

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ

Лектор
Сенько Олег Валентинович
Лекция 9

Коллективные методы

Использование различных методов прогнозирования (распознавания), а также различных обучающих выборок или подмножеств признаков позволяет получить набор прогнозирующих (распознающих) алгоритмов: A_1, \dots, A_r

Можно попытаться увеличить обобщающую способность за счёт выбора алгоритма с минимальной оценкой ошибки прогнозирования. Однако нередко более эффективной процедурой является вычисление прогноза с использованием всех алгоритмов из A_1, \dots, A_r .

Коллективные методы

Использование коллектива (ансамбля) алгоритмов, которые строятся с помощью различных методов позволяет использовать при прогнозировании различные принципы экстраполяции, лежащих в основе этих методов.

Статистическое обоснование использованию ансамбля алгоритмов даёт анализ ошибки выпуклой комбинации прогнозов, вычисляемых членами ансамбля.

Предположим, что алгоритмы ансамбля A_1, \dots, A_r вычисляют прогноз переменной Y .

Коллективные методы

Пусть f_i - прогноз, вычисляемый алгоритмом A_i

$\Delta_i = E_{\Omega}(Y - f_i)^2$ - ошибка прогноза, вычисляемого A_i ,

$i = 1, \dots, r$. Введём обозначение $\rho_{i' i''} = E_{\Omega}(f_{i'} - f_{i''})^2$ - математическое ожидание квадрата отклонения друг от друга прогнозов, вычисляемых алгоритмами $A_{i'}$ и $A_{i''}$.

Пусть c_1, \dots, c_r - положительные коэффициенты такие, что

$$\sum_{i=1}^r c_i = 1$$

Коллективные методы

Обозначим через \hat{f} выпуклую комбинацию прогнозов, вычисляемых алгоритмами ансамбля A_1, \dots, A_r : $\hat{f} = \sum_{i=1}^r c_i f_i$

Для ошибки выпуклой комбинации справедливо выражение

$$\hat{\Delta} = E_{\Omega} (Y - \hat{f})^2 = \sum_{i=1}^r c_i \Delta_i - \frac{1}{2} \sum_{i'=1}^r \sum_{i''=1}^r c_{i'} c_{i''} \rho_{i'i''}$$

Принимая во внимание, что все отклонения $\rho_{i'i''}$ всегда неотрицательны, а коэффициенты c_1, \dots, c_r положительны

получаем неравенство $\hat{\Delta} \leq \sum_{i=1}^r c_i \Delta_i$.

Коллективные методы

Рассмотрим, случай, когда все алгоритмы участвуют в построении коллективного решения равноправно. В этом случае

$$c_i = \frac{1}{r}, i = 1, \dots, m \quad \hat{f} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^r f_i$$

$$\hat{\Delta} = E_{\Omega} (Y - \hat{f})^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^r \Delta_i - \frac{1}{2} \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^r \sum_{i''=1}^r \rho^{i i''}$$

Таким образом, ошибка коллективного метода, вычисляющего средний прогноз по ансамблю равна средней ошибке по сем членам ансамбля минус средний квадрат отклонений прогнозов между участниками ансамбля.

Комитетные методы в распознавании

Рассмотрим сначала несколько простейших эвристических методов принятия коллективных решений.

Предположим, что у нас есть ансамбль алгоритмов распознавания A_1, \dots, A_r , которые были использованы для классификации некоторого объекта s^* . Простейшим комитетным методом является метод голосования по большинству, относящий объект к тому классу, к которому он был присвоен относительным большинством алгоритмов.

Комитетные методы в распознавании

Напомним, что произвольный распознающий алгоритм является комбинацией распознающего оператора, вычисляющего оценки за классы и решающего правила, производящего классификацию по оценкам, вычисленным распознающим оператором. Предположим, что $\Gamma_l^i(s^*)$ - оценка за класс K_l , вычисляемая алгоритмом A_l . Коллективное решение может строиться путём вычисления коллективных оценок за классы через оценки $\Gamma_l^i(s^*)$, соответствующие отдельным алгоритмам.

Комитетные методы в распознавании

1) Коллективная оценка за класс вычисляется как среднеарифметическое оценок

$$\Gamma_l^{av}(s^*) = \frac{1}{r} \sum_{i=1}^r \Gamma_l^i(s^*)$$

2) Коллективная оценка вычисляется как минимум всех оценок за данный класс полученных разными алгоритмами

$$\Gamma_l^{\min}(s^*) = \min_{i \in \{1, \dots, r\}} [\Gamma_l^i(s^*)]$$

Комитетные методы в распознавании

3) Коллективная оценка вычисляется как вычисляется как максимум всех оценок за данный класс полученных разными алгоритмами

$$\Gamma_l^{\max}(s^*) = \max_{i \in 1, \dots, r} [\Gamma_l^i(s^*)]$$

4) Еще одним употребительным способом построения комитетного решения является произведение оценок

$$\Gamma_l^{pr}(s^*) = \prod_{i=1}^r [\Gamma_l^i(s^*)]$$

Комитетные методы в распознавании

К достоинствам комитетных методов относится их простота, высокая быстродействие. Для применения этих методов не требуется никакой дополнительной процедуры обучения, что позволяет сразу переходить к распознаванию объектов комитетом обученных алгоритмов.

Подобными же достоинствами обладает другой известный метод построения коллективных решений – «Наивный байесовский классификатор».

Наивный байесовский классификатор

«Наивный байесовский классификатор» является статистическим методом, основанном на оценках вероятностей принадлежности объекта классам в зависимости от результатов классификации отдельными алгоритмами.

Пусть для каждого из распознающих алгоритмов A_1, \dots, A_r известна матрица оценок условных вероятностей

$$\|\hat{\mathbf{P}}(s^* \in K_{l'} | A_i(s^*) = "s^* \in K_{l'}")\|_{L \times L}$$

Наивный байесовский классификатор

Предположим, что алгоритмы A_1, \dots, A_r отнесли объект s^* в классы K_{t_1}, \dots, K_{t_r} соответственно.

Для вычисления коллективной оценки $\Gamma_l^{NB}(s^*)$ объекта s^* за класс K_l формально принимается гипотеза о независимости классификаторов A_1, \dots, A_r . В результате коллективная оценка вычисляется как произведение оценок, соответствующих отдельным классификаторам

$$\Gamma_l^{NB}(s^*) = \prod_{i=1}^r \hat{\mathbf{P}}(s^* \in K_l \mid A_i(s^*) = "s^* \in K_{t_i}")$$

Логическая коррекция

Комитетные методы и наивный байесовский классификатор являются простейшими методами коллективной коррекции, не учитывающих взаимодействие алгоритмов ансамбля или их относительную эффективность.

Требование повышения обобщающей способности ансамбля за счёт более полного учёта его структуры и использования возможностей лежащих в его основе эвристик привело к созданию средств алгебраической и логической коррекции.

Методы логической коррекции учитывают только окончательные результаты классификации.

Логическая коррекция

Пусть у нас имеется некоторая выборка $\tilde{S}_q = \{s_1, \dots, s_q\}$ объектов, принадлежащих классам K_1, \dots, K_L , по которой мы собираемся произвести коррекцию. Данной выборке может быть сопоставлена информационная матрица $\|\alpha_{lj}\|_{L \times q}$, где $\alpha_{lj} = 1$, если $s_j \in K_l$ и $\alpha_{lj} = 0$ в противном случае. Иными словами α_{lj} является значением предиката $P_l = "s \in K_l"$ на объекте s_j .

И набор матриц $\|\beta_{lj}^i\|_{L \times q}$, где β_{lj}^i значение предиката P_l на объекте s_j , вычисленное алгоритмом A_i .

Логическая коррекция

Поиск оптимального логического корректора сводится к поиску такой логической функции от r переменных $F(z_1, \dots, z_r)$,

чтобы равенство $F(\beta_{lj}^{g^{(1)}} \dots, \beta_{lj}^{g^{(r)}}) = \alpha_{lj}$ выполнялось для

возможно большего числа объектов обучающей выборки, где

перестановочная функция $g(i)$ устанавливает связь между

переменными z_1, \dots, z_r и алгоритмами A_1, \dots, A_r . В том

случае, когда $2^r > q$ и отсутствуют противоречия типа

равенства функции F при одних и тех же значениях аргументов

разным значениям элементов информационной матрицы, задача

построения логического корректора сводится к задаче

доопределения логической функции естественным путём

заданной на выборке \tilde{S}_q на весь единичный куб E^r

Логическая коррекция

Приведем в качестве примера «монотонный логический корректор», в основу которого положена следующая идея. В исходном наборе A_1, \dots, A_r для каждого класса K_i выбирается поднабор A_{t_1}, \dots, A_{t_k} . Объект s относится монотонным логическим корректором в класс K_i в том и только в том случае, если он отнесён в K_i всеми алгоритмами из A_{t_1}, \dots, A_{t_k} и ещё одним алгоритмом из набора A_1, \dots, A_r , который не принадлежит A_{t_1}, \dots, A_{t_k} .

Логическая коррекция

Построение монотонного логического корректора, правильно классифицирующих объекты выборки \tilde{S}_q сводится к построению монотонной булевой функции, для которой

$$F(\beta_{lj}^{g(1)}, \dots, \beta_{lj}^{g(r)}) = \alpha_{lj} \quad \text{для всех объектов } \tilde{S}_q .$$

Алгебраическая коррекция

Универсальным способом построения оптимального распознающего алгоритма по набору исходных алгоритмов A_1, \dots, A_r является использование алгебраических методов коррекции. В отличие от логических методов коррекции алгебраические методы используют не только окончательные результаты классификации, содержащиеся в матрицах $\|\beta_{ij}^i\|_{L \times q}$, но также матрицы оценок $\|\gamma_{ij}^i\|_{L \times q}$, вычисляемые операторами R_1, \dots, R_r , где $\gamma_{ij}^i = \Gamma_l^i(s_j)$ - оценка объекта $s_j \in \tilde{S}_q$ за класс, вычисляемая оператором R_i , $i = 1, \dots, r$, $j = 1, \dots, q$, $l = 1, \dots, L$.

Алгебраическая коррекция

Основы теории алгебраической коррекции были разработаны Ю.И.Журавлёвым в 1976-1978 годах.

Задача распознавания в алгебраической теории рассматривается как задача построения по начальной информации I о классах K_1, \dots, K_L для предъявленной для распознавания выборки $\tilde{S}_q = \{s_1, \dots, s_q\}$ информационной матрицы $\|\alpha_{lj}\|_{L \times q}$. Обозначим данную задачу как задачу $Z(I, \tilde{S}_q, P_1, \dots, P_L)$ или просто задачу Z .

Примером начальной информации о классах является таблица признаков описаний эталонных объектов классов и их информационная матрица.

Алгебраическая коррекция

Предположим, что у нас имеется множество алгоритмов $\{A\}$, переводящих пару $\{I, \tilde{S}_q\}$ в матрицы $\|\beta_{ij}^i\|_{L \times q}$, составленные из элементов $\{0, 1, \Delta\}$, где значения 0 и 1 как и раньше являются значениями предикатов, вычисленными алгоритмами из множества $\{A\}$, значение Δ соответствует отказу от вычисления значения предиката.

Определение. Алгоритм A называется корректным для задачи Z , если выполнено равенство $A(I, \tilde{S}_q, P_1, \dots, P_L) = \|\alpha_{ij}\|_{L \times q}$.

Алгебраическая коррекция

Алгоритм, не являющийся корректным для задачи Z , называется некорректным. Совокупность $\{A\}$ состоит из вообще говоря некорректных алгоритмов.

Алгебраический подход к решению задач распознавания включает в себя введение алгебраических операций над алгоритмами из $\{A\}$, позволяющих строить корректные алгоритмы по наборам алгоритмов из $\{A\}$. Поскольку каждый распознающий алгоритм может быть представлен как последовательное выполнение распознающего оператора и решающего правила, множеству $\{A\}$ соответствуют множества операторов $\{R\}$ и множество решающих правил $\{C\}$.

Алгебраическая коррекция

Каждый из операторов из множества $\{R\}$ вычисляет для задачи Z матрицу оценок за классы $R^*(I, \tilde{S}_q) = \|\gamma_{ij}^*\|_{L \times q}$

На множестве операторов $\{R\}$ вводятся операции сложения, умножения и умножения на скаляр.

Пусть $R', R'' \in \{R\}$ $R'(I, \tilde{S}_q) = \|\gamma'_{ij}\|_{L \times q}$ $R''(I, \tilde{S}_q) = \|\gamma''_{ij}\|_{L \times q}$

b скалярная величина.

Определим операторы $b \bullet R'$ (умножение на скаляр), $R' + R''$ (сложение), $R' \bullet R''$ (умножение) следующим образом.

Алгебраическая коррекция

$$(b \bullet R')(I, \tilde{S}_q) = \| b * \gamma'_{ij} \|_{L \times q} \quad (1)$$

$$(R' + R'')(I, \tilde{S}_q) = \| \gamma'_{ij} + \gamma''_{ij} \|_{L \times q} \quad (2)$$

$$(R' \bullet R'')(I, \tilde{S}_q) = \| \gamma'_{ij} * \gamma''_{ij} \|_{L \times q} \quad (3)$$

Использование операций (1)-(3) позволяет строить новые распознающие операторы, являющиеся полиномами от операторов из исходного множества вида $\sum_{i=1}^{N_p} a_i R_{t(1,i)} \bullet \dots \bullet R_{t(k_i,i)}$

Функция $t(j,i)$ - указывает на оператор, являющийся j -ым сомножителем в i -ом слагаемом полинома.

Алгебраическая коррекция

Очевидно, что замыкание $\mathbf{L}\{R\}$ множества операторов $\{R\}$ относительно операций (1) и (2) является линейным векторным пространством. Обозначим через $\mathbf{U}\{R\}$ замыкание множества $\{R\}$

относительно операций (1)-(3) - алгебраическое замыкание.

$$Z(I, \tilde{S}_q, P_1, \dots, P_L)$$

Рассмотрим условия, существования корректного алгоритма для некоторой задачи .

Алгебраическая коррекция

Определение 2. Если множество матриц $\{R(I, \tilde{S}_q)\}$ (операторы R пробегают множество $\tilde{\mathbf{R}}$) содержит базис в пространстве числовых матриц размерности $L \times q$, то задача $Z(I, \tilde{S}_q, P_1, \dots, P_L)$ называется полной относительно $\tilde{\mathbf{R}}$.

Определение 3. Решающее правило C называется корректным, если для всякой выборки длины q существует хотя бы одна числовая матрица $\|\gamma_{ij}\|_{L \times q}$ такая, что $C(\|\gamma_{ij}\|_{L \times q}) = \|\alpha_{ij}\|_{L \times q}$

Алгебраическая коррекция

Пусть $\{A\}$ - множество алгоритмов вида $A = R \otimes C^*$, где $R \in \{R\}$
 C^* - некоторое корректное решающее правило.

Определение Множества алгоритмов вида $A = R \otimes C^*$ будут обозначаться $\mathbf{L}\{A\}$ и $\mathbf{U}\{A\}$, если $R \in \mathbf{L}\{R\}$ и $R \in \mathbf{U}\{R\}$ соответственно.

Теорема 1 Если множество $\{Z\}$ состоит лишь из задач, полных относительно $\tilde{\mathbf{R}}$, то линейное замыкание $\mathbf{L}\{\tilde{\mathbf{R}} \otimes C^*\}$, где C^* - некоторое корректное решающее правило, является корректным относительно $\{Z\}$

Алгебраическая коррекция

Доказательство. При фиксированном q базис в пространстве числовых матриц размерности $L \times q$ состоит из $L * q$ матриц M_1, \dots, M_{L*q} . Тогда существуют числа c_1, \dots, c_{L*q} такие,

что $M = \sum_{i=1}^{L*q} c_i * M_i$ где M является матрицей, которая может быть переведена решающим правилом C^* в информационную матрицу $\| \alpha_{lj} \|_{L \times q}$. Существование матрицы M следует из Корректности решающего правила C^* .

Алгебраическая коррекция

Представление (4) возможно в силу того, что матрицы M_1, \dots, M_{L^*q} образуют базис в пространстве числовых матриц размерности $L \times q$. В том случае, если матрицы M_1, \dots, M_{L^*q} построены из $\{I, \tilde{S}_q\}$ с помощью операторов R_1, \dots, R_{L^*q} из $\tilde{\mathbf{R}}$, корректный алгоритм может

быть представлен в виде $\tilde{A} = \left(\sum_{i=1}^{L^*q} c_i R_i \right) \otimes C^*$. Теорема доказана.

Алгебраическая коррекция

Следствие 1. Пусть $\{A\}$ - совокупность некорректных алгоритмов,

$\tilde{\mathbf{R}}$ - соответствующее множество операторов, C^* - некоторое фиксированное корректное решающее правило. Тогда

$\mathbf{L}\{A\} = \mathbf{L}\{\tilde{\mathbf{R}} \otimes C^*\}$ является корректным относительно $\{Z\}$,
если $\{Z\}$

состоит из задач, полных относительно $\tilde{\mathbf{R}}$.

Алгебраическая коррекция

Следствие 2. Пусть выполнены все условия следствия 1 и, кроме того, $[\tilde{\mathbf{R}}]$ есть замыкание $\tilde{\mathbf{R}}$ относительно операций (1) – (3). Тогда $\mathbf{U}\{A\} = \{\mathbf{U}\{\tilde{\mathbf{R}}\} \otimes C^*\}$ является корректным относительно $\{Z\}$, если $\{Z\}$ состоит из задач, полных относительно $[\tilde{\mathbf{R}}]$

Алгебраическая коррекция

Линейные и алгебраические замыкания могут строиться не только над конечными наборами заранее обученных алгоритмов, но также и над множествами алгоритмов, принадлежащих некоторой модели и имеющих в общем случае мощность континуума. Рассмотрим в качестве примера рассмотрим один из вариантов модели алгоритмов вычисления оценок, в котором оценки за классы вычисляются по формуле

$$\Gamma_i(s^*) = \sum_{s_\mu \in K_i} \sum_{\omega \in \Omega} \left(\sum_{j=1}^n p_j \omega_j \right) B_\omega(s^*, s_\mu, \boldsymbol{\varepsilon}) + \sum_{s_\mu \notin K_i} \sum_{\omega \in \Omega} \left(\sum_{j=1}^n p_j \omega_j \right) \bar{B}_\omega(s^*, s_\mu, \boldsymbol{\varepsilon}) \quad (5)$$

Алгебраическая коррекция

Здесь $\bar{B}_\omega(s^*, s_\mu, \boldsymbol{\varepsilon}) = 1 - B_\omega(s^*, s_\mu, \boldsymbol{\varepsilon})$ является функцией антиблизости объекта s^* к эталону s_μ по опорному множеству,

описываемому бинарным характеристическим вектором

$\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \dots, \omega_n)$, $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$ - вектор положительных

пороговых коэффициентов, задающих близость объектов

по каждому из признаков, (p_1, \dots, p_n) - вектор

положительных параметров, характеризующих важность

признаков, $(\gamma_1, \dots, \gamma_n)$ - вектор положительных

параметров, характеризующих важность признаков

Алгебраическая коррекция

Для того, чтобы описать условия существования корректного алгоритма в алгебраическом замыкании подмножества алгоритмов вычисления оценок введём дополнительные определения. Пусть \tilde{M} - некоторое множество допустимых объектов.

Определение Объекты s_v и s_u с описаниями (x_1^u, \dots, x_n^u) и (x_1^v, \dots, x_n^v) называются изоморфными относительно множества \tilde{M} , если $\forall s \in \tilde{M}$ с описанием (a_1, \dots, a_n) выполняются равенство

$$(|x_1^u - a_1|, \dots, |x_n^u - a_n|) = (|x_1^v - a_1|, \dots, |x_n^v - a_n|)$$

Алгебраическая коррекция

Нетрудно видеть что корректный алгоритм в рамках модели

Вычисления оценок не может существовать для задачи

$Z(I, \tilde{S}_q, P_1, \dots, P_L)$ случаях, когда

а) в выборке \tilde{S}_q существует два объекта s' и s'' , изоморфных относительно выборки эталонов \tilde{S}_m , которая вместе со своей информационной матрицей образует начальную информацию I ;

б) объекты s' и s'' принадлежат двум непересекающимся классам.

Алгебраическая коррекция

Действительно в этом случае векторы оценок $(\Gamma_1(s'), \dots, \Gamma_l(s'))$ и $(\Gamma_1(s''), \dots, \Gamma_l(s''))$, вычисляемые произвольным оператором из модели АВО будут одинаковы. Следовательно никакое множество операторов модели АВО не может вычислять базис в пространстве вещественных матриц размера $L \times q$

Будем называть задачу $Z(I, \tilde{S}_q, P_1, \dots, P_L)$ регулярной, если

а) никакие два класса полностью не совпадают, т.е. $K_{l'} \neq K_{l''}$ при $l' \neq l''$;

Алгебраическая коррекция

б) никакие два объекта из \tilde{S}_q не являются изоморфными относительно выборки эталонов \tilde{S}_m , где $I = \{\tilde{S}_m, \|\alpha_{lj}\|_{L \times q}\}$; $\tilde{S}_q \cap \tilde{S}_m = \emptyset$

в) .

Справедлива теорема.

Теорема 2. Алгебраическое замыкание подкласса алгоритмов модели АВО, в которой оценки за классы вычисляются по формуле (5) корректно над множеством регулярных задач.