Лекция 9.
Часть 1. Модификации градиентного бустинга

Блуменау М. И.

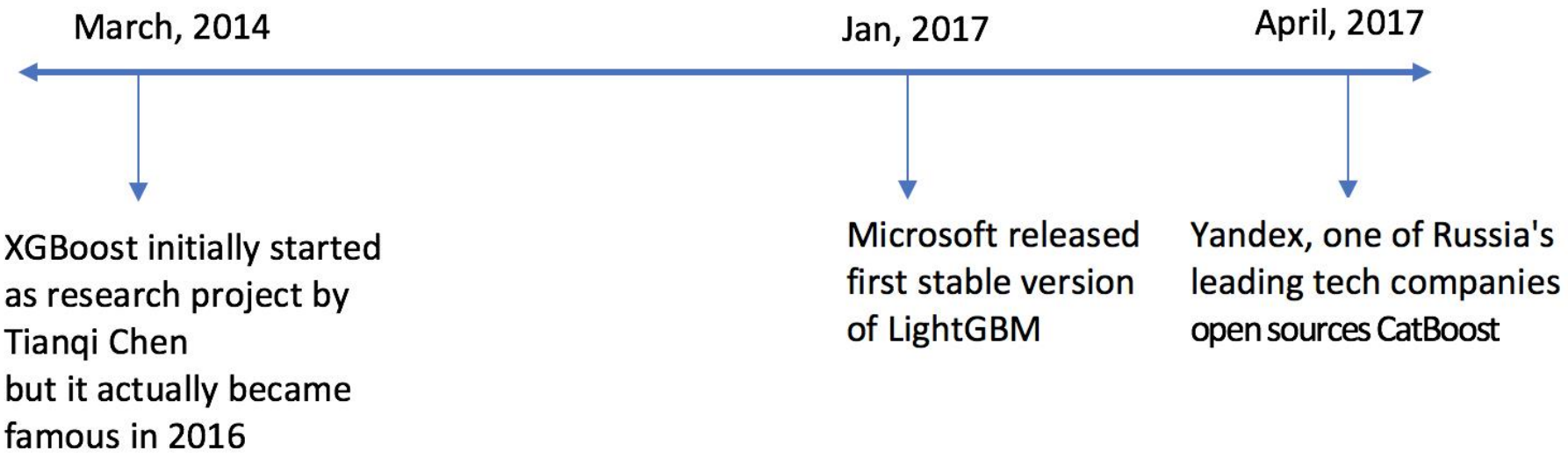
На основе материалов Кантонистовой Е.О.

ВШЭ, 2025

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

$$\text{obj}^{(t)} = \sum_{i=1}^{n}[l(y_i,\hat{y}_i^{(t-1)}) + g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2}h_i f_t^2(x_i)] + \omega(f_t) + \text{constant}$$

$$g_i = \partial_{\hat{y}_i^{(t-1)}} l(y_i,\hat{y}_i^{(t-1)})$$

$$h_i = \partial^2_{\hat{y}_i^{(t-1)}} l(y_i,\hat{y}_i^{(t-1)})$$

$$\omega(f) = \gamma T + \frac{1}{2}\lambda\sum_{j=1}^{T} w_j^2$$

XGBOOST

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:

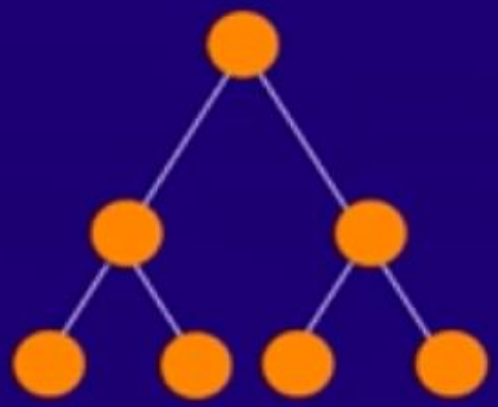
- Для кодирования категориальных признаков используется набор методов (one-hot encoding, счётчики, комбинации признаков и др.)

CATBOOST

Особенности catboost:

- динамический бустинг

Динамический бустинг



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

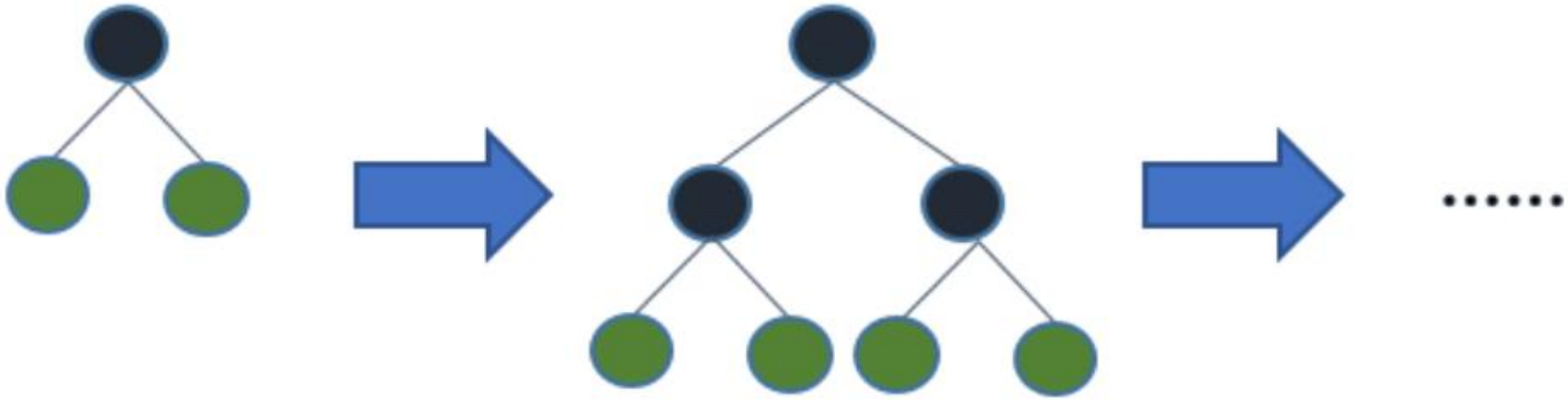
CATBOOST

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

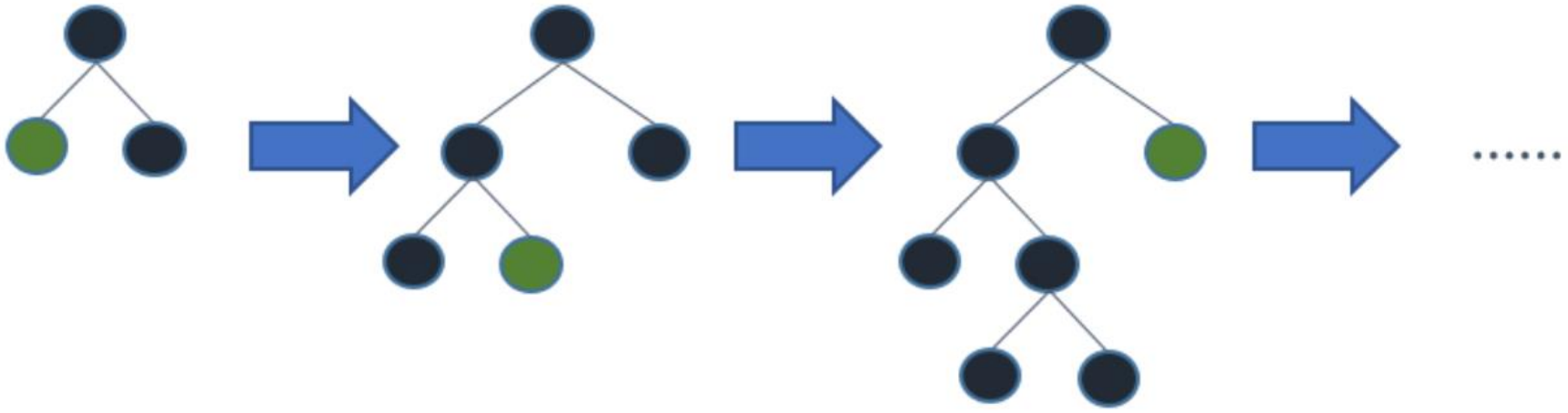
В других реализациях градиентного бустинга деревья строятся по уровням:



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.

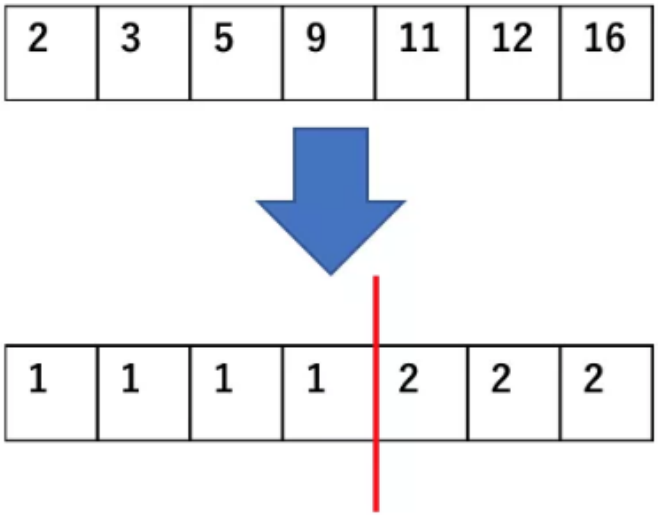
LIGHTGBM

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.