«РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАРОДНОГО ХОЗЯЙСТВА и ГОСУДАРСТВЕННОЙ СЛУЖБЫ

при Президенте Российской Федерации»

ИНСТИТУТ ЭКОНОМИКИ, МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

ЭКОНОМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ НАПРАВЛЕНИЕ 38.03.01 ЭКОНОМИКА

Современная модификация градиентного бустинга

Выполнили:

Антонова Арина: подбор датасета для решения задач регрессии и классификации, анализ статей с целью определения современных подходов к модификации бустинга, выбор целевой переменной для задачи регрессии, анализ актуальности и эффективности выбранного loss для решения подобранных задач.

Панкратов Никита: вывод фокального loss для задачи регрессии, пошаговый расчет градиента на основе loss, подбор гиперпараметров модели, оценка сложности полученного алгоритма в зависимости от набора факторов, определение преимуществ фокального loss для задачи регрессии, сравнение результатов с классическим XGBoost.

Мальшаков Павел: вывод фокального loss для задачи классификации, подбор гиперпараметров модели, сравнение результатов с классическим XGBoost, определение преимуществ фокального loss для задачи классификации.

Аннотация

В данной работе предлагается модификация стандартных функций потерь на Loss, адаптированная для решения задач регрессии многоклассовой классификации с использованием градиентного бустинга. В задаче регрессии предсказание количества сожженных калорий осложняется правосторонней асимметрией распределения и концентрацией значений в среднем диапазоне, что затрудняет работу стандартных функций потерь. Модифицированная Focal Loss позволяет модели сосредотачиваться на значительных отклонениях, игнорируя легко предсказываемые значения. Такой подход минимизирует процентные ошибки и улучшает точность предсказаний на всём диапазоне данных. В задаче многоклассовой классификации предсказание уникального идентификатора зала осложняется схожестью признаков между классами и размытостью границ, что усложняет различение объектов. Focal Loss адаптивно усиливает вклад трудно классифицируемых примеров, снижая влияние легко предсказываемых наблюдений. Это позволяет повысить точность модели, особенно в неоднозначных ситуациях, и улучшить её обобщающую способность. Проведённое сравнение предложенной реализации с классическим XGBoost показывает, что предложенный метод позволяет существенно сократить время обучения и повысить эффективность работы модели для обеих задач. Таким образом, комбинация Focal Loss и градиентного бустинга демонстрирует высокую точность и устойчивость предсказаний, обеспечивая эффективное решение как регрессионных, так и классификационных задач на сложных многомерных данных.

Оглавление

Введение	4
1. Описание датасета	6
2. Реализация алгоритма	10
2.1. BoostingFocalRegression	10
2.2. BoostingFocalClassifier	16
Заключение	21
Литература	23

Введение

В последнее время растет необходимостью в построении эффективных и устойчивых моделей машинного обучения для решения много классовых задач классификации и регрессии с учётом сложных, многомерных и неоднозначных данных. современной литературе широко рассматриваются классификации несбалансированных выборках, на однако сбалансированными классами, где признаки частично пересекаются и границы между классами размыты, уделяется недостаточное внимание. Кроме того, задачи регрессии в условиях правосторонней асимметрии данных, особенно на реальных синтетических наборах, практически не исследуются. Это создает потребность в новых адаптивных функциях потерь, способных справляться с такими сложностями и улучшать производительность моделей.

Цель данного исследования заключается в разработке и применении нестандартного алгоритма на основе градиентного бустинга с модифицированной функцией потерь Focal Loss, адаптированной как для задач регрессии, так и для многоклассовой классификации. Предложенный подход направлен на улучшение качества предсказаний, уменьшение ошибок на сложных примерах и сокращение времени обучения по сравнению с классическими методами, такими как XGBoost.

Задачи исследования:

- 1. Найти и подготовить датасет для задач классификации и регрессии с большим количеством точек и признаков различного типа (числовые, категориальные, текстовые).
- 2. Разработать собственный код для дерева решений и алгоритма градиентного бустинга, внедрив нестандартную функцию потерь и новый способ оптимизации бустинга.

- 3. Рассчитать сложность предложенного алгоритма в зависимости от факторов.
- 4. Обучить модель на выбранном датасете, реализовать критерии остановки обучения по валидации и произвести перебор гиперпараметров для улучшения качества модели.
- 5. Сравнить производительность предложенной реализации с классическим XGBoost по метрикам качества и времени выполнения.

1. Описание датасета

Датасет [1], использованный в данном исследовании, называется «Регистрация в тренажерном зале и метаданные пользователя». Это синтетический набор данных, созданный для имитации активности в тренажерных залах различных локаций и включающий данные как на уровне пользователей, так и на уровне объектов. Датасет представлен в виде четырех связанных CSV-файлов, каждый из которых представляет отдельное измерение экосистемы тренажерных залов. При этом из-за высокой сложности и многообразия признаков (числовые, категориальные, временные и текстовые) количество колонок после предварительной обработки превышает 10 тысяч. Для снижения потребляемой памяти и улучшения вычислительной эффективности было введено ограничение на размер данных.

Датасет состоит из 4 файлов:

- 1. Данные о пользователях (файл содержит демографические данные пользователей и информацию об их подписках)
 - user id: Уникальный идентификатор каждого пользователя.
- first_name, last_name: Имена пользователей (исключены из анализа для сохранения анонимности и из-за их нерелевантности для модели).
 - age и gender: Основные демографические характеристики пользователей.
 - sign up date: Дата регистрации пользователя в тренажерном зале.
 - user location: Город, где проживает пользователь.
- subscription_plan: Тип подписки на тренажерный зал (например, Basic, Pro, Student).

- 2. *Данные о местоположении тренажерных залов* (файл описывает тренажерные залы и их характеристики)
 - gym id: Уникальный идентификатор каждого тренажерного зала.
 - location: Город, где расположен тренажерный зал.
- gym_type: Категория тренажерного зала (например, Premium, Standard, Budget).
- amenities: Список доступных удобств (например, бассейн, занятия йогой, сауна).
- 3. *История регистрации и выхода* (файл фиксирует посещения пользователей тренажерных залов)
 - checkin time и checkout time: Метки времени входа и выхода пользователя.
- workout_type: Тип тренировки, выполненной во время визита (например, кардио, силовые тренировки, йога).
- calories_burned: Предполагаемое количество сожженных калорий (целевой признак для регрессионного анализа).
- 4. *Планы подписки* (файл содержит информацию о различных тарифных планах, предлагаемых тренажерными залами)
 - subscription_plan: Название тарифного плана.
 - price_per_month: Стоимость подписки в месяц.
 - features: Дополнительные преимущества, включенные в каждый план.

Выбор данного датасета обусловлен его способностью имитировать многомерную реальную задачу, связанную с физической активностью пользователей в различных тренажерных залах.

Датасет содержит разнообразные типы признаков — числовые, категориальные, временные и текстовые. Такое сочетание данных создает условия для решения как регрессионных задач (например, предсказание количества сожженных калорий по *calories burned*), так и классификационных задач (например, предсказание конкретного тренажерного зала по *gym_id*).

В данном проекте используются две целевые переменные: $calories_burned$ для задачи регрессии и gym_id для задачи классификации. Целевые переменные имеет реальное практическое применение:

- Предсказание количества сожженных калорий позволяет тренерам и пользователям адаптировать тренировки под индивидуальные цели и физические возможности. Например, можно рекомендовать оптимальную продолжительность и интенсивность тренировок для достижения заданного результата.
- Модель помогает оценивать, насколько эффективно пользователи сжигают калории при разных типах тренировок и в различных залах. Это может использоваться для сравнения тренажёров и удобств, доступных в залах.
- Анализ данных о сожженных калориях позволяет генерировать индивидуальные и групповые отчеты для пользователей, что повышает их мотивацию и удержание в системе.
- Классификация помогает предсказать, в какой зал пойдёт пользователь, исходя из его истории тренировок, демографических характеристик и предпочтений. Это даёт возможность персонализировать предложения и рекомендации по залам.

- Модель может предсказать, какой зал наиболее вероятно выберут пользователи в определённое время или день. Это помогает управлять потоками клиентов, оптимизировать расписание и предотвратить перегрузку залов.
- Классификация позволяет выявить закономерности в выборе залов. Например, пользователи определённого возраста или типа подписки чаще посещают Premium залы в конкретных локациях. Это полезно для таргетированного маркетинга и стратегического планирования.
- Модель предсказывает популярность различных залов в зависимости от характеристик клиентов и их поведения. Эти данные могут использоваться для принятия решений об открытии новых залов или улучшении существующих.

Таким образом, объединение регрессионного анализа calories burned и классификации gym id позволяет получить комплексные аналитические выводы. Результаты исследования имеют практическую значимость для персонализации программ, улучшения обслуживания тренировочных качества клиентов, стратегического планирования повышения эффективности работы И тренажерных залов.

2. Реализация алгоритма

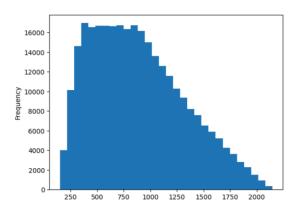
2.1 BoostingFocalRegression

Целевая переменная *calories_burned* представляет собой количественную переменную, отражающую объем сожженных калорий во время тренировок. Её распределение характеризуется правосторонним хвостом с редкими и высокими значениями (1500+), что создаёт сложности для моделирования и точного предсказания.

Анализ распределения (см. График 1):

- Диапазон значений: 150 2000+ с концентрацией в диапазоне 500 1250.
- Среднее значение: 886.09, медиана: 834, что указывает на асимметрию и смещение распределения.
- Редкие высокие значения: Значения выше 1500 встречаются реже, что приводит к трудностям в обучении стандартных моделей.

График 1. Распределение целевой переменной calories_burned



Стандартные функции потерь (MSE, MAE) одинаково взвешивают ошибки, из-за чего модель фокусируется на частых значениях и игнорирует редкие высокие значения из правого хвоста. При использовании MAPE возникают значительные штрафы за высокие относительные ошибки, особенно для малых и редких значений.

Для решения проблемы предложена адаптация функции Focal Loss, изначально разработанной для классификации [2], к регрессионной задаче с целью фокусировки на сложных примерах, где ошибки значительны и снижения влияния легко предсказываемых значений.

$$L(r) = |r|^{\gamma} \cdot \log(|r| + 1)$$

Производная фокального лосса

Используем правило производной для произведения двух функций:

$$L(r) = f(r) \cdot g(r)$$

где:

$$f(r) = |r|^{\gamma}$$

$$g(r) = \log(|r| + 1)$$

Производная по (r):

$$\frac{\partial L(r)}{\partial r} = \frac{\partial f(r)}{\partial r} \cdot g(r) + f(r) \cdot \frac{\partial g(r)}{\partial r}$$

Шаг 1: Производная $f(r) = |r|^{\gamma}$

$$\frac{\partial f(r)}{\partial r} = \gamma |r|^{\gamma - 1} \cdot \operatorname{sign}(r),$$

где sign(r) — знак остатка:

$$sign(r) = \begin{cases} 1, & r > 0, \\ 0, & r = 0, \\ -1, & r < 0. \end{cases}$$

Шаг 2: Производная $g(r) = \log(|r| + 1)$

$$\frac{\partial g(r)}{\partial r} = \frac{1}{|r|+1} \cdot \operatorname{sign}(r).$$

Шаг 3: Объединение результатов:

$$\frac{\partial L(r)}{\partial r} = \gamma |r|^{\gamma - 1} \cdot \operatorname{sign}(r) \cdot \log(|r| + 1) + \frac{|r|^{\gamma}}{|r| + 1}.$$

Таким образом, формула градиента для модифицированной функции Focal Loss представлена следующим образом:

$$\operatorname{grad}(r) = \gamma \cdot |r|^{\gamma - 1} \cdot \operatorname{sign}(r) \cdot \log(|r| + 1) + \frac{|r|^{\gamma}}{|r| + 1}.$$

где $[r=y-\hat{y}]$ — остаток между реальным и предсказанным значением, а γ — параметр фокусировки.

Использование только первой производной в нашей реализации бустинга обосновано:

- 1. Простотой реализации и вычислительной эффективности (мы стремились оптимизировать не только финальную метрику, но и время выполнения алгоритма);
 - 2. Устойчивостью к выбросам и шуму;
- 3. Адекватностью для фокальной функции потерь, которая уже содержит встроенное усиление ошибок через γ ;
- 4. Экспериментальным подтверждением эффективности для задач регрессии (то есть даже первой производной было достаточно, чтобы значительно увеличив скорость алгоритма, получив существенное улучшение и в финальной метрике в том числе).

Почему Focal Loss эффективен для MAPE?

Focal Loss оптимизирует обучение модели за счет фокусировки на крупных остатках, усиливая влияние редких и сложных примеров с высокими процентными ошибками. Градиент функции увеличивается для значительных отклонений, что позволяет минимизировать ошибки на редких значениях из правостороннего хвоста распределения.

Целевая метрика MAPE особенно критична в задаче предсказания *calories_burned*, так как:

- Чувствительна к процентным ошибкам для малых и редких значений.
- Наказывает значительные отклонения, которые возникают при недооценке высоких значений.

Использование Focal Loss косвенно оптимизирует MAPE, так как уменьшает вероятность крупных ошибок и обеспечивает точность предсказаний на всём диапазоне значений.

Преимущества использования Focal Loss:

- 1. Улучшение точности предсказаний для редких и высоких значений, что важно для анализа крайних случаев.
- 2. Повышение устойчивости модели к асимметрии распределения и правостороннему хвосту.
- 3. Снижение процентных ошибок (МАРЕ) за счет акцентирования внимания на значительных отклонениях.
- 4. Гибкость настройки через параметр γ, который позволяет адаптировать модель под структуру данных.

Сложность алгоритма в зависимости от факторов:

1. Обучение деревьев

- Алгоритм включает п деревьев, обучаемых последовательно. Для каждого дерева происходит расчет градиента (см.формулу выше). Градиент вычисляется для всех mmm объектов. Сложность на одну итерацию: O(m).
- Обучение дерева: для построения дерева с максимальной глубиной d сложность составляет O(m*d) на каждую итерацию.
- Обновление предсказаний: для обновления предсказаний требуется пройти по всем объектам, т.е. O(m).

- 2. Раннее прекращение (early stopping)
- Валидация: на каждой итерации вычисляется МАРЕ на валидационном наборе. Сложность на одну итерацию: O(m_val).
 - Условия прекращения: сравнение текущей ошибки с лучшей O(1).

3. Прогнозирование

• Прогнозирование включает вычисление предсказаний всех деревьев на новых данных m test. Сложность: O(n·m test).

Итоговая сложность:

A) Обучение:
$$O(n*m*d+n*m+n*m \ val) = O(n*m*d+n*m \ val)$$

где:

- п число деревьев,
- т число обучающих объектов,
- d максимальная глубина дерева,
- m val число объектов в валидационном наборе.
- В) Прогнозирование: O(n*m_test)

где:

• m test — число тестовых объектов.

Вывод:

Данная реализация позволяет достичь лучшего результата по метрике МАРЕ и что немаловажно значительно быстрее приходит к оптимуму по количеству итераций и времени выполнения алгоритма в сравнении с классическим алгоритмом XGBoost.

Метод	MAPE	Time
BoostingFocalRegression	0.46083	2 min 13 sec
XGboost	0.57409	17 min 26 sec

Таблица 1: Сравнение методов по метрике МАРЕ и времени выполнения.

Таким образом, применение Focal Loss для описанной задачи регрессии позволяет построить модель, которая эффективно обрабатывает сложные и редкие значения, минимизируя процентные ошибки по метрике MAPE. Это делает модель точной, устойчивой и практически применимой для персонализации рекомендаций и мониторинга активности пользователей.

2.2. BoostingFocalClassifier

Целевая переменная *gym_id* представляет собой категориальный признак, обозначающий уникальный идентификатор тренажёрного зала, посещаемого пользователем. Задача предсказания *gym_id* на основе признаков пользователей (возраст, пол, тип подписки) и параметров тренировок (тип тренировки, количество сожженных калорий) является типичной много классовой задачей классификации, при этом данные могут содержать разные уровни сложности для обучения модели.

Даже при сбалансированном распределении классов задача предсказания конкретного зала может оказаться непростой из-за следующих факторов:

- 1. Схожесть признаков между классами: например, залы одного типа (например, Premium) в разных городах привлекают аудиторию с похожими характеристиками (возраст, пол, тип подписки). Это приводит к размытым границам между классами и усложняет задачу различения залов.
- 2. Один и тот же тип тренировки (например, кардио или силовые упражнения) выполняется в разных залах, что создает неоднозначность при предсказании конкретного gym_id .
- 3. Некоторые признаки, такие как возраст или тип подписки, могут одновременно соответствовать нескольким классам. Это делает наблюдения сложными и менее информативными для модели.

Таким образом, стандартные функции потерь, такие как кросс-энтропия, могут быть недостаточно эффективны в обработке неуверенных предсказаний, что требует использования более адаптивного подхода.

Фокальная функция потерь решает вышеописанные проблемы путем усиления фокуса на сложных примерах и снижения вклада легко предсказываемых наблюдений.

$$FL(p_t) = -(1 - p_t)^{\gamma} \cdot \log(p_t),$$

где

 (p_t) — вероятность правильного класса, вычисленная как $(\operatorname{softmax}(z)_t)$, где (z) — логиты модели.

 $(\gamma > 0)$ — фокусирующий параметр, который управляет вкладом сложных примеров.

 $((1-p_t)^{\gamma})$ — фокусирующий модификатор.

 $(\log(p_t))$ — стандартный логарифмический штраф, используемый в кросс-энтропии.

Для вывода градиента по логитам (z_k) , мы дифференцируем FL (p_t) :

$$\frac{\partial FL}{\partial z_k} = \frac{\partial FL}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial p_k}{\partial z_k}.$$

1. Производная по P_k : Вероятность для класса t определяется как:

$$p_t = \frac{\exp(z_k)}{\sum_k \exp(z_k)}$$

Где z_k — логит для класса k, а $\sum_k \exp(z_k)$ — нормировка по всем классам.

Фокальный лосс состоит из:

 $(1-p_t)^{\gamma}\log(p_t)$ — это основной компонент, который штрафует за ошибки. Производная по p_k даёт комбинированный штраф, который зависит от параметра γ , $(1-p_t)$ и p_t .

2. Производная по z_k : Для вычисления градиента по логитам $z \square$ используется производная softmax, которая даёт корректировку для вероятностей:

$$\frac{\partial p_k}{\partial z_k} = p_k \cdot (1 - p_k)$$

Где p_k — вероятность для класса k.

Итоговый градиент для обновления логита г□ выглядит так:

$$\frac{\partial FL}{\partial z_k} = (y_k - p_k) \cdot \gamma \cdot (1 - p_k)^{\gamma - 1} \cdot p_k$$

Основные преимущества Focal Loss для задачи gym_id

- 1. Фокусировка на сложных примерах: Если вероятность $p_{i,k}$ низкая (трудные наблюдения), множитель $(1-p_t)^{\gamma}$ усиливает вклад ошибки, помогая модели обучаться на неуверенных предсказаниях.
- 2. Легко предсказываемые примеры с высокой вероятностью $p_{i,k}$ вносят минимальный вклад в градиенты. Это предотвращает "перетренировку" на тривиальных примерах и позволяет сосредоточиться на неоднозначных данных.
- 3. Параметр γ адаптирует функцию потерь под структуру данных, усиливая фокус на трудных примерах. Для задач с размытыми границами между классами оптимальное значение γ позволяет повысить точность модели.

В нашей реализации градиентный бустинг используется для последовательного обучения ансамбля деревьев решений, где:

- 1. Предсказания на каждом шаге представлены в виде логитов z_t .
- 2. Градиенты для Focal Loss рассчитываются по формуле:

gradient =
$$\gamma \cdot (y_{i,k} - p_{i,k}) \cdot (1 - p_{i,k})^{\gamma - 1} \cdot p_{i,k}$$

На каждой итерации деревья корректируют предсказания на основе текущих градиентов, что позволяет модели сосредоточиться на сложных и неоднозначных примерах.

Оценка качества модели проводится с использованием Accuracy — стандартной метрики для многоклассовой классификации. Ассuracy была выбрана по следующим причинам:

- 1. Ассигасу показывает долю правильно предсказанных наблюдений, что делает её наглядной и понятной для оценки производительности модели.
- 2. В условиях отсутствия классового дисбаланса Ассигасу является надежной и информативной метрикой.
- 3. Ассигасу позволяет отслеживать динамику улучшений модели при использовании Focal Loss и градиентного бустинга.

Применение Focal Loss в задаче классификации gym id позволяет:

- Повысить точность модели для всех категорий, особенно на сложных и неоднозначных наблюдениях.
- Разрешить неопределенность между классами, где признаки пересекаются или границы размыты.

Вывод

Использование Focal Loss для задачи классификации *gym_id* эффективно решает проблемы размытых границ между классами и неопределённости в предсказаниях. За счёт фокусировки на сложных примерах (низких вероятностях

 $p_{i,k}$) и снижения влияния легко предсказываемых наблюдений, модель улучшает обобщающую способность.

В нашей реализации градиентный бустинг с Focal Loss:

- Итеративно обучает деревья решений на основе градиентов, рассчитанных для фокусирующей функции.
- Пошагово обновляет предсказания модели, корректируя ошибки на трудных наблюдениях.
- Позволяет гибко настраивать параметр γ, регулируя фокус на примерах с высокой неопределённостью.

Таким образом, Focal Loss, в сочетании с бустингом, обеспечивает точное и устойчивое предсказание классов *gym_id*, даже при схожести признаков между залами. Такой подход позволяет моделировать сложные многоклассовые данные и решать практические задачи персонализации рекомендаций.

Данная реализация позволяет достичь отличного результата по Accuracy, 1.0 и работает значительно быстрее чем XGBClassifier.

Метод	Accuracy	Time
BoostingFocalClassifier	1.0	0 min 47 sec
XGboost	1.0	21 min 46 sec

Таблица 2: Сравнение методов по метрике Accuracy и времени выполнения.

Заключение

В данном исследовании разработана и успешно реализована модификация функции потерь Focal Loss, адаптированная для решения задач регрессии и многоклассовой классификации с использованием градиентного бустинга.

В задаче регрессии, связанной с предсказанием количества сожжённых калорий, предложенный метод позволил эффективно справиться с правосторонней асимметрией распределения и редкими значениями, которые создавали трудности для стандартных функций потерь. Модификация Focal Loss усиливает вклад значительных ошибок, игнорируя легко предсказываемые значения, что минимизирует процентные ошибки и улучшает точность модели. В результате удалось не только улучшить качество предсказаний по сравнению с классическим XGBoost (порядка 10% по MAPE), но и существенно сократить время обучения за счёт оптимизированного вычисления градиентов и ранней остановки обучения (более чем в 8 раз или более чем на 15 минут).

В задаче классификации предсказание уникального идентификатора тренажёрного зала осложнялось размытыми границами между классами и схожестью их признаков. Стандартные функции потерь не могли эффективно обрабатывать такие ситуации, однако использование Focal Loss позволило акцентировать внимание на трудных для классификации примерах. Это снизило влияние легко предсказываемых наблюдений и позволило модели повысить точность предсказаний, сохраняя обобщающую способность. Реализованный метод значительно ускорил процесс обучения, при этом достигнув высокой точности на тестовых данных.

Анализ сложности предложенного алгоритма показал, что его производительность линейно зависит от числа деревьев, количества объектов и глубины деревьев. Использование ранней остановки обучения позволило

ускорить процесс и предотвратить избыточные вычисления без потери качества модели.

Таким образом, разработанный метод демонстрирует значительное преимущество по сравнению с классическими реализациями и является надёжным решением для задач машинного обучения, где критически важны точность, устойчивость и скорость, как было продемонстрировано для выбранной задачи с тренажерными залами.

Литература

- [1] Dataset Summary: Gym Check-ins and User Metadata. https://www.kaggle.com/datasets/mexwell/gym-check-ins-and-user-metadata/data
- [2] Ross T. Y., Dollár G. Focal loss for dense object detection //proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition. 2017. C. 2980-2988.
- [3] Trisanto D. et al. Modified focal loss in imbalanced XGBoost for credit card fraud detection //International Journal of Intelligent Engineering and Systems. 2021. T. 14. N_{\odot} . 4. C. 350-358.
- [4] Wang X. et al. Focal loss dense detector for vehicle surveillance //2018 international conference on intelligent systems and computer vision (ISCV). IEEE, 2018. C. 1-5.
- [5] Wang C., Deng C., Wang S. Imbalance-XGBoost: leveraging weighted and focal losses for binary label-imbalanced classification with XGBoost //Pattern recognition letters. 2020. T. 136. C. 190-197.