Лекция 12 - часть 1. Модификации градиентного бустинга

Кантонистова Е.О.

РЕАЛИЗАЦИИ ГРАДИЕНТНОГО БУСТИНГА

- Xgboost
- CatBoost
- LightGBM

XGBOOST, LIGHTGBM, CATBOOST

March, 2014 Jan, 2017 April, 2017

XGBoost initially started as research project by Tianqi Chen but it actually became famous in 2016 Microsoft released first stable version of LightGBM Yandex, one of Russia's leading tech companies open sources 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

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

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

XGBOOST

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

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

https://github.com/catboost/catboost

Особенности catboost:

📍 используются симметричные деревья решений

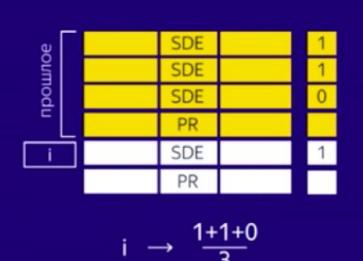


Особенности catboost:

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

Статистики по категориальным факторам

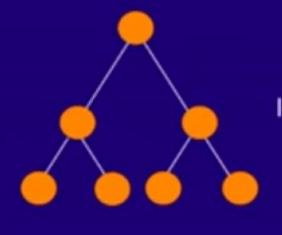
- One-hot кодирование
- Статистики без использования таргета
- Статистики по случайным перестановкам
- > Комбинации факторов



Особенности catboost:

🦿 динамический бустинг

Динамический бустинг

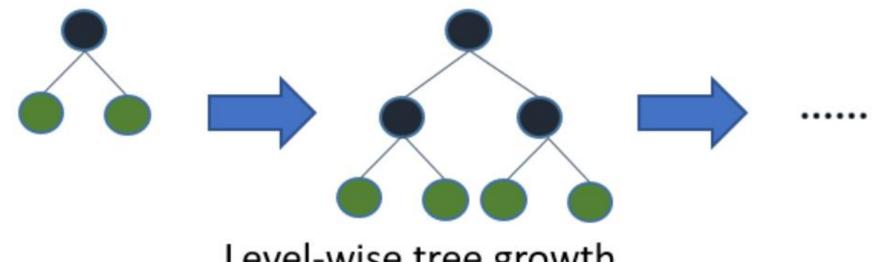


leafValue(doc) =
$$\sum_{i=1}^{doc} \frac{g(approx(i), target(i))}{docs in the past}$$

Бонусы реализации:

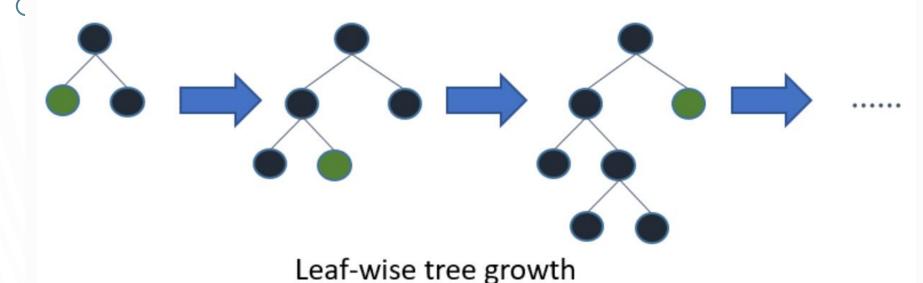
- Поддержка пропусков в данных
- Обучается быстрее, чем xgboost
- Показывает хороший результат даже без подбора параметров
- Удобные методы: проверка на переобученность, вычисление значений метрик, удобная кросс-валидация и др.

В других реализациях градиентного бустинга деревья строятся по уровням:



Level-wise tree growth

LightGBM строит деревья, добавляя на каждом шаге один лист:

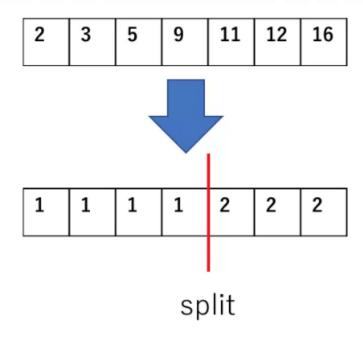


Такой подход позволяет добиться более высокой точности решения задачи оптимизации.

Скодирование 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.

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.