

異常値を含む時系列の異常値検出と予測について

九州大学 工学部 上田 年比古
九州大学 工学部 神野 健二
九州大学 工学部 ○河村 明
農林水産省 高吉 晋吾

1. はじめに

自然現象や生体も含めたより広範なシステムの同定問題を考える場合、システムの特性要素に異常値を含む場合を考慮する必要がしばしばある。例えば、年降水量の時系列にみられる少雨化傾向¹⁾などの気候変動は、降水システムの動特性に異常を生じ、システムが変化したとして数学的記述を行う方が、実系をより忠実に表現できると考えられる。このような異常現象に対しては、どのように配慮を行っても事前に異常を予測しこれを回避することは非常に困難である。従って、事前に予測することが困難ないわゆる異常値、あるいは少なくとも状態を記述するシステムモデルでは表現できない系の変化に対しては、異常値が発生した時刻やその異常値の規模の早急な検出および推定を定量的に行い、対応策を立てることが望まれよう。

さて、現在、線形推定理論の1つとしてカルマンフィルターは、広範囲の分野で多くの問題に応用されている。水資源の分野においても、日野氏²⁾が水文流出予測にカルマンフィルターを適用して以来、さまざまな文献に見受けられるようになり一般的な手法になりつつある。しかし、定常な誤差統計値をもつ通常のカルマンフィルターのフィードバック機構では、先に述べたような異常値が存在する場合には、その異常値系列に追隨することができず、将来予測に大きな誤差を生じることになる。これに対して近年、一般化尤度比検定法をカルマンフィルターと融合した形で用いて、システムに異常値が生じた場合の異常値発生時刻およびその異常値の規模を推定するいわゆる適応的フィルタリング法の研究が盛んになりつつある。^{3) 4)} この手法は、通常のカルマンフィルターではシステムの異常をパラメータの異常として敏感に表現できない場合でも、パラメータの異常値を推定することによってシステムへの素早い追隨を可能にするものと考えられている。Kitanidis and Bras⁴⁾は、河川の降雨流出をオンラインで予測する場合に、この適応的フィルタリング法を用いると予測精度の向上が得られると述べている。

ところで、周期関数による時系列の表示は既に多くの工学の分野でシステムの動特性として採用されていて、異常値の検出をスペクトルの変化として検出することが多い。⁵⁾ また、山本義一編「気候変動」¹⁾のテキストにも見られるように、自然現象にはその時系列が周期関数で表される場合も少なくない。

本報では、周期関数で表される時系列を対象に適応的フィルタリング法を適用し、その有効性を検討した。すなわち、一定のパターン変動を繰り返す時系列に異常値が発生する場合を模擬させ、異常値の発生時刻およびその大きさを推定する。次に、システムパラメータをそれに応じて修正する場合と通常のカルマンフィルターでパラメータ推定を行う場合との同定結果および予測精度を比較検討した。なお、計算機の記憶容量の軽減と演算時間の短縮のための簡易的な方法も示している。

2. 解析手法

(1) 通常のカルマンフィルター（詳しくは参考文献6）などを参照されたい）

これは(1)式のようなダイナミクスで表されるシステムの状態量 x を推定するのに適用される理論で、そのシステム状態量は(2)式の観測方程式を通してのみ観測される。

$$\text{システム方程式} : \quad x(k+1) = \Phi(k) x(k) + \Gamma(k) u(k) \quad \dots \dots \quad (1)$$

$$\text{観測方程式} : \quad y(k) = H(k) x(k) + w(k) \quad \dots \dots \quad (2)$$

ここに、 $x(k+1)$: システムの状態ベクトル (n次元ベクトル)

$y(k)$: 観測ベクトル (m次元ベクトル ($m \leq n$))

$u(k)$: システム雑音。平均 0 で分散行列 $U(k)$ の独立な正規性白色雑音 (p 次元ベクトル)

$w(k)$: 観測雑音。平均 0 で分散行列 $W(k)$ の独立な正規性白色雑音 (m 次元ベクトル)

$\Phi(k)$: 既知の状態遷移行列 ($n \times n$ 行列) $\Gamma(k)$: 既知の変換行列 ($n \times p$ 行列)

$H(k)$: 既知の観測行列 ($m \times n$ 行列) k : 時点

x の最適推定値は、 $\hat{x}(0|0)$ 、 $P(0|0)$ を初期値として与えると、以下の(3)～(12)式を順次計算することにより、各時点毎に逐次求めることができる。

$$\hat{x}(k+1|k) = \Phi(k) \hat{x}(k|k) \quad \dots \dots \quad (3) \quad \hat{y}(k+1|k) = H(k) \hat{x}(k+1|k) \quad \dots \dots \quad (4)$$

$$\tilde{x}(k+1|k) \triangleq x(k+1) - \hat{x}(k+1|k) \quad \dots \dots \quad (5)$$

$$P(k+1|k) \stackrel{\triangle}{=} E[\tilde{x}(k+1|k) \tilde{x}'(k+1|k)] = \Phi(k) P(k|k) \Phi'(k) + \Gamma(k) U(k) \Gamma'(k) \quad \dots \dots \quad (6)$$

$$v(k+1) \stackrel{\triangle}{=} y(k+1) - \hat{y}(k+1|k) \quad \dots \dots \quad (7)$$

$$V(k+1) \triangleq E[V(k+1) | v'(k+1)] = H(k+1)P(k+1|k)H'(k+1) + w(k+1) \quad \dots \dots \quad (8)$$

$$K(k+1) = P(k+1|k) H(k+1) V^{-1} \quad \dots \dots \quad (9)$$

$$\hat{x}(k+1|k+1) = \hat{x}(k+1|k) + K(k+1)v(k+1) \quad \dots\dots \quad (10)$$

$$\tilde{x}(k+1|k+1) \triangleq x(k+1) - \hat{x}(k+1|k+1) \quad \dots \dots \quad (11)$$

$$P(k+1|k+1) \triangleq E[\tilde{x}(k+1|k+1) \tilde{x}'(k+1|k+1)] = [I - K(k+1) H(k+1)] P(k+1|k) \quad \cdots \cdots \quad (12)$$

ここに、 $\hat{x}(k+1|k)$: k 時点までの観測情報による $x(k+1)$ の最適推定値

ここに、 $\hat{x}(k+1|k)$: k 時点までの観測情報による $x(k+1)$ の最適推定値

$\hat{y}(k+1|k)$: k 時点までの観測情報による $y(k+1)$ の最適推定値

$K(k+1)$: カルマンゲインマトリックス ($n \times m$ 行列)

$v(k+1)$: 1時点先の観測量の予測残差(イノベーションと呼ばれている) (m次元ベクトル)

': 転置記号 \triangle : 定義 I : 単位行列 ($n \times n$ 行列) E[] : 期待値演算

(2) 適応的フィルタリング法^{3) 4)}

この手法は(13)式のようなダイナミクスで表されるシステムの状態量を推定するのに適用される手法である。(13)式は通常のカルマンフィルターのシステム方程式に異常値項 $G(k)\delta_{0k}\delta v(k)$ を含んだ形となっている。観測方程式は通常のカルマンフィルターの観測方程式と同じである。

$$\text{システム方程式 : } x(k+1) = \Phi(k)x(k) + \Gamma(k)u(k) + G(k)\delta_{\theta k}\delta v(k) \quad \dots \dots (13)$$

ここで, $G(k) \delta_{\theta k} \delta v(k)$: 未知の独立した異常値項

$G(k)$: 既知の重みベクトル (n次元ベクトル)

θ : 実際に異常値の発生した時点

$\delta_{\theta k}$: クロネッカーデルタ $\delta_{\theta k} = \begin{cases} 1 & (k=\theta) \\ 0 & (k \neq \theta) \end{cases}$
 $\delta v(k)$: k 時点における未知の異常値量 (スカラー)

この手法は、一般化尤度比検定法により異常値の有無を検定し、もし異常値が検出されればその発生時点およびその大きさを推定し、異常値の大きさに応じて状態量を修正するものである。以下に異常値検出から修正までの諸式を示すが、ここでは、実際の時系列の観測量がスカラーであることと簡単化のため観測量 $y(k)$ はスカラーとする。なお $y(k)$ がベクトルの場合も同様に誘導できる。(13)式は 2 つの仮説に分けることができる。仮説 H_0 ：異常値 $\delta v(k)$ が発生していない。仮説 H_1 ： $k = \theta$ において異常値 $\delta v(k)$ が発生している。仮説 H_0 の下では通常のカルマンフィルターによりシステム状態量を推定する。一方仮説 H_1 の場合は、システムの線形性よりイノベーション $v(k)$ は以下のように異常値の影響を受ける項と受けない項(添字 0 で示す)に分離することができる。異常値の影響を受けない項とは異常値が発生していないとした場合の値のことである。

$$v(\theta + i) = v_o(\theta + i) + A(\theta, \theta + i) \delta v(\theta) \quad \dots \dots \quad (14)$$

ここに、

$$A(\theta, \theta+i) \stackrel{\triangle}{=} H(\theta+i) \Psi(\theta, \theta+i) G(\theta) \quad \dots \dots \quad (15)$$

$$\Psi(\theta, \theta+i) \triangleq \begin{cases} \Phi(\theta+i-1) [I - K(\theta+i-1) H(\theta+i-1)] \Psi(\theta, \theta+i-1) & (\text{if } i \geq 2) \\ I & (\text{n} \times n \text{行列}) \\ 0 & (\text{if } i=1) \\ 0 & (\text{if } i \leq 0) \end{cases} \dots \dots \quad (16)$$

また、イノベーションの期待値と分散を求める以下のようにになる。

$$E[v_0(\theta+i)] = 0 \quad \dots \dots \quad (17) \quad E[v(\theta+i)] = A(\theta, \theta+i) \delta v(\theta) \quad \dots \dots \quad (18)$$

$$\text{Var}[v_0(\theta+i)] = \text{Var}[v(\theta+i)] = H(\theta+i) P(\theta+i | \theta+i-1) H'(\theta+i) + W(\theta+i) \triangleq \sigma^2(\theta+i) \quad \dots \dots \quad (19)$$

ここで、イノベーション $v(\theta+i)$ は正規分布を成す $u, w, x(0)$ の線形関数であるから、正規分布を成している。よって、 $v(\theta+i)$ ($i=1, 2, \dots, l$) がお互いに独立であるので、仮説 H_0 の下で一連のイノベーション $v(\theta+1), v(\theta+2), \dots, v(\theta+l)$ が同時に生起する同時確率密度 $p(v(\theta+1), \dots, v(\theta+l) | H_0)$ および仮説 H_1 の下で $\delta v(\theta)$ の大きさの異常値が発生したときの同時確率密度 $p(v(\theta+1), \dots, v(\theta+l) | H_1, \delta v(\theta))$ は (17), (18), (19) 式の平均と分散をもつ正規確率密度の積となり、(20), (21) 式のようになる。

$$p(v(\theta+1), \dots, v(\theta+l) | H_0) = \prod_{i=1}^l \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma(\theta+i)} \exp\left[-\frac{v^2(\theta+i)}{2\sigma^2(\theta+i)}\right] \quad \dots \dots \quad (20)$$

$$p(v(\theta+1), \dots, v(\theta+l) | H_1, \delta v(\theta)) = \prod_{i=1}^l \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma(\theta+i)} \exp\left[-\frac{(v(\theta+i) - A(\theta, \theta+i) \delta v(\theta))^2}{2\sigma^2(\theta+i)}\right] \quad (21)$$

(20) 式と (21) 式の比を尤度比 $\Lambda(\theta, \delta v(\theta), l)$ と定義すると以下のようにになる。

$$\Lambda(\theta, \delta v(\theta), l) \triangleq \frac{p(v(\theta+1), \dots, v(\theta+l) | H_1, \delta v(\theta))}{p(v(\theta+1), \dots, v(\theta+l) | H_0)} = \exp[\phi(\theta, l) \delta v(\theta) - \frac{1}{2} \mu(\theta, l) \delta v^2(\theta)] \quad (22)$$

$$\text{ここで, } \phi(\theta, l) \triangleq \sum_{i=1}^l v(\theta+i) A(\theta, \theta+i) / \sigma^2(\theta+i) \quad \dots \dots \quad (23)$$

$$\mu(\theta, l) \triangleq \sum_{i=1}^l A^2(\theta, \theta+i) / \sigma^2(\theta+i) \quad \dots \dots \quad (24)$$

そこで (22) 式を微分して 0 とおけば, $\delta v(\theta)$ の最尤推定値 $\hat{\delta v}(\theta)$ が (25) 式のように求められる。

$$\hat{\delta v}(\theta) = \phi(\theta, l) / \mu(\theta, l) \quad \dots \dots \quad (25)$$

さらに (22) 式は $\delta v(\theta)$ の関数であるので, $\delta v(\theta)$ のかわりに $\hat{\delta v}(\theta)$ を用いれば (22) はある定まった値となり, これが一般化尤度比と定義され (26) 式のようになる。

$$\Lambda g(\theta, l) \triangleq \Lambda(\theta, \hat{\delta v}(\theta), l) = \exp[\phi^2(\theta, l) / 2\mu(\theta, l)] \quad \dots \dots \quad (26)$$

この (26) 式の一般化尤度比の大きさにより仮説 H_0, H_1 のいずれを受容するかを決定するのが一般化尤度比検定である。すなわち, (26) 式があるしきい値よりも大きければ仮説 H_1 を受容し, 小さければ仮説 H_0 を受容することになる。これは (27) 式で定義される $\phi_{**}(\theta, l)$ としきい値 η の大小を検定することと等価である。よって (28) 式で異常値発生の有無を検定する。以後 $\phi_{**}(\theta, l)$ を異常検出指標と呼ぶことにする。

$$\phi_{**}(\theta, l) \triangleq \sqrt{2 \ln \Lambda g(\theta, l)} = |\phi(\theta, l)| / \sqrt{\mu(\theta, l)} \quad \dots \dots \quad (27) \quad \phi_{**}(\theta, l) \stackrel{H_1}{>} \stackrel{H_0}{<} \eta \quad \dots \dots \quad (28)$$

異常値発生時点 θ が既知であれば, 以上的方法で異常値の有無の検定およびその大きさの推定を行えばよい。さらに, 異常値発生時点 θ の最尤推定値 $\hat{\theta}$ を求めるには, (26) 式の一般化尤度比を最大にする時点 k を求め, これを $\hat{\theta}$ とすることにより求められる。すなわち (29) 式で $\hat{\theta}$ を求めることができる。

$$\hat{\theta} = \max_k \Lambda g(k, l) = \max_k \phi_{**}(k, l) \quad \dots \dots \quad (29)$$

(29) 式で $\hat{\theta}$ を決定するには, 各時点毎に変化する非定常な異常検出指標を現時点以前のすべての時点について計算する必要がある。これは, ある時点 $k=k_1$ における異常検出指標 $\phi_{**}(k_1, l)$ の値は, 時間ステップが進むと共に新しいイノベーションが次々と入力されるので, l の値も次々と大きくしなければならず, そのため異常検出指標の値も刻々変化するからである。この計算の実行は, 時点 k の進行と共に記憶容量および演算時間を増大させるので, 通常は有限なデータ幅 N を考え, 現時点より N 時点以内の異常検出指標のみを計算することになる。そこで本報では, 若干異常値検出の精度は低くなることも考えられるが,

l をパラメータとして与えある値に固定することにより、異常検出指標の値を時点の進行と共に変化させず定常値として計算する。こうすれば、現時点の情報より得られる最新の異常検出指標 $\phi_{\text{new}}(k, l)$ と、それ以前の時点で計算されている異常検出指標の最大値 $\phi_{\text{old}}(k, l)$ との2つの値の大小関係のみを比較すればよく、データ幅を考慮する必要もなく、また、ある時点の異常検出指標を時点の進行と共に繰り返し計算する必要もないで、記憶容量の軽減および演算時間の短縮になり実用的である。 l を固定することの妥当性は、(20), (21), (22)式において、これらの統計的性質が、イノベーション系列の個数 l の増減に関係しないからである。

以上の一般化尤度比検定法により異常値が検出されると、これに対してフィルターを適応させるために状態推定量を(30)式のように修正し、また $\delta v(\theta)$ の推定の不正確さを補うために、推定誤差共分散行列を(31)式のように修正する。新しく修正されたものに添字new、修正前のものに添字oldを付ける。

$$\hat{x}_{\text{new}}(\theta+i|\theta+i) = \hat{x}_{\text{old}}(\theta+i|\theta+i) + \Delta(\theta, \theta+i) \delta \hat{v}(\theta) \quad \dots \dots \dots (30)$$

$$P_{\text{new}}(\theta+i|\theta+i) = P_{\text{old}}(\theta+i|\theta+i) + \Delta(\theta, \theta+i) \Delta'(\theta, \theta+i) / \mu(\theta, l) \quad \dots \dots \dots (31)$$

ここで、 $\Delta(\theta, \theta+i) \triangleq [I - K(\theta+i)H(\theta+i)] \Psi(\theta, \theta+i) G(\theta) \quad (\text{スカラー}) \quad \dots \dots \dots (32)$
なお、修正はオフラインで計算できる。

3. 計算例

(33)式により、平均値、周期成分およびランダム成分の和で表される時系列を模擬発生させた。

$$y(k) = M_y + \sum_{i=1}^m (A_i \sin 2\pi f_i k + B_i \cos 2\pi f_i k) + w(k) \quad \dots \dots \dots (33)$$

ここに、 M_y ：時系列の平均値、 m ：周期成分の個数、 k ：時点

f_i ：周波数成分、 A_i, B_i ： f_i に対する振幅、

$w(k)$ ：平均0の正規性白色雑音

なお、この時系列モデルの採用にあたってはSenの研究⁷⁾を参考にした。正常時の時系列を模擬発生させるのに、以下のようにして卓越周波数を求めた。まず福岡気象台の明治23年から昭和53年までの89年間の日降水量記録から旬平均降水量(mm/day)を計算し、3204個の旬平均降水量時系列にMEM(最大エントロピー法)を用いてスペクトル解析を行った。その結果図-1のように4つの卓越したピークが表れた。これらは、36旬、9旬、7.2旬、6旬の周期をもつ波である。そこで、(33)式において、 $m=4, [f_1, f_2, f_3, f_4] = [1/36, 1/9, 1/7.2, 1/6]$ と設定した。時間ステップ $k=72$ 時点で異常が発生したとし、 $k \leq 72$ では、上記の4本の周期の周波数を用いて、最小二乗法により求めた平均 M_y および各周波数成分の係数 A_i, B_i (表-1上段値)を、また $k \geq 73$ では M_y, A_i, B_i を表-1下段のように適当に変化させた。ここで、ケース1では(33)式の正規性白色雑音 $w(k)$ が存在しない場合を考え、ケース2では $w(k)$ として $N(0, 0.5)$ の正規乱数を与えた。これは正常時の時系列の最大振幅の約1/10の標準偏差をもつ正規性白色雑音に相当する。次に、適応的フィルタリング法において(13)式の $G(k)$ を表-1の上段と

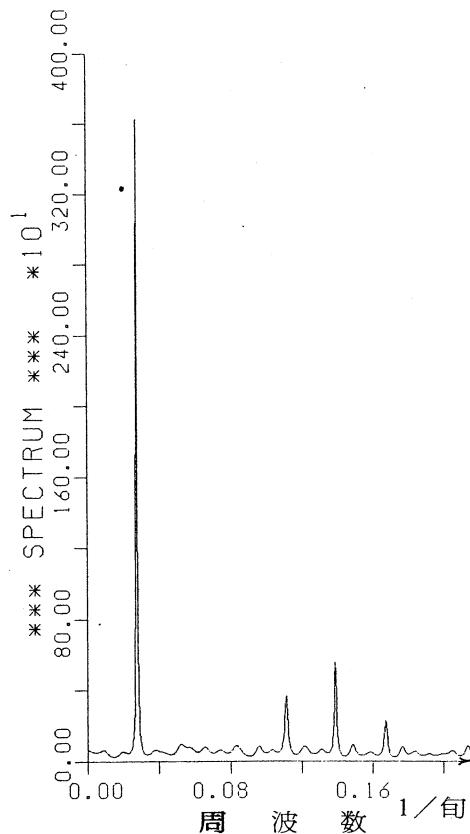


図-1 福岡市旬平均降水量のMEMによるスペクトル

表-1 模擬発生に用いたパラメーターの値

平均及び振幅 時点	M_y	A_1	B_1	A_2	B_2	A_3	B_3	A_4	B_4
$k \leq 72$	4.5	-0.7	-2.5	0.0	1.2	-0.6	-1.1	0.6	0.6
$73 \leq k \leq 180$	4.0	0.0	-2.0	1.2	0.0	-0.3	-1.1	0.3	0.1

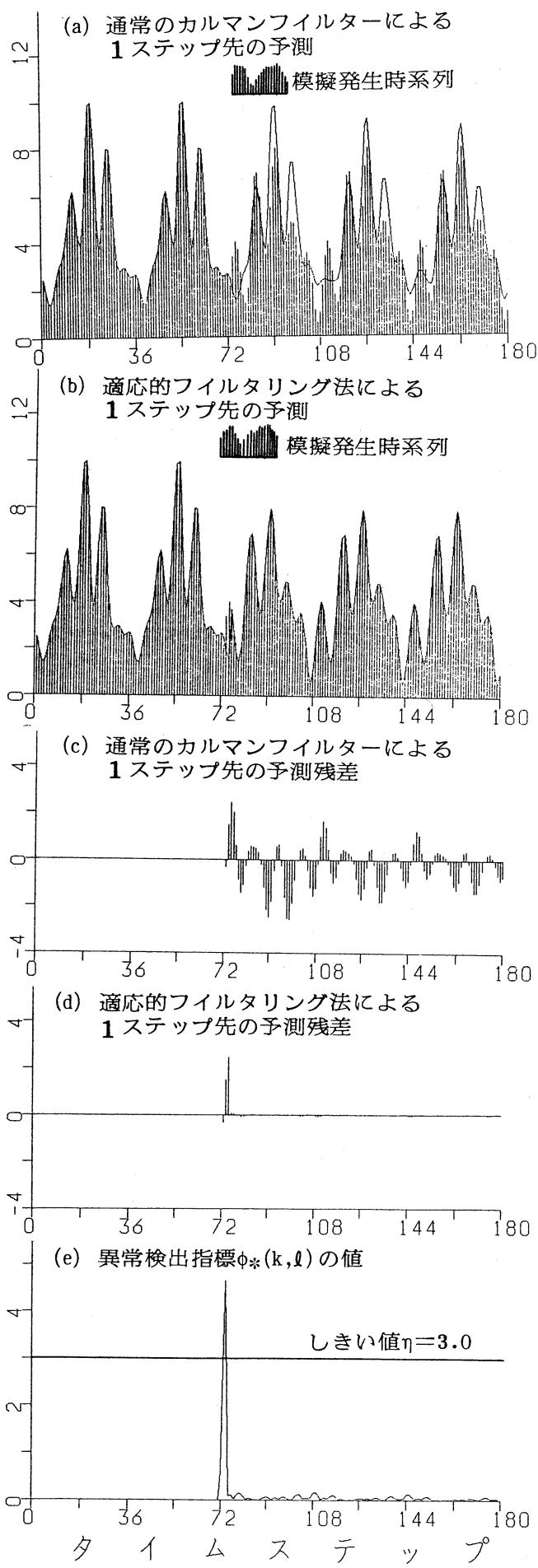


図-2 ケース1の結果

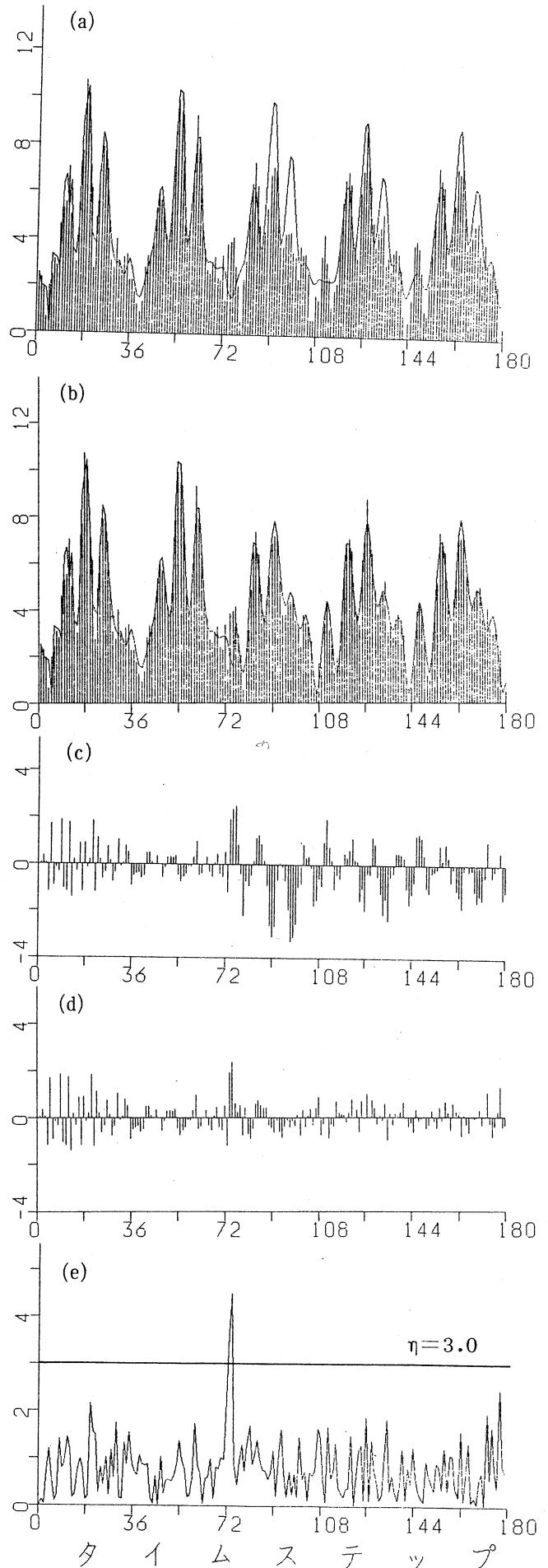


図-3 ケース2の結果

下段の値の差として $G(k) = [0.5 \ -0.7 \ -0.5 \ -1.2 \ 1.2 \ -0.3 \ 0.0 \ 0.3 \ 0.5]$ を与えた。以上より、 $\theta = 72$, $\delta v(\theta) = -1.0$ の異常値を発生させたことになり、本手法でこれらが検出できることを期待したものである。データ蓄積個数を示すパラメータは $l=1$, しきい値は $\eta=3$ とした。また、(1), (2), (13)式のシステム方程式および観測方程式の各諸量は、 $x(k) = [M_y \ A_1 \ B_1 \ \dots \ A_4 \ B_4]$, $\Phi(k) = I$, $\Gamma(k) = I$, $H(k) = [1 \ \sin 2\pi f_1 k \ \cos 2\pi f_1 k \ \dots \ \sin 2\pi f_4 k \ \cos 2\pi f_4 k]$, $U = 0$, $W = 0.25$ である。以上により、ケース1, 2の模擬発生時系列に対して、通常のカルマンフィルターおよび適応的フィルタリング法で1ステップ先を予測した値を図-2, 3の(a)および(b)に示す。また、これらの1ステップ先の予測残差(イノベーション)を図-2, 3の(c)および(d)に示す。(27)式の異常検出指標の値は図-2, 3の(e)に示している。

4. 考察

以上の計算結果より、通常のカルマンフィルターでは異常値時系列にゆっくりとしか追随できず図-2, 3の(e)に示すように大きな予測残差を生ずることが分かる。これに対して、適応的フィルタリング法では、ケース1の場合 $\hat{\theta} = 74$, $\delta v(\hat{\theta}) = -0.96$, ケース2の場合 $\hat{\theta} = 74$, $\delta v(\hat{\theta}) = -0.93$ と異常値を検出して状態量を修正したので、異常値時系列によく追随しており、1ステップ先の予測残差もかなり小さくなっている。この場合、ケース1の雑音のない時系列の場合でも異常値発生時点の推定が2時点程ずれているが、これは、これらの計算例では、異常値が発生してもすぐにはイノベーションが大きくならなかつたため、異常検出指標のピークが実際の異常値発生時点よりも少し遅れて表れたためであり、また、この場合の検定では、データ蓄積個数 l を最小の1として検定を行ったため、異常値検出の精度が若干悪くなるためである。例えば、ケース1で $l=5$ とした場合には、 $\hat{\theta} = 73$, $\delta v(\hat{\theta}) = -1.00$ となり、一般に異常値の発生時点の推定および大きさの推定の精度は l を大きくすると向上する傾向にある。しかし、異常値検出時点はそれだけ遅れる。次に、時系列に加わる雑音の影響については、図-2, 3の(e)を比較しても分るように、雑音が大きくなる程、異常値発生による異常検出指標の大きさと雑音の影響による異常検出指標の大きさの差が縮まってくる。余りに雑音が大きい場合には、異常値発生による異常検出指標のピークは完全に雑音の影響による異常検出指標の中に埋れてしまい、異常値を検出することができなくなる。この適応的フィルタリング法は、異常値がシステム状態量の各要素に及ぼす比率が、なんらかの方法で推定されなければならないが、それが可能な場合には、 l を最小の1に設定しても異常値系列によく適合しており、本手法はシステムに予期し得ない突発的異常値が発生した場合の同定および予測に有効な手法であると考えられる。

謝辞 本研究において、本学電気工学科の橋本修輔博士に有益な御助言を頂いたので、ここに深く謝意を表したい。

参考文献

- 1) 山本義一編：気候変動、東京大学出版, pp32~42, 1979年
- 2) 日野幹雄：水文流出系予測へのカルマン・フィルター理論の適用、土木学会論文報告集, 第221号, 1974年1月
- 3) Willsky,A.S., and Jones,H.L., : A Generalized Likelihood Ratio Approach to the Detection and Estimation of Jumps in Linear Systems, IEEE Trans. on A.C., pp108~112, February 1976
- 4) Kitanidis,P.K., and Bras,R.L., : Adaptive Filtering Through Detection of Isolated Transient Errors in Rainfall-Runoff Models, Water Resources Research, Vol.16, No.4, pp740~748, August 1980
- 5) 計測自動制御学会：異状検出予測技術シンポジウム報文集, 1978年11月
- 6) 有本卓：カルマン・フィルター、産業図書, 1977年
- 7) Sen,Z., : Adaptive Fourier Analysis of Periodic-Stochastic Hydrologic Sequences, Journal of Hydrology, pp239~249, 46(1980)