

クレジット:

UTokyo Online Education 数理手法Ⅶ 2019 北川源四郎

ライセンス:

利用者は、本講義資料を、教育的な目的に限ってページ単位で利用することができます。特に記載のない限り、本講義資料はページ単位でクリエイティブ・コモンズ 表示-非営利-改変禁止 ライセンスの下に提供されています。

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

本講義資料内には、東京大学が第三者より許諾を得て利用している画像等や、各種ライセンスによって提供されている画像等が含まれています。個々の画像等を本講義資料から切り離して利用することはできません。個々の画像等の利用については、それぞれの権利者の定めるところに従ってください。



時系列解析 (8)

－状態空間モデル－

東京大学 数理・情報教育研究センター

北川 源四郎

概要

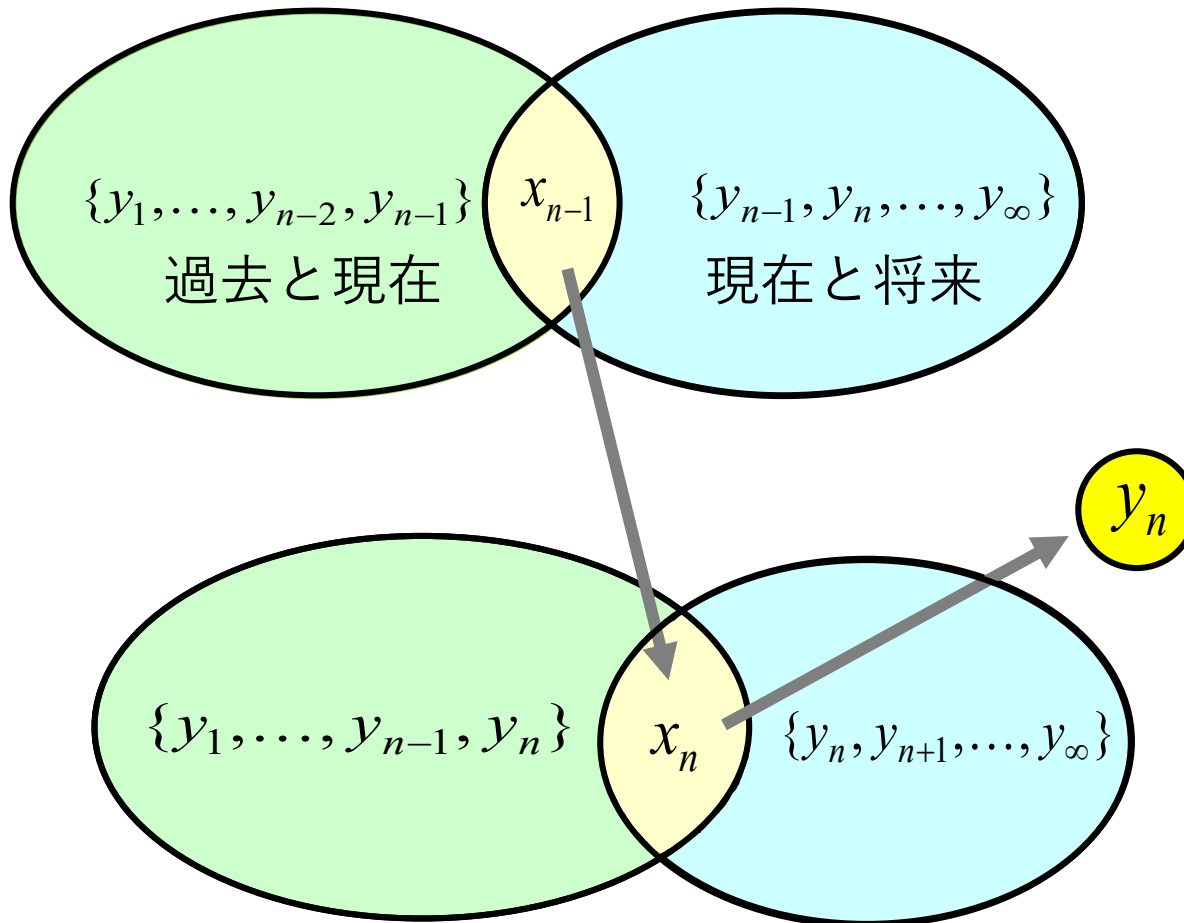
1. 状態空間モデル
2. 時系列モデルの状態空間表現
3. 状態推定の問題とカルマンフィルタ
4. 状態空間モデルのパラメータ推定
5. 長期予測
6. 平滑化アルゴリズム
7. 欠測値の処理

状態空間モデルの特長

- 線形時系列モデルを統一的に取り扱うためのメタモデル
- 効率的な $O(N)$ の逐次計算アルゴリズムが利用できる
- 様々な非定常モデルを実装できる
- 複数の成分モデルの合成が可能
- L_2 正則化やベイズモデルが自然に導入・表現できる
- 非線形・非ガウス型のモデルに拡張できる

状態とは

状態 x_n 時刻 n までの情報のうち、将来の予測に必要なものを集約したもの



(例)

$$\text{AR}(1) \quad y_n = ay_{n-1} + v_n$$

$$x_n = \{y_n\}$$

$$\text{AR}(2) \quad y_n = a_1y_{n-1} + a_2y_{n-2} + v_n$$

$$x_n = \{y_n, y_{n-1}\}$$

ARMA(2,1)

$$y_n = a_1y_{n-1} + a_2y_{n-2} + v_n - bv_{n-1}$$

$$x_n = ?$$

状態空間モデル

$$x_n = F_n x_{n-1} + G_n v_n \quad \text{システムモデル}$$

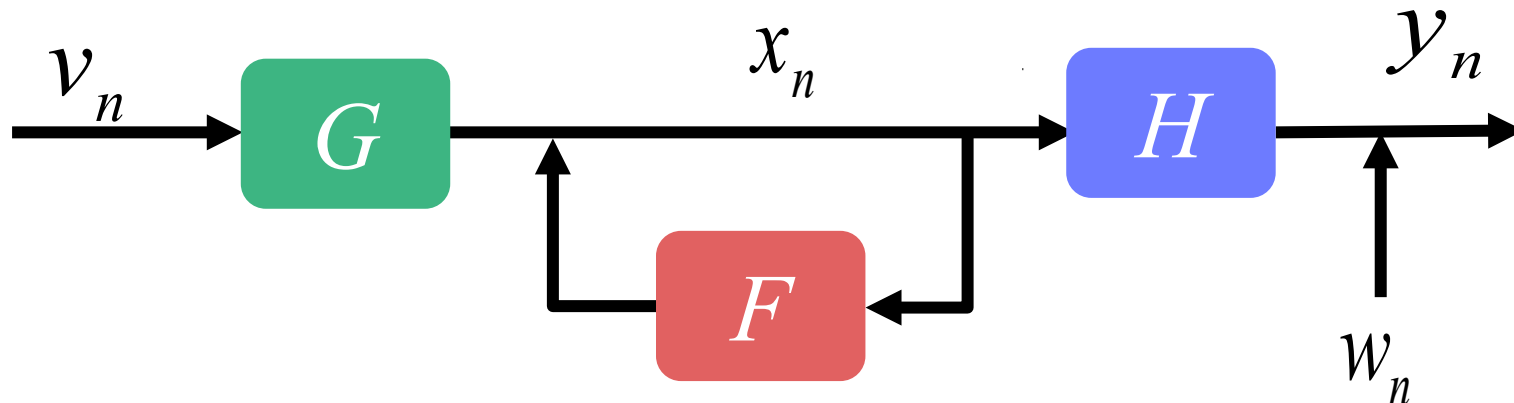
$$y_n = H_n x_n + w_n \quad \text{観測モデル}$$

y_n ℓ 次元時系列 v_n k 次元システムノイズ

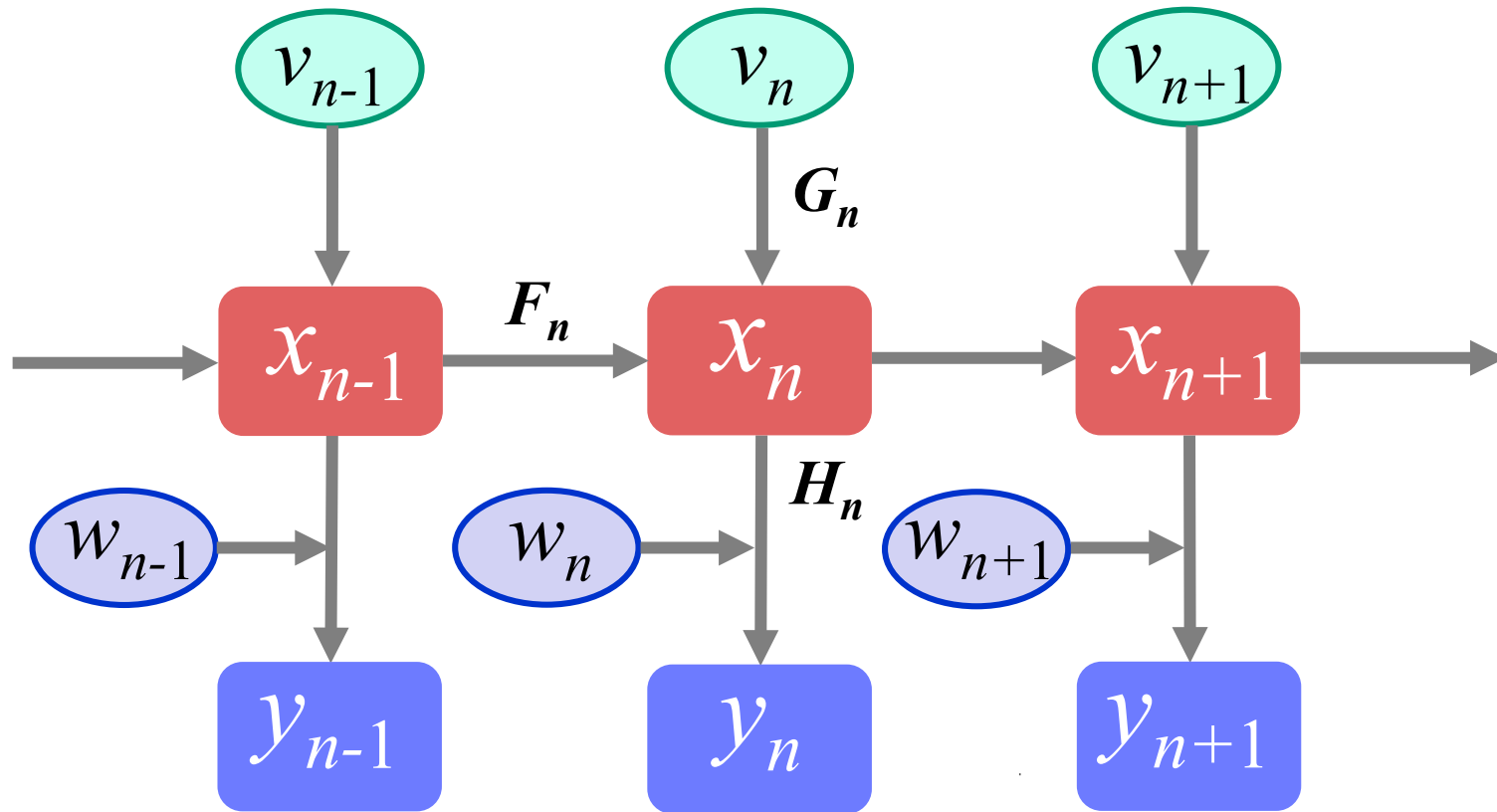
x_n m 次元状態ベクトル w_n ℓ 次元観測ノイズ

$$v_n \sim N(0, Q_n), \quad w_n \sim N(0, R_n)$$

$$F_n : m \times m, \quad G_n : m \times k, \quad H_n : \ell \times m$$



状態空間モデル



状態空間モデルの利用イメージ

1. 状態 x_n	推定すべき情報
システムモデル	情報の生成機構
観測モデル	観測機構

2. 観測モデル	回帰モデル $y_n = H_n x_n + w_n$
状態 x_n	回帰係数
システムモデル	回帰係数変化のモデル

ARモデルの状態空間表現

ARモデル

$$y_n = a_1 y_{n-1} + a_2 y_{n-2} + \cdots + a_m y_{n-m} + v_n$$

$$v_n \sim N(0, \sigma^2)$$

$$\begin{bmatrix} y_n \\ y_{n-1} \\ \vdots \\ y_{n-m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{n-1} \\ y_{n-2} \\ \vdots \\ y_{n-m} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} v_n$$

$$\begin{aligned} y_n &= a_1 y_{n-1} + \cdots + a_m y_{n-m} + v_n \\ y_{n-1} &= y_{n-1} \\ &\vdots \\ y_{n-m+1} &= y_{n-m+1} \end{aligned}$$

$$y_n = [1 \ 0 \ \cdots \ 0] \begin{bmatrix} y_n \\ y_{n-1} \\ \vdots \\ y_{n-m+1} \end{bmatrix}$$

$$y_n = y_n$$

ARモデルの状態空間表現

状態空間表現

$$x_n = Fx_{n-1} + Gv_n$$

$$y_n = Hx_n + w_n$$

$$x_n = \begin{bmatrix} y_n \\ y_{n-1} \\ \vdots \\ y_{n-m+1} \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$H = [1 \ 0 \ \cdots \ 0], \quad Q = \sigma^2, \quad R = 0$$

AR(m)は時不変で観測ノイズ0の m 次元状態空間モデルで表現できる

状態空間表現はUniqueではない

状態空間モデル

$$x_n = F_n x_{n-1} + G_n v_n \quad v_n \sim N(0, Q_n)$$

$$y_n = H_n x_n + w_n \quad w_n \sim N(0, R_n)$$

T : 任意の正則行列 ($T T^{-1} = T^{-1} T = I$)

$$z_n \equiv T x_n \quad F'_n = T F_n T^{-1} \quad G'_n = T G_n \quad H'_n = H_n T^{-1}$$

$$z_n = F'_n z_{n-1} + H'_n v_n$$

$$y_n = H'_n z_n + w_n$$

同じ y_n, v_n, w_n を持つ表現がある

$$z_n = T F_n x_{n-1} + T G_n v_n = T F_n T^{-1} T x_{n-1} + T G_n v_n = F'_n z_{n-1} + G'_n v_n$$

$$y = H x + w = H T^{-1} T x + w = H' z + w$$

ARモデルの状態空間表現 (2)

$$x_n = \begin{bmatrix} y_n \\ y_{n-1} \\ \vdots \\ y_{n-m+1} \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & & 1 \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$H = [1 \ 0 \ \cdots \ 0]$$

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & a_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & a_m & & 0 \end{bmatrix}$$

$$TG = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = G, \quad TFT^{-1} = \begin{bmatrix} a_1 & 1 & & \\ a_2 & & \ddots & \\ \vdots & & & 1 \\ a_m & & & \end{bmatrix}, \quad Tx_n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_2 & \cdots & a_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ 0 & a_m & & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_n \\ y_{n-1} \\ \vdots \\ y_{n-m+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_n \\ \sum_{j=2}^m a_j y_{n+1-j} \\ \vdots \\ a_m y_{n-1} \end{bmatrix}$$

$$HT^{-1} = [1 \ 0 \ \cdots \ 0] = H$$

$\tilde{y}_{n+i|n-1}$ は y_{n+i} の一期先予測 $y_{n+i|n+i-1} \equiv \sum_{j=1}^m a_j y_{n+i-j}$

のうち時刻 $n-1$ までの観測値で直接表現できる部分

ARモデルの状態空間表現 (2)

$\tilde{y}_{n+i|n-1}$ は y_{n+i} の一期先予測

$$\tilde{y}_{n+i|n-1} \equiv \sum_{j=i+1}^m a_j y_{n+i-j}$$

$y_{n+i|n+i-1} \equiv \sum_{j=1}^m a_j y_{n+i-j}$ のうち時刻 $n-1$

までの観測値で直接表現できる部分

$$\begin{bmatrix} y_n \\ \tilde{y}_{n+1|n-1} \\ \vdots \\ \tilde{y}_{n+m-1|n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 1 & & \\ & a_2 & \ddots & \\ & \vdots & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_{n-1} \\ \tilde{y}_{n|n-2} \\ \vdots \\ \tilde{y}_{n+m-2|n-2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} v_n$$

$$\begin{aligned} y_n &= a_1 y_{n-1} + a_2 y_{n-2} + \cdots + a_m y_{n-m} + v_n \\ &= a_1 y_{n-1} + \tilde{y}_{n|n-2} + v_n \\ \tilde{y}_{n+1|n-1} &= a_2 y_{n-1} + \cdots + a_m y_{n+1-m} \\ &= a_3 y_{n-1} + \tilde{y}_{n+1|n-2} \\ &\vdots \\ \tilde{y}_{n+m-1|n-1} &= a_m y_{n-1} \end{aligned}$$

ARモデルの状態空間表現 (3)

$$\begin{aligned}
 y_{n+i|n} &\equiv \sum_{j=1}^m a_j y_{n+i-j|n} \\
 &= \sum_{j=1}^{i-1} a_j y_{n+i-j|n} + \sum_{j=i}^m a_j y_{n+i-j}
 \end{aligned}$$

$y_{n+i|n}$ は y_{n+i} の i 期先予測値

$$T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ g_1 & a_2 & \cdots & a_m \\ \vdots & * & * & * \\ g_{m-1} & * & * & * \end{bmatrix}$$

$$y_n = y_{n|n-1} + v_n$$

$$y_{n+1|n} = y_{n+1|n-1} + g_1 v_n$$

$$y_{n+2|n} = y_{n+2|n-1} + g_2 v_n$$

\vdots

$$y_{n+m-1|n} = a_1 y_{n+m-2|n-1} + \cdots + a_{m-1} y_{n|n-1} + a_m y_{n-1} + g_{m-1} v_n$$

状態空間表現

$$\begin{aligned}
 x_n &= \begin{bmatrix} y_n \\ y_{n+1|n} \\ \vdots \\ y_{n+m-1|n} \end{bmatrix} & F &= \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ a_m & \cdots & a_2 & a_1 \end{bmatrix} & G &= \begin{bmatrix} 1 \\ g_1 \\ \vdots \\ g_{m-1} \end{bmatrix} \\
 H &= [1 \ 0 \ \cdots \ 0]
 \end{aligned}$$

ARモデルの状態空間表現 (3) 詳細

$$y_{n+i|n} \equiv \sum_{j=1}^m a_j y_{n+i-j|n} = \sum_{j=1}^{i-1} a_j y_{n+i-j|n} + \sum_{j=i}^m a_j y_{n+i-j}$$

$$y_n = \sum_{j=1}^m a_j y_{n-j} + v_n = y_{n|n-1} + v_n$$

$$y_{n+1|n} = a_1 y_n + \sum_{j=2}^m a_j y_{n+1-j} = a_1 (y_{n|n-1} + v_n) + \sum_{j=2}^m a_j y_{n+1-j} = y_{n+1|n-1} + g_1 v_n$$

$$y_{n+2|n} = \sum_{j=1}^2 a_j y_{n+2-j|n} + \sum_{j=3}^m a_j y_{n+2-j} = a_1 (y_{n+1|n-1} + g_1 v_n) + a_2 (y_{n|n-1} + v_n) + \sum_{j=3}^m a_j y_{n+2-j}$$

$$= y_{n+2|n-1} + (a_1 g_1 + a_2) v_n = y_{n+2|n-1} + g_2 v_n$$

⋮

$$y_{n+m-1|n} = a_1 y_{n+m-2|n} + \cdots + a_{m-1} y_{n|n} + a_m y_{n-1} = a_1 (y_{n+m-2|n-1} + g_{m-2} v_n) + \cdots + a_{m-1} (y_{n|n-1} + v_n) + a_m y_{n-1}$$
$$= y_{n+m-1|n-1} + (a_1 g_{m-2} + \cdots + a_{m-1}) v_n = y_{n+m-1|n-1} + g_{m-1} v_n$$

ARモデルのイノベーション表現

ARモデル

$$y_n = a_1 y_{n-1} + a_2 y_{n-2} + \cdots + a_m y_{n-m} + v_n$$

$$v_n \sim N(0, \sigma^2)$$

イノベーション表現

$$x_n = \begin{bmatrix} y_{n|n-1} \\ y_{n+1|n-1} \\ \vdots \\ y_{n+m-1|n-1} \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} a_1 & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \\ a_m & & & \end{bmatrix}, \quad K = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix}$$

$$H = [1 \ 0 \ \cdots \ 0], \quad Q = \sigma^2, \quad R = \sigma^2$$

$$x_{n+1} = F_n x_n + K_n v_n \quad v_n \sim N(0, Q_n)$$

$$y_n = H_n x_n + v_n$$

ARMAモデルの状態空間表現

(詳細は次回)

ARMAモデル

$$y_n = \sum_{i=1}^m a_i y_{n-i} + v_n - \sum_{i=1}^{\ell} b_i v_{n-i} \quad v_n \sim N(0, \sigma^2)$$

状態空間表現

$$x_n = \begin{bmatrix} y_n \\ \tilde{y}_{n+1|n-1} \\ \vdots \\ \tilde{y}_{n+k-1|n-1} \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} a_1 & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \\ a_k & & & \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} 1 \\ -b_1 \\ \vdots \\ -b_{k-1} \end{bmatrix}$$

$$H = [1 \ 0 \ \cdots \ 0], \quad Q = \sigma^2, \quad R = 0$$

$$k = \max(m, \ell + 1) \quad a_i = 0 \quad i > m$$

$$b_i = 0 \quad i > \ell$$

モデルの合成

成分モデル
($i=1, \dots, k$)

$$x_n^i = F^i x_{n-1}^i + G^i v_n^i \quad v_n^i \sim N(0, Q_n^i)$$

$$y_n = H^i x_n^i + w_n^i \quad w_n^i \sim N(0, R_n^i)$$

$$x_n = \begin{bmatrix} x_n^1 \\ \vdots \\ x_n^k \end{bmatrix} \quad v_n = \begin{bmatrix} v_n^1 \\ \vdots \\ v_n^k \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} F^1 & & \\ & \ddots & \\ & & F^k \end{bmatrix} \quad G = \begin{bmatrix} G^1 & & \\ & \ddots & \\ & & G^k \end{bmatrix}$$
$$H = \begin{bmatrix} H^1 & \dots & H^k \end{bmatrix}$$

合成モデル

$$x_n = Fx_{n-1} + Gv_n \quad v_n \sim N(0, Q_n) \quad Q_n = \begin{bmatrix} Q_n^1 & & \\ & \ddots & \\ & & Q_n^k \end{bmatrix}$$
$$y_n = Hx_n + w_n \quad w_n \sim N(0, R_n)$$

$$y_n = H^1 x_n^1 + \dots + H^k x_n^k + w_n \quad \text{時系列の成分分解に利用できる}$$

- 時系列モデルの最尤推定
- 長期予測
- 平滑化
- 欠測値の補間
- 非定常性のモデリング
 - ・ トレンド推定
 - ・ 季節調整
 - ・ 確率的ボラティリティ
 - ・ 時変係数 (AR) モデルと時変スペクトル
 - ・ 信号抽出・信号分離

状態推定の問題

データ Y_j に基づき x_n 状態
を推定する.

条件付き分布 $p(x_n | Y_j)$

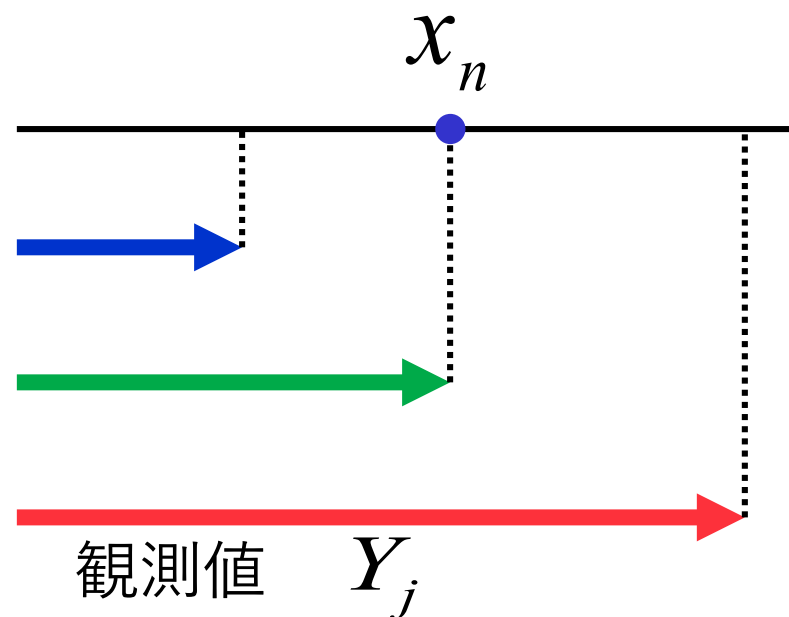
$$Y_j \equiv \{y_1, \dots, y_j\}$$

時刻 j までの観測値

$j < n$ の場合：予測

$j = n$ の場合：フィルタ

$j > n$ の場合：平滑化



状態推定問題の重要性

なぜ、状態推定の問題が重要か

- 時系列モデルの尤度計算，長期予測，平滑化，欠測値の補間，非定常時系列の成分分解，信号抽出などが，状態推定を通して実現できる。
- 逐次推定の問題に分解できる

nm 次元のパラメータ推定 \Rightarrow m 次元のパラメータ推定を n 回
実行すればよい

\Rightarrow フィルタの計算量は常に（自動的に） $O(n)$

線形・ガウス型状態空間モデルの場合

$$Y_j \equiv \{y_1, \dots, y_j\} \quad \longrightarrow \quad \{x_1, \dots, x_N\}$$

$$p(x_n | Y_j) \sim N(x_{n|j}, V_{n|j})$$

$p(x_n | Y_j)$ は $x_{n|j}$ と $V_{n|j}$ で規定される

$x_{n|j}$ 条件付き平均

$V_{n|j}$ 条件付き分散

カルマンフィルタ

予測

$$\mathbf{x}_{n|n-1} = \mathbf{F}_n \mathbf{x}_{n-1|n-1}$$

$$\mathbf{V}_{n|n-1} = \mathbf{F}_n \mathbf{V}_{n-1|n-1} \mathbf{F}_n^T + \mathbf{G}_n \mathbf{Q}_n \mathbf{G}_n^T$$

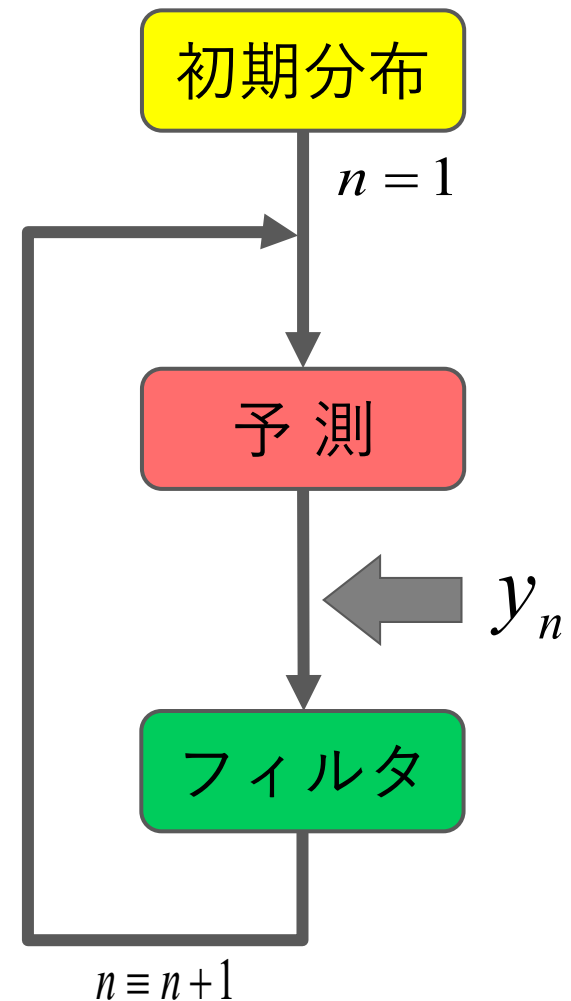
フィルタ

$$\mathbf{K}_n = \mathbf{V}_{n|n-1} \mathbf{H}_n^T (\mathbf{H}_n \mathbf{V}_{n|n-1} \mathbf{H}_n^T + \mathbf{R}_n)^{-1}$$

$$\mathbf{x}_{n|n} = \mathbf{x}_{n|n-1} + \mathbf{K}_n (\mathbf{y}_n - \mathbf{H}_n \mathbf{x}_{n|n-1})$$

$$\mathbf{V}_{n|n} = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_n \mathbf{H}_n) \mathbf{V}_{n|n-1}$$

\mathbf{K}_n カルマンゲイン



一期先予測の導出

予測

E: 期待値

$$x_n = F_n x_{n-1} + G_n v_n$$

$$x_{n|n-1} = \mathbf{E}[x_n | Y_{n-1}]$$

$$= \mathbf{E}[F x_{n-1} + G_n v_n | Y_{n-1}]$$

$$= F \mathbf{E}[x_{n-1} | Y_{n-1}]$$

$$= F x_{n-1|n-1}$$

$$V_{n|n-1} = \mathbf{E}[(x_n - x_{n|n-1})^T (x_n - x_{n|n-1})]$$

$$= \mathbf{E}[(F(x_{n-1} - x_{n-1|n-1}) + G v_n)^T (F(x_{n-1} - x_{n-1|n-1}) + G v_n)]$$

$$= F \mathbf{E}[(F(x_{n-1} - x_{n-1|n-1}) + G v_n)^T (F(x_{n-1} - x_{n-1|n-1}) + G v_n)] F^T + G \mathbf{E}[v_n^T v_n] G$$

$$= F V_{n-1|n-1} F^T + G Q G^T$$

フィルタステップの導出

$$\begin{aligned}\varepsilon_n &\equiv y_n - \mathbf{E}[y_n | Y_{n-1}] \\ &= Hx_n + w_n - \mathbf{E}[Hx_n + w_n | Y_{n-1}] \\ &= Hx_n + w_n - H\mathbf{E}[x_n | Y_{n-1}] \\ &= H(x_n - x_{n|n-1}) + w_n\end{aligned}$$

$$\text{Var}(\varepsilon_n) = HV_{n|n-1}H^T + R$$

$$\begin{aligned}\text{Cov}(x_n, \varepsilon_n) &= \text{Cov}(x_n, H(x_n - x_{n|n-1}) + w_n) \\ &= \text{Var}(x_n - x_{n|n-1})H_n^T \\ &= V_{n|n-1}H_n^T\end{aligned}$$

$$Y_n = \{Y_{n-1}, y_n\} = Y_{n-1} \oplus \varepsilon_n$$

$$\begin{aligned}x_{n|n} &= \mathbf{E}[x_n | Y_n] = \text{Proj}(x_n | Y_n) \\ &= \text{Proj}(x_n | Y_{n-1}, \varepsilon_n) \\ &= \text{Proj}(x_n | Y_{n-1}) + \text{Proj}(x_n | \varepsilon_n)\end{aligned}$$

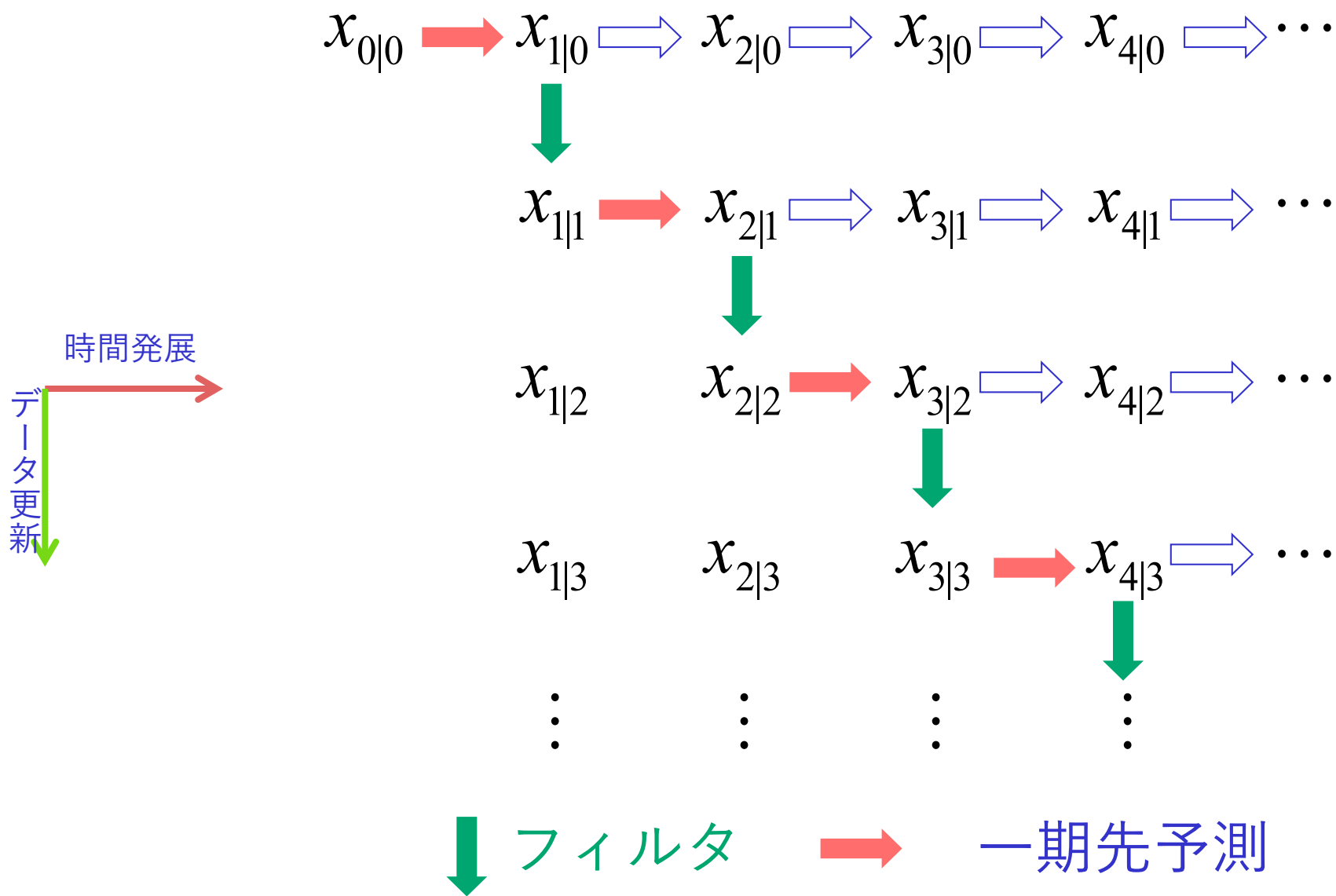
$$\begin{aligned}\text{Proj}(x_n | \varepsilon_n) &= \text{Cov}(x_n, \varepsilon_n)\text{Var}(\varepsilon_n)^{-1}\varepsilon_n \\ &= V_{n|n-1}H^T(HV_{n|n-1}H^T + R)^{-1}\varepsilon_n \\ &\equiv K_n\varepsilon_n\end{aligned}$$

$$x_{n|n} = x_{n|n-1} + K_n\varepsilon_n$$

$$\begin{aligned}V_{n|n-1} &= \mathbf{E}\left[(x_n - x_{n|n-1})^T(x_n - x_{n|n-1})\right] \\ &= \mathbf{E}\left[(x_n - x_{n|n} + K_n\varepsilon_n)^T(x_n - x_{n|n} + K_n\varepsilon_n)\right] \\ &= V_{n|n} + K_n\text{Var}(\varepsilon_n)K_n^T\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}V_{n|n} &= V_{n|n-1} - K_nHV_{n|n-1} \\ &= (I - K_nH)V_{n|n-1}\end{aligned}$$

カルマンフィルタ（一期先予測とフィルタ）



フィルタ

$$x_{n|n} = x_{n|n-1} + K_n (y_n - H_n x_{n|n-1})$$

 K_n

カルマンゲイン

 $y_n - H_n x_{n|n-1}$

予測誤差

$$x_{n|n} = K_n y_n + (I - K_n H_n) x_{n|n-1}$$

$x_{n|n}$ は以下のように表現できる。

- $x_{n|n-1}$ と予測誤差の一次結合
- y_n と $x_{n|n-1}$ の一次結合

観測ノイズとシステムノイズに相関がある場合

状態空間モデル


$$\begin{aligned}x_{n+1} &= F_n x_n + G_n v_n \\ y_n &= H_n x_n + w_n\end{aligned} \quad \begin{bmatrix} v_n \\ w_n \end{bmatrix} \sim N \left(\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} Q_n & S_n \\ S_n^T & R_n \end{bmatrix} \right)$$

【予測】

$$\begin{aligned}x_{n+1|n} &= (F_n - G_n S_n R_n^{-1} H_n) x_{n|n} + G_n S_n R_n^{-1} y_n \\ V_{n+1|n} &= (F_n - G_n S_n R_n^{-1} H_n) V_{n|n} (F_n - G_n S_n R_n^{-1} H_n)^T + G_n (Q_n - S_n R_n^{-1} S_n^T) G_n^T\end{aligned}$$

【フィルタ (同じ)】

$$\begin{aligned}K_n &= V_{n|n-1} H_n^T (H_n V_{n|n-1} H_n^T + R_n)^{-1} \\ x_{n|n} &= x_{n|n-1} + K_n (y_n - H_n x_{n|n-1}) \\ V_{n|n} &= (I - K_n H_n) V_{n|n-1}\end{aligned}$$


$$\begin{aligned}F_n &\Rightarrow F'_n = F_n - G_n S_n R_n^{-1} H_n \\ Q_n &\Rightarrow Q'_n = Q_n - S_n R_n^{-1} S_n^T \\ x_{n+1|n} &= F'_n x_{n|n} + G_n S_n R_n^{-1} y_n\end{aligned}$$

情報フィルタ, 平方根フィルタ

	Matrix	Square root
共分散行列	カルマンフィルタ Kalman filter $V_{n n}$	Covariance Square Root filter $V_{n n} = S_{n n}^T S_{n n}$
情報行列	情報フィルタ Information filter $I_{n n} = V_{n n}^{-1}$	Information square root filter $I_{n n} = S_{n n}^{-1} S_{n n}^{-T}$

Information square root filter

$$V_{n|n-1} = R_n^T R_n$$

$$V_{n|n} = S_n^T S_n$$

$$E w_n w_n^T = Q_n = W_n^T W_n$$

$$E \varepsilon_n \varepsilon_n^T = R_n = U_n^T U_n$$

一期先予測

$$\left[\begin{array}{c|c|c} W_{n-1}^{-1} & 0 & 0 \\ \hline -S_{n-1}^{-1} F_{n-1}^{-1} G_{n-1} & S_{n-1}^{-1} F_{n-1}^{-1} & c_{n-1} \end{array} \right] \longrightarrow \left[\begin{array}{c|c|c} P_{n-1} & T_n & a_n \\ \hline 0 & R_n^{-1} & b_n \end{array} \right]$$

$$x_{n|n-1} = R_n b_n$$

フィルタ

$$\left[\begin{array}{c|c} R_n^{-1} & b_n \\ \hline U_n^{-1} H_n & U_n^{-1} y_n \end{array} \right] \longrightarrow \left[\begin{array}{c|c} S_n^{-1} & c_n \\ \hline 0 & e_n \end{array} \right]$$

$$x_{n|n} = S_n c_n$$

時系列モデルの尤度計算

- 独立なデータの場合

$$L(\theta) = p(y_1, \dots, y_N | \theta) = \prod_{n=1}^N p(y_n | \theta)$$

- 時系列の場合

$$L(\theta) = p(y_1, \dots, y_N | \theta)$$

$$= p_{N-1}(y_1, \dots, y_{N-1} | \theta) g_N(y_N | y_1, \dots, y_{N-1}, \theta)$$

$$= p_{N-2}(y_1, \dots, y_{N-2} | \theta) g_{N-1}(y_{N-1} | y_1, \dots, y_{N-2}, \theta) g_N(y_N | y_1, \dots, y_{N-1}, \theta)$$

$$= \prod_{n=1}^N g_n(y_n | y_1, \dots, y_{n-1}, \theta)$$

$$= \prod_{n=1}^N g_n(y_n | Y_{n-1}, \theta)$$

$$f(A, B) = f(A)f(B | A)$$

状態空間モデルの対数尤度

$$p(x_n | Y_{n-1}) \sim N(x_{n|n-1}, V_{n|n-1}) \quad \text{カルマンフィルタ}$$

$$y_n = Hx_n + w_n \quad \text{観測モデル}$$

$$y_{n|n-1} = H_n x_{n|n-1}, \quad \varepsilon_n = y_n - y_{n|n-1}, \quad d_{n|n-1} = H_n V_{n|n-1} H_n^T + R_n$$

$$g(y_n | Y_{n-1}) \sim N(Hx_{n|n-1}, d_{n|n-1})$$

$$g(y_n | Y_{n-1}) = (2\pi d_{n|n-1})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{\varepsilon_n^2}{2d_{n|n-1}}\right\}$$

対数尤度

$$\begin{aligned} \ell(\theta) &= \sum_{n=1}^N \log g_n(y_n | Y_{n-1}) \\ &= -\frac{1}{2} \left\{ N \log 2\pi + \sum_{n=1}^N \log d_{n|n-1} + \sum_{n=1}^N \frac{\varepsilon_n^2}{d_{n|n-1}} \right\} \end{aligned}$$

パラメータの最尤推定

対数尤度

θ : パラメータ

$$\ell(\theta) = -\frac{1}{2} \left\{ N \log 2\pi + \sum_{n=1}^N \log d_{n|n-1} + \sum_{n=1}^N \frac{\varepsilon_n^2}{d_{n|n-1}} \right\}$$

$$\varepsilon_n = y_n - H_n x_{n|n-1}, \quad d_{n|n-1} = H_n V_{n|n-1} H_n^T + R_n$$

$$\max_{\theta} \ell(\theta) \Rightarrow \hat{\theta}$$

最尤推定値

パラメータの最尤推定

- 一般には、数値的最適化が必要（最尤推定値が解析的に求まらない）
- 対数尤度の微分が求まらない（または計算が大変な）場合が多い（数値微分の利用、または Gradient を用いない最適化アルゴリズム）

パラメータの最尤推定 (2)

$$\max \ell(\theta) \Rightarrow \hat{\theta}$$

準ニュートン法

$$\theta_k = \theta_{k-1} - H_{k-1}^{-1} g(\theta_{k-1})$$

$$g(\theta) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \ell}{\partial \theta_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \ell}{\partial \theta_m} \end{bmatrix}, \quad H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta_1 \partial \theta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta_1 \partial \theta_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta_m \partial \theta_1} & \cdots & \frac{\partial^2 \ell}{\partial \theta_m \partial \theta_m} \end{bmatrix}$$

$$H_k^{-1} = H_{k-1}^{-1} - \frac{\Delta x_k \Delta x_k^T}{\Delta x_k^T \Delta g_k} - \frac{H_{k-1}^{-1} \Delta g_k \Delta g_k^T H_{k-1}^{-1}}{\Delta g_k^T H_{k-1}^{-1} \Delta g_k}$$

$$\theta_0 \Rightarrow \theta_1 \Rightarrow \cdots \Rightarrow \hat{\theta}$$

BFGS公式

パラメータ次元の減少

1次元時系列のカルマンフィルタでは、観測ノイズの分散は1と仮定して計算しても同一のフィルタ結果が得られる

$$\begin{aligned} V_{n|n-1} &= \sigma^2 \tilde{V}_{n|n-1}, & V_{n|n} &= \sigma^2 \tilde{V}_{n|n} \\ Q_n &= \sigma^2 \tilde{Q}_n, & \tilde{R} &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K_n &= V_{n|n-1} H_n^T (H_n V_{n|n-1} H_n^T + R_n)^{-1} \\ &= \sigma^2 \tilde{V}_{n|n-1} H_n^T \sigma^{-2} (H_n \tilde{V}_{n|n-1} H_n^T + 1)^{-1} \\ &= \tilde{V}_{n|n-1} H_n^T (H_n \tilde{V}_{n|n-1} H_n^T + \tilde{R})^{-1} \\ &= \tilde{K}_n \end{aligned}$$

パラメータ次元の減少 (2)

$$d_{n|n-1} = \sigma^2 \tilde{d}_{n|n-1}, \quad \varepsilon_n = y_n - y_{n|n-1}$$

$$\ell(\theta) = -\frac{1}{2} \left\{ N \log 2\pi\sigma^2 + \sum_{n=1}^N \log \tilde{d}_{n|n-1} + \frac{1}{\sigma^2} \sum_{n=1}^N \frac{\varepsilon_n^2}{\tilde{d}_{n|n-1}} \right\}$$

$$\frac{\partial \ell(\theta)}{\partial \sigma^2} = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{N}{\sigma^2} - \frac{1}{(\sigma^2)^2} \sum_{n=1}^N \frac{\varepsilon_n^2}{\tilde{d}_{n|n-1}} \right\} = 0$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{\varepsilon_n^2}{\tilde{d}_{n|n-1}}$$

$$\ell(\theta^*) = -\frac{1}{2} \left\{ N \log 2\pi\hat{\sigma}^2 + \sum_{n=1}^N \log \tilde{d}_{n|n-1} + N \right\}$$

状態空間モデルの推定手続き（1次元）

- (1) $R = 1$ においてカルマンフィルタを適用
- (2) $\hat{\sigma}^2$ を推定
- (3) 対数尤度 $\ell(\theta^*)$ を求める
- (4) 数値的最適化により対数尤度を最大化して最尤推定値 $\hat{\theta}^*$ を求める

情報量規準

$$\begin{aligned} \text{AIC} &= -2\ell(\hat{\theta}) + 2(\text{パラメータ数}) \\ &= N\ell \log 2\pi + \sum_{n=1}^N \log |d_{n|n-1}| + \sum_{n=1}^N \varepsilon_n^T d_{n|n-1}^{-1} \varepsilon_n + 2k \end{aligned}$$

$$\varepsilon_n = y_n - H_n x_{n|n-1}$$

$$d_{n|n-1} = H_n V_{n|n-1} H_n^T + R_n$$

長期予測

$I_m \equiv \{ \text{時点 } 1, \dots, m \text{ のうち実際に観測した時点} \}$

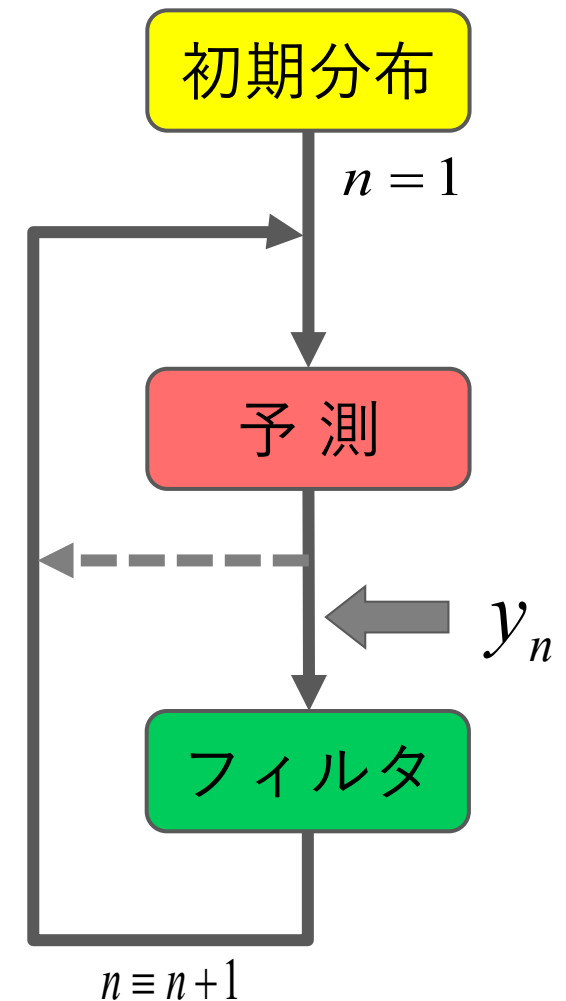
$Y_m \equiv \{ y_i \mid i \in I_m \}$

$Y_{n+j} \equiv \{ y_i \mid i = 1, \dots, n \}$ 長期予測の場合

長期予測

$$Y_n = Y_{n+1} = \dots = Y_{n+j}$$

$$p(x_{n+j} \mid Y_{n+j}) = \dots = p(x_{n+j} \mid Y_n)$$



カルマンフィルタ（長期予測）

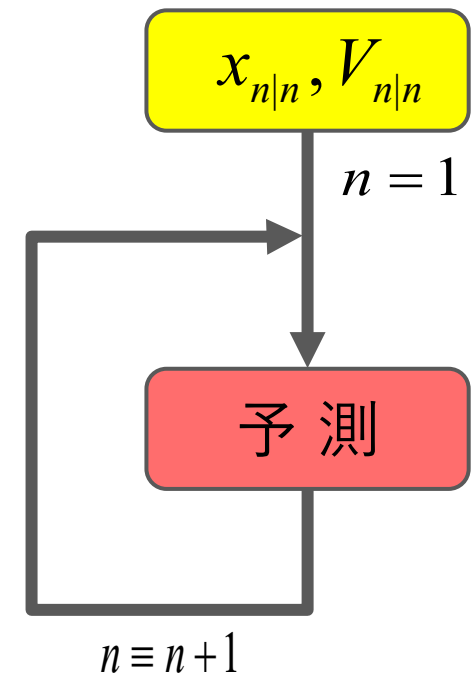
$$\mathbf{x}_{n+k|n+k} = \mathbf{x}_{n+k|n+k-1} = \cdots = \mathbf{x}_{n+k|n}$$

$$V_{n+k|n+k} = V_{n+k|n+k-1} = \cdots = V_{n+k|n}$$

長期予測

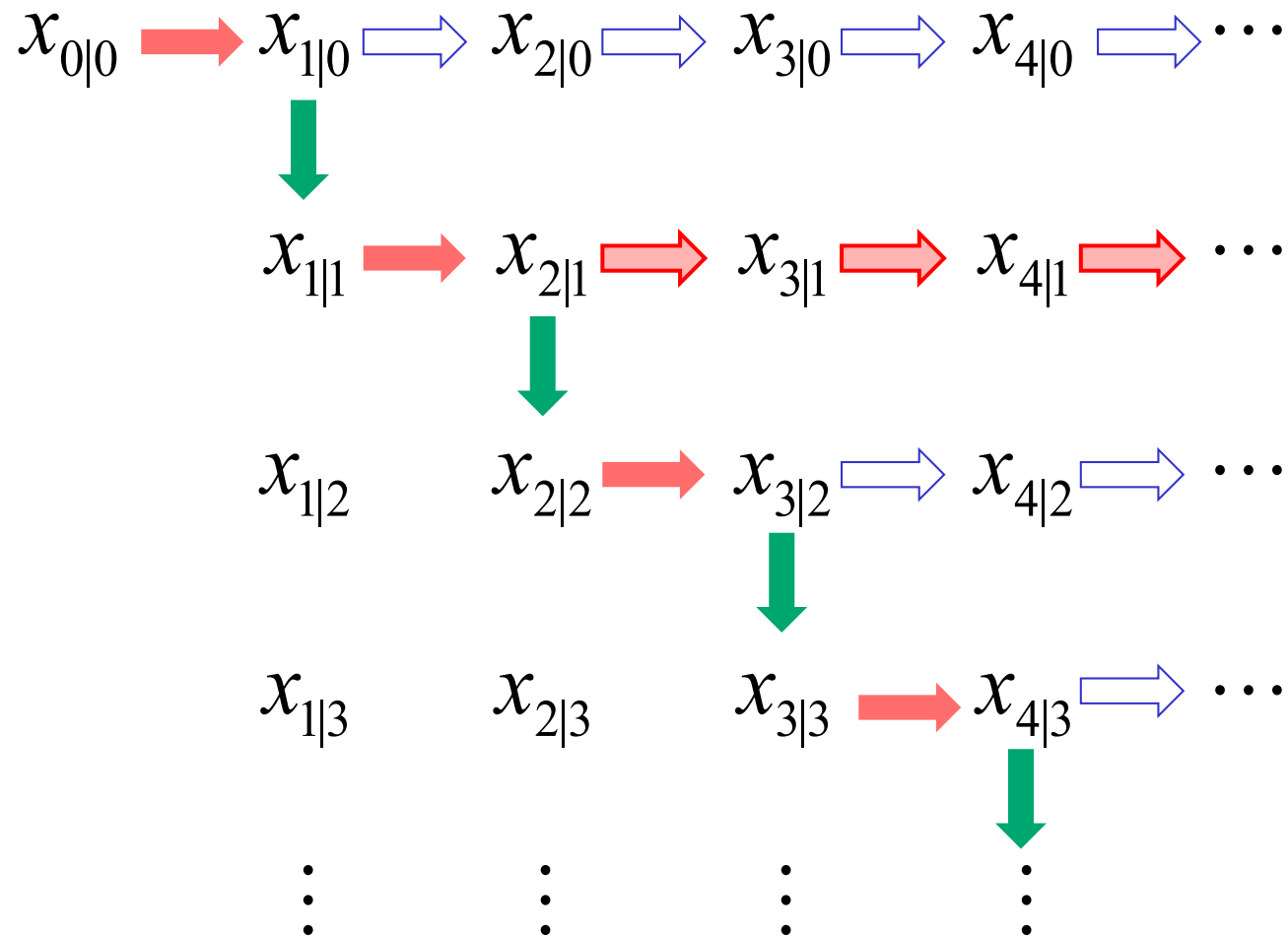
$$\mathbf{x}_{n+k|n} = F_n \mathbf{x}_{n+k-1|n}$$

$$V_{n+k|n} = F_n V_{n+k|n+k-1} F_n^T + G_n Q_n G_n^T$$



（フィルタを省略して）予測のステップだけを繰り返せばよい。

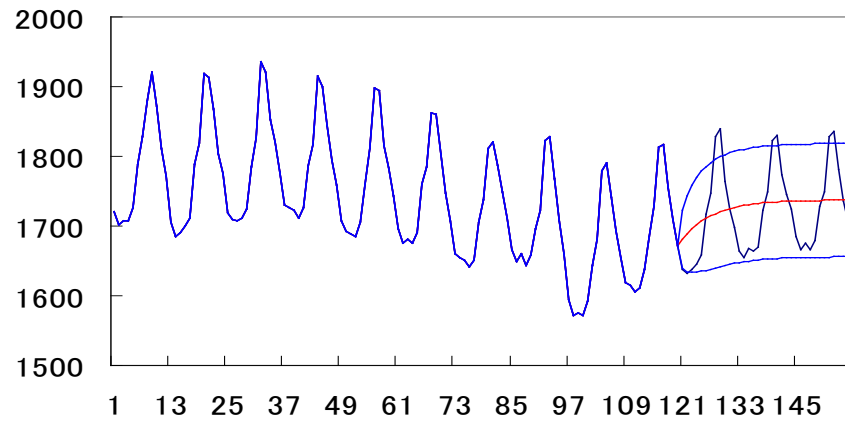
長期予測



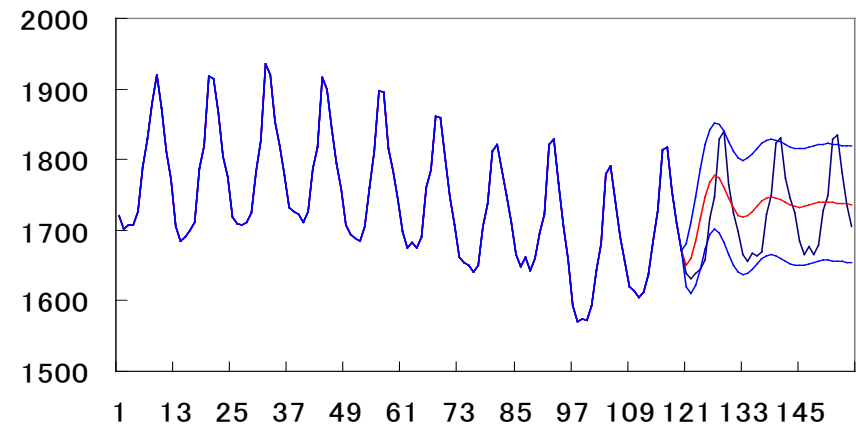
 一期先予測  長期予測  フィルタ

時系列の長期予測

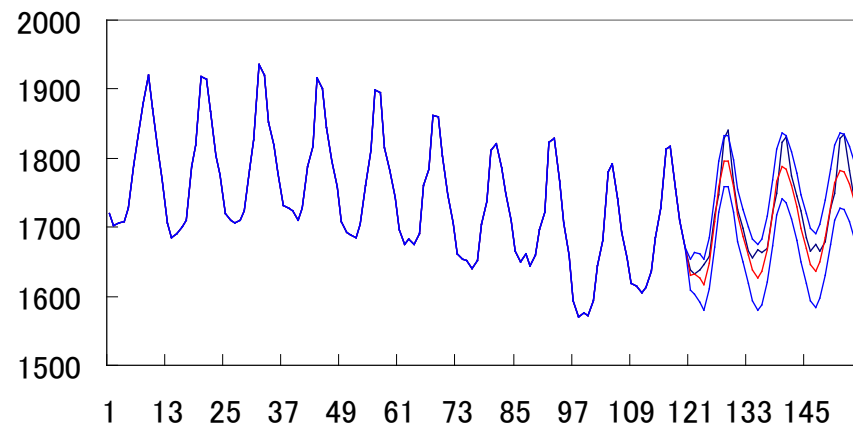
AR(1)



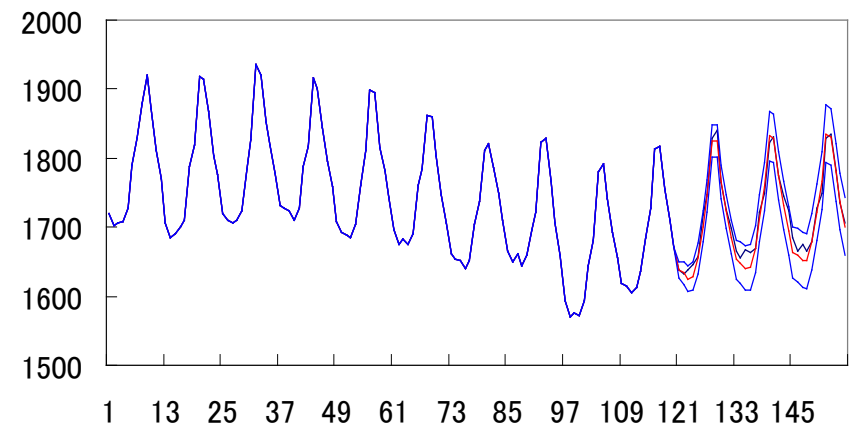
AR(5)



AR(10)

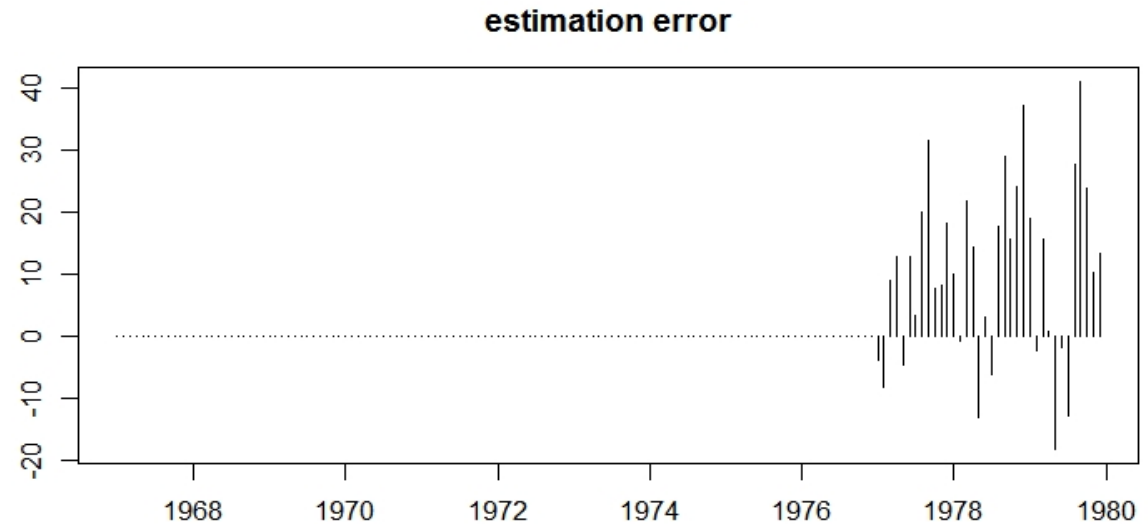
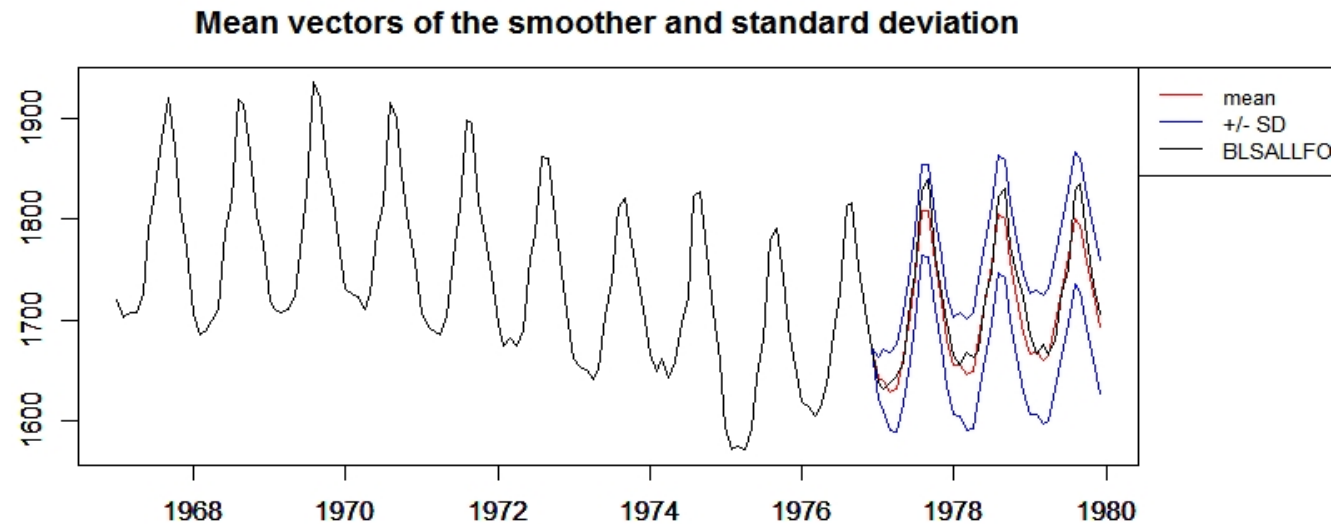


AR(13)



Rによる長期予測 (AR次数: 自動)

```
#  
## AR model (l=1, k=1) 長期予測  
#  
data(BLSALLFOOD)  
  
par(mar=c(2,2,3,2)+0.1)  
#  
BLS120 <- BLSALLFOOD[1:120]  
z1 <- arfit(BLS120, plot = FALSE)  
tau2 <- z1$sigma2  
arcoef <- z1$arcoef  
  
# in case m = 15  
m1 <- z1$maice.order  
f <- matrix(0.0e0, m1, m1)  
f[1, ] <- arcoef[1:m1]  
if (m1 != 1)  
  for (i in 2:m1) f[i, i-1] <- 1  
g <- c(1, rep(0.0e0, m1-1))  
h <- c(1, rep(0.0e0, m1-1))  
q <- tau2[m1+1]  
r <- 0.0e0  
x0 <- rep(0.0e0, m1)  
v0 <- NULL  
  
s1 <- tsmooth(BLS120, f, g, h, q, r, x0, v0,  
filter.end = 120, predict.end = 156)  
s1  
  
plot(s1, BLSALLFOOD)
```



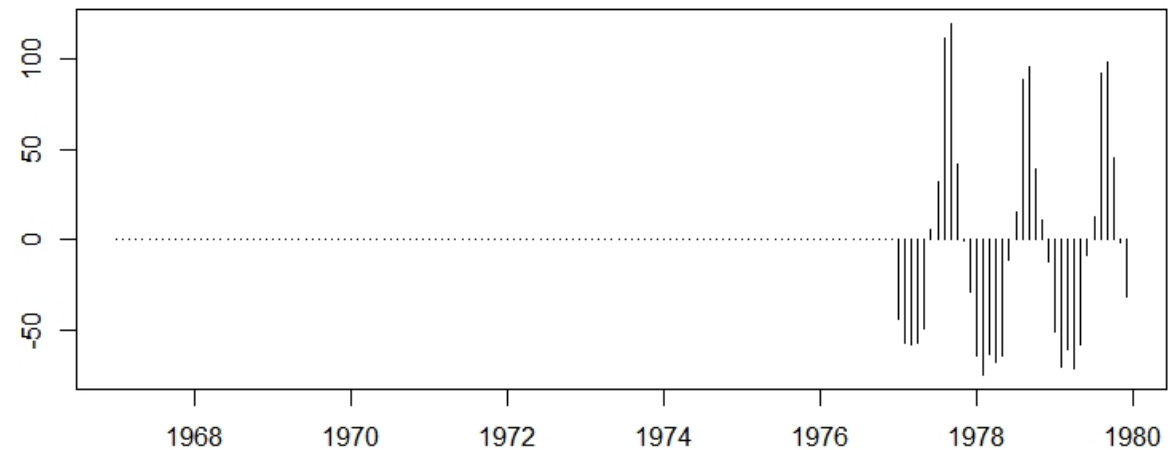
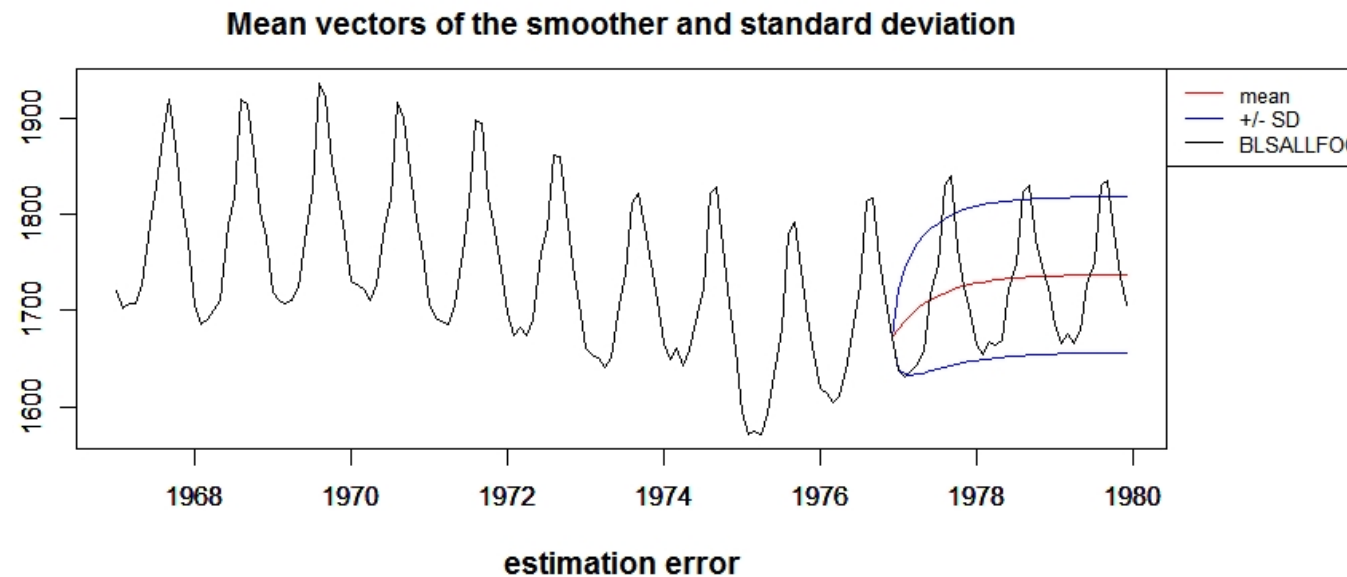
Rによる長期予測 (AR次数 = 1)

```
# AR order=1
#
BLS120 <- BLSALLFOOD[1:120]
z1 <- arfit(BLS120, plot = FALSE, lag=1)
tau2 <- z1$sigma2
arcoef <- z1$arcoef

m1 <- z1$maice.order
f <- matrix(0.0e0, m1, m1)
f[1, ] <- arcoef[1:m1]
if (m1 != 1)
  for (i in 2:m1) f[i, i-1] <- 1
g <- c(1, rep(0.0e0, m1-1))
h <- c(1, rep(0.0e0, m1-1))
q <- tau2[m1+1]
r <- 0.0e0
x0 <- rep(0.0e0, m1)
v0 <- NULL

s1 <- tsmooth(BLS120, f, g, h, q, r, x0, v0,
  filter.end = 120, predict.end = 156)
s1

plot(s1, BLSALLFOOD)
```



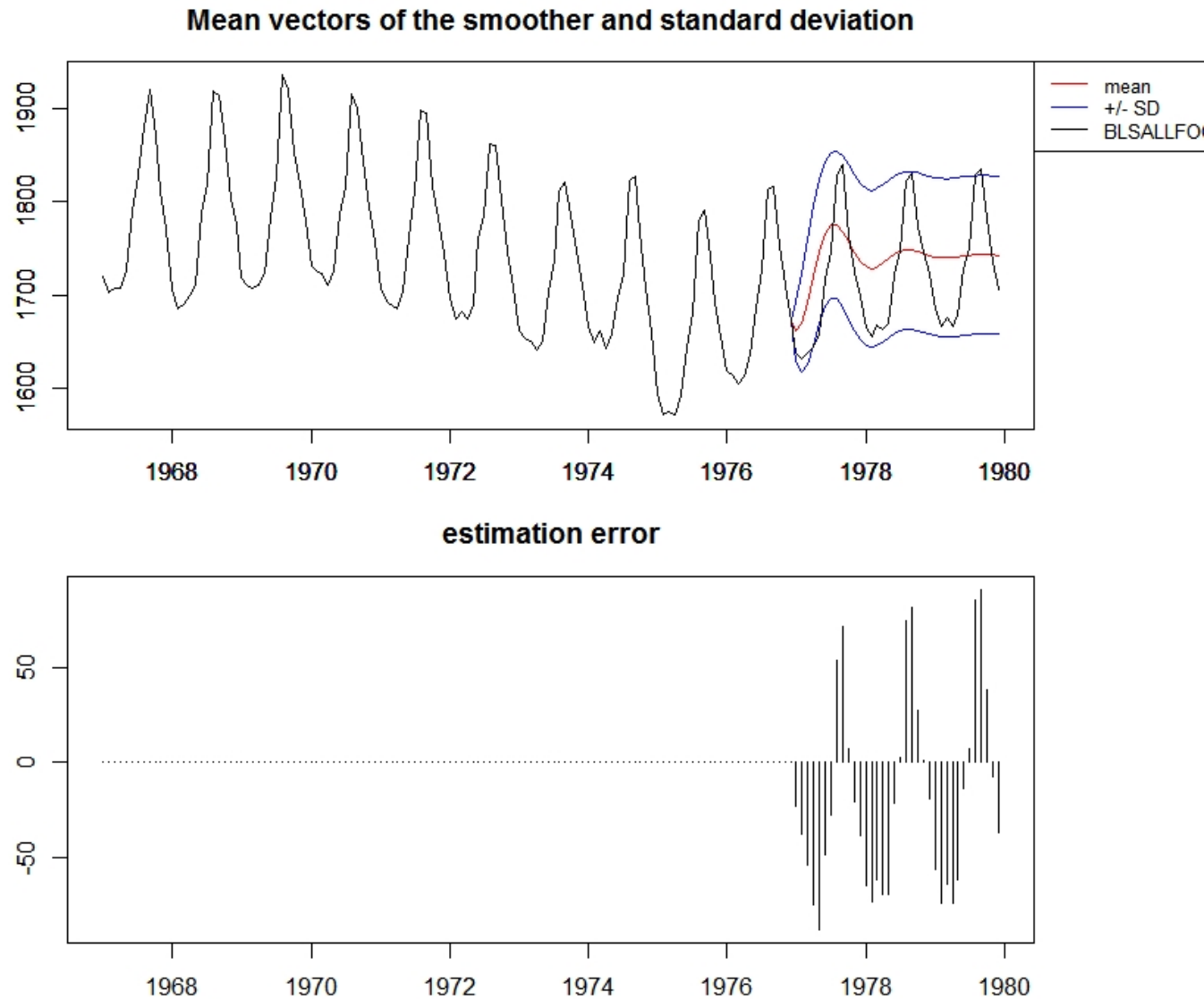
Rによる長期予測 (AR次数 = 5)

```
# AR order=5
#
BLS120 <- BLSALLFOOD[1:120]
z1 <- arfit(BLS120, plot = FALSE, lag=5)
tau2 <- z1$sigma2
arcoef <- z1$arcoef

m1 <- z1$maice.order
f <- matrix(0.0e0, m1, m1)
f[1, ] <- arcoef[1:m1]
if (m1 != 1)
  for (i in 2:m1) f[i, i-1] <- 1
g <- c(1, rep(0.0e0, m1-1))
h <- c(1, rep(0.0e0, m1-1))
q <- tau2[m1+1]
r <- 0.0e0
x0 <- rep(0.0e0, m1)
v0 <- NULL

s1 <- tsmooth(BLS120, f, g, h, q, r, x0, v0,
  filter.end = 120, predict.end = 156)
s1

plot(s1, BLSALLFOOD)
```



状態推定の問題(再掲)

データ Y_j に基づき x_n 状態
を推定する.

条件付き分布 $p(x_n | Y_j)$

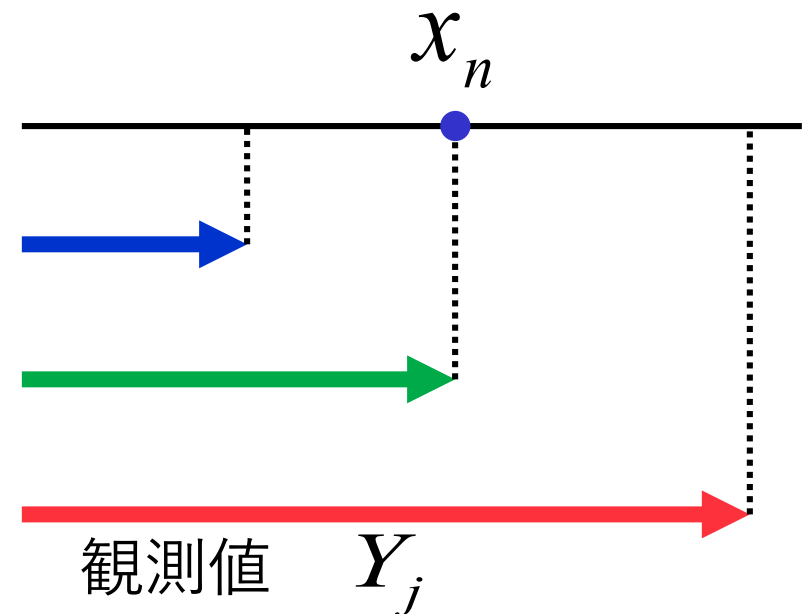
$$Y_j \equiv \{y_1, \dots, y_j\}$$

時刻 j までの観測値

$j < n$ の場合：予測

$j = n$ の場合：フィルタ

$j > n$ の場合：平滑化



平滑化の問題

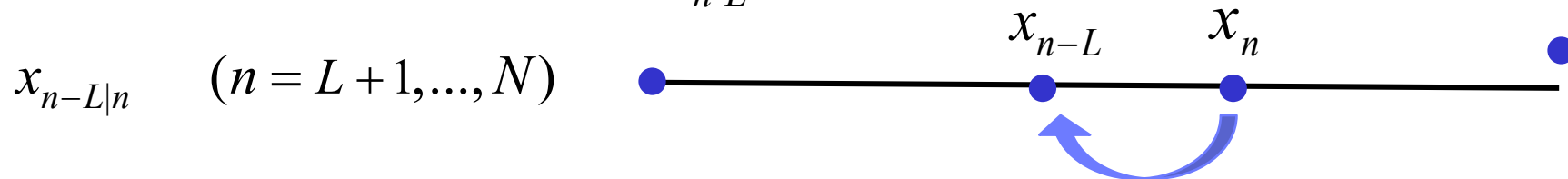
- Y_j に基づき x_n を推定する問題 ($j > n$)

- 3種類の平滑化

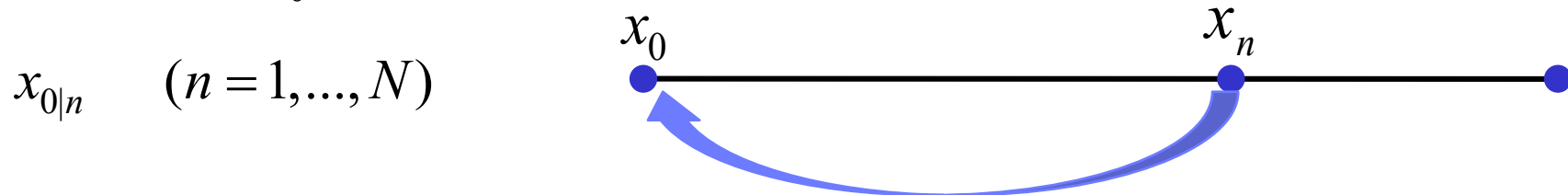
- 固定区間平滑化: x_N までのデータがあるとき x_n を推定



- 固定ラグ平滑化: L 時点前の状態 x_{n-L} を推定



- 固定点平滑化: x_0 などの固定した時点の状態を推定



固定ラグ平滑化と固定点平滑化

$$x_n = F_n x_{n-1} + G_n v_n$$

$$y_n = H_n x_n + w_n$$

固定ラグ平滑化と固定点平滑化は状態空間モデルを拡大すればカルマンフィルタで計算できる。

固定ラグ平滑化

$$z_n = \begin{bmatrix} x_n \\ x_{n-1} \\ \vdots \\ x_{n-L} \end{bmatrix} \quad \bar{F}_n = \begin{bmatrix} F_n & & & \\ & I & & \\ & & \ddots & \\ & & & I & O \end{bmatrix} \quad \bar{G}_n = \begin{bmatrix} G_n \\ O \\ \vdots \\ O \end{bmatrix}$$

$$\bar{H}_n = [H_n \quad O \quad \cdots \quad O]$$

$$z_n = \bar{F}_n z_{n-1} + \bar{G}_n v_n$$

$$y_n = \bar{H}_n z_n + w_n$$

固定ラグ平滑化と固定点平滑化

$$x_n = F_n x_{n-1} + G_n v_n$$

$$y_n = H_n x_n + w_n$$

固定点平滑化

$$z_n = \begin{bmatrix} x_n \\ x_0 \end{bmatrix} \quad \bar{F}_n = \begin{bmatrix} F_n & \\ & I \end{bmatrix} \quad \bar{G}_n = \begin{bmatrix} G_n \\ O \end{bmatrix}$$

$$\bar{H}_n = [H_n \quad O]$$

$$z_n = \bar{F}_n z_{n-1} + \bar{G}_n v_n$$

$$y_n = \bar{H}_n z_n + w_n$$

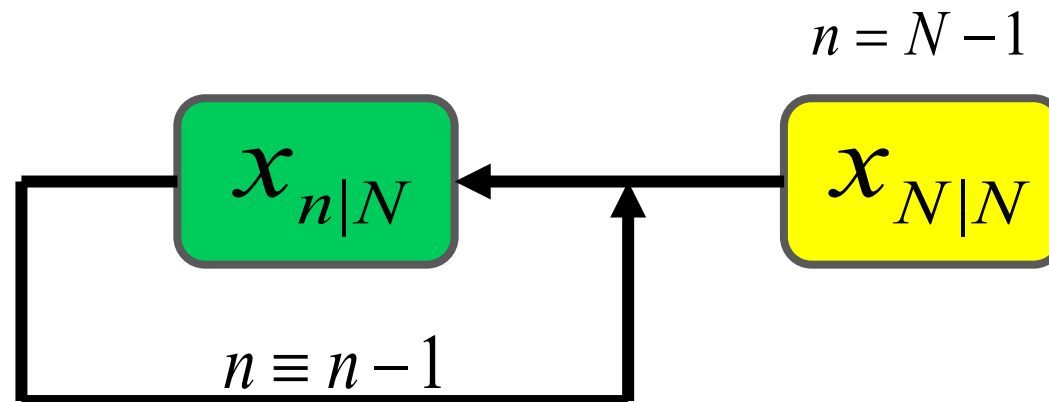
特別のアルゴリズムが必要なのは**固定区間平滑化**のみ

固定区間平滑化

$$A_n = V_{n|n} F_{n+1}^T V_{n+1|n}^{-1}$$

$$x_{n|N} = x_{n|n} + A_n (x_{n+1|N} - x_{n+1|n})$$

$$V_{n|N} = V_{n|n} + A_n (V_{n+1|N} - V_{n+1|n}) A_n^T$$



平滑化アルゴリズムの導出

$\delta_{n+1} \equiv x_{n+1} - x_{n+1|n}$ x_{n+1} の予測誤差

$$Z_n \equiv Y_n \oplus \delta_{n+1|n} \oplus \{v_{n+1}, \dots, v_N, w_{n+1}, \dots, w_N\}$$

とすると

$$\begin{aligned} z_n &\equiv \text{Proj}(x_n | Z_n) \\ &= \text{Proj}(x_n | Y_n) + \text{Proj}(x_n | \delta_{n+1}) \\ &\quad + \text{Proj}(x_n | v_{n+1}, \dots, v_N, w_{n+1}, \dots, w_N) \end{aligned}$$

と分解でき、さらに

$$\text{Proj}(x_n | Y_n) = x_{n|n}$$

$$\text{Proj}(x_n | \delta_{n+1}) = \text{Cov}(x_n, \delta_{n+1}) \text{Var}(\delta_{n+1})^{-1} \delta_{n+1}$$

$$\text{Proj}(x_n | v_{n+1}, \dots, v_N, w_{n+1}, \dots, w_N) = 0$$

$$\text{Var}(\delta_{n+1}) = V_{n+1|n}$$

$$\begin{aligned} \text{Cov}(x_n, \delta_{n+1}) &= \text{Cov}(x_n, F_{n+1}(x_n - x_{n|n}) + G_{n+1}v_{n+1}) \\ &= E((x_n - x_{n|n})^T (x_n - x_{n|n})) F_{n+1}^T \\ &= V_{n|n} F_{n+1}^T \end{aligned}$$

$$A_n = V_{n|n} F_{n+1}^T V_{n+1|n}^{-1} \text{とおくと}$$

$$z_n = x_{n|n} + A_n (x_{n+1} - x_{n+1|n})$$

Z_n が Y_n を生成するので

$$x_{n|N} = \text{Proj}(x_n | Y_N)$$

$$= \text{Proj}(\text{Proj}(x_n | Z_n) | Y_N)$$

$$= \text{Proj}(z_n | Y_N)$$

$$= x_{n|n} + A_n (x_{n+1|N} - x_{n+1|n})$$

平滑化アルゴリズムの導出 (続)

$$x_n - x_{n|N} + A_n x_{n+1|N} = x_n - x_{n|n} + A_n x_{n+1|n}$$

$$E\{(x_n - x_{n|N})x_{n+1|N}^T\} = E\{(x_n - x_{n|n})x_{n+1|n}^T\} = 0$$

となるので

$$V_{n|N} + A_n E\{x_{n+1|N}x_{n+1|N}^T\}A_n^T = V_{n|n} + A_n E\{x_{n+1|n}x_{n+1|n}^T\}A_n^T \quad (*)$$

$$E\{(x_{n+1} - x_{n+1|N})x_{n+1|N}^T\} = 0$$

$$E\{(x_n - x_{n|n})x_{n+1|n}^T\} = 0$$

$$E\{x_{n+1|N}x_{n+1|N}^T\}$$

$$= E\{(x_{n+1|N} - x_{n+1} + x_{n+1})(x_{n+1|N} - x_{n+1} + x_{n+1})^T\}$$

$$= V_{n+1|N} + E\{x_{n+1}x_{n+1}^T\} + 2E\{(x_{n+1|N} - x_{n+1})x_{n+1}^T\}$$

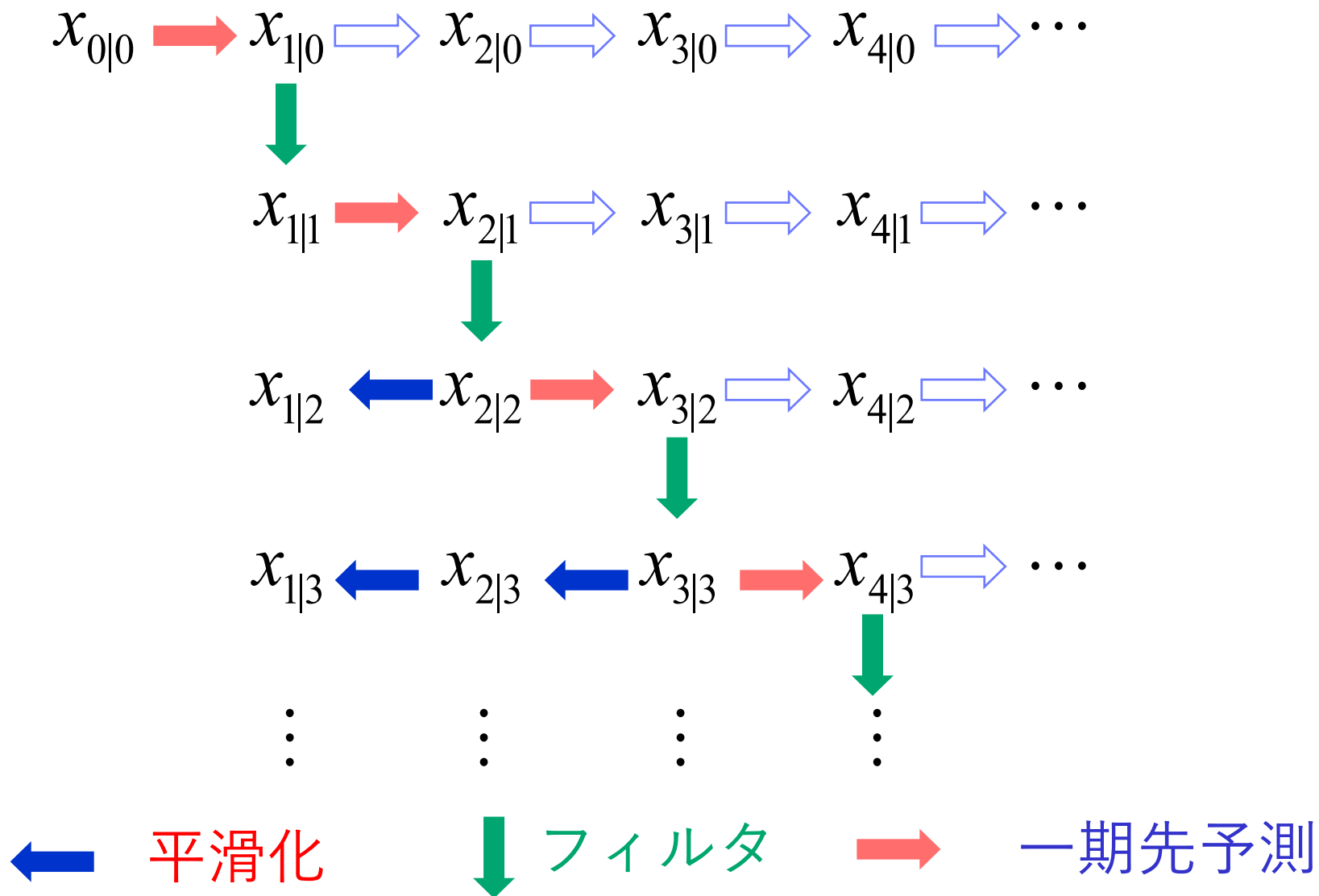
$$= V_{n+1|N} + E\{x_{n+1}x_{n+1}^T\} - 2E\{(x_{n+1|N} - x_{n+1})(x_{n+1|N} - x_{n+1})^T\}$$

$$= E\{x_{n+1}x_{n+1}^T\} - V_{n+1|n}$$

これを (*) に代入して

$$V_{n|N} = V_{n|n} + A_n (V_{n+1|N} - V_{n+1|n})A_n^T$$

カルマンフィルタと平滑化



平滑化アルゴリズムの利用

- 状態推定・成分分解（トレンド推定, 季節調整など）
 - • • 次回以降
- 欠測値の処理

特徴

- フィルタよりも精度の良い推定が可能
- リアルタイム計算はできない（固定ラグ平滑化は準リアルタイム）