Detección de anomalías basada en técnicas de ensembles

Ignacio Aguilera Martos

10 Septiembre 2019

Trabajo Fin de Grado Código disponible en GitHub

Contenidos

- 1. Concepto de anomalía basado en distancias
- 2. Aprendizaje Automático
- 3. Probabilidad Multivariante
- 4. Concepto probabilístico de anomalía
- 5. Modelos implementados
- 6. Resultados
- 7. Conclusiones y Trabajo Futuro

Concepto de anomalía basado en

distancias

Pensado para el caso uno-dimensional.

Pensado para el caso uno-dimensional.

Tukey's Fences

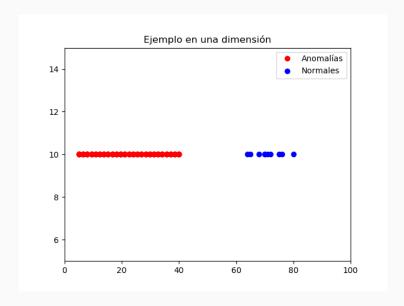
Valores fuera del rango $[Q_1-k(Q_3-Q_1),\,Q_3+k(Q_3-Q_1)]$ con k=1,5

Pensado para el caso uno-dimensional.

Tukey's Fences

Valores fuera del rango $[Q_1-k(Q_3-Q_1),\,Q_3+k(Q_3-Q_1)]$ con k=1,5

La propuesta de k = 1,5 es arbitraria.



Criterio

Aplicar el criterio de Tukey a cada una de las características.

Criterio

Aplicar el criterio de Tukey a cada una de las características. <u>Trivial</u>.

Criterio

Aplicar el criterio de Tukey a cada una de las características. Trivial.

Criterio de clusters

1. Agrupamos los datos por clusters.

Criterio

Aplicar el criterio de Tukey a cada una de las características. Trivial.

Criterio de clusters

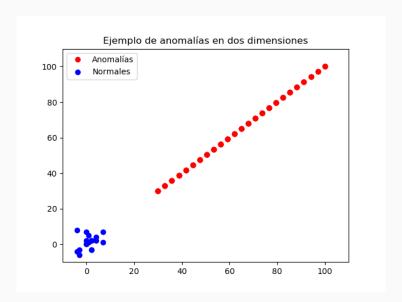
- 1. Agrupamos los datos por clusters.
- 2. Encontramos el cluster más cercano para cada instancia.

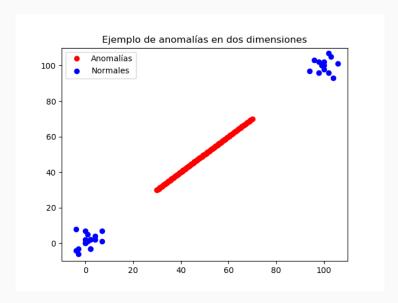
Criterio

Aplicar el criterio de Tukey a cada una de las características. Trivial.

Criterio de clusters

- 1. Agrupamos los datos por clusters.
- 2. Encontramos el cluster más cercano para cada instancia.
- 3. Si la distancia del objeto al centroide del cluster es mayor que 1,5 veces la mayor distancia intercluster entonces es una anomalía.





Aprendizaje Automático

Problema que abordamos

Problema que abordamos

Problema de detección de anomalías

Es un problema de aprendizaje no supervisado pues no disponemos de las etiquetas.

Problema que abordamos

Problema de detección de anomalías

Es un problema de aprendizaje no supervisado pues no disponemos de las etiquetas.

Problema no supervisado y acierto

Es un problema no supervisado. Usaremos conjuntos de datos etiquetados.

Propiedades de conjuntos de alta dimensionalidad

1. La densidad disminuye exponencialmente al aumentar la dimensionalidad.

Propiedades de conjuntos de alta dimensionalidad

- 1. La densidad disminuye exponencialmente al aumentar la dimensionalidad.
- 2. Cuanto mayor es la dimensionalidad mayor debe ser el radio de una bola para englobar el mismo porcentaje de datos.

Propiedades de conjuntos de alta dimensionalidad

- 1. La densidad disminuye exponencialmente al aumentar la dimensionalidad.
- 2. Cuanto mayor es la dimensionalidad mayor debe ser el radio de una bola para englobar el mismo porcentaje de datos.
- 3. Casi todo punto está más cerca del borde del conjunto que de otro punto.

$$D(d,n) = (1 - \frac{1}{2}^{\frac{1}{n}})^{\frac{1}{d}}$$

Propiedades de conjuntos de alta dimensionalidad

- 1. La densidad disminuye exponencialmente al aumentar la dimensionalidad.
- 2. Cuanto mayor es la dimensionalidad mayor debe ser el radio de una bola para englobar el mismo porcentaje de datos.
- 3. Casi todo punto está más cerca del borde del conjunto que de otro punto.

$$D(d,n) = (1 - \frac{1}{2}^{\frac{1}{n}})^{\frac{1}{d}}$$

4. Casi todo punto es una anomalía sobre su propia proyección.

Propiedades de conjuntos de alta dimensionalidad

- 1. La densidad disminuye exponencialmente al aumentar la dimensionalidad.
- 2. Cuanto mayor es la dimensionalidad mayor debe ser el radio de una bola para englobar el mismo porcentaje de datos.
- 3. Casi todo punto está más cerca del borde del conjunto que de otro punto.

$$D(d,n) = (1 - \frac{1}{2}^{\frac{1}{n}})^{\frac{1}{d}}$$

4. Casi todo punto es una anomalía sobre su propia proyección.

Maldición de la alta dimensionalidad

A mayor dimensionalidad mayor número de puntos necesitamos para obtener una aproximación con funciones de igual regularidad.

Aproximación de funciones

Nuestro objetivo es aproximar la función de salida del sistema con los datos que tenemos.

Aproximación de funciones

Nuestro objetivo es aproximar la función de salida del sistema con los datos que tenemos.

Teoremas útiles

• Teorema de Aproximación de Weierstrass

Aproximación de funciones

Nuestro objetivo es aproximar la función de salida del sistema con los datos que tenemos.

Teoremas útiles

- Teorema de Aproximación de Weierstrass
- Serie de Fourier

Aproximación de funciones

Nuestro objetivo es aproximar la función de salida del sistema con los datos que tenemos.

Teoremas útiles

- Teorema de Aproximación de Weierstrass
- Serie de Fourier
- Teorema de Kolmogorov-Arnold

Probabilidad Multivariante

Contenidos de la sección

Contenidos útiles

• Vectores aleatorios.

- Vectores aleatorios.
- Independencia.

- Vectores aleatorios.
- Independencia.
- Probabilidad condicionada (sucesos, variables y σ -álgebras) y sus propiedades.

- Vectores aleatorios.
- Independencia.
- Probabilidad condicionada (sucesos, variables y σ -álgebras) y sus propiedades.
- Esperanza condicionada (sucesos, variables y σ -álgebras) y sus propiedades.

- Vectores aleatorios.
- Independencia.
- Probabilidad condicionada (sucesos, variables y σ -álgebras) y sus propiedades.
- Esperanza condicionada (sucesos, variables y σ -álgebras) y sus propiedades.
- Desigualdades famosas.

Desigualdades famosas

Desigualdades famosas

Desigualdades estudiadas

- Desigualdad de Markov
- Desigualdad de Chebychev
- Cotas de Chernoff
- Desigualdad de Hoeffding

Concepto probabilístico de

anomalía

Notación usada

$$X = \{x_1, ..., x_n\}, \ x_i = (x_{s_1}, ..., x_{s_d})$$

Notación usada

$$X = \{x_1, ..., x_n\}, \ x_i = (x_{s_1}, ..., x_{s_d})$$

$$S = \{s_i | s_i \in \{s_1, ..., s_d\} \text{ con } i \in \Delta\}$$

Notación usada

$$X = \{x_1, ..., x_n\}, x_i = (x_{s_1}, ..., x_{s_d})$$

$$S = \{s_i | s_i \in \{s_1, ..., s_d\} \text{ con } i \in \Delta\}$$

X_S proyección de los datos en el subespacio S

Notación usada

$$X = \{x_1, ..., x_n\}, x_i = (x_{s_1}, ..., x_{s_d})$$

$$S = \{s_i | s_i \in \{s_1, ..., s_d\} \text{ con } i \in \Delta\}$$

X_S proyección de los datos en el subespacio S

$$p_{s_1,...,s_p}(x_{s_1},...,x_{s_p})$$

Notación usada

$$X = \{x_1, ..., x_n\}, x_i = (x_{s_1}, ..., x_{s_d})$$

$$S = \{s_i | s_i \in \{s_1, ..., s_d\} \text{ con } i \in \Delta\}$$

X_S proyección de los datos en el subespacio S

$$p_{s_1,...,s_p}(x_{s_1},...,x_{s_p})$$

$$p_{s_i}(x_{s_i})$$

Definición subespacio incorrelado

Decimos que un subespacio S es un subespacio incorrelado si y sólo si:

$$p_{s_1,...,s_p}(x_{s_1},...,x_{s_p}) = \prod_{i=1}^p p_{s_i}(x_{s_i})$$

Definición subespacio incorrelado

Decimos que un subespacio S es un subespacio incorrelado si y sólo si:

$$p_{s_1,...,s_p}(x_{s_1},...,x_{s_p}) = \prod_{i=1}^p p_{s_i}(x_{s_i})$$

Definición anomalía no trivial

Decimos que un objeto x_S es una anomalía no trivial respecto del subespacio S si:

$$p_{s_1,...,s_p}(x_{s_1},...,x_{s_p}) \ll p_{esp}(x_{s_1},...,x_{s_p})$$

Definición subespacio incorrelado

Decimos que un subespacio S es un subespacio incorrelado si y sólo si:

$$p_{s_1,...,s_p}(x_{s_1},...,x_{s_p}) = \prod_{i=1}^p p_{s_i}(x_{s_i})$$

Definición anomalía no trivial

Decimos que un objeto x_S es una anomalía no trivial respecto del subespacio S si:

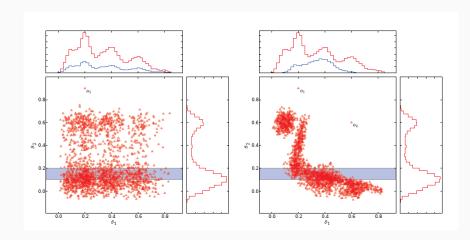
$$p_{s_1,...,s_p}(x_{s_1},...,x_{s_p}) \ll p_{esp}(x_{s_1},...,x_{s_p})$$

Relación entre conceptos de anomalía

Este concepto de anomalía es complementario.

Ejemplo de anomalía

Ejemplo de anomalía



Modelos implementados

Algoritmos de ensamblaje

Algoritmos secuenciales

Algoritmos de ensamblaje

- Algoritmos secuenciales
- Algoritmos independientes

Algoritmos de ensamblaje

- Algoritmos secuenciales
- Algoritmos independientes

Ensamblaje secuencial:

Entrada: Conjunto de datos \mathcal{D} , Algoritmos base $\mathcal{A}_1, ..., \mathcal{A}_r$ j=1

repetir

Tomamos el algoritmo A_j según los resultados anteriores

Tomamos el conjunto de datos modificado $f_j(\mathcal{D})$ de anteriores ejecuciones

Ejecutamos el algoritmo A_j sobre $f_j(\mathcal{D})$

j=j+1

hasta que fin;

Resultado: Combinación de los resultados

Algoritmos de ensamblaje

- Algoritmos secuenciales
- Algoritmos independientes

Ensamblaje independiente:

Entrada: Conjunto de datos \mathcal{D} , Algoritmos base $\mathcal{A}_1, ..., \mathcal{A}_r$ j=1

repetir

Tomamos el algoritmo A_j Creamos el conjunto de datos modificado $f_j(\mathcal{D})$ Ejecutamos el algoritmo A_j sobre $f_j(\mathcal{D})$ j=j+1

hasta que fin;

Resultado: Combinación de los resultados

HICS

• Se obtienen subespacios de alto contraste: subespacios en los que haya altas desviaciones de unas instancias frente a otras.

HICS

- Se obtienen subespacios de alto contraste: subespacios en los que haya altas desviaciones de unas instancias frente a otras.
- Se valora con LOF (Local Outlier Factor) las proyecciones sobre dichos subespacios.

HICS

- Se obtienen subespacios de alto contraste: subespacios en los que haya altas desviaciones de unas instancias frente a otras.
- Se valora con LOF (Local Outlier Factor) las proyecciones sobre dichos subespacios.
- Se hace la media.

OUTRES

• Se analiza para cada instancia los subespacios interesantes.

- Se analiza para cada instancia los subespacios interesantes.
- Si un subespacio es relevante (no uniforme) se calcula la densidad de la instancia con respecto a su vecindario.

- Se analiza para cada instancia los subespacios interesantes.
- Si un subespacio es relevante (no uniforme) se calcula la densidad de la instancia con respecto a su vecindario.
- Con dicha densidad se calcula una desviación usando la media y la desviación típica de las densidades de los vecinos.

- Se analiza para cada instancia los subespacios interesantes.
- Si un subespacio es relevante (no uniforme) se calcula la densidad de la instancia con respecto a su vecindario.
- Con dicha densidad se calcula una desviación usando la media y la desviación típica de las densidades de los vecinos.
- Si la desviación es alta entonces el dato es anómalo y se actualiza su puntuación.

- Se analiza para cada instancia los subespacios interesantes.
- Si un subespacio es relevante (no uniforme) se calcula la densidad de la instancia con respecto a su vecindario.
- Con dicha densidad se calcula una desviación usando la media y la desviación típica de las densidades de los vecinos.
- Si la desviación es alta entonces el dato es anómalo y se actualiza su puntuación.
- El proceso es recursivo.

LODA

• Algoritmo basado en histogramas.

- Algoritmo basado en histogramas.
- Se obtienen unos vectores proyección y con ellos se obtiene un valor real.

- Algoritmo basado en histogramas.
- Se obtienen unos vectores proyección y con ellos se obtiene un valor real.
- Se elabora con estos valores reales para cada vector de proyección un histograma.

- Algoritmo basado en histogramas.
- Se obtienen unos vectores proyección y con ellos se obtiene un valor real.
- Se elabora con estos valores reales para cada vector de proyección un histograma.
- Con los histogramas, para cada instancia y sus valores reales asociados podemos obtener la probabilidad de que aparezca con el histograma.

- Algoritmo basado en histogramas.
- Se obtienen unos vectores proyección y con ellos se obtiene un valor real.
- Se elabora con estos valores reales para cada vector de proyección un histograma.
- Con los histogramas, para cada instancia y sus valores reales asociados podemos obtener la probabilidad de que aparezca con el histograma.
- Finalmente combinamos estas probabilidades para hacer la puntuación: cuanto menor sea el valor de la probabilidad más anómalo será el dato.

Mahalanobis Kernel

Mahalanobis Kernel

Mahalanobis Kernel Entrada: D

```
S = DD^{T}.
S = Q\Delta^{2}Q^{T}.
```

Almacenamos los vectores propios columna no negativos de $Q\Delta$ en una matriz D'

Normalizamos D' para que tenga media 0 y varianza 1.

```
vector\_media = media(D')

puntuaciones = []
```

para cada fila en D' hacer

```
score = distancia(vector_media, fila)
puntuaciones = [puntuaciones, score]
```

fin

Salida: puntuaciones

Componentes

1. Componente basado en distancias: KNN con k=5

Componentes

- 1. Componente basado en distancias: KNN con k = 5
- 2. Componente basado en dependencia: Mahalanobis Kernel

Componentes

- 1. Componente basado en distancias: KNN con k=5
- 2. Componente basado en dependencia: Mahalanobis Kernel
- 3. Componente basado en densidad en subespacios: IForest

Nota

Aplicamos en todos los componentes la técnica de subsampling.

Recursos usados

• Implementación hecha en Python3

Recursos usados

- Implementación hecha en Python3
- Disponible en GitHub

Recursos usados

- Implementación hecha en Python3
- Disponible en GitHub
- Documentada con Sphinx

Resultados

Conversión del problema a semisupervisado

Conversión del problema a semisupervisado

Problema

Si queremos medir el rendimiento de los modelos necesitamos conjuntos de datos que tengan detectadas las anomalías.

Conversión del problema a semisupervisado

Problema

Si queremos medir el rendimiento de los modelos necesitamos conjuntos de datos que tengan detectadas las anomalías.

Solución

Vamos a utilizar los conjuntos de datos de ODDS de la Universidad de Stony Brooks.

Problema

Conjuntos de datos mantenidos por la Universidad Stony Brooks. Etiquetados los datos con 0 si son normales y 1 si son anomalías.

Nombre	Dimensionalidad	Número de instancias	
annthyroid	6	7200	
arrhythmia	274	452	
breastw	9	683	
cardio	21	1831	
glass	9	214	
ionosphere	33	351	
letter	32	1600	
lympho	18	148	
mammography	6	11183	
mnist	100	7603	
musk	166	3062	
optdigits	64	5216	
pendigits	16	6870	
pima	8	768	

Nombre	Dimensionalidad	Número de instancias	
satellite	36	6435	
satimage-2	36	5803	
speech	400	3686	
thyroid	6	3772	
vertebral	6	240	
vowels	12	1456	
wbc	30	378	
wine	13	129	

Modelos PyOD

Experimentación

Los 5 modelos se han puesto frente a modelos clásicos implementados en la librería PyOD.

Modelos PyOD

Experimentación

Los 5 modelos se han puesto frente a modelos clásicos implementados en la librería PyOD.

Angle-Based Outlier Detection (ABOD), Connectivity-Based Outlier Factor (COF), Histogram-Based Outlier Score (HBOS), K Nearest Neighbors (KNN), Local Outlier Factor (LOF), Minimum Covariance Determinant (MCD), One-Class Support Vector Machines (OCSVM), Principal Component Analysis (PCA), Subspace Outlier Detection (SOD) y Stochastic Outlier Selection (SOS)

Acierto

Mejores modelos

Trinity, Mahalanobis Kernel y LODA

Acierto

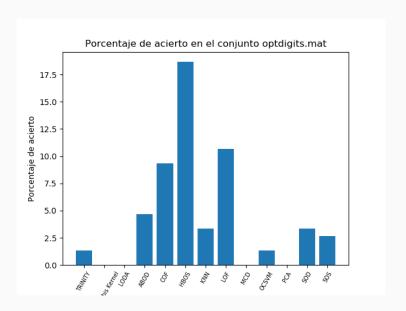
Mejores modelos

Trinity, Mahalanobis Kernel y LODA

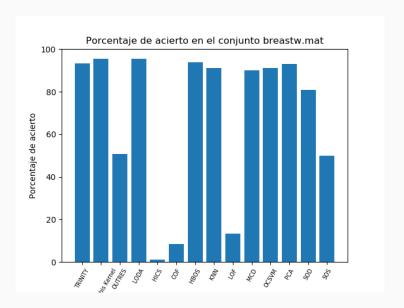
Peores modelos

HICS y OUTRES

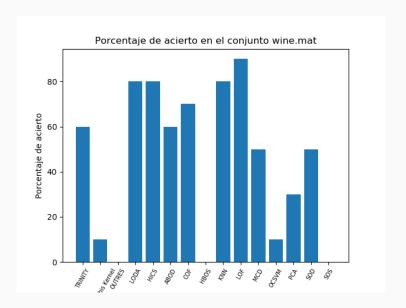
Dificultad del problema



Buenos resultados



Mejor resultado de HICS



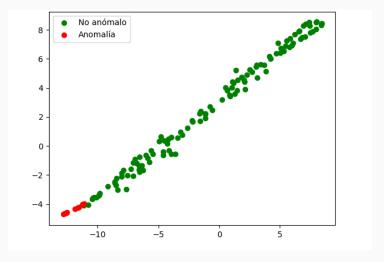
Porcentaje de acierto

Data / Mod	Trinity	MK	OUTRES	LODA	HICS
annthyroid	26.2172 %	12.3595 %	7.4906 %	8.9887 %	6.5543 %
arrhythmia	48.4848 %	51.5151%	NAN	37.8787 %	NAN
breastw	93.3054 %	95.3974%	50.6276 %	95.3974	1.2552 %
cardio	44.3181 %	51.7045 %	NAN	59.0909 %	NAN
glass	11.1111 %	0 %	0 %	0 %	11.1111 %
ionosphere	73.0158 %	57.1428 %	NAN	46.8253 %	NAN
letter	16 %	15 %	NAN	4 %	NAN
lympho	83.3333 %	50 %	NAN	0 %	NAN
mammography	25.7692 %	1.1538 %	5.3846 %	28.0769 %	8.0769 %
mnist	40.2857 %	54.7142 %	NAN	2 %	NAN
musk	34.0206 %	0 %	NAN	32.9896 %	NAN
optdigits	1.3333 %	0 %	NAN	0 %	NAN
pendigits	25 %	16.6666 %	2.5641 %	0 %	NAN
pima	50.7462 %	38.8059 %	34.7014 %	54.8507 %	30.5970 %

Porcentaje de acierto

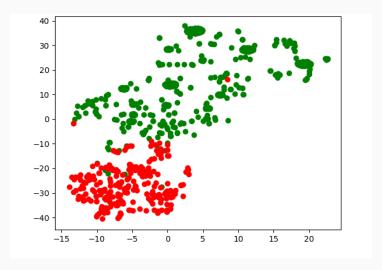
Data / Mod	Trinity	MK	OUTRES	LODA	HICS
satellite	54.3713 %	32.8585 %	NAN	12.6227 %	NAN
satimage-2	90.1408 %	90.1408 %	NAN	0 %	NAN
speech	0 %	4.9180 %	NAN	3.2786 %	NAN
thyroid	39.7849 %	22.5806 %	5.3763 %	1.0752 %	0 %
vertebral	3.3333 %	10 %	3.3333 %	0 %	3.3333 %
vowels	24 %	0 %	4 %	8 %	32 %
wbc	42.8571 %	0 %	NAN	71.4285 %	NAN
wine	60 %	10 %	0 %	80 %	80 %

Proyecciones



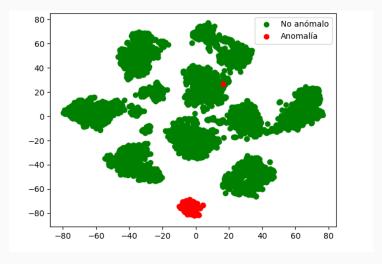
Proyección del conjunto wine

Proyecciones

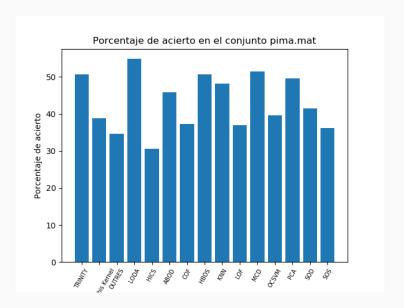


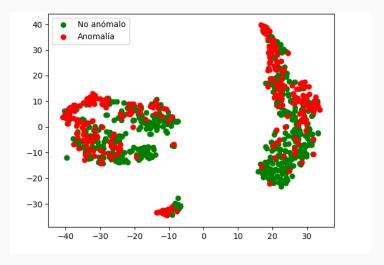
Proyección del conjunto breastw

Proyecciones

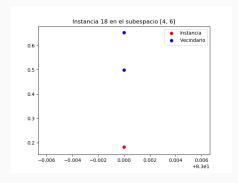


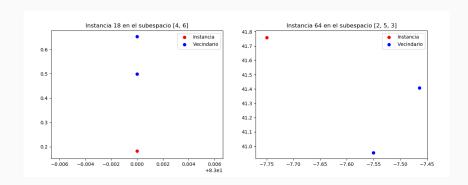
Proyección del conjunto optdigits

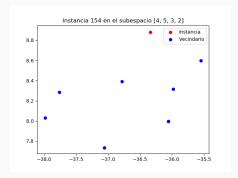


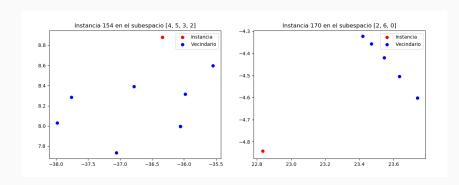


Proyección del conjunto pima









Valores AUC

$$TPR = \frac{VP}{VP + FN}, \ FPR = \frac{FP}{VN + FP}$$

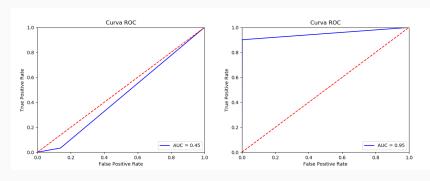
Valores AUC

$$TPR = \frac{VP}{VP + FN}, \ FPR = \frac{FP}{VN + FP}$$

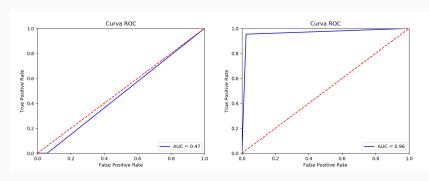
Área bajo la curva

Data / Model	Tinity	MK	OUTRES	LODA	HICS
annthyroid	0.6015	0.5266	0.5003	0.5084	0.4953
arrhythmia	0.6983	0.7161	NAN	0.6362	NAN
breastw	0.9485	0.9646	0.6202	0.9646	0.2405
cardio	0.6919	0.7328	NAN	0.7737	NAN
glass	0.5360	0.4780	0.4780	0.4780	0.5360
ionosphere	0.7895	0.6657	NAN	0.5852	NAN
letter	0.5519	0.5466	NAN	0.488	NAN
lympho	0.9131	0.7394	NAN	0.4788	NAN
mammography	0.6200	0.4940	0.5156	0.6318	0.5294
mnist	0.6711	0.7506	NAN	0.4603	NAN
musk	0.6593	0.4836	NAN	0.6539	NAN
optdigits	0.4920	0.4851	NAN	0.4851	NAN
pendigits	0.6162	0.5736	0.5015	0.4883	NAN
pima	0.6217	0.5300	0.4985	0.6532	0.4669

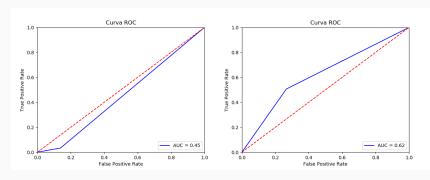
Data / Model	Tinity	MK	OUTRES	LODA	HICS
satellite	0.6662	0.5089	NAN	0.3609	NAN
satimage-2	0.9500	0.9500	NAN	0.4938	NAN
speech	0.4915	0.5165	NAN	0.5082	NAN
thyroid	0.6913	0.6031	0.5149	0.4928	0.4873
vertebral	0.4476	0.4857	0.4476	0.4285	0.4476
vowels	0.6064	0.4822	0.5029	0.5236	0.6479
wbc	0.6974	0.4705	NAN	0.8487	NAN
wine	0.7831	0.5121	0.4579	0.8915	0.8915



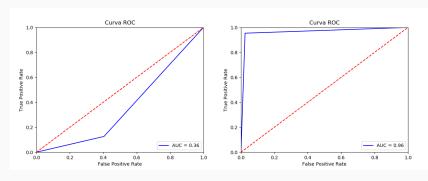
Curvas ROC para Trinity



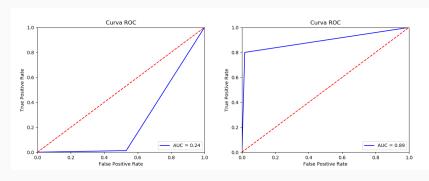
Curvas ROC para Mahalanobis Kernel



Curvas ROC para OUTRES



Curvas ROC para LODA



Curvas ROC para HICS

Tiempos

Data / Mod	Trinity	MK	OUTRES	LODA	HICS
annthyroid	28.5212	390.5937	193.6110	137.8692	1169.3422
arrhythmia	28.8828	0.1243	NAN	9.0474	NAN
breastw	23.3296	0.3165	117.8225	13.2879	315.4130
cardio	33.0496	6.5851	NAN	36.6768	NAN
glass	12.5272	0.0220	11.5349	4.0798	79.2560
ionosphere	16.5319	0.0565	NAN	6.9664	NAN
letter	41.8301	5.1648	NAN	31.8875	NAN
lympho	12.2874	0.0187	NAN	2.8804	NAN
mammography	31.5619	1444.1323	27765.1978	224.8207	2502.0258
mnist	42.7623	464.8962	NAN	150.1434	NAN
musk	42.8683	34.4336	NAN	60.4207	NAN
optdigits	36.2723	145.6876	NAN	103.9115	NAN
pendigits	34.0999	340.2855	2757.0345	135.0839	NAN
pima	26.3576	0.3482	40.6379	15.2128	150.1283

Tiempos

Data / Mod	Trinity	MK	OUTRES	LODA	HICS
satellite	48.2618	301.9960	NAN	129.6712	NAN
satimage-2	39.7535	200.5037	NAN	113.2818	NAN
speech	76.6633	62.2470	NAN	73.0844	NAN
thyroid	32.6503	65.3469	64.2370	72.1607	376.2697
vertebral	13.4726	0.0301	1.7653	4.6250	9.1404
vowels	36.2093	3.1876	426.6157	28.2930	5126.5627
wbc	17.0011	0.0675	NAN	7.5109	NAN
wine	11.2756	0.0165	58.9642	2.4540	774.9212

Conclusiones y trabajo futuro

 Rendimiento similar a los clásicos aunque los superan en algunos casos: potencial.

- Rendimiento similar a los clásicos aunque los superan en algunos casos: potencial.
- Mal enfoque de los algoritmos HICS y OUTRES. Detección de anomalías no triviales.

- Rendimiento similar a los clásicos aunque los superan en algunos casos: potencial.
- Mal enfoque de los algoritmos HICS y OUTRES. Detección de anomalías no triviales.
- Consumo de tiempo mucho mayor.

- Rendimiento similar a los clásicos aunque los superan en algunos casos: potencial.
- Mal enfoque de los algoritmos HICS y OUTRES. Detección de anomalías no triviales.
- Consumo de tiempo mucho mayor.
- Valores perdidos y tratamiento.

- Rendimiento similar a los clásicos aunque los superan en algunos casos: potencial.
- Mal enfoque de los algoritmos HICS y OUTRES. Detección de anomalías no triviales.
- Consumo de tiempo mucho mayor.
- Valores perdidos y tratamiento.
- Algoritmo nuevo.

Gracias por su atención. ¿Preguntas?