外れ値に頑健な密度比推定

南雲　亮佑　総合研究大学院大学　統計科学専攻　博士課程（３年次編入学）４年

1　背景

製造業においては生産設備の異常検知による予知保全が課題となっている．予知保全では機械が完全に故障する前に小さな異常を検知することで，予防的に機械を点検して生産設備の停止による損失を小さくする．

異常検知の問題設定の一つに変化検知がある．例えば複数の機械が同期して動いているときに，ある一つの機械の同期がずれたことを検知する問題を考える．ここでは機械の間の関係性が変わるので，これを検知するのが変化検知の問題である．

変化検知の問題の難しさは，変化と外れ値を区別するところにある．現実世界で動作する機械は外れ値を含む場合があり，これを変化と区別して検知することが誤検知を減らすために重要である．

変化検知の従来技術の一つである密度比推定 (DRE: Density Ratio Estimation) は，参照分布 $p(x)$ と目標分布 $q(x)$ の密度比 $r(x) = p(x)/q(x)$ を求める手法である．この手法は変化をよく検知できるものの，外れ値にも反応するという欠点があった．外れ値に頑健な密度比推定として提案された Trimmed DRE という手法も外れ値にあまり頑健ではない．

そこで我々は，外れ値に頑健な密度比推定の手法として Weighted DRE と γ-DRE を提案する．Weighted DRE は eKL divergence に基づいており凸問題を最適化することでパラメータを推定する．γ-DRE は γ-divergence に基づいており，凸の差分問題を最適化することでパラメータを推定する．

この両手法は二重強頑健性 (doubly strong robustness) という望ましい性質を持つ．「二重」とは分布 $p(x)$ と $q(x)$ のどちらに外れ値が入ってもよい，「強」とは外れ値の多さに依存しない，という意味である．

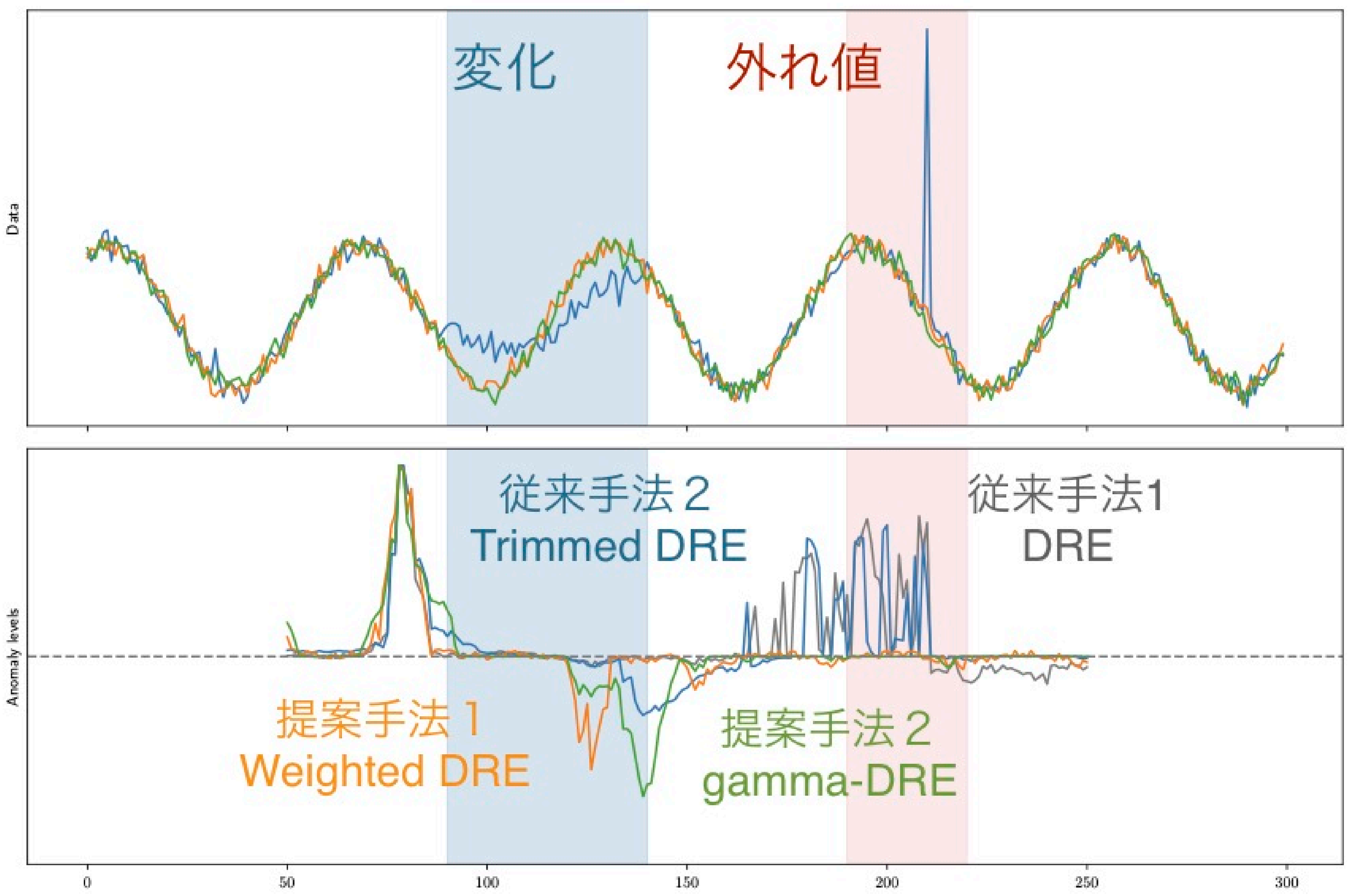

図 1: 外れ値を含む変化検知の例

2　提案手法

exp の形式で表現した密度比を外れ値に頑健に推定する方法を提案する．

$$r_{\boldsymbol{\theta},C} = Cr_{\boldsymbol{\theta}} = C\exp(\boldsymbol{\theta}^T h(\boldsymbol{x})) \tag{1}$$

2.1　Weighted DRE

eKL divergence に基づいて凸問題を最適化してパラメータを推定する．

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{eKL}}(r, r_{\boldsymbol{\theta},C}; wq) = &\int r(\boldsymbol{x}) \log \frac{r(\boldsymbol{x})}{r_{\boldsymbol{\theta},C}(\boldsymbol{x})} w(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \\ &- \int r(\boldsymbol{x})w(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} + \int r_{\boldsymbol{\theta},C}(\boldsymbol{x})w(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \end{aligned} \tag{2}$$

先に正規化項 C に関して最適化すると，パラメータ $\boldsymbol{\theta}$ を推定する式は凸問題になる．

$$\begin{aligned} &D_{\mathrm{eKL}}(r, r_{\boldsymbol{\theta}}; wq) \\ &= -\int \boldsymbol{\theta}^T h(\boldsymbol{x})w(\boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \\ &\quad + \int w(\boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \times \log \int \exp(\boldsymbol{\theta}^T h(\boldsymbol{x}))w(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} + \mathrm{const} \end{aligned} \tag{3}$$

2.2　γ-DRE

γ-divergence を使って密度比関数を最適化すると，正規化項を求めないために推定性能のわずかな向上が見込まれる．

$$\begin{aligned} d_\gamma(r, r_{\boldsymbol{\theta},C}; wq) = &-\frac{1}{\gamma}\log \int \exp(\gamma\boldsymbol{\theta}^T h(\boldsymbol{x}))w(\boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \\ &+ \frac{1}{1+\gamma}\log \int \exp((1+\gamma)\boldsymbol{\theta}^T h(\boldsymbol{x}))w(\boldsymbol{x})q(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \end{aligned} \tag{4}$$

3　実験

非対角成分の異なる２次元正規分布の密度比を推定する問題を考えることで，従来手法である DRE，Trimmed DRE よりも提案手法である Weighted DRE，γ-DRE の方が頑健であることが示された．

$$p^*(\boldsymbol{x}) = f_{\lambda_p}(\boldsymbol{x}),\ q(\boldsymbol{x}) = f_{\lambda_q}(\boldsymbol{x}),\ f_\lambda(\boldsymbol{x}) = N\left(\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}1 & \lambda\\ \lambda & 1\end{pmatrix}^{-1}\right)$$

- “clean”: $p^\dagger(\boldsymbol{x}) = p^*(\boldsymbol{x}),\ q^\dagger(\boldsymbol{x}) = q^*(\boldsymbol{x})$.
- “reference contamination”: $p^\dagger(\boldsymbol{x}) = 0.8p^*(\boldsymbol{x}) + 0.2\delta(\boldsymbol{x}),\ q^\dagger(\boldsymbol{x}) = q^*(\boldsymbol{x})$.
- “target contamination”: $p^\dagger(\boldsymbol{x}) = p^*(\boldsymbol{x}),\ q^\dagger(\boldsymbol{x}) = 0.8q^*(\boldsymbol{x}) + 0.2\delta(\boldsymbol{x})$.
- “double contamination”: $p^\dagger(\boldsymbol{x}) = 0.8p^*(\boldsymbol{x}) + 0.2\delta(\boldsymbol{x}),\ q^\dagger(\boldsymbol{x}) = 0.8q^*(\boldsymbol{x}) + 0.2\delta(\boldsymbol{x})$.

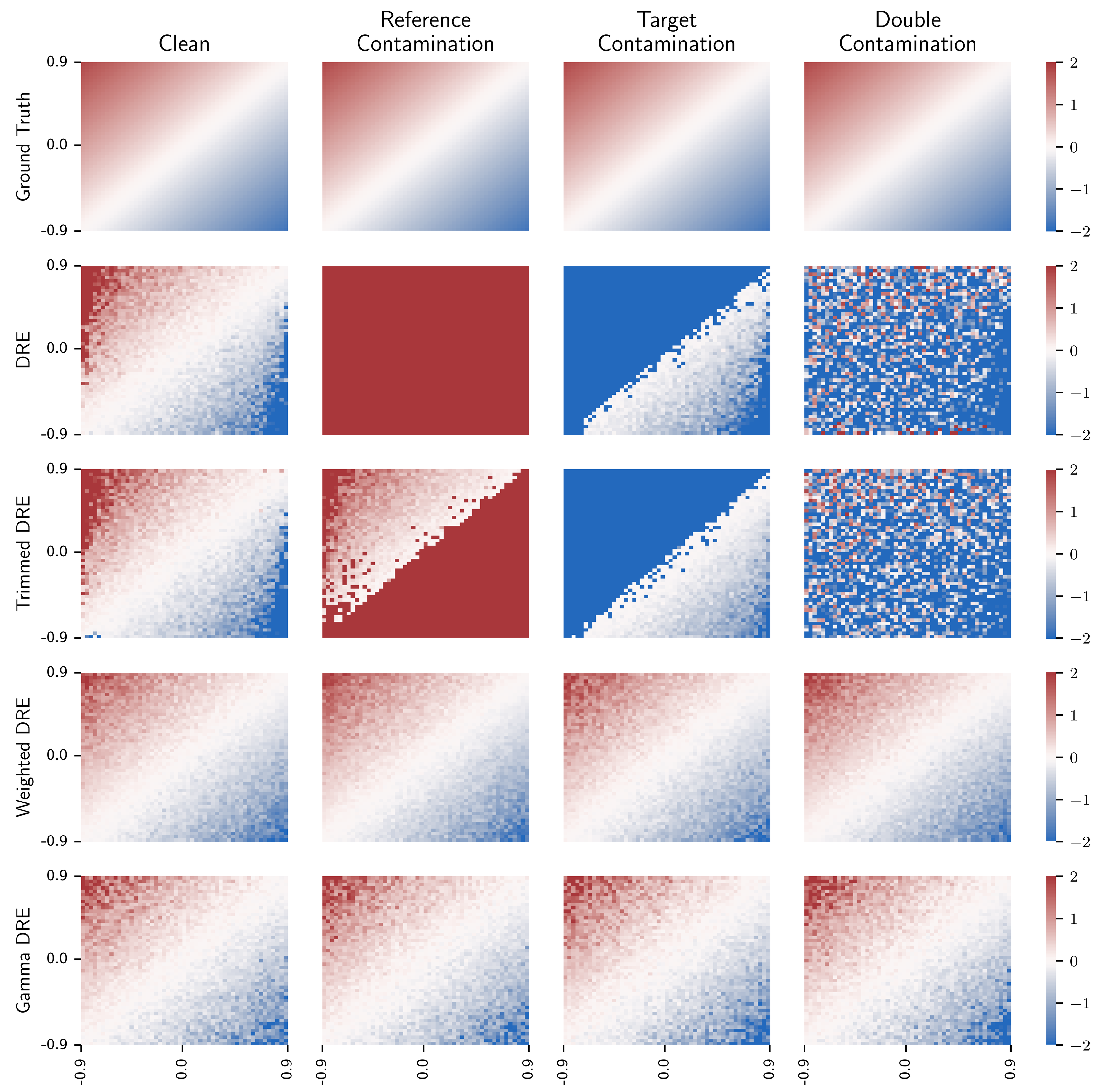

図 2: 外れ値の混入状況を変えたときの密度比推定の結果