Детектирование аномалий с помощью sklearn

In [1]:

```
import numpy as np
import scipy.stats as sps
import pandas as pd

import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
sns.set(font_scale=1.3)
%matplotlib inline

import warnings
warnings.simplefilter("ignore")
```

started 19:43:37 2020-05-08, finished in 1.26s

In [2]:

```
from sklearn.covariance import EllipticEnvelope
from sklearn.ensemble import IsolationForest
from sklearn.neighbors import LocalOutlierFactor
from sklearn.cluster import DBSCAN
from sklearn.svm import OneClassSVM
```

started 19:43:38 2020-05-08, finished in 186ms

EllipticEnvelope

[Страница на sklearn (https://scikit-learn.org/0.20/modules/generated/sklearn.covariance.EllipticEnvelope.html)](https://scikit-learn.org/0.20/modules/generated/sklearn.covariance.EllipticEnvelope.html)

Создадим данные: облако из нормального распределения и некоторые выбросы.

In [3]:

```
X = sps.multivariate_normal(cov=[[2, 1], [1, 2]]).rvs(size=100)
X = np.vstack([X, sps.uniform(loc=-10, scale=20).rvs(size=(15, 2))])
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1]);
```

started 19:43:38 2020-05-08, finished in 290ms

Данный метод пытается построить эллиптическую оболочку типичных точек, отделив их от выбросов.

Параметр `contamination` отвечает за ожидаемую долю выбросов.

In [4]:

```
model = EllipticEnvelope(contamination=0.15)
model.fit(X)
```

started 19:43:39 2020-05-08, finished in 51ms

Out[4]:

```
EllipticEnvelope(assume_centered=False, contamination=0.15, random_sta
te=None,
                 store_precision=True, support_fraction=None)
```

Центр эллипса

In [5]:

```
model.location_
```

started 19:43:39 2020-05-08, finished in 4ms

Out[5]:

```
array([0.12671486, 0.28823447])
```

Матрица ковариаций (соответствует нормальному распределению)

In [6]:

```
model.covariance_
```

started 19:43:39 2020-05-08, finished in 11ms

Out[6]:

```
array([[1.53567586, 0.84108733],
       [0.84108733, 2.12482298]])
```

Степерью типичности точки служит метод `decision_function` , который вычисляет сдвинутое расстояние Махаланобиса. Сдвиг определяется так, чтобы отрицательные значения соответствовали выбросам.

In [7]:

```
model.decision_function([[0, 0],
                         [10, 0]])
```

started 19:43:39 2020-05-08, finished in 10ms

Out[7]:

```
array([  5.35688367, -77.57668225])
```

Визуализация полученного эллипса. Сам эллипс соответствует уравнению `model.decision_function(x)=0` .

In [8]:

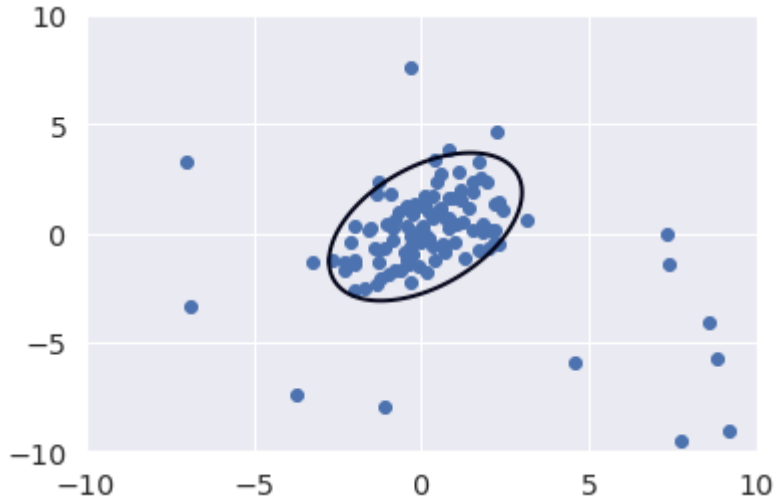
```
# двумерная сетка
X_grid, Y_grid = np.meshgrid(np.linspace(-10, 10, 500), np.linspace(-10, 10, 
Z = model.decision_function(np.c_[X_grid.ravel(), Y_grid.ravel()])
Z = Z.reshape(X_grid.shape)

plt.contour(X_grid, Y_grid, Z, levels=[0], linewidths=2)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1])
```

started 19:43:39 2020-05-08, finished in 359ms

Out[8]:

```
<matplotlib.collections.PathCollection at 0x7ff1b2f30ef0>
```



Создание данных для других методов

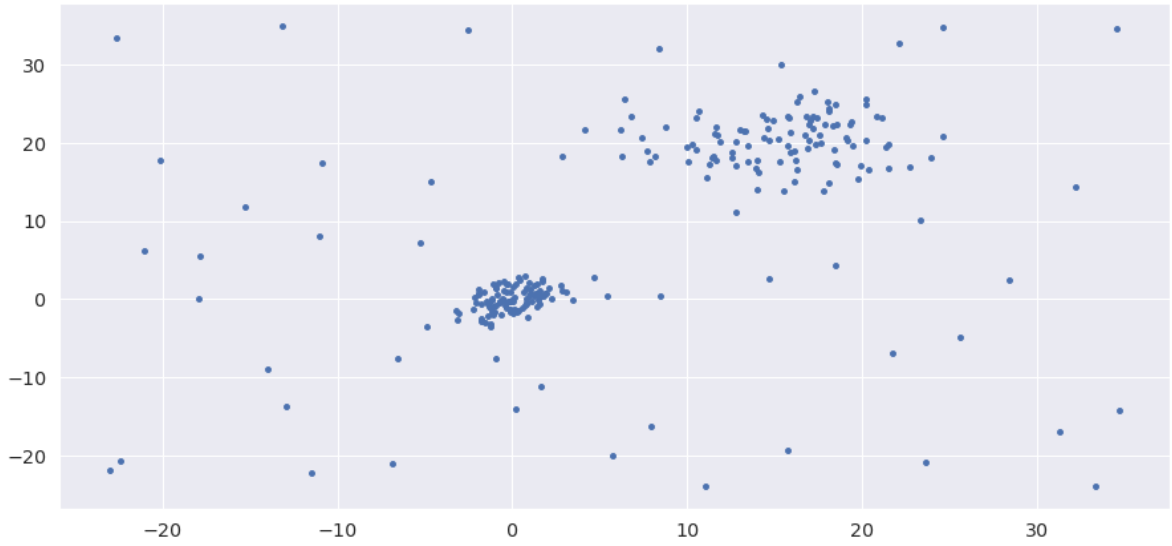
Создадим данные с двумя нормальным кластерами, один из них плотный, другой -- разреженный. Дополнительно добавим выбросы.

In [9]:

```
X1 = sps.multivariate_normal(cov=[[2, 1], [1, 2]]).rvs(size=100)
X2 = sps.multivariate_normal(mean=[15, 20], cov=[[15, 2], [2, 10]]).rvs(size=
X = np.vstack([X1, X2, sps.uniform(loc=-25, scale=60).rvs(size=(50, 2))])

plt.figure(figsize=(15, 7))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=15);
```

started 19:43:39 2020-05-08, finished in 383ms



IsolationForest

[Страница на sklearn (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.IsolationForest.html)](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.ensemble.IsolationForest.html)

Параметры:

- `n_estimators` -- число деревьев;
- `max_samples` -- размер выброки на каждое дерево;
- `max_features` -- количество признаков на каждое дерево;
- `contamination` -- ожидаемая доля выбросов;
- `bootstrap` -- использовать ли бутстрепные выборки;
- `n_jobs` -- количество процессов при распараллеливании.

Обучим лес на 200 деревьев

In [10]:

```
iforest = IsolationForest(contamination=0.15, n_estimators=200)
iforest.fit(X)
```

started 19:43:40 2020-05-08, finished in 307ms

Out[10]:

```
IsolationForest(behaviour='old', bootstrap=False, contamination=0.15,
                max_features=1.0, max_samples='auto', n_estimators=20
0,
                n_jobs=None, random_state=None, verbose=0, warm_start=
False)
```

Степерью типичности точки служит метод `decision_function` , который вычисляет со сдвигом среднюю глубину листа, в который попадает точка. Сдвиг определяется так, чтобы отрицательные

значения соответствовали выбросам.

In [11]:

```
iforest.decision_function([[0,0],
                           [10, 10],
                           [-20, -20]])
```

started 19:43:40 2020-05-08, finished in 89ms

Out[11]:

```
array([ 0.13847971, -0.02085678, -0.16622822])
```

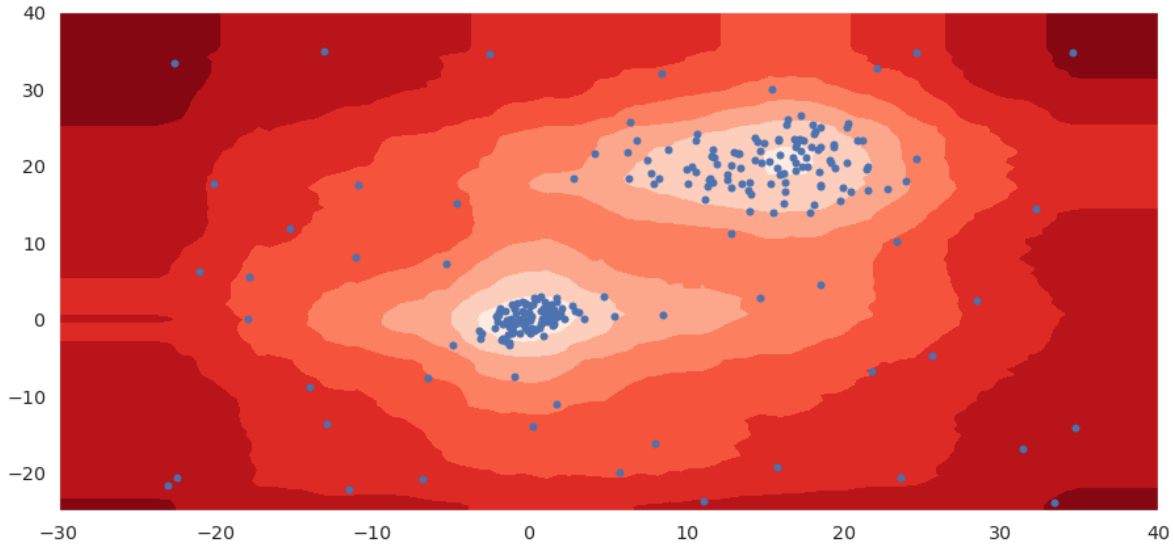
Визуализация результата. Для построения графика создается двумерная сетка точек. Далее для каждой точки из сетки вычисляется значение решающей функции. Раскраска области создается при помощи функции `plt.contourf` .

In [12]:

```
xx, yy = np.meshgrid(np.linspace(-30, 40, 100), np.linspace(-25, 40, 100))
Z = iforest.decision_function(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
Z = Z.reshape(xx.shape)

plt.figure(figsize=(15, 7))
plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=plt.cm.Reds_r)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=25);
```

started 19:43:40 2020-05-08, finished in 727ms



LocalOutlierFactor

[Страница на sklearn (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.neighbors.LocalOutlierFactor.html)](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.neighbors.LocalOutlierFactor.html)

Параметры:

- `n_neighbors` -- количество соседей;
- `metric` -- метрика;
- `p` -- параметр метрики Минковского;
- `contamination` -- ожидаемая доля выбросов;
- `novelty` -- использовать ли метод для обнаружения новизны или же для выбросов (по умолчанию);

- `n_jobs` -- количество процессов при распараллеливании.

Обучим модель, которая сразу выдаст метки (1 = типичная точка, -1 = выброс).

In [13]:

```
lof = LocalOutlierFactor(contamination=0.1, n_neighbors=10)
preds = lof.fit_predict(X)
```

started 19:43:41 2020-05-08, finished in 17ms

In [14]:

```
preds
```

started 19:43:41 2020-05-08, finished in 5ms

Out[14]:

```
array([ 1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1, -1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1, -1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,
1,
        1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1,  1, -1,
-1,
        1,  1, -1,  1, -1, -1, -1, -1,  1, -1, -1, -1, -1,  1, -1,  1,
-1,
        1,  1,  1, -1,  1,  1,  1, -1,  1,  1, -1,  1,  1, -1,  1, -1,
1,
        1, -1,  1, -1,  1,  1, -1,  1,  1,  1, -1, -1])
```

Отрицательная доля выбросов. Соответствует локальной доле выбросов (LOF), сдвинутой так, чтобы отрицательные значения соответствовали выбросам.

In [15]:

```
X_scores = lof.negative_outlier_factor_
X_scores[:5]
```

started 19:43:41 2020-05-08, finished in 7ms

Out[15]:

```
array([-1.0279096 , -1.48928875, -1.25569929, -0.9775965 , -1.3244223
6])
```

Визуализируем так, чтобы радиус круга точки соответствовал степени нетипичности точки. Чем меньше радиус, тем более типичной считается точка.

In [16]:

```
plt.figure(figsize=(15, 7))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], color='k', s=3)
radius = (X_scores.max() - X_scores) / (X_scores.max() - X_scores.min())
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=1000 * radius, edgecolors='r', facecolors='no
```

started 19:43:41 2020-05-08, finished in 423ms

DBSCAN

[Страница на sklearn (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.cluster.DBSCAN.html)](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.cluster.DBSCAN.html)

Параметры:

- `eps` -- максимальное расстояние между двумя точками, при котором они считаются соседями;
- `min_samples` -- минимальное количесто соседей точки, при котором точка считается основной;
- `metric` -- метрика;
- `p` -- параметр метрики Минковского;
- `n_jobs` -- количество процессов при распараллеливании.

Обучаем модель, которая сразу выдаст метки (-1 = выброс, остальные метки соответствую номеру кластера).

In [17]:

```
db = DBSCAN(eps=2, min_samples=10)
preds = db.fit_predict(X)
```

started 19:43:41 2020-05-08, finished in 5ms

Различные метки

In [18]:

```
np.unique(preds)
```

started 19:43:41 2020-05-08, finished in 9ms

Out[18]:

```
array([-1,  0,  1])
```

Визуализация результата

In [19]:

```
plt.figure(figsize=(15, 7))
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=20 + 30 * (preds!=-1), c=preds, cmap='Set1');
```

started 19:43:41 2020-05-08, finished in 373ms

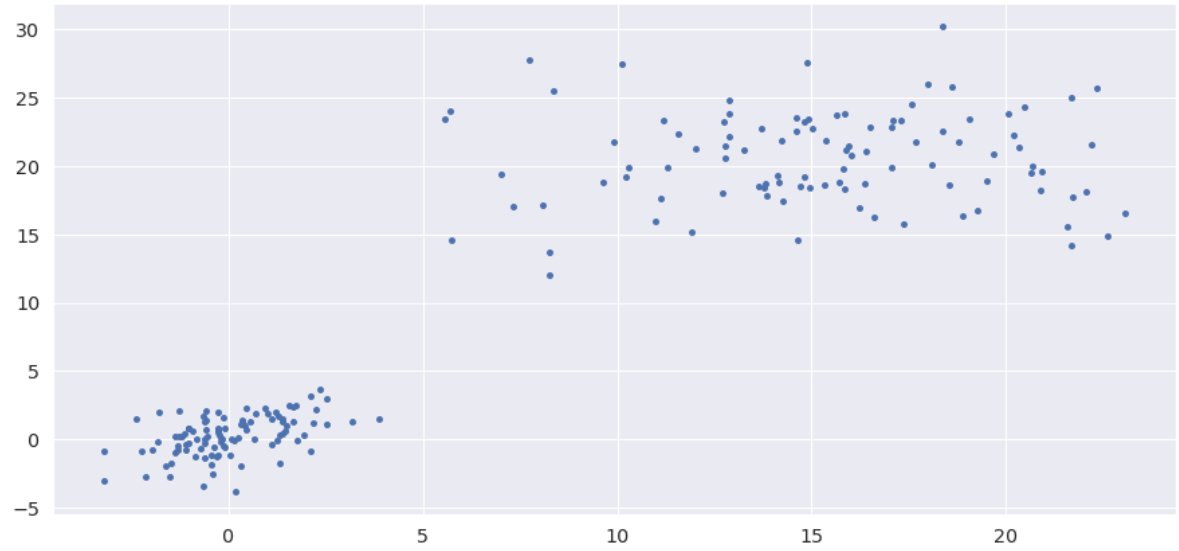
OneClassSVM

Метод работает для определения новизны, поэтому теперь создадим данные без выбросов

In [20]:

```
1  X1 = sps.multivariate_normal(cov=[[2, 1], [1, 2]]).rvs(size=100)
2  X2 = sps.multivariate_normal(mean=[15, 20], cov=[[15, 2], [2, 10]]).rvs(size=
3  X = np.vstack([X1, X2])
4
5  plt.figure(figsize=(15, 7))
6  plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=15);
```

started 19:43:42 2020-05-08, finished in 368ms



[Страница на sklearn (https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.svm.OneClassSVM.html)](https://scikit-learn.org/stable/modules/generated/sklearn.svm.OneClassSVM.html)

Параметры:

- `kernel` -- тип ядра. Метод обычно хорошо работает только с `rbf` (по умолчанию);
- `gamma` -- параметр ядра;
- `nu` -- верхняя граница доли выбросов в данных.

Поля:

- `support_` -- индексы опорных векторов;
- `support_vectors_` -- опорные вектора;
- `dual_coef_` -- коэффициенты опорных векторов;
- `intercept_` -- свободный коэффициент.

Обучаем модель.

In [21]:

```
svm = OneClassSVM()
svm.fit(X)
```

started 19:43:42 2020-05-08, finished in 5ms

Out[21]:

```
OneClassSVM(cache_size=200, coef0=0.0, degree=3, gamma='auto_deprecate
d',
            kernel='rbf', max_iter=-1, nu=0.5, random_state=None,
            shrinking=True, tol=0.001, verbose=False)
```

Степерью типичности точки служит метод `decision_function` , который вычисляет расстояние (со знаком) до разделяющей гиперплоскости (в спрямляющем пространстве). Отрицательные значения соответствуют аномалиям.

In [22]:

```
svm.decision_function([[0,0],
                       [10, 10],
                       [-20, -20]])
```

started 19:43:42 2020-05-08, finished in 11ms

Out[22]:

```
array([ 2.19918960e-03, -3.06791392e+00, -3.09468614e+00])
```

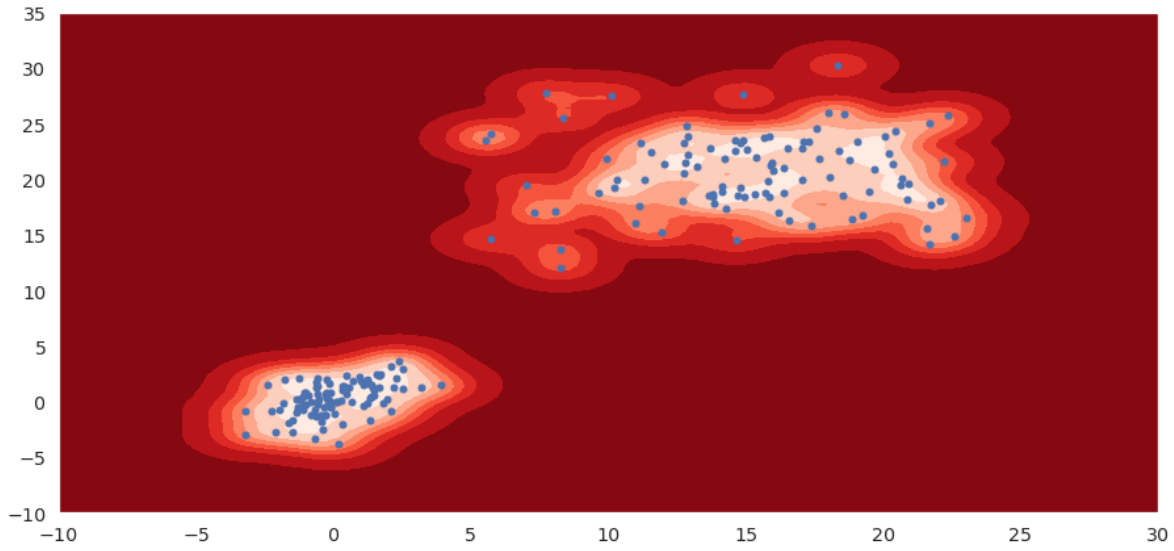
Визуализация результата. Для построения графика создается двумерная сетка точек. Далее для каждой точки из сетки вычисляется значение решающей функции. Раскраска области создается при помощи функции `plt.contourf` .

In [23]:

```
xx, yy = np.meshgrid(np.linspace(-10, 30, 100), np.linspace(-10, 35, 100))
Z = svm.decision_function(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
Z = Z.reshape(xx.shape)

plt.figure(figsize=(15, 7))
plt.contourf(xx, yy, Z, cmap=plt.cm.Reds_r)
plt.scatter(X[:, 0], X[:, 1], s=25);
```

started 19:43:42 2020-05-08, finished in 481ms



Данные о свойствах вин

In [24]:

```
winequality = pd.read_csv("./winequality-red.csv", sep=';')
winequality.head(10)
```

started 19:43:42 2020-05-08, finished in 26ms

Out[24]:

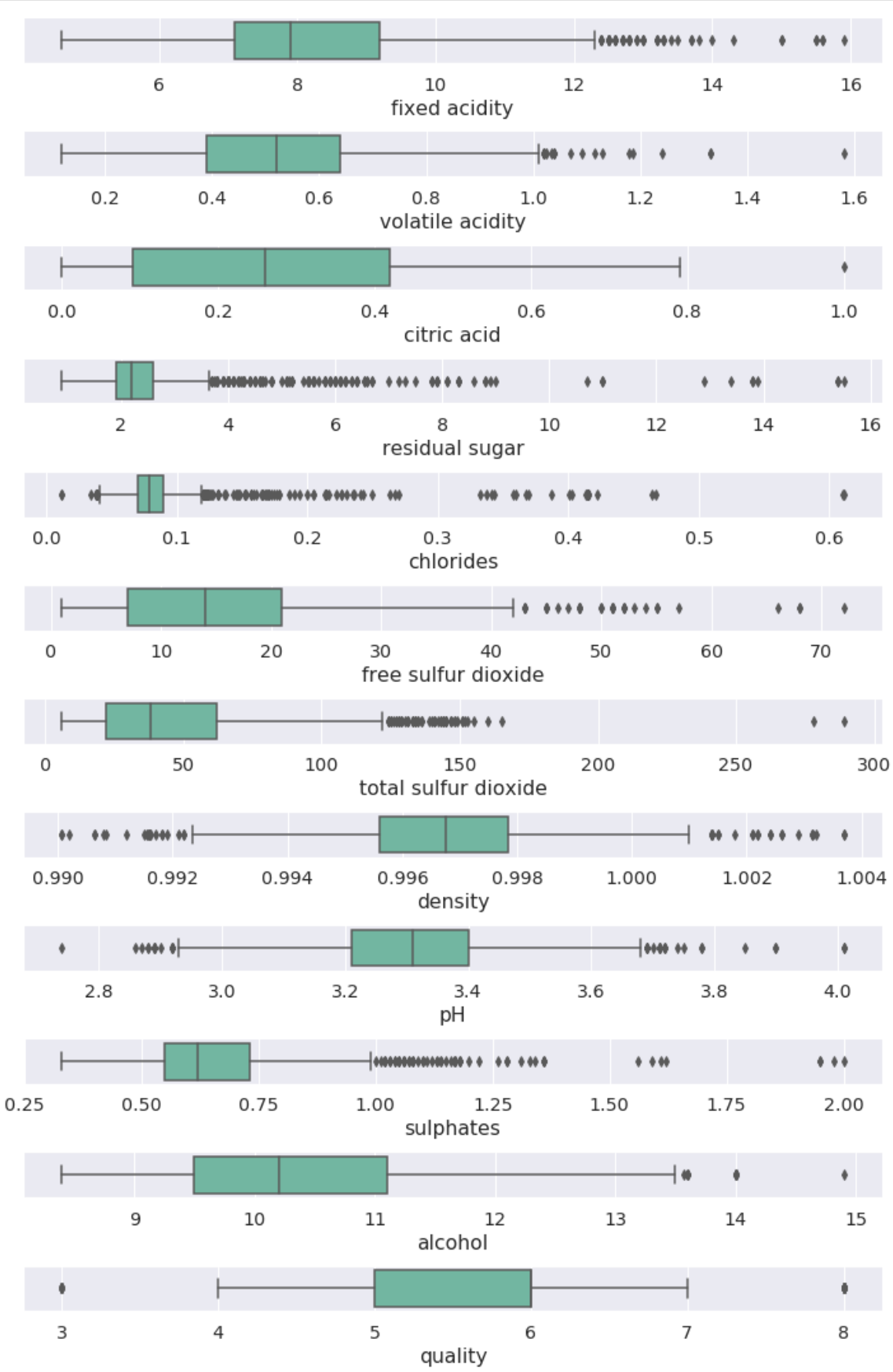
	fixed acidity	volatile acidity	citric acid	residual sugar	chlorides	free sulfur dioxide	total sulfur dioxide	density	pH	sulphates	alcoh
0	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	9
1	7.8	0.88	0.00	2.6	0.098	25.0	67.0	0.9968	3.20	0.68	9
2	7.8	0.76	0.04	2.3	0.092	15.0	54.0	0.9970	3.26	0.65	9
3	11.2	0.28	0.56	1.9	0.075	17.0	60.0	0.9980	3.16	0.58	9
4	7.4	0.70	0.00	1.9	0.076	11.0	34.0	0.9978	3.51	0.56	9
5	7.4	0.66	0.00	1.8	0.075	13.0	40.0	0.9978	3.51	0.56	9
6	7.9	0.60	0.06	1.6	0.069	15.0	59.0	0.9964	3.30	0.46	9
7	7.3	0.65	0.00	1.2	0.065	15.0	21.0	0.9946	3.39	0.47	10
8	7.8	0.58	0.02	2.0	0.073	9.0	18.0	0.9968	3.36	0.57	9
9	7.5	0.50	0.36	6.1	0.071	17.0	102.0	0.9978	3.35	0.80	10

Посмотрим на боксплоты по всем признакам. Цель поиска выбросов -- найти наилучшие вина.

In [25]:

```
plt.figure(figsize=(10, 15))
for i, c in enumerate(winequality.columns):
    plt.subplot(winequality.shape[1], 1, i+1)
    sns.boxplot(x=winequality[c], palette='Set2')
plt.tight_layout()
```

started 19:43:43 2020-05-08, finished in 3.75s



Оставим только первые 5

In [26]:

```
1  winequality = winequality.iloc[:, :5]
```

started 19:43:46 2020-05-08, finished in 5ms

Применим IsolationForest на 2.5% выбросов и 1000 деревьев и визуализируем результат.

In [27]:

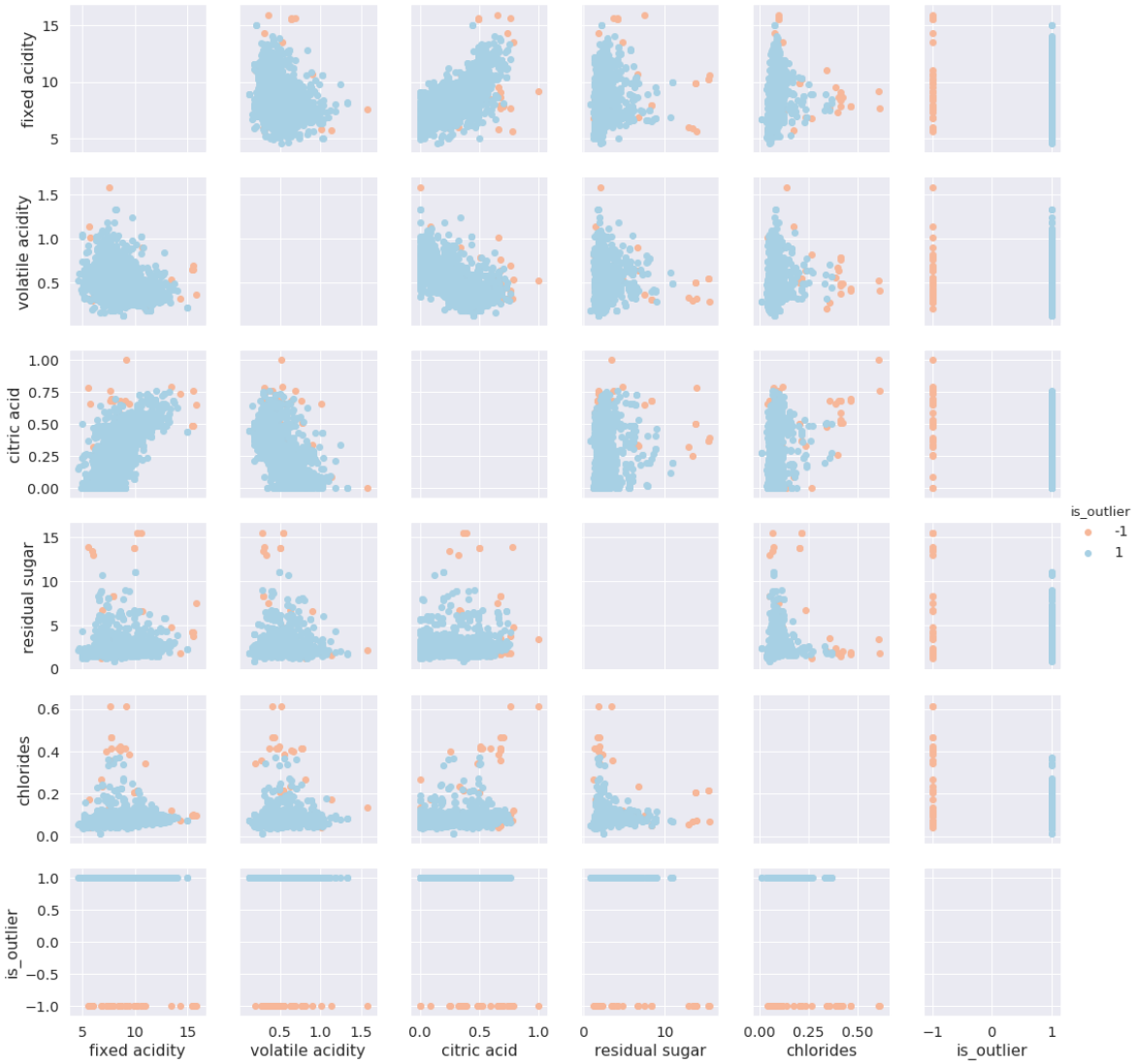
```
iforest = IsolationForest(contamination=0.025, n_estimators=1000)
is_outlier = iforest.fit_predict(winequality)

winequality_IF = winequality.copy()
winequality_IF['is_outlier'] = is_outlier

plot = sns.PairGrid(winequality_IF, hue='is_outlier', palette='RdBu')
plot = plot.map_offdiag(plt.scatter);
plot = plot.add_legend()
```

started 19:43:46 2020-05-08, finished in 13.5s

```
/usr/local/lib/python3.7/dist-packages/sklearn/ensemble/iforest.py:41
5: DeprecationWarning: threshold_ attribute is deprecated in 0.20 and
will be removed in 0.22.
  " be removed in 0.22.", DeprecationWarning)
```



Количество выбросов, которые мы нашли

In [28]:

```
(is_outlier == -1).sum()
```

started 19:44:00 2020-05-08, finished in 4ms

Out[28]:

39

Применим LocalOutlierFactor на 2.5% и 10 соседей и визуализируем результат

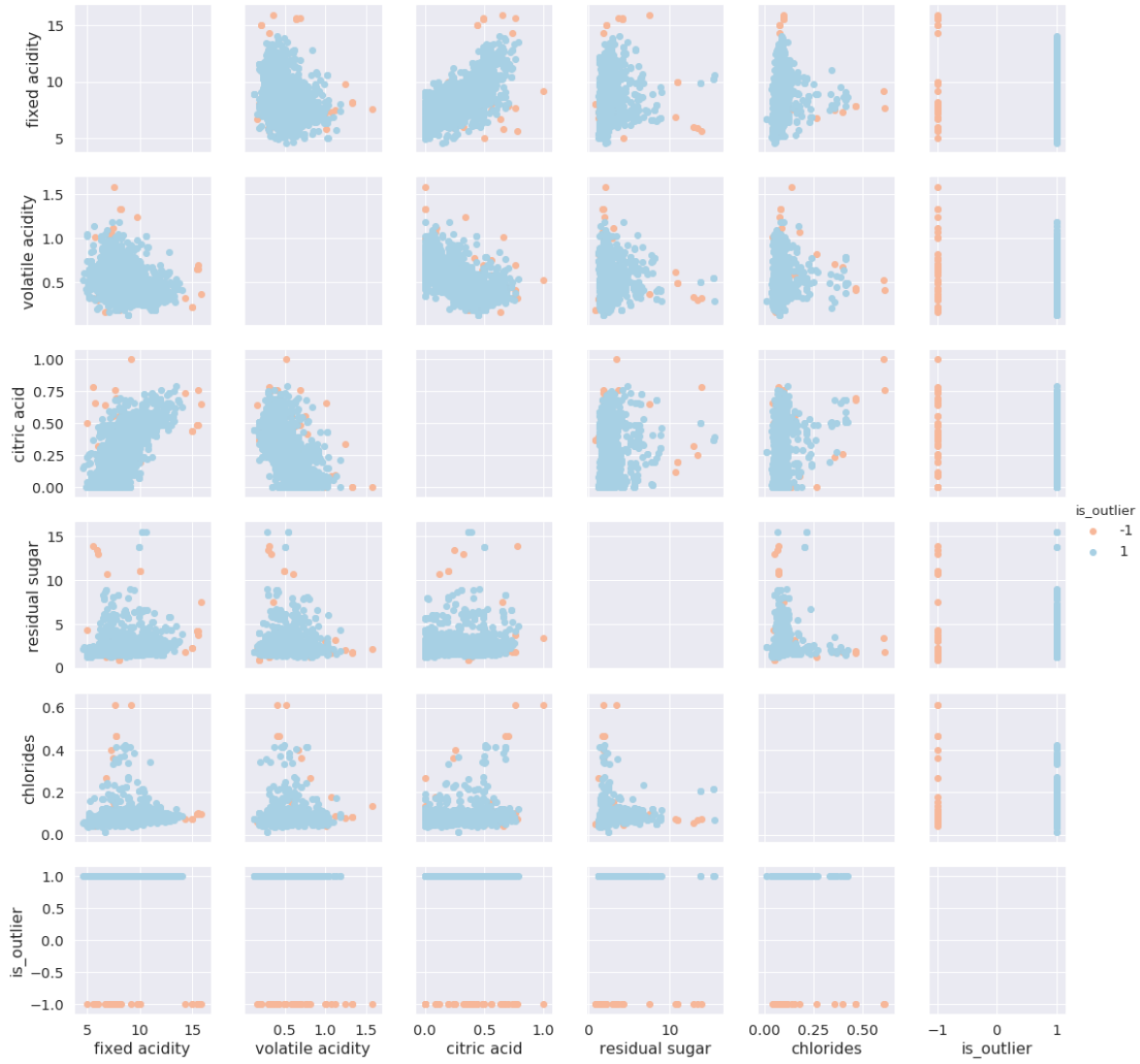
In [29]:

```
lof = LocalOutlierFactor(contamination=0.025, n_neighbors=10)
is_outlier = lof.fit_predict(winequality)

winequality_LOF = winequality.copy()
winequality_LOF['is_outlier'] = is_outlier

plot = sns.PairGrid(winequality_LOF, hue='is_outlier', palette='RdBu')
plot = plot.map_offdiag(plt.scatter);
plot = plot.add_legend()
```

started 19:44:00 2020-05-08, finished in 10.8s



Количество выбросов, которое мы нашли. Такое же, т.к. мы явно задали, сколько их :)

In [30]:

```
1  (is_outlier == -1).sum()
```

started 19:44:11 2020-05-08, finished in 3ms

Out[30]:

40