arXiv:2603.00855v1 [cs.LG] 1 Mar 2026

探索时间的可能性：通过遗传算法为多变量时间序列预测提供可信的反事实解释

Gianlucca Zuin 和 Adriano Veloso 米纳斯吉拉斯联邦大学，计算机科学系。巴西贝洛奥里藏特。Kunumi。巴西贝洛奥里藏特。{gianlucca, adriano}@kunumi.com

摘要——**反事实学习在理解和建模复杂动态系统中的因果关系方面展现出良好前景。本文提出了一种新方法，用于多变量时间序列分析和预测中的反事实学习。其主要目标是揭示隐藏的因果关系，并找出实现预期结果的潜在干预措施。所提出的方法结合遗传算法与严格的因果关系检验，以推断并验证时间序列中的反事实依赖关系。具体而言，我们采用格兰杰因果关系来提高所识别因果关系的可靠性，并严格评估其统计显著性。随后，我们结合分位数回归，利用遗传算法发掘这些复杂的因果关系，以投影未来场景。遗传算法与因果关系检验协同作用，确保全面探索数据中存在的时间动态，揭示隐藏的依赖关系，并能够投影假设干预下的结果。我们在真实世界数据上评估了算法的性能，展示了其处理复杂因果关系、揭示有意义的反事实见解，以及预测假设干预下结果的能力。**

索引词—**反事实、时间序列预测、遗传算法**

一、引言

几个世纪以来，人类对另类现实的迷恋始终激发着我们的想象。从科幻小说的篇章到银幕之上，探索不同的可能世界和迥异的未来这一想法始终令我们着迷，也带给我们乐趣。例如，帕斯卡那句著名的话：“如果克´娄巴特拉的鼻子再短一些，´那´么整个地球的面貌都会改变´”（如果克娄巴特拉的鼻子再短一些，整个地球的面貌都会改变）[1]。在虚构作品中，作者以精妙而富有想象力的笔法构筑故事，将我们带入平行宇宙，让我们得以一窥历史以不同方式展开、人物作出不同选择、事件走向与我们所处世界截然不同的世界 [2]。

尽管穿梭于平行维度的想法或许仍属于科幻范畴，但理解和探索另类现实的愿望早已超越了故事叙述。在数据分析和预测建模领域，研究人员和从业者致力于理解并解释复杂系统中的因果关系，例如时间序列数据 [3], [4]。了解影响时间序列数据动态变化的因素，对于金融和经济学 [5] 、医疗保健 [6],以及气候科学 [7]等众多领域至关重要。时间序列模型能够揭示数据中的潜在模式和趋势，从而准确预测未来的变化。然而，解读时间序列数据中变量之间的复杂关系，并揭示驱动特定结果的潜在机制，仍然是一项艰巨的任务 [8]。

在各种解释方法中，反事实因能够提供有助于构建可解释模型的洞见而备受关注，使开发者和用户都能理解复杂系统的决策。在时间序列背景下，反事实解释旨在回答假设性问题：如果特定变量取值不同，或某些事件以不同方式发生，可能会产生什么结果 [9]。这些技术通常被称为“假设”场景，已成为提升可解释性的一种方法 [10]。在这一背景下，时间序列数据中的反事实建模面临着重大挑战。这类系统包含多种共同影响结果的相互依赖变量。此外，时间序列数据的时间属性还会引入滞后效应和非线性动力学。

我们提出一种在时间序列数据中生成反事实解释的方法。具体而言，我们关注多变量反事实预测。也就是说，给定一个目标内生变量和一个假设的预测值，其余所有外生变量应遵循哪些路径才能达到所述未来。为了生成未来场景，我们为每个外生输入变量建立自回归模型，从而能够将其值预测到未来。通过将这些预测作为主模型的输入，我们得到一个将全部数据投射到未来的综合预测。然而，在寻求特定期望结果的反事实解释情境中，我们需要找到在一定误差容限范围内逼近该结果的未来场景。

因此，我们也考虑每个输入变量在合理但概率较低的范围内可能出现的预测。这是一个关键前提，但相关文献往往忽视了这一点。为了探索合理的未来场景空间，我们针对每个

输入变量训练多个分位数回归器，将其作为独立模型来捕捉各自的分布信息。随后，我们采用遗传算法 [11], , 通过迭代演化一组潜在解。结合这些方法，我们能够在庞大的未来可能性空间中进行搜索，推演出与历史数据一致、并满足所需多变量反事实预测及解释约束的场景。本研究与拉丁美洲领先的食品公司 M. Dias Branco 合作开展，使用了该公司运营中的真实世界数据，具体涉及脱臭器工艺中的真空中断。简而言之，真空中断可能严重干扰脱臭过程，导致食品质量问题和运营效率低下。为缓解此类事件并从中恢复，我们将预测模型与实时监控系统集成，以便及时检测并响应。

II. 相关工作

反事实解释有许多优点，但也面临一些挑战 [12], [13]。它们易于人类理解，使用户能够掌握实现预期结果所需的变化。通过为已有事实引入新信息，反事实解释能够提供有用信息，并促进创新性的问题解决。此外，它们还能揭示决策过程，帮助组织确保公平性并遵守法规。然而，针对同一结果可能存在多种解释，这种现象也称为“拉肖蒙效应” [14]-[18], , 可能使选择合适的解释变得困难。判断哪些特征可以采取行动、应当修改，可能带有主观性，并取决于具体情境。

[19] 回顾了反事实文献，并重点介绍了反事实解释的一些关键方法。 [20] 提出了一种通过随机抽样并最小化损失函数来生成反事实解释的方法。该损失由两项组成：反事实实例的预测结果与期望结果之间的二次距离，以及待解释实例与反事实实例之间的距离度量。该优化方法通过搜索整个输入空间，对输入数据进行扰动，直至找到合适且令人满意的反事实实例。然而，这类方法往往涉及外推，可能产生位于数据域之外、不合乎情理的解释 [21]。另一种方法是将采样空间限制在合理的数据范围内，如 [22]所提出的方法。我们可以仅考察历史实例，并在多维特征空间中搜索满足反事实示例条件的邻居。然而，这些方法可能并不适用于时间序列数据。

在多变量时间序列的背景下，应用 [20] 提出的方法会引起担忧。在损失函数的优化过程中，将变量的每个时间状态视为不同的特征，可能会破坏状态之间的时间依赖性，从而产生不合理的反事实。因此，该方法不适合解决此类问题。然而，另一种选择，即[22], 提出的方法，同样不适用。要应用该方法，时间序列需要通过向量化进行展平。然而，这一过程会显著增加数据的维度，使得难以找到既合适又与当前情景高度契合的历史实例。

许多其他研究也致力于解决多变量时间序列的反事实解释问题，然而，它们都缺少一些关键组成部分，而这些组成部分正是我们的方法区别于它们的地方。例如， [23] 使用生成对抗网络为整个时间序列创建反事实情景，并将数据集表示为热力图，但仅处理分类问题。 [24] 和 [25]同样专注于分类问题，情况也是如此。据作者所知，很少有方法关注回归预测，而能将目标连续变量与输入变量一同投影到未来的则更少。因此，我们未能在文献中找到任何有力的基线方法。

还必须提及其他依赖于与我们相似方法的反事实方法，尽管它们未必适用于时间序列。 [26]提出了 CERTIFAI，这是一种与模型和数据无关的方法，通过使用反事实候选种群来生成反事实解释； [27] 提出了 MOC（多目标反事实），该方法同样利用遗传算法，但将反事实搜索表述为一个多目标优化问题；或者是 [28] 提出的遗传反事实解释器（GECO），其通过在变异和交叉操作期间自动考虑合理性和问责性来实现差异化。不过，还应指出一些关键区别。CERTIFAI、MOC 和 GECO 是为表格数据设计的，而我们的方法则专门针对时间序列数据。我们引入格兰杰因果检验，以揭示变量之间的因果关系，这对于捕捉时间依赖关系至关重要。此外，我们采用分位数回归来捕捉时间序列中的不确定性和变异性，从而全面呈现潜在的未来轨迹。

III. 提出的方法

在时间序列的语境中，反事实是指对观测到的事件序列以某种方式加以改变的假设情景，从而能够分析替代结果。形式上，令 $X = \{X_1, X_2, ..., X_T\}$ 表示由 T 个观测组成的多元时间序列，其中 X_t表示该时间序列在时间 t 的取值，并且每个X_t 可进一步划分为 $x_{t1}, x_{t2}, ...x_{tV}$ ，分别表示时间 t处 V 个变量中的每一个。

通过预先设定的干预操作原始时间序列X ，构建反事实情景 $X' = \{X'_1, X'_2, ..., X'_N\}$ with$N \leq T$。因此，设 A 表示可应用于时间序列 X的可行干预集合， $P(A)$表示 A的幂集，即所有可能的干预组合。对于给定的反事实情景 X'，反事实结果 $Y' = \{Y'_1, Y'_2, ..., Y'_N\}$由因果模型 g 确定： $X \times A \to Y$。因果模型 g 刻画了不同干预下时间序列数据 X 与结果 Y之间的因果关系。从数学上看，它可以表示为：

$$Y' = g(X', A) \tag{1}$$

主要挑战有两个方面。首先，需要选择一个子集 $A \subseteq P(A)$，确保只考虑现实且可行的干预。若某项干预与 X的历史值保持一致，并确保 X' 的分布符合在 X中观察到的分布，我们便认为该干预可行。第二个挑战是找到一组干预 $a \in A$ ，使其满足关于某个未知 Y'的约束。例如，我们可以设定裕度ϵ和一组目标值 $\mathcal{Y}$，并提出约束$\hat{} \mathcal{Y}-\epsilon \leq Y' \leq \mathcal{Y}+\epsilon$。现在，设 $f(X)$表示一个预测模型，该模型根据历史数据 X预测时间序列变量的未来目标值。那么，反事实预测$\hat{} f(X')$表示改变后的情景 X'下的未来预测值，从而可以评估$\hat{} Y'$，并据此选择符合期望约束的干预 a。

为了限制对合理未来场景的搜索并获得合适的 A，我们提出针对每个输入变量训练多个分位数回归器，并将其作为独立的预测模型。这通过使用过去的历史数据并优化 Pinball 损失 [29] 来实现。我们的目标不是预测单个点估计，而是估计一个范围；损失函数用于评估预测分位数与目标变量实际分位数的匹配程度。对于给定的分位数水平 τ （取值范围为 0 到 1 ）和目标变量 x，Pinball 损失定义如下：

$$\mathcal{L}(\tau, x) = \max(\tau \cdot (x - x_{\text{pred}}), (\tau - 1) \tag{2}$$

其中，x_{pred} 表示目标变量 x 的预测值。当 x 高于 x_{pred} 时，Pinball 损失会惩罚低估；当 x 低于 x_{pred} 时，则会惩罚高估。随着 τ 偏离 0.5，惩罚幅度也会增加。

通过最小化 Pinball 损失，分位数模型能够学习如何捕捉完整的分布信息。训练好这些回归器后，我们可以利用它们搜索输入空间。与未来情景投影相关联的干预策略 a 可以表示为一个 t 形向量，其中 $t = V \times N$。每个索引都对应一个概率（分位数），用于获取每个变量 $v \in V$ 在每个时间状态 $n \in N$ 下的预测值 $x_{nv} \in X'$ 。

我们首先为每个输入变量 $x \in X$ 创建一个超前一步的自回归模型，记为 $f^x(X, \tau)$。应用干预策略 a ，并递归地预测未来 N 个时间步的每个变量后，我们会生成一组预测值 $X' = X_1$、X_2、.....、X_N。这组值代表了我们对各变量在不同时间步上的投影，可用于估计未来的目标变量。为了提高投影值 X' 的准确性，我们采用格兰杰因果检验来学习输入特征两两之间的因果关系。格兰杰检验的主要目标是缩小可行预测的 Rashomon 空间。

Rashomon 空间是指这样一组模型：它们在预测准确率方面对数据的解释同样出色，但可能会导致不同的决策或解读 [17]。在实际场景中，这个空间可能相当庞大，由于结果存在变异性，难以从模型中提取可行的见解。通过缩小 Rashomon 空间，我们旨在将模型范围收窄至不仅表现良好，而且能够提供稳定、可解释且一致预测的模型。借助格兰杰因果检验，我们只关注存在因果关系的变量对。

我们的格兰杰因果检验通过比较两个自回归模型的表现来进行：一个加入了额外的待评估特征，另一个则没有。对于每个输入变量，我们使用过去的历史数据分别训练一个自回归模型。然后，我们比较加入额外待评估特征后的自回归模型的表现。

零假设认为，待评估特征不会对目标变量产生格兰杰因果关系，而 t 检验得出的 p值表示观察到的预测准确率提升纯属偶然的概率。p值低于所选显著性水平（0.05）表明有证据反对零假设，并说明存在格兰杰因果关系。如果 t 检验得出的 p值低于 0.05，我们就认为存在格兰杰因果关系。我们将未来情景描述为一个 t 形向量，其中 $t = |\mathcal{X}| \times N$。每个索引对应于用于获取 $x \in X$ 在每个时间状态 $n \in N$ 下预测的概率（分位数）。加入待评估特征后的自回归模型可表示为：

$$\hat{y}i = \alpha + \sum j = 1^p \beta_j y_{i-j} + \sum_{j=1}^{p} \gamma_j x_{j,i-j} + \varepsilon_i \tag{3}$$

其中$\hat{} yi$ 是目标变量在时间i的预测值， $yi - j$ 表示目标变量直至阶数 p的滞后值， $x_{j,\ i-j}$ 表示被评估特征 x_j 直至阶数 p的滞后值， α 是截距项， β_j 和γ_j 是滞后值的系数， ε_i 是误差项。类似地，不含被评估特征的自回归模型可表示为：

$$\hat{y}^* i = \alpha + \sum j = 1^p \beta_j y_{i-j} + \varepsilon_i \tag{4}$$

通过使用t检验比较这两个模型的性能，我们可以确定被评估特征是否对目标变量有显著影响。

所提出的反事实算法旨在找到一个满足条件的投影。也就是说，找到一种干预，使其产生的投影能够在较小的误差裕度 ϵ内逼近所需的 $\mathcal{Y}$。我们采用遗传算法 [30] ，搜索与每个输入变量相关的分位数序列。该算法模拟自然选择过程，以生成用于优化和搜索问题的高质量解。它通过选择、组合和变异候选解，迭代演化一个种群。我们

我们采用 [27] 提出的适应度函数的改编版本，将其用于反事实解释的三目标优化。第一个目标 o_1 用于最小化预测的反事实值 $\hat{} \ f(X')$ 与所需的 $\mathcal{Y}_{\text{goal}}$ 之间的距离：

$$o_1(\hat{f}(X'), \mathcal{Y}_{\text{goal}}) = ||\hat{f}(X') - \mathcal{Y}_{\text{goal}}|| \tag{5}$$

第二个目标 o_2 用于衡量反事实 X' 与原始 X之间的相似度：

$$o_2(X, X') = 1 - \frac{X \cdot X'}{||X||\,||X'||} \tag{6}$$

第三个目标 o_3 用于评估 X' 的可能性：

$$o_3(X', X_{\text{obs}}) = -\log P(X'|X_{\text{obs}}) \tag{7}$$

我们假设，所述反事实方法有助于更好地理解时间序列模型的投影以及驱动未来场景的变量。通过对所有变量对进行格兰杰因果检验，我们识别出彼此影响的特征。结合这些特征，我们创建自回归模型来生成未来场景。为确保这些场景的合理性，我们训练多个分位数回归器，并在输入空间中搜索满足特定结果约束的输入。这种综合方法增强了模型的预测能力，使其能够生成符合预期结果的合理未来场景。

IV. 实验

为了评估我们提出的用于生成时间序列数据反事实解释的方法，我们使用 M. Dias Branco 的真实世界数据开展了实验。该公司是一家食品企业，在巴西饼干和意大利面领域占据三分之一的巴西市场份额 [31]。我们聚焦于其碱性闭环（ACL）真空系统。这是一种专用装置，应用于真空蒸馏、化学加工等行业，以及其他需要维持特定真空条件的工艺。

图1展示了 ACL 系统的主要变量。该系统本质上采用闭环回路，将真空室设备产生的热量传递至热交换器，再由热交换器将热量传递给冷却塔水，通过蒸发冷却散热。对冷却水进行碱性处理对于防止腐蚀、确保特定工业过程所需真空条件的稳定至关重要。在 M. Dias Branco，这一步通过保持真空恒定来控制食品气味。

我们的目标是预测未来 T 个时间步的压力值，并找到一组输入特征路径，以近似所查询的反事实。为此，我们需要此前每个时间步的所有输入特征值，共 $T-1$ 个时间步。然而，每个特征都可能沿着许多不同的路径变化。因此，我们得到一个大小为 $T * V$ 的向量，作为遗传算法的输入。我们的适应度函数旨在找到一个个体（一组分位数），使其生成的预测与所查询的情景相符，同时将与当前情景的差异降至最低

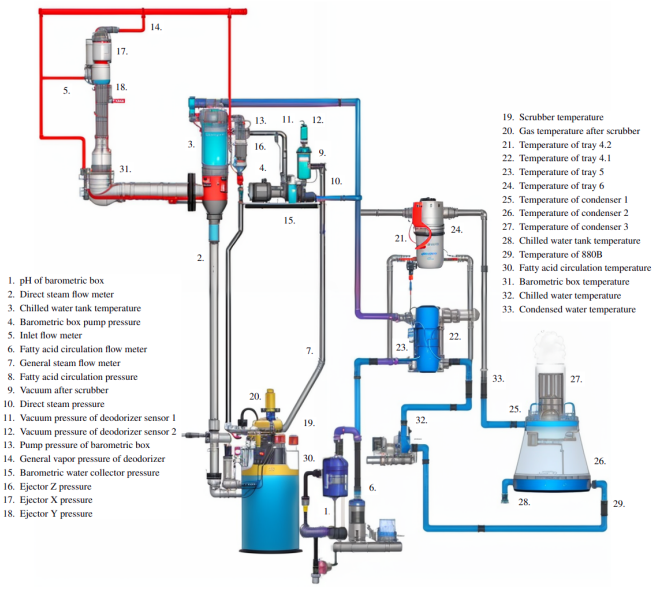


图1：碱性闭环真空系统。

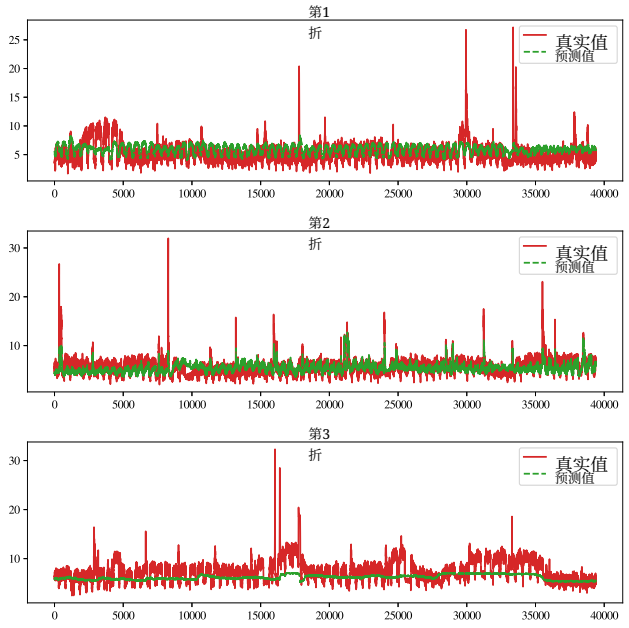
表I：模型比较与预测性能。

模型	MAE	MSE	R^2	训练时间（秒）	推理时间（秒）
LightGBM	**0.889**	**2.210**	**0.505**	37.81	2.55
线性回归	1.055	2.375	0.401	**6.88**	**2.03**
弹性网络	1.082	**2.179**	0.393	9.52	**2.17**
SVR	1.393	5.398	0.183	432.65	529.39
LSTM	1.288	3.432	0.074	1405.32	7.76
长短期记忆网络+偏差	1.259	3.563	0.108	544.65	7.26秒
长短期记忆网络+CNN	1.616	4.788	0.015	305.01	16.94

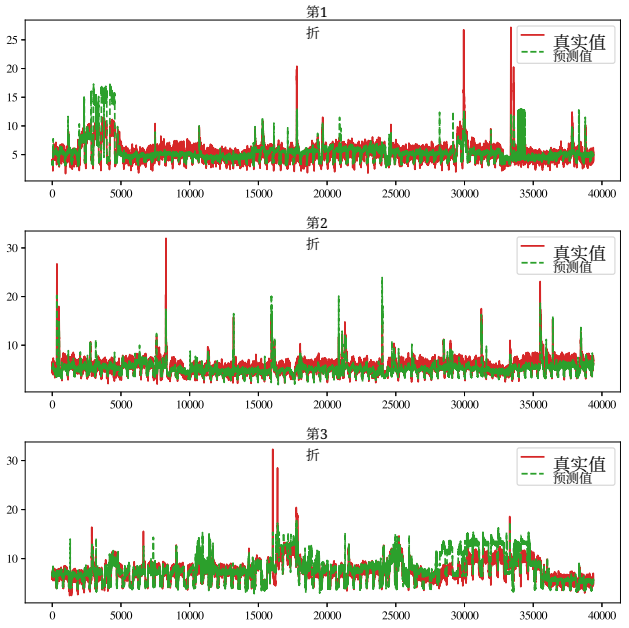
。为了量化这些目标，我们计算它们的绝对差值。找到之后，我们就可以确认哪些变量是可采取行动的，并实施干预。

数据与机器学习模型：我们的数据集包含图1所示的33个随时间变化的变量。每个变量的数值均以3秒间隔连续记录数月。为确保结果的有效性和统计显著性，我们采用了为期1个月的滚动交叉验证：使用一个月的数据训练模型，并在接下来的一个月验证其性能。我们比较了多种机器学习和统计模型的性能。为评估它们的预测能力，我们采用了均方误差（MSE）、平均绝对误差（MAE）和决定系数（R^2）等指标。我们还给出了各方法相应的训练时间和推理时间。模型比较结果汇总于表I。每个模型均使用样本外数据进行训练，以预测30秒后的目标变量。

我们还分别比较了 ARIMA [32] 和性能出色的 LightGBM。我们使用截至最新时点的数据来预测未来的时间步。在这项评估中，根据数据集最后 83 小时的数据（10,000 个数据点），LightGBM 的表现优于 ARIMA。其平均绝对百分比误差为



(a) 长短期记忆网络。



(b) LightGBM。

图 2：交叉验证期间数据子集的预测值与真实值 .

为 3.8%， R^2 值为 0.916，均方误差为 1.602。另一方面，ARIMA 模型的平均绝对百分比误差为 5.20%，R^2 为 0.914，均方误差为 1.557。尽管 LightGBM 速度较慢，但由于其平均绝对百分比误差较低且具有可解释性，我们决定选择它作为学习算法。

为了进一步了解模型的性能，我们将长短期记忆网络和 LightGBM 模型在交叉验证中最近几个折上的预测结果进行了可视化，如图 2 所示。图中展示了预测值（虚线）和相应的真实值（实线）。从图中可以看出，LightGBM 模型的预测结果更贴近实际真实值，与底层数据模式高度吻合。另一方面，长短期记忆网络模型的预测结果似乎不够细致，更接近时段均值，未能恰当地捕捉目标变量的细微变化，因此预测性能略低。交叉验证分析也证实了该模型的鲁棒性：它在不同折上始终优于替代模型，进一步表明它适用于准确的时间序列预测任务。

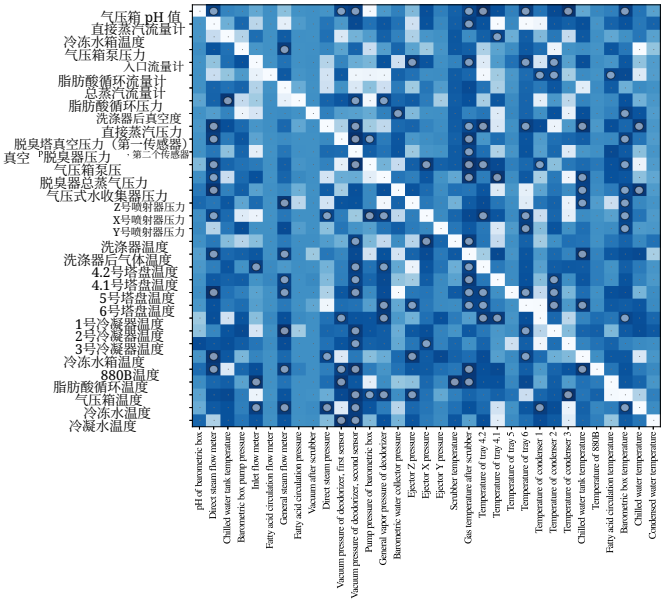


图 3：格兰杰因果关系热力图。颜色较深的单元格表示关系较强，并标记出具有统计显著性的变量对。

因果关系分析：我们对所有变量对进行了全面的格兰杰因果分析。格兰杰因果检验有助于确定时间序列的哪些过去值包含可用于预测另一时间序列的有价值信息。我们检查了所得热力图，并标记出经过成对 t 检验后 p值小于或等于 0.05 的变量对所对应的单元格。

图 3 展示了我们的格兰杰因果关系分析结果以热力图的形式进行分析。该可视化通过热力图单元格不同的深浅，凸显变量之间的相互关联。较深的单元格对应存在统计显著因果关系的变量对，而较浅的单元格则表示关联较弱或不显著。通过查看热力图，我们可以

识别出彼此之间具有强因果影响的变量群组，它们形成相互关联的模式，共同塑造所探索现象的整体行为。

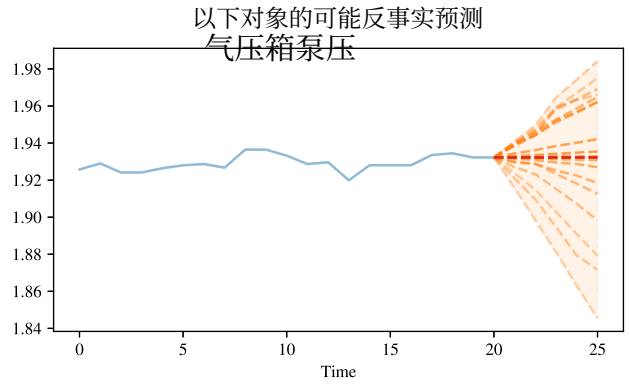


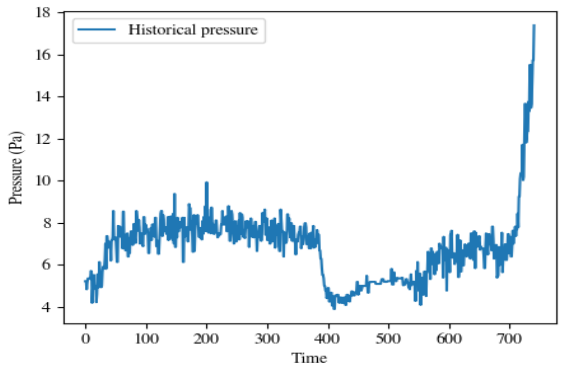
图4：可操作变量的分位数预测及一些可能的未来路径。实线表示历史值，虚线表示可能的未来。红色虚线突出显示最可能的路径。具体而言，未来15秒（5个时间步）内，[1.84 至 1.98] 范围内的值是合理的。

合理情景的分位数回归：为搜索合理的未来场景，我们使用历史数据为每个输入变量训练了多个分位数回归器。这些分位数回归器根据输入特征估计每个目标变量的条件分位数，从而捕捉分布信息。分位数回归为量化不确定性和探索各种可能的未来轨迹提供了强大的框架。通过估计条件分位数，我们可以获得一系列合理的值，如图4所示。

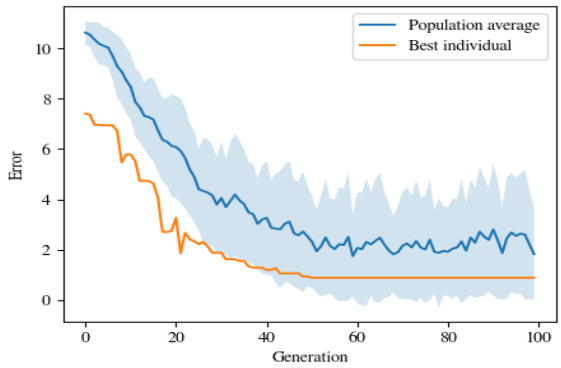
遗传算法搜索：为找到满足特定结果约束的未来场景，我们采用了带有随机移民的遗传算法。遗传算法的参数设置如下：种群规模为200，变异概率为0.25，交叉概率为0.75，锦标赛规模为3，移民率固定为10%，共运行100代数。容差范围设为5%，以便提前停止；搜索未来场景的时间范围为30秒。我们将每个个体定义为一个向量，其中每个位置代表未来每个时间步中各变量的分位数。

我们进行了实验以确定种群规模，发现少于 50 个个体的种群难以收敛到良好的解。此外，规模较大的种群收敛更快（100 个个体的种群约在第 80 代收敛，而 500 个个体的种群约在第 20 代收敛），但超过 500 个个体后，性能提升并不显著。选择这组种群规模和代数参数是为了便于可视化；实际上，如图5所示，收敛发生得要早得多。其余参数则参考文献选取。

遗传算法探索了可能解的空间，并找到了满足预期结果的场景



(a) 真空破坏附近的时间序列。



(b) 遗传算法的适应度演化。

图5：遗传算法执行期间的种群适应度，展示了对真空破坏附近一种可信回归情形的预测。搜索过程中，目标是寻找近期压力水平达到 5.0 帕的情形。找到的解位于 4.0 帕至 6.0 帕的范围内，满足从真空破坏中恢复的约束。

在容差范围内。通过在各代中迭代优化解，算法能够逐步收敛到近似期望结果的反事实解释。图5a展示了一个场景：ACL系统中的压力异常升高，这将导致真空破坏和食物异味污染。我们采用遗传算法（GA），其具体目标是使未来压力值达到5.0帕。图5b中的纵轴表示误差，即每次迭代中由个体生成的预测值与5.0帕这一期望目标之间的绝对差值。图6所示的反事实解释详细揭示了影响期望未来状态的关键变量。对于给定示例，这些洞见可以帮助决策者防止真空破坏并恢复系统稳定性。由于我们演化的是完整种群，专业人员可以从所有个体中寻找一个可执行的方案，图6展示了这样一个示例。我们通过每个可操作变量投影的联合概率计算情景似然。具体而言，我们评估每个时间步与0.5分位数之间的距离。

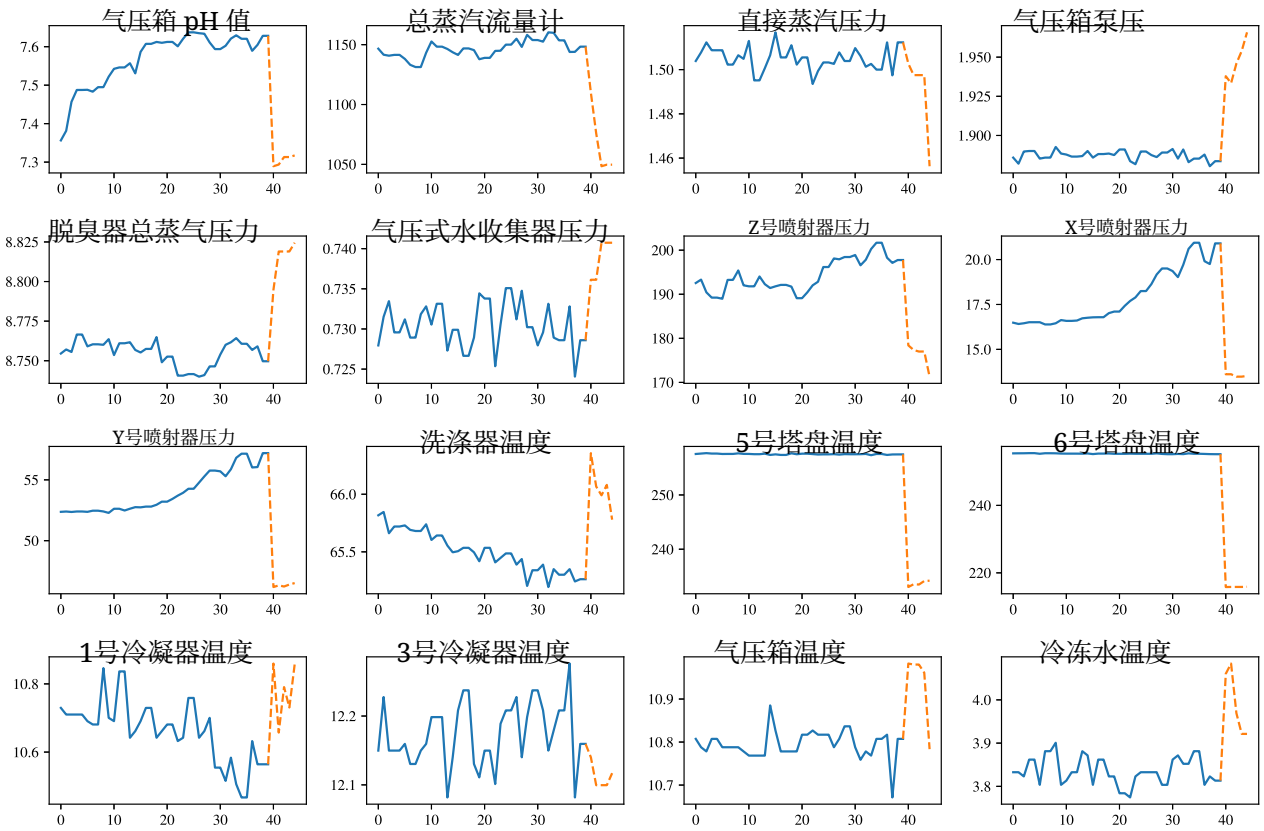


图6：使系统能够从近真空破裂中恢复并满足所需反事实解释的未来预测。情景似然：42.9%。预测压力：5.87 帕。

V. 讨论

我们的实验表明，所提出的方法在时间序列数据中生成反事实解释方面具有良好效果。通过结合格兰杰因果分析、分位数回归和遗传算法，我们成功搜索了可能未来场景的解空间。格兰杰因果分析揭示了时间序列变量之间的因果关系，从而说明了它们之间的相互关联性。这是实现未来场景合理性的关键要点之一。

遗传算法高效地探索了可能解的空间。由此得到的反事实解释全面呈现了影响特定未来轨迹的关键变量，为决策者提供了可付诸行动的洞见。它还支持开展模拟，以探索可能的预防性安全措施。向 M. Dias Branco 的专家展示开发出的工具后，他们能够模拟大量场景，表现出极大的热情，并从中发现系统的新模式，进而制定新的应对措施以防止真空中断。我们重复运行整个处理流程进行了 30 次实验，每次均保留 200 个解的种群和 100 代。在超过 90% 的实验中（28/30），我们都找到了满足我们的约束、可供 M. Dias Branco 的专家使用的预测场景，展现了所设计技术的鲁棒性。

我们的方法中最耗时的步骤是训练模型和进行格兰杰检验。遗传算法中的推理在计算上并没有那么密集。从时间复杂度来看，其大约为 $O(tdTVPG)$。这里，$O(td)$表示使用深度为 d、包含 t棵树的梯度提升机进行推理的复杂度。T 是未来预测的时间步数，V 是变量数量，P 是种群规模，G是代数。

我们的实验还凸显了模型选择的重要性，因为 LightGBM 始终优于其他方法。不过，我们的观察也揭示了一个常见挑战：难以进行外推。具体而言，模型往往会低估分布极端值对应的点。随着我们增加有关分布极端值的训练数据量，模型的学习能力有所提升；比较第1、2、3和4折的预测结果时，这一点显而易见，如图2所示。第1折和第3折包含更多、更高的目标变量峰值，因此使第2折和第4折的预测更加准确。另一方面，第1折的预测凸显了模型在训练数据对这些极端值的代表性不足时，捕捉此类极端值的能力有限。

VI. 结论

在这项工作中，我们提出了一种新方法，主要借助遗传算法、分位数回归和格兰杰因果关系，为时间序列数据发现反事实解释。我们的方法提供了一个框架，可在包含多个潜在预测投影的数据空间中进行探索，同时寻找反事实解释。该方法向 M. Dias Branco 的专家展示后，成功识别出一些引人关注的未来场景，彰显了其在现实世界决策中的适用性和价值。它还能够提出干预措施，以减少生产过程中的真空中断次数。

未来的研究可以通过探索其他优化策略（如元启发式算法），进一步改进我们的方法，以提升其在更大数据集上的可扩展性和效率。有时，遗传算法会收敛到局部最小值，导致种群无法继续进化。可以探索其他优化技术，或采用替代方法来应对过早收敛。此外，研究整合领域专门知识的潜力，可能有助于提高准确性和可解释性。

代码和数据可用性

用于机器学习分析的代码和数据可供非商业用途，已存档于 https://doi.org/10.6084/m9.figshare.27609555 [33]。

致谢

本研究由作者从 Kunumi 获得的个人资助提供支持。M. Dias Branco 慷慨地提供了开发本研究技术所需数据库的访问权限。

参考文献

[1] B. Pascal，《思想 ´录》。Dezobry et E. Magdeleine，1852。[2] J. Prucher，《新词新世界：牛津科幻词典》。牛津大学出版社，2007。[3] U. Schlegel、H. Arnout、M. El-Assady、D. Oelke 和 D. A. Keim，“面向时间序列可解释人工智能方法的严格评估”，载于*2019 IEEE/CVF*国际计算机视觉会议研讨会（*ICCVW*）。电气电子工程师学会，2019，第4197–4201页。[4] A. Theissler、F. Spinnato、U. Schlegel 和 R. Guidotti，“用于时间序列分类的可解释人工智能：综述、分类法与研究方向”，《IEEE Access》，2022。[5] M. Clements 和 D. Hendry，《经济时间序列预测》。剑桥大学出版社，1998。[6] G. Zuin、D. Araujo、V. Ribeiro、M. G. Seiler、W. H. Prieto、M. C. Pint˜ao、C. dos Santos Lazari、C. F. H. Granato 和 A. Veloso，“利用机器学习从百万级全血细胞计数数据预测SARS-CoV-2阳性”，《Communications Medicine》，第2卷，第1期，第72页，2022。[7] G. Zuin、R. Buechler、T. Sun、C. Zanocco、F. Galuppo、A. Veloso 和 R. Rajagopal，“巴西电力消费的极端事件反事实分析：气候变化背景下的历史影响与未来展望”，《Energy》，第128101页，2023。[8] K. Ghosh，“时间序列分析：简史及其未来挑战”，《Indian Science Cruiser》，第34卷，第5期，第22–27页，2020。[9] R. M. Byrne，“可解释人工智能（XAI）中的反事实：来自人类推理的证据。”载于国际人工智能联合会议，2019，第6276–6282页。[10] J. Wexler、M. Pushkarna、T. Bolukbasi、M. Wattenberg、F. Vi´egas 和 J. Wilson，“What-If工具：对机器学习模型的交互式探查”，《IEEE可视化与计算机图形学汇刊》，第26卷，第1期，第56–65页，2019。[11] A. Konak、D. W. Coit 和 A. E. Smith，“使用遗传算法进行多目标优化：教程”，《Reliability E ngineering & System Safety》，第91卷，第9期，第992–1007页，2006。[12] K. Sokol 和 P. A. Flach，“机器学习预测的反事实解释：人工智能安全领域的机遇与挑战。”SafeAI@ AAAI，2019。[13] I. Stepin、J. M. Alonso、A. Catala 和 M. Pereira-Fari˜na，“可解释人工智能的对比解释与反事实解释生成方法综述”，IEEE Access，第9卷，第11 974–12 001页，2021。[14] L. Breiman，“统计建模：两种文化”，Statistical Science. A Review Journal of the Institute of Mathematical Statistics，第16卷，第3期，第199–231页，2001，附作者评论与回应。[15] A. Fisher、C. Rudin 和 F. Dominici，“所有模型都有缺陷，但许多模型仍有用：通过同时研究整个预测模型类别来学习变量的重要性。”J. Mach. Learn. Res.，第20卷，第177期，第1–81页，2019。[16] G. Zuin、F. Marcelino、L. Borges、J. Couto、V. Jorge、M. Laurindo、G. Barcelos、M. Cunha、V. Alvarenga、H. Rodrigues、P. Balsamo 和 A. Veloso，“通过Rashomon集预测双相不锈钢制造中的加热银条”，载于2021年国际神经网络联合会议，2021，第1–8页。[17] G. Zuin，“通过Rashomon集实现集成学习”，博士学位论文，米纳斯吉拉斯联邦大学，2023。[18] G. Zuin 和 A. Veloso，“通过Rashomon集实现集成学习”，载于XXXVII论文竞赛论文集。巴西南里奥格兰德州阿雷格里港：SBC，2024，第1–10页。[19] C. Molnar，《可解释机器学习》，第1版，2019。 [在线]。网址：https://christophm.github.io/interpretable-ml-book [20] S. Wachter、B. Mittelstadt 和 C. Russell，“无需打开黑箱的反事实解释：自动化决策与《通用数据保护条例》”，Harv. JL & Tech.，第31卷，第841页，2017。[21] L. Yang、E. Kenny、T. L. Ng、Y. Yang、B. Smith 和 R. Dong，“为金融文本分类中的深度 Transformer 生成可信的反事实解释”，载于COLING’2020，2020。[22] R. K. Mothilal、A. Sharma 和 C. Tan，“通过多样化反事实解释阐释机器学习分类器”，载于2020年公平性、问责制与透明度会议论文集，2020，第607–617页。[23] J. Lang、M. A. Giese、W. Ilg 和 S. Otte，“为多变量时间序列生成稀疏反事实解释”，载于国际人工神经网络会议。施普林格，2023，第180–193页。[24] O. Bahri、P. Li、S. F. Boubrahimi 和 S. M. Hamdi，“多变量时间序列的基于时间规则的反事实解释”，载于2022年第21届IEEE国际机器学习与应用会议（ICMLA）。电气电子工程师学会，2022，第1244–1249页。[25] E. Ates、B. Aksar、V. J. Leung 和 A. K. Coskun，“多变量时间序列的反事实解释”，载于2021年国际应用人工智能会议（ICAPAI）。电气电子工程师学会，2021，第1–8页。[26] S. Sharma、J. Henderson 和 J. Ghosh，“CERTIFAI：提供解释并分析黑箱模型公平性与鲁棒性的通用框架”，载于AAAI/ACM 人工智能、伦理与社会会议论文集，系列：AIES ’20。美国纽约州纽约：计算机协会，2020，第166–172页。[27] T. B¨ack、M. Preuss、A. Deutz、H. Wang、C. Doerr、M. Emmerich 和 H. Trautmann，《自然启发并行问题求解：第16届国际会议，PPSN 2020，荷兰莱顿，2020年9月5日至9日，论文集，第二部分》。施普林格·自然，2020，第12270卷。[28] M. Schleich、Z. Geng、Y. Zhang 和 D. Suciu，“GECO：实时生成高质量反事实解释”，Proc. VLDB Endow.，第14卷，第9期，第1681–1693页，2021年5月。[29] I. Steinwart 和 A. Christmann，“借助Pinball损失估计条件分位数”，2011。[30] K. Michalak，“用于多目标旅行商问题的随机移民进化算法”，Procedia 计算机科学，第192卷，第1461–1470页，2021。[31] M. Dias Branco，“2018年第四季度及全年业绩公告”， [在线] https://ri.mdiasbranco.com.br/wp-content/uploads/sites/15/2019/03/Mdias Earnings Release 4T18-PORT.pdf，2019。[32] S. Siami-Namini、N. Tavakoli 和 A. S. Namin，“ARIMA与长短期记忆网络在时间序列预测中的比较”，载于2018年第17届IEEE国际机器学习与应用会议（ICMLA）。电气电子工程师学会，2018，第1394–1401页。[33] G. Zuin，“探索时间的可能性：通过遗传算法为多变量时间序列预测生成可信反事实解释的代码与数据”，Figsh¯are，202¯4。