Anomaly Detection in High Dimensional Data

발표자

정희철

INDEX

- 1. 이상치탐지
- 2. 논문 소개
- 3. HDoutliers
- 4. Stray Algorithm

1

이상치탐지

1 이상치탐지

이상치탐지란?

정상 데이터 또는 데이터의 절대 다수가 가지는 패턴과 상이한 패턴을 가진 데이터를 판별

다양한 분야 적용가능

제조 - 공장 불량품 탐지 금융 - 이상 거래 탐지

안전 - CCTV 의료 – 질병 탐지

이상치탐지란?

정상 데이터 또는 데이터의 절대 다수가 가지는 패턴과 상이한 패턴을 가진 데이터를 판별

다양한 분야 적용가능

제조 - 공장 불량품 탐지 금융 - 이상 거래 탐지

안전 - CCTV

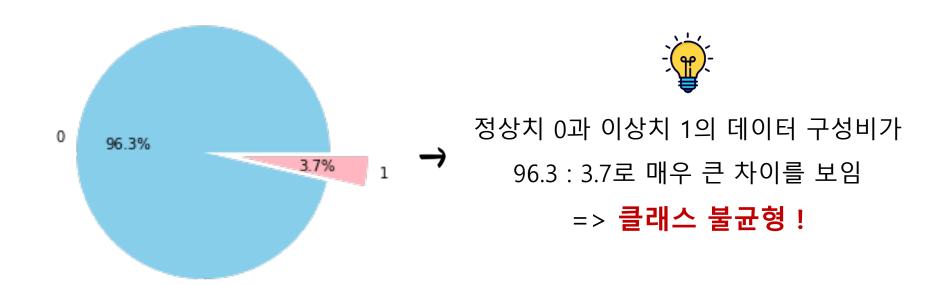
의료 – 질병 탐지

1 이상치탐지

이상치탐지의 필요성

클래스 불균형

어떤 범주형 변수의 각 수준이 가지고 있는 데이터의 양에 큰 차이가 있는 경우



이상치탐지의 필요성



클래스 비율의 차이가 크다면?

1

우세한 클래스만으로 예측하여도 정확도 자체는 높게 나타남

1

모델의 성능을 판별하기 어려움!

2

논문 소개

Anomaly Detection in High Dimensional Data

기존 고차원 이상치탐지 알고리즘인 HDoutliers의 단점을 개선시킨 Stray Algorithm 소개 및 패키지 배포

Anomaly Detection in High Dimensional Data

Priyanga Dilini Talagala^{1,3,4}

and

Rob J. Hyndman^{1,3} and

Kate Smith Miles

¹Department of Econometrics and Business Statistics, Monash Universit

Australia

²School of Mathematics and Statistics, University of Melbourne, Australia ³ARC Centre of Excellence for Mathematics and Statistical Frontiers (ACEMS)

Australia

⁴Department of Computational Mathematics, University of Moratuwa, Sri Lanka

Corresponding author Priyanga Dilini Talagala priyangad@uom.lk

Abstract

The HDoutliers algorithm is a powerful unsupervised algorithm for detecting anomalies in high-dimensional data, with a strong theoretical foundation. However, it suffers from some limitations that significantly hinder its performance level, under certain circumstances. In this article, we propose an algorithm that addresses these limitations. We define an anomaly as an observation where its k-nearest neighbour distance with the maximum gap is significantly different from what we would expect if the distribution of k-nearest neighbours with the maximum gap is in the maximum domain of attraction of the Gumbel distribution. An approach based on extreme value theory is used for the anomalous threshold calculation. Using various synthetic and real datasets, we demonstrate the wide applicability and usefulness of our algorithm, which we call the stray algorithm. We also demonstrate how this algorithm can assist in detecting anomalies present in other data structures using feature engineering. We show the situations where the stray algorithm outperforms the HDoutliers algorithm both in accuracy and computational time. This framework is implemented the open source R package stray.

- Priyanga Dilini Talagala
- Department of Econometrics and Business Statistics, Monash University (Australia)
- School of Mathematics and Statistics, University of M elbourne (Australia)
- Department of Computational Mathematics, Universit y of Moratuwa (Sri Lanka)

3

HDoutliers Algorithm

"Visualizing Big Data Outliers through Distributed Aggregation"

거리기반 이상치탐지 기법으로 차원에 상관없이 1차원 문제로 축소시켜 직관적



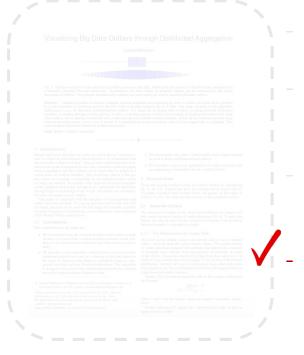
Leland Wilkinson (2017)

- Department of Computer Science, University of Illinois , Chicago
- Version 1 : 각 점마다 nearest neighbor distance를 계 산하여 이상치탐지
- Version 2 : 선제적으로 클러스터링을 진행하여 각 클러 스터마다 대표점을 산출하고, 대표점들만을 사용하여 nearest neighbor distance로 이상치탐지

"\ /i.c. 1.0

"Visualizing Big Data Outliers through Distributed Aggregation"

거리기반 이상치탐지 기법으로 차원에 상관없이 1차원 문제로 축소시켜 직관적



- Leland Wilkinson (2017)
- Department of Computer Science, University of Illinois, Chicago
- Version 1 : 각 점마다 nearest neighbor distance를 계산하여 이상치탐지
- Version 2 : 선제적으로 클러스터링을 진행하여 각 클러스터마다 대표점을 산출하고, 대표점들만을 사용하여 nearest neighbor distance로 이상치탐지

HDoutliers Algorithm의 문제점

1

오직 nearest neighbor distance만을 사용하여 이상치탐지

2

대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추기

3

Anomalous Threshold 계산 과정에서 FN rate을 증가시키는 경향이 있음

HDoutliers Algorithm의 문제점

1

오직 nearest neighbor distance만을 사용하여 이상치탐지

2

대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추가

3

Anomalous Threshold 계산 과정에서 FN rate을 증가시키는 경향이 있음

HDoutliers Algorithm의 문제점

1

오직 nearest neighbor distance만을 사용하여 이상치탐지

2

대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추가

3

Anomalous Threshold 계산 과정에서 FN rate을 증가시키는 경향이 있음

HDoutliers Algorithm의 문제점

1

오직 nearest neighbor distance만을 사용하여 이상치탐지

필요한 가정: Isolated Anomalies

- "정상치와 이상치 간의 거리는 멀다" 가정이 충족되어야 함
- 해당 가정 하에, 이상치는 nearest neighbor distance가 매우 큼 (threshold에 관해서는 추후 설명)
- 특정 Representative Point가 nearest neighbor distance가 threshold 보다 크다면 anomalous point로 간주하고, 해당 Representative Point 가 포함된 클러스터 전체가 anomalous points로 판별

오직 nearest neighbor distance만을 사용하여 이상치탐지

필요한 가정 : Isolated Anomalies

- "정상치와 이상치 간의 거리는 멀다" 가정이 충족되어야 함
- 해당 가정 하에, 이상치는 nearest neighbor distance가 매우 큼 (threshold에 관해서는 추후 설명)
- 특정 Representative Point의 nearest neighbor distance가 threshold 보다 크다면 이상치로 간주하고, 해당 Representative Point가 포함된 클러스터 전체가 이상치로 판별

HDoutliers Algoritt(유) 문제점 "파생되는 문제점

오직 nearest neighbor distance만을 사용하여 이상치탐지

2개 이상의 이상치 클러스터들이 서로 가깝게 형성

- 되어 있다면, 이들 간의 nearest neighbor distance가.
 - 작게 산출되면서 정상 클러 스터로 한 별이야함
- 해당 가정 하에, 이상치는 nearest neighbor distance가 매우 큼 (threshold에 관해서는 추후 설명)
- 특정 Representative Point가 nearest neighbor distance가 threshold 보다 크다면 anomalous point로 간주하고, 해당 Representative Point 가 포함된 클러스터 전체가 anomalous points로 판별

HDoutliers Algorit^(교) 문제점 1 **- 사생되는 문제점**

오직 nearest neighbor distance만을 사용하여 이상치탐지

2개 이상의 이상치 클러스터들이 서로 가깝게 형성

- 되어 있다면, 이들 간의 hearest neighbor distance가
 - 작게 사출되면서 정상 클러스터로 한별이야함



HDoutliers Algorithm의 문제점

2

대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추가

알고리즘 진행 과정

- 선제적으로 클러스터링 진행
- 각 클러스터에서 Representative Points 추출
- Representative Points들 간의 nearest neighbor distances들을 계산

HDoutliers Algorithm의 문제점

2

대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추가

알고리즘 진행 과정

- 선제적으로 클러스터링 진행
- 각 클러스터에서 Representative Points 추출
- Representative Points들 간의 nearest neighbor distances들을 계산

HDoutliers Algoritt(유) 문제점 "파생되는 문제점

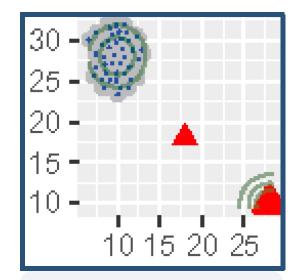
대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추가

- (1) 클러스터링과 Representative Points, 그리고 threshold를
 - 계산하는 과정에서 데이터의 density 특징을 완전히 무시
- "정상치와 이상치 간의 거리는 멀다" 가정이 충족되어야 함 (2) 차원이 늘어날 때마다 연산량이 지수적으로 증가 해당 가정 하에, 이상치는 nearest neighbor distance가 매우 큼 (threshold에 관해서는 추후 설명)
 - 특정 Representative Point가 nearest neighbor distance가 threshold 보다 크다면 anomalous point로 간주하고, 해당Representative Point가 포함된 클러스터 전체가 anomalous points로 판별

대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추가

예시 설명

- 좌상단, 우하단 클러스터에 각 각 1000개의 관측치 할당
- 이상치 클러스터에 1개 할당
- 앞서 설명한 알고리즘을 사용하 면 우하단 클러스터는 1000개 의 관측치가 있음에도 이상치로 판별됨 (Bimodal)



정상: 좌상단, 우하단

이상치 : 중앙

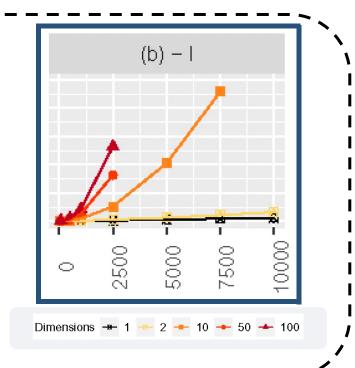
대표점 산출을 위한 중간 클러스터링 과정 추가

예시 설명

- X축 : Sample Size

- Y축: Running Time (miliseconds)

- 같은 Sample Size에서 차원이 높 을수록 연산시간이 지수적으로 높아짐을 확인 가능



Anomalous Threshold 계산 과정에서

FN rate을 증가시키는 경향이 있음

Anomalous Threshold

Weissman's Spacing Theorem 사용

Weissman's Spacing Theorem:

- 어떤 분포 F로부터 독립적으로 X_i 's들을 추출하고, $X_{i:n}$ 을 순서통계량으로 정
- $D_{j,n} = X_{j:n} X_{j+1:n}$, j = 1, 2, ..., k 로 정의
- 이때, F가 maximum domain of attraction of the Gumbel Distribution에 속 한다면, $D_{i,n}$ 's들은 근사적으로 독립이며, 기대값이 $E(D_{j,n}) \propto j^{-1}$ 인 Exponential Distribution을 따름

Anomalous Threshold 계산 과정에서 FN rate을 증가시키는 경향이 있음

Anomalous Threshold

Weissman's Spacing Theorem 사용

Weissman's Spacing Theorem:

- 이 때, F가 maximum domain of attraction of the Gumbel Distribution에 속

Maximum Domain of Attraction (MDA)

다음과 같은 Cumulative Distribution Function F를 MDA라고 정의함

Anomalous Threshold

 \rightarrow There exists sequences of constants, C_n and D_n with $C_n > 0$ for all n, such

that
$$\lim_{n\to\infty} P(\frac{M_n - D_n}{C_n} \le x) = \lim_{n\to\infty} P(M_n - D_n \le C_n x)$$

Weissman's Spacing Theorem:

$$\lim_{n\to\infty} F^n(C_n x + D_n) = H(x), \text{ where } M_n = \max(X_i)$$

maximum domain of attraction

한다면, $D_{i,n}$ 's들은 근사적으로 독립이며, 기대값이 $E(D_{i,n}) \propto i^{-1}$ 인

Maximum Domain Attraction (MDA)

다음과 같은 Cumulative Distribution F를 ction F를 MDA라고 정의함

- \rightarrow There exists see Fisher-Tippet Theorem에 의해 H(x)는
 - that lim P(Gumbel, Frechet, Weibull Family 하나가 됨

- 즉, maximum을 적당한 C_n , D_n 로 scaling해주면 위 3개 중 하나로 수렴함. $F^n(C_n x + D_n) = H(x)$, where $M_n = \max(X_i)$

HDoutliers Algorithm의 문제점

Maximum Domain Attraction (MDA)

다음과 같은 Cumulative Distribution F를 ction F를 MDA라고 정의함

```
ightarrow There exists see Fisher-Tippet Theorem에 의해H(x)는 for all n, such that \lim_{x \to \infty} P(\frac{\mathbf{Gumbel}}{\mathbf{Gumbel}}) Frechet, Weibull Family 하나가 됨
```

Weissman's Spacing Theorem

- 즉, maximum을 적당한 C_n , D_n 로 scaling해주면 위 3개 중 하나로 수렴함. $\lim_{n\to\infty}F^n(C_n|x|+D_n)=H(x)$, where $M_n=\max(X_i)$

maximum domain of attraction

식 유도

Assumption : $D_{i,n} \sim Exp(\lambda i)$

$$\Rightarrow f(D_{i,n} \mid \lambda) = (\lambda i) \exp[-(\lambda i)D_{i,n}]$$

$$\rightarrow l(\lambda|D_{1,n},...,D_{k,n}) = (k-1)\log(\lambda) + \sum_{i=2}^{k}\log(i) - \sum_{i=2}^{k}(\lambda i)D_{i,n}$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial \lambda} l(\lambda | D_{1,n}, \dots, D_{k,n}) = \frac{k-1}{\lambda} - \sum_{i=2}^{k} (i) D_{i,n}$$

→ By the MLE,

$$\widehat{\lambda^{-1}} = \frac{1}{k-1} (\sum_{i=2}^{k} (i) D_{i,n})$$

Then, let t be the anomalous threshold, i.e., $P(D_{1,n} \le t) = 1 - \alpha$

$$\rightarrow P(D_{1,n} \le t) = 1 - \exp(-\lambda t) = 1 - \alpha$$

$$\rightarrow \exp(-\lambda t) = \alpha$$

$$\rightarrow t = \frac{1}{\lambda} \log(\frac{1}{\alpha})$$

→ By the Invariance property of MLE,

$$\hat{t} = \{\frac{1}{k-1} \left(\sum_{i=2}^{k} (i) D_{i,n} \right) \} \log(\frac{1}{\alpha})$$

식 유도

Assumption : $D_{i,n} \sim Exp(\lambda i)$

$$\rightarrow f(D_{i,n} | \lambda) = (\lambda i) \exp[-(\lambda i)D_{i,n}]$$

$$\rightarrow l(\lambda | D_{1,n}, ..., D_{k,n}) = (k-1)\log(\lambda) + \sum_{i=2}^{k} \log(i) - \sum_{i=2}^{k} (\lambda i) D_{i,n}$$

$$\rightarrow \frac{\partial}{\partial \lambda} l(\lambda | D_{1,n}, \dots, D_{k,n}) = \frac{k-1}{\lambda} - \sum_{i=2}^{k} (i) D_{i,n}$$

 \rightarrow By the MLE,

$$\widehat{\lambda}^{-1} = \frac{1}{k-1} (\sum_{i=2}^{k} (i) D_{i,n})$$

Then, let t be the anomalous threshold, i.e., $P(D_{1,n} \le t) = 1 - \alpha$

$$\rightarrow P(D_{1,n} \le t) = 1 - \exp(-\lambda t) = 1 - \alpha$$

$$\rightarrow \exp(-\lambda t) = \alpha$$

$$\rightarrow t = \frac{1}{\lambda} \log(\frac{1}{\alpha})$$

→ By the Invariance property of MLE,

$$\hat{t} = \{\frac{1}{k-1} \left(\sum_{i=2}^{k} (i) D_{i,n} \right) \} \log(\frac{1}{\alpha})$$

3

Anomalous Threshold 계산 과정에서 FN rate을 증가시키는 경향이 있음

Anomalous Threshold

```
(EX)

Nearest Neighbor Distance for each \overrightarrow{P_i}:

P_i: P_a \Rightarrow \text{distance} = 2 = X_1

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_2

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_2

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_2

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_4

P_a: P_a \Rightarrow \text
```

HDoutliers를 사용하게 되면 threshold가 커지면서 FN이 증가

3

Anomalous Threshold 계산 과정에서 FN rate을 증가시키는 경향이 있음

Anomalous Threshold

```
(EX)

Neares| Veighbor Distance for each P_i:

P_i: P_a \Rightarrow \text{distance} = 2 = X_1

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_2

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_2

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_2

P_a: P_a \Rightarrow \text{distance} = 1 = X_4

P_a: P_a \Rightarrow \text{di
```

HDoutliers를 사용하게 되면 threshold가 커지면서 FN이 증가

4

STRAY ALGORITHM

알고리즘의 특징

- (1) 빠른 연산으로 실시간 적용가능
- (2) KNN을 활용해 masking problem에 효과적으로 대응
- (3) Multimodal distribution을 따르는 데이터에도 효과적
- (4) 이진분류는 물론 anomalous score를 함께 제공

알고리즘의 특징 HDoutlier로부터의 개선점

- (1) 빠른 연산으로 실시간 적용가능
- (1) NN distance \rightarrow KNN distance with the maximum gap
 - (2) KNN을 활용해 masking problem에 효과적으로 대응
- (2) 중간 clustering단계가 생략되어 연산속도 증가
- (3) Multimodal distribution을 따르는 데이터에도 효과적 (3) 분류 only > 분류 및 anomalous score 제공
 - (4) 이진분류는 물론 anomalous score를 함께 제공

알고리즘 과정

1

정규화: min-max (수치형), correspondence (범주형)

2

각 점들에 대해 KNN with the maximum gap 계산 및 순서 정렬

- 3 하위 50%의 순서통계량에 한해서 Spacing Theorem으로 threshold 계산
- 4
- 상위 50%의 순서통계량에 오름차순으로 threshold와 비교
- \hat{t} 보다 작으면 정상으로 분류, \hat{t} 보다 크면 해당 통계량 포함 하여 위의 나머지를 모두 이상치로 분류

알고리즘 과정

1

정규화: min-max (수치형), correspondence (범주형)

Correspondence Analysis

- 다변량 통계기법 중 하나로, 개념적으로 PCA와 유사
- 단, PCA는 수치형 자료에, CA는 범주형 자료에 사용



모두 0~1 사이의 값을 가지게 정규회

알고리즘 과정

1

정규화: min-max (수치형), correspondence (범주형)

Correspondence Analysis

- 다변량 통계기법 중 하나로, 개념적으로 PCA와 유사
- 단, PCA는 수치형 자료에, CA는 범주형 자료에 사용



모두 0~1 사이의 값을 가지게 정규화

알고리즘 과정

2

각 점들에 대해 KNN with the maximum gap 계산 및 순서 정렬

KNN with the Maximum Gap

- K개의 가장 가까운 점을 구하고, 이 거리들의 차이를 계산
- 거리들의 차이값 중 가장 차이가 많이 나는 값으로 정의



Masking problem에 효과적으로 대처함과 동시에 HDoutliers의 문제점이었던 높은 threshold에도 효과적으로 대응

알고리즘 과정

2

각 점들에 대해 KNN with the maximum gap 계산 및 순서 정렬

KNN with the Maximum Gap

- K개의 가장 가까운 점을 구하고, 이 거리들의 차이를 계산
- 거리들의 차이값 중 가장 차이가 많이 나는 값으로 정의



Masking problem에 효과적으로 대처함과 동시에 HDoutliers의 문제점이었던 높은 연산시간에도 효과적으로 대응 (real-time data에도 적용가능)

알고리즘 과정

하위 50%의 순서통계량에 한해서 Spacing Theorem으로 threshold 계산



- HDoutliers의 문제점이었던 높은 threshold에 효과적으로 대응 - Threshold를 적절하게 산정하면서 FN rate을 낮춤
- 상위 50%의 순서통계량에 오름차순으로 threshold와 비교
- \hat{t} 보다 작으면 정상으로 분류, \hat{t} 보다 크면 해당 통계량 포함 하여 위에 나머지를 모두 이상치로 분류



- Multimodal Distribution에도 효과적으로 작동
 - Anomalous scores도 제공하여 해석 가능

알고리즘 과정

하위 50%의 순서통계량에 한해서 Spacing Theorem으로 threshold 계산



- HDoutliers의 문제점이었던 높은 threshold에 효과적으로 대응 - Threshold를 적절하게 산정하면서 FN rate을 낮춤
- 상위 50%의 순서통계량에 오름차순으로 threshold와 비교
- \hat{t} 보다 작으면 정상으로 분류, \hat{t} 보다 크면 해당 통계량 포함 하여 위에 나머지를 모두 이상치로 분류



- Multimodal Distribution에도 효과적으로 작동 - Anomalous scores도 제공하여 해석 가능

알고리즘 과정

하위 50%의 순서통계량에 한해서 Spacing Theorem으로 threshold 계산



- HDoutliers의 문제점이었던 높은 threshold에 효과적으로 대응 - Threshold를 적절하게 산정하면서 FN rate을 낮춤

4

- 상위 50%의 순서통계량에 오름차순으로 threshold와 비교
- \hat{t} 보다 작으면 정상으로 분류, \hat{t} 보다 크면 해당 통계량 포함 하여 위에 나머지를 모두 이상치로 분류



- Multimodal Distribution에도 효과적으로 작동 - Anomalous scores도 제공하여 해석 가능

알고리즘 과정

하위 50%의 순서통계량에 한해서 Spacing Theorem으로 threshold 계산



- HDoutliers의 문제점이었던 높은 threshold에 효과적으로 대응 - Threshold를 적절하게 산정하면서 FN rate을 낮춤

4

- 상위 50%의 순서통계량에 오름차순으로 threshold와 비교
- \hat{t} 보다 작으면 정상으로 분류, \hat{t} 보다 크면 해당 통계량 포함 하여 위에 나머지를 모두 이상치로 분류



- Multimodal Distribution에도 효과적으로 작동
 - Anomalous scores도 제공하여 해석 가능

알고리즘 과정

하위 50%의 순서통계량에 한해서 Spacing Theorem으로 threshold 계산



- HDoutliers의 문제점이었던 높은 threshold에 효과적으로 대응 - Threshold를 적절하게 산정하면서 FN rate을 낮춤
- 상위 50%의 순서통계량에 오름차순으로 threshold와 비교
- \hat{t} 보다 작으면 정상으로 분류, \hat{t} 보다 크면 해당 통계량 포함 하여 위에 나머지를 모두 이상치로 분류



- Multimodal Distribution에도 효과적으로 작동
 - Anomalous scores도 제공하여 해석 가능

감사합니다