcal{N}\left(x[i;k] \mid u[i] \cdot \mathbf{z}\left[\tau[i;k]\right] \cdot \chi[k],\, \sigma[i]\right), \tag{2.3.3}$$

где $\mathcal{N}\left(x \mid z, \sigma\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-z)^2}{2\sigma^2}\right)$ – Гауссово нормальное распределение; $\sigma^2[i]$ – это вариация шума в наблюдаемом временном ряду; $u[i]$ – глобальный параметр масштаба, уникальный для наблюдаемого временного ряда, который корректирует

(глобальную) разницу масштаба временного ряда $\mathbf{x}[i]$ и скрытой записи $\mathbf{z}$ (2.3.1).

Чтобы полностью специфицировать CPM-модель, необходимо определить вероятности переходов между скрытыми состояниями. Вероятности переходов между состояниями времени и вероятности переходов между состояниями масштаба определяются отдельно, поэтому совместная вероятность переходов между скрытыми состояниями факторизуется следующим образом:

$$\mathcal{T}^{i}_{\phi[i;k],\,\phi[i;l]} \equiv p(\phi[i;\,k] \mid \phi[i;\,l]) = p(\tau[i;\,k] \mid \tau[i;\,l])p(\chi[k] \mid \chi[l]). \tag{2.3.4}$$

Накладывается ограничение, что состояния скрытого времени всегда продвигаются вперед, но не могут перескакивать больше чем на J последовательных значений скрытого времени, индексируемого скрытой записью. Кроме этого, разрешаются переходы только между соседними состояниями масштаба. Поэтому локальный масштаб наблюдаемого временного ряда не может внезапно меняться. С учетом факторизации распределения вероятности переходов (2.3.4), число возможных скрытых состояний, из которых могут быть совершены переходы в текущее скрытое состояние, оказывается равным $3J$. Следовательно, матрица переходов $\mathcal{T}^{i}_{\phi[i;k],\,\phi[i;l]}$ (2.3.4) сильно разрежена. Каждый наблюдаемый временной ряд имеет свое собственное распределение вероятности переходов между состояниями скрытого времени. Вероятности переходов между состояниями скрытого времени и состояниями скрытого масштаба даются мультиномиальными распределениями

$$p\left(\tau[i;\;k] = a \mid \tau[i;\;k-1] = b\right) = \begin{cases} \theta[i;\;1],\ \text{если}\, a-b=1; \\ \theta[i;\;2],\ \text{если}\, a-b=2; \\ \dots \\ \theta[i;\;J],\ \text{если}\, a-b=J; \\ 0\,\text{в противном случае}; \end{cases} \tag{2.3.5}$$

$$p\left(\chi[k] = a \mid \chi[k-1] = b\right) = \begin{cases} \xi[1],\ \text{если}\, d(a,\,b)=-1; \\ \xi[2],\ \text{если}\, d(a,\,b)=0; \\ \xi[1],\ \text{если}\, d(a,\,b)=1; \\ 0\,\text{в противном случае}; \end{cases} \tag{2.3.6}$$

где $d(a,\,b) = -1$ означает, что a на одно состояние масштаба меньше, чем b, $d(a,\,b) = 0$ означает, что $a = b$ и $d(a,\,b) = 1$ означает, что a на одно состояние масштаба боль-

ше b. Параметры мультиномиальных распределений (2.3.5) и (2.3.6) удовлетворяют условиям нормирования: $\sum_{j=1}^{J} \theta[i;j] = 1$ и $2\xi[1] + \xi[2] = 1$. Параметр J определяет максимально допустимое ускорение одного сегмента временного ряда по отношению к другому, в пределах одного временного ряда или между разными рядами. Если один сегмента временного ряда использует только последовательные значения скрытого времени (которое индексируется скрытой записью), когда он продвигается через последовательность скрытых состояний, в то время, как другой пропускает максимально допустимое число значений J, то последний движется со скоростью в J раз быстрее, чем первый. Однако длина интервала скрытого времени, в течение которого сегмент временного ряда может двигаться так быстро, ограничена длиной скрытой записи. Таким образом, максимальное суммарное отношение скоростей, достигаемое моделью между двумя полными временными рядами, дается выражением $\min\left(J,\, \frac{M}{N}\right)$.

Необходимы два предположения, которые обеспечивают регуляризацию CPM-модели. Первое – это априорное предположение о гладкости скрытой записи, а второе – априорные вероятности параметров для распределений вероятностей переходов (2.3.5) и (2.3.6) между скрытыми состояниями, которые гарантируют, что не нулевые вероятности переходов между скрытыми состояниями (2.3.2) остаются ненулевыми при обучении. Чтобы при обучении обеспечить гладкость оцениваемой скрытой записи, к правдоподобию добавляется следующая штрафная функция априорной гладкости скрытой записи:

$$\begin{aligned} p(\mathbf{z}) &= \prod_{k=1}^{M-1} \mathcal{N}\left(z[k+1] \mid z[k],\, \frac{1}{2\lambda}\right) \propto \\ &\propto \prod_{k=1}^{M-1} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{(z[k+1]-z[k])^2}{\frac{1}{2\lambda}}\right) = \exp\left(-\lambda \sum_{k=1}^{M-1} (z[k+1]-z[k])^2\right). \end{aligned} \tag{2.3.7}$$

Чем больше величина λ, тем сильнее штрафная функция (2.3.7) удерживает скрытую запись от быстрых изменений на шаге скрытого времени (индексируемого скрытой записью). Однако при обучении невозможно непосредственно оценить значение λ. Хотя формула (2.3.7) представляет необходимую штрафную функцию, ее окончательный вид

$$p(\mathbf{z}) = \exp\left(-\lambda \bar{u} \sum_{k=1}^{M-1} (z[k+1]-z[k])^2\right). \tag{2.3.8}$$

где $\bar{u} = \frac{1}{K} \sum\limits_{k=1}^{M-1} (u[i])^2$ – средний глобальный масштабный фактор по всем наблюдаемым временным рядам. Причина добавления $\bar{u}$ в показатель экспоненты штрафной

функции (2.3.7) состоит в том, что без добавления $\bar{u}$ оцениваемая скрытая запись $\mathbf{z}$ (2.3.1) имеет очень малый масштаб, и, соответственно, оцениваемые глобальные факторы масштаба $u[i]$, $i = \overline{1,\, K}$, очень велики. При использовании штрафной функции (2.3.8) масштаб скрытой записи совпадает с масштабом наблюдаемых временных рядов. Чтобы подчеркнуть намерение совместить масштаб скрытой записи с масштабом наблюдаемых временных рядов, кроме штрафной функции (2.3.8) добавляется априорное логарифмически нормальное распределение для глобальных масштабов $u[i]$, $i = \overline{1,\, K}$:

$$p\left(\log(u[i])\right) = \mathcal{N}\left(\log(u[i]) \mid 0,\, w\right),\ i = \overline{1,\, K}. \tag{2.3.9}$$

Наконец, априорная вероятность Дирихле (Dirichlet priors) для распределения параметров вероятностей переходов (2.3.5) и (2.3.6) между скрытыми состояниями гарантирует, что ненулевые вероятности переходов остаются ненулевыми при обучении

$$p(\boldsymbol{\theta}[i]) = \mathcal{D}\left(\boldsymbol{\theta}[i] \mid \boldsymbol{\eta}\right) \propto \prod_{j=1}^{J} (u[i;j])^{\eta[j]-1}. \tag{2.3.10}$$

$$p(\boldsymbol{\xi}) = \mathcal{D}\left(\boldsymbol{\xi} \mid \boldsymbol{\nu}\right) \propto \prod_{j=1}^{2} (u[i;j])^{\nu[j]-1}.$$

где $\eta[j]$, $j = \overline{1,\, J}$ и $\nu[j]$, $j = \overline{1,\, 2}$ могут рассматриваться, как псевдосчетчики. То есть, можно считать, что априори имеется некоторое число переходов каждого типа, и что они всегда будут добавляться к полному числу при обучении.

2.3.2 Правдоподобие для набора наблюдаемых временнных рядов

Логарифм правдоподобия $\mathcal{L}^p$ наблюдаемых временных рядов $\mathbf{x}[i] = x[i;k]$, $k = \overline{1,\, N[i]}$, имеет вид $\mathcal{L}^p = \mathcal{L} + \mathcal{P}$, где $\mathcal{L}$ – это член правдоподобия, происходящий из скрытой Марковской модели. Он состоит из вероятностей эмиссии (2.3.3) и вероятностей переходов между скрытыми состояниями (2.3.4). $\mathcal{P}$ – это логарифм априорной вероятности или штрафной член, обеспечивающий регуляризацию CPM-модели. Две компоненты логарифма правдоподобия $\mathcal{L}^p$ имеют вид

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^{K} \log\left(\sum_{\boldsymbol{\phi}[i]} p(\phi[i;1]) \left(\prod_{i=1}^{N} \mathcal{N}\left(x[i;k] \mid u[i] z\left[\tau[i;k]\right] \chi[k],\, \sigma[i]\right)\right) \left(\prod_{i=2}^{N} \mathcal{T}^{i}_{\phi[i;k-1],\, \phi[i;k]}\right)\right), \tag{2.3.11}$$

где $p(\phi[i,\, 1])$ – априорные вероятности начальных скрытых состояний; Гауссовы распределения для эмиссии элементов наблюдаемого временного ряда даются формулой (2.3.4); вероятности переходов между скрытыми состояниями $\mathcal{T}^{i}_{\phi[i;k-1],\, \phi[i;k]}$ даются формулой (2.3.3),

$$\mathcal{P} = -\lambda\bar{u}\sum_{k=1}^{M-1}(z[k+1]-z[k])^2+$$
$$+\sum_{i=1}^{K}\left(\sum_{j=1}^{J}\log\left(\mathcal{D}(\theta[i;j]\,|\,\eta[j])\right)+\sum_{j=1}^{2}\log\left(\mathcal{D}(\xi[i;j]\mid\nu[j])\right)\right)+ \tag{2.3.12}$$
$$+\sum_{i=1}^{K}\mathcal{N}\left(\log(u[i]\mid 0,\,w)\right),$$

где присутствуют параметры штрафной функции гладкости $p(\mathbf{z})$ (2.3.8) скрытой записи; вероятности Дирихле $\mathcal{D}(\boldsymbol{\theta}[i]\mid\boldsymbol{\eta})$ и $\mathcal{D}(\boldsymbol{\xi}[i]\mid\boldsymbol{\nu})$ (2.3.10) для параметров вероятностей переходов (2.3.5) и (2.3.6) между скрытыми состояниями (2.3.2); логарифмически нормальное распределение для глобальных масштабов $u[i]$, $i=\overline{1,\,K}$, (2.3.9) наблюдаемых временных рядов. После того, как полностью специфицирована CPM-модель, ее параметры можно оценить с помощью алгоритма ожидания-максимизации правдоподобия (EM-алгоритма).

2.4 EM-алгоритм

Алгоритм ожидания-максимизации правдоподобия (The Expectation-Maximization Algorithm) – EM-алгоритм в присутствии скрытых переменных дает оценки параметров по максимуму правдоподобия, если структура правдоподобия имеет специальную форму [49], [50].(ссылки надо исправить) Форма правдоподобия, при которой EM-алгоритм оказывается полезным с практической точки зрения, обеспечивает относительно простое вычисление оценок параметров при известных распределениях скрытых переменных и эффективное вычисление апостериорного распределения скрытых переменных. Если апостериорное распределение скрытых переменных не может быть эффективно вычислено, следует использовать приближенные алгоритмы, например, вариационный EM-алгоритм [43]. Здесь под относительно простым вычислением оценок параметров понимается, либо наличие аналитического решения, или использование численной процедуры оптимизации, в результате которой могут быть вычислены соответствующие функции и их производные. Если это не так, все еще можно использовать EM-алгоритм с обобщенным M-шагом, необходимым для поиска лучших оценок параметров.

EM-алгоритм использует структуру формулы правдоподобия, производя итерации между шагом ожидания (E-шагом) и шагом максимизации (M-шагом). С интуитивной точки зрения, E-шаг может рассматриваться как заполнение «пропущенных» данных (скрытых переменных). Однако, вместо того, чтобы находить подходящие оценки для этих данных, этот шаг на самом деле предоставляет полное распределение значений этих данных (т.е., он находит апостериорное распределение скрытых переменных). Если выполнен E-шаг, то выполняется M-шаг, использующий стандартные методы поиска максимума правдоподобия. Итерации между E-шагом и M-шагом гарантируют монотонное увеличение логарифма правдоподобия. Проблема только в надлежащем выборе начальных значений параметров при старте процесса вычислений.

Здесь приводится краткое описание вывода EM-алгоритма для общей, вероятностной, генеративной модели с вектором параметров $\mathbf{\Theta}$, временным рядом $x[k]$, $k = \overline{1,\, N}$ и соответствующими скрытыми переменными с действительными значениями $\phi[k]$, $k = \overline{1,\, N}$. Например, при кластеризации данных с использованием смеси Гауссовых распределений, $x[k]$, $k = \overline{1,\, N}$– это данные, которые должны быть разделены на кластеры, $\phi[k]$, $k = \overline{1,\, N}$ – метки кластеров, связанные с каждым элементом данных, и $\mathbf{\Theta}$ содержит средние, вариации и параметры смешивания для каждой Гауссовой

компоненты. Предполагается, что данные независимы и одинаково распределены, и что специфицирована вероятностная модель, так чтобы можно было легко написать выражение для распределения $p(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta})$. Необходимо найти оценку параметров $\mathbf{\Theta}$, которая максимизирует правдоподобие временного ряда $x[k]$, $k = \overline{1,\, N}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = p\left(x[1],\, \cdots,\, x[N] \mid \mathbf{\Theta}\right) = \prod_{k=1}^{N} p\left(x[k] \mid \mathbf{\Theta}\right) = \\ = \prod_{k=1}^{N} \int\limits_{\phi[k]} p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right) d\phi[k]. \end{aligned} \tag{2.4.1}$$

Для получения максимума правдоподобия, определяется максимум логарифма правдоподобия. В присутствии скрытых переменных, интеграл по скрытым переменным не позволяет этого сделать. Однако имеются способы решить эту проблему. Во-первых, можно получить оценку снизу для логарифма правдоподобия, и эта оценка дает EM-алгоритм. Первый прием состоит во введении произвольного распределения вероятности $q(\phi[k] \mid x[k])$, и умножения и деления выражения под интегралом на этот множитель. Затем используется неравенство Енсена (The Jensen's inequality), которое устанавливает, что если $f(\cdot)$ – выпуклая функция (например, такая как $\log(\cdot)$) и X – случайная переменная, то $f\left(E_{q(x)}[X]\right) \leqslant E_{q(x)}[X]$, где $E_{q(x)}[X]$ обозначает ожидание по отношению к распределению вероятностей $q(x)$. Теперь можно определить оценку снизу для логарифма правдоподобия

$$\begin{aligned} \log\left(\mathcal{L}\right) = \sum_{k=1}^{N} \log\left(\int\limits_{\phi[k]} p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right) d\phi[k]\right) = \\ = \sum_{k=1}^{N} \log\left(\int\limits_{\phi[k]} q\left(\phi[k] \mid x[k]\right) \frac{p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)}{q\left(\phi[k] \mid x[k]\right)} d\phi[k]\right) \geqslant \\ \geqslant \sum_{k=1}^{N} \int\limits_{\phi[k]} q\left(\phi[k] \mid x[k]\right) \log\left(\frac{p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)}{q\left(\phi[k] \mid x[k]\right)}\right) d\phi[k] = \\ = \sum_{k=1}^{N} \left(\int\limits_{\phi[k]} q\left(\phi[k] \mid x[k]\right) \log\left(p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)\right) d\phi[k] - \int_{\phi[k]} q\left(\phi[k] \mid x[k]\right) \log(q\left(\phi[k] \mid x[k]\right)) d\phi[k]\right) = \\ = \sum_{k=1}^{N} \left(E_{q(\phi[k]|x[k])}\left[\log\left(p(x[k], \phi[k] \mid \mathbf{\Theta})\right)\right] + \mathcal{H}\left(q(\phi[k] \mid x[k])\right)\right) = -F(q, \mathbf{\Theta}). \end{aligned} \tag{2.4.2}$$

Как принято в статистической физике, функционал – $F(q(\phi[k] \mid x[k]), \mathbf{\Theta})$ (2.4.2) называется свободной энергией, $\mathcal{H}\left(q(\phi[k] \mid x[k])\right)$ обозначает энтропию распределения

$q(\phi[k] \mid x[k])$, $p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)$, называется полным правдоподобием,
а $E_{q(\phi[k]|x[k])}\left[\log\left(p(x[k], \phi[k] \mid \mathbf{\Theta})\right)\right]$ – это ожидаемый полный логарифм правдоподобия. Оказывается, что граница (2.4.2) достижима, т.е., $-F(q, \mathbf{\Theta}) = \log\left(\mathcal{L}\right)$, когда $q(\phi[k] \mid x[k]) = p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right)$. Выполнение этой подстановки в выражение для свободной энергии (2.4.2) и использование формулы условной вероятности
$p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right) = \frac{p(x[k],\, \phi[k]|\mathbf{\Theta})}{p(x[k]|\mathbf{\Theta})}$ дает

$$
\begin{aligned}
&- F(p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right), \mathbf{\Theta}) = \\
&= \sum_{k=1}^{N} \int\limits_{\phi[k]} p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right) \times \log\left(\frac{p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)}{p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right)}\right) d\phi[k] = \\
&= \sum_{k=1}^{N} \int\limits_{\phi[k]} p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right) \times \log\left(\frac{p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right) p\left(x[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)}{p\left(x[k],\, \phi[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)}\right) d\phi[k] = \\
&= \sum_{k=1}^{N} \int\limits_{\phi[k]} p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right) \log\left(p\left(x[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)\right) d\phi[k] = \\
&= \sum_{k=1}^{N} \log\left(p\left(x[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)\right) \int\limits_{\phi[k]} p\left(\phi[k] \mid x[k],\, \mathbf{\Theta}\right) d\phi[k] = \\
&= \sum_{k=1}^{N} \log\left(p\left(x[k] \mid \mathbf{\Theta}\right)\right).
\end{aligned}
\tag{2.4.3}
$$

Пусть известны точные апостериорные распределения вероятности скрытых переменных $p\left(x[k] \mid \phi[k],\, \mathbf{\Theta}\right)$, где $\mathbf{\Theta}$ – оценка параметров по максимуму правдоподобия). Тогда можно определить максимум свободной энергии по отношению к параметрам $\mathbf{\Theta}$, чтобы получить оценку этих параметров по максимуму правдоподобия для рассматриваемой модели. Это эквивалентно максимизации ожидаемого полного логарифма правдоподобия по отношению к этим параметрам (поскольку фиксировано $q(\phi[k] \mid x[k]) = p\left(x[k] \mid \phi[k],\, \mathbf{\Theta}\right)$ и член энтропии становится несущественным). Наоборот, если известна оценка параметров $\mathbf{\Theta}$ по максимуму правдоподобия, можно вычислить апостериорное распределение вероятностей скрытых переменных, используя правило Байеса. С интуитивной точки зрения, EM-алгоритм работает в предположении, что имеется оценка параметров $\mathbf{\Theta}$ по максимуму правдоподобия, и затем вычисляет апостериорное распределение вероятностей скрытых переменных (E-шаг). После того, как получена текущая оценка апостериорного распределения вероятностей скрытых переменных, алгоритм производит новую оценку параметров $\mathbf{\Theta}$ (M-шаг). Этот алгоритм производит спуск по координатам в пространстве свободной энергии и когда он достигает локального максимума свободной энергии, то

достигается граница $-F(q, \mathbf{\Theta}) = \log(\mathcal{L})$ и, следовательно, этот локальный максимум является также локальным максимумом логарифма правдоподобия. Таким образом, при числе итераций, достигающих сходимости, EM-алгоритм гарантирует определение локального максимума логарифма правдоподобия.

Когда EM-алгоритм выводится для конкретной модели, для E-шага необходимо вычислить апостериорные распределения вероятностей скрытых состояний (или предельные апостериорные распределения вероятностей, как в скрытых Марковских моделях (HMM-моделях)). На M-шаге эти апостериорные распределения вероятностей из E-шага фиксируются, и вычисляются оптимальные оценки параметров для ожидаемого полного логарифма правдоподобия. Эти оценки параметров на основе аналитических формул на M-шаге выглядят в значительной степени подобными обычным оценкам по максимуму правдоподобия в моделях с наблюдаемыми переменными. Например, в модели смеси Гауссовых распределений (вероятностная версия кластеризации с k-средними), когда обновляется параметр среднего для каждого кластера, берется апостериорное взвешенное среднее данных, которое показывает степень уверенности, что конкретные данные принадлежат конкретному кластеру. Если апостериорное взвешенное среднее имеет массу только в одном кластере, то вычисление сводится к простому среднему каждой назначенной кластеру точки, который предстоит оценивать. Аналогично, в тех частях M-шага, где имеются аналитические формулы, оценки параметров $\mathbf{\Theta}$ выглядят как взвешенные оценки по максимуму правдоподобия.

2.5 Обучение CPM-модели с помощью EM- алгоритма

Чтобы найти оценки параметров CPM-модели, необходимо максимизировать правдоподобие $\mathcal{L}^p$ (2.3.11) со штрафным членом $\mathcal{P}$ (2.3.12) по отношению к параметрам, которые требуется оценить, а именно $\mathbf{z}$ (2.3.1), $\{u[i],\, i = \overline{1,\, K}\}$ (2.3.3), $\{\theta[i;j],\, i = \overline{1,\, K},\, j = \overline{1,\, J}\}$ (2.3.5), $\xi[0]$, $\xi[1]$ (2.3.6) и $\{\sigma^2[i],\, i = \overline{1,\, K}\}$ (2.3.3) (интегрированием удаляя скрытые состояния). Конечно, предполагается, что параметр λ (2.3.8) фиксирован. Для обучения CPM-модели может использоваться EM-алгоритм (раздел 2.4). Для вывода EM-алгоритма, специфического для CPM-модели, необходимо выражение для ожидаемого полного логарифма правдоподобия $\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \rangle$, который является средним логарифма правдоподобия $\mathcal{L}^p$ (2.3.11) со штрафным членом $\mathcal{P}$ (2.3.12) по отношению к предельным апостериорным распределениям вероятностей скрытых состояний $p(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i])$ (2.2.9) и $p(\phi[i;k-1] = s,\, \phi[i;k] = s' \mid \mathbf{x}[i])$ (2.2.10). При перечислении скрытых состояний, как $s = 1, \ldots, S$, формула для ожидаемого полного логарифма правдоподобия имеет вид

$$
\begin{aligned}
&\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \rangle \equiv \langle \mathcal{P} \rangle + \sum_{i=1}^{K} \langle \log\left(p(\phi[i],\, \mathbf{x}[i])\right) \rangle = \\
&= \mathcal{P} + \sum_{i=1}^{K} \left\langle \log\left(\sum_{\phi[i]} p(\phi[i;\, 1]) \right) + \sum_{k=1}^{N} \log\left(\mathcal{N}\left(x[i;k] \mid u[i] z\left[\tau[i;\, k]\right] \chi[k],\, \sigma[i]\right)\right) + \right. \\
&\left. + \sum_{k=2}^{N} \log\left(\mathfrak{T}^i_{\phi[i;k-1],\phi[i;k]}\right) \right\rangle = \\
&= \mathcal{P} + \sum_{i=1}^{K} \left\langle \log\left(\sum_{\phi[i]} p(\phi[i;\, 1]) \right) \right\rangle + \sum_{i=1}^{K} \sum_{k=1}^{N} \langle \log\left(\mathcal{N}\left(x[i;k] \mid u[i] z\left[\tau[i;\, k]\right] \chi[k],\, \sigma[i]\right)\right) \rangle + \\
&+ \sum_{i=1}^{K} \sum_{k=2}^{N} \left\langle \log\left(\mathfrak{T}^i_{\phi[i;k-1],\phi[i;k]}\right) \right\rangle = \\
&= \mathcal{P} + \sum_{s=1}^{S} \sum_{i=1}^{K} \sum_{k=1}^{N} p\left(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i]\right) \log(\tau^i_{0,\, s}) + \\
&+ \sum_{s=1}^{S} \sum_{i=1}^{K} \sum_{k=1}^{N} p\left(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i]\right) \times \log\left(\mathcal{N}\left(x[i;k] \mid u[i] z\left[\tau[s]\right] \chi[s],\, \sigma[i]\right)\right) + \\
&+ \sum_{s=1}^{S} \sum_{s \neq s'} \sum_{i=1}^{N} \log(\mathfrak{T}^i_{s,\, s'}) \sum_{i=2}^{N} p(\phi[i;k-1] = s,\, \phi[i;k] = s' \mid \mathbf{x}[i]),
\end{aligned}
\tag{2.5.1}
$$

где $\mathcal{P}$ определяется формулой (2.3.12) и $\langle \mathcal{P} \rangle = \mathcal{P}$, потому что этот штрафной член не зависит от скрытых состояний $\phi[i;k]$, $k = \overline{1,\, N}$ (2.3.2).

2.5.1 Оценки предельных апостериорных вероятностей (E-шаг)

В CPM-модели на E-шаге (EM-алгоритма) предельные апостериорные вероятности $p(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i])$ (2.2.9) и $p(\phi[i;k-1] = s,\, \phi[i;k] = s' \mid \mathbf{x}[i])$ (2.2.10) вычисляются в точности так же, как в скрытой Марковской модели, которая описана в разделе 2.2. То есть это вычисление выполняется посредством алгоритма прямой и обратной рекурсии, описанного в разделе 2.2.2. Отметим, что ввиду выбора разреженной матрицы переходов между скрытыми состояниями (2.3.3), вычислительная сложность этого алгоритма линейная по числу скрытых состояний, а не квадратичная, как в общем случае. Предельные апостериорные вероятности (2.2.9) и (2.2.10), которые вычисляются на E-шаге, остаются постоянными на M-шаге.

2.5.2 Оценки значений параметров CPM-модели (M-шаг)

Каждый оцениваемый параметр $\boldsymbol{\alpha}$ или группа оцениваемых параметров имеют свою собственную часть M-шага. Для параметров, оценки которых на M-шаге представляются аналитическими формулами, эти оценки максимизируют ожидаемый полный логарифм правдоподобия $\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \rangle$ (2.5.1). Таким образом, при заданных предельных апостериорных вероятностях из E-шага, сначала вычисляется $\frac{\partial \langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \rangle}{\partial(\boldsymbol{\alpha})}$ и затем приравнивается нулю. Если это уравнение не может быть решено аналитически, то для частичной максимизации (только по одному параметру) используется численная процедура оптимизации. На M-шаге оценки параметров $\{u[i],\, i = \overline{1,\, K}\}$, $\{\sigma^2[i],\, i = \overline{1,\, K}\}$ и $\mathbf{z}$ связаны (значение одного присутствует в производной по отношению к другому параметру). Таким образом, если выбирается некоторый порядок оценки параметров и один из них оценивается, то его оценка используется при оценивании связанных с ним параметров, которые за ним следуют. Например, можно оценивать параметры в следующем порядке: вариации эмиссии $\{\sigma^2[i],\, i = \overline{1,\, K}\}$ (2.3.3), скрытая запись $\mathbf{z}$ (2.3.1) и глобальные масштабы $\{u[i],\, i = \overline{1,\, K}\}$ (2.3.3) наблюдаемых временных рядов. Другие параметры $\{\theta[i;j],\, i = \overline{1,\, K},\, j = \overline{1,\, J}\}$ (2.3.5) и $\xi[0]$, $\xi[1]$ (2.3.6) полностью развязаны. Теперь рассмотрим, как каждый из перечисленных параметров CPM-модели оценивается на M-шаге.

2.5.3 Скрытая запись

Из формулы (2.5.1) для ожидаемого полного логарифма правдоподобия $\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \rangle$ наблюдаемых временных рядов $x[i;k]$, $k = \overline{1,\, N}$ следует, что производная $\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \rangle$ по $z[k]$ (элемент скрытой записи (2.3.1)) имеет вид

$$\frac{\partial\left\langle\mathcal{L}^p_{\text{comp}}\right\rangle}{\partial\left(z[k']\right)}=\frac{\partial}{\partial\left(z[k']\right)}\sum_{s=1}^{S}\sum_{k=1}^{N}p\left(\phi[i;k]=s\mid\mathbf{x}[i]\right)\log\left(\mathcal{N}\left(x[i;k]\mid u[i]z\left[\tau[s]\right]\chi[s],\,\sigma[i]\right)\right)-$$
$$-\lambda\bar{u}\frac{\partial}{\partial\left(z[k']\right)}\sum_{k=1}^{M-1}\left(z[k+1]-z[k]\right)^2=$$
$$=-\sum_{\{s|\tau[s]=k'\}}\sum_{k=1}^{N}p\left(\phi[i;k]=s|\mathbf{x}[i]\right)\times\frac{\partial}{\partial\left(z[k']\right)}\frac{\left(x[i;k]-u[i]z[\tau[s]]\chi[s]\right)^2}{2\sigma^2[i]}-$$
$$-\lambda\bar{u}\left(2\left(z[k']-z[k'-1]\right)-2\left(z[k'+1]-z[k']\right)\right)=$$
$$=\sum_{\{s|\tau[s]=k'\}}\sum_{k=1}^{N}p\left(\phi[i;k]=s|\mathbf{x}[i]\right)\times u[i]\chi[s]\frac{\left(x[i;k]-u[i]z[\tau[s]]\chi[s]\right)}{2\sigma^2[i]}-$$
$$-\lambda\bar{u}\left(4z[k']-2z[k'-1]-2z[k'+1]\right).\tag{2.5.2}$$

При $\lambda\neq 0$ условие $\frac{\partial\left\langle\mathcal{L}^p_{\text{comp}}\right\rangle}{\partial(z[k'])}=0$, $k=\overline{1,\,M}$ приводит к три диагональной системе уравнений [51]. При $\lambda=0$, оценка каждого элемента $z[k]$ скрытой записи независима от других $z[k]$, $k=\overline{1,\,M}$, и может быть вычислена аналитически из одного уравнения с одним неизвестным.

2.5.4 Вариация эмиссии временного ряда с помощью HMM

Из формулы (2.5.1) для ожидаемого полного логарифма правдоподобия $\left\langle\mathcal{L}^p_{\text{comp}}\right\rangle$ следует, что производная $\left\langle\mathcal{L}^p_{\text{comp}}\right\rangle$ по $\sigma^2[i]$ – вариации эмиссии временного ряда $x[i;k]$, $k=\overline{1,\,N}$ скрытой Марковской моделью имеет вид

$$\frac{\partial\left\langle\mathcal{L}^p_{\text{comp}}\right\rangle}{\partial\left(\sigma^2[i]\right)}=\sum_{s=1}^{S}\sum_{k=1}^{N}p\left(\phi[i;k]=s\mid\mathbf{x}[i]\right)\times$$
$$\times\frac{\partial}{\partial\left(\sigma^2[i]\right)}\log\left(\mathcal{N}\left(x[i;k]\mid u[i]z\left[\tau[s]\right]\chi[s],\,\sigma[i]\right)\right).$$

Поскольку $\sum\limits_{s=1}^{S}p\left(\phi[i;k]=s\mid\mathbf{x}[i]\right)=1$(условие нормировки) и $\log\left(\mathcal{N}\left(x[i;k]\mid u[i]z\left[\tau[s]\right]\chi[s],\,\sigma[i]\right)\right)=\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2[i]}}\right)-\frac{\left(x[i;k]-u[i]z[\tau[s]]\chi[s]\right)^2}{2\sigma^2[i]}$, то из условия $\frac{\partial\left\langle\mathcal{L}^p_{\text{comp}}\right\rangle}{\partial(\sigma^2[i])}=0$ следует, что

$$\sigma^2[i]=\frac{1}{N}\sum_{s=1}^{S}\sum_{k=1}^{N}p\left(\phi[i;k]=s\mid\mathbf{x}[i]\right)\times\left(x[i;k]-u[i]z[\tau[s]]\chi[s]\right)^2.\tag{2.5.3}$$

Эта оценка является взвешенной посредством апостериорных вероятностей (2.2.9)

вариации элементов наблюдаемого временного ряда по отношению к элементам базовой скрытой записи – стандартный результат М-шага с аналитической формулой для оценки параметра. Однако налагается ограничение в виде $\forall i, j \in \overline{1,\, K}$, $\frac{\sigma^2[i]}{\sigma^2[j]} < F$, т.е. вариации эмиссии для наблюдаемых временных рядов одного класса не могут отличаться больше, чем на фактор F . Альтернативное представление этого ограничения – это набор линейных ограничений на логарифм вариаций $\forall i, j \in \overline{1,\, K}$, $\log\left(\sigma^2[i]\right) - \log\left(\sigma^2[j]\right) < F$. Это ограничение накладывается, потому что в противном случае скрытая запись $\mathbf{z}$ (2.3.1) может воспроизводить один из наблюдаемых временных рядов, и для этого временного ряда вариация эмиссии $\sigma^2[i]$ становится на порядок меньше чем у других наблюдаемых временных рядов.

М-шаг для вариаций эмиссии может быть легко модифицирован, чтобы учесть это ограничение, при условии, что оно инициализированы так, что удовлетворяют этому условию. Идея состоит в том, чтобы сначала вычислить оценку без ограничения, и затем для каждой оцениваемой вариации $\sigma^2[i]$ проверить, приемлема ли ее оценка без применения ограничения. Если это так, то оценка $\sigma^2[i]$ (2.3.3) принимается. Если нет, то насколько возможно, произвести правильное обновление, так чтобы не нарушать ограничение. Циклически проходится набор $\sigma^2[i]$, $i = \overline{1,\, K}$ до тех пор, пока хотя бы один из них не перестает меняться. Этот алгоритм гарантирует неуменьшение ожидаемого полного логарифма правдоподобия $\left\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \right\rangle$, поскольку каждый раз при изменении величины $\sigma^2[i]$, с необходимостью увеличивается $\left\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \right\rangle$.

2.5.5 Вероятности переходов между скрытыми состояниями

Параметры мультиномиальных распределений (2.3.5) и (2.3.6) удовлетворяют условиям нормирования: $\sum\limits_{j=1}^{J} \theta[i;j] = 1$ и $2\xi[1] + 2\xi[2] = 1$. Поэтому, для оценки $\theta[i;j] = 1$, $i = \overline{1,\, K}$, $j = \overline{1,\, J}$ необходимо выполнить минимизацию с ограничением. Это делается посредством множителей Лагранжа, которые используют тот факт, что градиент функции ограничения должен быть параллелен градиенту ожидаемого логарифма правдоподобия $\left\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \right\rangle$, который минимизируется, в точке, где решение не верно (если действует условие нормирования). Таким образом, требуются следующие уравнения, где $\Lambda[i]$, $i = \overline{1,\, K}$ – множители Лагранжа:

$$\frac{\partial}{\partial\left(\theta[i;j]\right)}\left(\left\langle\mathcal{L}^{p}_{\text{comp}}\right\rangle-\Lambda[i]\sum_{j=1}^{J}\theta[i;j]\right)=$$

$$=\frac{\partial}{\partial\left(\theta[i;j]\right)}\left(\log\left(\mathcal{D}\left(\theta[i;j]|\eta[j]\right)\right)+\sum_{s=1}^{S}\sum_{s\neq s'}\sum_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)\log\left(\mathfrak{T}^{i}_{s,\,s'}\right)\right)-$$

$$-\Lambda[i]=\frac{\partial}{\partial\left(\theta[i;j]\right)}\left(\eta[j]\log\left(\theta[i;j]\right)\right)+\sum_{s=1}^{S}\sum_{s\neq s'}\sum_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)\frac{\partial\log\left(\mathfrak{T}^{i}_{s,\,s'}\right)}{\partial\left(\theta[i;j]\right)}-$$

$$-\Lambda[i]=\frac{\eta[j]}{\theta[i;j]}+\sum_{s=1}^{S}\sum_{\{s'|\tau[s']-\tau[s]=j\}}\sum_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)\frac{\partial\log\left(\mathfrak{T}^{i}_{s,\,s'}\right)}{\partial\left(\theta[i;j]\right)}-$$

$$-\Lambda[i]=\frac{\eta[j]}{\theta[i;j]}+\sum_{s=1}^{S}\sum_{\{s'|\tau[s']-\tau[s]=j\}}\sum_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)\frac{1}{\theta[i;j]}-\Lambda[i]. \tag{2.5.4}$$

Для каждого $i=\overline{1,\,K}$ имеется J производных (2.5.4). Приравнивая эти производные нулю получаем J уравнений. Умножая каждое из этих уравнений на соответствующий параметр $\theta[i;j]$ и складывая их, получаем уравнение

$$\sum_{j=1}^{J}\left(\eta[j]+\sum_{s=1}^{S}\sum_{\{s'|\tau[s']-\tau[s]=j\}}\sum_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)-\Lambda[i]\theta[i;j]\right)=0. \tag{2.5.5}$$

используя условие $\sum\limits_{j=1}^{J}\theta[i;j]=1$, решаем уравнение (2.5.5) сначала относительно $\Lambda[i]$, а затем относительно $\theta[i;j]$, $j=\overline{1,\,J}$:

$$\Lambda[i]=\sum_{j=1}^{J}\left(\eta[j]\right)+\sum_{j=1}^{J}\left(\sum_{s=1}^{S}\sum_{\{s'|\tau[s']-\tau[s]=j\}}\sum_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)\right); \tag{2.5.6}$$

$$\theta[i;j]=\frac{\eta[j]+\sum\limits_{s=1}^{S}\sum\limits_{\{s'|\tau[s']-\tau[s]=j\}}\sum\limits_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)}{\sum\limits_{j=1}^{J}\left(\eta[j]\right)+\sum\limits_{j=1}^{J}\left(\sum\limits_{s=1}^{S}\sum\limits_{\{s'|\tau[s']-\tau[s]=j\}}\sum_{k=2}^{N}p\left(\phi[i;k-1]=s,\,\phi[i;k]=s'\mid\mathbf{x}[i]\right)\right)}; \tag{2.5.7}$$

Отметим, что параметры априорных распределений Дирихле служат как псевдо подсчеты (pseudo-counts). Интуитивно ясно, что приведенная оценка (2.5.7) верна. Производные $\left\langle\mathcal{L}^{p}_{\text{comp}}\right\rangle$ по параметрам $\xi[j]$, $j=\overline{1,\,2}$ аналогичны (2.5.4) и формула для оценки этих параметров имеет вид

$$\xi[j] = \frac{\nu[j] + \sum\limits_{s=1}^{S} \sum\limits_{\{s' \in H(s,j)\}} \sum\limits_{k=2}^{N} p\left(\phi[i;k-1] = s,\, \phi[i;k] = s' \mid \mathbf{x}[i]\right)}{\sum\limits_{j=1}^{2} \left(\nu[j]\right) + \sum\limits_{j=1}^{J} \left(\sum\limits_{s=1}^{S} \sum\limits_{\{s' \in H(s,1),\, H(s,0)\}} \sum\limits_{k=2}^{N} p\left(\phi[i;k-1] = s,\, \phi[i;k] = s' \mid \mathbf{x}[i]\right) \right)}; \tag{2.5.8}$$

где $H(s,j) \equiv \{s' \mid |s' - s| = j\}$.

2.5.6 Глобальный параметр масштаба

Из формулы (2.5.1) для ожидаемого полного логарифма правдоподобия $\left\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \right\rangle$ наблюдаемых временных рядов $x[i;k]$, $k = \overline{1,\, N}$ следует, что производная $\left\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \right\rangle$ по $u[i]$ (параметр глобального масштаба (2.3.3)) имеет вид

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial \left\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \right\rangle}{\partial \left(u[i]\right)} = \sum_{s=1}^{S} \sum_{k=1}^{N} p\left(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i]\right) \times \frac{\partial}{\partial \left(u[i]\right)} \log\left(\mathcal{N}\left(x[i;k] \,|\, u[i] z\left[\tau[s]\right] \chi[s],\, \sigma[i]\right)\right) + \\
&+ \frac{\partial}{\partial \left(u[i]\right)} \left(\frac{1}{u[i]} \mathcal{N}\left(\log\left(u[i] \mid 0,\, w\right)\right) \right) = \\
&= \sum_{s=1}^{S} \sum_{k=1}^{N} p\left(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i]\right) \times \frac{z\left[\tau[s]\right] \chi[s] \left(x[i;k] \,-\, u[i] z\left[\tau[s]\right] \chi[s]\right)}{\sigma[i]} - \frac{1}{u[i]} - \frac{\log\left(u[i]\right)}{w^2 u[i]}.
\end{aligned} \tag{2.5.9}$$

Уравнение $\frac{\partial \left\langle \mathcal{L}^p_{\text{comp}} \right\rangle}{\partial (u[i])} = 0$ дает для наблюдаемого временного ряда оценку параметра глобального масштаба $u[i]$ (2.3.3), которая независима от оценок глобальных масштабов $\{u[i],\, i = \overline{1,\, K}\}$ других временных рядов. При использовании априорного распределения вероятностей $u[i]$ (2.3.9), для оценки $u[i]$ отсутствует аналитическая формула. Однако если не используется это априорное распределение, аналитическая формула для оценки $u[i]$ имеет вид

$$u[i] = \frac{\sum\limits_{s=1}^{S} \left(z\left[\tau[s]\right] \chi[s]\right) \sum\limits_{k=1}^{N} p\left(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i]\right) x[i;k]}{\sum\limits_{s=1}^{S} \left(z\left[\tau[s]\right] \chi[s]\right)^2 \sum\limits_{k=1}^{N} p\left(\phi[i;k] = s \mid \mathbf{x}[i]\right)}, \tag{2.5.10}$$

где предельные апостериорные распределения вероятности $p\left(\phi[i;k-1] = s,\, \phi[i;k] = s' \mid \mathbf{x}[i]\right)$ представлены формулой (2.2.10). Однако поскольку используется априорное распределение вероятностей $u[i]$ (2.3.9), оценка $u[i]$ получается в результате численной процедуры.

2.6 Принятие решений при проектировании CPM-модели

При проектировании CPM-модели делаются предположения относительно генеративного процесса, базового для типа временных рядов, для которых используется CPM-модель. Здесь обсуждаются эти предположения, объясняется, почему они сделаны, и рассматриваются другие возможные предположения относительно генеративного процесса.

Можно возразить, что априорная гладкость скрытой записи является довольно слабым предположением. Маловероятно, чтобы при таком предположении можно было генерировать тип скрытой записи для произвольных временных рядов. Гауссов процесс мог предоставить более подходящее априорное предположение [52], однако это приводит к дополнительным вычислительным затратам. В любом случае, при достаточном количестве временных рядов, это слабое априорное предположение является достаточным, т.е. оно хорошо работает на практике.

Вариации эмиссии скрытой Марковской модели $\sigma^2[i]$, $i = \overline{1, K}$, независимы от интенсивности сигнала, который они моделируют (поскольку шум аддитивный) –когда можно ожидать, что вариация становится больше при увеличении сигнала так, что относительный шум остается постоянным (например, мультипликативный шум). Эта проблема решается посредством логарифмического преобразования наблюдаемого временного ряда перед использованием CPM-модели. Такое решение является компромиссом с другими частями модели (например, мультипликативным масштабированием).

С обсужденным выше вопросом до некоторой степени связано, что используемая штрафная функция гладкости (2.3.8) скрытой записи не учитывает величину сигнала. Таким образом, части скрытой записи, которые являются заметно не гладкими, но лежат в области малых амплитуд, не будут сильно штрафоваться по сравнению к так же меняющимся сигналом с большими амплитудами. Следовало бы использовать разности, которые пропорциональны амплитуде, или, например, использовать сумму точечных вторых производных в конечных разностях по скрытой записи. Это делает М-шаг более сложным (в случае $\lambda = 0$ нет аналитических формул для оценки параметров, т.е. требуется численное решение).

Вероятности переходов между состояниями факторизуются в вероятности переходов между состояниями масштаба и вероятности переходов между состояниями времени, но можно себе представить, что имеются определенные интервалы времени,

в которых коррекция масштаба меняется более быстро, чем в других интервалах времени. Связывание этих двух типов состояний вместе не меняет разреженности матрицы вероятностей переходов, не приводит к дополнительным вычислительным трудностям.

2.6.1 Отношение CPM-модели и Input-Output HMM

CPM-модель имеет структурное подобие с Input/Output HMM-моделями (IOHMM-моделями), также называемыми Conditional HMM-моделями, хотя эти модели решают различные задачи [53]. IOHMM-модели расширяют стандартные HMM-модели. Они используют условные вероятности переходов и эмиссий на ненаблюдаемой (входной) последовательности [46]. Каждый элемент выходной последовательности соответствует конкретному элементу входной последовательности. В IOHMM-модели обучение осуществляется с учителем – определяется отображение наблюдаемой входной последовательности на выходную (целевую) последовательность. Для CPM-модели также требуется входная последовательность элементов. Таким образом, CPM-модель является разновидностью условной HMM-модели. Однако, эта входная последовательность ненаблюдаемая (буквально она распределяется между всеми ее копиями – наблюдаемыми временными рядами) и, следовательно, обучение в CPM-модели происходит без учителя. Существует альтернативная точка зрения, что CPM-модель – это HMM-модель с дополнительным параметром в виде скрытой записи, которая влияет на вероятности эмиссии и оценивается посредством CPM-модели.

2.6.2 Отношение алгоритма DTW и CPM-модели

DTW-алгоритм может рассматриваться, как ограниченная версия CPM-модели. Если DTW-алгоритм применяется для выравнивания временных рядов, один из которых используется как ссылка или шаблон, можно получить полностью идентичную процедуру на основе упрощенной CPM-модели без обучения. Принимается, что скрытая запись – это один из наблюдаемых временных рядов без добавления в него дополнительных элементов. Поэтому он не более плотный, чем исходные временные ряды. Затем задается вероятность эмиссии скрытой Марковской модели и все остальные параметры (это аналогично заданию меры подобия в DTW-алгоритме). Если состояния скрытого масштаба не используются, а временные ряды выравниваются посредством алгоритма Витерби, результат будет близок к результату DTW-алгоритма. Если используется та же модель шума, то результаты будут идентичны. Становятся очевидны сильные стороны CPM-модели с EM-алгоритмом:

1. Априори не требуется специфицировать ссылку или шаблон для EM-CPM-модели – вместо этого подходящий шаблон в виде скрытой записи обучается из всех наблюдаемых временных рядов одновременно.

2. В EM-CPM-модели не надо отображать друг в друга элементы различных наблюдаемых временных рядов из-за высокой плотности скрытой записи, тогда как DTW-алгоритм всегда отображает элементы одного ряда в элементы другого.

3. В EM-CPM-модели не требуется априори полностью специфицировать функцию расстояния. Можно оценить функции ошибки на основе наблюдаемых временных рядов, тогда как в DTW-алгоритм должны заранее специфицироваться все параметры функции стоимости.

4. Одновременно с выравниванием, масштабирование временных рядов может быть естественно инкорпорировано в EM-CPM-модель. Это преимущество четко отделяет EM-CPM-модель от DTW-алгоритма и отражает мощность и элегантность, присущую вероятностным, генеративным моделям.

Однако DTW-алгоритм работает на порядок быстрее, чем EM-CPM-модель (если в DTW-алгоритме не используется итеративное обучение ссылки или шаблона). Также DTW-алгоритм дает превосходную инициализацию для EM-CPM-модели.

Численный эксперимент

В настоящей работе обрабатываются результаты контрольного опыта в серии экспериментов по исследованию горения водородно-воздушных смесей, которые проводятся в ФГБУН Объединённом институте высоких температур РАН на установке «Сфера» (опыт № 84 от 2.02.2012 г.).

Установка «Сфера» состоит из испытательной камеры 13Я3 диаметром 12 м и объемом 900 м^3 (рис. 6), внутри которой размещается мягкая резиновая оболочка (рис.7), заполняемая водородно-воздушной смесью, и системы регистрации протекающих газодинамических процессов. На рис. 8, *а* приведена принципиальная схема установки. На Рис. 8, *б* показана схема расположения датчиков давления на измерительной планке, установленной в центре сферического объёма для измерения параметров, определяющих движение ударных волн и их интенсивность. В экспериментах используются пьезоэлектрические датчики импульсного давления.

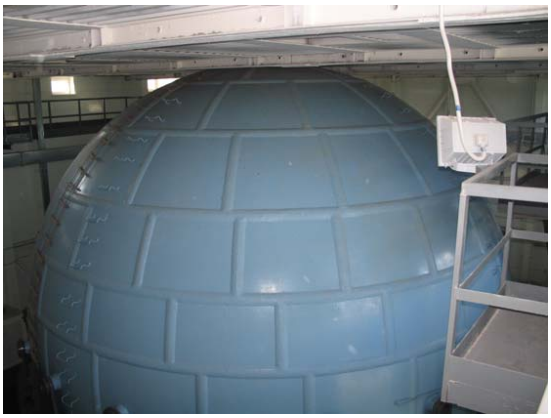
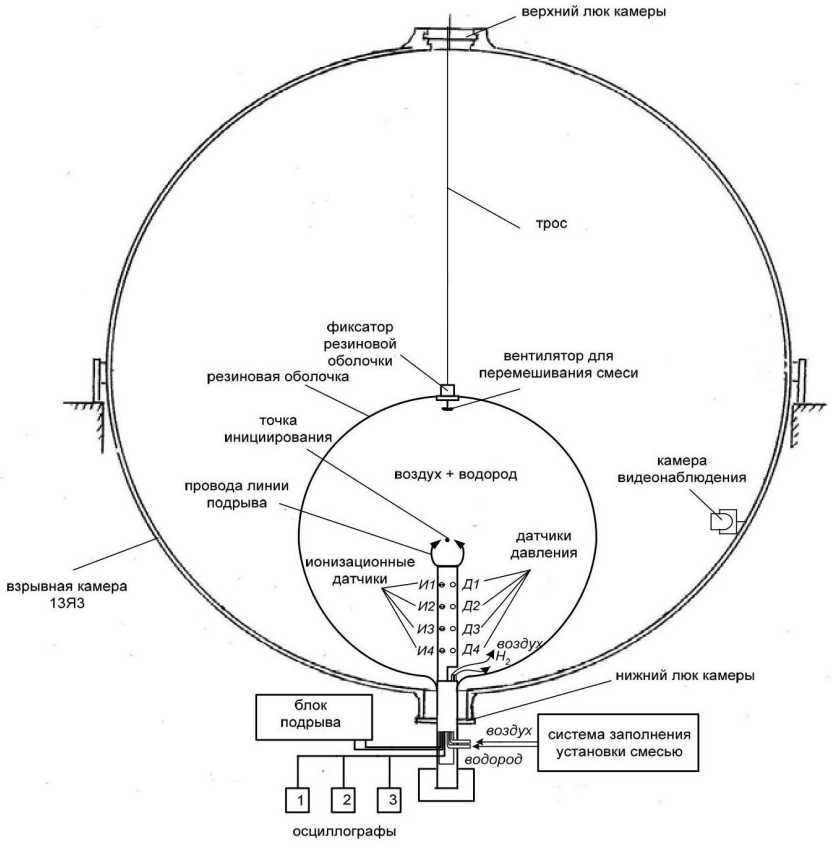


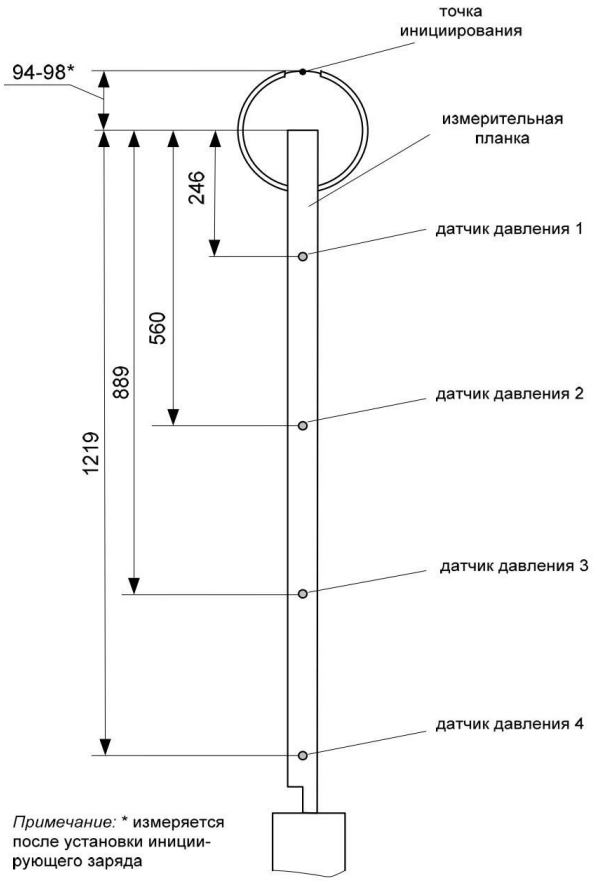
Рис. 6: Взрывная камера 13Я3. Внутренний диаметр – 12 м, объем камеры – 910 м^3

Исследуемая водородно-воздушная смесь закачивается в объем 7,06 м^3, ограниченный тонкой резиновой оболочкой по форме, близкой к сфере. В качестве оболочки используется метеорологический шар-зонд (см. рис.7). Оболочка располагается внутри взрывной камеры 13Я3. Смесь водорода и воздуха, подающаяся в оболочку, содержит 30 % водорода и не содержит ингибиторов. Инициирование взрыва производится от высоковольтного блока питания. Масса инициирующего заряда составляет 2,7 г тэн.

Рис. 7: Фотография резинового шара-зонда, заполненного исследуемой водородно-воздушной смесью и установленного во взрывной камере



(*а*)



(*б*)

Рис. 8: а) Схема взрывной камеры 13Я3 с резиновой оболочкой внутри.
б) Схема расположения датчиков давления

После взрыва водородно-воздушной смеси при распространении ударной волны увеличение давления инициирует повышение напряжения на датчиках 1-4 (рис. 8, *б*), в соответствии с их чувствительностью. Максимальные давления, зафиксированные 1, 2, 3 и 4-м датчиками (см. рис. 8), при переходе от показаний в вольтах к давлению в атмосферах, составляют 18.67, 17.74, 22.5 и 23.88 атм, соответственно.

На рис. 9 представлены регистрируемые осциллографом сигналы датчиков 1-4 в вольтах. Датчики 1-3 имеют близкие коэффициенты чувствительности (0.14785, 0.1488, 0.1511 мВ/атм, соответственно), датчик 4 имеет более высокий коэффициент чувствительности, равный 0.36008 мВ/атм. Рассматриваемый случай соответствует режиму детонации, при котором процессы горения происходят за фронтом ударной волны.

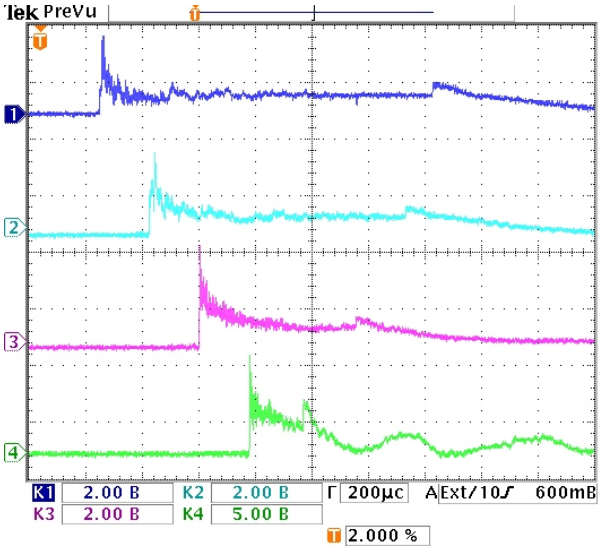


Рис. 9: Анализируемые данные сигналов датчиков 1-4 на экране осциллографа

На рис. 10 представлены выравненные сигналы датчиков давления 1-4. Таким образом сигналы приводятся к одной длине, что необходимо для их последующей обработки с помощью метода СРМ-модели.

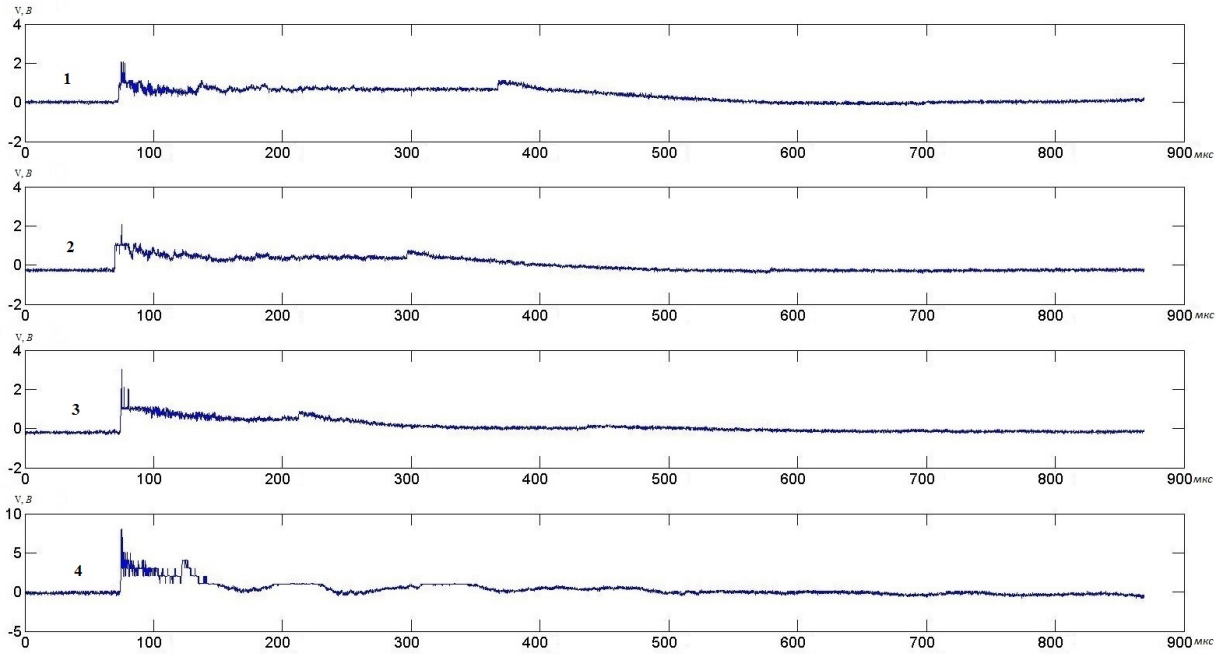


Рис. 10: Выравненные данные сигналов датчиков 1-4

Одновременная обработка сигналов датчиков 1-4

На рис. 11-13 демонстрируются промежуточные результаты последовательных шагов применения CPM-модели к анализируемым данным датчиков давления 1-4.

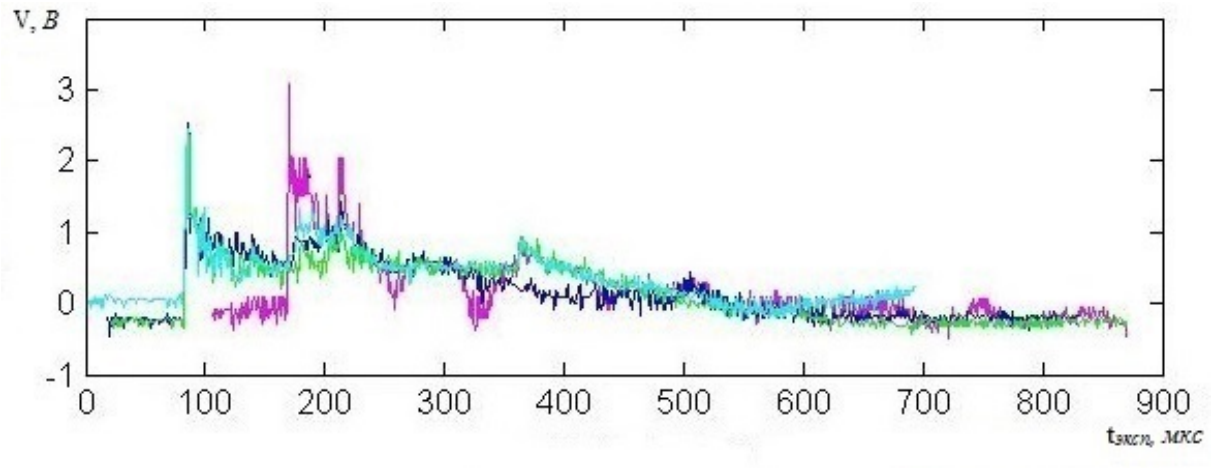


Рис. 11: Представление невыравненных и немасштабированных данных датчиков в исходном времени

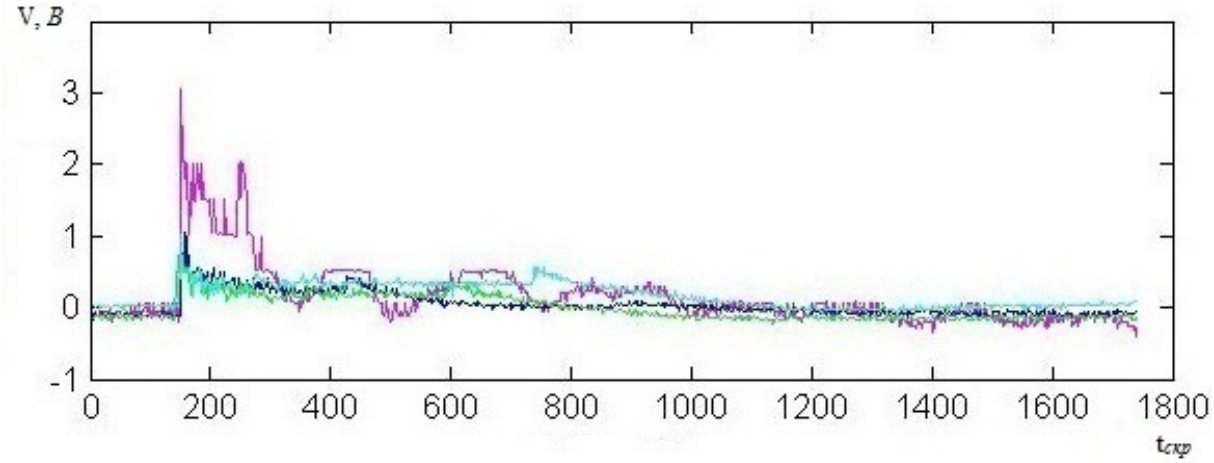
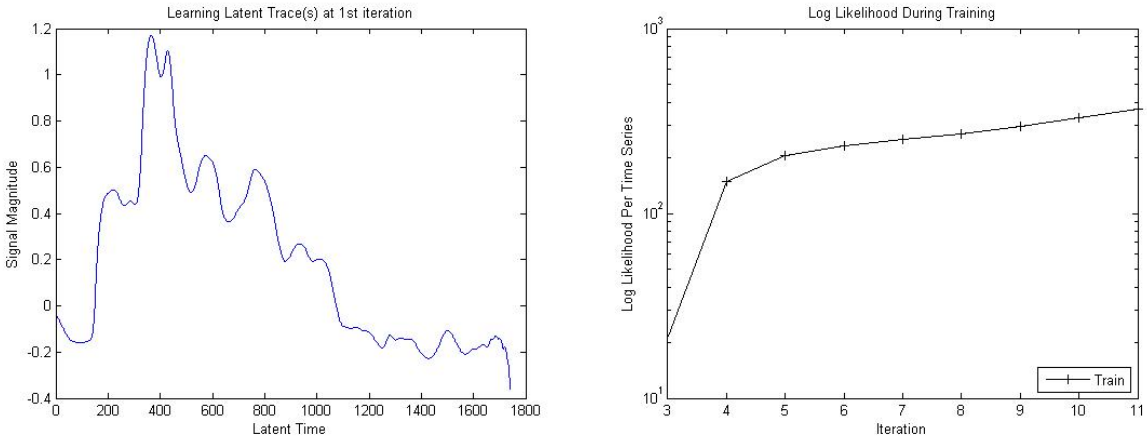


Рис. 12: Представление выравненных и масштабированных данных датчиков в скрытом времени



(*а*) (*б*)

Рис. 13: а) Обучение скрытого следа на первой итерации,
б) вычисление логарифма правдоподобия в зависимости от числа итераций

Заметим, что в этом случае значения логарифма правдоподобия при вычислении скрытого следа СРМ-модели, рассматриваемого в качестве генеративной последовательности для всех четырёх временных рядов, не стабилизируется с увеличением числа итераций. Таким образом, невозможно построить скрытый след для полного набора из четырёх временных рядов. Поэтому, принимая во внимание значительно более высокую чувствительность датчика 4, далее СРМ-модель применяется к первым трём временным рядам, зарегистрированных датчиками близкой чувствительности.

Одновременная обработка сигналов датчиков 1-3

На рис.14-16 представлены результаты последовательных шагов применения СРМ-модели для обработки данных датчиков 1-3. Как показывает рисунок 16(б), в этом случае значения величины логарифма правдоподобия выявляемого скрытого следа (наиболее вероятной генеративной последовательности для анализируемых временных рядов) имеют тенденцию к достижению постоянного значения с увеличением числа итераций.

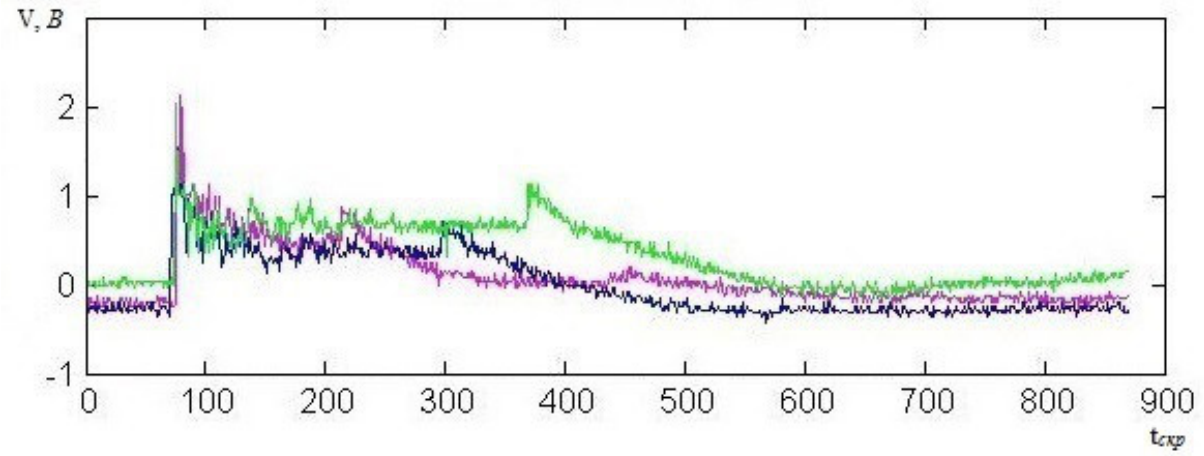


Рис. 14: Представление невыравненных и немасштабированных данных в исходном времени

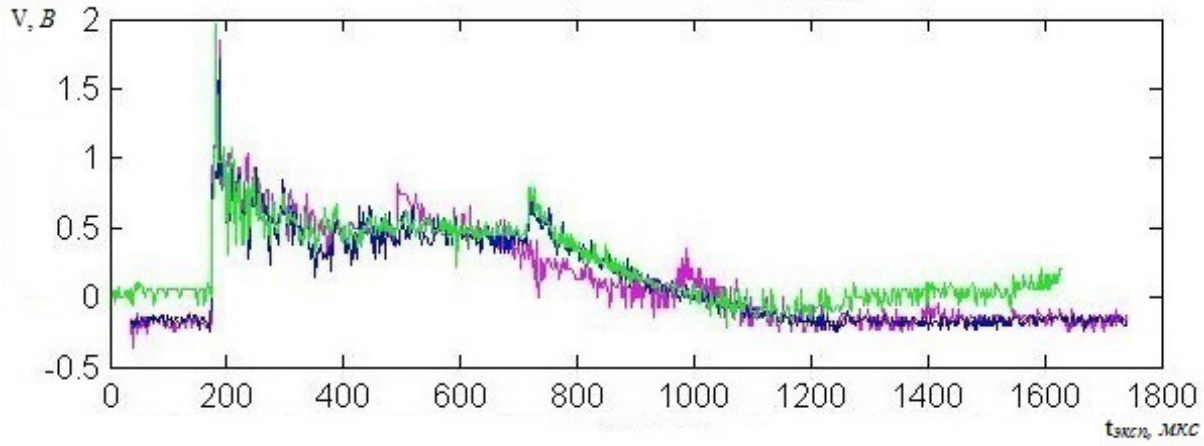
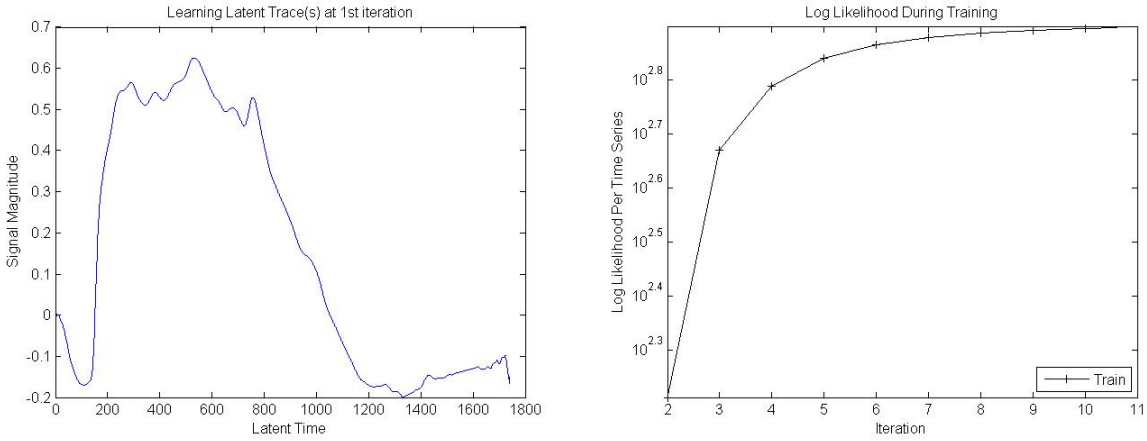


Рис. 15: Представление выравненных и масштабированных данных в скрытом времени



(*а*) (*б*)

Рис. 16: а) Обучение скрытого следа на первой итерации,
б) вычисление логарифма правдоподобия в зависимости от числа итераций

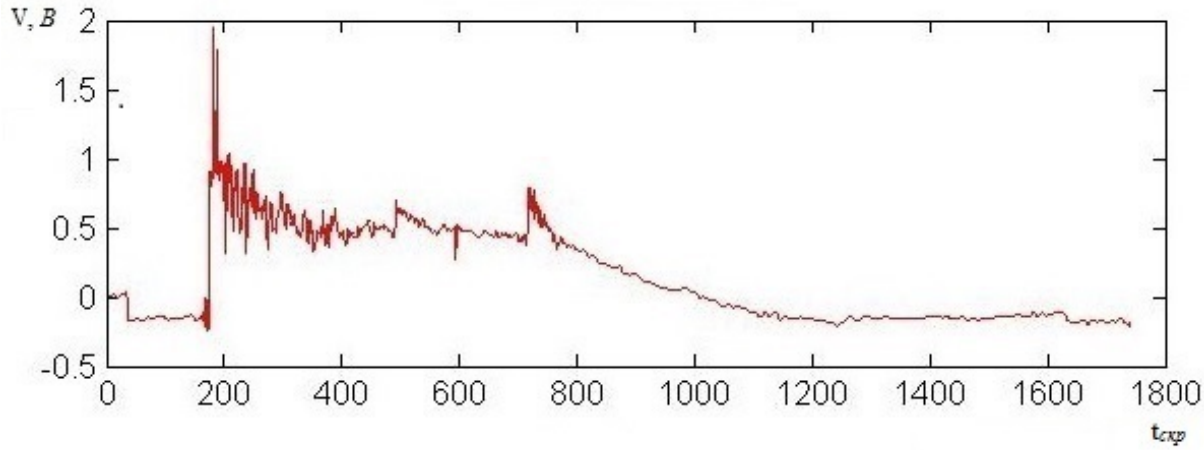


Рис. 17: Датчики 1-3: скрытый след (learned latent trace),
полученный с помощью CPM-модели

В результате, скрытый след для зашумлённых данных, регистрируемых датчиками 1-3, показанный на рис.17, демонстрирует характерную картину распределения давления во фронте ударной волны и позволяет перейти к рассмотрению газодинамического процесса в системе координат, связанной с самой волной. Наибольший пик на Рис.17 соответствует фронту ударной волны.

Полученный скрытый след содержит все три пика повышения давления, связанных с отражённой волной, регистрируемой каждым из трёх датчиков. Факт выделения характерногосигнала общего вида, для всех трёх временных рядов, позволяет предположить, что взрывная волна стабилизируется практически сразу после инициализации взрыва или, во всяком случае, с момента прохождения первого датчика. Таким образом, полученный результат (см.рис. 17) уточняет сделанные ранее выводы о моменте прекращения роста взрывной волны [54] в отсутствии ингибитора в смеси с 30% содержанием водорода.

Заключение

В настоящей работе рассматриваются алгоритмы анализа многомерных асинхронных временных рядов. Марковская модель непрерывного скрытого профиля (CPM-модель) применяется для оценки распространения детонационной волны в водородно-воздушной смеси, сопровождаемой процессами горения. В данном подходе выравниваются временные ряды сигналов, зарегистрированных датчиками давления. Полученные результаты позволяют получить характерную картину процесса распространения детонационной волны. Работа демонстрирует успешное применение методов обработки сигналов в области исследования данных натурных экспериментов по изучению газодинамических процессов.

Список литературы

[1] *Kleist C.* Time series data mining methods: Ph.D. thesis / Humboldt-Universität zu Berlin, Wirtschaftswissenschaftliche Fakultät. — 2015.

[2] *Murphy K.P.* Machine learning: a probabilistic perspective. — MIT press, 2012. — Pp. 1–30.

[3] *Batal I., Cooper G., et al.* An efficient pattern mining approach for event detection in multivariate temporal data // *Knowledge and information systems.* — 2016. — Vol. 46, no. 1. — Pp. 115–150.

[4] *Hebert D., Anderson B., et al.* Time Series Data Mining: A Retail Application // *International Journal of Business Analytics (IJBAN).* — 2014. — Vol. 1, no. 4. — Pp. 51–68.

[5] *Филипенков Н.В.* Об алгоритмах прогнозирования процессов с плавно меняющимися закономерностями: Автореферат / Вычислительный центр им. А. А. Дородницына РАН. — Москва, 2010.

[6] *Mitsa Th.* Temporal data mining. — CRC Press, 2010. — Pp. xix–xxii.

[7] *Comon P.* Independent component analysis, a new concept? // *Signal processing.* — 1994. — Vol. 36, no. 3. — Pp. 287–314.

[8] *Belouchrani A., Abed-Meraim K., et al.* A blind source separation technique using second-order statistics // *IEEE Transactions on Signal Processing.* — 1997. — Vol. 45, no. 2. — Pp. 434–444.

[9] *Langlois D., Chartier S., Gosselin D.* An introduction to independent component analysis: InfoMax and FastICA algorithms // *Tutorials in Quantitative Methods for Psychology.* — 2010. — Vol. 6, no. 1. — Pp. 31–38.

[10] *Durbin J., Koopman S.* Time series analysis by state space methods. No. 38. — Oxford University Press, 2012.

[11] *Ghahramani Z., Hinton G.* Variational learning for switching state-space models // *Neural computation.* — 2000. — Vol. 12, no. 4. — Pp. 831–864.

[12] *Murphy K.* Switching kalman filters. — Citeseer. — 1998.

[13] *Roweis S., Ghahramani Z.* Learning nonlinear dynamical systems using the expectation–maximization algorithm // Kalman filtering and neural networks / Ed. by S. Haykin. — John Willey & Sons, 2001. — Pp. 175–220.

[14] *Пономарев Д.* Использование алгоритмов обнаружения паттернов для идентификации жестов оператора в записях управляющего сигнала манипулятора // *Труды МФТИ.* — 2012. — Т. 4, № 3. — С. 187–197.

[15] *Catlin D.* Estimation, control, and the discrete Kalman filter. — Springer Science & Business Media, 2012. — Vol. 71.

[16] *Einicke G.* Smoothing, Filtering and Prediction: Estimating the Past, Present and Future. — Rijeka, Croatia: Intech, 2012.

[17] *Boudet J., Leveque E., et al.* A Kalman filter adapted to the estimation of mean gradients in the large-eddy simulation of unsteady turbulent flows // *Computers & Fluids.* — 2016. — Vol. 127. — Pp. 65–77.

[18] *Wu X., Abbondanza C., et al.* KALREF—A Kalman filter and time series approach to the International Terrestrial Reference Frame realization // *Journal of Geophysical Research: Solid Earth.* — 2015. — Vol. 120, no. 5. — Pp. 3775–3802.

[19] *Кухаренко Б. Г.* Анализ независимых компонент и скрытая марковская модель для определения доминантных компонент многомерных временных рядов // *Информационные технологии.* — 2010. — № 11. — С. 1–32.

[20] *Rakthanmanon Th., Campana B., Mueen A.* Addressing Big Data Time Series: Mining Trillions of Time Series Subsequences Under Dynamic Time Warping // *ACM Trans. Knowl. Discov. Data.* — 2013. — Vol. 7, no. 3. — Pp. 1–31.

[21] *Listgarten J.* Analysis of sibling time series data: alignment and difference detection: Ph.D. thesis / University of Toronto: Graduate Department of Computer Science. — 2007.

[22] *Awad M., Khanna R.* Hidden Markov Model // Efficient Learning Machines. — Springer, 2015. — Pp. 81–104.

[23] *Narasimhan V., Danecek P., et al.* BCFtools/RoH: a hidden Markov model approach for detecting autozygosity from next-generation sequencing data // *Bioinformatics.* — 2016. — Pp. 1–3.

[24] *Jeon K., Lee D., et al.* Acoustic Surveillance of Hazardous Situations Using Nonnegative Matrix Factorization and Hidden Markov Model // Audio Engineering Society Convention 137 / Audio Engineering Society. — 2014. — Pp. 1–5.

[25] *Petukhov V. A., Bublik N.P., и др.* Influence of the initiation energy on development of hydrogen–air mixtures combustion in large spherical volumes // *High Temperature.* — 2016. — Vol. 54, no. 1. — Pp. 99–104.

[26] *Набоко И.М., Петухов В. А., и др.* Инициирование горения газового заряда взрывными волнами различной интенсивности в объёмах сложной геометрии // *Физическая газодинамика и теплообмен.* — 2012. — С. 357–376.

[27] *Иванов М.Ф., Киверин А.Д., и др.* От горения и детонации к окислам азота // *Успехи физических наук.* — 2014. — Т. 184, № 3. — С. 247–264.

[28] *Булат П.В., Упырев В. В.* Детонация и её инициирование—история экспериментального, теоретического и численного исследования // *Технические науки–от теории к практике.* — 2015. — № 7-8 (44).

[29] *Uskov V., Bulat P., Arkhipova L.* Gas-dynamic discontinuity conception // *Research Journal of Applied Sciences, Engineering and Technology.* — 2014. — Vol. 8, no. 22. — Pp. 2255–2259.

[30] *Proud W., Williamson D., et al.* Diagnostic techniques in deflagration and detonation studies // *Chemistry Central Journal.* — 2015. — Vol. 9, no. 1. — Pp. 1–14.

[31] *Bazarov S.B., Naboko I.M.* Simulating Blast Wave Propagation // *Computational Mathematics and Modeling.* — 2015. — Vol. 26, no. 2. — Pp. 156–162.

[32] *Петухов В.А., Гусев П.А.* Влияние энергии инициирования на развитие горения водородно-воздушных смесей в больших сферических объемах // *Теплофизика высоких температур.* — 2016. — Т. 54, № 1. — С. 92–98.

[33] *Smirnov N., Nikitin V., et al.* Supercomputing simulations of detonation of hydrogen-air mixtures // *International Journal of Hydrogen Energy.* — 2015. — Vol. 40, no. 34. — Pp. 11059–11074.

[34] *Grogan K., Ihme M.* Weak and strong ignition of hydrogen/oxygen mixtures in shock-tube systems // *Proceedings of the Combustion Institute.* — 2015. — Vol. 35, no. 2. — Pp. 2181–2189.

[35] *Лопато А.И., Уткин П.С.* О двух подходах к математическому моделированию детонационной волны // *Математическое моделирование.* — 2016. — Т. 28, № 2. — С. 133–145.

[36] *Sakoe Hiroaki, Chiba Seibi.* Dynamic programming algorithm optimization for spoken word recognition // *Acoustics, Speech and Signal Processing, IEEE Transactions on.* — 1978. — Vol. 26, no. 1. — Pp. 43–49.

[37] *Salvador Stan, Chan Philip.* Toward accurate dynamic time warping in linear time and space // *Intelligent Data Analysis.* — 2007. — Vol. 11, no. 5. — Pp. 561–580.

[38] *Tomasi Giorgio, Van Den Berg Frans, Andersson Claus.* Correlation optimized warping and dynamic time warping as preprocessing methods for chromatographic data // *Journal of Chemometrics.* — 2004. — Vol. 18, no. 5. — Pp. 231–241.

[39] *Rabiner Lawrence, Juang Biing-Hwang.* Fundamentals of speech recognition. — Prentice hall, 1993.

[40] *Ramsay JO, Li Xiaochun.* Curve registration // *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology).* — 1998. — Vol. 60, no. 2. — Pp. 351–363.

[41] *Gaffney Scott J., Smyth Padhraic.* Joint probabilistic curve clustering and alignment // *Advances in Neural Information Processing Systems.* — 2005. — Vol. 17. — Pp. 473–480.

[42] Multiple alignment of continuous time series / Jennifer Listgarten, Radford M Neal, Sam T Roweis, Andrew Emili // Advances in neural information processing systems. — 2004. — Pp. 817–824.

[43] *Frey Brendan J, Jojic Nebojsa.* A comparison of algorithms for inference and learning in probabilistic graphical models // *Pattern Analysis and Machine Intelligence, IEEE Transactions on.* — 2005. — Vol. 27, no. 9. — Pp. 1392–1416.

[44] *Neal Radford M.* Probabilistic inference using Markov chain Monte Carlo methods. — 1993.

[45] *MacKay David JC.* Introduction to Monte Carlo methods // Learning in graphical models. — Springer, 1998. — Pp. 175–204.

[46] *Poritz Alan B.* Hidden Markov models: A guided tour // Acoustics, Speech, and Signal Processing, 1988. ICASSP-88., 1988 International Conference on / IEEE. — 1988. — Pp. 7–13.

[47] Biological sequence analysis: probabilistic models of proteins and nucleic acids / Richard Durbin, Sean R Eddy, Anders Krogh, Graeme Mitchison. — Cambridge university press, 1998.

[48] *Витерби А.* Границы ошибок для сверточных кодов и асимптотически оптимальный алгоритм декодирования // *Некоторые вопросы теории кодирования. М.: Мир.* — 1970. — С. 142–165.

[49] *Dempster Arthur P, Laird Nan M, Rubin Donald B.* Maximum likelihood from incomplete data via the EM algorithm // *Journal of the royal statistical society. Series B (methodological).* — 1977. — Pp. 1–38.

[50] *Neal Radford M, Hinton Geoffrey E.* A view of the EM algorithm that justifies incremental, sparse, and other variants // Learning in graphical models. — Springer, 1998. — Pp. 355–368.

[51] *Stoer Josef, Bulirsch Roland.* Introduction to numerical analysis. — Springer Science & Business Media, 2013. — Vol. 12.

[52] *Williams Christopher KI, Rasmussen Carl Edward.* Gaussian processes for machine learning // *the MIT Press.* — 2006. — Vol. 2, no. 3. — P. 4.

[53] *Bengio Y., Frasconi P.* An input output HMM architecture // *Advances in neural information processing systems.* — 1995. — Pp. 427–434.

[54] *Петухов В.А., В.В. Азатян, и др.* Исследование горения и ингибирования больших сферических объемов водородно-воздушных смесей при интенсивном инициировании // Механика и наномеханика структурно-сложных и гетерогенных сред. Успехи, проблемы, перспективы. — Москва: ИПРИМ РАН, 2015. — С. 150–155.

Приложение