ТЕХНОСФЕРА

Лекция 9
Бустинг

Всеволод Викулин

Содержание

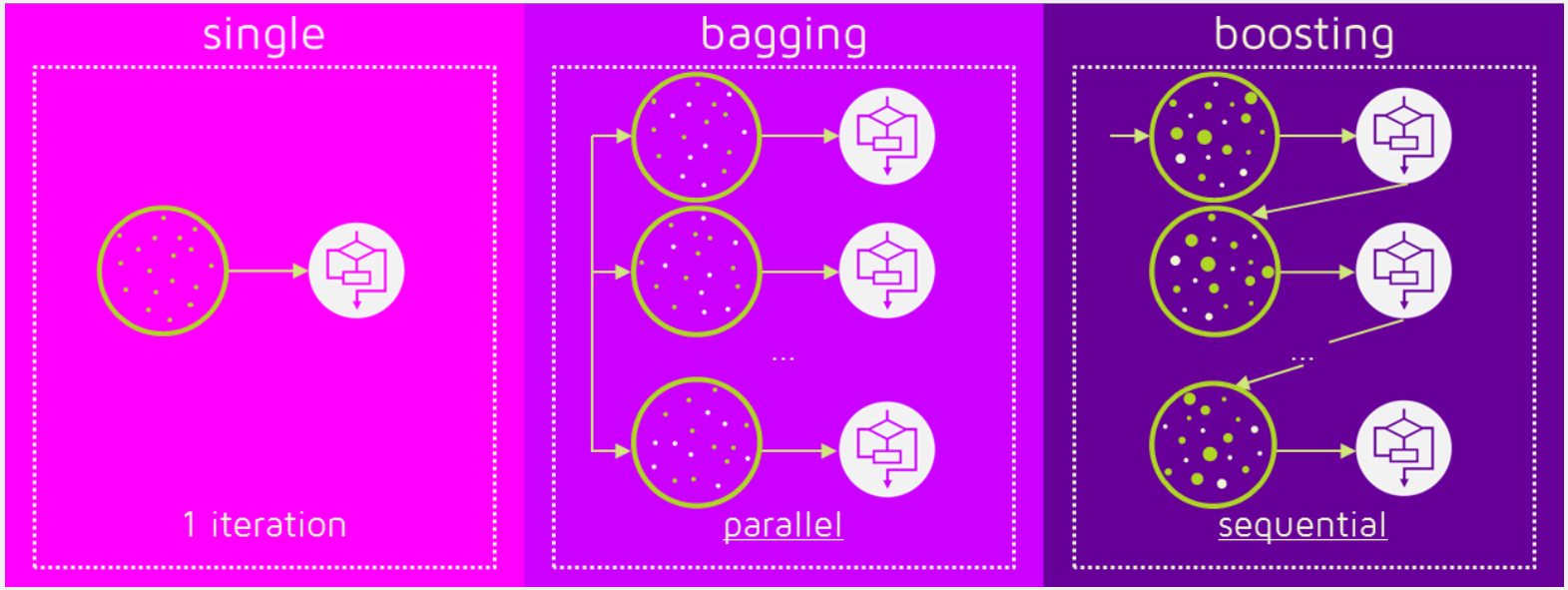
1. Что такое бустинг?
2. AdaBoost
3. Градиентный бустинг
4. Современные реализации: xgboost, lightgbm

Часть 1
Что такое бустинг?

Напоминание

Проходили бэггинг и RandomForest, в них все модели строятся независимо.

Давайте строить модели не независимо, а чтобы следующая модель исправляла ошибки предыдущих.



Источник: kdnuggets.com/2017/11/difference-bagging-boosting.html

Бустинг

$F(x) = f_0(x) + c_1 f_1(x) + \ldots c_n f_n(x)$ размера n

$F(x)$ — ансамбль, $f_i(x)$ — базовый алгоритм

Как находить все коэффициенты и базовые алгоритмы?

Будем находить их **итеративно,** сначала $f_0(x)$ потом $c_1, f_1(x)$ и так далее

Общая схема

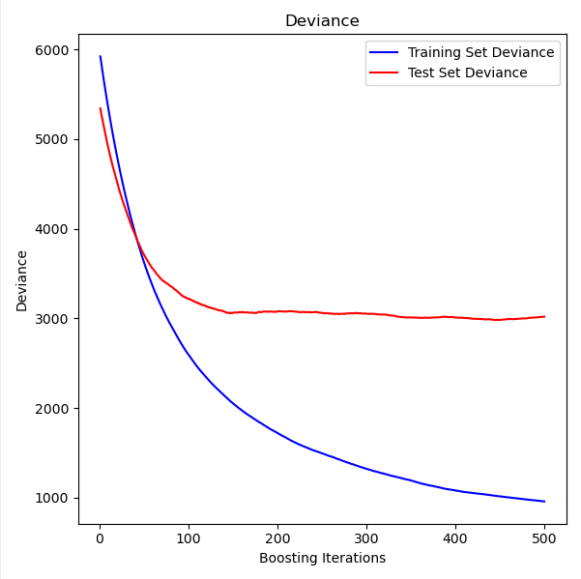
Хотим минимизировать

$$Q = \sum_{i=1}^{N} L(F(x_i), y_i) = \sum_{i=1}^{N} L(\sum_{j=1}^{n} c_j f_j(x_i), y_i)$$

1. Взять начальное приближение $f_0(x)$
2. $c_k, f_k = argmin_{c,f} \sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i) + cf(x_i), y_i)$
3. $F_k = F_{k-1} + c_k f_k$
4. Повторять 2) 3) до сходимости

Замечания

- Для некоторых функций потерь, задача может решаться аналитически, для остальных - градиентный бустинг
- Нельзя использовать сверх переобученные модели, как в случайном лесе
- Число алгоритмов надо тоже подбирать



scikit-learn.org/stable/modules/ensemble.html

Часть 2
AdaBoost

AdaBoost

$$c_k, f_k = argmin_{c,f} \sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i) + cf(x_i), y_i)$$

$$L(x_i, y_i) = \exp(-y_i F(x_i)), y_i \in \{-1, 1\}$$

$$L(x_i, y_i) = \exp(-y_i(F_{k-1} + c_k f_k(x_i))) =$$

$$= \exp(-y_i F_{k-1}) * \exp(-y_i c_k f_k(x_i))) =$$

$$= w_i * \exp(-y_i c_k f_k(x_i)))$$

$$Q = \sum_{i=1}^{N} L(F(x_i), y_i) = \exp(-c_k) \sum_{y_i = f_k(x_i)} w_i + \exp(c_k) \sum_{y_i \neq f_k(x_i)} w_i$$

$$Q = (\exp(c_k) - \exp(-c_k)) \sum_{i=1}^{N} w_i I[y_i \neq f_k(x_i)] + \exp(-c_k) \sum_{i=1}^{N} w_i$$

Оптимально учить алгоритм на выборке с весами!

$$f_k = argmin_f w_i I[y_i \neq f_k(x_i)]$$

AdaBoost

Подставляя f_k и оптимизируя по c_k

$$c_k = \frac{1}{2}\log\frac{1-eer_k}{err_k}$$

Где $err_k = \frac{\sum_{i=1}^{N} w_i I[y_i \neq f_k(x_i)]}{\sum_{i=1}^{N} w_i}$

1) Инициализировали веса $w_i = \frac{1}{N}$

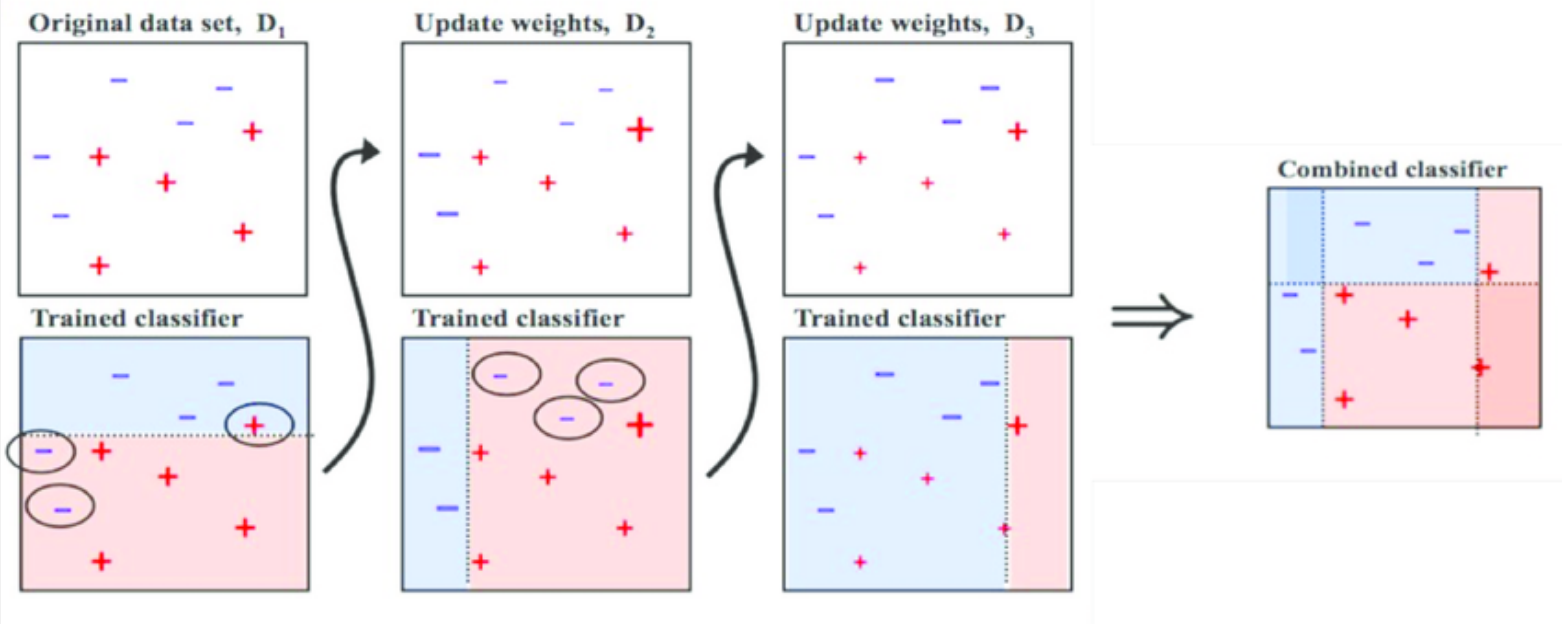
2) обучили $f_k = argmin_f w_i I[y_i \neq f_k(x_i)]$, нашли $c_k = \frac{1}{2}\log\frac{1-eer_k}{err_k}$

3) Достроили ансамбль $F_k = F_{k-1} + c_k f_k$, обновили $w_i = \exp(-y_i F_k(x_i))$

4) Повторять 2) и 3) M шагов

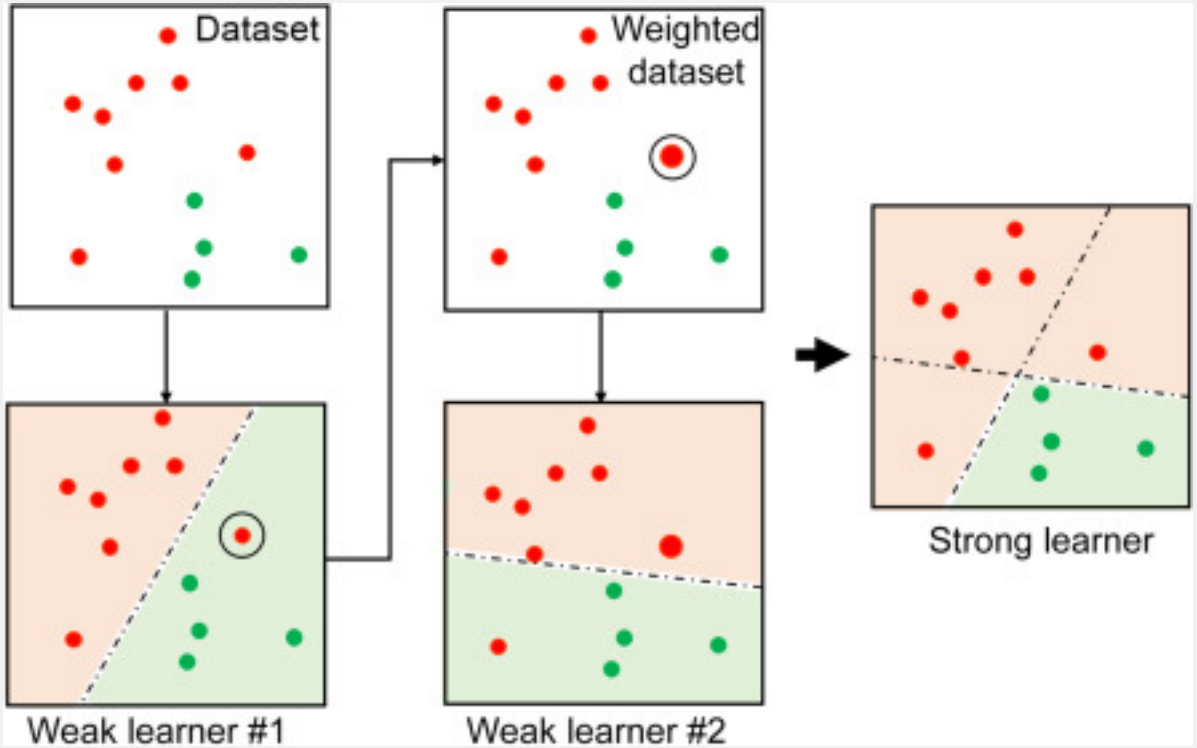
В итоге предсказание $a(x) = sign(\sum_{j=1}^{N} c_j f_j(x_i))$

Пример



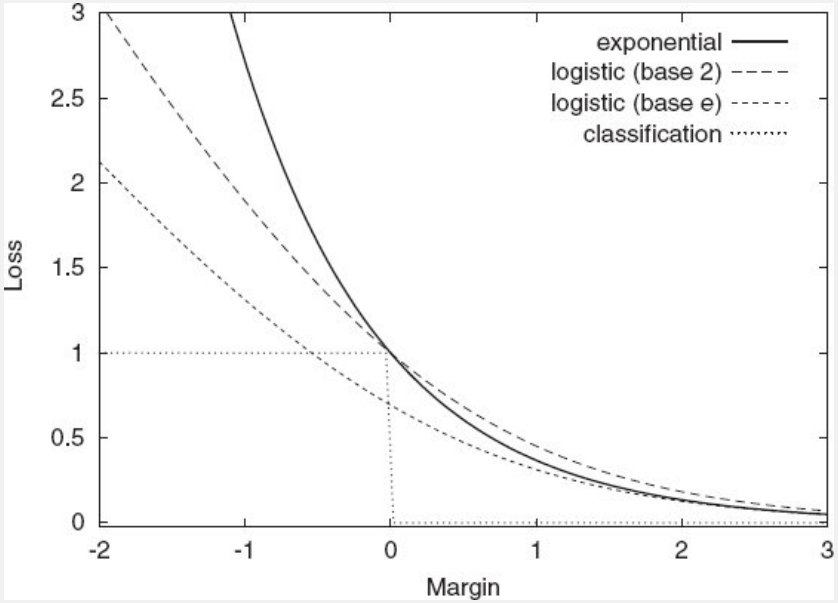
towardsdatascience.com/tagged/adaboost

Пример



sciencedirect.com/topics/engineering/adaboost

Проблема AdaBoost



Экспоненциальная функция ошибки очень плохо работает с выбросами — задает им очень большие веса. Нужно менять!

mitpress.mit.edu

LogitBoost

$$L(x_i, y_i) = \log(1 + \exp(-y_i F(x_i))$$

LogitBoost (two classes)

1. Start with weights $w_i = 1/N$ $i = 1, 2, \ldots, N$, $F(x) = 0$ and probability estimates $p(x_i) = \frac{1}{2}$.
2. Repeat for $m = 1, 2, \ldots, M$:

   (a) Compute the working response and weights

   $$z_i = \frac{y_i^* - p(x_i)}{p(x_i)(1 - p(x_i))},$$

   $$w_i = p(x_i)(1 - p(x_i)).$$

   (b) Fit the function $f_m(x)$ by a weighted least-squares regression of z_i to x_i using weights w_i.

   (c) Update $F(x) \leftarrow F(x) + \frac{1}{2} f_m(x)$ and $p(x) \leftarrow (e^{F(x)})/(e^{F(x)} + e^{-F(x)})$.

3. Output the classifier $\text{sign}[F(x)] = \text{sign}[\sum_{m=1}^{M} f_m(x)]$.

Еще есть L2Boost для MSE и возможно еще миллион вариантов для разных лоссов. Но сейчас уже их нет смысла разбирать, потому что есть…

Часть 3
Градиентный бустинг

Общий подход

- Хочется уметь делать бустинг для любого лосса (все как в линейной регрессии)

$$c_k, f_k = argmin_{c,f} \sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i) + cf(x_i), y_i)$$

Куда правильнее всего идти? В сторону анти-градиента! Давайте f_k приблизим антиградиент и найдем шаг. То есть мы рассмотрим функцию $Q = \sum_{i=1}^{N} L(F(x_i), y_i)$ как функцию N переменных и будем оптимизировать ее градиентным спуском

Градиентный бустинг

1. Инициализировать f_0
2. Обучить f_k на выборке $(x_i, -\frac{\partial L}{\partial F}(x_i, F_{k-1}(x_i)))_{i=1}^{N}$, например, на MSE функции потерь. Посчитали антиградиент
3. Найти шаг

$$c_k = argmin_c \sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i) + cf_k(x_i), y_i)$$

4. Достроить ансамбль $F_k = F_{k-1} + c_k f_k$
5. Повторять 2) 3) 4) M итераций

Размер шага

Можно честно решить задачу **одномерной** оптимизации: $argmin_c \sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i) + cf_k(x_i), y_i)$

На практике можно сделать перебор.

Используют **shrinkage** $F_k = F_{k-1} + \eta c_k f_k, \eta \in (0,1]$

Можно вообще шаг сделать константным:

$F_k = F_{k-1} + \eta f_k$, где η - learning rate

Глубина деревьев

В RandomForest строили деревья максимальной глубины, чтобы модели были переобученными.

- Если в бустинге деревья маленькие, то мы очень плохо приближаем аннтиградиент;
- Если в бустинге деревья очень глубокие, то мы за несколько итераций переобучимся.

Глубину надо подбирать на валидации!

Обычно используют глубину 3-6.

?

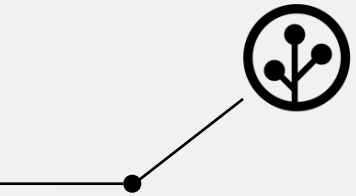
А что с точки зрения Bias-Variance?

Стохастический градиентный бустинг

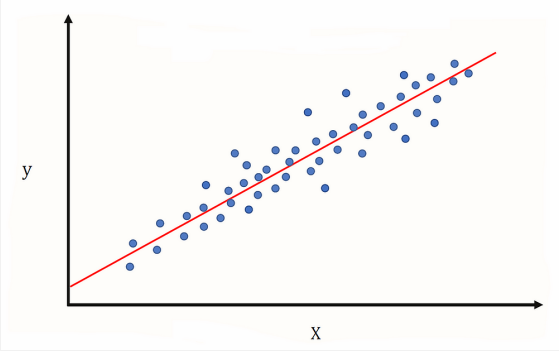
Каждый алгоритм можно учить на случайной подвыборке и случайном множестве признаков.

+ Может уменьшить переобучение
+ Быстрее учится
+ Позволяет считать OOB core

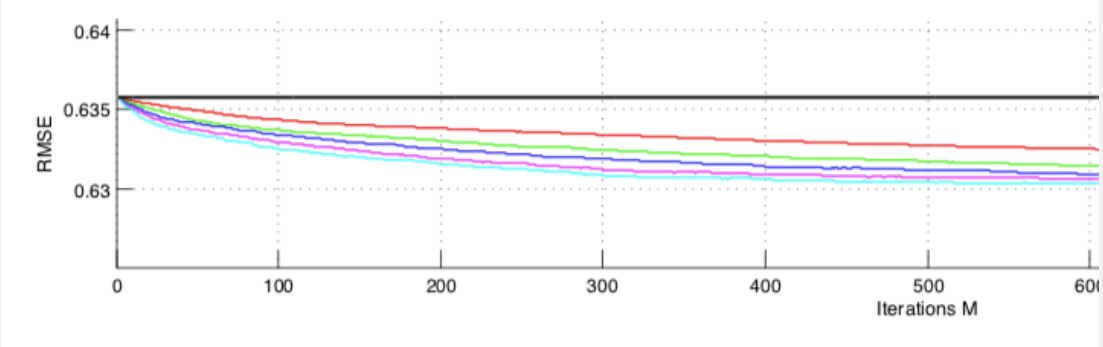
Чем инициализировать



Если есть линейный тренд, можно его отсечь инициализацией



(numpyninja.com)



proceedings.mlr.press/v14/mohan11a/mohan11a.pdf

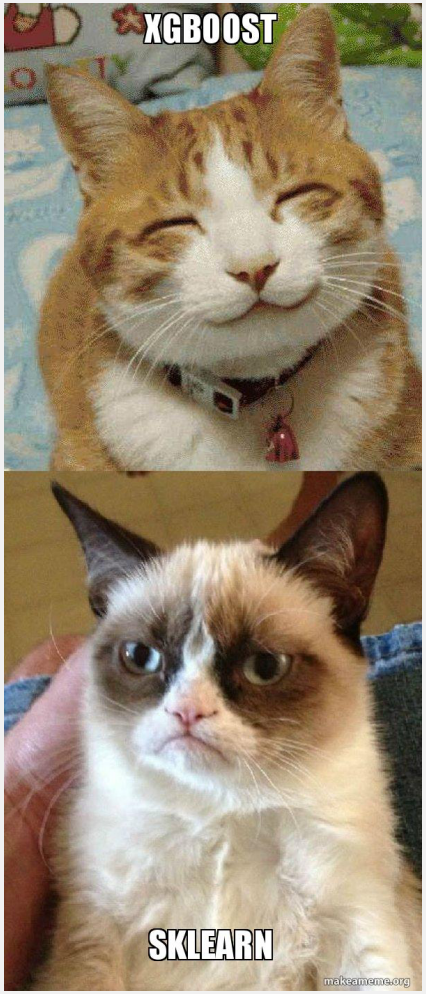
BagBoo

1. **Input:** training data D; $NBag$ and $NBoo$ iterations of bagging and boosting respectively
2. **Output:** Random Forest of $NBag$ x $NBoo$ trees
3. **for** $i = 1$ **to** $NBag$ do
4. $D[i] := SampleData(D)$; # samples both data records and features without replacement
5. $BT[i] := BoostedTree(D[i], NBoo)$; # NBoo iterations of boosting optimization on D[i]
6. **endfor**
7. Output additive model $\sum_i BT[i]$;

cache-mskstoredata05.cdn.yandex.net/download.yandex.ru/company/a_scalable_hybrid_bagging_the_boosting_model.pdf

Часть 4
xgboost, lightgbm

Xgboost



Взорвал Кагл несколько лет назад(породил мемов):

В 2015 году среди 29 соревнований 17 победителей использовали xgboost и 8 использовали только его!

Причины:

1. Быстро учится
2. Может многопоточно или на ГПУ
3. Учится непосредственно под лосс (разберем)
4. Использует хитрую оптимизацию (разберем)
5. Есть регуляризация листьев (разберем)

Почему MSE

$$f_k = argmin_f \sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i) + f(x_i), y_i)$$

$$\sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i) + f(x_i), y_i) = \sum_{i=1}^{N} L(F_{k-1}(x_i), y_i) + g_i f(x_i) + \frac{1}{2} h_i f(x_i)^2$$

А вот с таким лоссом мы учим дерево в бустинге:

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (f(x_i) + g_i)^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)^2 + 2 f(x_i) g_i + g_i^2$$

Если гессиан на всех объектах единичен, то эти две формулы совпадают! В xgboost применяется разложение 2 порядка.

Регуляризация

Наш функционал мерит качество на трейне, но никак не штрафует за сложность!

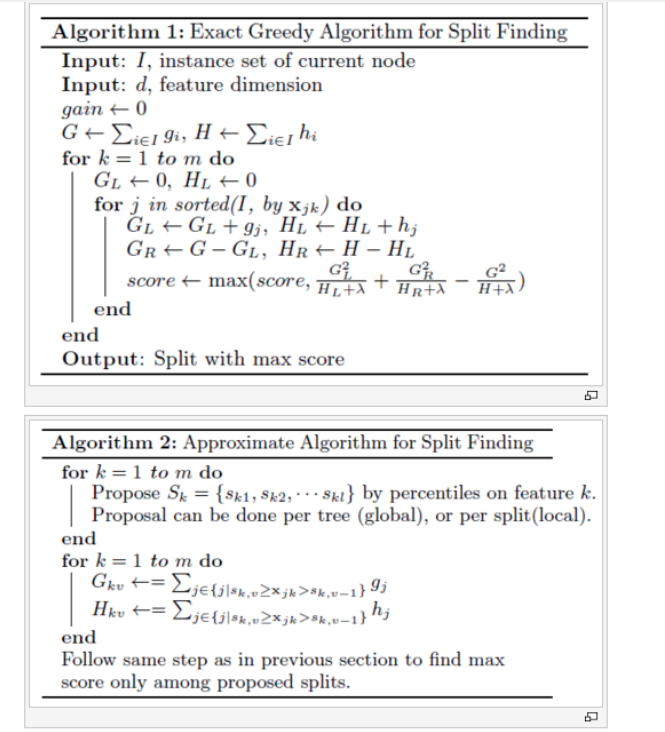
Делаем регуляриацию на число листьев и на значения в них

$$\sum_{i=1}^{N} g_i f(x_i) + \frac{1}{2} h_i f(x_i)^2 + \gamma J + \sum_{j=1}^{J} |b_j|^2$$

Этот функционал потом берется как критерий информативности и деревья строятся **непосредственного** под него!

В качестве критерия останова смотрится значение этого функционала.

Approximate split finding



Algorithm 1: Exact Greedy Algorithm for Split Finding

Input: I, instance set of current node
Input: d, feature dimension
$gain \leftarrow 0$
$G \leftarrow \sum_{i \in I} g_i$, $H \leftarrow \sum_{i \in I} h_i$
for $k = 1$ *to* m **do**
  $G_L \leftarrow 0$, $H_L \leftarrow 0$
  for j *in sorted*$(I,$ *by* $\mathbf{x}_{jk})$ **do**
    $G_L \leftarrow G_L + g_j$, $H_L \leftarrow H_L + h_j$
    $G_R \leftarrow G - G_L$, $H_R \leftarrow H - H_L$
    $score \leftarrow \max(score, \frac{G_L^2}{H_L+\lambda} + \frac{G_R^2}{H_R+\lambda} - \frac{G^2}{H+\lambda})$
  end
end
Output: Split with max score

Algorithm 2: Approximate Algorithm for Split Finding

for $k = 1$ *to* m **do**
  Propose $S_k = \{s_{k1}, s_{k2}, \cdots s_{kl}\}$ by percentiles on feature k.
  Proposal can be done per tree (global), or per split(local).
end
for $k = 1$ *to* m **do**
  $G_{kv} \leftarrow= \sum_{j \in \{j | s_{k,v} \geq \mathbf{x}_{jk} > s_{k,v-1}\}} g_j$
  $H_{kv} \leftarrow= \sum_{j \in \{j | s_{k,v} \geq \mathbf{x}_{jk} > s_{k,v-1}\}} h_j$
end
Follow same step as in previous section to find max score only among proposed splits.

wiki.math.uwaterloo.ca/statwiki/index.php?title=summary

Резюме по xgboost

1. Можем учить дерево по квантилям неточно
2. Приближаем направление еще с учетом вторых производных
3. Добавляем регуляризацию в функционал
4. Меняется критерий информативности, который непосредственно использует этот функционал
5. Критерий основа тоже меняется под функционал

Lightgbm

Статья 2017 года, то есть алгоритм свежее xgboost, взял в себя все лучшее.

Отличия:

1. Используется 1 порядок аппроксимации
2. Gradient Based One Side Sampling (уменьшаем объекты)
3. Exclusive Feature Bundling (уменьшаем признаки)

GOSS

Какие примеры самые важные для обучения?
На которых самый большой градиент!

Input: I: training data, d: iterations
Input: a: sampling ratio of large gradient data
Input: b: sampling ratio of small gradient data
Input: $loss$: loss function, L: weak learner
models ← {}, fact ← $\frac{1-a}{b}$
topN ← a × len(I) , randN ← b × len(I)
for $i = 1$ ***to*** d **do**
  preds ← models.predict(I)
  g ← $loss$(I, preds), w ← {1,1,...}
  sorted ← GetSortedIndices(abs(g))
  topSet ← sorted[1:topN]
  randSet ← RandomPick(sorted[topN:len(I)], randN)
  usedSet ← topSet + randSet
  w[randSet] × = fact ▷ Assign weight $fact$ to the small gradient data.
  newModel ← L(I[usedSet], − g[usedSet], w[usedSet])
  models.append(newModel)

papers.nips.cc/paper/2017/file/6449f44a102fde848669bdd9eb6b76fa-Paper.pdf

EFB

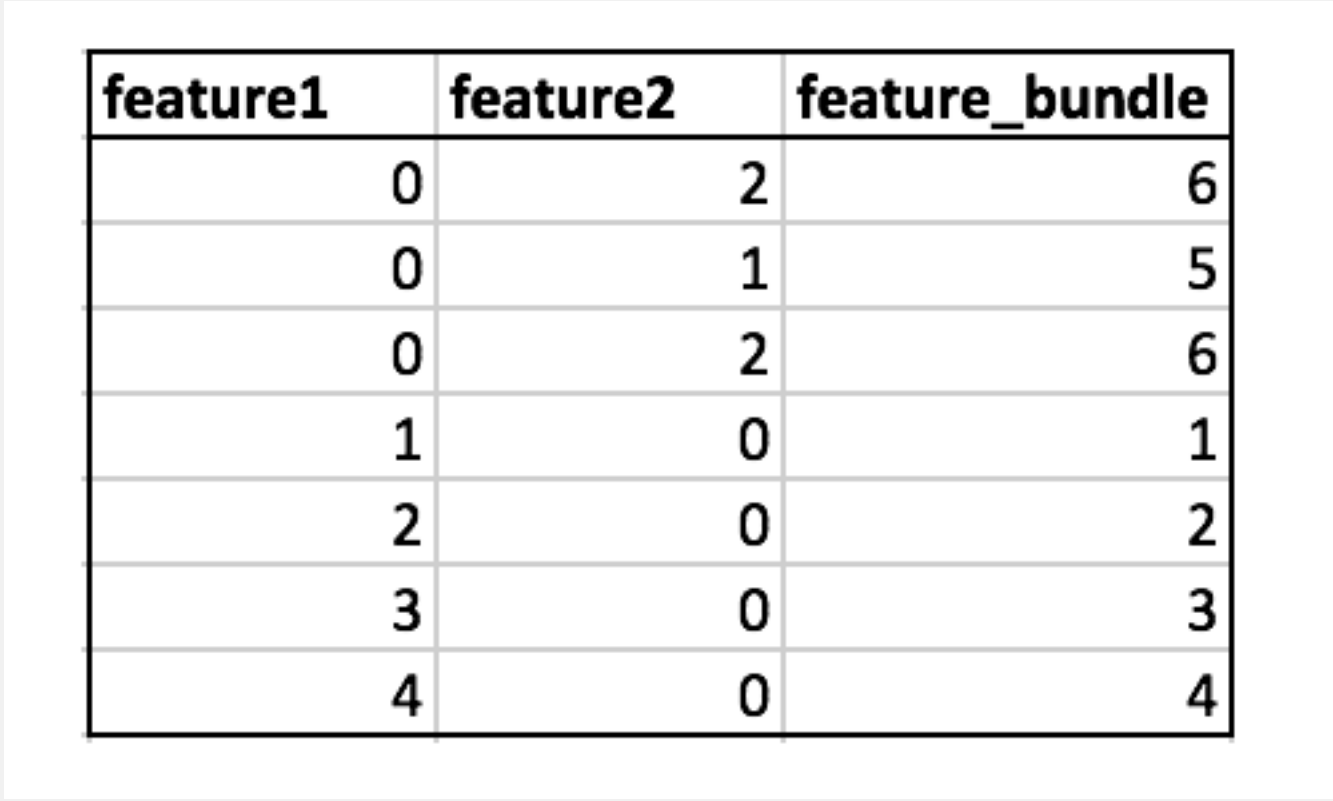
1. Сгруппировать фичи в связки
2. Смерджить фичи в связках в одну фичу

Связка строится из фичей, которые **не перекрываются** на разных объектах, например

[0, 0, 0, 1, 2], [1, 2, 0, 0, 0] -> [1, 2, 0, 3, 4]

Идем по всем фичам, если фича перекрывается с текущими связками, создаем новую иначе добавляем в текущую

EFB



feature1	feature2	feature_bundle
0	2	6
0	1	5
0	2	6
1	0	1
2	0	2
3	0	3
4	0	4

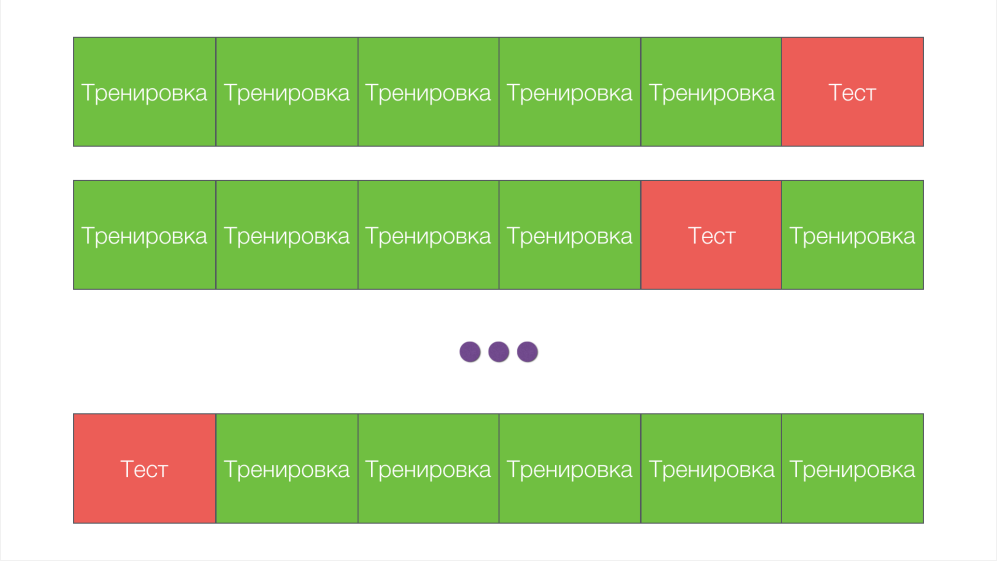
towardsdatascience.com/what-makes-lightgbm-lightning-fast-a27cf0d9785e

Catboost

Градиентный бустинг с кодировкой категориальных признаков!

catboost.ai

Реализованы лоссы для **ранжирования**.



ТЕХНОСФЕРА

Спасибо за внимание!