Лекция 19: Поиск аномалий с обучением без учителя

Проблемы поиска аномалий в «обучении без учителя»

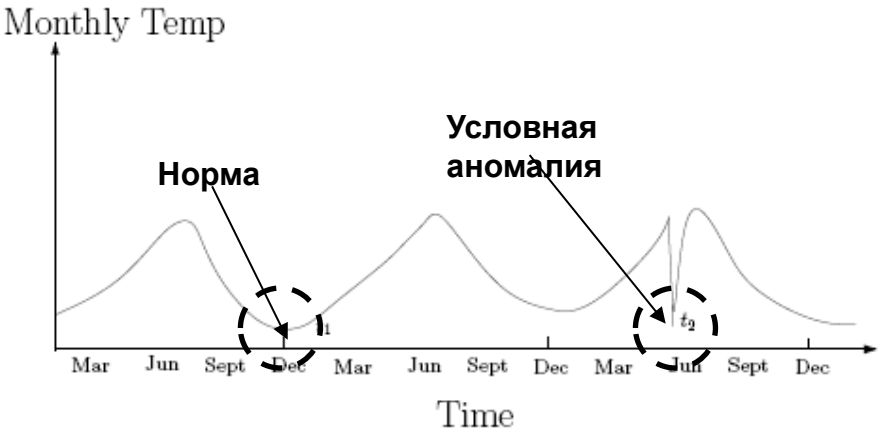
- Выявление аномалий – сложная задача:
  - Граница между нормой и аномалией не всегда очевидна и не всегда однозначна – вопрос эффективности алгоритма?
  - Нет общепринятого понятия аномальности, зависит от предметной области и от алгоритма поиска
  - «Шум» в данных – «интересная» аномалия или случайный выброс?
  - Нормальное поведение может меняться во времени - «интересная» аномалия или изменение поведения **(outliers vs novelty** detection**)?**
  - Интерпретируемость – почему аномалия?
- Типы аномалий:
  - Точечные (выбросы), «Условные», «Групповые»
- «Разметка» аномалий:
  - Степень аномальности или бинарная метка

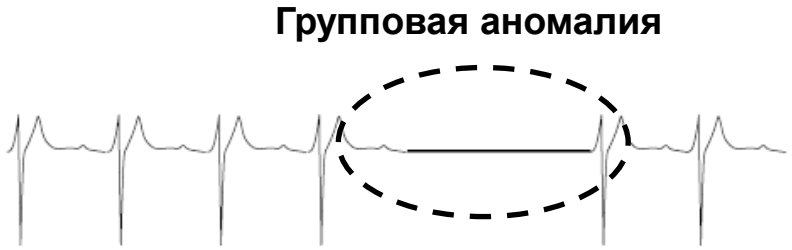
Практические приложения

- Безопасность (финансовая, компьютерная, гражданская)
- Медицина
- Промышленные нештатные ситуации
- Обработка мультимедиа
- Поиск новых тем в Text mining
- Выявлением редких событий
- …

Условные и групповые аномалии (на основе моделей)

- «Условные» аномалии:
  - Точка является аномалией при определенных условиях
  - Одна и та же точка может быть нормальной и аномальной в разном окружении (контексте)
  - Требует определения понятия контекста
  - Чаще всего – во временных рядах
- «Групповые» аномалии (каждая может быть нормальной):
  - Требуется какая-либо зависимость между точками, например:
  - Временные ряды
  - Географические и пространственные данные



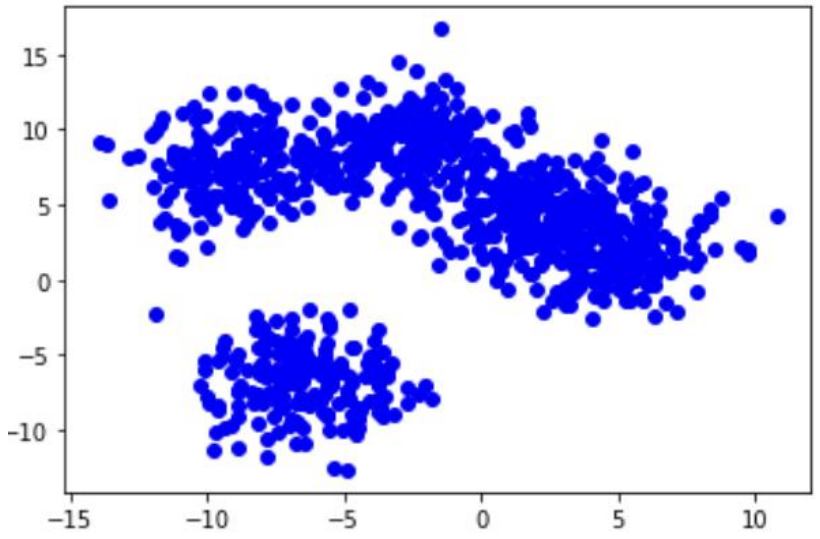


Типы точечных аномалий и методы их поиска

- Одномерные (вероятностные)
  - Пользовательские интервалы
  - Отклонение от мат. ожидания или медианы
  - Экстремальные перцентили
- Метрические (KNN и кластеризация)
- Статистические (параметрические и нет)
- Анализ отклонений (ошибка реконструкции)
  - Матричные разложения (в том числе робастные и нелинейные)
  - Нейросетевые автокодировщики, SOM

Демонстрационный пример

```
# Генерация данных гауссового облака точек
from sklearn.datasets import make_blobs

n_samples = 1000
X_one, y_one = make_blobs(n_samples=n_samples,
                          centers=5, cluster_std=2,
                          random_state=42)
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c='blue')
```



Метрические методы

- Основной постулат:
  - «рядом с нормальными точками много соседей, рядом с аномалиями – мало»
- Два этапа:
  1. Расчет расстояний и числа соседей (как правило, строятся поисковые индексы)
  2. Анализ структуры ближайших соседей и «разметка» точек
- Категории:
  - На основе расстояний – аномалии наиболее удалены от остальных
  - На основе плотности – аномалии лежат в области с невысокой плотностью
  - Для одномерного случая и известного распределения почти всегда можно доказать эквивалентность

Определение аномалий в методах ближайших соседей

- Метрические методы
  - Точка *x* есть *DB*(*p*, *D*) аномалия, если по меньшей мере *p-я* часть остальных точек лежит дальше чем *D* от нее:

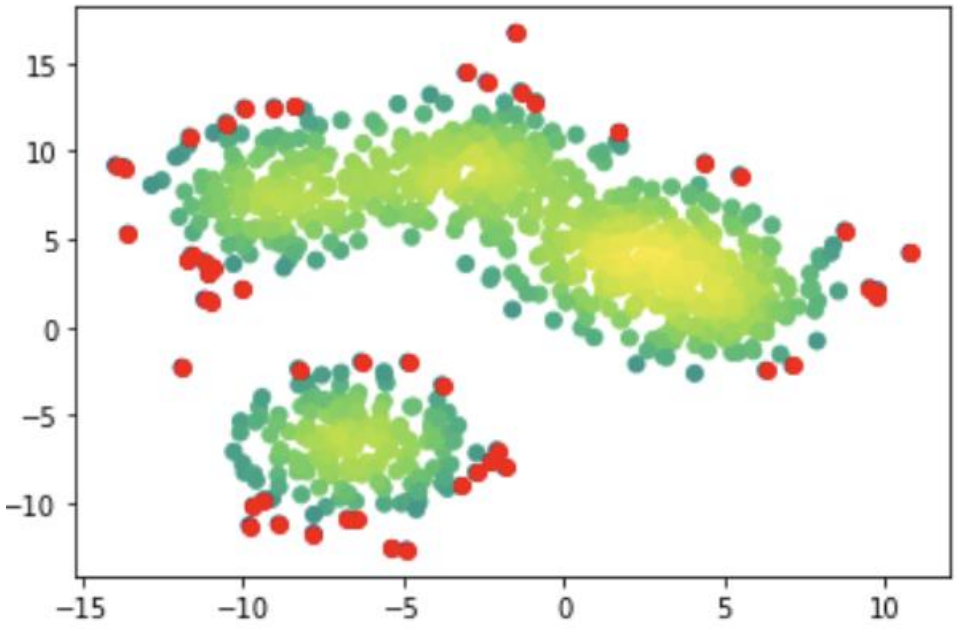
$$|\{x_i | x_i \in X, d(x, x_i) > D\}| \geq n * p$$

- На основе оценки плотности
  - Расчет локальной плотности распределения вокруг каждой точки
  - Области с невысокой плотностью - аномалии
- Методы:
  - Глобальные метрические методы
  - Local Outlier Factor (LOF)
  - Connectivity Outlier Factor (COF)
  - Multi-Granularity Deviation Factor (MDEF)

Глобальные метрические методы

- Общая процедура:
  - Для каждой точки считается расстояние до *k-го* ближайшего соседа d_k
  - Все точки упорядочиваются по d_k
  - Исключения – точки с наибольшим d_k (а значит, с наименьшим числом соседей)
  - Обычно берется % точек с наибольшим d_k как исключения
  - Не годится для данных со сложными распределениями

```
from sklearn.neighbors import NearestNeighbors
nbrs = NearestNeighbors(n_neighbors = 100)
nbrs.fit(X_one)
distances, indexes = nbrs.kneighbors(X_one)
E=-distances.max(axis=1)
X_anom=X_one[E<pd.DataFrame(E).quantile(q=0.05)[0]]
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1],  c=E)
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:, 1],  c="red")
```



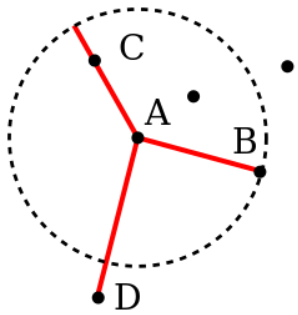
Local Outlier Factor (LOF)

- Общая процедура:
  - Для каждой точки x считается расстояние до k -го соседа (d_k)
  - Считается достижимое расстояние для каждого x по образцу *y*:

$$reach\_dist_k(x, y) = \max(d_k(y), d(x, y))$$

  - Считается локальная достижимая плотность *local reachability density* (*lrd*) как обратное среднее достижимое расстояние по *k* соседям

$$lrd_k(x) = \frac{|N_k(x)|}{\sum_{y \in N_k(x)} reach\_dist_k(x,y)}$$

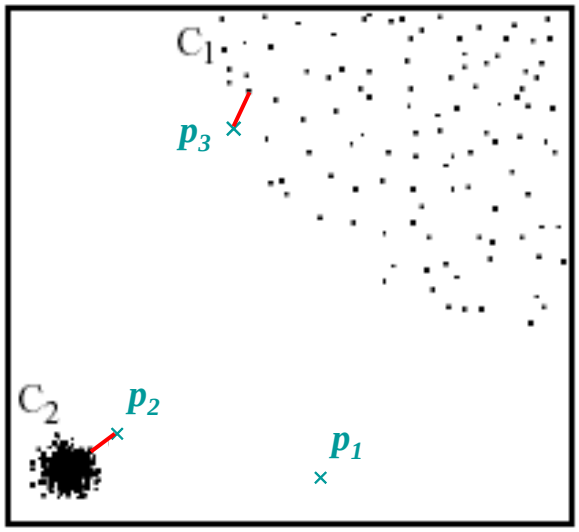


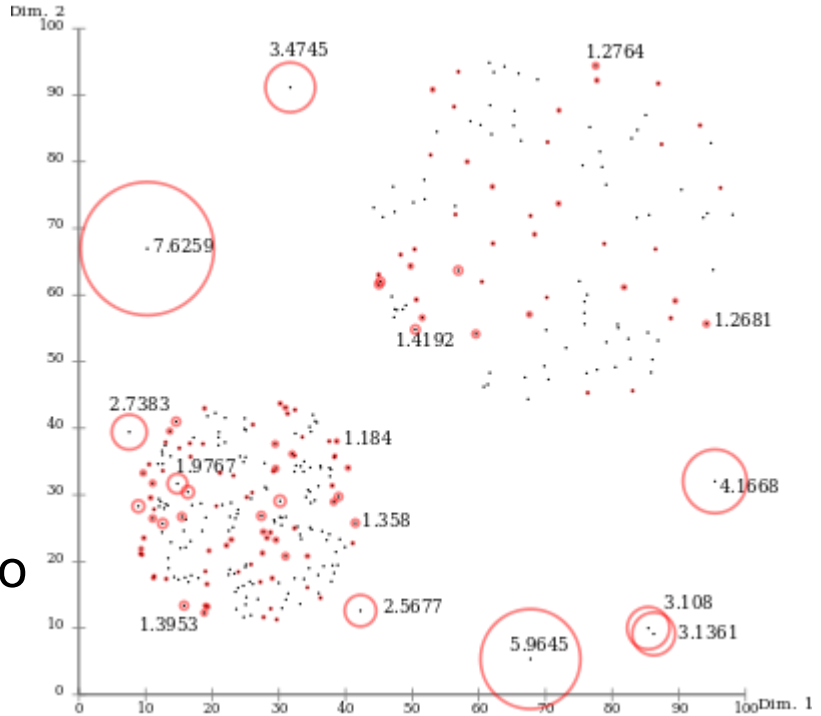
  - Считается *LOF* как отношение:

$$LOF_k(x) = \frac{\sum_{y \in N_k(x)} \frac{lrd_k(y)}{lrd_k(x)}}{|N_k(x)|}$$

Если LOF < 1, то область вокруг точки более «заселенная» чем у соседей, LOF > 1 менее

Свойства LOF (пример)

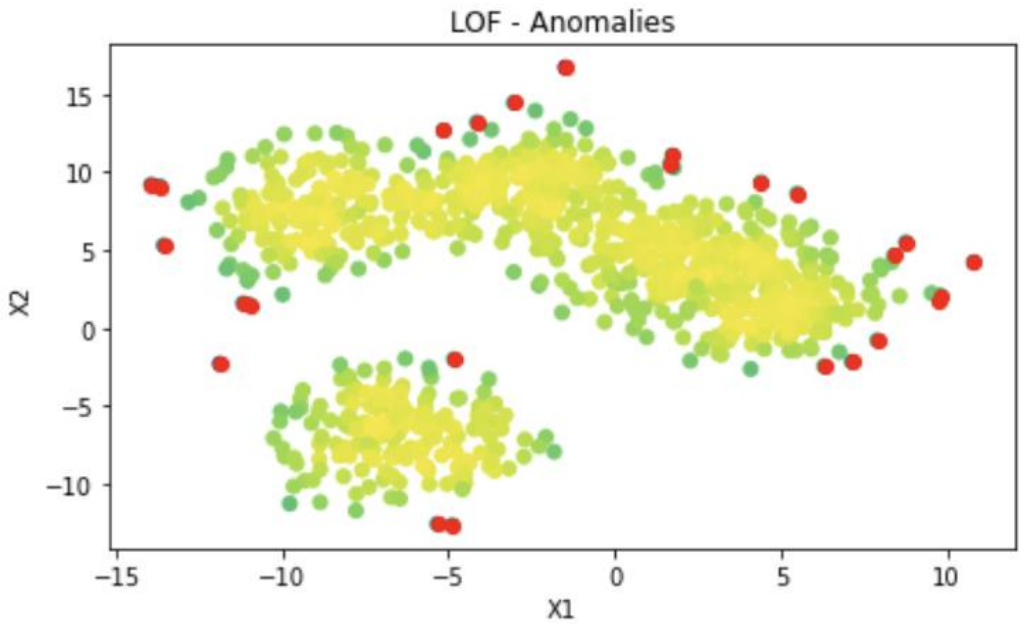




- В глобальном метрическом подходе p_2 не исключение (много соседей, но на пределе расстояния), а в *LOF* и p_1, и p_2 исключения
- В глобальном подходе p_3 может быть исключением, а в LOF – нет

Демо пример

```
from sklearn.neighbors import LocalOutlierFactor

lof = LocalOutlierFactor(n_neighbors=15, novelty=False)
clf = lof.fit(X_one)
if_outlier = lof.fit_predict(X_one)
X_anom = X_one[if_outlier==-1]

plt.figure(figsize = (7, 4))
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=clf.negative_outlier_factor_)
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:,1], c='red')
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('LOF - Anomalies')
```



Connectivity Outlier Factor (COF)

- В рамках k–окрестности объекта x строится последовательность вложенных подмножеств, отличающихся на один объект:

$$\{x\} = G_1 \subset G_2 \subset G_3 \subset \ldots\ldots \subset G_m = N_k(x),\ |G_i| = i,$$

т.е. поочередно добавляется объект, ближайший к уже добавленным (single-link или complete-link)

  - Таким образом формируется последовательность расстояний:

$$\{0, dist(G_1, x_2), \ldots, dist(G_{i-1}, x_i), \ldots, dist(G_{m-1}, x_m)\} = \{d_m\}$$

  - И определяется среднее связывающее расстояние (average chaining distance):

$$ac\_dist_G(x) = \frac{1}{m-1} \sum_{i=2}^{m} \frac{2(m+1-i)}{m} d_i$$

  - Оно учитывает структуру объектов и расстояний между ними внутри множества, соседей - чем дальше объект отстоит от x, тем меньше его вклад в значение функции

Connectivity Outlier Factor (COF)

- Точка *p* – исключение, если среднее связывающее расстояние больше среднего связывающего расстояния среди всех k ближайших соседей *p*
- Вычисляется мера связности:

$$COF_k(x) = \frac{|N_k(x)| ac\_dist_{N_k(x)}(x)}{\sum_{y \notin N_k(x)} ac\_dist_{N_k(y)}(y)}$$

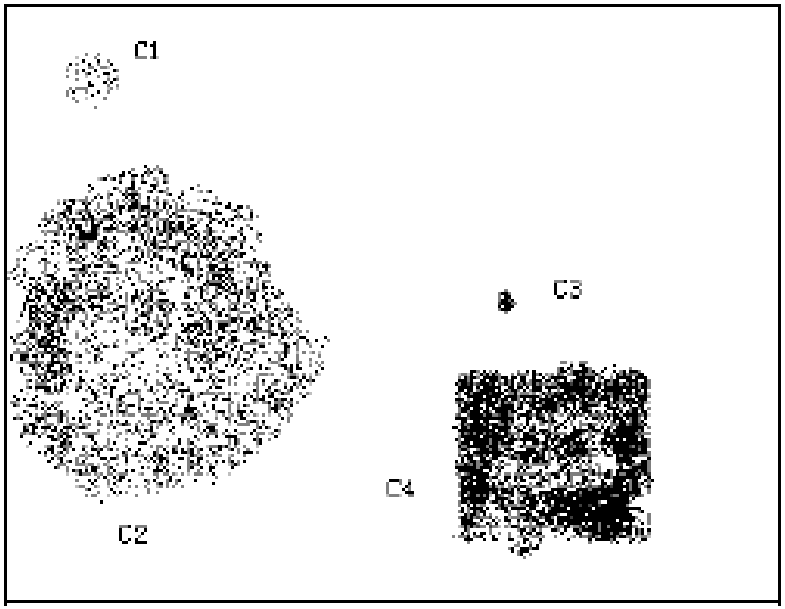
- COF и LOF в определенных случаях дают близкие результаты, а также, что они имеют квадратичную сложность

Методы на основе кластеризации

- Основная идея:
  - Нормальные данные лежат в больших кластерах с высокой плотностью, остальные - аномалии
- Общая процедура:
  - Кластеризация
  - Расчет характеристик кластеров (диаметр, среднее внутрикластерное расстояние и т.п.)
  - Поиск аномалий
- Аномалии:
  - Объекты вне кластеров, маленькие кластеры, кластеры с низкой плотностью
- Недостатки:
  - Вычислительно сложны, зависят от метода кластеризации, не всегда можно выделить кластеры, а аномалии искать нужно

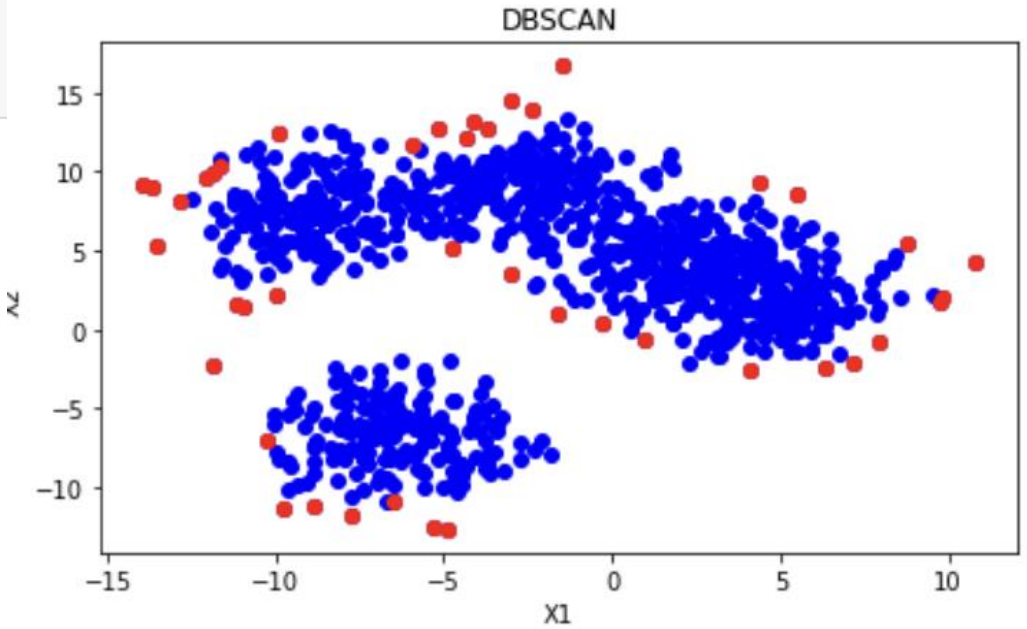
Cluster based Local Outlier Factor (CBLOF)

- CBLOF считается для каждой точки с учетом размера кластера и расстояний:
  - Если точка в маленьком кластере, то CBLOF есть произведение размера кластера на расстояние до центроида ближайшего большого кластера
  - Если точка лежит в большом кластере, то CBLOF - произведение размера кластера на расстояние до центроида этого кластера



Демо пример (DBSCAN)

```
from sklearn.cluster import DBSCAN

dbscn = DBSCAN(eps=1, min_samples=5)
dbscn.fit(X_one)
X_anom = X_one[dbscn.labels_==-1]

plt.figure(figsize = (7, 4))
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c='blue')
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:,1], c='red')
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('DBSCAN')
```



Свойства методов ближайших соседей

- Достоинства:
  - Простые в реализации
  - Достаточно интуитивно понятные
  - Не нужно априорных знаний
- Недостатки:
  - Вычислительно сложны
  - В задачах с большой размерностью и разреженной матрицей данных – проблема расстояний
  - Сложно адекватно определить расстояние для сложных разнородных данных
  - «Критические» параметры надо задавать априори

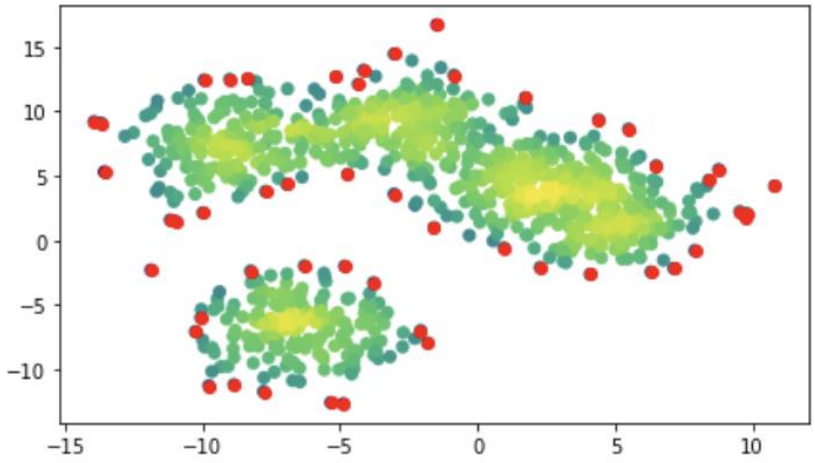
Статистические методы

- Основная идея:
  - Строится вероятностная модель (параметрическая или нет), описывающая закон распределения данных
  - Может строится модель только нормальных данных или смесь нормальных и аномалий (обычно требуется знать пропорцию аномалий)
  - Для каждой точки оценивается правдоподобие, что она сгенерирована данной вероятностной моделью или отношение правдоподобий нормального и аномального распределений
- Достоинства:
  - Аппарат статистики и теории вероятностей
- Проблемы
  - Для большой размерности тяжело оценить распределения и параметры

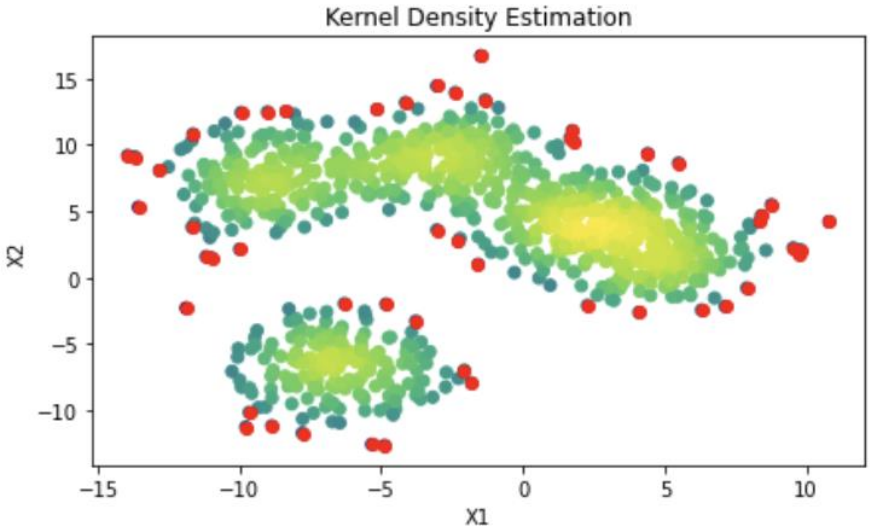
Демо примеры

```
from sklearn.mixture import GaussianMixture

fig, axes = plt.subplots(ncols=1, figsize=(7,4))
gmm_0 = GaussianMixture(n_components=25)
gmm_0.fit(X_one)

E=gmm_0.score_samples(X_one)

X_anom=X_one[E<pd.DataFrame(E).quantile(q=0.05)[0]]
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1],  c=E)
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:, 1],  c="red")
```

Параметрическая модель



Непараметрическая модель




```
from sklearn.neighbors import KernelDensity
kde = KernelDensity(kernel='gaussian', bandwidth=1).fit(X_one)
scr=kde.score_samples(X_one)

X_anom=X_one[scr<pd.DataFrame(scr).quantile(q=0.05)[0]]

plt.figure(figsize = (7, 4))
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=scr)
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:,1], c='red')
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('Kernel Density Estimation')
```

Параметрическая смесь с шумовой компонентой

- Порождающая модель смеси распределений:

$$p(x) = \boldsymbol{w_0 \varphi(x, \theta_0)} + \sum_{j=1}^{k} w_j \varphi(x, \theta_j), \quad \sum_{\boldsymbol{j=0}}^{k} w_j = 1, \quad w_j \geq 0$$

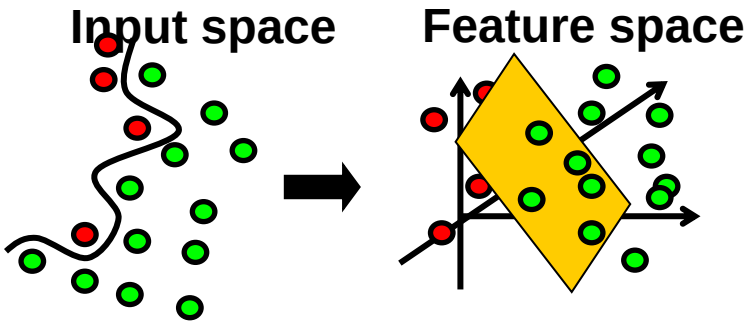
  - k – число компонент смеси, $\varphi(x, \theta_j) = p(x|j)$ – функция правдоподобия j-ой компоненты, $w_j = P(j)$ – априорная вероятность j-ой компоненты
- $\varphi(x, \theta_0)$ - отдельная компонента **для моделирования шума**:
  - Закон распределения выбирается под прикладную задачу, например
  - Beta (например, равномерное)
  - Gauss (с очень большой дисперсией)
  - w_0 - может быть фиксирована
  - $\varphi(x, \theta_0) = p(j = 0|x) = p(x \sim \varphi_0)$ – **оценка аномальности** x
- Задача максимизации логарифма правдоподобия:

$$L(w, \theta) = \sum_{i=1}^{l} \ln \left[\sum_{j=1}^{k} w_j \varphi(x_i, \theta_j) + \boldsymbol{w_0 \varphi(x_i, \theta_0)} \right] \rightarrow max_{w,\theta}$$

Непараметрические методы на основе ядерных функций

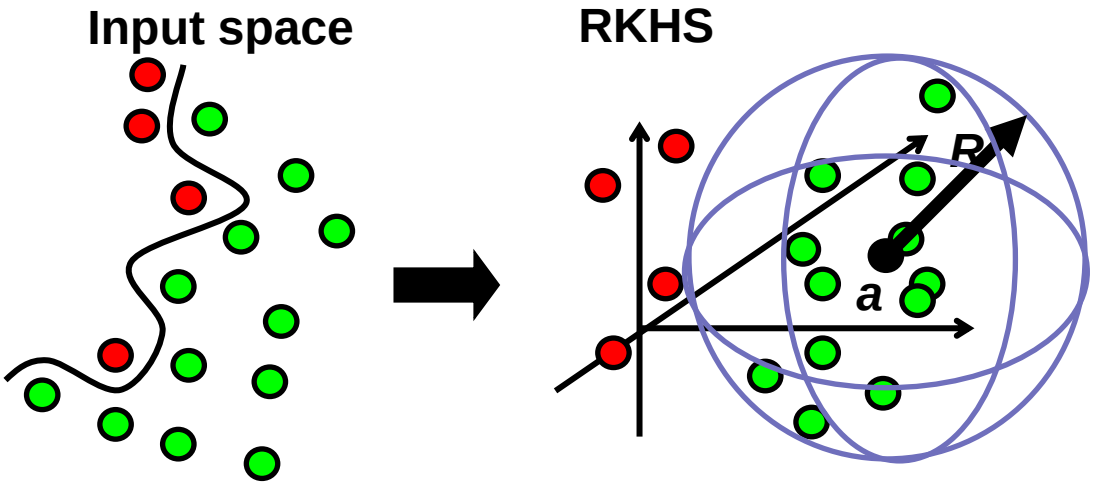
- **Основная идея** – отобразить признаковое пространство X в индуцированное гильбертово пространство большой размерности H (RKHS) с образами $\varphi(x)$ и $\varphi(y)$, связанными с наблюдениями x и y через замену скалярного произведения потенциальной функцией (ядром) $K(x,y) = \langle \varphi(x), \varphi(y) \rangle_H$,

  Цель отображения - дать возможность использовать в RKHS более простые геометрические структуры для описания основных зависимостей .



- **Популярные алгоритмы:**
  - Support vector clustering (Single Class SVM), Kernel PCA.

Support vector clustering



1. С помощью ядра (обычно гауссовского) строится RKHS, ширина ядра влияет на «гладкость» границ областей при обратном отображении
2. В RKHS ищется гиперсфера с центром в *a* и минимальным радиусом *R*, содержащую не менее $1 - \nu$ часть образов всех наблюдений
3. Аномалии – наблюдения, чьи образы вне гиперсферы, чем дальше, тем аномальнее
4. Обратное отображение границы задает в пространстве признаков контуры плотности распределения с заданным порогом

Обнаружение аномалий с помощью SVM

- Формулировка задачи оптимизации:

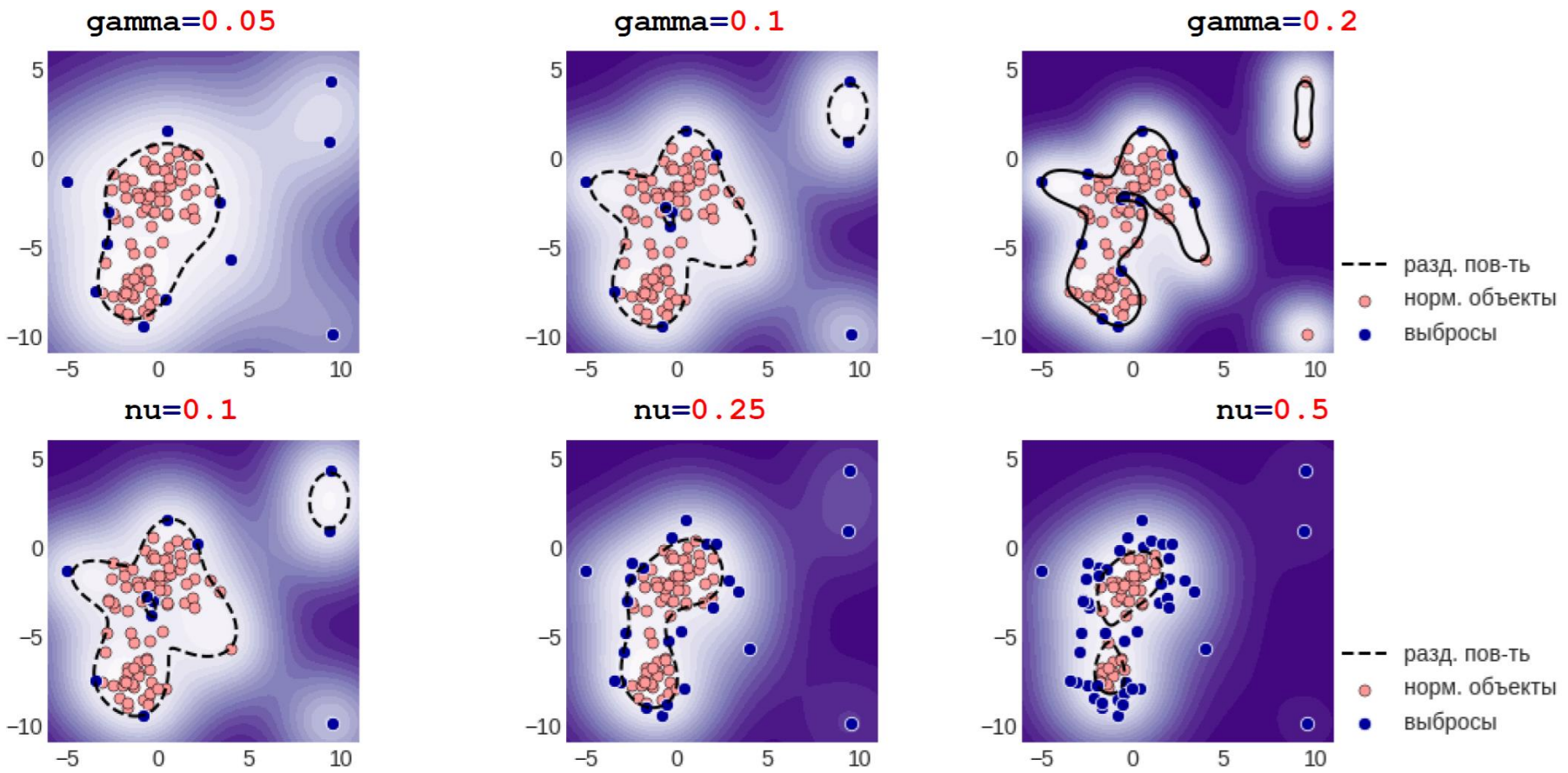
$$\min_{\xi \in \Re^m, R \in \Re, a \in H} \left[R^2 + \frac{1}{\nu l} \sum_{i=1}^{l} \xi_i \right]$$
$$\|\phi(x_i) - a\|^2 \leq R^2 + \xi_i, \forall i \in [1, N]$$

- Решающая функция:

$$f(z) = \text{sign}\left(R^2 - \sum_{i,j=1}^{l} \beta_i \beta_j K(x_i, x_j) + 2 \sum_{i=1}^{l} \beta_i K(x_i, z) - K(z, z) \right),$$

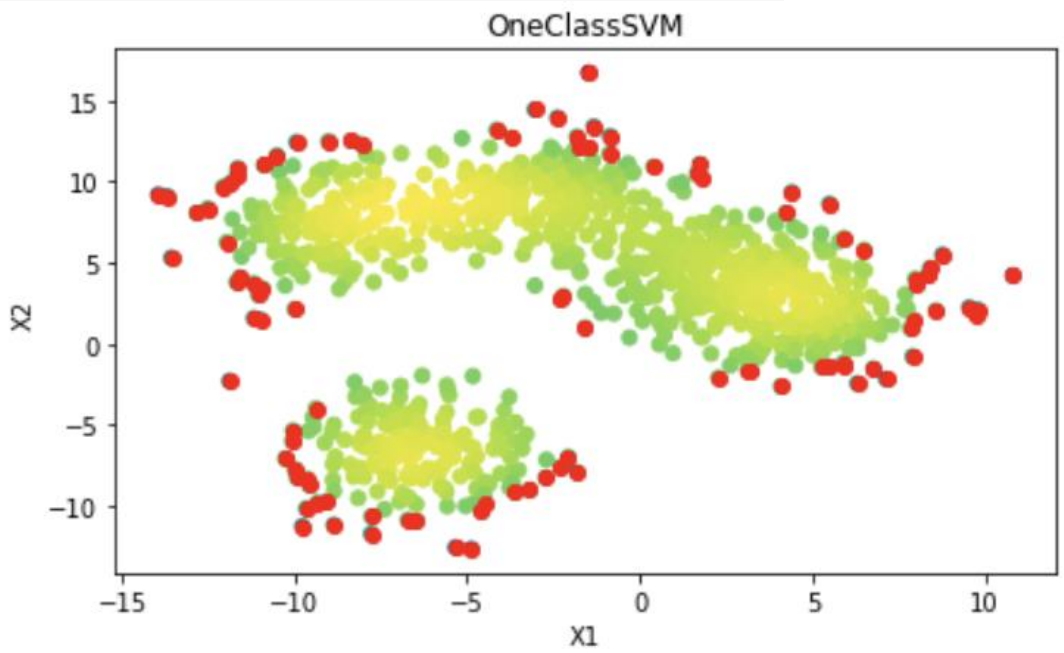
- где по ККТ β_i - множители Лагранжа:
  - $\beta_i = \frac{1}{\nu l}$ для выбросов,
  - $0 < \beta_i < \frac{1}{\nu l}$ для наблюдений на границе
  - $\beta_i = 0$ для точек внутри сферы радиуса R с центром в a
  - z – проверяемое наблюдений

Зависимость от ширины ядра



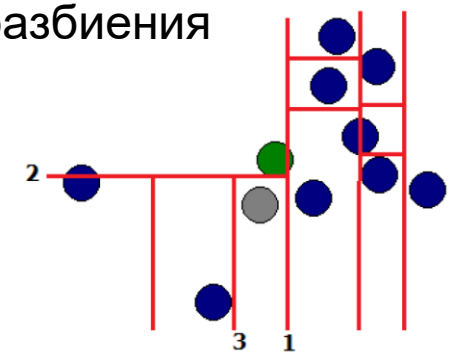
Демо пример

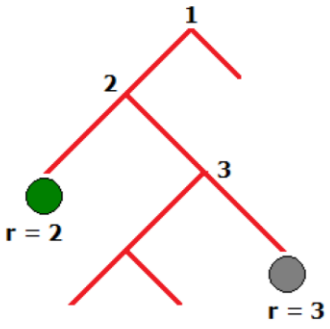
```
from sklearn.svm import OneClassSVM

osvm = OneClassSVM(nu=0.1).fit(X_one)
X_anom = X_one[osvm.predict(X_one)==-1]

plt.figure(figsize = (7, 4))
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=osvm.score_samples(X_one))
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:,1], c='red')
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('OneClassSVM')
```

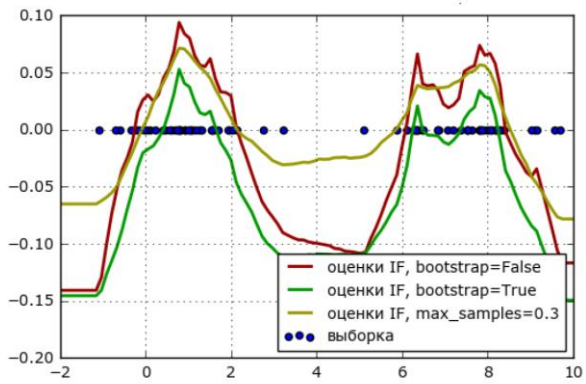


Методы анализа отклонений

- Основная идея - строим «сжимающую» модель
  - Находим аномальность наблюдение как отклонение от других либо по **ошибке реконструкции**, либо по **отличию сжимающего «кода»**
- На основе ошибки реконструкции:
  - Методы матричных разложений и главных компонент (в том числе нелинейные), автокодировщики и другие embeddings
- На основе отличия сжимающей модели - **Изоляционный лес:**
  - Строим ансамбль деревьев со случайным выбором признака и разбиения



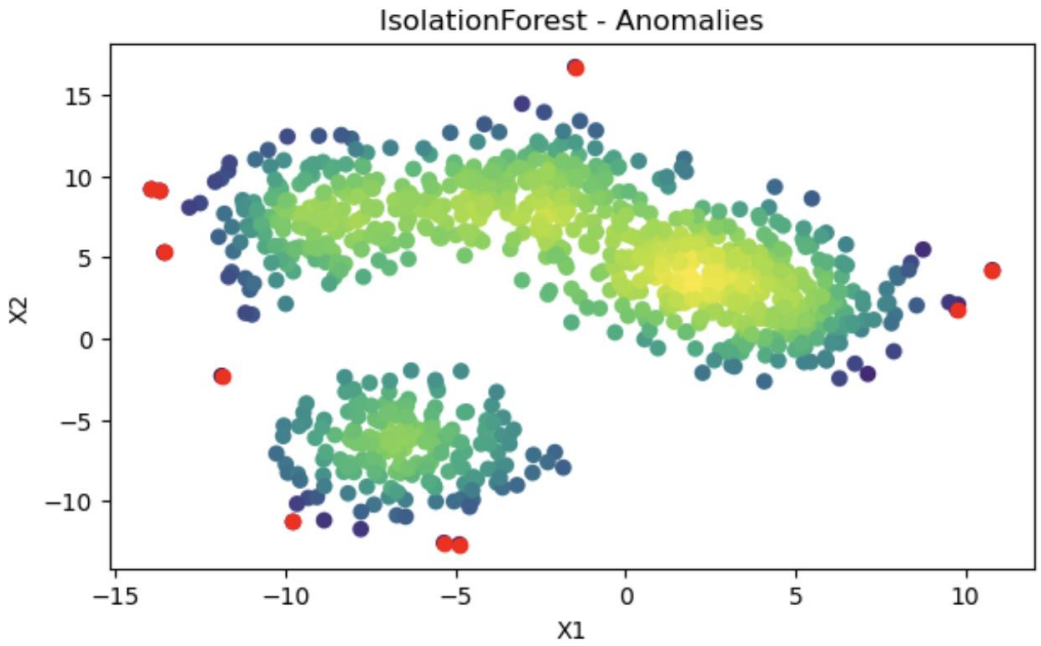




  - мера аномальности наблюдения – **средняя глубина для листьев ансамбля, куда попало наблюдение**

Демо пример

```
from sklearn.ensemble import IsolationForest

isof = IsolationForest(contamination=0.01, random_state=0)
if_outlier = isof.fit_predict(X_one)
X_anom = X_one[if_outlier==-1]

scr=isof.score_samples(X_one)


plt.figure(figsize = (7, 4))
plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=scr)
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:,1], c='red')
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('IsolationForest - Anomalies')
```



Kernel PCA

- Проекция наблюдений на выбранные k главных нелинейных компонент в RKHS.
  - Проекция образа наблюдения $\varphi(x)$ на *k*th главную компоненту V^k:

$$V^{k^T}\varphi(x) = \left(\sum_{i=1}^{N} a_i^l \varphi(x_i)\right)^T \varphi(x)$$

  - α собственные вектора центрированной матрицы ядер $\widetilde{K}$:

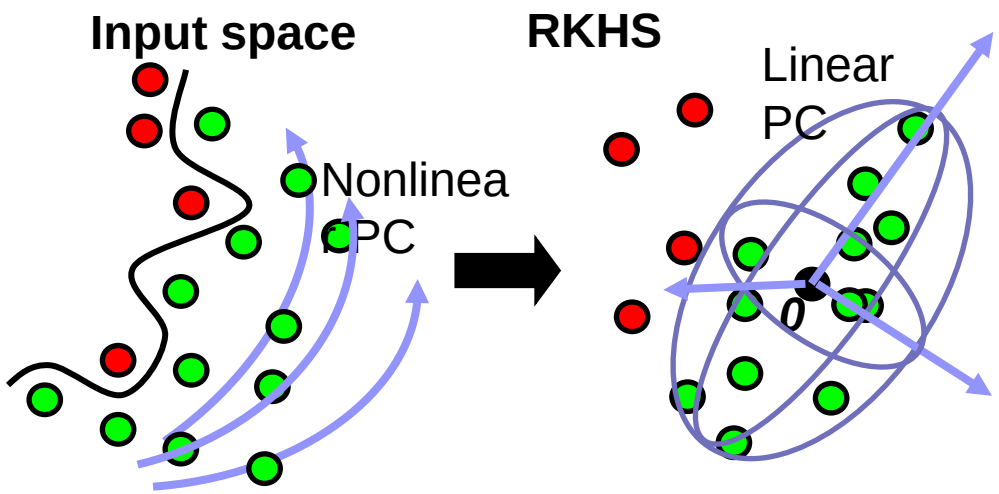
$$N\lambda\alpha = \widetilde{K},$$

где $\widetilde{K} = K - 1_N K - K 1_N + 1_N K 1_N$;

λ с.зн. *N* – размер выборки.

- В результате в RKHS строится гиперэллипсоид (не гиперсфера) с фиксированным центром (т.к. матрица центрирована), содержащий основную часть образов наблюдений

Kernel PCA



- $a = 0$ - центр центрированного гиперэллипсоида в RKHS
- главные компоненты линейны в RKHS и нелинейны в пространстве признаков

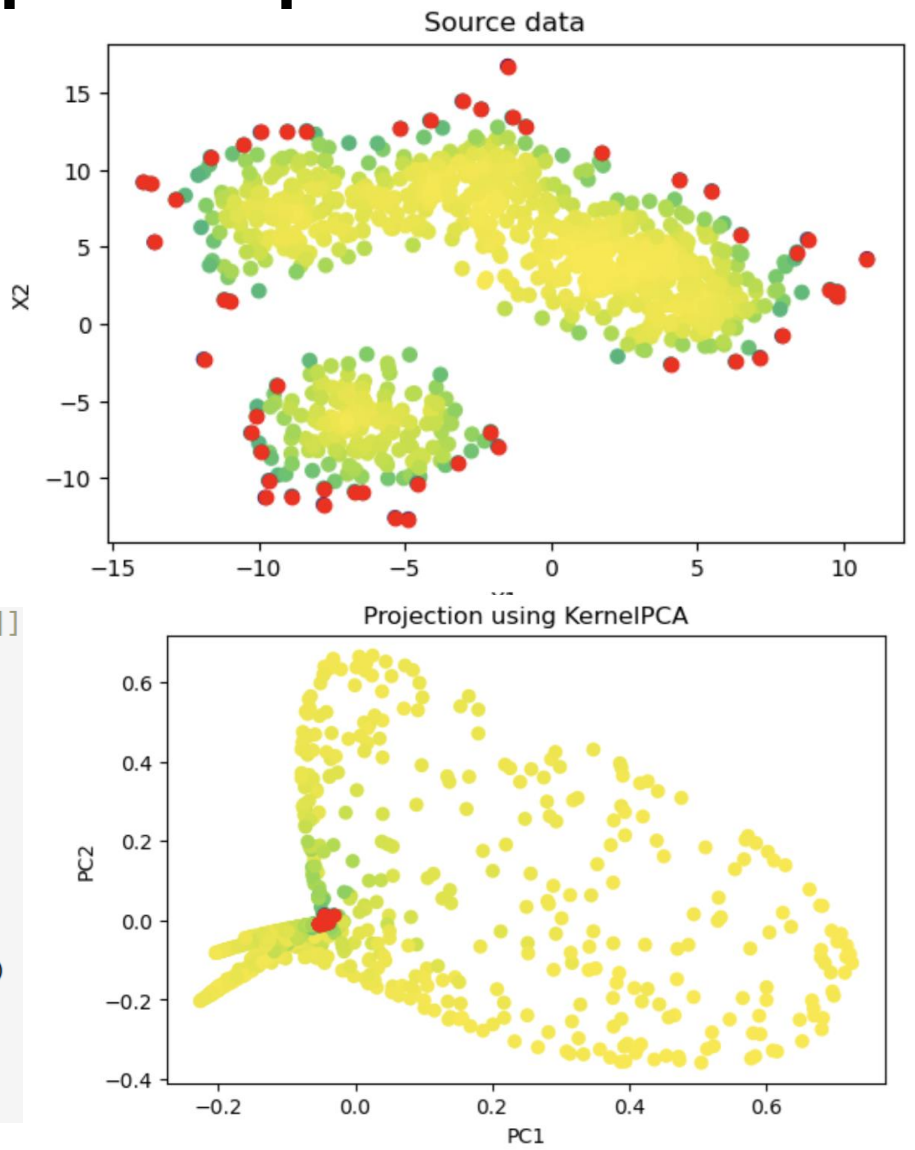
Ошибка реконструкции – уровень аномальности наблюдения z:

$$err(z) = K(z,z) - \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} K(z,x_i) + \frac{1}{N^2}\sum_{i,j=1}^{N} K(x_i,x_j) - \sum_{l=1}^{q}\left(\sum_{i=1}^{N} a_i^l (K(z,x_i) - \frac{1}{N}\sum_{r=1}^{N} K(x_i,x_r) - \frac{1}{N}\sum_{r=1}^{N} K(z,x_r) + \frac{1}{N^2}\sum_{r,s=1}^{N} K(x_r,x_s)\right)\right)^2,$$

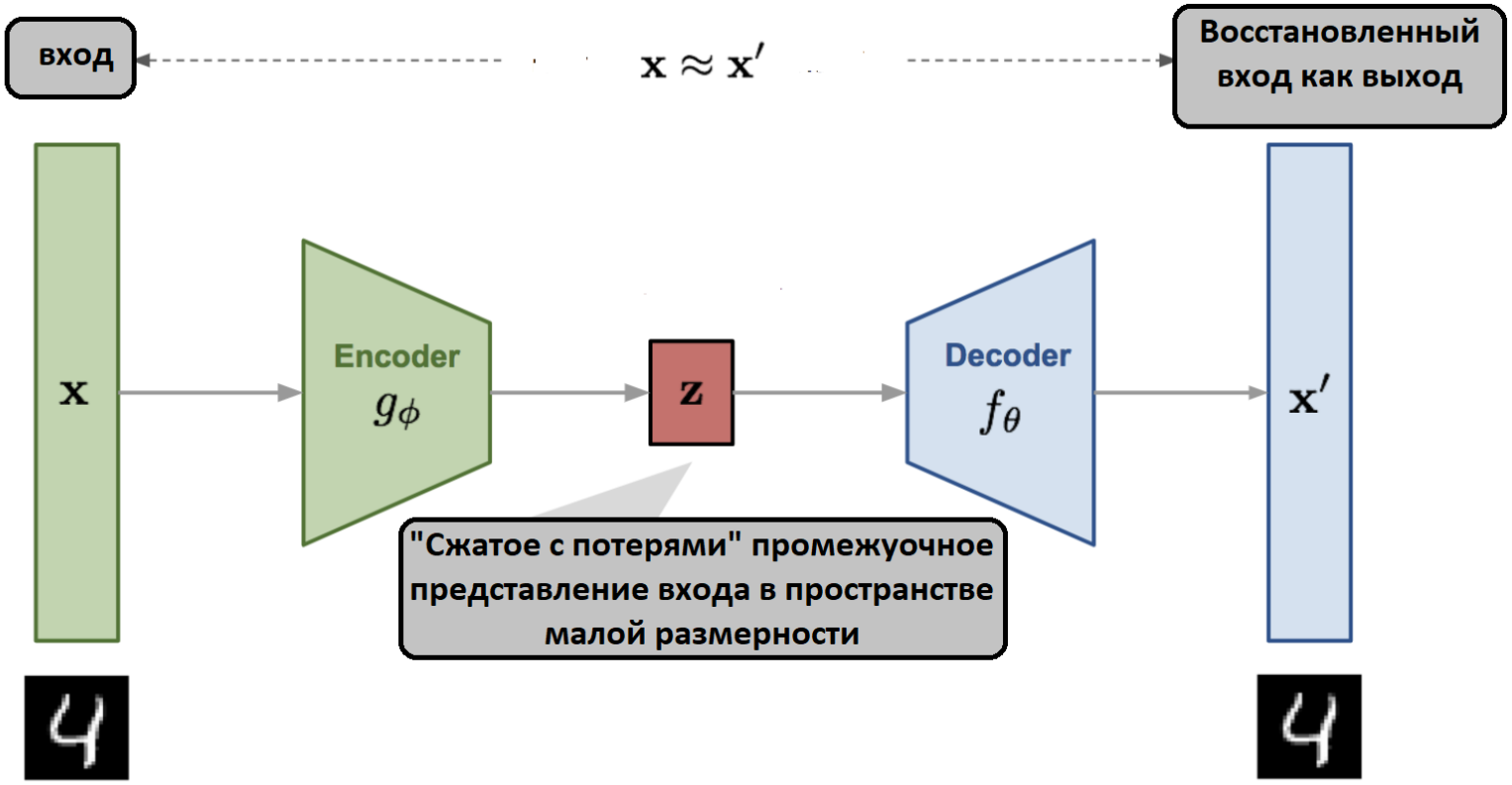
где N размер выборки; a_i^l коэф. KPCA; q – число главных компонент

Демо пример

```
from sklearn.decomposition import KernelPCA

kernel_pca = KernelPCA(kernel="rbf", gamma = 0.5,
                       fit_inverse_transform=True)
kernel_pca.fit(X_one)
X_one_pca = kernel_pca.transform(X_one)

fig, axes = plt.subplots(ncols=2, figsize=(14, 4))

#reconstruction error

E=abs(X_one-kernel_pca.inverse_transform(X_one_pca))

ET=np.apply_along_axis(np.linalg.norm, 1, E)
X_anom=X_one[ET>pd.DataFrame(ET).quantile(q=0.95)[0]]
X_anom_pca=X_one_pca[ET>pd.DataFrame(ET).quantile(q=0.95)[0]]

axes[0].scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1], c=-ET)
axes[0].scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:, 1], c="red")
axes[0].set_xlabel("X1")
axes[0].set_ylabel("X2")
axes[0].set_title("Source data")

axes[1].scatter(X_one_pca[:, 0], X_one_pca[:, 1], c=-ET)
axes[1].scatter(X_anom_pca[:, 0], X_anom_pca[:, 1], c="red")
axes[1].set_xlabel("PC1")
axes[1].set_ylabel("PC2")
axes[1].set_title("Projection using KernelPCA")
```



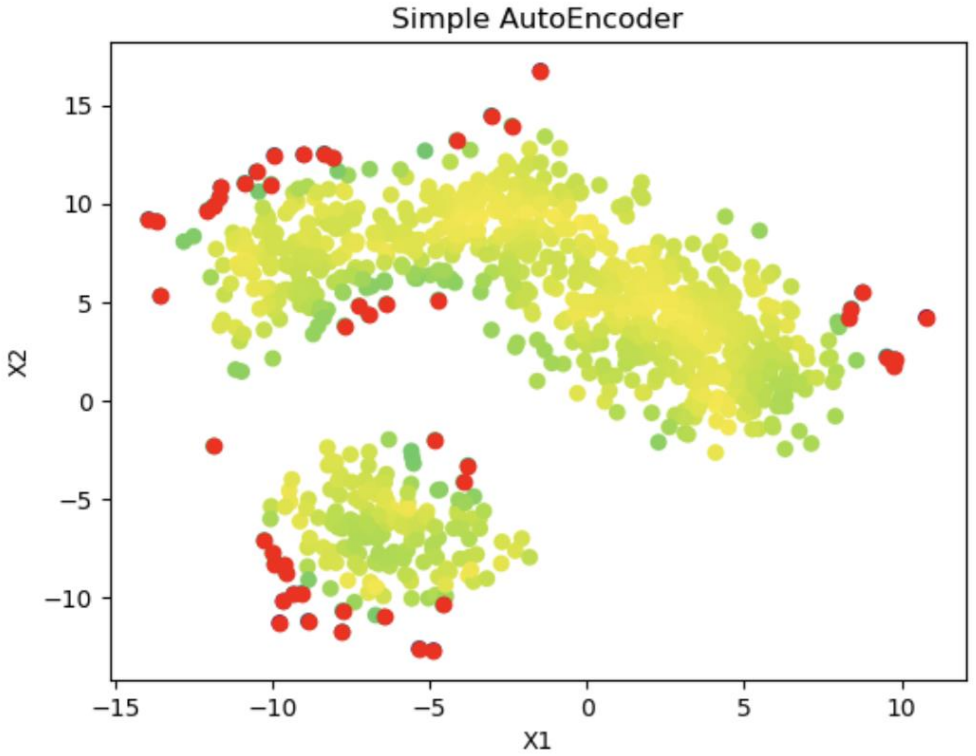
Автоэнкодер



1. Архитектура типа «песочных часов» (иногда «вывернутые», тогда embedding)
2. Обучается минимизируя ошибку восстановления на тренировочном наборе
3. Дополнительно можно использовать робастность – зашуление входа
4. Оценка аномальности – ошибка восстановления $\|x - x`\|$

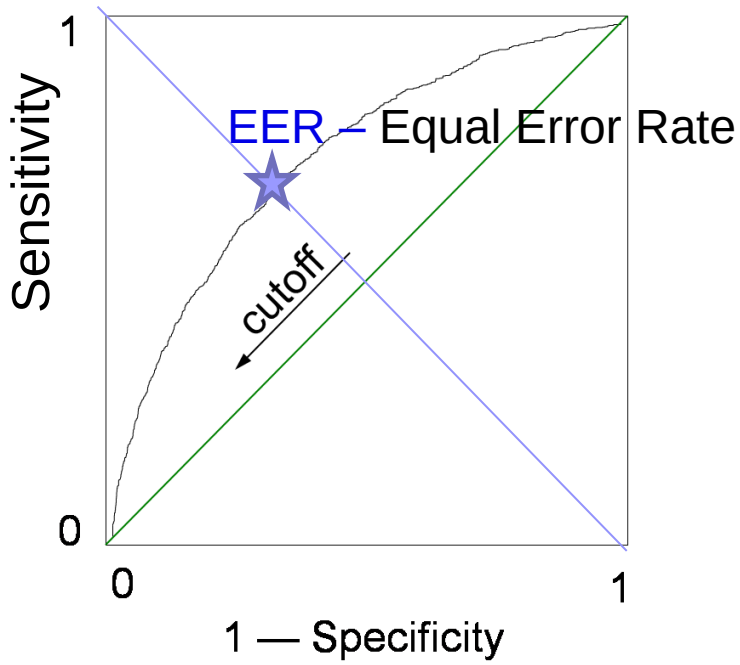
Демо пример

```
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
model = MLPRegressor(hidden_layer_sizes=(100,2,100), activation='tanh',
                     alpha=0.001, max_iter=1000)
model.fit(X_one,X_one)

E=1/(1+np.exp(abs(X_one-model.predict(X_one))))
ET=np.apply_along_axis(np.linalg.norm,1,E)
X_anom=X_one[ET<pd.DataFrame(ET).quantile(q=0.05)[0]]

plt.scatter(X_one[:, 0], X_one[:, 1],  c=ET)
plt.scatter(X_anom[:, 0], X_anom[:, 1],  c="red")
plt.xlabel('X1')
plt.ylabel('X2')
plt.title('Simple AutoEncoder')
plt.show()
```



Оценка модели

Actual Class	Predicted Class: 0	Predicted Class: 1	
0	**True Negative**	**False Positive**	Actual Negative
1	**False Negative**	**True Positive**	Actual Positive
	Predicted Negative	Predicted Positive	

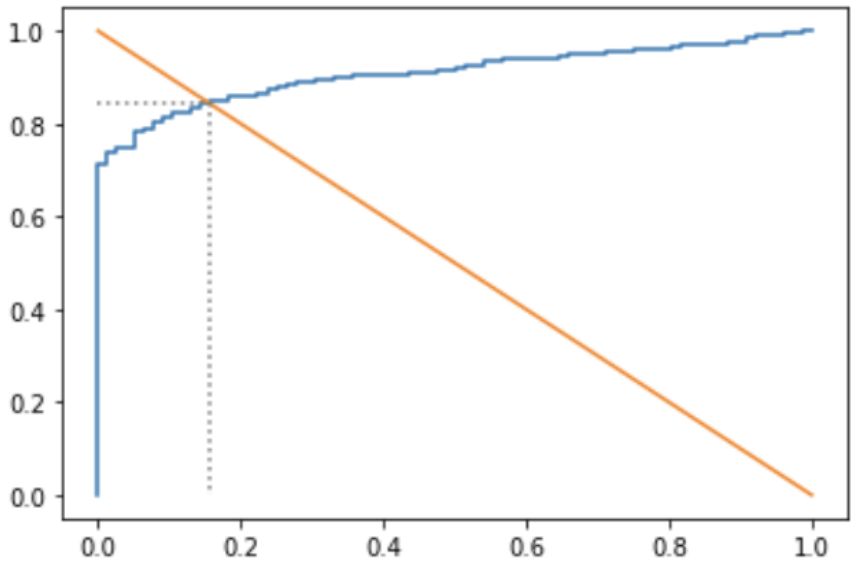


SENSITIVITY (true positive rate (TPR), hit rate, recall)
TPR = TP / (TP+FN)

SPECIFICITY (SPC) (true negative rate (TNR))
SPC = TN / (FP + TN)

Пример

```
from sklearn.ensemble import IsolationForest
from sklearn.metrics import roc_curve

isof = IsolationForest(contamination=0.01, random_state=0)
isof.fit(df_e.drop(columns="label"))
X_Y = isof.score_samples(df_e.drop(columns="label"))

rc=roc_curve(df_e["label"], X_Y, pos_label=6)

fpr, tpr, threshold = rc
fnr = 1 - tpr
eer_threshold = threshold[np.nanargmin(np.absolute((fnr - fpr)))]
EER = fpr[np.nanargmin(np.absolute((fnr - fpr)))]
```




```
plt.plot(tpr,fpr)
plt.plot([0,1],[1,0])
plt.plot([1-EER,1-EER],[EER,0],linestyle='dotted',color="grey")
plt.plot([0,1-EER],[EER,EER],linestyle='dotted',color="grey")
```