Optymalizacja hiperparametrów xgboost

Dokumentacja wstępna

Przemysław Stawczyk, Piotr Zmyślony

15 kwietnia 2020

Spis treści

1 Treść zadania

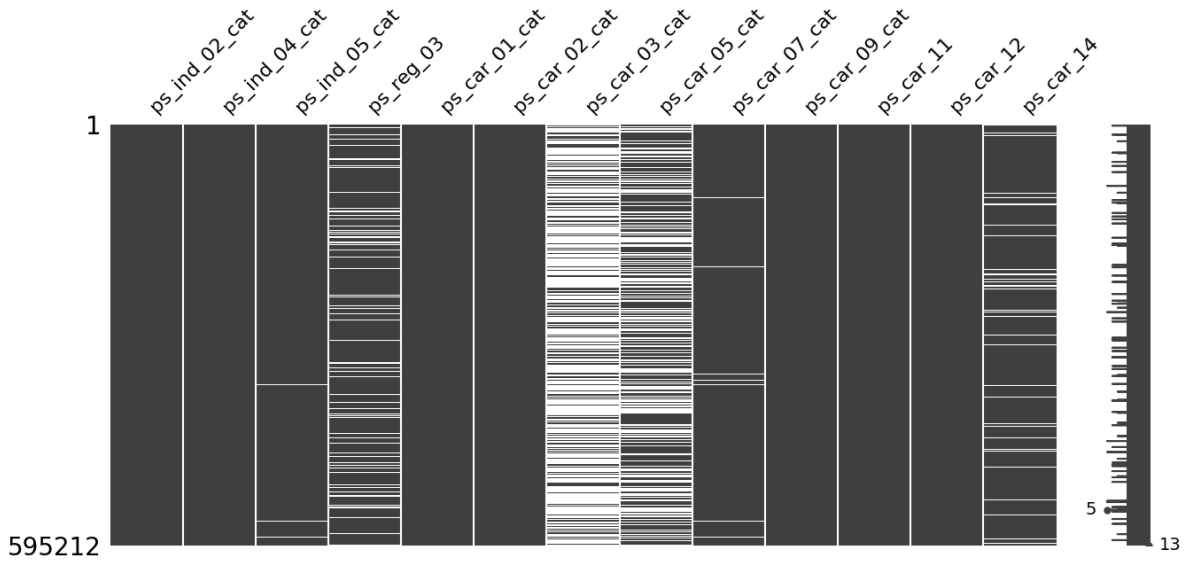
Naszym zadaniem jest przetestowanie różnych algorytmów heurystycznych/populacyjnych w kontekście problemu strojenia hiperparametrów algorytmu xgboost. Problem wyboru hiperparametrów wynika z ich bardzo dużej ilości, co często rozwiązyne jest poprzez manualny dobór parametrów klasyfikatora.

Projekt zostanie zrealizowany w języku Python 3+.

2 Dane testowe

Jako dane na których będziemy trenować i testować klasyfikatory przyjęliśmy proponowany zestaw danych https://www.kaggle.com/c/porto-seguro-safe-driver-prediction. Zawiera on 57 atrybutów opisujących klientów firmy ubezpieczeniowej i jeden atrybut binarny sygnalizujący, czy w ciągu roku od zawarcia umowy, klient skorzystał z ubezpieczenia.

Rysunek 1: Brakujące atrybuty



2.1 Analiza danych

Po wstępnej analizie danych odkryliśmy, że w zbiorze danych posiadamy około 79% niekompletnych wierszy. Rysunek 1 przedstawia pokrycie niekompletnych atrybutów - jest ich jedynie 13, z czego większość jest wybrakowana w bardzo niewielkim stopniu.

Największym winowajcą jest atrybut binarny *ps_car_03_cat*, którego brakuje aż w 70% wierszy, oraz atrybut *ps_car_05_cat* (brakuje go w 44% przypadków).

Dodatkowo, wystaępuje znaczna dysproporcja między klasami rekordów - tylko 3% wierszy opisuje klientów, którzy skorzystali z ubezpieczenia. Stąd niezbędna będzie interpolacja danych, tak aby ilość rekordów obu klas była równa.

2.2 Uzupełnienie brakujących danych

W związku z powyższym, planujemy uzupełnić brakujące atrybuty na bazie kompletnych wierszy danych. Do tego zastosujemy bibliotekę pythonową *impyute*, ale nie będziemy analizować, jaka jest zależność między konkretnymi metodami interpolacji wybrakowanych atrybutów a hiperparametrami trenowanego klasyfikatora - ręcznie wybierzemy tą, która daje najlepsze (i najszybsze) rezultaty.

3 Propozycja rozwiązania

Planujemy zaimplementować następujące algorytmy:

- stochastyczny algorytm wspinaczkowy z tabu.
  W wariantach:
  - z prawdopodobieństwem P mutacji jednego z parametrów
  - z prawdopodobieństwem P mutacji każdego z parametrów [w szczególności mogą zmutować wszystkie]
- przegląd wyczerpujący hipersiatki

Trenowane parametry

nazwa parametu	zakres
eta	0.2, 0.3, 0.4, 0.5
min_split_loss *gamma*	0, 1, 2, 3
max_depth	1, 2... 16
min_child_weight	1, 2
max_delta_step	0, 1, 2
subsample	0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9
colsample_bytree	0.6, 0.8, 1

4 Funkcja celu - TODO : REWORK

Jako funkcję celu planujemy wykorzystać *przewidywany koszt*

```
Expected cost = p(p) × [ p(tp) × benefit(tp) + p(fn) × cost(fn) ]
              + p(n) × [ p(tn) × benefit(tn) + p(fp) × cost(fp) ]
```

gdzie :

- *P(x)* to prawdopodonieństwo x
- *benefit(x)* to zysk z x
- *cost(x)* to koszt/kara za x
- *x* - może oznaczać :
  - *p* - pozytywną predykcję
  - *n* - negatywną predykcję
  - *tp* - pozytywną prawidłową predykcję

fp - pozytywną fałszywą predykcję

*t*n - negatywną prawidłową predykcję

fn - negatywną fałszywą predykcję

Gdzie przewidywane koszta i straty preedykcji będą możliwe do zmiany jako parametry uruchomienia.

5 Sposób mierzenia jakości rozwiązania

Będziemy porównywać algorytm pod kątem czasu działania względem wyczerpującego przeglądu, analizując czy zysk z szybszego doboru parametrów jest wystarczająco duży, by go stosować dla różnych limitów przejrzanych kombinacji dla naszych algorytmów.
Zbiór danych zostanie podzielony na 2 podzbiory - uczenia i testowy *uczący odpowiednio większy*. Na zbiorze testowym nie będziemy uczyć i podejmować decyzji - zostanie on wykorzystany do zmierzenia działania algorytmu po dobraniu wszystkich parametrów. Zbiór uczący będzie działać z k-krotną walidacją krzyrzową lub podzielony na zbiór uczenia i weryfikacji.

5.1 Weryfikacja rozwiązania na innych danych

Końcową wersję naszego algorytmu heurystycznego planujemy przetestować przy użyciu dodatkowego zbioru danych dot. przewidywania bankructwa polskich firm, który analizowaliśmy w innym projekcie.