

ЧЕБЫШЕВСКИЙ СБОРНИК

Том 23. Выпуск 5.

УДК 004.8, 514

DOI 10.22405/2226-8383-2022-23-5-227-240

Распознавание аномалий неизвестного заранее типа

А. О. Иванов, Г. В. Носовский, В. А. Кибкало, М. А. Никулин, Ф. Ю. Попеленский,
Д. А. Федосеев, И. В. Грибушин, В. В. Злобин, С. С. Кузин, И. Л. Мазуренко

Иванов Александр Олегович — доктор физико-математических наук, профессор, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (г. Москва).

e-mail: aoiva@mech.math.msu.su

Носовский Глеб Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (г. Москва).

e-mail: gleb_nosovskiy@mail.ru

Кибкало Владислав Александрович — кандидат физико-математических наук, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова; Московский центр фундаментальной и прикладной математики (г. Москва).

e-mail: slava.kibkalo@gmail.com

Никулин Михаил Александрович — аспирант, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (г. Москва).

e-mail: nikmihale@gmail.com

Попеленский Федор Юрьевич — кандидат физико-математических наук, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (г. Москва).

e-mail: popelens@mech.math.msu.su

Федосеев Денис Александрович — кандидат физико-математических наук, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова (г. Москва).

e-mail: denfedex@yandex.ru

Грибушин Иван Владимирович (писать ему) — ведущий инженер, ООО «Техкомпания Хуавей» (г. Москва).

e-mail: ivangribushin@yandex.ru

Злобин Валерий Валерьевич — ведущий инженер ключевых проектов, ООО «Техкомпания Хуавей» (г. Москва).

e-mail: hello.valera@gmail.com

Кузин Сергей Сергеевич — ведущий инженер, ООО «Техкомпания Хуавей» (г. Москва).

e-mail: serkuz23@ya.ru

Мазуренко Иван Леонидович — кандидат физико-математических наук, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова; заведующий лабораторией интеллектуальных систем и науки о данных HUAWEI, ООО «Техкомпания Хуавей» (г. Москва).

e-mail: ivan@mazurenko.ru

Аннотация

В работе предложена модификация метода PaDiM детекции аномалий, сопоставляющему изображению вектор и вычисляющему расстояние Махаланобиса от такого вектора до распределения векторов обучающего множества. Выделяется подмножество тех координатных осей векторов, распределение вдоль которых наименее близко к нормальному в сравнении с остальными по выбранному статистическому критерию. Применение к этим координатам векторов процедуры выпрямления (униформизации) перед вычислением расстояния Махаланобиса повышает значение ROCAUC метода PaDiM.

Ключевые слова: детекция аномалий, нормальное распределение, униформизация.

Библиография: 18 названий.

Для цитирования:

А. О. Иванов, Г. В. Носовский, В. А. Кибкало. Распознавание аномалий неизвестного заранее типа // Чебышевский сборник, 2022, т. 23, вып. 5, с. 227–240.

CHEBYSHEVSKII SBORNIK

Vol. 23. No. 5.

UDC 004.8, 514

DOI 10.22405/2226-8383-2022-23-5-227-240

Recognition of anomalies of an a priori unknown type

A. O. Ivanov, G. V. Nosovskiy, V. A. Kibkalo, M. A. Nikulin, F. Yu. Popelensky, D. A. Fedoseev,
I. V. Gribushin, V. V. Zlobin, S. S. Kuzin, I. L. Mazurenko

Ivanov Alexander Olegovich — doctor of physical and mathematical sciences, professor, Lomonosov Moscow State University (Moscow).

e-mail: aoiva@mech.math.msu.su

Nosovsky Gleb Vladimirovich — candidate of physical and mathematical sciences, associate professor, Lomonosov Moscow State University (Moscow).

e-mail: gleb_nosovskiy@mail.ru

Kibkalo Vladislav Alexandrovich — candidate of physical and mathematical sciences, Lomonosov Moscow State University; Moscow Center for Fundamental and Applied Mathematics (Moscow).

e-mail: slava.kibkalo@gmail.com

Nikulin Mikhail Alexandrovich — postgraduate student, Lomonosov Moscow State University (Moscow).

e-mail: nikmihale@gmail.com

Popelensky Fyodor Yurievich — candidate of physical and mathematical sciences, Lomonosov Moscow State University (Moscow).

e-mail: popelens@mech.math.msu.su

Fedoseev Denis Alexandrovich — candidate of physical and mathematical sciences, Lomonosov Moscow State University (Moscow).

e-mail: denfedex@yandex.ru

Gribushin Ivan Vladimirovich — lead engineer, LLC «Huawei Tech Company» (Moscow).

e-mail: ivangribushin@yandex.ru

Valery Valerievich Zlobin — leading engineer of key projects, LLC «Huawei Tech Company» (Moscow).

e-mail: hello.valera@gmail.com

Kuzin Sergey Sergeevich — leading engineer, LLC «Huawei Tech Company» (Moscow).

e-mail: serkuz23@ya.ru

Mazurenko Ivan Leonidovich — candidate of physical and mathematical sciences, Lomonosov Moscow State University; Head of the Laboratory of Intelligent Systems and Data Science HUAWEI, LLC «Huawei Tech Company» (Moscow).

e-mail: ivan@mazurenko.ru

Abstract

In the present article we propose a modification of the PaDiM anomaly detection method which maps images to vectors and then calculates the Mahalanobis distance between such vectors and the distribution of the vectors of the training set. Of the coordinate axes of the vectors we choose a subset of such that the distribution along them is close to normal according to the chosen statistical criterion. The uniformization procedure is then applied to those coordinates and the Mahalanobis distance is calculated. This approach is shown to increase the ROCAUC value in comparison with the PaDiM method.

Keywords: anomaly detection, normal distribution, uniformization.

Bibliography: 18 titles.

For citation:

A. O. Ivanov, G. V. Nosovskiy, V. A. Kibkalo et al., 2022, “Recognition of anomalies of an a priori unknown type”, *Chebyshevskii sbornik*, vol. 23, no. 5, pp. 227–240.

1. Введение

В настоящей работе рассматривается применение ряда геометрических методов для решения задачи *распознавания аномалий*. Общая постановка задачи следующая: имея базу данных фотографий качественных объектов одного и того же вида, построить алгоритм распознавания, проверяющий является ли объект того же вида на новой фотографии качественным или нет. Задачи подобного типа широко известны, см., например, [9].

Более точно, имеется множество фотографий качественных предметов определенного вида, которое заранее подается на вход нейросети. Нейросеть строит по каждой фотографии точку в многомерном евклидовом пространстве $\mathbb{R}^N$. Таким образом, получается облако точек $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^N$. При работе алгоритма в реальном времени на вход подается тестовая фотография P по которой при помощи той же нейросети строится точка $x_P \in \mathbb{R}^N$. Алгоритм должен по имеющемуся облаку $\mathcal{X}$ и точке x_P определить, является ли объект на фотографии P качественным или аномальным.

Как и в иных задачах компьютерного зрения, использующих нейросети, предполагается справедливой *гипотеза о многообразии*, согласно которой точки множества $\mathcal{X}$ сосредоточены в малой окрестности некоторого многообразия M (вообще говоря, не обязательно связного и, возможно, с особенностями), см., например, [11]. Как следствие, важным шагом к решению поставленной задачи является анализ многообразия M , в частности, оценка его размерности. Вторая стадия решения задачи — построение аналога функции расстояния в пространстве $\mathbb{R}^N$, которое эффективно характеризует близость тестовой точки x_P к облаку $\mathcal{X}$ “качественных” точек.

В настоящей работе представлены результаты (для конкретного множества типов объектов и конкретной нейросети) по обоим вопросам: в разделе 2 приведены результаты оценки размерности при помощи подсчета размерности Минковского для облака $\mathcal{X}$, в разделе 3 описано улучшение показателя ROCAUC эффективности распознавания аномалий при помощи предложенного авторами метода, основанного на раздельной обработке “более гауссовых” и “менее гауссовых” координат — то есть, координат, распределение которых в облаке “качественных точек” ближе или дальше от гауссовского распределения в соответствии с подходящей мерой близости и выбранным порогом.

2. Оценка размерности при помощи размерности Минковского

Оценка размерности облака точек, соответствующего изучаемым изображениям, крайне важна в задаче распознавания образов и выявления аномалий (см., например, [10, 12, 14, 15,

16, 17, 18]). В настоящей работе мы предлагаем использование метода, основанного на понятии размерности Минковского.

Идея применяемого здесь метода оценки размерности заключается в следующем. Если мы замостим евклидово пространство $\mathbb{R}^m$ маленькими кубами и посчитаем число кубов замощения, необходимых для покрытия данного подмножества пространства $\mathbb{R}^m$, мы получим величину, асимптотически описывающую *фрактальную размерность* этого подмножества — *размерность Минковского* [1, 13]. Если рассматриваемое подмножество является многообразием, размерность Минковского совпадает с размерностью этого многообразия. Для вычисления размерности Минковского может быть использован хорошо известный *box-counting алгоритм*, основанный на подсчете числа необходимых для замощения данного подмножества кубиков в зависимости от их размера.

Формально размерность Минковского подмножества $M \subset \mathbb{R}^m$ определяется следующим образом. Разобьем пространство $\mathbb{R}^m$ на m -мерные кубы со стороной r , так что любые два куба с непустым пересечением пересекаются либо по вершине, либо по ребру, либо по грани. Обозначим множество этих кубов через B_r . Рассмотрим число $N(r)$ кубов, пересекающихся с множеством M :

$$N(r) = |\{B \in B_r \mid B \cap M \neq \emptyset\}|. \quad (1)$$

Размерностью Минковского множества M называется предел (если он существует)

$$\dim_{\text{mink}}(M) = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\log N(r)}{\log(1/r)}. \quad (2)$$

В случае, когда M — n -мерное многообразие, при $r \rightarrow 0$ имеем $N(r) \sim \frac{V}{r^n}$, где V — n -мерный объем M . Следовательно, при $r \rightarrow 0$ справедлива асимптотическая оценка

$$\log N(r) \sim \log V - n \log r. \quad (3)$$

Это означает, что $\log N(r)$ — асимптотически линейная функция от $\log r$. Следовательно, размерность n многообразия M может быть оценена как угловой коэффициент соответствующей экспериментальной функции (если она оказывается приблизительно линейной), см. Рис. 1.

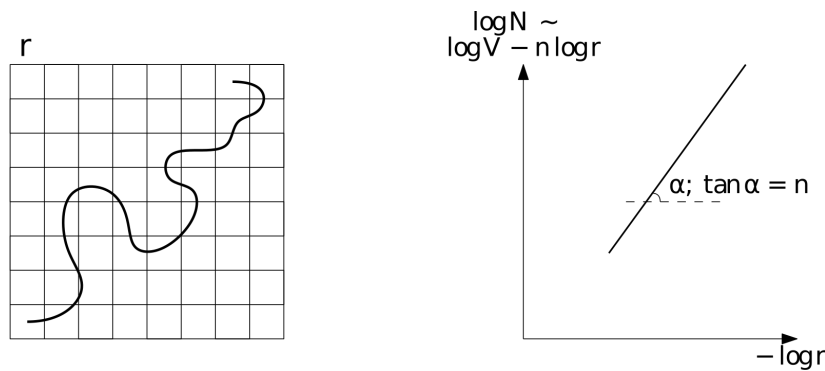


Рис 1: Размерность Минковского одномерной кривой на двумерной плоскости. Угловой коэффициент: $\tan \alpha = 1$

Рассмотрим теперь облако, состоящее из конечного числа точек $\mathcal{C} = \{P_i\}$, расположенных в малой окрестности некоторого n -мерного многообразия M . Мы хотим найти размерность n многообразия M , применяя алгоритм вычисления размерности Минковского к облаку $\mathcal{C}$. Определим $N(r)$ как число кубов, содержащих точки облака $\mathcal{C}$. Предполагая, что $\mathcal{C}$ содержит достаточно большое количество точек (достаточное число точек зависит от m и n), мы можем оценить n при помощи асимптотической формулы (3).

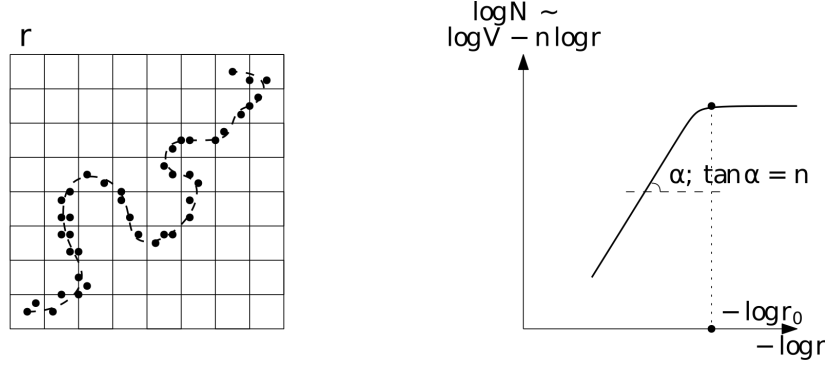


Рис 2: Размерность Минковского для облака точек в окрестности одномерной кривой на двумерной плоскости. Для $-\log r \geq -\log r_0$ график становится горизонтальным

Заметим, что формула (3) для $\log N$ справедлива только если $r > r_0 > \frac{d}{\sqrt{m}}$ для некоторого критического r_0 , где d — минимальное расстояние между точками облака: $d = \min_{i \neq j} \{|P_i - P_j|\}$. В самом деле, если $r < \frac{d}{\sqrt{m}}$, то каждый куб содержит не более одной точки множества, а потому при $r < \frac{d}{\sqrt{m}}$ имеем $\log N(r) = \log |\mathcal{C}| = \text{const}$, см. Рис. 2. Это означает, что в этом случае размерность следует оценивать используя только $r > r_0$.

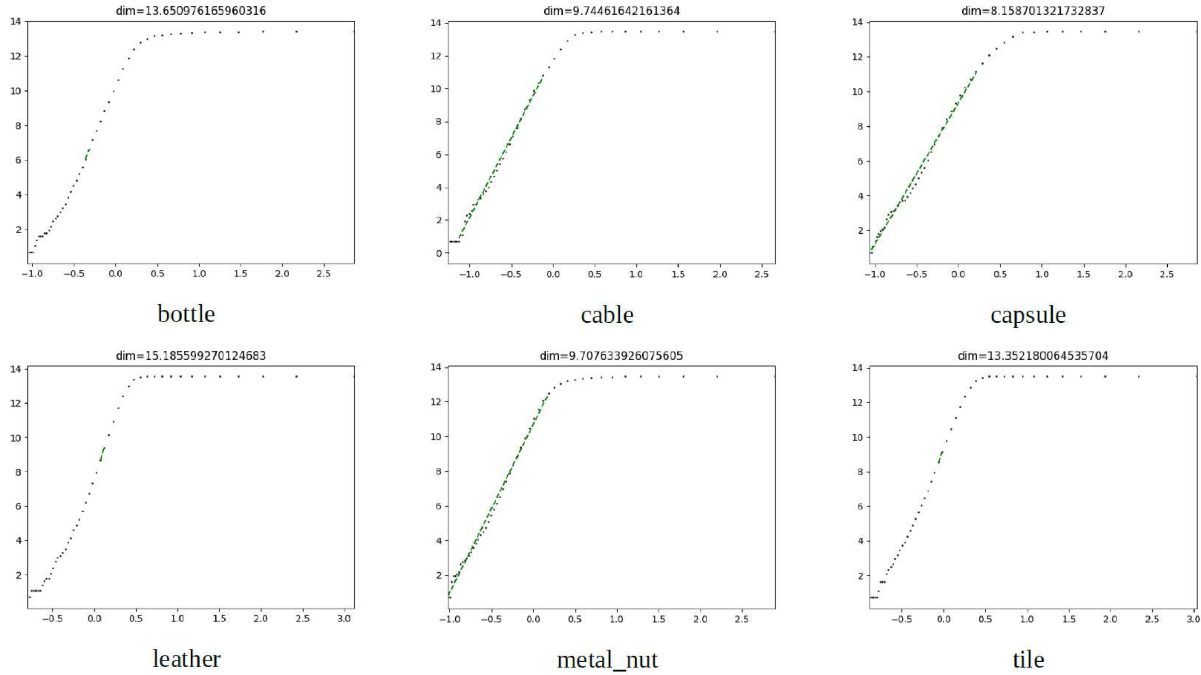


Рис 3: Оценка размерности Минковского для разных типов объектов: график и линейное приближение

Приведем результаты оценки размерности для реальных облаков точек (эти точки иногда называют эмбедингами) в 1700-мерном пространстве, вычисленных для открытой базы объектов MVТес [4] по методу PaDiM [2, 3] путем применения нейросети WideResNet50. Количество типов объектов в базе MVТес равно 15. В таблице 1 для каждого из этих 15 типов приведено значение оценки размерности Минковского для соответствующего облака точек.

Как оказалось, значения размерности Минковского для всех изученных типов объектов

находятся в диапазоне от 8 до 15. При этом, как показали расчеты, многообразие в этих примерах довольно быстро отходит от своей касательной плоскости в любой точке, то есть, по-видимому, вложено в объемлющее пространство достаточно сложным, искривленным способом.

Объект	Оценка размерности Минковского
bottle	13.65
cable	9.74
capsule	8.16
carpet	12.27
grid	13.00
hazelnut	9.17
leather	15.19
metal_nut	9.71
pill	11.02
screw	8.65
tile	13.35
toothbrush	12.41
transistor	10.25
wood	13.05
zipper	13.37
Среднее	11.53

Таблица 1: Оценка размерности Минковского

3. Улучшение эффективности распознавания аномалий

При решении задачи распознавания аномалий часто используется так называемое *расстояние Махаланобиса*.

3.1. Обычное расстояние Махаланобиса

Говоря неформально, расстояние Махаланобиса — это расстояние от данной точки в многомерном евклидовом пространстве до данного (в идеале — многомерного нормального) распределения в этом пространстве. Дадим формальное определение.

Рассмотрим случайное распределение в пространстве $\mathbb{R}^N$ со средним $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_N)^T$ и матрицей ковариации S . Тогда расстояние Махаланобиса от точки $x = (x_1, \dots, x_N)^T$ до этого распределения определяется как

$$D_M(x) = \sqrt{(x - \mu)^T S^{-1} (x - \mu)}.$$

В случае нормального распределения важно отметить, что плотность вероятности в точке x однозначно определяет расстояние Махаланобиса:

$$\begin{aligned} p(x)dx &= \frac{1}{\sqrt{\det 2\pi S}} \exp\left(-\frac{(x - \mu)^T S^{-1} (x - \mu)}{2}\right) dx = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\det 2\pi S}} \exp\left(-\frac{D_M^2(x)}{2}\right) dx \end{aligned}$$

С геометрической точки зрения расстояние Махаланобиса можно понимать следующим образом. Рассмотрим для примера двумерный случай. Тогда линиями уровня плотности нормального распределения на плоскости являются эллипсы. Преобразование плоскости $T_M: x \mapsto S^{-1}x$, называемое преобразованием Махаланобиса, превращает эти эллипсы в концентрические окружности. После такого преобразования подсчет расстояния Махаланобиса сводится к вычислению обычного евклидова расстояния до центра распределения.

Важно отметить, что в случае нормального распределения расстояние Махаланобиса обладает следующим важнейшим свойством: все точки, плотность распределения в которых одна и та же, лежат на одинаковом расстоянии Махаланобиса от центра распределения. С этим и связано геометрическое описание этого метода: после преобразования Махаланобиса все точки с одинаковой плотностью оказываются лежащими на окружности с центром в центре распределения (точке наибольшей плотности). Однако, это свойство вместе с тем и ограничивает применимость расстояния Махаланобиса к задаче определения аномалий. В самом деле, если распределение, которому подчиняются изучаемые точки, не является нормальным, преобразование Махаланобиса переведет кривые постоянной плотности не в концентрические окружности, а в некоторые, вообще говоря, произвольные замкнутые кривые. Как следствие, евклидово расстояние, вычисленное в образе, не даст разумной характеристики расстояния от точки до распределения.

3.2. Популярные модификации расстояния Махаланобиса

В литературе можно найти разные методы обобщения и адаптации расстояния Махаланобиса на случаи других распределений. Выделим работу [5], в которой разрабатывается ядерный подход, подобный геометрической идее преобразования Махаланобиса, но предполагающий подбор подходящего преобразования для изучаемого распределения, и [6], в которой строится “полиномиальное расстояние Махаланобиса” при помощи расширения пространства, в которое вложены изучаемые точки, и использования обычного $D_M(x)$, но уже в расширенном пространстве.

Остановимся подробнее на первом методе обобщения расстояния Махаланобиса следуя [5].

Рассмотрим пространство $X \subset \mathbb{R}^n$ с вероятностной мерой P . Обозначим через f_P функцию плотности распределения, порожденного мерой P .

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 1. Функция $g: (X, P) \rightarrow \mathbb{R}$ называется f -монотонной если из неравенства $f(x) \geq f(y)$ следует, что $g(x, P) \geq g(y, P)$, где запись $g(x, P)$ означает, что функция g зависит также и от распределения P .

Если распределение P неизвестно, а известна лишь выборка S_n случайных точек из этого распределения, то определение f -монотонности адаптируется следующим образом:

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 2. Функция $g(x, S_n)$ называется асимптотически f -монотонной, если из неравенства $f(x) \geq f(y)$ следует, что

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(g(x, S_n) \geq g(y, S_n)) = 1.$$

Теперь определим ядро плотности.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3. Пусть $g(x, P)$ (или (g, S_n)) — положительная (асимптотически) f -монотонная функция. Тогда ядро плотности определяется так:

$$K_P(x, y) = g(x, P)g(y, P)$$

(или, соответственно, $K(x, y) = g(x, S_n)g(y, S_n)$).

Наконец, ядро плотности порождает меру различия:

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 4. Если дано ядро плотности K_P , то соответствующая ему мера различия определяется как

$$d_K^2(x, y) = -\log K_P(x, y).$$

В частности, при наличии порожденной ядром плотности меры различия можно построить обобщенное расстояние Махаланобиса между точкой x и данным распределением, вычислив меру различия точки x и среднего значения изучаемого распределения. Следующее предложение показывает, что мера различия d_K^2 действительно обобщает расстояние Махаланобиса.

ПРЕДЛОЖЕНИЕ 1. Пусть рассматриваемое распределение P является нормальным $\mathcal{N}(\mu, \Sigma)$, и пусть f -монотонная функция g определена как

$$g(x, P) = e^{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \Sigma^{-1}(x-\mu)}.$$

Тогда соответствующее расстояние $d_K^2(x, \mu)$ совпадает с расстоянием Махаланобиса от точки x до распределения P .

Доказательство см. в [5].

3.3. Анализ распределения координат точек в облаке

Описанное в предыдущем разделе расстояние Махаланобиса является одним из стандартных инструментов поиска аномалий, например, в задаче распознавания некачественных предметов по их фотографиям. Однако, поскольку реальные данные часто оказываются распределены не по нормальному закону, имеет смысл поиск иного расстояния, более подходящего для изучаемого распределения, чем расстояние Махаланобиса. Первым шагом к этому является анализ распределения координат точек с целью определения, какие координаты распределены нормально, а какие — нет. Для этого могут использоваться различные методы оценки близости распределения к нормальному, например, критерий Колмогорова-Смирнова или критерий Шапиро.

Напомним суть критерия Колмогорова-Смирнова. Для выборочной функции распределения F_n , построенной по выборке размера n , и теоретической (проверяемой) непрерывной функции распределения F вычисляется

$$D_n = \sup_{x \in \mathbb{R}} |F_n(x) - F(x)|.$$

Если статистика $\sqrt{n}D_n$ превысит квантиль распределения Колмогорова K_α с данным уровнем значимости α , то гипотеза о соответствии закона распределения выборки распределению F отвергается. В нашем случае в качестве F берется одномерное нормальное распределение.

Критерий проверки нормальности распределения, предложенный в работе Shapiro и Wilk [7], состоит в следующем. Для выборки $x_1, \dots, x_n$ вычисляется статистика:

$$W = \frac{(\sum_{i=1}^n a_i x_{(i)})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2},$$

где $x_{(i)}$ есть i -я порядковая статистика выборки, $\bar{x} = (\sum_{i=1}^n x_i)/n$ есть среднее значение выборки.

Коэффициенты $\vec{a} = (a_1, \dots, a_n)$ определяются следующим образом. Для выборки из n независимых, одинаково распределенных по стандартному нормальному закону случайных

величин обозначим через m_i математическое ожидание соответствующих порядковых статистик, а через V — матрицу их ковариаций. Тогда

$$(a_1, \dots, a_n) = m^T V^{-1} / C, \quad C = ((V^{-1} m)^T V^{-1} m)^{1/2}.$$

Нулевая гипотеза, состоящая в том, что выборка x взята из нормального распределения, принимается, если значение статистики W оказывается больше заданной квантили.

3.4. Метод отдельной обработки гауссовых и негауссовых координат

Авторы предложили и реализовали следующий метод. Сначала анализируются распределения координат векторов облака $\mathcal{X}$: с помощью статистического критерия (например, критерий Колмогорова–Смирнова, Шапиро–Вилка [7] или других подсчета L_2 -расстояния между функцией нормального распределения и эмпирической функцией распределения) определяют те координатные оси, распределение которых наиболее отклоняется от гауссового. Основная идея метода состоит в том, что негауссовы координаты следует обрабатывать отдельно.

Самый простой способ состоит в отбрасывании негауссовых координат (и у точек облака, и у пробной точки x_P) и применении к оставшимся координатам обычного расстояния Махаланобиса. Эксперимент показывает, что даже такой подход в отдельных случаях увеличивает эффективность распознавания аномалий.

Например, для открытой базы данных MVTec [4] вычислительный эксперимент показал, что отбрасывание негауссовых осей и последующее применение расстояния Махаланобиса к оставшимся осям увеличивает среднее значение ROCAUC примерно на 3% по сравнению с расстоянием Махаланобиса по всем осям.

Более действенный подход, который еще сильнее повышает среднее значение ROCAUC, состоит в выпрямлении распределений координат для наименее гауссовых осей с последующим применением обычного расстояния Махаланобиса по всем осям. Операция выпрямления распределений координат по отдельности (приведения их распределений к равномерному распределению на $[0, 1]$ преобразованием $y = F(x)$, где $F(x)$ — исходная функция распределения данной координаты в предположении, что эта функция непрерывна) с успехом применялась авторами и ранее для анализа другой прикладной задачи (ArcFace), см. [8]. Отметим, что операция выпрямления всех без исключения координат также дает положительный эффект в рассматриваемой здесь задаче.

Опишем операцию выпрямления подробнее. В ее основе лежит следующее простое утверждение:

ТЕОРЕМА 1. Пусть X — скалярная случайная величина с непрерывной функцией распределения F . Тогда величина $Y := F(X)$ является случайной величиной, равномерно распределенной на отрезке $[0, 1]$.

Пусть наши обучающие данные представляют собой облако точек в пространстве $\mathbb{R}^n$. Для каждой из n координат построим эмпирическую функцию распределения $F_{emp}^i(x)$ этой координаты на нашем облаке (здесь верхний индекс i — это номер координаты). Процедура выпрямления состоит в следующем преобразовании:

$$(x^1, \dots, x^n) \mapsto (\hat{F}_{emp}^1(x^1), \dots, \hat{F}_{emp}^n(x^n)),$$

где $\hat{F}_{emp}^i$ — линейная интерполяция эмпирической функции распределения $F_{emp}^i(x)$, построенной по точкам обучающего множества. Линейная интерполяция превращает скачкообразную эмпирическую функцию распределения в кусочно-линейную. Конечно, на самой выборке

линейная интерполяция не меняет значение эмпирической функции распределения, но процедура выпрямления применяется не только к обучающим, но и к пробным точкам, не принадлежащим к той выборке, по которой строились эмпирические распределения $F_{emp}^i(x)$.

Если та или иная координата принимает на обучающем множестве различные значения, без повторений, то после выпрямления эмпирическая функция распределения для этой координаты будет представлять собой ступенчатое (с высотой ступенек $\frac{1}{N}$, где N – объем выборки) приближение линейной функции, растущей от 0 до 1 на отрезке $[0, 1]$, а ее линейная интерполяция — саму эту функцию, то есть функцию равномерного распределения на отрезке $[0, 1]$.

В случае, когда значения той или иной координаты содержат повторения, возникшие искусственно, — например, в результате предварительной обработки и размножения исходных данных, — имеет смысл убрать эти повторения из обучающего распределения данной координаты перед вычислением эмпирической функции распределения и последующим применением процедуры выпрямления. Это делается для каждой координаты отдельно.

Объект	Оценка разм. Минковского	ROCAUC исходный	Выпрямл. всех осей	1400 наиболее гауссовых осей	Выпрямление негауссовых
bottle	13.65	0.998	1.00	1.00	1.00
cable	9.74	0.922	0.956	0.9949	0.9942
capsule	8.16	0.915	0.922	0.9537	0.9689
carpet	12.27	0.999	0.999	0.9940	0.9940
grid	13.00	0.957	0.978	0.9825	0.9875
hazelnut	9.17	0.933	0.930	0.9996	1.00
leather	15.19	1.00	1.00	1.00	1.00
metal_nut	9.71	0.992	0.998	0.9966	0.9961
pill	11.02	0.944	0.947	0.9574	0.9926
screw	8.65	0.836	0.904	0.9555	0.9539
tile	13.35	0.974	0.991	0.9910	0.9917
toothbrush	12.41	0.972	0.981	0.9917	1.00
transistor	10.25	0.978	1.00	0.9925	0.9942
wood	13.05	0.988	0.989	0.9974	0.9974
zipper	13.37	0.909	0.958	0.9701	0.9832
Среднее	11.53	0.954	0.970	0.9851	0.9882
Улучш. абс.	-	0.0	0.016	0.028	0.0342
До max = 1	-	0%	34.78%	67.61%	74.35%

Таблица 2: Оценка размерности Минковского и величины ROCAUC для разных способов обработки осей с “наименее гауссовыми” распределениями координат. В трех нижних строках для каждого метода (включая отсутствие модификаций) указаны: среднее арифметическое ROCAUC по всем 15-ти типам объектов, его абсолютное улучшение от базового уровня 0.954 и процент улучшения, если за 100% взято улучшение до $\text{ROCAUC} = 1$.

Результаты работы на множестве векторов, получаемых при обработке датасета изображений MVTeс при помощи нейросети WideResNet50 и ее модификации, приведены в таблице 2. Опишем, что стоит в его столбцах.

- “*ROCAUC* исходный”: применение расстояния Махаланобиса к множеству векторов без каких-либо преобразований
- “Выпрямл. всех осей”: перед вычислением расстояния Махаланобиса проведем выпрямление (приведение к равномерному распределению на $[0, 1]$) каждой координаты по

отдельности.

- “1400 наиболее гауссовых”: применяя заданный критерий согласия, выберем N осей, распределение значения координат вдоль которых наиболее похоже на гауссово (в данном примере $N = 1400$), а остальные оси отбросим, понизив тем самым размерность пространства.
- “Выпрямление негауссовых”: проверим с помощью некоторого статистического критерия (с единой выбранной квантилью принятия) гипотезу о нормальности одномерного распределения вдоль произвольной координаты. Распределения вдоль тех координат, на которых гипотеза была отвергнута, подвергаются процедуре выпрямления, подробно описанной в [8]. В правом столбце таблицы приведен лучший из результатов, полученных нами при применения такой схемы к эмбедингам для датасета MVТес.

4. Заключение

При анализе данных, полученных нейросетями в результате обработки изображений, существенную роль может играть специфика распределений отдельных координат результирующих многомерных векторов. На необходимость отдельной обработки координат, имеющих приблизительно гауссово и существенно негауссово распределение, может указывать сильная искривленность многообразия, в окрестности которого расположено рассматриваемое облако точек. В компьютерных экспериментах, проведенных авторами, за счет выпрямления распределений существенно негауссовых координат получено улучшение показателя ROCAUC на 3.4 процентных пункта с 0.954 до 0.9882, а доля неверно обрабатываемых аномалий сократилась почти на 75 процентов).

В случаях, когда распределение всех координат приблизительно гауссово, обыкновенное расстояние Махаланобиса, по-видимому, является оптимальным с точки зрения интегрального показателя ROCAUC ошибок 1 и 2 рода. В противном случае, распределение координат вдоль существенно не гауссовых осей имеет смысл распрямлять (или как-то иначе преобразовывать) перед вычислением расстояния Махаланобиса.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Falkoner K. Fractal geometry: mathematical foundations and applications // Chichester etc.: John Wiley & Sons 1990, ISBN 0-471-92287-0, xxii + 288.
2. Defard T., Setkov A., Loesch A., Audigier R. PaDiM: a Patch Distribution Modeling Framework for Anomaly Detection and Localization // arXiv e-print: <https://arxiv.org/pdf/2011.08785v1.pdf> 2020.
3. Realization of PaDiM approach // <https://github.com/xiahaifeng1995/PaDiM-Anomaly-Detection-Localization-master>.
4. Bergmann P., Batzner K., Fauser M., Sattlegger D., Steger C. The MVТес Anomaly Detection Dataset: A Comprehensive Real-World Dataset for Unsupervised Anomaly Detection // International Journal of Computer Vision 2021, Vol. 129, P. 1038–1059.
5. Venturini G. M. Statistical Distances and Probability Metrics for Multivariate Data, Ensembles and Probability Distributions // Ph.D. THESIS (advisor: Alberto Munoz Garcia), Dep. of Statistics, Univ. Carlos III, Leganes, Madrid, Spain, June, 2015.

6. Grudic G. Z., Mulligan J. Outdoor Path Labeling Using Polynomial Mahalanobis Distance // Robotics: Science and Systems II, August 16-19, 2006. University of Pennsylvania, Philadelphia, Pennsylvania, USA.
7. Shapiro S. S., Wilk M. B. An analysis of variance test for normality (complete samples) // Biometrika 1965. Vol. 52, P. 591-611.
8. Ivanov A., Nosovskiy G., Chekunov A., Fedoseev D., Kibkalo V., Nikulin M., Popelenskiy F., Komkov S., Mazurenko I., Petiushko A. Manifold Hypothesis in Data Analysis: Double Geometrically-Probabilistic Approach to Manifold Dimension Estimation // arXiv e-print: arXiv:2107.03903 [cs.LG] 2021.
9. Stolz B., Tanner J., Harrington H., Nanda V. Geometric anomaly detection in data // Proceedings of the National Academy of Sciences 2020, Vol. 117, P. 202001741, DOI: 10.1073/pnas.2001741117.
10. Erba V., Gherardi M., Rotondo P. Intrinsic dimension estimation for locally undersampled data // Sci. Rep. 2019, Vol. 9, doi:10.1038/s41598-019-53549-9.
11. Fefferman C., Mitter S., Narayanan H. Testing the manifold hypothesis // J. Amer. Math. Soc. 2016, Vol. 29, doi:10.1090/jams/852.
12. Bernstein A., Burnaev E., Erofeev P. Manifold Reconstruction in Dimension Reduction Problem // International conference "Intelligent Information Processing" IIP-9 2012.
13. Grassberger P., Procaccia I. Measuring the strangeness of strange attractors // Physica D: Nonlinear Phenomena 1983, Vol. 9, P. 189-208.
14. Eckmann J.-P., Ruelle D. Fundamental limitations for estimating dimensions and Lyapunov exponents in dynamical systems // Physica D: Nonlinear Phenomena 1992, Vol. 56, P. 185-187.
15. Mordohai P., Medioni G. Dimensionality Estimation, Manifold Learning and Function Approximation using Tensor Voting // Journal of Machine Learning Research 2010, Vol. 11, P. 411-450.
16. He J., Jiang L., Ding L., Li Z. Intrinsic Dimensionality Estimation based on Manifold Assumption // Journal of Visual Communication and Image Representation 2014, Vol. 25, Issue 5, P. 740-747.
17. Granata D., Carnevale V. Accurate Estimation of the Intrinsic Dimension Using Graph Distances: Unraveling the Geometric Complexity of Datasets // Sci. Rep. 2016, Vol. 6, doi:10.1038/srep31377.
18. Levina E., Bickel P. J. Maximum likelihood estimation of intrinsic dimension // Advances in neural information processing systems 2005, P. 777-784.

REFERENCES

1. Falconer, K. 1990, "Fractal geometry: mathematical foundations and applications", *Chichester etc.: John Wiley & Sons*, ISBN 0-471-92287-0, xxii + 288.
2. Defard, T., Setkov, A., Loesch, A., Audigier, R. 2020, "PaDiM: a Patch Distribution Modeling Framework for Anomaly Detection and Localization", arXiv e-print: <https://arxiv.org/pdf/2011.08785v1.pdf>.

3. “Realization of PaDiM approach”, <https://github.com/xiahaifeng1995/PaDiM-Anomaly-Detection-Localization-master>.
4. Bergmann, P., Batzner, K., Fauser, M., Sattlegger, D., Steger, C. 2021, “The MVTEC Anomaly Detection Dataset: A Comprehensive Real-World Dataset for Unsupervised Anomaly Detection”, *International Journal of Computer Vision*, vol. 129, pp. 1038–1059.
5. Venturini, G. M. 2015, “Statistical Distances and Probability Metrics for Multivariate Data, Ensembles and Probability Distributions”, *Ph.D. THESIS (advisor: Alberto Munoz Garcia)*, Dep. of Statistics, Univ. Carlos III, Leganes, Madrid, Spain.
6. Grudic, G. Z., Mulligan, J. 2006, “Outdoor Path Labeling Using Polynomial Mahalanobis Distance”, *Robotics: Science and Systems II, August 16-19, 2006*, University of Pennsylvania, Philadelphia, Pennsylvania, USA.
7. Shapiro, S. S., Wilk, M. B. 1965, “An analysis of variance test for normality (complete samples)”, *Biometrika*, vol. 52, pp. 591-611.
8. Ivanov, A., Nosovskiy, G., Chekunov, A., Fedoseev, D., Kibkalo, V., Nikulin, M., Popelenskiy, F., Komkov, S., Mazurenko, I., Petiushko, A. 2021, “Manifold Hypothesis in Data Analysis: Double Geometrically-Probabilistic Approach to Manifold Dimension Estimation”, *arXiv e-print: arXiv:2107.03903 [cs.LG]*.
9. Stolz, B., Tanner, J., Harrington, H., Nanda, V. 2020, “Geometric anomaly detection in data”, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 117, pp. 202001741, doi:10.1073/pnas.2001741117.
10. Erba, V., Gherardi, M., Rotondo, P. 2019, “Intrinsic dimension estimation for locally undersampled data”, *Sci. Rep.*, vol. 9, doi:10.1038/s41598-019-53549-9.
11. Fefferman, C., Mitter, S., Narayanan, H. 2016, “Testing the manifold hypothesis”, *J. Amer. Math. Soc.*, vol. 29, doi:10.1090/jams/852.
12. Bernstein, A., Burnaev, E., Erofeev, P. 2012, “Manifold Reconstruction in Dimension Reduction Problem”, *International conference “Intelligent Information Processing” IIP-9*.
13. Grassberger, P., Procaccia, I. 1983, “Measuring the strangeness of strange attractors”, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 9, pp. 189-208.
14. Eckmann, J.-P., Ruelle, D. 1992, “Fundamental limitations for estimating dimensions and Lyapunov exponents in dynamical systems”, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 56, pp. 185-187.
15. Mordohai, P., Medioni, G. 2010, “Dimensionality Estimation, Manifold Learning and Function Approximation using Tensor Voting”, *Journal of Machine Learning Research*, vol. 11, pp. 411-450.
16. He, J., Jiang, L., Ding, L., Li, Z. 2014, “Intrinsic Dimensionality Estimation based on Manifold Assumption”, *Journal of Visual Communication and Image Representation*, vol. 25, issue 5, pp. 740-747.
17. Granata, D., Carnevale, V. 2016, “Accurate Estimation of the Intrinsic Dimension Using Graph Distances: Unraveling the Geometric Complexity of Datasets”, *Sci. Rep.*, vol. 6, doi:10.1038/srep31377.

18. Levina, E., Bickel, P. J. 2005, "Maximum likelihood estimation of intrinsic dimension", *Advances in neural information processing systems*, pp. 777-784.

Получено: 15.09.2022

Принято в печать: 22.12.2022