Prédiction probabiliste de séries temporelles multivariées de mobilité avec des modèles basés sur l'apprentissage profond

Spring school Data Science
Centrale Casablanca - 8-12 Mai 2023

Paul DE NAILLY

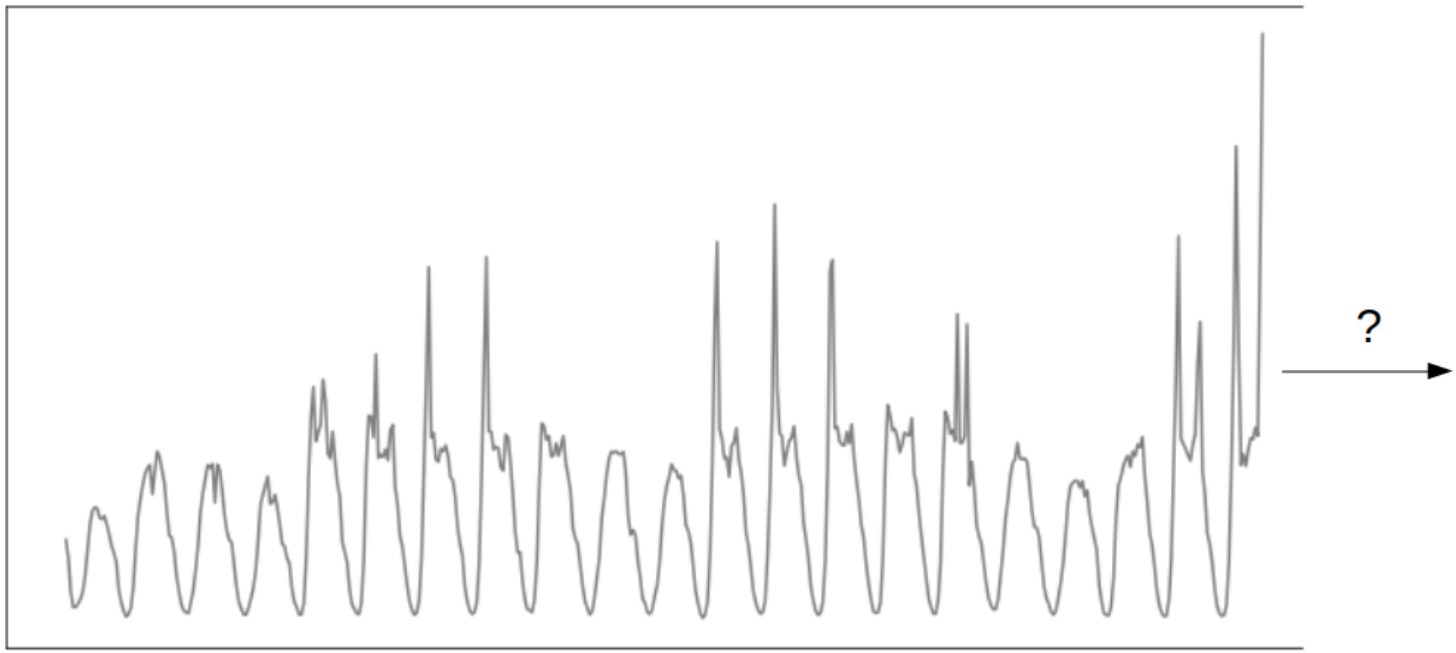
Plan de présentation

Présentation disponible sur : https://github.com/pdenailly/Atelier-Summer-School

Contexte et objectifs

Contexte

La prédiction de séries temporelles

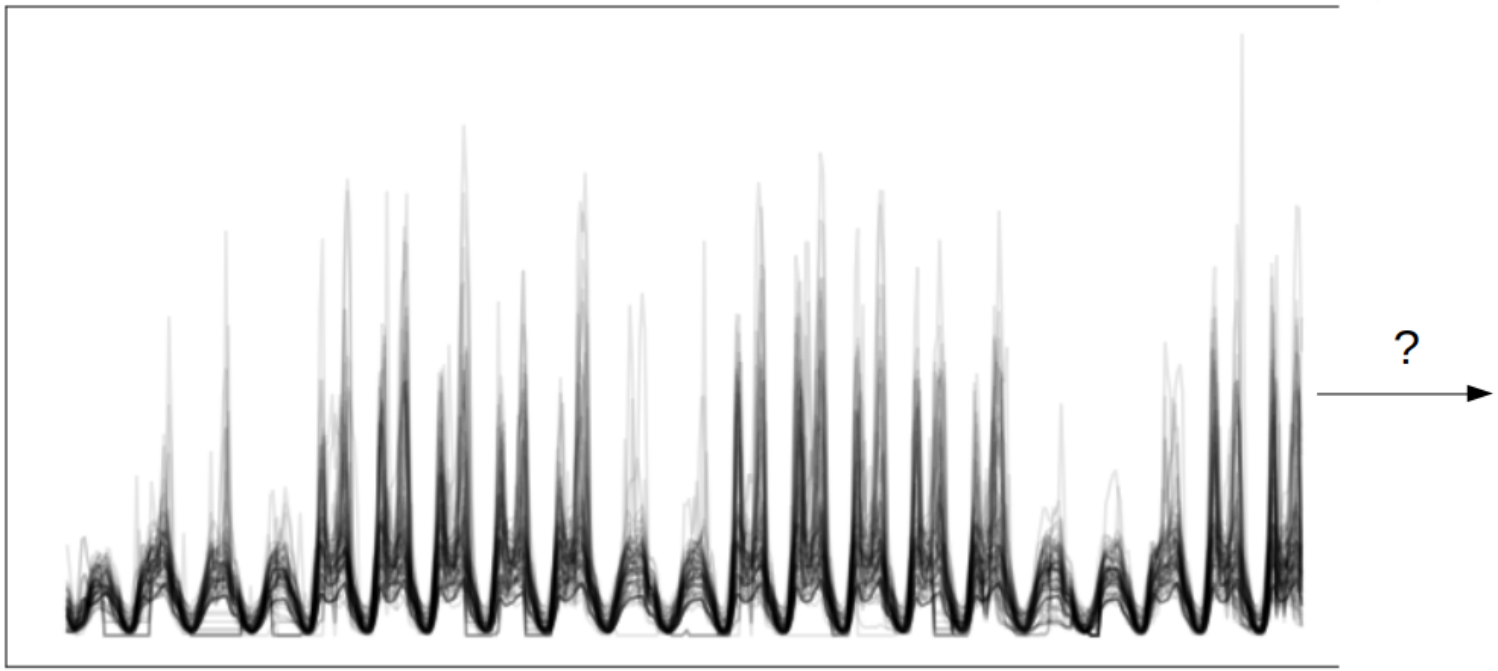


Des méthodes pour la prédiction de séries temporelles

- Modèles de régression linéaire
- Modèles autorégressifs : AR, ARMA, ARIMA, SARIMA
- Machine learning : méthodes à noyau, forêts aléatoires
- Deep learning : Réseaux de neurone récurrents (RNNs)

Contexte

Problème des séries multivariées - grandes dimensions

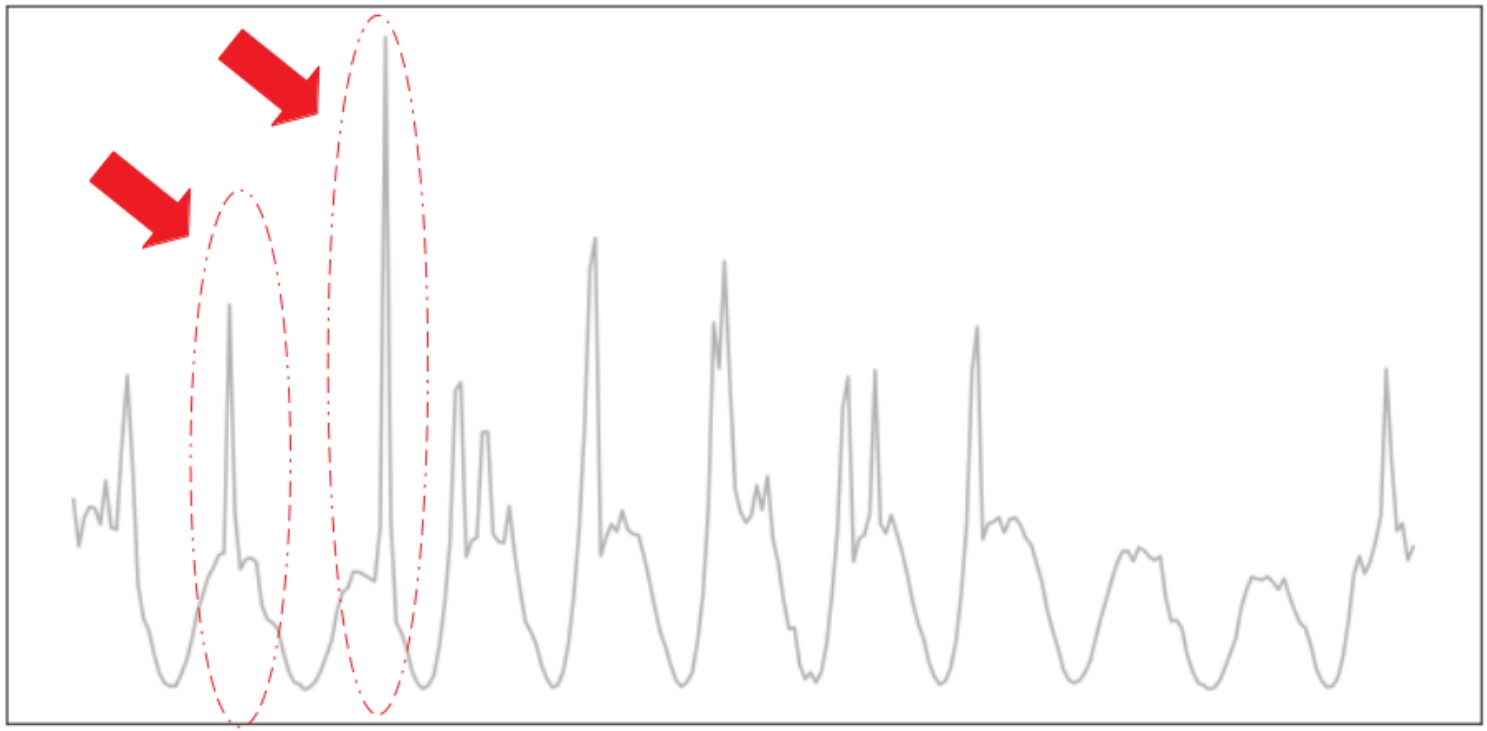


Si la série est multivariée (dimension N) :

1. Dépendances entre séries $\longrightarrow$ Matrice de covariance (Σ)
2. Equivaut à estimer $O(N^2)$ paramètres, potentiellement variables dans le temps (si Σ pleine).

Contexte

Problème des prédictions probabilistes - avec incertitude



De nombreuses situations où prédire sous un certain seuil de risque est plus pertinent !
Prédire des enveloppes de confiance au lieu de prédictions déterministes ?

Objectifs ❓

Prédiction dans un cadre probabiliste de séries temporelles multivariées et corrélées avec des méthodes basées sur le *deep learning*, en utilisant les travaux proposés par [Salinas et al., 2019].

Dans cet atelier :

1. **Une présentation** des architectures pour la prédiction probabiliste de séries multivariées, leurs variantes, les hyperparamètres, etc..
2. **Un cas pratique** avec la librairie GluonTS de Python, appliqué à des données de traffic de vélos.

Quelques rappels : Deep Learning

Rappels : Deep Learning

Principe général d'un réseau de neurones : passer d'un ensemble de données en entrée à des sorties *via* le calcul de représentations des entrées en couches cachées successives. Les poids de passage d'une couche à l'autre doivent être estimés.

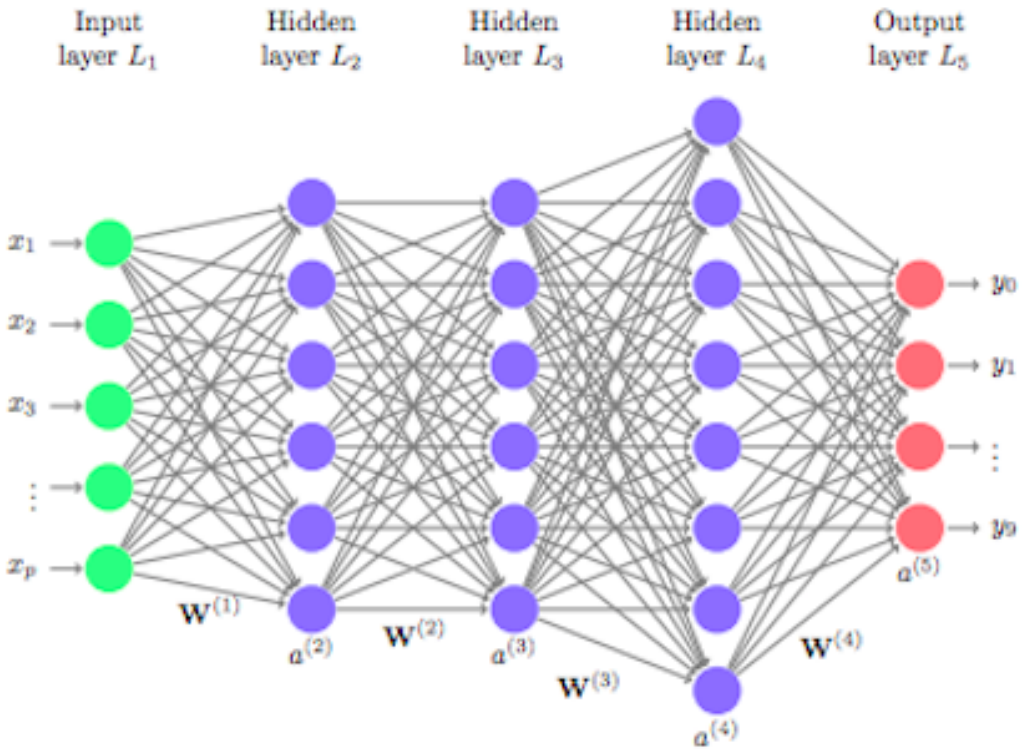
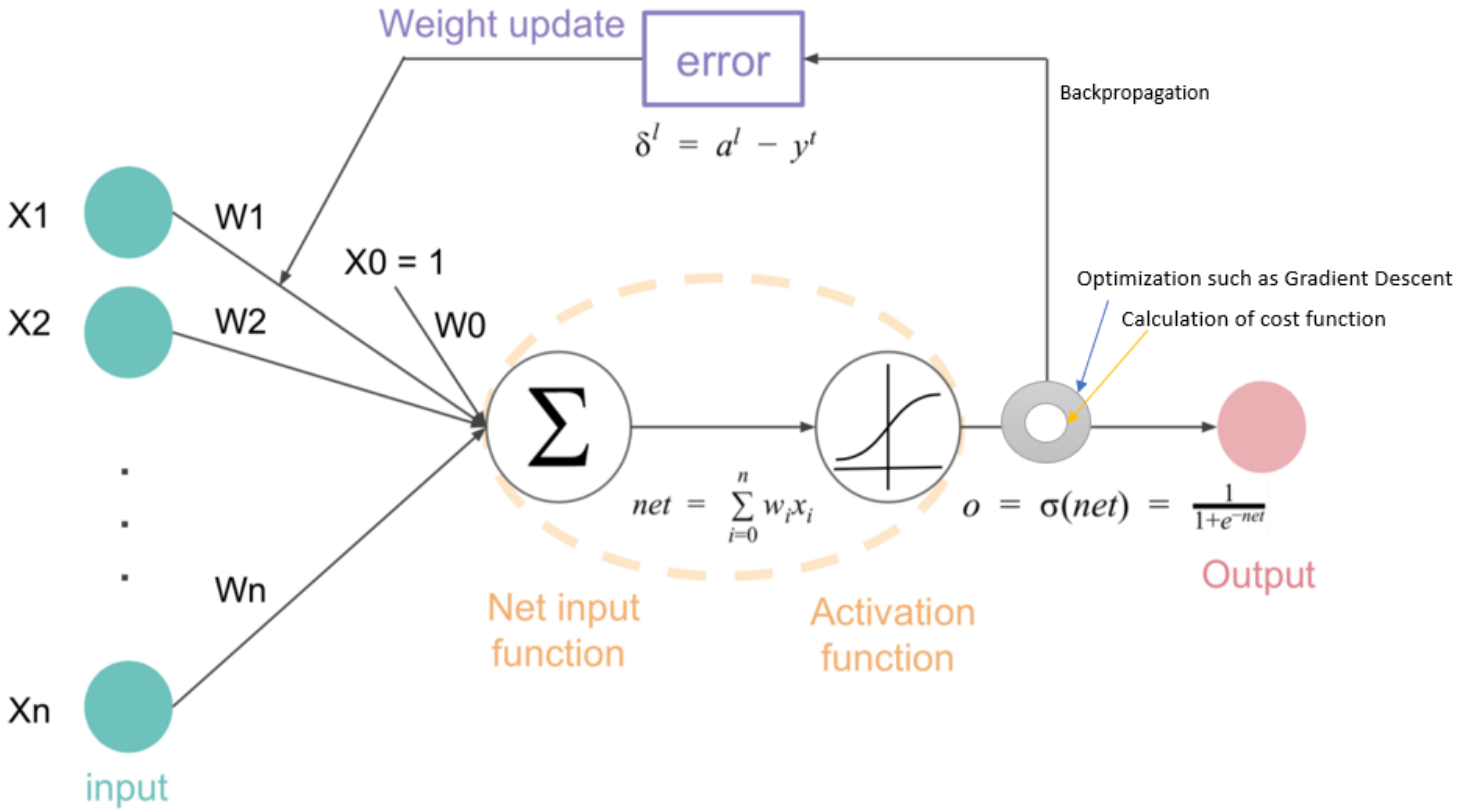


Image : UC Business Analytics R Programming Guide

Rappels : Deep Learning

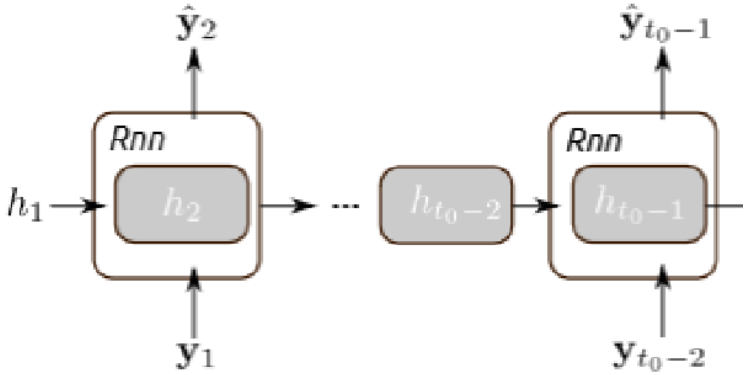
Estimation des poids : backpropagation.



Test de modèles avec différentes valeurs d'hyperparamètres : nombre de couches, taux d'apprentissage, etc..

Rappels : Deep Learning

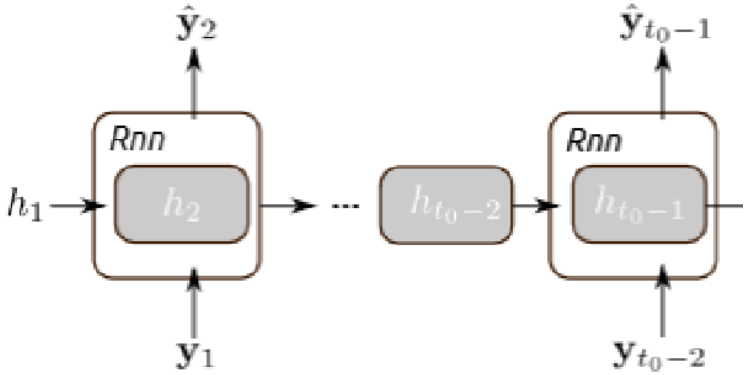
Les réseaux de neurone récurrents (RNNs)



- Adaptés à la prédiction de séries temporelles
- Différents types de cellules possibles : LSTM ou GRU

Rappels : Deep Learning

Les réseaux de neurone récurrents (RNNs)



- Hyperparamètres :
  - Pas d'apprentissage
  - Taille de couche cachée
  - Nombre de couches
  - Dropout
  - Taille de lot (batch)

Les RNNs pour la prédiction probabiliste

Formalisation

Soit $y_{i,t}$ une valeur/un comptage en un point i (avec $i \in \{1, ..., N\}$) et une tranche de temps t.
On peut écrire $\mathbf{y}_t = \{y_{1,t}, ..., y_{N,t}\}$.

But
Estimer la distribution $p(\mathbf{y}_{t_0:T} | \mathbf{y}_{1:t_0-1}, \boldsymbol{\chi}_{1:T})$, les futures distributions de probabilité des séries temporelles de t_0 à T connaissant les données jusqu'à $t_0 - 1$ et les données exogènes $\boldsymbol{\chi}_{1:T}$.

Réseau de neurone récurrent probabiliste

Prédiction probabiliste des séries en t, $\mathbf{y}_t$, suivant le système :

$$\mathbf{h}_t = f(\mathbf{U}\mathbf{z}_t + \mathbf{W}\mathbf{h}_{t-1}),$$
$$\mathbf{y}_t|\mathbf{h}_t \sim g(\mathbf{y}_t; \Phi(\mathbf{V}\mathbf{h}_t))$$

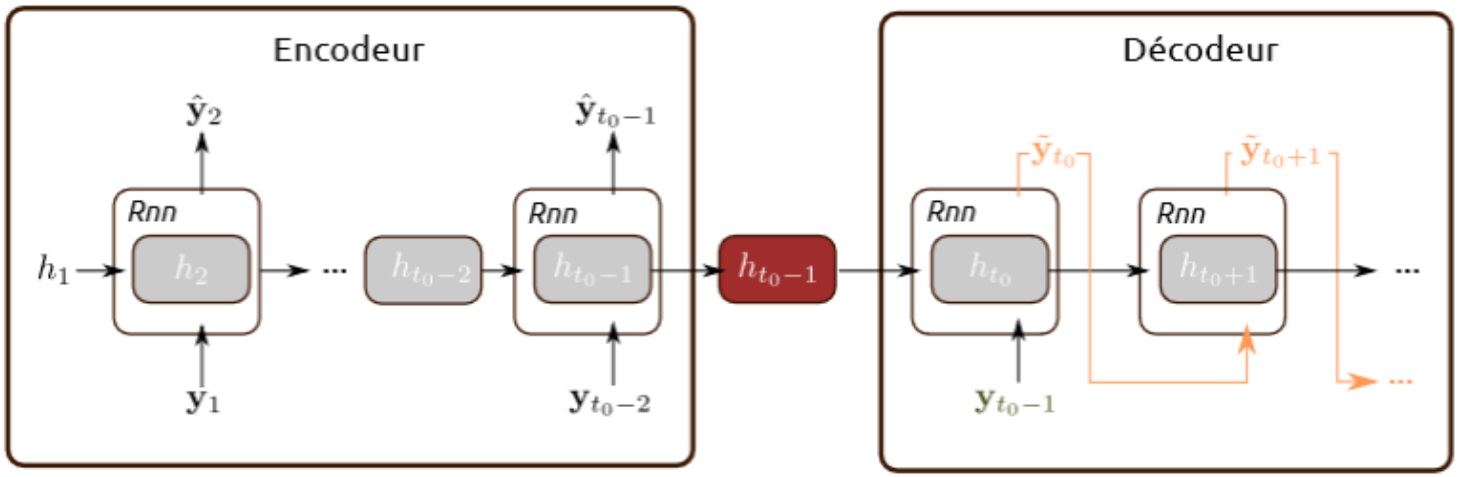
avec $\mathbf{z}_t = \{\mathbf{y}_{t-1}, \boldsymbol{\chi}_t\}$.

- $g \Longrightarrow$ modèle de distribution des comptages.
- $\mathbf{V}\mathbf{h}_t \Longrightarrow$ ensemble des paramètres de la distribution g.
- Besoin d'estimer les matrices $\mathbf{U}$, $\mathbf{W}$ et $\mathbf{V}$.

Réseau de neurone récurrent probabiliste

Utilisation d'une architecture de type Encodeur-Décodeur.

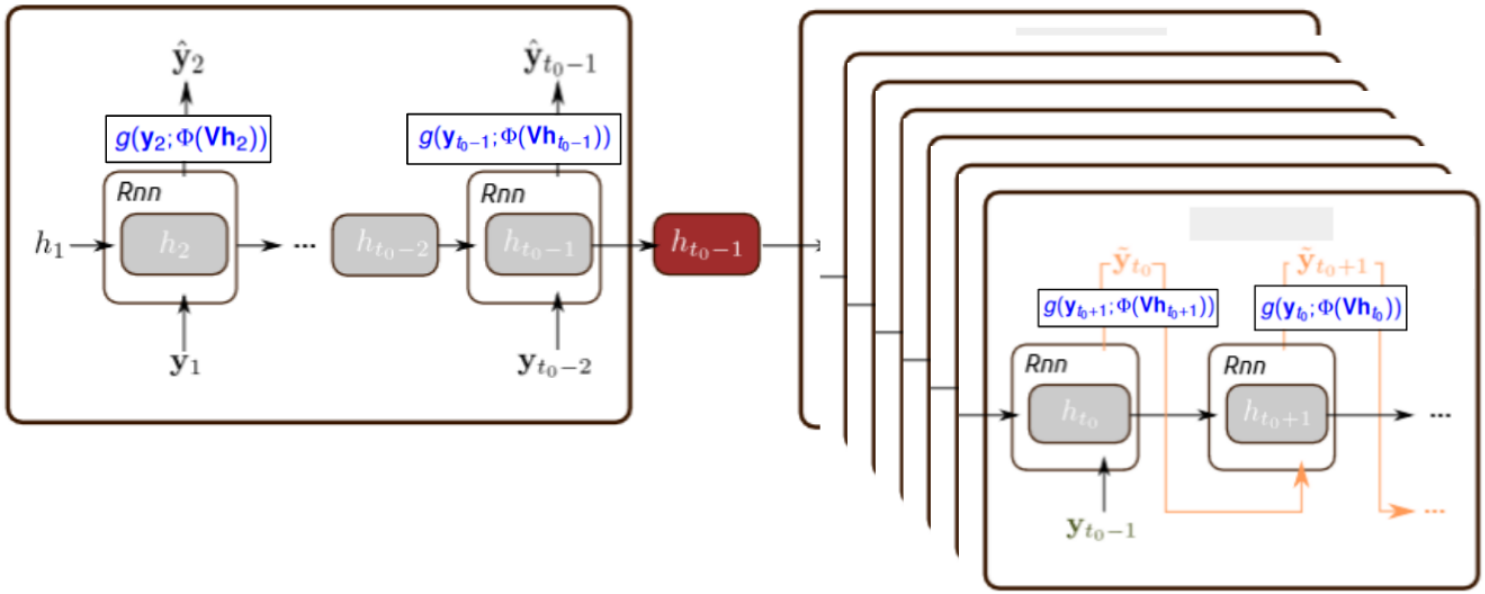
- L'**encodeur** intègre en entrée une séquence d'observations, et la transforme en "contexte" (la dernière couche cachée).
- Le **décodeur** récupère ensuite la sortie émise par l'encodeur, pour l'associer à un ensemble d'observations.



Réseau de neurone récurrent probabiliste

Utilisation d'une architecture de type Encodeur-Décodeur.

- L'**encodeur**
- Le **décodeur**



- **Cadre probabiliste** : *y* tirés des distributions *g* + échantillons de Monte Carlo sur le décodeur pour obtenir un échantillon de prédictions.

Présentation de quelques architectures de modèles issues de l'article de [Salinas et al., 2019]

Architecture de base

Encodeur-décodeur avec une distribution **gaussienne multivariée** en sortie.

$$\mathbf{h}_t = f(\mathbf{U}\mathbf{z}_t + \mathbf{W}\mathbf{h}_{t-1})$$

$$\mathbf{x}_t|\mathbf{h}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \mu(\mathbf{h}_t), \Sigma(\mathbf{h}_t)) \Longrightarrow \text{gaussienne multivariée}$$

avec :

- $\mathbf{x}_t = m(\mathbf{y}_t)$, une transformation de $\mathbf{y}_t$ avec une fonction $m(.)$.
- $\mu(\mathbf{h}_t) = (\mu_1(h_{1,t}), ..., \mu_N(h_{N,t}))$ des **transformations** de $\mathbf{h}_t$ en paramètres de **moyenne** de la gaussienne.
- $\Sigma(\mathbf{h}_t) = (\Sigma_1(h_{1,t}), ..., \Sigma_N(h_{N,t}))$ des **transformations** de $\mathbf{h}_t$ en paramètres de **covariance** de la gaussienne.

Architecture de base

Encodeur-décodeur avec une distribution **gaussienne multivariée** en sortie.

$$\mathbf{h}_t = f(\mathbf{U}\mathbf{z}_t + \mathbf{W}\mathbf{h}_{t-1})$$

$$\mathbf{x}_t|\mathbf{h}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{x}_t; \mu(\mathbf{h}_t), \Sigma(\mathbf{h}_t)) \Longrightarrow \text{gaussienne multivariée}$$

Plusieurs variantes de modèles au niveau de :

- Prise en compte de la matrice de covariance Σ,
- Transformation des données en entrée $m(.)$.

Variantes du modèle

Gestion de la matrice de covariance Σ

- **Première stratégie : matrice pleine**
  - $\Sigma(h_t) \Longrightarrow$ matrice symétrique $N \times N$.
  - $O(N^2)$ paramètres à estimer.

Variantes du modèle

Gestion de la matrice de covariance Σ

- **Première stratégie : matrice pleine**
  - $\Sigma(h_t) \Longrightarrow$ matrice symétrique $N \times N$.
  - $O(N^2)$ paramètres à estimer.
- **Deuxième stratégie : matrice de faible rang + diagonale**
  - $\Sigma(h_t) = D(h_t) + J(h_t)J(h_t)^T$
    avec D une matrice diagonale $(N \times N)$, et J une matrice $(N \times r)$.
  - $O(N \times r)$ paramètres à estimer, r peut être choisis petit.

$$\Sigma(\mathbf{h}_t) = \begin{bmatrix} d_1(\mathbf{h}_{1,t}) & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & d_N(\mathbf{h}_{N,t}) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} j_1(\mathbf{h}_{1,t}) \\ \dots \\ j_N(\mathbf{h}_{N,t}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j_1(\mathbf{h}_{1,t}) \\ \dots \\ j_N(\mathbf{h}_{N,t}) \end{bmatrix}^T$$

Variantes du modèle

Transformation des données y en entrée

Deux problèmes possibles :

1. Les séries peuvent suivre une **loi de puissance** : beaucoup de séries aux valeurs faibles, quelques séries avec de fortes valeurs.
2. Les séries peuvent ne pas être distribuées normalement.

Comment y répondre ?

Variantes du modèle

Transformation des données y en entrée

Passage $y \xrightarrow{m(.)} x$ *via* deux stratégies :

- **Première stratégie : Transformation par la moyenne**
  Chaque y est divisé par la moyenne de chaque série.
- **Deuxième stratégie : Transformation via des Copules Gaussiennes**
  - Transforme les séries pour que marginalement, elles suivent des distributions gaussiennes.
  - Passage des observations y à des variable aléatoire uniforme u (via la fonction de répartition) puis des variables gaussiennes x.

Variantes du modèle

Passage par un processus gaussien GP

Il est possible d'utiliser un processus gaussien en sortie :
$x_{i,t} \sim GP(x_{i,t}; \tilde{\mu}(h_{i,t}), \tilde{d}(h_{i,t}), \tilde{j}(h_{i,t}))$

Avantage :

- Les paramètres des transformations $\tilde{\mu}$, $\tilde{d}$ et $\tilde{j}$ sont partagés entre toutes les séries
- Possibilité d'apprendre ces paramètres sur un petit nombre de séries à chaque itération d'apprentissage. On évite ainsi le sur-apprentissage et on gère bien les grandes dimensions.

Variantes du modèle

Récapitulatif

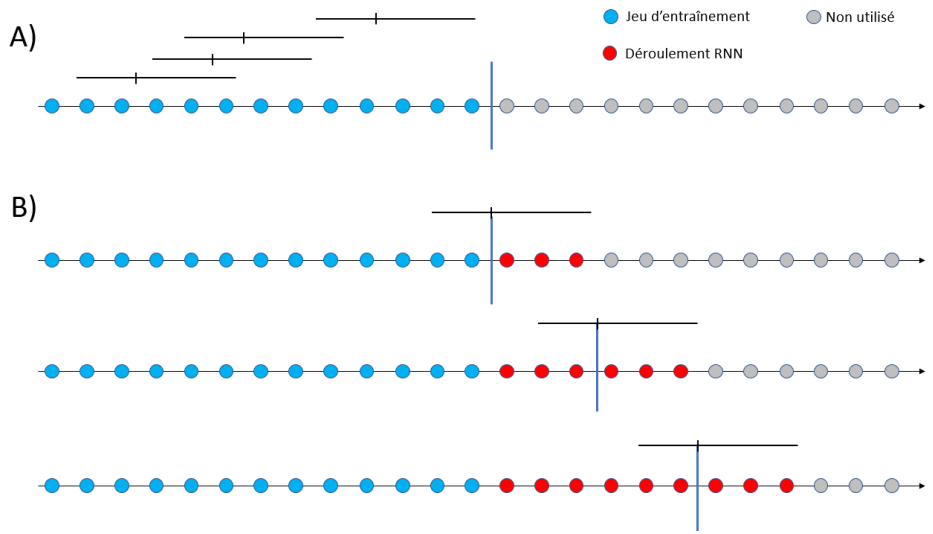
Modèle	**Architecture**	**Covariance**	**Transf.**
Vec-LSTM-fullrank-scaling	LSTM global	Pleine	Moyenne
Vec-LSTM-lowrank-Copula	LSTM global	Faible rang	Copules
GP-Copula	GP	Faible rang	Copules

Nous testerons ces trois modèles dans le cas pratique avec GluonTS.

Entraînement et évaluation

Entraînement (A)/Evaluation (B)

Grille d'hyperparamètres non estimés par le modèle : nombre de couches cachées, pas d'apprentissage, taille de batch, etc.

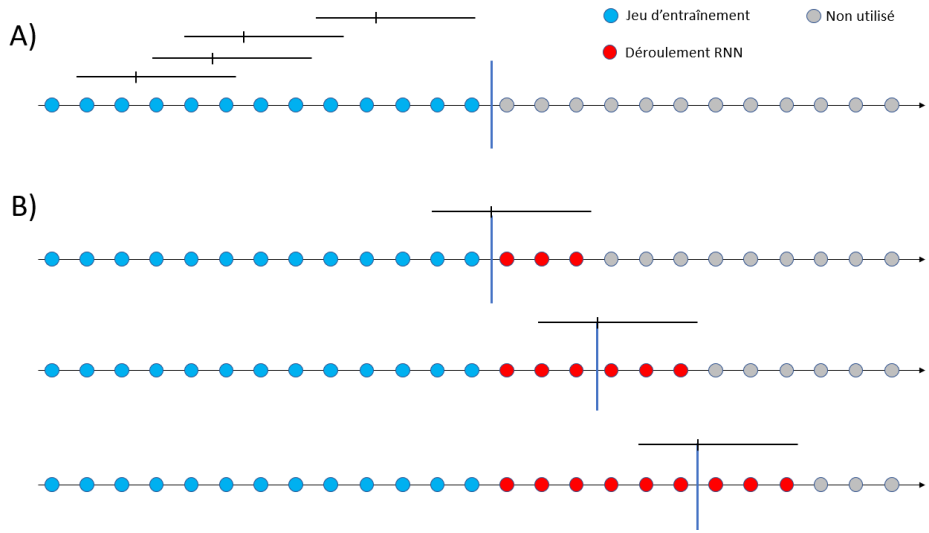


- Pour chaque jeu d'hyperparamètres, estimation de **U**, **W** et **V** via la maximisation de la log vraisemblance $L_Y(\mathbf{U},\mathbf{V},\mathbf{W})$:

$$L_Y(\mathbf{U},\mathbf{V},\mathbf{W}) = \frac{1}{|Ba|(T)} \sum_{Ba} \sum_{t=1}^{T} \log p(\mathbf{y}_t|\mathbf{h}_t, \chi_t)$$

Entraînement (A)/Evaluation (B)

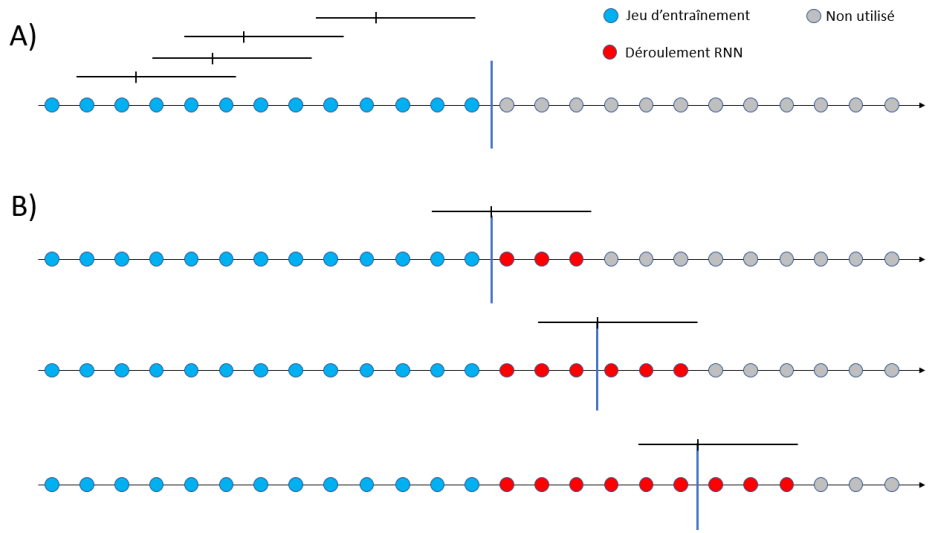
Grille d'hyperparamètres non estimés par le modèle : nombre de couches cachées, pas d'apprentissage, taille de batch, etc.



- Augmentation des données : à chaque batch plusieurs fenêtres de tailles T échantillonées aléatoirement dans la base d'entraînement.

Entraînement (A)/Evaluation (B)

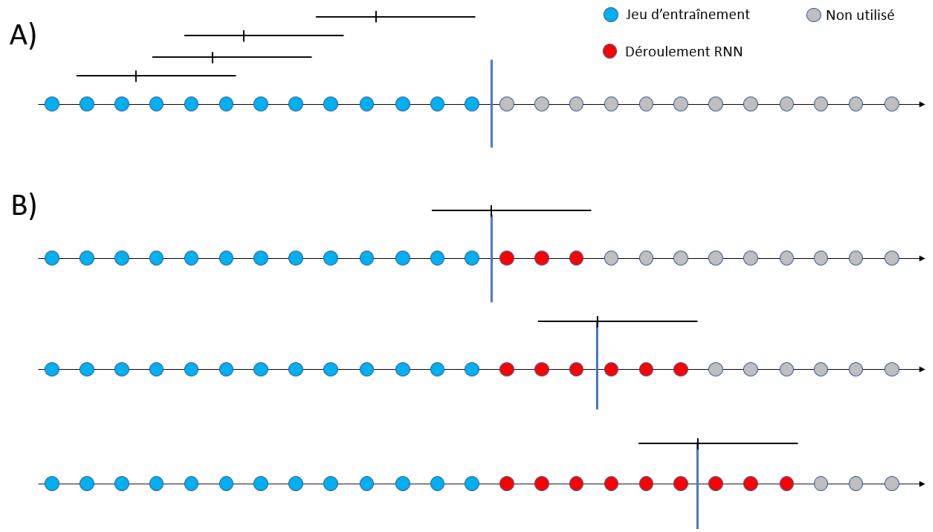
Grille d'hyperparamètres non estimés par le modèle : nombre de couches cachées, pas d'apprentissage, taille de batch, etc.



- Couverture de l'ensemble de la base de validation/test avec une fenêtre glissante.

Entraînement (A)/Evaluation (B)

Grille d'hyperparamètres non estimés par le modèle : nombre de couches cachées, pas d'apprentissage, taille de batch, etc.



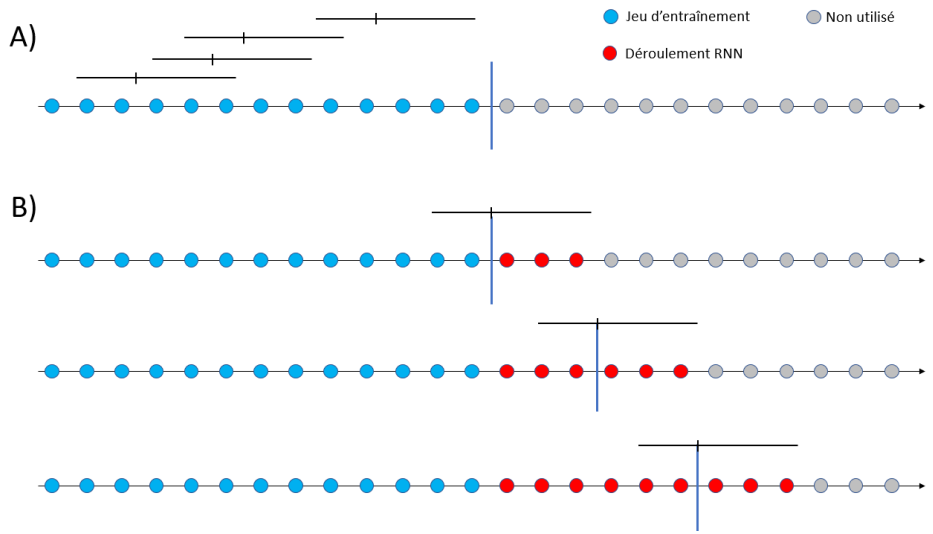
- Calcul de métriques moyennées sur les M fenêtres pour comparer observations et prédictions.

$$MSE = \frac{1}{N(T - t_0 + 1} \sum_{i,t} (y_{i,t} - \hat{y}_{i,t})^2$$

avec $\hat{y}_{i,t}$ une prédiction.

Entraînement (A)/Evaluation (B)

Grille d'hyperparamètres non estimés par le modèle : nombre de couches cachées, pas d'apprentissage, taille de batch, etc.



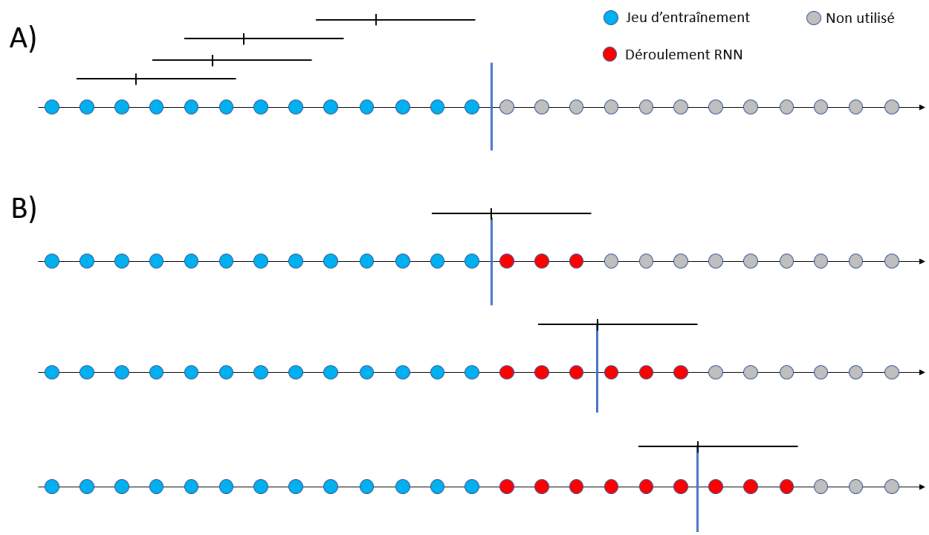
- Calcul de métriques moyennées sur les M fenêtres pour comparer observations et prédictions.

$$CRPS(F,y) = \int_{-\infty}^{+\infty} (F(\alpha) - 1(y \leq \alpha))^2 d\alpha$$

avec F la distribution cumulée prédite, calculée empiriquement et $1(y \leq \alpha)$ un fonction indicatrice qui vaut 1 si $y \leq \alpha$.

Entraînement (A)/Evaluation (B)

Grille d'hyperparamètres non estimés par le modèle : nombre de couches cachées, pas d'apprentissage, taille de batch, etc.



- Comparaison des modèles avec différentes architectures et/ou différents hyperparamètres.

Conclusions

Conclusions

- Modèles adaptés à la prédiction probabiliste de séries multivariées et corrélées.
- Capacité à prendre en compte des séries de grande dimension grâce aux matrices de covariance de faible rang et aux processus gaussiens (GP).

Atelier pratique

1. Ouvrez le dépôt github du cas pratique à l'adresse suivante : https://github.com/pdenailly/Atelier-Summer-School.
2. Suivez le notebook python *Prédictions_Vélos.ipynb* :
   - Sur google colab, ouvrez le lien colab. Vous pouvez enregistrer une copie modifiable
   - En local avec jupiter-notebook.
3. Importez les données *bike_data.csv* et le fichier python *rolling_dataset.py* dans le répertoire courant du projet (sur colab ou en local si vous utilisez jupiter).

Références I

David Salinas, Michael Bohlke-Schneider, Laurent Callot, Roberto Medico, and Jan Gasthaus. High-dimensional multivariate forecasting with low-rank gaussian copula processes. *Advances in neural information processing systems*, 32, 2019.