Модификации градиентного бустинга

Кантонистова Е.О.

ВШЭ, 2018

РАБОТА С ПРИЗНАКАМИ

КОДИРОВАНИЕ КАТЕГОРИАЛЬНЫХ ПРИЗНАКОВ: ONE-HOT ENCODING

- Предположим, категориальный признак $f_j(x)$ принимает m различных значений: $C_1, C_2, \ldots, C_m$.

Пример: еда может быть *горькой, сладкой, солёной или кислой* (4 возможных значения признака).

КОДИРОВАНИЕ КАТЕГОРИАЛЬНЫХ ПРИЗНАКОВ: ONE-HOT ENCODING

- Предположим, категориальный признак $f_j(x)$ принимает m различных значений: $C_1, C_2, \ldots, C_m$.

Пример: еда может быть *горькой, сладкой, солёной или кислой* (4 возможных значения признака).

- Заменим категориальный признак на m бинарных признаков: $b_i(x) = [f_j(x) = C_i]$ (индикатор события).

Тогда One-Hot кодировка для нашего примера будет следующей:

горький = (1,0,0,0), *сладкий* = (0,1,0,0),

солёный = (0,0,1,0), *кислый* = (0,0,0,1).

ХЭШИРОВАНИЕ ПРИЗНАКОВ

- Возьмем некоторую функцию (hash-функция), которая переводит значения категориального признака в числа от *1* до *B*: $h: U \rightarrow \{1,2, \dots, B\}$.
- То есть для каждого объекта:

$$g_j(x) = \left[h\left(f(x)\right) = j\right], j = 1, \dots, B$$

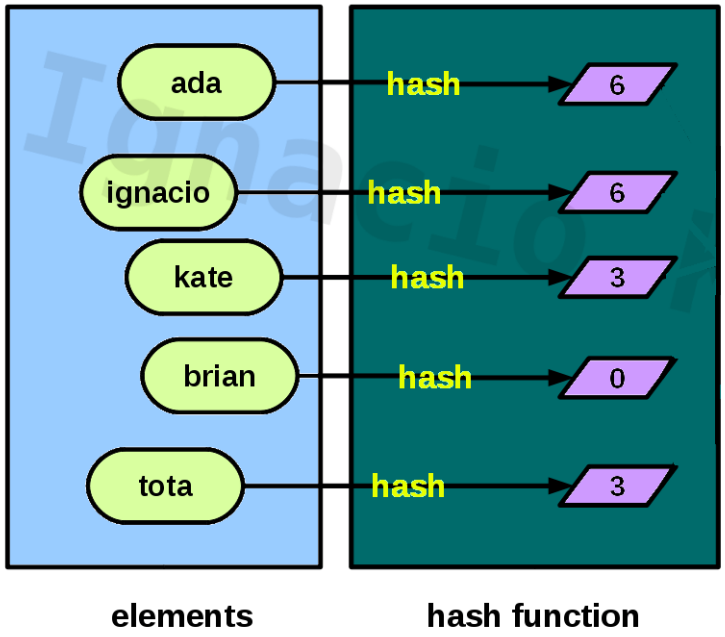
ХЭШИРОВАНИЕ ПРИЗНАКОВ

- Возьмем некоторую функцию (hash-функция), которая переводит значения категориального признака в числа от *1* до *B*: $h: U \rightarrow \{1,2,\dots,B\}$.
- То есть для каждого объекта:

$$g_j(x) = \left[h\left(f(x)\right) = j\right], j = 1,\dots,B$$

Идея: *хэширование группирует значения признака. Так как часто встречающихся значений немного, они редко попадают в одну группу при группировке.*

ХЭШИРОВАНИЕ ПРИЗНАКОВ



0	1	2	3	4	5	6
0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	1	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	0	0

ХЭШИРОВАНИЕ ПРИЗНАКОВ

- Возьмем некоторую функцию (hash-функция), которая переводит значения категориального признака в числа от *1* до *B*: $h: U \rightarrow \{1,2,\dots,B\}$.
- То есть для каждого объекта:

$$g_j(x) = \left[h\left(f(x)\right) = j\right], j = 1,\dots,B$$

+ позволяет закодировать любое значение категориального признака (в том числе, то, которого не было в тренировочной выборке)

ХЭШИРОВАНИЕ

- Хороший способ работать с категориальными данными, принимающими множество различных значений
- Хорошие результаты на практике
- Позволяет понизить размерность пространства признаков с незначительным снижением качества

Статья про хэширование:

https://arxiv.org/abs/1509.05472

СЧЁТЧИКИ

- Пусть целевая переменная y принимает значения от 1 до K.
- Закодируем категориальную переменную $f(x)$ следующим способом:

$$counts(u, X) = \sum_{(x,y)\in X} [f(x) = u]$$

$$successes_k(u, X) = \sum_{(x,y)\in X} [f(x) = u][y = k], k = 1, \dots, K$$

СЧЁТЧИКИ: ПРИМЕР

city	target	0	1	2
Moscow	1	1/4	1/2	1/4
London	0	1/2	0	1/2
London	2	1/2	0	1/2
Kiev	1	1/2	1/2	0
Moscow	1	1/4	1/2	1/4
Moscow	0	1/4	1/2	1/4
Kiev	0	1/2	1/2	0
Moscow	2	1/4	1/2	1/4

СЧЁТЧИКИ

- Пусть целевая переменная y принимает значения от 1 до K.
- Закодируем категориальную переменную $f(x)$ следующим способом:

$$counts(u, X) = \sum_{(x,y)\in X} [f(x) = u]$$

$$successes_k(u, X) = \sum_{(x,y)\in X} [f(x) = u][y = k], k = 1, \dots, K$$

Тогда кодировка:

$$\boldsymbol{g_k(x, X) = \frac{successes_k(f(x), X) + c_k}{counts(f(x), X) + \sum_{i=1}^{K} c_i} \approx p(y = k|f(x))},$$

c_i - чтобы не было деления на 0.

СЧЁТЧИКИ: ОПАСНОСТЬ ПЕРЕОБУЧЕНИЯ

Вычисляя счётчики, мы закладываем в признаки информацию о целевой переменной и, тем самым, переобучаемся!

СЧЁТЧИКИ: КАК ВЫЧИСЛЯТЬ

- Можно вычислять счётчики так:

city	target
Moscow	1
London	0
London	2
Kiev	1
Moscow	1
Moscow	0
Kiev	0
Moscow	2

Вычисляем счетчики по этой части

Кодируем признак вычисленными счётчиками и обучаемся по этой части

СЧЁТЧИКИ: КАК ВЫЧИСЛЯТЬ

Более продвинутый способ (по кросс-валидации):

1) Разбиваем выборку

на m частей $X_1, \dots, X_m$

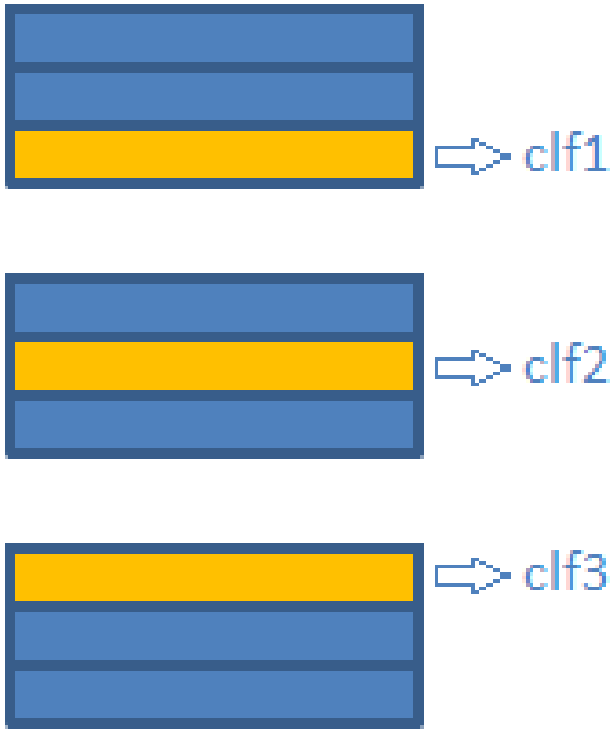
2) На каждой части X_i

значения признаков

вычисляются по

оставшимся частям:

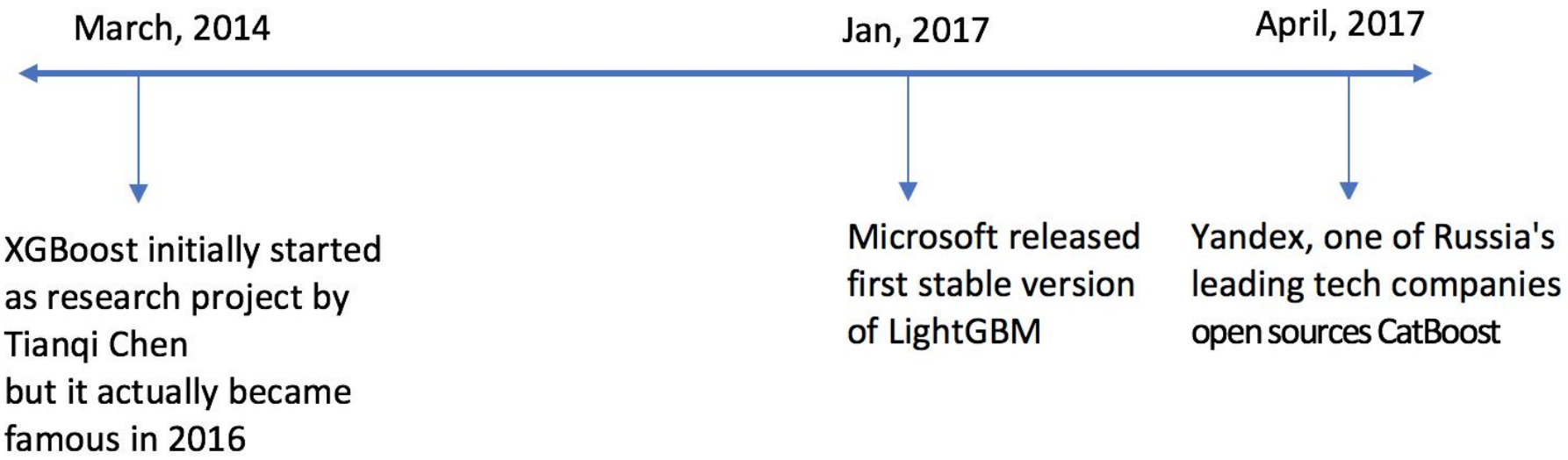
$x \in X_i \Rightarrow g_k(x) = g_k(x, X \backslash X_i)$



РЕАЛИЗАЦИИ ГРАДИЕНТНОГО БУСТИНГА

- Xgboost
- CatBoost
- LightGBM

XGBOOST, LIGHTGBM, CATBOOST



- https://github.com/dmlc/xgboost
- https://github.com/Microsoft/LightGBM
- https://towardsdatascience.com/catboost-vs-light-gbm-vs-xgboost-5f93620723db

XGBOOST (EXTREME GRADIENT BOOSTING)

- На каждом шаге градиентного бустинга решается задача

$$\sum_{i=1}^{l}(b(x_i)-s_i)^2 \to \min_b$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{l}\left(-s_i b(x_i)+\frac{1}{2}b^2(x_i)\right)^2 \to \min_b$$

- На каждом шаге xgboost решается задача

$$\sum_{i=1}^{l}\left(-s_i b(x_i)+\frac{1}{2}h_i b^2(x_i)\right)+\gamma J+\frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{J}b_j^2 \to \min_b, \quad (*)$$

$$h_i = \frac{\partial^2 L}{\partial z^2}\Big|_{a_{N-1}(x_i)}$$

XGBOOST

$$\sum_{i=1}^{l}\left(-s_i b(x_i)+\frac{1}{2}h_i b^2(x_i)\right)+\gamma J+\frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{J}b_j^2\to\min_b$$

Основные особенности xgboost:

- базовый алгоритм приближает направление, посчитанное с учетом второй производной функции потерь
- функционал регуляризуется – добавляются штрафы за количество листьев и за норму коэффициентов
- при построении дерева используется критерий информативности, зависящий от оптимального вектора сдвига
- критерий останова при обучении дерева также зависит от оптимального сдвига

CATBOOST

CatBoost – алгоритм, разработанный в Яндексе. Он является оптимизацией Xgboost и в отличие от Xgboost умеет обрабатывать категориальные признаки.

https://github.com/catboost/catboost

CATBOOST

Особенности catboost:

- используются симметричные деревья решений

CATBOOST

Особенности catboost:

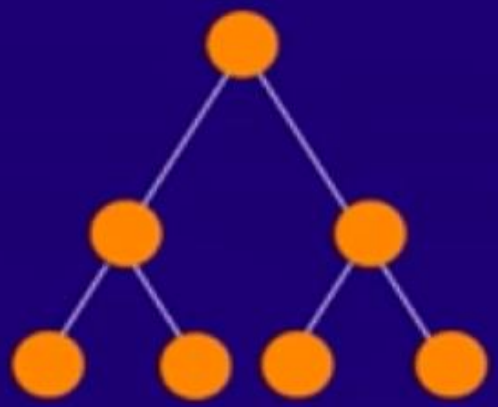
- Для кодирования категориальных признаков используется набор методов (one-hot encoding, счётчики, комбинации признаков и др.)

CATBOOST

Особенности catboost:

- динамический бустинг

Динамический бустинг



$$\text{leafValue(doc)} = \sum_{i=1}^{doc} \frac{g(\text{approx(i)}, \text{target(i)})}{docs\ in\ the\ past}$$

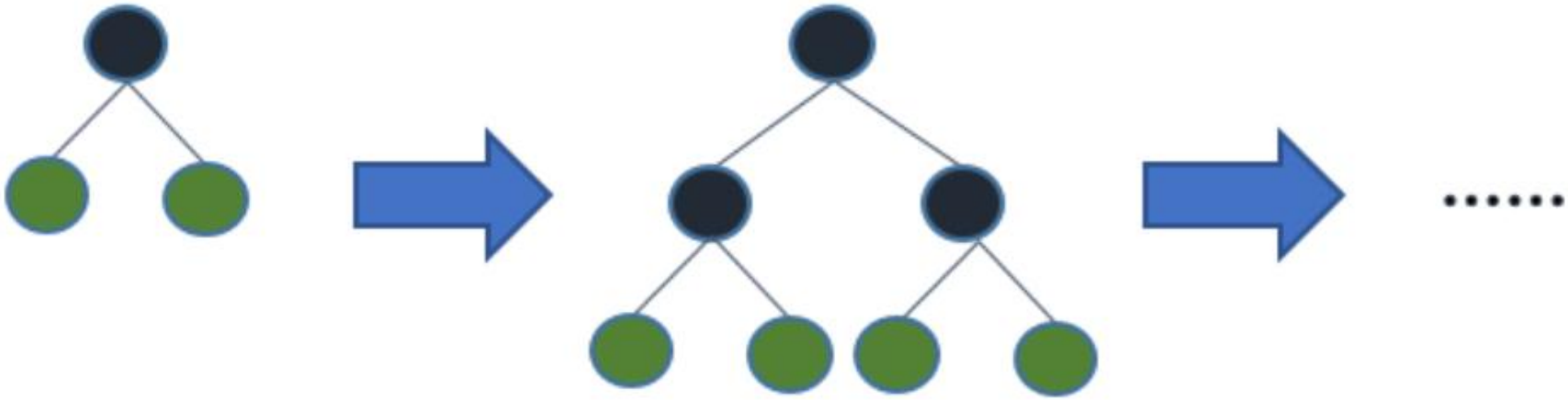
CATBOOST

Бонусы реализации:

- Поддержка пропусков в данных
- Обучается быстрее, чем xgboost
- Показывает хороший результат даже без подбора параметров
- Удобные методы: проверка на переобученность, вычисление значений метрик, удобная кросс-валидация и др.

LIGHTGBM

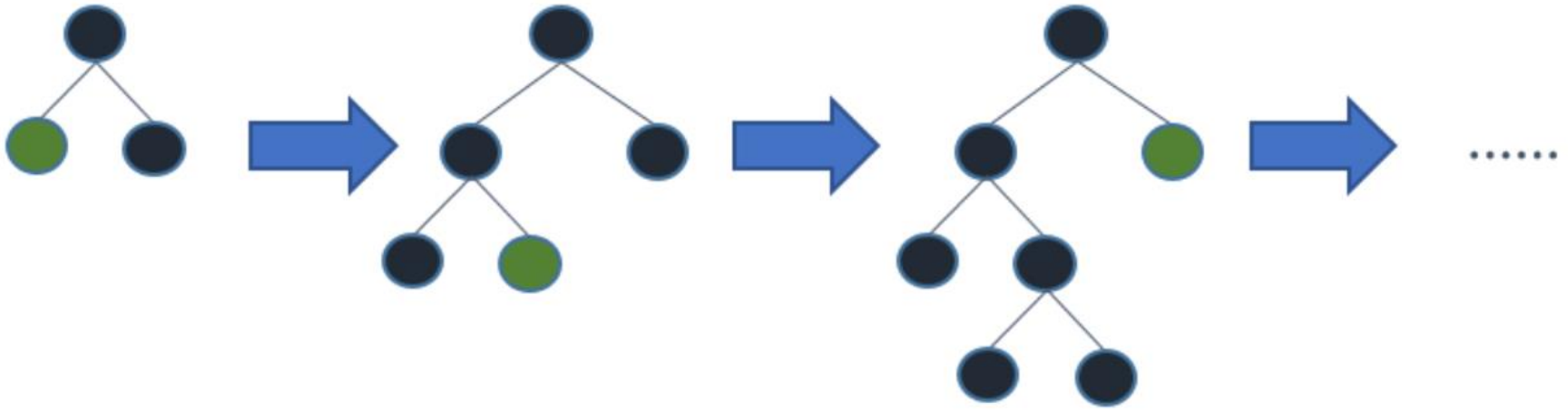
В других реализациях градиентного бустинга деревья строятся по уровням:



Level-wise tree growth

LIGHTGBM

LightGBM строит деревья, добавляя на каждом шаге один лист:



Leaf-wise tree growth

Такой подход позволяет добиться более высокой точности решения задачи оптимизации.

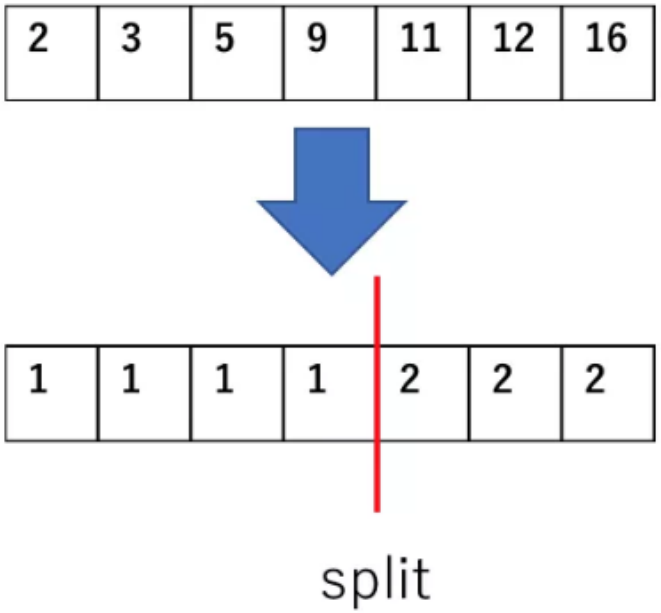
LIGHTGBM

Кодирование категориальных признаков.

- LightGBM разбивает значения категориального признака на два подмножества в каждой вершине дерева, находя при этом наилучшее разбиение
- Если категориальный признак имеет k различных значений, то возможных разбиений $2^{k-1} - 1$. В LightGBM реализован способ поиска оптимального разбиения за $O(klogk)$ операций.

LIGHTGBM

Ускорение построения деревьев за счёт бинаризации признаков:



An example of how binning can reduce the number of splits to explore. The features must be sorted in advance for this method to be effective.