Data Analytics Challenge - ASN-SMOTE

2023-07-02

Philipp von Lovenberg, Vincent Bläske, Dennis Götz

Inhaltsverzeichnis

Einleitung

Derzeit stellen unausgeglichene Datensätze eine erhebliche Herausforderung im Bereich des maschinellen Lernens und des Data Minings dar. Denn die herkömmlichen Klassifizierungsverfahren neigen in der Regel dazu, die Mehrheitsklasse zu bevorzugen, welche bei einem binären Klassifizierungsproblem oft ein Vielfaches an Instanzen gegenüber der Minderheitsklasse besitzt. Hierdurch wird der Klassifikator in seiner Vorhersagefähigkeit, die Minderheitsinstanzen korrekt zu erkennen, stark beeinträchtigt, kann jedoch trotzdem eine hohe Accuracy aufweisen. Die Minderheitsklasse kann dabei auch völlig unerkannt bleiben. Diese Thematik ist insbesondere bei der Erkennung betrügerischer Transaktionen in Banken, Kreditrisikobewertung oder Erkennung von Firewall-Eingriffen von hoher Bedeutung. Aufgrund dieser universellen Existenz von unausgewogenen Datensätzen wurden bereits viele Vorverarbeitungsmethoden vorgeschlagen, um die Imbalance zu bewältigen. Oversampling ist eine vielversprechende Technik für unausgewogene Datensätze, die neue Minderheiteninstanzen erzeugt, um den Datensatz auszugleichen. Unter den Oversampling-Methoden ist die Synthetic Minority-Oversampling-Technique (SMOTE) eine der bekanntesten Methoden, die künstliche Minoritätsinstanzen durch lineare Interpolation erzeugt. Eine jüngst veröffentlichte Adaption dessen liefert im Paper „ASN-SMOTE: a synthetic minority oversampling method with adaptive qualified synthesizer selection“ von Yi Xinkai et al. (2022) vielversprechende Ergebnisse, weshalb dieser Algorithmus im Folgenden auf dem Creditcard Datensatz angewendet wird. Weiterhin wird seine Performance mithilfe zweier geeigneter Classifier und den Ergebnissen des originalen SMOTE Algorithmus untersucht. Dafür wird nach der Data Exploration und Anwendung des SMOTE im 1. Kapitel die Funktionsweise des ASN-SMOTE sowie die Unterschiede zum ursprünglichen Algorithmus in Kapitel 2 erläutert. Anschließend werden die verwendeten Classifier und das Performancemaß in Kapitel 3 sowie die gewählte Cross-Validation im 4. Kapitel präsentiert. Darauf folgt in Kapitel 5 und 6 eine Methode des Undersamplings und die Durchführung der Hyperparameteroptimierung. Abschließend werden die Ergebnisse des ASN-SMOTE in Kapitel 6 analysiert, bevor ein Ausblick mit weiteren Ideen und Forschungsfragen folgt. Der Code des entsprechenden Abschnitts ist zur Nachvollziehbarkeit in der Programmiersprache R an jedes Kapitel angehängt.

1. Data Exploration

Der zu behandelnde Datensatz Creditdata beinhaltet europäische Kreditkartentransaktionen von September 2013 im CSV-Format und besitzt pro Transaktion 31 Features/Spalten, wobei die letzte binäre Spalte die Target darstellt. Diese definiert, ob ein Sample Fraud (1) oder kein Fraud (0) ist. Das Ziel hierbei ist es ein Machine Learning Modell zu trainieren, welcher Kreditkartenbetrug erkennen soll, um die Kunden vor unautorisierten Belastungen zu schützen. Die Daten sind ausschließlich numerisch und abgesehen von Time und Amount aus Datenschutzgründen mit PCA transformiert worden. Zu Beginn werden die notwendigen Packages geladen sowie die Working Directory in den Ordner gesetzt, worin sich der Creditdata Datensatz befindet und mit read.csv eingelesen. Anschließend wird eine NA-Analyse durchgeführt und einige Statistiken der einzelnen Spalten berechnet. Die Imbalance des Datensatzes wird deutlich, wenn wir die Anzahl der Minority Samples mit den 284.315 der Majority vergleichen. Denn es befinden sich lediglich 492 Fraud Samples in Creditdata, was einem Prozentsatz von 0,17% entspricht. Dies deutet auf eine extreme Imbalance zwischen Majority und Minority hin und macht eine Preprocessingmethode umso notwendiger. Aufgrund der hohen Imbalance wird ein 90 zu 10 Split der Daten in Trainings- und Testdatensatz durchgeführt, worauf eine Trennung der Features von der Target Variable folgt. Da das Feature Time als nicht aussagekräftig genug erscheint, wird dieses aus dem Datensatz entfernt und ebenfalls ein Scaling der Spalte Amount vorgenommen, da diese nicht mit PCA transformiert wurde. Dies geschieht in Trainings- und Testdatensatz separat, um den Mittelwert und die Standardabweichung des Testdatensatzes nicht mit in den Trainingsdatensatz aufzunehmen, was andernfalls zu Overfitting führen würde. Beim Korrelationsplot der Features mit der Target Variable fallen einige positive als auch negative Korrelation beim Feature Amount beispielsweise mit V2 und V7 auf. Die Target Value weist z.B. mit den Features V12, V15 und V17 lediglich einige niedrige negative Korrelation auf. Im Anschluss an die Data Exploration wird der in R bereits implementierte SMOTE Algorithmus aus dem Package smotefamily auf den Trainingsdatensatz angewendet, um eine Balance im Datensatz herzustellen. Nach der Generierung von 255.228 synthetischen Trainingsdaten beträgt der Anteil der Minority Samples im Train Set 49,97%. Beim Vergleich der Visualisierungen mit den Features V1 und V2 wird die Funktionsweise des SMOTE Algorithmus mit linearer Interpolation durch die geraden Linien, welche die synthetischen Daten ziehen, deutlich.

```
# Load necessary packages
library(tidyverse)
```

```
## -- Attaching core tidyverse packages ------------------------ tidyverse 2.0.0 --
## v dplyr     1.1.2     v readr     2.1.4
## v forcats   1.0.0     v stringr   1.5.0
## v ggplot2   3.4.2     v tibble    3.2.1
## v lubridate 1.9.2     v tidyr     1.3.0
## v purrr     1.0.1
## -- Conflicts ---------------------------------------- tidyverse_conflicts() --
## x dplyr::filter() masks stats::filter()
## x dplyr::lag()    masks stats::lag()
## i Use the conflicted package (<http://conflicted.r-lib.org/>) to force all conflicts to be
come errors
```

```
library(randomForest)
```

```
## randomForest 4.7-1.1
## Type rfNews() to see new features/changes/bug fixes.
##
## Attache Paket: 'randomForest'
##
## Das folgende Objekt ist maskiert 'package:dplyr':
##
##     combine
##
## Das folgende Objekt ist maskiert 'package:ggplot2':
##
##     margin
```

```
library(caTools)
library(smotefamily)
library(caret)
```

```
## Lade nötiges Paket: lattice
##
## Attache Paket: 'caret'
##
## Das folgende Objekt ist maskiert 'package:purrr':
##
##     lift
```

```
library(mlr)
```

```
## Lade nötiges Paket: ParamHelpers
## Warning message: 'mlr' is in 'maintenance-only' mode since July 2019.
## Future development will only happen in 'mlr3'
## (<https://mlr3.mlr-org.com>). Due to the focus on 'mlr3' there might be
## uncaught bugs meanwhile in {mlr} - please consider switching.
##
## Attache Paket: 'mlr'
##
## Das folgende Objekt ist maskiert 'package:caret':
##
##     train
```

```
library(tibble)
library(corrplot)
```

```
## corrplot 0.92 loaded
```

```
# Load the dataset
#setwd("C:/Users/Vincent Bl/Desktop/DAC/")
setwd("C:/Users/Dennis/OneDrive/Dokumente/03_Master/05_Kurse/01_BA/04_DAC/")
ccdata <- read.csv("creditcard.csv")

# Look at the data
#View(ccdata)
#summary(ccdata)         # summary statistics of the data
colSums(is.na(ccdata))  # check for NA in the data
```

```
##   Time     V1     V2     V3     V4     V5     V6     V7     V8     V9    V10
##      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0
##    V11    V12    V13    V14    V15    V16    V17    V18    V19    V20    V21
##      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0      0
##    V22    V23    V24    V25    V26    V27    V28 Amount  Class
##      0      0      0      0      0      0      0      0      0
```

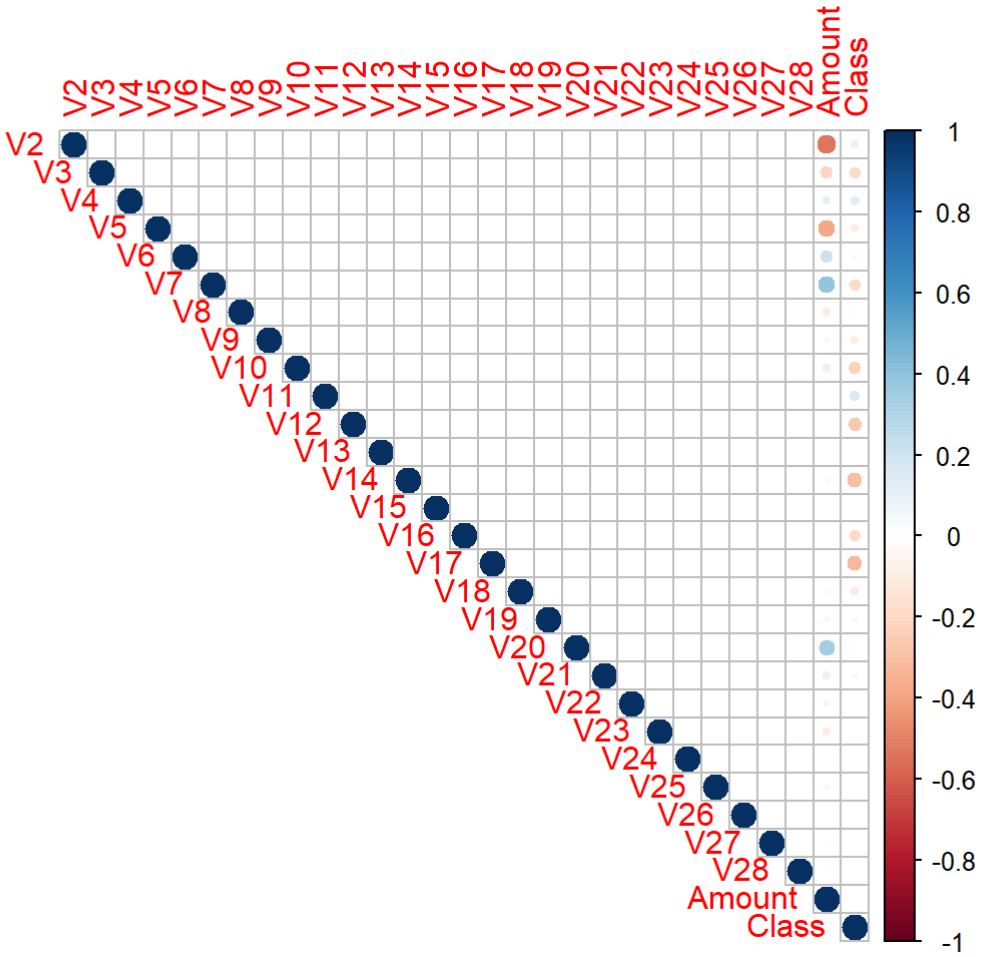
```
table(ccdata$Class)     # absolute amount of class membership
```

```
##
##      0      1
## 284315    492
```

```
### Preprocessing
# Split into training/test set
set.seed(123)
split <- sample.split(ccdata$Class, SplitRatio = 0.9)
train <- subset(ccdata, split == TRUE)
test <- subset(ccdata, split == FALSE)
table(train$Class)
```

```
##
##      0      1
## 255884    443
```

```
# Split features from the target value
y_train <- train$Class
X_train <- train[,-30]

# Drop column 'Time' and scale column 'Amount' individually for train and test set
train <- train[,-1] %>% mutate(Amount = scale(Amount))
test <- test[,-1] %>% mutate(Amount = scale(Amount))


### some data exploration (plot of time and amount for the 2 classes)
# correlation
corr_plot <- corrplot(cor(train[,-c(1)]), method = "circle", type = "upper")
```



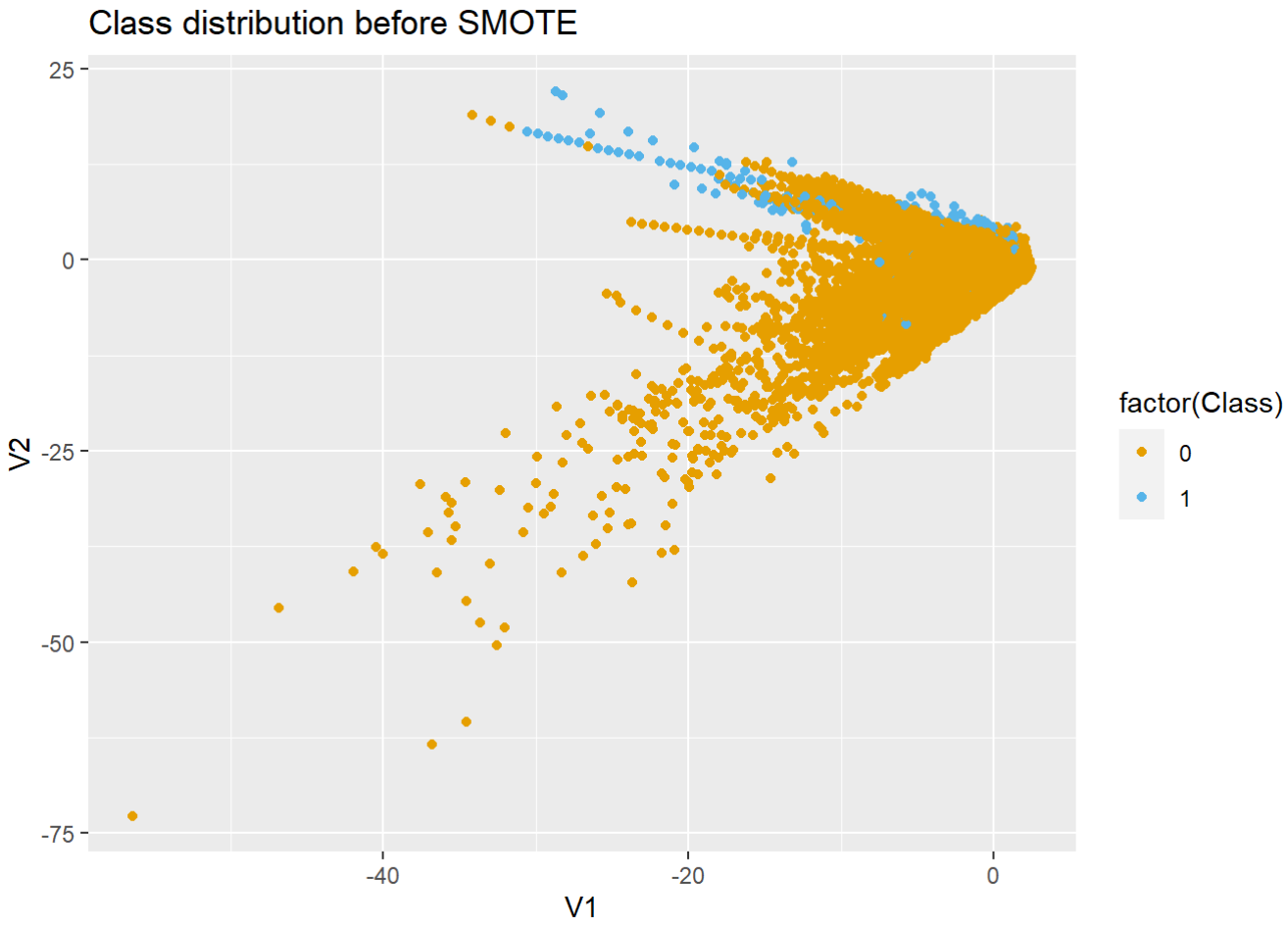

```
### Apply the original SMOTE Algorithmus to the train set
# Calculate number of synthetic samples for each minority instance
n_smote <- as.integer((255884 - 443)/443)

set.seed(1234)
smote_ <- smotefamily::SMOTE(X = X_train, target= y_train, K= 5, dup_size=n_smote)
train_smote <- (smote_$data)

# View the new balance in the dataset
table(train_smote$Class)
```

```
##
##      0      1
## 255884 255611
```

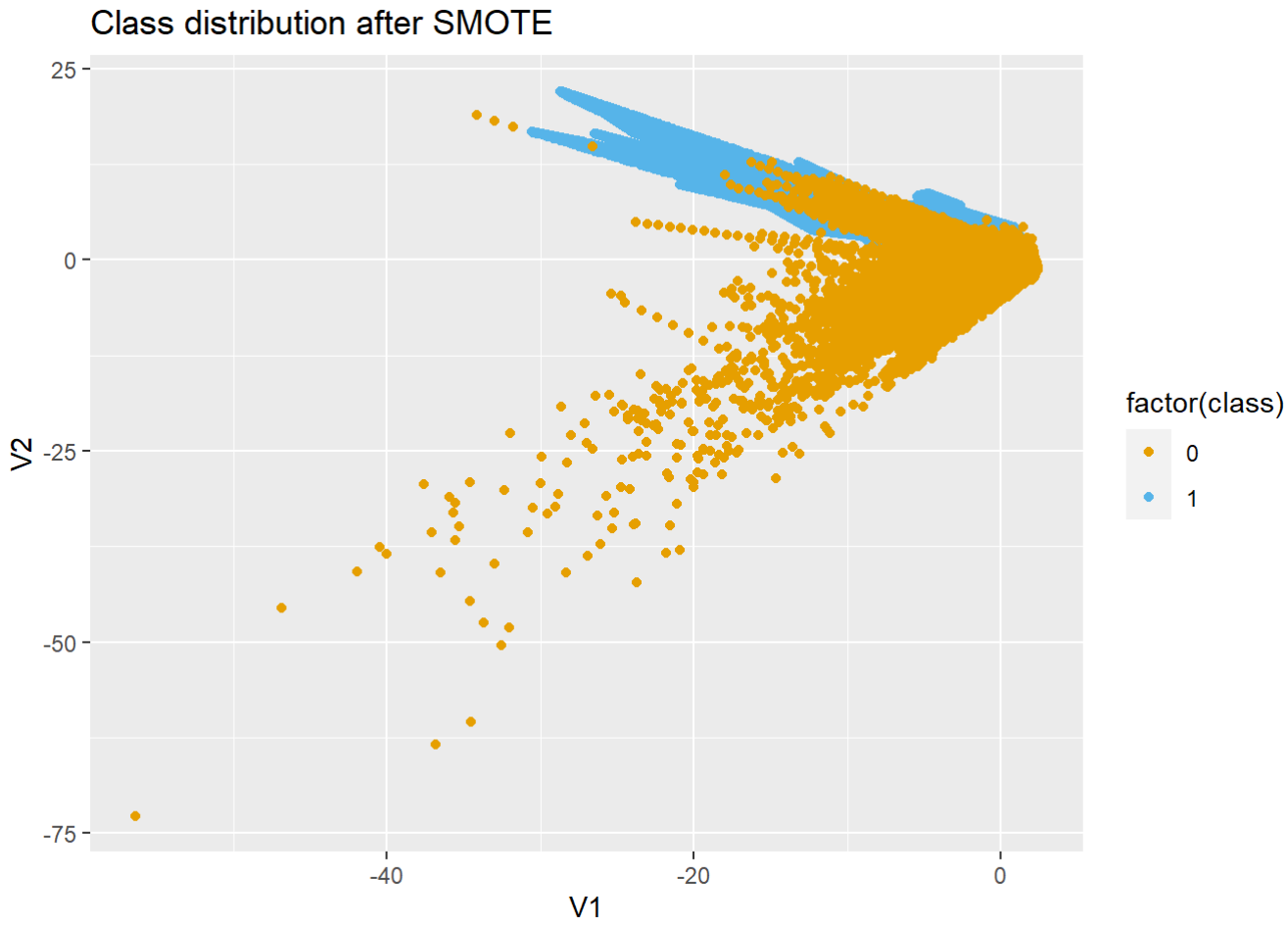
```
prop.table(table(train_smote$Class))
```

```
##
##         0         1
## 0.5002669 0.4997331
```

```
# data visualization
# Plot the first two features with the target value before SMOTE
ggplot(train, aes(x = V1, y = V2, color = factor(Class))) +geom_point() + ggtitle("Class dist
ribution before SMOTE") + scale_color_manual(values = c("#E69F00", "#56B4E9"))
```




```
# Plot the first two features with the target value before SMOTE
ggplot(train_smote, aes(x = V1, y = V2, color = factor(class))) + geom_point() + ggtitle("Cla
ss distribution after SMOTE")+ scale_color_manual(values = c("#E69F00", "#56B4E9"))
```



2. ASN-SMOTE Algorithmus

Allerdings können unsachgemäß erzeugte Minority Samples das Lernen des Classifiers auch beeinträchtigen und sich negativ auf ihn auswirken. Da im originalen SMOTE Algorithmus sowohl alle Minority Instanzen als auch alle k-nearest neighbors gleich behandelt werden und somit zur Generierung synthetischer Datenpunkte verwendet werden, kann dies zu einem Verschwimmen der Entscheidungsgrenze bzw. Überlappen der Feature Spaces führen. Durch die synthetischen Daten im Feature Space der Majority Class, wird es für ein Modell schwierig die beiden Klassen zu unterscheiden. Auf dieses Problem zielt der einfache und effektive Ansatz des ASN-SMOTE ab, welcher ebenfalls auf der k-Nearest-Neighbors und SMOTE-Technologie basiert. Dieser lässt sich in drei Algorithmen unterteilen, wobei der erste als Noise-Filtering bezeichnet wird. Hierbei wird für jede Minority Instanz die euklidische Distanz zu allen anderen Datenpunkten berechnet und lediglich der nächste Nachbar betrachtet. Sollte dieser zur Majority gehören, wird die gerade betrachtete Minority Instanz als Noise klassifiziert und im weiteren Verlauf nicht als Synthesizer für die Datengenerierung verwendet. Sollte der nächste Nachbar ebenfalls zur Minority gehören, ist die betrachtete Minority Instanz qualifiziert für die Generierung synthetischer Daten. Dies dient zur Filterung von Noise und Instanzen entlang der Entscheidungsgrenze. Im Anschluss folgt der Algorithmus zur adaptiven Nachbarauswahl, wobei für die k nächsten Nachbarn erneut die euklidische Distanz berechnet wird. Befindet sich darunter eine Majority Instanz, werden nur diejenigen als Nachbar für die Synthese genutzt, welche eine geringere Distanz als die nächste Majority Instanz aufweisen. Alle anderen Nachbarn werden als unqualifiziert markiert und nicht für die Datengenerierung mit der betrachteten Minority Instanz verwendet. Der dritte Algorithmus dient zur Erstellung der Samples, wobei anfangs die Anzahl der notwendigen neuen Instanzen für jedes Minority Sample bis zur optimalen Balance berechnet werden. Daraufhin folgt die Anwendung des SMOTE Algorithmus, welcher die synthetischen Daten mithilfe der linearen Interpolation erstellt. Dabei wird die euklidische Distanz zwischen der Synthesizer Minority Instanz und einem zufällig ausgewählten Nachbar der k nächsten Nachbarn (bei ASN: nur qualifizierten k nächsten Nachbarn) mit einer Zufallszahl zwischen Null und Eins multipliziert und zur Synthesizer Instanz addiert. Anschließend wird zu jeder erstellten Instanz die Target Variable (1) hinzugefügt und die synthetischen Daten an den Trainingsdatensatz angehängt. Die Vorteile des neuen Ansatzes sind

dabei die Effektivitätssteigerung durch das Filtern von Noise sowie die Feature Spaces daran zu hindern sich zu überlappen. Die Wirksamkeit dieses modernen ASN-SMOTE Algorithmus wurde mit 24 unausgewogenen Datensätzen im Originalpaper getestet und zeigte durchweg positive Ergebnisse im Vergleich mit anderen namhaften SMOTE Adaptionen. Die Imbalance der 24 Datensätze lag dabei zwischen 1,82% und 41,4%, weshalb die folgenden Fragen aufkommen: Funktioniert der ASN-SMOTE auch beim Creditdata Datensatz, welcher eine deutlich höhere Imbalance von 0,17% aufweist? Oder ist möglicherweise ein vorausgezogenes Undersampling notwendig? Bei der Anwendung des Algorithmus auf den gegebenen Datensatz, zeigt sich, dass 82 der lediglich 442 Minority Samples im Trainingsdatensatz als unqualifiziert klassifiziert werden, wodurch dem Classifier das Lernen noch mehr erschwert wird. Bei der Analyse von höheren Werten für den Hyperparameter k wird deutlich, dass nur die wenigsten Minority Instanzen 30 nächste Nachbarn aus der eigenen Klasse oder mehr besitzen und keine mehr als 80. Daher wird beim Tuning ein höheres Augenmerk auf niedrige Wert für k gelegt und dieser Bereich feiner unterteilt als hohe Werte für k. Aufgrund von Unstimmigkeiten im ASN-Paper wurde „n“ die Anzahl der zu generierenden Samples pro qualifizierter Minority Instanz sowohl als Inputparameter festgelegt als auch in der Funktion selbst „n_opt“ berechnet. Durch Auskommentieren der Codezeile „n <- n_opt“ kann n als Eingabewert verwendet werden und andernfalls wird jenes n gewählt, welches zur optimalen Balance im Datensatz führt. Beim Plot der Features V1 und V2 wird fällt anhand der zwei gekennzeichneten Punkte der Unterschied zum SMOTE Ansatz deutlich auf, da die vom ersten Algorithmus als Noise klassifizierte blaue Minority Instanz nicht für die Generierung synthetischer Daten verwendet wird. Zudem wählt der Algorithmus zur Nachbarauswahl den zweiten gekennzeichneten Punkt der Majority Class nicht als qualifizierten Nachbar aus. Das Verhalten des ASN ist bei Zweiterem aber möglicherweise ungünstig, da es sich hierbei um einen Ausreißer der Majority handeln könnte, welcher im Feature Space der Minority liegt.

```r
# ASN-SMOTE function
asn_smote <- function(train, n, k) {

  # Split the train set into features (T in the Pseudo Code) and target value
  train_feat <- train[,1:29]
  train_target <- train$Class

  # Create a matrix with the features and split the train set into majority and minority
  train_feat_matrix <- as.matrix(train_feat)
  train_Majority <- train[train_target == 0,]
  train_Minority <- train[train_target == 1,]

  # Select only the features of the minority train set (P in the Pseudo code)
  train_Minority_feat <- train_Minority[,1:29]

  # Calculate the distance of each minority instance to all samples of the train set
  dis_matrix <- proxy::dist(train_Minority_feat, train_feat)

  # Create a list with indices of the k-nearest minority neighbors of all minority
  # instances (majority neighbors marked as NaN)
  index_knn <- list()

  for (i in 1:nrow(train_Minority_feat)) {
    index_knn[[rownames(dis_matrix)[i]]] <- order(dis_matrix[i,])[2:(k+1)]
    for (j in 1:k) {
      if (train_target[index_knn[[i]][j]] == 0 ) {
        index_knn[[i]][j] <- NaN
      }
    }
  }

  print("Distance matrix calculated and nearest neighbors defined.")
  print("-------------------------------------------------------------------------------")



  # Algorithm 1: Filter Noise
  # Drop minority instances with a majority (NaN) as nearest neighbor
  Mu <- vector()

  for (i in length(index_knn):1) {
    if (is.nan(index_knn[[i]][1])) {
      Mu[i] <- names(index_knn[i])
      index_knn <- index_knn[-i]
    }
  }

  print(paste0("Number of qulaified minority instances: ", length(index_knn),
               " of ", nrow(train_Minority)))
  print("Algorithm 1 successfully completed.")
  print("-------------------------------------------------------------------------------")


  # Algorithm 2: Adaptive neighbor instances selection
  # Keep only the neighbors that are closer than the nearest majority (NaN) instance
```

```
for (i in 1:length(index_knn)) {
  for (j in 1:k) {
    if (is.nan(index_knn[[i]][j])) {
      index_knn[[i]] <- index_knn[[i]][1:(j-1)]
      break
    }
  }
}

print(paste0("Mean qualified nearest neighbors: ",
             round(sum(lengths(index_knn))/length(index_knn), 2), " of ", k))
print(paste0("Maximum qualified nearest neighbors: ",
             max(sapply(index_knn, length)), " of ", k))
hist_qn <<- hist(sapply(index_knn, length), plot=FALSE)
print("Algorithm 2 successfully completed.")
print("--------------------------------------------------------------------------------")


# Algorithm 3: Procedure of ASN-SMOTE (Create new synthetic minority samples)
# Add to the feature values of each qualified minority instance the difference of the
# minority sample and one random selected neighbor of their qualified neighbors
# multiplied with a random number between 0 and 1 for n times.

# Calculate the amount of synthetic minority samples for each qualified minority sample
# that the train set is balanced
n_opt <- as.integer((nrow(train_Majority) - nrow(train_Minority))/length(index_knn))
print(paste0("optimal n = ", n_opt))

#if you assign 'n_opt' to 'n', then 'n' is not a inputparameter anymore
# always the perfect balance will be generated in the dataset
#n <- n_opt

synthetic <- list()
for(i in names(index_knn)) {
  for(j in seq_len(n)) {
    random_n <- sample(seq_along(index_knn[[i]]), 1)
    dif <- train_feat_matrix[index_knn[[i]][random_n],] - train_feat_matrix[i,]
    randomNum <- runif(1)
    synthetic_instance <- train_feat_matrix[i,] + randomNum * dif
    synthetic[[length(synthetic) + 1]] <- synthetic_instance
  }
}

print(paste0("Number of generated synthetic minority samples: ", length(synthetic)))
print("Algorithm 3 successfully completed.")
print("--------------------------------------------------------------------------------")



# Assign "Class" label = 1 to the synthtic points
synthetic_df <- do.call(rbind, synthetic)
synthetic_df <- as.data.frame(synthetic_df)
synthetic_labels <- rep(1, length(synthetic))
synthetic_df$Class <- synthetic_labels

# Combine original train set with synthetic set
```

```
  asn_train <<- rbind(train, synthetic_df)
  print("The ASN-SMOTE was applied to the data.")
  print("The new training dataset is saved as 'asn_train'.")
  print("-----------------------------------------------------------------------------")

  # View the new balance of the dataset
  print("New balance of 'creditcard' dataset:")
  return (table(asn_train$Class))
}
```

```
# Execute ASN-SMOTE function (optimal balanced with n=707)
asn_smote(train, n=10, k=5)

# Execute ASN-SMOTE function with high 'k' (very high k doesn't make sense!)
asn_smote(train, n=10, k=100)
plot(hist_qn, xlab = "Neighbors", ylab = "Frequency", xlim = c(0, 100), ylim = c(0, 200),
     col = "lightblue", main = "Histogram of qualified nearest neighbors")


# data visualization after ASN-SMOTE
#ggplot(asn_train, aes(x = V1, y = V2, color = factor(class))) + geom_point() + ggtitle("Clas
s distribution after ASN-SMOTE")+ scale_color_manual(values = c("#E69F00", "#56B4E9"))
```

3. Verwendete Classifier und Performance Measure

```
#Code
```

4. Cross-Validation

```
#Code
```

5. Undersampling

```
#Code
```

6. Hyperparameteroptimierung

```
#Code
```

7. Performance des ASN-SMOTE

```
#Code
```

8. Undersampling vor ASN-SMOTE

```
#Code
```

Ausblick

Aufgabengebiete Dennis Götz: Durcharbeiten SMOTE-Paper, Mitarbeit bei der Erstellung der Präsentationsfolien, Mitarbeit bei der Recherche nach modernen SMOTE Adaptionen, Durcharbeiten des ASN-SMOTE Papers und der dazugehörigen Python Implementierung, Mitarbeit bei der R Implementierung des ASN-SMOTE und des Modells der logistischen Regression, Mitarbeit bei der Erstellung des R Markdown Dokuments.