



Prédiction séquence-à-séquence de séries temporelles multivariées et déséquilibrées avec réseaux de neurones convolutifs unidimensionnels

### Mercredi 27 Janvier 2021



Mehdi Elion



Sonia Tabti



Julien Budynek

### Contexte et motivation

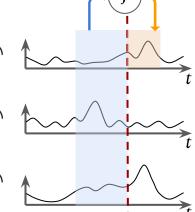
### <u>Données industrielles</u>







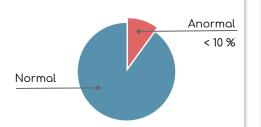




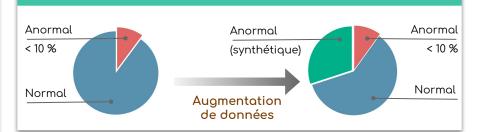
### <u>Évènements rares</u>

- Pannes
- Anomalies, non conformités
- Baisses de qualité

#### Données déséquilibrées



# Augmentation de données



# État de l'art

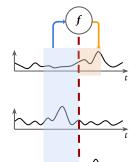
| 2002 | • | SMOTE (Synthetic Minority Oversampling Technique for classification)                                | Chawla et al.        |
|------|---|---|----------------------|
| 2013 | • | SMOTE for Regression  | Torgo et al          |
| 2017 | • | Adaptation de SMOTE-R à la prédiction de<br>séries temporelles univariées à un pas dans le<br>futur | Moniz et al          |
| 2020 | • | SMOTEST (Synthetic Minority Oversampling Technique for Sequence-To-sequence)                        | Notre<br>proposition |



# Approche proposée: SMOTEST

Sur-échantillonnage des données d'entraînement

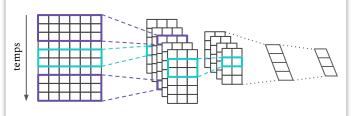




Séries temporelles multivariées

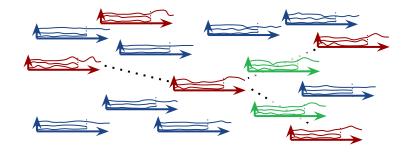
Séquence-à-séquence

CNN-1D

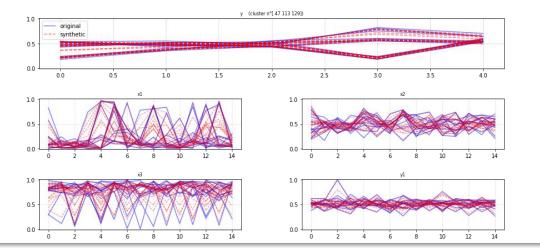


# Algorithme de sur-échantillonnage

<u>Illustration</u>



### Exemple sur jeu de données synthétiques

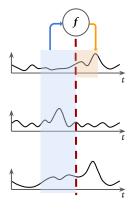




## Approche proposée: SMOTEST

Sur-échantillonnage des données d'entraînement

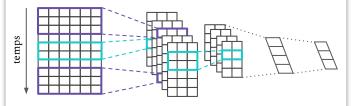




Séries temporelles multivariées

Séquence-à-séquence

CNN-1D



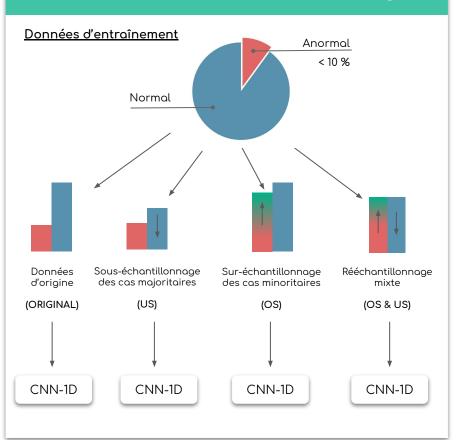
## Algorithme de sur-échantillonnage

#### Algorithm 1 Algorithme de sur-échantillonnage

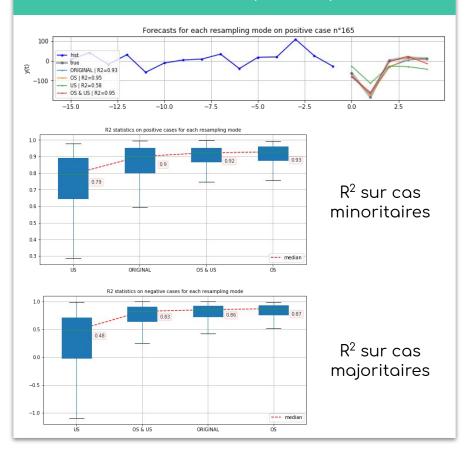
```
Require: n_g: nombre de cas synthétiques à générer par cas positif existant, k: nombre de voisins, G: générateur de nombres aléatoires, \mathcal{D}_P = \{(X,Y) \mid \Phi(Y) \geq \theta\}: ensemble des cas positifs
```

```
1: function GENSYNTHCASES(\mathcal{D}_P, n_q, k, G)
          \mathcal{D}_{qen} \leftarrow \emptyset
          for all (X,Y) \in \mathcal{D}_P do
 3:
                NNS \leftarrow KNN(k, Y, \mathcal{D}_P \setminus \{(X,Y)\})
                for i = 1 to n_a do
                      (X_{nn}, Y_{nn}) \leftarrow un cas choisi aléatoirement parmi NNS
                      Initialiser (X_{new}, Y_{new}) pour contenir le ième cas synthétique
                      for all s \in [1, n_X] do
                           diff \leftarrow X_{nn}[:,s] - X[:,s]
                           X_{new}[:,s] \leftarrow X[:,s] + G(0,1) \times diff
10:
                     end for
11:
                     d_1 \leftarrow DIST(X_{new}, X)
                                                                                                         \begin{aligned} & d_2 \leftarrow \textit{DIST}(X_{new}, X_{nn}) \\ & Y_{new} \leftarrow \frac{d_2Y + d_1Y_{nn}}{d_1 + d_2} \end{aligned}
                      \mathcal{D}_{gen} \leftarrow \mathcal{D}_{gen} \cup \{(X_{new}, Y_{new})\}
                end for
           end for
17:
           return \mathcal{D}_{gen}
19: end function
```





# Résultats sur données synthétiques





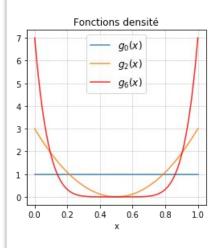
Fonctions forme

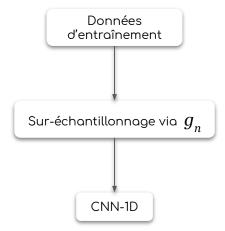
$$f_n(x) = (x - 0.5)^n$$

Fonctions densité

$$g_n(x) = f_n(x) / \int_0^1 f_n(t) dt$$

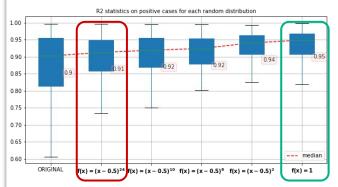
Synthèse de séquences 
$$\begin{cases} s_{\lambda} = \lambda s_0 + (1-\lambda)s_1 \\ \lambda \sim \mathcal{P}(g_n) \end{cases}$$





# Résultats sur données synthétiques

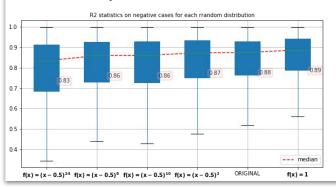
#### R2 sur cas minoritaires



La distribution uniforme donne les meilleurs résultats

> La réplication de données donne de moins bons résultats

#### R2 sur cas majoritaires





## Expérience sur données industrielles

### Problématique

- Contrôle qualité
- Variable cible à prédire : taux d'impureté
- Évènement rares à anticiper : augmentations brutales du taux d'impureté

### Caractéristiques du jeu de données

- 10 variables (cible incluse)
- 90 points en entrées, 20 points en sortie
- 74000 échantillons
- 77% pour l'entraînement, 23% pour le test
- Envion 7% de cas rares

### Résultats

- Amélioration des résultats sur cas rares
- Baisse de performance sur cas majoritaires

|                | Cas p           | ositifs         | Cas négatifs    |                 |  |  |  |
|----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|--|--|--|
|                | MAE             | RMSE            | MAE             | RMSE            |  |  |  |
| Original       | $0.36 \pm 0.37$ | $0.46 \pm 0.43$ | $0.16 \pm 0.21$ | $0.19 \pm 0.23$ |  |  |  |
| <b>SMOTEST</b> | $0.34 \pm 0.35$ | $0.42 \pm 0.40$ | $0.19 \pm 0.21$ | $0.22 \pm 0.23$ |  |  |  |

TAB. 1: Résultats sur les données industrielles de test  $(w_{in}=90,w_{out}=20)$ . Les valeurs à gauche et à droite du signe  $\pm$  correspondent resp. à la moyenne et l'écart type de l'erreur.

| 2011      | TP   | TN    | FP   | FN   | bAcc  | Rappel | Précision | Spécificité |
|-----------|------|-------|------|------|-------|--------|-----------|-------------|
| Orig      | 3.87 | 89.88 | 3.22 | 3.03 | 76.31 | 56.08  | 54.58     | 96.54       |
| OS + Unif | 4.61 | 88.94 | 4.15 | 2.29 | 81.17 | 66.81  | 52.62     | 95.54       |

TAB. 6: Métriques de confusion sur le jeu de données industrielles (test).



### Conclusions

### Mode de rééchantillonnage

- Le sur-échantillonnage fournit les meilleurs résultats
- Le sous-échantillonnage rend le modèle sous-performant

#### Distribution aléatoire pour synthèse de séquences

- Une distribution uniforme fournit des résultats satisfaisants
- Une distribution proche de la duplication a tendance à rendre le modèle sous-performant

#### Données industrielles

Augmentation des performances sur les cas d'intérêt

### Perspectives

- Comparer d'autres méthodes d'augmentation de données
- Expérimenter sur plus de données industrielles
- Expérimenter avec d'autres modèles prédictifs (e.g. réseaux récurrents)
- Expérimenter sur d'autres types d'événements rares

### Contacts



www.fieldbox.ai



melion@fieldbox.ai



<u>fieldboxai/predict-rare-events-smotest</u>









Annexes

### Caractérisation des cas rares

# Ensemble de cas $\mathcal{D}: (X,Y) \in \mathbb{R}^{w_{in} \times n} \times \mathbb{R}^{w_{out}}$

- win : taille des séquences d'entrée
- w<sub>out</sub> : taille des séquences de sortie
- n : nombre de signaux d'entrée
- $X \in \mathbb{R}^{w_{in} \times n}$  : signaux d'entrée d'un cas donné
- $Y \in \mathbb{R}^{w_{out}}$  : signal de sortie associé à X

#### Caractérisation d'un cas

$$\Phi: \mathbb{R}^{w_{out}} \mapsto \mathbb{R}$$

### Exemple: augmentation maximale

$$\Phi\left(\left(y(t+k)\right)_{k\in 1, w_{out}}\right) = \max_{\substack{t\in 1, w_{out}-1\\\tau\in 1, w_{out}-t}} y(t+\tau) - y(t)$$

#### Ensemble des cas rares

$$D_P = \{(X, Y) \in \mathcal{D} \mid \Phi(Y) \ge \theta\}$$

### Evaluation

### Métriques de régression

$$\begin{split} \text{RMSE}(Y, \hat{Y}) &= \sqrt{\frac{1}{w_{out}} \sum_{t=1}^{w_{out}} (Y[t] - \hat{Y}[t])^2} \\ \text{MAE}(Y, \hat{Y}) &= \frac{1}{w_{out}} \sum_{t=1}^{w_{out}} \left| Y[t] - \hat{Y}[t] \right| \end{split}$$

#### Métriques de confusion

$$\begin{aligned} \operatorname{Rappel}(Y, \hat{Y}) &= \frac{TP}{TP + FN} \\ \operatorname{Pr\'{e}cision}(Y, \hat{Y}) &= \frac{TP}{TP + FP} \\ \operatorname{Sp\'{e}cificit\'{e}}(Y, \hat{Y}) &= \frac{TN}{TN + FP} \\ \operatorname{bAcc}(Y, \hat{Y}) &= \frac{1}{2} \left( \frac{TP}{TP + FN} + \frac{TN}{TN + FP} \right) \end{aligned}$$

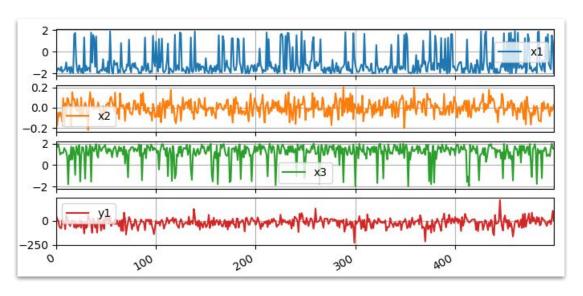


# Jeu de données synthétique

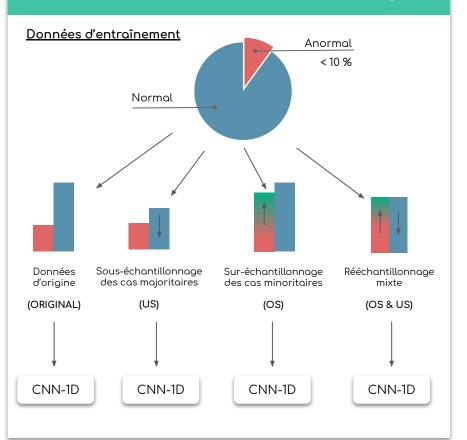
## Caractéristiques du jeu de données

- 4 variables (cible incluse)
- 15 points en entrées, 5 points en sortie
- 9960 échantillons

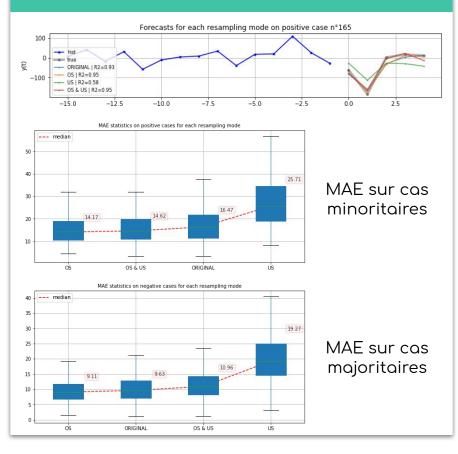
- 70% pour l'entraînement, 30% pour le test
- Moins de 10% de cas rares



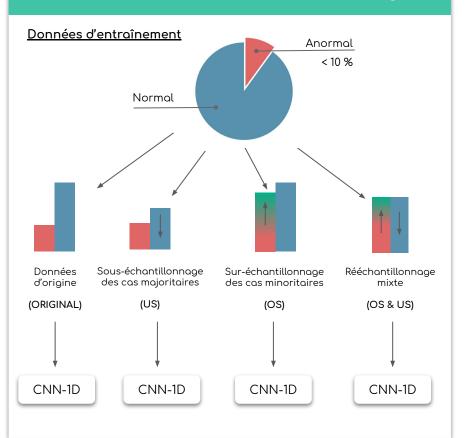




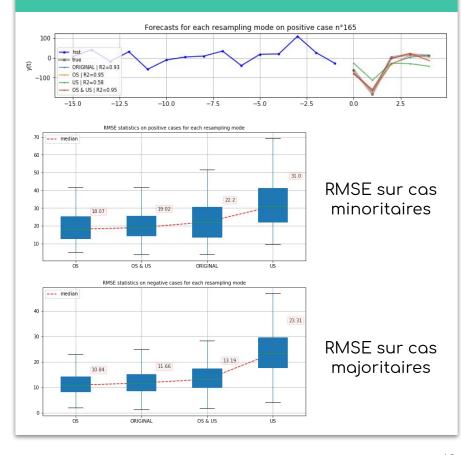
## Résultats sur données synthétiques



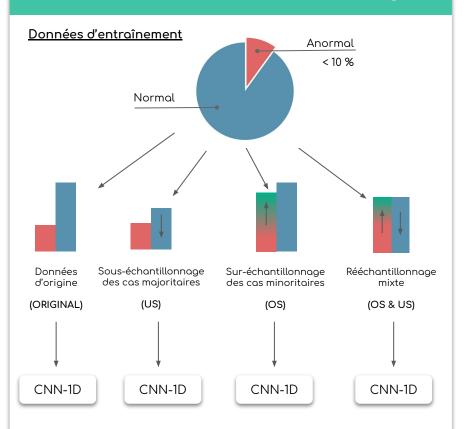




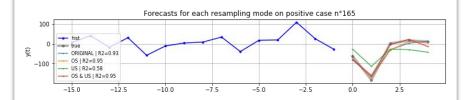
## Résultats sur données synthétiques







## Résultats sur données synthétiques



#### Métriques de confusion sur les données de test

|          | P    | N     | TP   | TN    | FP   | FN   | accuracy | recall | precision | specificity |
|----------|------|-------|------|-------|------|------|----------|--------|-----------|-------------|
| ORIGINAL | 8.43 | 91.57 | 4.15 | 90.37 | 1.2  | 4.28 | 94.52    | 49.21  | 77.5      | 98.69       |
| os       | 8.43 | 91.57 | 5.22 | 89.97 | 1.61 | 3.21 | 95.18    | 61.9   | 76.47     | 98.25       |
| US       | 8.43 | 91.57 | 3.88 | 85.69 | 5.89 | 4.55 | 89.57    | 46.03  | 39.73     | 93.57       |
| OS & US  | 8.43 | 91.57 | 5.55 | 89.36 | 2.21 | 2.88 | 94.92    | 65.87  | 71.55     | 97.59       |

#### Métriques de confusion sur les données d'entraînement

|          | P     | N     | TP    | TN    | FP   | FN    | accuracy | recall | precision | specificity |
|----------|-------|-------|-------|-------|------|-------|----------|--------|-----------|-------------|
| ORIGINAL | 7.86  | 92.14 | 4.35  | 91.32 | 0.82 | 3.51  | 95.67    | 55.29  | 84.17     | 99.11       |
| os       | 47.74 | 52.26 | 41.39 | 51.51 | 0.75 | 6.34  | 92.9     | 86.71  | 98.21     | 98.56       |
| US       | 50    | 50    | 31.66 | 48.54 | 1.46 | 18.34 | 80.2     | 63.32  | 95.59     | 97.08       |
| OS & US  | 48.03 | 51.97 | 42.2  | 51.01 | 0.96 | 5.83  | 93.21    | 87.86  | 97.78     | 98.15       |



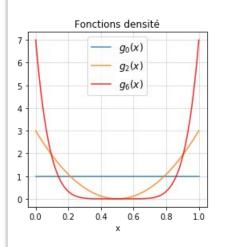
Fonctions forme

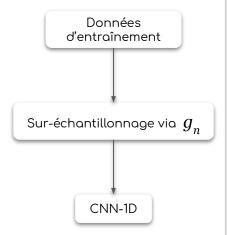
$$f_n(x) = (x - 0.5)^n$$

Fonctions densité

$$g_n(x) = f_n(x) / \int_0^1 f_n(t) dt$$

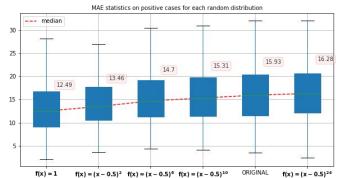
Synthèse de séquences 
$$\begin{cases} s_{\lambda} = \lambda s_0 + (1-\lambda)s_1 \\ \lambda \sim \mathcal{P}(g_n) \end{cases}$$



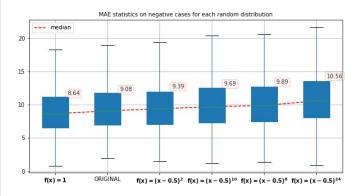


# Résultats sur données synthétiques

#### MAE sur cas minoritaires



#### MAE sur cas majoritaires





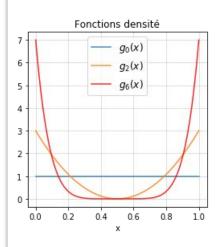
Fonctions forme

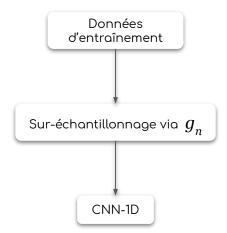
$$f_n(x) = (x - 0.5)^n$$

Fonctions densité

$$g_n(x) = f_n(x) / \int_0^1 f_n(t) dt$$

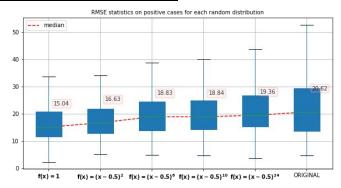
Synthèse de séquences 
$$\begin{cases} s_{\lambda} = \lambda s_0 + (1-\lambda)s_1 \\ \lambda \sim \mathcal{P}(g_n) \end{cases}$$



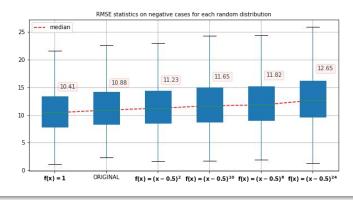


## Résultats sur données synthétiques

#### RMSE sur cas minoritaires



#### RMSE sur cas majoritaires





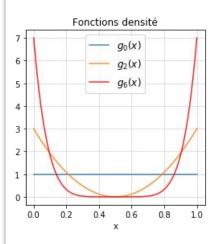
Fonctions forme

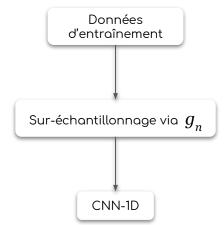
$$f_n(x) = (x - 0.5)^n$$

Fonctions densité

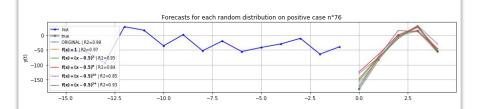
$$g_n(x) = f_n(x) / \int_0^1 f_n(t) dt$$

Synthèse de séquences 
$$\begin{cases} s_{\lambda} = \lambda s_0 + (1-\lambda)s_1 \\ \lambda \sim \mathcal{P}(g_n) \end{cases}$$





## Résultats sur données synthétiques



#### Métriques de confusion sur les données de test

|                         | -   | IN   | IP   | IIV  | FP   | FIN  | accuracy | recall  | precision   | specificity   |
|-------------------------|---|--|--|--|--|--|----------|---|---|---|
| Resampled Datasets      |   |  |  |  |  |  |          |   |   |   |
| ORIGINAL                | 8.43  | 91.57  | 3.75   | 90.43  | 1.14   | 4.68   | 94.18    | 44.44   | 76.71   | 98.76   |
| f(x) = 1                | 8.43  | 91.57  | 5.55   | 90.5   | 1.07   | 2.88   | 96.05    | 65.87   | 83.84   | 98.83   |
| $f(x) = (x - 0.5)^2$    | 8.43  | 91.57  | 5.42   | 90.17  | 1.4  | 3.01   | 95.59    | 64.29   | 79.41   | 98.47   |
| $f(x) = (x - 0.5)^6$    | 8.43  | 91.57  | 5.82   | 89.77  | 1.81   | 2.61   | 95.59    | 69.05   | 76.32   | 98.03   |
| $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ | 8.43  | 91.57  | 4.75   | 90.7   | 0.87   | 3.68   | 95.45    | 56.35   | 84.52   | 99.05   |
| $f(x) = (x - 0.5)^{24}$ | 8.43  | 91.57  | 4.62   | 90.77  | 0.8  | 3.81   | 95.38    | 54.76   | 85.19   | 99.12   |
|                         | ORIGINAL $f(x) = 1$ $f(x) = (x - 0.5)^{2}$ $f(x) = (x - 0.5)^{6}$ $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ | ORIGINAL 8.43<br>f(x) = 1 8.43<br>$f(x) = (x - 0.5)^2$ 8.43<br>$f(x) = (x - 0.5)^6$ 8.43<br>$f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 | ORIGINAL 8.43 91.57 $f(x) = 1$ 8.43 91.57 $f(x) = (x - 0.5)^2$ 8.43 91.57 $f(x) = (x - 0.5)^6$ 8.43 91.57 $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 | ORIGINAL 8.43 91.57 3.75 $f(x) = 1$ 8.43 91.57 5.55 $f(x) = (x - 0.5)^2$ 8.43 91.57 5.42 $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 5.82 $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 4.75 | Resampled Datasets  ORIGINAL 8.43 91.57 3.75 90.43 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 1$ 8.43 91.57 5.55 90.5 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^2$ 8.43 91.57 5.42 90.17 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^6$ 8.43 91.57 5.82 89.77 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 4.75 90.7 | Resampled Datasets  ORIGINAL 8.43 91.57 3.75 90.43 1.14 $f(x) = 1$ 8.43 91.57 5.55 90.5 1.07 $f(x) = (x - 0.5)^2$ 8.43 91.57 5.42 90.17 1.4 $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 5.82 89.77 1.81 $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 4.75 90.7 0.87 |          | Resampled Datasets  ORIGINAL 8.43 91.57 3.75 90.43 1.14 4.68 94.18 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 1$ 8.43 91.57 5.55 90.5 1.07 2.88 96.05 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^2$ 8.43 91.57 5.42 90.17 1.4 3.01 95.59 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^6$ 8.43 91.57 5.82 89.77 1.81 2.61 95.59 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 4.75 90.7 0.87 3.68 95.45 | Resampled Datasets  ORIGINAL 8.43 91.57 3.75 90.43 1.14 4.68 94.18 44.44 $f(x) = 1$ 8.43 91.57 5.55 90.5 1.07 2.88 96.05 65.87 $f(x) = (x - 0.5)^2$ 8.43 91.57 5.42 90.17 1.4 3.01 95.59 64.29 $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 5.82 89.77 1.81 2.61 95.59 69.05 $f(x) = (x - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 4.75 90.7 0.87 3.68 95.45 56.35 | Resampled Datasets  ORIGINAL 8.43 91.57 3.75 90.43 1.14 4.68 94.18 44.44 76.71 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 1$ 8.43 91.57 5.55 90.5 1.07 2.88 96.05 65.87 83.84 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^2$ 8.43 91.57 5.42 90.17 1.4 3.01 95.59 64.29 79.41 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^6$ 8.43 91.57 5.82 89.77 1.81 2.61 95.59 69.05 76.32 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (\mathbf{x} - 0.5)^{10}$ 8.43 91.57 4.75 90.7 0.87 3.68 95.45 56.35 84.52 |

### Métriques de confusion sur les données d'entraînement

|                                 | P     | N     | TP    | TN    | FP   | FN   | accuracy | recall | precision | specificity |
|---------------------------------|-------|-------|-------|-------|------|------|----------|--------|-----------|-------------|
| Original and Resampled Datasets |       |       |       |       |      |      |          |        |           |             |
| ORIGINAL                        | 7.86  | 92.14 | 4.65  | 91.05 | 1.09 | 3.21 | 95.7     | 59.12  | 81        | 98.82       |
| $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 1$    | 47.94 | 52.06 | 41.02 | 51.42 | 0.63 | 6.92 | 92.44    | 85.56  | 98.48     | 98.78       |
| $f(x) = (x - 0.5)^2$            | 47.9  | 52.1  | 41.38 | 51.5  | 0.59 | 6.52 | 92.88    | 86.39  | 98.58     | 98.86       |
| $f(x) = (x - 0.5)^6$            | 48.06 | 51.94 | 42.68 | 50.86 | 1.08 | 5.38 | 93.54    | 88.81  | 97.54     | 97.93       |
| $f(x) = (x - 0.5)^{10}$         | 47.99 | 52.01 | 39.42 | 51.3  | 0.71 | 8.57 | 90.72    | 82.15  | 98.24     | 98.64       |
| $f(x) = (x - 0.5)^{24}$         | 48.02 | 51.98 | 40.78 | 51.04 | 0.94 | 7.24 | 91.82    | 84.93  | 97.75     | 98.19       |

