XGBoost

背景

XGBoost 最初是由 Tianqi Chen 作为分布式（深度）机器学习社区（DMLC）组的一部分的一个研究项目开始的。XGBoost后来成为了Kaggle竞赛传奇——在2015年的時候29个Kaggle冠军队伍中有17队在他们的解决方案中使用了XGboost。人们越来越意识到XGBoost的强大威力。夸张一点说，如果你不会XGboost，那你参加Kaggle竞赛就是去送人头的。

XGboost到底是什么呢？Tianqi Chen在XGboost的论文中写道：”Tree boosting is a highly effective and widely used machine learning method. In this paper, we describe a scalable end-to-end tree boosting system called XGBoost, which is used widely by data scientists to achieve state-of-the-art results on many machine learning challenges.“[1] **总结一下，XGBoost是一个可拓展的Tree boosting算法，被广泛用于数据科学领域。**

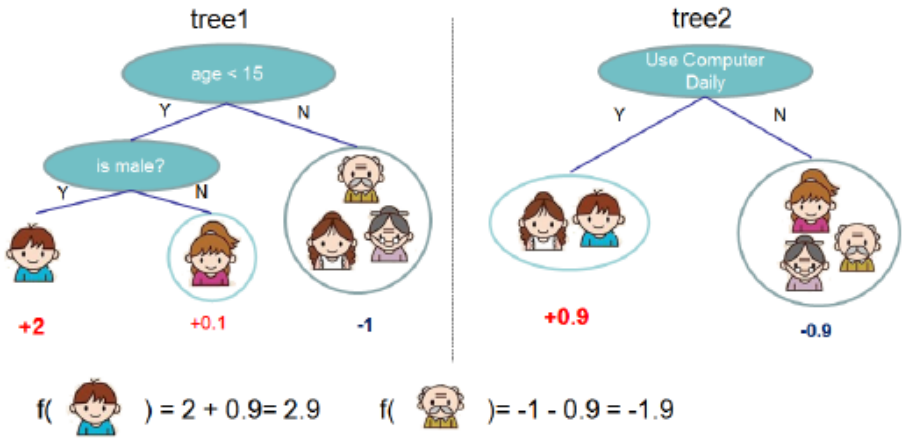
XGBoost可以说是GBDT（Gradient Boosting Decision Tree）梯度提升树的一个改进版本。XGBoost中的X代表的就是eXtreme（极致），XGBoost能够更快的、更高效率的训练模型。这就是为什么XGBoost可以说似乎GBDT的一个改进版本。正是得益于XGBoost的高效率，使得她成为数据竞赛中的一大杀器。

工程原理

想要了解一个算法，首先得从**宏观**上知道这个算法是怎么工作的：**1、算法的具体形式；2、怎么做出预测**

具体形式

XGboost的可视化（如下图，一个由两棵决策树组成的XGBoost）



重点：

1、XGboost的基本组成元素是：决策树；我们将这些决策树成为”弱学习器“，这些”弱学习器“**共同**组成了XGboost

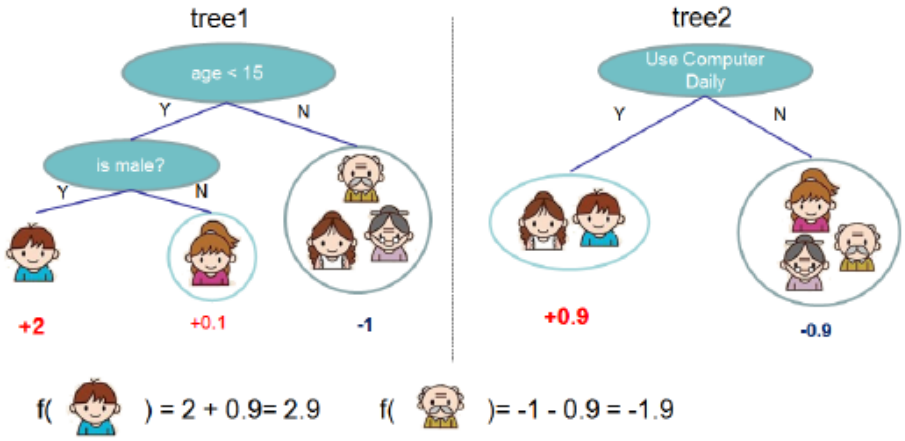
2、组成XGBoost的决策树之间是有先后顺序的；**后一棵**决策树的生成会考虑前一棵决策树的预测结果，即将前一棵决策树的偏差考虑在内（在目标函数中有体现）

3、生成每棵决策树使用的数据集，是整个数据集。所以可以将每棵决策树的生成都看作是一个完整的决策树生成过程

怎么做出预测

一个新样本的预测：新样本依次进入XGBoost的每棵决策树。在第一棵决策树，有一个预测值；在第二棵决策树，有一个预测值，依次类推…直到进入完所有”弱学习器“（决策树）。最后，将”在每一颗决策树中的值”**相加**，即为最后预测结果。

举例：还是刚刚那张图，样本”儿子”在tree1中的预测值为+2，在tree2中为+0.9。将两个值相加，2+0.9=2.9，所以XGboost最后预测样本”儿子”的值为2.9



目标函数

引言

到这里，我们已经知道了一个XGBoost模型到底是什么工作的了。那XGboost模型到底是怎么生成的呢？XGboost中的“弱学习器”是怎么生成的？

了解机器学习的都知道，要评价我们产生的模型是否是最好的，其依据是“目标函数”。目标函数越小，这个模型才越是我们想要的。刚刚提到，XGboost中的“弱学习器”是“决策树”。在经典的“决策树”算法中，**ID3**的目标函数基于“信息熵”，**CART**的目标函数基于“GINI系数”。而在XGboost中，“决策树“的目标函数引入了”偏差“这个变量，这也是XGBoost的魅力所在。

总结一下：XGboost的”弱学习器“是”决策树“，每棵”决策树”都是目标函数值最小时的模型。只有这棵”决策树”的目标函数值最小，才会被选为“弱学习器”。

数学详解

要想清楚了解XGBoost的原理，需要对其目标函数进行数学上的解析。这样，我们才能知道，每一个”弱学习器“是怎么生成的。

我们已经知道，要生成一棵好的决策树，目标是：是其目标函数值最小。那问题是，我们该如何使得其最小呢？其中，涉及到两个问题：

问题1：怎么设置叶子节点的值？

问题2：如何进行结点的分裂（怎么构造树的结构）？

围绕问题1问题，笔者对目标函数进行了手写的数学详解

第t个决策树的目标函数公式如下

$$\mathcal{L}^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} l(y_i, \hat{y_i}^{(t-1)} + f_t(\mathbf{x}_i)) + \Omega(f_t)$$

明确符号

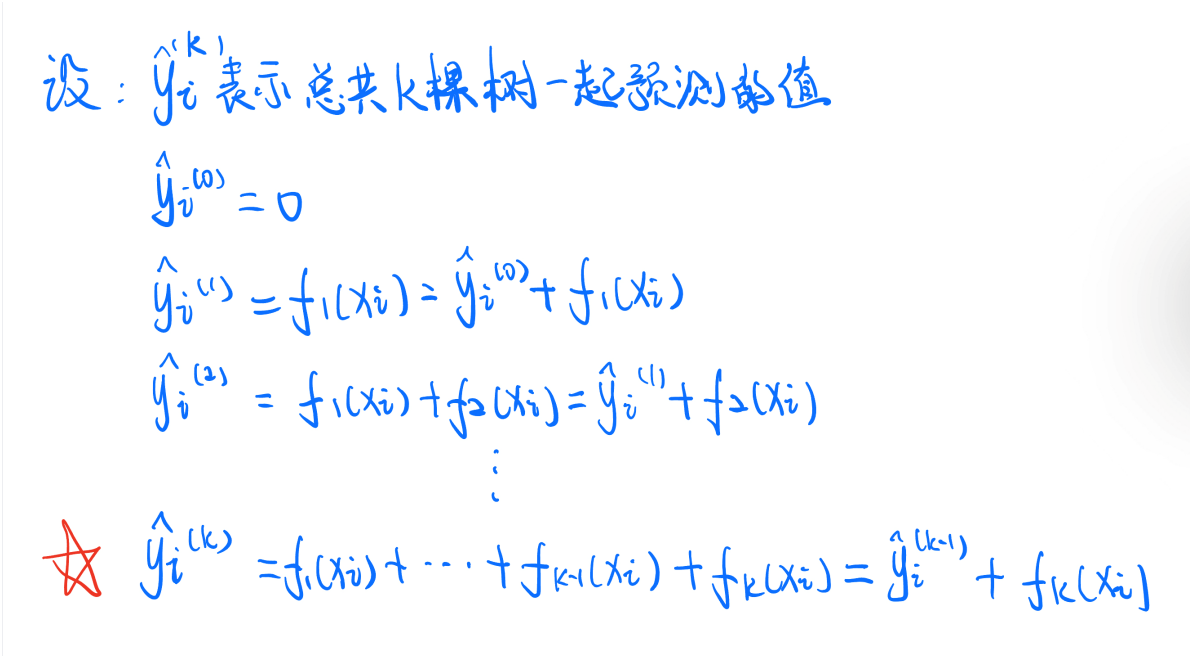
1、$l(y_i，\ \hat{y}_i^{(t-1)})$ 表示与 y_i，$\hat{y}_i^{(t-1)}$ 有关的损失函数，这个损失函数是可以根据需要自己定义的

2、$\hat{y}_i^{(t-1)}$ 表示"**前t-1棵决策树**"对样本i的**预测值**（将前t-1棵决策树中的每棵决策树的预测值相加所得）；y_i 表示样本i的**实际值**

3、$f_t(x_i)$ 表示"**第t棵决策树**"对样本i 的**预测值**

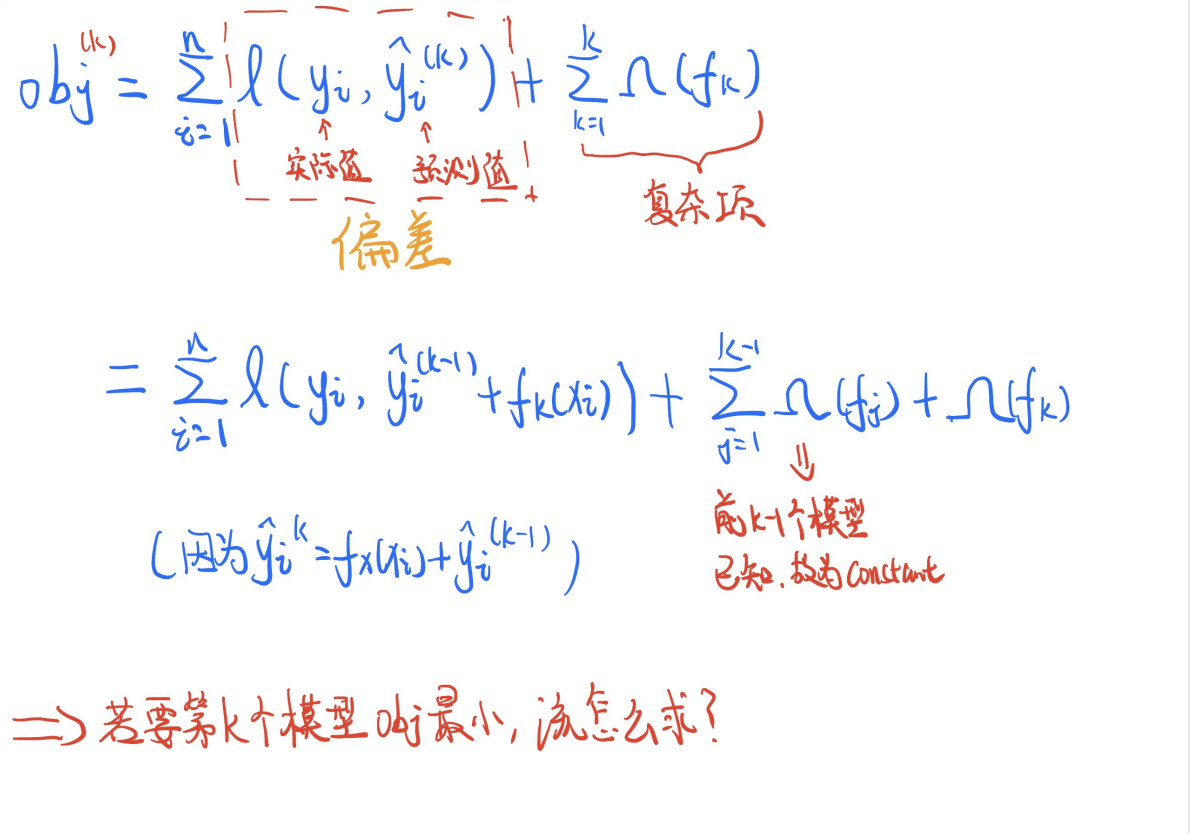
4、$\Omega(f_t)$ 表示第t棵树的模型复杂度

所以，我们有结论如下图：**总共k棵树对样本i的预测值=前k-1棵预测树的预测值+第k棵树的预测值**

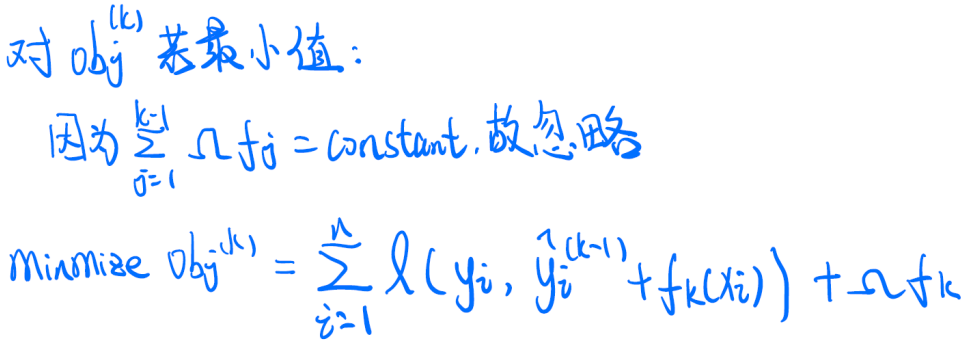


化简目标函数

1、将刚刚得到的：$\hat{y}_i^{(k)}=\hat{y}_i^{(k-1)}+f_k(x_i)$ 替换进目标函数。过程如下图



2、紧接着第一步的结果，我们有以下目标——**怎么样才能使目标函数最小**（如下图）



3、为了解决这个问题，我们对目标函数进行化简。根据数学知识，我们可以使用“**泰勒展开**”对一个函数进行化简。具体过程如下图

大致的思路：1、使用泰勒展开；2、将常数项忽略（因为我们的目标是找最小值）；3、转换一些符号，使式子更简洁

使用泰勒展开：

$$Obj^{k}=\sum_{i=1}^{n}\left[l\left(y_i,\hat{y}_i^{(k-1)}\right)+\frac{\partial\, l\left(y_i,\hat{y}_i^{(k-1)}\right)}{\hat{y}_i^{(k-1)}}\times f_k(x_i)+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 l\left(y_i,\hat{y}_i^{(k-1)}\right)}{y_i^{(k-1)}}\times f_k^2(x_i)\right]+\Omega(f_k)$$

残差的一阶导数　　残差的二阶导数

$$=\sum_{i=1}^{n}\left[l\left(y_i,\hat{y}_i^{(k-1)}\right)+g_i f_k(x_i)+\frac{1}{2}h_i\times f_k^2(x_i)\right]+\Omega(f_k)$$

$l\left(y_i,\hat{y}_i^{(k-1)}\right)$ ⇓ constant

$$=\sum_{i=1}^{n}\left[g_i f_k(x_i)+\frac{1}{2}h_i\times f_k^2(x_i)\right]+\Omega(f_k)$$

注：当训练第k棵树，g_i 与 h_i 已知

$I_j=\{i\mid q(x_i)=j\}$

$$=\sum_{j=1}^{T}\left[\left(\sum_{i\in I_j}g_i\right)w_j+\frac{1}{2}\left(\sum_{i\in I_j}h_i+\lambda\right)\times w_j^2\right]+\gamma T \quad (\text{二次函数})$$

G_j　　H_j

当 $w_j=-\frac{G_j}{H_j+\lambda}$ 时，$Obj_{min}=-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T}\frac{G_j^2}{H_j+\lambda}+\gamma T$

注释

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

符号注释

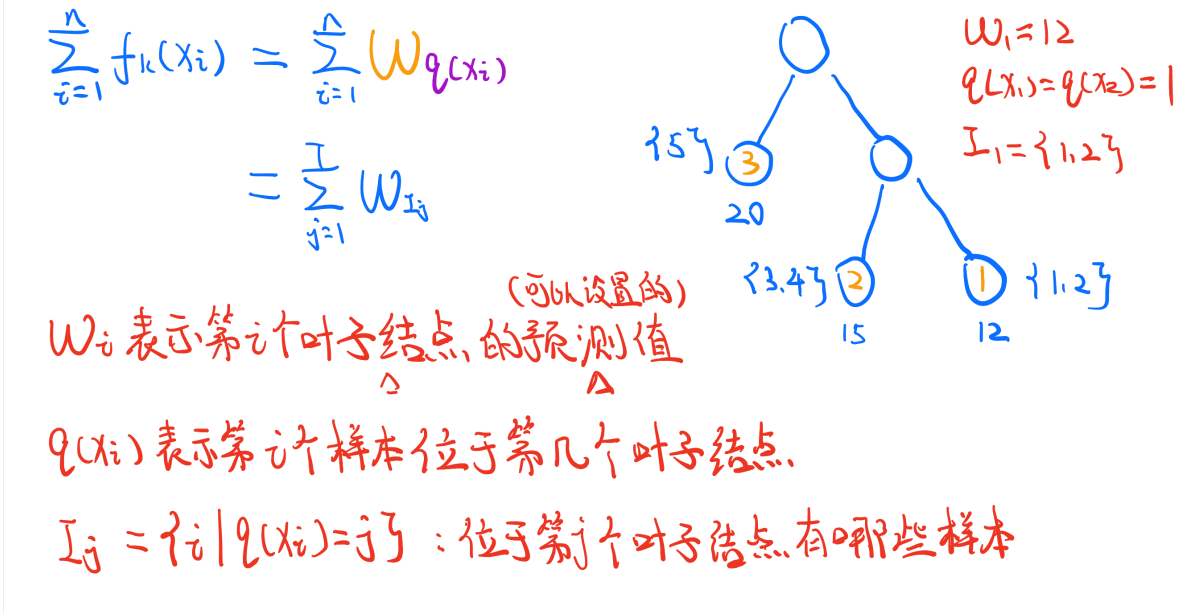
1、W_i 表示该树中，第i个叶子结点的值

2、$q(x_i)$ 表示第i个样本位于第几个叶子结点

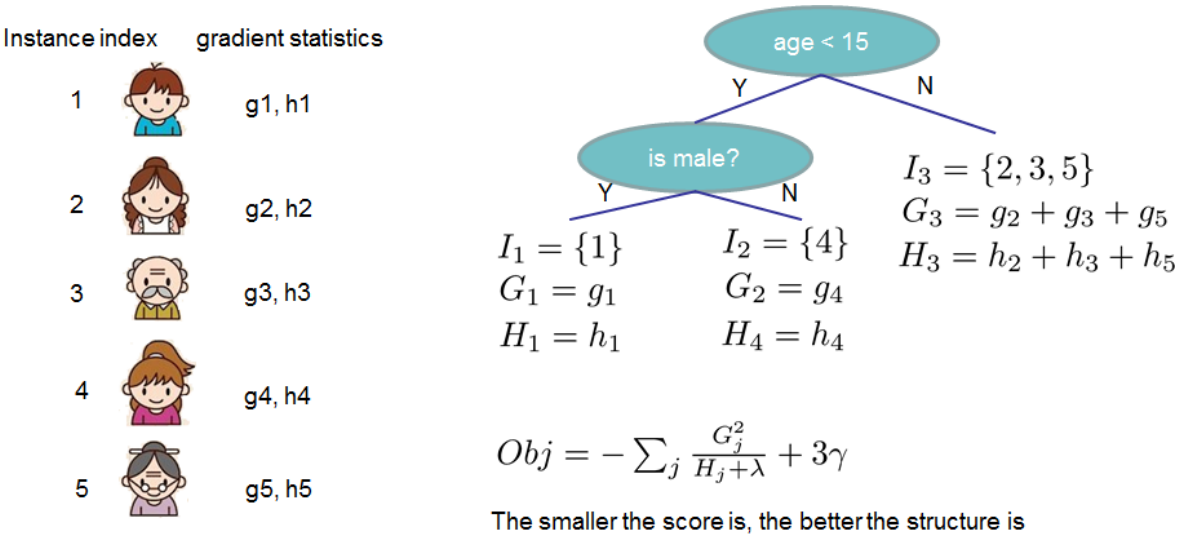
3、I_j 表示位于第j个叶子结点有哪些样本

4、G_j 表示所有属于第j个叶子结点的样本的g_i 总和，H_j 表示所有属于第j个叶子结点的样本的h_i 总和

4、T 表示叶子结点数量



例子：



结论

通过上面目标函数的化简，可以回答一开始提出的问题一了

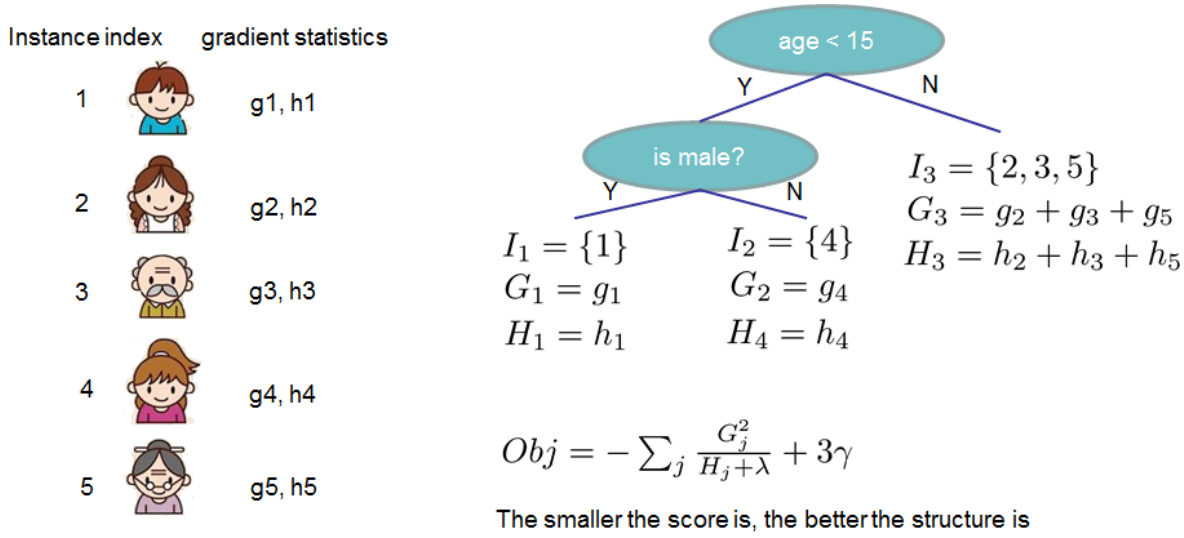
1、应该怎么设置叶子结点的值?

答：应该将叶子结点的值W_j设为$\frac{-G_j}{H_j+\lambda}$，此时该树的目标函数最小

2、目标函数化简后提高了什么信息?

答：叶子结点的值和目标函数的大小，与"前k-1个决策树"的**偏差**有关。且每个决策树在结构确定的前提下，目标函数最小为$-\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T}\frac{G_j}{H_j+\lambda}+\gamma T$，人话就是：先求每个叶子结点中的样本的偏差的一次导数和二次导数相除，再对所有叶子节点求和

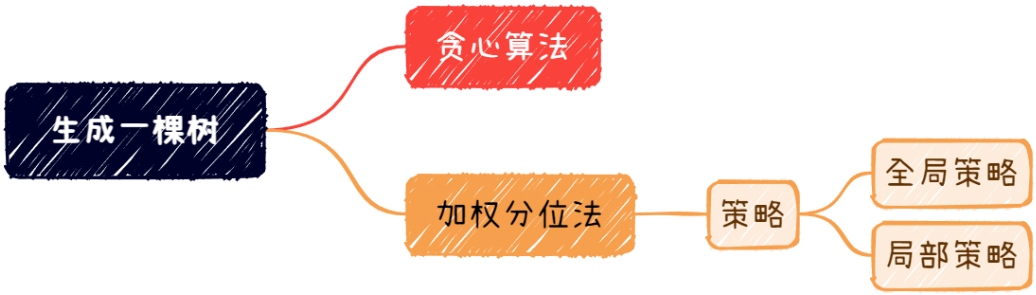
例子：还是这个例子，但是这里的Obj表示的不是目标函数最小的时候，所以应该改一下，在前面乘$\frac{1}{2}$（笔者这里没在图中修改）



生成一棵完整的树

到这里，我们已经知道，怎么样设置叶子节点的值，可以使得该树的目标函数最小了，之后我们就可以选择目标函数值最小的决策树，作为XGBoost的一个“弱学习器”。但在实际应用中有一个问题：我们无法做到遍历所有的树形结构，也就是说我们不能通过计算所有树形结构的目标函数值，而实现选出其中最小那个。因此下面要解决的问题是：怎样高效的产生一棵决策树呢？

主要内容



贪心算法

与传统的决策树生成方法类似，在XGBoost中，我们也可以利用贪心算法生成一棵树，着将大大的提高效率。

贪心算法，简单来说，就是保证每一步都是最优解，从而达到全局最优解的方法。放到决策树的生成中，就是：保证每一次结点的分裂产生的新的树，都是目标函数值最小的。

举例：如下图，假设现在有四个特征，我们要构造决策树的**第一层**。第一步：分别将每个特征都依次作为第一层结点；第二步：计算相应的目标函数值；第三步：比较哪个最小，选取最小的作为结果。

下图的例子中，因为选取特征D为第一层的决策树，目标函数最小，所以结果为**红色部分**。

那如何判断是否应该分裂这个节点呢?

与传统决策树的判断依据一样——增益。只有当将这个结点分裂后，形成的新的树的目标函数值比之前的小，才分裂。换句话说，就是分裂后的树一定要比分裂前的树，目标函数更小。计算方式如下图。

解释：如果当前结点A要分裂成B和C，**原先A结点**的目标函数值，**减去**B和C部分的目标函数值的和。如果大于0，则代表分裂有益，可以分裂。

$$\mathcal{L}_{split} = \frac{1}{2}\left[\frac{(\sum_{i\in I_L} g_i)^2}{\sum_{i\in I_L} h_i + \lambda} + \frac{(\sum_{i\in I_R} g_i)^2}{\sum_{i\in I_R} h_i + \lambda} - \frac{(\sum_{i\in I} g_i)^2}{\sum_{i\in I} h_i + \lambda}\right] - \gamma \tag{7}$$

注意：这里有一个**惩罚项**γ，表示有时候增益太小的话，相比于增加模型复杂度的副作用，不选择进行分裂

第二层、第三层、重复上述步骤，直到整个决策树所有特征都被使用，或者已经达到限定的层数。

算法描述如下

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

加权分位法

我们刚刚利用贪心算法解决了"如何高效的产生一棵决策树"的问题，但其实这个问题还没有完全解决。不知道你有没有注意到，在刚刚举的例子中，并没有给出每个特征具体的划分。例如，上个例子的图中，决策树D，并没有给出例如"D<5"这样的划分，仅仅只是说根据特征D来进行划分。

我们假设，特征D是一个离散的连续变量，有10个不同的值，范围是[1,10]。那么如果选择特征D时，需要尝试10中不同的划分，从D≤1到D≤9.这是一个非常繁琐的步骤，会导致算法的效率很低。那么XGBoost又是怎么解决这个问题的呢？有没有一种办法，可以不用尝试每一种的划分，只选取几个值进行尝试？为了解决这个问题，XGBoost中用了一个全新的方法：加权分位法

工作原理

为了得到值得进行尝试的划分点，我们需要一个函数对该特征的特征值进行"重要性"排序。根据排序的结果，再选出值得进行尝试的特征值。

数学原理

我们来看一下，我们化简得到的目标函数（如下）

$$\tilde{\mathcal{L}}^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} [g_i f_t(\mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(\mathbf{x}_i)] + \Omega(f_t)$$

对目标函数进行数学变换，结果如下。可以发现，目标函数是一个：真实值为 $\frac{g_i}{h_i}$ ，权重为h_i的平方损失。因此，我们可以得出结论：一个样本对于目标函数值的贡献，在于其得到的h_i。

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} h_i (f_t(\mathbf{x}_i) - g_i/h_i)^2 + \Omega(f_t) + constant,$$

这样我们可以根据h_i对特征值的"重要性"进行排序。到这，XGBoost提出了一个新的函数，这个函数用于表示一个特征值的"重要性"排名，如下图

$$r_k(z) = \frac{1}{\sum_{(x,h)\in\mathcal{D}_k} h} \sum_{(x,h)\in\mathcal{D}_k, x<z} h,$$

我们来解释一下这个函数：

1、D_k 解释如下：第k个特征的每个样本的特征值（x_{nk}）与其相应的h_i组成的集合。(x_{1k}, h_1) 表示第一个样本对于第k个特征的特征值，和其对应的h_i

$$D_k = \{(x_{1k}, h_1), (x_{2k}, h_2) \dots (x_{nk}, h_n)\}$$

2、$r_k(z)$ 的**分母**表示为：第k个特征的所有样本的h_i 总和；**分子**：所有特征值小于z的样本的h_i 总和

3、注意，这里是$x < z$

之后对一个特征的所有特征值进行排序。在排序之后，设置一个值ϵ 。这个值用于对要划分的点进行规范，满足要求如下：对于特征k的特征值的划分点$\{s_{k1}, s_{k2} \dots s_{kl}\}$ 有，两个相连划分点的r_k 值的差的绝对值要小于ϵ 。同时，为了增大算法的效率，也可以选择每个切分点包含的特征值数量尽可能多。人话就是，根据特征值的r_k 进行排序后，大约要选出$1/\epsilon$ 个的点作为切分点。

$$|r_k(s_{k,j}) - r_k(s_{k,j+1})| < \epsilon$$

例子：

假设对一个特征有：特征值1到4，其h_i ，r_k 如下，$\epsilon = 0.5$ 。如果我们的策略是切分点尽可能少，那么我们得到的切分点应该是{2，3}：x<2，x<3。因为：$r_k(2) = 0.4 < 0.5$ 但 $r_k(3) = 0.7 > 0.5$;之后，$|r_k(2) - r_k(3)| = 0.3 < 0.5$ 但$|r_k(2) - r_k(4)| = 0.5$ 。所以切分点是：{2，3}。

特征值	h_i	r_k
1	4	$r_k(1) = 0$
2	3	$r_k(2) = 0.4$
3	2	$r_k(3) = 0.7$
4	1	$r_k(4) = 0.9$

作用

在我们得到了使用加权分位法的分裂点之后，在贪心算法的分裂过程中，我们就只需要对这几个分裂点进行尝试，而不需要与原先一样，对所有的特征值进行尝试。这大大减少了算法的开销。

算法描述

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.

策略

基于加权分位法，我们有两种策略进行分裂点的计算：1、全局策略；2、局部策略

全局策略

顾名思义，全局策略，我们在一棵树的生成之前，就已经计算好每个特征的分裂点。并且在整个树的生成过程当中，用的都是一开始计算的分裂点。这也就代表了，使用全局策略的开销更低，但如果分裂点不够多的话，准确率是不够高的

局部策略

局部策略，对每一个结点所包含的样本，重新计算其所有特征的分裂点。我们知道，在一棵树的分裂的时候，样本会逐渐被划分到不同的结点中，也就是说，每个结点所包含的样本，以及这些样本有的特征值是不一样的。因此，我们可以对每个结点重新计算分裂点，以保证准确性，相当于是因地制宜的方法。这也就代表了，使用局部策略的开销更大，但分裂点数目不用太多，也能够达到一定的准确率。

两种策略相比

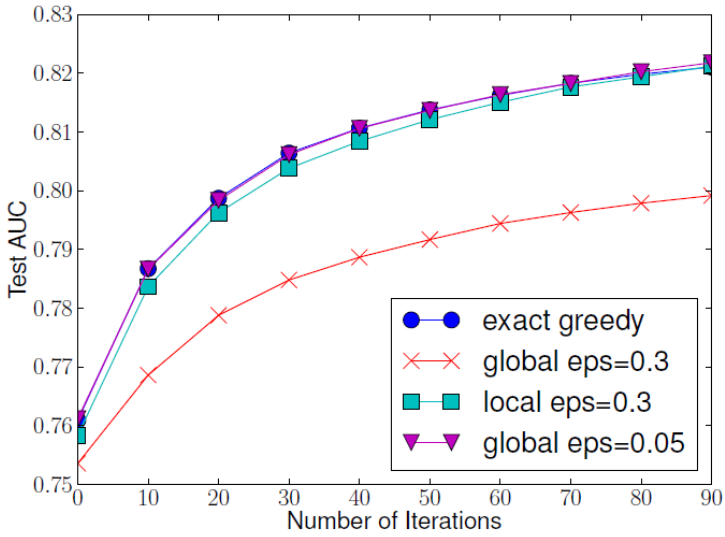


Figure 3: Comparison of test AUC convergence on Higgs 10M dataset. The eps parameter corresponds to the accuracy of the approximate sketch. This roughly translates to 1 / eps buckets in the proposal. We find that local proposals require fewer buckets, because it refine split candidates.

根据上图，我们可以得出结论：

1、在分裂点数目相同，即eps（ϵ）相同的时候，全局策略的效果 < 局部策略

2、分裂点数目越多，两个策略的效果都越好

3、全局策略可以通过增加分裂点数目，达到逼近局部策略的效果

总结

至此，我们已经知道了一棵完整的树是怎么生成的了。

步骤

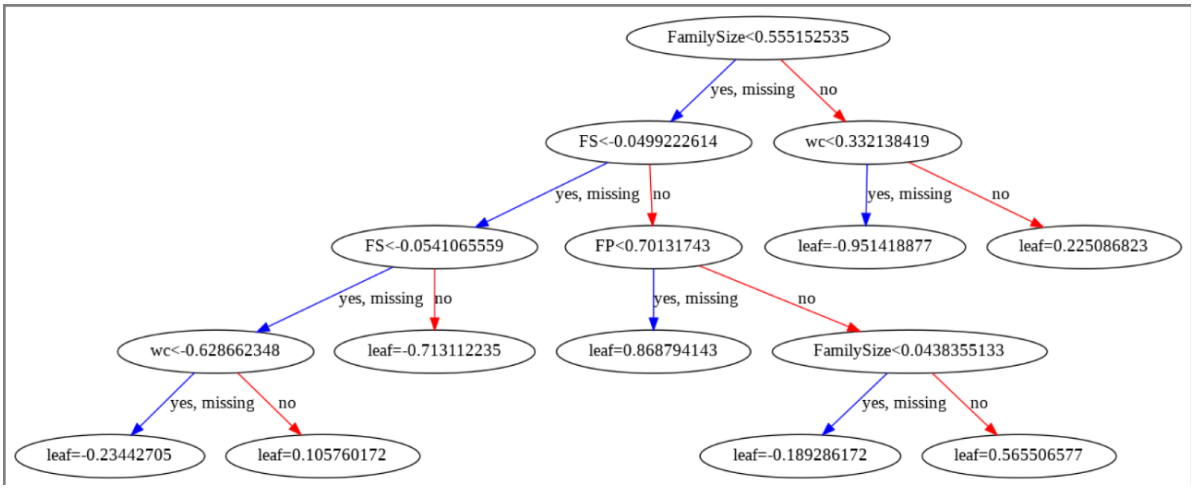
1、基于贪心算法进行划分，通过计算目标函数增益，选择该结点使用哪个特征

2、为了提高算法效率，使用“加权分位法”，计算分裂点。只考虑计算分裂点的目标函数值，而不是考虑所有特征值

3、可以选择“全局策略”还是“局部策略”计算分裂点

例子

下图是笔者在kaggle Titanic比赛时候训练的XGBoost的其中一棵决策树。其中，笔者选择的是全局策略进行计算。在下图中可以看到一个值得注意的地方：并不是一个特征在使用了一次后就不会再使用了，而是一个分裂点被使用后，这个分裂点包含的所有情况就不会再被使用了。例如，图中的FS特征，在第二层和第三层都有被使用



缺失值处理

从上面的例子，我们可以看到有一条蓝色的线，上面写着“yes,missing”，这表示只要是缺失值就跟着蓝色线走。这是XGBoost对缺失值的处理方法。那这个蓝色的线又是如何生成的呢？生成的算法如下图

Algorithm 3: Sparsity-aware Split Finding

Input: I, instance set of current node
Input: $I_k = \{i \in I | x_{ik} \neq \text{missing}\}$
Input: d, feature dimension
Also applies to the approximate setting, only collect statistics of non-missing entries into buckets
$gain \leftarrow 0$
$G \leftarrow \sum_{i \in I}, g_i, H \leftarrow \sum_{i \in I} h_i$
for $k = 1$ ***to*** m **do**
  // enumerate missing value goto right
  $G_L \leftarrow 0,\ H_L \leftarrow 0$
  for j *in sorted*$(I_k,$ *ascent order 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
  // enumerate missing value goto left
  $G_R \leftarrow 0,\ H_R \leftarrow 0$
  for j *in sorted*$(I_k,$ *descent order by* $\mathbf{x}_{jk})$ **do**
    $G_R \leftarrow G_R + g_j,\ H_R \leftarrow H_R + h_j$
    $G_L \leftarrow G - G_R,\ H_L \leftarrow H - H_R$
    $score \leftarrow \max(score, \frac{G_L^2}{H_L+\lambda} + \frac{G_R^2}{H_R+\lambda} - \frac{G^2}{H+\lambda})$
  end
end
Output: Split and default directions with max gain

这个算法实际上做的是一件非常简单的事情。对于第k个特征，我们首先将样本中第k个特征的特征值为缺失值的样本全部剔除。然后我们正常进行样本划分。最后，我们做两个假设，一个是缺失值全部摆左子结点，一个是摆右子节点。哪一个得到的增益大，就代表这个特征最好的划分。总结一下，就是缺失值都摆一起，选最好的情况

注意：对于加权分位法中对于特征值的排序，缺失值不参与。也就是说缺失值不会作为分裂点。gblinear将缺失值视为0。

shrinkage（收缩率）

shrinkage（收缩率）是一个对于"弱学习器"的权重值。shrinkage的目的是防止过拟合，具体公式如下。解释一下，就是对每个"弱学习器"的预测值乘η，来缩小预测值（$0 < \eta <= 1$），达到防止过拟合的效果。

$$\hat{y}_i^t = \hat{y}_i^{(t-1)} + \eta f_t(x_i)$$

超参数/参数

超参数的训练是模型训练中至关重要的一环。对于一个不变的数据集，超参数的设置决定了模型的效果。下面就来总结一下XGBoost中的超参数以及每个超参数的影响。

注意：下列表格中列出的超参数/参数的名称，会因为调用的包不同而有不一样的名称。表格的超参数以python中的XGBoost为准（网页链接）

超参数	取值	影响
objective	常用：reg:logistic，binary:logistic，binary:logitraw，multi:softmax	根据你的目标进行选择，得到不同的结果，以及损失函数会不一样
n_estimators（sklearn-API），num_round	$(0, \infty]$	"弱学习器"的数量
base_score	default=0.5	所有实例的初始预测分数，如果"弱学习器"足够多，不会有影响
eval_metric	rmse，rmsle，mae，mape，mphe，logloss，error，error@t，merror，mlogloss，auc，aucpr…	验证数据的评估指标
eta（learning_rate）	[0,1]	shrinkage中的η，对每个学习器的权重；越小，越减少过拟合

超参数	取值	影响
gamma	$[0, \infty]$	当一个结点的分裂，目标函数的增益大于“gamma”才进行分裂；是一个模型复杂度惩罚项，越大，越不分裂
max_depth	$[0, \infty]$	树的最大深度，0表示没有限制
min_child_weight	$[0, \infty]$	结点样本的h_i（偏差的二次导数）的和的最小值，也就是说如果结点的h_i 小于设定的值，就不分裂了。在线性回归中，可以理解为结点的样本数。越大，越不分裂
max_delta_step	$[0, \infty]$	允许每个叶子输出的最大增量步长，适用于样本极度不平衡的时候。通常为0，表示不受限制。并且这个超参数通常不用。但当类极度不平衡时，它可能有助于逻辑回归。将其设置为 1-10 的值可能有助于控制模型。
subsample	$(0, 1]$	选择多少百分比的样本进行训练，每次训练一棵新的树，都会进行重新采样。用于防止过拟合；原理：基于部分数据产生的一棵新的树，都会作用在整个数据集上进行预测，这样可以得到所有样本的偏差，然后下一棵树在重新抽样
sampling_method	uniform，gradient_based	uniform：每个训练实例被选中的概率相等。通常设置 `subsample` >= 0.5 以获得良好的结果；gradient_based：*每个训练实例的选择概率与梯度的正则化绝对值*成正比 。这时可以subsample可以设置低到0.1也不会影响模型精度。只有当"tree_method"为”gpu_hist"才可以用这个方法，其他都只能用“uniform”
colsample_bytree colsample_bylevel colsample_bynode	$(0, 1]$，default=1	对特征进行采样的方法。分步骤进行：1、colsample_bytree：采样一棵树能运用的特征；2、colsample_bylevel：对colsample_bytree后的结果，再次进行抽样，得到对一棵树某一层的结点能用的特征；3、colsample_bynode：基于colsample_bylevel的结果，进行抽样，得到这一层的这一个结点能用的特征。 所以，如果{'colsample_bytree':0.5, 'colsample_bylevel':0.5, 'colsample_bynode':0.5}，总共有64个特征，表示：1、每棵树只能用0.5的特征数，等于32；2、在0.5的特征数基础上，再取0.5的特征作为这一层的可选特征，等于16；3、在某一层可选特征中，再选0.5作为这个结点的可选特征，等于8。
lambda	$[0, \infty]$，default=1	权重（叶子结点的预测值）的L2正则化参数；可以理解为：越大，目标函数越大

超参数	取值	影响
alpha	$[0,\infty]$, default=0	权重（叶子结点的预测值）的L1正则化参数；可以理解为：越大，目标函数越大
sketch_eps	$(0,1]$, default=0.3	仅用于“updater=grow_local_histmaker”。用于精确控制分箱的数量（类似于ϵ）
scale_pos_weight	$(0,\infty]$, default=1	控制正负样本不平衡的情况，一般考虑值为"sum(negative instances) / sum(positive instances)"
max_leaves	$[0,\infty]$, default=0	最大叶子结点的数量，“tree_method=exact"不可用
max_bin	$[0,\infty]$, default=256	最大分箱数（其实就是分裂点的数目），“tree_method=hist,approx,gpu_hist"时可用
num_parallel_tree	$[0,\infty]$, default=1	每次迭代并行生成多少棵树，仅支持”boosted random forest“

参数	取值	影响
booster	gbtree,gblinear,dart	XGBoost中的“弱学习器”的模型类型：树还是线性
verbosity	0，1，2，3	训练的时候要显示什么信息，数字越大，显示信息越详细
nthread	int	选择线程数
disable_default_eval_metric	0，1	是否禁用默认的指标，0为false，1为True
tree_method	auto，exact，approx，hist，gpu_hist，	exact：精确贪心算法 approx：使用分位数草图和梯度直方图的近似贪心算法（就是加权分类法），是全局策略的 hist：更快的直方图优化近似贪心算法，使用的是用户提高的权重，而不是h_i，全局策略 gpu_hist：基于GPU实现hist auto：根据数据集大小，自动选择方法；小数据集，使用exact；较大数据集，使用approx；大数据集，使用hist或者gpu_hist

参数	取值	影响
updater	grow_local_histmaker，prune，refresh，sync	要使用这个参数，得设置参数“process——type”:{"process_type": "update", "updater": "[grow_local_histmaker，prune，refresh，sync]"} grow_local_histmaker：近似算法，局部策略（很少使用）
refresh_leaf	0,1	当“updater=refresh”可用，refresh_leaf=1，更新树叶和树结点的统计信息；refresh_leaf=0，仅更新结点的统计信息
process_type	default,update	default表示用正常的去生成树，update表示用"updater"中的参数方法
grow_policy	depthwise（default），lossguide	当“tree_method=[hist,approx,gpu_hist]”时可用。 depthwise：倾向于在离根结点近的地方进行分裂（深度优先，保证平衡） lossguide：倾向于在目标函数变化最大的结点处分裂（可能会使树不平衡）
predictor	auto,cpu_predictor,gpu_predictor	auto：自动选择。如果”tree_method=gpu_hist“，提供基于GPU的预测，而无需复制所有数据到GPU内存 cpu_predictor：多核cpu预测 gpu_predictor：当”tree_method=gpu_hist“时可用。将所有数据复制到GPU中进行预测
monotone_constraints		变量单调性的约束，有关详细信息，请参阅单调约束。
interaction_constraints		表示允许交互的交互约束。约束必须以嵌套列表的形式指定，例如，其中每个内部列表是一组允许相互交互的特征索引。[[0, 1], [2, 3, 4]]`，有关详细信息，请参阅特征交互约束。
enable_categorical	True or False	输入的变量是否是分类变量。如果已经做了one-hot就不用设置为True了
max_cat_to_onehot	int	设置阈值，小于阈值的分类变量的值会做ont-hot。反之，不做，该数值会被划分到子节点
seed	random	随机数种子

Tree_mehtod & updater

Exact	Approx	Hist	GPU Hist	
grow_policy	Depthwise	depthwise/lossguide	depthwise/lossguide	depthwise/lossguide
max_leaves	F	T	T	T
sampling method	uniform	uniform	uniform	gradient_based/uniform
categorical data	F	T	T	T
External memory	F	T	T	P（部分支持）
Distributed(分布式)	F	T	T	T

References

[1] Tianqi Chen,Carlos Guestrin. XGBoost: A Scalable Tree Boosting System.