1クラスサポートベクターマシン

One-Class Support Vector Machine
OCSVM

大阪府立大学 工学研究科
清水　悠生

はじめに

- ✓ 本記事はサポートベクターマシンの知識を
  前提で構成しているので
  先にこちら↓を読まれることを推奨します
- ✓ https://yuyumoyuyu.com/2021/01/24/supportvectormachine/

教師なし学習（自己教師あり学習）

- ✓ サポートベクターマシン（分類）やサポートベクター回帰では，入力と出力のペアが与えられていた
  ⇒**教師あり学習**

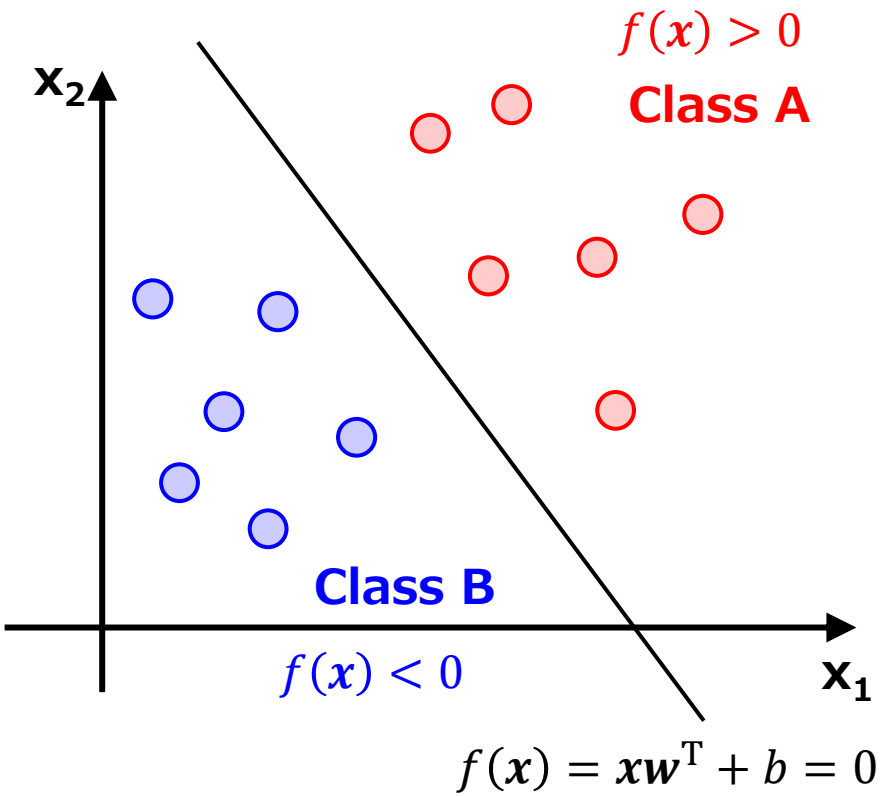
- ✓ **1クラスサポートベクターマシン（OCSVM）**では入力データのみが学習データとして与えられる
  ⇒**教師なし学習（自己教師あり学習）**

- ✓ OCSVMは異常検知etcに用いられ，
  正常データ（+少数の異常データ）を用いて学習を行う

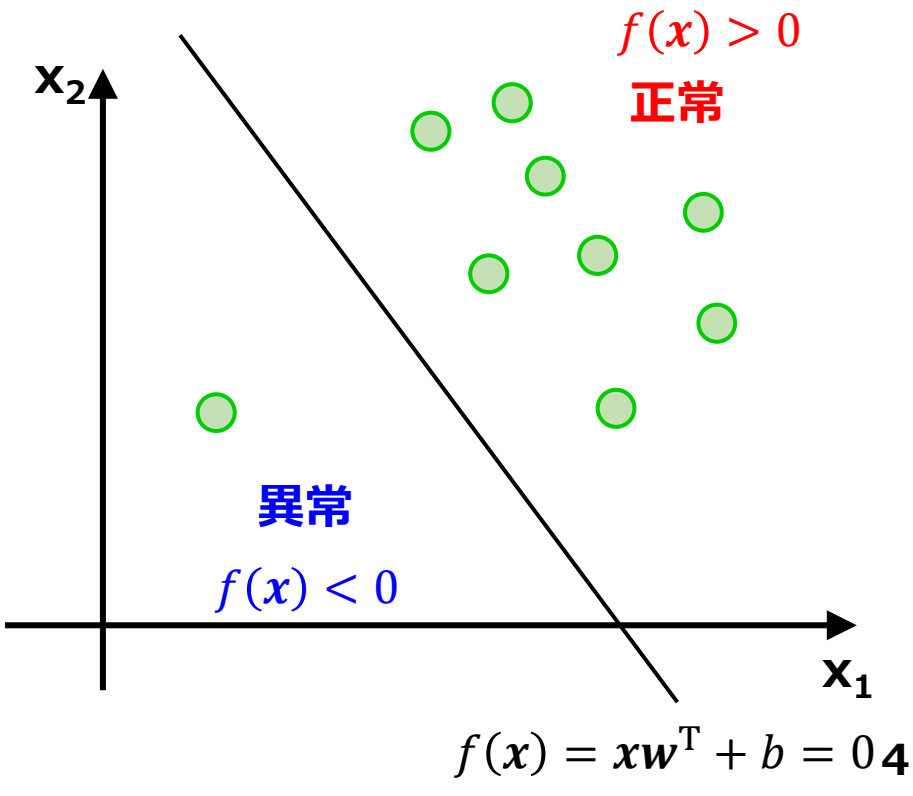
2クラス分類SVMと1クラスSVMの違い

- ✓ 1クラスSVMの根本的な考え方は2クラス分類のSVMと同様で，分類境界によって正常/異常を分類する
- ✓ ただし1クラスSVMでは**クラスラベルが与えられない**！

2クラス分類SVM



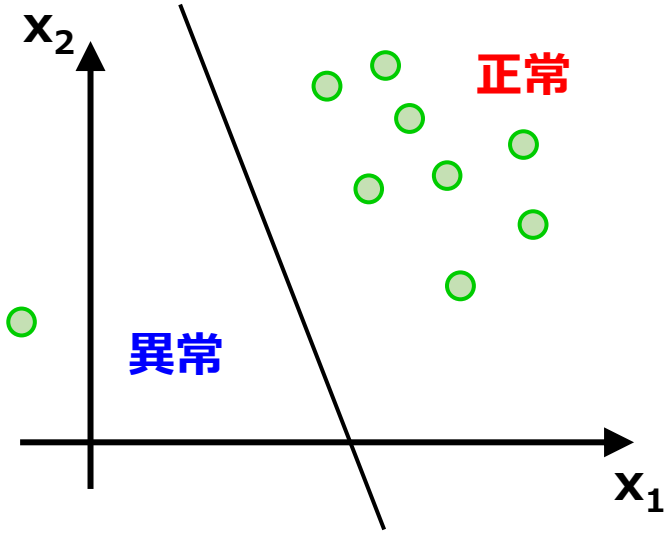
1クラスSVM



1クラスSVMの問題点

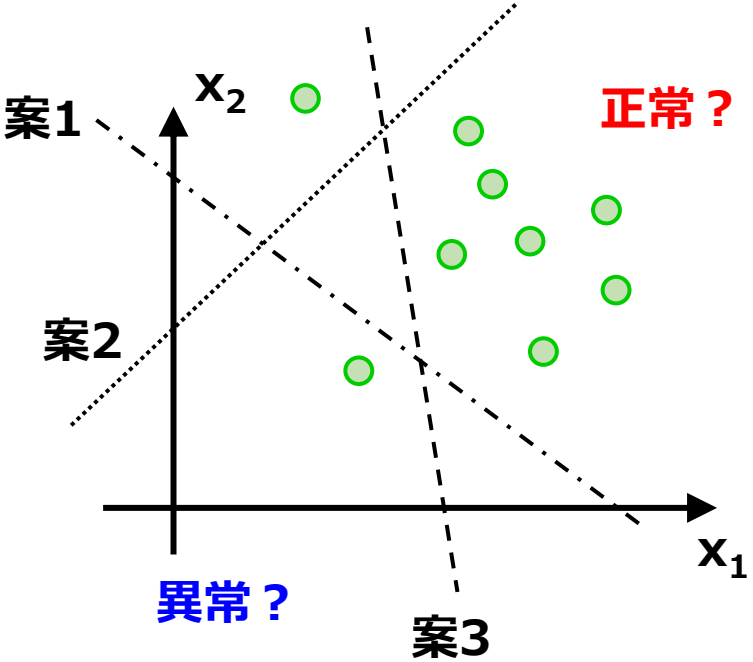
- ✓ 異常データが極端に少ない or 全くないため
  分類境界をいかようにも引けてしまう
- ✓ 異常/正常のラベルは与えられないため
  何をもって異常データとするかの指標が必要！

明らかに外れているとわかりやすい



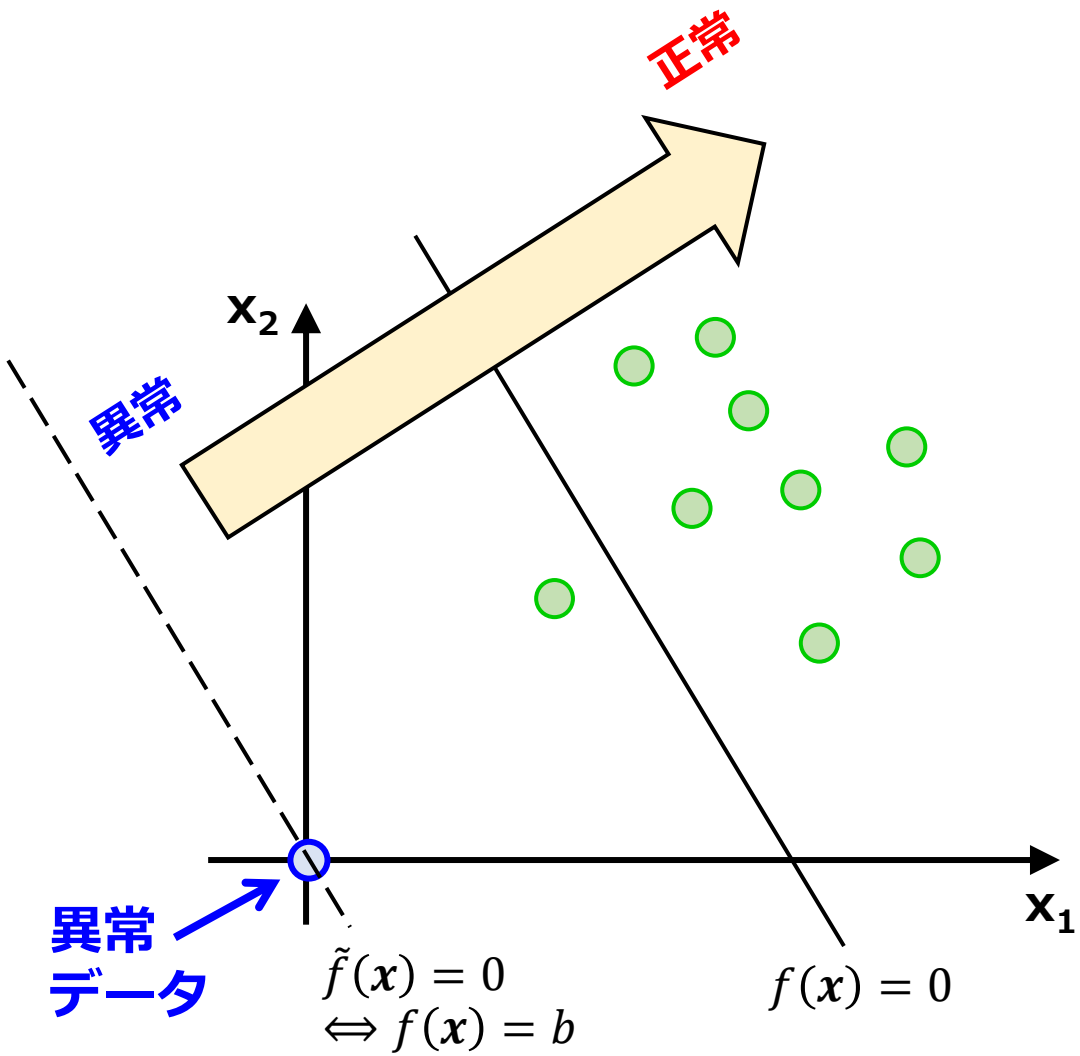
分類境界 $f(x) = 0$

明らかじゃないとわかりづらい



原点付近を異常データとみなす！

- ✓ **原点付近のデータを異常データ**とみなす
- ✓ 原点に近ければ異常，原点から遠ければ正常と判断



境界の決定関数は次式

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} + b$$

評価関数を

$$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}$$

と定義し，次のように判断

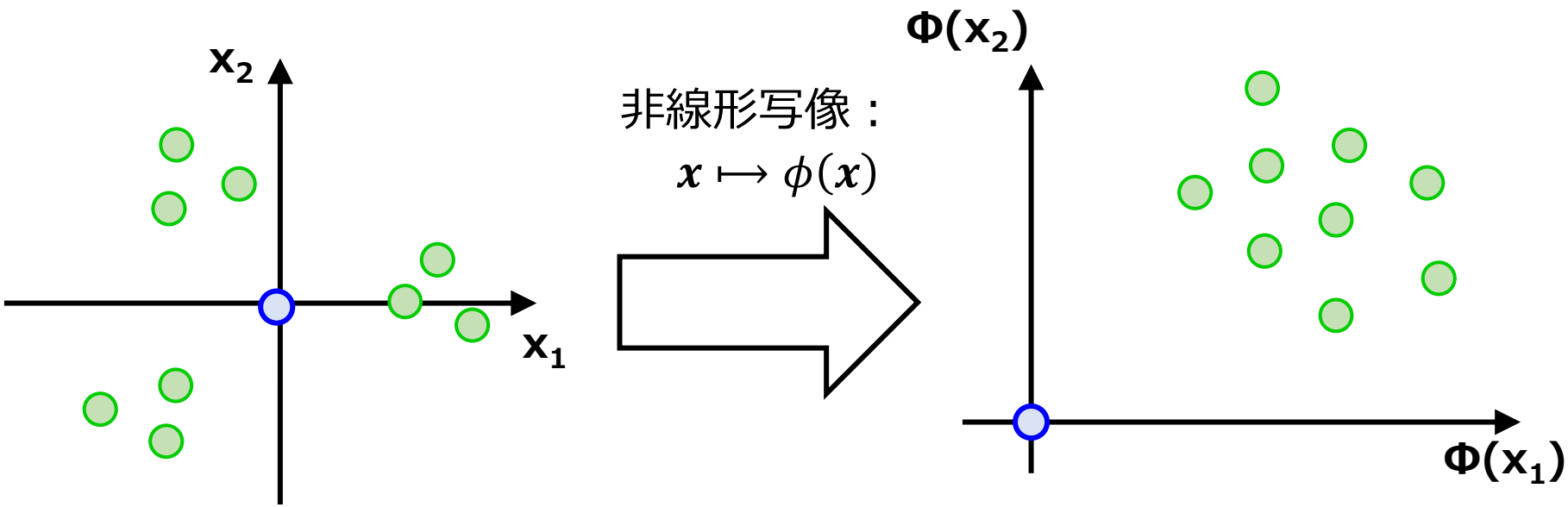
$\tilde{f}(\boldsymbol{x})$：**0に近い小さい値**
⇒異常！

$\tilde{f}(\boldsymbol{x})$：**0から離れた大きい値**
⇒正常！

ここで$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) \geq 0$としている
（後ほど説明）

正常データが原点に近い場合は？

- ✓ 標準化したデータなど，原点付近にサンプルが散らばっている場合が多い
- ✓ 正常データが原点から遠くになるように適切な非線形写像を選択する！
  （例えば，下図だと $\Phi(x)=x^2$ とか）



カーネル関数による非線形写像の表現

- ✓ 非線形写像は非負のカーネル関数によって表現
- ✓ 評価関数の値によって異常/正常を判断する

非線形写像後の評価関数

$$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = \phi(\boldsymbol{x})\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} = \underbrace{\sum_{i=0}^{n} \alpha_i K\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}\right)}_{\text{双対表現}}$$

$\tilde{f}(\boldsymbol{x})$：**0に近い小さい値**
⇒異常！

$\tilde{f}(\boldsymbol{x})$：**0から離れた大きい値**
⇒正常！

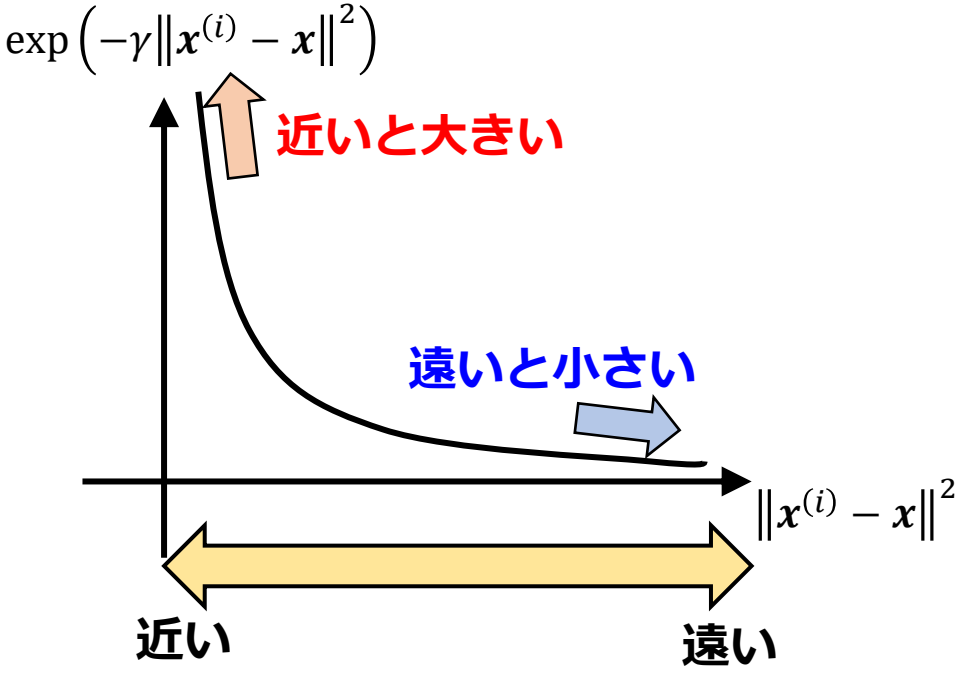
カーネル関数のイメージ

- ✓ カーネル関数は2つの入力ベクトルの**データの類似度を表現**
- ✓ 入力データに似た（=**正常の可能性が高い**）データは評価関数の値が大きくなる

評価関数（RBFカーネルの例）

$$\tilde{f}(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i K\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}\right)$$

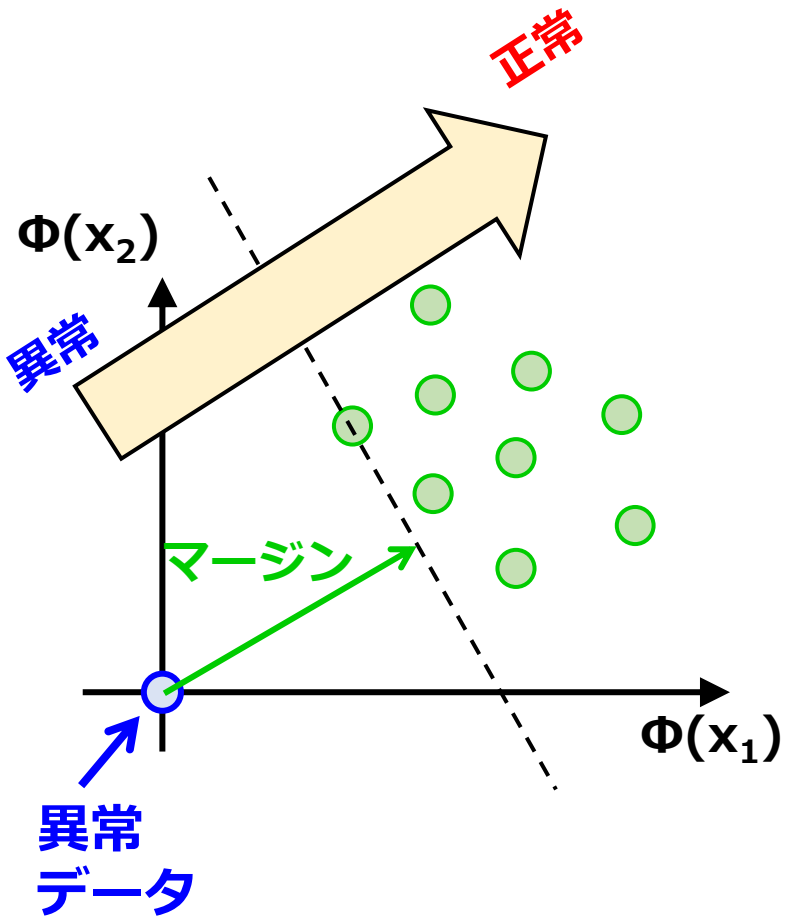
$$= \sum_{i=0}^{n} \alpha_i \underbrace{\exp\left(-\gamma \left\|\boldsymbol{x}^{(i)} - \boldsymbol{x}\right\|^2\right)}_{\text{RBFカーネル}}$$

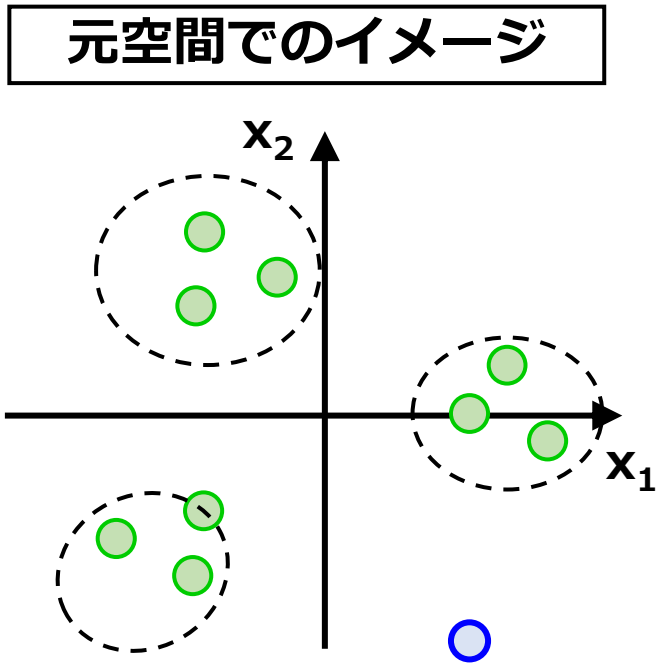


xとx(i)の(ユークリッド)距離が

1クラスSVMのマージン最大化（ハードマージン）

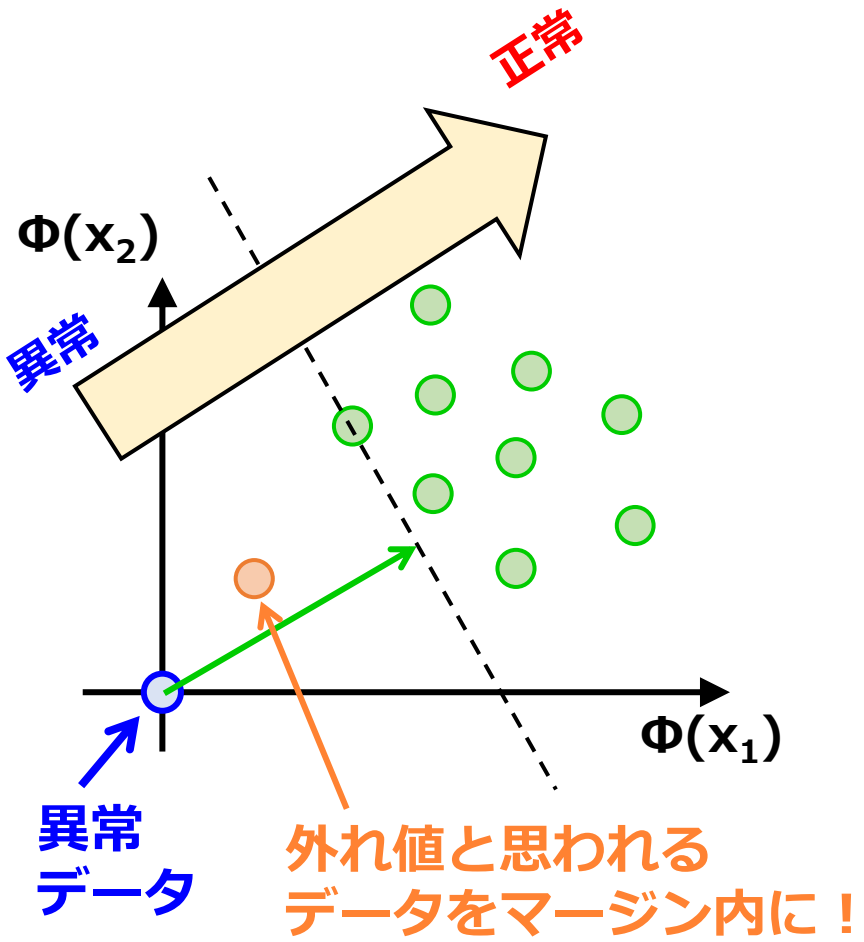
✓ ハードマージンでの1クラスSVMの分類境界は
原点からのマージンを最大化するように決定

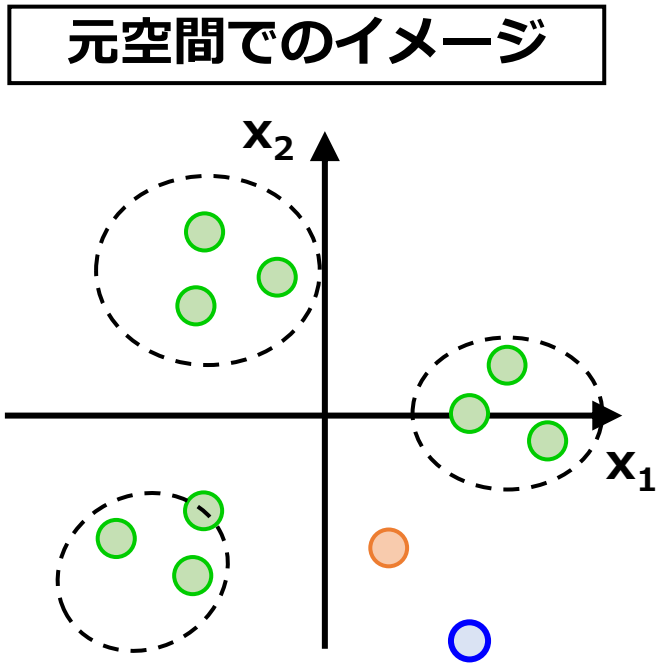




1クラスSVMのマージン最大化（ソフトマージン）

✓ ソフトマージンでの1クラスSVMの分類境界は
原点に近い異常データ（外れ値）がマージン内部に
侵入するのを許容





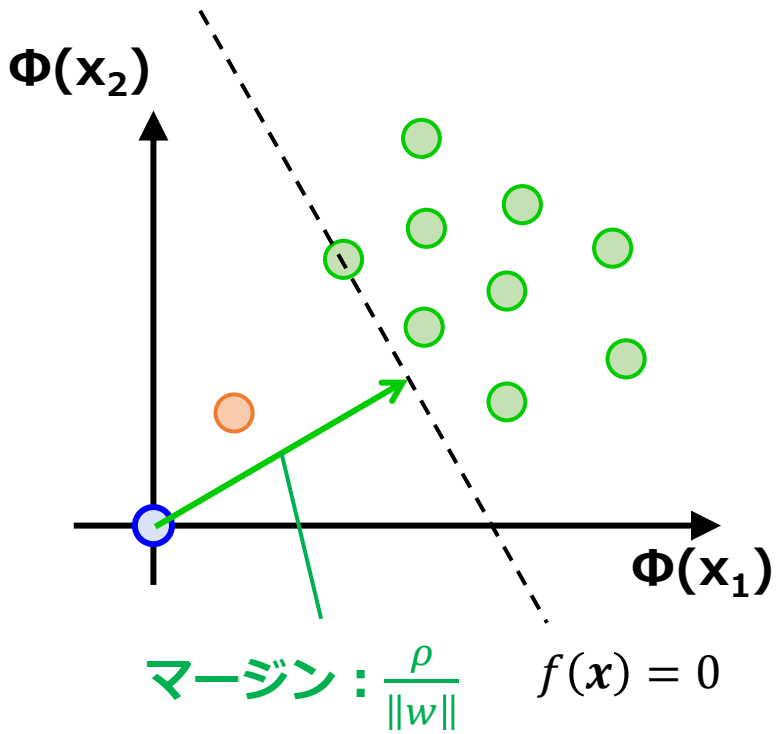
1クラスSVMの定式化

✓ 1クラスサポートベクターマシンの分類境界を
下記のように定義

1クラスSVMの分類境界

$$f(\boldsymbol{x}) = \phi(\boldsymbol{x})\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho = 0$$

$\rho > 0$ ：バイアス



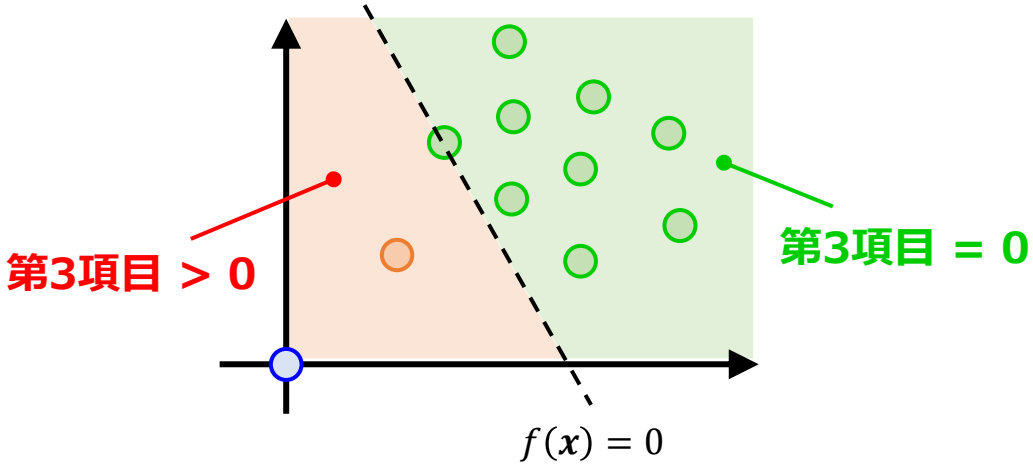
マージン最大化問題の定式化

- ✓ 1クラスSVMのマージン最大化問題は次式のように定式化できる
- ✓ 以降，サポートベクター回帰の定式化と類似する点が多いためこちらも要参照
- ✓ https://yuyumoyuyu.com/2021/01/10/supportvectorregression/

1クラスSVMのマージン最大化問題

$\nu > 0$ ：ハイパーパラメータ

$$\min_{\boldsymbol{w},\rho} \quad \underbrace{\frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \rho}_{\text{マージン}\frac{\rho}{\|w\|}\text{の最大化}} + \underbrace{\frac{1}{n\nu}\sum_{i=0}^{n}\max\{0, -(\phi(\boldsymbol{x}^{(i)})\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho)\}}_{\text{分類境界を超えて異常と判断するデータ数の最小化}}$$



スラック変数による主問題の導出

✓ スラック変数を導入することで
前頁の問題を制約あり最適化問題に変換する

1クラスSVMの主問題

$$\min_{\boldsymbol{w},\rho,\boldsymbol{\xi}} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \rho + \frac{1}{n\nu}\sum_{i=0}^{n}\xi_i$$

ここで
$\boldsymbol{\xi} = [\xi_0, \dots, \xi_n]^{\mathrm{T}}$

$$s.t.\ \ \xi_i \geq -\left(\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho\right), \xi_i \geq 0 \ \ (i = 0, \dots, n)$$

ラグランジュの未定乗数法による変換

✓ ラグランジュの未定乗数法により主問題をmax-min問題に変換する

$$\min_{\boldsymbol{w},\rho,\boldsymbol{\xi}} \quad \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \rho + \frac{1}{n\nu}\sum_{i=0}^{n}\xi_i$$

$$s.t. \quad \xi_i \geq -\left(\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho\right), \xi_i \geq 0 \quad (i = 0, \dots, n)$$

ラグランジュ関数の導入

$$L(\boldsymbol{w}, \rho, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \rho + \frac{1}{n\nu}\sum_{i=0}^{n}\xi_i - \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\left(\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho + \xi_i\right) - \sum_{i=0}^{n}\beta_i\xi_i$$

以下は全て新たに導入する非負の変数

$\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_0, \dots, \alpha_n]^{\mathrm{T}}$

$\boldsymbol{\beta} = [\beta_0, \dots, \beta_n]^{\mathrm{T}}$

変換したmax-min問題

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}\geq\boldsymbol{0},\boldsymbol{\beta}\geq\boldsymbol{0}} \quad \min_{\boldsymbol{w},\rho,\boldsymbol{\xi}} \quad L(\boldsymbol{w}, \rho, \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta})$$

この問題が主問題と等価であることの証明は省略（参考文献参照）

ラグランジュ関数の主変数による最小化

✓ ラグランジュ関数は主変数に対して微分可能であるため
各主変数で偏微分して0とすることで関係式を求める
（偏微分して0となる点で最小となる）

ラグランジュ関数

$$L(\boldsymbol{w},\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \rho + \frac{1}{n\nu}\sum_{i=0}^{n}\xi_i - \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\left(\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho + \xi_i\right) - \sum_{i=0}^{n}\beta_i\xi_i$$

主変数による偏微分

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}L = \boldsymbol{w} - \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right) = \boldsymbol{0} \Leftrightarrow \underline{\boldsymbol{w} = \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)}$$

$$\frac{\partial}{\partial \rho}L = -1 + \sum_{i=0}^{n}\alpha_i = 0 \Leftrightarrow \underline{\sum_{i=0}^{n}\alpha_i = 1}$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i}L = \underline{\frac{1}{n\nu} - \alpha_i - \beta_i = 0}, (i = 0,1,\ldots,n)$$

主変数を削除する

✓ 前ページで求めた関係式をラグランジュ関数に適用し
双対変数のみの関数に変形（主変数に対して最小化する）

$$L(\boldsymbol{w},\rho,\boldsymbol{\xi},\boldsymbol{\alpha},\boldsymbol{\beta}) = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 - \rho + \frac{1}{n\nu}\sum_{i=0}^{n}\xi_i - \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\left(\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho + \xi_i\right) - \sum_{i=0}^{n}\beta_i\xi_i$$

まとめる

$$= \frac{1}{2}\|\boldsymbol{w}\|^2 + \sum_{i=0}^{n}\left(\frac{1}{n\nu} - \alpha_i - \beta_i\right)\xi_i - \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho\left(1 - \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\right)$$

関係式を適用

$$= \frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}\alpha_i\alpha_j\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\phi\left(\boldsymbol{x}^{(j)}\right)^{\mathrm{T}} - \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}\alpha_i\alpha_j\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\phi\left(\boldsymbol{x}^{(j)}\right)^{\mathrm{T}}$$

まとめる

$$= -\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}\alpha_i\alpha_j\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right)\phi\left(\boldsymbol{x}^{(j)}\right)^{\mathrm{T}}$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}\alpha_i\alpha_j K\left(\boldsymbol{x}^{(i)},\boldsymbol{x}^{(j)}\right)$$

偏微分による関係式

$$\boldsymbol{w} = \sum_{i=0}^{n}\alpha_i\phi\left(\boldsymbol{x}^{(i)}\right), \quad \sum_{i=0}^{n}\alpha_i = 1$$

$$\frac{1}{n\nu} - \alpha_i - \beta_i = 0, \ (i = 0,1,\ldots,n)$$

β が計算過程で削除できるため
α のみの関数となる！

双対問題が完成

- ✓ 双対変数の非負条件と偏微分で得られた関係式から下記の範囲制約が求まる

$$0 \leq \alpha_i, 0 \leq \beta_i = \frac{1}{n\nu} - \alpha_i \Rightarrow 0 \leq \alpha_i \leq \frac{1}{n\nu}$$

- ✓ よって，双対問題は次式のように求まる
- ✓ 双対問題を解くと $\boldsymbol{\alpha}$ が求められる

1クラスSVMの双対問題

$$\max_{\boldsymbol{\alpha}} \quad -\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{n}\alpha_i\alpha_j K\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}^{(j)}\right)$$

$$\text{s.t.} \quad \sum_{i=0}^{n}\alpha_i = 1, 0 \leq \alpha_i \leq \frac{1}{n\nu}(i = 0, \ldots, n)$$

分類境界の双対表現

✓ 分類境界を双対表現すると次式の通り

1クラスSVMの分類境界

$$f(\boldsymbol{x}) = \phi(\boldsymbol{x})\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} - \rho = \sum_{i=0}^{n} \alpha_i K\left(\boldsymbol{x}^{(i)}, \boldsymbol{x}\right) - \rho = 0$$

ハイパーパラメータ ν の役割

- ✓ ハイパーパラメータ ν は学習データの偽陽性率を調整
- ✓ ν を大きくすると異常と判定される学習データが増加