# Градиентный бустинг

Харинаев Артём

316 МС ВМК МГУ

29.11.2021

# Введение



# Интуитивные соображения

$Y = \mathbb{R}$, $X^\ell$-обучающая выборка

1. $y$ - целевой признак, $b_1(x)$ - решающее дерево, настроенное на него
2. $y - b_1(x)$ - целевой признак, $b_2(X)$ - решающее дерево, настроенное на него
3. $y - b_1(x) - b_2(x)$ - целевой признак, $b_3(X)$ - решающее дерево, настроенное на него

и т.д.

$$a_T(x) = \sum_{t=1}^{T} b_t(x) \text{ - композиция алгоритмов}$$

$$\mathcal{L}(y, a(x)) = \frac{1}{2}\|y - a(x)\|^2$$

$$\nabla\mathcal{L}(y, a(x)) = y - a(x)$$

# Алгоритм

$X$ - пространство объектов, $Y$ - пространство ответов, $X^\ell = \{x_i, y_i\}_{i=1}^\ell$ - обучающая выборка, $\mathcal{L}$ - дифференцируемая функция потерь, $\mathfrak{B}$ - пространство базовых алгоритмов

$$\mathrm{a}_T(x) = \sum_{t=1}^T b_t(x), \quad x \in X, \quad b_t : X \mapsto Y, \quad b_t \in \mathfrak{B}$$

$$\mathrm{a}_T(x) = a_{T-1}(x) + b_T(x)$$

$$\mathrm{b}_T(x) = \underset{b \in \mathfrak{B}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^\ell \mathcal{L}(y_i, a_{T-1}(x_i) + b(x_i))$$

$$b_1(x) = \underset{b \in \mathfrak{B}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^\ell \mathcal{L}(y_i, b(x_i))$$

# Алгоритм

Разложение Тейлора функции потерь до первого члена в окрестности $(y_i, a_{T-1}(x_i))$ :

$$\mathcal{L}(y_i, a_{T-1}(x_i) + b(x_i)) \approx \mathcal{L}(y_i, a_{T-1}(x_i)) + b(x_i) \frac{\partial \mathcal{L}(y_i, z)}{\partial z}\Big|_{z=a_{T-1}(x_i)} =$$

$$= \mathcal{L}(y_i, a_{T-1}(x_i)) + b(x_i) g_i^{T-1}$$

Получается следующая оптимизационная задача:

$$b_T \approx \operatorname*{argmin}_{b \in \mathcal{B}} \sum_{i=1}^{\ell} b(x_i) g_i^{T-1}$$

решением которой является антиградиент $-g^{T-1}$.

На каждой итерации базовые алгоритмы обучаются предсказывать значения антиградиента функции потерь по текущим предсказаниям композиции

# Постановка задачи

- Сравнить качество алгоритма градиентного бустинга с линейными моделями на задачах
  - классификации
  - регрессии
- Исследовать зависимости в данных "Ценообразование недвижимости" (www.kaggle.com/c/house-prices-advanced-regression-techniques)

# Описание данных

Классификация "Болезни сердца"

| | age | sex | cp | trestbps | chol | fbs | restecg | thalach | exang | oldpeak | slope | ca | thal | target |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **0** | 63 | 1 | 3 | 145 | 233 | 1 | 0 | 150 | 0 | 2.3 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| **1** | 37 | 1 | 2 | 130 | 250 | 0 | 1 | 187 | 0 | 3.5 | 0 | 0 | 2 | 1 |
| **2** | 41 | 0 | 1 | 130 | 204 | 0 | 0 | 172 | 0 | 1.4 | 2 | 0 | 2 | 1 |
| **3** | 56 | 1 | 1 | 120 | 236 | 0 | 1 | 178 | 0 | 0.8 | 2 | 0 | 2 | 1 |
| **4** | 57 | 0 | 0 | 120 | 354 | 0 | 1 | 163 | 1 | 0.6 | 2 | 0 | 2 | 1 |
| **...** | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| **298** | 57 | 0 | 0 | 140 | 241 | 0 | 1 | 123 | 1 | 0.2 | 1 | 0 | 3 | 0 |
| **299** | 45 | 1 | 3 | 110 | 264 | 0 | 1 | 132 | 0 | 1.2 | 1 | 0 | 3 | 0 |
| **300** | 68 | 1 | 0 | 144 | 193 | 1 | 1 | 141 | 0 | 3.4 | 1 | 2 | 3 | 0 |
| **301** | 57 | 1 | 0 | 130 | 131 | 0 | 1 | 115 | 1 | 1.2 | 1 | 1 | 3 | 0 |
| **302** | 57 | 0 | 1 | 130 | 236 | 0 | 0 | 174 | 0 | 0.0 | 1 | 1 | 2 | 0 |

https://www.kaggle.com/ronitf/heart-disease-uci

# Описание данных

## Регрессия "Ценообразование недвижимости"

| Id | MSSubClass | MSZoning | LotFrontage | LotArea | Street | Alley | ... | MiscVal | MoSold | YrSold | SaleType | SaleCondition | SalePrice |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| **1** | 60 | RL | 65.0 | 8450 | Pave | NaN | ... | 0 | 2 | 2008 | WD | Normal | 208500 |
| **2** | 20 | RL | 80.0 | 9600 | Pave | NaN | ... | 0 | 5 | 2007 | WD | Normal | 181500 |
| **3** | 60 | RL | 68.0 | 11250 | Pave | NaN | ... | 0 | 9 | 2008 | WD | Normal | 223500 |
| **4** | 70 | RL | 60.0 | 9550 | Pave | NaN | ... | 0 | 2 | 2006 | WD | Abnorml | 140000 |
| **5** | 60 | RL | 84.0 | 14260 | Pave | NaN | ... | 0 | 12 | 2008 | WD | Normal | 250000 |
| **...** | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... | ... |
| **1456** | 60 | RL | 62.0 | 7917 | Pave | NaN | ... | 0 | 8 | 2007 | WD | Normal | 175000 |
| **1457** | 20 | RL | 85.0 | 13175 | Pave | NaN | ... | 0 | 2 | 2010 | WD | Normal | 210000 |
| **1458** | 70 | RL | 66.0 | 9042 | Pave | NaN | ... | 2500 | 5 | 2010 | WD | Normal | 266500 |
| **1459** | 20 | RL | 68.0 | 9717 | Pave | NaN | ... | 0 | 4 | 2010 | WD | Normal | 142125 |
| **1460** | 20 | RL | 75.0 | 9937 | Pave | NaN | ... | 0 | 6 | 2008 | WD | Normal | 147500 |

1460 rows × 80 columns

https://www.kaggle.com/c/house-prices-advanced-regression-techniques/data

# Предобработка данных

Для обучения линейный моделей необходимо проделать достаточно большую работу по предобработке данных:

- Обработать недостающие значения (заполнить или удалить строки, содержащие их)
- Преобразовать текстовые данные в числовые
- Закодировать категорильные данные (one-hot-encoding, target mean, label encoder)
- Для лучшей сходимости нужно масштабировать данные (к $\mathcal{N}(0, 1)$, min-max)
- Выявить и удалить выбросы

Для многих реализаций градиентного бустинга, таких как XGBoost, LightGBM, CatBoost, не обязательно выполнять все эти шаги.

# Классификация

Yandex
CatBoost

Логистическая регрессия:
Recall = 0.814

| | Болен | Здоров |
|---|---|---|
| Болен | 23 | 10 |
| Здоров | 8 | 35 |

Таблица: Матрица ошибок

CatBoost:
Recall = 0.860

| | Болен | Здоров |
|---|---|---|
| Болен | 25 | 8 |
| Здоров | 6 | 37 |

Таблица: Матрица ошибок

# Регрессия

Ridge-регрессия

RMSLE = 0.13748

CatBoost "из коробки"

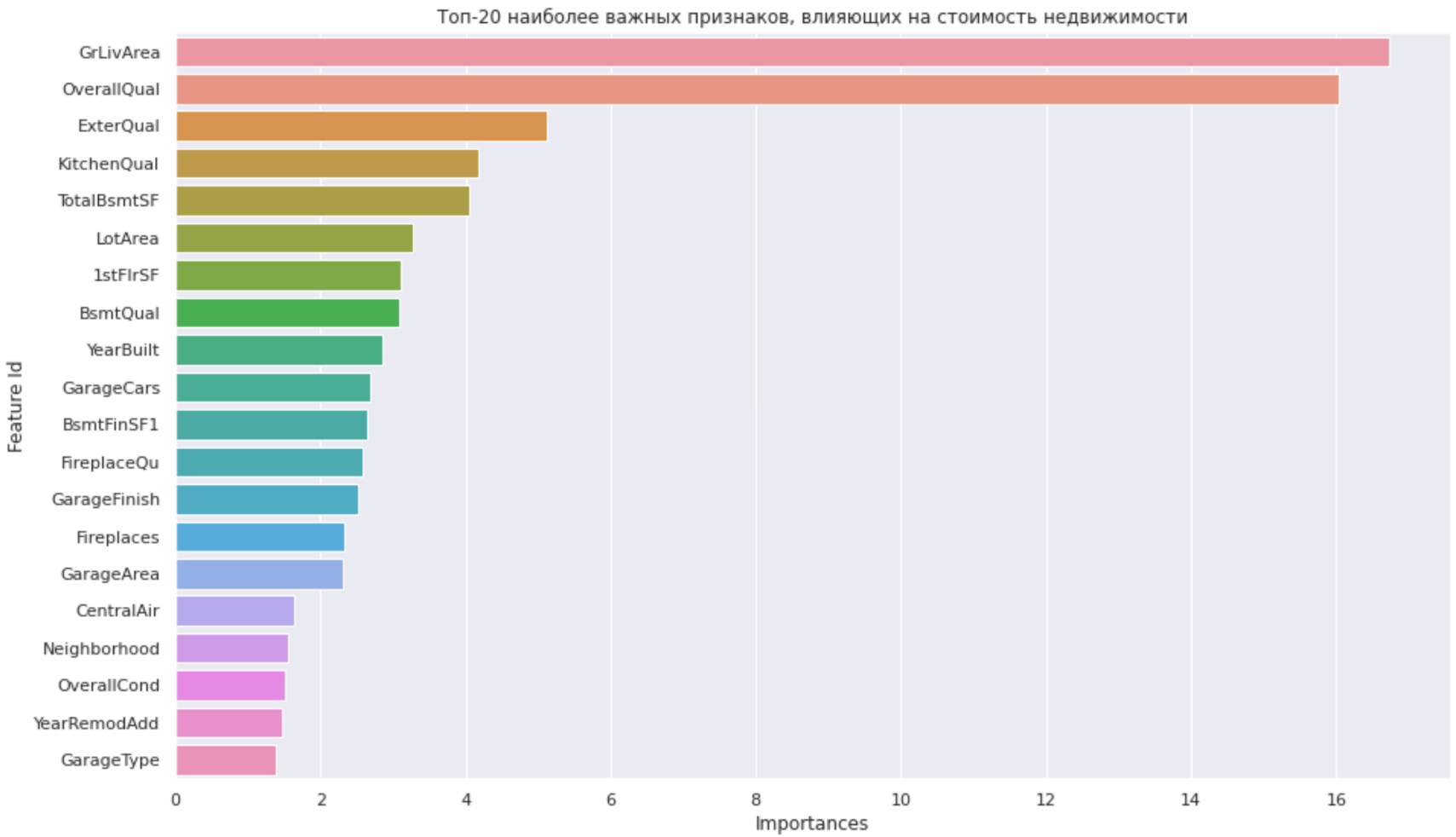
RMSLE = 0.12948

CatBoost с оптимальными параметрами

RMSLE = 0.12420

# Важность признаков

# Важность признаков



# Важность признаков