Rapport de projet, Sparse wavelet

Louis Thiry, Alexandre Saint-Dizier

2 mars 2017

Introduction

Pendant la présentation des projets par les entreprises, nous avons été séduits par le projet de prédiction de la qualité de l'air à l'échelle de la rue de Plume Labs. En effet, le problème en question est un problème de physique, et l'on peut espérer s'inspirer de son intuition et de modèles physiques pour proposer des solutions. De plus, l'application, la prédiction de la pollution à l'echelle de la rue, est intéressante et d'actualité, compte tenu des nombreux pics de pollution récents en Île-de-France.

Cependant, quand nous avons commencé à étudier les données, nous nous sommes rendus compte qu'un bon nombre de paramètres relevant de la physique du problème étaient exclus dans les données fournies, ce qui empêchait d'avoir une approche physique du problème et qui remettait sérieusement en cause l'ambition affichée : prédire la qualité de l'air à l'échelle de la rue. Nous avons contacté Plume Labs pour en savoir plus, et ils nous ont répondu que cela était volontaire, le but réel du projet étant de "prédire la pollution à des points précis à partir d'informations statiques sur ces points et d'informations structurelles extraites sur les séries temporelles".

C'est donc à ce problème que nous nous sommes attaqués, certes très intéressant, mais aussi très limité dans son approche physique.

1 Les données à notre disposition

Les données du problème concernent les contentrations de trois types de polluants (NO_2, PM_{10}, $PM_{2,5}$) sur une période de temps T donnée dans six villes inconnues, numérotées de 0 à 5. Chaque ville comporte 4 ou 5 stations (29 au total sur les six villes, numérotées de 1 à 29).

1.1 Variables explicatives

Pour chacune des stations, nous avons les variables explicatives suivantes :

— 19 variables statiques, qui nous renseignent sur l'entourage du point où les mesures sont faites :
  — la surface cumulée de zones résidentielles à faible densité dans un rayon de 25/50/150/250/500 mètres autour du point
  — la surface cumulée de zones résidentielles à haute densité dans un rayon de 25/50/150/250/500 mètres autour du point
  — la surface cumulée de zones industrielles dans un rayon de 500 mètres autour du point
  — la surface cumulée de zones portuaires dans un rayon de 2500 mètres autour du point
  — la surface cumulée d'espaces verts dans un rayon de 2500 mètres autour du point
  — la distance cumulée de routes dans un rayon de 50/150/250/500 mètres autour du point
  — l'inverse de la distance à la route la plus proche
— 9 variables dynamiques, dont on a les valeurs sur pratiquement toute la periode T, à intervalles de temps d'une heure :
  — La température
  — La vitesse du vent
  — l'orientation du vent, via la valeur du cosinus et du sinus de l'angle par rapport à une référence inconnue
  — l'ennuagement
  — l'intensité des précipitations
  — la probabilité de précipitations
  — la pression
  — une variable booléenne qui indique si le jour est calme ou non

1.2 Données d'entrainement

Comme données d'entrainement, nous avons les concentrations en polluants à intervalle de temps d'une heure sur toute la période pour 2 ou 3 stations par ville (17 sur 29 au total) pendant 1 an et demi environ. Pour les 12 autre stations (2 par ville), nous n'avons **aucune** valeur de concentration en polluants, que nous devons prédire sur les **mêmes** temps, avec par conséquent les mêmes données dynamiques. En effet, à une heure donnée, les données météorologique (température, vent, pression, ennuagement) sont rigoureusmenent les mêmes pour toutes les stations d'une zone. Ce sont donc uniquement les données statiques qui différencient les stations les unes des autres, y compris pour les stations d'entrainement et de test.

1.3 Problème posé

Le problème est un problème de régression très général : étant données les variables explicatives et l'évolution temporelle des concentrations en polluants à certain points sur une période T, prédire l'évolution temporelle des concentration en d'autre points à partir des données météorologiques et statiques. Pour ce faire, nous n'avons que très peu d'exemples (2 ou 3 par ville), bien que la période T soit longue. La tâche s'annonce donc compliquée.

1.4 Remarques sur les données

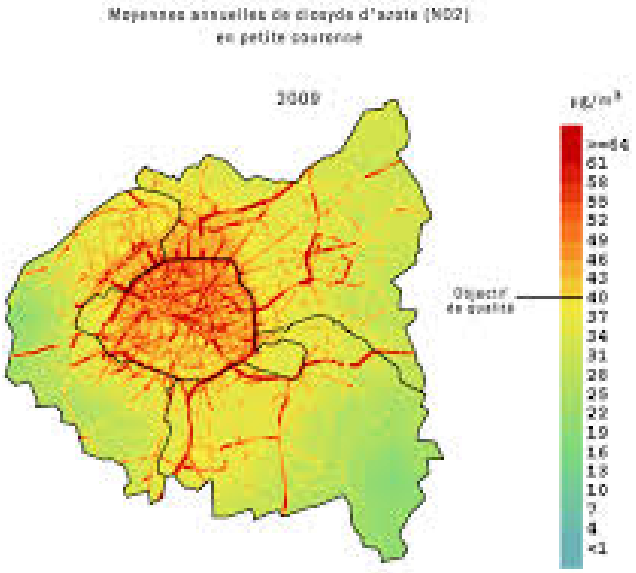
— Le comportement physiques des trois polluants est très différent. Les particules $PM_{2,5}$ et PM_{10} ont une taille entre 1 et 10 micromètres, et sont suffisamment légères pour rester en suspension dans l'atmosphère. Elle sont solubles dans l'eau ; la pluie a donc une très grande influence sur leur concentration dans l'air.

Le NO_2 est une molécule de taille moléculaire, soit quelques angströms, beaucoup plus petite que les particules, avec une inertie beaucoup plus faible. Elle est de plus bien moins sensible à la pluie que les micro particules.

Le comportement des différents polluants est donc radicalement différent. Cela suggère de traiter différemment les microparticules et le NO_2.

— Nous n'avons aucune donnée géographique qui nous renseigne sur la position relative des différents points les uns par rapport aux autre, ni sur la position relative des éléments (par exemples les routes) qui sont dans l'entourage du point auquel est fait la mesure. Nous ne pouvons donc pas espérer apprendre les paramètres d'un modèles pertinent utilisant des théories physiques comme la conduction, qui nous permettraient d'avoir des résultats extrêmement précis ; il s'agit d'un pur problème de machine-learning.

— Prenons une carte de répartition annuelle du NO_2 sur Paris (source :



On constate que la pollution est phénomène spatial, et que le NO_2 est principalement concentré autour des grands axes routiers. Il est aussi pertinent de différencier les routes en différentes catégories selon leur fréquentation. Notons au passage que les routes sont classés selon différents types qui semblent être déterminants pour la pollution en NO_2, or nous n'avons qu'un type de route à notre disposition, et aucune information sur l'affluence. On peut donc sans aucun doute trouver des points qui auront les même valeurs statiques (surfaces cumulées) et pour lesquels le niveau de pollution est pourtant très différent.

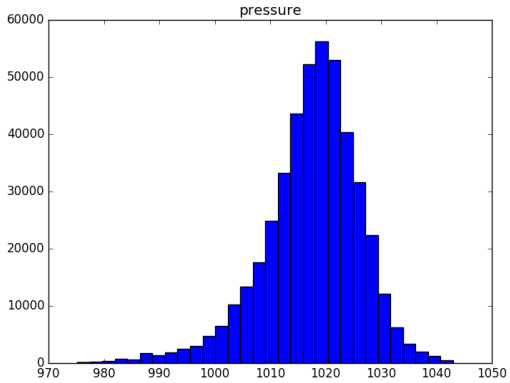
— Nous avons fait un script pour vérifier autant que possible la cohérence des données, pour avoir une une idée du niveau de fiabilité des différents paramètres du problème. Nous avons alors repéré que l'angle d'orientation du vent nous est donnée par son cosinus et son sinus, dont la somme des carrés ne font pas 1 en général (moyenne = 0.995, écart type = 0.06 , maximum = 1.995 , minimum = $2.4 \cdot 10^{-11}$)

1.5 Exploration des valeurs

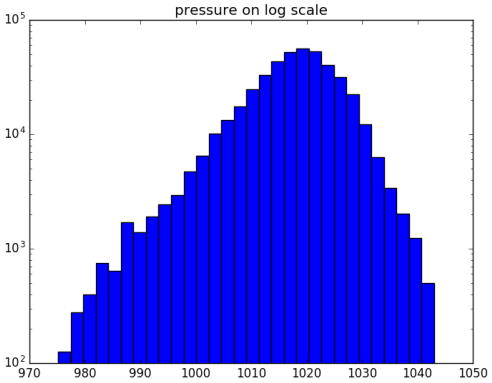
1.5.1 Influence des données constatées en première approche

1.5.2 Les données dynamiques

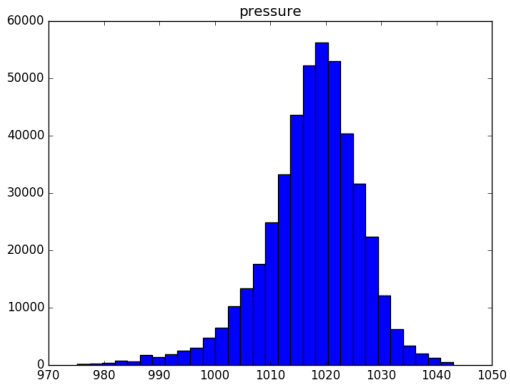
Pour se rendre compte de la répartition des valeurs des données dynamiques, on affiche les histogramme de ces valeurs sur une echelle logarithmique :



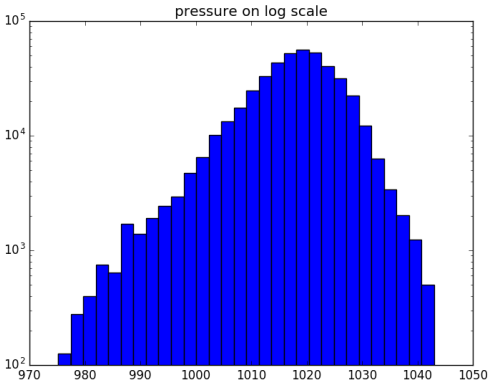
pression



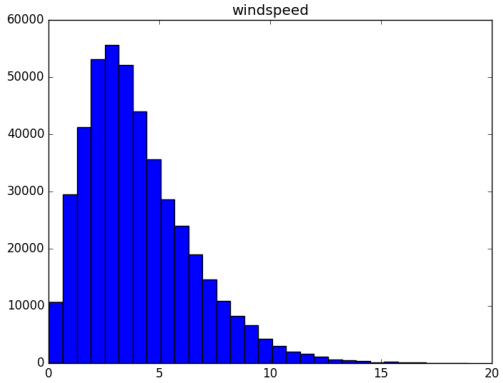
pression sur échelle log



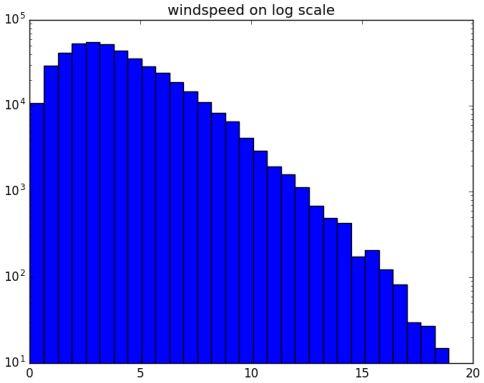
pression



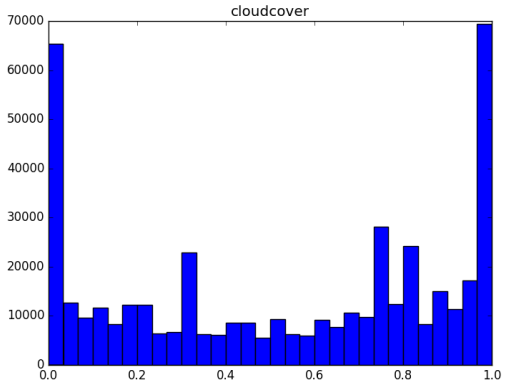
pression sur échelle log



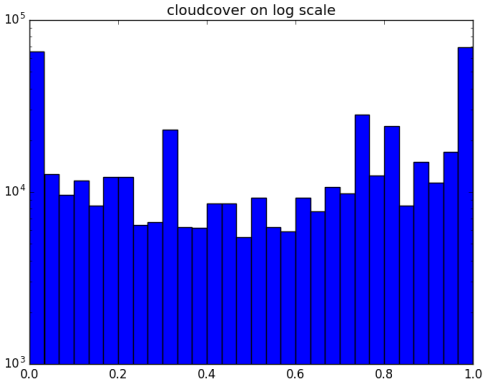
vent



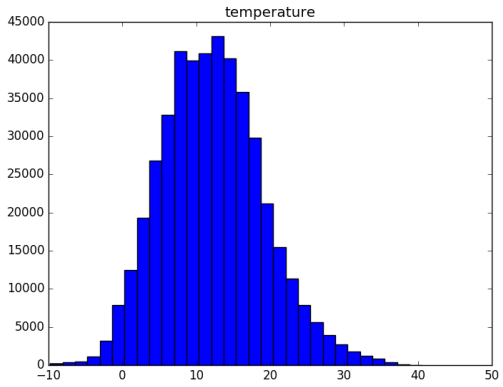
vent sur échelle log



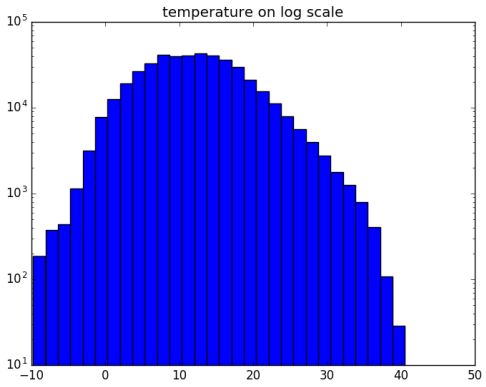
ennuagement



ennuagement sur échelle log



temperature



temperature sur échelle log

Il apparaît donc que les données sont plus étalées sur un échelles logarithmique. Dans la mesure ou nous cherchons à appliques des techniques de régression simples et avec une forte régularité (regression lineaire), le fait d'utiliser des échelles logarithmiques est une première transformation que nous pouvons appliquer à nos données avant d'utiliser des modèles de régression simples.

1.5.3 Les données statiques

Les données statiques ne sont pas toutes renseignées sur certaines stations. Cela peut être problématique si l'on souhaite utiliser un algorithme d'apprentissage commun à toute les stations. Cependant, nous avons au moins une valeur par catégorie dans les données de type concentration cumulées, ce qui nous a permis d'interpoler les valeurs manquantes. Pour les autres (industrie, port, zones naturelles), les données sont considérées comme nulles si non renseignées, ce qui semble être raisonnable.

1.6 Conclusion

En conclusion, les données du problèmes sont peu fiables et discutables. Le fait que les données sur les routes ne soient pas différenciées sera surement un problème pour prédire les concentrations de NO_2. De même, partager les même données dynamiques pour toutes les stations d'une zone est discutable, surtout concernant la force et l'orientation du vent, jouant pourtant un rôle essentiel dans l'évolution de la concentration.

Un autre aspect important est cette distinction entre les données statiques (très variées et dont nous disposons que de 29 exemples) et les données dynamiques en grand nombre, identiques par zone, mais non redondantes entre les zones. Cela nous empêche donc d'apprendre un modèle par zone, et nuit à l'apprentissage d'un modèle commun aux zones. Cet aspect est la principale difficulté du problème.

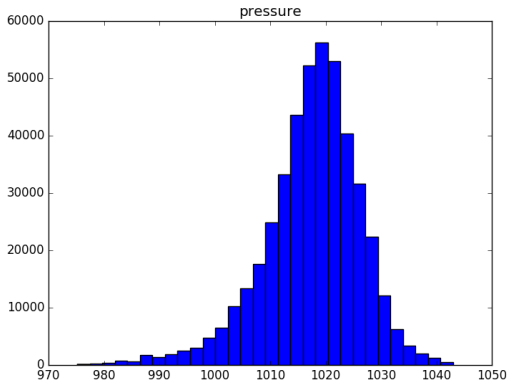
Nous pouvant ainsi dès à présent anticiper que les prévisions de ce problème resteront très grossières, surtout concernant le NO_2.

2 Transformation des données

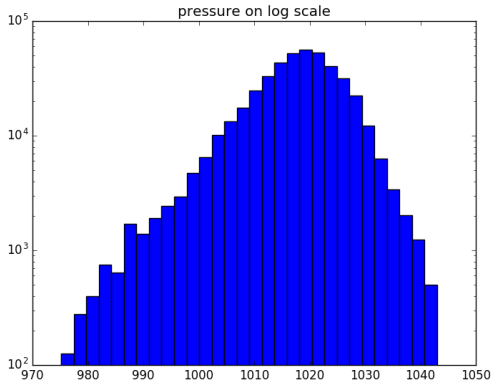
2.1 Les données dynamiques

2.1.1 Echelle

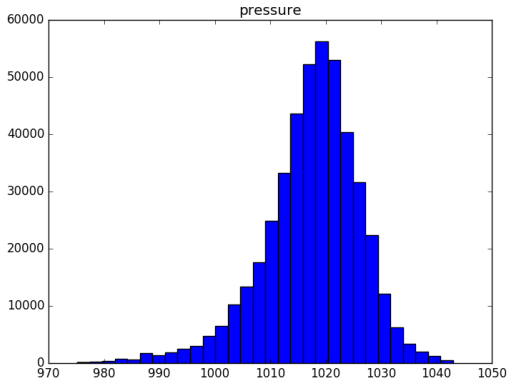
Pour se rendre compte de la répartition des valeurs des données dynamiques, on affiche les histogramme de ces valeurs sur une echelle logarithmique :



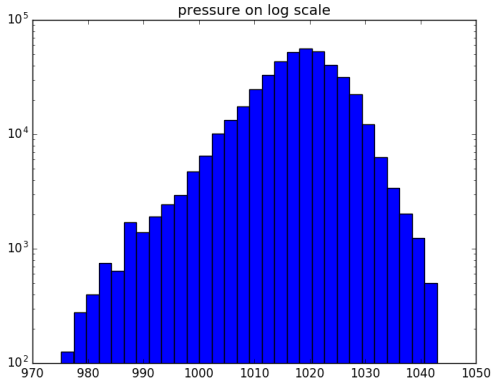
pression



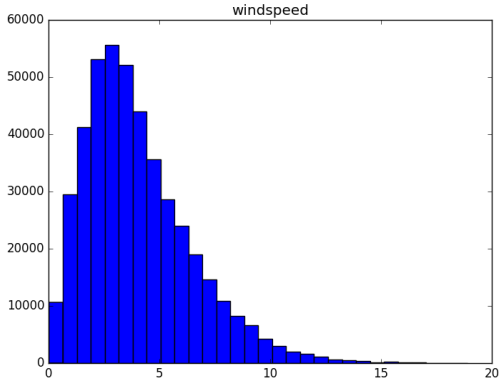
pression sur échelle log



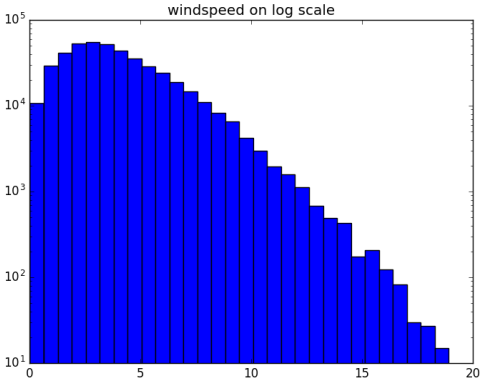
pression



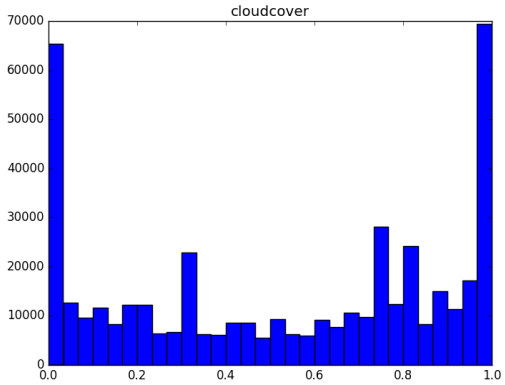
pression sur échelle log



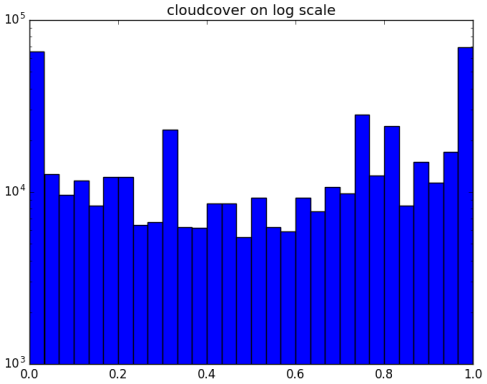
vent



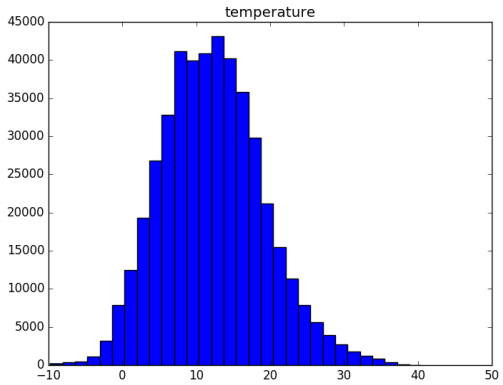
vent sur échelle log



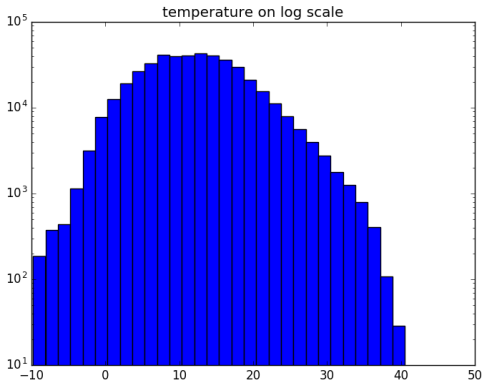
ennuagement



ennuagement sur échelle log



temperature



temperature sur échelle log

Il apparaît donc que les données sont plus étalées sur un échelles logarithmique. Dans la mesure ou nous cherchons à appliques des techniques de régression simples et avec une forte régularité (regression lineaire), le fait d'utiliser des échelles logarithmiques est une première transformation que nous pouvons appliquer à nos données avant d'utiliser des modèles de régression simples.

2.1.2 Représentations temps fréquence

2.2 Les données statiques

Les données statiques sont des surfaces cumulées dans des périmètres de plus en plus grands

3 Techniques existantes

Dans la description du challenge, Plume Labs donne les références de deux articles qui décrivent et implémentent un modèle de régression de la pollution. Le premier [] traite exclusivement le cas de la pollution en NO_2, qui est prédité uniquement à partir de variables statiques. Elles sont beaucoup plus précises que celles que nous avons à disposition :

— 4 types de routes sont distingués

— on a les valeurs u traffic routier moyen dans des zones de différents rayons

— l'altitude est donnée

— les batiments sont classés par taille

De plus, les données d'entrainement sont beaucoup plus conséquentes : pour une seule ville, il y a 25 points pour lequels la pollution est connue et nous n'en avons que 3 par ville.

Le second [] traite exclusivement le cas des particules ultrafines (diamètre inférieur à 0.1 micromètres), auxquelles n'appartiennent pas les particules PM_{10} et $PM_{2.5}$ que nous étudions. Cette fois ci, les données sont constittuées de données statiques et de données météorologique, et là encore, les données statiques sont beaucoup plus précises que celles que nous avons.

4 Solutions

Comme nous l'avons vu dans la section 1, le principal défi du problème est de réussir à traiter avec le bivalence des données. En outre,

4.1 Plus proche voisins

On commence par implémenter une methode des K plus proches voisins sur les données brutes séparées polluant par polluant. On fait plusieurs essais et voici ce qu'on obtient :

score	methode	K
597.379	par polluant	K = 5
617.229	par polluant	K = 3
613.892	par polluant	K = 4
613.892	par polluant et par zone	K = 4

Etonnament, le fait de faire la méthode par polluant et par zone ne change pas le résultat. De plus, on n'est pas très loin du score du benchmark proposé par Plume Labs (501).

4.2 Méthode triviales

On essaie ensuite trois méthodes triviales :

— On met la valeur zéro pour toutes les prédictions : le score de 800 environ. Cela nous donne un ordre de grandeur sur les score : toute méthode donnant un score supérieur à 800 n'est vraiment pas adaptée.

— On met une valeur constante pour chaque polluant égale à la moyenne de toutes les valeurs pour ce polluant : on obtient une score de 380 environ.

— On calcule la valeur moyenne pour chaque polluant à chaque instant donné : on obtient un score de 440.000 environ. Cette méthode n'apporte rien par rapport à la valeur moyenne

4.3 Application brut aux données

4.3.1 Régression linéaire

On teste un modèle linéaire sur les données. Puisque le modèle linéaire contient les fonctions constantes, a priori, le score devrait être au pire de l'ordre de la valeur obtenue en

mettant la moyenne, c'est à dire 350.000. Etonnament, on obtient un score de 430.000. Cela veut dire qu'avec une classe de fonction aussi simple que les fonctions linéaires, on overfitte déjà sur les données d'entrainement. Ou alors les données test réagissent différemment que les données d'entrainements, dû par exemple à un paramètre important manquant. Mais ce n'est pas tellement étonnant ; en effet, nous n'avons que 29 jeu de données statiques alors que ces données vivent dans un espace de dimension 18. Quelque soit la méthode employée, à moins d'avoir de la chance, on ne peut pas espérer obtenir une bonne prédiction.

4.3.2 Gradient boosting

Nous avons choisi de tester également un algorithme plus élaboré et plus adapté au problème. Nous avons choisi la random forest (ou communement appelée gradient boosting dans sa version boostée, pour améliorer les performances et réduire l'overfitting). En effet, les types de données du problème sont très diverses (mesure physiques, boolean, probabilités, ...), et bien qu'étant une régression, ce problème à une valeur décisionnelle importante. Comme nous l'avons vu, de nombreux paramètres interviennent de façon binaires. Par exemple beaucoup de vent ou beaucoup de pluie va entrainer automatiquement peu de polluant. Enfin, comme expliqué, le risque d'overfitting est énorme.

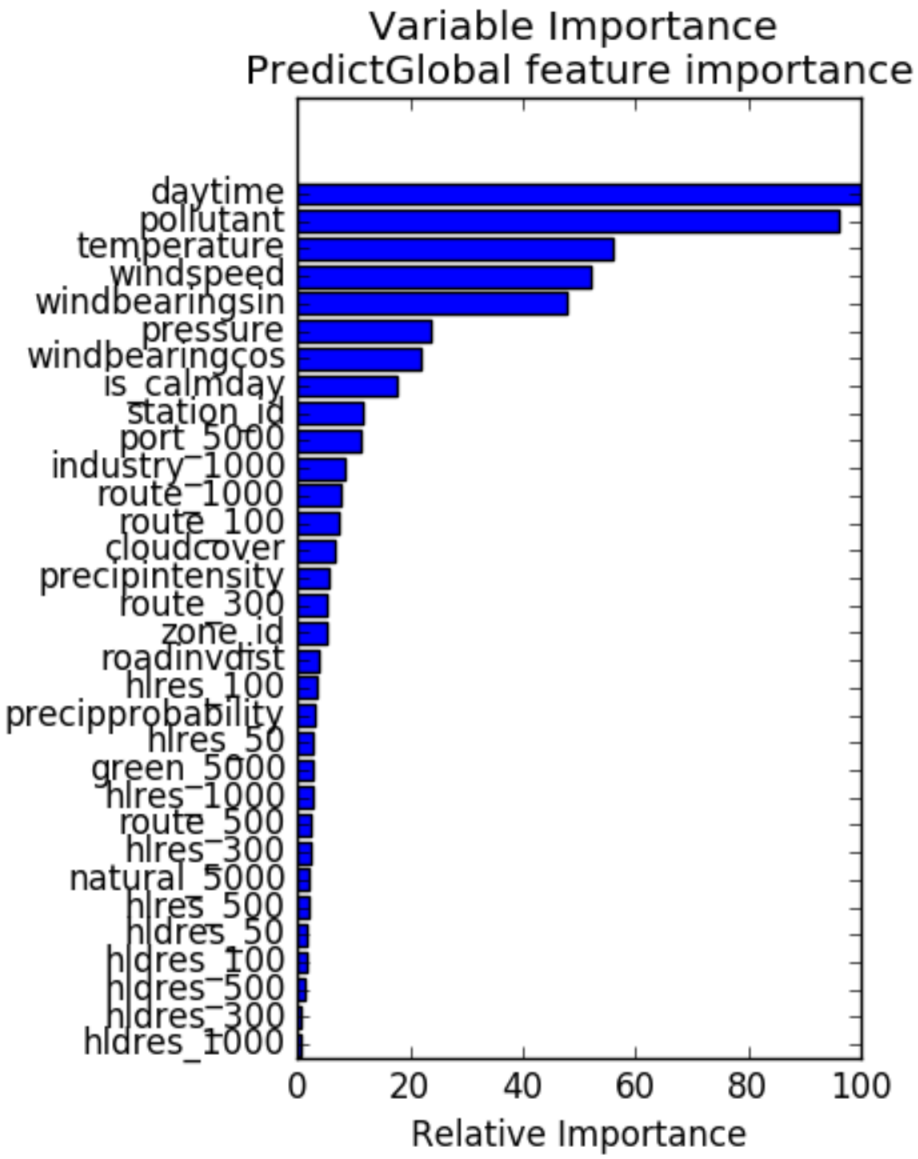
Nous avons donc fait tourner un algorithme de gradient boosting sur les données, après avoir interpolé les valeurs statiques manquantes, et avoir numéroté les différents polluants.

Dans notre protocole, pour se rendre d'un éventuel overfitting, nous avons séparé les données d'entrainement en train/validation par station. Ainsi nous sommes a priori exactement dans les mêmes conditions que lors de la prédiction des données test. En outre, les données test ayant exactement les mêmes paramètres dynamiques par zone que les données d'entrainement, il est impossible de faire de l'overfitting vis-à-vis de ces-derniers.

Nous avons comme résultat : 261 sur les données de validation, 302 sur les données test.

Sur les données de validation, nous avons des prédictions nettement meilleurs sur les microparticules (environ 100) que sur le NO_2 (465), ce qui rejoint notre analyse a priori des données. En outre, nous pouvons afficher l'importance relative des données lors de l'apprentissage.

feature global.png



Ce graphique est très instructif, et on voit qu'il confirme nos raisonnements a priori sur les données.

— Le type de polluant a joué un rôle crucial dans la prédiction, ce qui nous confirme dans l'idée de séparer les polluants.

— Les données statiques ont rôle moindre par rapport aux données dynamique, ce qui est étonnant, surtout pour les routes qui devrait beaucoup influer sur le NO_2. Cela nous conforte dans l'idée que les paramètres statiques en notre possession sont peu pertinents.

— Le temps joue en rôle crucial également dans la prédiction. Bien que n'intervenant pas physiquement sur les polluant, il régit les activités humaines (et influe certain paramètres physiques), et donc la création de polluants.

— le numero de la station (stationid) joue en rôle important aussi, supérieur aux données statiques.

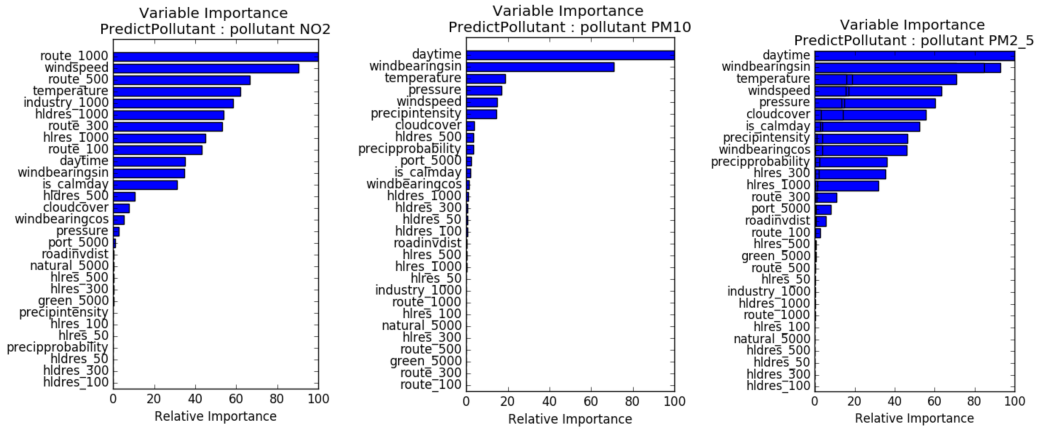
4.4 Arrangement des données

4.4.1 Gradient boosting

Comme prévu, l'algorithme de gradient boosting fonctionne mieux que la régression linéaire, et ses résultats nous encouragent encore plus à séparer les polluants. Nous avons donc appliqué l'algorithme précédent à chaque polluant indépendamment.

En outre, étant donné l'importance du temps, qui est brut sous sa forme présente, nous avons divisé ce paramètre en plusieurs hyper-paramètres pertinents a priori : heure/mois/-semaine/jour. Ainsi, nous utilisons un maximum les informations a priori sur l'influence des paramètres. Il pourrait aussi sembler utile de diviser également les données par zone, mais nous n'aurions alors plus assez de données statiques différentes pour apprendre (seulement 3).

Les résultats obtenus sont bien meilleurs : 160 sur les données de validation, et 250 sur les données test. Nous n'avons pas optimisé cette méthode, usant de cross-validation ou autre technique d'ingenieure pour améliorer cette performance, car comme le prouve notre analyse et le benchmark, cela ne nous permettrait pas d'améliorer beaucoup notre score (passer de 15.5^2 à 14^2...).



Les importances des paramètres ne font que confirmer ...

4.4.2 Séparation

Jusqu'ici nous n'avons pas encore essayé de palier à la bivalence des données d'entrainement. Les données dynamiques joue le rôle principal, mais le problème consiste à apprendre l'influence des données statiques (nous devons predire sur de nouvelles stations, et non sur de nouvelles données météorologiques). Dans l'application des algorithmes jusqu'à présent, les très maigres données statiques sont noyées dans la multitude des données dynamiques. Or le problème voudrait que l'on apprenne juste la dépendance envers les données dynamiques via les données statiques.

De plus, en première approximation, les données statiques et dynamiques jouent des rôles opposés. Les données statiques, purement liées aux activités humaines, régissent la création de polluant, alors que les données météorologiques régissent la dispersion des polluants. Nous pouvons donc modéliser la dépendance des paramètres, en notant s pour statique, d pour dynamique et t pour le temps :

$$p(s, d, t) = g(s, t) - f(d)$$

avec g et f deux fonctions à apprendre. Cela nous permet de séparer les données et ainsi d'apprendre mieux la dépendance statique.

En pratique, n'ayant pas accès à f et g, nous apprenons les deux l'un après l'autre. On initialise g par le maximum de polluant observé par station sur la durée donnée. Puis on apprend f, qu'on utilise pour apprendre g et ainsi de suite, en espérant une convergence.

Data: Données d'entrainement strain, dtrain, ytrain
Result: fonctions f et g
Initialiser $gtrain$ par $gtrain(strain) = \max_{dtrain}(Data(strain, dtrain))$;
for $i = 1$ *to* $iterationNumber$ **do**
  $ftrain \leftarrow gtrain - ytrain$;
  Apprendre f avec $f(dtrain) = ftrain$;
  $gtrain \leftarrow f(dtrain) + ytrain$;
  Apprendre g avec $g(strain) = gtrain$;
end

Algorithm 1: Algorithme d'entrainement de la méthode séparation

En pratique l'algorithme converge rapidement, et les résultats sont : - si g(s,t) = g(s) - si g(s,t) = g(s,t) - si g(s,t) = g(s,t,calmday)

4.5 Conclusion

bla bla bla c'est pourri