

XIV Konferencja PLOUG
Szczyrk
Październik 2008

Prognozowanie w teorii i praktyce

Tomasz Wyrozumski
BMS Creative

e-mail: tw@bms.krakow.pl

Abstrakt. Artykuł nawiązuje do wcześniejszych publikacji autora, dotyczących zastosowań sztucznych sieci neuronowych. Jego przedmiotem nie jest jednak tym razem funkcjonowanie samego motoru neuronowego, lecz raczej szerszy kontekst zagadnienia, a więc istota prognozowania, kryteria przewidywalności zjawisk, metodyki predykcji oraz możliwe sposoby jej automatyzacji. Szeroko omówione zostały kwestie doboru i przetwarzania danych wykorzystywanych do tworzenia prognoz, jak również problemy analizy wyników i zarządzania ryzykiem otrzymanych rezultatów. Rozważania teoretyczne zilustrowano na przykładzie konkretnej implementacji – dedykowanego oprogramowania N-Predictor, działającego w oparciu o bazy danych Oracle

Informacja o autorze. Z wykształcenia fizyk, absolwent Uniwersytetu Jagiellońskiego. Doktorat w dziedzinie fizyki teoretycznej na Uniwersytecie Wiedeńskim. Od 1992 roku zajmuje się profesjonalnie informatyką, kierując firmą BMS Creative (Kraków). Uczestniczy przy tym aktywnie w komercyjnych projektach informatycznych związanych między innymi z eksploracją danych, technologią sztucznych sieci neuronowych, a także wdrożeniami systemów CRM.

1. Tytułem wstępu

O prognozowaniu było już nie raz, tu na konferencjach PLOUG. Wystarczy rzucić okiem choćby na [Wyro00] lub [Wyro04]. Poprzednio jednak koncentrowaliśmy się głównie na funkcjonowaniu sieci neuronowych i na ich konkretnych, praktycznych zastosowaniach, zaś tym razem chcielibyśmy abstrahować od samego „motoru prognozującego”, a więcej uwagi poświęcić metodologii predykcji. Wielokrotnie odwoływać się będziemy do fizyki, która spośród wszystkich nauk wytworzyła najskuteczniejszy chyba aparat badawczy i może pod tym względem stanowić wzór do naśladowania dla dyscyplin mniej sformalizowanych, a pretendujących do przewidywania tych aspektów przyszłości, które leżą w sferze ich zainteresowań. W istocie jednak naszym celem jest przedyskutowanie kwestii prognozowania automatycznego, a więc takiego, które każdy szanujący się fizyk uzna za tandetne, lecz które z konieczności pozostaną jedynymi skutecznymi tam, gdzie zazwyczaj nie ma nic lepszego, a więc w ekonomii, socjologii, a nawet zagadnieniach technicznych o bardzo dużym stopniu złożoności. Stricte praktycznym aspektem poświęcamy tylko drugą część rozważań, podczas gdy pierwsza, obszerniejsza, dotyka istoty zagadnienia. Jej zadaniem jest pewne uporządkowanie pojęć – wydaje się, że warto mieć świadomość tego, co się zamierza, zanim usiądzie się do komputera, by napisać program, czy użyć gotowych narzędzi, przetwarzających jedne liczby w drugie.

2. Prognozować, ale po co?

Dążenie do poznania przyszłości jest dla człowieka czymś bardzo naturalnym – od najdawniejszych czasów w obrębie wszystkich cywilizacji funkcjonowały wróżby i wróżbici. Odpowiedzi na pytanie o to, co ma nastąpić, szukano w gwiazdach, wnętrznościach zwierząt ofiarnych, wyglądzie dłoni itp. Z drugiej strony, gdyby człowiek znał dokładnie swoją przyszłość, życie wydawałoby mu się nieciekawe, puste, niemal przykre. Takie przekonanie znajduje zresztą swój wyraz w antycznych tragediach, w których los bohaterów przesądzony jest od samego początku i cokolwiek by nie uczynili, zawsze spotka ich ten sam koniec. Skąd zatem owa sprzeczność? Z jednej strony z niecierpliwością, zainteresowaniem, nadzieją, czekamy na to, co przyniesie kolejny dzień, z drugiej – chcielibyśmy jak najdokładniej poznać wszystko już dziś.

W istocie chodzi chyba o co innego. Nie tyle pragniemy wiedzieć, co dokładnie nastąpi, ile raczej, co może nastąpić w takiej, a nie innej sytuacji. Gdyby ktoś miał pełną świadomość tego, że wychodząc z domu o 10.53 wpadnie za kilka minut pod pędzący samochód, zapewne poczekałby i wyszedł, powiedzmy, o 10.54. Gdyby ostrzeżony przed idami marcowymi Cezar nie udał się do kurii Senatu... itd. Od zarania dziejów pragniemy poznać różne możliwe scenariusze rozwoju sytuacji, a pcha nas do tego poznania wspólny dla wszystkich istot żyjących instynkt samozachowawczy, przejawiający się w tym przypadku w prostym dążeniu do unikania niebezpieczeństw.

Mogą nas, współczesnych, oczywiście śmieszyć owe starożytne metody przewidywania przyszłości, ale miejmy świadomość, że nie tak wiele się pod tym względem zmieniło. Nadal funkcjonują i bardzo dobrze prosperują różnego rodzaju wróżki, a ich klientami bywają ludzie, z pozoru wykształceni, w tym przynajmniej sensie, że legitymują się świadectwami maturalnymi, a nawet dyplomami wyższych uczelni i to niekoniecznie tych „podejrzanych”. Horoskopy propagowane są przez media elektroniczne, wykorzystujące skądinąd najnowsze technologie. Co więcej, zainteresowanie tarotem i podobnymi zabawkami w skali społecznej przewyższa zapewne zapotrzebowanie na publikacje popularnonaukowe. Jeśli więc przyjdzie nam do głowy mówić o ciemnocie i zacofoaniu w starożytności, bądź w średniowieczu, to ugryźmy się lepiej w język, nim ktoś, patrząc z boku, nie powtórzy za Mikołajem Wasiljewiczem Gogolem: „Z samych siebie się śmiejecie”.

3. Prognozować, ale jak?

Tyle dygresja. Tworzenie scenariuszy przyszłych zdarzeń opiera się na poznawaniu związków przyczynowo-skutkowych, które to z kolei poznawanie stanowi bardzo istotny element metody naukowej, nie tylko w przyrodoznawstwie. Aby unikać niebezpieczeństw człowiek od zawsze nie tylko posługiwał się wróżbami, ale również starał się kojarzyć fakty i łączyć je w pewne zależności. Czynią tak przecież również zwierzęta. Znane są eksperymenty, w których po zapaleniu się lampki szczury traktowano słabym, acz przykrym dla nich impulsem elektrycznym. Po niedługim czasie gryzonie próbowały uciekać, kiedy tylko zapalała się lampka. Podobny mechanizm kazał zapewne ludziom od zarania dziejów chronić się przed nadciągającą burzą, gdy niebo zasnuwały ciężkie, ołowiane chmury i zrywał się silny wiatr. Tego typu postępowanie można by określić mianem **prognozowania fenomenologicznego**, jako że nie wchodzi się tu w istotę zjawiska, a raczej koncentruje na samym jego powierzchniowym opisie po to, by wyłapać mniej lub bardziej ewidentne związki przyczynowo-skutkowe. Wiadomo, że jeśli obciążyć windę zanadto, to lina się urwie i dojdzie do nieszczęścia. Zależność jest oczywista, a prognozowanie fenomenologiczne w tym zakresie – znacznie starsze niż windy, w każdym razie te, napędzane silnikami elektrycznymi. Tu jednak rodzi się drugie, bardzo naturalne pytanie: „Zanadto – to znaczy jak dokładnie nie należy obciążać windy?” Albo innymi słowy, **ile** kilogramów udźwignie lina? A wraz z pojawieniem się słowa „ile” na scenę wkracza matematyka. Robi ona zresztą oszałamiającą karierę jako narzędzie nauk przyrodniczych, oszałamiającą do tego stopnia, że warto poświęcić jej chwilę uwagi.

Czy matematykę się tworzy, czy raczej odkrywa? Czy stanowi ona idealny byt platoński, który istnieje gdzieś, niezależnie od nas, a my tylko, obserwując cienie na ścianie jaskini, z mozołem poznajemy jej reguły, czy też jest raczej emanacją naszego umysłu, kwintesencją abstrakcyjnego myślenia, pochodną fizjologicznych procesów, zachodzących w mózgu? Pozostawmy tę dyskusję filozofom, nie próbując nawet szufladkować obu podejść i przyklejać im etykiet „idealistyczne” lub „materialistyczne”. Poprzestańmy jedynie na stwierdzeniu, że oba w jakimś stopniu wyjaśniają przystawanie matematyki do przyrodoznawstwa, bowiem albo to świat materialny jest odbiciem idealnego i matematyka jest niejako a priori „wpisana” w materię, albo też, wywodzi się z niej via fizjologia mózgu i w związku z tym do niej pasuje. W każdym razie, owo przystawanie matematyki do materii jest faktem, a jego namacalny dowód stanowi nauka zwana fizyką oraz funkcjonująca w oparciu o jej prawa sfera jakże zaawansowanej dzisiaj techniki.

Matematyka najpierw więc w naturalny sposób staje się narzędziem ilościowego opisu zjawisk, a następnie okazuje się narzędziem niezwykle wręcz potężnym. Zastosowanie jej do prognozowania fenomenologicznego nie tylko pozwala skwantyfikować jego rezultaty, lecz również wejść głębiej w istotę zjawiska! Można powiedzieć, że matematyka ciągnie niejako badacza za rękę i pozwala coraz lepiej **rozumieć** opisywaną za jej pomocą rzeczywistość. James Clerk Maxwell powiedział ponoć kiedyś, że równania są mądrzejsze niż ludzie, którzy je ułożyli. Zapewne układając swoje słynne równania nie miał z początku świadomości, że posiadają one nietrywialnie próżniowe rozwiązanie, zwane falami elektromagnetycznymi. Zresztą przypomnijmy przy okazji, że fakt iż równania Maxwella nie są niezmiennicze względem transformacji Galileusza, stanowił pewien paradoks, implikując niezbyt konsystentną skądinąd koncepcję ruchu absolutnego oraz eteru. Dopiero Hendrik Antoon Lorentz z uniwersytetu w Lejdzie wyznaczył inną, dość egzotyczną transformację, która równania te zachowywała, zaś Albert Einstein w 1905 roku zaproponował, by opisywała ona rzeczywistą sytuację przejścia od jednego układu odniesienia do innego. Jak wiadomo, w ten właśnie sposób powstała szczególna teoria względności.

Powyższy przykład (a można by takie mnożyć) dowodzi tego, że matematyka świetnie przystaje do rzeczywistości. Przyłożona do niej w jednym miejscu, przylega też w innych, w związku z tym, jeśli tylko konsekwentnie ją stosować, można te inne miejsca łatwo dostrzec i dowiedzieć się nowych, ważnych rzeczy o otaczającym nas świecie materii. Matematyka jest więc świetnym

tworzywem do **modelowania** rzeczywistości. Czy prowadzi nas tym samym na wyższy od fenomenologicznego poziom prognozowania? Odpowiedź jest twierdząca, choć, jak się przekonamy – wcale nie aż tak oczywista.

Sprawdzianem każdej teorii fizycznej jest eksperyment. Teoria musi więc mieć taki charakter, aby przy jej pomocy dało się przewidzieć wynik eksperymentu i tym samym ją zweryfikować lub obalić (jak słusznie zauważył Karl Popper, poprawnym kryterium naukowości jest właśnie falsyfikowalność [Pope35]). Naukowość teorii jest więc w istocie tym samym, czym jej zdolność do prognozowania! Jak zdolność tę sprawdzić? Jeżeli teoria posługuje się aparatem matematycznym i swoje tezy przedstawia w formie równań, należy zapytać, czy równania te dają się sprowadzić do tzw. **hamiltonowskiego równania ewolucji**, o postaci

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi,$$

gdzie Ψ opisuje stan układu, a H jest tzw. operatorem ewolucji działającym na ten stan. Pozostaje jeszcze wyjaśnić, czym jest t . Parametr ów, nazywany *czasem*, ma charakter nierelatywistyczny. Dla eksperymentatora jest to po prostu „coś, co pokazuje jego zegarek”, dla teoretyka – wielkość, której poprawne określenie może być niekiedy wcale kłopotliwe, dla filozofa zaś – pojęcie nadzwyczaj trudne i niejednoznaczne, dotyczące problemów egzystencjalnych. Poprzestańmy więc na zegarku oraz stwierdzeniu, iż czas, wprowadzający w zbiorze zdarzeń relację porządku, jest esencją każdego równania ewolucji.

Skojarzenia z mechaniką kwantową (zob. np. [LaLi79]), jakie nasuwają się w kontekście przedstawionego równania, są oczywiście słuszne. Ψ byłoby wtedy funkcją falową, a H – **Hamiltonianem** (z dokładnością do $1/\hbar$). A choć kontekst naszych rozważań jest szerszy – wykracza poza fizykę, choć nawet w jej przypadku obejmuje również zagadnienia klasyczne (por. równanie Hamiltona-Jacobiego, np. [Olch78]) – to jednak będziemy trzymać się wprowadzonej terminologii i operator ewolucji konsekwentnie nazywać właśnie Hamiltonianem. Przy tej okazji warto zresztą na marginesie zauważyć, że ogólnie H wcale nie musi być operatorem liniowym, jak ma to miejsce w mechanice kwantowej.

Nasze równanie ewolucji jest oczywiście równaniem różniczkowym cząstkowym, pierwszego rzędu ze względu na t . Oznacza to, że jego rozwiązania Ψ są funkcjami czasu oraz zmiennych q z tzw. **przestrzeni konfiguracyjnej** układu (np. zmiennych przestrzennych: x, y, z , danych ekonomicznych, meteorologicznych itp., w zależności od problemu). Nie wdając się w bardzo skomplikowane skądinąd kwestie istnienia rozwiązań równań cząstkowych, przypomnijmy tylko, że nie mogą być one jednoznacznie określone, jeżeli nie zostaną zadane tzw. warunki początkowe, czyli po prostu wartość funkcji Ψ w pewnej, wybranej chwili czasu

$$\Psi_0(q) = \Psi(q, t_0).$$

Wtedy równanie ewolucji opisuje dalszy rozwój sytuacji, a jego rozwiązanie dane jest następującym, ogólnym wyrażeniem

$$\Psi(q, t) = \int G(q, t; q', t_0) \Psi(q', t_0) d^n q',$$

gdzie całkowanie rozciąga się po całej przestrzeni konfiguracyjnej danych początkowych. Jądro powyższego przekształcenia G , zwane funkcją Greena lub propagatorem (por. np. [Schi77]), stanowi w pewnym sensie odwrotność operatora H .

To tyle „mocniejszej” matematyki, a teraz wróćmy do rozważań na temat prognozowania. Zaczniemy od tego, że teorie takie jak mechanika, czy elektrodynamika klasyczna da się przedstawić w postaci hamiltonowskiej. Podobnie jest zresztą z ogólną teorią względności, choć z powodów, których nie będziemy tu szerzej omawiać, jest to znacznie trudniejsze i mniej oczywiste. Jeżeli

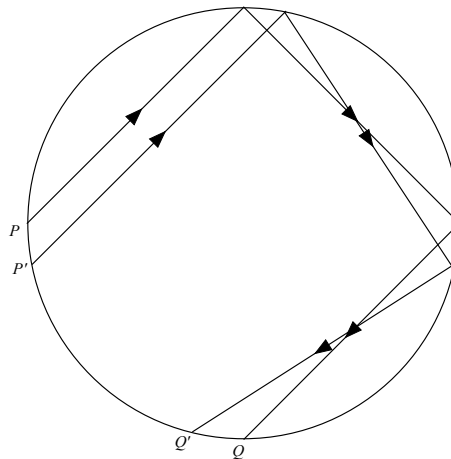
jednak jakaś teoria, niezależne, czy dotycząca materii nieożywionej, czy też zachowań społecznych, gospodarczych itp., nie mogłaby z powodów fundamentalnych wyprodukować równania ewolucji, to przynajmniej w ścisłym tego słowa znaczeniu nie należałoby jej uznawać za naukową. Nie chodzi przy tym o to, by umieć wspomniane równanie napisać w postaci jawnej, ile raczej o to, by a priori dało się je napisać, czyli aby nie istniały ku temu jakieś istotne przeszkody.

Podsumowując, doszliśmy do tego, że drugą, doskonalszą formą prognozowania jest **prognozowanie modelowe**, oparte na matematycznie sformułowanej teorii, z której da się wywieść hamiltonowskie równanie ewolucji. Przy okazji podaliśmy też ściśle sformułowanie kryterium naukowości Poppera, choć nota bene, nie jest ono pełne, bowiem można sobie bez trudu wyobrazić teorię (a nawet podać konkretne przykłady), która doskonale pozwala przewidywać wyniki eksperymentów, jednakże tylko takich, których przeprowadzenie jest technicznie niemożliwe. Naukowość tego rodzaju teorii wydaje się z oczywistych przyczyn wątpliwa, a choć mogą być one genialne, to jednak geniusz bardzo trudno oddzielić tu od szarłataństwa.

4. Prognozować, ale kiedy?

Zastanówmy się teraz nad tym, czy zawsze jesteśmy w stanie (ilościowo) prognozować rzeczywistość. Dotychczasowe rozważania prowadziłyby do przekonania, że zawsze, gdy tylko dysponujemy odpowiednią matematyczną teorią, posiadającą sformułowanie hamiltonowskie. Niestety nie jest to takie proste. Z powodów, które spróbujemy wyjaśnić, nie da się czasami skutecznie prognozować zjawisk dobrze opisanych matematycznie, natomiast można prognozować takie, które dobrego opisu zdają się nie posiadać.

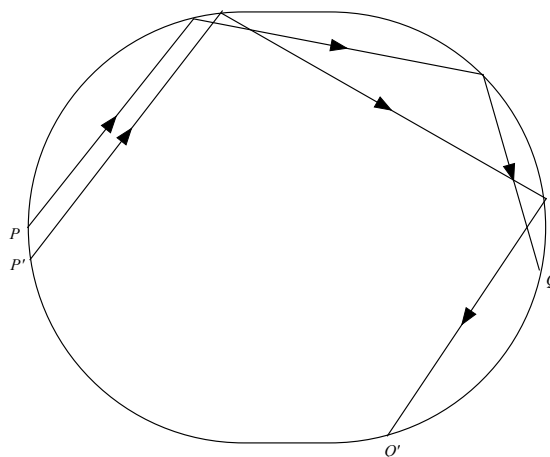
Przede wszystkim musimy pochylić się nad kwestią tzw. **stabilności** równań ewolucji. Możemy o niej mówić wtedy, gdy małe zmiany warunków początkowych prowadzą do podobnie małych zmian rozwiązań. Prześledźmy to na prostym przykładzie kulki poruszającej się wewnątrz sztywnego okręgu, od którego odbija się ona w sposób sprężysty, tak jak to pokazano na rysunku.



Załóżmy, że kulka startuje z punktu P z prędkością v , wykonuje N odbić i ląduje w punkcie Q . Powtórzmy teraz eksperyment dla tej samej prędkości początkowej i tej samej liczby odbić, jednak zmieńmy odrobinę punkt startu. Teraz będzie to P' . Jeżeli odległość między P a P' będzie niewielka, to również punkt Q' , w którym kulka znajdzie się po N odbiciach będzie w niewielkim stopniu odległy od punktu Q . Powiemy zatem, że układ zachowuje się stabilnie.

Spróbujmy jednak przeprowadzić ten sam eksperyment nie dla okręgu, lecz dla boiska piłkarskiego. Przecinamy więc okrąg średnicą, rozsuwamy obie połówki i wstawiamy między nie dwa odcinki. Co ciekawe, mogą one być dowolnie krótkie! Jaki jest tego skutek? Okazuje się, że układ

dramatycznie zmienia swoje zachowanie. Ruch kulki zostaje „rozogniskowany” i niewielka zmiana jej początkowego położenia skutkuje całkowicie odmiennymi efektami po pewnej liczbie odbić. Układ przestaje być stabilny i mówimy o nim, że zachowuje się **chaotycznie**.



Zwróćmy przy tym uwagę, że w żaden sposób nie zmieniła się fizyka zagadnienia. Kulka żąda te same prawa dynamiki, co poprzednio. Czy możemy zatem przewidzieć jej ruch? Teoretycznie tak, bo teoria nie przestała być naukową z powodu odcinka o dowolnie małej długości. W praktyce jednak pojawia się bardzo istotna trudność: każdy pomiar wykonywany jest z określoną dokładnością, a zatem w eksperymencie nie będziemy mogli idealnie określić początkowego położenia (ani prędkości) naszej kulki. Wraz z jej ruchem, z kolejnymi zderzeniami, ten wyjściowy błąd będzie się propagować i rosnąć nieograniczenie, sprawiając, że rzeczywista dokładność prognozy okaże się po pewnym czasie żenująco niska.

Niestabilność i związane z nią zachowania chaotyczne są nierzadką przypadłością nieliniowych równań ewolucji, choć w pewnych sytuacjach zdarzają się także w układach liniowych. Ni by więc wszystko jest jasno i jednoznacznie określone, a jednak pojawia się chaos. Nazywamy go zresztą z tego powodu **chaosem deterministycznym**. W praktyce – jak już powiedziano – uniemożliwia on prognozowanie w dłuższym horyzoncie czasowym. Jeżeli więc mamy uzasadnione podejrzenie, że nasz układ zachowuje się chaotycznie, albo co więcej możemy to w sposób ścisły udowodnić, nie bierzmy się za prognozowanie. Ale i odwrotnie, jeśli nie znamy równań rządzących zachowaniem układu, nie sądźmy zbyt pochopnie, że mamy do czynienia z chaosem. Nie jest on bynajmniej regułą.

Prześledźmy teraz nieco inny przykład. Kilkulitrowa butla z gazem zawiera, jak wiadomo, imponującą ilość molekuł – rzędu liczby Avogadro. Czy da się przewidzieć zachowanie gazu? Jeżeli każdą molekułę potraktować jak sztywną kulkę, zderzającą się nieustannie z innymi, to oczywiście tak. Wystarczy znać początkowe położenia i prędkości molekuł (abstrahujemy tu od zasady nieoznaczoności) i dysponować odpowiednio szybkim komputerem, który stosując elementarne zasady dynamiki Newtona wyliczać będzie ich trajektorie. Oczywiście układ jest skrajnie niestabilny. Minimalne potrącenie jednej z molekuł spowoduje, że zderzy się ona z zupełnie inną i pod zupełnie innym kątem, przekaże jej inny pęd itd. W efekcie nastąpi cała lawina zdarzeń różnych od tych, które zaszyby, gdyby molekuły nie tracono. Zgodnie z naszymi rozważaniami, prognozowanie się nie powiedzie. Co więcej, problem ma charakter rzeczywisty, a nie tylko modelowy. Bardzo łatwo jest potrącić molekułę. Stukając lekko w butlę wywołamy przecież daleko większe zaburzenie, diametralnie zmieniając stan układu. Czy jednak zmieni się przez to jego temperatura, ciśnienie, entropia? Z doświadczenia wiemy, że nie. I tu dotykamy właśnie sedna sprawy. W istocie bowiem interesuje nas nie stan mikroskopowy, lecz makroskopowy, a ten nie wykazuje żadnych niestabilności. Co więcej, możemy bez problemu prognozować rozwój sytuacji, tyle, że aby powiedzieć, jak wzrośnie ciśnienie w butli, gdy podgrzejemy ją zapalką, nie powinniśmy stoso-

wać dynamiki Newtona, lecz raczej równanie stanu gazu doskonałego (przy odpowiednich założeniach modelowych, oczywiście).

Pokazuje to wyraźnie, że z praktycznego punktu widzenia uniemożliwiająca prognozowanie niestabilność układu może mieć charakter pozorny i być po prostu wynikiem zastosowania nieprawidłowego modelu.

Kolejnym interesującym problemem, który warto omówić jest **indeterminizm**. Jeżeli jakiś obiekt nie rządzi się żadnymi z góry ustalonymi prawami, ale np. posiada tzw. „wolną wolę”, to w oczywisty sposób prognozowanie jego zachowania nie jest możliwe. W żadnym wypadku nie chcielibyśmy wdawać się w tym miejscu w ryzykowne, acz lubiane przez filozofów dyskusje na temat pochodzenia wolnej woli, interpretacji mechaniki kwantowej, bądź też związków jednego z drugim. Pragniemy jedynie podkreślić, że o ile pojedynczy indeterministyczny obiekt nie poddaje się opisowi matematycznemu, to jednak wcale nie musi tak już być z grupą obiektów. Jest zaobserwowanym faktem, że gdy wieje wiatr halny, wzrasta ilość samobójstw, choć przecież w wymiarze jednostkowym mamy zawsze do czynienia z dramatyczną decyzją, której nikt nie podejmuje dlatego, że wieje wiatr! Podobnie wygląda sytuacja z zachowaniami inwestorów giełdowych. Jeżeli banki centralne podnoszą stopy procentowe, z giełd odpływa kapitał i kursy akcji spadają. Jest to fakt dobrze znany, w pełni zrozumiały i przynajmniej jakościowo przewidywalny. A przecież stanowi on efekt indywidualnych zachowań poszczególnych inwestorów, z których każdy ma wolną wolę i całkiem niezależnie podejmuje decyzję o sprzedaży aktywów. Co więcej, gdyby próbować prognozować zachowanie jednego, losowo wybranego inwestora, można by mieć z tym poważne kłopoty.

O ile nie możemy więc prognozować zachowania pojedynczego, indeterministycznego obiektu, o tyle ich zespół nierzadko rządzi się określonymi prawami, które zresztą mogą mieć postać matematyczną, dającą się sprowadzić do hamiltonowskiego równania ewolucji. Poniekąd przypomina to omawianą sytuację z gazem w butli, z tą tylko różnicą, że o ile w przypadku gazu stabilne równania makroskopowe są wynikiem uśrednienia deterministycznych zachowań mikroskopowych, o tyle w przypadku obiektów z gruntu indeterministycznych prawa opisujące ich zbiorowość mają w istocie charakter fundamentalny. Na marginesie dodajmy, że skojarzenia z jedną z interpretacji mechaniki kwantowej są całkowicie poprawne.

Powyższe rozważania prowadzą tak naprawdę do wniosków konstruktywnych i dość optymistycznych, bowiem wynika z nich, iż nie ma najmniejszego powodu, by np. grupy społeczne w swych zachowaniach o charakterze politycznym, ekonomicznym, czy kulturowym uważać za z gruntu nieprzewidywalne. Oczywiście, całkiem odrębną kwestię stanowi to, czy dysponujemy w tym zakresie odpowiednimi teoriami i co za tym idzie, modelami.

5. Gdy nie ma modelu

Napisać równanie to jedno, a rozwiązać je to drugie. Każdy, kto uczył się mechaniki kwantowej, wie, że równanie Schrödingera można rozwiązać w sposób ścisły (i elegancki, to znaczy przy użyciu ołówka i papieru) tylko w przypadku najprostszego z atomów – wodoru. Dla helu pozostają już tylko metody przybliżone i komputery, a im więcej elektronów, tym więcej kombinowania podczas rachunków. Skoro jednak chcemy np. budować lasery, liczyć trzeba, do obliczeń używa się maszyn i jakoś nikomu nie przeszkadza to, że nie potrafi skontrolować każdej linijki rachunku. Dysponując równaniem Schrödingera, czy Diraca uważamy, słusznie skądinąd, że rozumiemy, co i jak, choć od napisania owych równań na kartce do wyliczenia widma cezu droga bardzo daleka. Uczony dziewiętnastowieczny, gdyby dać mu do ręki komputer, z jednej strony pewnie by się ucieszył, ale z drugiej – poczułby dyskomfort, że maszyna wykonuje (poprawne i skuteczne) operacje, nad którymi on zupełnie nie panuje.

Pójdźmy teraz krok dalej. Wyobraźmy sobie, że mamy układ, obojętne jaki, o którym wiemy tylko tyle, że podlega ewolucji hamiltonowskiej i że jego dynamika jest niezmiernie skomplikowana. Oznacza to, że w żaden sposób nie potrafilibyśmy *explicite* napisać operatora H z naszego równania ewolucji. Ponieważ jednak dysponujemy olbrzymią ilością danych opisujących rzeczywiste zachowanie układu w przeszłości, tzn. konkretnych wartości $\Psi(q, t)$ dla różnych q i t , konstruujemy specjalny algorytm, który dane te przeanalizuje i na ich podstawie zbuduje Hamiltonian. Tyle tylko, że zapisze go w postaci bardzo długiego ciągu zer i jedynek! Trochę przykre, bo chciałoby się spojrzeć na piękną formułę matematyczną, najlepiej prostą i przejrzystą, a zamiast niej dysponuje się czymś, na co nawet patrzeć nie ma sensu, bo jest to dla istoty ludzkiej całkowicie niestrawne. Ale z drugiej strony, jeżeli działa...

Oczywiście, mamy pełną świadomość faktu, iż puryści stwierdzą w tym miejscu, że taki cyfrowy Hamiltonian to w ogóle nie Hamiltonian, że tylko to, co ma postać analityczną, zasługuje na tę szlachetną nazwę, kojarząca się z elegancją, przejrzystością i matematyczną prostotą. Tyle, że kryterium prostoty matematycznej jest w ogóle nieco zwodnicze. Dziecku, które właśnie uczy się w szkole o wielomianach, funkcje trygonometryczne mogą wydać się bardzo skomplikowane, bo niby podnieść do kwadratu łatwo, ale policzyć sinus dowolnego kąta i to bez kalkulatora – już znacznie trudniej. Z kolei ktoś, kto właśnie **przyzwyczał się** (to bardzo ważne słowo!) do trygonometrii, dozna szoku dowiadując się o istnieniu np. konfluentnej funkcji hipergeometrycznej, czy w ogóle funkcji specjalnych. Zdobywanie wiedzy polega jednak między innymi właśnie na przyzwyczajaniu się do pewnych pojęć oraz faktów. Czy z konieczności można będzie przyzwyczać się do cyfrowych Hamiltonianów, istniejących jedynie w pamięci maszyn? Czas pokaże.

W każdym razie tak właśnie należy naszym zdaniem postrzegać **automatyzację prognozowania**. Aby miała ona miejsce, spełnione muszą być następujące warunki:

- (i) układ musi być a priori przewidywalny, tzn. rządzić się jakąś dynamiką hamiltonowską,
- (ii) układ nie może zachowywać się chaotycznie,
- (iii) muszą być dostępne dane $\Psi(q, t)$, opisujące zachowanie układu w przeszłości,
- (iv) musimy dysponować algorytmem ekstrahującym z tych danych Hamiltonian.

Możemy powiedzieć, że nasz aparat prognostyczny „uczy się” więc niejako Hamiltonianu z dostarczonych danych. Określenie to sugeruje oczywiście zastosowanie technik tzw. sztucznej inteligencji, w rodzaju algorytmów genetycznych lub sieci neuronowych. W istocie jesteśmy zdania, że właśnie te ostatnie bardzo dobrze nadają się do tego celu, a Hamiltonian zostaje tam odwzorowany w określonej konfiguracji wag synaptycznych. Ale zgodnie z założeniami przedstawionymi na wstępie, artykuł niniejszy nie ma dotyczyć samych sieci neuronowych – zainteresowanych tematem odsyłamy do obszernej literatury przedmiotu (np. [HKP93]). W dalszej części omówimy natomiast to, co powinno mieć miejsce przed i po użyciu samych sieci, a więc zagadnienia wstępnej obróbki danych i analizy uzyskanych wyników. Nasze rozważania będą miały charakter teoretyczny, jednak w rzeczywistości zostały one potwierdzone w praktyce, dzięki implementacji omawianych metod w konkretnym oprogramowaniu o roboczej nazwie *N-Predictor 2*. Powstało ono w wyniku realizacji przez firmę BMS Creative projektu badawczego **System kognitywny wspomagający tworzenie prognoz w oparciu o technologie sztucznych sieci neuronowych** (WKP-1/1.4.1/1/2006/116/116/671/2007/U), dofinansowanego w ramach Sektorowego Programu Operacyjnego Wzrost konkurencyjności przedsiębiorstw, lata 2004-2006, Priorytet 1 Rozwój przedsiębiorczości i wzrost innowacyjności poprzez wzmocnienie instytucji otoczenia biznesu, Działanie 1.4 Wzmocnienie współpracy między sferą badawczo-rozwojową a gospodarką.

6. Jakich danych użyć do automatycznego prognozowania?

Pozornie odpowiedź na to pytanie wydaje się banalna – danych o zachowaniu układu w przeszłości. Jeśli takimi dysponujemy, nasz motor prognostyczny wyekstrahuje z nich Hamiltonian. Niestety, znowu nie jest to wszystko aż tak proste. Aby wyjaśnić, gdzie pojawia się problem, musimy omówić kwestię tzw. **założeń modelowych**. Chodzi mianowicie o to, że rzeczywistość jest bardzo skomplikowana i nawet jeśli jakaś teoria opisuje ją dokładnie, to rozwiązywanie równań tej teorii z uwzględnieniem wszystkich szczegółowych uwarunkowań może okazać się w praktyce niewykonalne. Dlatego zawsze czynimy pewne uproszczenia i tworzymy modele rzeczywistości, a następnie te właśnie modele rozwiązujemy. Fizyka pełna jest idealizacji takich jak punkt materialny, gaz doskonały, ciecz nielepka, bryła sztywna, czy ciało doskonale czarne. Z jednej strony przybliżają one zachowania pewnych układów, z drugiej strony sprawiają, że odpowiednie równania dają się rozwiązać stosunkowo łatwo. Tzw. rozwiązanie Friedmana, pierwsze, które opisało ewolucję Wszechświata, bazuje na prostym założeniu, że ten ostatni był niemal zawsze i jest obecnie jednorodnie wypełniony pyłem. Kto spojrzy w niebo, widzi że to nieprawda i widział to również Friedman, jednakże zastosowane uproszczenie pozwoliło mu w sposób ścisły rozwiązać skomplikowane skądinąd równania Einsteina. Możemy się zastanawiać, czy ziarna owego pyłu, to gwiazdy, galaktyki, czy raczej gromady galaktyk. Nota bene, pochodzenie wymienionych struktur jest jednym z ważniejszych zagadnień kosmologicznych, tyle że samej nowoczesnej kosmologii pewnie by nie było, gdyby kiedyś nie założono, że struktury te w ogóle nie istnieją.

Upraszczone założenia modelowe pozwalają zatem rozwiązywać równania, a więc i prognozować rzeczywistość. Czy mają również zastosowanie w prognozowaniu automatycznym? Bez wątplenia tak. Nasze algorytmy służące do konstrukcji Hamiltonianu nie są idealne – tak naprawdę działają tym lepiej, im bardziej oczywiste są prawidłowości zawarte w danych użytych do ich konstruowania. Musimy im więc niejako pomagać, eliminując z danych te przypadki, które w jakimś sensie są bardzo nietypowe i tym samym mylące. Przykładowo, jeśli chcemy aby nasz system nauczył się prognozować zużycie gazu w gospodarstwach domowych, należy w ostrożny sposób podejść do danych z tego dnia, w którym nastąpiła awaria rurociągu. Ktoś mógłby argumentować, że i ją dałoby się przewidzieć, gdyby odpowiednio rozszerzyć przestrzeń konfiguracyjną – tak aby zawierała informacje o remontach ulic i pracy koparek. To prawda, jednak model mógłby stać się do tego stopnia skomplikowany, że jego realna rozwiązywalność stałaby pod znakiem zapytania. Co więc należałoby zrobić? Raczej przyjąć pewne uproszczenia i zrezygnować z przewidywania awarii, a co za tym idzie, usunąć prawdziwe, choć nietypowe dane i zastąpić je np. uśrednionymi wartościami z sąsiednich dni bezusterkowej pracy rurociągu. Procedura ta poprawia, idealizuje i tym samym upraszcza rzeczywistość. Jeżeli nasze algorytmy są tzw. algorytmami sztucznej inteligencji i szukamy pewnych odniesień do inteligencji naturalnej, to wpsomniane uproszczenie moglibyśmy porównać z wprowadzeniem erraty do zawierającego błędy podręcznika matematyki. Oczywiście, zdolny student sam wychwyci i poprawi oczywiste błędy drukarskie, podobnie jak i sztuczna sieć neuronowa ma szanse sama skorygować pewne nieprawidłowości w danych używanych do uczenia. Ale z drugiej strony, po co student, czy sieć ma tracić czas? Jeśli już mamy świadomość istnienia błędów, lepiej je po prostu poprawić.

7. Redukcja wymiarów

Wyobraźmy sobie, że nasza przestrzeń konfiguracyjna jest N -wymiarowa. W przywołanym już prognozowaniu zużycia gazu (funkcja Ψ) takimi wymiarami mogłyby być np. temperatura powietrza, ciśnienie, nasłonecznienie i wilgotność, a więc dane typowo meteorologiczne. Załóżmy, że to wystarczy. Mamy więc cztery wymiary. To niedużo, ale warto sobie uzmysłowić, że niekiedy może być ich i czterdzieści. A każdy wymiar kosztuje – czas potrzebny do automatycznej ekstrakcji Hamiltonianu i niezbędną moc obliczeniową. Przeczujemy, że najważniejsza będzie tu tempera-

tura, ale pozostałe parametry też mają jakiś wpływ. Czy można więc któryś z nich odrzucić? Ale który, jeśli ten wpływ jest podobny? Poza tym, nie ulega najmniejszej wątpliwości, że wymienione parametry są ze sobą w pewien sposób skorelowane. Wysoka temperatura i także ciśnienie na ogół wiążą się z małą wilgotnością powietrza i dużym nasłonecznieniem. Nie jest jednak tak, że mając temperaturę, nasłonecznienie i ciśnienie, da się jednoznacznie określić wilgotność. Matematyk powie, że wektory opisujące poszczególne wielkości są liniowo niezależne, a więc w istocie generują czterowymiarową przestrzeń wektorową. Iloczyn skalarny, który pozwala mierzyć kąty w takiej przestrzeni, określony jest poprzez tzw. macierz kowariancji (np. [Bran76]).

Gdyby nasze cztery parametry były nieskorelowane, odpowiadające im wektory pozostawałyby ortogonalne, czyli prostopadłe względem siebie. Powstaje więc naturalne pytanie, czy można znaleźć inne cztery prostopadłe wektory, powstałe przez linowe transformacje wyjściowych: temperatury, ciśnienia, wilgotności i nasłonecznienia? Każdy, kto uczył się algebry, wie, że odpowiedź jest twierdząca (np. [Gelf77]). Wie też, że takie ortogonalne zestawy wektorów (bazy) są bardzo przyjemne, jeśli ma się prowadzić jakieś rachunki. Możemy zatem stworzyć cztery nowe ortogonalne wektory

$$v_k = \alpha_k \cdot \text{temperatura} + \beta_k \cdot \text{ciśnienie} + \gamma_k \cdot \text{wilgotność} + \delta_k \cdot \text{nasłonecznienie},$$

gdzie indeks k przebiega od 1 do 4, zaś współczynniki mają tak dobrany wymiar, aby v było liczbą niemianowaną. Nowe wektory, tworzące tzw. bazę ortogonalną, tzn.

$$\langle v_i, v_j \rangle = 0 \quad \text{gdy } i \neq j,$$

nie mają bezpośredniego sensu fizycznego i tym samym trudno zrozumieć, co znaczą. Nie są one też określone jednoznacznie, bowiem wystarczy obrócić całą bazę ortogonalną i uzyska się nową, która również będzie ortogonalna. Możemy jednak narzucić dodatkowe warunki. Chcielibyśmy mianowicie, aby kierunek pierwszego z wektorów bazowych miał dominujący wpływ na zużycie gazu (innymi słowy, aby wariancja rzutu Ψ na ten kierunek była maksymalna). Jeżeli taki kierunek ustalimy, podobnie czynimy z kolejnym wektorem bazowym itd., aż nie pozostanie już żadna swoboda manewru. W efekcie uzyskujemy zbiór nowych, nieskorelowanych zmiennych, uporządkowanych od tej która najbardziej wpływa na stan układu, do tej, która ma znaczenie najmniejsze. Możemy teraz odrzucić te kierunki, których rola jest wyraźnie słabsza od pozostałych, redukując w ten sposób wymiar przestrzeni wektorowej do podprzestrzeni generowanej przez wektory (kierunki) dominujące.

Statystycy nazywają to **analizą składowych głównych** (*PCA – Principal Component Analysis*, por. [KoĆw05]). Technicznie przeprowadza się ją poprzez diagonalizację odpowiedniej macierzy kowariancji, zaś w rzeczywistości stanowi ona dla prognozowania automatycznego typowe uproszczenie modelowe, takie, o jakich była już mowa poprzednio. Różnica polega może tylko na tym, że uproszczenie to nie posiada prostej interpretacji fizycznej, a raczej głęboki sens geometryczny. Jeśli uznać, że zbędne wymiary nie wnoszą żadnej istotnej informacji, to zastosowaną operację można też porównać do **filtracji** dyskryminującej szum.

W praktyce analiza składowych głównych jest bardzo przydatnym narzędziem wstępnej obróbki danych. Zawsze warto sprawdzić, ile istotnych wymiarów ma przestrzeń konfiguracyjna, a nierzadko okaże się, że cała dynamika zagadnienia prawie nie wykracza poza pewną podprzestrzeń, czyli że stopni swobody jest znacznie mniej niż można było przypuszczać. To trochę tak, jakby dostrzec, że na pozór niezwykle złożony, przestrzenny ruch, naprawdę odbywa się w jednej płaszczyźnie. Redukcja wymiarów oraz przejście do odpowiedniej podprzestrzeni nie pozbawi nas wtedy żadnej istotnej wiedzy o układzie, a przyczyni się do znacznego przyspieszenia działania algorytmów ekstrahujących Hamiltonian i – na ogół – poprawy jakości ich działania, bo mało istotne informacje, zakłócające tylko to, co najważniejsze, zostaną wyeliminowane.

8. Prognozowanie adiabacyjne

Rozważmy czasową zależność funkcji opisującej stan naszego układu $\Psi(t)$. Niekiedy zdarza się, że wykazuje ona pewne cechy periodyczności z dobrze znanym okresem T , choć na taką szybką zmienność nakłada się druga, znacznie wolniejsza. Przykładem mogłaby być temperatura powietrza, która wykazuje cykliczność dobową, ale z drugiej strony zmienia się również w wolniejszym cyklu rocznym. Dysponując wiedzą o takiej periodyczności, trudno byłoby jej nie wykorzystywać do prognozowania zależności funkcyjnej. Dlatego, jeśli interesuje nas ilościowe przewidywanie owej szybkiej zmienności czasowej dla pewnego okresu w przyszłości, możemy posłużyć się techniką, którą poprzez analogię do metody znanej z mechaniki kwantowej (zob. np. [Schi77]), nazwaliśmy prognozowaniem adiabacyjnym.

Jak wiadomo, funkcje periodyczne dość skutecznie rozwija się w **szereg Fouriera** [Leja76], skutecznie w tym sensie, że szereg taki jest stosunkowo szybko zbieżny. Możemy więc napisać:

$$\Psi(t) = \sum_{k=0}^{\infty} [a_k \sin \omega_k t + b_k \cos \omega_k t],$$

gdzie oczywiście

$$\omega_k = \frac{2k\pi}{T},$$

zaś współczynniki określone są poprzez odpowiednie transformaty odwrotne, tzn.

$$a_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \Psi(t) \sin \omega_k t dt, \quad b_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \Psi(t) \cos \omega_k t dt.$$

Cała zależność czasowa zawiera się, jak widać, w funkcjach trygonometrycznych, podczas gdy współczynniki rozkładu widmowego a_k i b_k zostały od niej uwolnione. Wyobraźmy sobie teraz niezbyt może poprawną matematycznie operację, polegającą na uzmiennieniu tych współczynników. Mielibyśmy w takiej sytuacji

$$\Psi(t) = \sum_{k=0}^{\infty} [a_k(t) \sin \omega_k t + b_k(t) \cos \omega_k t],$$

przy czym ta druga zmienność byłaby znacznie wolniejsza. Pomysł polega oczywiście na tym, by prognozować nie bezpośrednio funkcję $\Psi(t)$, ale jej wolnozmienny rozkład widmowy $a_k(t)$ i $b_k(t)$. Jest to generalnie prostsze, gdyż zmniejszeniu ulega ilość kanałów informacyjnych, którymi doprowadzamy dane niezbędne do ekstrakcji Hamiltonianu. Przykładowo, gdyby szybkozmienna zależność miała charakter dokładnie sinusoidalny, prognozowalibyśmy tylko jeden współczynnik rozkładu, a_1 , czyli inaczej mówiąc, amplitudę sinusoidy. Alternatywnie, nie korzystając z metody adiabacyjnej, należałoby stabelizować funkcję i prognozować cały ciąg wartości dla pełnego okresu jej szybkiej zmienności.

Dodajmy jeszcze, że z matematycznego punktu widzenia, rozkład funkcji na komponenty fourierowskie jest jedynie szczególnym przypadkiem wyboru **bazy funkcyjnej** w odpowiedniej przestrzeni Hilberta (por. [ByFu75]). Nie tylko funkcje trygonometryczne mogą jednak stanowić taką alternatywną bazę. W rzeczywistości chodzi o to, by dobrać tego rodzaju zbiór funkcji, który najlepiej pasuje do zagadnienia, tzn. odpowiedni szereg charakteryzuje się najszybszą zbieżnością. Im mniej istotnych wyrazów, tym mniej współczynników do prognozowania i tym łatwiej wyekstrahować Hamiltonian. W szczególności, bardzo interesujące wydają się bazy złożone z tzw. **falek** (np. [Biał04]), które zrobiły sporą karierę w zagadnieniach kompresji stratnej.

9. Błędy i ryzyko prognoz

Naukowe wypowiedzi na temat materialnej rzeczywistości, jeśli tylko mają charakter ilościowy, są dokładne co najwyżej w takim stopniu, na jaki pozwala dokładność przyrządów pomiarowych. Tych zaś, jak wiadomo, w nieskończoność ulepszać się nie da, bo w końcu na drodze do pełni szczęścia stanie nam jedno z najważniejszych praw przyrody, tzn. zasada nieoznaczoności Heisenberga. Mówiąc krótko, jesteśmy skazani na niedokładność. Mierzmy z błędami, a następnie nasza teoria (np. równanie ewolucji) błędy te propaguje dalej i w efekcie wyniki rachunków również obarczone są błędami. Fizycy przyzwyczaili się jednak do tego i – zmierzwszy temperaturę herbaty w szklance – powiedzą nie „85 °C”, lecz np. „85 ± 0,1 °C”. Jeżeli tylko pomiar został przeprowadzony prawidłowo, rzeczywista temperatura zawiera się pomiędzy 84,9 a 85,1 °C, przy czym im bliżej środka przedziału, tym większe prawdopodobieństwo, że tyle właśnie wynosi. Studentów od pierwszego roku uczy się, że wynik pomiaru jest całkowicie bezwartościowy, jeśli nie towarzyszy mu **oszacowanie dokładności**, zaś tzw. rachunek błędów stanowi jedno z podstawowych narzędzi pracy przyrodnika. Warto zauważyć, że jeśli rzeczywista temperatura wspomnianej herbaty miała mieć wartość 84,8 °C, to przywołany powyżej wynik pomiaru byłby błędny, prawidłowe zaś byłoby stwierdzenie „80 ± 5 °C” lub nawet „40 ± 50 °C”, choć oczywiście odrębną kwestię mogłaby stanowić praktyczna użyteczność tego ostatniego.

Ogólnie rzecz biorąc, jeżeli parametry q_i układu podlegającego prognozowaniu, zmierzone w chwili początkowej t_0 obarczone są błędami pomiarowymi Δq_i , to błąd prognozy wyniesie (zob. np. [Szyd75])

$$\Delta\Psi = \sum_i \frac{\partial\Psi}{\partial q_i} \Delta q_i ,$$

gdzie sumowanie przebiega po wszystkich zmiennych z przestrzeni konfiguracyjnej, zaś Ψ stanowi konkretne rozwiązanie naszego równania ewolucji. Oczywiście praktyczne wykorzystanie powyższej, prostej formuły wymaga znajomości analitycznej postaci rozwiązania Ψ , co na ogół nie ma miejsca. Jeśli równanie ewolucji rozwiązujemy numerycznie, będziemy musieli użyć pewnych sztuczek, a także uwzględnić błędy generowane przez same procedury numeryczne, które z oczywistych powodów nie są dokładne (a mogą nawet nie być stabilne!).

Co jednak zrobić, jeśli w ogóle nie znamy analitycznej postaci Hamiltonianu? Jakby nie było, ten przypadek wydaje się poniekąd najciekawszy i właśnie jemu poświęcamy najwięcej uwagi, mówiąc przy tym o „prognozowaniu automatycznym”. Odpowiedź będzie zależała od zastosowanej metody prognostycznej, czyli algorytmu służącego do ekstrakcji Hamiltonianu z danych pomiarowych w przeszłości. Jeśli przykładowo użyjemy sieci neuronowych, metoda postępowania będzie dość prosta. Jak wiadomo, sieci charakteryzują się pewnym indeterminizmem, wynikającym z faktu, iż początkowe wagi synaptyczne, które później dostrajane są w procesie treningu, znajduje się poprzez losowanie. Oznacza to mniej więcej tyle, że dwie topologicznie identyczne sieci, uczone na tych samych danych, tę samą ilość cykli, wyprodukują dwie różniące się od siebie prognozy, podobnie zresztą, jak na ogół uczynią to dwie osoby, eksperci zapytani o ilościowe przewidywania odnośnie przyszłości.

Automatyczne prognozy sieci można traktować jak pomiary niezależne, których rozkład powinien mieć charakter dobrze znanej krzywej Gaussa. Jeśli tak, (a trzeba by to jednak sprawdzić), to należałoby po prostu obliczyć średnią arytmetyczną $\langle\Psi\rangle$ dla N prognoz, a do oszacowania błędu posłużyć się wariancją rozkładu. Ścisłej, błąd byłby określony wyrażeniem ([Szyd75])

$$\Delta\Psi = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_i^N (\langle\Psi\rangle - \Psi_i)^2} .$$

Oczywiście, będzie trzeba odrzucić te prognozy, które znajdą się pod założonym progiem ufności, czyli, jak się to przyjęło czynić w naukach przyrodniczych, te, które od średniej różnią się o więcej niż trzykrotność $\Delta\Psi$.

Jak widać więc, metoda oszacowania błędu w przypadku użycia sieci neuronowych jest bardzo prosta i opiera się na elementarnej statystyce matematycznej, zupełnie omijając elegancką, acz niepraktyczną formułę różniczkową, przedstawioną na początku niniejszego paragrafu. Z drugiej strony wymaga ona przeprowadzenia nie jednego, lecz całej serii treningów sieci, co oczywiście może być czasochłonne i wymagać zaangażowania całkiem sporej mocy obliczeniowej.

Jak przedstawia się praktyczna użyteczność uzyskanych prognoz? Oczywiście zależy od ich jakości. Jednak warto zwrócić uwagę na jeszcze jeden aspekt, a mianowicie kwestię tzw. **zarządzania ryzykiem**. Otóż w praktyce bardzo często jesteśmy zmuszani do podania wyniku ścisłego, nieobarczonego błędem. Niekiedy wynika to ze zwykłego nieuctwa odbiorców prognoz, dla których pojęcie błędu pomiarowego jest abstrakcją, niekiedy (choć znacznie rzadziej) z uwarunkowań obiektywnych. Jakby nie było, za popełnienie błędu jesteśmy w pewien sposób karani, np. finansowo. Jeżeli przykładowo przewidujemy zapotrzebowanie na energię elektryczną, to wynikiem działania automatu prognozującego zawsze będzie pewna ilość megawatogodzin, oznaczymy ją przez Ψ_0 oraz błąd prognozy $\Delta\Psi_0$ (np. 300 ± 10 MWh). Z drugiej strony, dostawca zażąda od nas podania konkretnej wartości i każe zapłacić więcej zarówno za niedoszacowanie, jak i przeszacowanie. Nasz wynik będzie obiektywnie poprawny jeśli zmieścimy się w przedziale od 290 do 310 MWh. Jaką więc wartość podać? Największe prawdopodobieństwo trafności, to oczywiście środek przedziału, czyli 300 MWh, jednakże nie należy się tym bezkrytycznie sugerować. Przeciwnie, trzeba raczej pomyśleć o konsekwencjach pomyłki w jedną lub w drugą stronę. Czy tyle samo zapłacimy za przeszacowanie, co za niedoszacowanie? Jeśli tak, nie ma problemu, jeśli nie – możemy mówić o tzw. **niesymetrycznej funkcji kary** – warto wtedy nie tyle zminimalizować ryzyko pomyłki, co raczej wysokość opłaty i skorygować naszą oryginalną prognozę do pewnej wartości Ψ_1 . Jeśli funkcję kary oznaczyć przez K , to owa poprawiona prognoza powinna spełniać warunek

$$\int_{\Psi_0 - \Delta\Psi_0}^{\Psi_1} K(\Psi) d\Psi = \int_{\Psi_1}^{\Psi_0 + \Delta\Psi_0} K(\Psi) d\Psi.$$

Jak widać, gdy K jest funkcją symetryczną, to $\Psi_0 = \Psi_1$ i prognozy poprawiać nie trzeba. W innych sytuacjach prognoza poprawiona przesunie się w prawo lub w lewo, w zależności od charakteru K . Dodajmy jeszcze, że funkcja kary nie musi mieć wymiaru finansowego. Przykładowo, jeżeli prognozować będziemy prawdopodobieństwo rozwoju nowotworu i od wyniku prognozy zależniać charakter terapii, funkcja kary będzie czymś zupełnie innym, a jej asymetria nie wymaga chyba komentarza.

10. Po co to wszystko?

No właśnie, po co? Po co, jeśli można po prostu wziąć dane z przeszłości, wpasować w nie jakąś funkcję, może liniową, a może wielomian piątego stopnia i sprawa załatwiona. Prosta ekstrapolacja powie nam, jak zachowa się nasz układ w przyszłości. Zresztą, im wyższy stopień wielomianu, tym lepiej się go dopasuje – to akurat wynika z elementarnej matematyki.

Regresja, w szczególności regresja wielokrotna, jest tak na prawdę jakąś metodą automatycznego konstruowania Hamiltonianu, choć w naszym odczuciu – metodą ogólnie niezbyt dobrą. Jej wadą jest aprioryczne zakładanie pewnej postaci funkcyjnej prognozowanej zależności i – co za tym idzie – ograniczenie swobody wspomnianego konstruowania. Zaletą jest z kolei szybkość działania, która w pewnych sytuacjach może z nawiązką rekompensować owe ograniczenie.

Tzw. średnie ruchome, metody ARMA, ARIMA itp., mają z kolei w ogóle niewiele wspólnego z prognozowaniem w poprawnym rozumieniu tego słowa. W istocie bliżej im do wróżb lub bardzo płytko pojmowanej fenomenologii.

Metody neuronowe wydają się lepsze od regresji z dwóch powodów: po pierwsze sieci cechują się na ogół znacznie większą ilością stopni swobody i tym samym możliwościami adaptacyjnymi, po drugie – choć brzmi to tajemniczo – w jakimś sensie imitują one najdoskonalszy twór zdolny do prognozowania, czyli ludzki mózg.

Niezależnie jednak od tego, jaką metodę wybierzemy, powinniśmy dokładnie zdawać sobie sprawę z tego, co robimy i robić to „z głową”. Niniejsze rozważania miały właśnie pomóc czytelnikowi w uporządkowaniu pewnych podstawowych faktów w zakresie prognozowania, nawet jeśli wydaje się, że ich bezpośrednia użytkowa wartość nie jest wielka. Autor miał okazję wysłuchać kiedyś kilku wykładów prof. Jerry'ego Kazdana. Były one poświęcone zastosowaniu zaawansowanych metod analizy matematycznej do badania zagadnień fizycznych, a chodziło konkretnie o dowodzenie istnienia rozwiązań pewnej klasy równań różniczkowych. Prof. Kazdan zadał wówczas fundamentalne pytanie: „Po co to fizykom? Matematycy dowodzą istnienia bądź nieistnienia, ale fizycy muszą po prostu rozwiązywać równania. Nie dowody są im potrzebne, ale metody rachunkowe.” Odpowiedź brzmiała: „Tak, ale czasami, gdy idzie się nad staw łowić ryby, dobrze wiedzieć, że one tam w ogóle są.” Podobnie ma się rzecz z prognozowaniem – zanim usiądzie się do komputera, warto wiedzieć, czy i jaki sens ma to, co zamierza się zrobić.

Bibliografia

- [Biał04] Białasiewicz, J.T.: Falki i aproksymacje, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne 2004, ISBN 83-204-2971-4.
- [Bran76] Brandt, S.: Metody Statystyczne i obliczeniowe analizy danych, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1976.
- [ByFu75] Byron, F.W., Fuller, R.W.: Matematyka w fizyce klasycznej i kwantowej, t.1, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1975.
- [Gelf77] Gelfand, I.M.: Wykłady z algebry liniowej, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1977.
- [HKP93] Hertz, J., Krogh, A., Palmer, R.G.: Wstęp do teorii obliczeń neuronowych, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne 1993, ISBN 83-204-1680-9.
- [KoĆw05] Koronacki, J., Ćwik, J.: Statystyczne systemy uczące się, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne 2005, ISBN 83-204-3157-3.
- [LaLi79] Landau, L.D., Lipszyc, E.M.: Mechanika kwantowa, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1979, ISBN 83-01-00501-7.
- [Leja76] Leja, F.: Rachunek różniczkowy i całkowy, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1976.
- [Olch78] Olchowski, I.I.: Mechanika teoretyczna, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1978.
- [Pope35] Popper, K.R.: Logik der Forschung, Julius Springer, Wien 1935.
- [Schi77] Schiff, L.I.: Mechanika kwantowa, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1977.
- [Szyd75] Szydłowski, H.: Pracownia Fizyczna, Państwowe Wydawnictwo Naukowe 1975.
- [Wyro00] Wyrozumski, T.: Prognozowanie neuronowe w oparciu o dane ekonomiczne z baz Oracle, VI Konferencja PLOUG, Zakopane 2000, ss. 297-304.
- [Wyro04] Wyrozumski, T.: Sieci neuronowe a energetyka – prawdy i mity o prognozowaniu, X Konferencja PLOUG, Zakopane 2004, ss. 179-190.

