1. 異常検知
   1. 概要

異常検知とは多数のデータから外れ値等の異常なパターンを検出することである．例として，図 1に時系列データにおける異常なパターンを示す．

図 1　時系列データにおける異常の例[1]

異常検知には上述の例のようにある特定のデータが他のデータと比較して大きく外れた位置に存在する場合や，特定のデータではなく，データの振る舞いが他のものと異なる場合等を検出する手法である．

本案件では武繁・中澤モデルへの応用を目的とし，学習データとテストデータの性質に変化があった場合に異常検知を用いて検出する手法をまとめる．

一般的な異常検知の手法は以下の通りである．

* 距離を用いた手法
  + - 正規分布のデータを仮定する手法

個々のデータが独立に単一の正規分布に従うと仮定したうえで，新しく得られたデータの異常度を計算し，それが閾値以上であればそのデータが異常であると判断する手法．

* + - 非正規データを仮定する手法

上述の正規分布を用いた方法において，ここのデータが独立に正規分布以外の分布に従うと仮定した場合の手法．

* 確率密度比を用いた手法
  + - 次元削減による手法

変数間に何らかの関係がある場合，次元削減により変数の座標とした多次元空間内の超平面を求め，その平面からの距離が閾値以上のデータが異常であると判断する手法．

本報告書の構成は以下の通りである

* 1. 手法の詳細
     1. 正規分布を仮定した方法

本節では，正規分布を仮定した方法のうち，特に有名なホテリングの法と呼ばれる手法について記載する．当該手法では，観測値を正規分布とみなし，新たに得た観測値が正規分布の仮定の下で得られる可能性が低い場合に異常値とする．

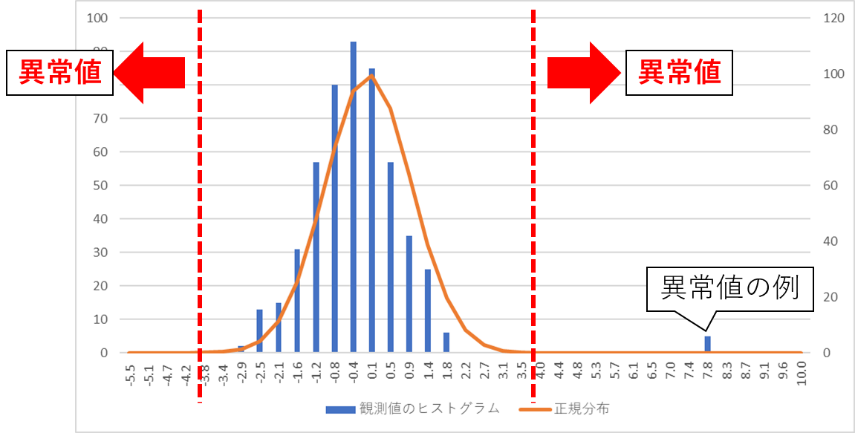


図 2　正規分布による異常検知のイメージ図

一つのデータが次元ベクトルである個のデータを考える． ホテリングの法ではこのデータが，異常標本を含まないか，含んでいたとしても圧倒的に少数であるという前提のもとで各データが独立に以下の多変量正規分布に従うと仮定する．

|  |  |
| --- | --- |
| ：単一のデータ  ：平均  ：共分散行列 | (1) |

上記の分布に含まれるパラメータを決めるための自然な方法として，最尤法[[1]](#footnote-1)が挙げられる．この方法によると，パラメータの推計値は以下の式で与えられる．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

次に，データの異常度を測る指標について述べる．異常度を測るデータを母集団分布からの独立標本を新たに観測したとすると，が得られる確率が低い場合は異常度が高く，確率が高い場合は異常度が低く算出されることが望ましいと考えられる．そのため，例えば以下の定義をすることができる[[2]](#footnote-2)．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

(2)式を代入すると異常度の算式が導ける．ただし，観測データに関係ない定数は無視した．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

(4)式はマハラノビス距離と呼ばれる．この距離はデータの相関を考慮したものである．図 **3**はユークリッド距離とマハラノビス距離について，それぞれ距離が2である等高線を示したものである．分散が大きい軸については距離の尺度が小さく，分散が小さい軸については距離の尺度が大きいことがわかる．



図 3　ユークリッド距離とマハラノビス距離の違い

異常検知のためには異常度の閾値が必要である．閾値を客観的な手法で決めることができれば，それを超える異常度をもつデータが異常であると判別することができる．

閾値を決定するため，異常度の確率分布を使用し，以下の算式に基づいて閾値を決める．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

は誤報率と呼ばれ，比較的小さな値に設定することで閾値が意味のある量になる．例えばを3%とすると，が以上の値をとる確率が3%となり，以上の異常値を持つデータはデータ全体から見れば異常であるという解釈ができる．

なお，実用上，ほとんどの場合はが成立するが，この場合，は近似的に自由度，スケール因子1のカイ２乗分布に従うことが知られている[[3]](#footnote-3)．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

以上の手法を武繁・中澤モデルに応用する場合，以下の手順で進める事が考えられる．

1. 予め決めているパーセント値に基づき，以下の方程式を満たすを算出

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

ここで，は自由度1，スケール因子1のカイ２乗分布である．

1. 学習データから標本平均と標本分散共分散行列を求める．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8) |

1. 新たな観測値に対して以下の式で異常度を計算する．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

1. であれば異常であるとし，パラメータを更新する．

複雑な系を考えた場合，次元数の値は数百から数千になることがある．この場合，上述の手法ではあるデータ自体が異常であると判定できても，そのデータを構成する各変数のうちどの変数が原因で異常となっているのかはわからない．以下で説明するマハラノビス=タグチ法では選択した変数に対応する異常度を計算することでこの課題に対応することができる[[4]](#footnote-4)．

当該手法では正常データが圧倒的多数だと信じられるデータセットと，異常と判明しているデータセットに対して以下の指標を計算する．

|  |  |
| --- | --- |
| ：選択した変数の集合  ：選択した変数の数  ：の分散共分散行列を使ったときの異常度 | (10) |

この指標はSN比と呼ばれる．上述の通り，変数の数が大きい場合，は期待値がのカイ2乗分布に従う．したがって，(10)の分子の1はの期待値を表すと考えることができる．SN比はこの1という値が正常値を表す基準値にとり，異常状態の1変数ああたりに異常度との比を計算していると考えられる．

例として，の場合を考える．この時，第変数が内のデータの異常度に大きく寄与しているとすると，真数の値が小さくなるため，SN比の値は大きくなる．したがって，SN比が大きくなるほどその変数の寄与度が大きいと考えられる．

* + 1. 非正規データを仮定する方法

前節ではデータが正規分布に従うという仮定の下での異常検知の方法を記載したが，本節ではデータが正規分布ではとらえきれない特徴を持つ場合の異常検知の方法として近傍法やカーネル密度推定に基づく方法を記載する．

近傍法ではk近傍法と近傍法の2種類が存在する．k近傍法はデータ点を中心とした球内のデータ数が基準値以下であれば異常なデータとみなし，近傍法は他のデータ点までの距離が基準値よりも大きい場合に異常なデータとみなす手法である．

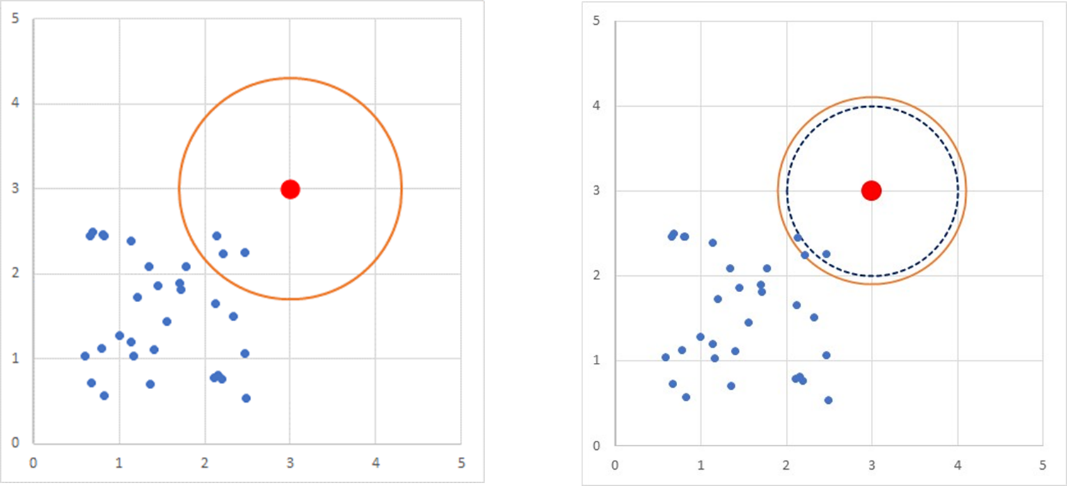


図 4　k近傍法と近傍法のイメージ図

以下では，次元データ個からなる武繁・中澤モデルの学習データを，新たに観測したデータの異常判定をする場合を考える．なお，には異常標本が含まれていないか，含まれていたとしても圧倒的少数だと信じられるとする．

* + - 近傍法

を中心とした次元の球を考える．この時，二つの近傍法による異常判定の手順は以下の通りである．

1. 近傍法
2. なんらかの方法で半径と近傍数の閾値を決める．
3. 新たな観測値に対して，半径の範囲に入るデータの数が閾値を下回ればは異常あるとみなし，パラメータを更新する．
4. 近傍法
5. なんらかの手法で近傍数と半径の閾値を決める．
6. 新たな観測値に対して，個のデータを球内に含むような最小の半径が閾値を上回れば，は異常あるとみなし，パラメータを更新する．

時系列データからの異常パターンの検出においては近傍法が主たる手法として使われる．また，特に高次元の場合にはデータセットが分布する全領域に妥当なやを決めるのは簡単ではなく，この点が実用上の困難となりうる．

使用する距離としては，ユークリッド距離のほかにマハラノビス距離・チェビシェフ距離が使われる．

* + - カーネル密度推定法

カーネル密度推定法は近傍法において，近傍に入るか否かという2値ではなく，着目する点からの距離に応じた判断に緩和することで使い勝手を向上させた手法である．

まず初めに，観測値とに含まれる観測値との間の類似度Ｋを導入し，学習データで平均をとった値をの確率密度とする．式で表すと(11)ようになる．

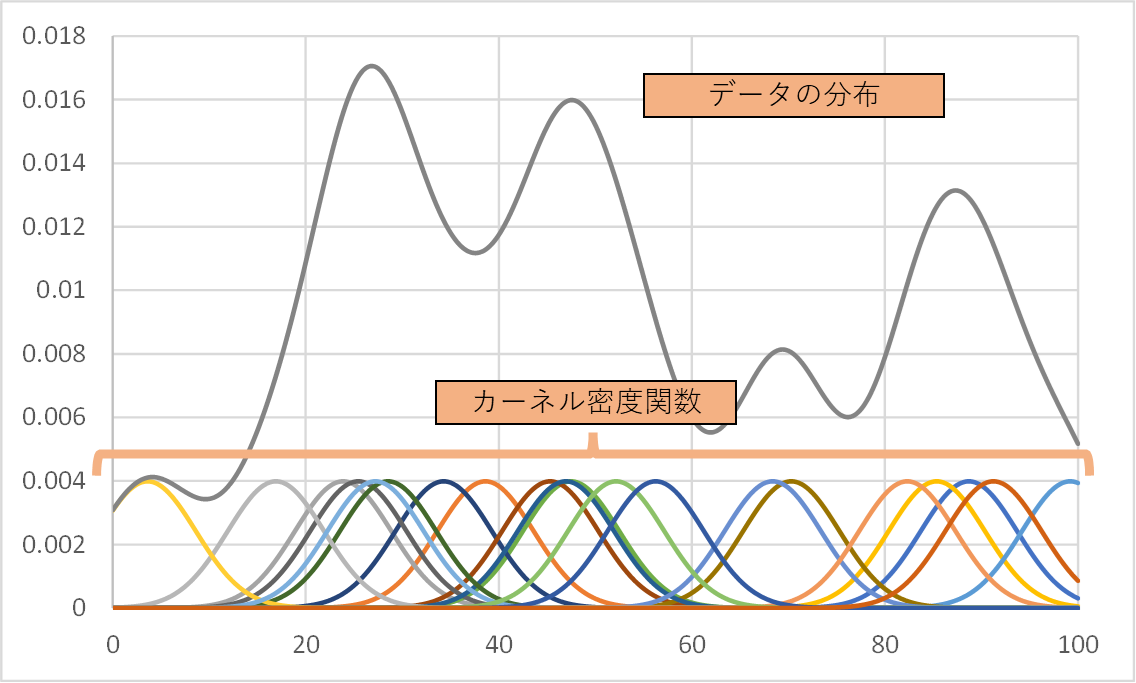


図 　カーネル密度法のイメージ．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

ここで，は類似度の到達距離を表すパラメータである．はを中心としてその周りの点にどれだけ影響を与えるかを表しており，一般に核関数またはカーネル関数と呼ばれる．

カーネル密度推定による異常検知では，まず初めにの推計を行う．基本的な手法としては以下の積分二乗誤差を最小化するように決める方法である．

|  |  |
| --- | --- |
| :真の確率密度 | (12) |

真の確率密度は実際には未知なので何らかの形で近似する必要がある．通常は以下のように近似することが多い．

|  |  |
| --- | --- |
| :真の確率密度 | (13) |

ここで，に含まれる式の内，未知のパラメータに依存しない部分は(定数)と記載した．

カーネル密度関数としてよく用いられるのは相関がない多変量正規分布である．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (14) |

この場合，の値は以下のように計算される．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15) |

以上の手法を武繁・中澤モデルに応用する場合，以下の手順で進める事が考えられる．

* 1. (15)を最小化するバンド幅を推計する．
  2. 推計したバンド幅を(11)に代入し，以下の算式よりデータの異常度を計測する．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16) |

* 1. が閾値以上であれば，異常値とみなす．

参考文献

1. 異常検知・変化検知
2. Taguchi，G．and Jugulum，R.: The Mahalanobis-Taguchi Strategy: A Pattern Technology System，Wiley（2002）

メモ（報告書には載せない）

という値が式中に現れることからわかる通り，が平均から離れると異常度は大きくなり直感的な異常度と整合的である．また，については各座標軸を標準偏差で割ることを意味している．これは，データをある一つの座標上の位置で見たとき，例え平均から離れていてもその座標上の標準偏差が大きければ異常とはみなさないことを意味する．これを具体例で示したものが**エラー! 参照元が見つかりません。**である．各データの縦軸の値は横軸の値より分散が小さい．例えば赤色のデータについて平均からの乖離という視点のみで異常度を判断すると，横軸の値は平均からの乖離が大きいため，異常と判断される可能性がある．しかしながら実際は異常といえるほどの乖離はない．これは横軸の値が平均から乖離していても，データのばらつき（＝標準偏差）が大きいためである．したがって，各軸の値を標準偏差で割り，ばらつきを揃える必要がある．



図 6　2次元データのイメージ図

**主成分分析について**

主成分分析とは，一般的に次元削減の手法の一つである．この手法では可能な限りデータのばらつきを維持できるよう，データを低次元で表現する．データの空間の中ではこのような低次元のデータは部分空間としてあらわされ，以下では正常部分空間と呼ぶ

主成分分析を用いることで，使用する変数を減らしたうえで，異常検知の手法を適用する事が考えられる．

1. 主成分分析による異常検知

まず初めに，正常部分空間を求める．なお，以下では，次元ベクトル個が標本としてのように与えられていると考え，その中には正常な標本しかないか，正常標本の割合が圧倒的多数であると信じられると仮定する．

標本平均ベクトル ，標本共分散行列 ，散布行列，データ行列およびを以下のように定義する．

|  |  |
| --- | --- |
| ただし，は中心化行列であり，要素がすべて1である次元ベクトルを用いて以下のように定義される． | (17) |

正常部分空間を求める方法としてここでは以下の3通りの方法を説明する．

1. 分散を最大化する方法

正常部分空間をで張られる次元空間とする．既定に含まれるベクトルをとしたとき，この正規直交基底の下でのデータの標本平均・標本分散は以下のようにあらわされる．

|  |  |
| --- | --- |
| ●標本平均  ●標本分散 | (18) |

したがって，分散を最大化するには以下の最適化問題を解く必要がある．

ラグランジュの未定乗数を用いると，ラグランジアンは

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19) |

となる．これをで微分することで得べき方程式を得る．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20) |

したがって，の固有ベクトルを求めることで正常部分空間の基底を求めることができる．なお，は主成分と呼ばれる．

1. ノルムを最大化する方法

を最大化するような長さ1の次元ベクトルを求めることで正常部分空間の基底を求める．すなわち，以下の最適化問題を解く．

分散を最大化する方法と同様に，ラグランジュの未定乗数法で解くことによって以下の式を得る．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21) |

1. 残差平方和を最小化する方法

を上に射影した際，得られるベクトルはで与えられる．このベクトルの長さを最小にすることで正常部分空間の基底を求める．すなわち，以下の最適化問題を解く．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (22) |

(1)(2)(3)の手法で得られる正常部分空間は同一の空間になる．(1)で使用している行列は行列であり，(2)で使用している行列は行列なので，使用するデータ数,変数の数の大小関係によって手法を変更する等の使い分けが考えられる．

1. 確率的主成分分析

確率的主成分分析では，通常の主成分分析とは異なり，データが正規分布に従う確率変数からサンプリングしたものであると仮定する．この方法をつかうことで，状況によっては通常の主成分分析と比較して効率よく計算ができる場合がある．また，通常の主成分分析では正常部分空間の次元を決めるための基準は定性的な経験則しかない一方で，確率主成分分析は対数尤度関数が明確に定義できるため，AICやBICなどの情報量基準を用いて正常部分空間の次元を決めることができる．

データの分布として，具体的には以下の式を仮定する．

|  |  |
| --- | --- |
| ：データベクトル（次元）  ：次元削減後のデータベクトル(次元)  ：次元の単位行列  ：モデルのパラメータ | (23) |

Ｗは行列でこの列空間が正常部分空間を表す．はの平均値，ばらつきを表すパラメータである．

当該手法ではをデータから推計し，の分布を求めたうえで距離ベースの異常検知手法を応用する．まずは，パラメータの推計について最尤法を説明する．

* について

ベイズの公式により，は以下の分布に従う.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (24) |

この分布をもとに，以下の対数尤度を最大化するを求める．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (25) |

結果として以下の式を得る．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26) |

* について

これらのパラメータについては上式のを微分して最大化することは容易ではない．したがって，対数尤度の近似式とパラメータ更新式を用いて求める．具体的には以下のステップを実行する．

1. パラメータの初期値を適当に与える．
2. 各データ点ごとに以下の量を計算する．

|  |  |
| --- | --- |
| ただし，Pは以下の式で定義する． | (27) |

1. 対数尤度の近似式を微分して得られる以下の更新式にしたがい，パラメータを更新

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28) |

1. ②③をパラメータが収束するまで繰り返す．
2. カーネル主成分分析

上述の手法は正常部分空間が平面であると仮定していた．一方で，本節のカーネル主成分分析は平面のような線形性を持つ空間ではなく，曲面のような非線形性を持つ空間を仮定することで，使用するデータに応じて柔軟な対応をすることができる．

当該手法では次元の標本個からなるデータをより次元の高い空間に写像することで，データの複雑な構造がより単純になることを期待する．そのため，本節ではデータが存在する次元空間のほかに次元空間と，この空間への写像(次元空間→次元空間)を考える．

変換後のデータをとすると，(21)式同様に以下の式が得られる．

|  |  |
| --- | --- |
| ただし，とする． | (29) |

この固有値方程式を解いて，固有値の大きい順から個の固有値と固有ベクトルの組を求めたとき，次元空間内の正常部分空間の基底は以下のように求められる．

|  |  |
| --- | --- |
| :次元空間における正常部分空間の番目の基底  :正常部分空間の基底を列ベクトルに持つ行列  :対角成分に固有値を持つ行列 | (30) |

なお，上式より，次元空間内のデータは正常部分空間において次のような次元ベクトルで表される．

|  |  |
| --- | --- |
| ただし， | (31) |

(29)式，(31)式を確認すると，関数よりもという関数が必要になる．この関数はカーネル関数と呼ばれ，正定値性等の数学的な条件を考慮して決める必要がある．頻繁に使用されるカーネル関数としては以下の通りである．

|  |  |
| --- | --- |
| ●RBFカーネル  ●多項式カーネル  ●ラプラスカーネル | (32) |

1. スパース主成分分析

主成分分析による次元圧縮では，寄与率が大きい成分によって特徴量が持つ情報の大半を説明できれば解釈しやすい．しかしながら，各主成分の寄与率が小さいときデータを説明するためにより多くの主成分を選ぶ必要があるため，主成分自体の解釈が難しくなる．本節で説明するスパース主成分分析はできるだけ主成分を０にするような推計をすることで，上述の問題を解決できる可能性がある．

通常の主成分分析の手法では正常部分空間の基底を(22)の最適化をすることで求められる．で定義される行列とすると，(22)は以下のように書ける．

|  |  |
| --- | --- |
| ：次元の単位行列 | (33) |

一方で，スパース主成分分析は主成分を0にするためにこの最適化の目的関数に罰則項を加え，以下の形式で定式化する．

|  |  |
| --- | --- |
| ：正則化パラメータ  ：L1ノルム | (34) |

しかしながら，の直交性を保持しつつ最適化することは一般的には難しいことが知られている．したがって，を次元ベクトルとして，となるような行列を定義し，以下の最適化問題を解く．

|  |  |
| --- | --- |
| ：行列の直交行列  ：主成分ベクトルを列ベクトルに持つ行列  ：正則化パラメータ | (35) |

ここで，得られたは正則化による制約が課せられた値であり，この値をスパース主成分分析で得られた正常部分空間での基底であるとする．

1. 独立成分分析

独立成分分析はデータからお互いに独立な成分を計算する手法である．お互いに独立な次元ベクトルとし行列を用いて以下のモデルを仮定する．

|  |  |
| --- | --- |
| ●混合モデル  ●分離モデル | (36) |

ここで，行列は独立な成分をどのように混合するかを表す行列，行列がデータをどのように独立成分に分離するかを表す行列である．

当該手法ではの各列が可能な限り独立にするように推計を行う．の各列が独立である場合，以下の式が成立するため，の各列を可能な限り独立にするには左辺の分布と右辺の分布が可能な限り等しくなるよう，推計を行えばよい．

|  |  |
| --- | --- |
| :の同時確率密度関数  :の確率密度関数 | (37) |

本節では分布同士の近さを表す量としてカルバック・ライブラー情報量を用いる．

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38) |

また，エントロピーをとして上式の計算をすると最終的には以下の算式に帰着する．

|  |  |
| --- | --- |
| ただし，エントロピーは以下の算式に基づいて計算される． | (39) |

したがって，(39)式を最小化するようなを計算することで独立成分への分解ができる．

1. 観測したデータが得られる確率が最大になるようにパラメータを決める方法． [↑](#footnote-ref-1)
2. 情報理論の観点でもこの定義は筋の通ったものとなっている．ありふれたデータよりも，「珍しい」データ（＝異常値）を得る方が得られる情報量が大きいと考えれば，異常度が高いなら情報量が多く，異常度が低いなら情報量が低いと考えられる．情報理論においては，情報量は確率密度の対数値にを掛けた量で定義されるため，(3)式と整合的である． [↑](#footnote-ref-2)
3. が成立しない場合は，以下の統計量（ホテリングの統計量）が自由度の分布に従う． [↑](#footnote-ref-3)
4. マハラノビス=タグチ法には複数の方法があるが，ここでは[2]の手法を記載する． [↑](#footnote-ref-4)