

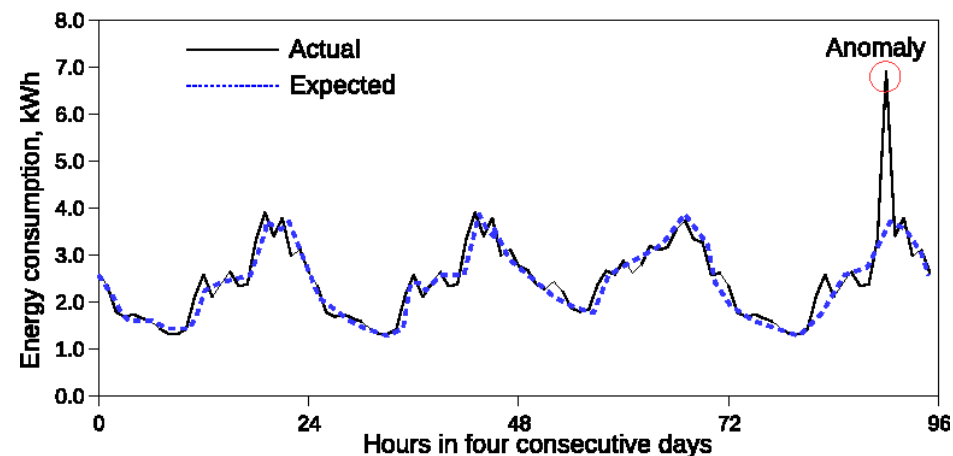
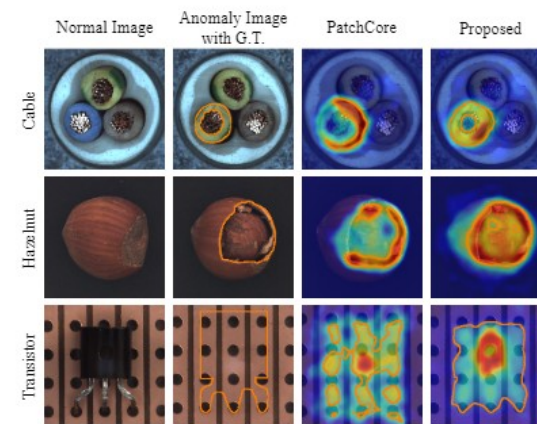
Novelty Detection Neural Networks for Model- Independent New Physics Search

A. Zaborenko, L. Dudko, M. Perfilov,
SINP MSU, Moscow

supported by RSF-22-12-00152

Детектирование аномалий

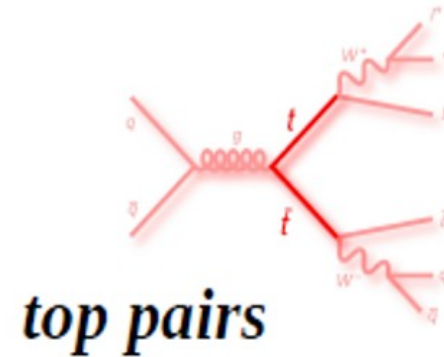
- Детектирование аномалий – процесс поиска отклонений от данных, считающихся «нормальными» без знаний о конкретной природе таких отклонений.
- Задача трудна: имея знания только об одном классе, нужно понять, что считать «отличием» а что – вариацией нормального класса. Нужно «провести» бинарную классификацию без разметки второго класса.



Детектирование
аномалий
в индустрии

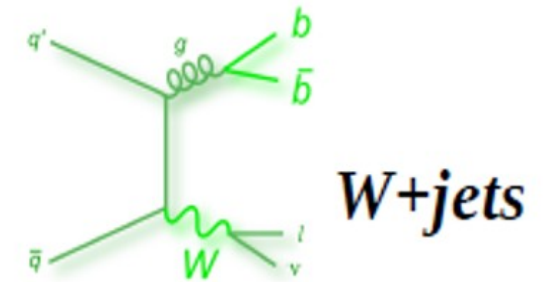
Детектирование аномалий: НЕР

- Задача поиска аномалий в НЕР: произвести **модельно-независимый** отбор событий.*
- Нейронная сеть обучается на событиях Стандартной модели и детектирует значимые отклонения от СМ в данных.
- Для тестирования алгоритмов были взяты два процесса различной природы: (топ+антитоп) и (W-бозон+струи)



top pairs

Рождение $t\bar{t}$ пары - «нормальный» процесс. При обучении модель видит только этот класс.



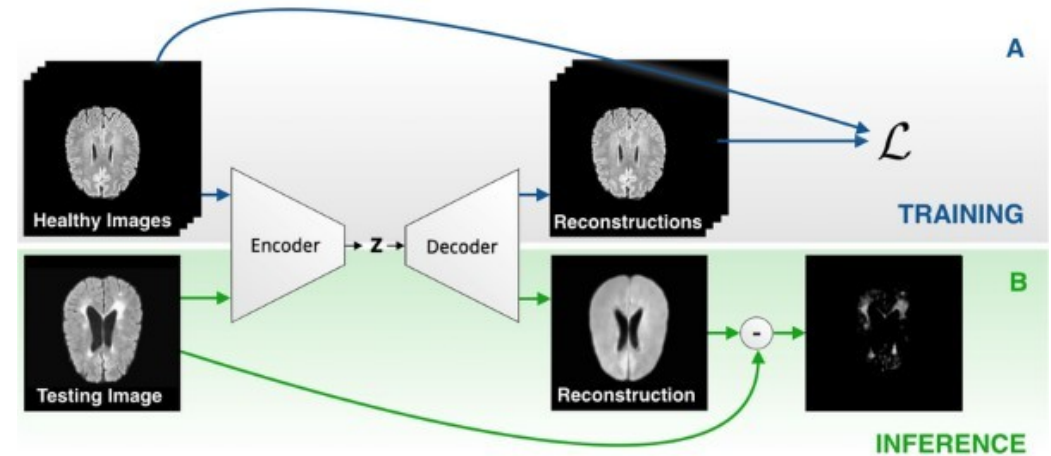
W+jets

Рождение W-бозона и образование струй - «аномальный» процесс. Используется, чтобы понять, насколько НС выделяет отклонения от данных, типичных для ЦЕР.

* Более детально классический подход описан в E. E. Abasov, M. I. Belobrova, P. V. Volkov, G. A. Vorotnikov, L. V. Dudko, A. D. Zaborenko, M. A. Perfilov и E. S. Sivakova. «Methodology for the Application of Deep Neural Networks in Searches for New Physics at Colliders and Statistical Interpretation of Expected Results». В: Phys. Atom. Nucl. 85.6 (2022), pp. 708–720. doi:10.1134/S1063778822060023.

Классический подход: автоэнкодер

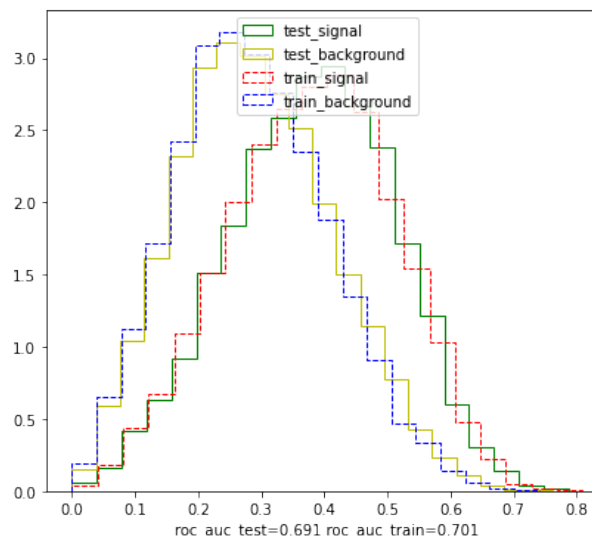
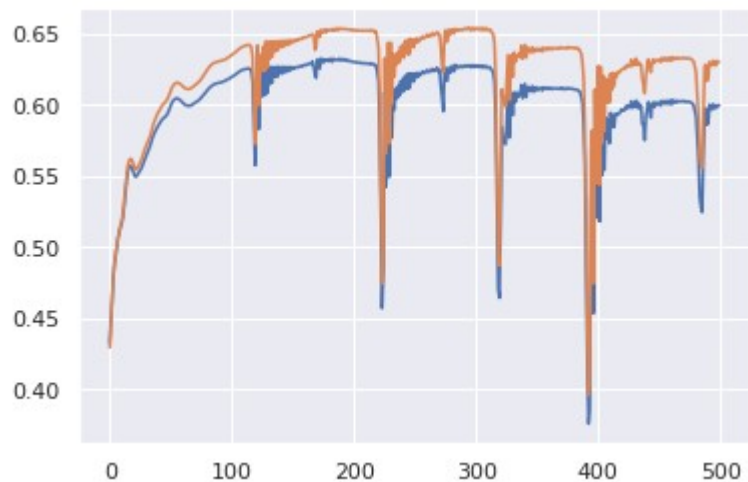
- Автоэнкодер – это нейронная сеть с «бутылочным горлышком»: слоем с числом нейронов меньшим, чем размерность входных данных.
- Задача такой нейронной сети – максимально точно реконструировать входные данные, пропустив через «бутылочное горлышко» только самые важные компоненты.



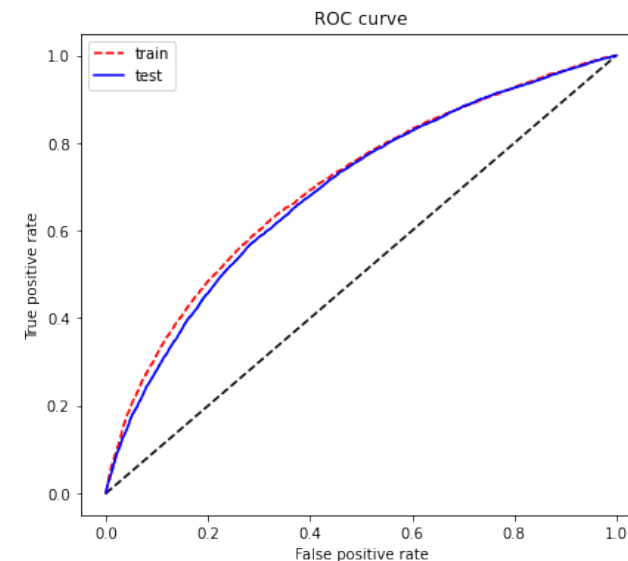
Для детектирования аномалий используется ошибка реконструкции: сеть будет хуже реконструировать те данные, которые она не «видела» при обучении.

Автоэнкодер в HER

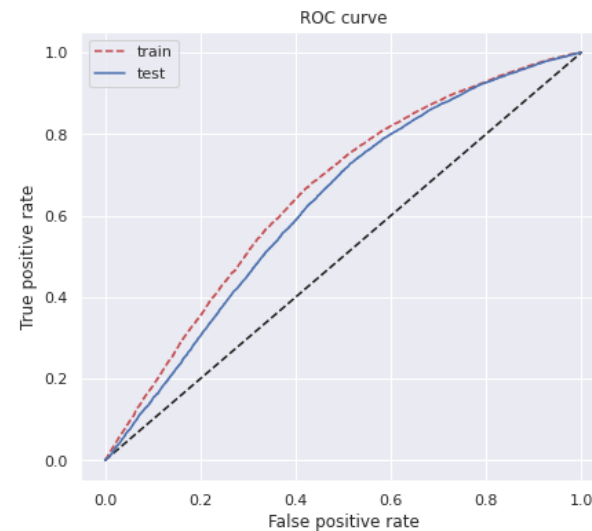
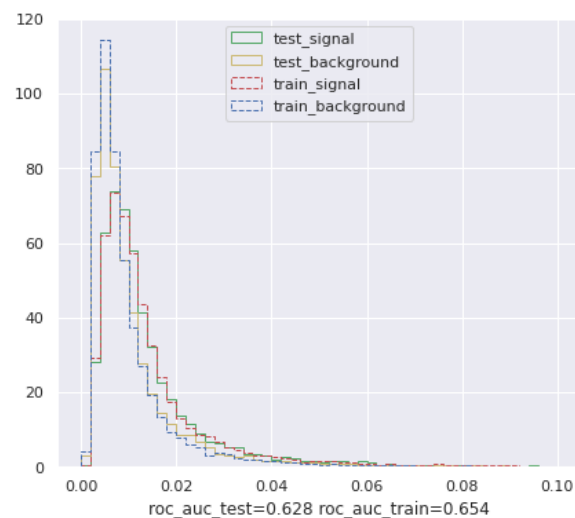
- Для данных физики высоких энергий автоэнкодер показал себя неэффективным: простой метод ближайших соседей



KNN



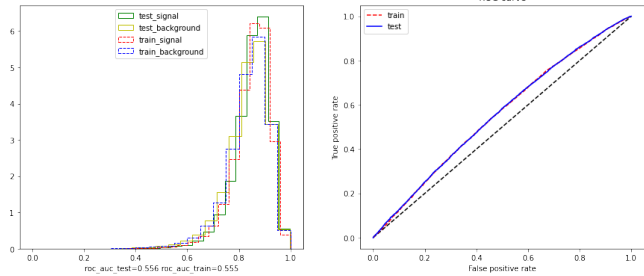
AE-500-48



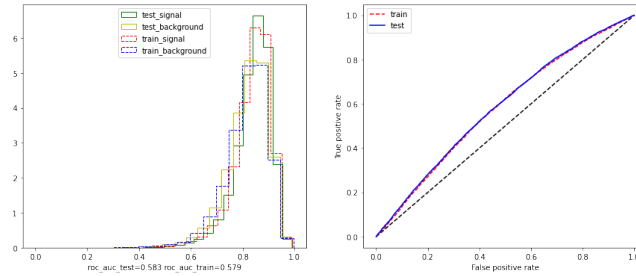
Другие методы

- Такая тенденция продолжилась и для других моделей для поиска аномалий: их результаты были очень далеки от обучения с учителем.

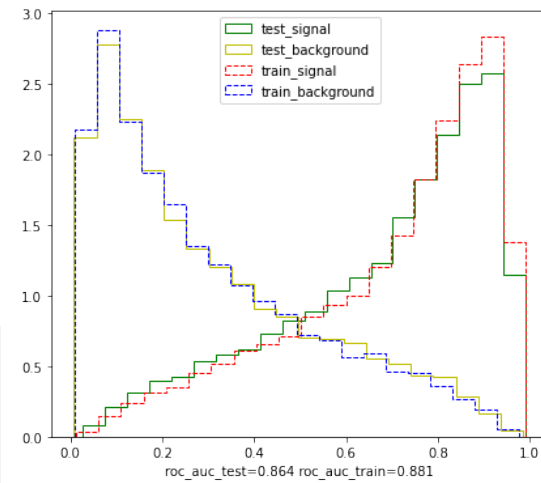
COPOD



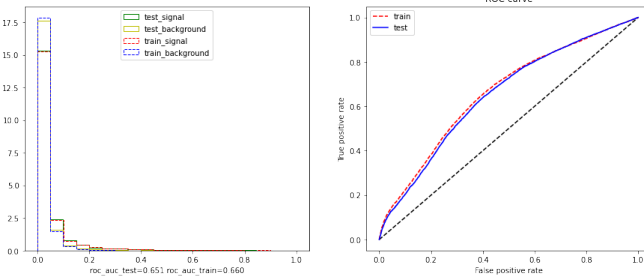
ECOD



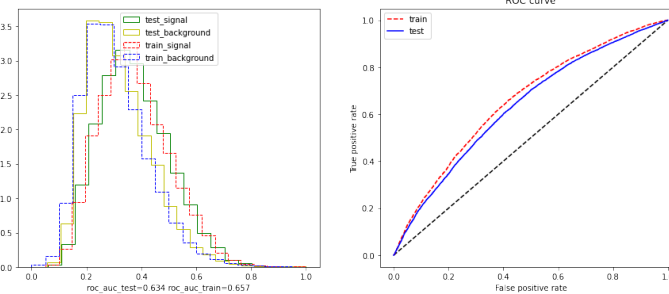
supervised



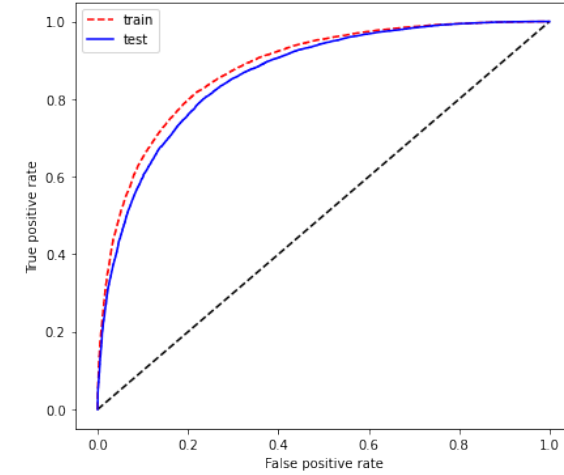
MCD



LUNAR

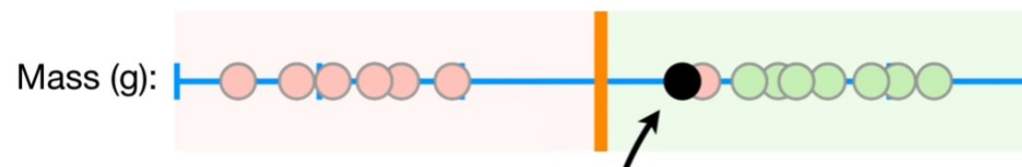


ROC curve

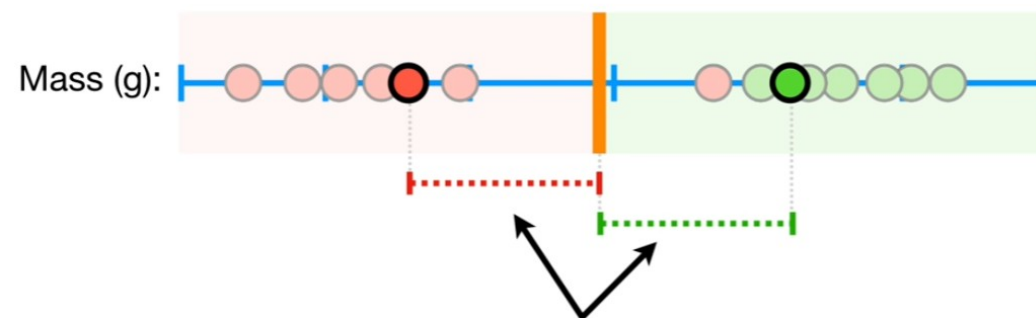


Метод Опорных Векторов (SVM)

- Метод опорных векторов:
 - Переносит данные в пространство более высокой размерности, используя специальную функцию – «ядро»
 - Разделяет классы с «правом на ошибку»: позволяет работать с шумными данными, некоторая часть точек может попасть в противоположный класс
 - Использует кросс-валидацию для поиска оптимальной классификации



Balancing the threshold to lower variance

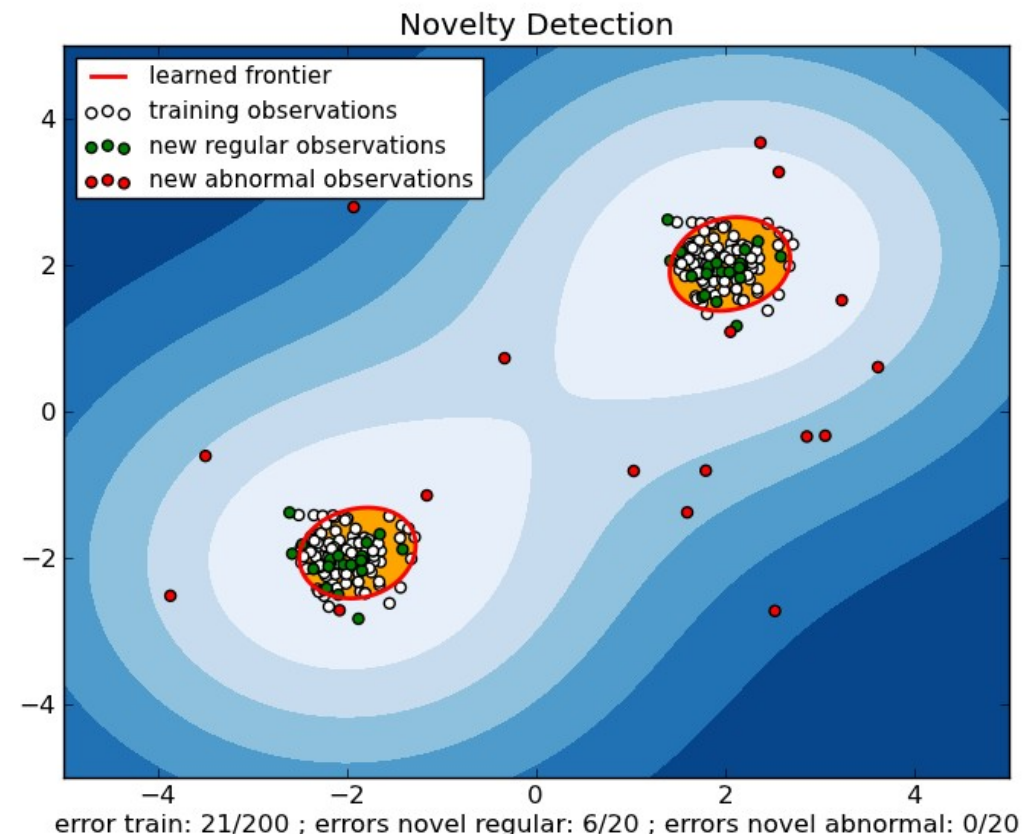


Support Vectors

Метод Опорных Векторов для одного класса

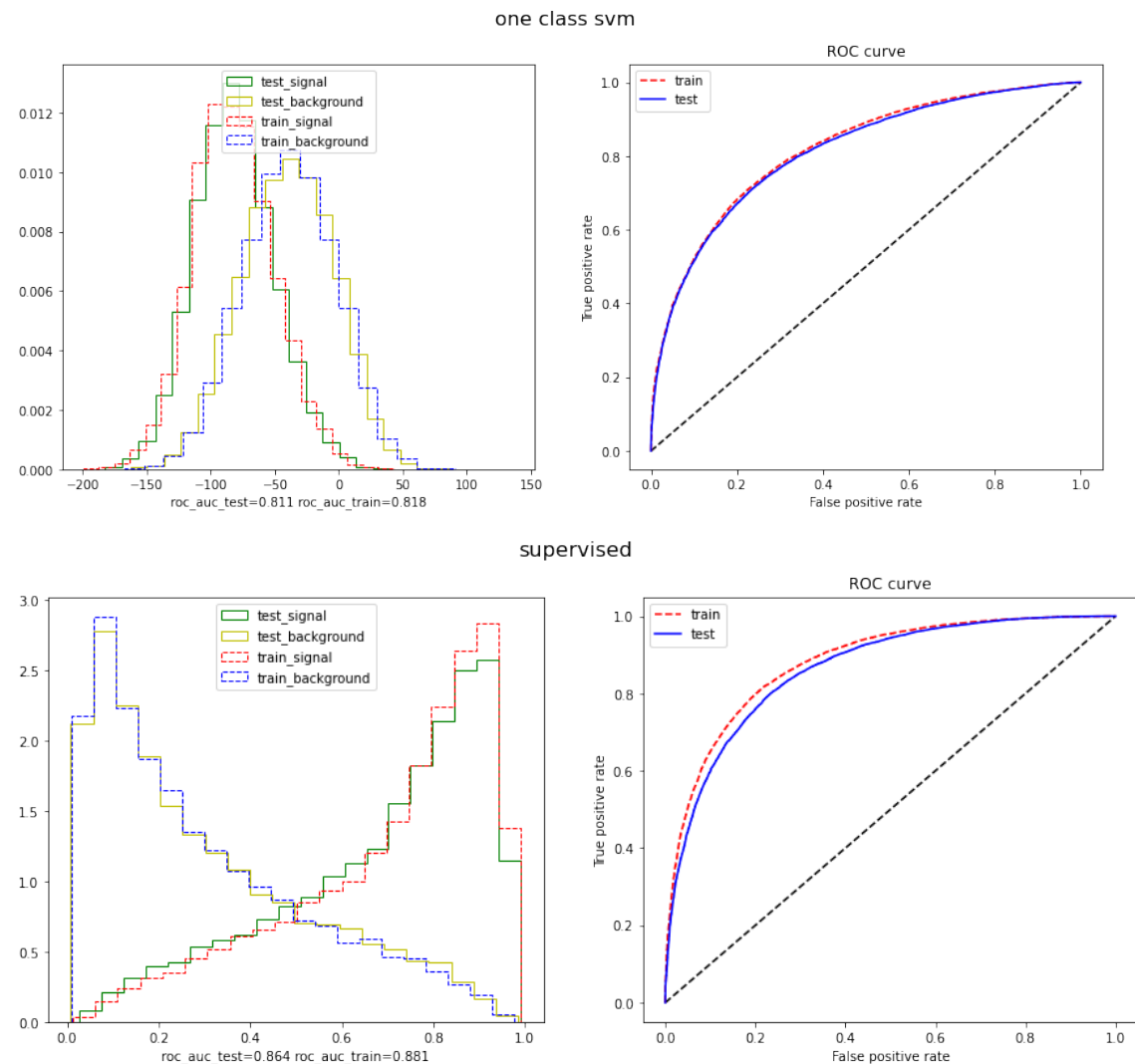
- SVM может создавать гиперповерхность вокруг данных, позволяя выделять аномалии как выход за эту гиперповерхность.
- С правильными гиперпараметрами может быть очень точен.
- Минус – время растет квадратично/кубично с числом примеров.

Support Vector Machines are powerful tools, but their compute and storage requirements increase rapidly with the number of training vectors. The core of an SVM is a quadratic programming problem (QP), separating support vectors from the rest of the training data. The QP solver used by the `libsvm`-based implementation scales between $O(n_{features} \times n_{samples}^2)$ and $O(n_{features} \times n_{samples}^3)$ depending on how efficiently the `libsvm` cache is used in practice (dataset dependent). If the data is very sparse $n_{features}$ should be replaced by the average number of non-zero features in a sample vector.



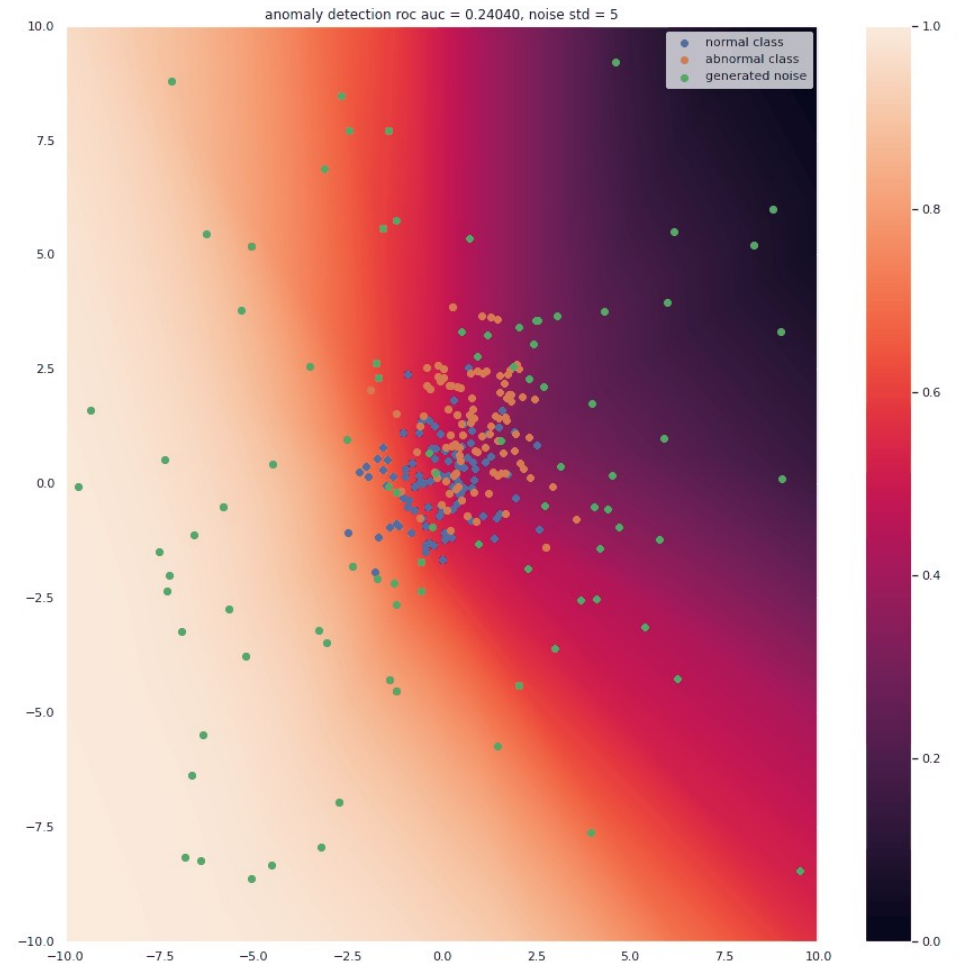
SVM: данные НЕР

- С правильными параметрами позволяет приблизиться к обучению с учителем. (0.811 против 0.864)
- Временная сложность ограничивает использование в физике, где обрабатываются события.
- Можем ли мы улучшить этот алгоритм?



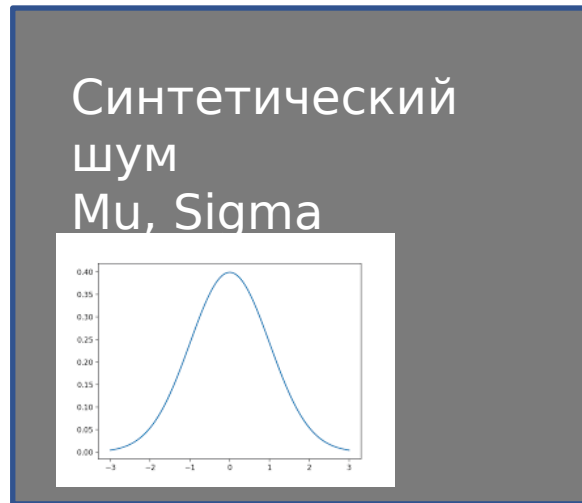
Нейронная сеть для одного класса

- Основная концепция:
 - генерировать синтетический шум каждую эпоху
 - обучать сеть отделять шум от реальных данных
 - использовать выход сети в качестве оценки аномалий
- Во время обучения сеть строит поверхность, окружающую данные, как алгоритм SVM.



Нейронная сеть для одного класса: схема

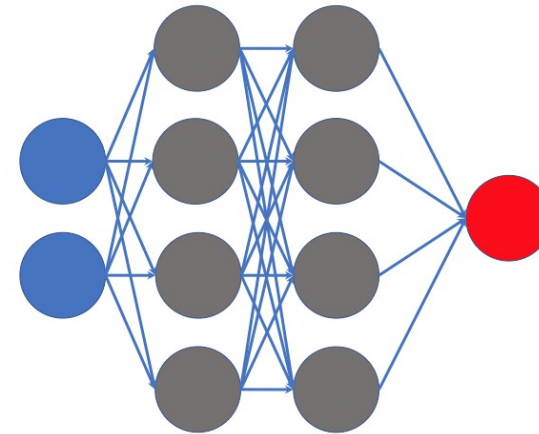
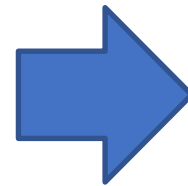
Реальные данные



Разметка

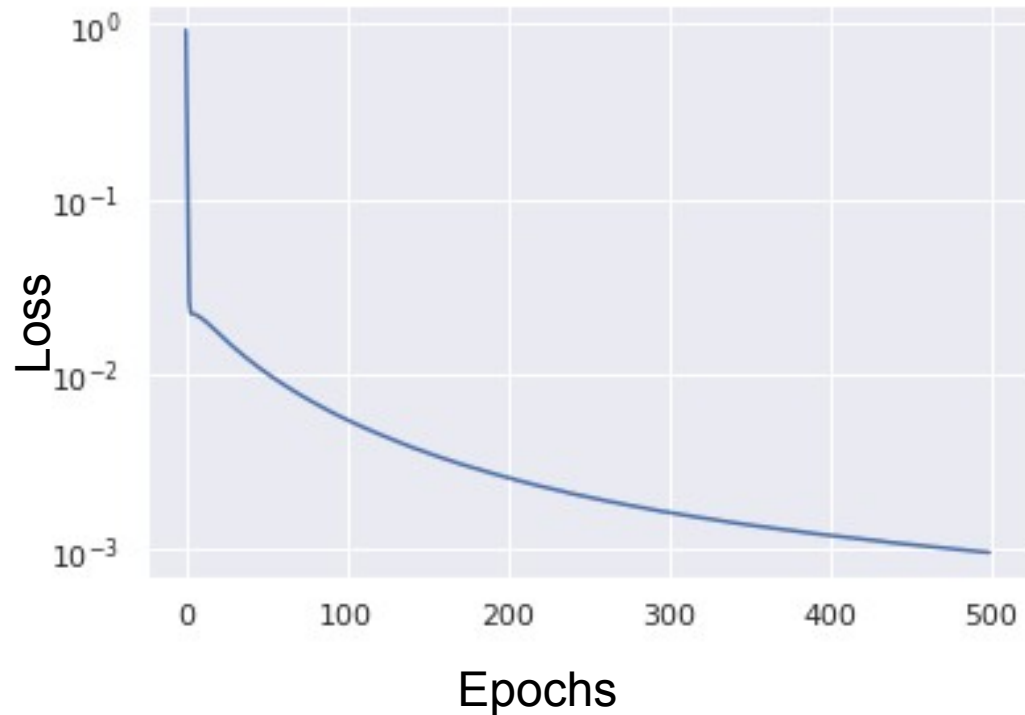
0

1

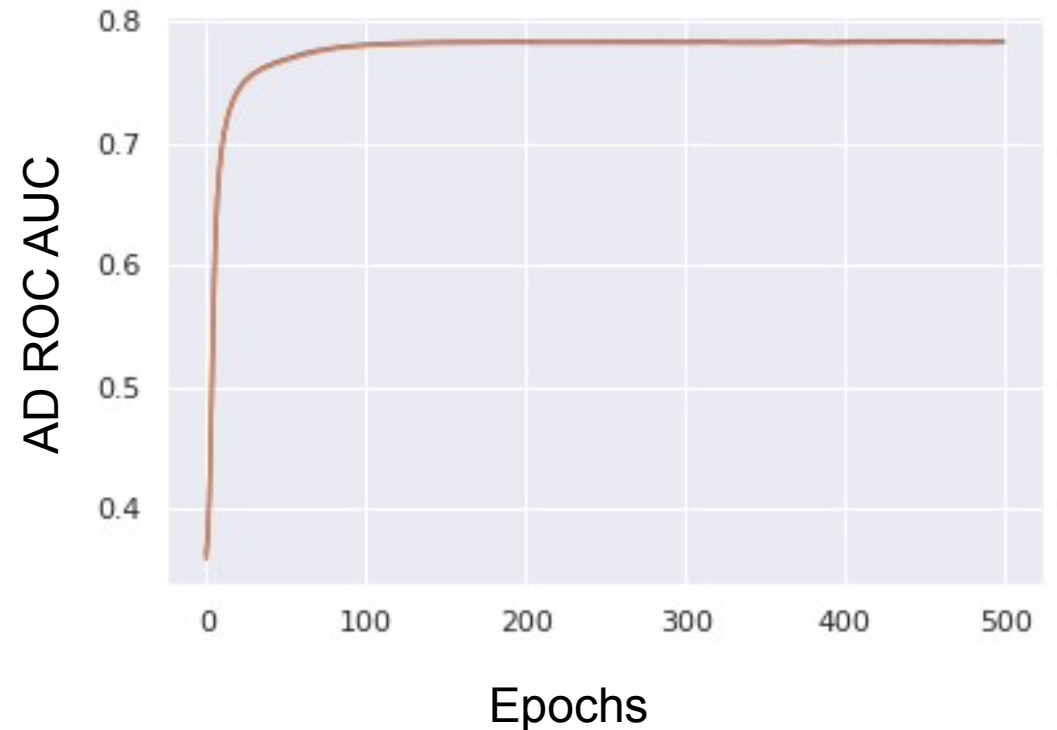


Гиперплоскость для выделения аномалий

Нейронная сеть для одного класса: обучение



Функция ошибки для
разделения нормального класса
от шума*



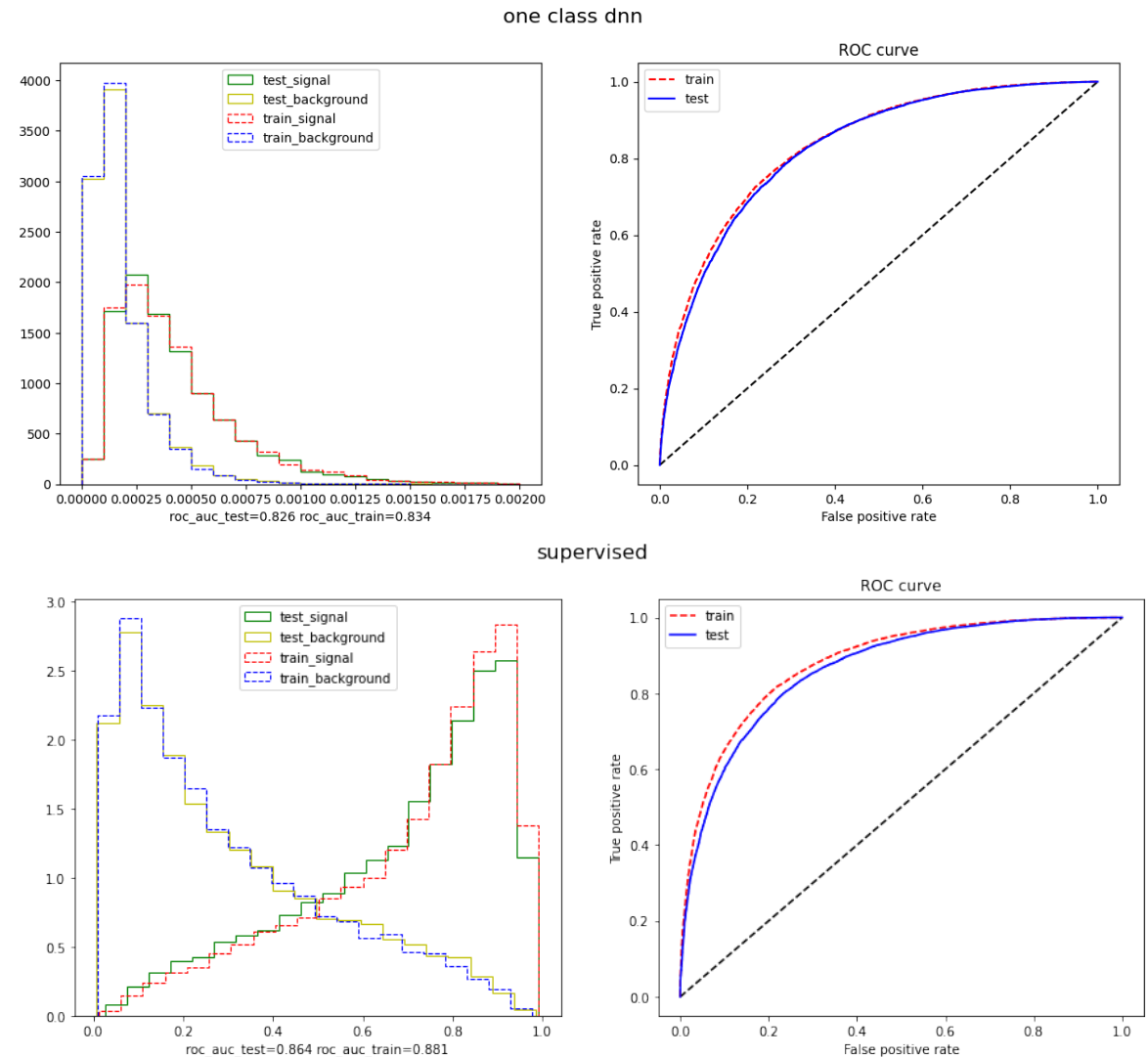
Способность сети выделять
аномалии

*Unleashing the Potential of Unsupervised Deep Outlier

Detection through Automated Training Stopping: Huang et al

Нейронная сеть для одного класса: результат

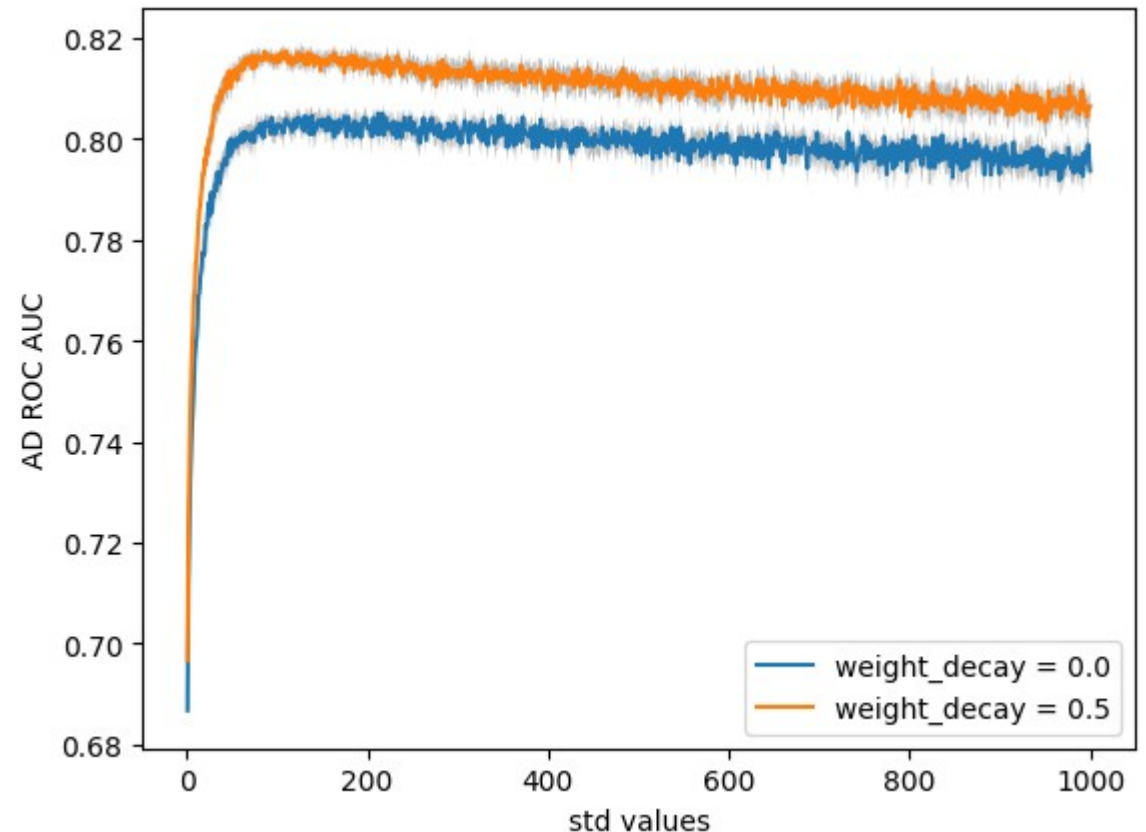
- Нейронная сеть может обучаться гораздо быстрее и на большем количестве точек.
- Классификация еще точнее, чем SVM для одного класса: (SVM: 0.811, OCDNN: 0.826, supervised: 0.864 ROC AUC)
- Разделяющая способность может быть еще улучшена с помощью различных модификаций архитектуры нейронной сети и генерации шума.



Нейронная сеть для одного класса: параметры* шума

- Несмотря на то, что аномальный класс распределен вокруг нуля с $\text{std}=1$ (данные стандартизируются), оптимальные характеристики шума для алгоритма – это относительно большое стандартное отклонение.
- Это свидетельствует о том, что алгоритм действительно создает гиперповерхность вокруг нормального класса, а не шум удачным образом ложится на аномальный класс.

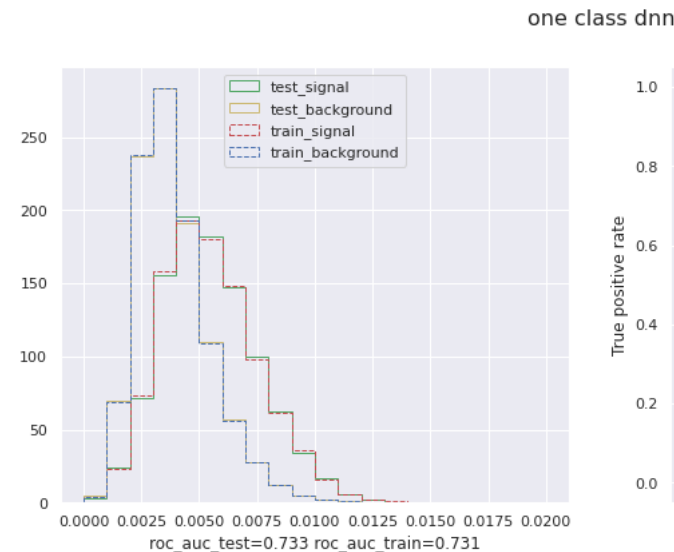
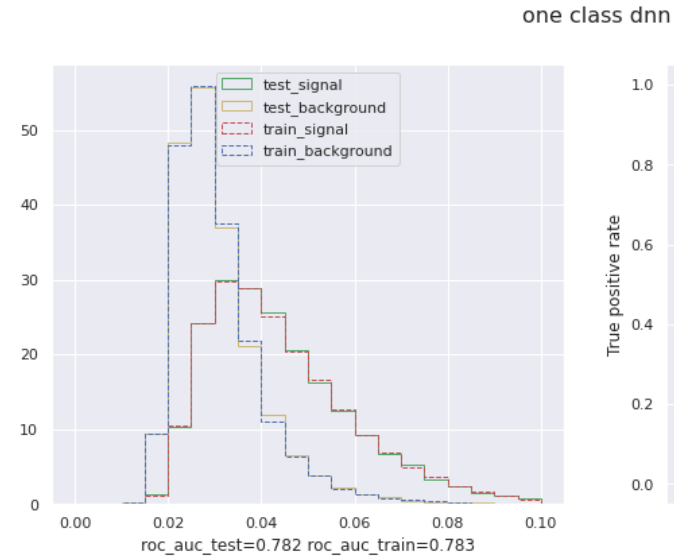
* Lev Dudko, P. V. Volkov, Georgi Vorotnikov и Andrei Zaborenko. «Application of Deep Learning Technique to an Analysis of Hard Scattering Processes at Colliders». B: Proceedings of The 5th International Workshop on Deep Learning in Computational Physics — PoS(DLCP2021) (2021).



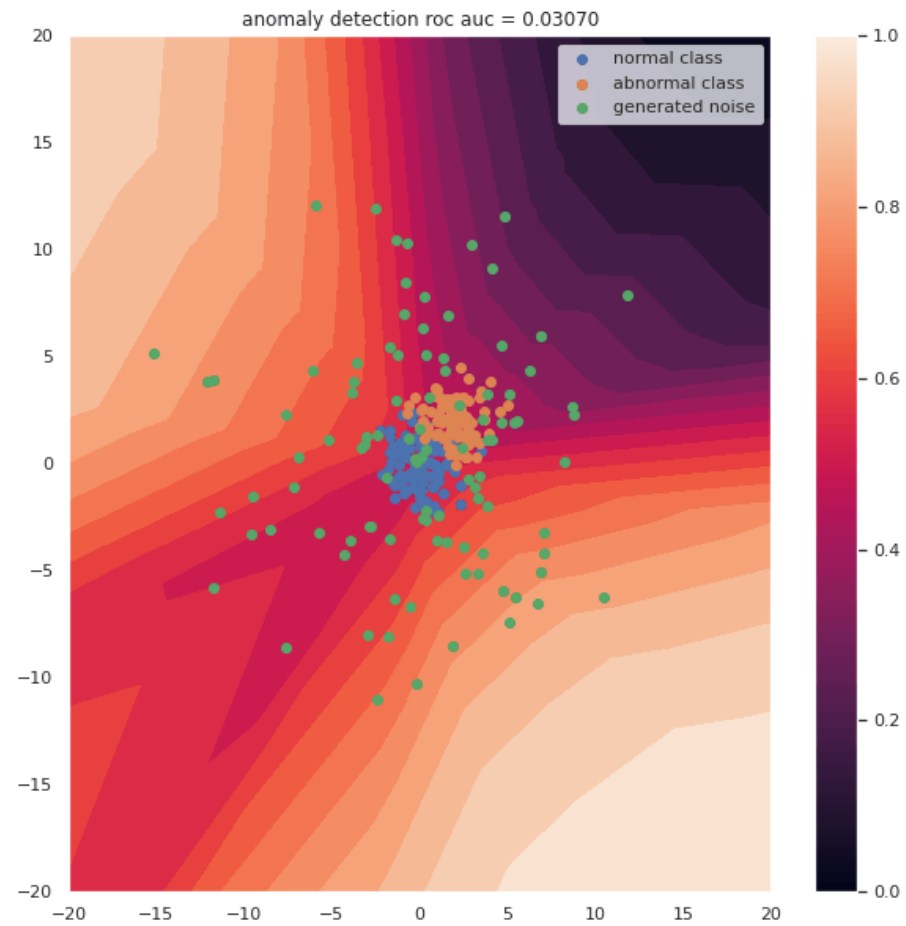
Зависимость точности алгоритма от стандартного отклонения для сгенерированного шума.

Нейронная сеть для одного класса: реальные данные

- Алгоритм был протестирован на нескольких типичных датасетах из НЕР и показал устойчивость и хорошую классификационную способность в режиме поиска аномалий.
- Верх – выделение т-канального рождения топ-кварка из SM фона. (OCDNN: 0.782, supervised: 0.840 ROC AUC)
- Низ – выделение нейтральных токов из SM фона. (OCDNN: 0.733, supervised: 0.810 ROC AUC)



Спасибо за внимание!



Эффект ядер метода опорных векторов на поверхность решений

