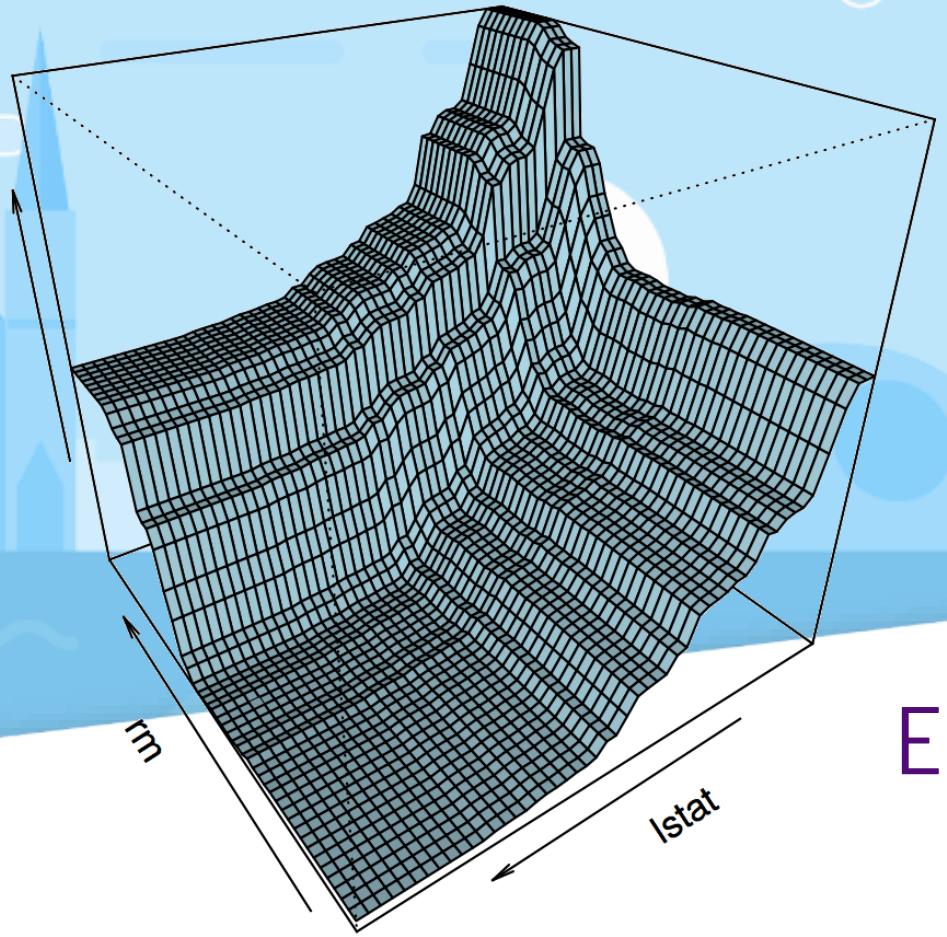


Een introductie tot Gradient Boosting

Pipple Lecture 5 - 15 mei 2019

Gradient Boosting

Is een effectief machine learning algoritme. Het is toe te passen op:

- Regressie
- Classificatie
- Ranking

Programma

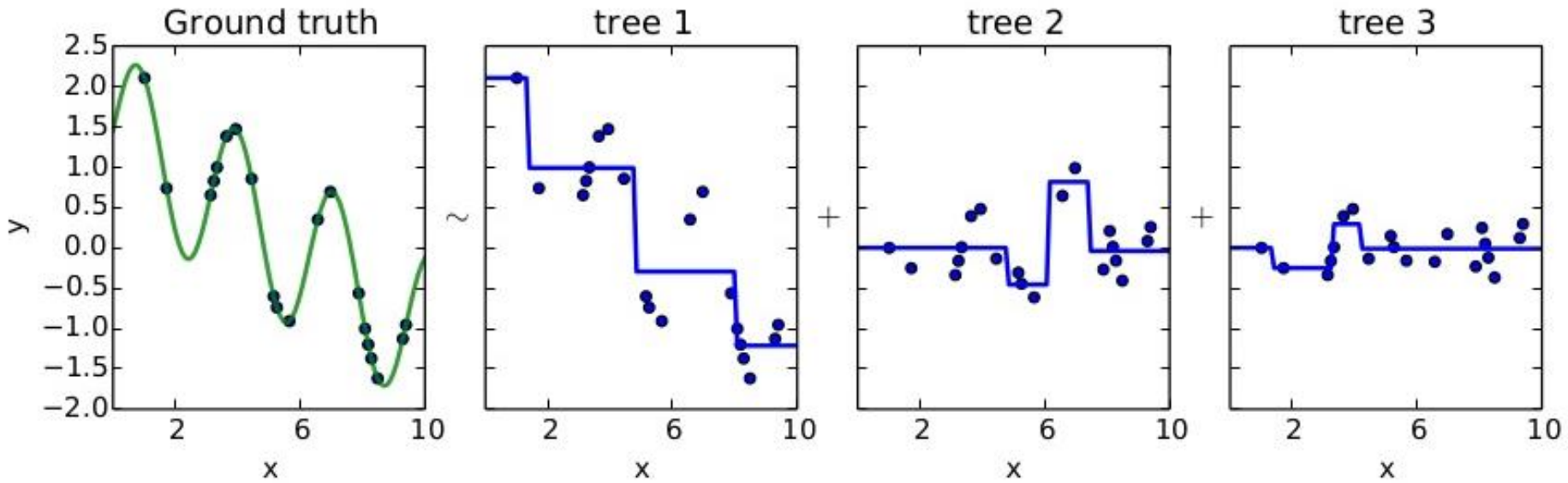
- Wat is gradient boosting?
- Gradient boosting met XGBoost
- Pre-processing en training tips
- Hands-on mini competitie
- Bekendmaking winnaars

Deze lecture is voornamelijk gericht op de intuïtie en de toepassing

Wat is Gradient Boosting?

- Ensemble algorithm
  - Baggin
  - Boosting
  - Random Forest
- Een ensemble is een samenvoeging van verschillende learners
  - Decision Tree
  - Regression Tree

Intuïtie gradient boosting

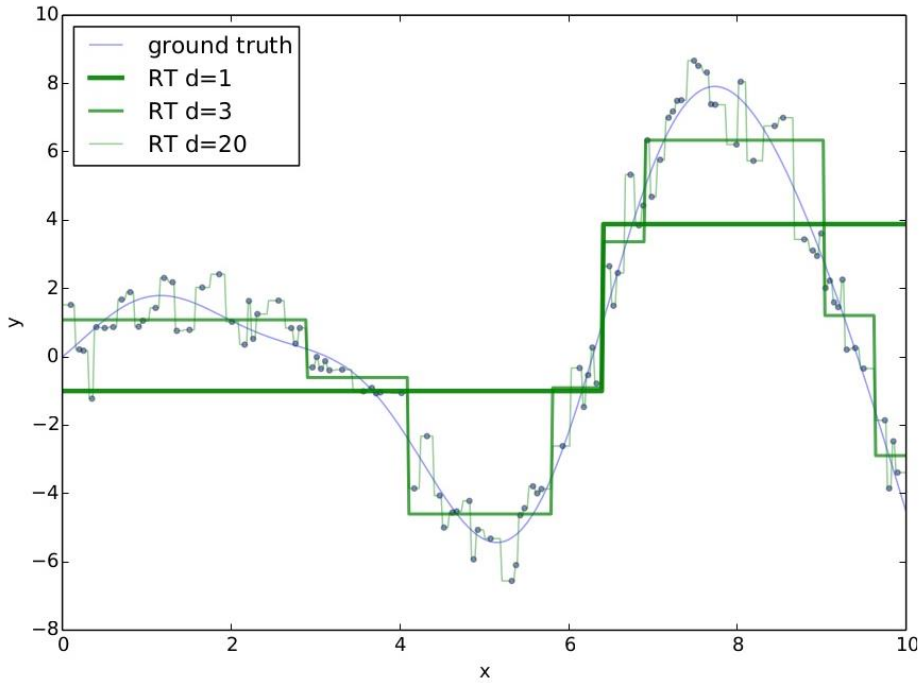


Gradient boosting

- Gradient boosting bestaat uit verschillende onderdelen
  - Weak Learners
    - Regression Tree
    - Classification Tree
  - Loss function
    - Wordt geoptimaliseerd
  - Additive model
    - Methode waarop de weak learners gecombineerd worden

Regression Tree

- Verbeteren door meer splits
- In gradient boosting beperkingen
  - Weinig splits (vroeger stumps)
  - Learners blijven weak

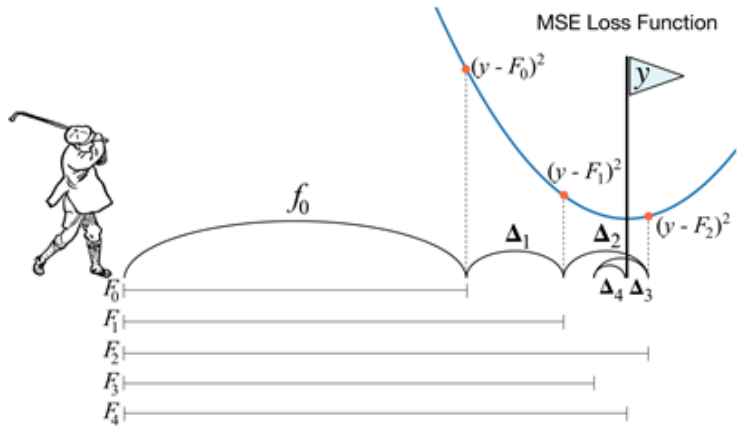


Loss function

- Residuals
  - Een functie meestal op basis van errors / residuals
- Veel gebruikte functies zijn
  - RMSE : square Root of Mean Squared Error
  - MAE : Mean Absolute Error

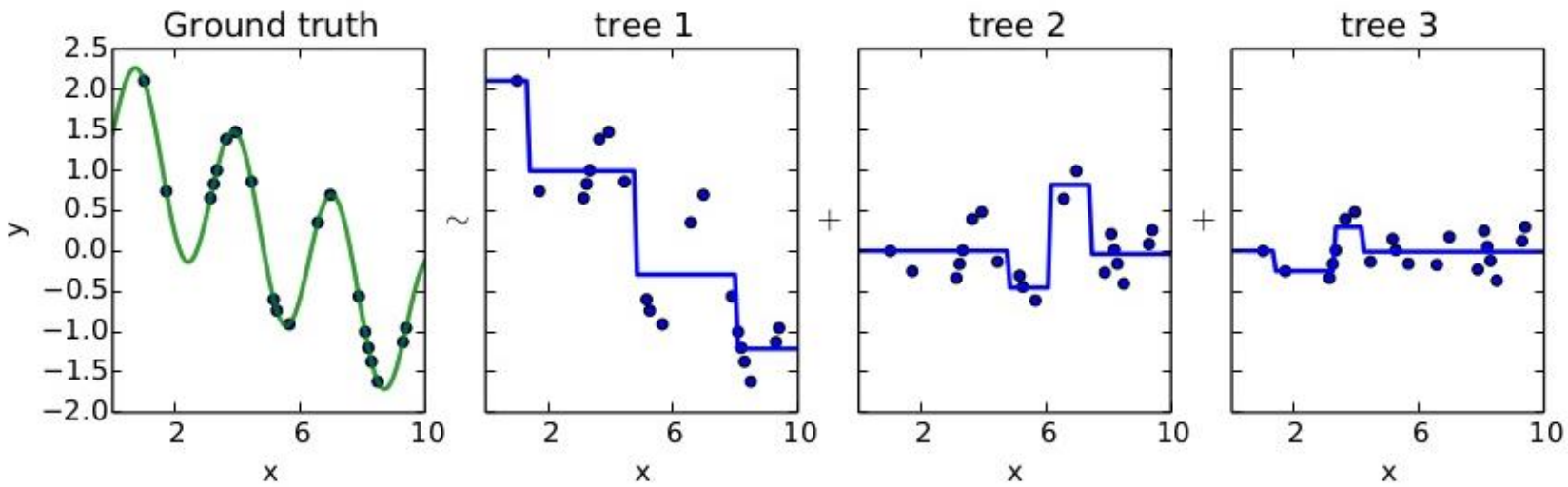
Additive model

- Stapsgewijs toevoegen en verbeteren van model
  - Bij elke stap wordt gekeken welke tree toegevoegd dient te worden
    - Minimaliseren van loss function d.m.v. gradient descent op residuals
- Decision tree wordt toegevoegd aan huidig model
  - Huidige elementen (trees) van model veranderen niet
  - Model is som van elementen
  - Toevoeging hoeft niet lineair te zijn
- Gebruikt gradient descent om loss functie te minimaliseren



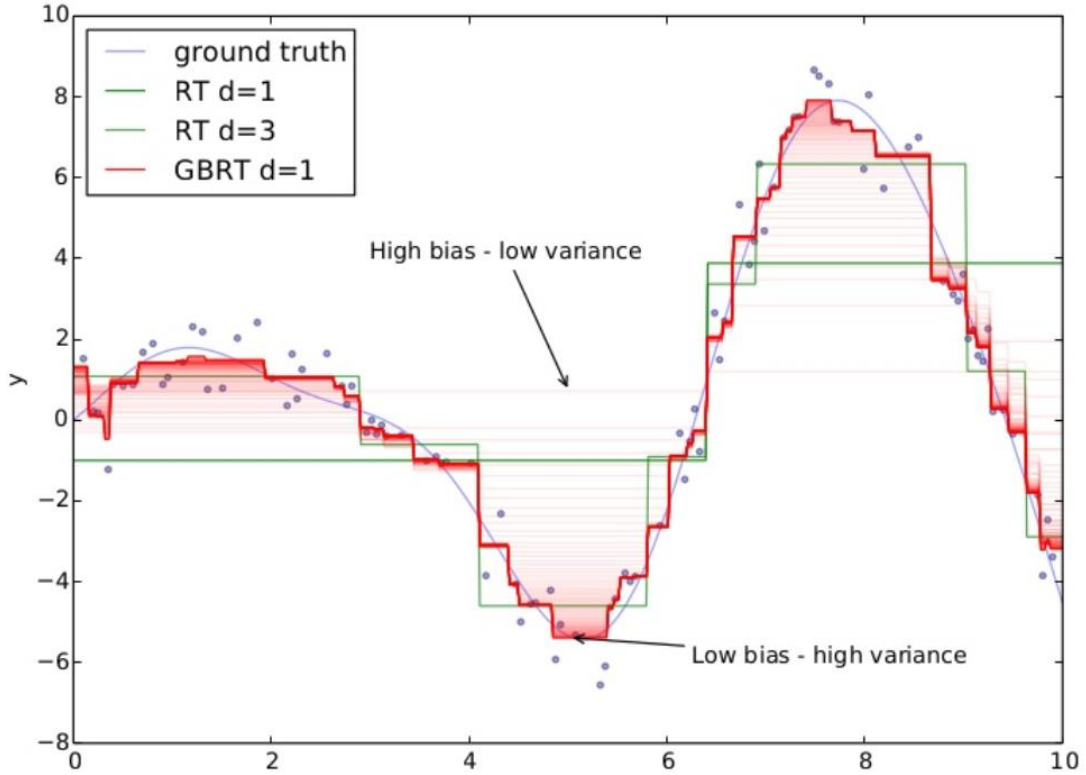
Additive model

Meer verklaren door extra trees toe te voegen



Gradient Boosting vs. Regression Tree

- Regression Tree
  - Aantal splits
- Gradient Boosting
  - Aantal trees



Gradient Boosting vs. Random Fores

- RF berekenen van meerdere trees tegelijkertijd
  - Voordeel voor distribueren
- GB berekenen van meerdere trees na elkaar
  - Kleine trees kosten minder tijd
- Over het algemeen:
  - GB > RF > Bagging > RT
- GB meer tuning nodig
  - Kans op overfitting

Gradient boosting met XGBoost

De XGBoost library

- eXtreme Gradient Boosting
- Beschikbaar in C++, Java, Python, R, en Julia
- Veel documentatie beschikbaar

Gradient boosting met XGBoost

Basis model

```
import pandas as pd

# Maak train en validatie matrixen aan
dtrain = xgb.DMatrix(data=train_X.values, label=train_y.values, feature_names=train_X.columns)
dvalid = xgb.DMatrix(data=valid_X.values, label=valid_y.values, feature_names=valid_X.columns)

# Stel de verschillende parameters in
param = {'eta': 0.01, 'max_depth': 10, 'silent':1, 'objective': 'reg:linear', 'eval_metric': 'mae'}

num_round = 100

bst = xgb.train(param, dtrain, num_round)

# Maak nieuwe voorspellingen op validatie set
preds = bst.predict(dvalid)
```

XGBoost parameters (1/3)

- **eta** staat voor hoeveel elke decision tree bijdraagt aan de uiteindelijke voorspelling [default=0.3]
- **gamma** is de minimale toegevoegde waarde van een nieuwe split [default=0]
- **max_depth** is de maximale diepte van elke decision tree [default=6]
- **subsample** is de ratio van random training samples waarop elke decision tree wordt getraind [default=1.0]
- **colsample_bytree** en **colsample_bylevel** geven aan welke ratios van de kolommen worden gebruikt per tree en per level [default=1.0]

XGBoost parameters (2/3)

- **objective** is het type loss functie die we minimalizeren, bijv. binary:logistic, multi:softmax, multi:softprob [default=reg:linear]
- **eval_metric** is de metric waarmee we evalueren hoe goed onze voorspellingen zijn op de validatie data [default according to objective]
- **seed** staat voor welke random seed we gebruiken [default=0]
- **num_round** geeft aan hoeveel decision trees we trainen

XGBoost parameters (3/3)

```
# De verschillende parameters
param = {'eta':0.01,
         'max_depth': 10,
         'min_child_weight': 1,
         'gamma': 0,
         'subsample': 1.0,
         'colsample_bytree': 1.0,
         'colsample_bylevel': 1.0,
         'silent': 1,
         'objective': 'reg:linear',
         'eval_metric': 'mae',
         'seed': 42}

# Hoeveel trees we trainen
num_round = 100
```

Gradient boosting met XGBoost

Overfitting

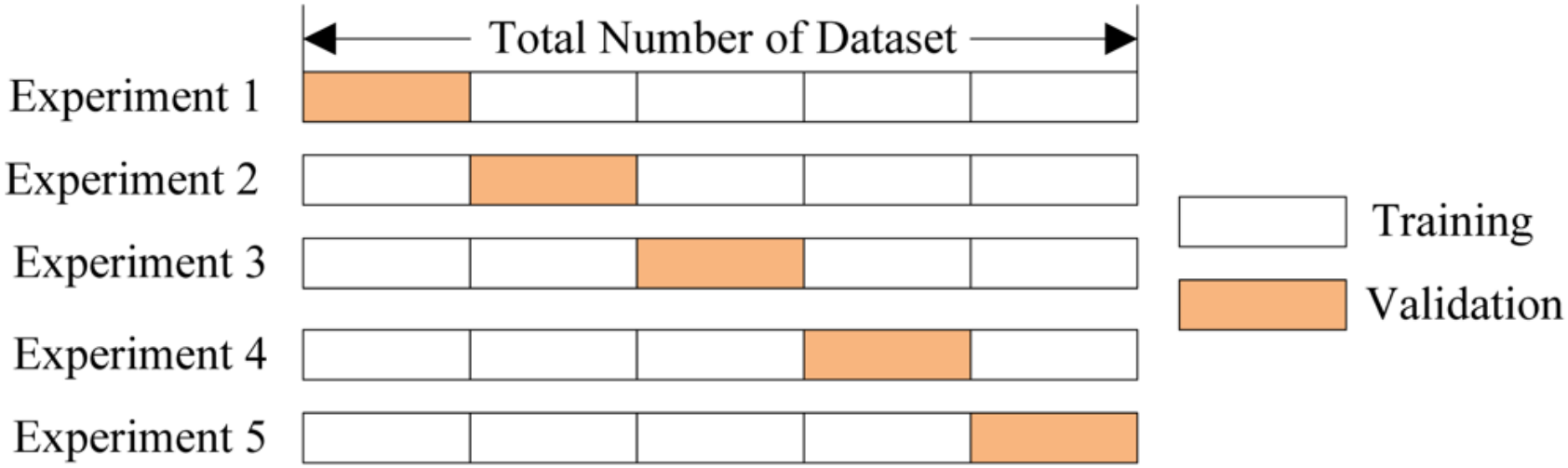
- Hoge training accuracy, lage validatie accuracy

Drie manieren om overfitting te voorkomen:

- Model complexiteit verminderen met **max_depth** en **gamma**
- Randomness toevoegen met **subsample, colsample_bytree** en **colsample_bylevel**
- De **eta** verminderen en **num_round** verhogen

Gradient boosting met XGBoost

Cross-validation



Gradient boosting met XGBoost

Cross-validation

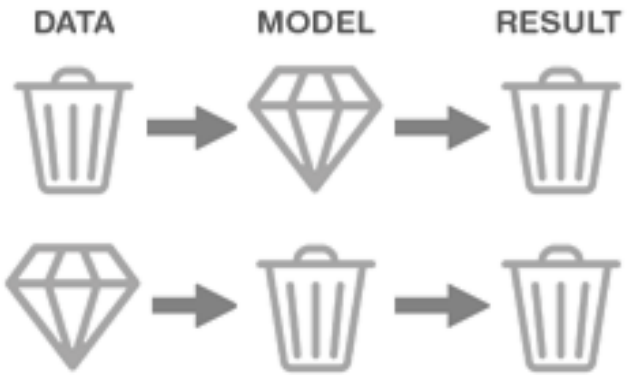
```
# Gebruik CV om overfitting te voorkomen
cv_results = xgb.cv(param, dtrain, num_boost_round=num_round,
                    nfold=5, metrics={'mae'}, early_stopping_rounds=10)

cv_results
```

	train-mae-mean	train-mae-std	test-mae-mean	test-mae-std
0	6.256053	0.005370	6.256020	0.021399
1	6.193581	0.005316	6.193493	0.021403
2	6.131712	0.005190	6.131599	0.021508
3	6.070492	0.005191	6.070339	0.021497

Gradient boosting kan niet alles…

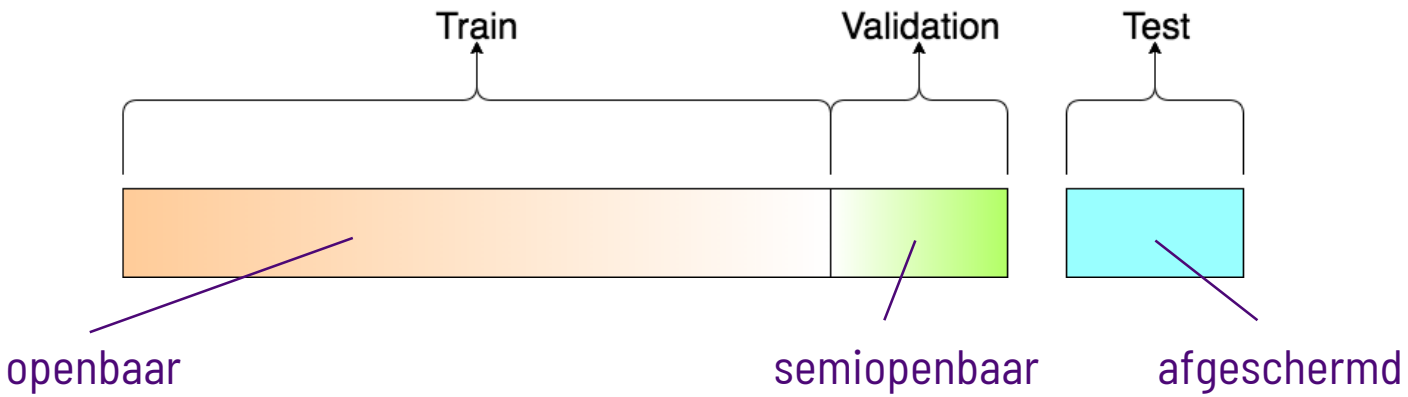
- ‘Garbage in, garbage out’
- Data-inzicht en pre-processing zijn net zo belangrijk
- Tips van Kaggle winnaars

The ‘garbage in, garbage out’ principle:



Kaggle competities

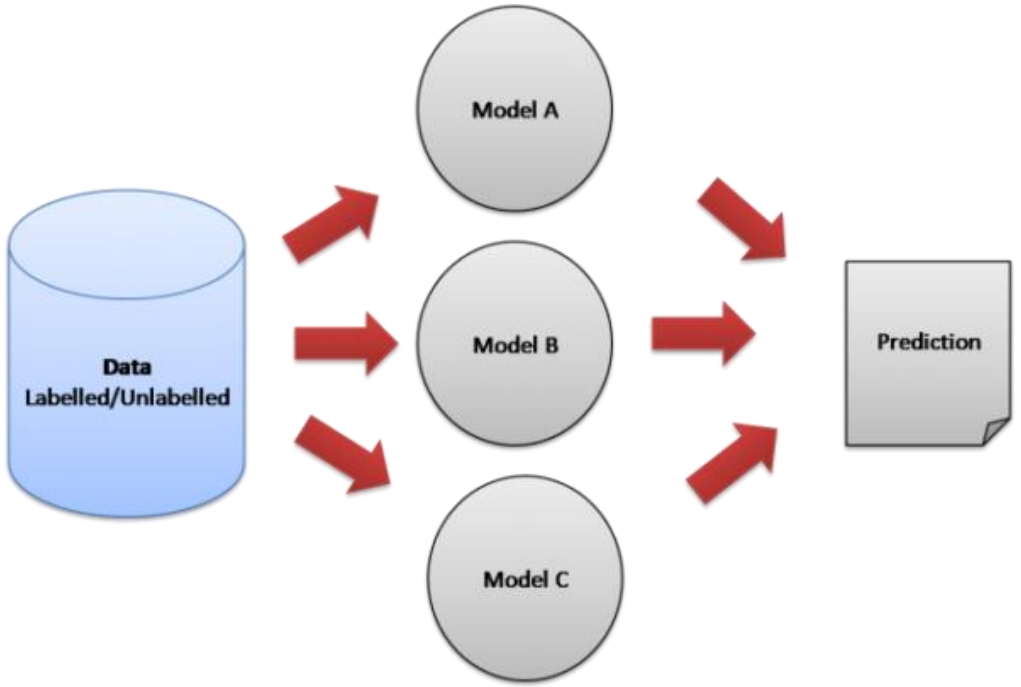
- Bouw model op openbare training data
- Maak voorspellingen op semiopenbare validatie data
- Validatie data score staat op public leaderboard
- Test data score blijft geheim tot einde competitie



Tip 1: stacken van modellen

Op basis van:

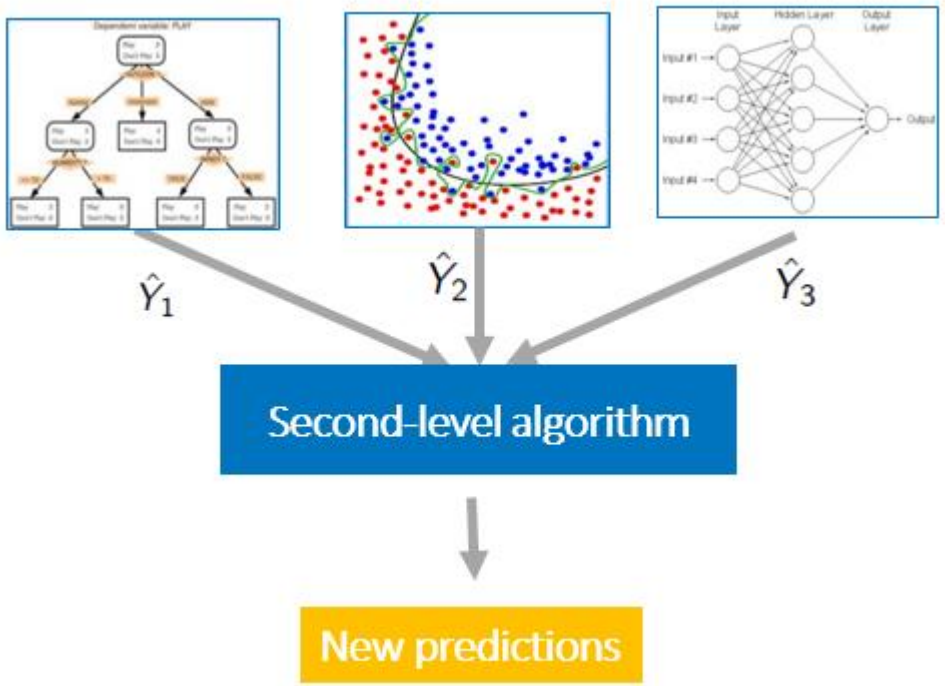
- Verschillende type modellen
- Verschillende parameters
- Verschillende features
- Verschillende training sets



Tip 2: combineren van voorspellingen

Meest gebruikt:

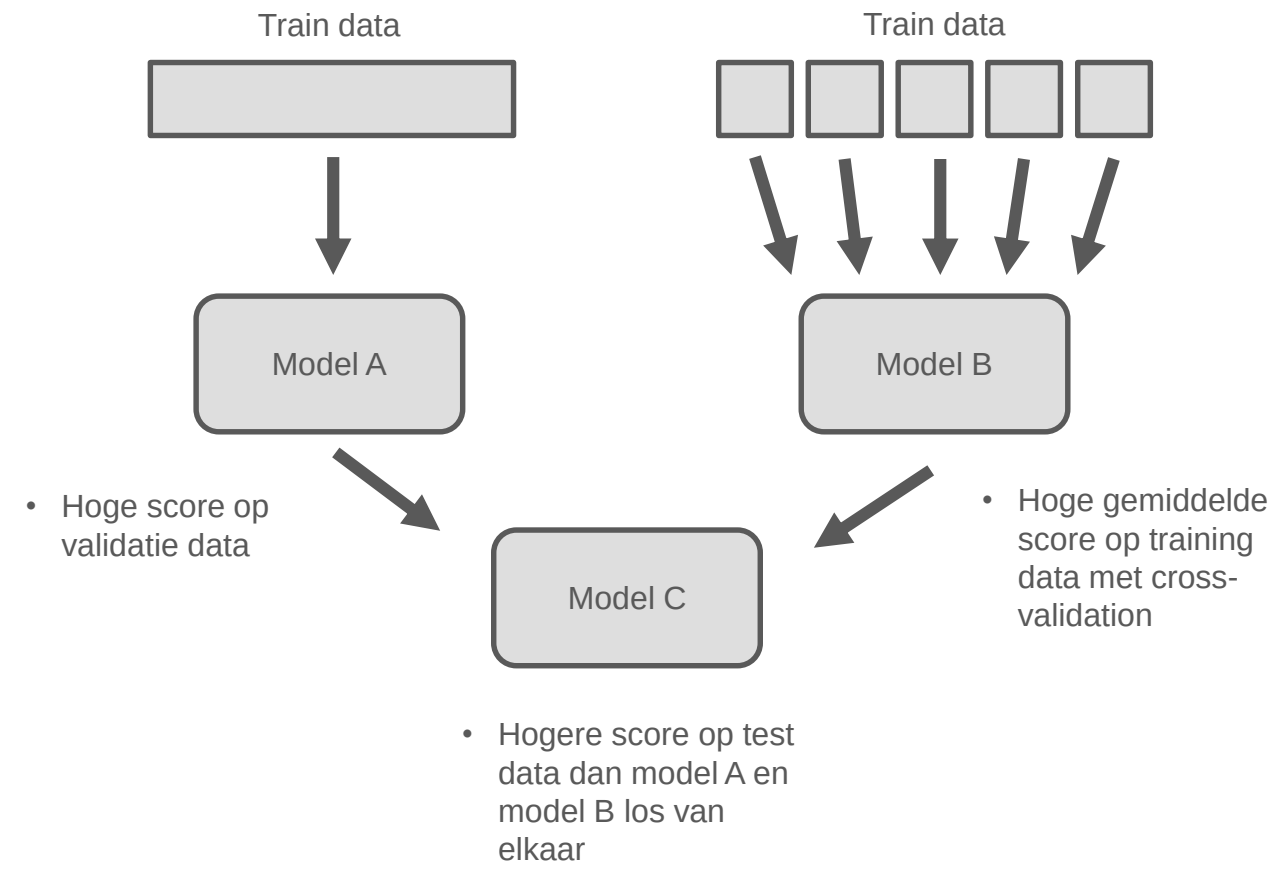
- (Un)weighted average
- Majority vote
- Trainen van nieuw model op de voorspellingen van voorgaande modellen



Tip 3: cross-validation

Als test data en validatie data verschillend verdeeld zijn:

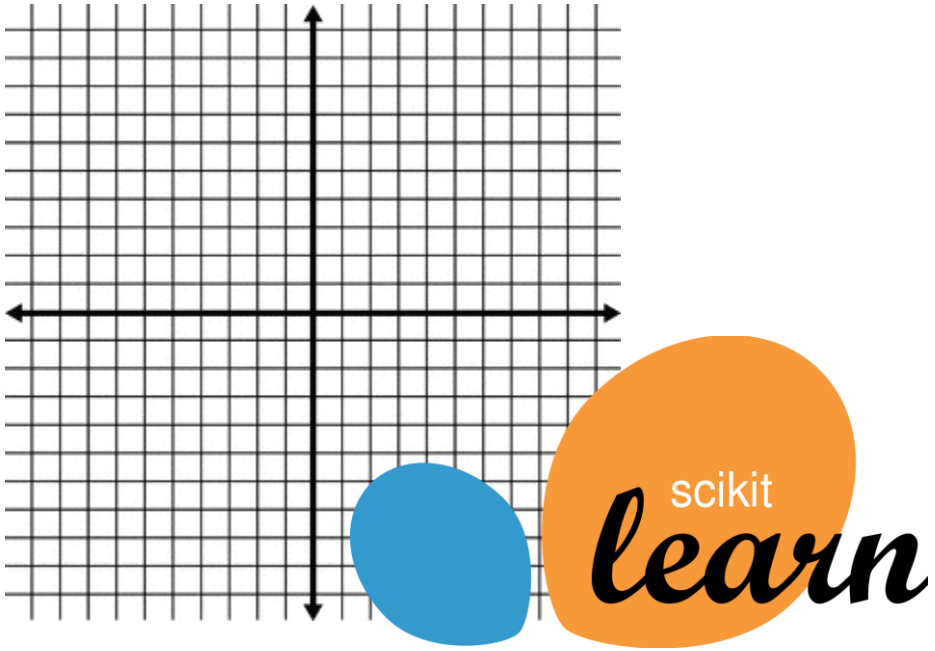
- Train model met hoge score op de validatie data
- Train model met beste gemiddelde score op cross-validation over training set
- De combinatie geeft beter resultaat op test data



Tip 4: parameter tuning

Grid search

- Automatisch zoeken naar de beste hyperparameters voor een model
- Verschillende parameter combinaties worden getest
- Kan met scikit-learn



Tip 4: parameter tuning

```
import xgboost as xgb
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

cv_params = {'eta':[0.2, 0.3, 0.4],
             'n_estimators': [10, 50, 200],
             'max_depth':[3, 6, 9],
             'subsample':[0.5, 0.75, 1.0],
             'colsample_bytree':[0.5, 0.75, 1.0],
             'colsample_bylevel':[0.5, 0.75, 1.0]}

ind_params = {'seed':42,
              'objective':'reg:linear',
              'eval_metric':'mae',
              'silent':1}

optimized_GBM = GridSearchCV(xgb.XGBRegressor(**ind_params),
                             cv_params,
                             scoring = 'neg_mean_absolute_error',
                             cv = 5,
                             n_jobs = -1)

optimized_GBM.fit(valid_X, valid_y)
```

```
optimized_GBM.best_params_
```

xgboost aanpasbare parameters

xgboost vaste parameters

grid search parameters

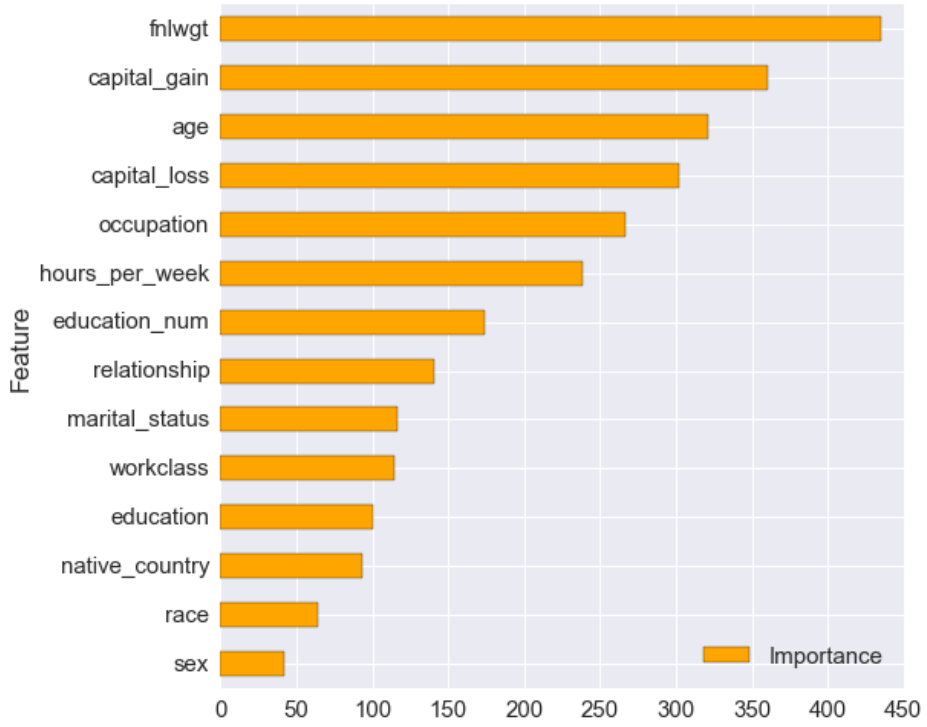
Tip 5: feature engineering & selection

Feature engineering

- Toevoegen van nieuwe features
- Kan relaties in kaart brengen die nog niet in de data worden meegenomen

Feature selection

- Verwijderen van onbelangrijke variabelen
- Kan makkelijk in XGBoost



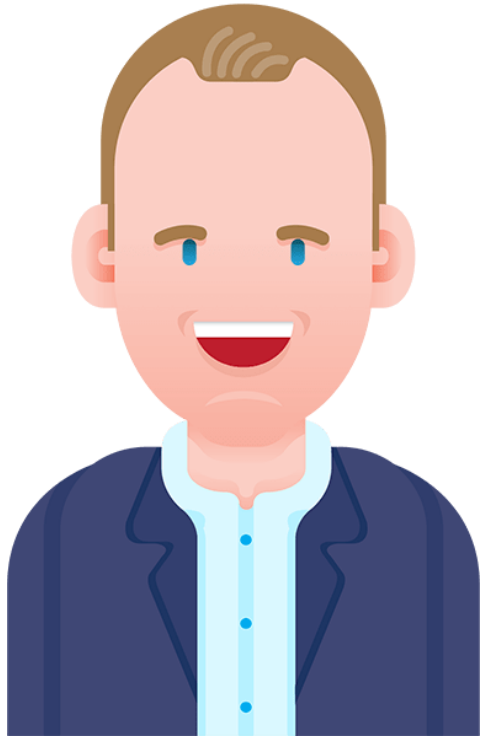
Tip 5: feature engineering & selection

```
import xgboost as xgb
import pandas as pd

# Maak train en validatie matrixen aan
dtrain = xgb.DMatrix(data=train_X.values, label=train_y.values, feature_names=train_X.columns)
dvalid = xgb.DMatrix(data=valid_X.values, label=valid_y.values, feature_names=valid_X.columns)

# Stel de verschillende parameters in
param = {'eta': 0.01, 'max_depth': 10, 'silent':1, 'objective': 'reg:linear', 'eval_metric': 'mae'}

num_round = 100

bst = xgb.train(param, dtrain, num_round)
```

```
xgb.plot_importance(bst)
```

Speciaal bier competitie

- Bart houdt van speciaal bier
- Bart heeft een bier app
- Bart wilt weten welke (nieuwe) bieren hij wel of niet lekker zal vinden
- Bart vraagt jullie hulp



Speciaal bier competitie

- Maak een XGBoost model dat voorspelt welke score Bart geeft aan een bier
- Gebruik één of meerdere modellen
- Winnaar krijgt een speciaalbier pakket

Info over de bier data (1/3)

- **calorien:** Totaal aantal calorieën in het bier
- **dichtheid:** De dichtheid van het bier (kg/dm^3)
- **gedronken:** Aantal keren dat Bart het bier gedronken heeft
- **is_belgisch:** Of het bier uit België komt (0=nee, 1=ja)
- **is_speciaal:** Of het bier een speciaalbier is (0=nee, 1=ja)
- **pct_alcohol:** Percentage alcohol in het bier (%)
- **pct_eiwitten:** Percentage eiwitten in het bier (%)

Info over de bier data (2/3)

- **pct_gist:** Percentage gist in het bier (%)
- **pct_hop:** Percentage hop in het bier (%)
- **recensie:** Gemiddelde score in de bier app (0.0-10.0)
- **suiker:** Hoeveelheid suiker in het bier (g/100ml)
- **water_kw:** Score voor de kwaliteit van het water (0.0-2.0)
- **zuur:** Score voor hoe zuur het bier is (0.0-2.0)
- **beoordeling:** Score voor hoe lekker Bart het bier zal vinden (1 t/m 10)

Info over de bier data (3/3)

- **Training set:** 3898 rijen (60%)
- **Validatie set:** 1299 rijen (20%)
- **Test set:** 1300 rijen (20%)

	calorien	dichtheid	gedronken	is_belgisch	is_speciaal	pct_alcohol	pct_eiwitten	pct_gist	pct_hop	recensie	suiker	water_kw	zuur	beoordeling
0	152.0	0.9935	26.0	1.0	1.0	6.7	10.00	0.98	4.4	6.0	1.20	0.47	0.39	7.0
1	126.0	0.9943	17.0	1.0	1.0	5.8	9.10	1.06	11.1	4.0	4.50	0.46	0.26	6.0
2	26.0	0.9965	13.0	0.0	0.0	6.0	10.00	1.84	10.0	5.7	2.20	0.47	0.04	6.0
3	197.0	0.9980	41.0	1.0	1.0	8.5	9.80	1.48	5.2	2.3	16.20	0.50	0.21	4.0
4	45.0	0.9914	9.0	1.0	1.0	6.7	10.50	0.68	5.4	2.8	3.60	0.40	0.33	7.0
5	140.0	0.9914	44.0	1.0	1.0	6.4	10.70	0.70	2.1	3.5	1.10	0.55	0.29	8.0

Meten van de resultaten

Train, validatie, test

- Openbare training set
- Openbare validatie set
- Test set features beschikbaar
- Test set labels niet beschikbaar
- Volgorde van voorspellingen moet hetzelfde blijven

Metric

- Mean Absolute Error (MAE):

$$\mathrm{MAE} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}|y_j - \hat{y}_j|$$

- Absolute error per voorspelling
- Elke error telt even zwaar mee

Stuur je voorspellingen (als csv) en team naam naar gijs@pipple.nl**!**

Hulpmiddelen

Er is een **Google Colab** notebook beschikbaar

- Inclusief de data
- Te downloaden via …

Deadline voor inzendingen:

- Om 20:30

Let's Pipple!

PIPPLE
DATA SCIENCE
WITH PURPOSE