# Машинное обучение

Лекция 13

Поиск аномалий

Ковалев Евгений

НИУ ВШЭ, 2020

### План

• Несбалансированные данные

• Оценка качества и построение качественных моделей на несбалансированных выборках

• Методы балансировки данных

Несбалансированные данные

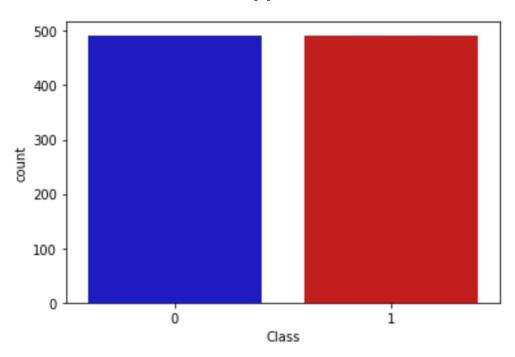
# Задача классификации

• Посмотрим на баланс классов:

# Задача классификации

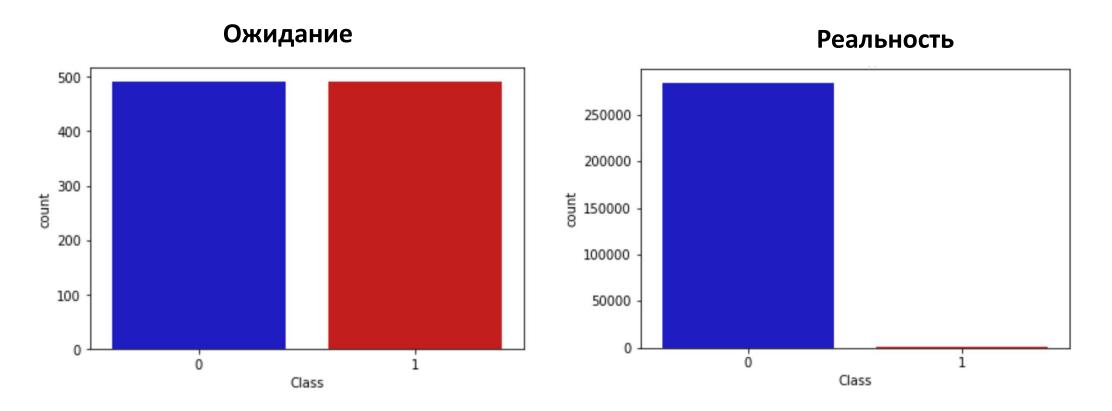
• Посмотрим на баланс классов:

#### Ожидание



# Задача классификации

• Посмотрим на баланс классов:



### 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)

• Определение дефектных деталь на производстве

• Вы построили модель, которая корректно определяет, дефектная ли деталь, в 99.9% случаев

• Хорошая ли это модель?

• Определение дефектных деталь на производстве

• Вы построили модель, которая корректно определяет, дефектная ли деталь, в 99.9% случаев

• Хорошая ли это модель?

• Ответ: необязательно.

- Хороший случай:
  - 30% деталей дефектны
  - 70% деталей не дефектны
- Модель, которая дает 99.9% правильных ответов вполне осмысленная

- 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!

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

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

• Что значит сильно больше?

• 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

• 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

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

- $(x_i, y_i)$  наблюдения и метки классов
- $\ell$  общее число наблюдений
- *a* классификатор

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

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

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

• Хорошая ли это модель?

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

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

- Хорошая ли это модель?
- Ответ: в терминах ассuracy да, в терминах бизнеса нет

- 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

• Алгоритму удобно предсказывать мажоритарный класс для всех наблюдений

• Мы должны изменить процедуру обучения и/или метрику качества

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

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

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

- 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

- 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?

- 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.

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

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

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

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

- 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

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

•  $F_{eta}$ -мера является взвешенной версией F-меры, где можно сделать больший акцент на точность либо полноту

$$F_{\beta}$$
 – score =  $(1 + \beta^2) \frac{\text{precision} \times \text{recall}}{\beta^2 \times \text{precision} + \text{recall}}$ 

# 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  |

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

$$precision = 0.8$$

$$recall = 0.4$$

$$precision = 0.8$$

$$recall = 0.4$$

# Balanced accuracy

• True Positive Rate (полнота):

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

• True Negative Rate (специфичность):

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

# Balanced accuracy

• Balanced accuracy — это среднее TPR and TNR

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

# Balanced accuracy

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

$$TPR = 0.4$$
$$TNR \approx 0.9999$$

Balanced accuracy  $\approx 0.7$ 

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

$$TPR = 0.4$$
$$TNR \approx 0.91$$

Balanced accuracy  $\approx 0.65$ 

### MCC

• Matthews correlation coefficient (MCC) — это сбалансированная метрика, которая отражает корреляцию между правильными ответами и предсказаниями

$$MCC = \frac{TP \times TN - FP \times FN}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}} \in [-1, 1]$$

## MCC

|           | 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     |

 $MCC \approx 0.566$ 

 $MCC \approx 0.362$ 

## Метрики качества ранжирования

• Пусть классификатор b(x) выдает вероятности принадлежности классам

• Подобрав порог t, можно построить следующий классификатор:

$$a(x) = sign(b(x) - t)$$

## Метрики качества ранжирования

ullet Значения точности и полноты зависят от порога t

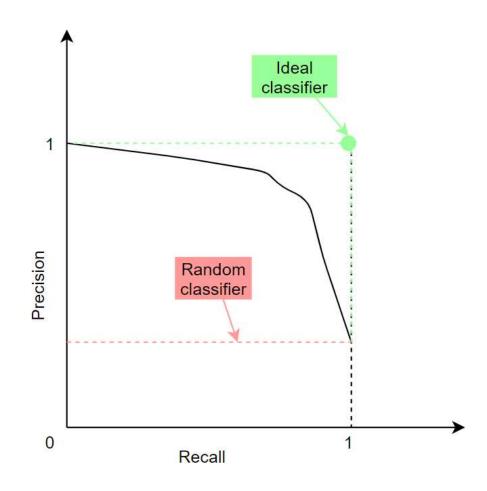
| y    | 1   | -1  | 1    | -1  | -1   | 1   | 1   |
|------|-----|-----|------|-----|------|-----|-----|
| b(x) | 0.1 | 0.2 | 0.25 | 0.4 | 0.45 | 0.7 | 0.9 |

- t = 0.3:
  - precision = 0.5
  - recall = 0.5
- t = 0.8:
  - precision = 1
  - recall = 0.25

# PR-кривая и AUC-PR

• При изменении t меняются значения точности и полноты

• AUC-PR — площадь под PR-кривой



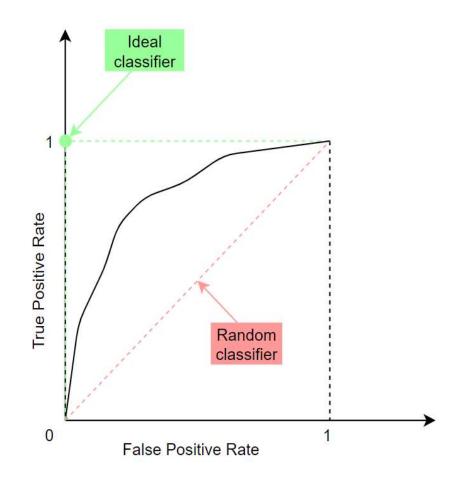
# ROC-кривая и AUC-ROC

ullet При изменении t меняются значения TPR и FPR

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

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

• 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 и MCC также учитывают True Negatives
- Метрики качества ранжирования: AUC-PR и AUC-ROC

Балансирование данных

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

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

• Функция потерь для логистической регрессии

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

- Функция потерь для логистической регрессии
- Класс 1: 10 наблюдений, класс -1: 10000 наблюдений

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

- Функция потерь для логистической регрессии
- Класс 1: 10 наблюдений, класс -1: 10000 наблюдений
- class\_weight = {1: 1000, -1: 1} (#negatives/#positives)

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

- Функция потерь для логистической регрессии
- Класс 1: 10 наблюдений, класс -1: 10000 наблюдений
- class\_weight = {1: 1000, -1: 1} (#negatives/#positives)

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

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

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

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

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

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

- Штраф за ошибку в положительном наблюдении:  $-1000 imes \log(z)$
- Штраф за ошибку в отрицательном наблюдении:  $-\log(1-z)$

- 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)

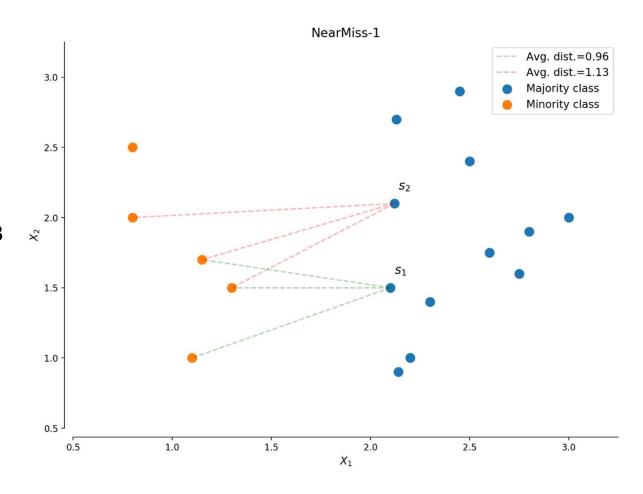
# Random undersampling

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

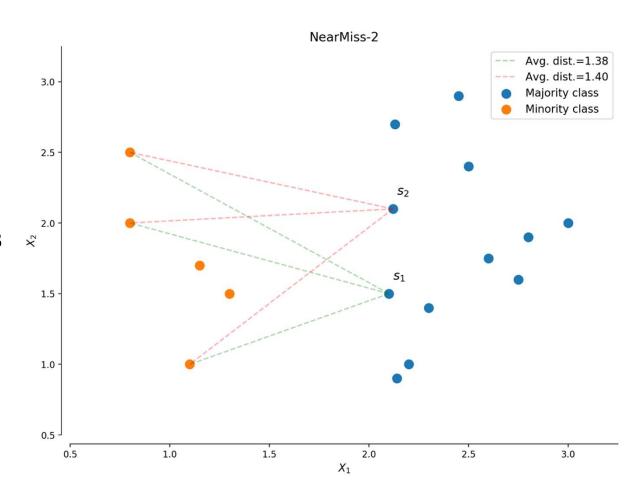
- Хотим контролировать процесс удаления объектов мажоритарного класса и сделать его менее случайным
- Будем использовать расстояния между объектами положительного и отрицательного классов
- Используем алгоритм kNN (k Nearest Neighbors) для определения близких и далеких объектов

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

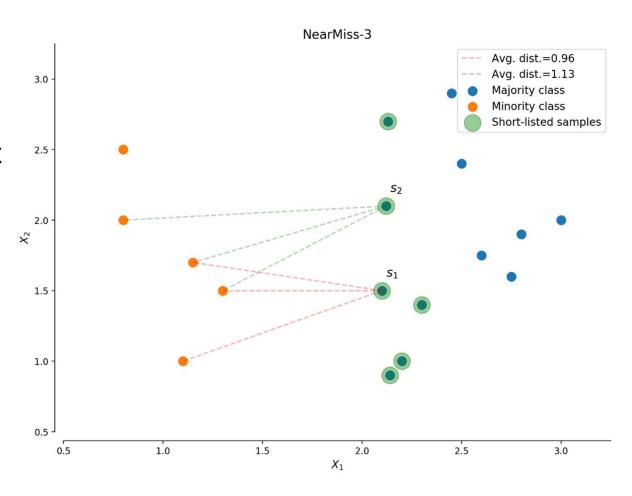
• Пример: M = #(minority class observations), k = 3



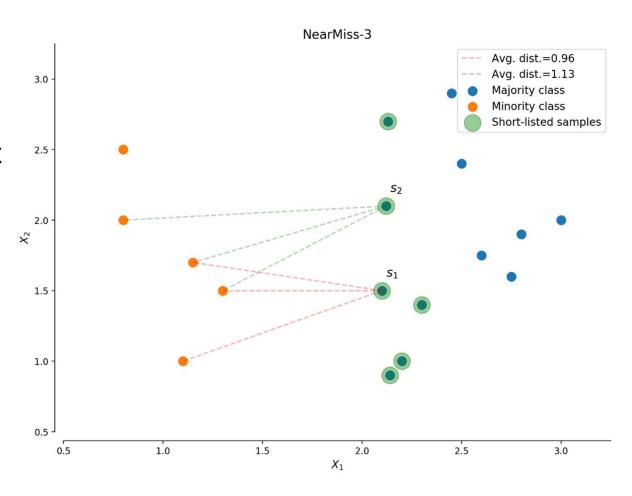
• Сохраняем *M* объектов мажоритарного класса, имеющих наименьшее среднее расстояние до *k* самых дальних объектов миноритарного класса



- 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



- 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



### Связи Томека

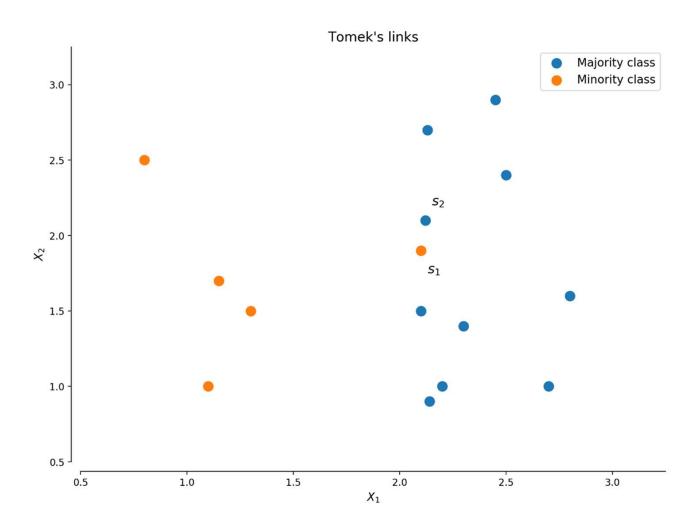
- Вместо сэмплирования напрямую, используем эвристики, которые позволят нам очистить данные
- Между объектами x и y разных классов существует **связь Томека**, если они являются ближайшими соседями друг друга:

$$\forall z$$
:  $d(x,y) < d(x,z)$  and  $d(x,y) < d(y,z)$ 

- z другой объект
- d(x, y) расстояние между x и y

### Связи Томека

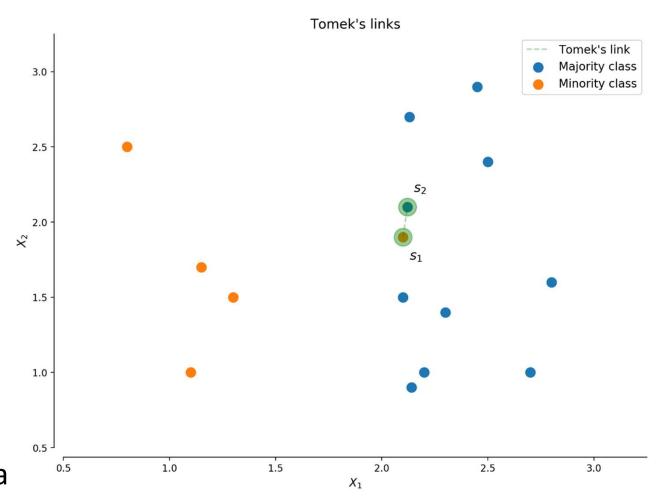
• Не хотим хранить избыточные объекты мажоритарного класса, которые находятся слишком близко к миноритарному классу



### Связи Томека

• Не хотим хранить избыточные объекты мажоритарного класса, которые находятся слишком близко к миноритарному классу

• Найдя связь Томека, мы можем либо удалить объект мажоритарного класса, либо оба объекта



## Oversampling

• Oversampling — это техника балансирования данных, при которой увеличивается число наблюдений миноритарного класса

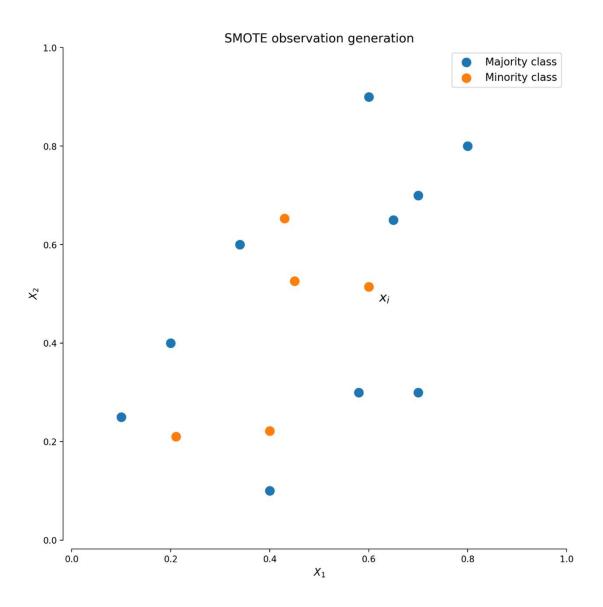
## Random oversampling

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

- SMOTE: 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:  $x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(M)}$
- **Шаг 3.** Для каждой пары  $(x_i, x_i^{(j)})$  сгенерировать новый объект:  $x_i^{(j)\prime} = x_i + \lambda \left(x_i^{(j)} x_i\right)$ ,

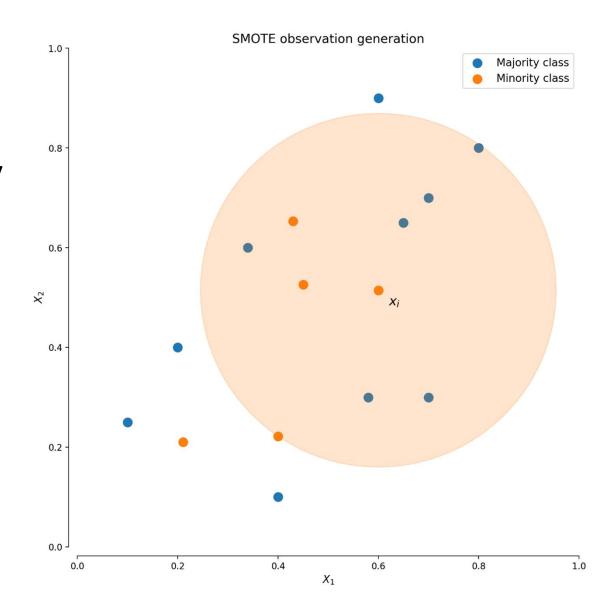
где  $\lambda \in [0,1]$  – случайное число.

• SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling TEchnique

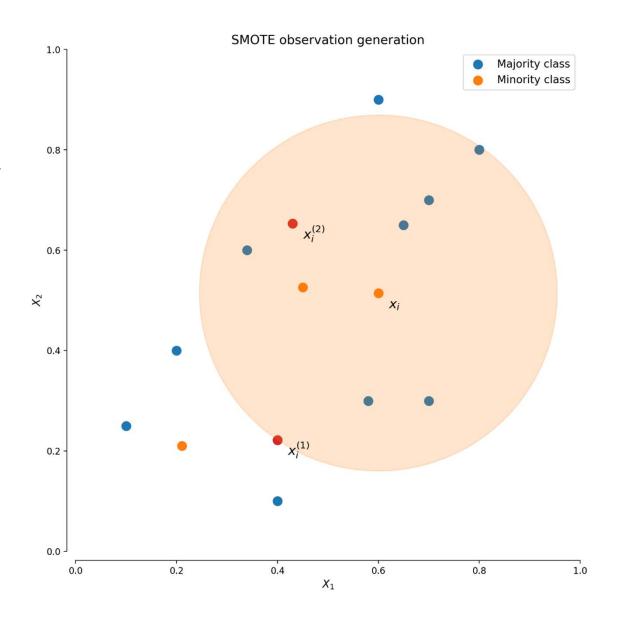


• SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

• Шаг 1. Ищем соседей

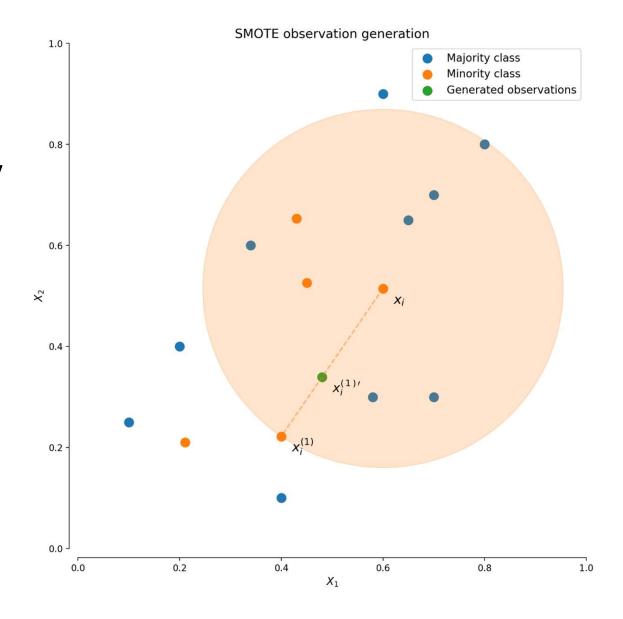


- SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique
- Шаг 1. Ищем соседей
- **Шаг 2.** Выбираем случайных соседей



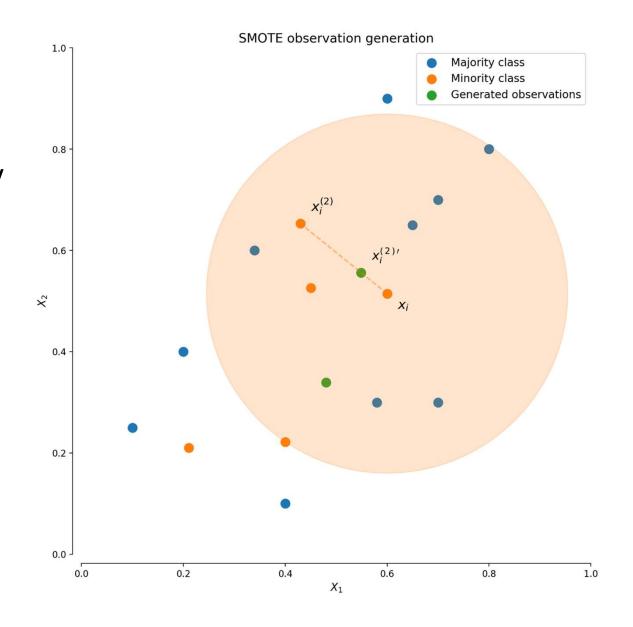
• SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

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



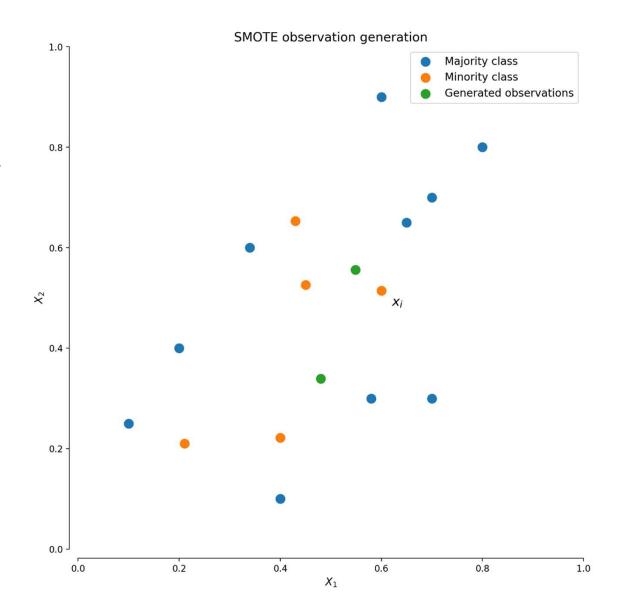
 SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

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



• SMOTE: Synthetic Minority Over-sampling Technique

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



#### **ADASYN**

ADASYN: ADAptive SYNthetic Sampling Approach

- SMOTE:
  - **Шаг 2.** Для каждого объекта  $x_i$  сгенерировать M новых наблюдений
- ADASYN:
  - Шаг 2. Для каждого объекта  $x_i$  сгенерировать  $g_i$  новых наблюдений

#### **ADASYN**

- $c_{
  m maj}$ ,  $c_{
  m min}$  число наблюдений мажоритарного/миноритарного классов
- $\beta \in [0,1]$  балансирующий параметр
- Общее число объектов, которые нужно сгенерировать:

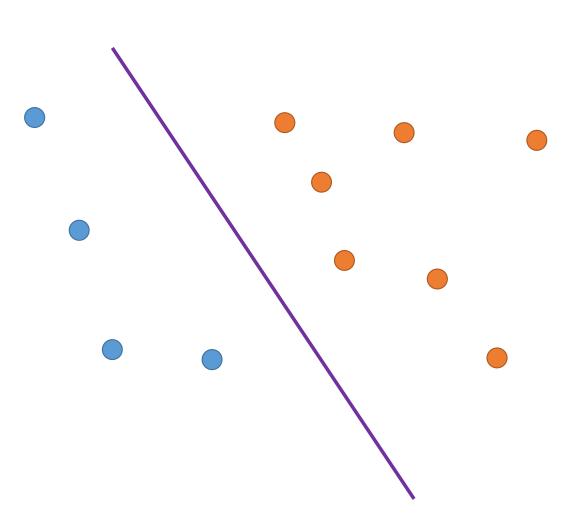
$$G = (c_{\text{maj}} - c_{\text{min}}) \times \beta$$

#### **ADASYN**

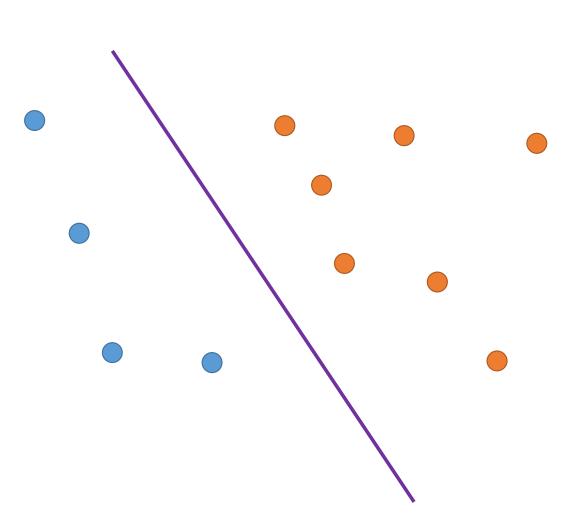
- $c_{
  m maj}$ ,  $c_{
  m min}$  число наблюдений мажоритарного/миноритарного классов
- $\Delta_i$  число соседей  $x_i$  мажоритарного класса
- G общее число объектов, которые нужно сгенерировать
- Число объектов, которые нужно сгенерировать для  $x_i$ :

$$g_i = \frac{\Delta_i}{\sum_{j=1}^{c_{\min}} \Delta_j} \times G$$

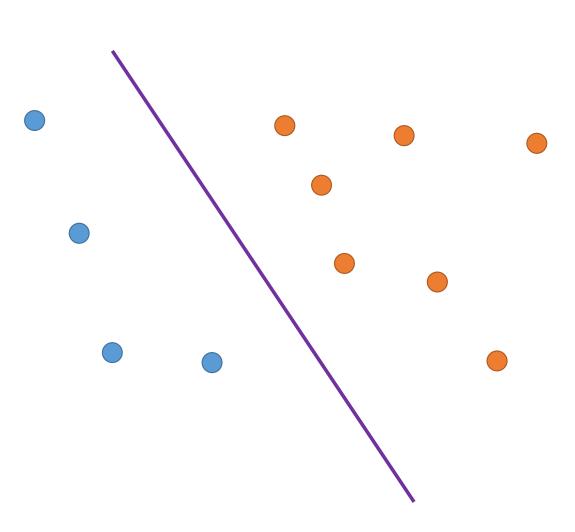
• Для моделей классификации очень важно выучить границу между классами



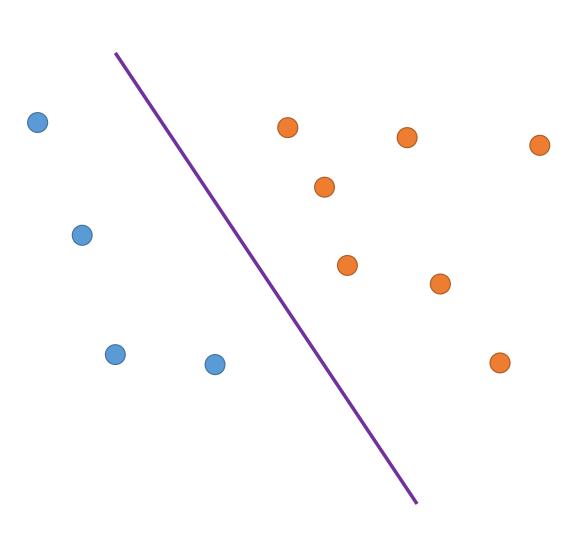
- Для моделей классификации очень важно выучить границу между классами
- Объекты около границ крайне важны



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



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



- 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

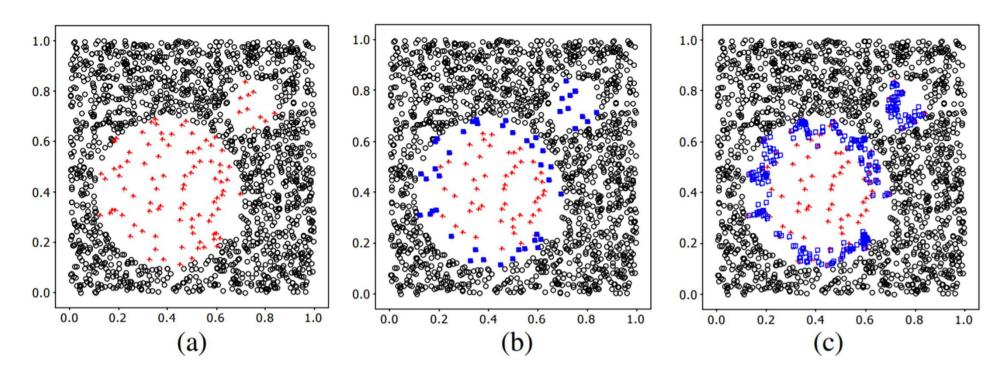
- Найти k ближайших соседей для каждого объекта  $x_i$  миноритарного класса
- Затем для каждого  $x_i$  вычислить  $k' \in [0, k]$  число соседей, принадлежащих к мажоритарному классу
- 1. Если k'=k, то  $x_i$  считаем шумом

- 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)

- 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)

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

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



**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*).

### SMOTE: другие вариации

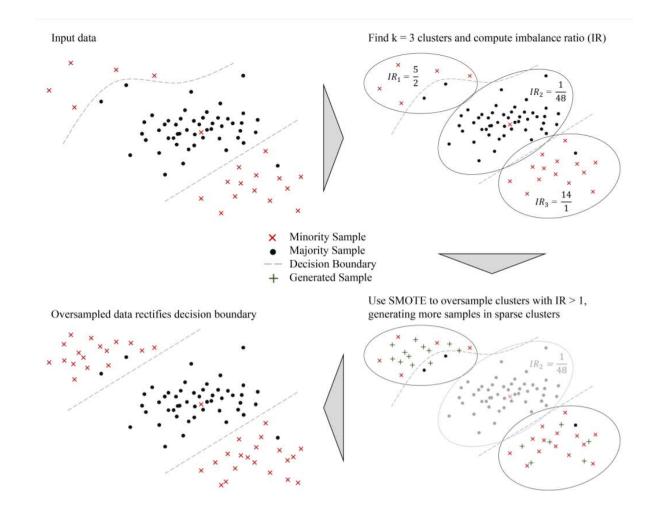
#### SVM SMOTE

- определить границы классов с помощью SVM
- сгенерировать объекты на основе опорных векторов

#### K-Means SMOTE

- кластеризовать объекты
- посчитать дисбаланс классов в кластерах
- сгенерировать объекты внутри кластеров с большим числом объектов миноритарного класса
- чтобы определить, сколько объектов сгенерировать, определить разреженность кластера

### K-Means SMOTE



• В обоих методах модифицируется обучающая выборка — не валидация/тест!

- 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**?

- В обоих методах модифицируется обучающая выборка не валидация/тест!
- Разбиение на фолды для кросс-валидации нужно делать **до** 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, связи Томека)
  - 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

### Определение аномалий

#### Популярные техники [править | править код]

В литературе было предложено несколько техник выявления аномалий<sup>[7]</sup>. Вот некоторые популярные техники:

- Техники, основанные на плотности (k-ближайшие соседи<sup>[8][9][10]</sup>, локальный уровень выброса<sup>[11]</sup>, изолирующие леса<sup>[12]</sup> и многие другие варианты этой концепции<sup>[13]</sup>).
- Обнаружение выбросов на основе подпространств<sup>[14]</sup> и на основе корреляции<sup>[15]</sup> для данных высокой размерности<sup>[16]</sup>.
- Метод опорных векторов для одного класса<sup>[17]</sup>.
- Репликатор нейронных сетей<sup>[18]</sup>.
- Байесовские сети<sup>[18]</sup>.
- Скрытые марковские модели (СММ) [18].
- Выявление выбросов на основе кластерного анализа[19][20].
- Отклонения от ассоциативных правил и часто встречающихся наборов.
- Выявление выбросов на основе нечёткой логики.
- Техника создания ансамблей, использующая бэггинг признаков<sup>[en][21][22]</sup>, усреднение оценки<sup>[23][24]</sup> и различение источников несхожести<sup>[25][26]</sup>.

Эффективность различных методов зависит от данных и параметров и имеют слабые систематические преимущества один перед другим, если сравнивать по многим наборам данных и параметров<sup>[27][28]</sup>.

https://ru.wikipedia.org/wiki/Выявление аномалий

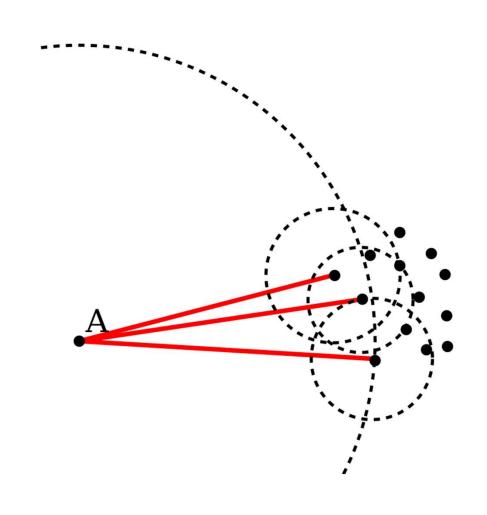
### Методы на основе kNN

- 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

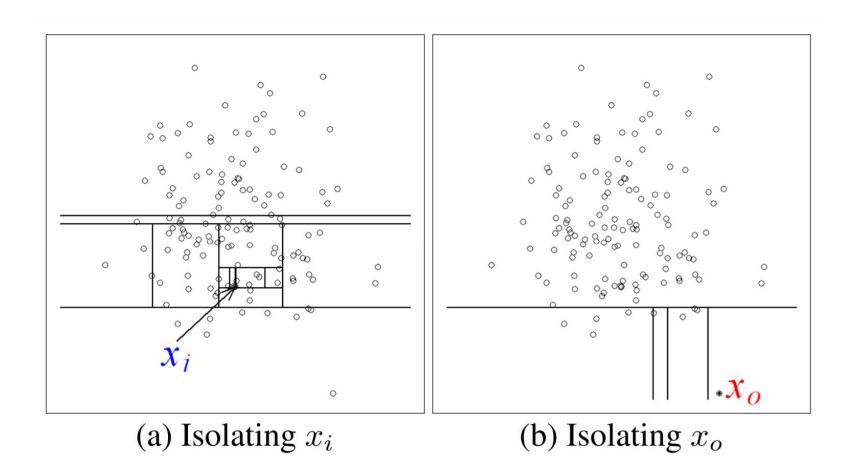
• Наблюдение аномально, если его локальная плотность намного меньше локальной плотности его ближайших соседей



### **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**



#### Резюме

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