Машинное обучение

Лекция 13

Поиск аномалий

План

- Несбалансированные данные
- Оценка качества и построение качественных моделей на несбалансированных выборках
- Методы балансировки данных
- Методы поиска аномалий

Несбалансированные данные

Задача классификации

- Посмотрим на баланс классов:

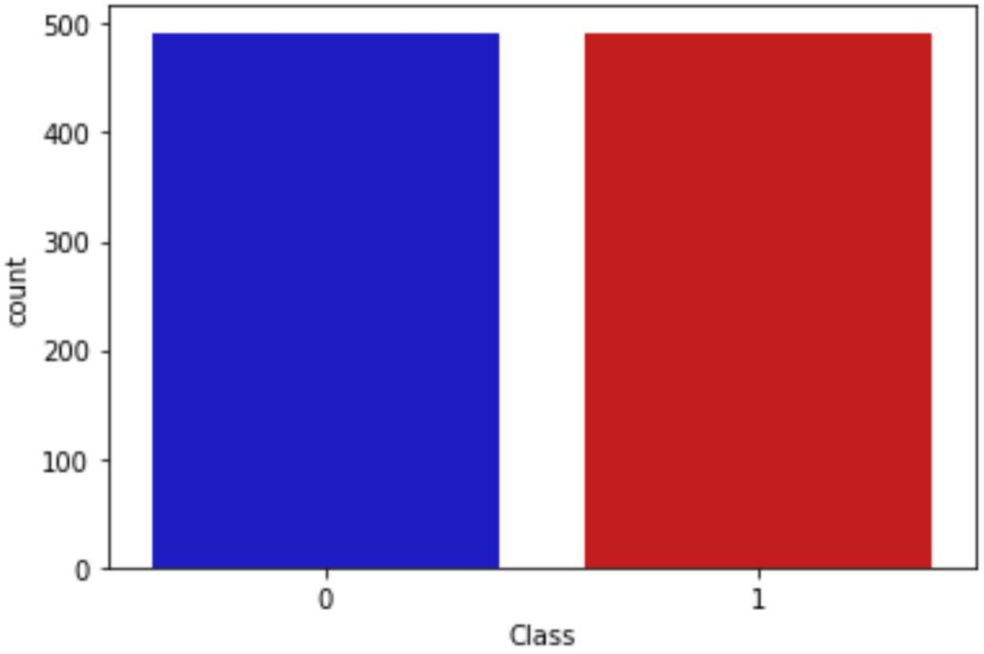
Задача классификации

- Посмотрим на баланс классов:

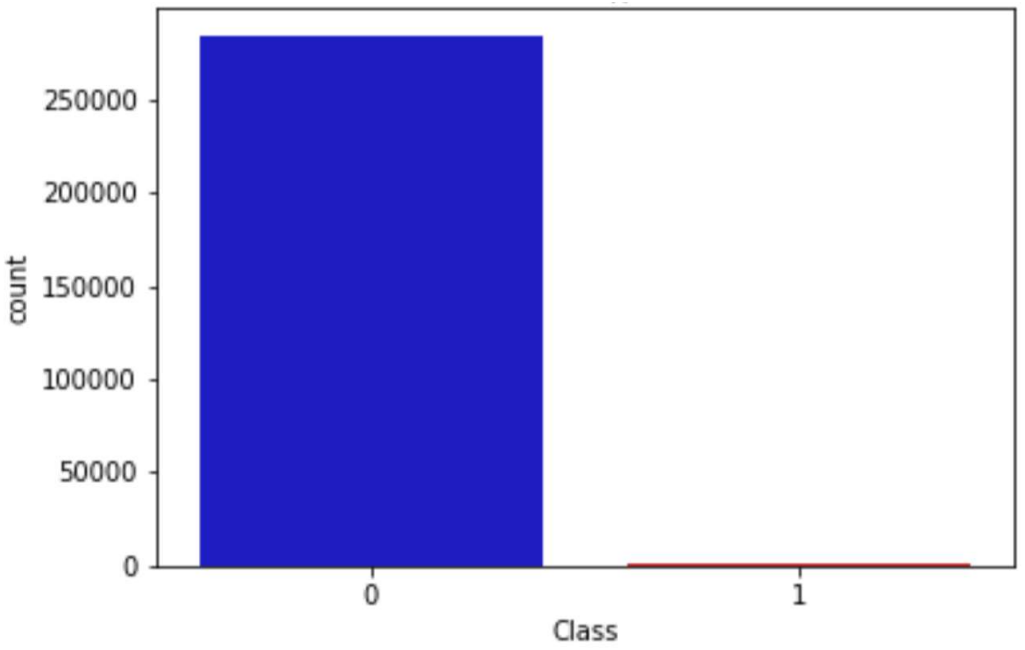
Задача классификации

- Посмотрим на баланс классов:

Ожидание



Реальность



Примеры

- Детектирование «неискренних» вопросов
- Обнаружение мошеннических транзакций
- Классификация рентгеновских снимков
- Предсказание сейсмической активности
- Выявление аномалий на производстве (predictive maintenance)
- Фильтрация спама
- Предсказание оттока клиентов
- Предсказание CTR (Click-Through Rate)

Проблемы

- Определение дефектных деталь на производстве
- Вы построили модель, которая корректно определяет, дефектная ли деталь, в 99.9% случаев
- Хорошая ли это модель?

Проблемы

- Определение дефектных деталь на производстве
- Вы построили модель, которая корректно определяет, дефектная ли деталь, в 99.9% случаев
- Хорошая ли это модель?
- Ответ: необязательно.

Проблемы

- Хороший случай:
  - 30% деталей дефектны
  - 70% деталей не дефектны

- Модель, которая дает 99.9% правильных ответов – вполне осмысленная

Проблемы

- Плохой случай:
  - 0.1% деталей дефектны
  - 99.9% деталей не дефектны

- Модель, которая дает 99.9% правильных ответов – не особо осмысленная

- Она просто выдает константные предсказания!

Определение несбалансированности

- Данные **несбалансированы**, если число наблюдений одного класса сильно больше, чем число наблюдений других классов

Определение несбалансированности

- Данные **несбалансированы**, если число наблюдений одного класса сильно больше, чем число наблюдений других классов

- Что значит *сильно больше?*

Определение несбалансированности

- Данные **несбалансированы**, если число наблюдений одного класса сильно больше, чем число наблюдений других классов

- Что значит *сильно больше?*

- Явного порога нет, это зависит от задачи

Определение несбалансированности

- Данные **несбалансированы**, если число наблюдений одного класса сильно больше, чем число наблюдений других классов
- Что значит *сильно больше?*
- Явного порога нет, это зависит от задачи
- Соотношение классов 10:1 можно считать несбалансированностью

Резюме

- В задаче классификации данные могут быть несбалансированы, то есть наблюдений одного класса существенно больше, чем других
- Если модель дает много правильных ответов, это не значит, что она хорошая
- Проверьте баланс классов

Метрики качества

Accuracy

$$\text{accuracy} = \frac{\#(\text{correct predictions})}{\#(\text{observations})}$$

- (x_i, y_i) – наблюдения и метки классов
- ℓ – общее число наблюдений
- a – классификатор

$$\text{accuracy} = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) = y_i]$$

Accuracy: проблемы

- Число дефектных деталей (класс 1): 10
- Число нормальных деталей (класс -1): 10001

$$\forall x\colon\ a(x) = -1$$

- Хорошая ли это модель?

Accuracy: проблемы

- Число дефектных деталей (класс 1): 10
- Число нормальных деталей (класс -1): 10001

$$\forall x\colon\ a(x) = -1$$

- Хорошая ли это модель?

- Ответ: в терминах accuracy – да, в терминах бизнеса – нет

Accuracy: проблемы

- Что хуже?
  - Ошибиться, назвав нормальную деталь дефектной
  - Ошибиться, назвав дефектную деталь нормальной

- Одна ошибка в нормальных деталях: $\approx -0.01\%$ accuracy
- Одна ошибка в дефектных деталях: $\approx -0.01\%$ accuracy

- Возможно, ошибка в дефектной детали хуже

Accuracy: проблемы

- Алгоритму удобно предсказывать мажоритарный класс для всех наблюдений

- Мы должны изменить процедуру обучения и/или метрику качества

Точность и полнота

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	True Positive (TP)	False Positive (FP)
a(x) = -1	False Negative (FN)	True Negative (TN)

$$\text{precision} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}}$$

$$\text{recall} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}}$$

Точность и полнота

- **Точность (precision)** показывает, насколько сильно мы можем доверять нашему алгоритму, если он предсказывает положительный класс

- **Полнота (recall)** показывает долю наблюдений положительного класса, верно предсказываемых алгоритмом

Точность и полнота

- Число дефектных деталей (класс 1): 10
- Число нормальных деталей (класс -1): 10001

- Модель корректно распознает 4 дефектных детали из 10
- Модель корректно распознает 10000 нормальных деталей из 10001

- Хорошая ли это модель?

Точность и полнота

- Число дефектных деталей (класс 1): 10
- Число нормальных деталей (класс -1): 10001

- Модель корректно распознает 4 дефектных детали из 10
- Модель корректно распознает 10000 нормальных деталей из 10001

- Хорошая ли это модель?

- Ответ: зависит от того, что вы хотите.

Точность и полнота

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	4	1
a(x) = -1	6	10000

$$\text{precision} = \frac{4}{4+1} = 0.8$$

$$\text{recall} = \frac{4}{4+6} = 0.4$$

$$\text{accuracy} = \frac{\text{TP} + \text{TN}}{\text{TP} + \text{FP} + \text{TN} + \text{FN}} = \frac{4 + 10000}{10011} \approx 0.9993$$

Точность и полнота

- Случай 1. Низкая точность, высокая полнота
  - Часто отмечаем нормальные детали как дефектные
  - Зато редко пропускаем дефектные детали

- Случай 2. Высокая точность, низкая полнота
  - Редко отмечаем нормальные детали как дефектные
  - Зато часто пропускаем дефектные детали

F-мера

- **F-мера** является гармоническим средним точности и полноты

$$\mathrm{F-score} = 2\frac{\mathrm{precision} \times \mathrm{recall}}{\mathrm{precision} + \mathrm{recall}}$$

- $\boldsymbol{F_\beta}$**-мера** является взвешенной версией F-меры, где можно сделать больший акцент на точность либо полноту

$$\mathrm{F}_\beta - \mathrm{score} = (1 + \beta^2)\frac{\mathrm{precision} \times \mathrm{recall}}{\beta^2 \times \mathrm{precision} + \mathrm{recall}}$$

F-мера: проблемы

- Точность, полнота и F-мера не учитывают True Negatives (TN) – количество верных предсказаний для наблюдений отрицательного класса

- Однако, если вас не интересуют True Negatives, это вполне нормально

F-мера: проблемы

- Какой случай лучше?

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	4	1
a(x) = -1	6	10000

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	4	1
a(x) = -1	6	10

F-мера: проблемы

- Какой случай лучше?

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	4	1
a(x) = -1	6	10000

$$\text{precision} = 0.8$$

$$\text{recall} = 0.4$$

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	4	1
a(x) = -1	6	10

$$\text{precision} = 0.8$$

$$\text{recall} = 0.4$$

Balanced accuracy

- True Positive Rate (полнота):

$$\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FN}}$$

- True Negative Rate (специфичность):

$$\mathrm{TNR} = \frac{\mathrm{TN}}{\mathrm{TN} + \mathrm{FP}}$$

Balanced accuracy

- **Balanced accuracy** – это среднее TPR and TNR

$$\text{Balanced accuracy} = \frac{\text{TPR} + \text{TNR}}{2}$$

Balanced accuracy

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	4	1
a(x) = -1	6	10000

$$\text{TPR} = 0.4$$
$$\text{TNR} \approx 0.9999$$

$$\text{Balanced accuracy} \approx 0.7$$

	y = 1	y = -1
a(x) = 1	4	1
a(x) = -1	6	10

$$\text{TPR} = 0.4$$
$$\text{TNR} \approx 0.91$$

$$\text{Balanced accuracy} \approx 0.65$$

Метрики качества ранжирования

- Пусть классификатор $b(x)$ выдает вероятности принадлежности классам

- Подобрав порог t, можно построить следующий классификатор:

$$a(x) = \text{sign}(b(x) - t)$$

Метрики качества ранжирования

- Значения точности и полноты зависят от порога t

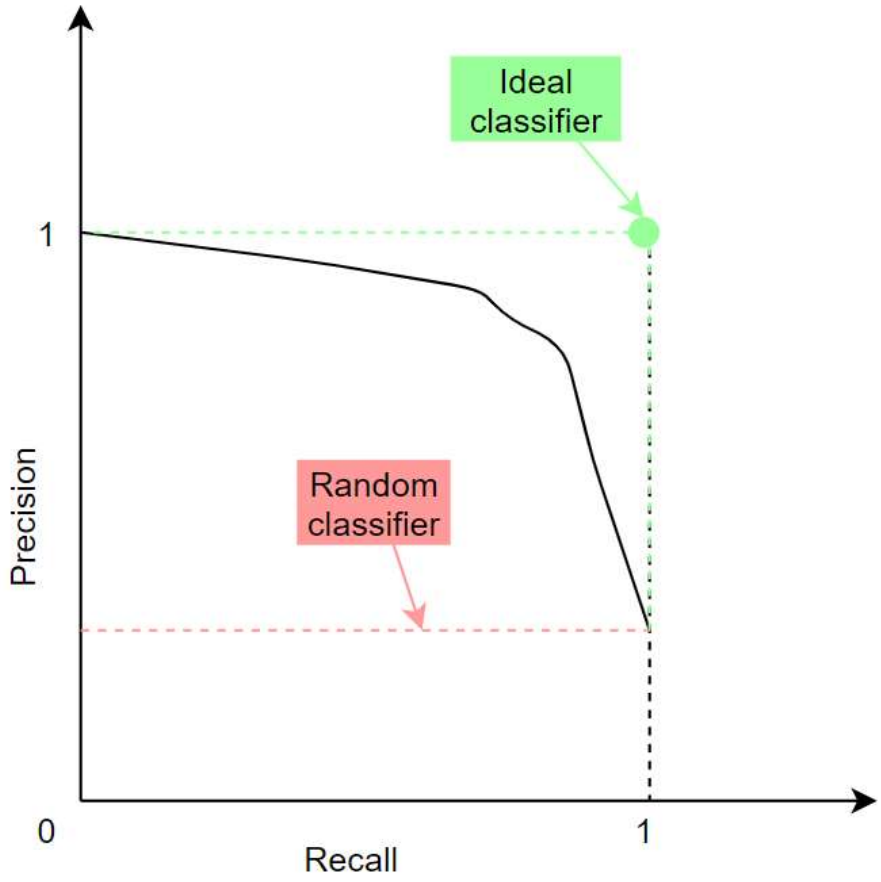
y	1	-1	1	-1	-1	1	1
$b(x)$	0.1	0.2	0.25	0.4	0.45	0.7	0.9

- $t = 0.3$:
  - $\text{precision} = 0.5$
  - $\text{recall} = 0.5$
- $t = 0.8$:
  - $\text{precision} = 1$
  - $\text{recall} = 0.25$

PR-кривая и AUC-PR

- При изменении t меняются значения точности и полноты

- AUC-PR – площадь под PR-кривой



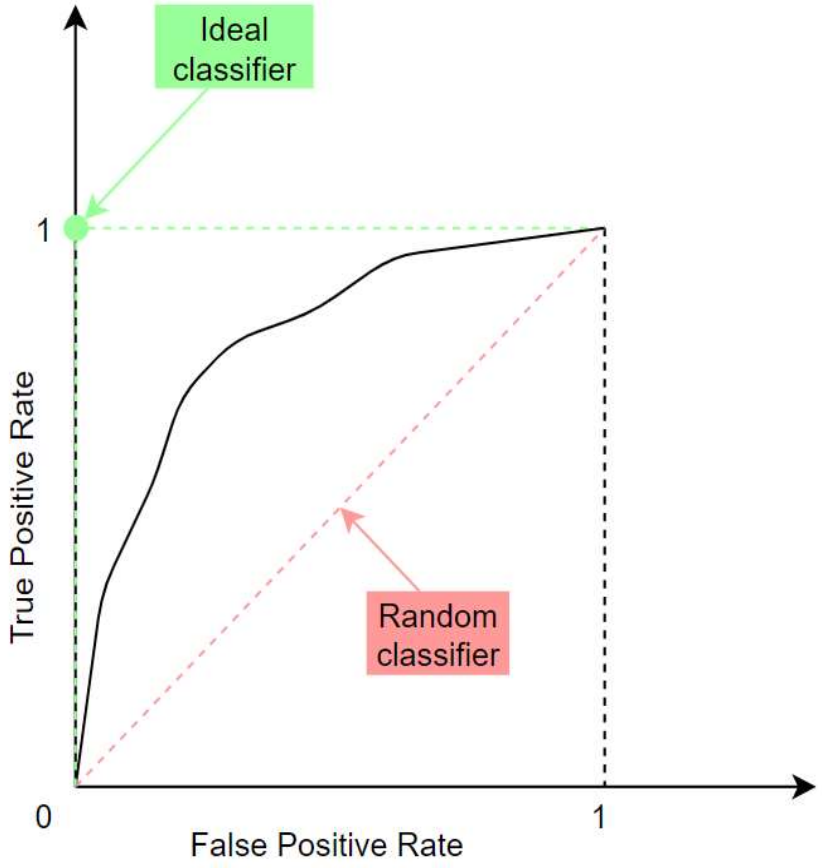
ROC-кривая и AUC-ROC

- При изменении t меняются значения TPR и FPR

$$\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\mathrm{TP} + \mathrm{FN}}$$

$$\mathrm{FPR} = \frac{\mathrm{FP}}{\mathrm{FP} + \mathrm{TN}}$$

- AUC-ROC – площадь под ROC-кривой



AUC-PR vs AUC-ROC

- AUC-PR и AUC-ROC зачастую ведут себя похоже
- В случае сильного дисбаланса, если хочется учитывать TN, возможно, стоит использовать AUC-ROC
- Если не хочется учитывать TN, то AUC-ROC может вводить в заблуждение
- AUC-PR может быть более интерпретируемой и подходящей метрикой, если задачу нужно решить в терминах точности/полноты

Резюме

- Есть много метрик для проверки качества модели на несбалансированных данных – какую именно использовать, зависит от постановки задачи
- Accuracy может вводить в заблуждение
- Точность, полнота и F-мера учитывают стоимость ошибки
- Balanced accuracy также учитывает True Negatives
- Метрики качества ранжирования: AUC-PR и AUC-ROC

Балансирование данных

Веса классов

$$L(y, z) = -[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

Веса классов

$$L(y, z) = -[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

- Функция потерь для логистической регрессии

Веса классов

$$L(y, z) = -[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

- Функция потерь для логистической регрессии

- Класс 1: 10 наблюдений, класс -1: 10000 наблюдений

Веса классов

$$L(y, z) = -[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

- Функция потерь для логистической регрессии

- Класс 1: 10 наблюдений, класс -1: 10000 наблюдений
- class_weight = {1: 1000, -1: 1} ($\#\text{negatives}/\#\text{positives}$)

Веса классов

$$L(y, z) = -[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

- Функция потерь для логистической регрессии

- Класс 1: 10 наблюдений, класс -1: 10000 наблюдений
- class_weight = {1: 1000, -1: 1} ($\#\text{negatives}/\#\text{positives}$)

$$L(y, z) = -\mathbf{1000}[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

Веса классов

$$L(y, z) = -[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

- Штраф за ошибку в положительном наблюдении: $-\log(z)$
- Штраф за ошибку в отрицательном наблюдении: $-\log(1 - z)$

Веса классов

$$L(y, z) = -[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

- Штраф за ошибку в положительном наблюдении: $-\log(z)$
- Штраф за ошибку в отрицательном наблюдении: $-\log(1 - z)$

$$L(y, z) = -\mathbf{1000}[y = 1] \times \log(z) - [y = -1] \times \log(1 - z)$$

- Штраф за ошибку в положительном наблюдении: $-\mathbf{1000} \times \log(z)$
- Штраф за ошибку в отрицательном наблюдении: $-\log(1 - z)$

Веса классов

- Логистическая регрессия, SVM, случайный лес: class_weight
- XGBoost, LightGBM, CatBoost: scale_pos_weight

Undersampling

- **Undersampling** – это техника балансирования данных, при которой уменьшается число наблюдений мажоритарного класса

Random undersampling

- Простейший метод: **random undersampling** (удаляем случайные объекты мажоритарного класса)

Random undersampling

- Простейший метод: **random undersampling** (удаляем случайные объекты мажоритарного класса)
- Скорее всего, повлечет за собой потерю качества (можем удалить важные объекты)

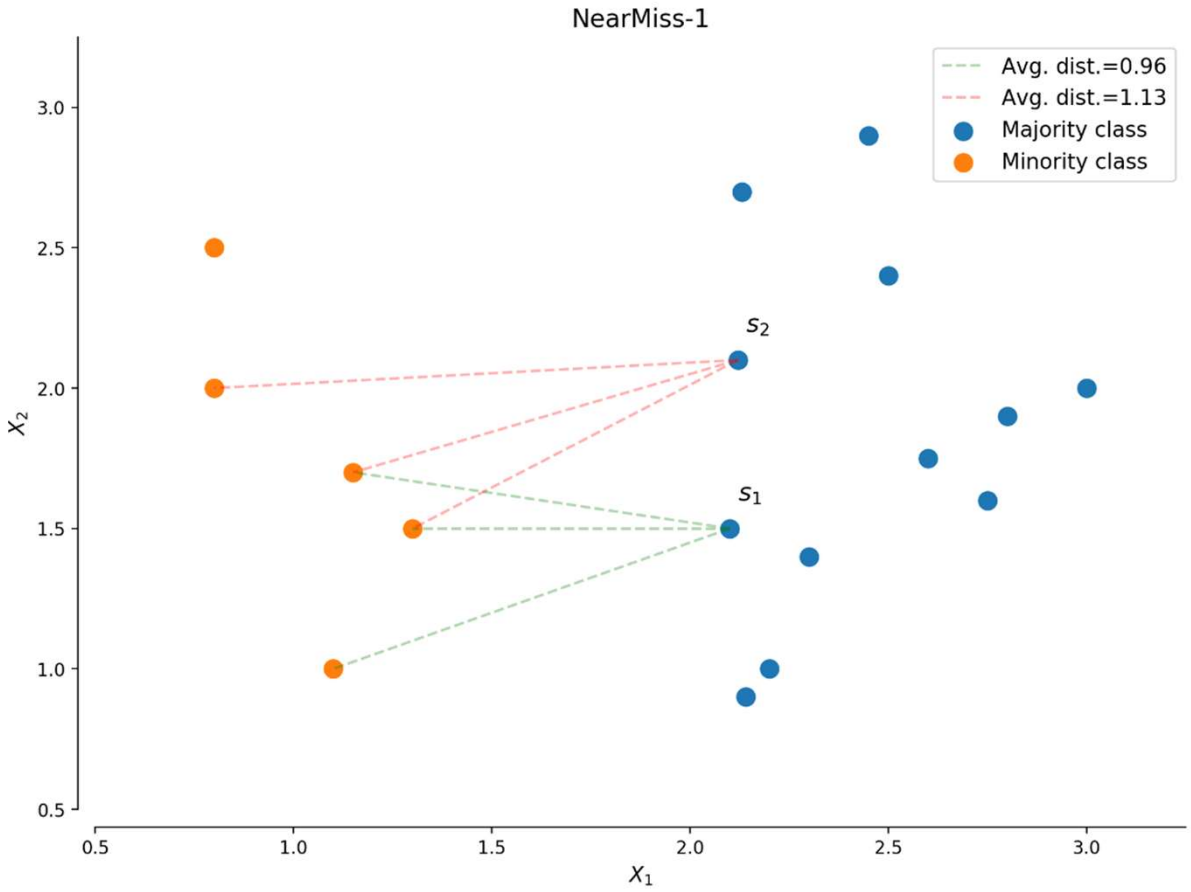
NearMiss

- Хотим контролировать процесс удаления объектов мажоритарного класса и сделать его менее случайным
- Будем использовать расстояния между объектами положительного и отрицательного классов
- Используем алгоритм kNN (k Nearest Neighbors) для определения близких и далеких объектов

NearMiss-1

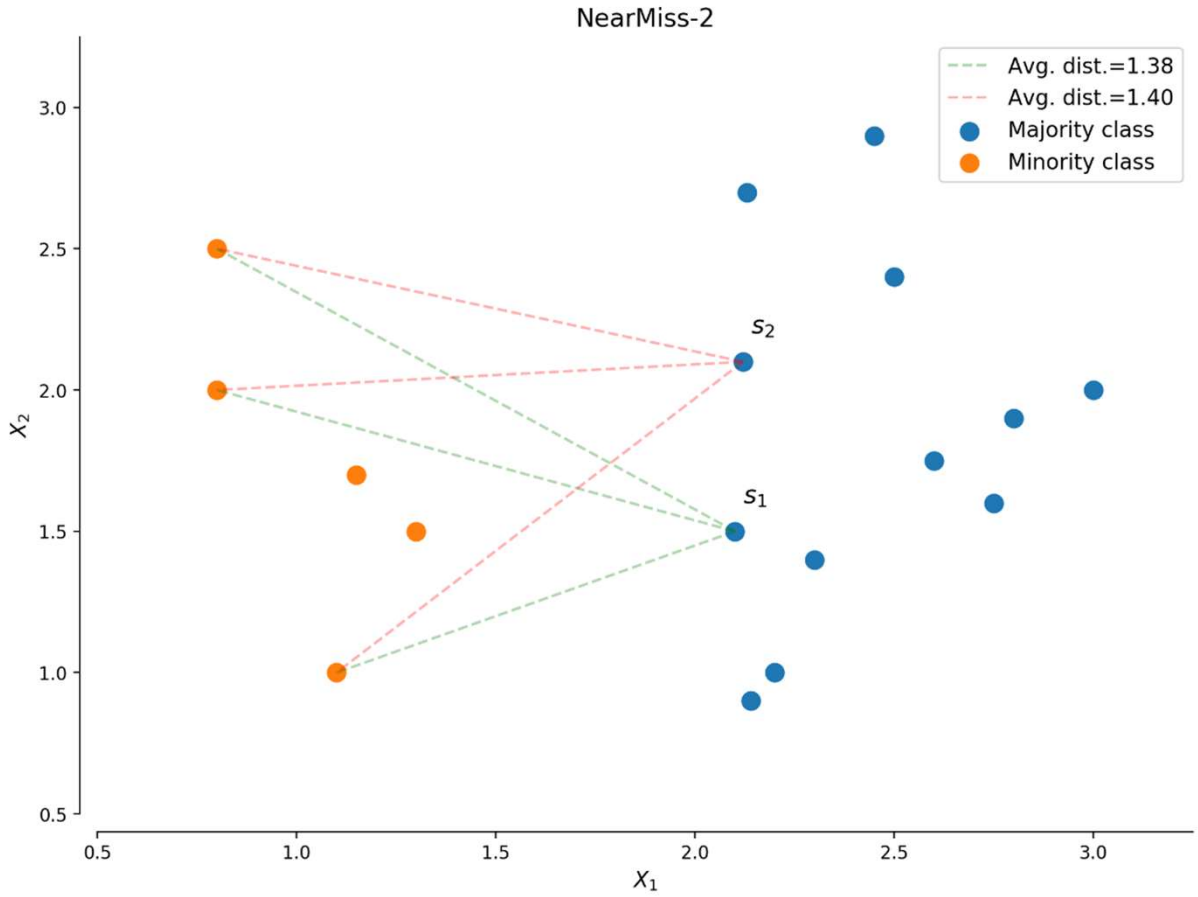
- Сохраняем M объектов мажоритарного класса, имеющих наименьшее среднее расстояние до k **самых близких** объектов миноритарного класса

- Пример: M = #(minority class observations), $k = 3$



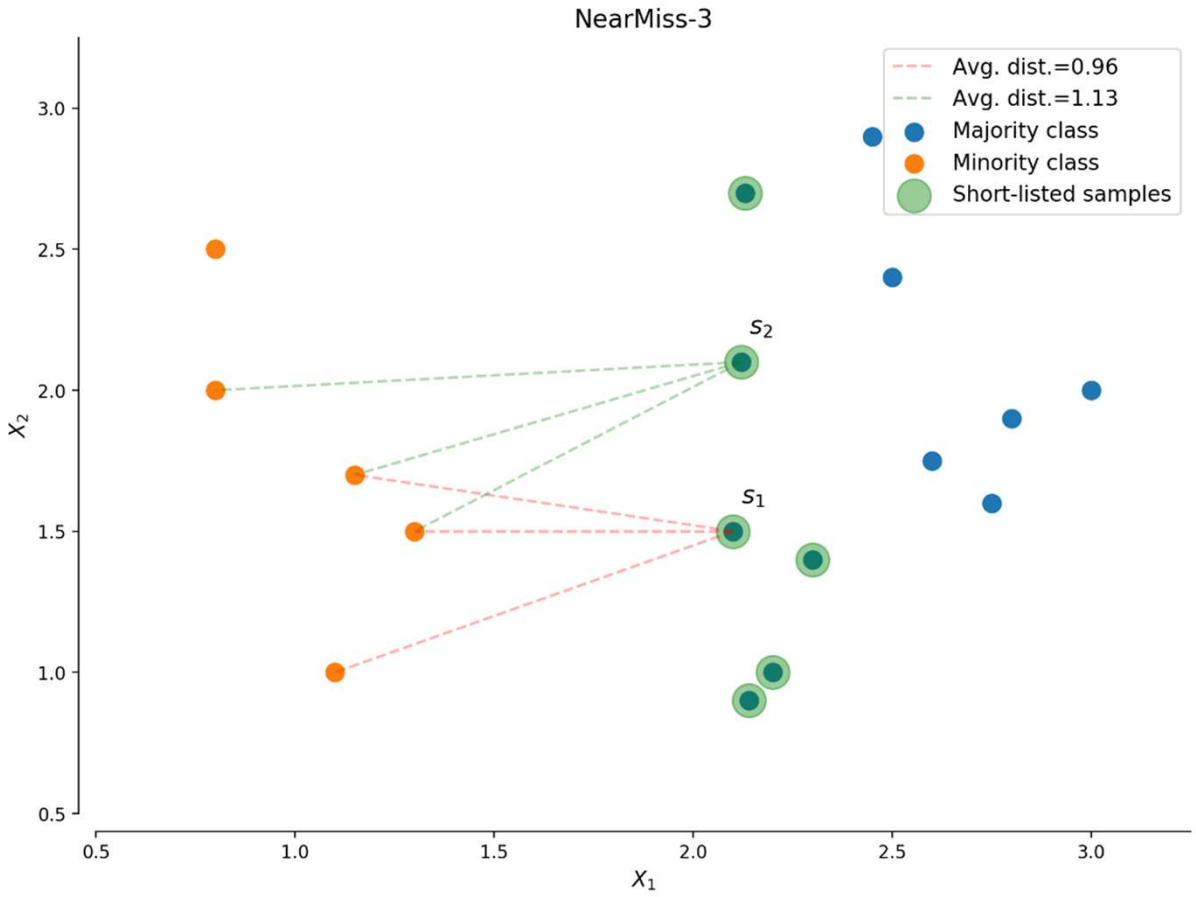
NearMiss-2

- Сохраняем M объектов мажоритарного класса, имеющих наименьшее среднее расстояние до k **самых дальних** объектов миноритарного класса



NearMiss-3

- Сделаем «шорт-лист» объектов мажоритарного класса, наиболее близких к объектам миноритарного класса
- Сохраним M объектов мажоритарного класса **из «шорт-листа»** с **наибольшим** средним расстоянием до k **ближайших** объектов миноритарного класса



Oversampling

- **Oversampling** – это техника балансирования данных, при которой увеличивается число наблюдений миноритарного класса

Random oversampling

- Простейший метод: **random oversampling** (случайно клонируем объекты миноритарного класа)

SMOTE

- **SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique**

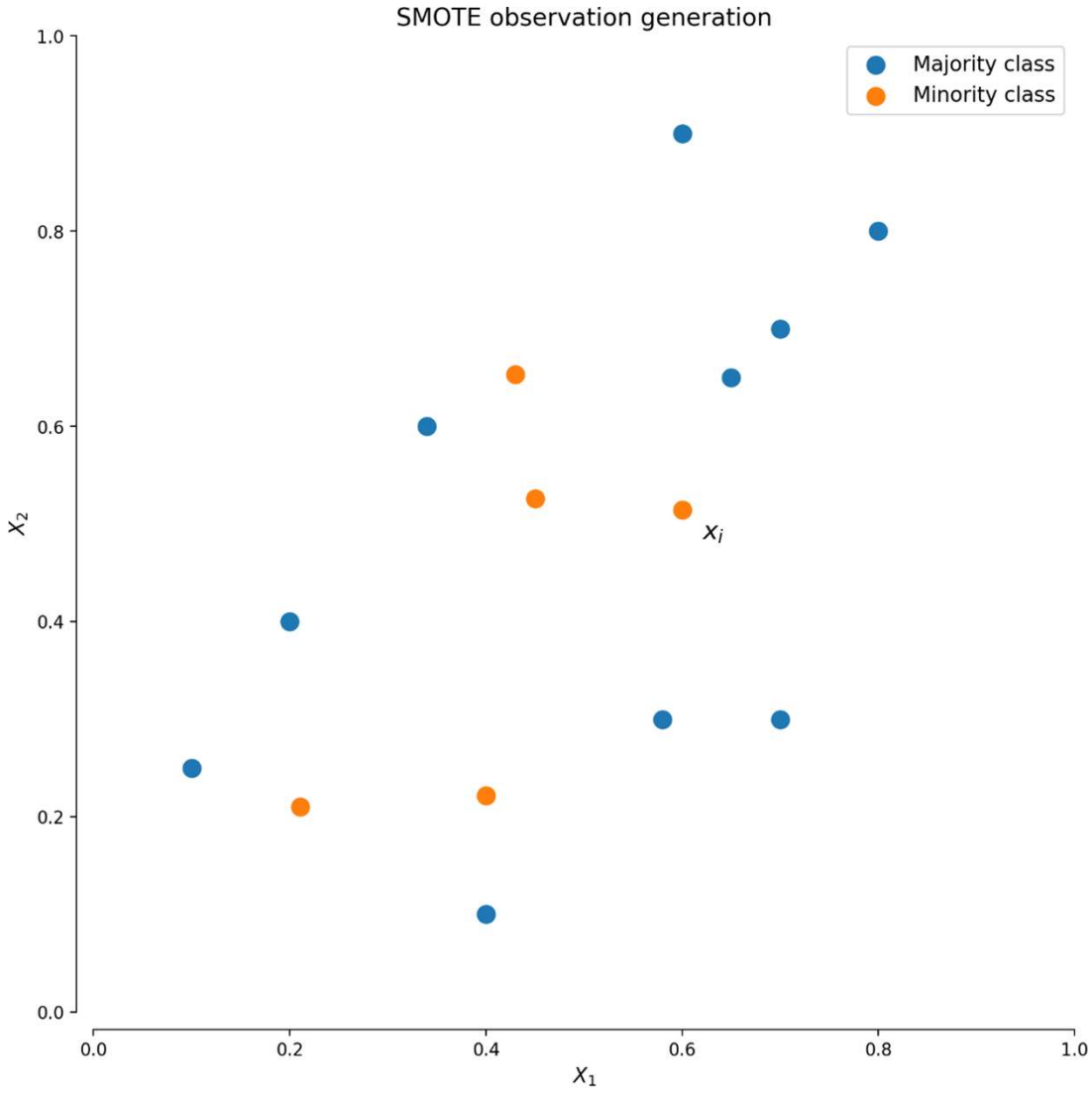
- **Шаг 1.** Для каждого объекта миноритарного класса x_i найти k его ближайших соседей
- **Шаг 2.** Для каждого x_i выбрать среди его соседей M случайных: $x_i^{(1)}, \ldots, x_i^{(M)}$
- **Шаг 3.** Для каждой пары $(x_i, x_i^{(j)})$ сгенерировать новый объект:

$$x_i^{(j)\prime} = x_i + \lambda\left(x_i^{(j)} - x_i\right),$$

где $\lambda \in [0, 1]$ – случайное число.

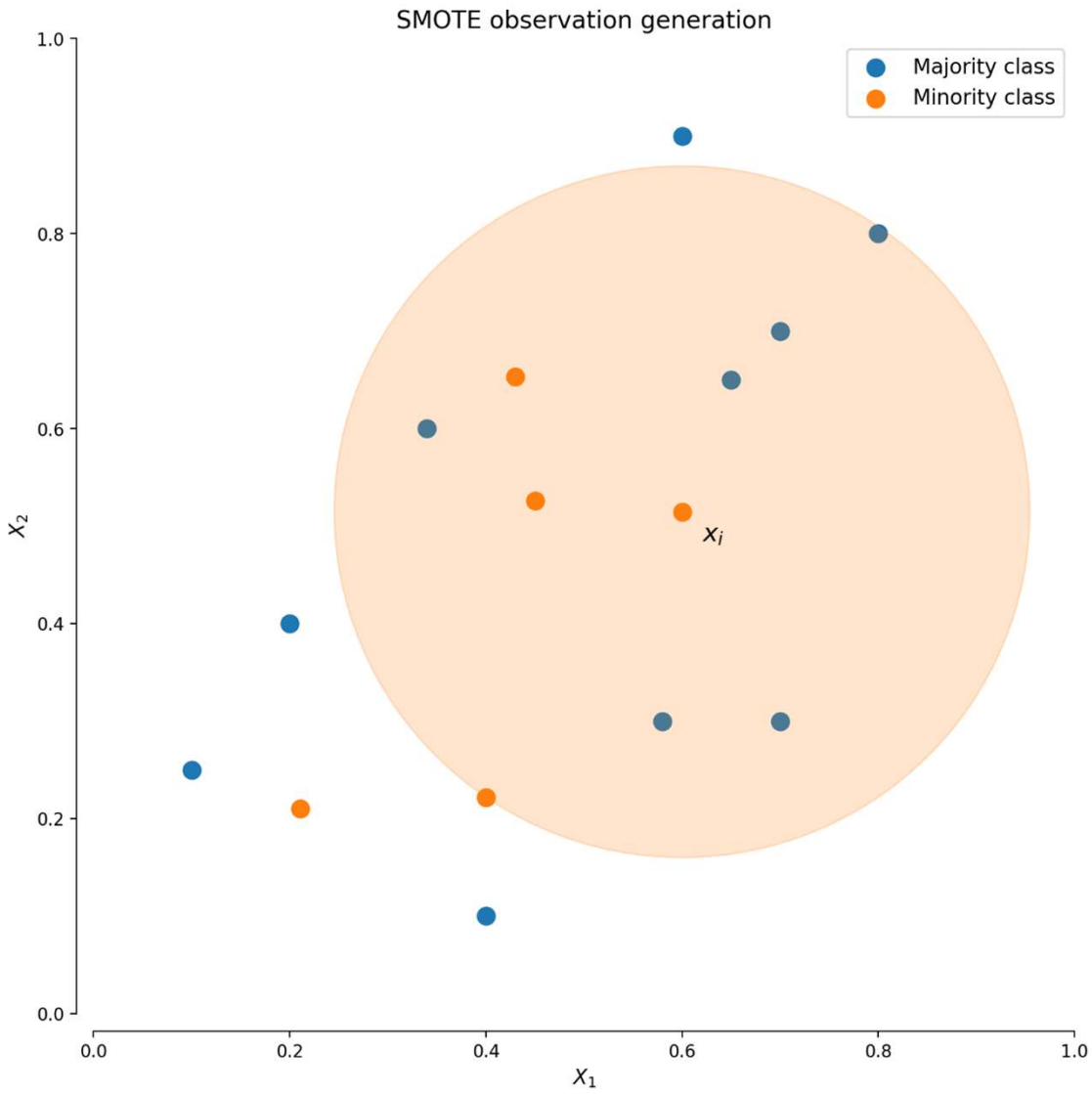
SMOTE

- SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling TEchnique



SMOTE

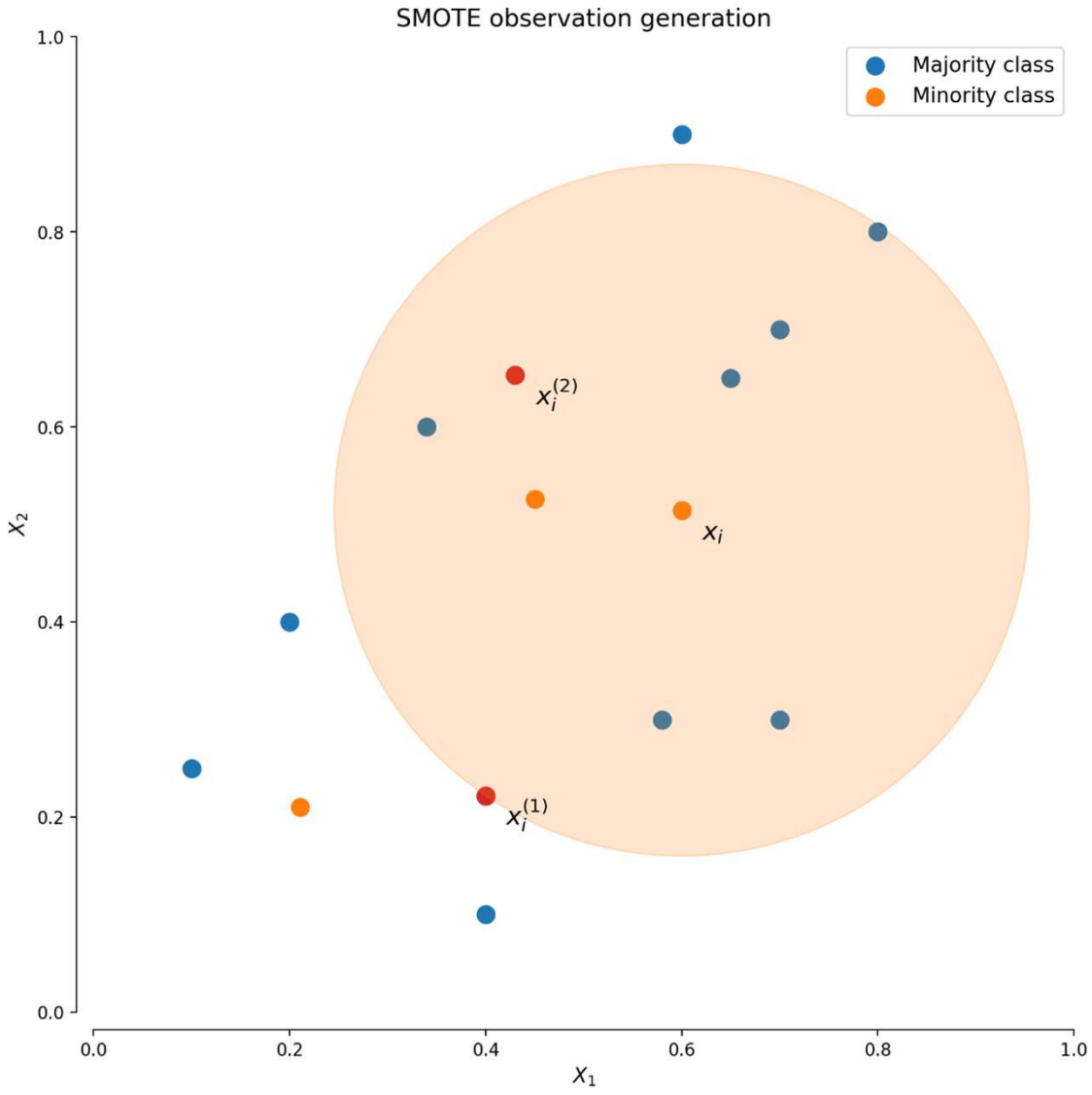
- SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique
- **Шаг 1.** Ищем соседей



SMOTE

- SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

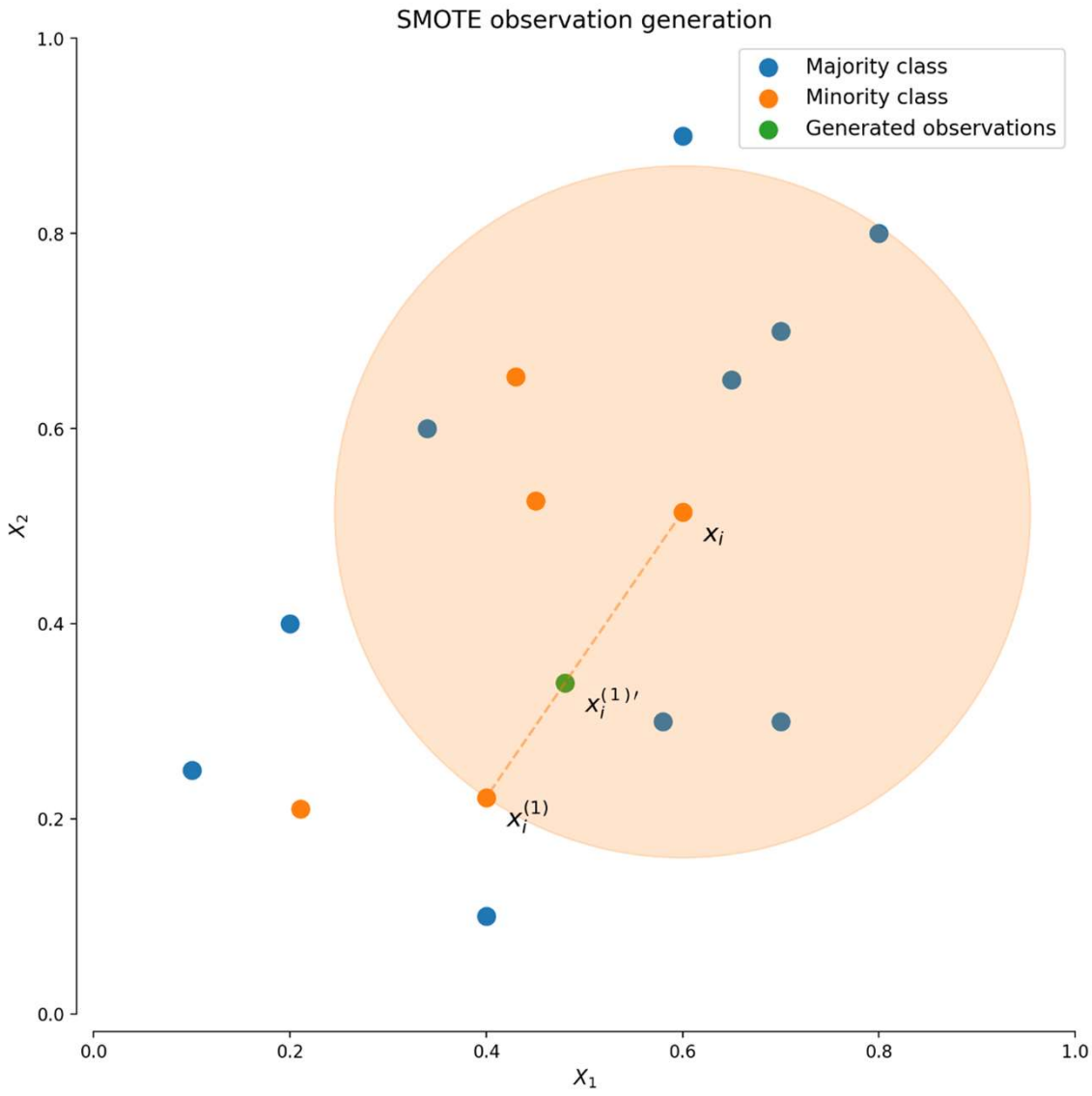
- **Шаг 1.** Ищем соседей
- **Шаг 2.** Выбираем случайных соседей



SMOTE

- SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

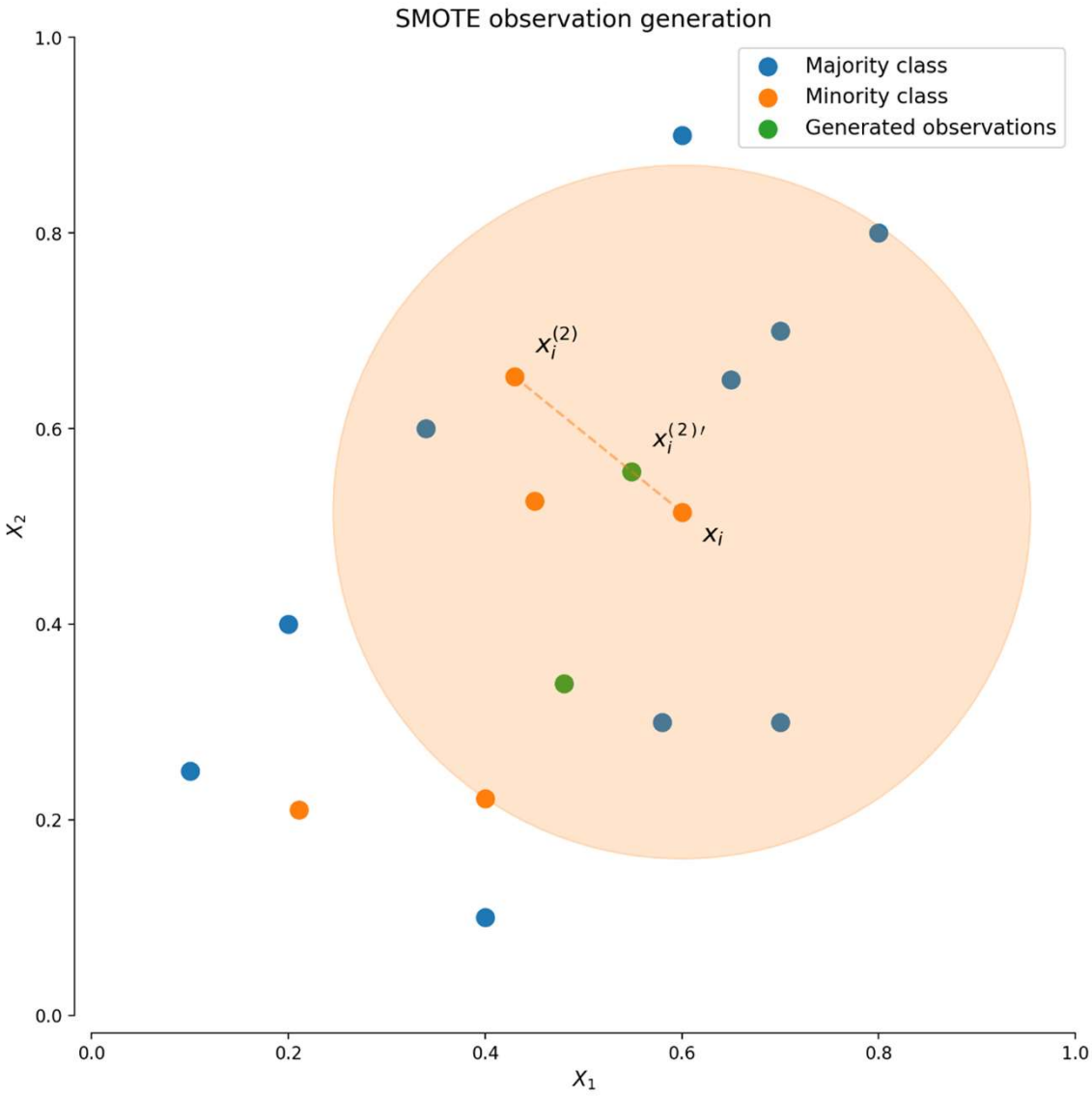
- **Шаг 1.** Ищем соседей
- **Шаг 2.** Выбираем случайных соседей
- **Шаг 3.** Генерируем объекты



SMOTE

- SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

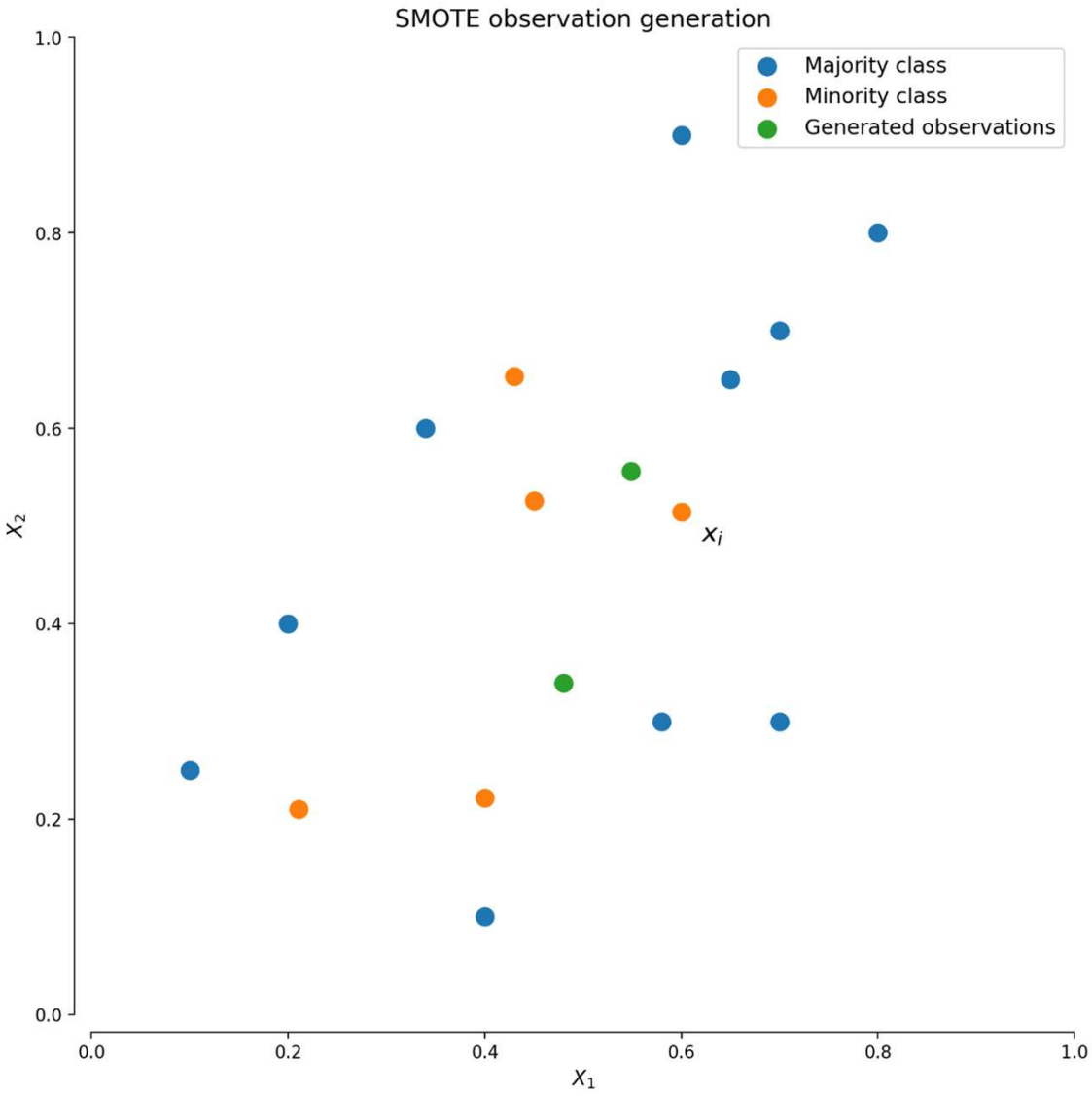
- **Шаг 1.** Ищем соседей
- **Шаг 2.** Выбираем случайных соседей
- **Шаг 3.** Генерируем объекты



SMOTE

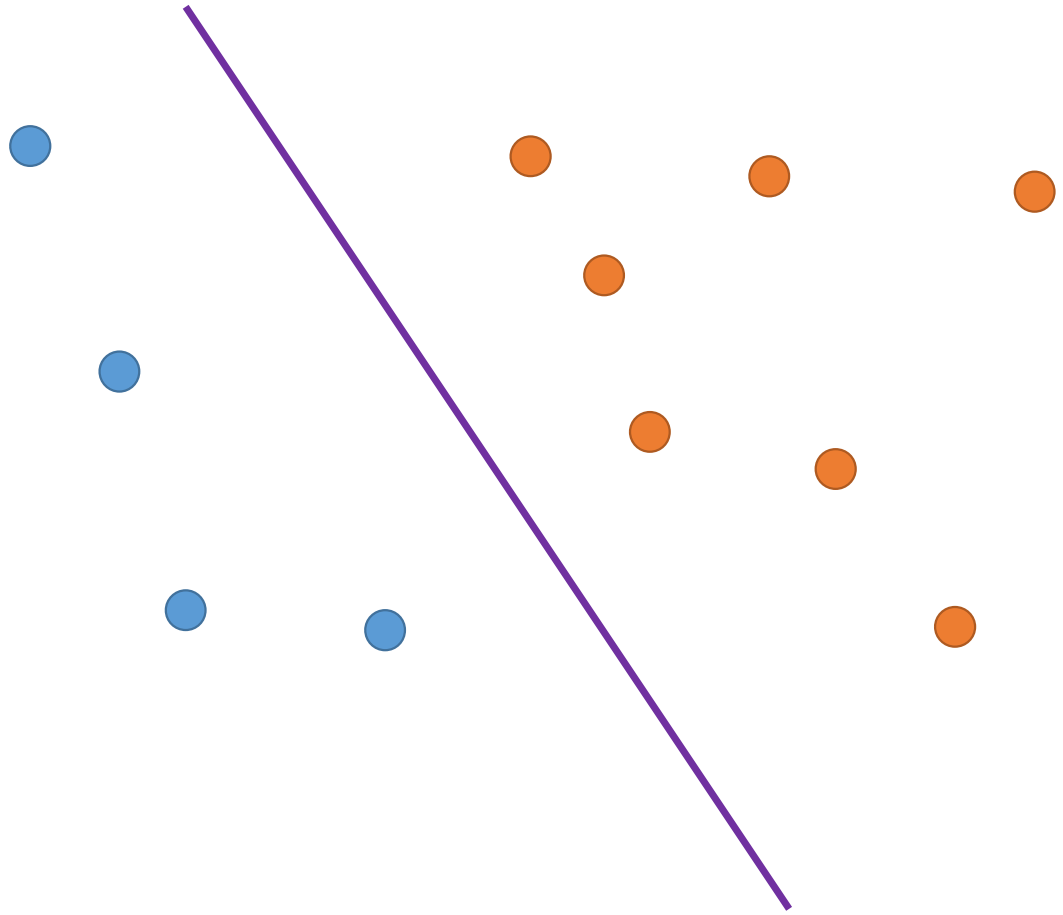
- SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

- **Шаг 1.** Ищем соседей
- **Шаг 2.** Выбираем случайных соседей
- **Шаг 3.** Генерируем объекты



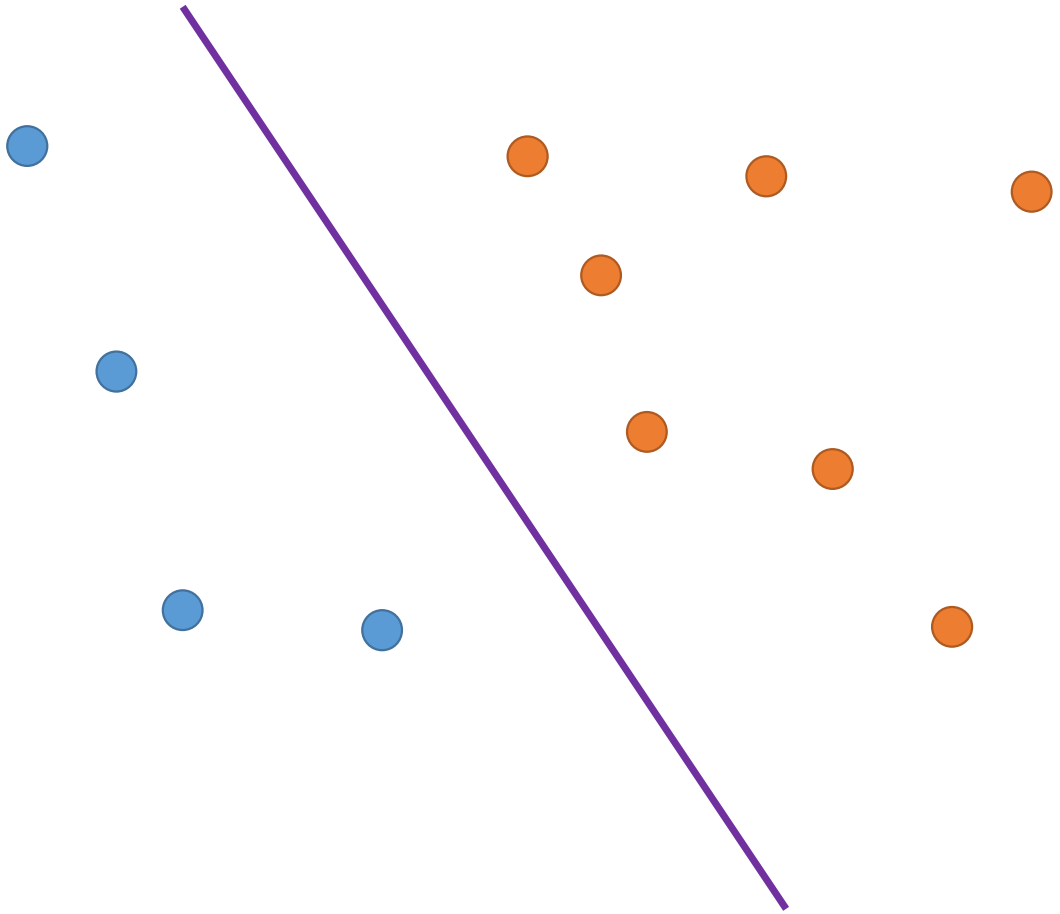
Borderline-SMOTE

- Для моделей классификации очень важно выучить границу между классами



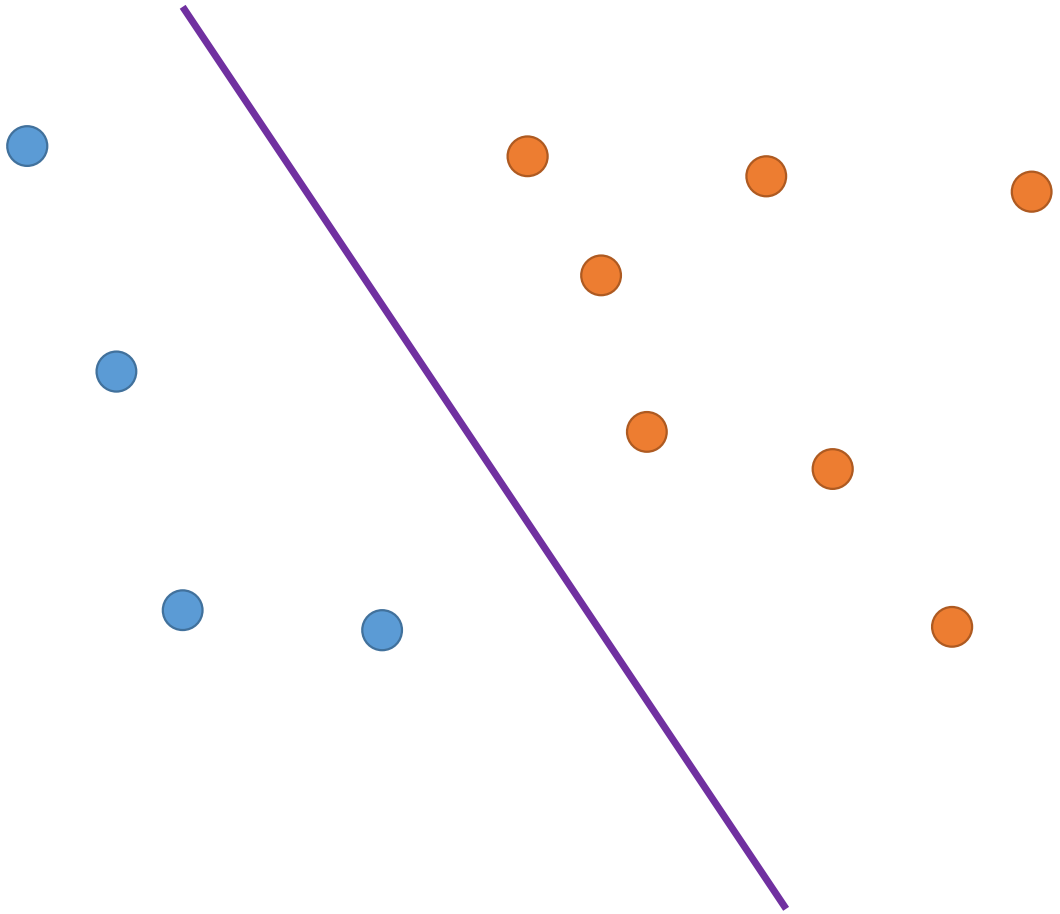
Borderline-SMOTE

- Для моделей классификации очень важно выучить границу между классами
- Объекты около границ крайне важны



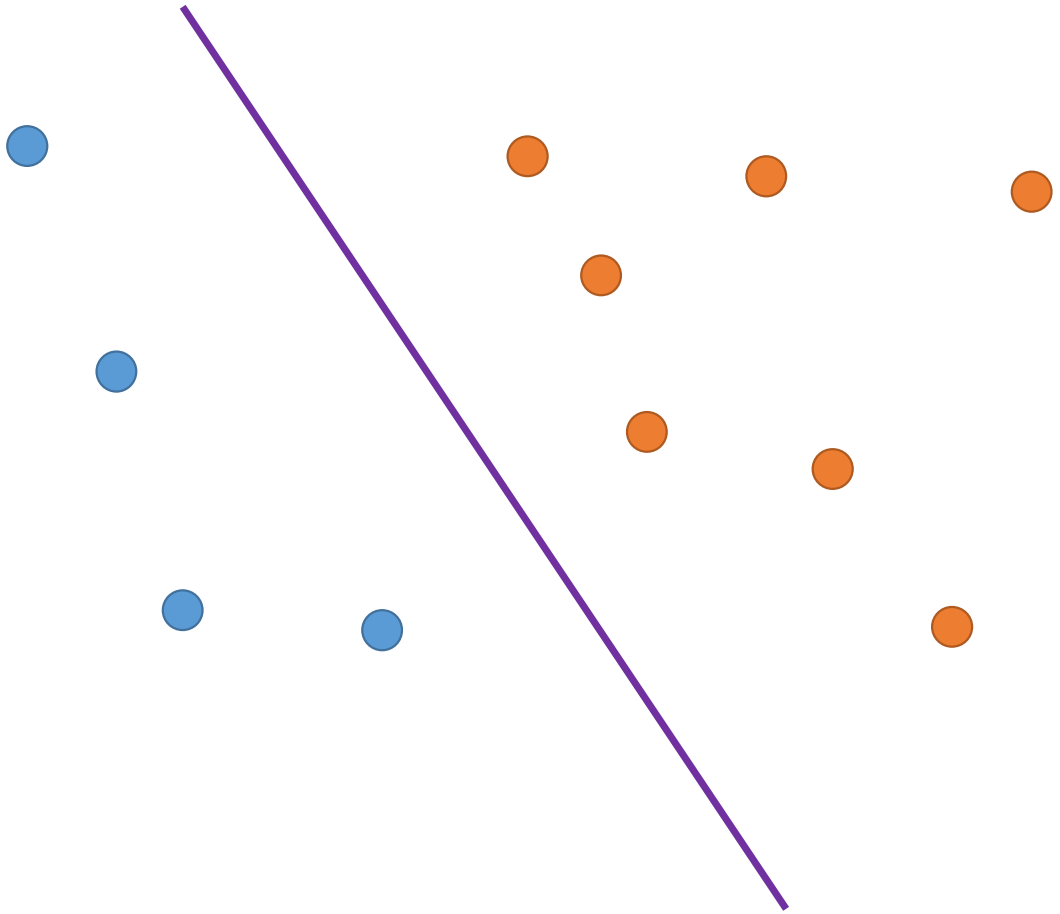
Borderline-SMOTE

- Для моделей классификации очень важно выучить границу между классами
- Объекты около границ крайне важны
- Следовательно, давайте генерировать объекты возле границ



Borderline-SMOTE

- Для моделей классификации очень важно выучить границу между классами
- Объекты около границ крайне важны
- Следовательно, давайте генерировать объекты возле границ
- Как определить границы?



Borderline-SMOTE

- Найти k ближайших соседей для каждого объекта x_i миноритарного класса
- Затем для каждого x_i вычислить $k' \in [0, k]$ – число соседей, принадлежащих к мажоритарному классу

Borderline-SMOTE

- Найти k ближайших соседей для каждого объекта x_i миноритарного класса
- Затем для каждого x_i вычислить $k' \in [0, k]$ – число соседей, принадлежащих к мажоритарному классу

1. Если $k' = k$, то x_i считаем шумом

Borderline-SMOTE

- Найти k ближайших соседей для каждого объекта x_i миноритарного класса
- Затем для каждого x_i вычислить $k' \in [0, k]$ – число соседей, принадлежащих к мажоритарному классу

1. Если $k' = k$, то x_i считаем шумом
2. Если $k' \in \left[0, \frac{k}{2}\right)$, то x_i – «надежный» объект (далеко от границы)

Borderline-SMOTE

- Найти k ближайших соседей для каждого объекта x_i миноритарного класса
- Затем для каждого x_i вычислить $k' \in [0, k]$ – число соседей, принадлежащих к мажоритарному классу

1. Если $k' = k$, то x_i считаем шумом
2. Если $k' \in \left[0, \frac{k}{2}\right)$, то x_i – «надежный» объект (далеко от границы)
3. Если $k' \in \left[\frac{k}{2}, k\right)$, то x_i – объект «в опасности» (близко к границе)

Borderline-SMOTE

$$x_i^{(j)\prime} = x_i + \lambda \left(x_i^{(j)} - x_i \right)$$

- **Borderline-SMOTE1:** используем для генерации объекты «в опасности» и их соседей миноритарного класса
- **Borderline-SMOTE2:** аналогично, но также использовать соседи мажоритарного класса, с $\lambda \in [0, 0.5]$

Borderline-SMOTE

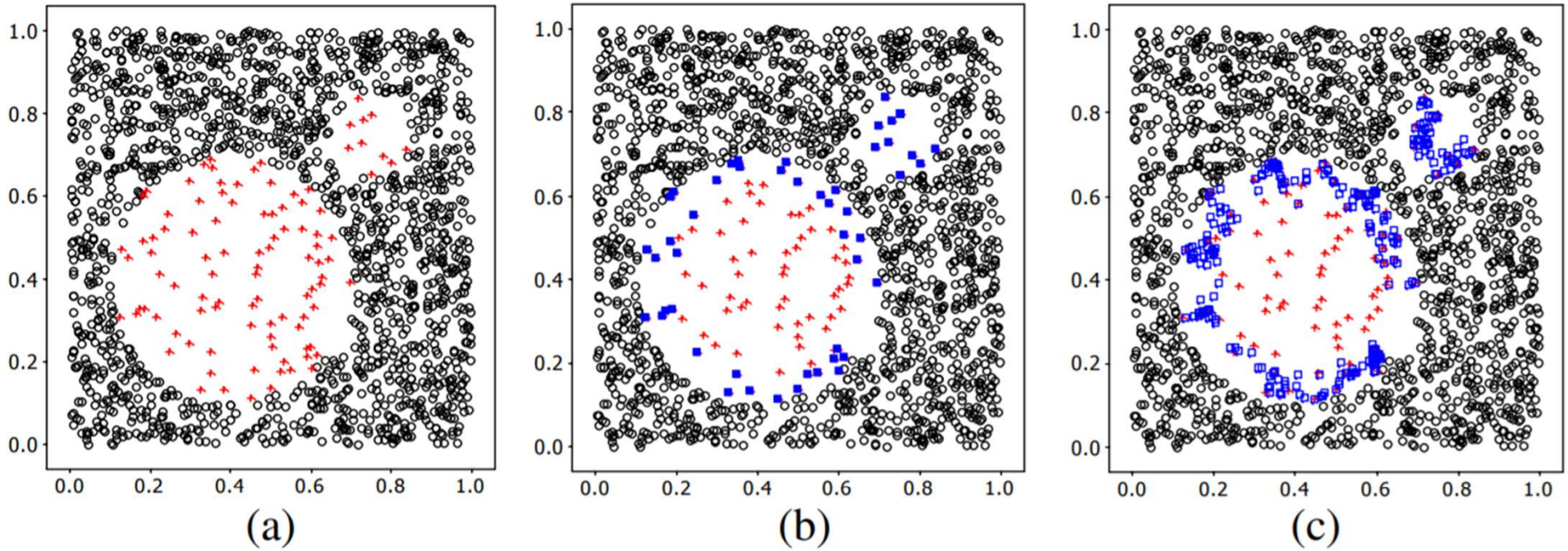


Fig. 1. (a) The original distribution of Circle data set. (b) The borderline minority examples (*solid squares*). (c) The borderline synthetic minority examples (*hollow squares*).

Undersampling/oversampling

- В обоих методах модифицируется обучающая выборка – не валидация/тест!

Undersampling/oversampling

- В обоих методах модифицируется обучающая выборка – не валидация/тест!
- Как вы думаете, разбиение на фолды для кросс-валидации нужно делать **до** oversampling, **после** или можно **и так, и так**?

Undersampling/oversampling

- В обоих методах модифицируется обучающая выборка – не валидация/тест!
- Разбиение на фолды для кросс-валидации нужно делать **до** oversampling

Undersampling/oversampling

- В обоих методах модифицируется обучающая выборка – не валидация/тест!
- Разбиение на фолды для кросс-валидации нужно делать **до** oversampling
- Комбинация из undersampling и oversampling может неплохо сработать

Резюме

- Можно балансировать данные множеством разных методов:
  - установка весов классов внутри алгоритмов
  - undersampling (random, NearMiss)
  - oversampling (random, методы на основе SMOTE)

Определение аномалий

Определение аномалий

- Целенаправленное определение аномалий (выбросов, новизны) – объектов, которые не подходят под оригинальное распределение
- Очень большой дисбаланс в данных
- Может формулироваться как задача обучения без учителя
- Примеры: обнаружение вторжений в систему, предсказание сбоев и поломок

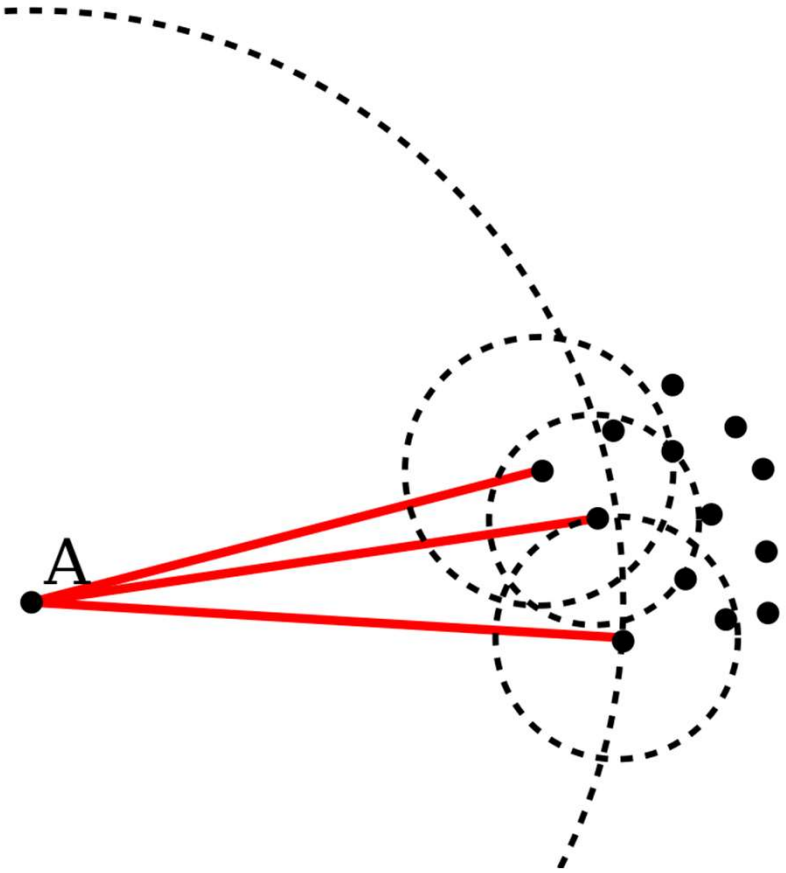
Методы на основе kNN

- Используем алгоритм kNN для детекции объектов, которые лежат далеко от остальных
- **Метод 1:** как далеко находится объект от своего k-ого ближайшего соседа
- **Метод 2:** какое среднее расстояние от объекта до k ближайших соседей?

Local Outlier Factor

- **LOF: Local Outlier Factor**

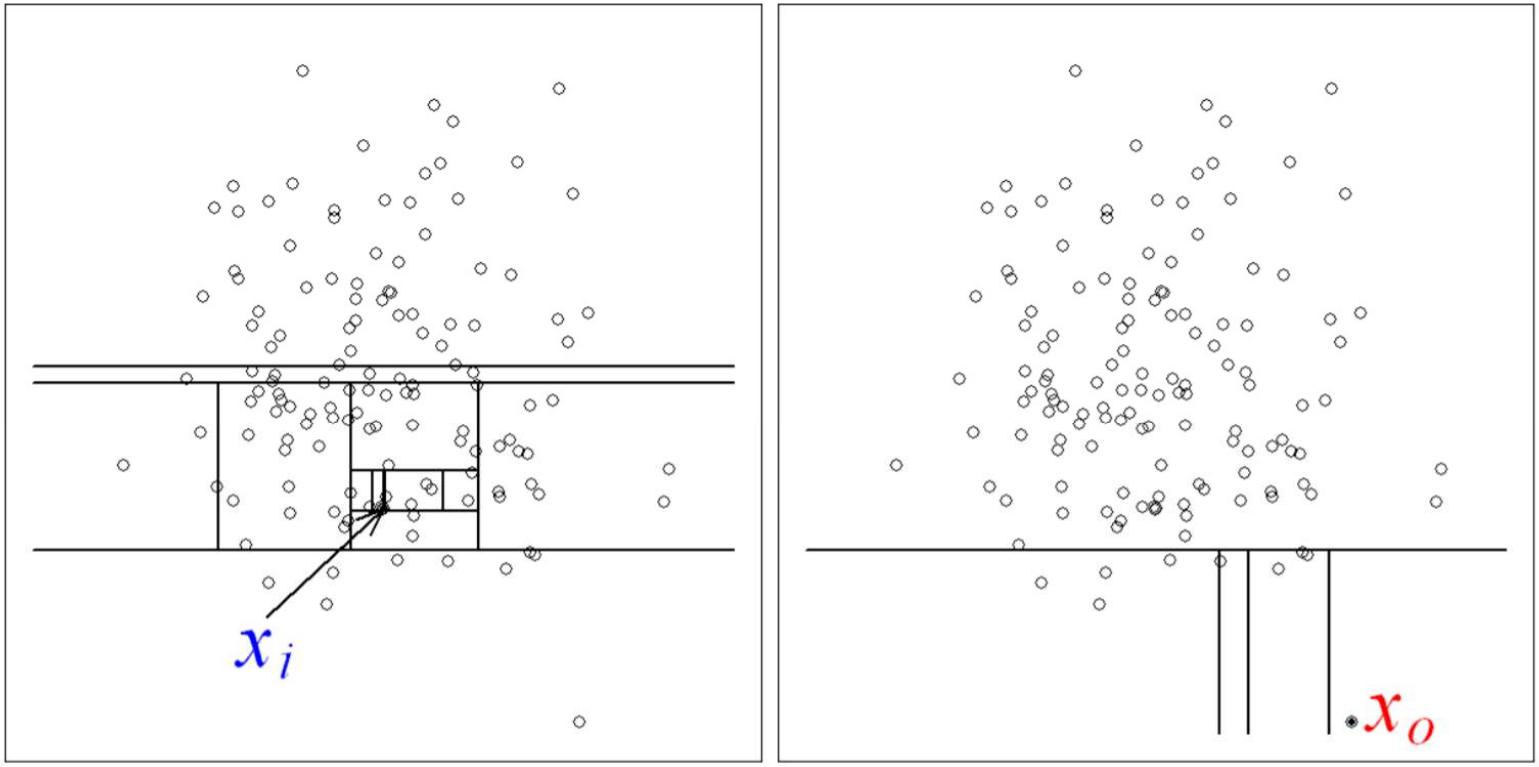
- Наблюдение аномально, если его локальная плотность намного меньше локальной плотности его ближайших соседей



Isolation Forest

- **Isolation Forest** «изолирует» наблюдения, делая случайные разбиения в решающих деревьях
- Идея: если наблюдение аномально, то чтобы его изолировать, нужно очень мало разбиений
- Построим лес и посчитаем оценку аномальности для каждого наблюдения

Isolation Forest

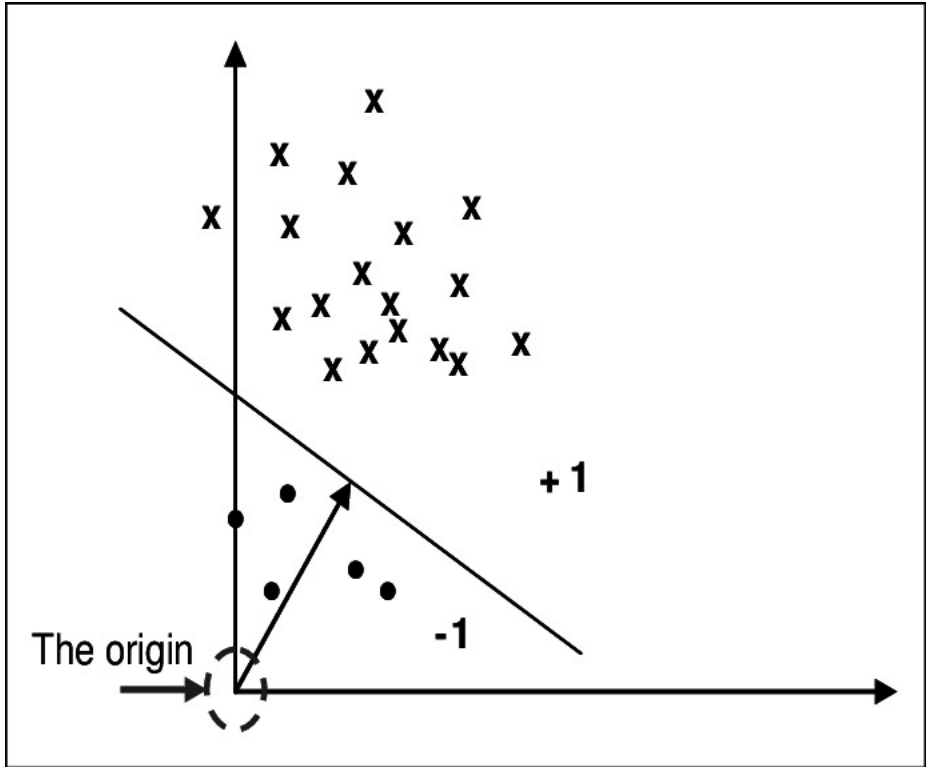


(a) Isolating x_i (b) Isolating x_o

One-Class SVM

• Метод строит линейную функцию $a(x) = sign(w, x)$
так, чтобы она отделяла выборку от начала
координат с максимальным отступом, а именно:

• $a(x)$ отделяет как можно больше объектов выборки от нуля


+ 1
-1
The origin

Резюме

- Определение аномалий – специфичная задача с дисбалансом данных
- Есть много методов для решения такой задачи
- kNN, Local Outlier Factor, Isolation Forest