Pseudo Sample Generation for Hyperparameter Selection of One Class SVM

지능데이터시스템 연구실(IDSL)

우 필 원

https://github.com/woopal/PSG_for_OCSVM

Abstract

❖ 본 알고리즘은 이상치 탐지를 위한 One Class SVM(OCSVM)의 성능 개선을 위해 고안 되었으며 한양대학교 산학협력 프로젝트에 적용 될 예정입니다.

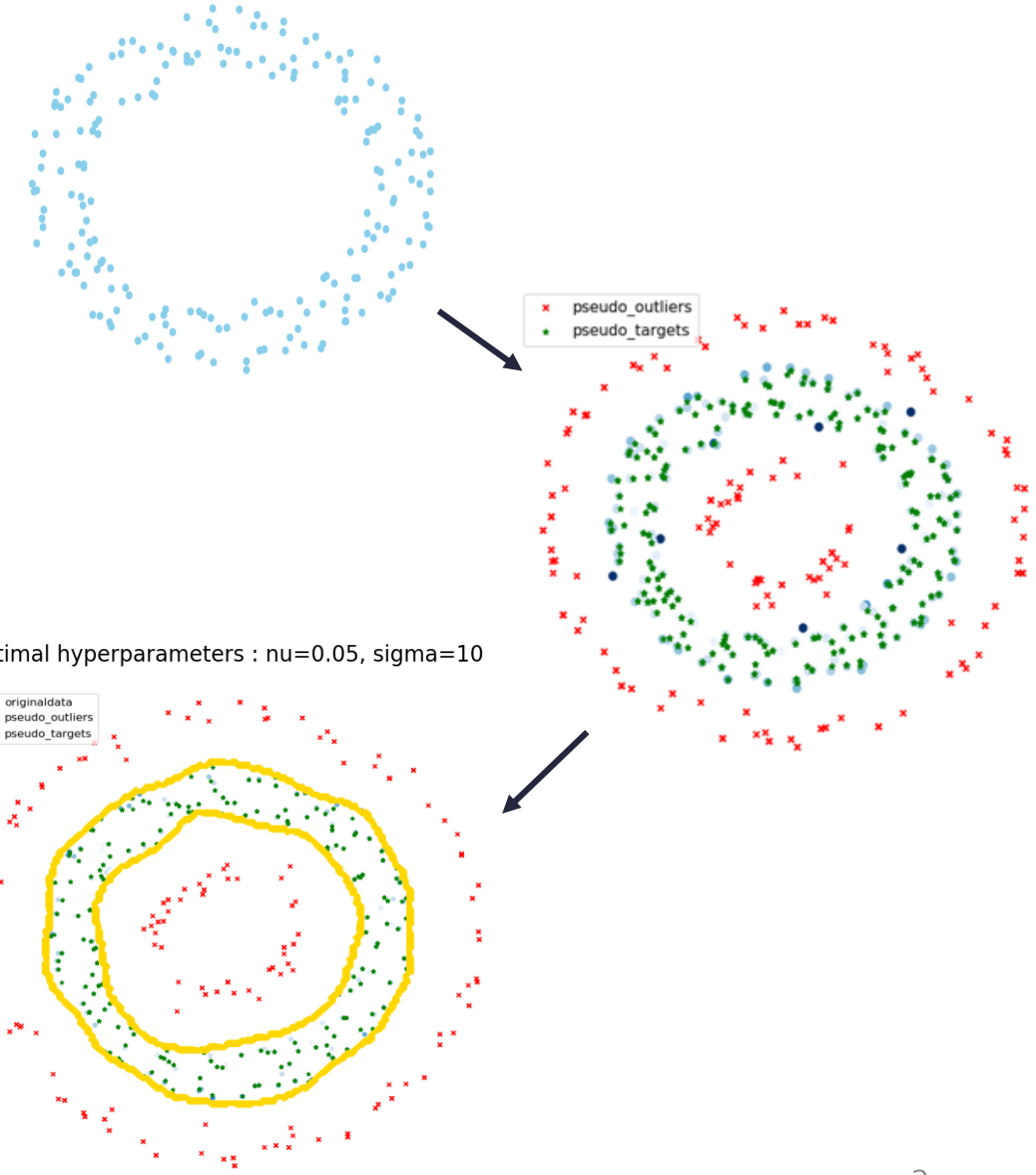
구현, 실험 코드(Python3.7)
https://github.com/woopal/PSG_for_OCSVM

1. 최종 목적 : OCSVM Hyperparameter (ν, σ) selection method의 제시

2. 핵심 수단 : 학습 데이터의 기하학적인 특성으로부터 가상의 샘플(pseudo-sample)을 생성하여 (ν, σ) 를 위한 validation set으로 활용

3. Contribution : 기존의 방안보다 기하학적인 특성을 더 잘 반영할 수 있는 pseudo-sample 생성 방안을 제시

4. Result : 15개의 UCI/LIBSVM dataset에 대해 비교실험 결과 성능의 개선이 이루어짐을 확인



Index

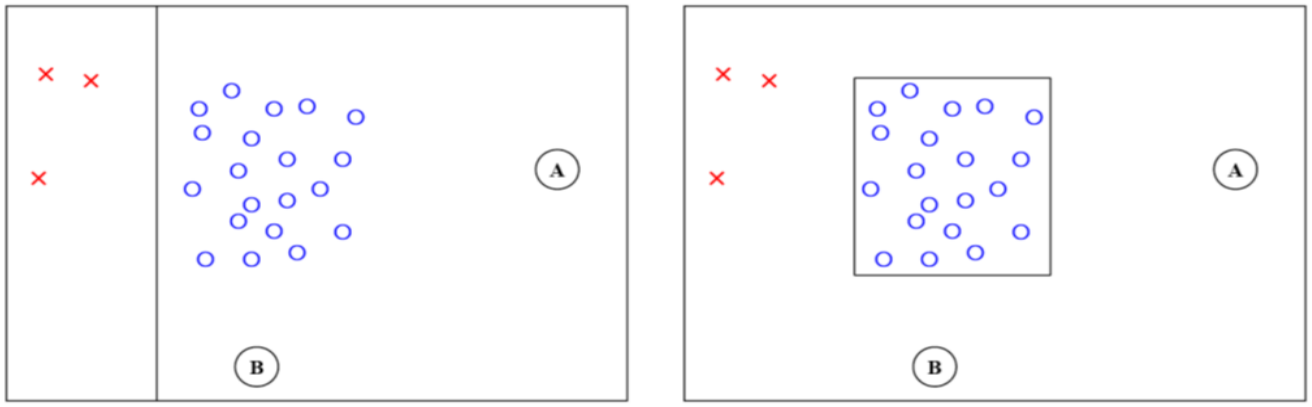
1. Introduction : One Class SVM

Novelty detection(이상치 탐지)

✓ 다수의 정상 데이터만 존재하고 이상치의 데이터가 없거나 소수이며, 습득하기 힘든 상황

✓ 분류(classification)로써 접근이 불가능하여 정상 데이터에 대한 decision boundary를 형성해주는 Unsupervised learning 기법

✓ 기존의 정상 분포와 다른 이상 데이터의 발생을 탐지하기 위함



Binary classification　　Novelty Detection

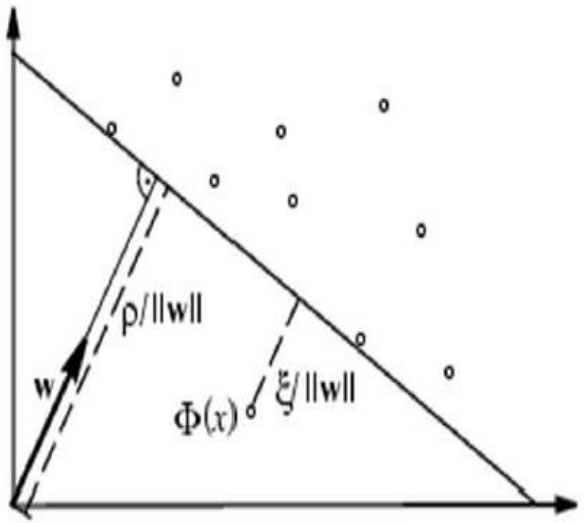
jayhey.github.io

One Class SVM (OC-SVM)

✓이상치 탐지를 위해 널리 쓰이는 SVM기반의 알고리즘(Scholkopf *et .al.*, 2000)

✓원점(Origin)으로부터 대부분의 데이터를 분리해내는 Hyperplane $\langle \mathbf{x}, \mathbf{\Phi}(x) \rangle = \rho$ 의 학습

✓Gaussian Kernel trick를 통해 비 선형의 decision boundary 학습이 가능함



Primal Quadratic Program

$$\min_{\mathbf{w},\boldsymbol{\xi},\rho} \ \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2 + \frac{1}{\nu m}\sum_{i=1}^{m}\xi_i - \rho,$$

$$\text{subject to } \langle \mathbf{w}, \mathbf{\Phi}(x_i) \rangle \geq \rho - \xi_i, \ \ \xi_i \geq 0$$

Dual Quadratic Program

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \ \frac{1}{2}\sum_{ij}\alpha_i\alpha_j k(x_i, x_j),$$

$$\text{subject to } 0 \leq \alpha_i \leq \frac{1}{\nu m}, \quad \sum_{i=1}^{m}\alpha_i = 1.$$

Adapted from Lecture note of Arcolano, Rudoy (Harvard University)

Challenge of One Class SVM

2개의 Hyperparameter설정이 사용자의 몫으로 남아있음

1. σ(gaussian kernel bandwitdh)

2. ν(regularization coef) $\in [0,1]$

Dual Quadratic Program

$$\min_{\boldsymbol{\alpha}} \ \frac{1}{2}\sum_{ij}\alpha_i\alpha_j k(x_i,x_j),$$

$$\text{subject to } 0 \le \alpha_i \le \frac{1}{\nu m}, \quad \sum_{i=1}^{m}\alpha_i = 1.$$

(2)

Gaussian kernels:

$$K(x_1,x_2) = exp\left\{-\frac{\|x_1-x_2\|_2^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad \sigma \neq 0$$

(1)

2. Main problem : Hyperparameter Selection

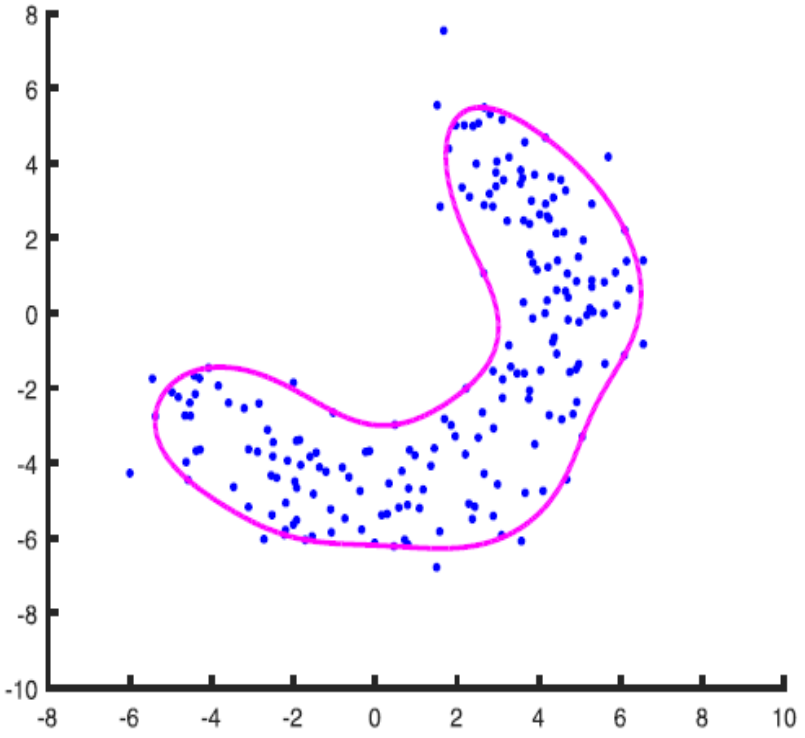
Hyperparameters of OC-SVM

1. ν(regularization coef) $\in [0,1]$

Training data 중 decision boundary 바깥으로 최대한 허용 가능한 sample의 비율

2. σ(gaussian kernel bandwitdh)

무한한 차원에서의 projection을 통해 비선형의 decision boundary 형성이 가능하게 하는 Gaussian kernel의 hyperparameter



(b) $\nu = 0.1, \sigma = \sqrt{10}$

Adapted from S. Wang et al., Hyperparameter selection of one-class support vector machine by self-adaptive data shifting. Pattern Recognition, 74:198–211, 2018.

Influence of hyperparameters of OCSVM

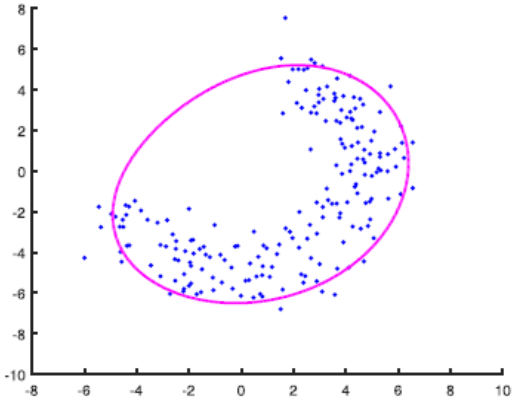
1. ν (regularization coef)

✓ 낮은 ν의 설정(d)
→ 대부분의 sample을 boundary 안으로 포함
→ 지나친 generalization을 불러옴
→이상치 탐지 성능 저하

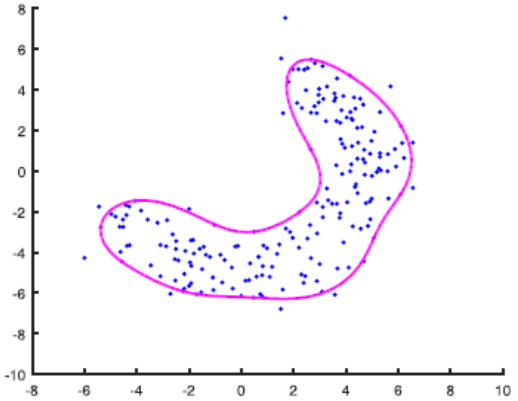
2. σ(gaussian kernel bandwitdh)

✓ 높은 σ의 설정 : (a)
→ 분포의 형태를 고려하지 못하는 느슨한 decision boundary 형성
→ 이상치 탐지 성능 저하

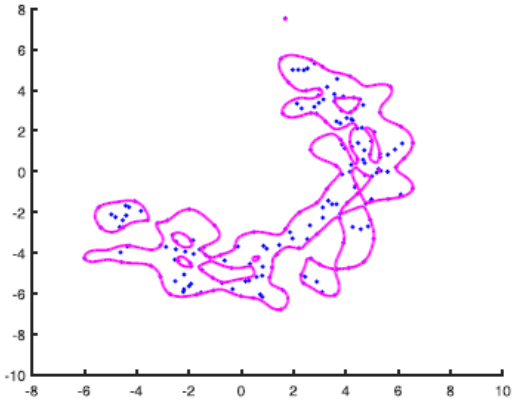
✓ 낮은 σ의 설정 : (c)
→ 과도한 Nonlinearity를 허용
→ 학습 데이터에 과적합한 decision boundary 형성
→ 정상 탐지 성능 저하



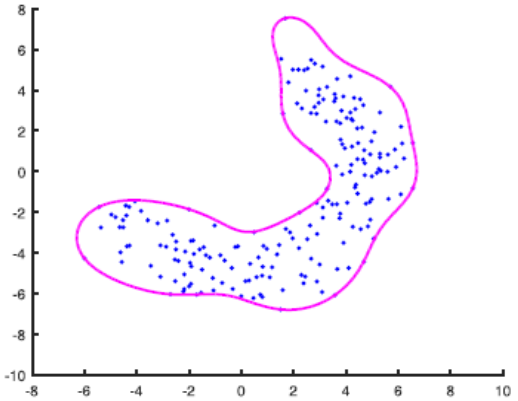
(a) $\nu = 0.1, \sigma = 10$



(b) $\nu = 0.1, \sigma = \sqrt{10}$



(c) $\nu = 0.1, \sigma = 1$



(d) $\nu = 0.01, \sigma = \sqrt{10}$

Adapted from S. Wang et al., Hyperparameter selection of one-class support vector machine by self-adaptive data shifting. Pattern Recognition, 74:198–211, 2018.

How can we set appropriate hyperparameter set?

(ν, σ)는 OCSVM의 Hyperparameter set으로써 Decision boundary의 형성에 결정적인 영향을 미침

⇩

데이터셋의 형태를 보존하면서 Overfitting을 방지하는 최적의 (ν, σ) set을 설정 하는 방법이 있는가?

⇩

Pseudo Sample Generation

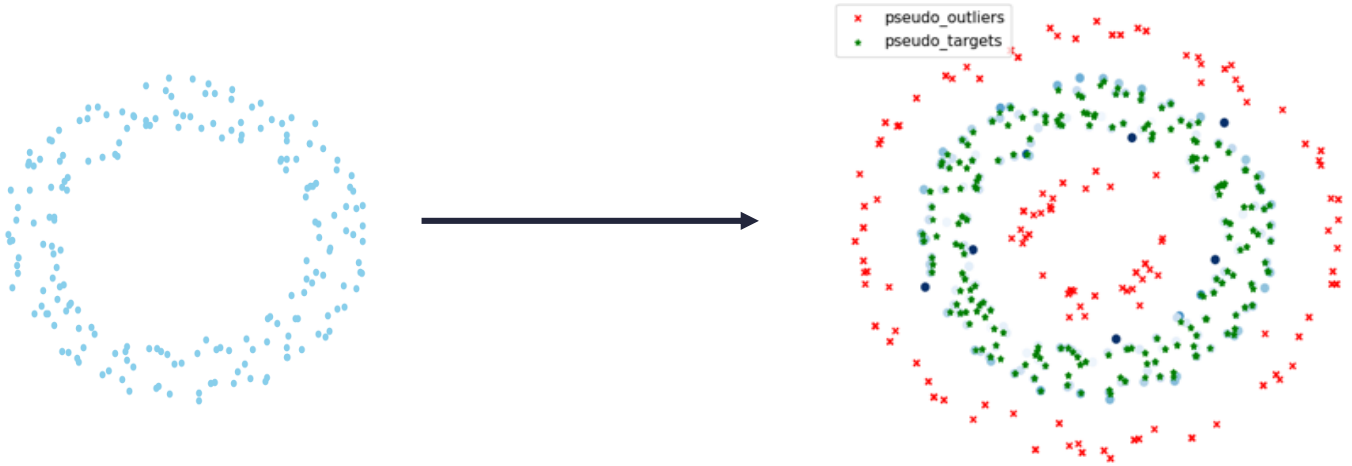
3. Solution : Pseudo Sample Generation

Pseudo Sample Generation

Training data의 분포 바깥에 Pseudo-outlier sample,

Training data의 분포 내부에 Pseudo-target sample을 생성하여

(ν, σ)를 위한 validation set으로 사용하는 것

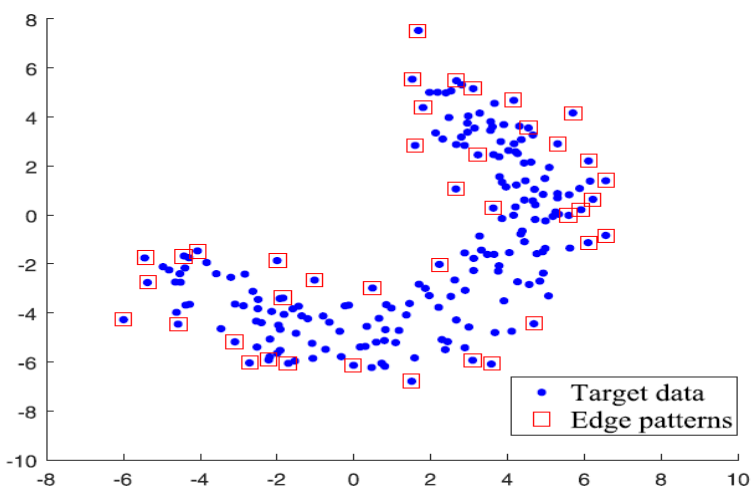


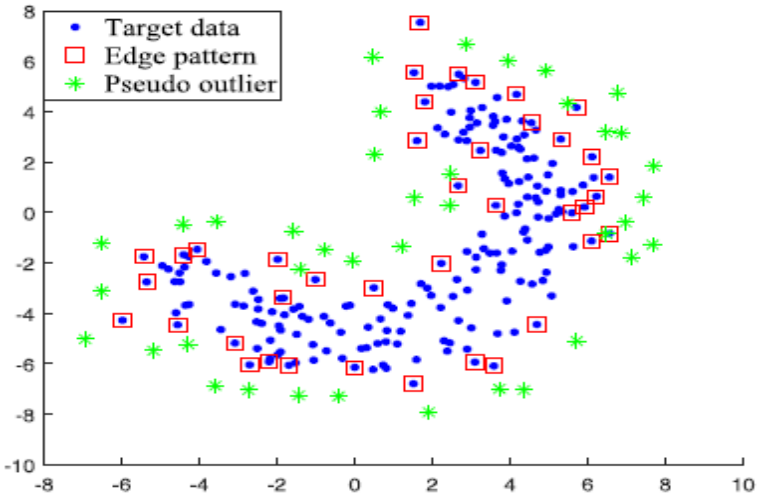
How Pseudo Samples Work?

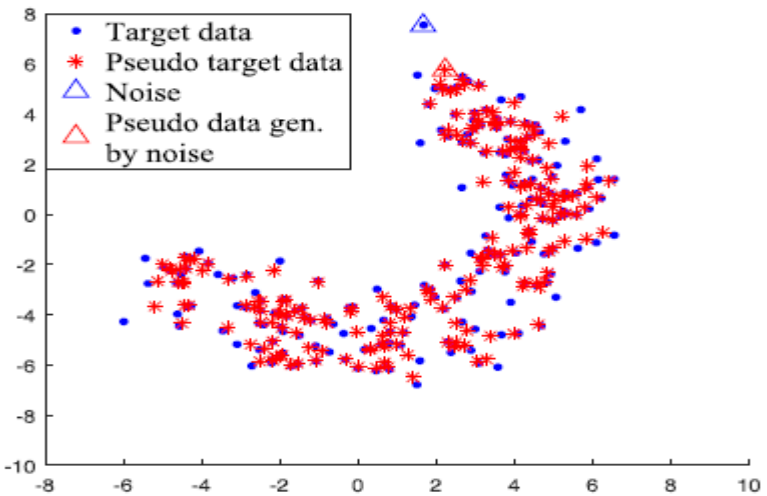
- ✓ Pseudo-outlier는 최대한 포함하지 않고, Pseudo-target은 최대한 포함하는 decision boundary를 유도
- ✓ Pseudo-target을 포함하도록 함으로써 Decision boundary에 구멍이 생기는 등의 지나친 비선형성을 막아 정상 데이터의 분포를 보존
- ✓ Pseudo-outlier를 최대한 배제하도록 함으로써 Outlier 탐지 성능이 떨어지는 느슨한 Decision boundary를 방지

Existing Pseudo Sample Generation method : SDS

- ✓ S. Wang et al.(2018) - Self adaptive shifting(SDS) : 현재 가장 좋은 실험성능을 보이는 방법
- ✓ 데이터 분포의 외각에 위치하는 sample을 기하학적 특성을 이용하여 Edge pattern으로 판정
- ✓ Edge pattern으로 판정된 sample을 통해 Pseudo-outlier를 생성, 그 외의 sample을 통해 pseudo-target 생성







From S. Wang et al., Hyperparameter selection of one-class support vector machine by self-adaptive data shifting. Pattern Recognition, 74:198–211, 2018.

Limitations of SDS method

1) Edge pattern detection method가 갖는 문제

- ✓ SDS는 Li, Y. et al.(2011)의 방법을 차용하여 Edge pattern을 판별함

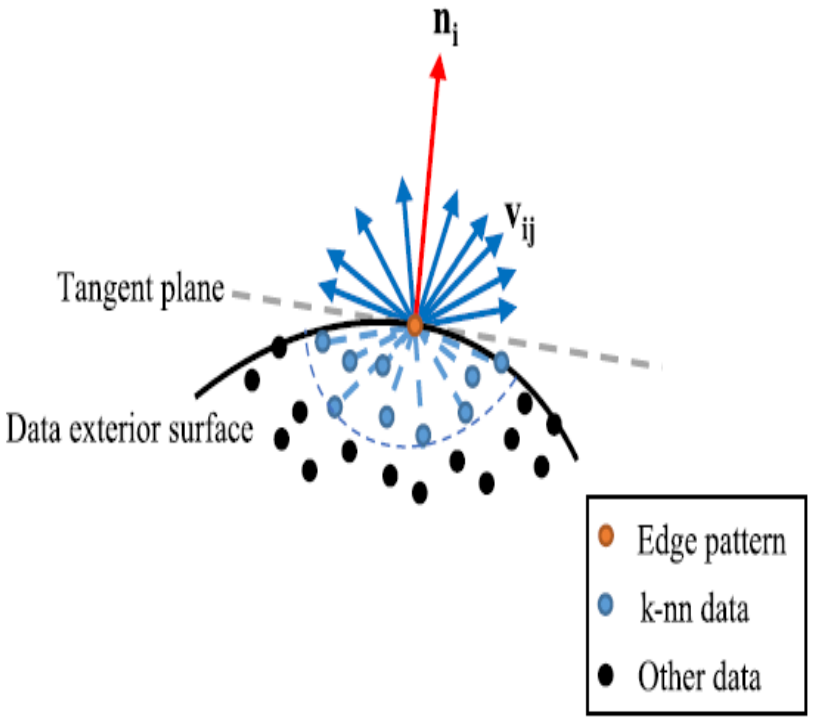
  step 1) 판별 대상인 sample x_i 로부터, K-nearest neighbors 와 sample과의 방향벡터($v_{ij,}\ j = 1, \ldots k$)를 k개 구하고 합하여 분포의 surface에 대한 tangent plane(접평면)의 normal vector(n_i)를 추정

  step 2) K-nearest neighbors 중에서 n_i 의 방향과 같은 v_{ij} 를 만드는 neighbors의 비율을 계산

  step 3) 해당 비율이 연구자가 자체 설정한 threshold T를 넘으면 sample x_i를 edge pattern으로 판정 (분포의 외각에 있을 수록 대부분의 v_{ij}와 n_i가 같은 방향을 이루기 때문)

- ✓ 해당 방법은 K-nn을 위한 K 외에 threshold라는 새로운 hyperparameter를 연구자가 취사선택해야 하는 문제점이 있음

- ✓ 또한 그림처럼 convex한 형태가 아닌 concave한 데이터 분포의 표면에 있는 sample들은 edge로써 판별하지 못하고 넘어갈 가능성이 큼



From S. Wang et al., Hyperparameter selection of one-class support vector machine by self-adaptive data shifting. Pattern Recognition, 74:198–211, 2018.

Limitations of SDS method

2) Edge pattern을 결정적으로 구분함으로써 생기는 문제

- ✓ Edge pattern으로 판정 된 sample만 pseudo outlier generation에 쓰일 수 있음. 즉 제한적인 수의 pseudo-outlier만 생성 가능
- ✓ 외각에 위치한 sample도 Edge pattern으로 판정되지 못하고 지나치게 되면 그 주변엔 pseudo outlier generation이 이루어지지 못함
- ✓ Edge pattern으로 판정 된 sample은 pseudo target generation에 쓰이지 못함

⇩

모든 sample이 pseudo-outlier/pseudo-target의 생성 가능성을 갖도록 하자

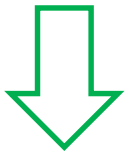
4. Main idea : New method to generate pseudo samples

How to solve problems of SDS?

✓ Sample(x_i)마다 $Probability\ to\ edge(x_i)$ 를 부여

✓ 데이터 분포의 외각(edge)에 위치 할수록 높은 Probability를 갖도록 함

✓ 부여된 $Probability\ to\ edge(x_i)$ 와 $U \sim unif\,(0,1)$ 를 이용한 acceptance/rejection 을 반복하여 Pseudo outlier/pseudo target generation이 자연스레 이루어지도록 함



어떻게 확률을 Modeling 할 것인가?

Modeling Probability for each sample

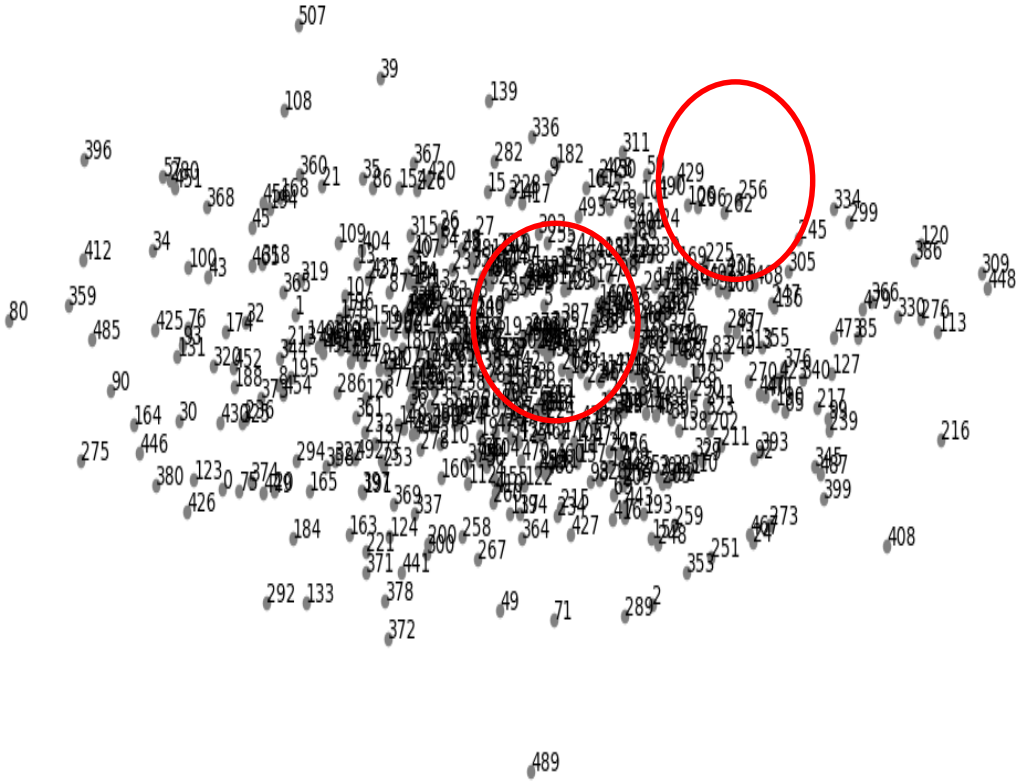
✓ Edge에 가까운 sample이 갖는 2가지 기하학적 특징을 이용

1. 분포의 Edge에 가까운 sample은, sample중심의 sphere를 생성했을 때, 분포 내부의 위치한 sample보다 상대적으로 적은 개수의 이웃이 sphere 내부로 들어올 것이다

   → feature 1($f1$) : sphere 내부에 들어온 이웃의 개수. Edge에 가까울 수록 작은 값을 갖는다.

2. Edge에 가까운 sample은 sphere 내부의 이웃들이 고르게 분포하지 않고 한 방향으로 쏠려 있을 것이다 .

   → feature 2($f2$) : sphere 내부에 들어온 이웃들의 중점(centroid)과 sample의 거리. Edge에 가까울 수록 큰 값을 갖는다.

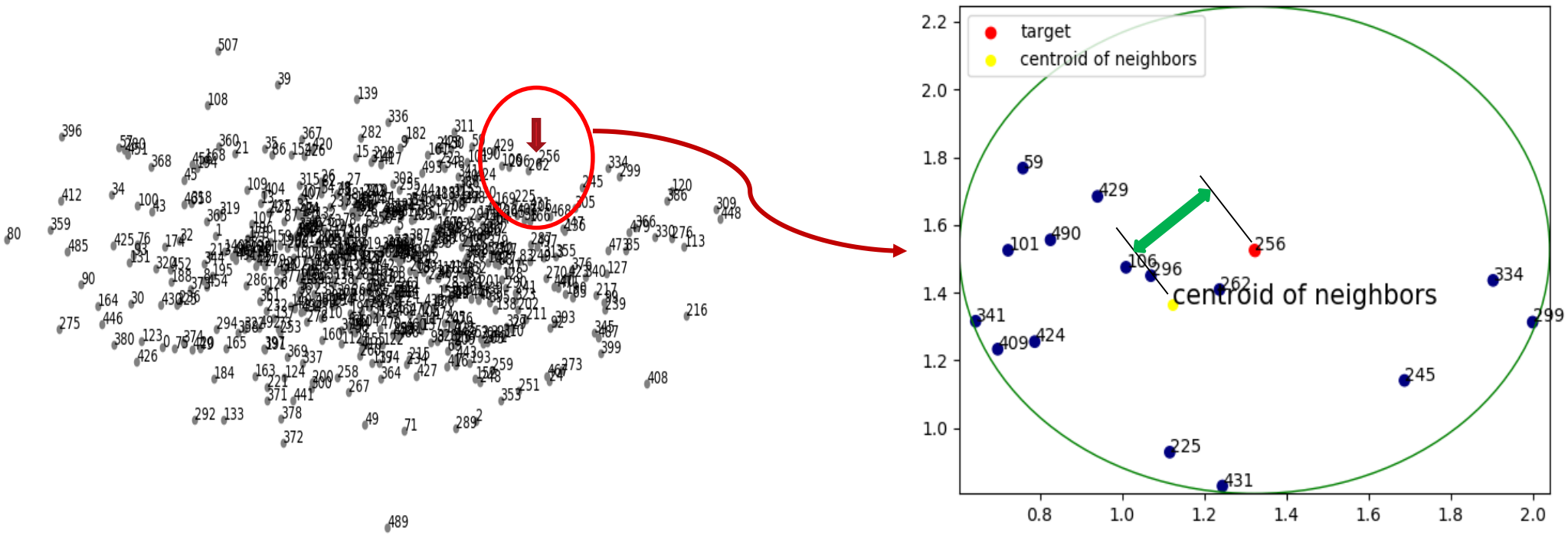


Modeling Probability for each sample

Edge에 가까운 sample:

상대적으로 적은 개수의 점($f1$)이 잡히고, 상대적으로 먼 거리($f2$)를 갖는다

- ✓ $f1$: sphere 내부에 들어온 neighbor(navy point)의 갯수
- ✓ $f2$: sphere 내부의 neighbor들의 centroid와 sample과의 거리

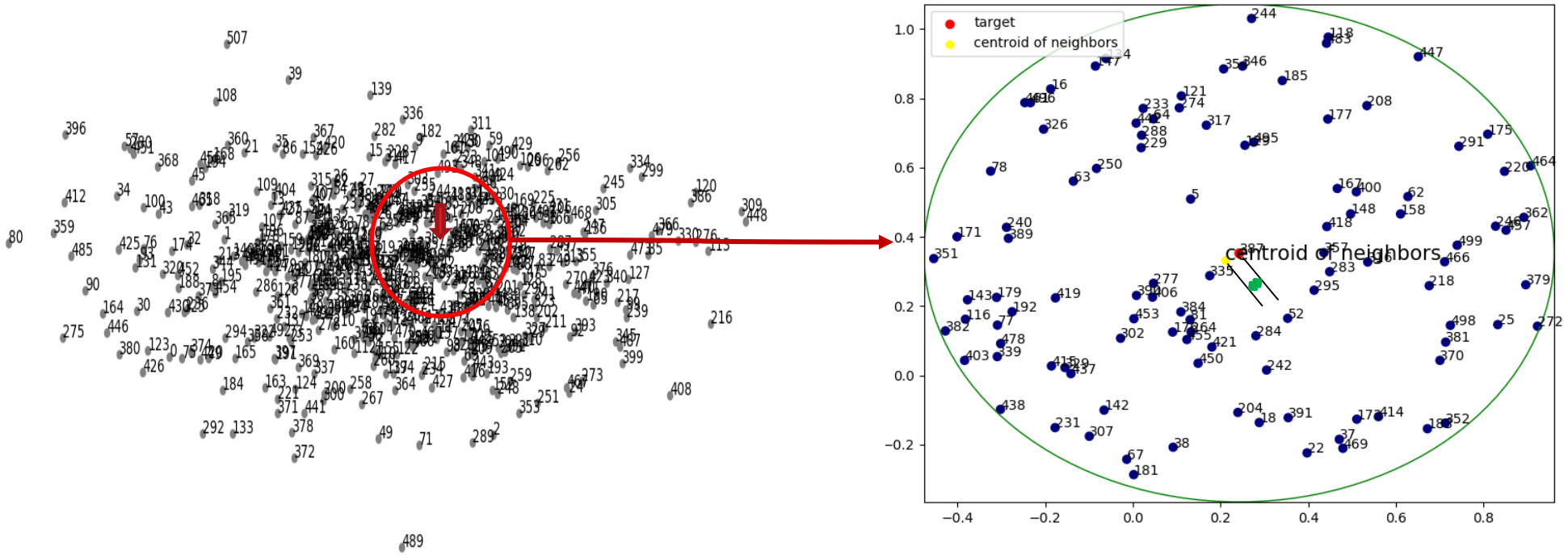


Modeling Probability for each sample

Edge가 아닌, 분포의 중심에 가까운 sample:

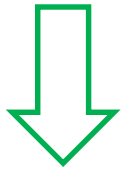
상대적으로 많은 개수의 점($f1$)이 잡히고, 상대적으로 낮은 거리($f2$)를 갖는다

- ✓ $f1$: sphere 내부에 들어온 neighbor(navy point)의 갯수
- ✓ $f2$: sphere 내부의 neighbor들의 centroid와 sample과의 거리



Modeling Probability for each sample

✓ Probability to edge= F2 – F1 로 모델링한다면, Edge에 가까운 sample이 상대적으로 높은 Probability를 갖는다.



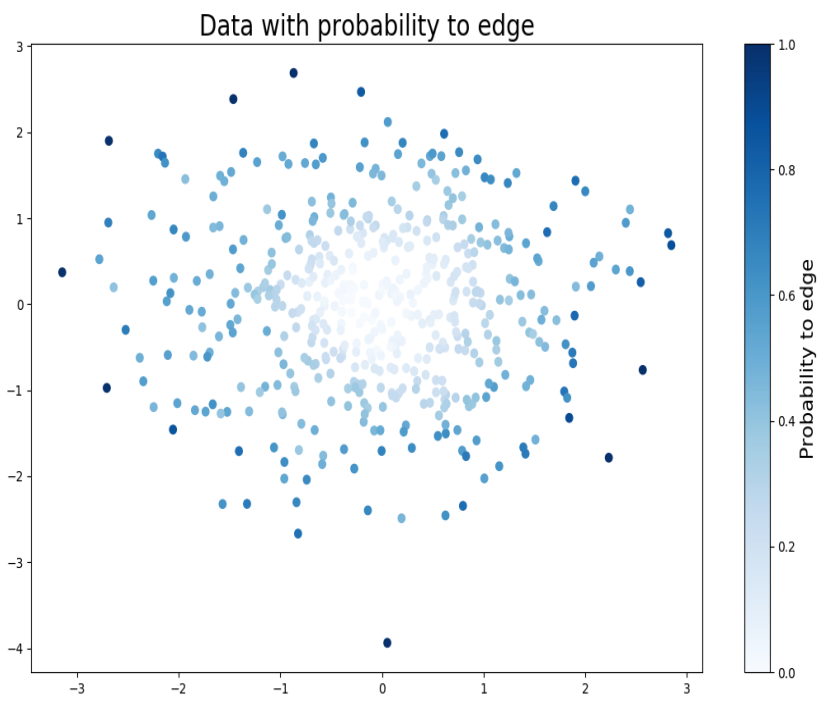
$$Probability\ to\ edge(x_i) = \frac{(f2_i - f1_i) - \min(f2 - f1)}{\max(f2 - f1) - \min(f2 - f1)} \in [0, 1]$$

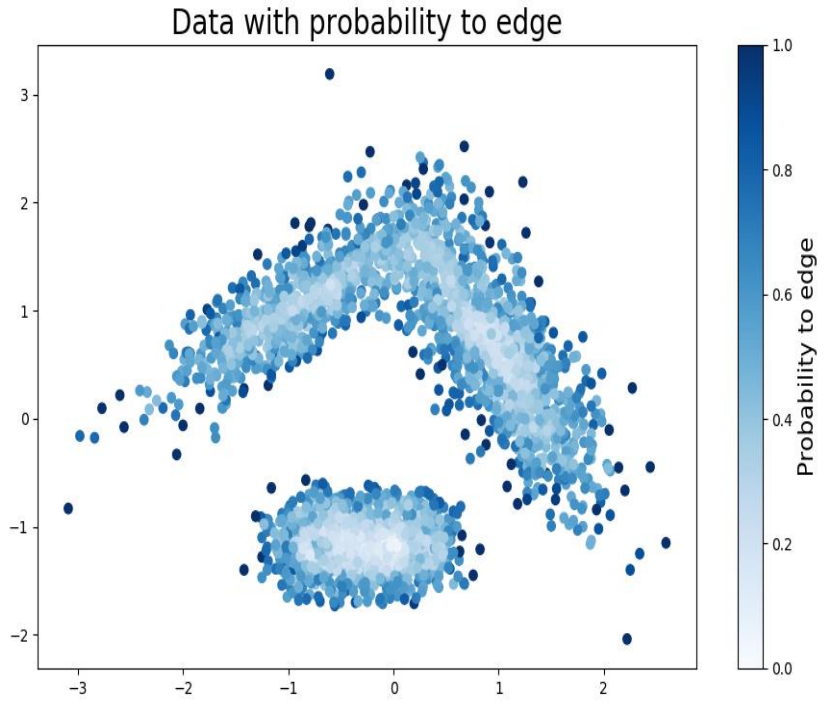
$$i = 1, \dots, N$$
$$N = number\ of\ samples$$

Modeling Probability for each sample

✓ 그라데이션을 이용한 $Probability\ to\ edge(x_i)$의 시각화 결과

✓ 분포 내부의 sample보다 외각의 sample이 더 높은 $Probability\ to\ edge(x_i)$를 갖는다.





Generating Pseudo samples with $U \sim unif(0,1)$

for x_i in $\{x_1, x_2, \ldots . x_N\}$ **do**

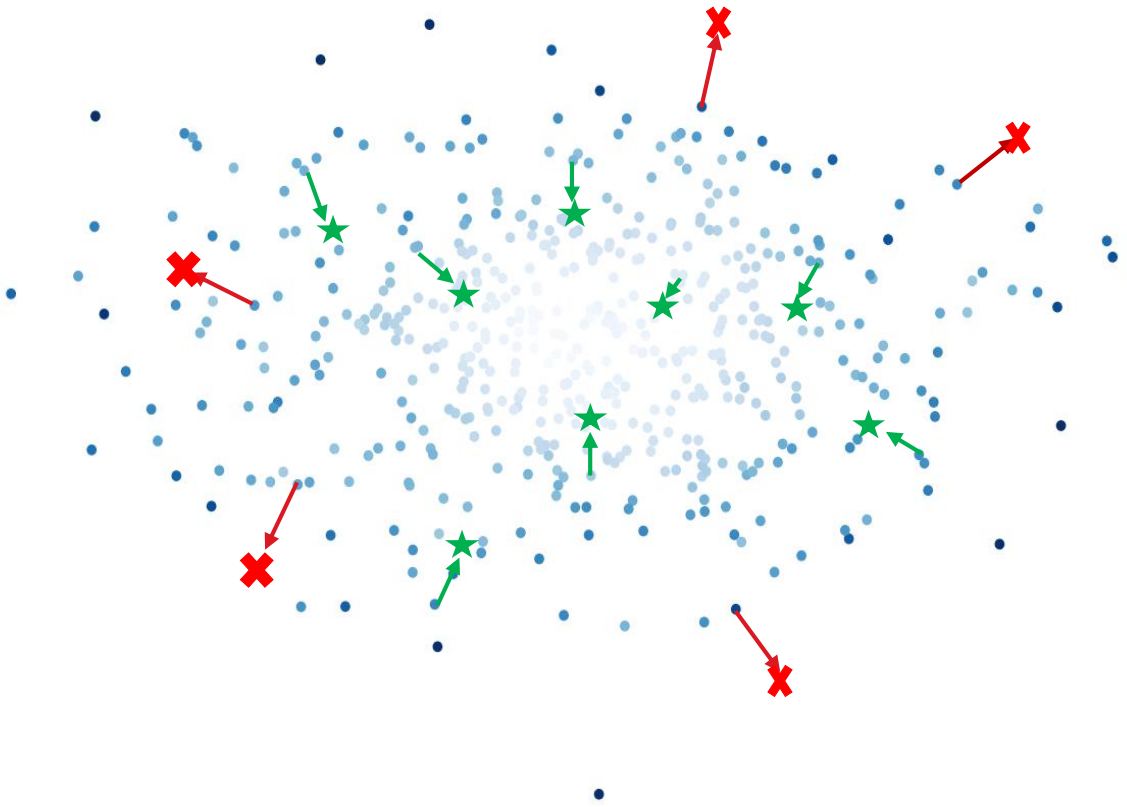
1. Generate $U \sim unif(0,1)$

2. ***if*** $U \sim unif(0,1) < Probability\ to\ edge(x_i)$:

$generate\ pseudo - outlier(x_i)$

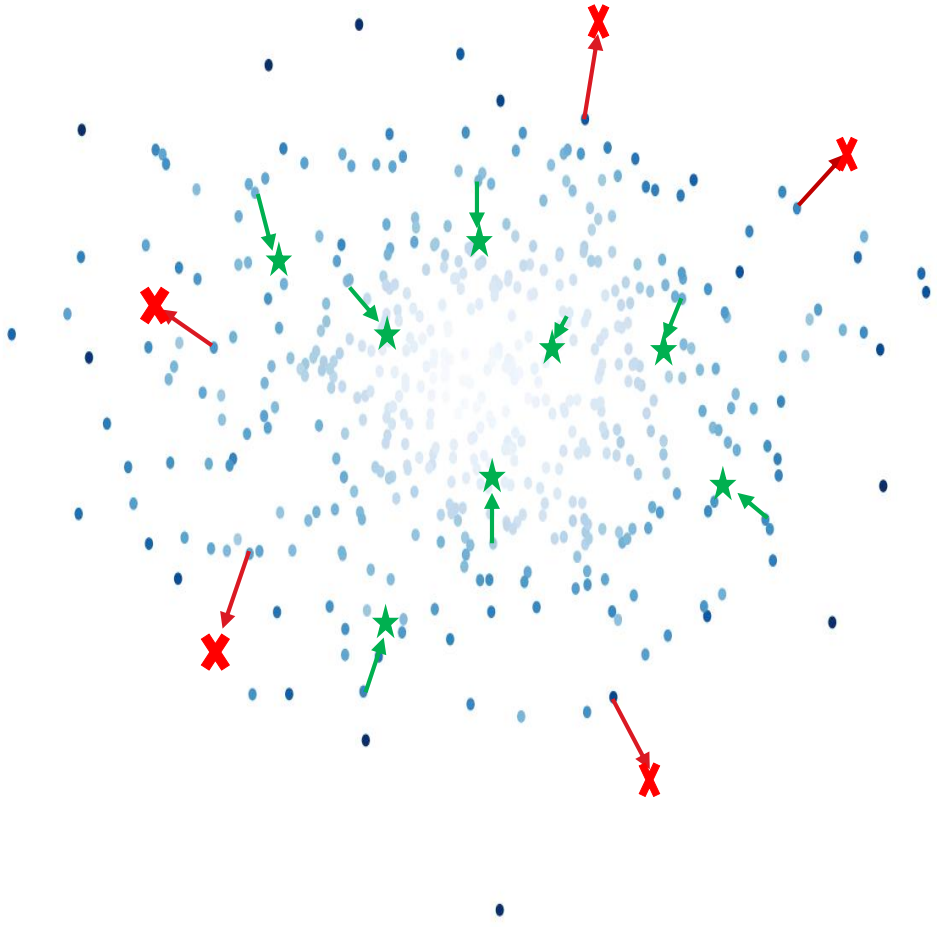
else:

$generate\ pseudo - target(x_i)$



Direction of Pseudo samples

$pseudo - sample(x_i)$ 생성 방향의 key :
data density gradient



- ✓ x_i : training sample
- ✓ $x_{neighbor}$: x_i의 sphere 내부에 들어온 sample
- ✓ $n_i = \sum_{neighbor} x_i - x_{neighbor}$
  $\approx direction\ of\ data\ density\ gradient$

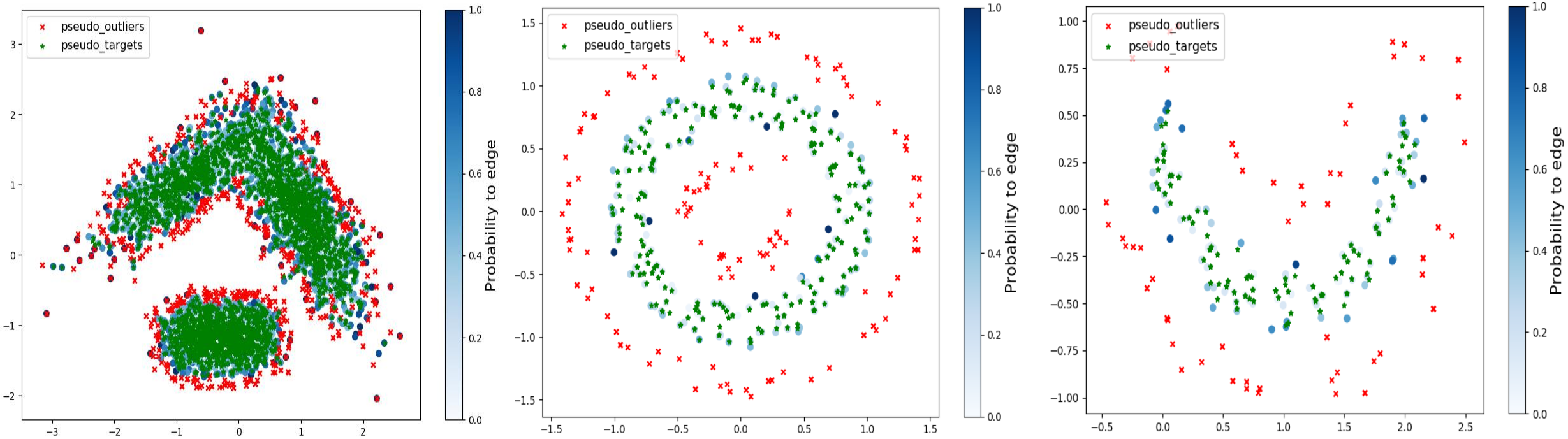
Following method in K. Fukunaga(1990)

⇩

- ✓ $pseudo - target(x_i)$: Density-gradient 의 방향 n_i
- ✓ $pseudo - outlier(x_i)$: Density-gradient 의 역 방향 $-n_i$

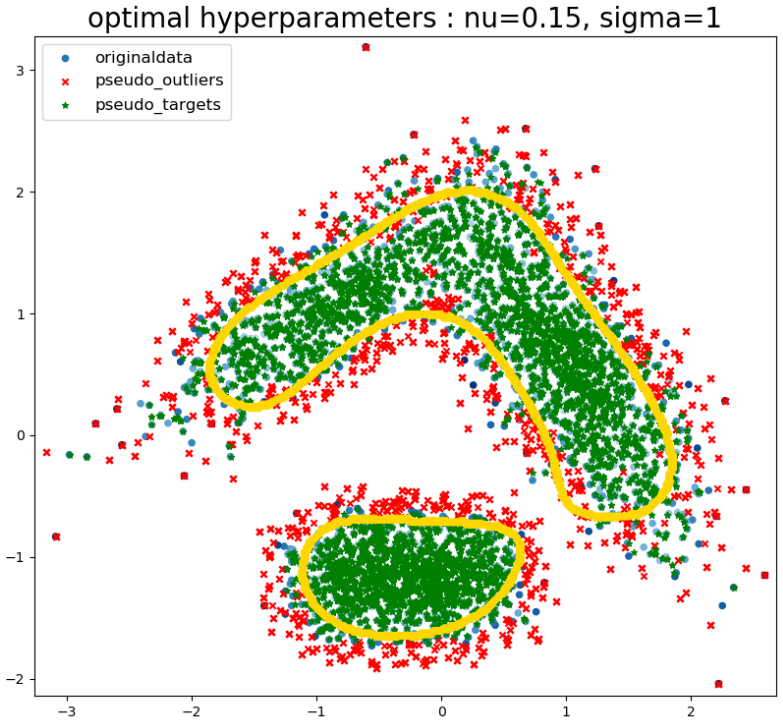
Pseudo samples on 2D dataset

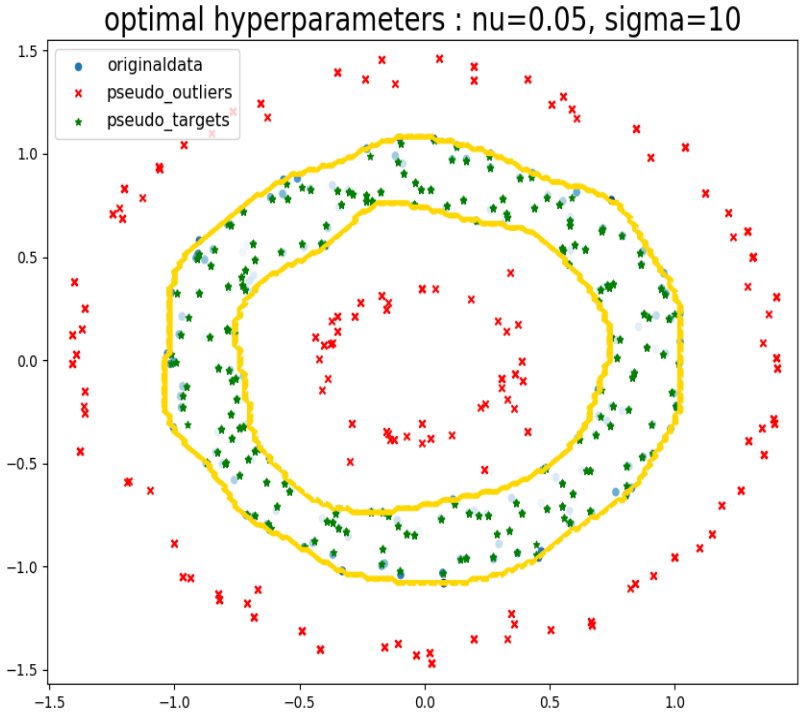
- ✓ Synthetic 2-D dataset에 대한 Pseudo sample 생성 결과
- ✓ Ring, moon 형태의 Convex하지 않은 곡면에서도 고르게 생성 되는 pseudo-outliers
- ✓ 분포를 보존할 수 있도록 생성된 pseudo-targets

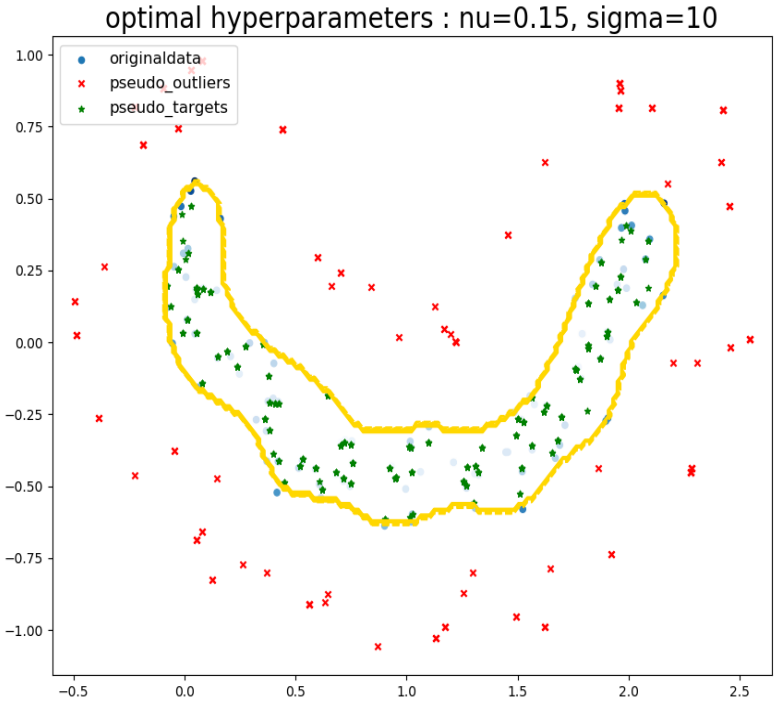


Search optimal (ν, σ) with Pseudo samples

- ✓ $\sigma \in [10^{-4}, 10^{-4}, \ldots\ldots, 10^{4}]$, $\nu \in [0.01, 0.05, 0.1]$: SDS와 같은 setting
- ✓ (ν, σ)의 모든 combination에 걸쳐 training data를 통한 OCSVM 학습
- ✓ Pseudo outlier/Pseudo target에 대한 classification error가 가장 낮은 $(\nu_{opt}, \sigma_{opt})$ 선택







Sphere 생성을 위한 radius 설정

✓ $f1$(sphere 내부에 잡힌 sample의 수) 의 정렬이 $\{x_1, x_2, \ldots . x_N\}$에 대해 고르게 이루어지도록

✓ $\mathrm{K} = 5 \ln \mathrm{N}$ $(\mathrm{N} = \text{number of data})$ from Li, Y. et al.(2011)

✓ $\mathrm{radius}(x_i)$: x_i를 중심으로 k개의 nearest neighbor을 포함 할 수 있는 sphere의 최소 반지름

✓ $radius_{model} = \sum_{x_i} radius(x_i) \ / \ \mathrm{N}$

5. Experiments

Results on benchmark datasets

- ✓ UCI Machine Learning Repository/LIBSVM webpage의 15개의 dataset을 사용
- ✓ 4~60의 다양한 dimension에 대하여, 다른 8개의 OCSVM hyperparameter selection method와 비교
- ✓ Feature value는 모두 [-1,1]로 normalize
- ✓ class의 절반은 target/절반을 outlier로 설정 (바꾸어 한번 더 진행)
- ✓ target을 train/test로 randomly partition 한 뒤 target-test는 outlier와 함께 test set으로 사용(10회 반복)
- ✓ 각 testset 에 대한 f1-score 계산 후 평균값 산출
- ✓ Python 3.7 환경에서 구현

Table 1. Details of benchmark datasets

Dataset	Feature dim.	# of data
Abalone	8	4177
Australian	14	690
Balance	4	625
Glass	9	214
Heart	13	303
Landsat	36	2000
Letter	16	5000
Segment	18	2310
Sonar	60	208
Vehicle	18	846
Waveform3	21	5000
Winequality	11	1599
SVMguide1	4	3089
Diabetes	8	768
Vowel	10	528

Results on benchmark datasets

- ✓ 15개 중 8개의 dataset에 대해 가장 좋은 f1-score 달성
- ✓ 15개 중 9개의 dataset에 대해 SDS보다 나은 f1-score 달성
- ✓ 가장 높은 Average f1-score
- ✓ SDS based method(state-of-the-art)의 성능을 개선 하였음을 확인

Table 2. f1-score on benchmark datasets

Dataset	**Proposed**	**SDS#**	HC#	HS#	CS#	SK#	MSML#	MIES#	QR#
Abalone	**0.43**	**0.402**	0.511	0.51	0.504	0.497	0.296	0.498	**0.512**
Australian	0.583	**0.592**	0.588	0.527	0.574	0.527	0.356	0.576	0.57
Balance	0.726	**0.808**	0.471	0.471	0.592	0.456	Nan	0.614	0.513
Glass	**0.628**	0.577	NaN	NaN	0.52	NaN	0.346	0.598	0.634
Heart	**0.608**	0.567	0.376	0.376	0.568	0.376	0.138	0.565	0.559
Landsat	**0.81**	0.711	0.665	0.645	0.713	0.695	NaN	0.658	0.636
Letter	**0.7**	0.601	0.519	0.519	0.515	0.068	0.058	0.514	0.494
Segment	**0.775**	0.769	0.589	0.588	0.576	0.431	0.436	0.581	0.589
Sonar	**0.583**	0.506	0.422	0.407	0.506	0.407	0.394	0.505	0.498
Vehicle	0.567	**0.651**	0.564	0.501	0.497	0.442	NaN	0.505	0.523
Waveform3	0.647	**0.674**	0.615	0.632	0.639	0.627	NaN	0.637	0.629
Winequality	0.448	**0.519**	0.5	0.5	0.497	0.226	0.241	0.501	0.501
SVMguide1	**0.847**	0.838	0.72	0.662	0.727	0.741	0.217	0.755	0.61
Diabetes	0.459	**0.508**	0.422	0.421	0.299	0.348	NaN	0.499	0.501
Vowel	**0.775**	0.648	0.34	0.34	0.617	0.338	0.169	0.661	0.648
Average	**0.639**	0.625	0.521	0.507	0.556	0.441	0.265	0.578	0.561

The results with # are from S. Wang et al., **Hyperparameter selection of one-class support vector machine by self-adaptive data shifting. Pattern Recognition, 74:198–211, 2018.**

Thank you!