курс «Машинное обучение»

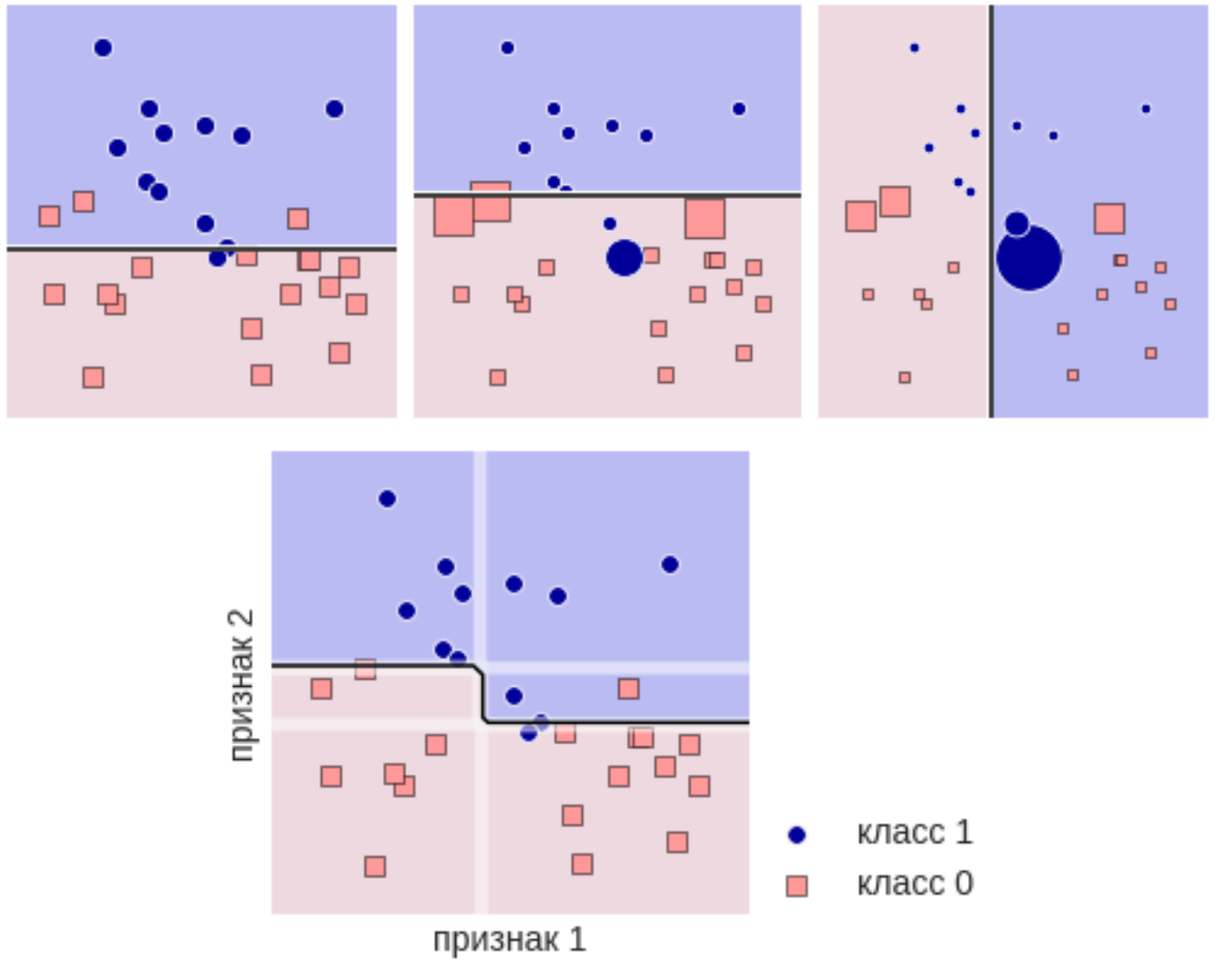
Градиентный бустинг

Александр Дьяконов

30 ноября 2021 года

Градиентный бустинг над деревьями

Вспоминаем идею…



Идея градиентного бустинга

FSAM + минимизация в случае дифференцируемой ф-ии ошибки

Задача регрессии с выборкой $(x_i, y_i)_{i=1}^m$,
дифференцируемая функция ошибки $L(y,a)$,
уже есть алгоритм $a(x)$ **– строим** $b(x)$**:**

$$a(x_i)+b(x_i)=y_i, i\in\{1,2,\ldots,m\}.$$

т.е. настраиваемся на невязку

$$b(x_i)\approx y_i - a(x_i)$$

формально надо:

$$\sum_{i=1}^m L(y_i, a(x_i)+b(x_i)) \to \min$$

а не

$$\sum_{i=1}^m L(y_i - a(x_i), b(x_i)) \to \min$$

хотя часто они эквивалентны

Проблема

Задача

$$\sum_{i=1}^{m} L(y_i, a(x_i) + b(x_i)) \to \min$$

может не решаться аналитически

$$F(b_1,\ldots,b_m) = \sum_{i=1}^{m} L(y_i, a(x_i) + b_i) \to \min_{(b_1,\ldots,b_m)}$$

Функция $F(b_1,\ldots,b_m)$ **убывает в направлении антиградиента, поэтому выгодно считать**

$$b_i = -L'(y_i, a(x_i)),\ \ i \in \{1,2,\ldots,m\}.$$

новая задача для настройки второго алгоритма:

$$(x_i, -L'(y_i, a(x_i)))_{i=1}^{m}.$$

Алгоритм градиентного бустинга (примитивный вариант)

- **Строим алгоритм в виде**

$$a_n(x) = \sum_{t=1}^{n} b_t(x),$$

для удобства можно даже считать, что $a_0(x) \equiv 0.$

- **Пусть построен** $a_t(x)$**, тогда обучаем алгоритм** $b_{t+1}(x)$ **на выборке**

$$(x_i, -L'(y_i, a_t(x_i)))_{i=1}^{m}$$

- $a_{t+1}(x) = a_t(x) + b_{t+1}(x).$

Итерационно получаем сумму алгоритмов…

Вот почему называется градиентный бустинг

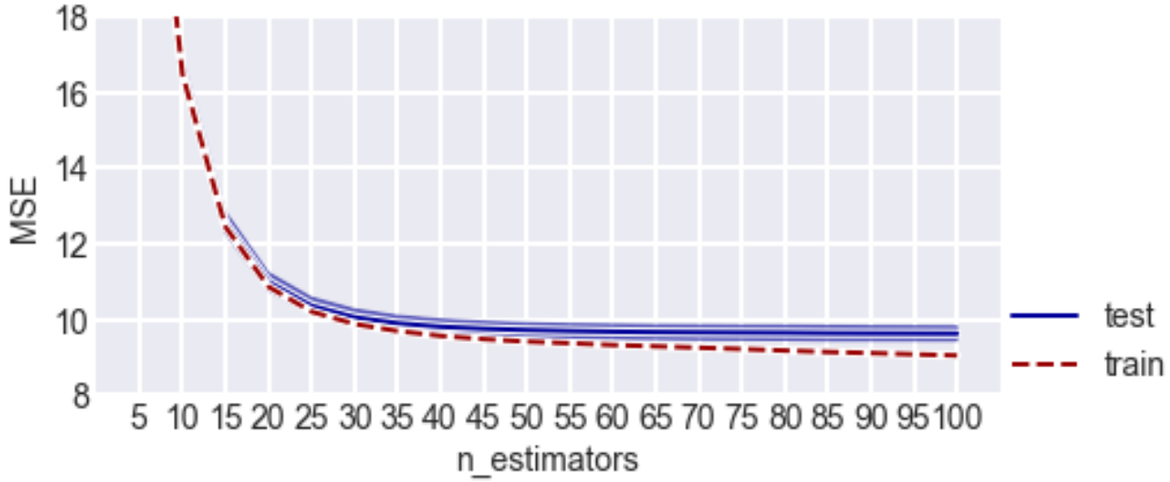
Частный случай: регрессия с СКО

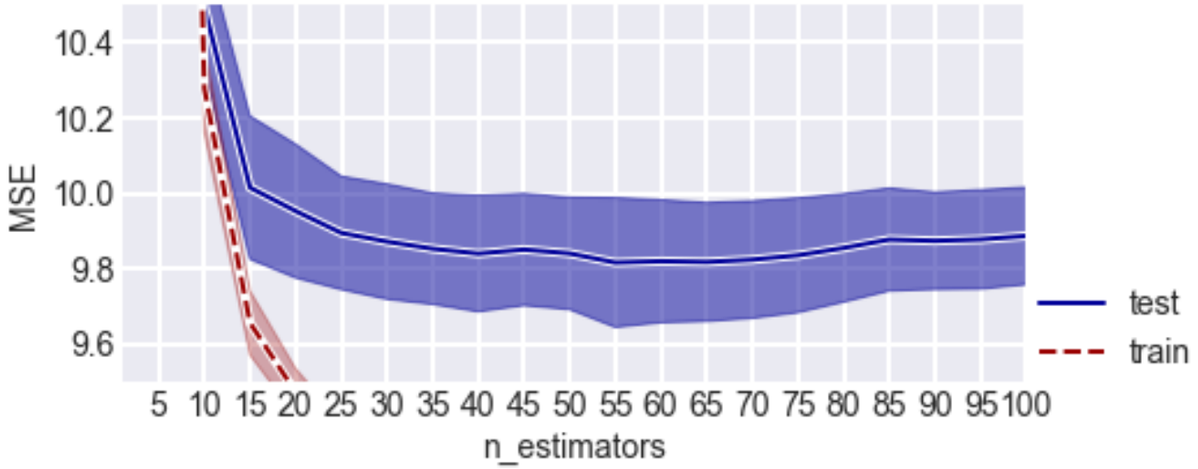
$$L(y,a)=\frac{1}{2}(y-a)^2, \quad L'(y,a)=-(y-a)$$

Задача для настройки следующего алгоритма

$$(x_i,\ y_i-a_t(x_i))_{i=1}^m$$

т.е. очень логично: настраиваемся на невязку!

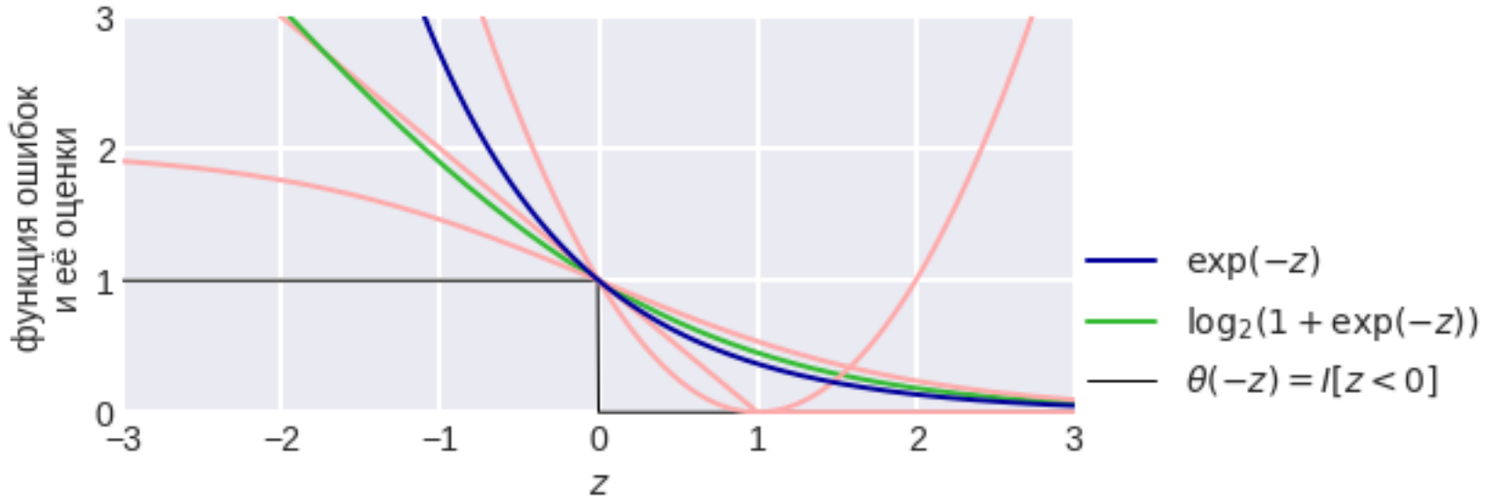




Частный случай: классификация на два класса

нужна дифференцируемая функция ошибки…

- **предполагаем, что алгоритм выдаёт вещественные значения**
- **нам подходят суррогатные функции ошибки**



Частный случай: классификация на два класса

BinomialBoost – логистическая функция ошибки:

$$L(y,a) = \log(1+e^{-y\cdot a}),\ a \in (-\infty,+\infty),\ y \in \{-1,+1\},$$

$$L'(y,a) = -\frac{y}{1+e^{-y\cdot a}} = -y\sigma(ya).$$

Функция ошибки типа Adaboost:

$$L(y,a) = e^{-y\cdot a},\ a \in (-\infty,+\infty),\ y \in \{-1,+1\},$$

$$L(y,a) = -ye^{-y\cdot a}.$$

здесь что-то выводится явно…

Итерация градиентного бустинга

Как решать задачу с выборкой

$$(x_i, -L'(y_i, a_t(x_i)))_{i=1}^m$$**?**

Любым простым методом!

Мы уже настраиваемся на нужную функцию ошибки.

Проблемы

Шаг в сторону антиградиента

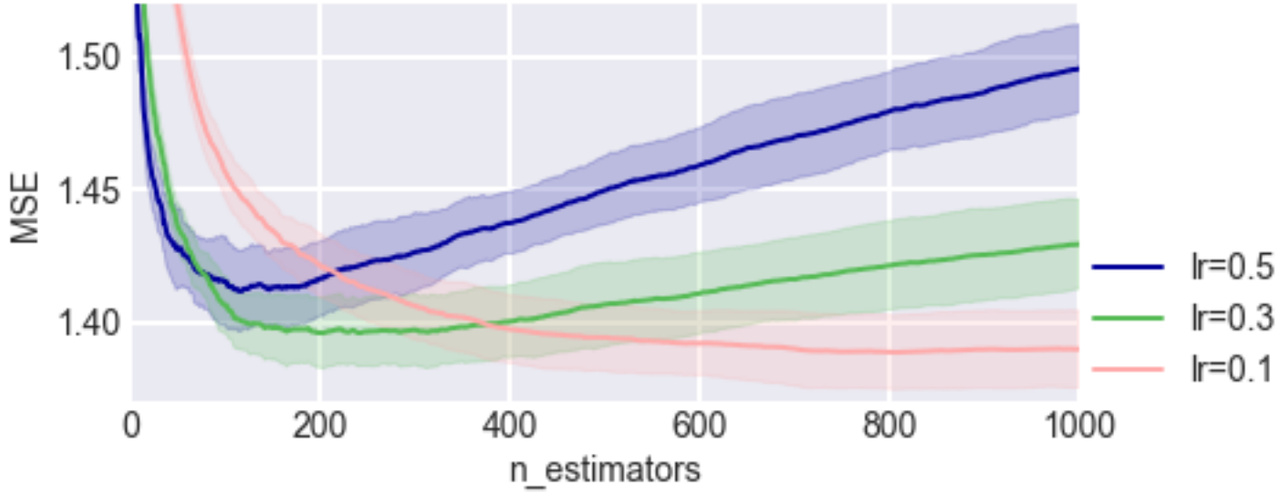
- **не приводит в локальный минимум (сразу) $\Rightarrow$ итерации**
- **мы всё равно не можем сделать такой шаг, а лишь шаг по ответам какого-то алгоритма модели $\Rightarrow$ не нужно стремиться шагать именно туда**

Дальше решение проблем…

Эвристика сокращения – Shrinkage

$$a_{t+1}(x) = a_t(x) + \eta \cdot b_t(x),$$

$\eta \in (0, 1]$ – **скорость (темп) обучения (learning rate)**



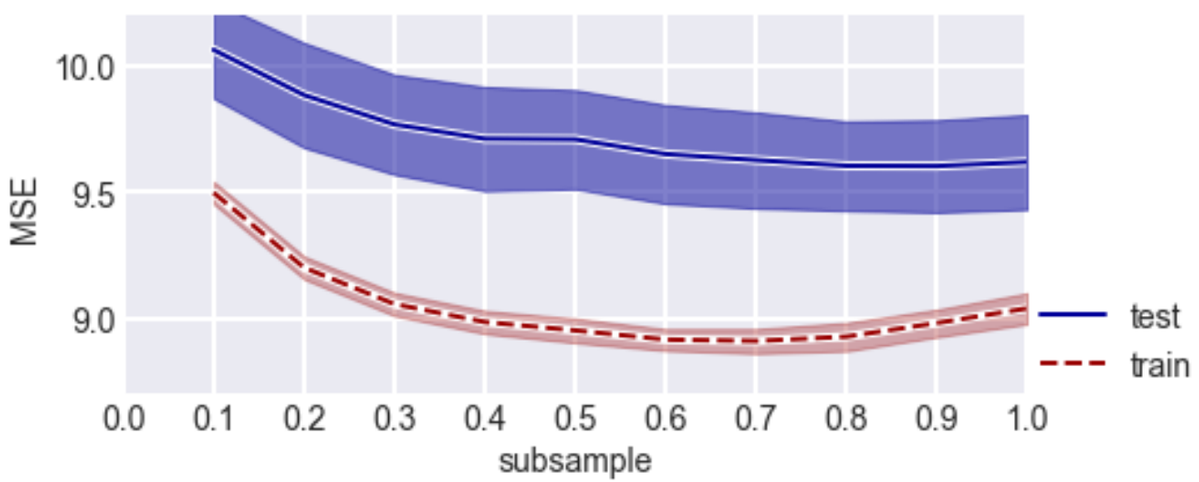
Видно, что число слагаемых (базовых алгоритмов) – шагов бустинга – надо контролировать (при увеличении можем переобучиться)

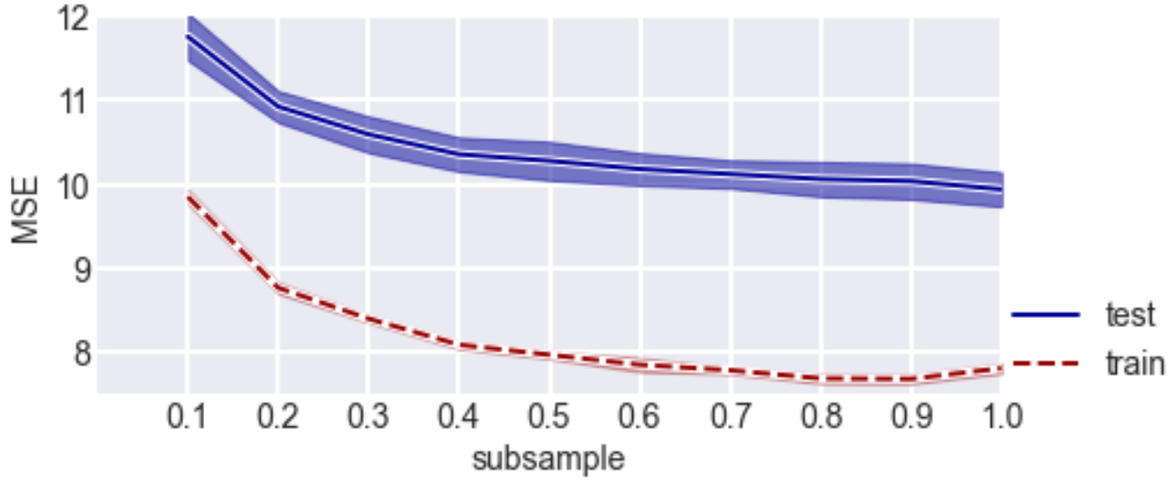
Чем меньше скорость, тем больше итераций надо

Стохастический градиентный бустинг (Stochastic gradient boosting)

Идея бэгинга Бреймана: bag fraction ~ берём часть всей выборки

бутстрепа обычно нет…



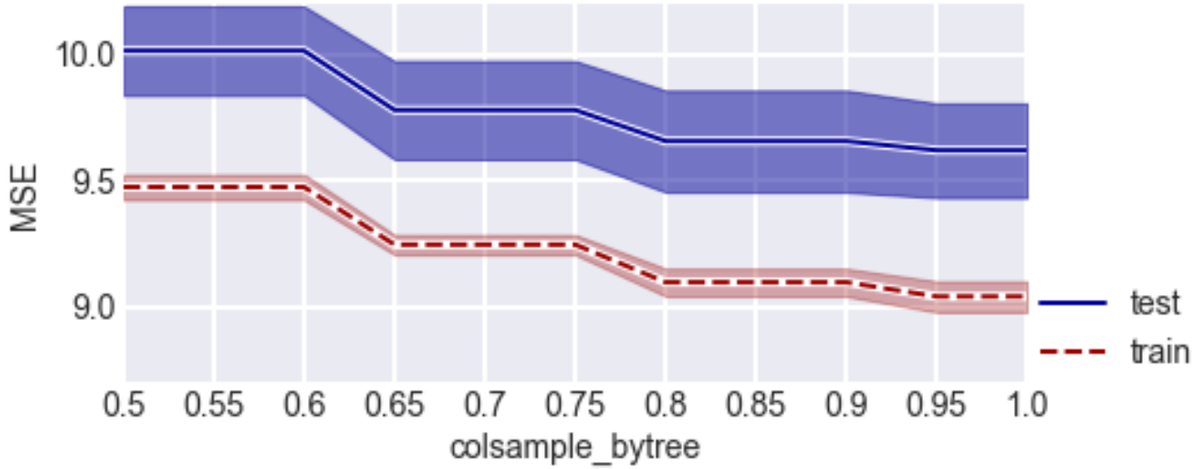


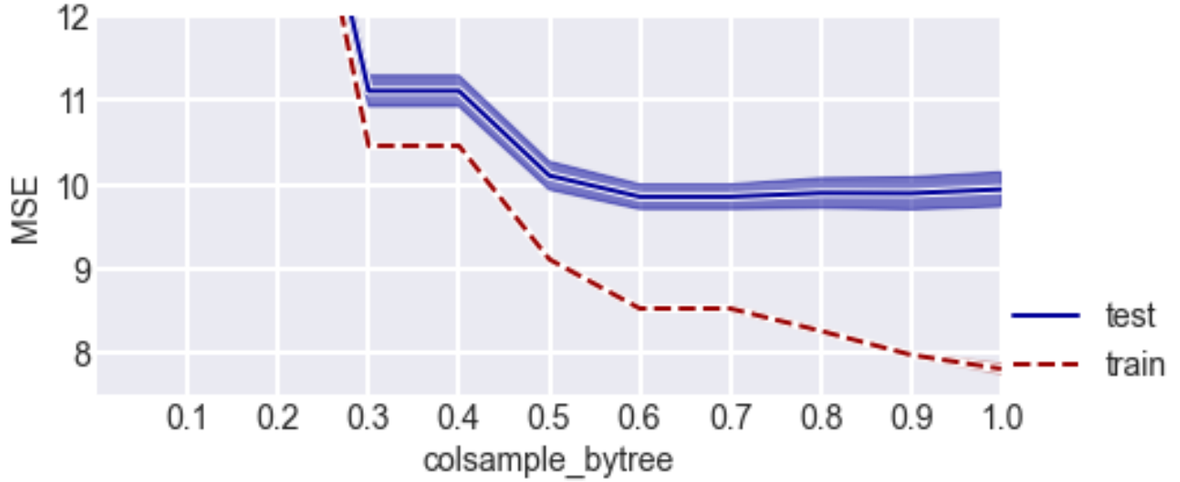
- **м.б. лучше качество («регуляризация»)**
- **быстрее**
- **аналог обучения по минибатчам**
- **можно вычислить OOB-ошибки**

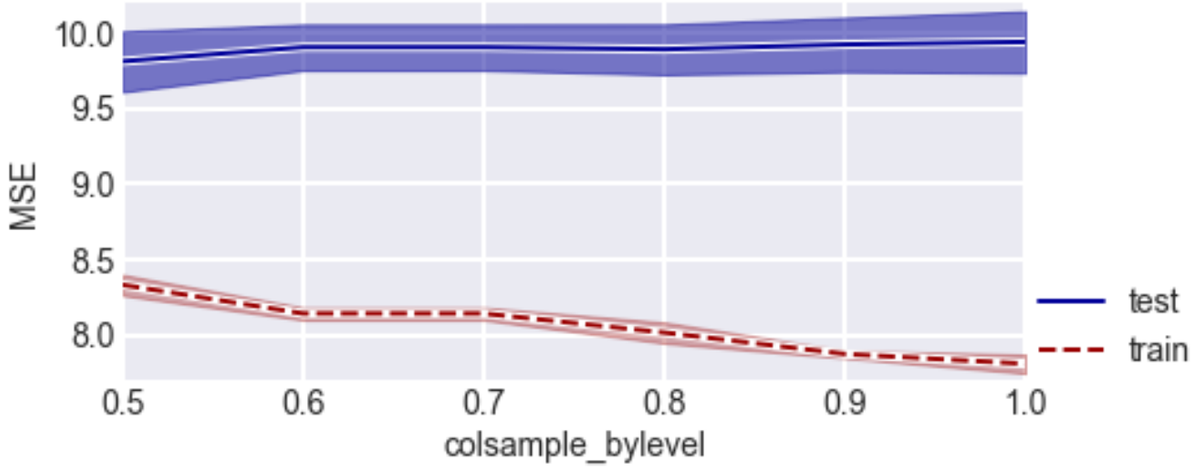
J. Friedman «Stochastic Gradient Boost» // 1999 http://statweb.stanford.edu/~jhf/ftp/stobst.pdf

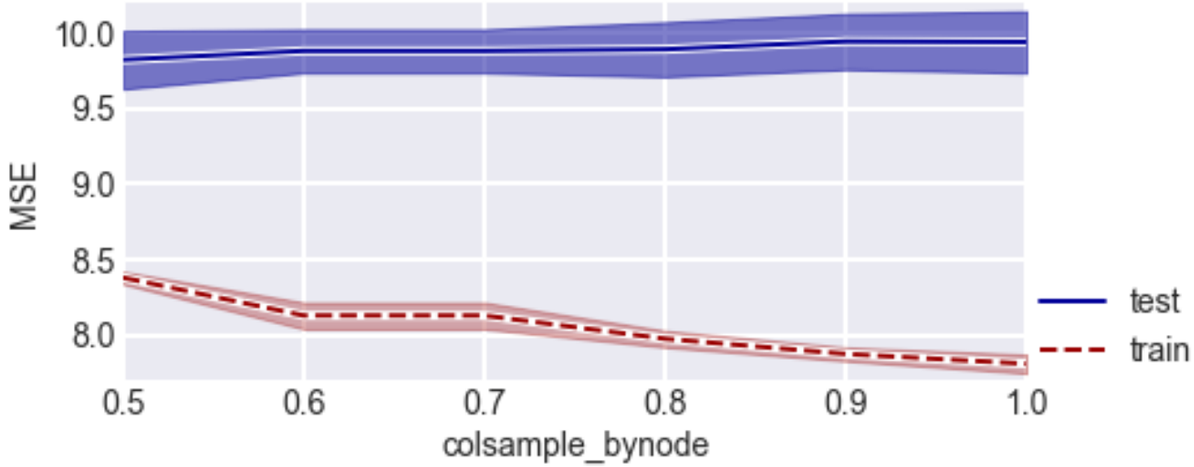
Column / Feature Subsampling for Regularization

аналогичная идея с признаками





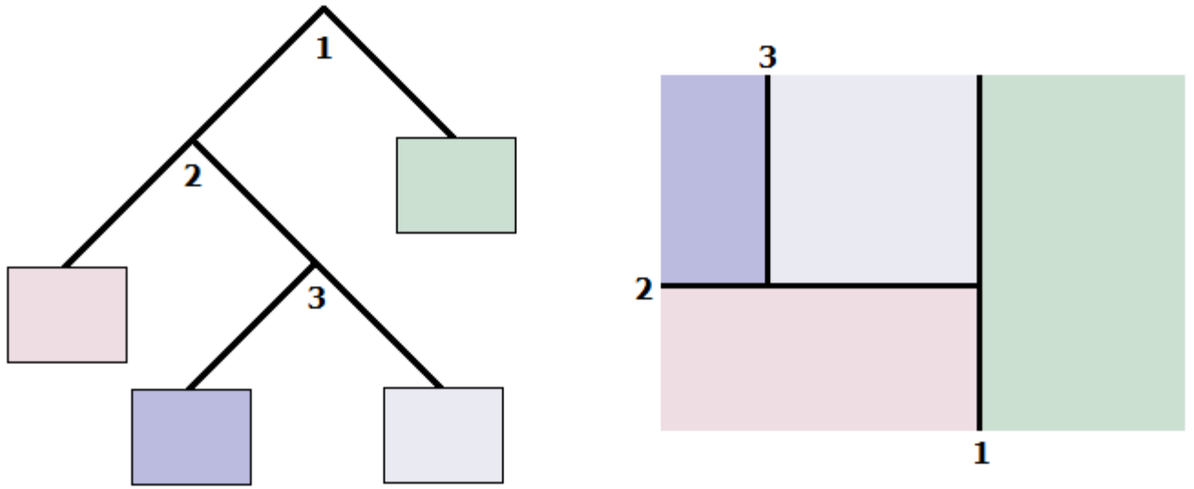




TreeBoost – градиентный бустинг над деревьями

Решающее дерево:

$$b(x) = \sum_j \beta_j I[x \in X_j]$$



TreeBoost – градиентный бустинг над деревьями

Наша основная задача

$$\sum_{i=1}^{m} L(y_i, a(x_i) + \sum_j \beta_j I[x \in X_j]) \to \min$$

Разбиваем по областям:

$$\sum_{x_i \in X_j} L(y_i, a(x_i) + \beta_j) \to \min_{\beta_j}.$$

если разбиение выбрано и зафиксировано,
то в каждой области осталось выбрать оптимальную константу

Продвинутые методы оптимизации

Наша основная задача

$$F(b_1,\ldots,b_m)=\sum_{i=1}^{m}L(y_i,a(x_i)+b_i)\to\min_{(b_1,\ldots,b_m)},$$

заметим, что

$$F=\sum_{i=1}^{m}L(y_i,a(x_i)+b_i)\approx$$

$$\sum_{i=1}^{m}\left[L(y_i,a(x_i))+L'(y_i,a(x_i))\cdot b_i+\frac{1}{2}L''(y_i,a(x_i))\cdot b_i^2\right]$$

(частные производные по второму аргументу функции ошибки)

Продвинутые методы оптимизации

$$\sum_{i=1}^{m}\left[g_i b_i + \frac{1}{2} h_i b_i^2 \right] \to \min,$$

$$g_i = L'(y_i, a(x_i)),$$

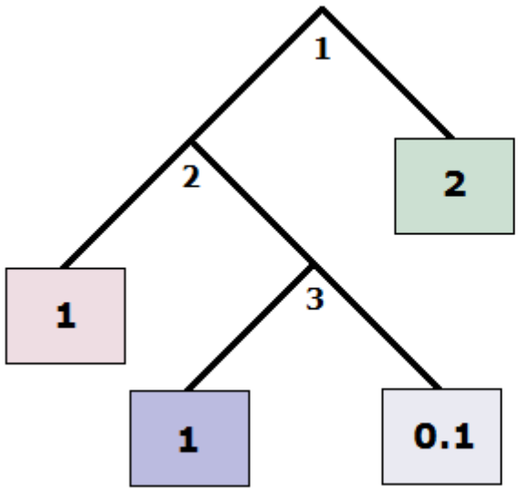
$$h_i = L''(y_i, a(x_i)).$$

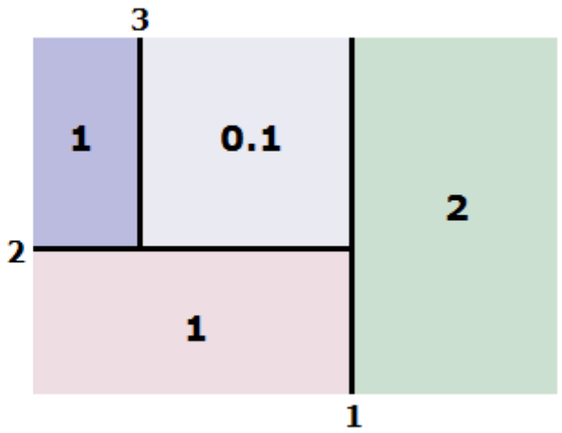
Сделаем оптимизацию с регуляризацией

Продвинутые методы оптимизации

Пусть дерево $b(x)$ делит пространство объектов на T областей $X_1,\ldots,X_T$, в каждой области X_j принимает значение β_j.

$$\Phi = \sum_{i=1}^{m}\left[g_i b_i + \frac{1}{2} h_i b_i^2 \right] + \gamma T + \lambda \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T} \beta_j^2 \to \min$$





$$\Phi = \ldots + \gamma 4 + \lambda \frac{1}{2}(1+1+0.01+4)$$

Продвинутые методы оптимизации

$$\Phi = \sum_{j=1}^{T}\left[\sum_{x_i \in X_j}\left[g_i\beta_j + \frac{1}{2}h_i\beta_j^2\right] + \lambda\frac{1}{2}\beta_j^2\right] + \gamma T =$$

$$= \sum_{j=1}^{T}\left[\beta_j\sum_{x_i \in X_j} g_i + \frac{1}{2}\beta_j^2\left(\sum_{x_i \in X_j} h_i + \lambda\right)\right] + \gamma T$$

Приравнивая производную к нулю:

$$\beta_j = -\frac{\sum_{x_i \in X_j} g_i}{\sum_{x_i \in X_j} h_i + \lambda}$$

Продвинутые методы оптимизации

Минимальное значение (при фиксированной структуре дерева)

$$\Phi_{\min} = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T}\frac{\left(\sum\limits_{x_i \in X_j} g_i\right)^2}{\sum\limits_{x_i \in X_j} h_i + \lambda} + \gamma T$$

Можно использовать при построении дерева для его оценки:

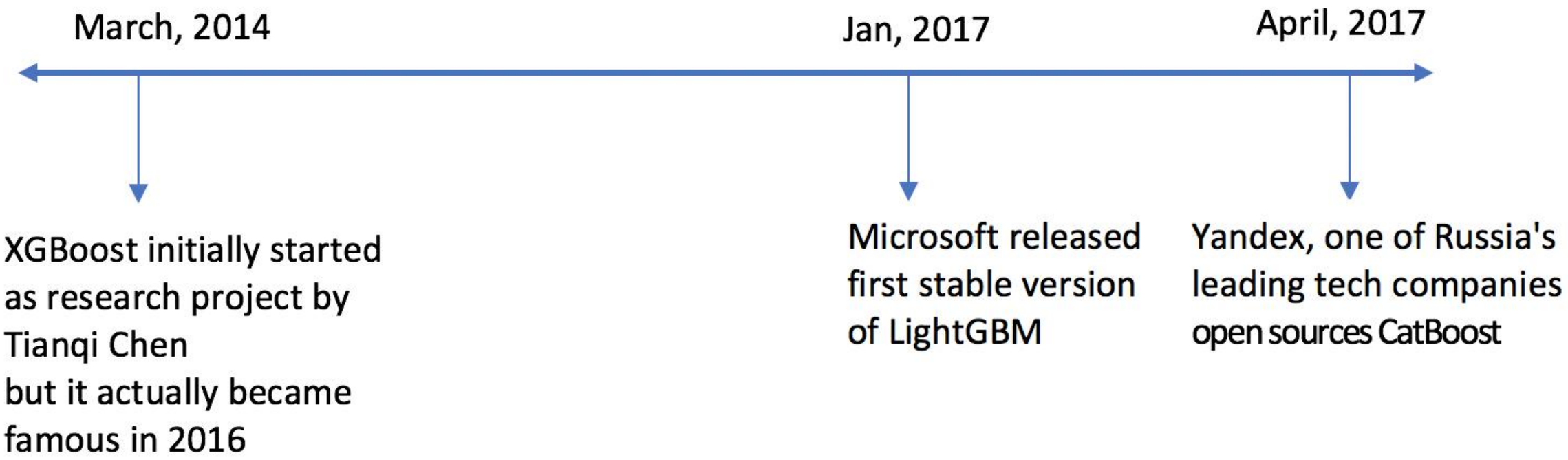
$$\text{Gain} = \frac{1}{2}\left(\frac{\left(\sum\limits_{x_i \in X_{\text{left}}} g_i\right)^2}{\sum\limits_{x_i \in X_{\text{left}}} h_i + \lambda} + \frac{\left(\sum\limits_{x_i \in X_{\text{right}}} g_i\right)^2}{\sum\limits_{x_i \in X_{\text{right}}} h_i + \lambda} - \frac{\left(\sum\limits_{x_i \in X_{\text{left}}} g_i + \sum\limits_{x_i \in X_{\text{right}}} g_i\right)^2}{\sum\limits_{x_i \in X_{\text{left}}} h_i + \sum\limits_{x_i \in X_{\text{right}}} h_i + \lambda}\right) - \gamma$$

Продвинутые методы оптимизации

можно использовать прунинг –
строим дерево, рекурсивно обрезаем, если Gain<0

Не используем какой-то традиционный критерий расщепления.
Исходим из функции ошибки!

История продвинутых методов / современные реализации



sklearn.ensemble.	**GradientBoostingRegressor GradientBoostingClassifier**
XGBoost (eXtreme Gradient Boosting)	**https://github.com/dmlc/xgboost**
LightGBM, Light Gradient Boosting Machine	**https://github.com/Microsoft/LightGBM**
CatBoost	**https://github.com/catboost/catboost**

https://towardsdatascience.com/catboost-vs-light-gbm-vs-xgboost-5f93620723db

Особенности реализаций продвинутых методов

	XGBoost	LightGBM	CatBoost
Построение деревьев	**По уровням (Level-wise)** потом добавили по листьям, но для гистограмм	**По листьям (Leaf-wise)** **best-first**	**По уровням однородно** **(oblivious trees)**
Поиск расщеплений	**Exact greedy algorithm** (полный перебор) **+** добавили потом **гистограммный подход** tree_method='hist'	**Гистограммный подход** **(использование бинов)** **+**	**Предварительный биннинг**
Фишки		**Exclusive Feature Bundling** Связываем разреженные признаки, которые одновременно не нули **Random forest mode**	**Динамический бустинг** **Overfitting Detector** Ранний останов od_type='Iter' use_best_model=True eval_metric=...

Особенности реализаций продвинутых методов

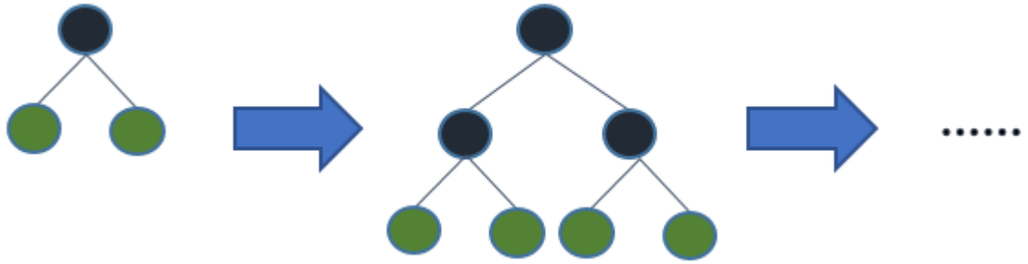
	XGBoost	LightGBM	CatBoost
Сэмплирование / градиенты / сплиты	– Сплиты медленнее, чем у конкурентов pre-sorted algorithm & Histogram-based	Gradient-based One-Side Sampling (GOSS) Среди малых градиентов сэмплируем, но с большим весом не выбран ли по умолчанию	Бернулли или байесовская подвыборка
Важности признаков	Gain / Frequency или Weight / Coverage	Gain / split	Prediction Values Change / Loss Function Change
Нули обрабатываются как NaN	+ см. ниже Sparsity-aware Split Finding	+ По умолчанию `use_missing=True`	
Неизвестные значения	На оптимальную сторону сплита	На оптимальную сторону сплита	Min / Max

Особенности реализаций продвинутых методов

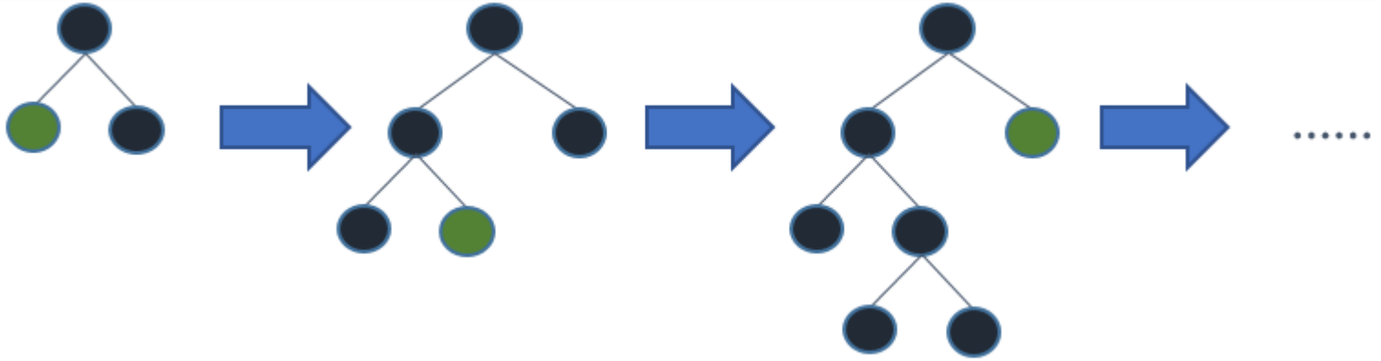
	XGBoost	LightGBM	CatBoost
Категориальные признаки	– вводится в версии 1.5.1	+ На две части с учётом mean target	+ Ordered Target Statistics Smoothed target encoding OHE с числом категорий < one_hot_max_size Жадные комбинации категориальных признаков

Построение деревьев

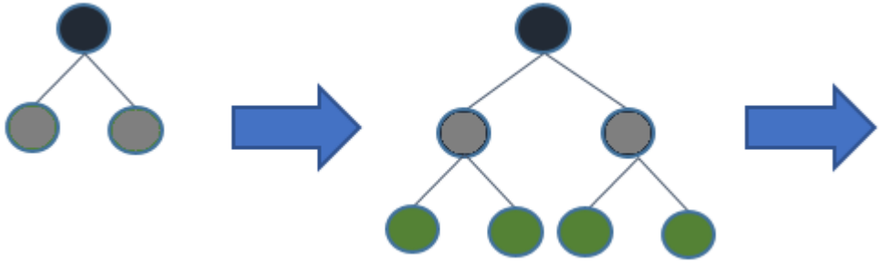
По уровням (Level-wise)



По листьям (Leaf-wise)

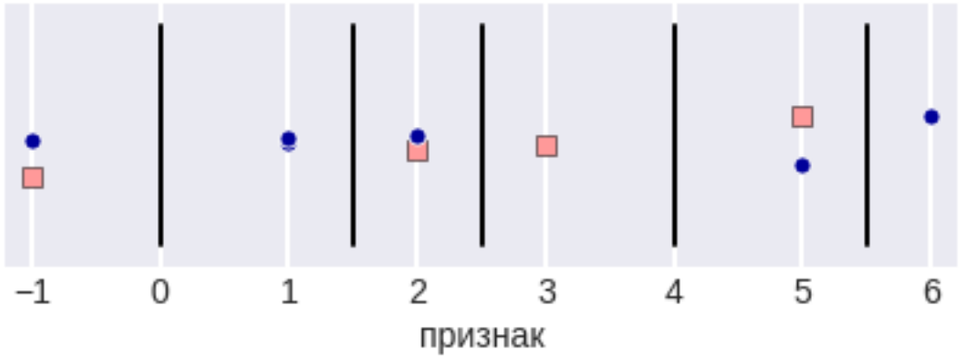


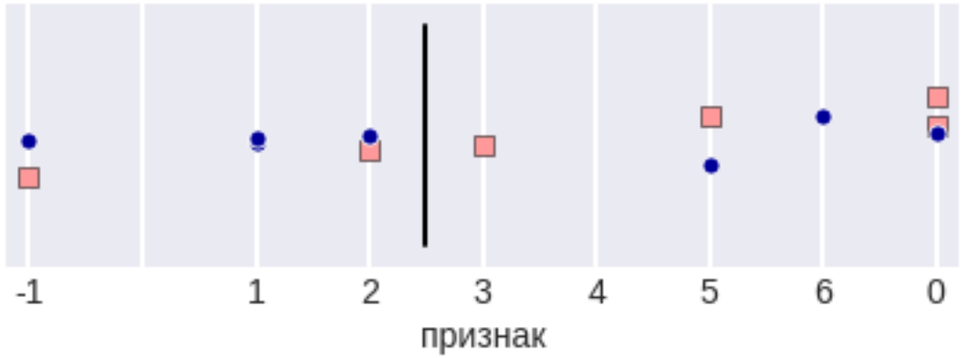
По уровням однородно (oblivious trees)



https://github.com/Microsoft/LightGBM/blob/master/docs/Features.rst#references

Игнорирование нулей / NaN





убираем нули,
выбираем сплит,
нули добавляем в «выгодное поддерево»

https://mlexplained.com/2018/01/05/lightgbm-and-xgboost-explained/

Гистограммный подход (Histogram based algorithm)

каждый вещественный признак дискретизуется – разбивается на бины

теперь число порогов, которые надо посмотреть ~ число бинов

Exclusive Feature Bundling (EFB)

объединение признаков с большим числом нулей (жадный алгоритм)

поиск оптимального решения – NP-полная задача

	признак 1	признак 2	bundle
0	1	0	1
1	0	1	3
2	1	0	1
3	2	0	2
4	0	2	4
5	0	3	5
6	1	0	1
7	0	2	4
8	2	0	2

строим граф признаков,
веса рёбер = число конфликтов между признаками,
сортируем признаки по степени

идём по признакам, по возможности включаем в существующие бандлы
(если мало конфликтов)

https://towardsdatascience.com/what-makes-lightgbm-lightning-fast-a27cf0d9785e

Gradient-based One-Side Sampling (GOSS)

считаем градиенты

$$g(x_1)=1,\ g(x_2)=2,\ g(x_3)=0.1,\ g(x_4)=0.5,\ g(x_5)=2.5,\ g(x_6)=0$$

выбираем top-2

$$g(x_1)=1,\ g(x_2)=2,\ g(x_3)=0.1,\ g(x_4)=0.5,\ g(x_5)=2.5,\ g(x_6)=0$$

из остальных сэмплируем

$$2\times g(x_1)=1,\ g(x_2)=2,\ 2\times g(x_4)=0.5,\ g(x_5)=2.5$$

но берём с весом

из объектов с маленькими градиентами сэмплируем (используем не все), но учитываем с большим весом

CatBoost = Category + Boosting: проблема смещения

Smoothed target encoding – для категориальных признаков

При построении дерева
значение в листе = сумма антиградиентов
получается утечка
мы оцениваем значение в точке, зная метку на ней!

Динамический бустинг (Ordered Boosting)
- случайная перестановка обучения
- оценивания значения, используя информацию до рассматриваемой точки в таблице

oblivious trees – один предикат на каждом уровне

работает «из коробки»
с параметрами по умолчанию

CatBoost: Ordered Boosting

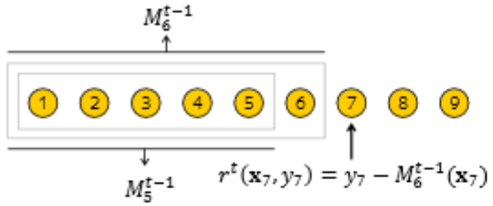


Figure 1: Ordered boosting principle, examples are ordered according to σ.

Algorithm 1: Ordered boosting

input : $\{(\mathbf{x}_k, y_k)\}_{k=1}^n$, I;

$\sigma \leftarrow$ random permutation of $[1, n]$;
$M_i \leftarrow 0$ for $i = 1..n$;
for $t \leftarrow 1$ **to** I **do**
  for $i \leftarrow 1$ **to** n **do**
    $r_i \leftarrow y_i - M_{\sigma(i)-1}(\mathbf{x}_i)$;
  for $i \leftarrow 1$ **to** n **do**
    $\Delta M \leftarrow$ $LearnModel((\mathbf{x}_j, r_j) : \sigma(j) \le i)$;
    $M_i \leftarrow M_i + \Delta M$;
return M_n

Algorithm 2: Building a tree in CatBoost

input : M, $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^n$, α, L, $\{\sigma_i\}_{i=1}^s$, $Mode$

$grad \leftarrow CalcGradient(L, M, y)$;
$r \leftarrow random(1, s)$;
if $Mode = Plain$ **then**
  $G \leftarrow (grad_r(i)$ for $i = 1..n)$;
if $Mode = Ordered$ **then**
  $G \leftarrow (grad_{r,\sigma_r(i)-1}(i)$ for $i = 1..n)$;
$T \leftarrow$ empty tree;
foreach *step of top-down procedure* **do**
  foreach *candidate split* c **do**
    $T_c \leftarrow$ add split c to T;
    if $Mode = Plain$ **then**
      $\Delta(i) \leftarrow \text{avg}(grad_r(p)$ for $p : leaf_r(p) = leaf_r(i))$ for $i = 1..n$;
    if $Mode = Ordered$ **then**
      $\Delta(i) \leftarrow \text{avg}(grad_{r,\sigma_r(i)-1}(p)$ for $p : leaf_r(p) = leaf_r(i), \sigma_r(p) < \sigma_r(i))$ for $i = 1..n$;
    $loss(T_c) \leftarrow \cos(\Delta, G)$
  $T \leftarrow \arg\min_{T_c}(loss(T_c))$
if $Mode = Plain$ **then**
  $M_{r'}(i) \leftarrow M_{r'}(i) - \alpha\,\text{avg}(grad_{r'}(p)$ for $p : leaf_{r'}(p) = leaf_{r'}(i))$ for $r' = 1..s$, $i = 1..n$;
if $Mode = Ordered$ **then**
  $M_{r',j}(i) \leftarrow M_{r',j}(i) - \alpha\,\text{avg}(grad_{r',j}(p)$ for $p : leaf_{r'}(p) = leaf_{r'}(i), \sigma_{r'}(p) \le j)$ for $r' = 1..s$, $i = 1..n$, $j \ge \sigma_{r'}(i) - 1$;
return T, M

Параметры градиентного бустинга: определяющие тип бустинга

objective / loss_function	– какая задача решается, какая целевая функция и в каком формате будет ответ
booster boosting_type	– какой бустинг проводить: над решающими деревьями, линейный или dart – lgb: gbdt / dart (Dropouts meet Multiple Additive Regression Trees) / goss / rf
tree_method	– как строить деревья (grow_policy – порядок построения дерева: на следующем шаге расщеплять вершину, ближайшую к корню, или на которой ошибка максимальна)
base_score	– начальный ответ на всех объектах (bias)
eval_metric	– значения какой функции ошибки смотреть на контроле (как правило, задание этого параметра не означает, что эту функцию будем минимизировать при настройке бустинга)

DART: Dropouts meet Multiple Additive Regression Trees

Вместо

$$a_n(x) = \sum_{t=1}^{n} b_t(x)$$

берём подмножество построенных деревьев $Q = \text{randsubset}(\{1, 2, \ldots, n\})$

пытаемся дополнить их

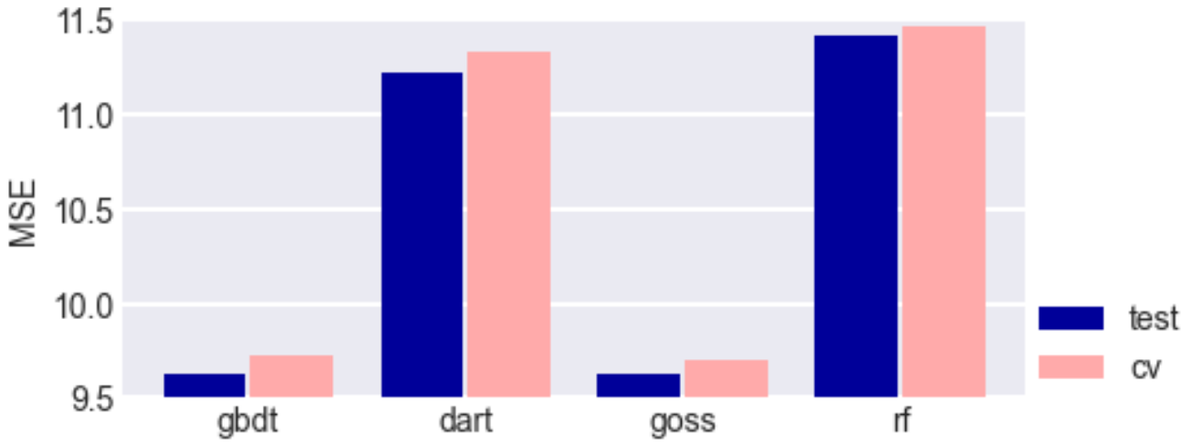
$$b_{t+1} = \arg\min_b \sum_{i=1}^{m} L(y_i, \sum_{t \in Q} b_t(x_i) + b(x_i))$$

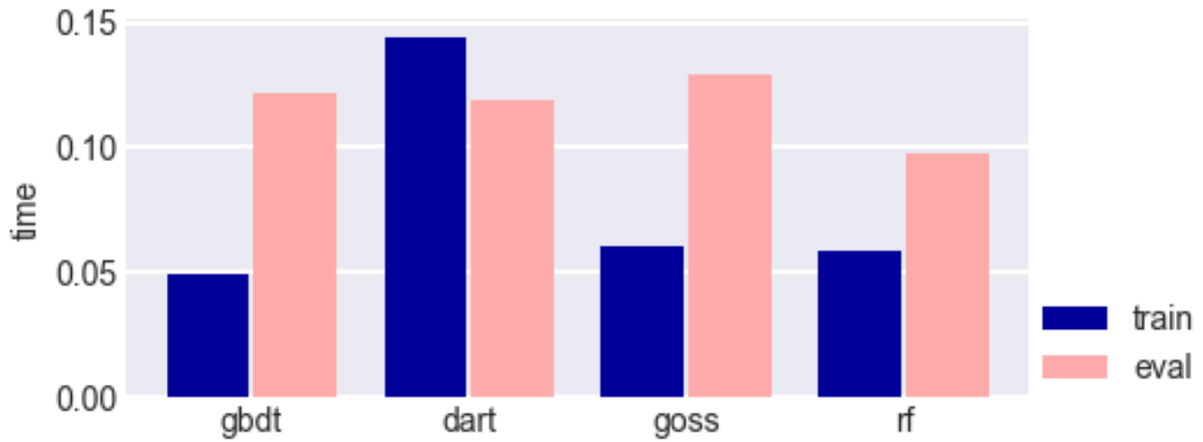
потом нужна поправка, что смещали ответ не всего ансамбля (подробно об это не будем)

$$a_n(x) = \sum_{t=1}^{n} b_t(x) + \eta b_{t+1}(x)$$

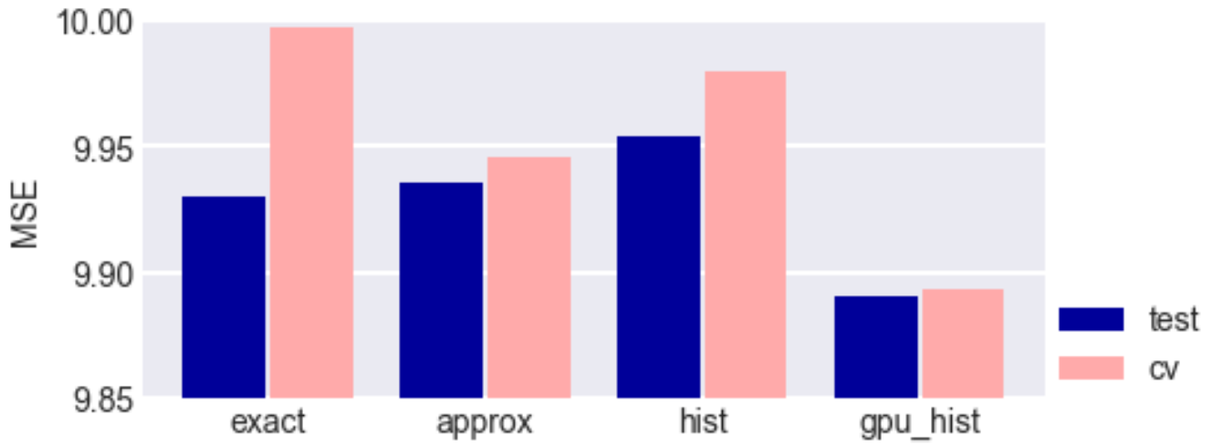
http://proceedings.mlr.press/v38/korlakaivinayak15.pdf

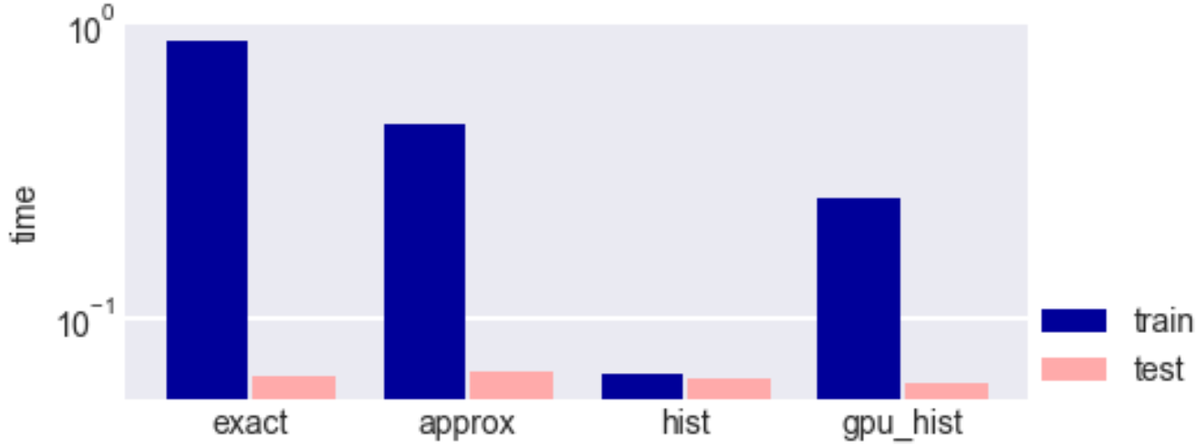
LGBM: разные варианты





XGBoost: разные варианты





Минутка кода

```
from lightgbm import LGBMRegressor
model = LGBMRegressor()
model = LGBMRegressor(boosting_type='dart')
model = LGBMRegressor(boosting_type='goss')
model = LGBMRegressor(boosting_type='rf', subsample_freq=1, subsample=0.75)
```

Без `subsample_freq` не берутся подвыборки!

```
model = XGBRegressor()
model = XGBRegressor(tree_method='approx')
model = XGBRegressor(tree_method='hist')
model = XGBRegressor(tree_method='gpu_hist')
```

Как правильно строить RF

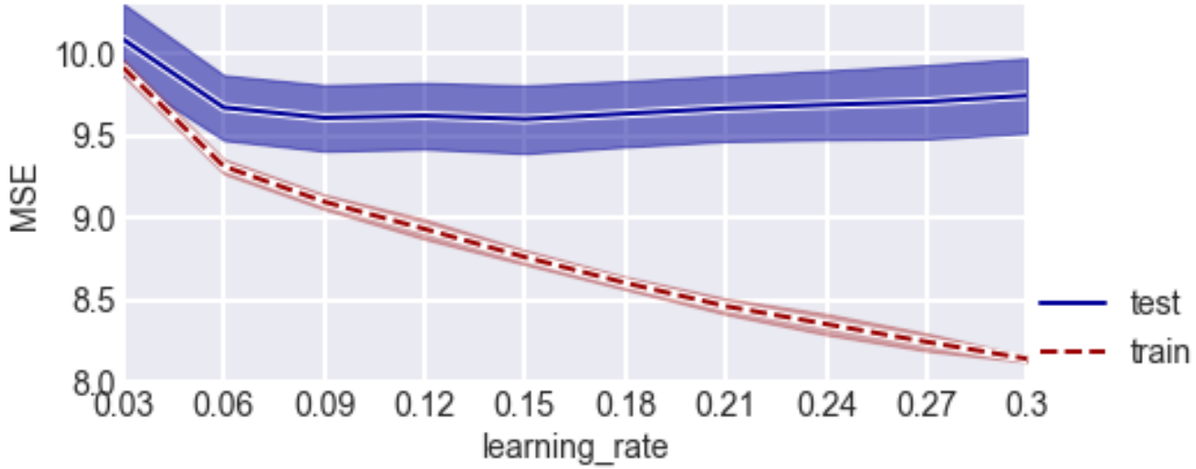
```
params = {'colsample_bynode': 0.8, 'learning_rate': 1,
          'max_depth': 5, # глубину м.б. надо сделать больше
          'num_parallel_tree': 100, # именно это число деревьев в RF
          'objective': 'binary:logistic',
          'subsample': 0.8, 'tree_method': 'gpu_hist'}

bst = train(params, dmatrix, num_boost_round=1) # а вот бустить не надо!
```

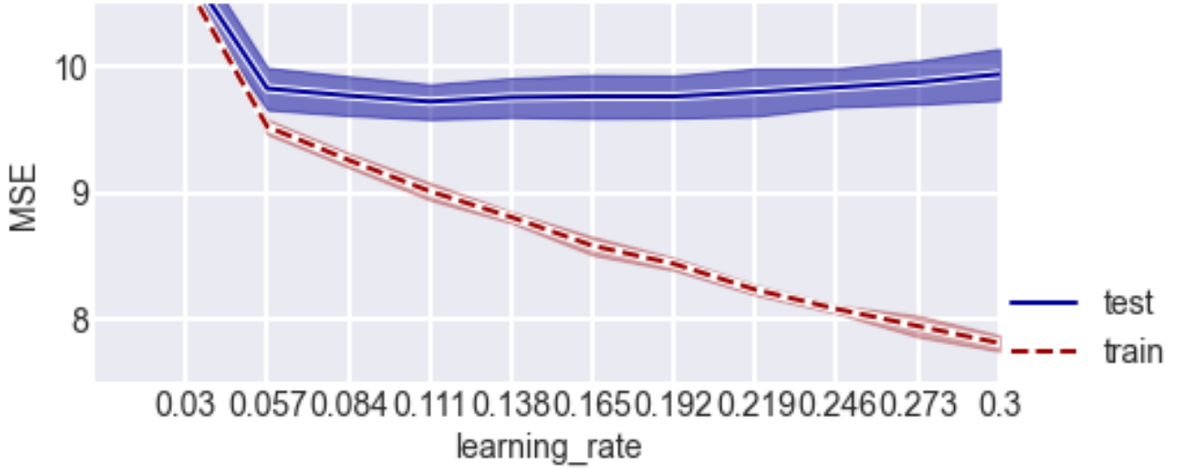
Параметры градиентного бустинга: основные

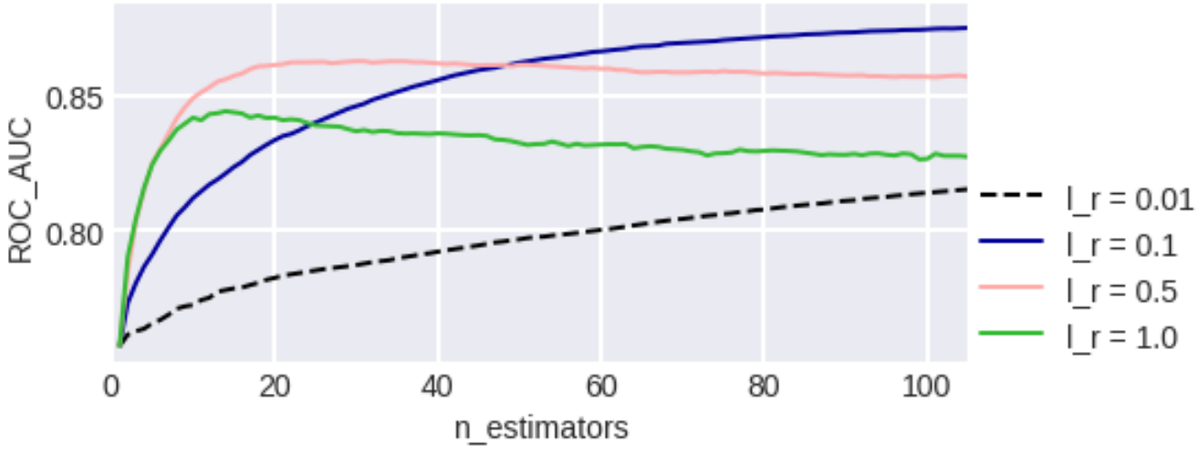
`learning_rate / eta`	– темп (скорость) обучения
`n_estimators / num_iterations / iterations`	– число итераций бустинга (базовых алгоритмов)
`num_parallel_tree`	– для режима RF

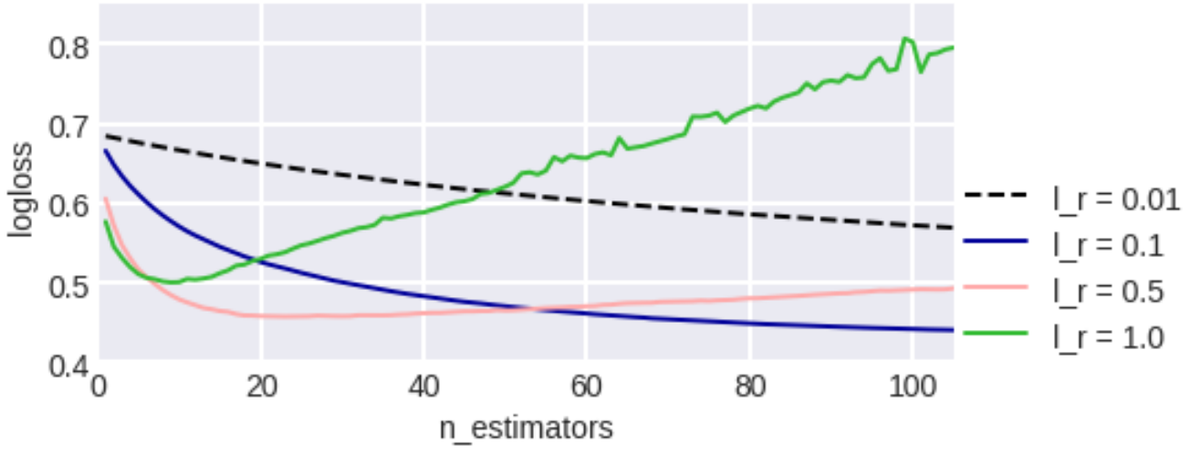
`categorical_feature`	– какие признаки категориальные

Темп обучения



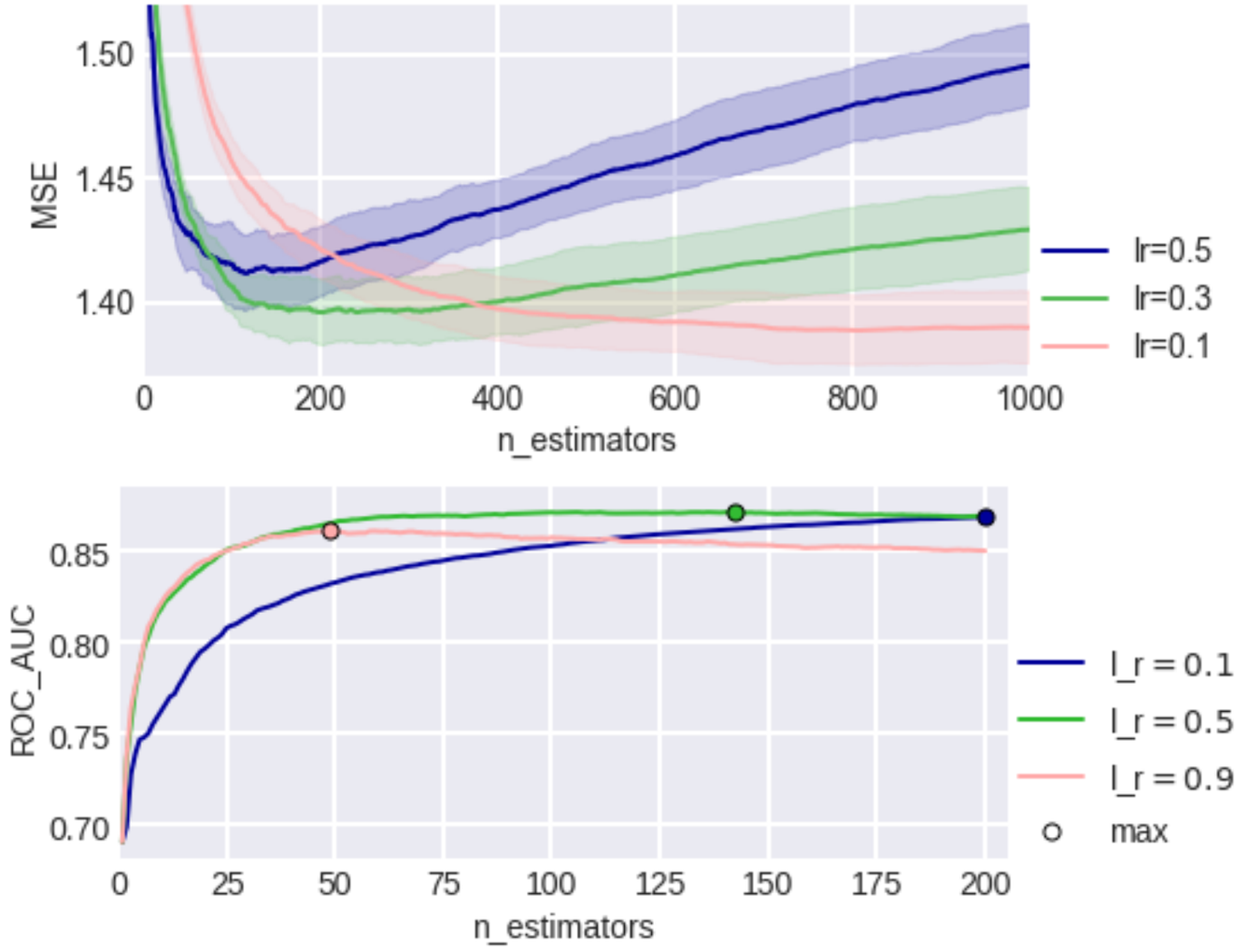






пример малого, среднего и большого темпов

Темп обучения и число базовых алгоритов



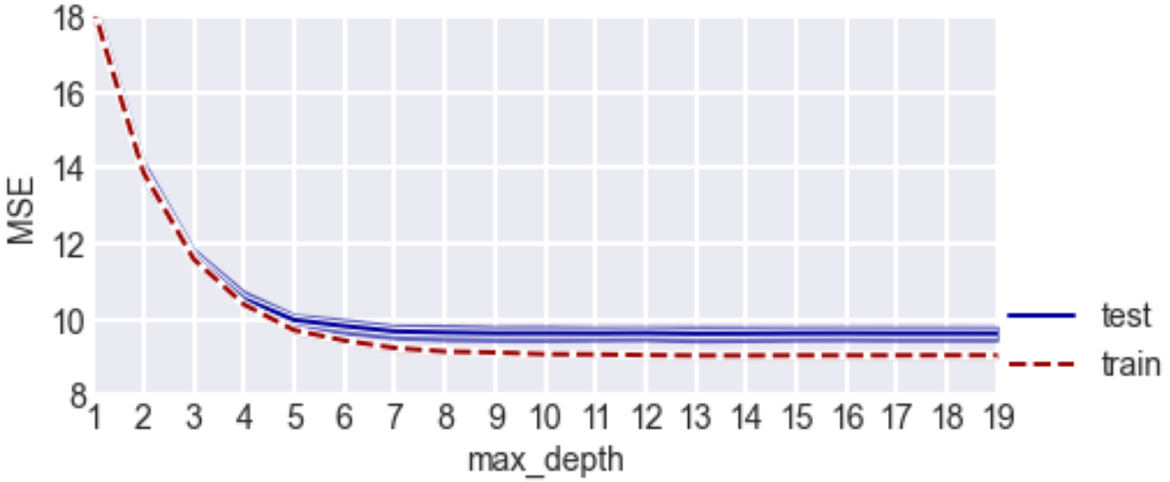
Нет логики «чем больше деревьев, тем лучше»

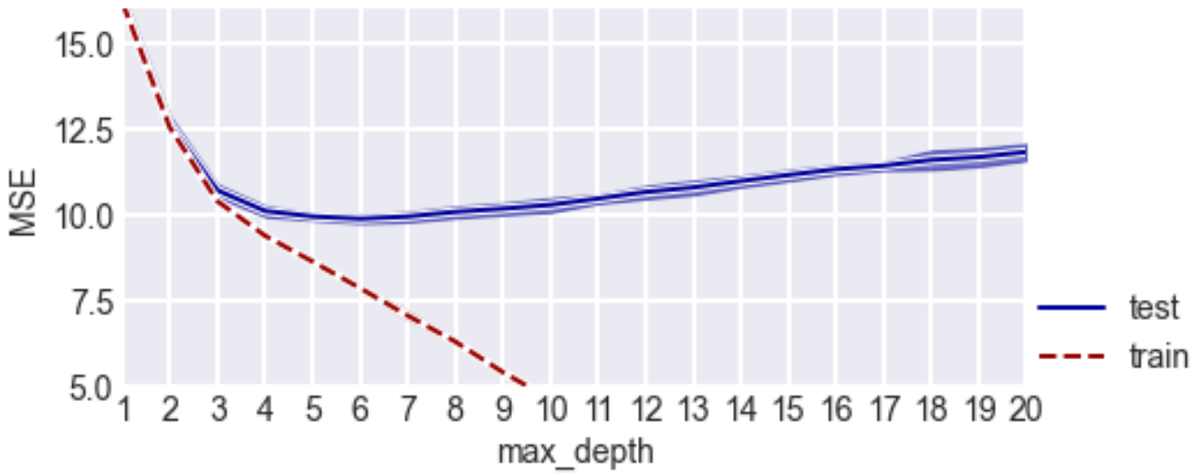
Нет логики «уменьшили темп в 2 раза – число деревьев надо увеличить в 2 раза»!

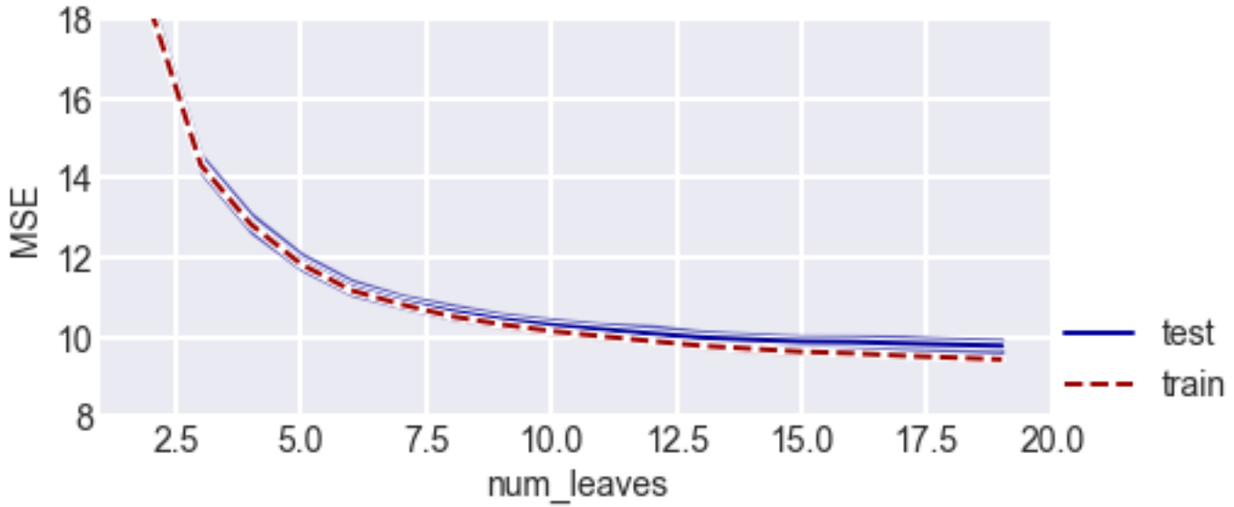
Параметры градиентного бустинга: сложность

max_depth	– максимальная глубина
gamma	– порог на уменьшение функции ошибки при расщеплении в дереве
min_child_weight	– минимальная сумма весов объектов в потомках
max_delta_step	– порог на изменение весов
max_leaves / num_leaves	– максимальное число вершин в дереве
min_split_gain / min_gain_to_split	– порог на изменение loss-функции
min_child_samples / min_data_in_leaf	– минимальное число объектов в листьях
/ min_sum_hessian_in_leaf	– минимальная сумма весов объектов в листе, минимальное число объектов, при котором делается расщепление

Сложность деревьев

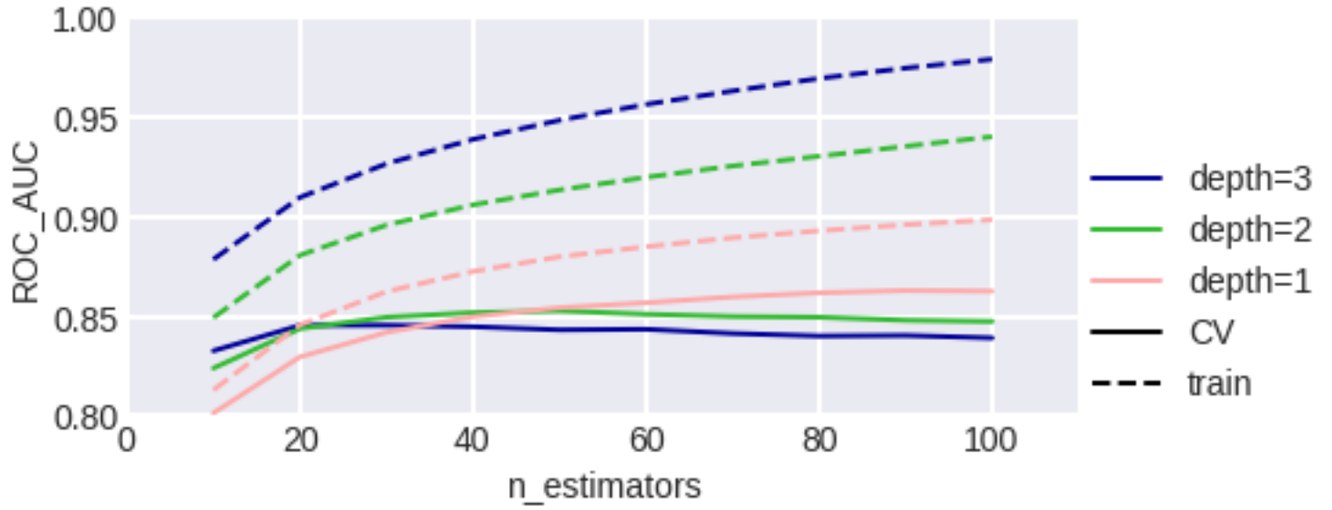




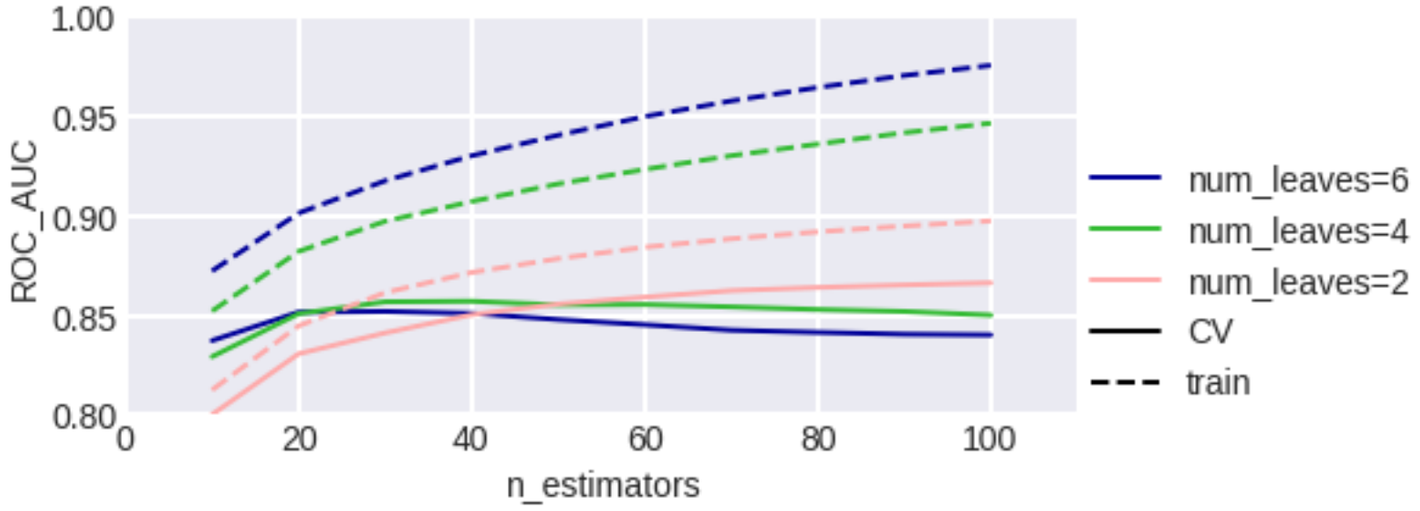


Сложность деревьев

scikit-learn



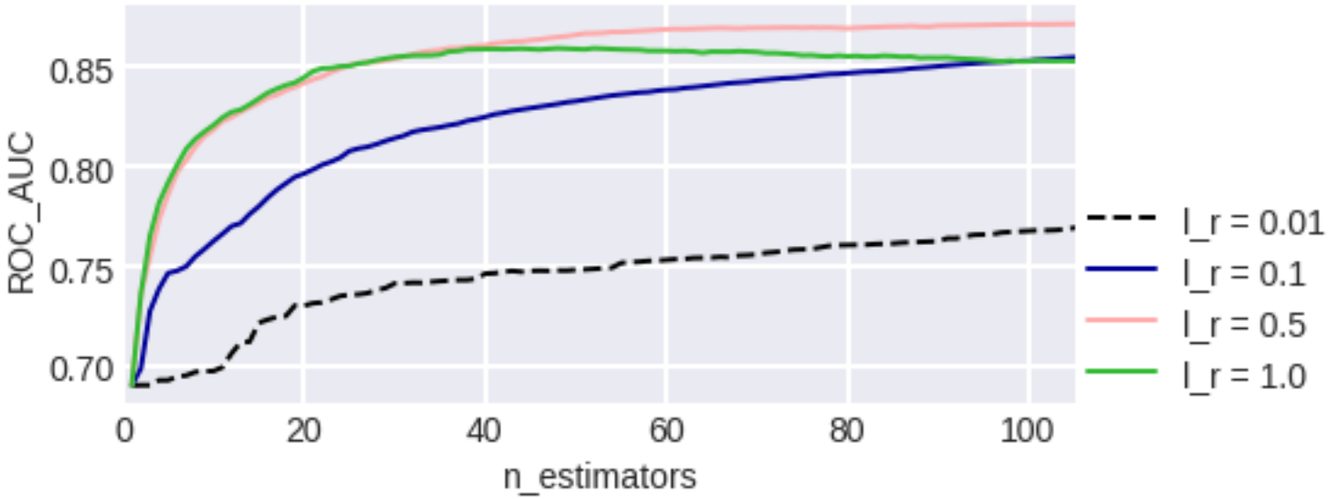
lightgbm



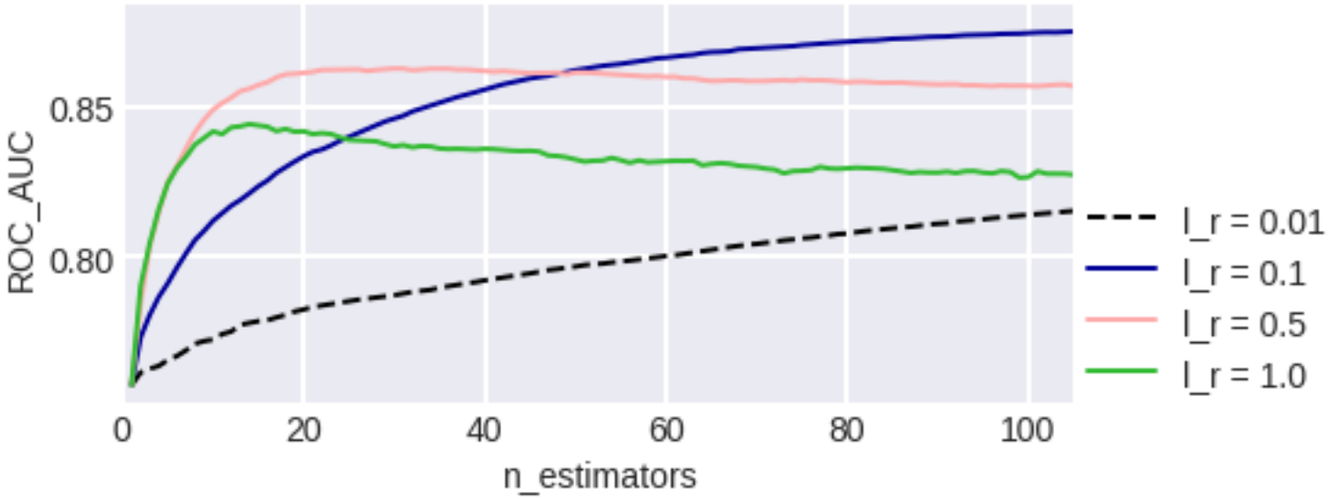
Для разной глубины – разное оптимальное число деревьев

Сложность деревьев

num_leaves = 3



num_leaves = 10



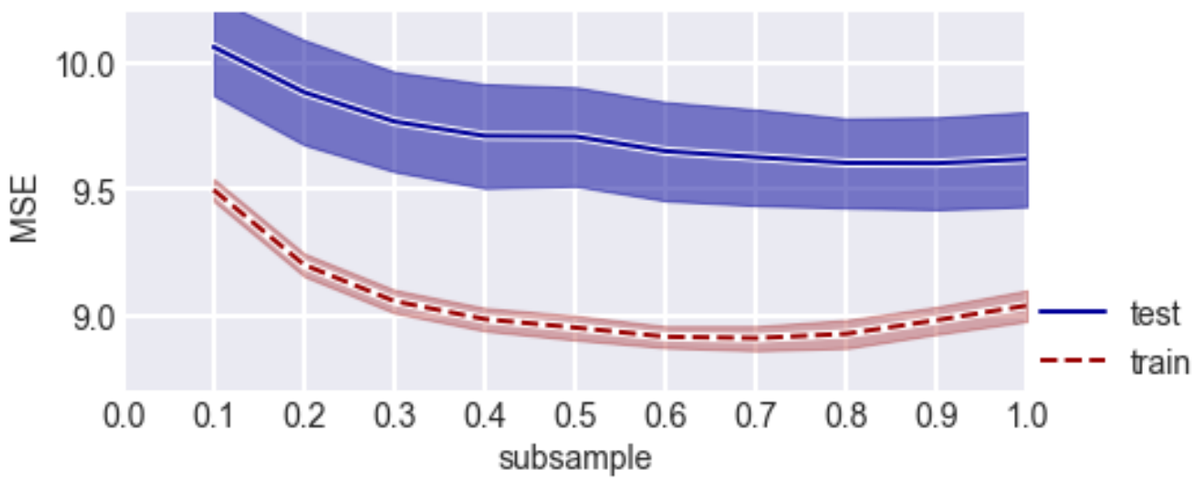
верно ли, что для малых деревьев нет большого темпа?

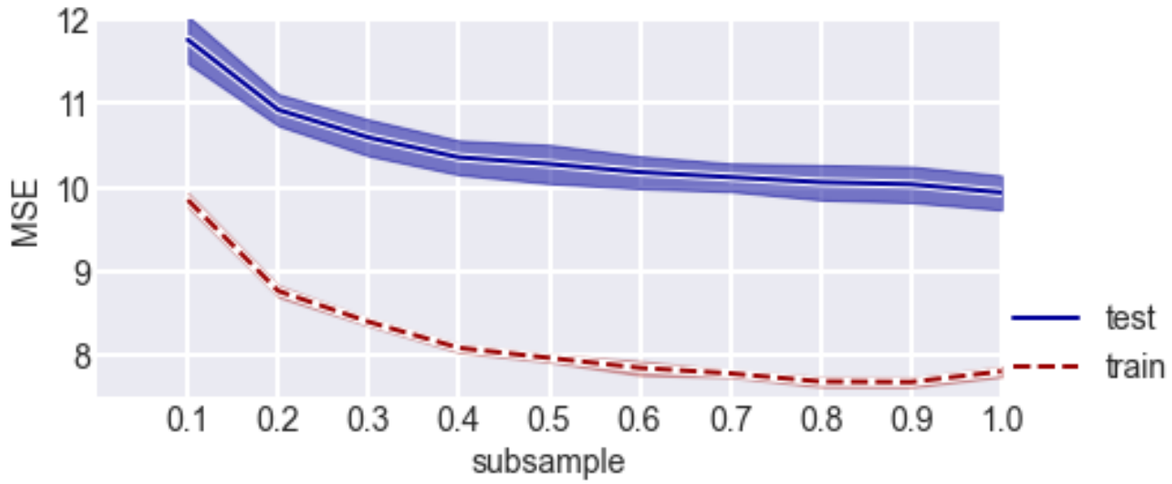
Параметры градиентного бустинга: формирование подвыборок

subsample / bagging_fraction	– какую часть объектов обучения использовать для построения одного дерева
colsample_bytree/ feature_fraction / rsm	– какую часть признаков использовать для построения одного дерева
colsample_bylevel	– какую часть признаков использовать для построения расщепления в уровне
colsample_bynode	– какую часть признаков использовать для построения расщепления в вершине
scale_pos_weight	– для сбалансирования позитивных и негативных весов
/ class_weight	– веса классов
// bootstrap_type	– тип бутстрепа (для Bayesian bootstrap есть bagging_temperature)

/ subsample_freq (int, optional (default=0)) – частота взятия подвыборок
// sampling_frequency

Подвыборки





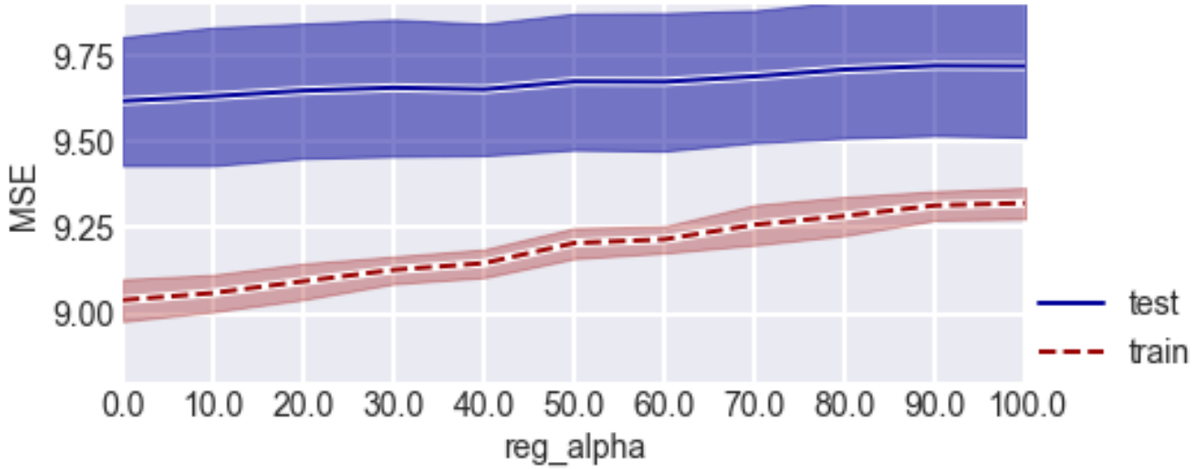
Обычно больше – лучше (в XGBoost это не всегда так)

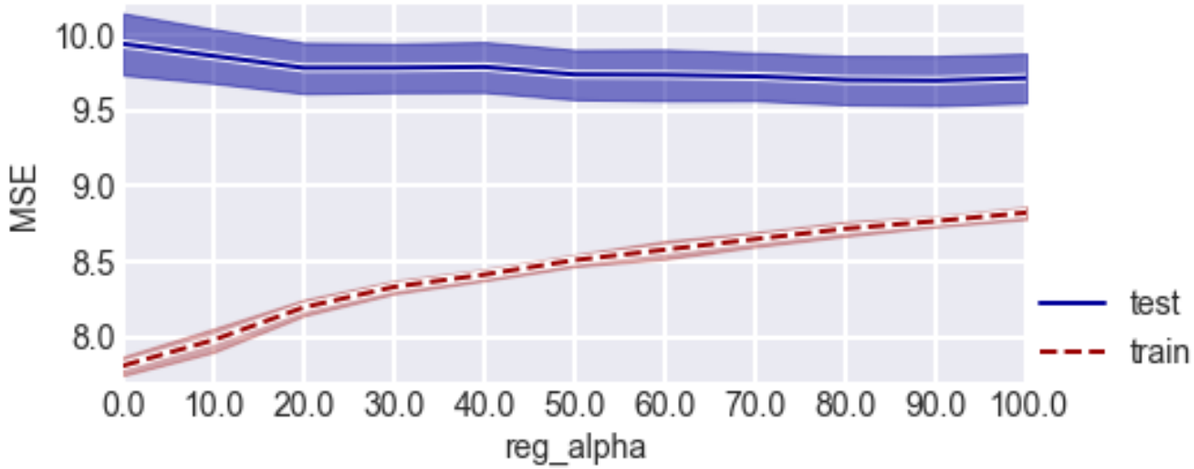
Если берём подвыборки бустинги «хуже суммируются»

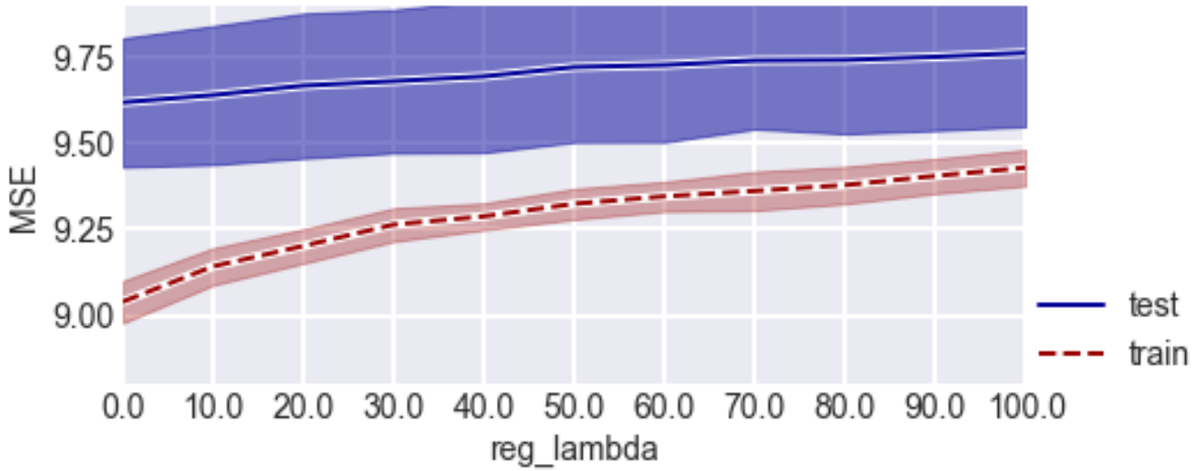
Параметры градиентного бустинга: регуляризация

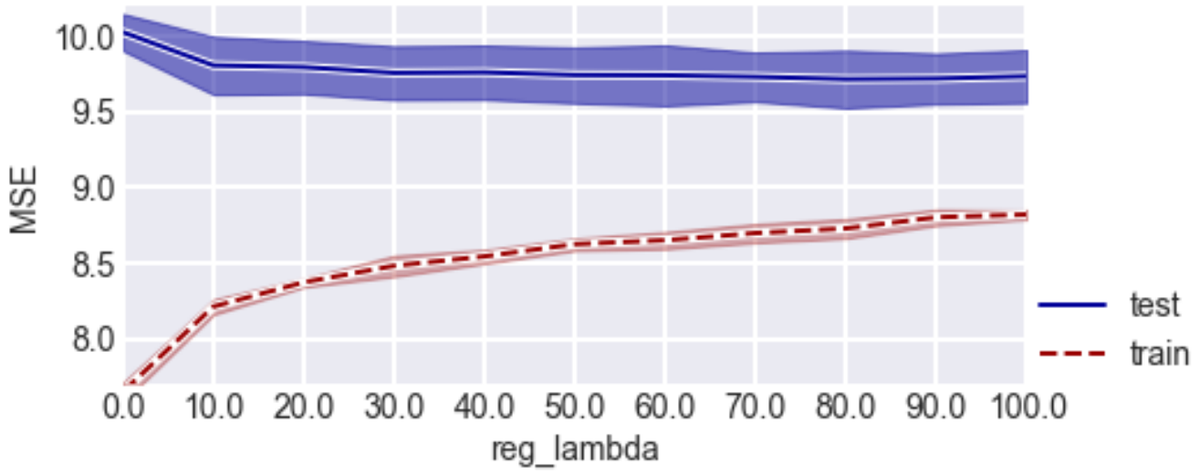
`reg_alpha / alpha`	– коэффициент L1-регуляризации
`reg_lambda / lambda // l2_leaf_reg`	– коэффициент L2-регуляризации
`random_strength`	– шум при оценки сплитов (CatBoost)
`border_count`	– число сплитов для вещественных признаков (CatBoost)
`ctr_border_count`	– число сплитов для категориальных признаков (CatBoost)

Регуляризация









Параметры градиентного бустинга: остальные

`verbosity / silent`	– вывод информации при обучении
`n_jobs / nthread / num_threads`	– число используемых потоков
`random_state`	– инициализация генератора псевдослучайных чисел
`missing`	– что обозначает пропуски
`importance_type`	– как вычислять важность «weight» (как часто признак выбирался), «total_gain» (по той функции ↑), «gain» (total_gain / weight), «total_cover» (за разделение скольких объектов отвечает), «cover» (total_cover / weight).
`/ subsample_for_bin`	– число объектов для бинов

Параметры градиентного бустинга: fit

early_stopping_round (fit)	– если на отложенном контроле заданная функция ошибки не уменьшается такое число итераций, обучение останавливается
sample_weight	– веса объектов
eval_metric	– метрика качества
callbacks	– какие функции вызывать после каждой итерации

- CPU / GPU
- хранить модель в ОЗУ

Early stopping (через fit)

```
params = {'objective': 'binary', 'reg_lambda': 0.0001, 'reg_alpha': 0.0001,
          'num_leaves': 7, 'learning_rate': 0.1, 'colsample_bytree': 0.75,
         }

from sklearn.model_selection import train_test_split

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(data, y, test_size=0.33, random_state=42)

model = lgb.LGBMClassifier(n_jobs=-1, n_estimators=1000, **params, metric='auc')  # использовать auc

model.fit(X_train, y_train,
          eval_set=[(X_test, y_test)],
          early_stopping_rounds=200,
          verbose=50)
```

```
Training until validation scores don't improve for 200 rounds
[50]    valid_0's auc: 0.685867
[100]   valid_0's auc: 0.687435
[150]   valid_0's auc: 0.687931
[200]   valid_0's auc: 0.688472
[250]   valid_0's auc: 0.686139
[300]   valid_0's auc: 0.685785
[350]   valid_0's auc: 0.684596
Early stopping, best iteration is:
[198]   valid_0's auc: 0.688558
```

Early stopping (через train)

```
def accuracy(preds, train_data):
    labels = train_data.get_label()
    preds = 1. / (1. + np.exp(-preds))
    return 'accuracy', np.mean(labels == (preds > 0.5)), True

def rmsle(y_true, train_data):
    y_pred = train_data.get_label()
    return 'RMSLE', np.sqrt(np.mean(np.power(np.log1p(y_pred) - np.log1p(y_true), 2))), False

 bst = lgb.train(params,
                 train_set=lgb.Dataset(X_train, y_train),
                 num_boost_round=1000,
                 valid_sets=[lgb.Dataset(X_test, y_test), lgb.Dataset(X_train, y_train)],
                 valid_names=['A', 'B'], # имена датасетов для удобства
                 init_model = tmp, # тут м.б. booster для продолжения обучения МОЖНО задать текстовый файл - см. ниже
                 early_stopping_rounds=50,
                 feval=lambda a, b: [accuracy(a,b), rmsle(a,b)], # несколько самописных функций
                 verbose_eval=25)

Training until validation scores don't improve for 50 rounds
[125]    A's binary_logloss: 0.106202  A's accuracy: 0.0227515   A's RMSLE: 0.10447
         B's binary_logloss: 0.0928391 B's accuracy: 0.0218412   B's RMSLE: 0.0983035
[150]    A's binary_logloss: 0.106231  A's accuracy: 0.0227515   A's RMSLE: 0.104485
         B's binary_logloss: 0.0921399 B's accuracy: 0.0218412   B's RMSLE: 0.0980522
Early stopping, best iteration is:
[111]    A's binary_logloss: 0.106148  A's accuracy: 0.0227515   A's RMSLE: 0.104426
         B's binary_logloss: 0.0932007 B's accuracy: 0.0218412   B's RMSLE: 0.0984656

bst.save_model('model.txt') # см. в файле прописаны деревья
```

Встроенные способы контроля

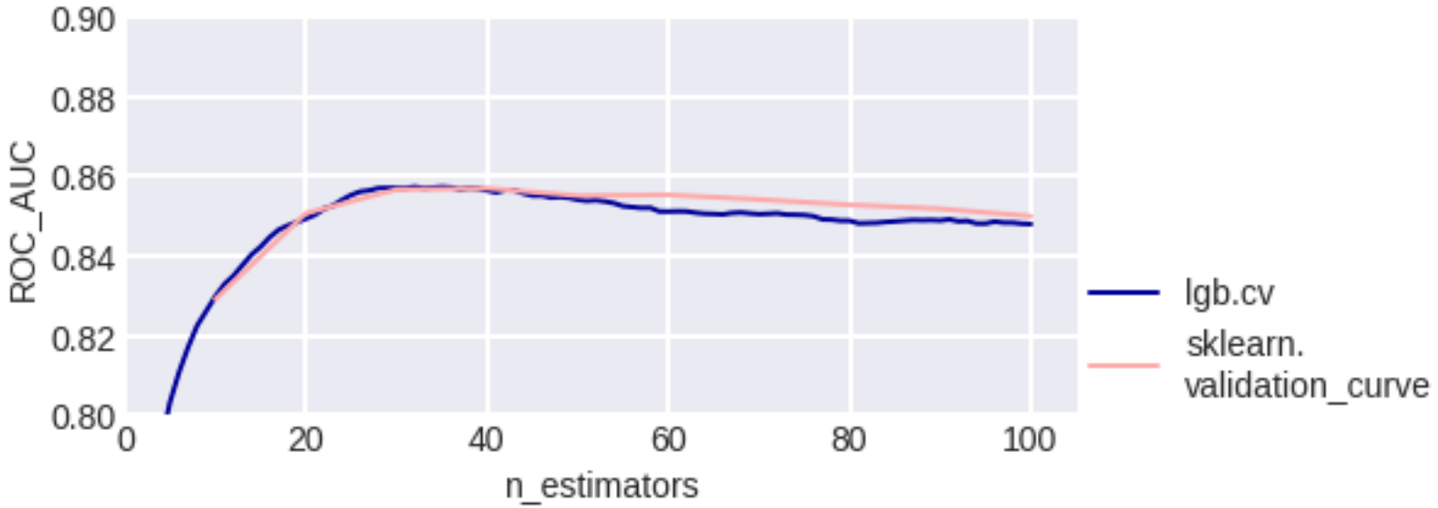
встроенный

```
params = {'objective': 'binary', 'learning_rate': 0.9,
          'num_leaves': 4, 'n_estimators': 100}
tmp = lgb.cv(params,
             train_set=lgb.Dataset(data, y_data),
             metrics=['auc', 'binary_logloss', 'rmse'])
```

универсальный

```
cv = KFold(n_splits=n_splits, shuffle=shuffle, random_state=random_state)
train_errors, test_errors = validation_curve(estimator,
                                             data, y_data,
                                             param_name=param_name,
                                             param_range=pars,
                                             cv=cv,
                                             scoring=scoring,
                                             n_jobs=-1)
```

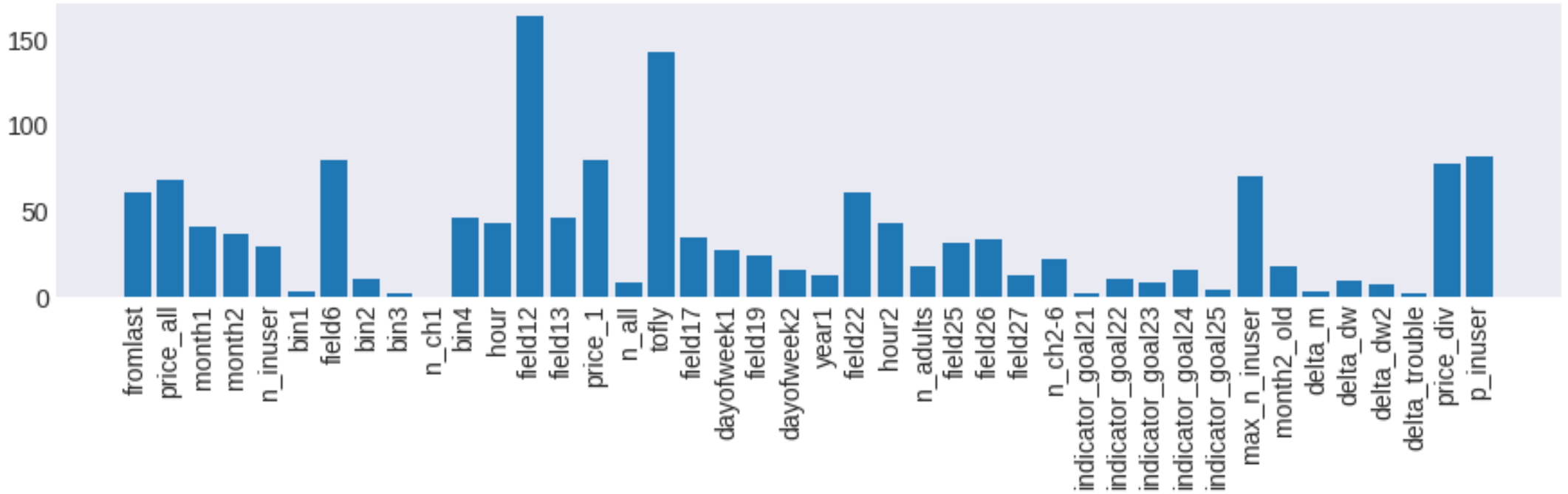
Встроенные способы контроля



существенно быстрее 2 мин – 2 сек

- **не перестраивают ансамбль с начала**
- **нечестный контроль – упрощённый способ выбора порогов (хитрость!)**
- **сразу получаем с шагом 1**
- **результаты похожи**

Важности признаков – Задача OneTwoTrip (сейчас об этом не будем)



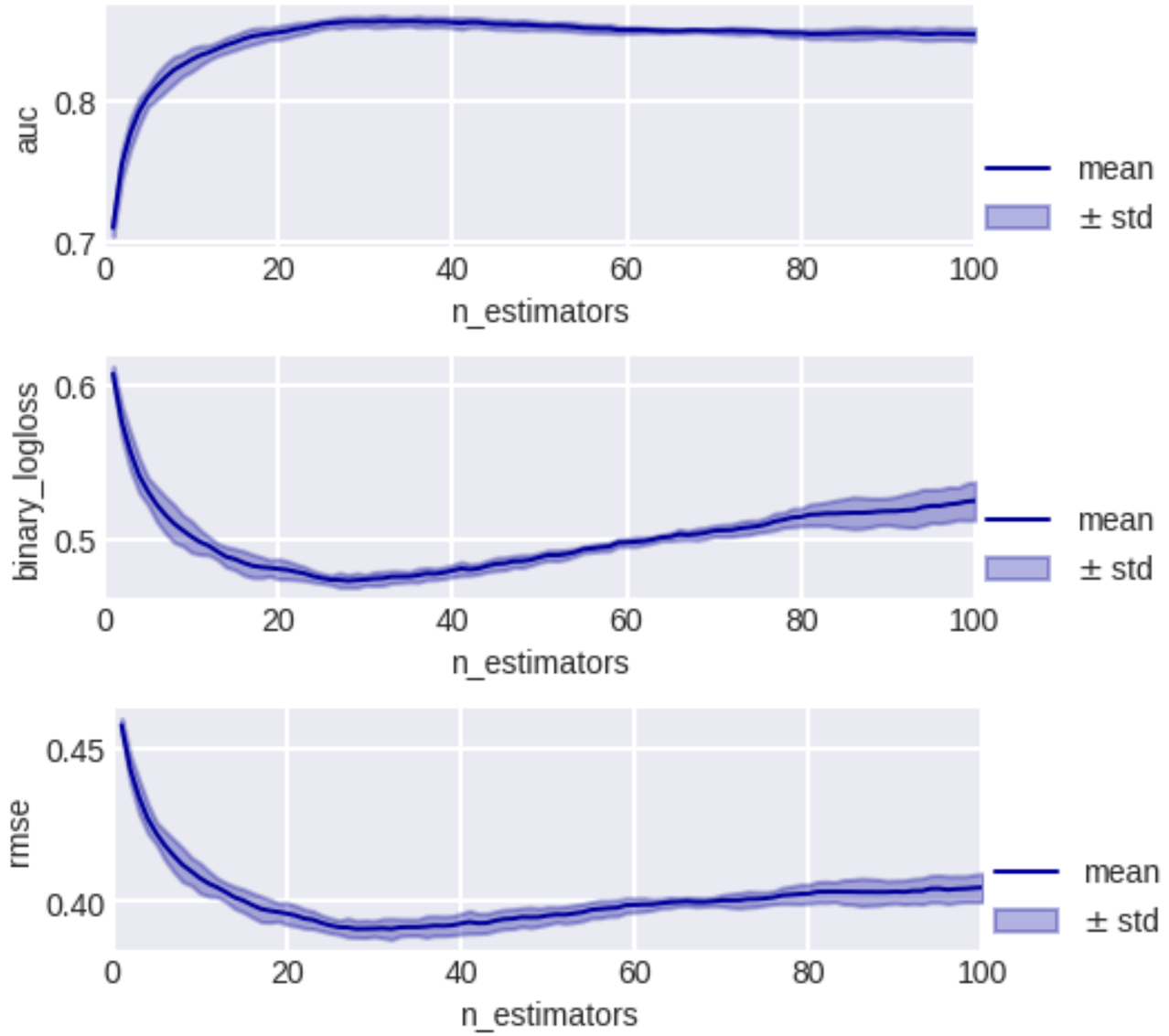

```
model = lgb.LGBMClassifier(learning_rate=0.05,
                           num_leaves=16,
                           subsample=1.0,
                           n_estimators=100,
                           random_state=1,
                           reg_alpha=0.01,
                           reg_lambda=0.0001)
model.fit(data.values, y)
model.feature_importances_
```

Перебор параметров

```
params = {'learning_rate': [0.05, 0.1, 0.2],
          'subsample': [0.5, 0.75, 1.0],
          'max_depth': [1, 2, 3, 4],
          'reg_alpha': [0, 0.0001, 0.01],
          'reg_lambda': [0, 0.0001, 0.01],
         }

model = xgb.XGBRFClassifier()

rs = RandomizedSearchCV(model, params, n_iter=100,
                        scoring='roc_auc',
                        n_jobs=-1, cv=gss)

rs.fit(data, y, groups=groups)
```

тут есть грубая ошибка… какая?

Советы по обучению: мониторьте разные метрики качества



Советы по обучению: темп обучения `learning_rate`

для разной сложности (ex: глубина)

обычно глубина 3–6 – смещённые (high bias), разброс ниже, чем в глубоких

- **смещение как раз устраняется бустингом**
- **модель не должна переобучаться $\Rightarrow$ простая**
- **быстрее строить**

- **зафиксируйте (достаточно большое) число деревьев в ансамбле**

- **настройте `learning_rate` (для этого числа деревьев)**

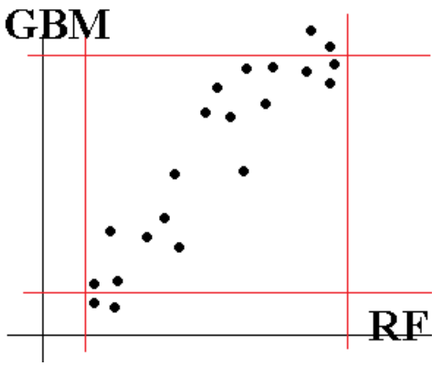
- **выберите оптимальную глубину**

- **настраивайте другие параметры**

Есть стратегия – сделать очень маленький темп и очень много деревьев

(но для настройки других параметров не годится)

Совет: постобработка ответов



Значения gbm могут выходить за пределы отрезка!

за пределы какого-то компактного множества в задаче регрессии

Вообще говоря, не важно,
как их вернуть обратно…

Итог

- выбрать вид бустинга / критерий расщепления / функцию ошибки «по задаче»

- три самых важных параметра:
сложность, темп, число деревьев
при разных сложностях (глубина / число листьев)
настроить два остальных связных параметра
для настройки можно немного деревьев

- в продакшене: увеличить число деревьев, взять маленький темп обучения

- использовать сумму нескольких gbm
проверить, помогает ли это
проверить, как нужно менять параметры для суммы

Литература

A. Natekin, A. Knoll Gradient boosting machines, a tutorial // Front Neurorobot. 2013; 7: 21.
http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3885826/

все статьи по XGBoost, LightGBM, CatBoost

Сравнения
https://www.kaggle.com/nholloway/catboost-v-xgboost-v-lightgbm
https://medium.com/riskified-technology/xgboost-lightgbm-or-catboost-which-boosting-algorithm-should-i-use-e7fda7bb36bc

Про параметры
https://neptune.ai/blog/lightgbm-parameters-guide