

1. Метод градиентного спуска

Градиентные методы довольно часто используются для решения задач многомерной безусловной оптимизации. Пусть стоит задача найти минимум функции:

$$f(\theta) \rightarrow \min_{\theta}, \quad (1)$$

где θ – **вектор** переменных. Алгоритм метода градиентного спуска состоит в последовательном движении в направлении наискорейшего спуска, то есть в направлении антиградиента $-\nabla_{\theta} f(\theta)$.

Метод градиентного спуска

Вход: функция $f(\theta)$, начальное приближение θ^0 , шаг градиентного спуска η , число итераций n , ϵ .

1. Определить $\nabla_{\theta} f$.
2. На каждом шаге $t = 1, 2, \dots, n$:

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} - \eta \nabla_{\theta} f(\theta^{(t)}).$$

Возможные критерии останова:

- a. $\|\theta^{(t+1)} - \theta^{(t)}\| \leq \epsilon$,
- b. $\|f(\theta^{(t+1)}) - f(\theta^{(t)})\| \leq \epsilon$.

Если взять чересчур большим шаг градиентного спуска, то есть риск «перескочить» минимум. Чтобы этого избежать на каждой итерации алгоритма шаг градиентного спуска можно менять:

1. Обратно пропорционально номеру итерации:

$$\begin{aligned} \theta^{(t+1)} &= \theta^{(t)} - \eta^{(t)} \nabla_{\theta} f(\theta^{(t)}) \\ \eta^{(t+1)} &= \frac{\eta^{(0)}}{t}. \end{aligned}$$

2. Недостатком первого способа является то, что с увеличением номера итерации дальнейшие шаги будут чересчур маленькими, и есть риск не дойти до минимума. Чтобы этого избежать, можно использовать экспоненциально затухающий шаг:

$$\eta^{(t+1)} = \eta^{(0)} e^{-\frac{1-t}{t}}.$$

Выбирать шаг градиентного спуска можно таким образом, чтобы значение функции $f(\theta^{(t+1)} - \eta^{(t+1)} \nabla_{\theta} f(\theta^{(t+1)}))$ было наименьшим. Для нахождения оптимального шага $\eta^{(t+1)}$ используются любые методы одномерной оптимизации. Полученный алгоритм имеет название **метод наискорейшего спуска**.

Задание 1

1. Сгенерировать 1000 точек по следующему правилу:

$$y = \cos(1.5 \pi x) + \mathcal{N}(0, 1).$$

2. Методом градиентного спуска определить параметры θ в модели полиномиальной регрессии.
3. Отобразить на графике изменения значения функционала качества с номером итерации.
4. Реализовать метод кросс-валидации для оценки качества полученной модели.
5. Определить степень полинома, при которой достигается наилучшее качество модели на кросс-валидации.

6. Полученную функцию отобразить на графике.

7. Дополнительно. Реализовать метод наискорейшего спуска. Для этого необходимо реализовать один из методов одномерной оптимизации, например, метод золотого сечения.