Основы машинного обучения

Лекция 4

Линейная регрессия

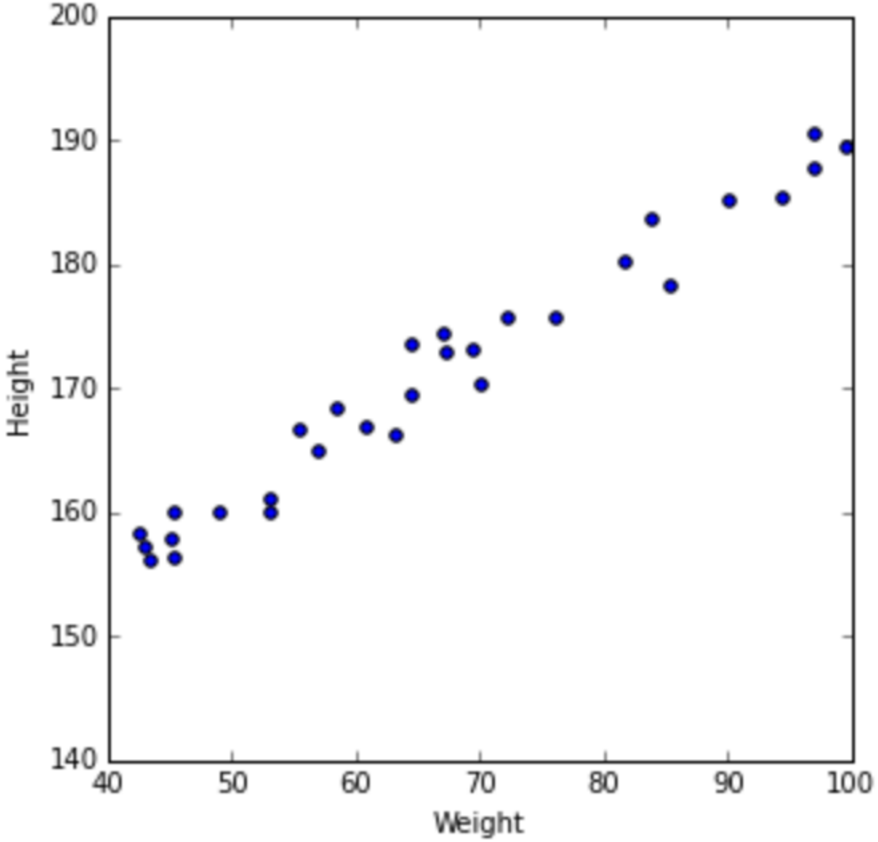
Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

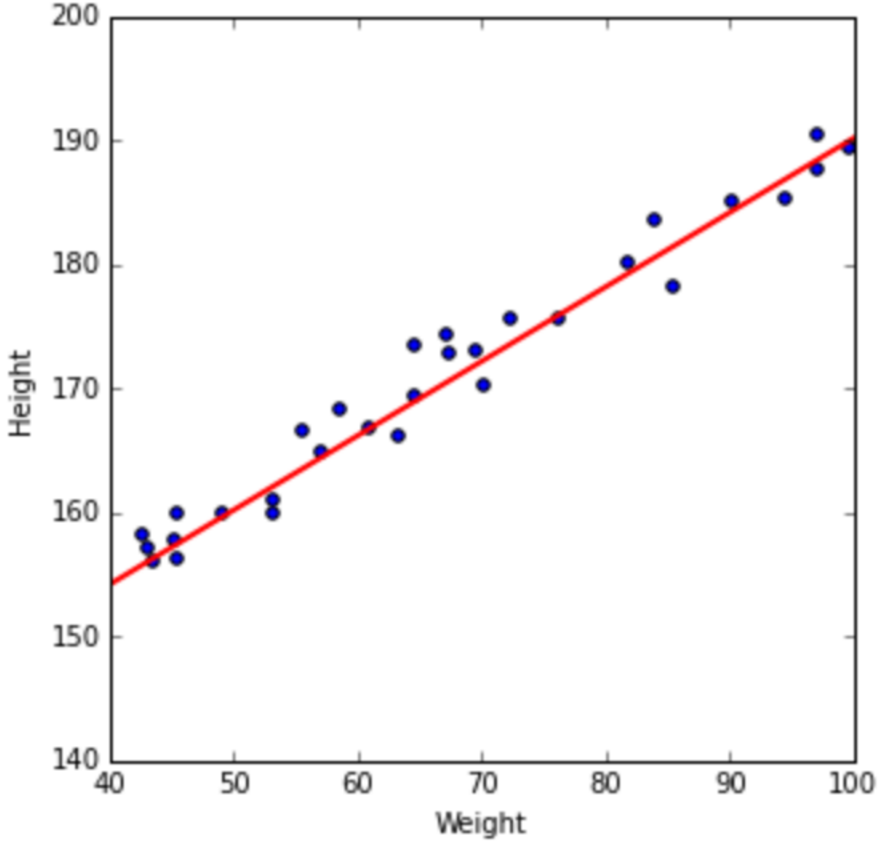
НИУ ВШЭ, 2026

Линейная регрессия

Парная регрессия



Парная регрессия



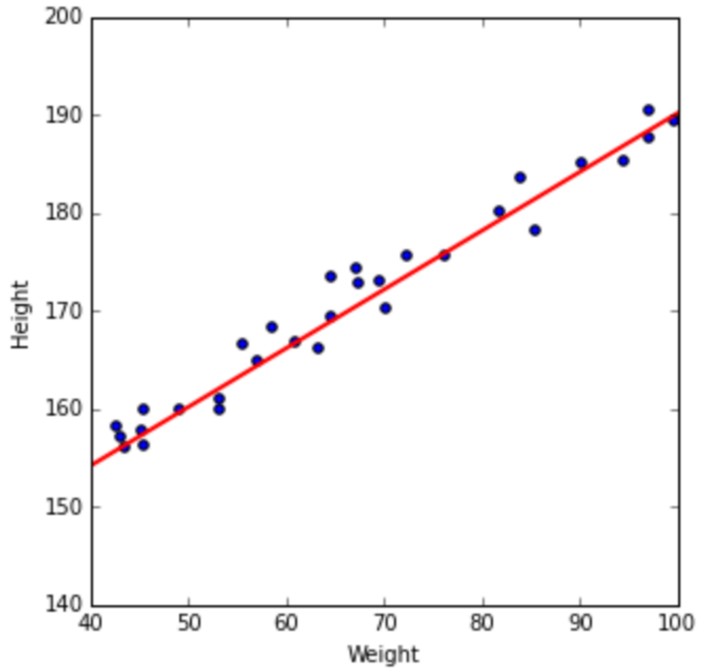
Парная регрессия

- Простейший случай: один признак
- Модель: $a(x) = w_1\, x + w_0$
- Два параметра: w_1 и w_0
- w_1 — тангенс угла наклона
- w_0 — где прямая пересекает ось ординат

Почему модель *линейная*?

$$a(x) = 2\,x + 1$$

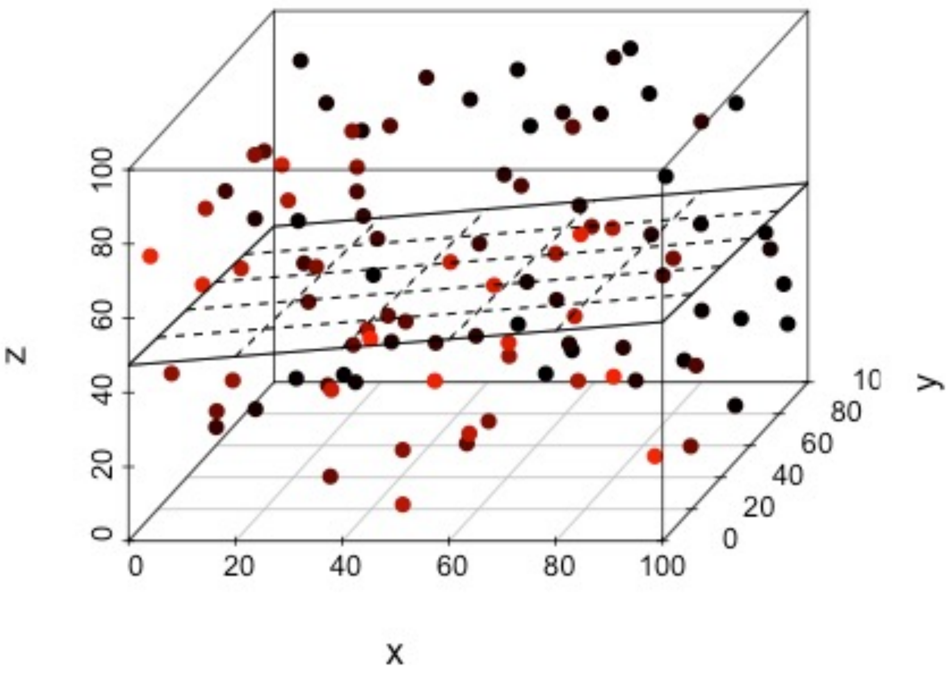
- $x = 1, a(x) = 3$
- $x = 2, a(x) = 5$
- $x = 10, a(x) = 21$
- $x = 20, a(x) = 41$



Два признака

- Чуть более сложный случай: два признака
- Модель: $a(x) = w_0 + w_1\, x_1 + w_2 x_2$
- Три параметра

Два признака



Много признаков

- Общий случай: d признаков
- Модель

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \dots + w_d x_d$$

- Количество параметров: $d + 1$

Много признаков

- Общий случай: d признаков
- Модель

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d$$

Свободный коэффициент/сдвиг/bias

Веса/коэффициенты

- Количество параметров: $d + 1$

Много признаков

Запишем через скалярное произведение:

$$a(x) = w_0 + w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d =$$
$$= w_0 + \langle w, x \rangle$$

Будем считать, что есть признак, всегда равный единице:

$$a(x) = w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d =$$
$$= w_1 * 1 + w_2 x_2 + \cdots + w_d x_d =$$
$$= \langle w, x \rangle$$

Применимость линейной регрессии

Модель линейной регрессии

$$a(x) = w_1 x_1 + \cdots + w_d x_d = \langle w, x \rangle$$

- Нет гарантий, что целевая переменная именно так зависит от признаков
- Надо формировать признаки так, чтобы модель подходила

Предсказание стоимости квартиры

- Признаки: площадь, район, расстояние до метро
- Целевая переменная: рыночная стоимость квартиры
- Линейная модель:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

- За каждый квадратный метр добавляем w_1 к прогнозу

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$
$$+ w_2 * (\text{район})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

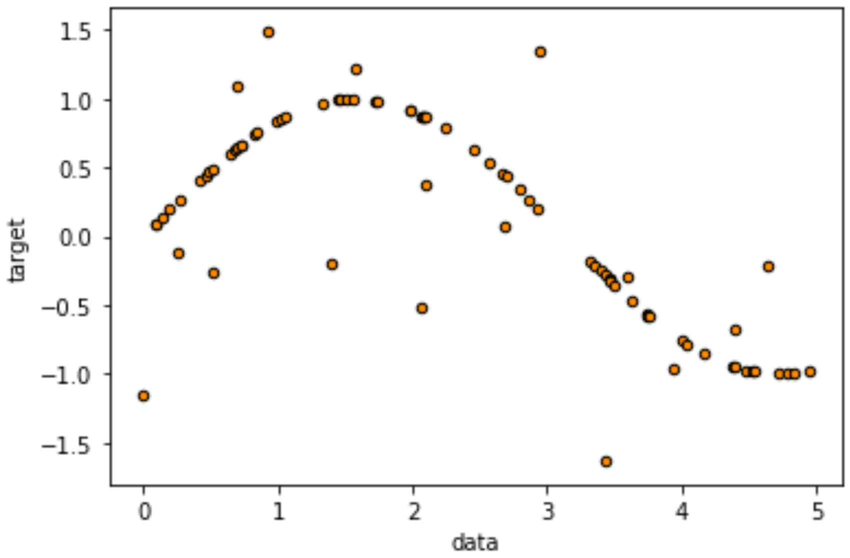
- Что-то странное

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$



Кодирование категориальных признаков

- Значения признака «район»: $U = \{u_1, \dots, u_m\}$
- Новые признаки вместо x_j: $[x_j = u_1], \dots, [x_j = u_m]$
- One-hot кодирование

Кодирование категориальных признаков

Район
ЦАО
ЮАО
ЦАО
САО
ЮАО

ЦАО	**ЮАО**	**САО**
1	0	0
0	1	0
1	0	0
0	0	1
0	1	0

Кодирование категориальных признаков

Район
ЦАО
ЮАО
ЦАО
САО
ЮАО

ЦАО	ЮАО	САО
1	0	0
0	1	0
1	0	0
0	0	1
0	1	0

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{квартира в ЦАО?})$$

$$+ w_3 * (\text{квартира в ЮАО?})$$

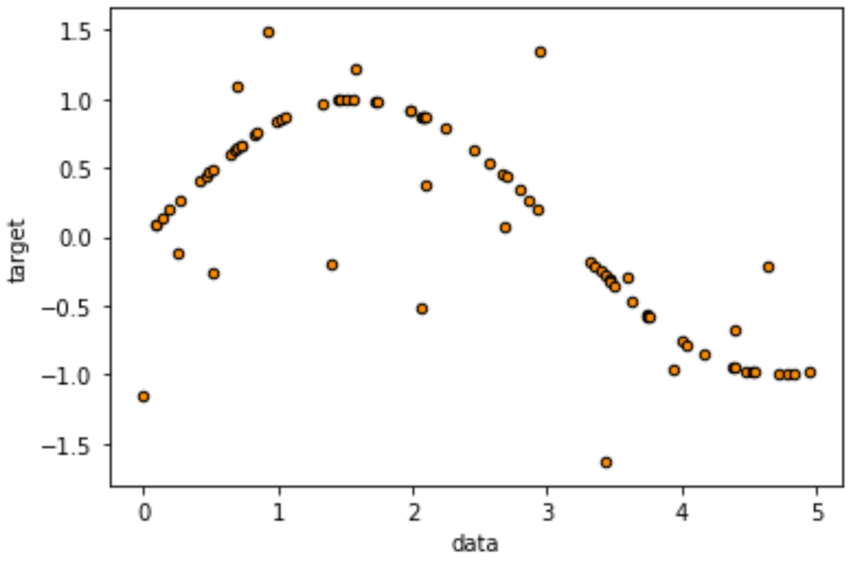
$$+ w_4 * (\text{квартира в САО?})$$

Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

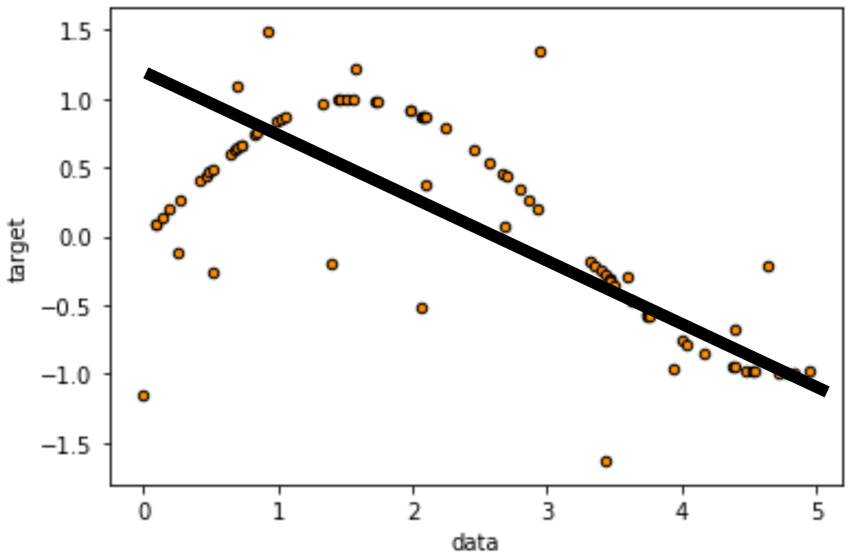


Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

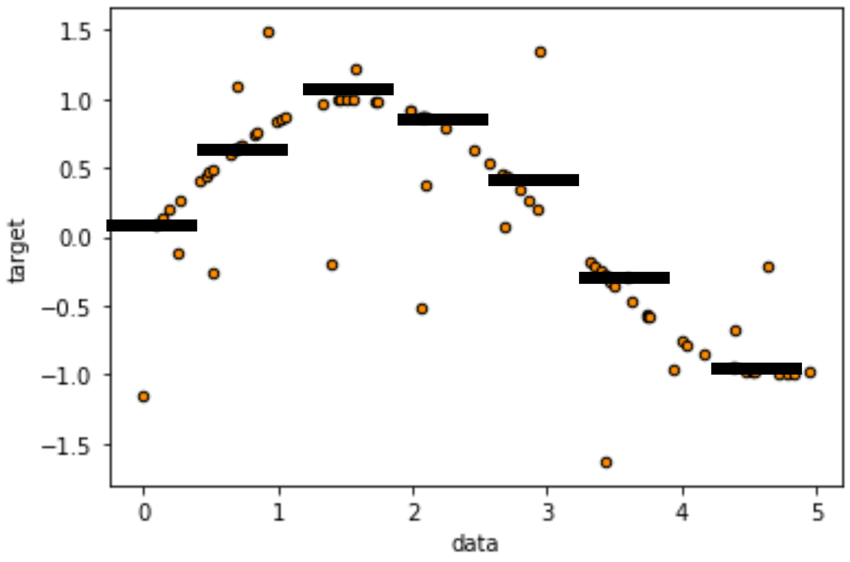


Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро})$$

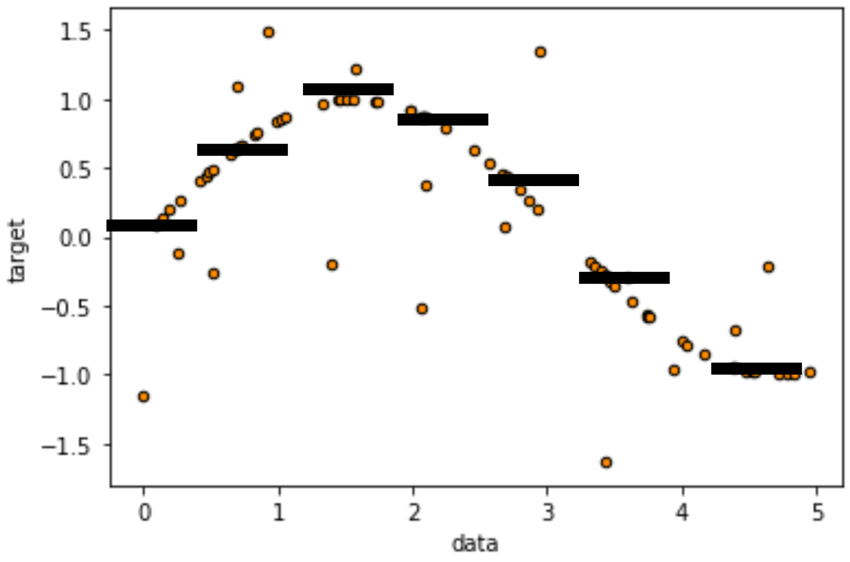


Предсказание стоимости квартиры

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь})$$

$$+ w_2 * (\text{район})$$

$$+ w_3 * [t_0 \leq x_3 < t_1] + \dots + w_{3+n}[t_{n-1} \leq x_3 < t_n]$$



Нелинейные признаки

- Линейная модель с полиномиальными признаками:

$$a(x) = w_0 + w_1 * (\text{площадь}) + w_2 * (\text{этаж})$$
$$+ w_3 * (\text{расстояние до метро}) + w_4 * (\text{площадь})^2$$
$$+ w_5 * (\text{этаж})^2 + w_6 * (\text{расстояние до метро})^2$$
$$+ w_7 * (\text{площадь}) * (\text{этаж}) + \cdots$$

Нелинейные признаки

- Есть и другие нелинейности:
  - $\log(\text{площадь})$
  - $\sin(\text{площадь})$
  - $\sqrt{\text{площадь}}$
  - …

Линейные модели

- Модель линейной регрессии хороша, если признаки сделаны специально под неё
- Пример: one-hot кодирование категориальных признаков или бинаризация числовых признаков

Линейная регрессия в векторном виде

Модель линейной регрессии

$$a(x) = \langle w, x \rangle$$

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

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

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{\ell \times d}$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$\begin{array}{r} \\ \text{объект и его признаки} \\ \\ \\ \end{array} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

Матрицы

- Матрица — таблица с числами (для простоты)
- Матрица «объекты-признаки»:

$$\begin{pmatrix} x_{11} & \boxed{\begin{matrix} x_{12} \\ x_{22} \\ \vdots \\ x_{\ell 2} \end{matrix}} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

значения признака на всех объектах

Векторы

- Вектор размера d — тоже матрица

- Вектор-строка: $w = (w_1, \dots, w_d) \in \mathbb{R}^{1 \times d}$

- Вектор-столбец: $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \cdots \\ w_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$

Матричное умножение

- Только для матриц $A \in \mathbb{R}^{m \times k}$ и $B \in \mathbb{R}^{k \times n}$
- Результат: $AB = C \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Правило:

$$c_{ij} = \sum_{p=1}^{k} a_{ip} b_{pj}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} \boxed{1 \quad 2} \\ 0 \quad 1 \\ 10 \quad 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix}1\\0\end{matrix}} & \begin{matrix}0\\0\end{matrix} & \begin{matrix}0\\2\end{matrix} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{1} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \boxed{0} & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \boxed{4} \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Пример

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ \boxed{0} & & \\ & & \end{pmatrix}$$

Применение линейной модели

- $a(x) = \langle w, x \rangle = w_1 x_1 + \dots + w_d x_d$
- Как применить модель к обучающей выборке?

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_i x_{1i} \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

Модель линейной регрессии

- Среднеквадратичная ошибка и задача обучения:

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

Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$

Вычисление ошибки

- Евклидова норма:

$$\|z\| = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} z_j^2}$$

$$\|z\|^2 = \sum_{j=1}^{n} z_j^2$$

Вычисление ошибки

- Отклонения прогнозов от ответов:

$$Xw - y = \begin{pmatrix} \langle w, x_1 \rangle - y_1 \\ \vdots \\ \langle w, x_\ell \rangle - y_\ell \end{pmatrix}$$

- Среднеквадратичная ошибка:

$$\frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (\langle w, x_i \rangle - y_i)^2$$

Обучение линейной регрессии

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

- Вычисление MSE в NumPy:

```
np.square(X.dot(w) - y).mean()
```

Обучение линейной регрессии

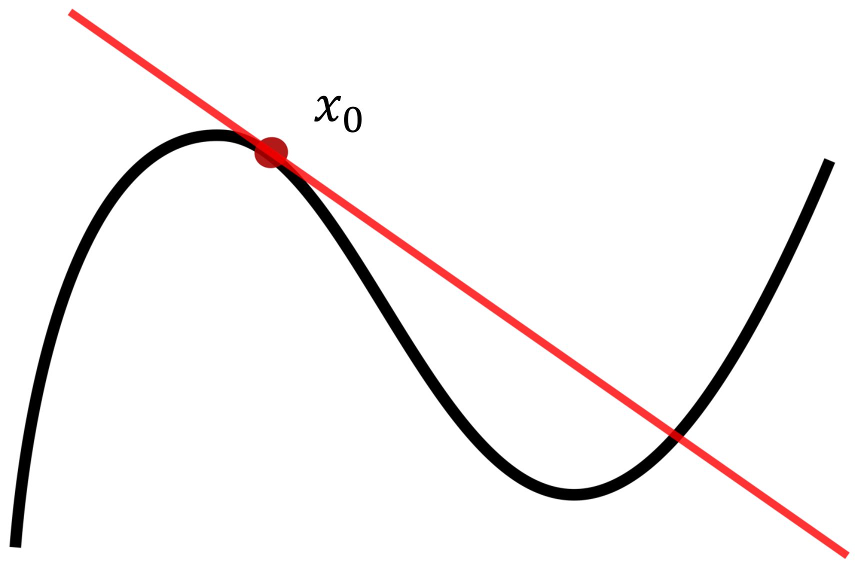
Среднеквадратичная ошибка

- MSE для линейной регрессии:

$$Q(w_1, \dots, w_d) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (w_1 x_1 + \dots + w_d x_d - y_i)^2$$

Производная

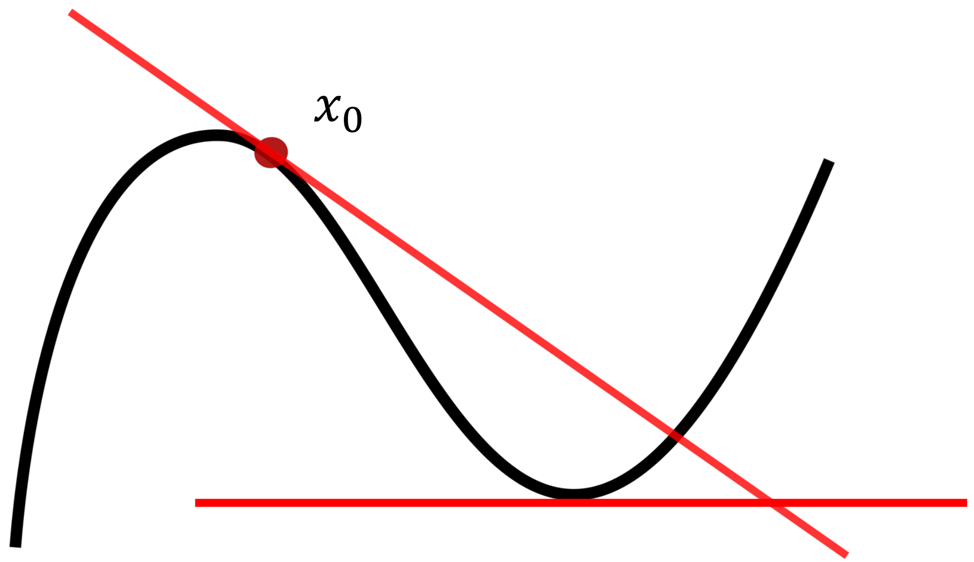
$$\lim_{x \to x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = f'(x_0)$$



Производная

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

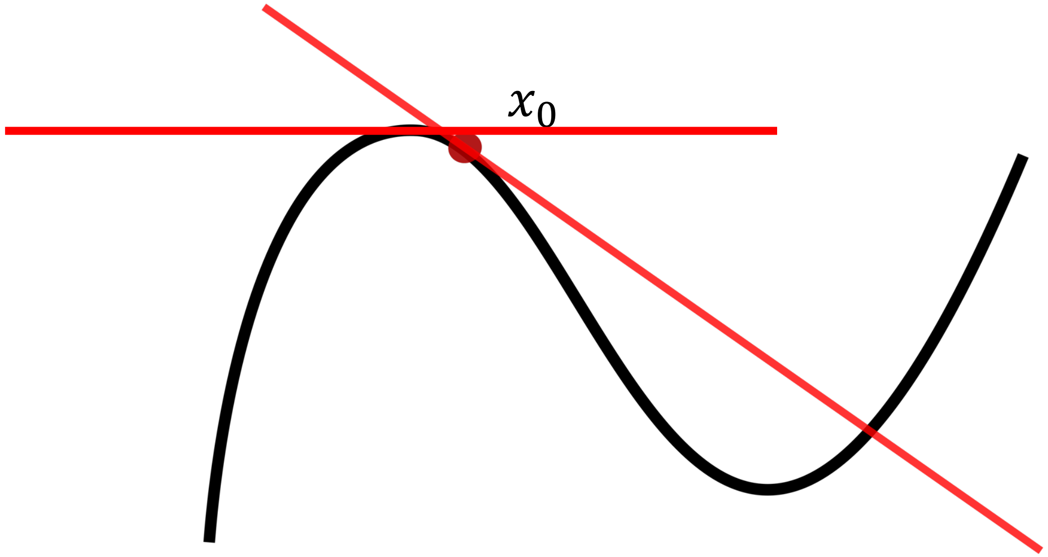
$$f'(x_0) = 0$$



Производная

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

$$f'(x_0) = 0$$



Градиент

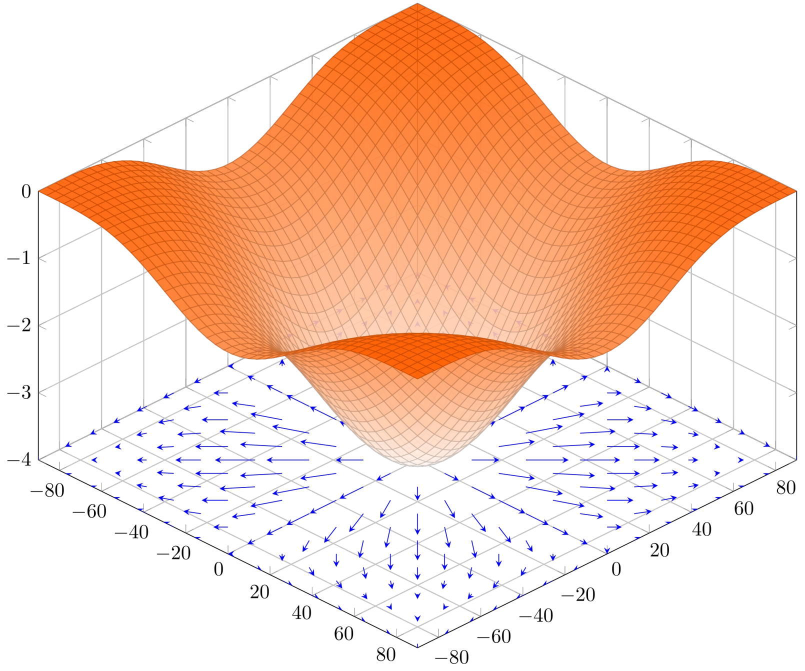
- Градиент — вектор частных производных

$$\nabla f(x) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_d}\right)$$

- У градиента есть важное свойство!

Важное свойство

- Зафиксируем точку x_0
- В какую сторону функция быстрее всего растёт?



Важное свойство

- Зафиксируем точку x_0
- В какую сторону функция быстрее всего растёт?
- В направлении градиента!
- Если градиент равен нулю, то это экстремум

Условие экстремума

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

$$\nabla f(x_0) = 0$$

Условие экстремума

- Если точка x_0 — экстремум и в ней существует производная, то

$$\nabla f(x_0) = 0$$

- Если функция выпуклая, то экстремум один
- MSE для линейной регрессии — выпуклая!
  - (при некоторых условиях)

Обучение линейной регрессии

- Можно посчитать градиент MSE:

$$\nabla \frac{1}{\ell} \|Xw - y\|^2 = \frac{2}{\ell} X^T (Xw - y)$$

- Приравниваем нулю и решаем систему линейных уравнений:

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

Аналитическое решение

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

- Если матрица $X^T X$ вырожденная, то будут проблемы
- Даже если она почти вырожденная, всё равно будут проблемы
- Если признаков много, то придётся долго ждать