Основы машинного обучения

Лекция 6

Линейная регрессия и градиентный спуск

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2026

Градиентный спуск

1. Начальное приближение: w^0

2. Повторять:

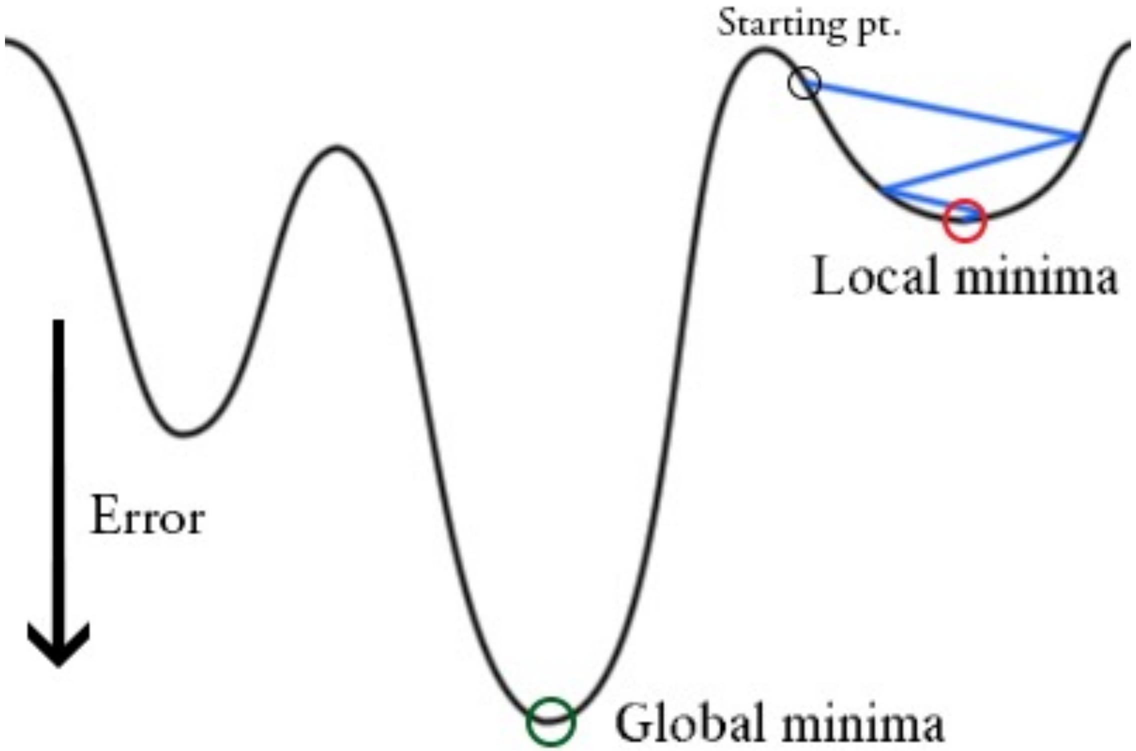
$$w^t = w^{t-1} - \eta \, \nabla Q(w^{t-1})$$

3. Останавливаемся, если

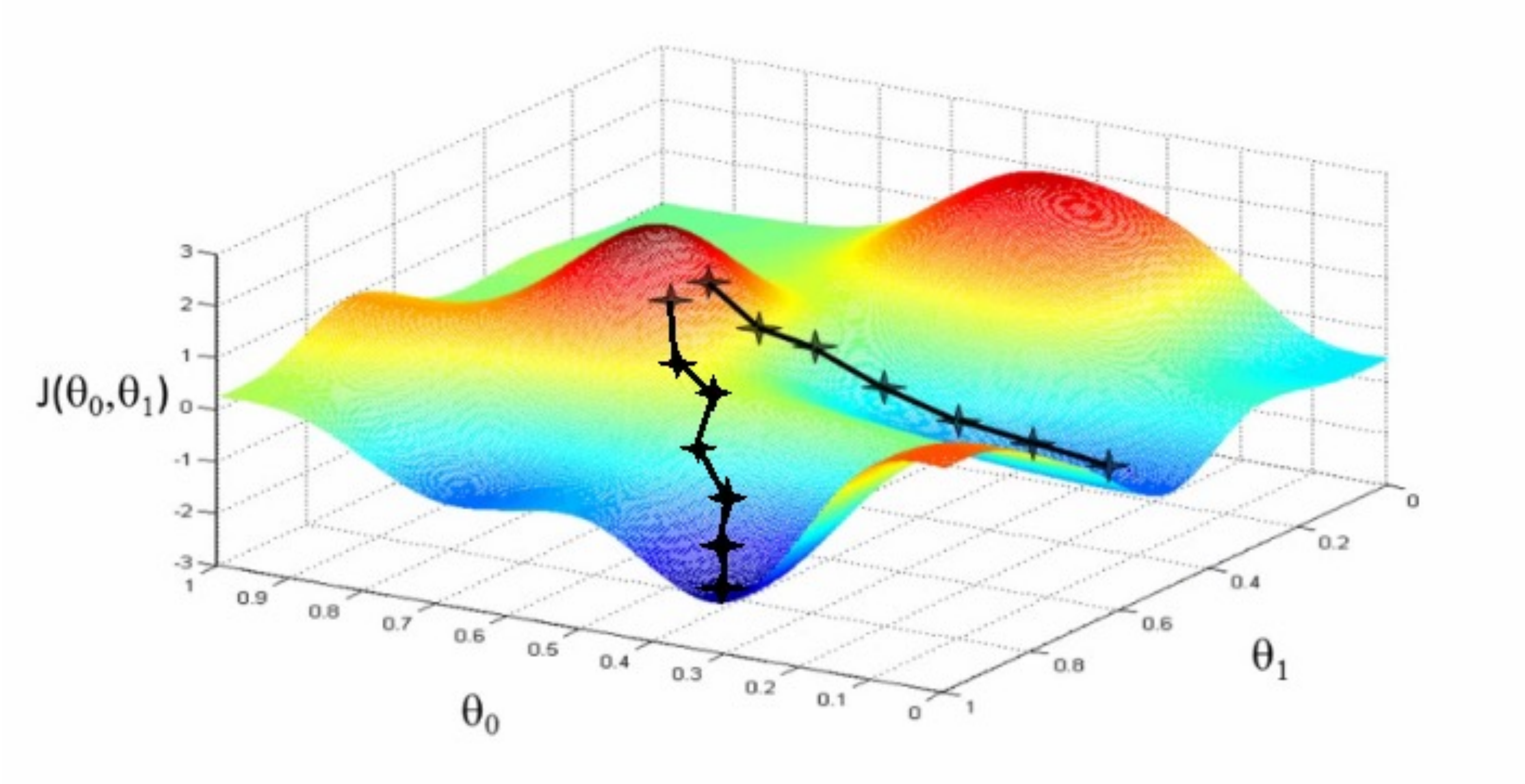
$$\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$$

Локальные минимумы

- Градиентный спуск находит только локальные минимумы



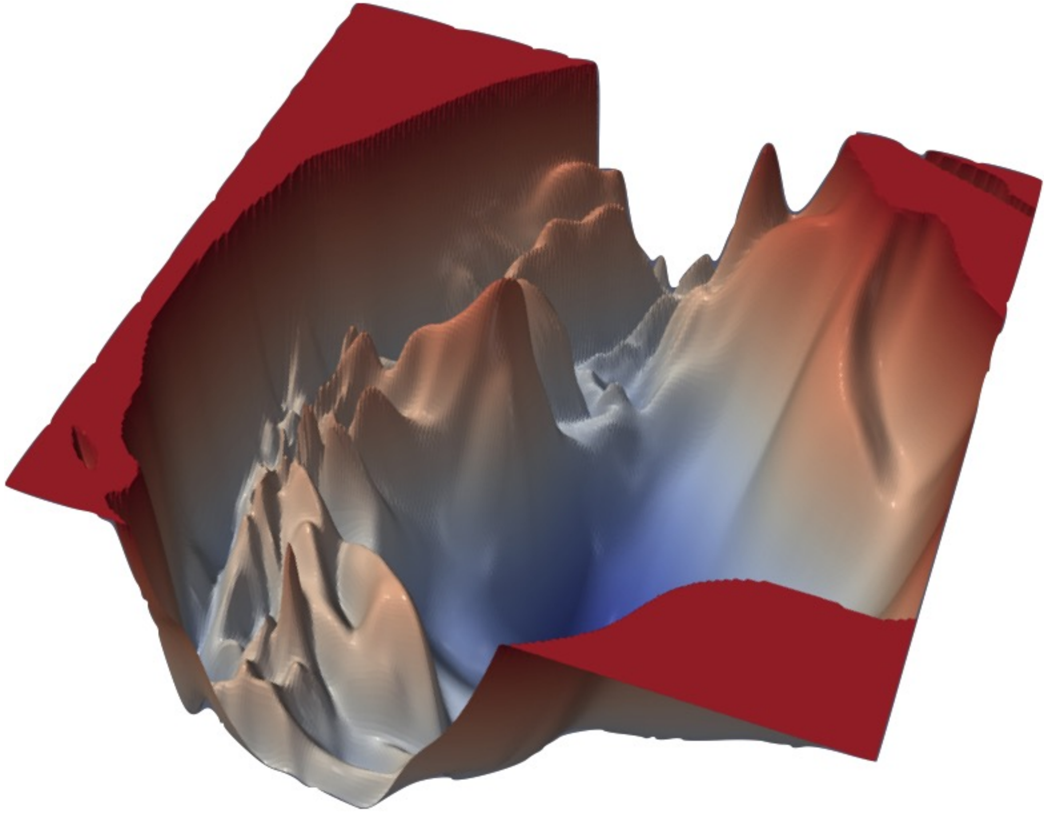
Локальные минимумы



Локальные минимумы

- Градиентный спуск находит **локальный минимум**
- Мультистарт — запуск градиентного спуска из разных начальных точек
- Может улучшить результат

Локальные минимумы



Длина шага

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

- Позволяет контролировать скорость обучения

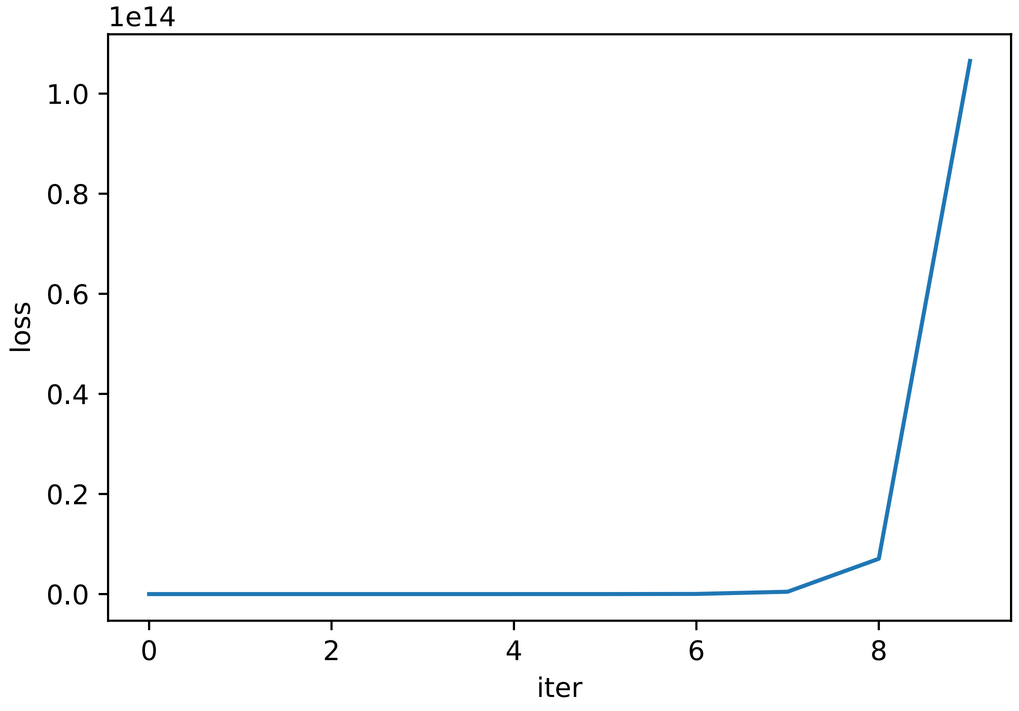
Длина шага

```
[[  0.8194022  -11.97609413 -34.41655678   0.98167246 -34.14405489]
 [ -2.83614512  17.19489715   3.29562399  63.8054227   39.70301275]
 [  3.10906179  11.26049837   0.51404712  22.64032379 -28.62078735]
 ...,
 [ -3.61976507  17.63933655  31.65890573  22.5124188  -75.6386039 ]
 [ -1.98472285   3.98588887  29.6135414  -11.11816     33.98746403]
 [ -3.34136103 -12.81955782 -19.5542601   12.62435442  50.24876879]]
```

Длина шага

Градиент на первом шаге:

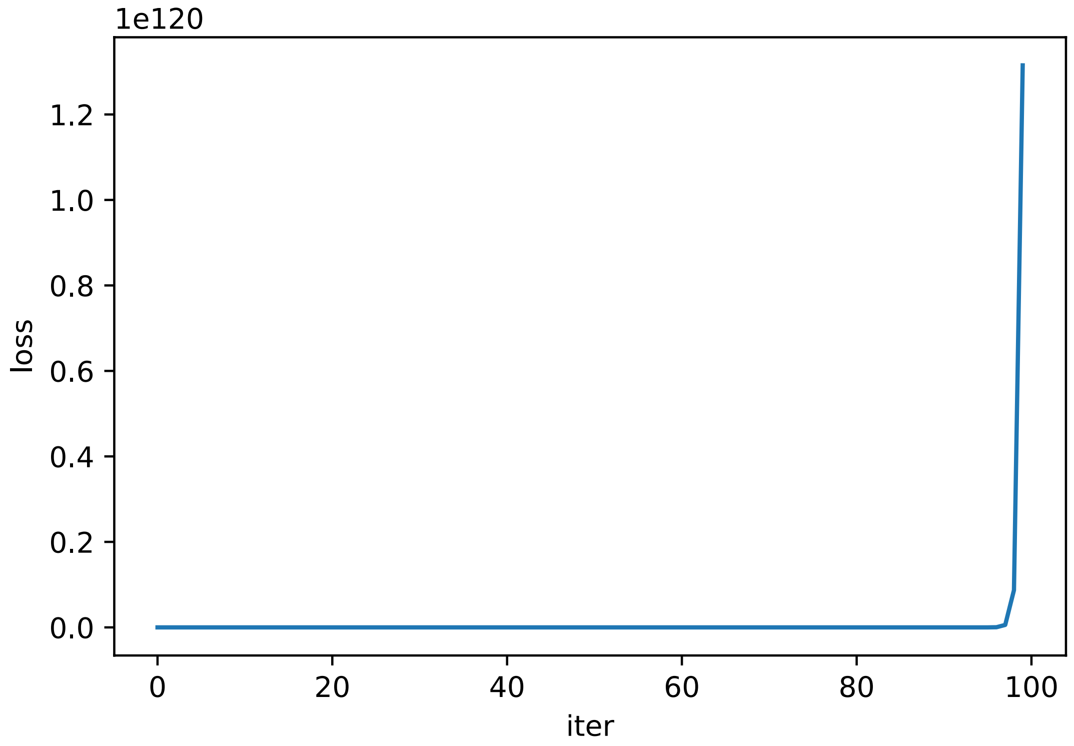
[26.52, 564.80, 682.90, 5097.71, 12110.87]



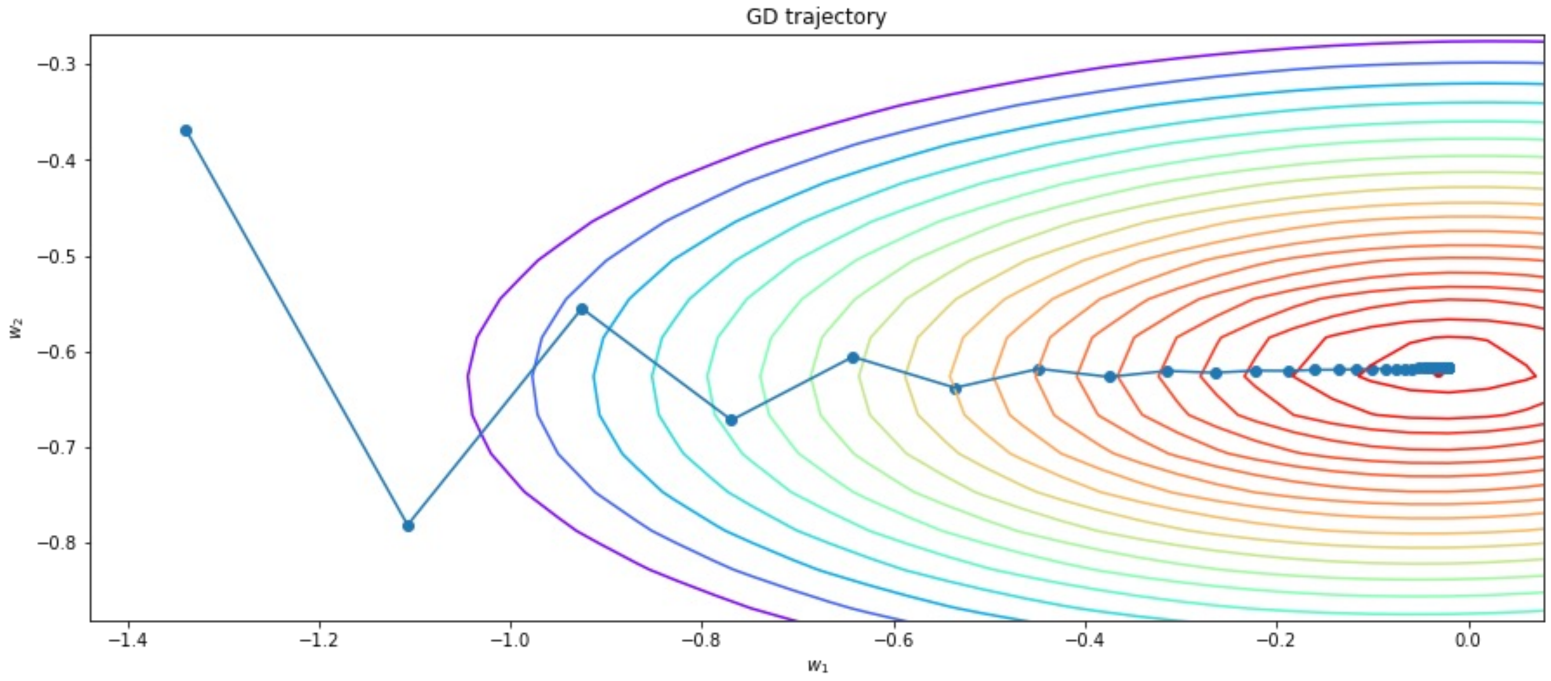
Длина шага

Градиент на первом шаге:

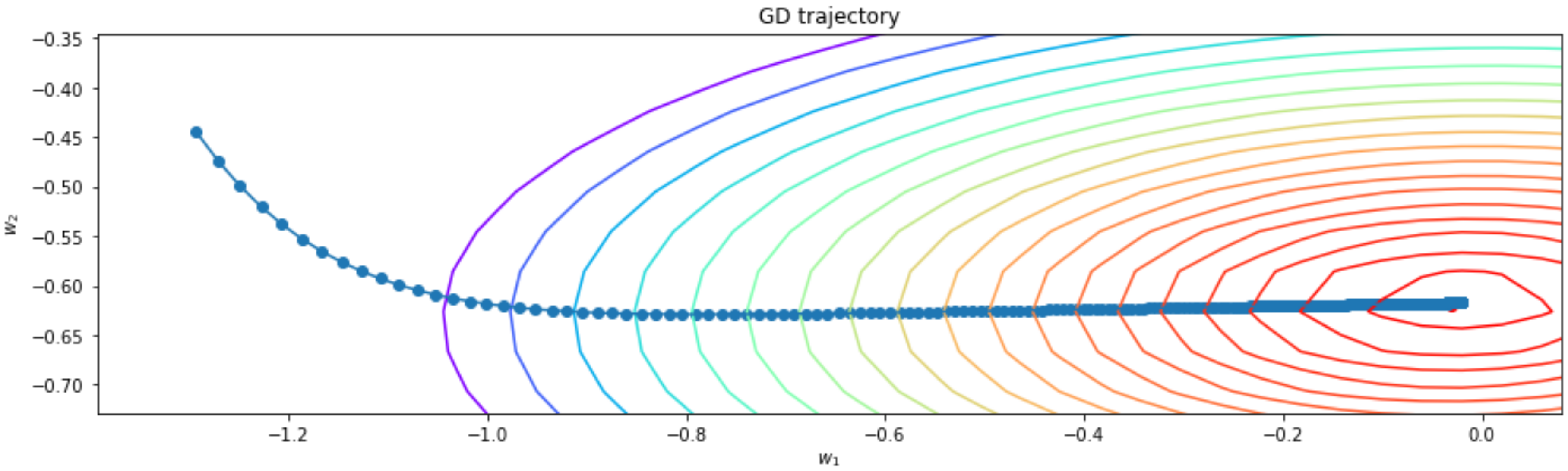
[26.52, 564.80, 682.90, 5097.71, 12110.87]



Длина шага



Длина шага



GD trajectory
−0.35
−0.40
−0.45
−0.50
−0.55
−0.60
−0.65
−0.70
w_2
−1.2
−1.0
−0.8
−0.6
−0.4
−0.2
0.0
w_1

Длина шага

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

- Позволяет контролировать скорость обучения
- Если сделать длину шага недостаточно маленькой, градиентный спуск может разойтись
- Длина шага — параметр, который нужно подбирать

Переменная длина шага

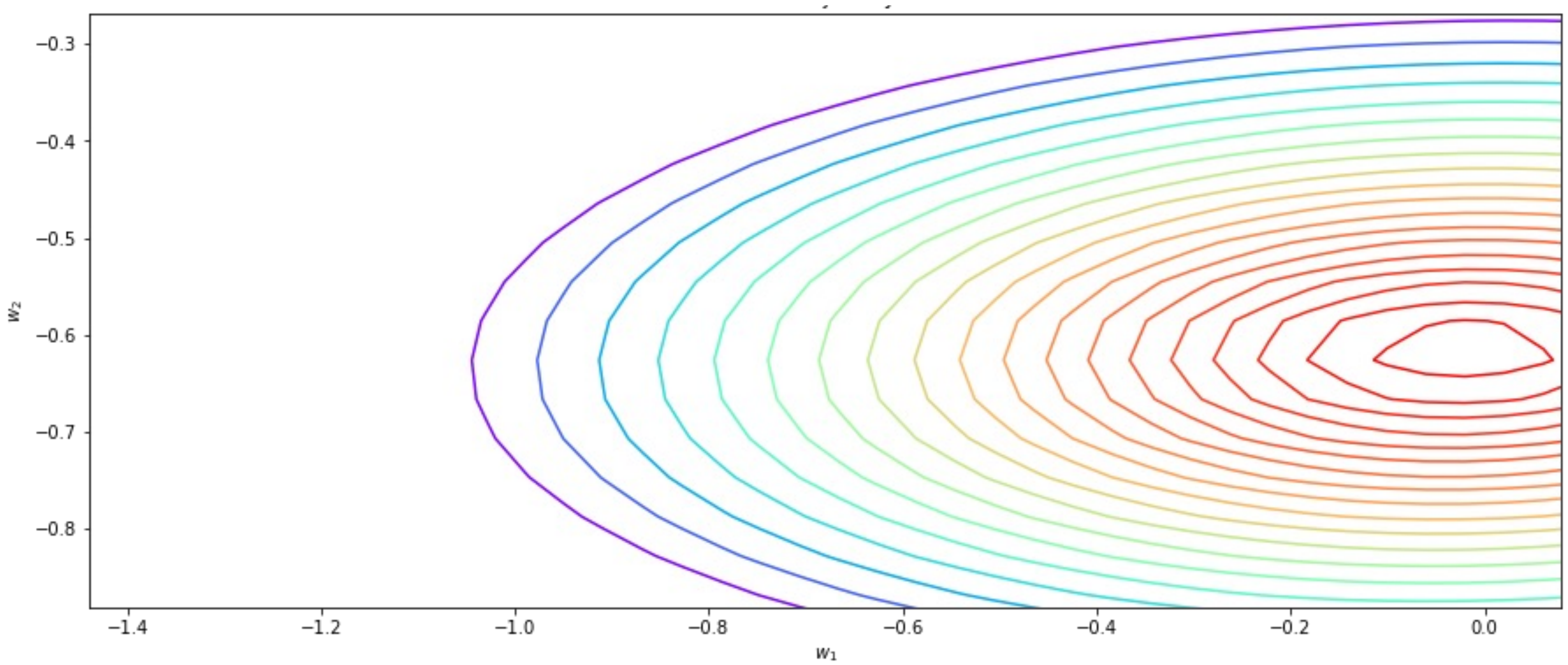
$$w^t = w^{t-1} - \eta_t \nabla Q(w^{t-1})$$

- Длину шага можно менять в зависимости от шага
- Например: $\eta_t = \frac{1}{t}$
- Ещё вариант: $\eta_t = \lambda \left(\frac{s}{s+t}\right)^p$

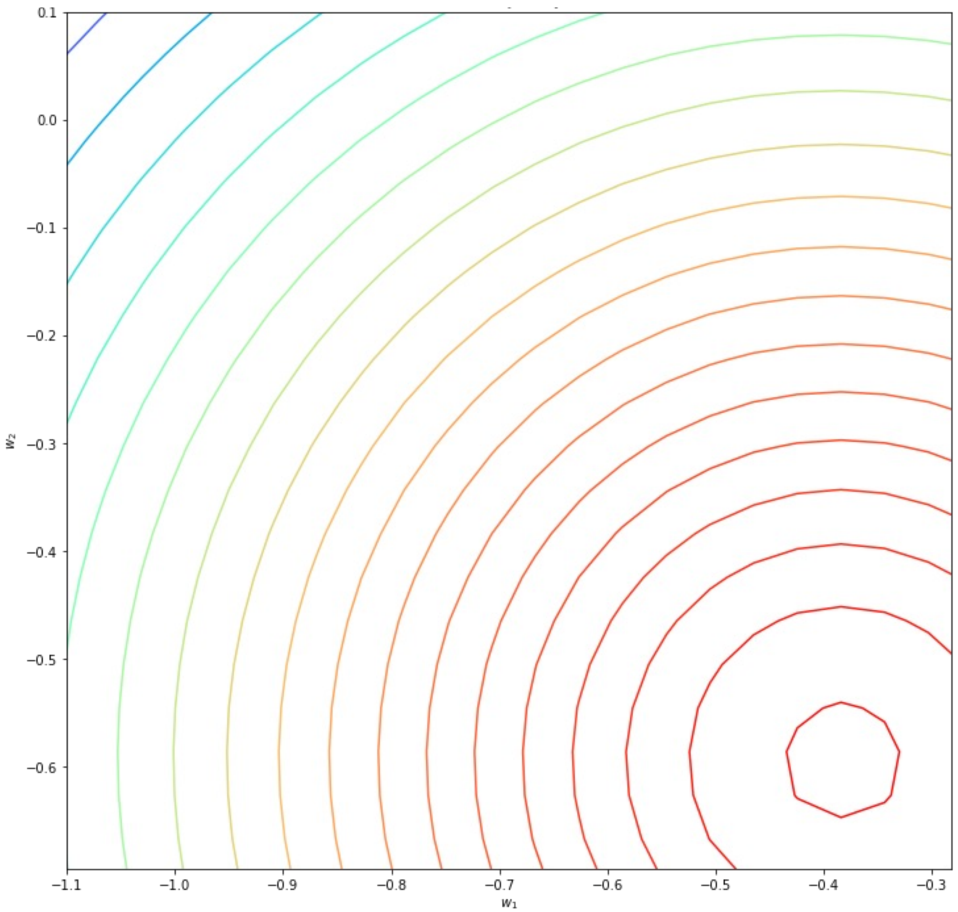
Масштабирование признаков

```
[[  0.8194022  -11.97609413 -34.41655678   0.98167246 -34.14405489]
 [ -2.83614512  17.19489715   3.29562399  63.8054227   39.70301275]
 [  3.10906179  11.26049837   0.51404712  22.64032379 -28.62078735]
 ...,
 [ -3.61976507  17.63933655  31.65890573  22.5124188  -75.6386039 ]
 [ -1.98472285   3.98588887  29.6135414  -11.11816     33.98746403]
 [ -3.34136103 -12.81955782 -19.5542601   12.62435442  50.24876879]]
```

Масштабирование признаков



Масштабирование признаков



Масштабирование признаков

- Вычтем из каждого значения признака среднее и поделим на стандартное отклонение:

$$x_{ij} := \frac{x_{ij} - \mu_j}{\sigma_j}$$

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

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

- Градиент:

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

- Может, оценить градиент одним слагаемым?

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

Стохастический градиентный спуск

1. Начальное приближение: w^0

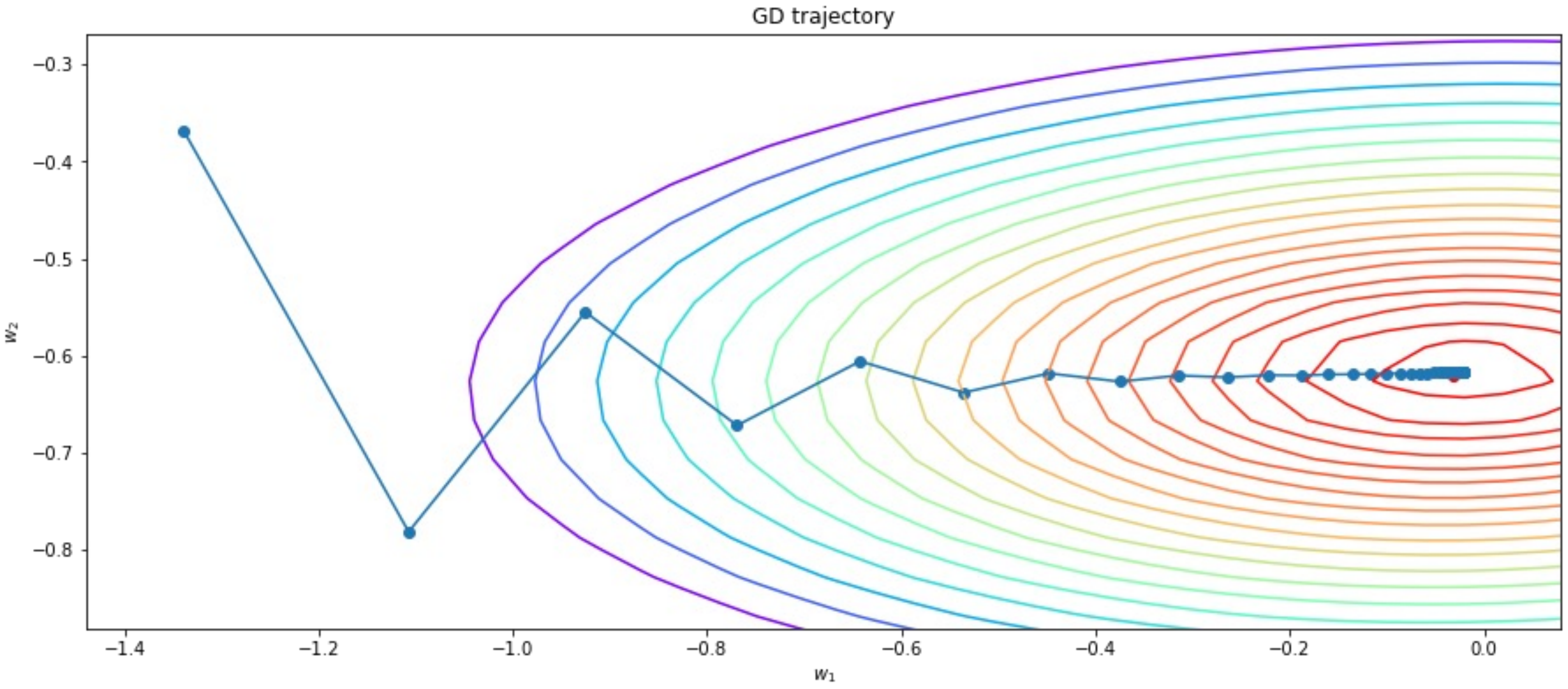
2. Повторять, каждый раз выбирая случайный объект i_t:

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

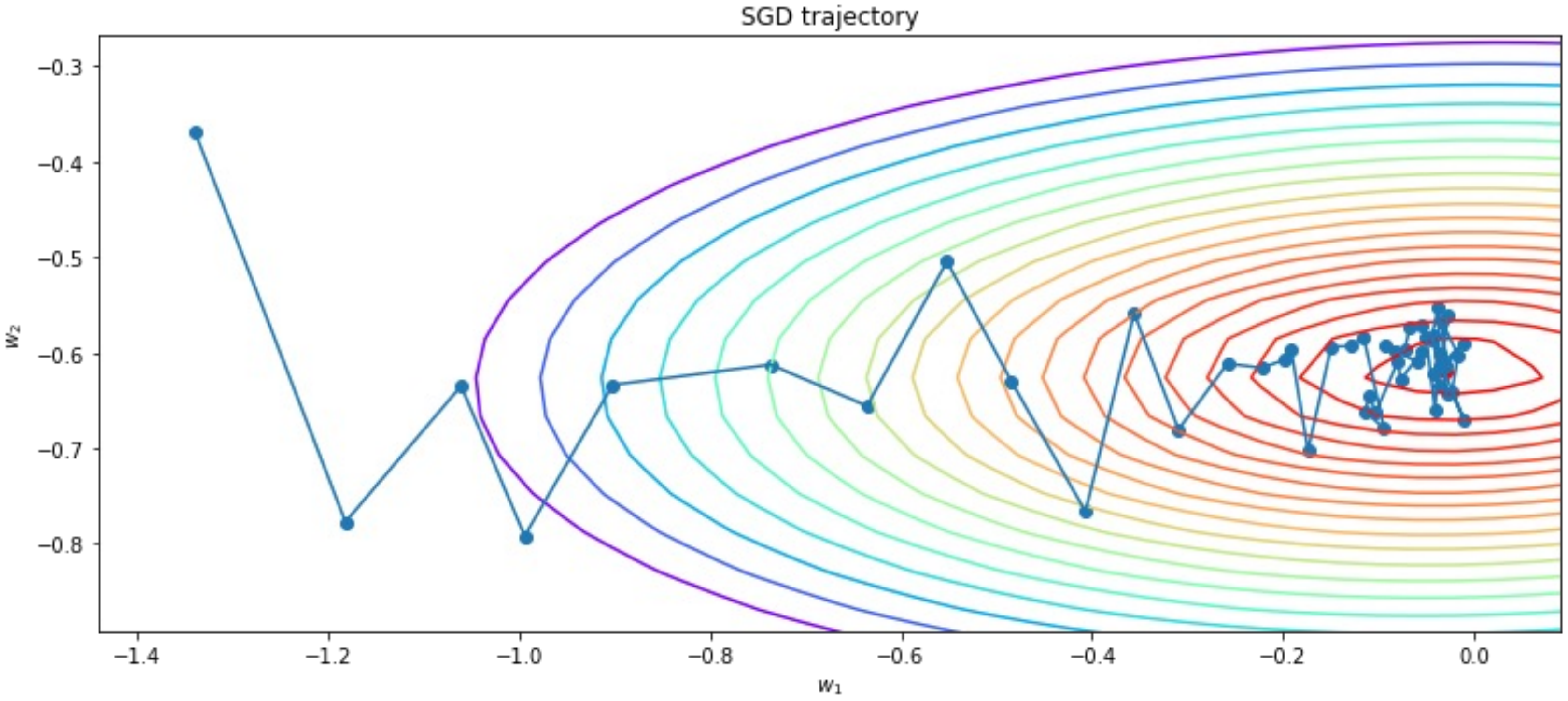
3. Останавливаемся, если

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

Градиентный спуск



Стохастический градиентный спуск



Стохастический градиентный спуск

1. Начальное приближение: w^0

2. Повторять, каждый раз выбирая случайный объект i_t:

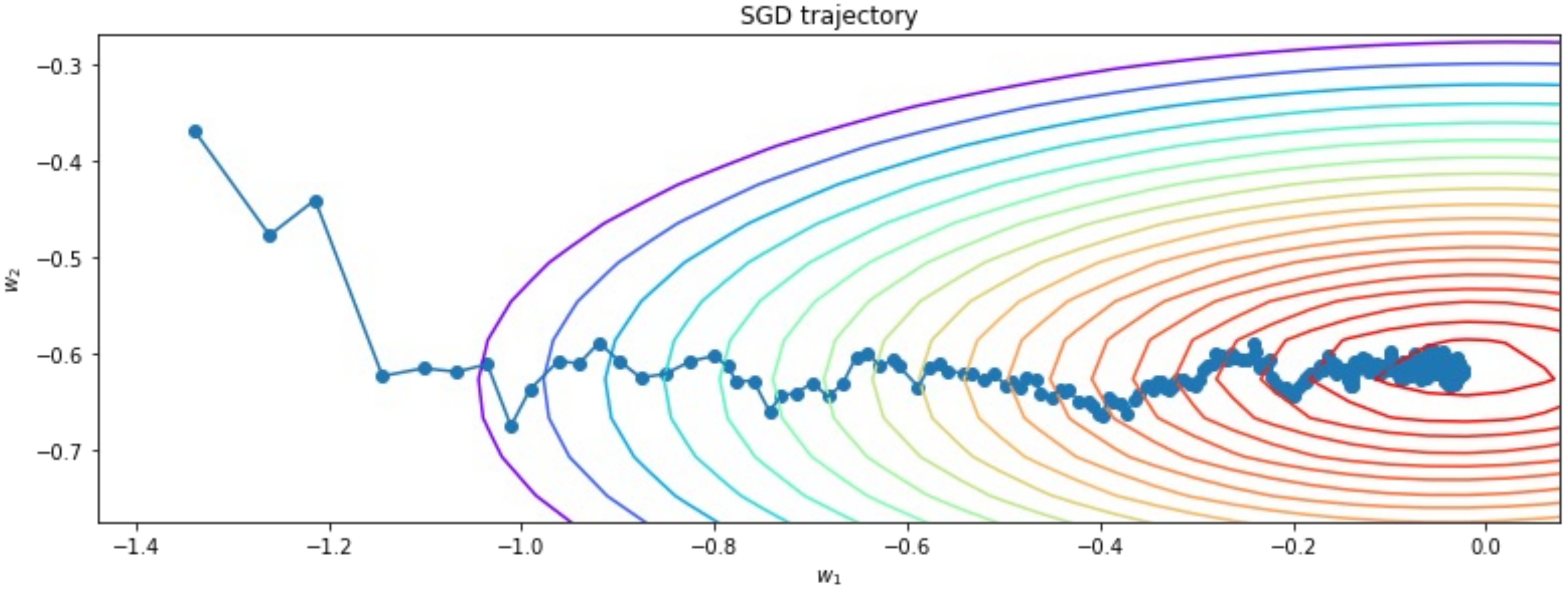
$$w^t = w^{t-1} - \eta_t \nabla L\left(y_{i_t}, a(x_{i_t})\right)$$

3. Останавливаемся, если

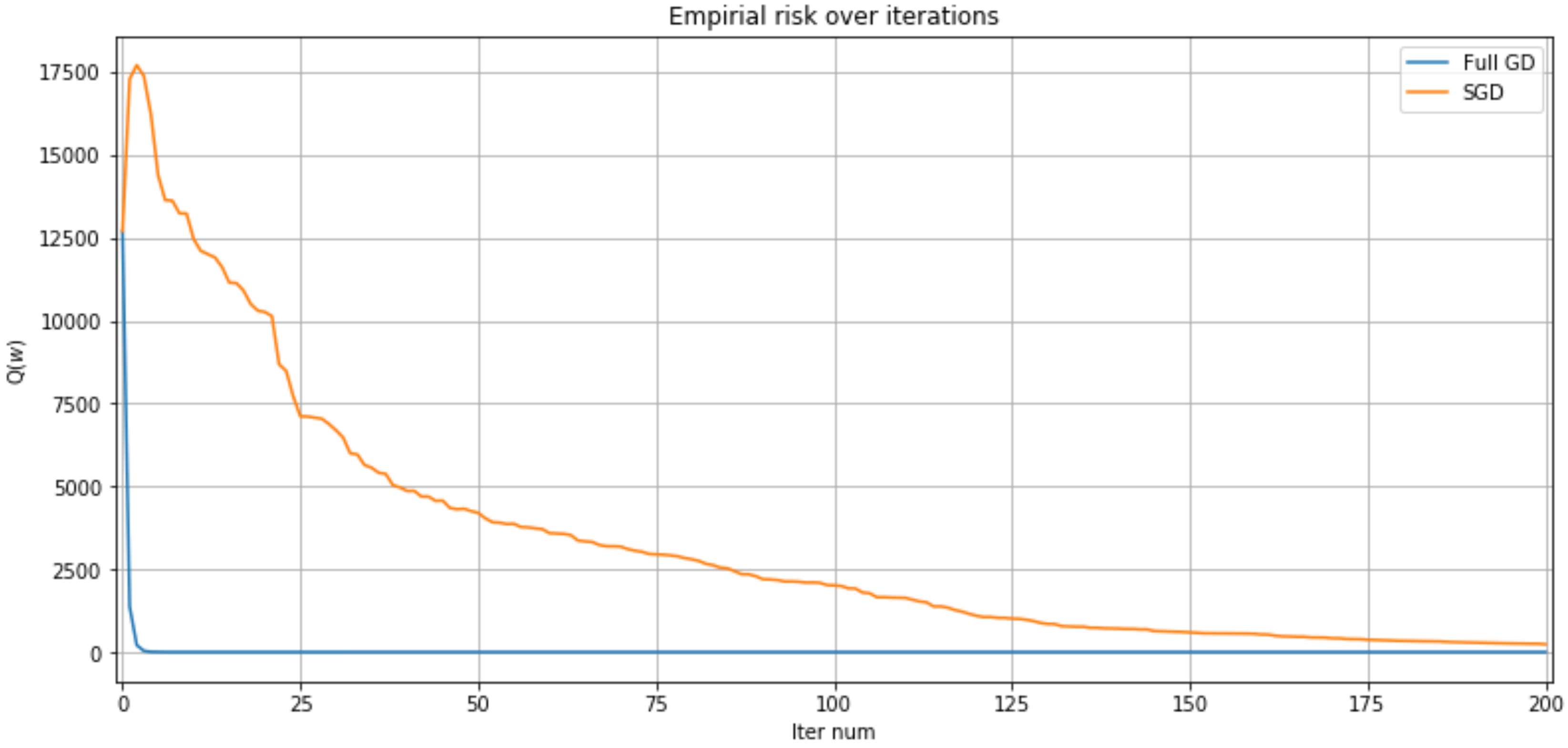
$$\|w^t - w^{t-1}\| < \varepsilon$$

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

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

Функции потерь в задачах регрессии

Среднеквадратичная ошибка

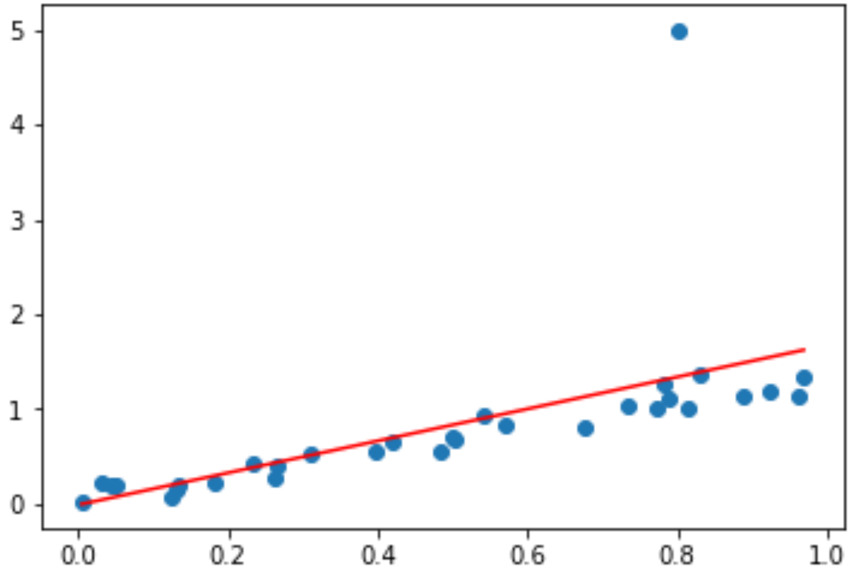
- Частый выбор — квадратичная функция потерь

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

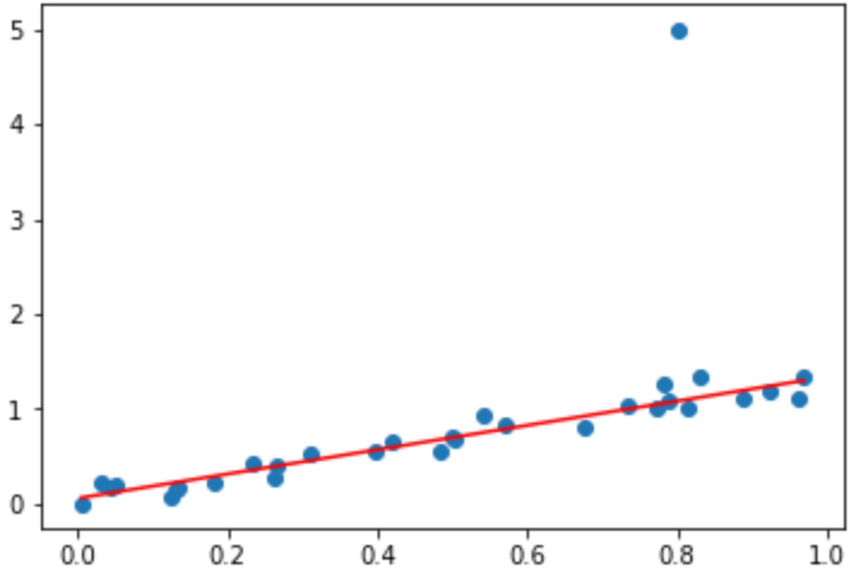
- Функционал ошибки — среднеквадратичная ошибка (mean squared error, MSE)

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

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

$$MSE \approx 1164$$

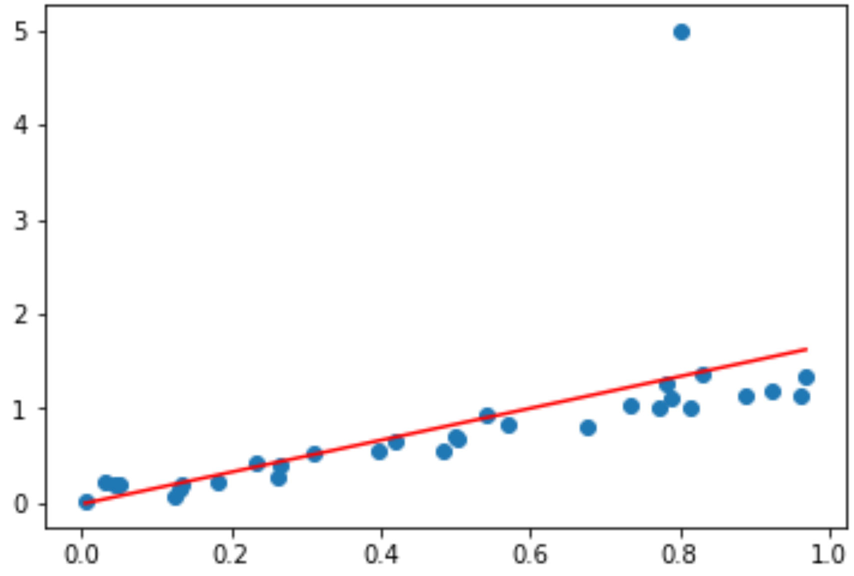
Средняя абсолютная ошибка

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

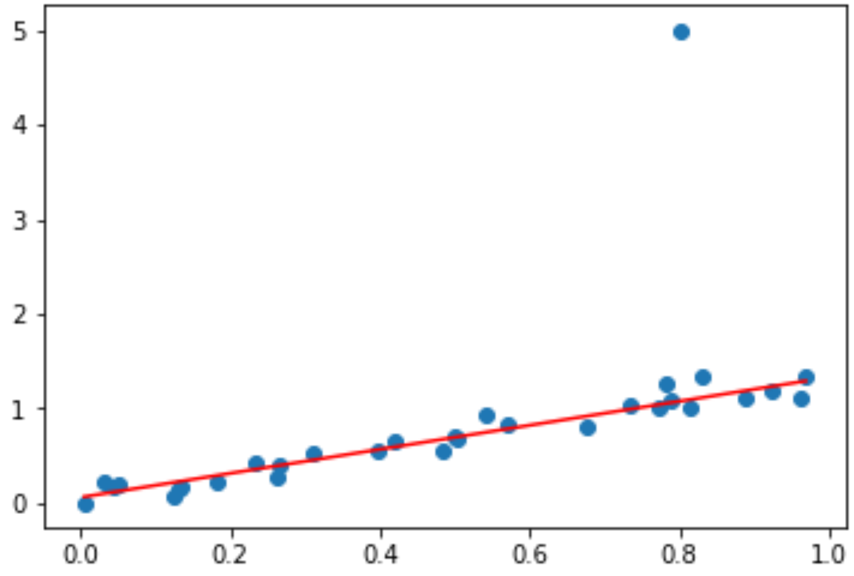
- Функционал ошибки — средняя абсолютная ошибка (mean absolute error, MAE)

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

Выбросы



Обучение на MSE



Обучение на MAE

Выбросы

$a(x)$	y	$\lvert a(x) - y\rvert$
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

$\boldsymbol{a(x)}$	$\boldsymbol{y}$	$\boldsymbol{\lvert a(x) - y \rvert}$
4	1	3
5	2	3
6	3	3
7	4	3
8	5	3
10	100	90
10	7	3

$$MAE \approx 15.43$$