

Оглавление

Предисловие от издательства	10
1 Введение в конформное прогнозирование	11
Технические требования.....	12
Введение в конформное прогнозирование	12
Понимание мер конформности	17
Истоки конформного прогнозирования.....	18
Будущее конформного прогнозирования	19
Отличия конформного прогнозирования от традиционного машинного обучения	20
Роль p -значения в конформном прогнозировании.....	21
Выводы	22
2 Обзор возможностей конформного прогнозирования	23
Понимание количественной оценки неопределенности	24
Алеаторная неопределенность.....	24
Эпистемическая неопределенность.....	25
Различные способы количественной оценки неопределенности	26
Количественная оценка неопределенности с помощью конформного прогнозирования.....	27
Выводы	30
3 Основы конформного прогнозирования	31
Основы конформного прогнозирования.....	31
Определение и принципы	32
Основные компоненты конформного предиктора.....	33
Типы мер неконформности	35
Выводы	49
4 Валидность и эффективность конформного прогнозирования	50
Валидность вероятностных предикторов.....	50
Калибровка классификатора	53
Эффективность вероятностных предикторов	58
Выводы	60

5	Типы конформных предикторов	61
	Знакомство с классическими конформными предикторами	62
	Применение ТСР для задач классификации	63
	Применение ТСР для задач регрессии	68
	Преимущества	69
	Недостатки	69
	Знакомство с индуктивными конформными предикторами	70
	Выбор подходящего конформного предиктора	72
	Трансдуктивные конформные предикторы	73
	Индуктивные конформные предикторы	73
	Выводы	73
6	Конформное прогнозирование для классификации	75
	Калибровка классификатора	75
	Основные понятия калибровки классификатора	77
	Оценка качества калибровки	79
	Различные подходы к калибровке классификаторов	83
	Биннинг на основе гистограммы (histogram binning)	84
	Масштабирование по Платту (Platt scaling)	85
	Изотоническая регрессия (isotonic regression)	87
	Конформное прогнозирование для калибровки классификаторов	90
	Конформное прогнозирование Venn-ABERS	90
	Сравнение методов калибровки	92
	Инструменты конформного прогнозирования с открытым исходным кодом для задач классификации	94
	Nonconformist	94
	Выводы	117
7	Конформное прогнозирование для регрессии	118
	Количественная оценка неопределенности для задач регрессии	119
	Понимание типов и источников неопределенности в регрессионном моделировании	119
	Концепция прогнозных интервалов	120
	Почему нам нужны прогнозные интервалы?	120
	Чем прогнозный интервал отличается от доверительного интервала?	121
	Конформное прогнозирование для задач регрессии	123
	Методы построения прогнозных интервалов	127
	1. Наивный метод	128
	2. Сплит-метод	129
	3. Конформализованная квантильная регрессия	143
	4. Метод jackknife	148

5. Метод jackknife+	149
6. Метод jackknife-minmax	152
Конформные прогнозные распределения.....	161
Выводы	171

8 Конформное прогнозирование для временных рядов ... 172

Количественная оценка неопределенности для временных рядов.....	173
Важность количественной оценки неопределенности.....	173
История методов количественной оценки неопределенности.....	173
Ранние статистические методы – первые попытки количественной оценки неопределенности во временных рядах.....	174
Современные подходы на основе машинного обучения	175
Концепция прогнозного интервала для прогнозирования временных рядов	175
Определение и построение	176
Проблемы, возникающие при построении прогнозных интервалов.....	176
Различные подходы к построению прогнозных интервалов.....	176
Параметрические подходы.....	177
Непараметрические методы.....	178
Байесовские методы.....	178
Методы машинного обучения	178
Конформное прогнозирование	179
Конформное прогнозирование для временных рядов	179
Прогнозные интервалы на основе ансамблей и батчей (ensemble batch PIs – EnbPIs)	179
Конформное прогнозирование в NeuralProphet	190
Конформное прогнозирование в Statsforecast	206
Выводы	218

9 Конформное прогнозирование для компьютерного зрения..... 219

Количественная оценка неопределенности для компьютерного зрения	220
Почему важна неопределенность?.....	220
Типы неопределенности в компьютерном зрении.....	220
Количественная оценка неопределенности	221
Почему глубокое обучение выдает некалиброванные прогнозы?	221
Период после 2012 года – бум глубокого обучения	222
Кризис калибровки в глубоких нейронных сетях – поворотный момент, случившийся в 2017 году	223
Сверхуверенность современных моделей глубокого обучения, применяемых в компьютерном зрении	225

Конформное прогнозирование для компьютерного зрения	226
Получение прогнозных множеств для классификаторов изображений с помощью конформного прогнозирования	226
Создание классификаторов компьютерного зрения с использованием конформного прогнозирования	228
Наивное конформное прогнозирование	231
Адаптивные прогнозных множества (Adaptive Prediction Sets – APS).....	238
Регуляризованные адаптивные прогнозных множества (Adaptive Prediction Sets – APS).....	248
Выводы	259

10 Конформное прогнозирование для обработки естественного языка..... 260

Количественная оценка неопределенности для NLP	261
Различные подходы к количественной оценке неопределенности в задачах NLP	261
Байесовские подходы к количественной оценке неопределенности.....	261
Бутстреп и ансамблевые методы	262
Выявление данных, выходящих за пределы распределения (OOD detection)	262
Конформное прогнозирование для NLP	262
Выводы	265

11 Работа с несбалансированными наборами данных 266

Знакомство с несбалансированными наборами данных	267
Почему проблему несбалансированных данных сложно решать	268
Методы решения проблемы несбалансированных данных	268
Решение проблемы несбалансированных данных с помощью конформного прогнозирования.....	276
Решение проблем несбалансированных данных с помощью предикторов Venn-ABERS	277
Ключевые выводы из тетрадки по обнаружению мошенничества с кредитными картами.....	279
Выводы	280

12 Введение в конформное прогнозирование для многоклассовой классификации 281

Задачи многоклассовой классификации	282
Алгоритмы для многоклассовой классификации	282
Стратегии «один против всех» и «один против одного».....	283

Метрики для задач многоклассовой классификации	283
Матрица ошибок (confusion matrix)	283
Точность (precision)	284
Полнота (Recall)	284
F1-оценка (F1-score)	284
Макро- и микроусредненные метрики	284
Площадь под ROC-кривой (AUC-ROC)	284
Логистическая функция потерь и ее применение для оценки качества калибровки многоклассовых моделей	284
Использование оценки Брайера для измерения качества калибровки	286
Применение конформного прогнозирования для задач многоклассовой классификации	286
Многоклассовая вероятностная классификация с использованием индуктивных предикторов и предикторов cross-Venn-ABERS	287
Выводы	304

Предисловие от издательства

Отзывы и пожелания

Мы всегда рады отзывам наших читателей. Расскажите нам, что вы думаете об этой книге – что понравилось или, может быть, не понравилось. Отзывы важны для нас, чтобы выпускать книги, которые будут для вас максимально полезны.

Вы можете написать отзыв на нашем сайте www.dmkpress.com, зайдя на страницу книги и оставив комментарий в разделе «Отзывы и рецензии». Также можно послать письмо главному редактору по адресу dmkpress@gmail.com; при этом укажите название книги в теме письма.

Если вы являетесь экспертом в какой-либо области и заинтересованы в написании новой книги, заполните форму на нашем сайте по адресу http://dmkpress.com/authors/publish_book/ или напишите в издательство по адресу dmkpress@gmail.com.

Список опечаток

Хотя мы приняли все возможные меры для того, чтобы обеспечить высокое качество наших текстов, ошибки все равно случаются. Если вы найдете ошибку в одной из наших книг – возможно, ошибку в основном тексте или программном коде, – мы будем очень благодарны, если вы сообщите нам о ней. Сделав это, вы избавите других читателей от недопонимания и поможете нам улучшить последующие издания этой книги.

Если вы найдете какие-либо ошибки в коде, пожалуйста, сообщите о них главному редактору по адресу dmkpress@gmail.com, и мы исправим это в следующих тиражах.

Нарушение авторских прав

Пиратство в интернете по-прежнему остается насущной проблемой. Издательство «ДМК Пресс» очень серьезно относится к вопросам защиты авторских прав и лицензирования. Если вы столкнетесь в интернете с незаконной публикацией какой-либо из наших книг, пожалуйста, пришлите нам ссылку на интернет-ресурс, чтобы мы могли применить санкции.

Ссылку на подозрительные материалы можно прислать по адресу dmkpress@gmail.com.

Мы высоко ценим любую помощь по защите наших авторов, благодаря которой мы можем предоставлять вам качественные материалы.

Введение в конформное прогнозирование

Эта книга посвящена конформному прогнозированию – современному подходу к количественной оценке неопределенности, который набирает популярность в промышленности и академической среде. Приложения, использующие машинное обучение и ИИ, встречаются повсюду. В области машинного обучения прогнозирование является основной задачей. Имея обучающий набор данных, мы обучаем модель машинного обучения, чтобы получить прогнозы для новых данных.

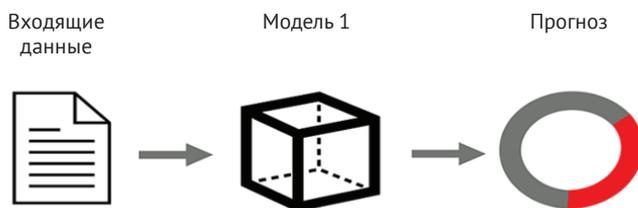


Рис. 1. Прогнозная модель машинного обучения

Однако во многих реальных задачах прогнозы, полученные с помощью статистических моделей, моделей машинного обучения и моделей глубокого обучения, часто оказываются неверными или ненадежными из-за различных факторов, таких как недостаточный объем данных или отсутствие полноты данных, проблем, возникающих в процессе моделирования, или просто из-за случайности и сложности соответствующей задачи.

Прогнозы, полученные с помощью моделей машинного обучения, часто не содержат количественной оценки неопределенности, необходимой для

принятия уверенных и надежных решений. Именно здесь на помощь приходит конформное прогнозирование. Предлагая ясную меру надежности прогнозов, конформное прогнозирование повышает достоверность и интерпретируемость моделей машинного обучения, делая их более прозрачными и удобными для лиц, принимающих решения.

В этой главе мы познакомимся с конформным прогнозированием и рассмотрим, как оно может применяться на практике.

Здесь мы рассмотрим следующие основные темы:

- введение в конформное прогнозирование;
- истоки конформного прогнозирования;
- отличия конформного прогнозирования от традиционного машинного обучения;
- p -значение и его роль в конформном прогнозировании.

В этой главе вы получите практическое представление о конформном прогнозировании и его применении. К концу этой главы вы сможете понять, как конформное прогнозирование можно применить к вашим собственным моделям машинного обучения, чтобы повысить их надежность и интерпретируемость.

ТЕХНИЧЕСКИЕ ТРЕБОВАНИЯ

В книге используется язык Python. Код этой книги размещен на GitHub, и его можно найти здесь: <https://github.com/PacktPublishing/Practical-Guide-to-Applied-Conformal-Prediction>. Вы можете запускать тетрадки локально или загружать их в Google Colab (<https://colab.research.google.com/>).

ВВЕДЕНИЕ В КОНФОРМНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ

В этом разделе мы познакомимся с конформным прогнозированием и объясним, как его можно использовать для повышения надежности прогнозов, генерируемых статистическими моделями, моделями машинного обучения и глубокого обучения. Мы представим обзор ключевых идей и концепций, лежащих в основе конформного прогнозирования, а также преимуществ конформного прогнозирования. К концу этого раздела вы получите твердое представление о конформном прогнозировании и поймете, почему его важно знать.

Конформное прогнозирование – это мощная система машинного обучения, которая предлагает валидные меры уверенности (меры доверия) для отдельных прогнозов. Это означает, что, когда вы делаете прогноз с помощью любой модели, используя конформное прогнозирование, вы также можете измерить свою уверенность в этом прогнозе.

Это невероятно полезно во многих практических задачах, где очень важно иметь надежные и интерпретируемые прогнозы. Например, в медицинской диагностике конформное прогнозирование позволяет вычислить уровень доверия, когда выносится решение о том, является ли опухоль злокачественной или доброкачественной. Это позволяет врачам принимать более обоснованные решения о лечении на основе уверенности в прогнозе. В финансовой сфере конформное прогнозирование позволяет получить прогнозные интервалы

оценки финансового риска. Это позволяет инвесторам количественно оценить риски роста и падения.

В частности, конформное прогнозирование позволяет сказать, что вероятность злокачественности опухоли составляет 95 %, это дает врачам высокую уверенность в диагнозе рака. Или же оно может предсказать с вероятностью 80 %, что цена на акции в следующем месяце будет находиться в диапазоне от 50 до 60 долл., определяя примерный торговый диапазон. Конформное прогнозирование повышает доверие и является полезным в реальных задачах, таких как медицинская диагностика и финансовое прогнозирование, обеспечивая количественную уверенность в прогнозах.

Ключевое преимущество конформного прогнозирования заключается в том, что оно предлагает валидные метрики уверенности для отдельных прогнозов. Модель конформного прогнозирования обычно дает прогноз в виде прогнозного интервала или множества прогнозов (набора прогнозов) с заданным уровнем доверия, например 95 %. В задачах классификации конформное прогнозирование может также калибровать вероятности классов, повышая уверенность в принятии решений.

В конформном прогнозировании «охват» (coverage) означает вероятность того, что область спрогнозированных значений, будь то множество потенциальных исходов в задачах классификации или прогнозный интервал в задачах регрессии, правильно охватывает истинные значения. По сути, если вы выбираете охват 95 %, это означает следующее: существует вероятность 95 %, что истинные значения попадают в полученное множество прогнозов или интервал.

Мы называем такие области прогнозов валидными. Требование валидности прогнозов имеет решающее значение для того, чтобы убедиться, что модель не содержит погрешности в прогнозах, и особенно это важно в таких важных сферах, как здравоохранение, финансы и самоуправляемые автомобили. Достоверные прогнозы являются необходимым условием доверия к модели машинного обучения, которая сгенерировала этот прогноз.

Хотя существуют альтернативные подходы к количественному определению неопределенности, такие как байесовские методы, методы Монте-Карло и бутстреп, для обеспечения гарантии валидности данные подходы требуют предположения о распределении данных, например предположение о том, что данные следуют нормальному распределению. Однако истинное соответствующее распределение реальных данных, как правило, неизвестно. Напротив, конформное прогнозирование не делает предположений о распределении и может обеспечить гарантии валидности, не делая предположений о характеристиках распределения данных. Это делает конформное прогнозирование более широко применимым к реальным данным, которые могут не удовлетворять общепринятым статистическим предположениям типа нормальности, гладкости и т. д.

На практике необходимость в предположениях касательно характеристик распределения ограничивает возможности таких методов, как байесовский вывод или бутстреп, делать формально строгие заявления об источниках реальных произвольных данных. Нет никакой гарантии, что прогнозы, полученные с помощью таких методов, будут иметь заявленный уровень доверия или охват для всех типов данных, поскольку предположения могут не выполняться. Это может привести к несоответствию между уровнем доверия, сообщаемым

пользователям, и фактическим охватом, что в свою очередь приведет к неточным решениям и введет пользователей в заблуждение относительно надежности прогнозов модели.

Конформное прогнозирование позволяет избежать этих проблем, предоставляя гарантии валидности для конечных выборок, не зависящие от распределения, поскольку оно не опирается на труднопроверяемые предположения о распределении данных. Это делает оценки уверенности, полученные в рамках конформного прогнозирования, более надежными и робастными в реальных задачах.

Конформное прогнозирование имеет множество преимуществ:

- **гарантированный охват (guaranteed coverage)**: конформное прогнозирование автоматически гарантирует валидность областей прогнозов. Любой метод из системы конформного прогнозирования гарантирует валидность областей прогнозов за счет математического дизайна. Для сравнения альтернативные методы выдают прогнозы, которые не дают никаких гарантий валидности. В качестве примера можно привести популярный пакет NGBoost, который не выдает валидных прогнозных интервалов (подробнее об этом можно прочитать по следующей ссылке: <https://valeman.medium.com/does-ngboost-work-evaluating-ngboost-against-critical-criteria-for-good-probabilistic-prediction-28c4871c1bab>);
- **не зависит от распределения (distribution-free)**: конформное прогнозирование не зависит от распределения, и его можно применить к любому распределению данных независимо от свойств этого распределения, при условии что данные являются перестановочными (неупорядоченными). **Перестановочность (exchangeability)**, также используются синоним «взаимообмениваемость», «неупорядоченность», означает, что порядок или индекс точек данных не имеет значения – перемешивание или перестановка точек данных не изменит общего распределения данных. Например, перестановочность предполагает, что наблюдения 1, 2, 3 имеют то же самое распределение, что и наблюдения 2, 3, 1 или 3, 1, 2. Это более слабое предположение, чем предположение IID (предположение о независимых одинаково распределенных случайных величинах), и оно необходимо для обеспечения гарантий валидности. В отличие от многих классических статистических моделей, конформное прогнозирование не делает предположений, например, о том, что данные подчиняются нормальному распределению. Данные могут иметь любое распределение, даже с отклонениями от нормального, например с толстыми хвостами. Единственное требование – это перестановочность. Полагаясь только на перестановочность, а не на строгие предположения о распределении, конформное прогнозирование обеспечивает гарантии охвата прогнозов для конечных выборок, которые не зависят от распределения и применимы к любому источнику данных;
- **независимость от модели (model-agnostic)**: конформное прогнозирование можно применить к любой модели прогнозирования, которая генерирует точечные прогнозы в задачах классификации, регрессии, временных рядов, компьютерном зрении, NLP, обучении с подкреплением и других задачах статистики, машинного обучения и глубокого

обучения. Конформное прогнозирование успешно применяется ко многим инновационным типам моделей, включая недавние новинки, такие как диффузионные модели и **большие языковые модели (LLM)**. Конформное прогнозирование не требует, чтобы модель была статистической, моделью машинного обучения или моделью глубокого обучения. Это может быть любая модель любого типа, например бизнес-эвристика, разработанная экспертами в данной области. Если у вас есть модель, генерирующая точечные прогнозы, вы можете поверх нее применить конформное прогнозирование, чтобы получить хорошо калиброванную, надежную и безопасную модель вероятностного прогнозирования;

- **неинтрузивность (non-intrusive)**: конформное прогнозирование отличается своей простотой и эффективностью. Вместо того чтобы переделывать существующую модель, генерирующую точечные прогнозы, вы можете легко настроить конформное прогнозирование поверх нее. Для предприятий с уже существующими моделями это меняет ситуацию. А для специалистов по data science этот процесс еще более захватывающий. Просто поверх вашей модели точечного прогнозирования появляется слой количественной оценки неопределенности, обеспечиваемый конформным прогнозированием, и вы получаете современную модель вероятностного прогнозирования;
- **размер набора данных**: конформное прогнозирование отличается от типичных статистических методов, которые зависят от строгих предположений о распределении данных, таких как нормальность, или требуют огромных массивов данных для получения надежных оценок. Оно с математической точки зрения гарантирует получение валидных прогнозов без смещения, независимо от размера набора данных. Хотя небольшие наборы данных могут давать более широкие прогнозные интервалы в задачах регрессии (или большие наборы в задачах классификации), конформное прогнозирование неизменно остается валидным. Валидность прогноза обеспечивается независимо от размера набора данных, базовой прогнозной модели или распределения данных, делая конформное прогнозирование уникальным и непревзойденным методом количественной оценки неопределенности;
- **простота использования**: несколько лет назад применение конформного прогнозирования было ограничено из-за нехватки библиотек с открытым исходным кодом, хотя уважаемые университеты и крупные корпорации, такие как Microsoft, использовали его в течение многих лет. Сейчас ситуация кардинально изменилась. Появился богатый выбор первоклассных пакетов Python, таких как MARIE, Amazon Fortuna и др. Это означает, что получение хорошо калиброванных вероятностных прогнозов с помощью конформного прогнозирования – это всего лишь несколько строк программного кода, что упрощает интеграцию конформного прогнозирования в бизнес-приложения. Более того, такие платформы, как KNIME, демократизировали его использование, предлагая конформное прогнозирование в рамках low-code- и no-code-решений;
- **скорость**: самый распространенный вариант конформного прогнозирования – индуктивное конформное прогнозирование, отличается тем, что

работает эффективно, без необходимости повторного обучения базовой модели. В отличие от него другие методы, такие как байесовские нейронные сети, часто требуют повторного обучения. Это различие означает, что индуктивное конформное предсказание предлагает оптимизированный подход, исключающий временные и вычислительные затраты, связанные с повторным обучением модели.

Преимущества использования конформного прогнозирования поистине невероятны. Возможно, вам будет интересно узнать, как конформное прогнозирование достигает тех уникальных и мощных преимуществ, которые оно предлагает своим пользователям.

Основная цель конформного прогнозирования – обеспечить валидные меры уверенности, которые корректируются в зависимости от сложности отдельных прогнозов. В конформном прогнозировании используются «метрики конформности», чтобы оценить, насколько хорошо новые наблюдения согласуются с предыдущими.

Общий рабочий процесс состоит из следующих шагов.

1. Конформный предиктор¹ учится на прошлых обучающих примерах, чтобы количественно оценить неопределенность прогнозов, полученных для новых наблюдений.
2. В рамках количественного определения (квантификации) неопределенности прогнозов для новых наблюдений он вычисляет оценки неконформности, измеряющие, насколько новое наблюдение отличается от наблюдений обучающего набора, не соответствует им, является «неконформным» (в классической трансдуктивной версии конформного прогнозирования), или калибровочного набора (в наиболее популярном варианте конформного предсказания – индуктивном конформном прогнозировании).
3. Эти оценки неконформности используются для определения того, попадает ли новое наблюдение в диапазон значений, ожидаемых исходя из обучающих данных.
4. Модель вычисляет персонализированные меры уверенности, а также множества прогнозов (в задачах классификации) или прогнозные интервалы (в задачах регрессии и прогнозирования временных рядов) для каждого прогноза.

Магия конформного прогнозирования заключается в этих мерах неконформности, которые позволяют модели оценивать каждое новое предсказание в контексте ранее просмотренных данных. Этот простой, но мощный подход приводит к гарантиям охвата для конечных выборок, адаптированным к внутренней сложности получения данного прогноза. Валидность обеспечивается для любого распределения данных, алгоритма прогнозирования или размера набора данных.

В этой книге мы будем взаимозаменяемо говорить о мерах конформности и мерах неконформности; одна является обратной величиной другой, и в зависимости от области применения будет удобнее использовать либо меры конформности, либо меры неконформности.

¹ Здесь и далее под термином «предиктор», если не оговорено иное, автор подразумевает модель конформного прогнозирования, чтобы не было смешения с прогнозной моделью машинного обучения, над которой настраивается модель конформного прогнозирования. – *Прим. перев.*

Понимание мер конформности

Мера конформности является важнейшим компонентом конформного прогнозирования и, по сути, представляет собой функцию, которая присваивает числовую оценку (оценку конформности) каждому объекту в наборе данных. Оценка конформности показывает, насколько хорошо новое наблюдение соответствует наблюдаемым данным. При получении нового прогноза мы можем использовать меру конформности, чтобы вычислить оценку конформности для нового наблюдения и сравнить ее с оценками конформности для предыдущих наблюдений. На основе этого сравнения мы можем рассчитать меру уверенности для нашего прогноза. Оценка конформности указывает на степень уверенности в прогнозе.

В контексте конформного прогнозирования выбор меры конформности является ключевым шагом. Мера конформности определяет, как мы оцениваем степень сходства новых наблюдений с прошлыми примерами. Существует множество вариантов определения мер конформности в зависимости от задачи.

В задачах классификации простой мерой конформности может быть расчет вероятностных оценок, присвоенных прогнозной моделью каждому классу нового наблюдения. Класс с наивысшей вероятностью будет иметь наилучшую конформность или соответствие обучающим данным.

Ключевым преимуществом конформного прогнозирования является то, что мы получаем валидные области прогнозов независимо от используемой меры конформности. Это происходит потому, что конформное прогнозирование основывается только на порядке, создаваемом мерой конформности, а не на ее точной форме.

Таким образом, у нас есть гибкость, позволяющая учитывать знания о предметной области при разработке подходящей меры конформности для решаемой задачи. Если мера ранжирует, насколько хорошо новые наблюдения соответствуют прошлым данным, конформное прогнозирование может использоваться для обеспечения гарантий охвата конечных выборов.

Хотя все конформные предикторы дают валидные области прогнозов, выбор меры конформности влияет на их эффективность. Эффективность относится к ширине интервалов или множеств прогнозов – более узкие интервалы содержат более ценную информацию для принятия решений.

Хотя валидность сохраняется при любой мере конформности, продуманный выбор меры, адаптированной к конкретной задаче, может улучшить эффективность и привести к получению более узких и полезных прогнозных интервалов. Интервалы также должны быть адаптивными в зависимости от неопределенности модели – становиться широкими для сложных прогнозов и узкими для более определенных прогнозов.

Давайте проиллюстрируем это на примере. Допустим, у нас есть набор данных о пациентах, у которых диагностировано заболевание; у этих пациентов есть такие характеристики, как возраст, пол и результаты анализов. Мы хотим выяснить, находятся ли новые пациенты в группе риска.

Простой мерой конформности может быть расчет степени сходства значений характеристик новых пациентов с данными из обучающего набора. Новые пациенты, сильно отличающиеся от пациентов в обучающем наборе, будут получать низкие оценки конформности и широкие прогнозные интервалы, ука-

зывающие на высокую неопределенность. Хотя эта мера конформности будет создавать валидные интервалы, мы можем повысить эффективность с помощью более адаптированного подхода.

Тщательно выбирая меры конформности, соответствующие нашей задаче и знаниям предметной области, мы можем получить высококачественные конформные предикторы, обеспечивающие как валидность, так и эффективность.

Теперь кратко рассмотрим истоки конформного прогнозирования.

Истоки конформного прогнозирования

Истоки конформного прогнозирования можно найти в статье Анастасиоса Н. Ангелопулоса (Anastasios N. Angelopoulos) и Стивена Бейтса (Stephen Bates) «Gentle Introduction to Conformal Prediction and Distribution-Free Uncertainty Quantification» (<https://arxiv.org/abs/2107.07511>).

Примечание

Конформное прогнозирование было изобретено моим научным руководителем, Владимиром Вовком (Vladimir Vovk), профессором Королевского колледжа Лондона. Владимир Вовк окончил Московский государственный университет, где изучал математику и был студентом одного из самых известных математиков XX века Андрея Колмогорова. В это время появились начальные идеи, которые позже привели к изобретению конформного прогнозирования.

Первое издание книги «Algorithmic Learning in a Random World» (<https://link.springer.com/book/10.1007/b106715>) Владимира Вовка (Vladimir Vovk), Александра Гаммермана (Alexander Gammerman) и Гленна Шафера (Glenn Shafer) было опубликовано в 2005 году. Второе издание книги было опубликовано в 2022 году (<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-031-06649-8>).

Конформное прогнозирование было популяризировано в академических кругах США профессором Ларри Вассерманом (Larry Wasserman) (Университет Карнеги–Меллона) и его сотрудниками, которые опубликовали несколько ключевых статей и познакомили с конформным прогнозированием многих других исследователей в США.

Примечание

В 2022 году я защитил свою кандидатскую диссертацию по машинному обучению. В том же году я создал ресурс «Awesome Conformal Prediction» (<https://github.com/valeman/awesome-conformal-prediction>) – наиболее полный профессиональный ресурс по конформному прогнозированию, который с тех пор получил тысячи звезд на GitHub.

Конформное прогнозирование быстро превратилось из нишевой исследовательской области в основную методологию для количественной оценки не-

определенности. За последние годы в этой области было опубликовано более 1000 научных статей.

Этот всплеск исследований отражает растущую популярность и применимость конформного прогнозирования в академической среде и индустрии. Крупные технологические компании, такие как Microsoft, Amazon, DeepMind и NVIDIA, теперь проводят исследования конформного прогнозирования и применяют его. Методология также была принята в областях с высокой ценой принятия решения, таких как здравоохранение и финансы, где валидность и надежность имеют критическое значение.

Всего за два десятилетия с момента своего появления конформное прогнозирование утвердилось как один из лучших и наиболее надежных подходов для количественной оценки неопределенности в машинном обучении. Эта область будет продолжать расширяться по мере того, как все больше практиков будут осознавать ценность гарантий охвата конечных выборок, предлагаемых конформным прогнозированием, по сравнению с традиционными статистическими методами, основанными на асимптотической теории и недоказуемых предположениях о распределении. С ростом числа исследований и кейсов применения конформное прогнозирование готово стать стандартным инструментом для любой задачи, требующей строгих оценок неопределенности наряду с точечными прогнозами.

На конференции NeurIPS 2022 один из ведущих математиков нашего времени, Эммануэль Канлес (Emmanuel Candès) (Стэнфорд), выступил с ключевым докладом под названием «Conformal Prediction in 2022» (<https://slideslive.com/38996063/conformal-prediction-in-2022?ref=speaker-43789>) перед десятками тысяч участников. В своем докладе Эммануэль Канлес сказал:

Методы конформного вывода становятся очень популярными как в академической среде, так и в индустрии. В двух словах, эти методы обеспечивают точные прогнозные интервалы для будущих наблюдений, не делая никаких предположений о распределении данных, кроме наличия независимых и одинаково распределенных данных и, говоря более широко, перестановочных данных.

Будущее конформного прогнозирования

В течение многих лет я продвигал конформное прогнозирование как ведущий подход для получения надежных вероятностных прогнозов. Последние 2-3 года порадовали взрывным интересом к конформному прогнозированию и его адаптацией, включая интерес крупнейших технологических лидеров, таких как Amazon, Microsoft, Google и DeepMind. Многие университеты и компании занимаются исследованиями конформного прогнозирования, активно разрабатывают прикладные решения и выпускают открытые библиотеки, такие как MARIE и Amazon Fortuna. Эти тенденции будут только усиливаться, поскольку все большее количество практиков признает мощь конформного прогнозирования для получения достоверной оценки неопределенности. Известный исследователь машинного обучения Майкл И. Джордан (Michael I. Jordan) на семинаре ICML 2021 (<https://icml.cc/virtual/2021/workshop/8373>) отметил: «Идеи конформного прогнозирования – это ответ на оценку неопределенности (UQ); я думаю, это лучшее, что я видел, – это просто, обобщаемо и так далее».

Конформное прогнозирование имеет невероятно светлое будущее как неотъемлемый инструмент для количественной оценки неопределенности в машинном обучении. Несколько ключевых причин способствуют развитию и внедрению конформного прогнозирования:

- **простота:** конформное прогнозирование легко понять и реализовать, что делает его доступным для практиков, не обладающих глубокими знаниями в области статистики. В его основе лежит интуитивная идея измерения степени соответствия новых наблюдений прошлым данным;
- **гибкость:** его можно применять к любой модели машинного обучения и распределению данных. Не требуется никаких изменений существующих предикторов. Эта независимость от модели значительно расширяет применимость конформного прогнозирования;
- **теоретические гарантии:** гарантии охвата для конечной выборки обеспечивают непревзойденный уровень надежности по сравнению с традиционными статистическими методами, основанными на асимптотической теории.

Эти преимущества идеально позиционируют конформное прогнозирование как золотой стандарт для оценки неопределенности в приложениях машинного обучения, где надежные оценки уверенности очень важны. Я уверен, что использование конформного прогнозирования в академических исследованиях и промышленности будет стремительно нарастать в ближайшие годы. Простой, но мощный подход, лежащий в основе конформного прогнозирования, закрепляет его место как неотъемлемого инструмента для любого практикующего специалиста или организации, работающей с прогностической неопределенностью. Следующие несколько лет будут невероятно захватывающими, поскольку мы осознаем полный потенциал этого революционного подхода.

Отличия конформного прогнозирования от традиционного машинного обучения

Конформное прогнозирование позволяет получать хорошо калиброванные вероятностные прогнозы для любой статистической модели, модели машинного обучения или модели глубокого обучения. Это достигается без использования ограничительных предположений, необходимых для других методов, таких как байесовские техники, метод Монте-Карло и бутстреп. Важно отметить, что конформное прогнозирование не требует субъективных априорных предположений. Оно генерирует математически обоснованные, хорошо калиброванные прогнозы каждый раз независимо от используемой модели прогнозирования, распределения данных или размера набора данных.

Одним из ключевых ограничений традиционного машинного обучения является необходимость более обоснованных мер уверенности для индивидуальных прогнозов. Модели могут демонстрировать отличную обобщающую способность, но не способны достоверно оценить неопределенность прогноза для конкретного наблюдения.

Конформное прогнозирование решает эту проблему, выводя области прогнозов и оценки уверенности с гарантией статистической валидности. Оно до-

Конец ознакомительного фрагмента.

Приобрести книгу можно

в интернет-магазине

«Электронный универс»

e-Univers.ru