# Занятие 2
# Линейные методы регрессии. Часть 1.

Елена Кантонистова

elena.kantonistova@yandex.ru

ВШЭ, 2022

# ПЛАН ЛЕКЦИИ

- Отложенная выборка и переобучение
- Линейная регрессия
- Почему MSE? Вероятностное объяснение
- Особенности применения линейной регрессии
- Градиентный спуск
- Модификации градиентного спуска (если успеем)

# ОТЛОЖЕННАЯ ВЫБОРКА И ПЕРЕОБУЧЕНИЕ

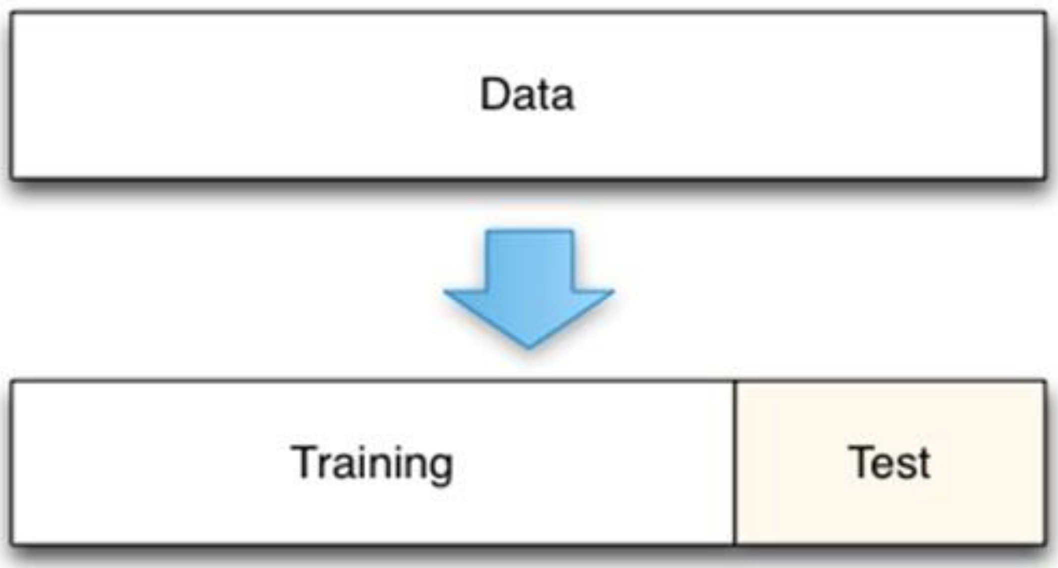
# ОЦЕНКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ АЛГОРИТМА

- Пусть мы решаем задачу *предсказания стоимости дома* по его признакам.

- В обучающей выборке 1000 домов.
- Мы обучаем алгоритм по имеющимся 1000 домам. *На каких объектах будем проверять качество алгоритма?*

# ОЦЕНКА ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ АЛГОРИТМА

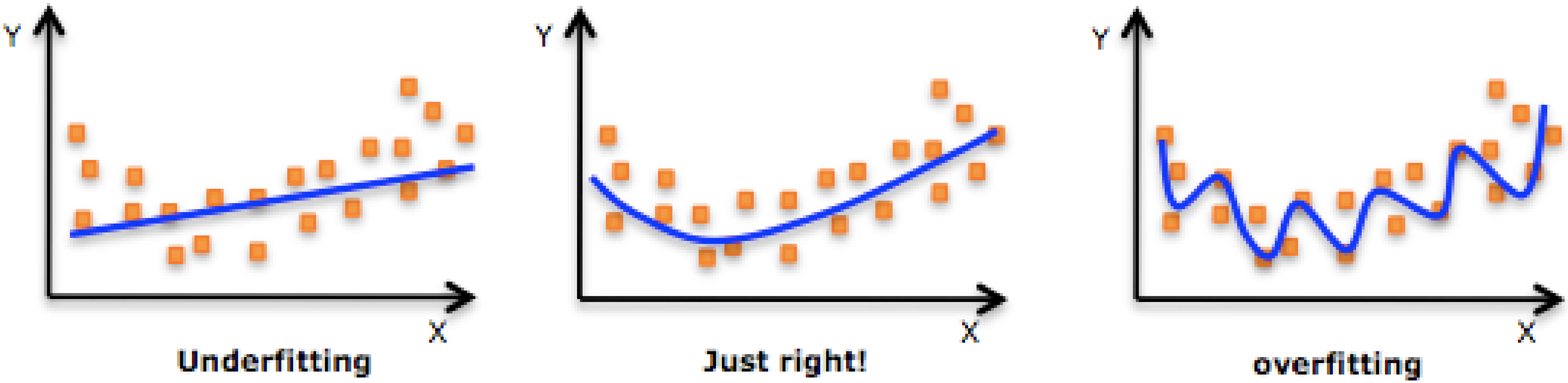
- Перед началом обучения отложим часть обучающих объектов и не будем использовать их для построения модели (отложенная выборка).



# ОТЛОЖЕННАЯ ВЫБОРКА

- Перед началом обучения отложим часть обучающих объектов и не будем использовать их для построения модели (отложенная выборка).
- Тогда можно измерить качество построенной модели на отложенной выборке и оценить ее предсказательную силу.

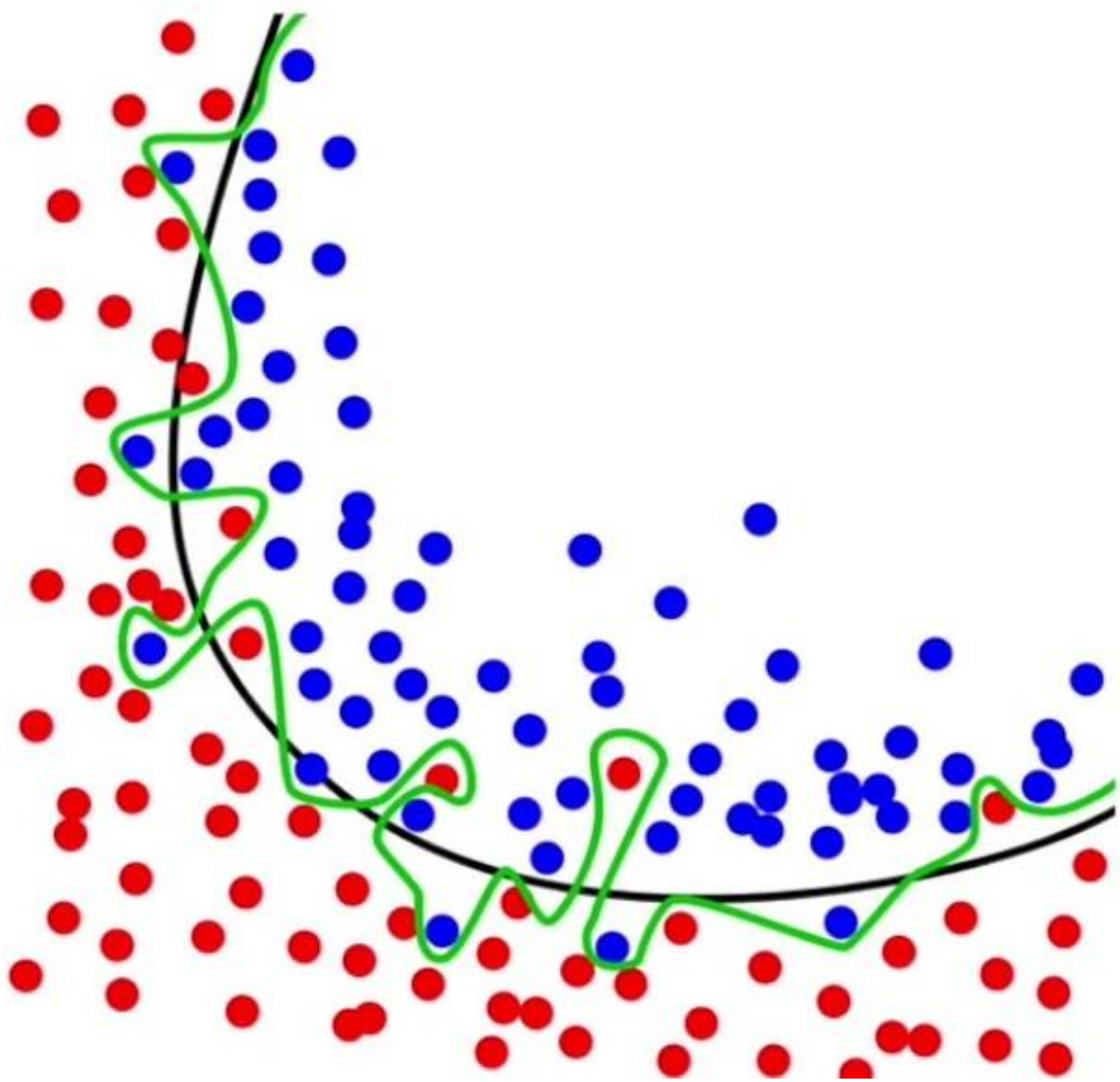
# ПЕРЕОБУЧЕНИЕ И НЕДООБУЧЕНИЕ



# ИЗ-ЗА ЧЕГО ВОЗНИКАЕТ ПЕРЕОБУЧЕНИЕ

- Избыточная сложность модели (большое количество весов). В этом случае лишние степени свободы в модели “тратятся” на чрезмерно точную подгонку под обучающую выборку.
- Переобучение есть всегда, когда есть оптимизация параметров по конечной (заведомо неполной) выборке.

# ПРИМЕР ПЕРЕОБУЧЕНИЯ В ЗАДАЧЕ КЛАССИФИКАЦИИ



# ПРИЗНАК ПЕРЕОБУЧЕНИЯ

- *Если качество на отложенной выборке сильно ниже качества на обучающих данных, то происходит переобучение*

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Пример (напоминание):

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* $y$ по его *площади* $(x_1)$ и *количеству комнат* $(x_2)$.

Линейная модель для предсказания стоимости:

$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w_0} + \boldsymbol{w_1}\boldsymbol{x_1} + \boldsymbol{w_2}\boldsymbol{x_2},$$

где $w_0, w_1, w_2$ -

параметры модели (*веса*).

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Пример (напоминание):

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* $y$

по его *площади* ($x_1$) и *количеству комнат* ($x_2$).

Линейная модель для предсказания стоимости:

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2},$$

где $w_0, w_1, w_2$ -

параметры модели (*веса*).

Общий вид (линейная регрессия):

$$\boxed{\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n},}$$

где $x_1, \ldots, x_n$ - признаки объекта $x$.

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$\boxed{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n}$$

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$\boxed{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n}$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

- запись через скалярное произведение (с добавлением признака $x_0 = 1$):

$$a(x) = w_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = \sum_{j=0}^{n} w_j x_j = (w, x)$$

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$\boxed{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n}$$

- сокращенная запись:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j$$

- запись через скалярное произведение (с добавлением признака $x_0 = 1$):

$$a(x) = w_0 \cdot 1 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_J = \sum_{j=0}^{n} w_j x_j = (w, x) \leftrightarrow \boxed{a(x) = (w, x)}$$

# ЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ

Линейная регрессия:

$$a(x) = w_0 + \sum_{j=1}^{n} w_j x_j = (w, x)$$

**Обучение линейной регрессии - минимизация среднеквадратичной ошибки:**

$$\mathrm{Q}(a, X) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} (a(x_i) - y_i)^2 = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^{l} ((w, x_i) - y_i)^2 \to \min_{w}$$

(здесь $l$ – количество объектов)

# ПОЧЕМУ MSE?

# ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА

- Даже если целевая переменная линейно зависит от признаков, то идеальной модели (с вероятностью 1) не существует, то есть реальные ответы будут (несильно) отличаться от предсказаний, поэтому мы пишем

$$y \approx (w, x)$$

- Второй подход заключается в том, что мы объясняем неидеальность прогнозом неполнотой данных, или же шумами в данных. Тогда формула переписывается со знаком “=”:

$$y = (w, x) + \varepsilon,$$

где ε – шум в данных.

# ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА

$$y = (w, x) + \varepsilon$$

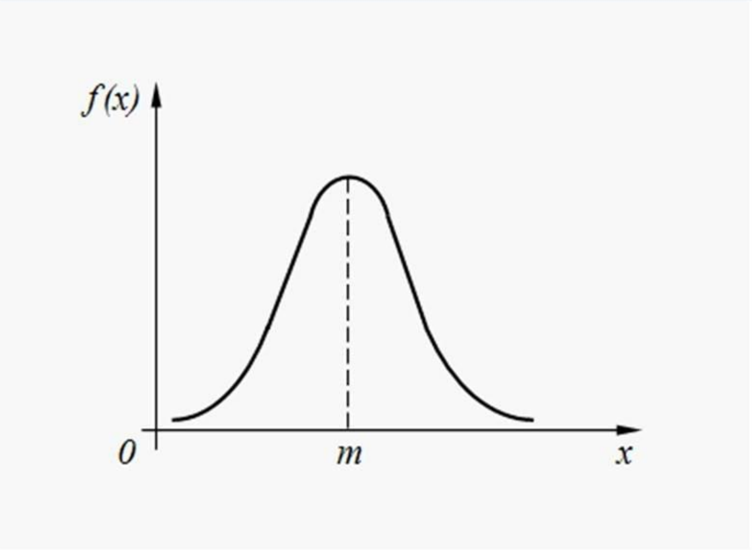
- Шум в данных обычно имеет некоторое распределение. В большинстве реальных задач считается, что

$$\varepsilon \sim N(0, \sigma^2).$$

- Отсюда получаем, что

$$y \sim N\big((w, x), \sigma^2\big).$$

График плотности нормального распределения



# ВЕРОЯТНОСТНАЯ ПОСТАНОВКА

$$y \sim N\big((w,x),\sigma^2\big)$$

Это означает, что вероятность наблюдать $y$ при данных значениях $x$ равна

$$p(y|x,w) \sim N((w,x),\sigma^2)$$

**Мы хотим подобрать оптимальные веса. Что это такое?**

Мы хотим подобрать такой вектор $w$, что вероятность наблюдать некоторое значение $y$ при наблюдаемых $x$ максимальна.

# МЕТОД МАКСИМУМА ПРАВДОПОДОБИЯ

**Мы хотим подобрать оптимальные веса. Что это такое?**

Мы хотим подобрать такой вектор $w$, что вероятность наблюдать некоторое значение $y$ при наблюдаемых $x$ максимальна.

Запишем это желание сразу для всех объектов выборки (в предположении, что объекты независимы):

$$p(\boldsymbol{y}|X, w) = p(y_1|x_1, w) \cdot p(y_2|x_2, w) \cdot \ldots \cdot p(y_i|x_i, w) \cdot \ldots \to \max_w$$

Величина $p(y|X, w)$ называется ***функцией правдоподобия (или правдоподобием) выборки***.

# ММП ДЛЯ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ

Модель данных с некоррелированным гауссовским шумом:

$$y_i = (w, x_i) + \varepsilon_i,\ \ \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), i = 1, \ldots, l$$

# ММП ДЛЯ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ

Модель данных с некоррелированным гауссовским шумом:

$$y_i = (w, x_i) + \varepsilon_i,\ \ \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), i = 1, \dots, l$$

Тогда $y_i \sim N((w, x_i), \sigma^2), i = 1, \dots, l$

# ММП ДЛЯ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ

Модель данных с некоррелированным гауссовским шумом:

$$y_i = (w, x_i) + \varepsilon_i, \;\; \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), i = 1, \dots, l$$

Тогда $y_i \sim N((w, x_i), \sigma^2), i = 1, \dots, l$

Метод максимума правдоподобия (ММП):

$$L(y_1, \dots, y_l | w) = \prod_{i=1}^{l} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\big(y_i - (w, x_i)\big)^2\right) \to \max_w$$

# ММП ДЛЯ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ

Модель данных с некоррелированным гауссовским шумом:

$$y_i = (w, x_i) + \varepsilon_i, \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), i = 1, \dots, l$$

Тогда $y_i \sim N((w, x_i), \sigma^2), i = 1, \dots, l$

Метод максимума правдоподобия (ММП):

$$L(y_1, \dots, y_l | w) = \prod_{i=1}^{l} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\big(y_i - (w, x_i)\big)^2\right) \to \max_w$$

$$-ln\, L(y_1, \dots, y_l | w) = const + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{l} \big(y_i - (w, x_i)\big)^2 \to \min_w$$

В данном случае ММП совпадает с МНК.

# ОСОБЕННОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ РЕГРЕССИИ

# О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* $y$ по его *площади* ($x_1$) и *количеству комнат* ($x_2$), *району* ($x_3$) *и удаленности от МКАД* ($x_4$).

$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + w_4 x_4}$.

# О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* $y$ по его *площади* ($x_1$) и *количеству комнат* ($x_2$), *району* ($x_3$) *и удаленности от МКАД* ($x_4$).

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + w_4 x_4}.$$

Проблема №1: район ($x_3$) – это не число, а название района. Например, Мамыри, Дудкино, Барвиха… Что с этим делать?

# О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* $y$ по его *площади* ($x_1$) и *количеству комнат* ($x_2$), *району* ($x_3$) *и удаленности от МКАД* ($x_4$).

$$\boldsymbol{a(x) = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + w_3 x_3 + w_4 x_4}.$$

Проблема №1: район ($x_3$) – это не число, а название района. Например, Мамыри, Дудкино, Барвиха… Что с этим делать?

Решение – one-hot encoding (OHE): создаем новые числовые столбцы, каждый из которых является индикатором района.

# ONE-HOT ENCODING

| Район |
| --- |
| Дудкино |
| Барвиха |
| Мамыри |
| … |
| Барвиха |

| Мамыри | Дудкино | Барвиха |
| --- | --- | --- |
| 0 | 1 | 0 |
| 0 | 0 | 1 |
| 1 | 0 | 0 |
| … | … | … |
| 0 | 0 | 1 |

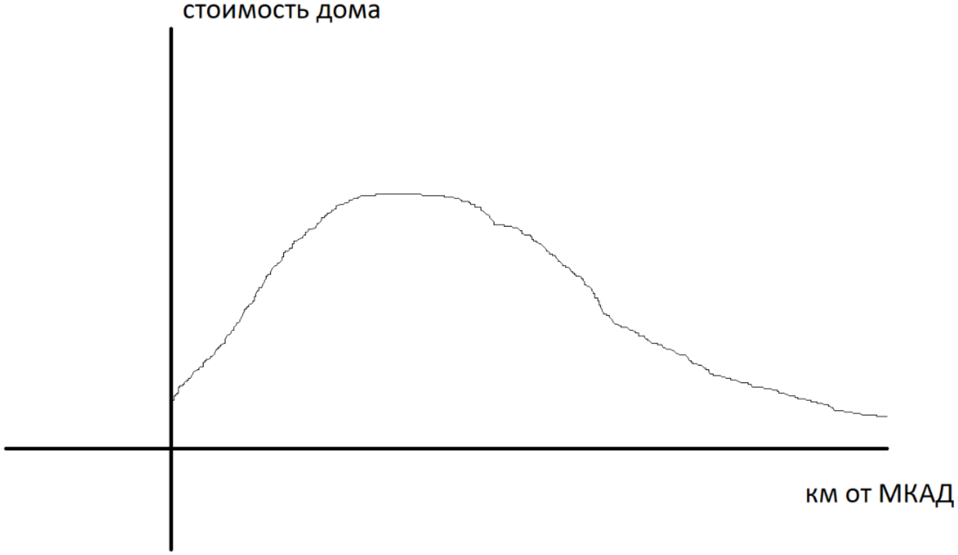
$$\boldsymbol{a(x)} =$$
$$= \boldsymbol{w_0} + \boldsymbol{w_1 x_1} + \boldsymbol{w_2 x_2} + \boldsymbol{w_{31} x}_{\text{Мамыри}} + \boldsymbol{w_{32} x}_{\text{Дудкино}} + \boldsymbol{w_{33} x}_{\text{Барвиха}} + \boldsymbol{w_4\, x_4}.$$

# О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Пример:

Предположим, что мы хотим предсказать *стоимость дома* $y$ по его *площади* ($x_1$) и *количеству комнат* ($x_2$), *району* ($x_3$) *и удаленности от МКАД* ($x_4$).

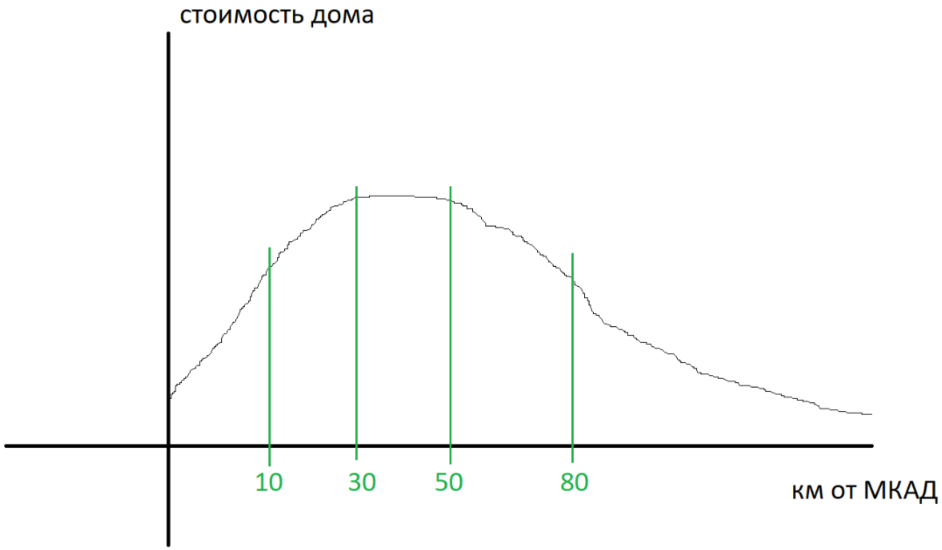
Проблема №2: удаленность от МКАД ($\mathrm{x}_4$) не монотонно влияет на стоимость дома.



# О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Проблема №2: удаленность от МКАД ($x_4$) не монотонно влияет на стоимость дома.

Решение – бинаризация (разбиение на бины).




Новые признаки:

- $x_{[0;10)}$ - равен 1, если дом находится в пределах 10 км от МКАД, и 0 иначе
- $x_{[10;30)}$ - равен 1, если дом находится в пределах от 10 км до 30 км МКАД, и 0 иначе. И т.д.

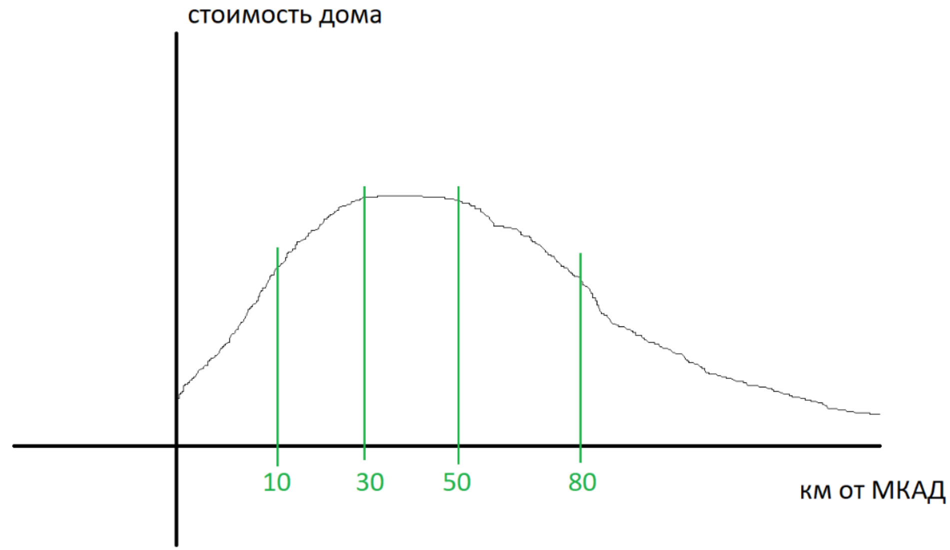
# О ПРИМЕНИМОСТИ ЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ

Проблема №2: удаленность от МКАД ($x_4$) не монотонно влияет на стоимость дома.

Решение – бинаризация (разбиение на бины).

Новые признаки:

- $x_{[0;10)}$ - равен 1, если дом находится в пределах 10 км от МКАД, и 0 иначе
- $x_{[10;30)}$ - равен 1, если дом находится в пределах от 10 км до 30 км МКАД, и 0 иначе. И т.д.




$$\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}) = \\ = \boldsymbol{w_0} + \boldsymbol{w_1 x_1} + \boldsymbol{w_2 x_2} + \cdots + \boldsymbol{w_{41} x_{[0;10)}} + \boldsymbol{w_{42} x_{[10;30)}} + \boldsymbol{w_{43} x_{[30;50)}} \\ + \boldsymbol{w_{44} x_{\geq 50}}$$

# АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ (МНК)

Задача обучения линейной регрессии (в матричной форме):

$$\frac{1}{\ell}\|Xw - y\|^2 \to \min_w$$

Точное (аналитическое) решение:

$$\boxed{w = (X^T X)^{-1} X^T y}$$

# НЕДОСТАТКИ АНАЛИТИЧЕСКОЙ ФОРМУЛЫ

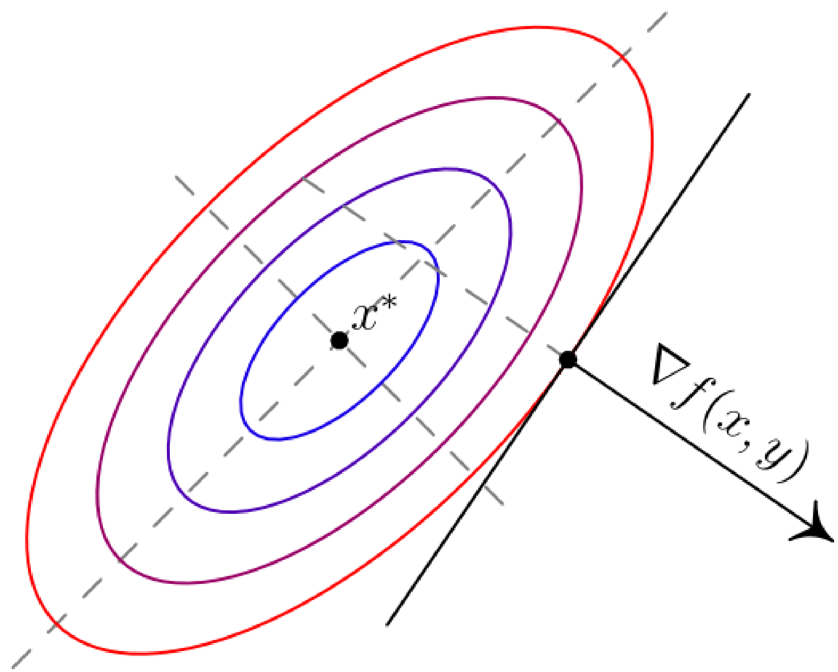
- Обращение матрицы – сложная операция ($O(N^3)$ от числа признаков)
- Матрица $X^T X$ может быть вырожденной или плохо обусловленной
- Если заменить среднеквадратичный функционал ошибки на другой, то скорее всего не найдем аналитическое решение

# ГРАДИЕНТНЫЙ СПУСК

# ТЕОРЕМА О ГРАДИЕНТЕ

**Теорема.** Градиент **–** это вектор, в направлении которого функция быстрее всего растёт.

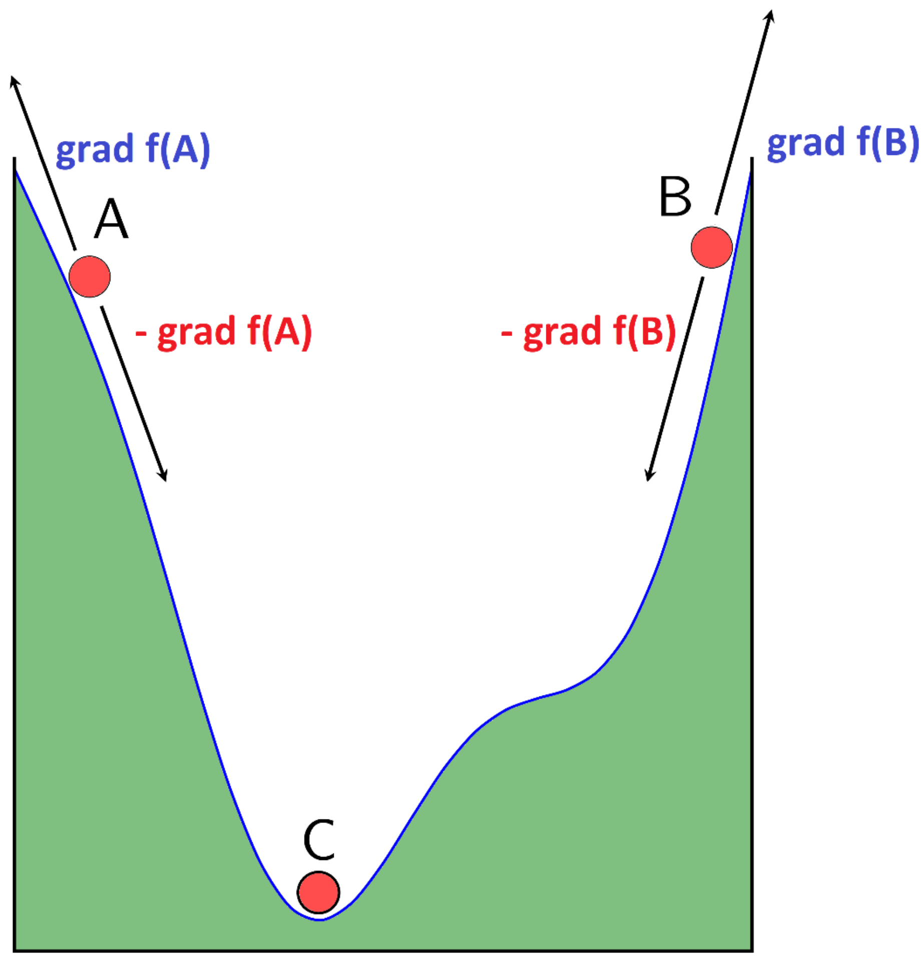
**Антиградиент (вектор, противоположный градиенту) – вектор, в направлении которого функция быстрее всего убывает.**




$$f(x, y) = \frac{3}{2}(x - y)^2 + \frac{1}{3}(x + y)^2$$

# ТЕОРЕМА О ГРАДИЕНТЕ

**Аантиградиент (вектор, противоположный градиенту) – вектор, в направлении которого функция быстрее всего убывает.**



# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

- Наша задача при обучении модели **–** найти такие веса $\boldsymbol{w}$**,** на которых достигается **минимум функции ошибки.**

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

- Наша задача при обучении модели – найти такие веса $\boldsymbol{w}$, на которых достигается минимум функции ошибки.
- В простейшем случае, если ошибка среднеквадратичная, то её график – это парабола.

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

- Наша задача при обучении модели – найти такие веса $\boldsymbol{w}$, на которых достигается минимум функции ошибки.
- В простейшем случае, если ошибка среднеквадратичная, то её график – это парабола.
- Идея метода градиентного спуска:

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потери!

То есть на каждом шаге движемся в направлении уменьшения ошибки.

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

- Наша задача при обучении модели – найти такие веса $\boldsymbol{w}$, на которых достигается минимум функции ошибки.
- В простейшем случае, если ошибка среднеквадратичная, то её график – это парабола.
- Идея метода градиентного спуска:

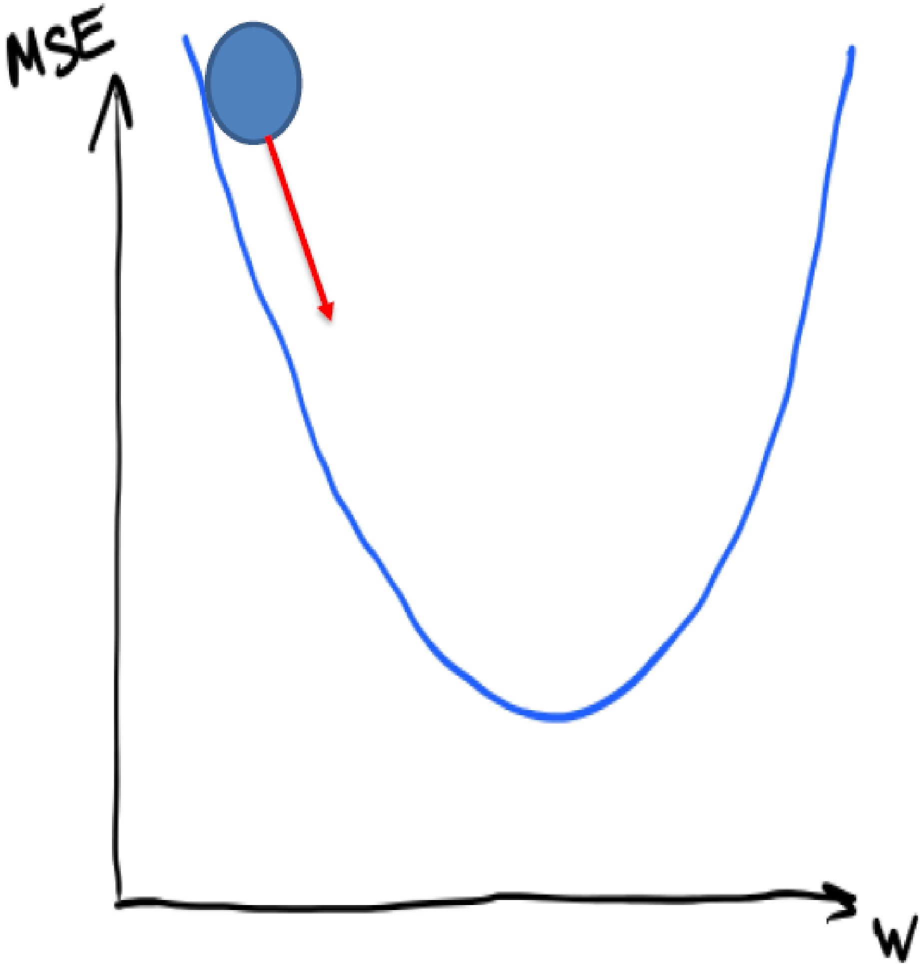
На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!

То есть на каждом шаге движемся в направлении уменьшения ошибки.

*Вектор градиента функции потерь обозначают* $\boldsymbol{grad\ Q}$ *или* $\boldsymbol{\nabla Q}$.

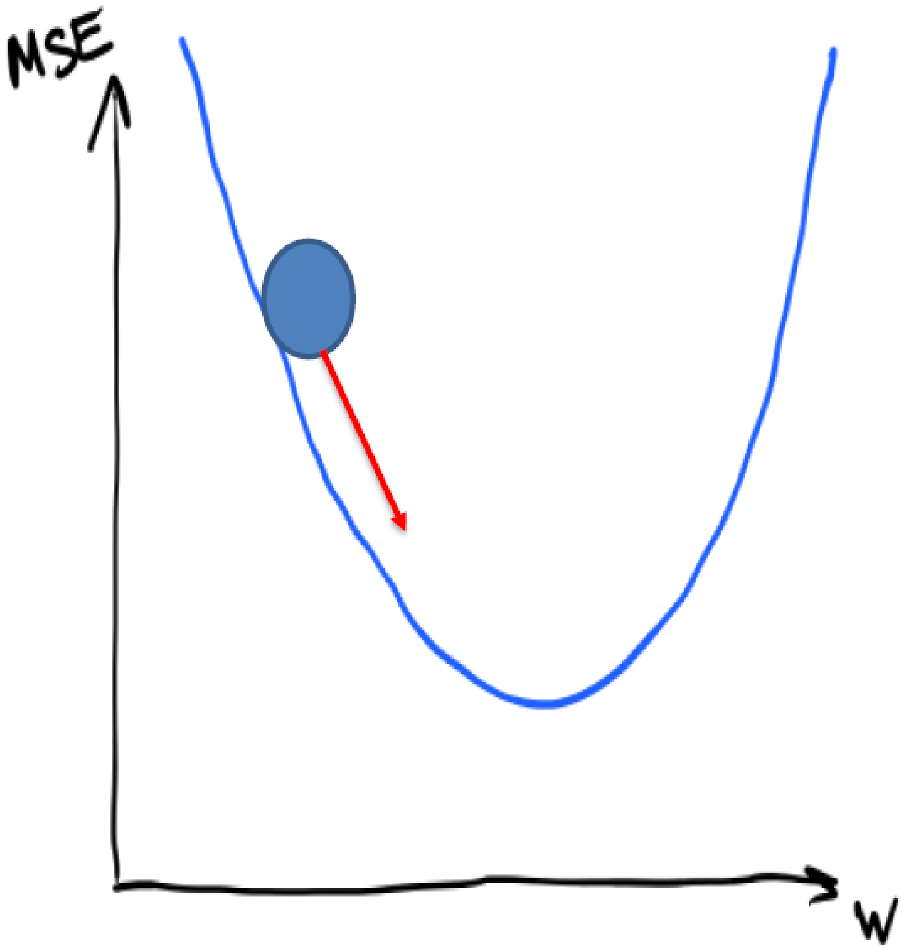
# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



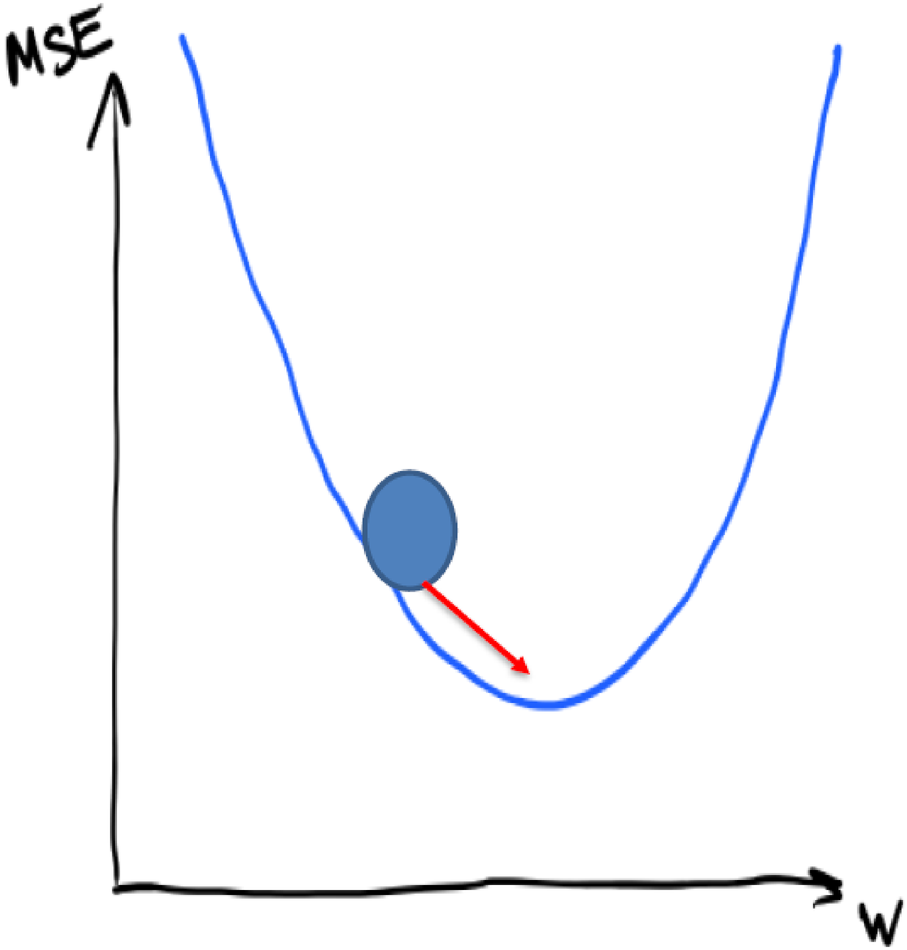
# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



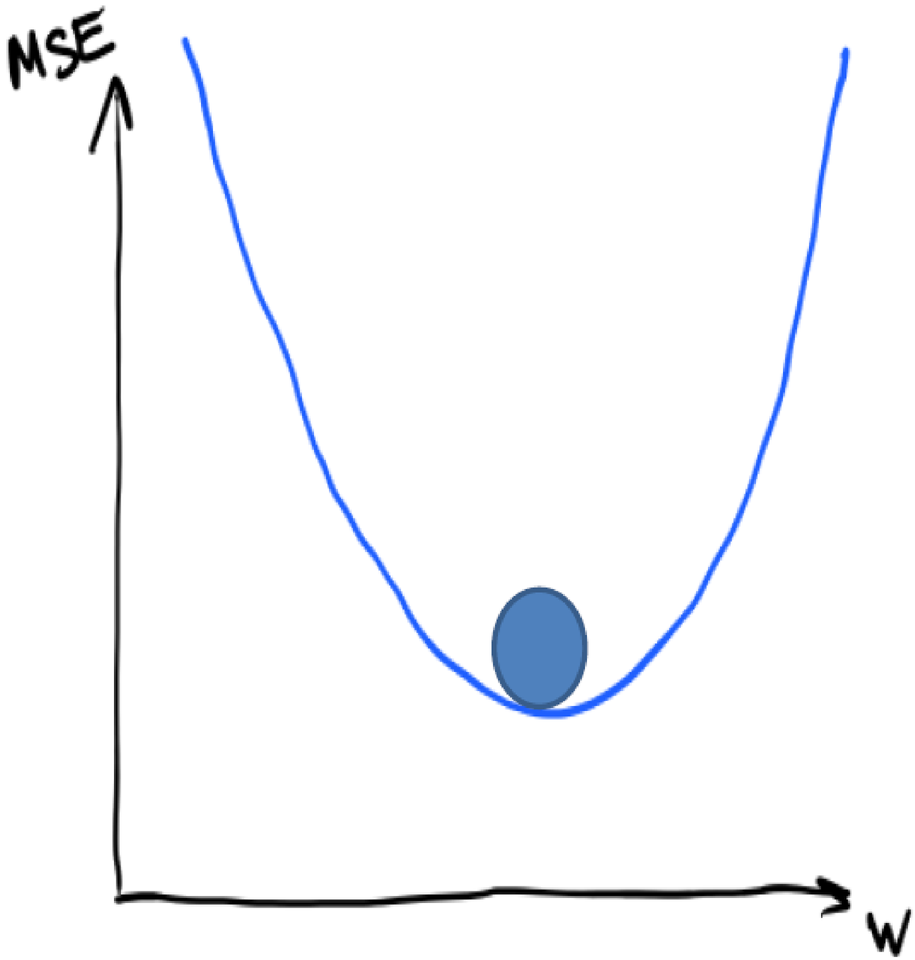
# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

На каждом шаге (на каждой итерации метода) движемся в сторону антиградиента функции потерь!



# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

**Метод градиентного спуска (одномерный случай):**

Пусть у нас только один вес - $w$.

Тогда при добавлении к весу $w$ слагаемого $-\frac{\partial Q}{\partial w}$ функция $Q(w)$ убывает.

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

**Метод градиентного спуска (одномерный случай):**

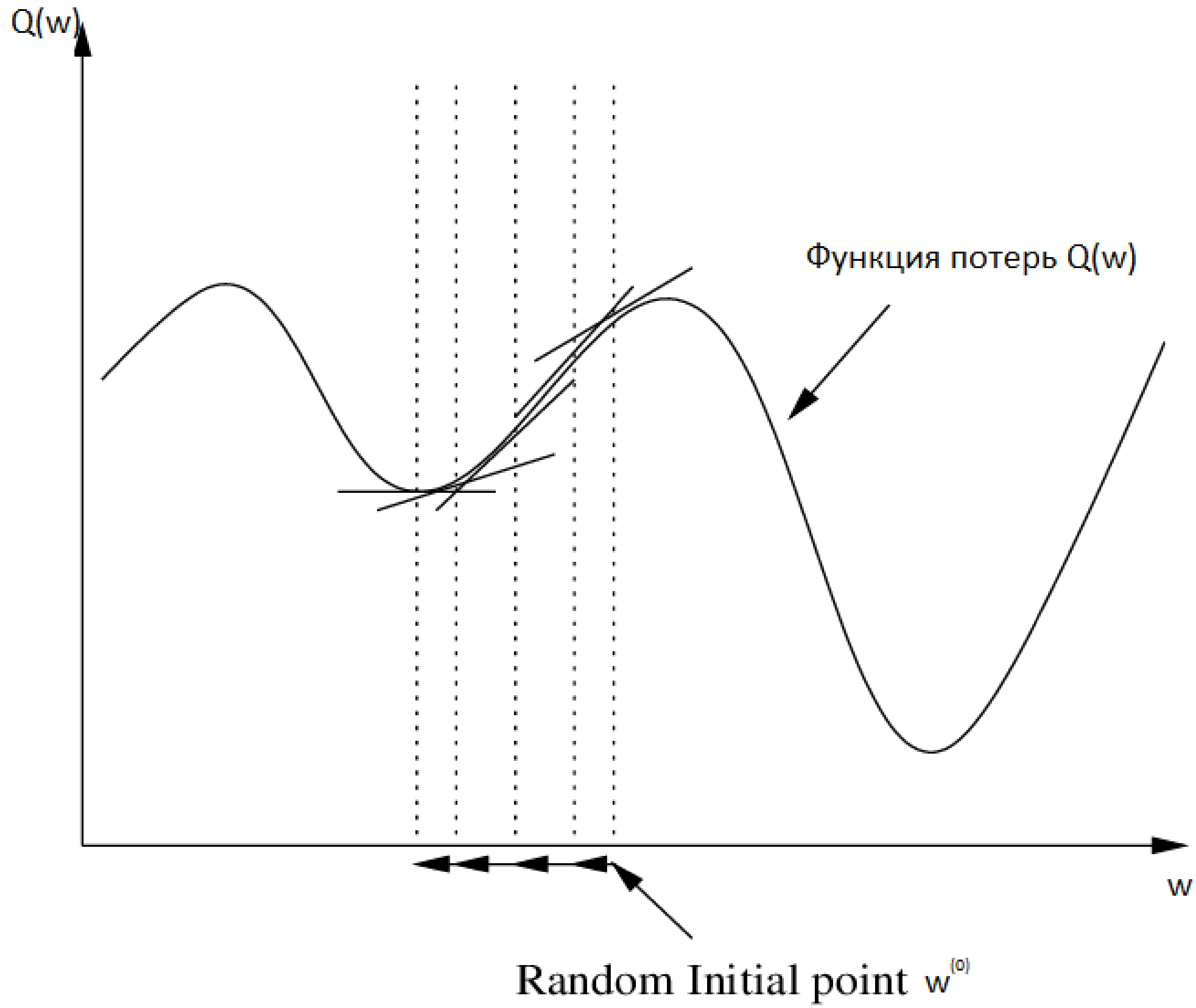
Пусть у нас только один вес - $w$.

Тогда при добавлении к весу $w$ слагаемого $-\frac{\partial Q}{\partial w}$ функция $Q(w)$ убывает.

- Инициализируем вес $w^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем вес, добавляя $-\frac{\partial Q}{\partial w}(w^{(k-1)})$ :

$$\boldsymbol{w^{(k)} = w^{(k-1)} - \frac{\partial Q}{\partial w}(w^{(k-1)})}$$

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА



# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

**Метод градиентного спуска (общий случай случай):**

Пусть $w_0, w_1, \dots, w_n$ - веса, которые мы ищем.

Тогда $\nabla Q(w) = \{\frac{\partial Q}{\partial w_0}, \frac{\partial Q}{\partial w_1}, \dots, \frac{\partial Q}{\partial w_n}\}$

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

**Формулу для обновления весов можно записать в векторном виде:**

- Инициализируем веса $\boldsymbol{w}^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем веса по формуле:

$$\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})} - \nabla \boldsymbol{Q}\left(\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})}\right)$$

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

**Формулу для обновления весов можно записать в векторном виде:**

- Инициализируем веса $\boldsymbol{w}^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем веса по формуле:

$$\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})} - \nabla \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})})$$

В формулу обычно добавляют параметр $\boldsymbol{\eta}$ – величина градиентного шага (learning rate). Он отвечает за скорость движения в сторону антиградиента:

$$\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})} - \boldsymbol{\eta} \nabla \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})})$$

# МЕТОД ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

**Формулу для обновления весов можно записать в векторном виде:**

- Инициализируем веса $\boldsymbol{w}^{(0)}$.
- На каждом следующем шаге обновляем веса по формуле:

$$\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})} - \nabla \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})})$$

В формулу обычно добавляют параметр $\boldsymbol{\eta}$ **–** величина градиентного шага (learning rate). Он отвечает за скорость движения в сторону антиградиента:

$$\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k})} = \boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})} - \boldsymbol{\eta} \nabla \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{w}^{(\boldsymbol{k}-\mathbf{1})})$$

Если функция $Q(w)$ выпуклая и гладкая, а также имеет минимум в точке $w^*$, то метод градиентного спуска при аккуратно подобранном $\eta$ через некоторое число шагов гарантированно попадет в малую окрестность точки $w^*$.

# ВАРИАНТЫ ИНИЦИАЛИЗАЦИИ ВЕСОВ

- $w_j = 0, j = 1, \dots, n$
- Небольшие случайные значения:

$$w_j := random(-\varepsilon, \varepsilon)$$

- Обучение по небольшой случайной подвыборке объектов
- Мультистарт: многократный запуск из разных случайных начальных приближений и выбор лучшего решения

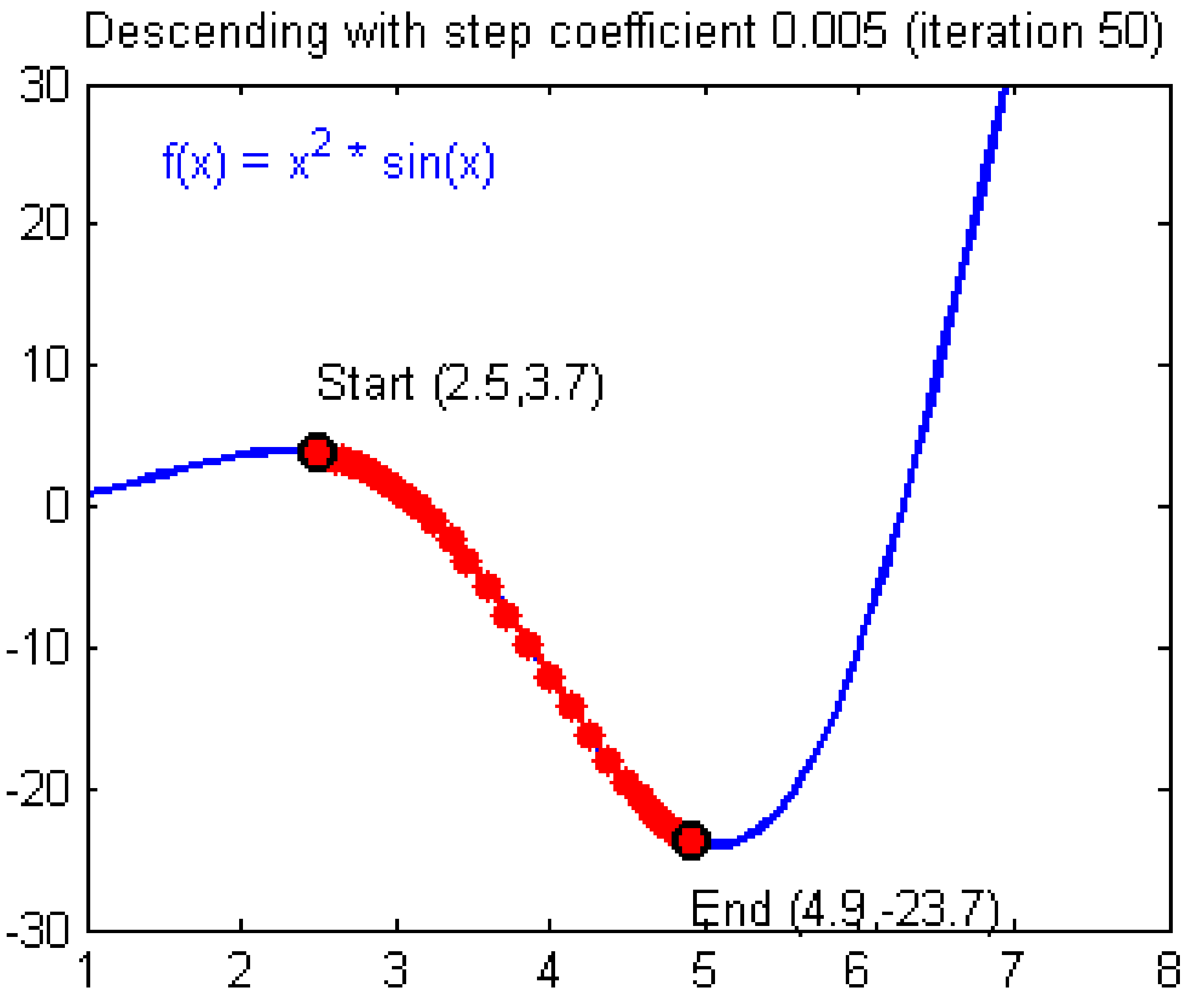
# КРИТЕРИИ ОСТАНОВА

- $\left|Q\left(w^{(k)}\right) - Q\left(w^{(k-1)}\right)\right| < \varepsilon$

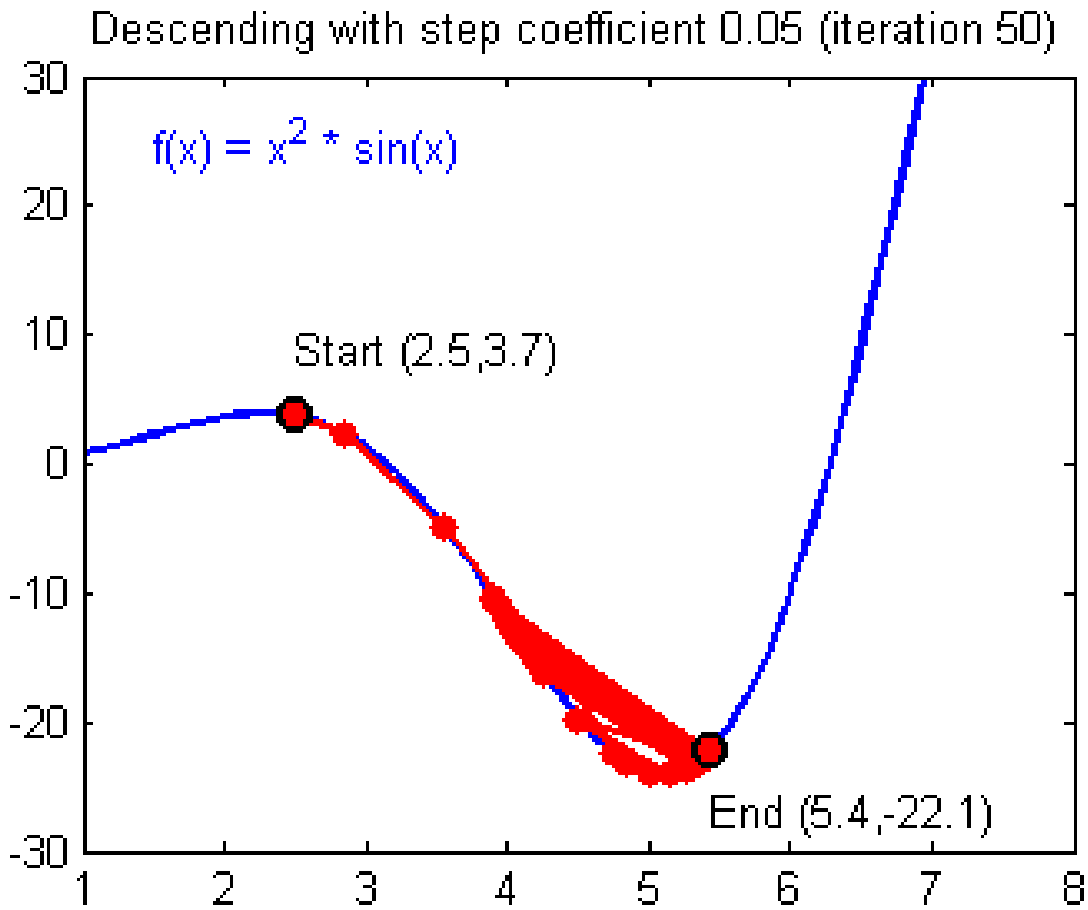
- $\|w^{(k)} - w^{(k-1)}\| < \varepsilon$

- $||\nabla Q(w^{(k)})|| < \varepsilon$

# ГРАДИЕНТНЫЙ СПУСК



# ПРОБЛЕМА ВЫБОРА ГРАДИЕНТНОГО ШАГА



# ГРАДИЕНТНЫЙ ШАГ

В общем случае градиентный шаг может зависеть от номера итерации, тогда будем писать не $\eta$, а $\eta_k$.

- $\eta_k = c$
- $\eta_k = \frac{1}{k}$
- $\eta_k = \lambda \left(\frac{s_0}{s_0+k}\right)^p$, $\lambda, s_0, p$ - параметры

# ОДИН ИЗ НЕДОСТАТКОВ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

(с точки зрения реализации)

- На каждом шаге для вычисления $\nabla Q(w)$ мы вычисляем производную по каждому весу от каждого объекта. То есть вычисляем целую матрицу производных – это затратно и по времени, и по памяти.

# СТОХАСТИЧЕСКИЙ ГРАДИЕНТНЫЙ СПУСК

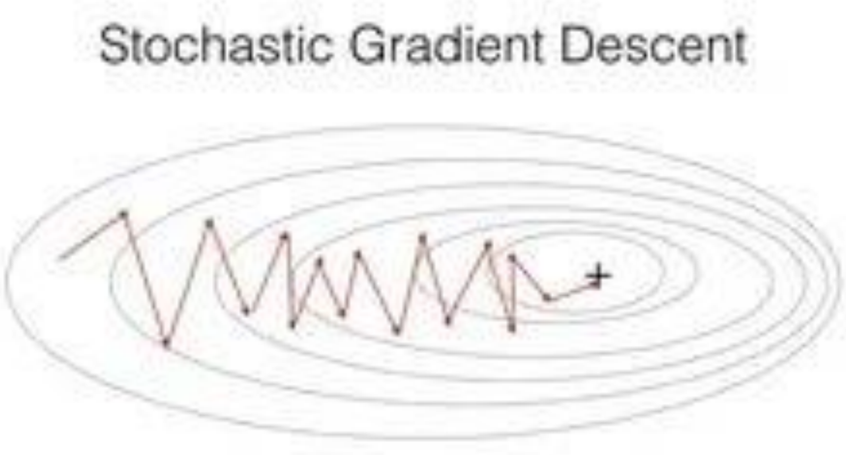
Stochastic gradient descent (SGD):

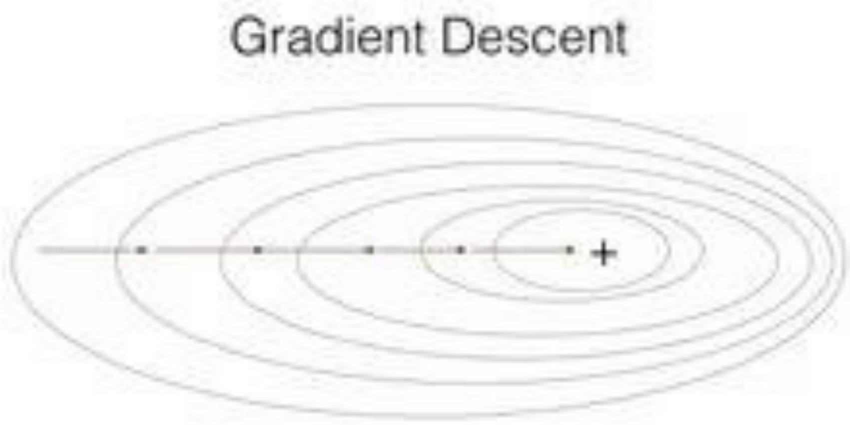
- на каждом шаге выбираем ***один случайный объект*** и сдвигаемся в сторону антиградиента по этому объекту:

$$w^{(k)} = w^{(k-1)} - \eta_k \cdot \boldsymbol{\nabla q_{i_k}\left(w^{(k-1)}\right)},$$

где $\nabla q_{i_k}\left(w^{(k-1)}\right)$ - градиент функции потерь, вычисленный только по объекту с номером $i_k$ (а не по всей обучающей выборке).

# СТОХАСТИЧЕСКИЙ ГРАДИЕНТНЫЙ СПУСК




Если функция $Q(w)$ выпуклая и гладкая, а также имеет минимум в точке $w^*$, то метод стохастического градиентного спуска при аккуратно подобранном $\eta$ через некоторое число шагов гарантированно попадет в малую окрестность точки $w^*$. Однако, сходится метод медленнее, чем обычный градиентный спуск

# MINI-BATCH GRADIENT DESCENT

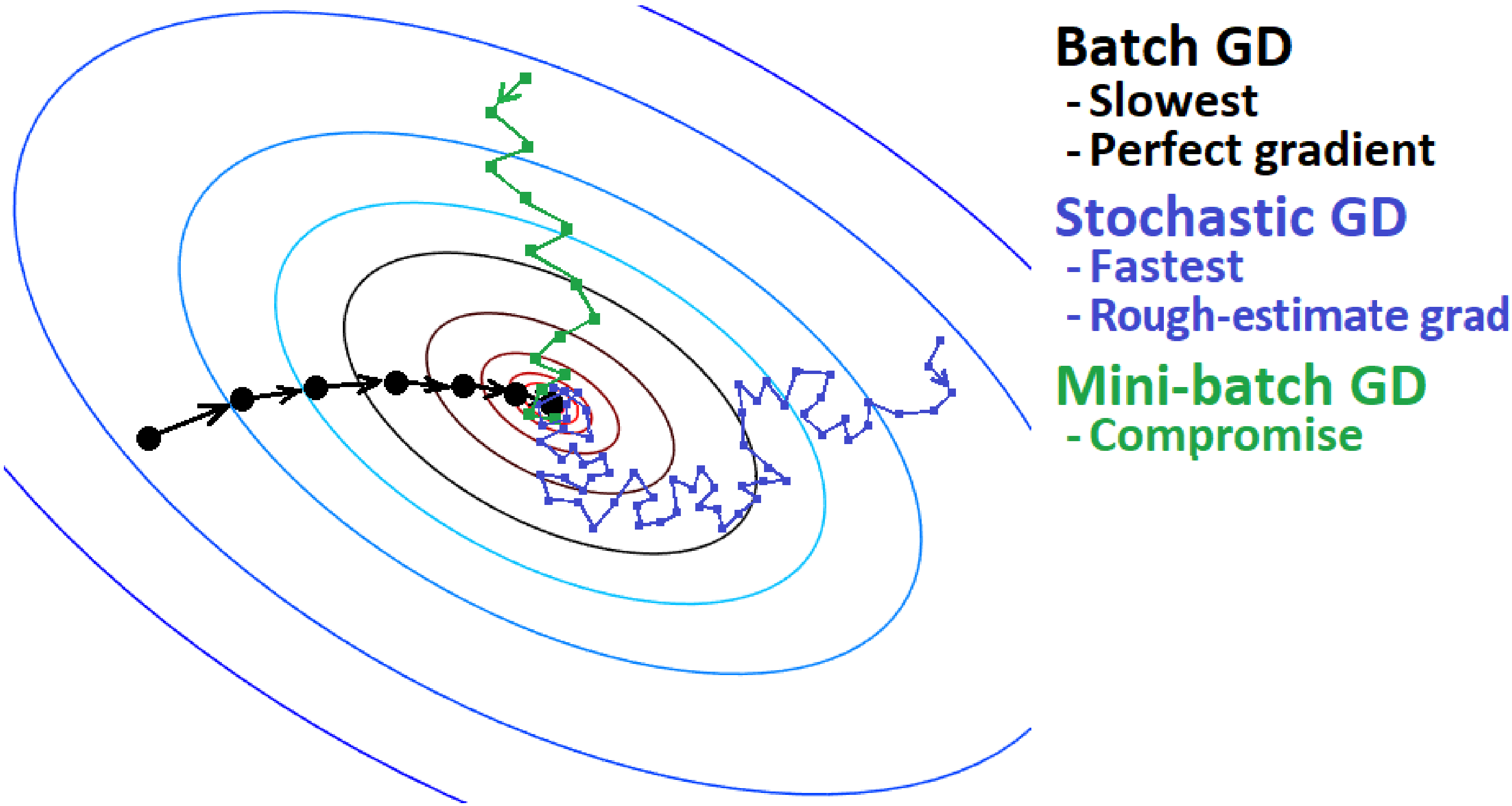
Промежуточное решение между классическим градиентным спуском и стохастическим вариантом.

- Выбираем batch size (например, 32, 64 и т.д.). Разбиваем все пары объект-ответ на группы размера batch size.
- На i-й итерации градиентного спуска вычисляем $\nabla Q(w)$ только по объектам i-го батча:

$$w^{(k)} = w^{(k-1)} - \eta_k \cdot \boldsymbol{\nabla Q_i\left(w^{(k-1)}\right)},$$

где $\nabla Q_i\left(w^{(k-1)}\right)$ - градиент функции потерь, вычисленный по объектам из i-го батча.

# ВАРИАНТЫ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

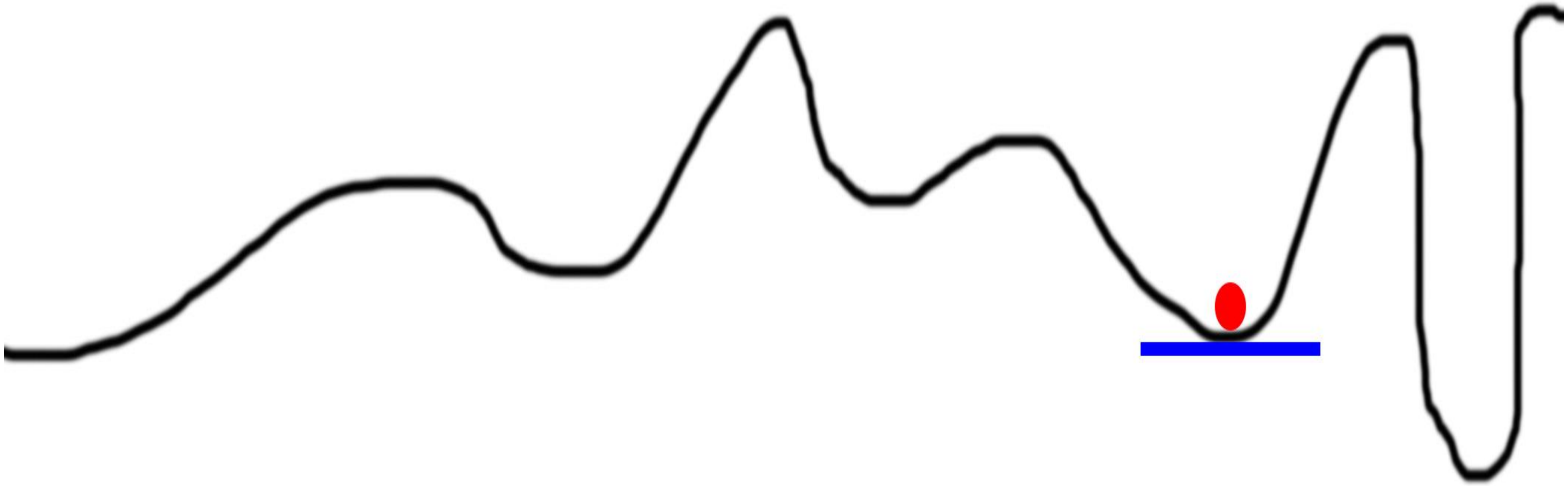


# МОДИФИКАЦИИ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА

# БОНУС: ПРОБЛЕМЫ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА И ВАРИАНТЫ ИХ РЕШЕНИЯ

- Медленно сходится
- Застревает в локальных минимумах

# ПРОБЛЕМА ЗАСТРЕВАНИЯ В LOCMIN



# МЕТОД МОМЕНТОВ (MOMENTUM)

Вектор инерции (*усреднение градиента по предыдущим шагам*):

$$h_0 = 0$$

$$h_k = \boldsymbol{\alpha h_{k-1}} + \eta_k \nabla Q(w^{(k-1)})$$

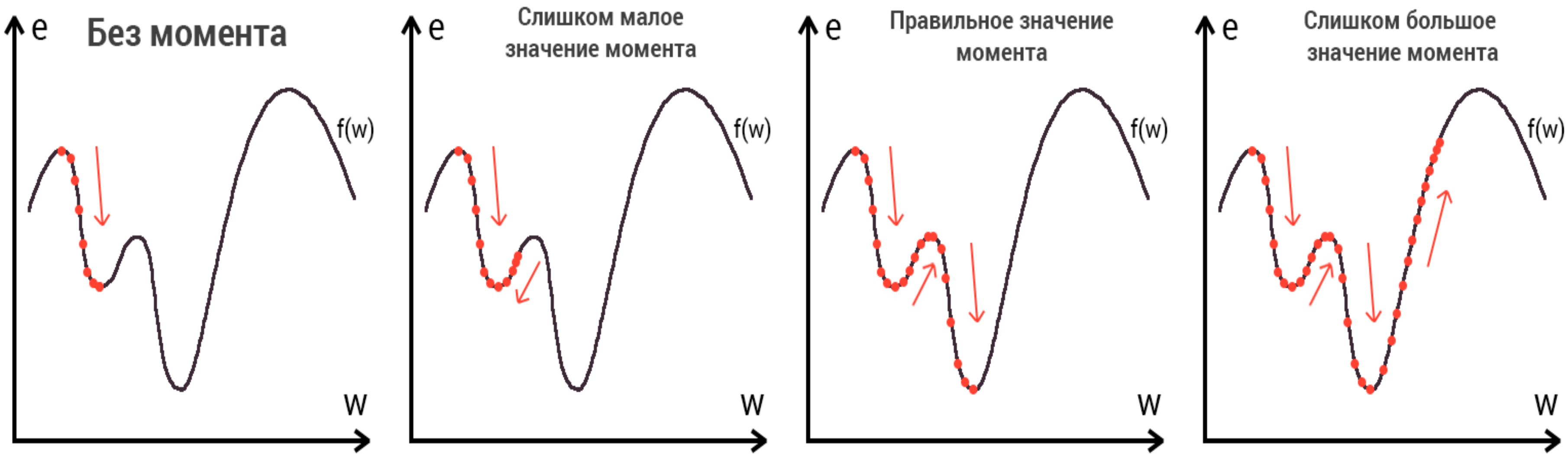
Формула метода моментов:

$$w^{(k)} = w^{(k-1)} - h_k$$

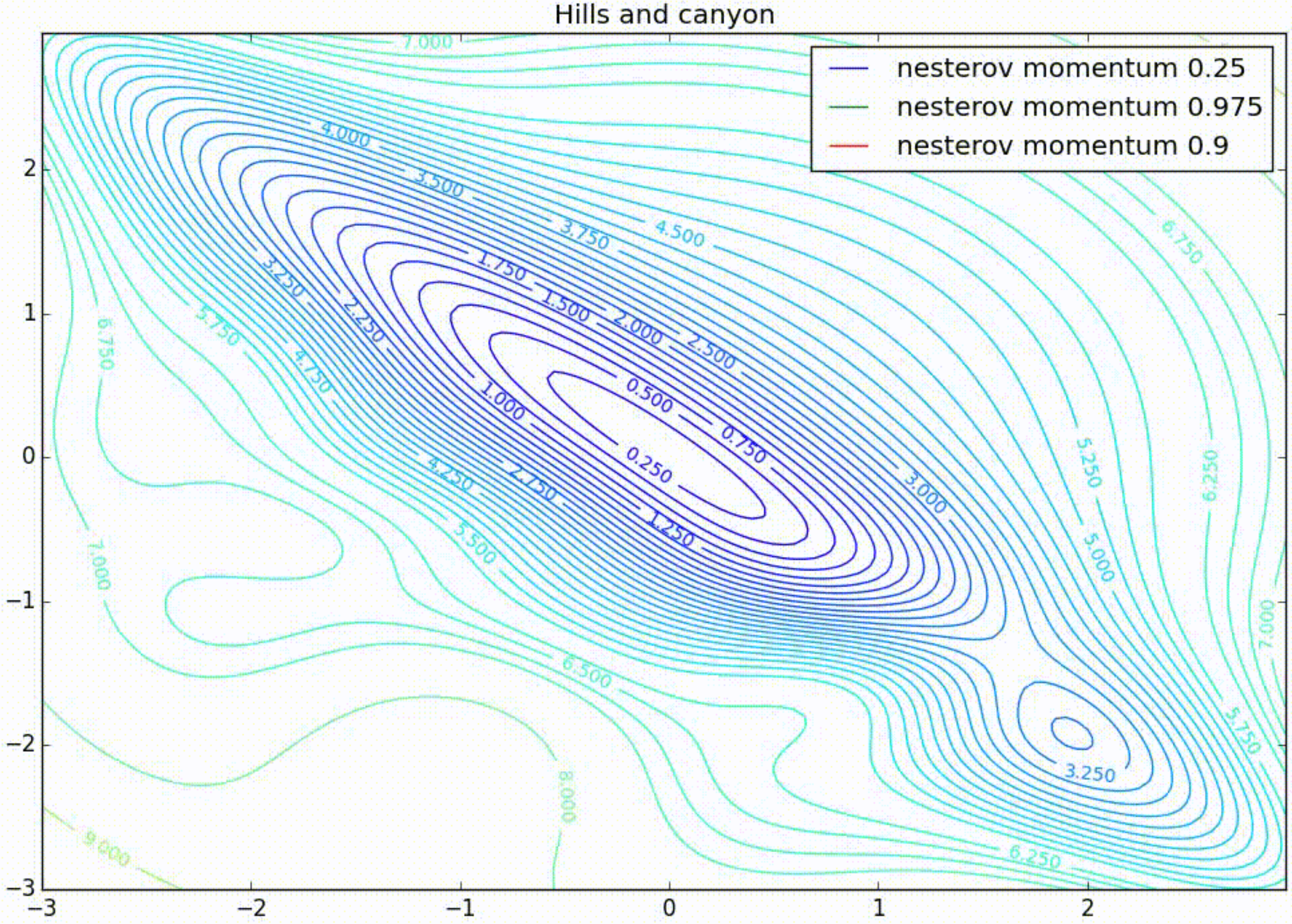
Подробнее:

$$w^{(k)} = w^{(k-1)} - \eta_k \nabla Q\left(w^{(k-1)}\right) - \boldsymbol{\alpha h_{k-1}}$$

# MOMENTUM


e
Без момента
f(w)
w
e
Слишком малое
значение момента
f(w)
w
e
Правильное значение
момента
f(w)
w
e
Слишком большое
значение момента
f(w)
w

# MOMENTUM



Hills and canyon
nesterov momentum 0.25
nesterov momentum 0.975
nesterov momentum 0.9

# ADAGRAD (ADAPTIVE GRADIENT)

Сумма квадратов обновлений:

$$g_{k-1,j} = \left(\nabla Q\left(w^{(k-1)}\right)\right)_j^2$$

Формулы метода AdaGrad:

- $G_{k,j} = G_{k-1,j} + g_{k-1.j} = G_{k-1,j} + \left(\nabla Q\left(w^{(k-1)}\right)\right)_j^2$
- $\omega_j^{(k)} = \omega_j^{k-1} - \frac{\boldsymbol{\eta}}{\sqrt{\boldsymbol{G_{k,j}+\varepsilon}}} \cdot \left(\nabla Q\left(w^{(k-1)}\right)\right)_j$

*Этот метод использует адаптивный шаг обучения – тем самым мы регулируем скорость сходимости метода.*

# ADAGRAD (ADAPTIVE GRADIENT)

Сумма квадратов обновлений:

$$g_{k-1,j} = (\nabla Q(w^{(k-1)}))_j^2$$

Формулы метода AdaGrad:

- $G_{k,j} = G_{k-1,j} + g_{k-1.j}$
- $\omega_j^{(k)} = \omega_j^{k-1} - \frac{\eta}{\sqrt{G_{k,j}+\varepsilon}} \cdot \left(\nabla Q\left(w^{(k-1)}\right)\right)_j$

**+ Автоматическое затухание скорости обучения**

**- $G_{kj}$ монотонно возрастают, поэтому шаги укорачиваются, и мы можем не успеть дойти до минимума**

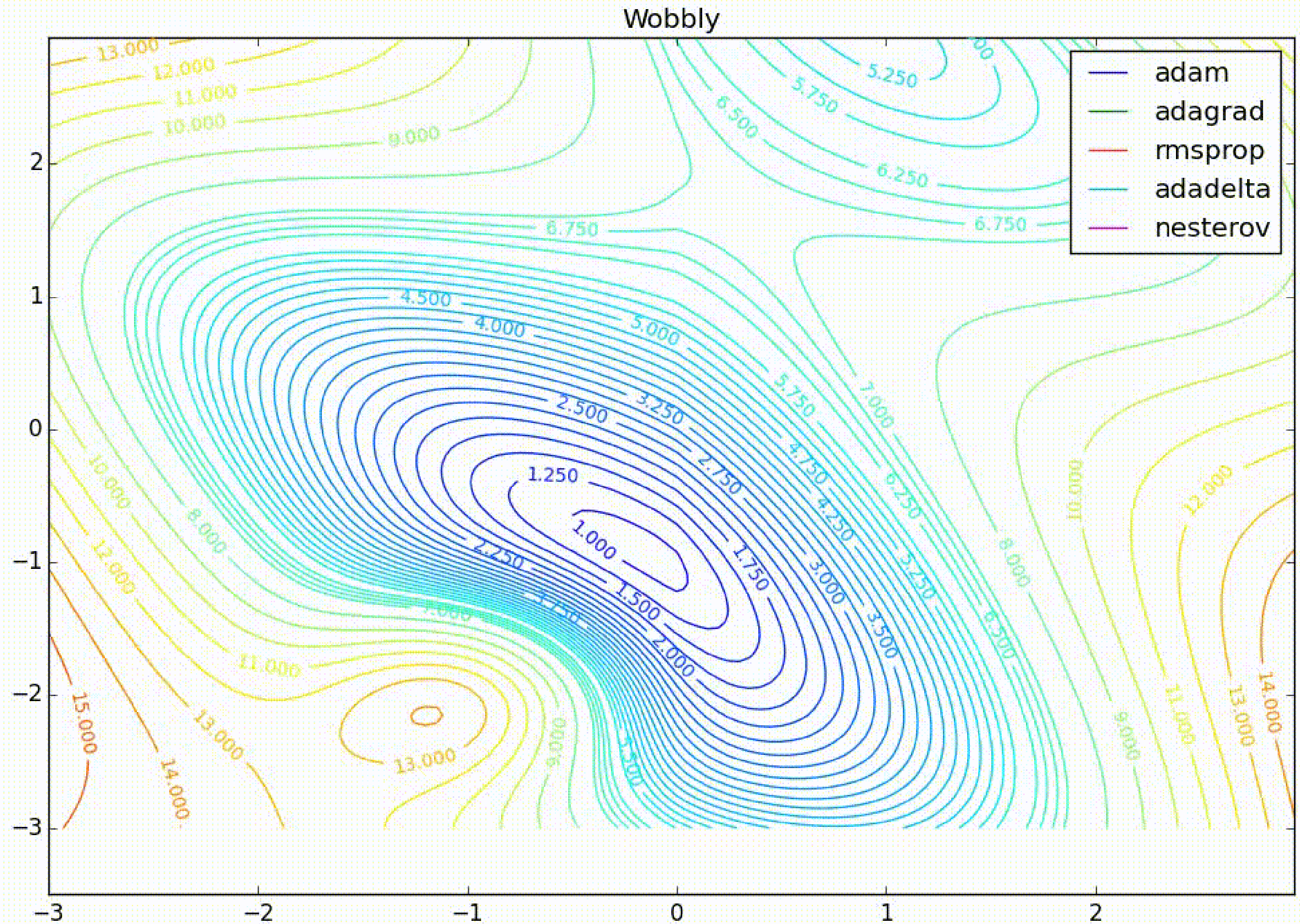
# RMSPROP (ROOT MEAN SQUARE PROPAGATION)

*Метод реализует экспоненциальное затухание градиентов*

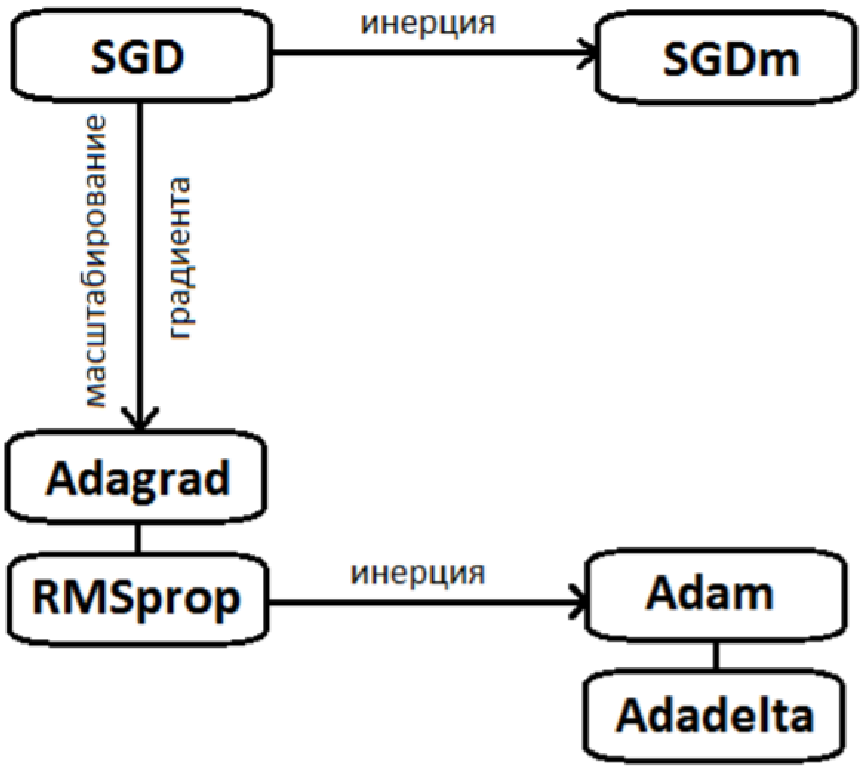
Формулы метода RMSprop (*усредненный по истории квадрат градиента*):

- $G_{k,j} = \boldsymbol{\alpha} \cdot G_{k-1,j} + (\mathbf{1} - \boldsymbol{\alpha}) \cdot g_{k-1,j}$
- $\omega_j^{(k)} = \omega_j^{k-1} - \frac{\eta}{\sqrt{G_{k,j} + \varepsilon}} \cdot \left(\nabla Q\left(w^{(k-1)}\right)\right)_j$

# МОДИФИКАЦИИ ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА



# МОДИФИКАЦИИ SGD




ссылка на статью