

Основы машинного обучения

Лекция 7

Линейная регрессия и градиентный спуск

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2025

Градиентный спуск

Градиентный спуск

1. Начальное приближение: w^0

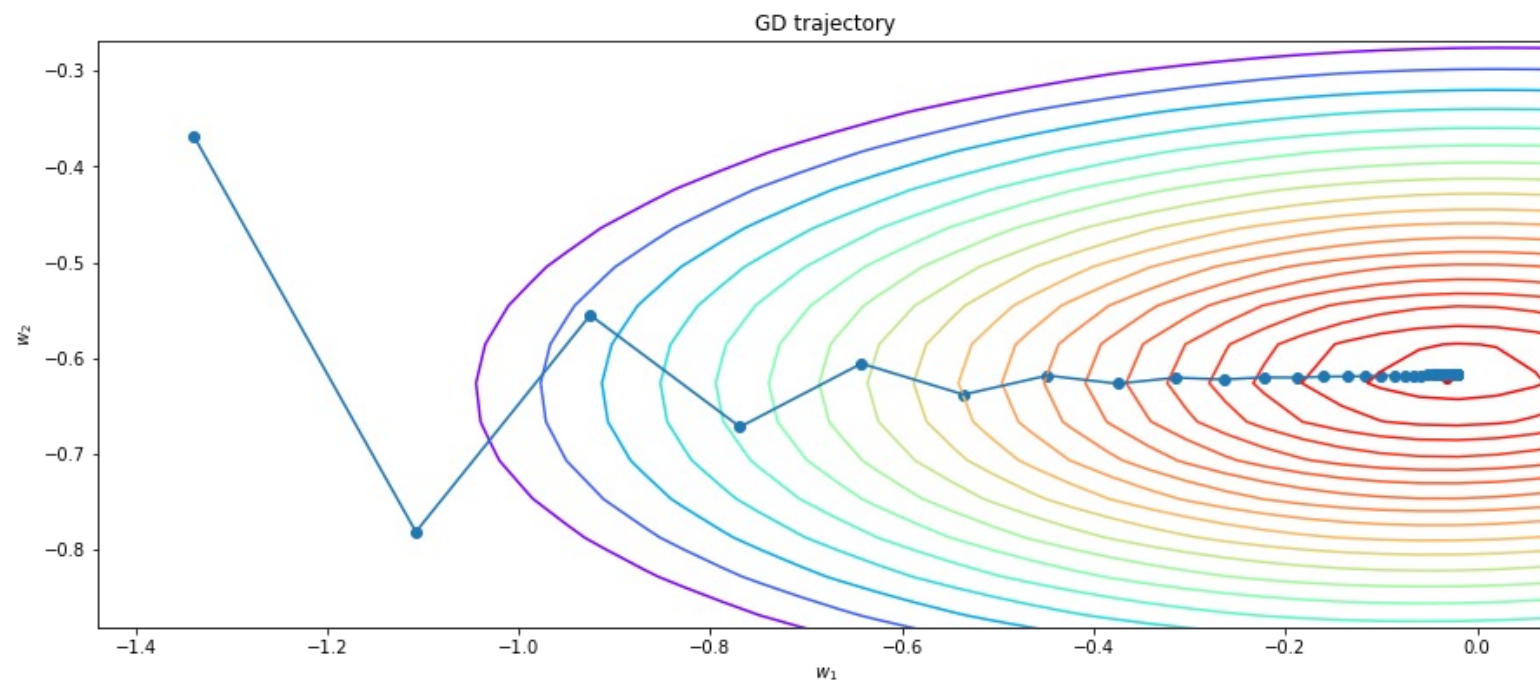
2. Повторять:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla Q(w^{t-1})$$

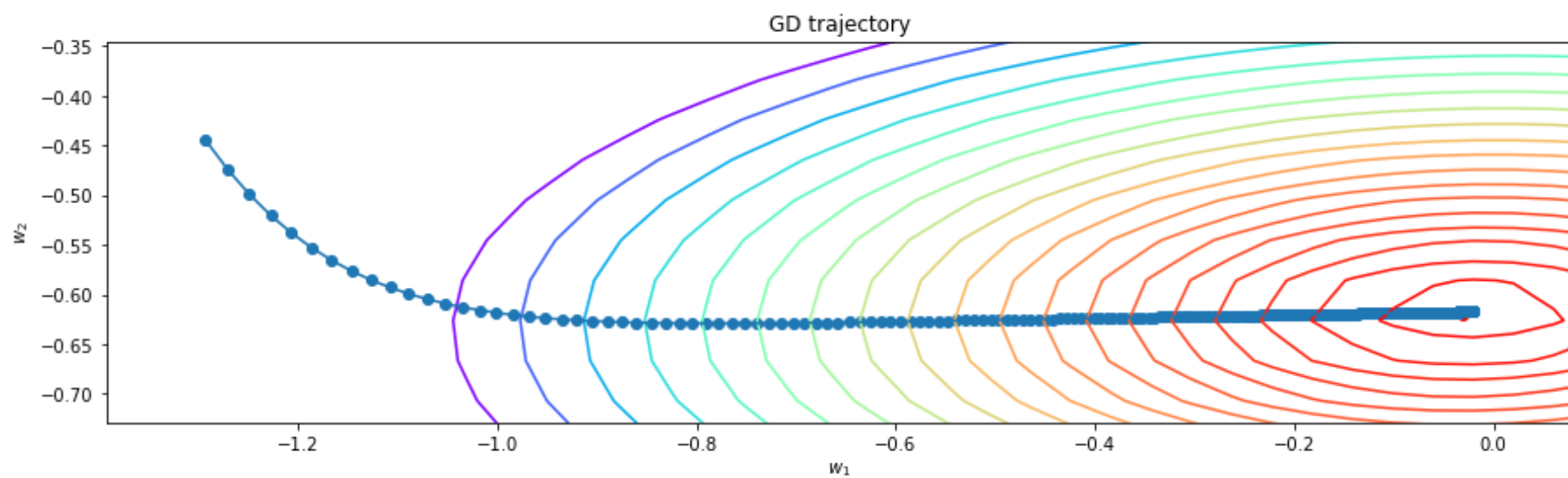
3. Останавливаемся, если

$$\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$$

Длина шага



Длина шага



Стохастический градиентный спуск

Градиентный спуск

1. Начальное приближение: w^0

2. Повторять:

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla Q(w^{t-1})$$

3. Останавливаемся, если

$$\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$$

Линейная регрессия

$$Q(w) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x \rangle - y_i)^2$$

- $\frac{\partial Q}{\partial w_1} = \frac{2}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} x_{i1} (\langle w, x \rangle - y_i)$
- ...
- $\frac{\partial Q}{\partial w_d} = \frac{2}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} x_{id} (\langle w, x \rangle - y_i)$
- $\nabla Q(w) = \frac{2}{\ell} X^T (Xw - y)$

Сложности градиентного спуска

- Для вычисления градиента, как правило, надо просуммировать что-то по всем объектам
- И это для одного маленького шага!

Оценка градиента

$$Q(w) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L(y_i, a(x_i))$$

- Градиент:

$$\nabla Q(w) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \nabla L(y_i, a(x_i))$$

- Может, оценить градиент одним слагаемым?

$$\nabla Q(w) \approx \nabla L(y_i, a(x_i))$$

Стохастический градиентный спуск

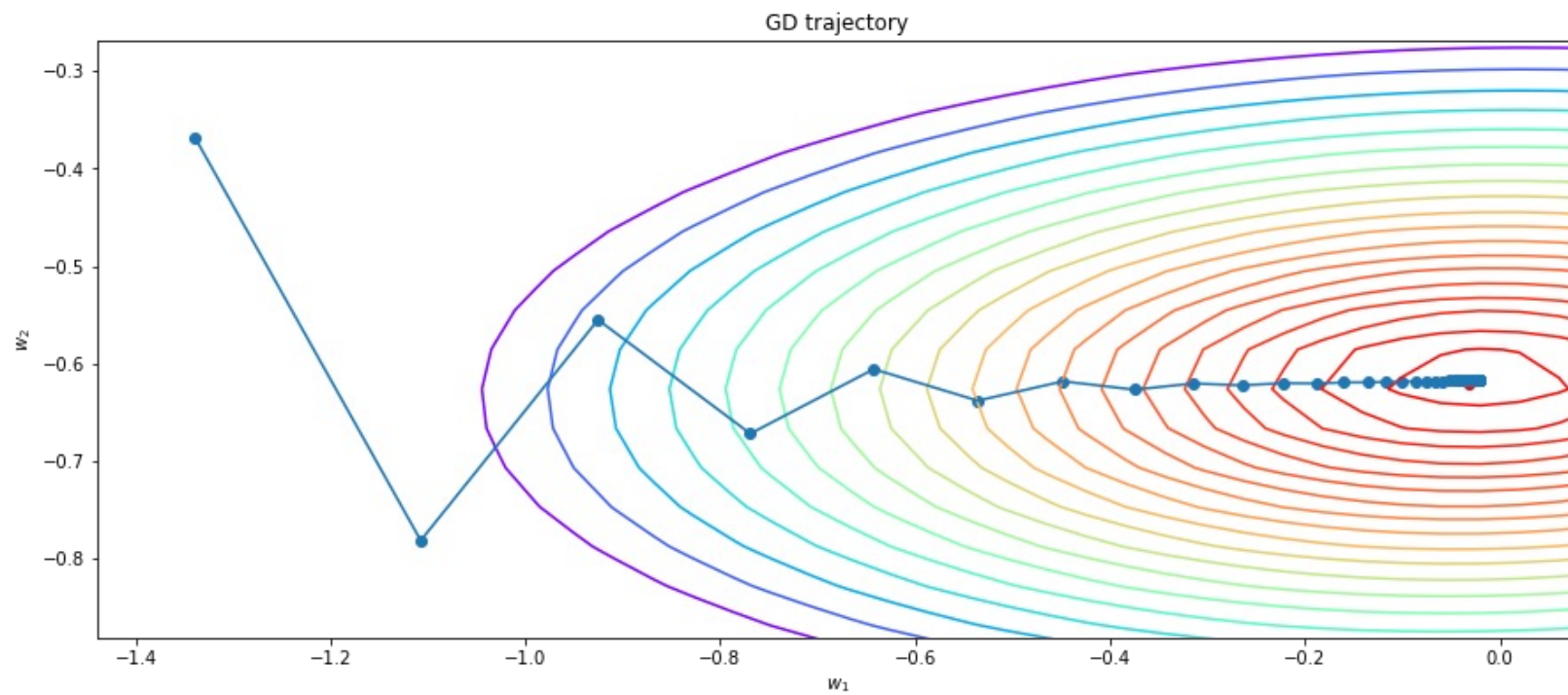
1. Начальное приближение: w^0
2. Повторять, каждый раз выбирая случайный объект i_t :

$$w^t = w^{t-1} - \eta \nabla L(y_{i_t}, a(x_{i_t}))$$

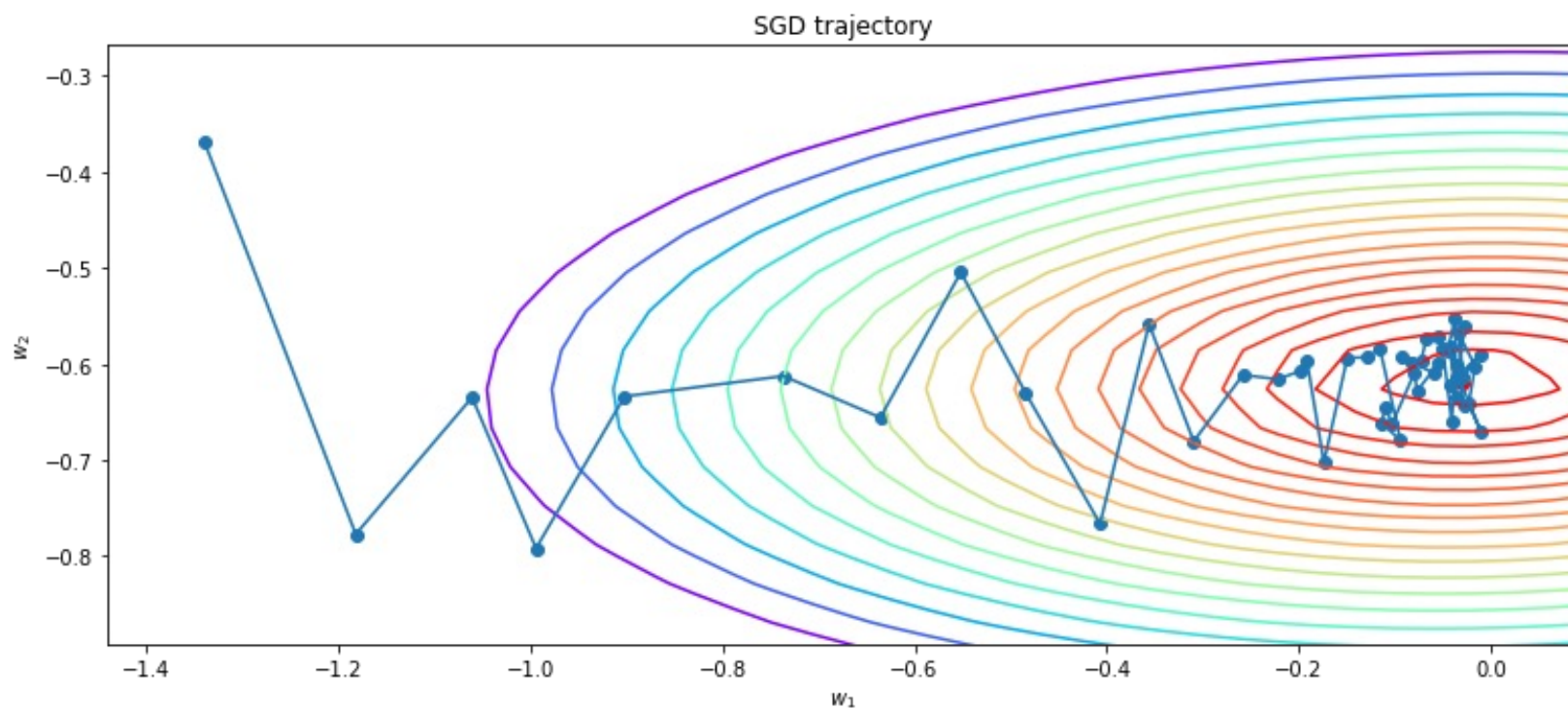
3. Останавливаемся, если

$$\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$$

Градиентный спуск



Стохастический градиентный спуск



Стохастический градиентный спуск

1. Начальное приближение: w^0
2. Повторять, каждый раз выбирая случайный объект i_t :

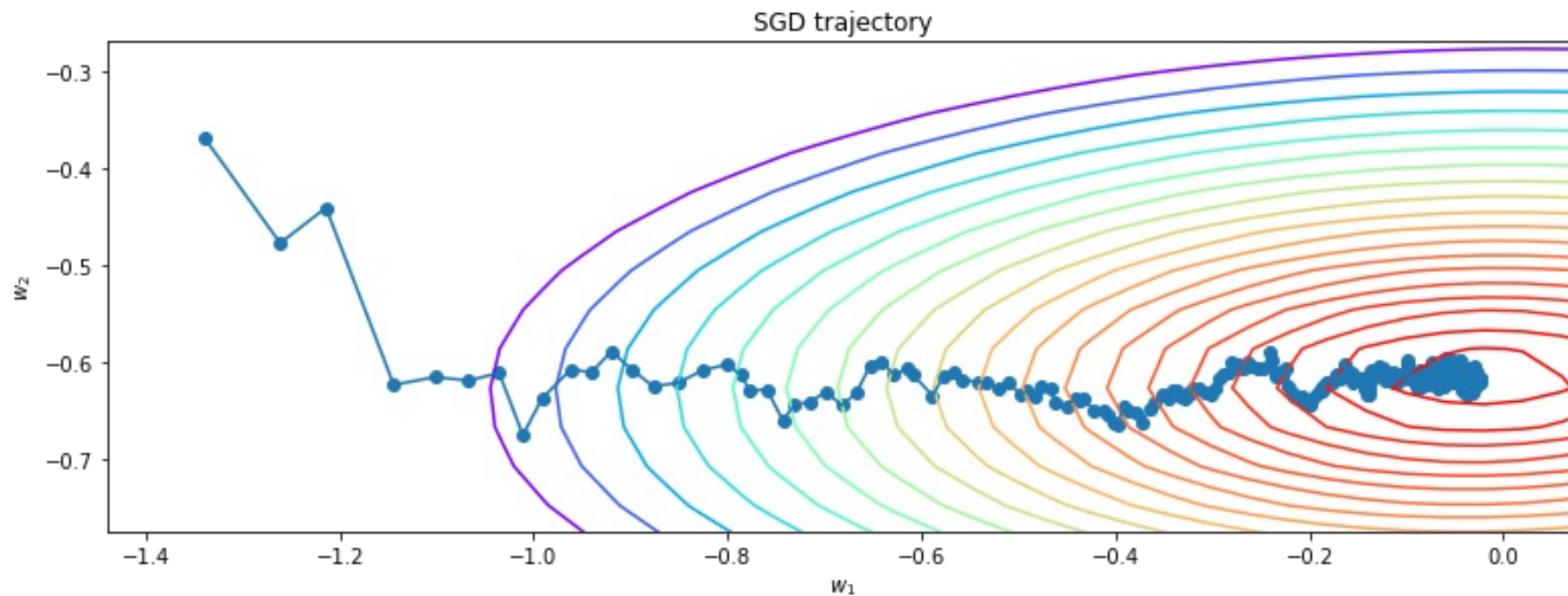
$$w^t = w^{t-1} - \eta_t \nabla L(y_{i_t}, a(x_{i_t}))$$

3. Останавливаемся, если

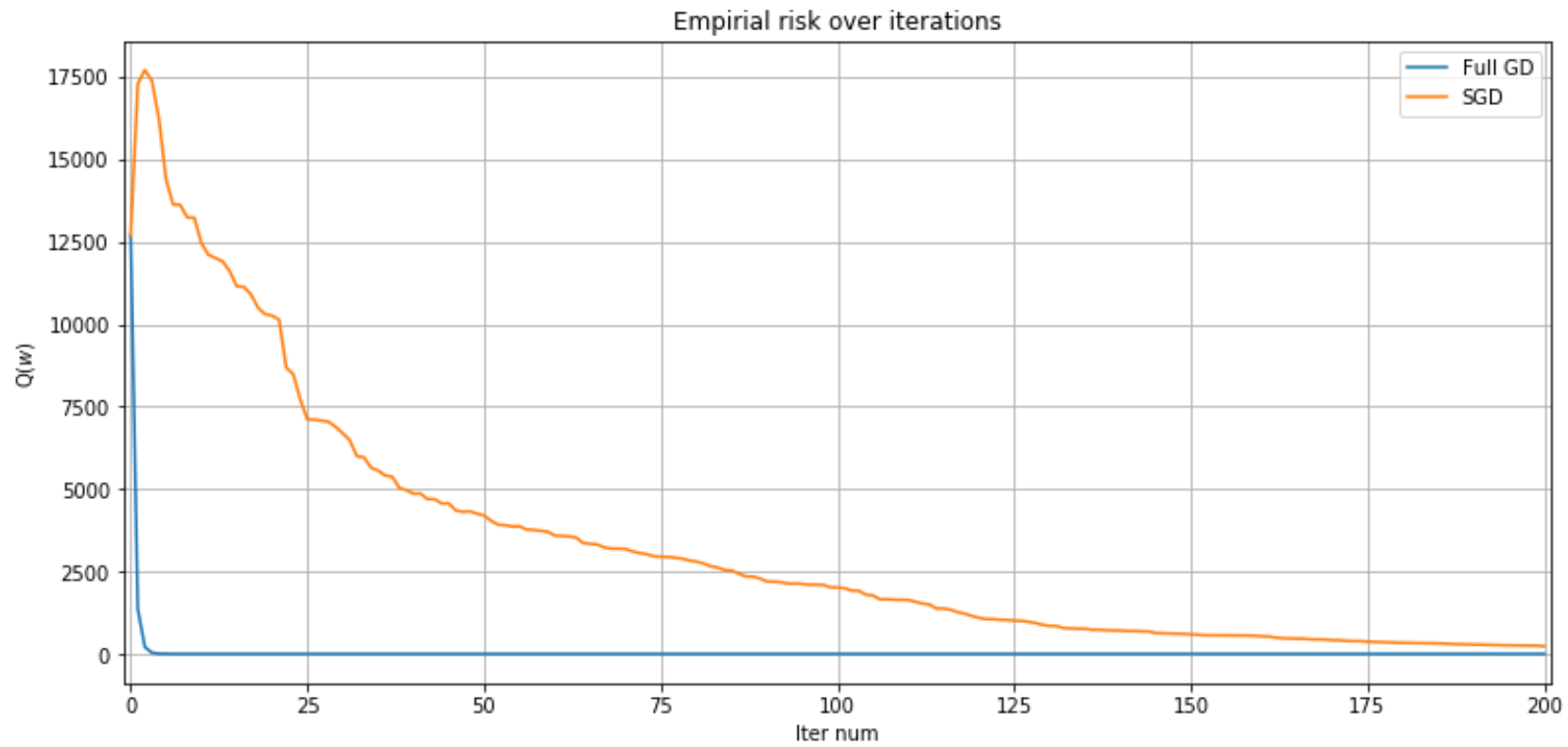
$$\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$$

Стохастический градиентный спуск

$$\eta_t = \frac{0.1}{t^{0.3}}$$



Стохастический градиентный спуск



Mini-batch

1. Начальное приближение: w^0
2. Повторять, каждый раз выбирая m случайных объектов i_1, \dots, i_m :

$$w^t = w^{t-1} - \eta_t \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m \nabla L \left(y_{i_j}, a \left(x_{i_j} \right) \right)$$

3. Останавливаемся, если

$$\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$$

Резюме

- SGD существенно упрощает каждый шаг
- Траектория в SGD существенно менее стабильная
- Но это может помочь выбираться из локальных минимумов
- Mini-batch — некоторый компромисс между SGD и Full GD

Функции потерь в задачах регрессии

Среднеквадратичная ошибка

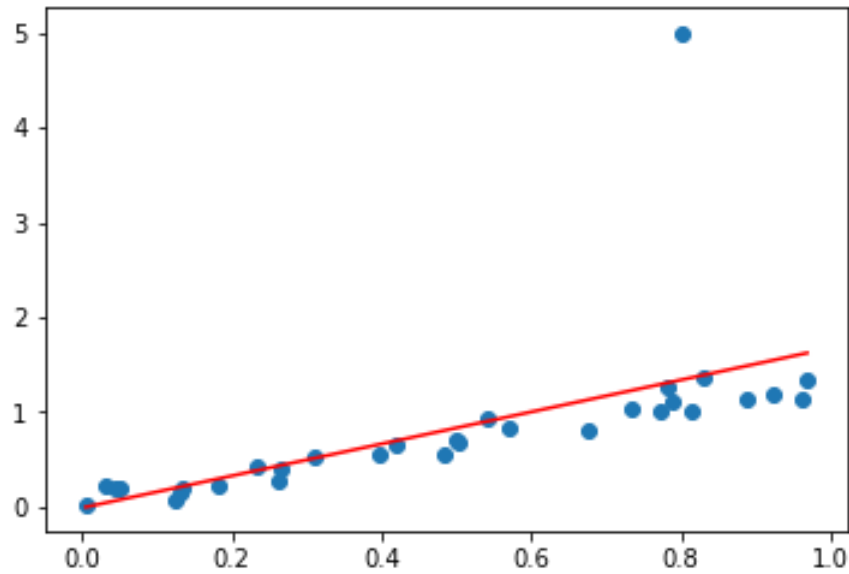
- Частый выбор — квадратичная функция потерь

$$L(y, a) = (a - y)^2$$

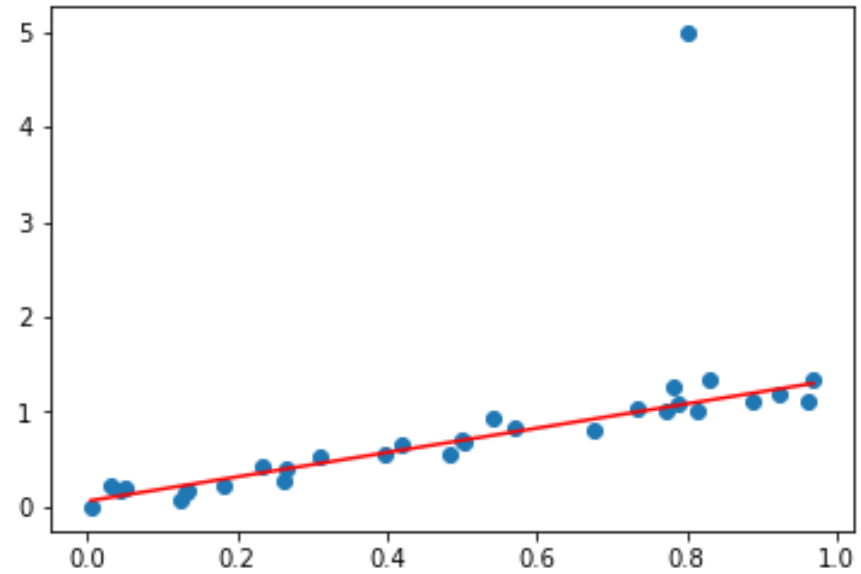
- Функционал ошибки — среднеквадратичная ошибка (mean squared error, MSE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (a(x_i) - y_i)^2$$

Выбросы



С учётом выброса



Без учёта выброса

Обучение на среднеквадратичную ошибку

Выбросы

$a(x)$	y	$(a(x) - y)^2$
2	1	1
1	2	1
2	3	1
5	4	1
6	5	1
7	100	8649
6	7	1

$$MSE \approx 1236$$

Выбросы

$a(x)$	y	$(a(x) - y)^2$
4	1	9
5	2	9
6	3	9
7	4	9
8	5	9
10	100	8100
10	7	9

$$MSE \approx 1164$$

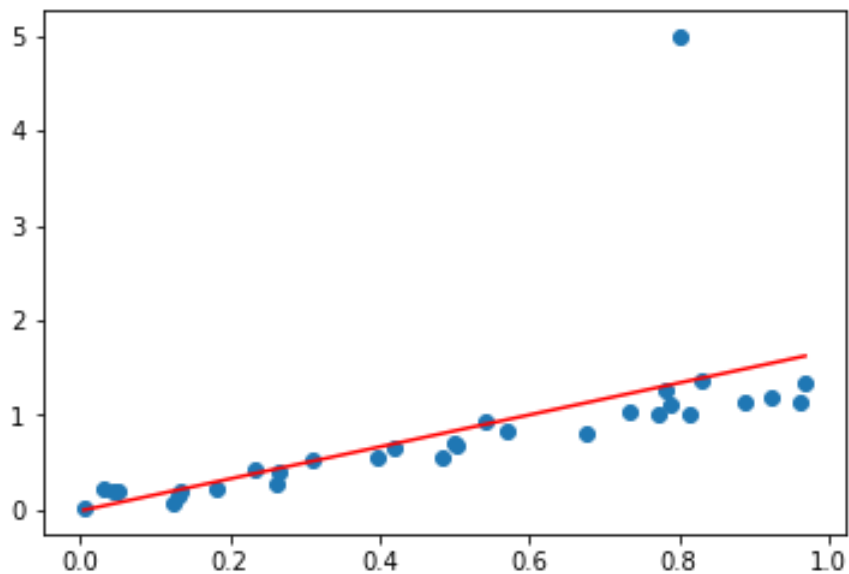
Средняя абсолютная ошибка

$$L(y, a) = |a - y|$$

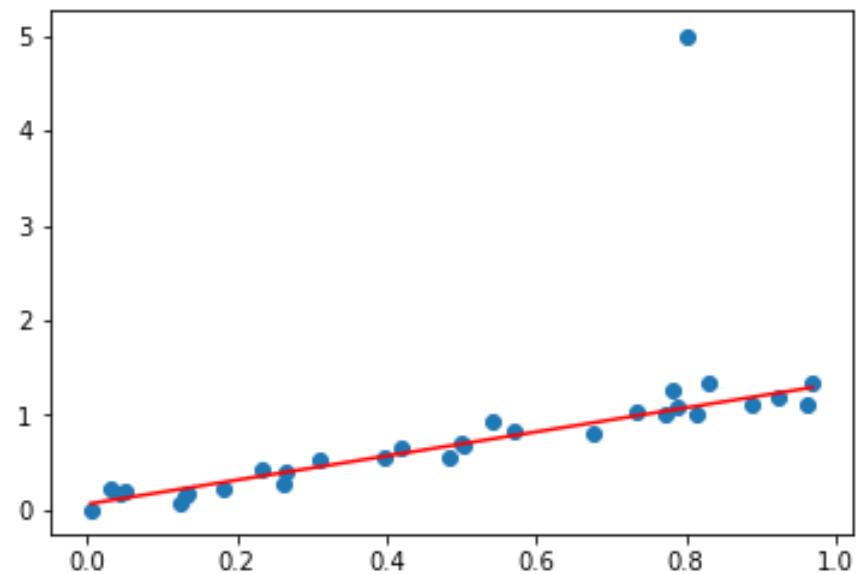
- Функционал ошибки — средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE)

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} |a(x_i) - y_i|$$

Выбросы



Обучение на MSE



Обучение на MAE

Выбросы

$a(x)$	y	$ a(x) - y $
2	1	1
1	2	1
2	3	1
5	4	1
6	5	1
7	100	93
6	7	1

$$MAE \approx 14.14$$

Выбросы

$a(x)$	y	$ a(x) - y $
4	1	3
5	2	3
6	3	3
7	4	3
8	5	3
10	100	90
10	7	3

$$MAE \approx 15.43$$

Функция потерь Хубера

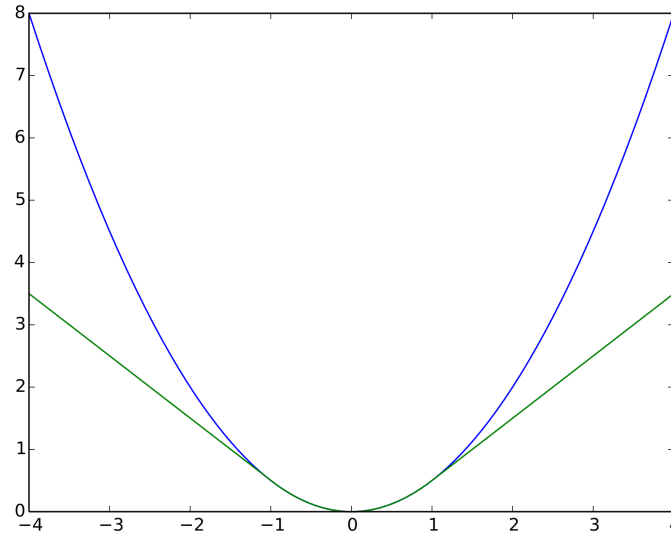
$$L_H(y, a) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - a)^2, & |y - a| < \delta \\ \delta \left(|y - a| - \frac{1}{2}\delta \right), & |y - a| \geq \delta \end{cases}$$

- Функционал ошибки:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} L_H(y_i, a(x_i))$$

Функция потерь Хубера

$$L_H(y, a) = \begin{cases} \frac{1}{2}(y - a)^2, & |y - a| < \delta \\ \delta \left(|y - a| - \frac{1}{2}\delta \right), & |y - a| \geq \delta \end{cases}$$



MAPE

- Mean Absolute Percentage Error (средний модуль относительной ошибки)

$$L(y, a) = \left| \frac{y - a}{y} \right|$$

$$Q(a, X) = \frac{100\%}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \left| \frac{a(x_i) - y_i}{y_i} \right|$$

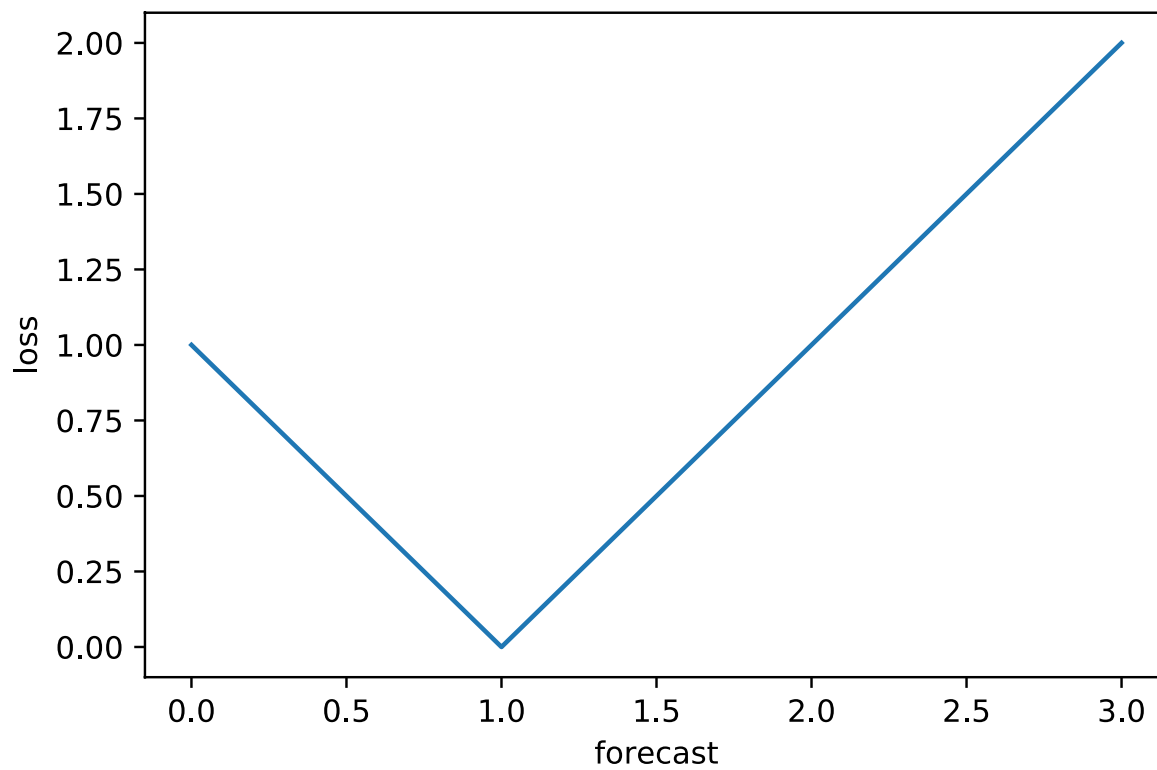
MAPE

$$L(y, a) = \left| \frac{y - a}{y} \right|$$

- Особенности (при $a \geq 0$):
- Недопрогноз штрафует максимум на единицу
- Перепрогноз может быть оштрафован любым числом
- Несимметричная функция потерь (отдаёт предпочтение недопрогнозу)

MAPE

$$L(y, a) = \left| \frac{y - a}{y} \right|$$



SMAPE

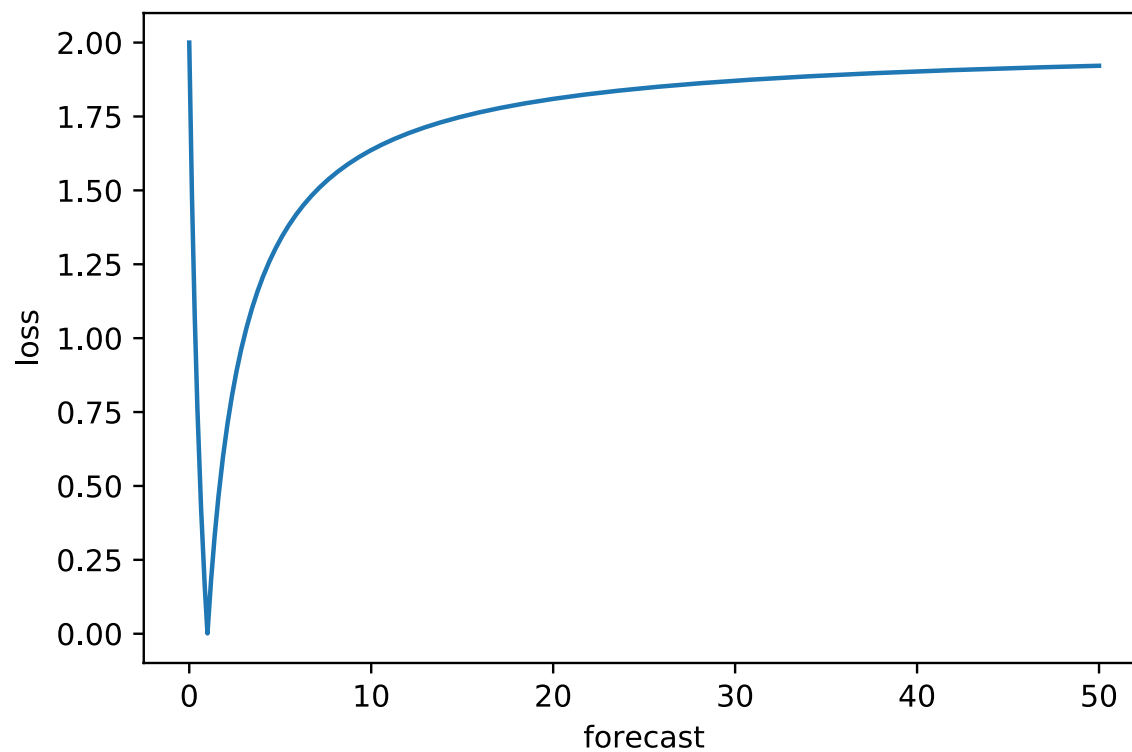
- Symmetric Mean Absolute Percentage Error (симметричный средний модуль относительной ошибки)

$$L(y, a) = \frac{|y - a|}{(|y| + |a|)/2}$$

$$Q(a, X) = \frac{100\%}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \frac{|y_i - a(x_i)|}{(|y_i| + |a(x_i)|)/2}$$

SMAPE

$$L(y, a) = \frac{|y - a|}{(|y| + |a|)/2}$$



Модель линейной классификации

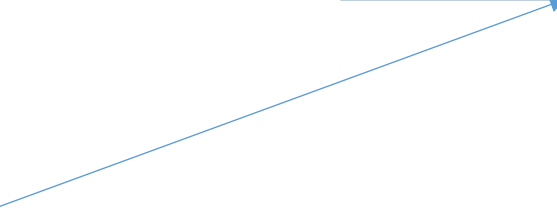
Классификация

- $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$
- -1 — отрицательный класс
- $+1$ — положительный класс
- $a(x)$ должен возвращать одно из двух чисел

Линейная регрессия

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

Вещественное
число!



Линейный классификатор

$$a(x) = \text{sign} \left(w_0 + \sum_{j=1}^d w_j x_j \right)$$

Линейный классификатор

$$a(x) = \text{sign} \left(w_0 + \sum_{j=1}^d w_j x_j \right)$$

Свободный
коэффициент

Веса

Признаки

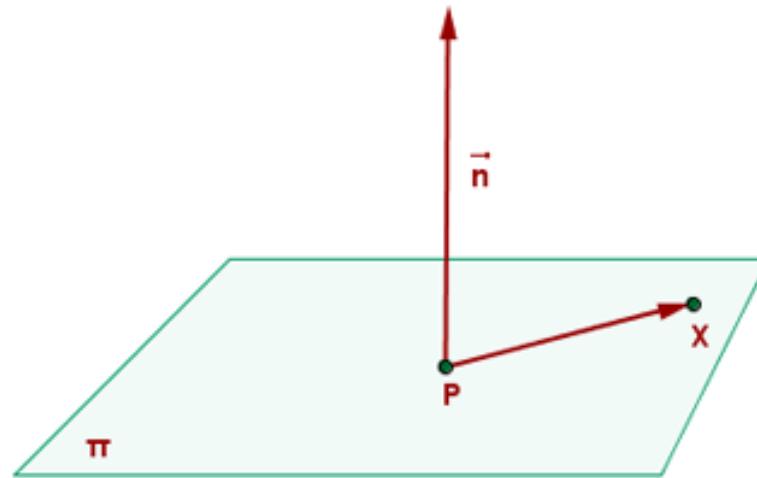
Линейный классификатор

- Будем считать, что есть единичный признак

$$a(x) = \text{sign} \sum_{j=1}^d w_j x_j = \text{sign} \langle w, x \rangle$$

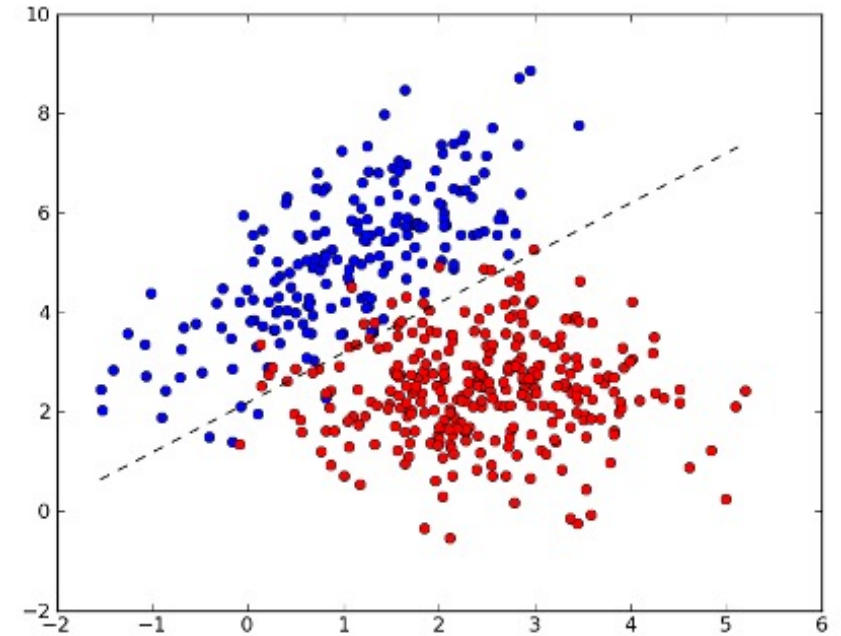
Геометрия линейного классификатора

Уравнение гиперплоскости: $\langle w, x \rangle = 0$



Геометрия линейного классификатора

- Линейный классификатор проводит гиперплоскость
- $\langle w, x \rangle < 0$ — объект «слева» от неё
- $\langle w, x \rangle > 0$ — объект «справа» от неё



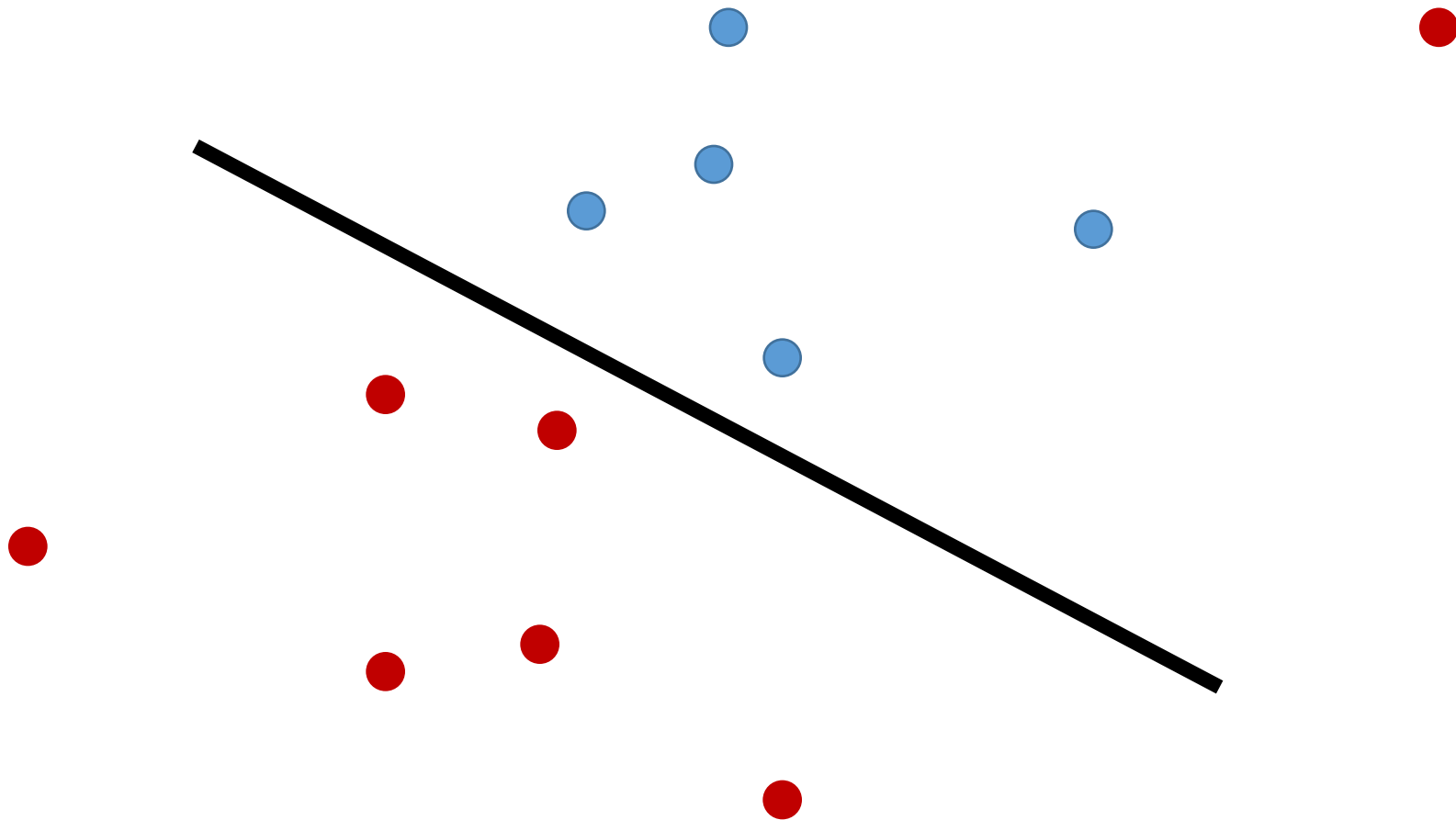
Геометрия линейного классификатора

- Расстояние от точки до гиперплоскости $\langle w, x \rangle = 0$:

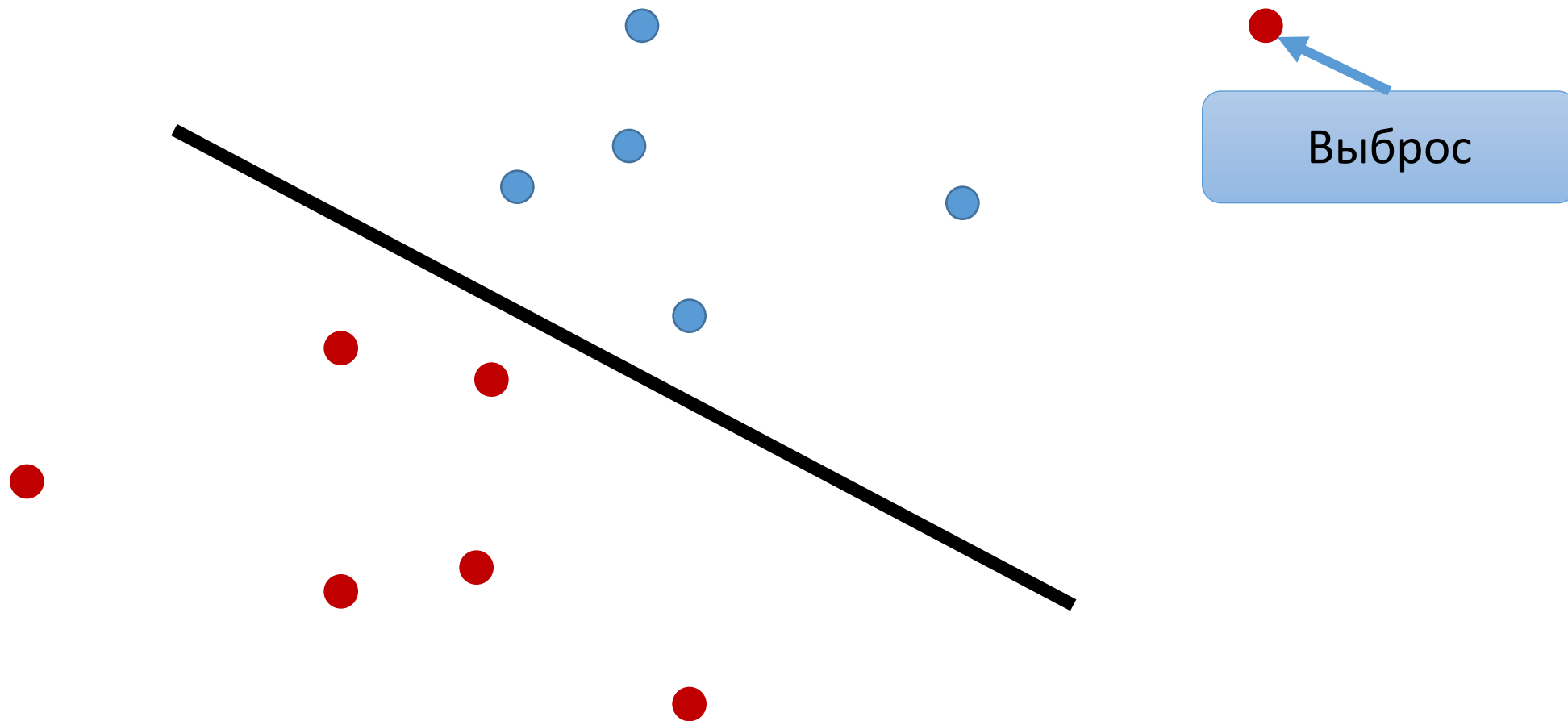
$$\frac{|\langle w, x \rangle|}{\|w\|}$$

- Чем больше $\langle w, x \rangle$, тем дальше объект от разделяющей гиперплоскости

Геометрия линейного классификатора

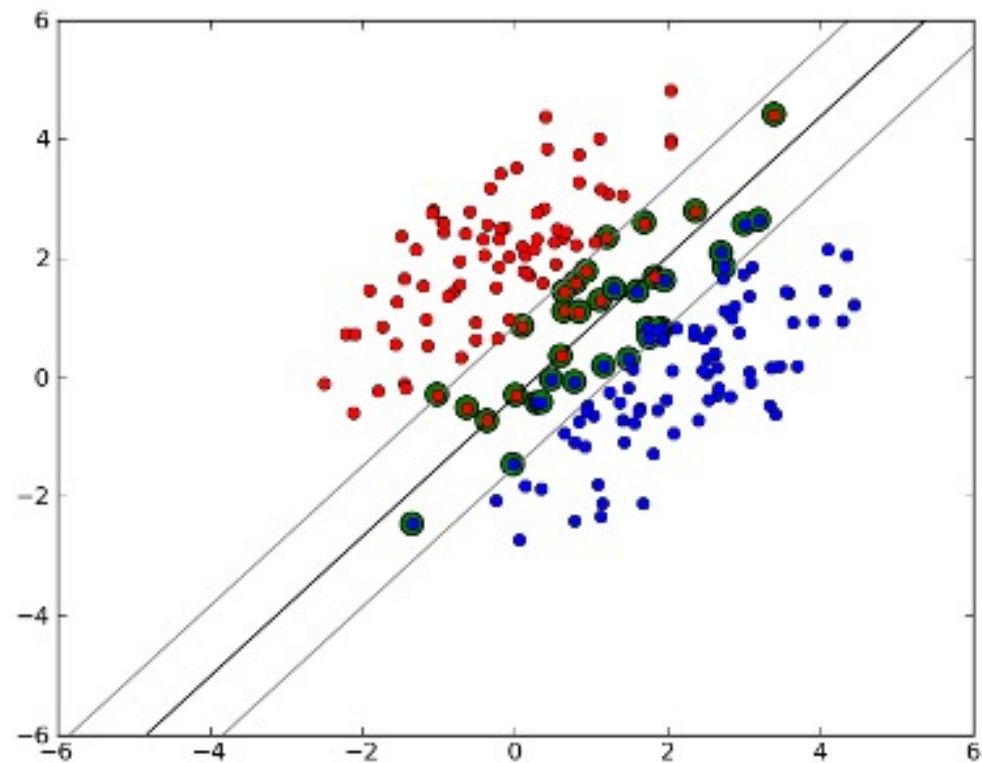


Геометрия линейного классификатора



Отступ

- $M_i = y_i \langle w, x_i \rangle$
- $M_i > 0$ — классификатор дает верный ответ
- $M_i < 0$ — классификатор ошибается
- Чем дальше отступ от нуля, тем больше уверенности



Порог

$$a(x) = \text{sign}(\langle w, x \rangle - t)$$

- t — порог классификатора
- Можно подбирать для оптимизации функции потерь, отличной от использованной при обучении

Линейный классификатор

- Линейный классификатор разделяет два класса гиперплоскостью
- Чем больше отступ по модулю, тем дальше объект от гиперплоскости
- Знак отступа говорит о корректности предсказания