Classification de Données Fonctionnelles

Benjamin Auder

CEA - UPMC

6 mai 2009

Thèse depuis 02/2008

Directeur de thèse : Gérard Biau (UPMC)

Encadrant CEA : Bertrand Iooss (CEA)

Contexte industriel CEA

Choc thermique pressurisé :

Code thermo-hydraulique coûteux en temps, déterminant les évolutions temporelles de paramètres φ dans l'espace annulaire de la cuve.

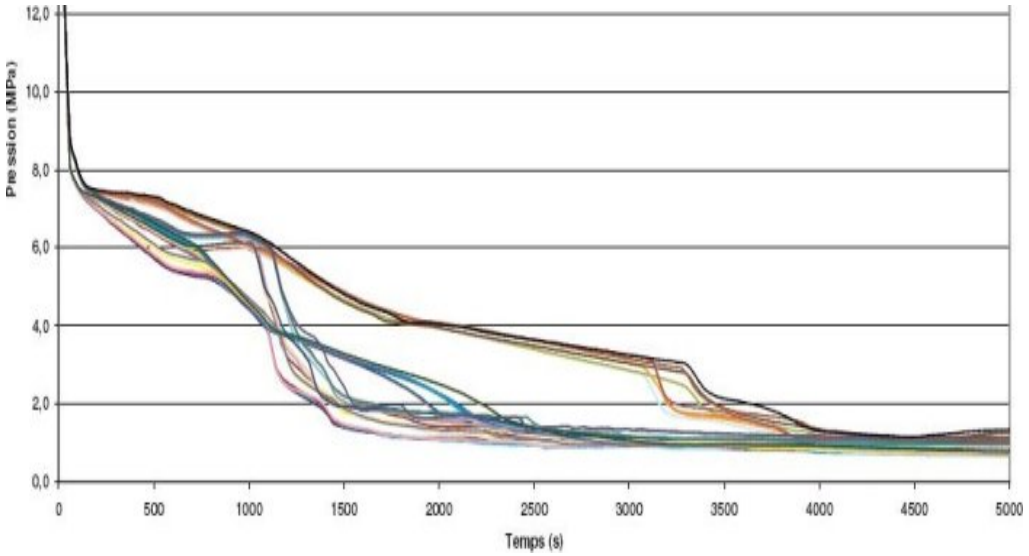


FIG.: Transitoire de pression - Cathare.

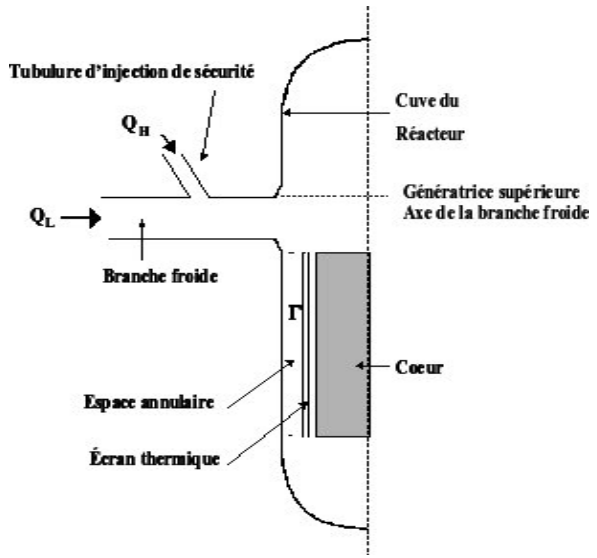


FIG.: Schéma de la zone modélisée

Objectif : prédiction de *données fonctionnelles* via un métamodèle.

Hypothèses

Code de calcul $B : \mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d \longrightarrow \mathcal{Y}$, avec $\mathcal{X} = \prod_{i=1}^{d} [a_i, b_i]$.

$\mathcal{Y}$ est un espace fonctionnel : $\mathcal{Y} \subset \mathcal{F}([a, b], \mathbb{R})$.

Hypothèse 1

Les sorties du code sont "lisses" : $\mathcal{Y} = \mathcal{C}^m([a, b], \mathbb{R})$ avec $m \geq 0$.

Hypothèse 2

B est *continu par morceaux* : continu sur $\mathcal{X}_i$ ouvert connexe,
$\mathcal{X} = \text{adh}\left(\bigsqcup_{i=1}^{k} \mathcal{X}_i\right)$.

H1 : l'évolution d'un paramètre physique est au minimum continue.

H2 : permet de prendre en compte les discontinuités du code.

$\Rightarrow$ Il faut retrouver ces domaines de continuité $\longrightarrow$ *clustering*.

Illustration

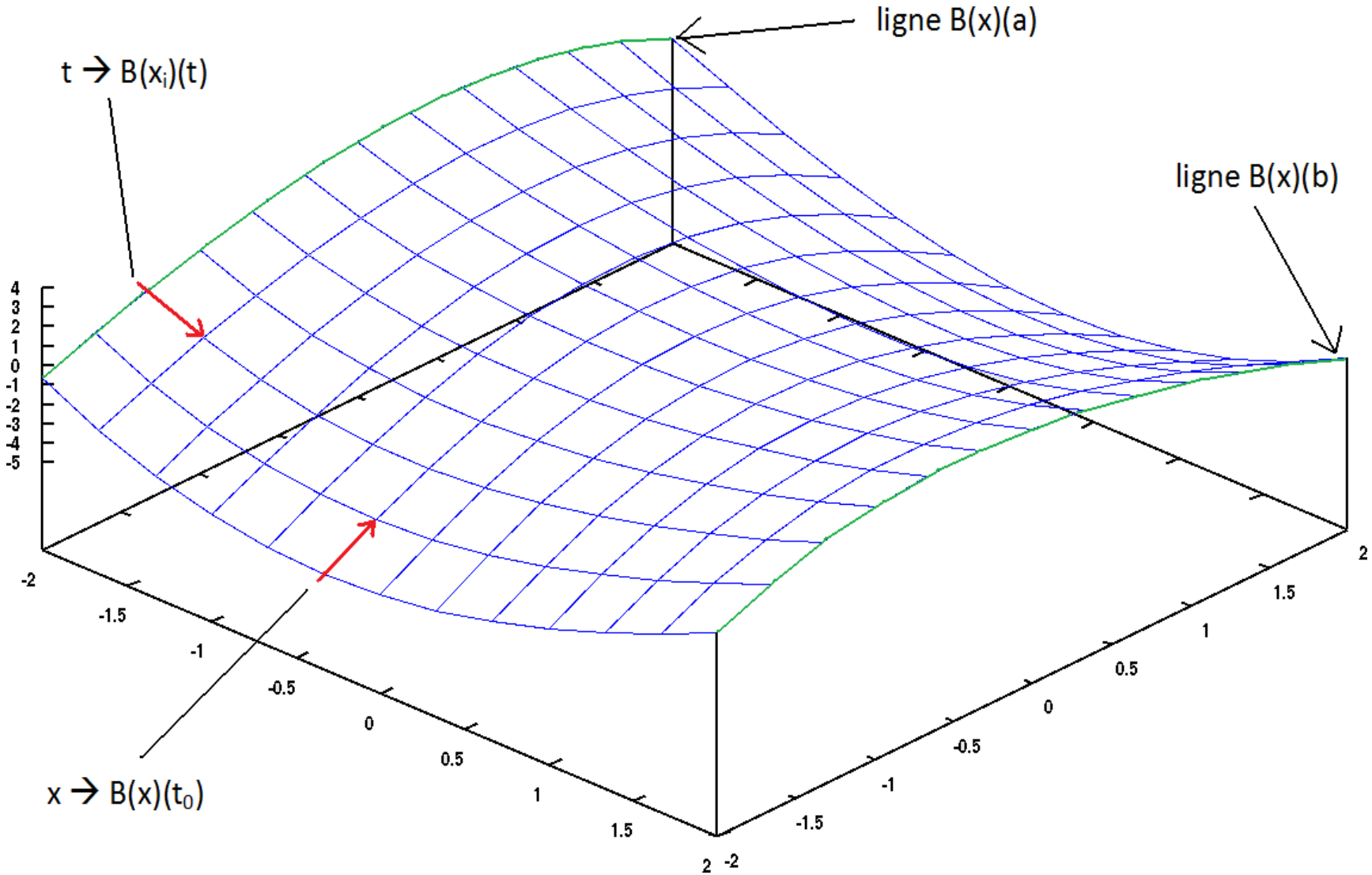


FIG.: Visualisation dans le cas particulier $d = 1$.

Plan

Plan

Objectifs

$\rightarrow$ Identifier des sous ensembles C_i de $\{(x_i, y_i)\} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, tels que :

- pour $i \neq j$, C_i est bien distinct de C_j ;
- tous les éléments de C_i sont similaires.

Objectifs

$\rightarrow$ Identifier des sous ensembles C_i de $\{(x_i, y_i)\} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, tels que :

- pour $i \neq j$, C_i est bien distinct de C_j ;
- tous les éléments de C_i sont similaires.

Différents points de vue mènent à différentes solutions :

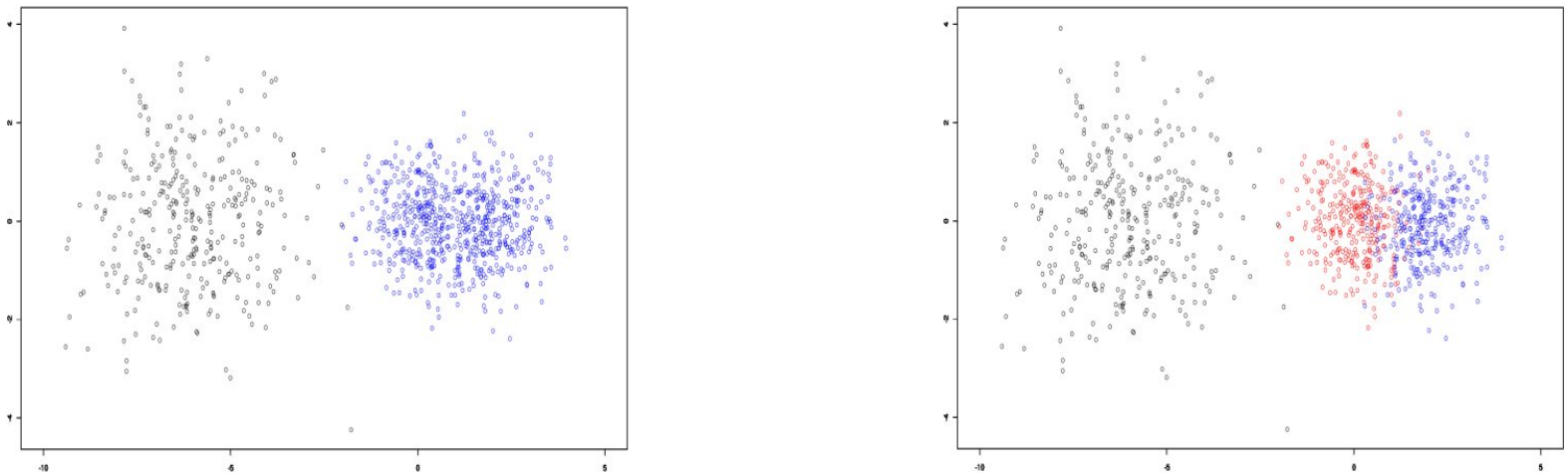


FIG.: Mélange de trois gaussiennes, $\mu = (-6, 0), (0, 0), (2, 0)$, $\sigma = 2, 0.5, 0.5$.

Objectifs

$\rightarrow$ Identifier des sous ensembles C_i de $\{(x_i, y_i)\} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, tels que :

- pour $i \neq j$, C_i est bien distinct de C_j ;
- tous les éléments de C_i sont similaires.

Différents points de vue mènent à différentes solutions :

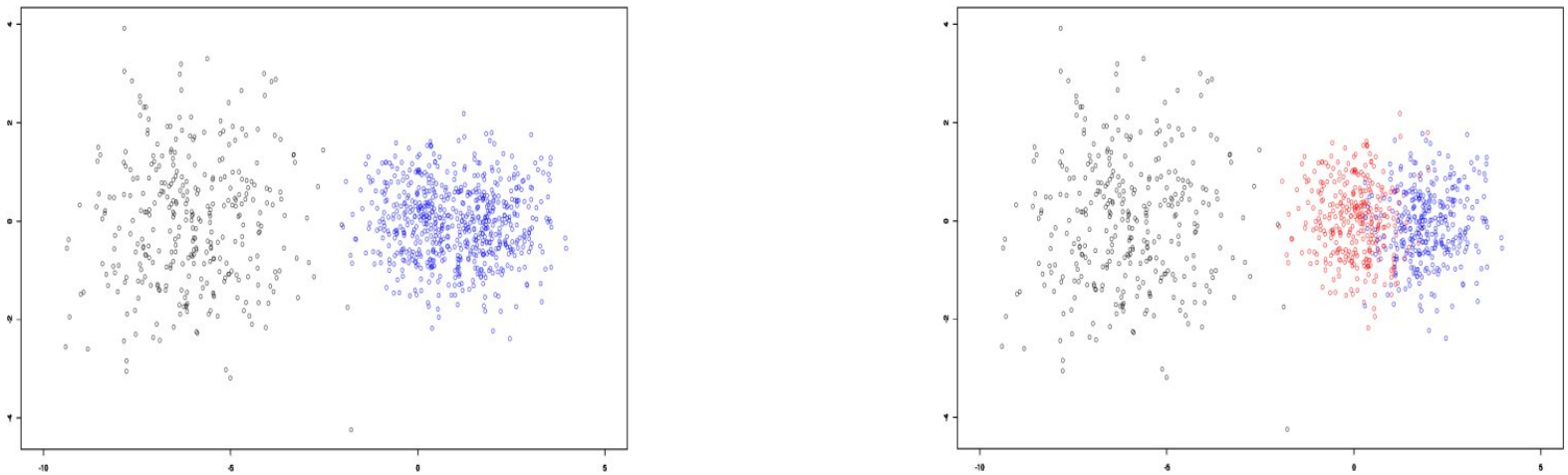


FIG.: Mélange de trois gaussiennes, $\mu = (-6, 0), (0, 0), (2, 0)$, $\sigma = 2, 0.5, 0.5$.

$\Rightarrow$ Approche choisie : un algorithme retourne une famille de partitions $(A_i)_{i=1..m}$ avec $A_{i+1} \prec A_i$; A_k contient k groupes.

Nombre de clusters

Comment choisir le bon partitionnement A_k ?

Deux options :

1. critère direct basé sur les distances ;
2. critère de validation par classification supervisée.

Difficile de donner un critère direct, trop dépendant de la structure des données $\Rightarrow$ choix 2.

Nombre de clusters

Comment choisir le bon partitionnement A_k ?

Deux options :

1. critère direct basé sur les distances ;
2. critère de validation par classification supervisée.

Difficile de donner un critère direct, trop dépendant de la structure des données $\Rightarrow$ choix 2.

Pour A_k, erreur de classification estimée par n-fold cross validation :

$$\text{label}\left(x \in A_k^{(i)}\right) = i\,.$$

Erreur de classification $< \delta \Rightarrow$ clustering validé, $k := k + 1$.

Sinon "il y a exactement k clusters".

Méthode

Clustering HCT

Clustering hiérarchique : donne une famille de partitions

$+$

Euclidian Commute Time Distance (ECTD) : gomme l'effet de chaînage du single linkage, en conservant ses avantages.

Méthode

Clustering HCT

Clustering hiérarchique : donne une famille de partitions

$+$

Euclidian Commute Time Distance (ECTD) : gomme l'effet de chaînage du single linkage, en conservant ses avantages.

Chronologie :

1. algorithme HCT sur sorties fonctionnelles $B(x_i)$;
2. validation croisée sur les sorties pour déterminer k_0 ;
3. algorithme HCT sur les entrées $B^{-1}(C_i)$ pour chaque cluster ;
4. k_0 validations croisées sur les entrées pour déterminer $k \geq k_0$.

Plan

Point de départ

Graphe $G = (S, A)$, S sommets représentant les éléments à classer. Une arête $(s_1, s_2) \in A$ a pour poids $w_{(s_1,s_2)}$, similarité entre s_1 et s_2.

Graphe k-NN (G_k) : deux points trop éloignés ont pour similarité 0.

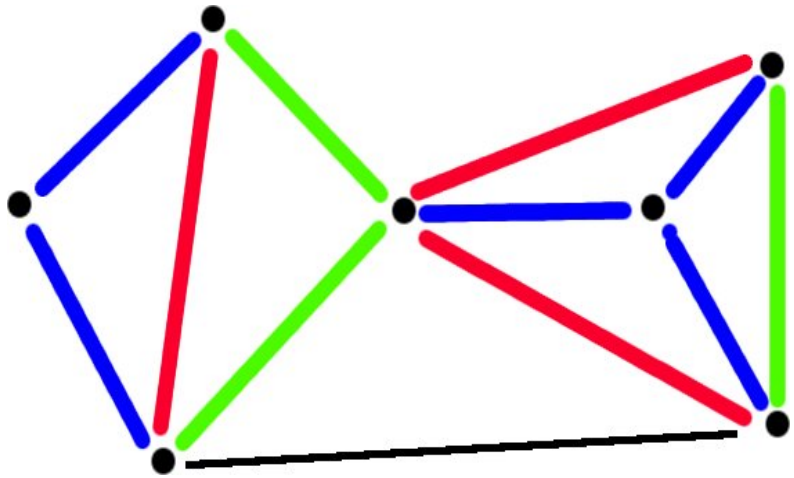


FIG.: 1-NN bleu, 2-NN vert, 3-NN rouge, lien avec k trop grand en noir.

Point de départ

Graphe $G = (S, A)$, S sommets représentant les éléments à classer. Une arête $(s_1, s_2) \in A$ a pour poids $w_{(s_1,s_2)}$, similarité entre s_1 et s_2.

Graphe k-NN (G_k) : deux points trop éloignés ont pour similarité 0.

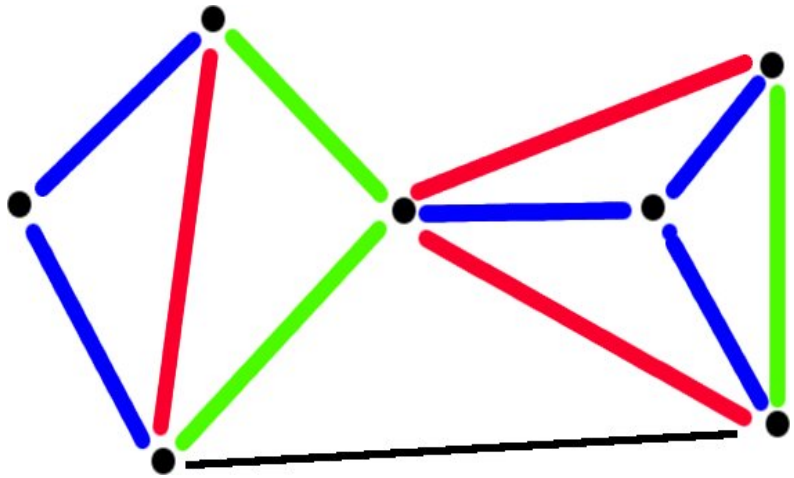


FIG.: 1-NN bleu, 2-NN vert, 3-NN rouge, lien avec k trop grand en noir.

- k trop petit : on sous-estime les similarités ;
- k trop grand : on sur-estime les similarités.

Heuristique : $k =$ plus petit entier tel que

$$\text{parties connexes}(G_k) = \text{parties connexes}(G_{k-1}) .$$

Coupe minimale

Coupe minimale normalisée

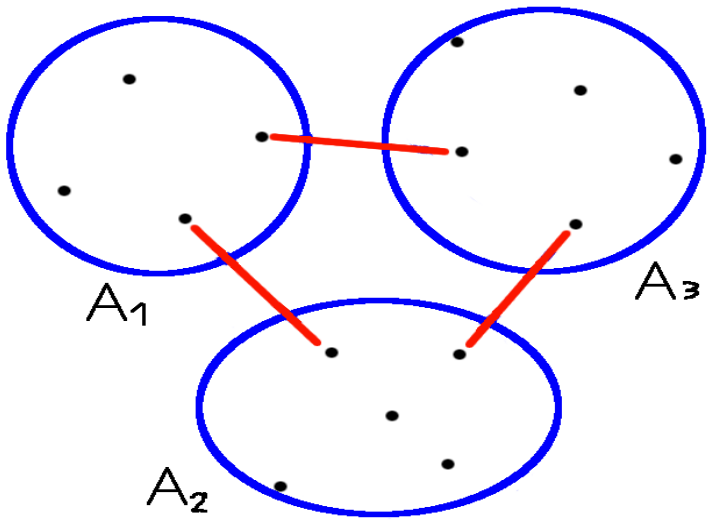
À k fixé, minimiser $\text{NCut} = \sum_{i=1}^{k} \frac{\text{cut}(A_i, \bar{A}_i)}{\text{Vol}(A_i)}$, avec $\text{cut}(A, \bar{A}) = \sum_{i \in A, j \in \bar{A}} w_{ij}$.

NCut est lié aux probabilité de transitions :

$$\mathbb{P}(\bar{A}|A) = \frac{\text{cut}(A, \bar{A})}{\text{Vol}(A)}.$$

Problème équivalent : minimiser $\sum_{i=1}^{k} \mathbb{P}(\bar{A}_i|A_i)$ (Shi & Meilă, 2000).
NP-complet $\Rightarrow$ relaxation.

FIG.: Illustration :



Plan

Clustering spectral

Laplacien du graphe : $L = D - W$,
W matrice de similarité contenant les poids des arêtes,
D matrice diagonale avec $D_{i,i} = \sum_{j \in V(i)} w_{ij}$.

Clustering spectral

Laplacien du graphe : $L = D - W$,
W matrice de similarité contenant les poids des arêtes,
D matrice diagonale avec $D_{i,i} = \sum_{j \in V(i)} w_{ij}$.

Réécriture de NCut (von Luxburg, 2006) :

$$h \in \mathbb{R}^{N \times k},\ h_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Vol}(A_j)}} \text{ si } i \in A_j\,, \\ 0 \text{ sinon }. \end{cases}$$

Après calculs : $\quad {}^tHH = I\,, \quad {}^th_i D h_i = 1\,, \quad$ et $\quad {}^th_i L h_i = 2\frac{\mathrm{cut}(A_i, \bar{A}_i)}{\mathrm{Vol}(A_i)}$.

Clustering spectral

Laplacien du graphe : $L = D - W$,
W matrice de similarité contenant les poids des arêtes,
D matrice diagonale avec $D_{i,i} = \sum_{j \in V(i)} w_{ij}$.

Réécriture de NCut (von Luxburg, 2006) :

$$h \in \mathbb{R}^{N \times k},\ h_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\mathrm{Vol}(A_j)}} \text{ si } i \in A_j\,, \\ 0 \text{ sinon }. \end{cases}$$

Après calculs : $\quad {}^tHH = I\,, \quad {}^th_iDh_i = 1\,, \quad$ et $\quad {}^th_iLh_i = 2\frac{\mathrm{cut}(A_i, \bar{A}_i)}{\mathrm{Vol}(A_i)}$.

Problème équivalent à NCut

$$\min_{A_1,\ldots,A_k} \mathrm{Tr}({}^tHLH)\,, \text{ sous } {}^tHDH = I\,,$$

Colonnes de H = vecteurs indicateurs de la composition des clusters.

Relaxation : on résout pour H quelconque dans $\mathbb{R}^{N \times k}$,

puis k-means sur les lignes $\Rightarrow$ solution approchée.

Euclidian Commute Time Distance

Marche aléatoire M : distribution initiale π sur les sommets, s_t le sommet courant à l'instant t.

$$\mathbb{P}(s_{t+1}|s_t) = \frac{w_{(s_t,s_{t+1})}}{\sum_{a \in V(s_t)} w_{(s_t,a)}}$$

$\rightarrow$ Si M prend peu de temps en moyenne pour aller de s_1 à s_2 puis revenir, alors s_1 et s_2 sont dans deux clusters identiques. Mesure de dissimilarité :

$$d^2(s_1, s_2) = \mathbb{E}[t, s_t = s_2 | s_0 = s_1] + \mathbb{E}[t, s_t = s_1 | s_0 = s_2] .$$

Euclidian Commute Time Distance

Marche aléatoire M : distribution initiale π sur les sommets, s_t le sommet courant à l'instant t.

$$\mathbb{P}(s_{t+1}|s_t) = \frac{w_{(s_t,s_{t+1})}}{\sum_{a \in V(s_t)} w_{(s_t,a)}}$$

$\rightarrow$ Si M prend peu de temps en moyenne pour aller de s_1 à s_2 puis revenir, alors s_1 et s_2 sont dans deux clusters identiques. Mesure de dissimilarité :

$$d^2(s_1, s_2) = \mathbb{E}[t, s_t = s_2 | s_0 = s_1] + \mathbb{E}[t, s_t = s_1 | s_0 = s_2] \,.$$

d est une distance euclidienne dans un espace de représentation à N dimensions :

$$d(i,j)^2 = \mathrm{Vol}(G)\, {}^t(e_i - e_j)\, L^+ \,(e_i - e_j) \quad \text{(Saerens et al., 2004);}$$

L^+ = pseudo-inverse du laplacien du graphe ; (e_i) base canonique de $\mathbb{R}^N$.

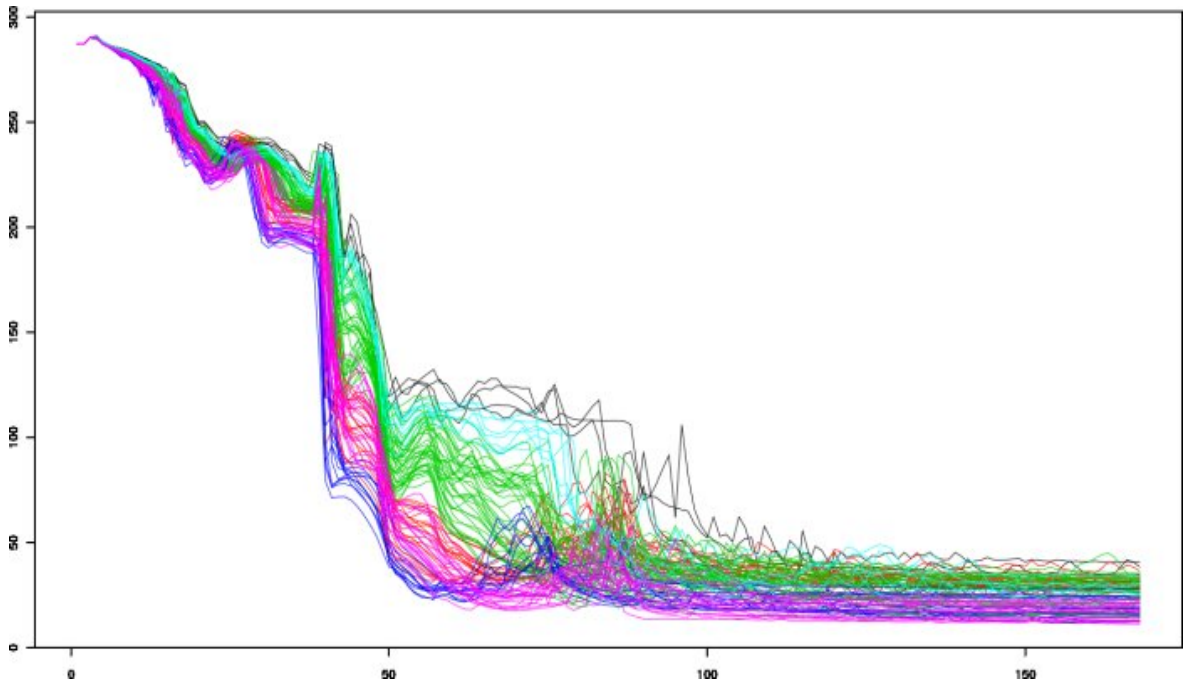
Algorithme utilisé : HCT

1. Choix d'une mesure de similarité sur les données ;
2. Construction du graphe k-NN avec k plus petit entier tel que parties connexes(G_k) = parties connexes(G_{k-1}) ;
3. Calcul de la matrice M des commute distances, avec l'inverse du laplacien L^+ ou itérativement ;
4. Clustering hiérarchique sur les sommets du graphe k-NN, utilisant M.

Algorithme utilisé : HCT

1. Choix d'une mesure de similarité sur les données ;
2. Construction du graphe k-NN avec k plus petit entier tel que parties connexes(G_k) = parties connexes(G_{k-1}) ;
3. Calcul de la matrice M des commute distances, avec l'inverse du laplacien L^+ ou itérativement ;
4. Clustering hiérarchique sur les sommets du graphe k-NN, utilisant M.

Six clusters sur 100 sorties de code Cathare :



Plan

Comparaisons I

Méthode	Taux d'erreur
K-Means	6%
Hiérarchique + Ward	6.2%
Clustering Spectral	5.9%
HCT	5.8%

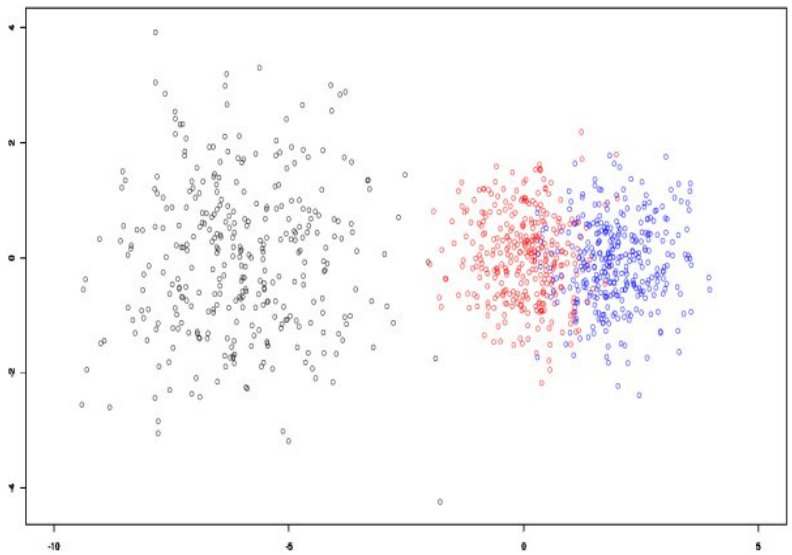


FIG.: Mélange de trois gaussiennes.

$\longrightarrow$ Résultats comparables.

Comparaisons II

Méthode	Taux d'erreur
K-Means	41%
Hiérarchique + Ward	45%
Clustering Spectral	0%
HCT	0%

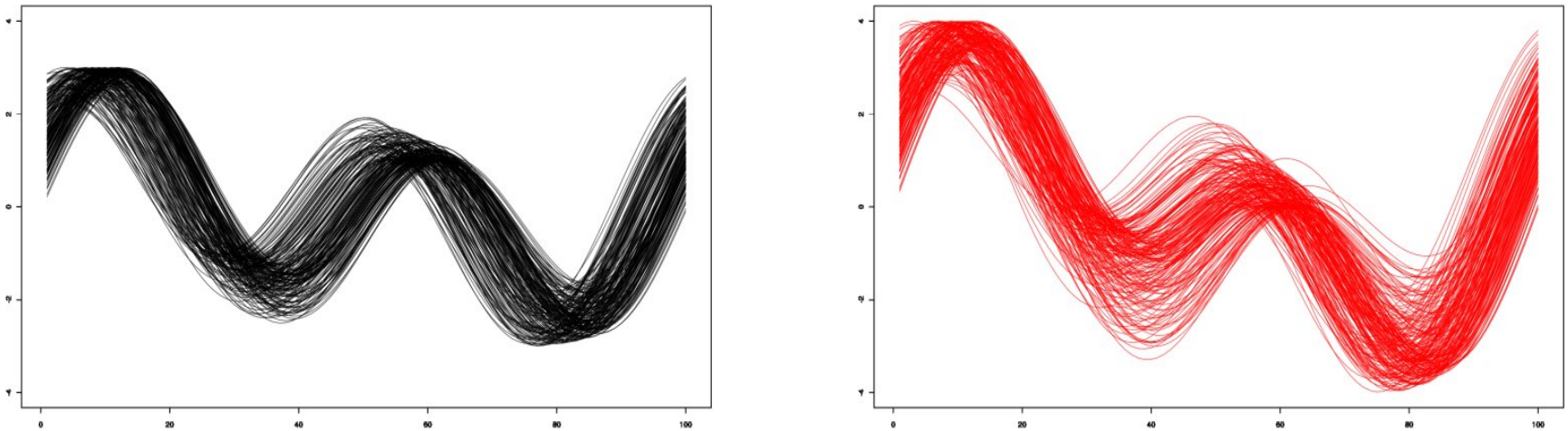


FIG.: $f_{a,b,c,d}$ sur $[0, 2\pi]$, groupe 1 à gauche, groupe 2 à droite.

Fonction $f_{a,b,c,d} : x \mapsto a\cos(x) + b\sin(x) + c\cos(2x) + d\sin(2x)$.

(a, b) uniforme sur $S(0, 1)$ pour tous les points (N=400),
$(c, d) : \mathcal{U}(S(0, 1))$ (noir, 1 à $N/2$), puis $\mathcal{U}(S(0, 2))$ (rouge, $N/2$ à N).

Bilan

Avantages

+ pas de recherche de vecteurs propres ;
+ performances comparables à celles du clustering spectral.

Inconvénients

- assez sensible aux outliers (améliorable) ;
- choix du paramètre k assez arbitraire.

Bilan

Avantages

+ pas de recherche de vecteurs propres ;
+ performances comparables à celles du clustering spectral.

Inconvénients

- assez sensible aux outliers (améliorable) ;
- choix du paramètre k assez arbitraire.

Distance $L^2 \longrightarrow$ mesure de similarité $\longrightarrow$ commute distance, algorithme.
Seule la mesure de similarité est utile. Exemples :

- extension de la corrélation sur les rangs au cadre fonctionnel (Heckman & Zamar, 2000) ;
- similarités du type $e^{-\gamma \|f^{(k)} - g^{(k)}\|^\alpha}$;
- $e^{-\gamma D(f,g)}$ avec D divergence de Bregman symétrique ..etc.

Plan

Vue globale

Étapes :

1. clustering en k groupes C_i ;
2. classification C des entrées ;
3. P_i : réduction de la dimension sur le cluster C_i ;
4. régression R_i sur les coordonnées réduites pour chaque C_i ;

Puis prédiction d'une nouvelle sortie en classant l'entrée x_0 dans $C(x_0)$, et application de $R_{C(x_0)}$ avant de restituer la fonction :

$$\text{Prédiction}(x_0) = P^{-1}_{C(x_0)}(R_{C(x_0)}(x_0)) \, .$$

Objectif : $P_i | C_i$.

Courbes principales

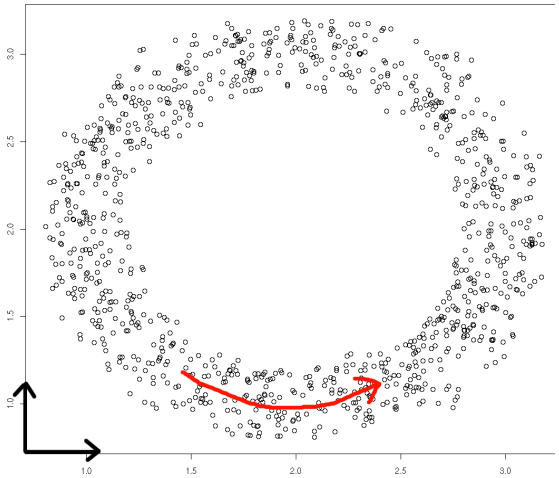


FIG.: Distribution autour d'un cercle.

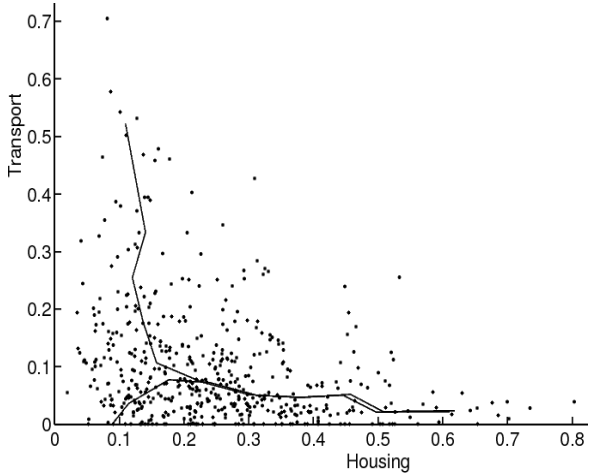


FIG.: Deux "1^{eres}" courbes principales.

Courbes principales

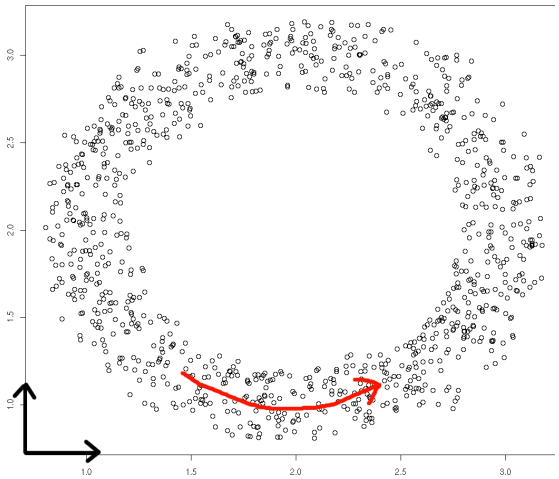


FIG.: Distribution autour d'un cercle.

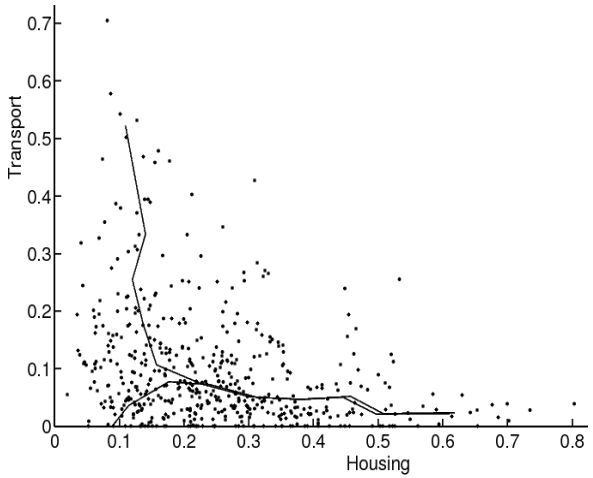


FIG.: Deux "1^{eres}" courbes principales.

Courbe "optimale" passerait par tous les points $\Rightarrow$ régularisation.

Self-consistency (Hastie, 1984) :
Une courbe paramétrée s est principale si $\forall t \in [\alpha, \beta]$, $s(t) = \mathbb{E}[X|t_X = t]$.

Longeur bornée (Kégl et al., 2000) :
s^* minimise l'erreur quadratique moyenne sous la contrainte $l(s) \leq L$.

Courbure bornée (Sandilya & Kulkarni, 2002) :
s^* minimise l'erreur quadratique moyenne sous la contrainte $\kappa(s) \leq K$.

Adaptation au cadre fonctionnel

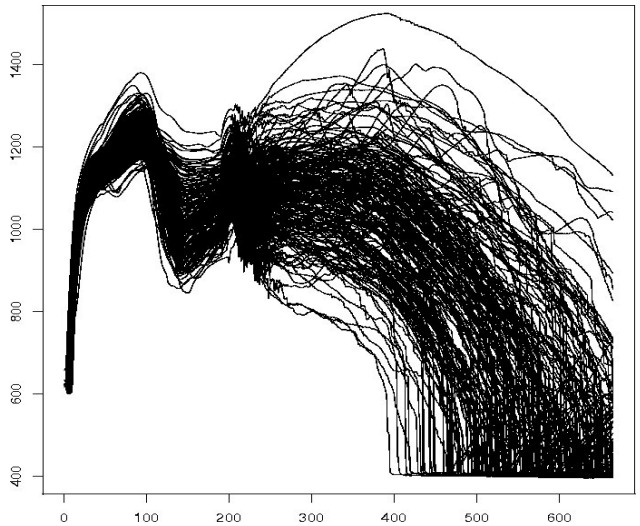


FIG.: 200 sorties du code de calcul Cathare, 665 points de discrétisation.

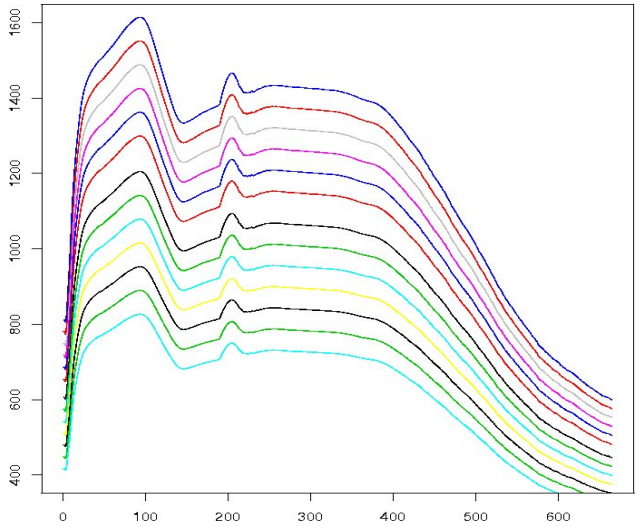


FIG.: Segment $t \mapsto t\,v$, $v\,1^{ere}$ CP : 20% de la variance.

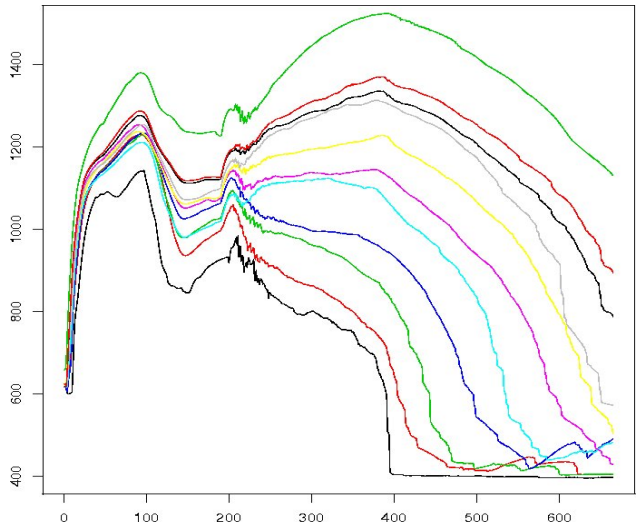


FIG.: 1^{ere} CP : 58% de la variance.

Ensuite, il faudrait déterminer une 2^{nde} (..etc) CP en chaque "point" de la courbe . . .

Conclusion

Réglages des paramètres du clustering ?

- Taille d'un voisinage dans le graphe.
- Mesure de similarité.

Optimiser efficacité de la représentation vs. qualité de la prédiction sur coordonnées réduites ?

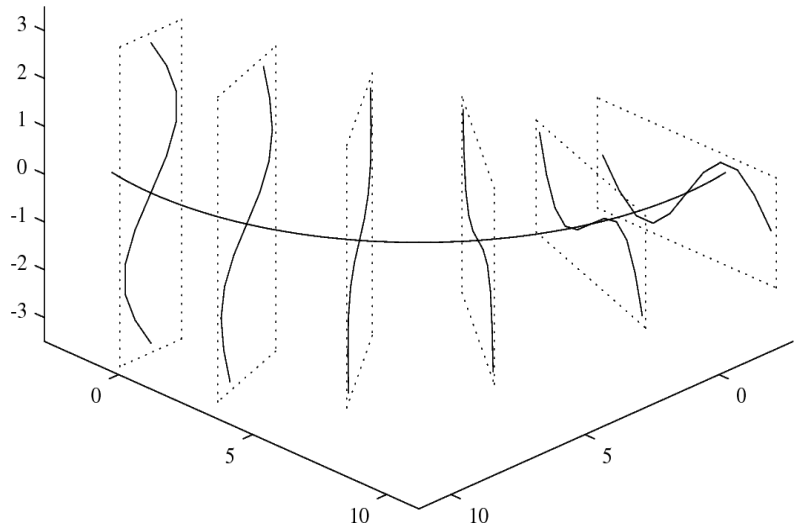


FIG.: Exemple de surface principale en $2D$.

Autres méthodes à explorer : isomap, LLE, laplacian eigenmaps . . .