入門講座

インフォマティクス入門－5

教師なし学習－外れ値検知－

Unsupervised Learning – Outlier Detection –

小野田　崇
Takashi Onoda
青山学院大学
理工学部　経営システム工学科
教授

1 はじめに

前稿の教師あり学習－分類問題－では、2つのクイズを考えてもらった。本稿では、教師なし学習－外れ値検知－を扱うため、「仲間外れ」探しクイズを思い出してもらう。

表1に示した生物の中で仲間外れ生物は誰でしょう。みなさんどれが仲間外れだと考えますか。回答例を図1、2に示す。図1は、「かたさ」(甲殻がある) と「足の本数」に基づいてグループ分けし、仲間外れの「いか」を発見した回答例である。図2は、「生息している場所」に基づいてグループ分けし、仲間外れの「くも」を発見した回答例である。

「仲間外れ」探しクイズの場合、ある視点からグループを生成し、それぞれの対象 (「くも」や「やどかり」など) がどのグループに属するのかを評価する。「仲間外れ」探しの場合は、グループに属さない対象を見つけることになる。この「仲間外れ」探しクイズは、機械学習の2大タスクの一つである「教師なし学習」に対応する。厳密には「仲間外れ」探しクイズは、教師なし学習の中のクラスタリングというタスクを表す。

表1　「仲間外れ」探し：仲間外れは誰？

くも
やどかり
いか
たこ
毛ガニ
花咲ガニ
ざりがに

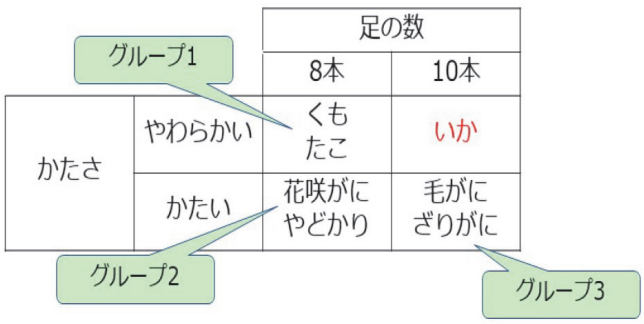

図1　「かたさ」と「足の本数」でグループ分類

2 教師なし学習 (外れ値検知)

教師なし学習では、教師あり学習ではあった入出力関係についてのヒントがない。つまり、教師なし学習では、出力が与えられず、入力のみが与えられる。そのため、入力だけから出力らしきものをつくる必要がある。教師がつかない自習のような感じである。「あり」「なし」などのラベルが明示的に与えられないので、教師なし学習はグループ分けくらいしかできない。

この教師なし学習の目的は、入力$\boldsymbol{x}$が与えられたとき、この入力$\boldsymbol{x}$をグループ (y) 分けすることである。例えば、前述の「仲間外れ」探しクイズの場合、入力$\boldsymbol{x}$は表1にある「くも」、「やどかり」、「いか」、「たこ」などであり、出力はyはグループ1、グループ2など (実際はグループ1、グループ2のような明示的なラベルを付ける必要はない) である。

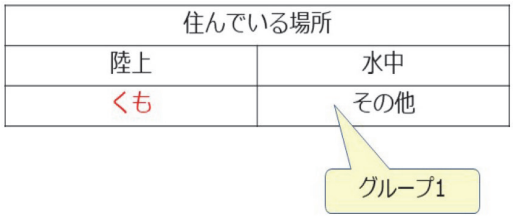

図2　生息場所でグループ分類

教師なし学習を計算機上に実現するためには、まず入力を数理的にとらえる必要がある。教師なし学習の場合、出力はある種のグループのようなものとして生成されるので、出力の数理的な表現を考える必要はない。前述した「仲間外れ」探しクイズの場合の入力である「くも」、「やどかり」、「いか」などは計算機上でどのように扱えばいいのであろうか？つまり、教師なし学習における入力をどのように数理的（計算機可読な形式）に表現すればいいのであろうか？一般に、教師なし学習における入力は、教師あり学習と同様に、入力対象の特徴量を列挙したD次元の実数値ベクトル$\boldsymbol{x}$で表現される。この実数値ベクトル$\boldsymbol{x}$は特徴ベクトルと呼ばれ、特徴ベクトルが構成する領域は特徴空間と呼ばれる。この特徴ベクトルは以下の式で一般に表される。

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_D \end{pmatrix} \in \Re^D \quad \cdots\cdots (1)$$

上式の$x_1, x_2, \cdots, x_D$には、特徴量の値が入る。例えば、$\boldsymbol{x}$が「いちご」であったとする。この場合、「いちご」を表すために、x_1には特徴量としていちごの赤みの度合いの値が入り、x_2には特徴量としていちごのビタミンCの含有量が入り、x_Dには特徴量としていちごの形状の値が入るといったことになる。

特徴ベクトル$\boldsymbol{x}$の設計は完全にドメイン（解きたい問題）依存であり、一般的な解はない。特徴ベクトル$\boldsymbol{x}$は、ユーザの目的に合わせて、ユーザが設計する必要がある。教師あり学習の学習データは、N個の入力ベクトルで以下の式のように与えられる。

$$\left\{\boldsymbol{x}^{(1)}, \boldsymbol{x}^{(2)}, \cdots, \boldsymbol{x}^{(N)}\right\} \quad \cdots\cdots (2)$$

ここで、$\boldsymbol{x}^{(i)}$はi番目の事例の入力ベクトルを表す。

教師なし学習は、明示的に指定されることなしに、「概念」を形成するプロセスを表している（大げさに言えばですが）。教師なし学習の実行例を図3に示す。図3では、特徴ベクトルが1次元で与えられ、その特徴量は「形状」であるとする。いくつかの果実の「形状」のデータが収集されている状況であるとする。図3の特徴量xは右に行くほど「形状」が尖っている形状を表す。図3の例では、観測された果実の「形状」データのヒストグラムが概ね赤い実線のようになり、3つの山が発見されている。左から「丸いグループ」、「やや角張ったグループ」、「逆三角形のグループ」となっている。図3の場合は、観測した果実との関係を見てみると、一番左のグループが「トマト」、真ん中のグループが「リンゴ」、一番右が「イチゴ」であることを確認できたという例である。現実のデータで教師なし学習を行った場合は、グループは構成されるものの、何のグループなのかの判断は分析者の判断による。

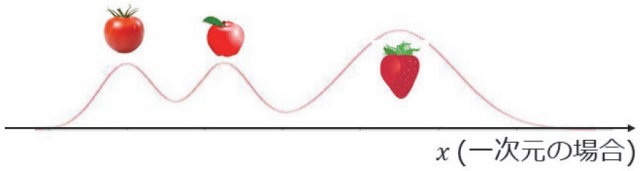

図3　教師なし学習実行例

クラスタリングのタスクを扱う教師なし学習には、非階層型クラスタリング手法のk-means法、階層型クラスタリング手法のウォード法など様々な方法が用いられる。また、外れ値検知（「仲間外れ」探し）のタスクを扱う教師なし学習には、1-クラスサポートベクトルマシン（1-Class SVM）、サポートベクトルデータ記述（SVDD）など様々な方法が用いられる。教師あり学習の場合と同様に、教師なし学習を行う機械学習手法にもそれぞれ長所、短所があるので、ユーザの目的に合った機械学習手法を選択することが重要となる。

3 外れ値検知の事例

ここでは、教師なし学習の中の外れ値検知の事例を紹介する。

3.1 機械システムの異常検知

機械システムの異常検知は、システムに設置されたセンサからの取得データが通常通りであるか、通常からは外れているのかを判断する問題である。機械システムにおけるセンサデータを表す入力ベクトル（センサデータベクトル）$\boldsymbol{x}$の例を図4に示す。

このセンサデータベクトルにk-means法などのクラスタリング手法や1-クラスサポートベクトルマシン（1-Class SVM）などの外れ値検知手法といった機械学習手法を適用し、図5に示すように、代表点（図5では$\boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\mu}^{(3)}$から遠い$\boldsymbol{x}$（図5で

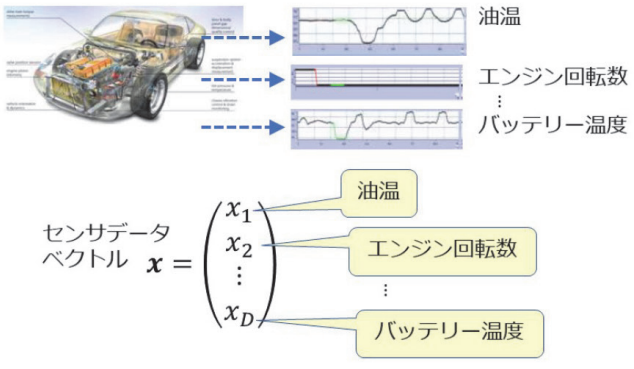

図4　センサデータベクトルの例

は$\boldsymbol{x}^{(9)}$を「めったに起こらない状態」として検出する。つまり、この「めったに起こらない状態」は、システム異常、不正操作、計器故障などの可能性があると判断するのである。ちなみに、図5の$\boldsymbol{x}^{(1)}$, $\boldsymbol{x}^{(2)}$, …, $\boldsymbol{x}^{(8)}$は典型的な値を表す。

3.2　サイバー攻撃検知

サイバー攻撃検知、防御には図6に示すように様々な対策がある。ここでは電気学会論文誌C, Vol. 132, No. 1の「監視制御通信におけるシーケンスを考慮した侵入検知」[1]で扱われているビジネスネットワークにおける侵入検知について紹介する。

ネットワークへの侵入検知問題は、ネットワーク上から取得できる情報からネットワークへの不正侵入を検知する問題である。ここではビジネスネットワーク上から取得できる情報からネットワークへの不正侵入を検知する問題を考える。この問題のためのベンチマークデータはDARPAより提供されている[2,3]。DARPAのデータで利用できる入力ベクトル（ネットワーク情報ベクトル）$\boldsymbol{x}$を図7に示す。学習データとしてDARPAのデータからランダムに正規通信のパケット（上記のネットワーク情報ベクトルを有する）を10,000データ抽出し、テストデータとしてDARPAのデータからランダムに正規通信、不正規通信を含むパケットを10,000データ抽出している。この論文ではこの学習データとテストデータの組をランダムに10セット用意し、平均評価を行い、不正侵入の高い検出率を示している。

3.3　プラントシステムの異常予兆検知

ここでは、電気学会D部門論文誌、Vol. 131, No. 4の「水力発電所における異常予兆発見支援ツールの開発」[4]における例外状態のセンサデータパターンの抽出について紹介する。この水力発電所における例外状態のセンサデータパターン抽出問題は、水力発電所に設置された複数のセンサ値のパターンから発生確率の低い稀頻度パターンを抽出する問題である。

水力発電所は常に頑健に設計されているため、異常がほとんど起こらない。つまり、水力発電所が異常状態のセンサ値パターンがない。このような状況の下、上記の論文で扱われている問題は、正常状態のセンサ値パターンのみから異常予兆を発見しようとするものである。ここで、上記論文で扱われている「正常状態」、「例外状態」、「通常の状態」について、図8を利用して簡単に説明しておく。現在稼働中の水力発電所は頑健に設計されているため、何の問題もなく運転がされている。この何の問題もなく運転がされている状態を「正常状態」という（図8斜線領域）。「通常の状態」は「正常状態」の中にあり、ある程度の頻度で起こる状態を意味する。図8の場合、約0.00001より大きい頻度で起こる状態を表す（図8の緑円内）。「例外状態」は非常に低い頻度でしか起こらない状態を意味する。図8の場合、約0.00001より小さい頻度で起こる状態を表す（図8の黒星）。

現状の水力発電所には異常状態のセンサ値パターンがないため、この論文では「異常予兆」を「例外状態のセンサ値パターンの急激な増加」と定義している。そのため、この論文で扱う問題にとって、水力発電所の異常に関連するような例外状態のセンサ値パターンの抽出が重要となる。この問題における入力ベクトル$\boldsymbol{x}$はセンサ値パターンとなる。起動時、解列時のセンサ値パターンは、表2に示したセンサのNo.1を

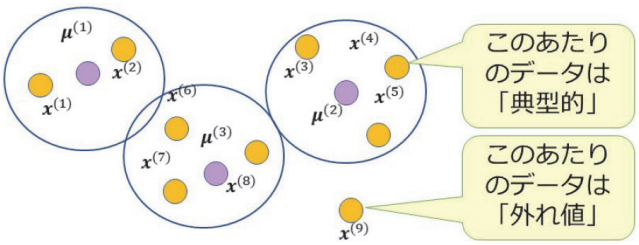

図5　外れ値検知の例

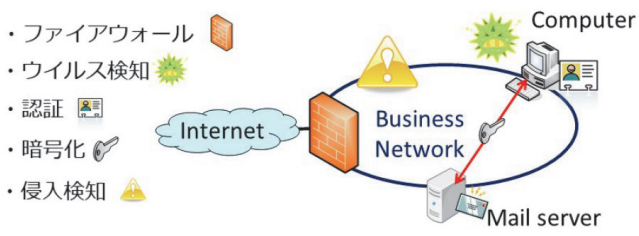

図6　様々なセキュリティ対策技術

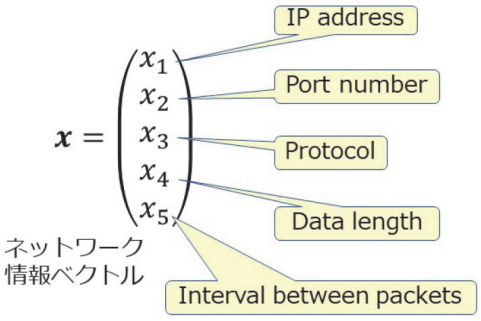

図7　ネットワーク情報ベクトル

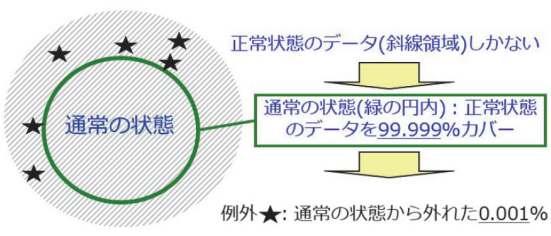

図8　例外状態のセンサ値パターン抽出例

表2 センサ値パターン𝒙

No.	センサ
1	発生電力
2	回転速度
3	上部軸受油温－オイルクラー入口空気温度
4	水車軸受油温
5	スラスト軸受油温
6	下部油槽油温度
7	下部軸受入気温度
8	水車軸振(X 軸)
9	上部振動(垂直)
10	上部振動(水平)
11	下部振動(垂直)
12	下部振動(水平)
13	水車振動(垂直)
14	水車振動(水平)

除いた13個のセンサ値で構成され、並列時のセンサ値パターンは表2に示した14個全てのセンサ値で構成される。

論文では上記のセンサ値パターンを5秒間隔で概ね2年分収集し、はじめの1年分で例外状態のセンサ値パターンを抽出し (図8参照)、残りの概ね1年分で例外状態のセンサ値パターン発生率を分析している。その結果、軸受での油漏れの早期発見に成功している。

図8において、から例外状態のセンサ値パターンは、非常に稀に起こるセンサ値パターンであることがわかる。また、水力発電所ではセンサ値が高いことが水力発電所にとって危険である場合が多い。そこで論文では、センサ値が高く、かつ、図8のように非常に稀に起こるセンサ値パターンを抽出している。

4 おわりに

本稿では教師なし学習、厳密には教師なし学習の外れ値検知について、事例を中心に紹介した。最初に述べたように教師なし学習は視点を変えると答えが変わる可能性が高い。そのため、教師なし学習は教師あり学習と比較して、学習性能の評価が難しい。逆に考えれば、視点を変えた様々な結果を生成してくれるため、人間にある種の気づきを与えてくれる可能性がある。

読者が本稿を読んで、教師なし学習を利用してみようと考えてもらえれば幸いである。

参考文献

1) 木内舞, 小野田崇:電気学会C部門論文誌, 132 (2012) 1, 14.
2) Y. Bengio and P. Frasconi：IEEE Transactions on Neural Networks, 7 (1996) 5, 1231.
3) R. P. Lippmann, J. W. Haines, D. J. Fried, J. Korba and K. Das：Computer Networks, 34 (2000), 579.
4) 小野田崇, 伊藤憲彦, 是枝英明：電気学会D部門論文誌, 131 (2011) 4, 448.

(2020年9月30日受付)