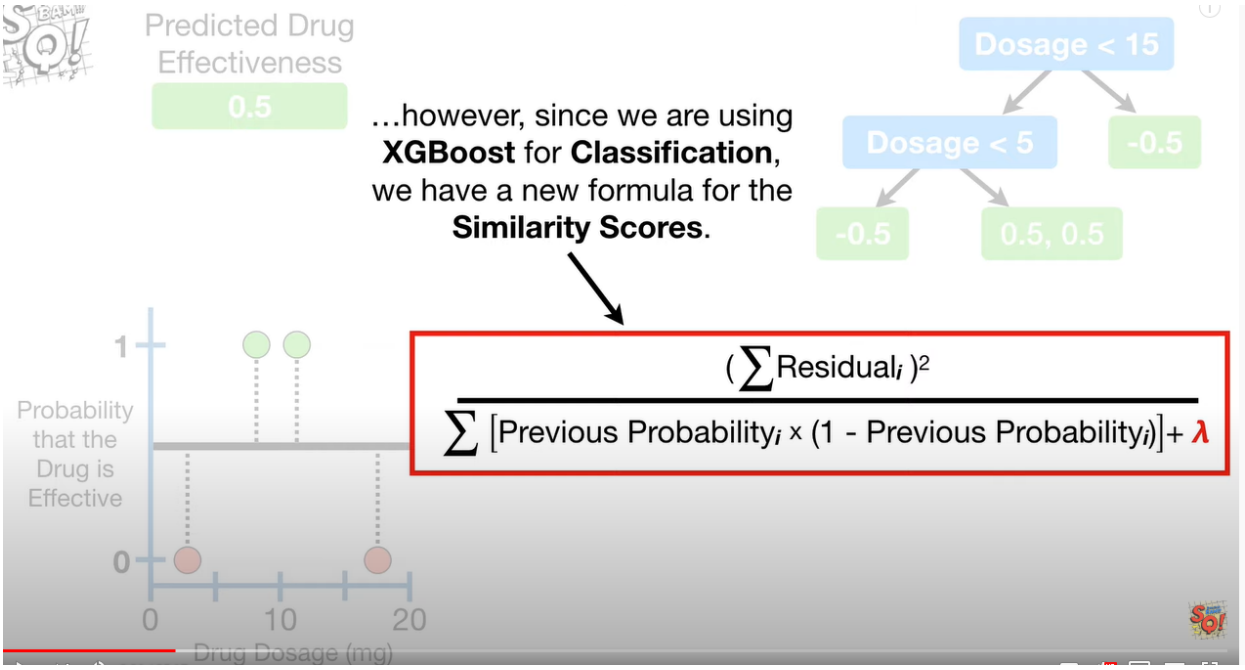
和解决Regression问题一样，要下给出一个预估的值，本例子中假设是0.5（4个样本中2个为正例，即effective）。可以代表概率。比如在视频中，0.5代表有50%的概率药物是有效的。

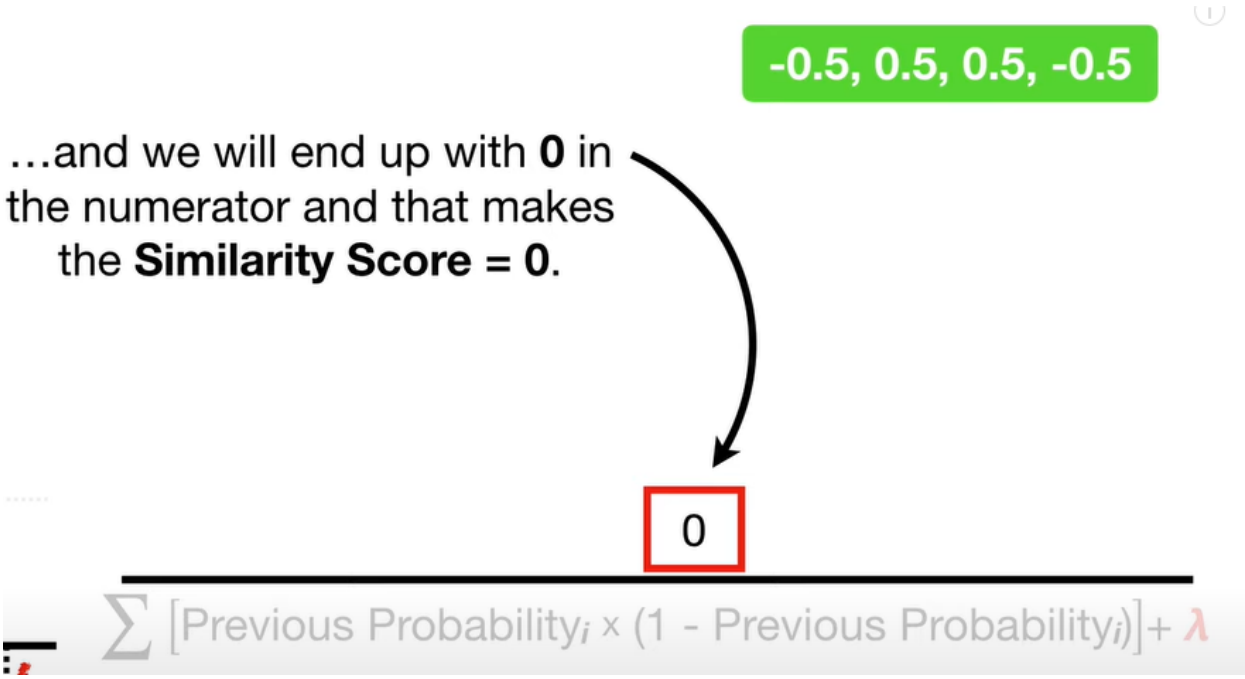
计算similarity的公式跟regression中的不同：



正类样本的概率是1，负类样本的概率是0。

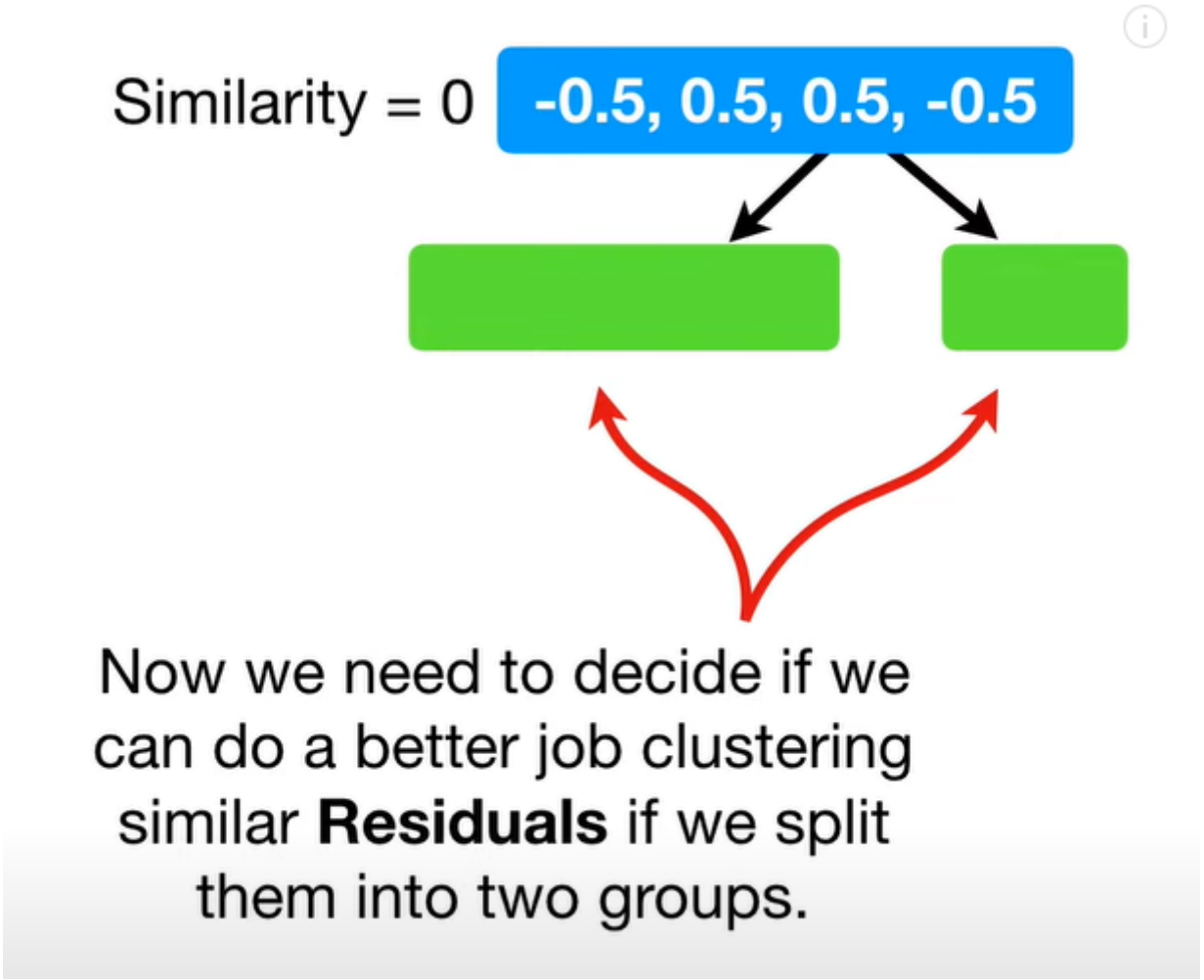
如何构建树：

还是从单个节点开始

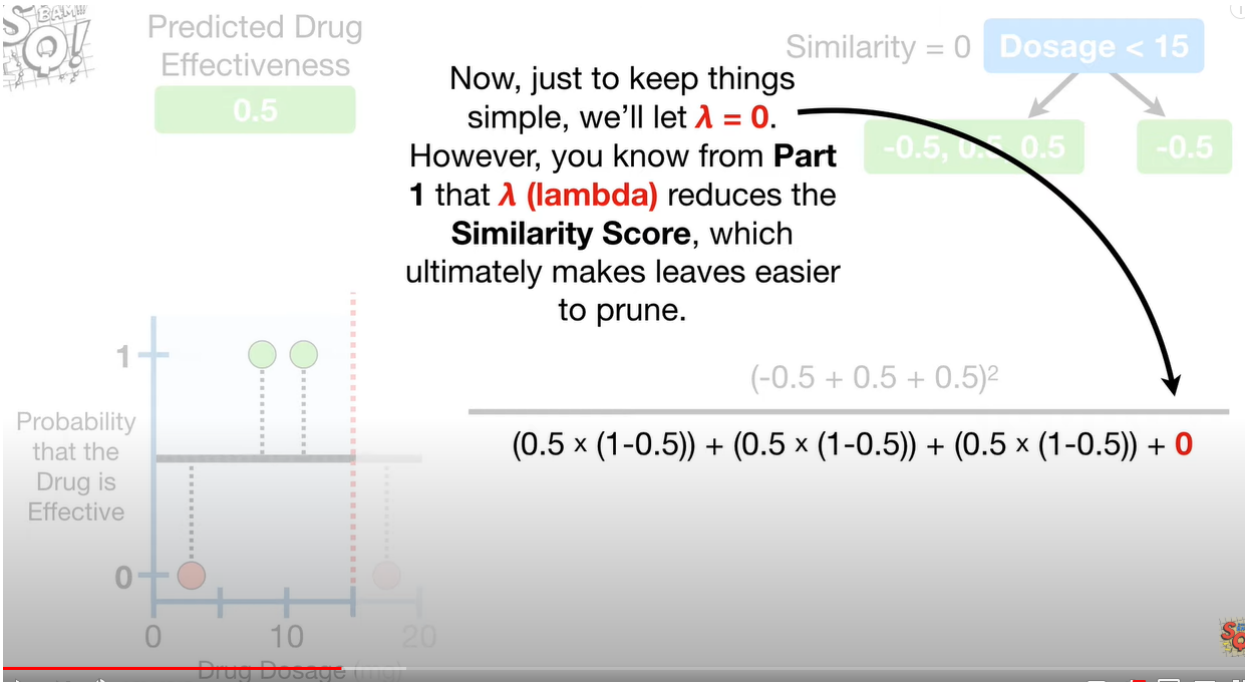


有趣的是，在这个例子中，residuals刚好相互抵消，因此分母不用计算了，最初的similarity是0。

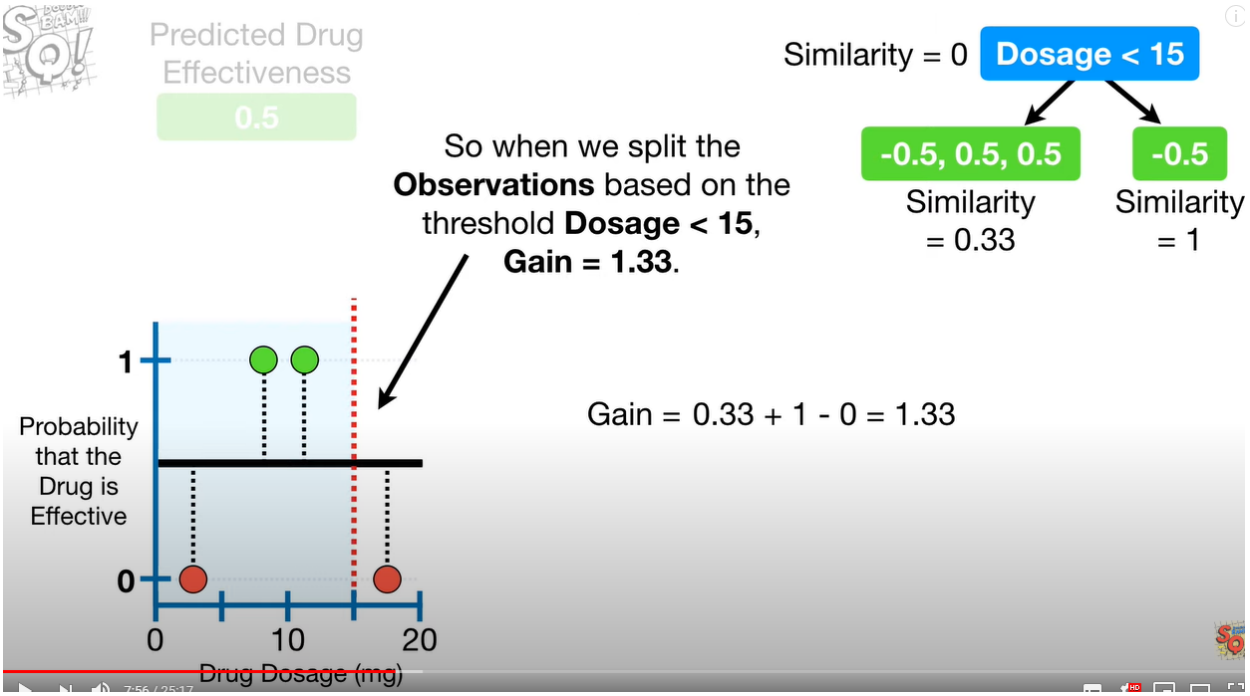
接着又是对residuals进行聚类



尝试用dosage<15（即最后两个样本的均值）作为threshold



previous probability都是0.5，即最初的预测。

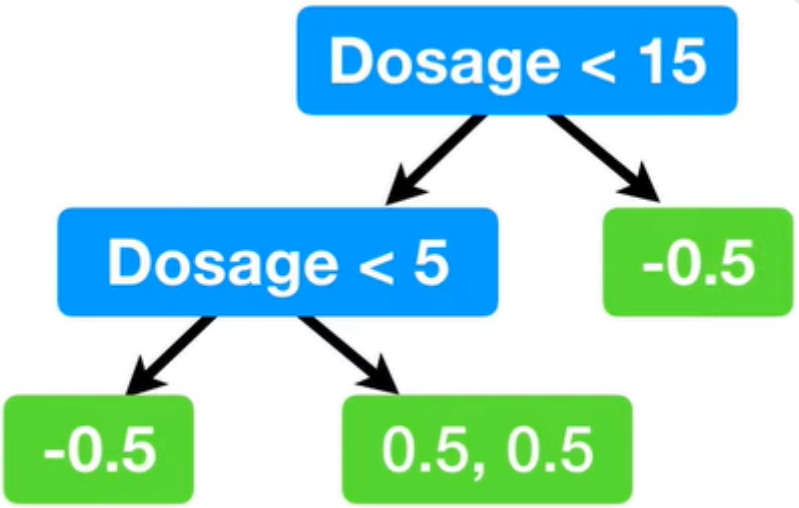


$$\text{Gain} = \text{Left}_{\text{Similarity}} + \text{Right}_{\text{Similarity}} - \text{Root}_{\text{Similarity}}$$

用相同方法计算右子节点的similarity后，得到dosage<15作为threshold的Gain值。（假设dosage<15的Gain值就是最大的，因此用dosage<15作为root节点的分裂条件）

继续对左子节点进行分裂

尝试使用dosage<5和dosage<10作为分裂判断条件，dosage<5的Gain较大，因此使用其作为分裂条件

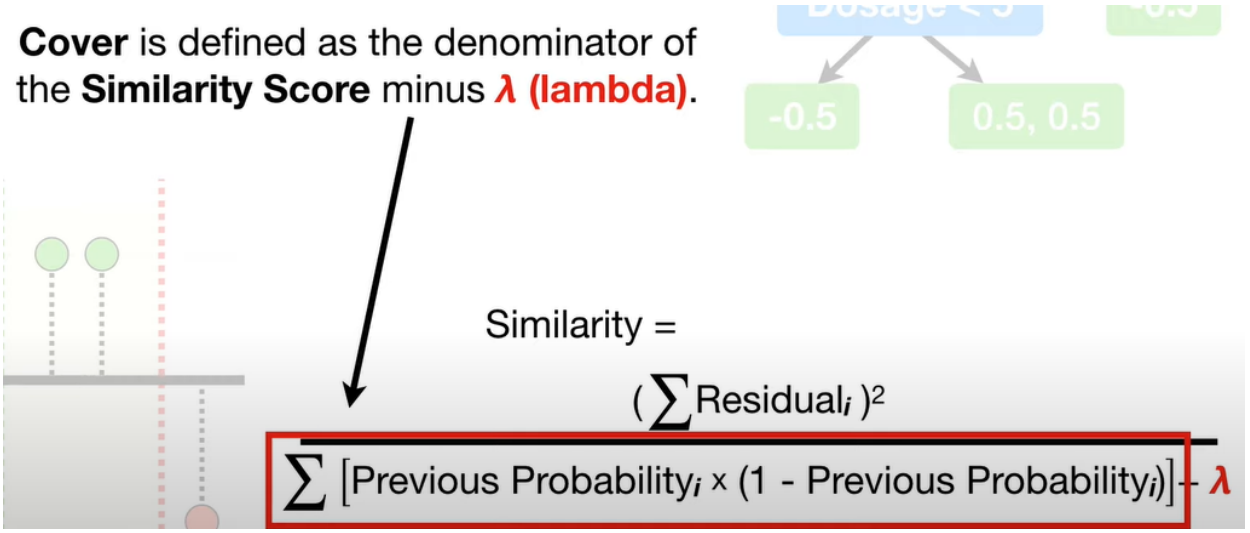


这个例子中限制XGB的树最大深度为2，就不继续分裂了。

除此之外，还可以对每个叶节点的residuals的最少数量进行限制，称为Cover。

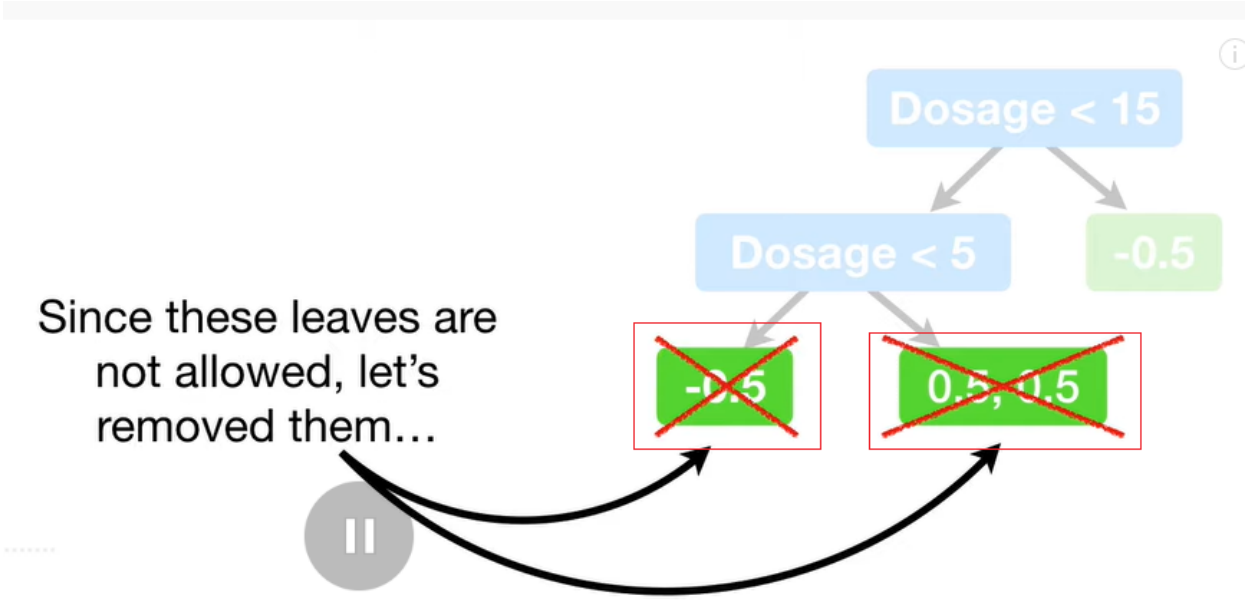
The minimum number of **Residuals** in each leaf is determined by calculating something called **Cover**.

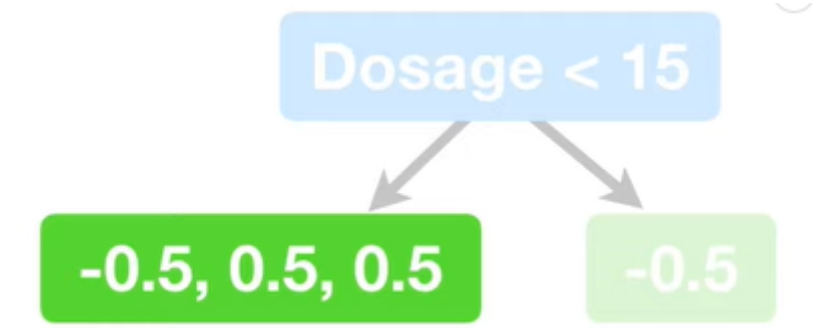
Cover的计算公式：



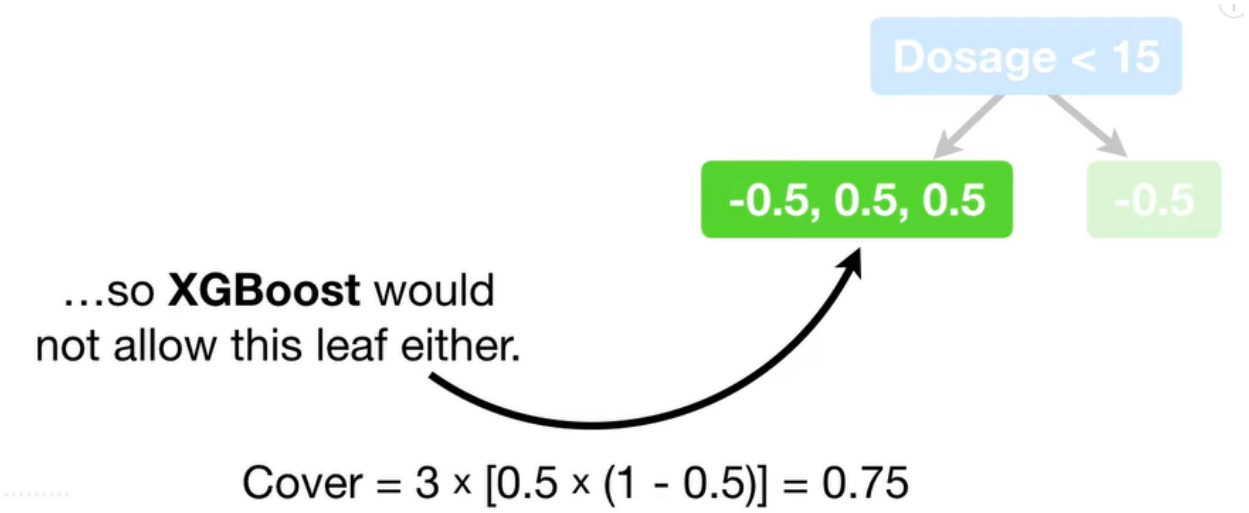
即classification问题中，similarity分母部分的前半部分，即红框中部分（求和是该叶节点的所有residuals，即分配到该叶节点的所有样本）

注意，无论在regression还是classificaiton中，cover的最小值都为1。
然而，在下面这个树中，通过计算可以得知，红框中的叶节点的Cover值都小于1，因此这两个节点是不允许出现的。两个叶节点合并回到原来的父节点。



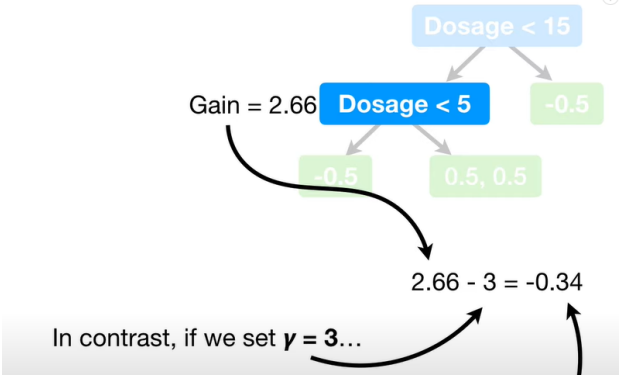


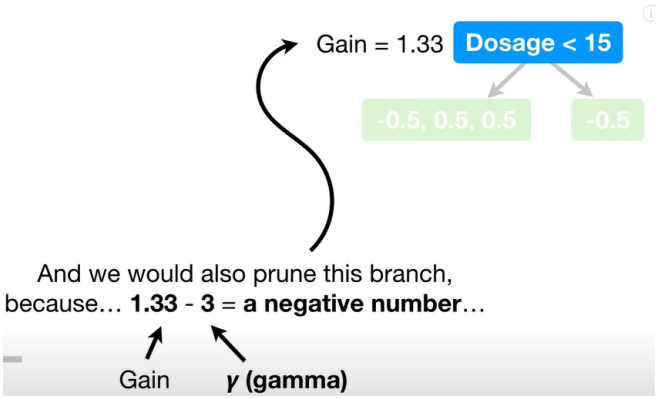
但是，(-0.5, 0.5, 0.5)的节点的Cover值仍然小于1，又被剪掉。同样的，右子节点也被剪掉。



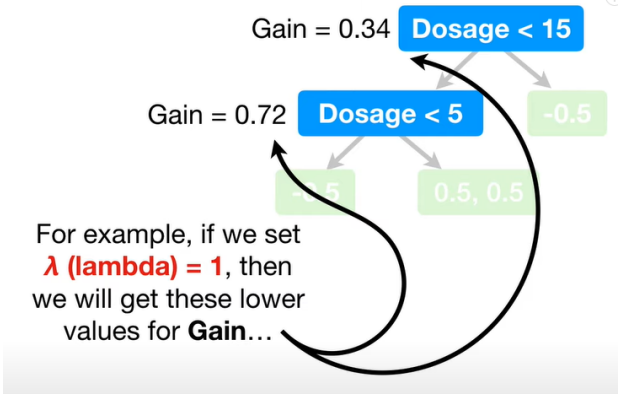
这样就只剩下根节点。
但是XGB中规定树不能只有一个根节点。因此，我们可以设定Cover的最小值为0（即所有节点的Cover值必须大于0）。
这样就可以继续讨论剪枝的问题。

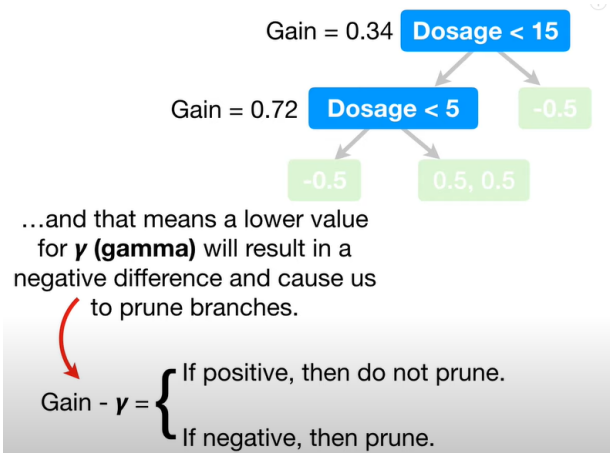
如何进行剪枝?
通过similarity计算Gain，再计算Gain-γ，如果结果为正，则不需要剪枝，反之剪枝。
如果现在假设γ=3，则整个树都被剪掉，就剩下原来的预测0.5.

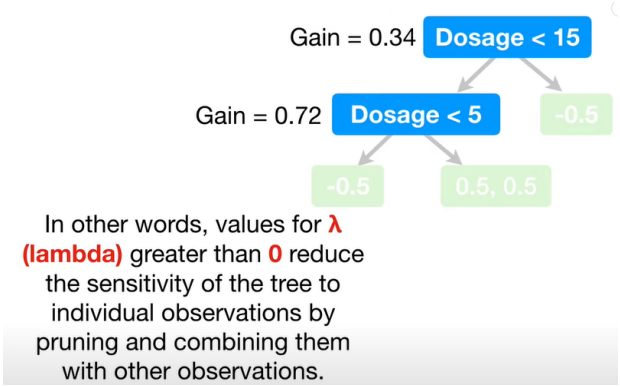




注意之前假设的是λ=0.现在可以假设λ=1.λ越大，similarity越小，则Gain也越小。

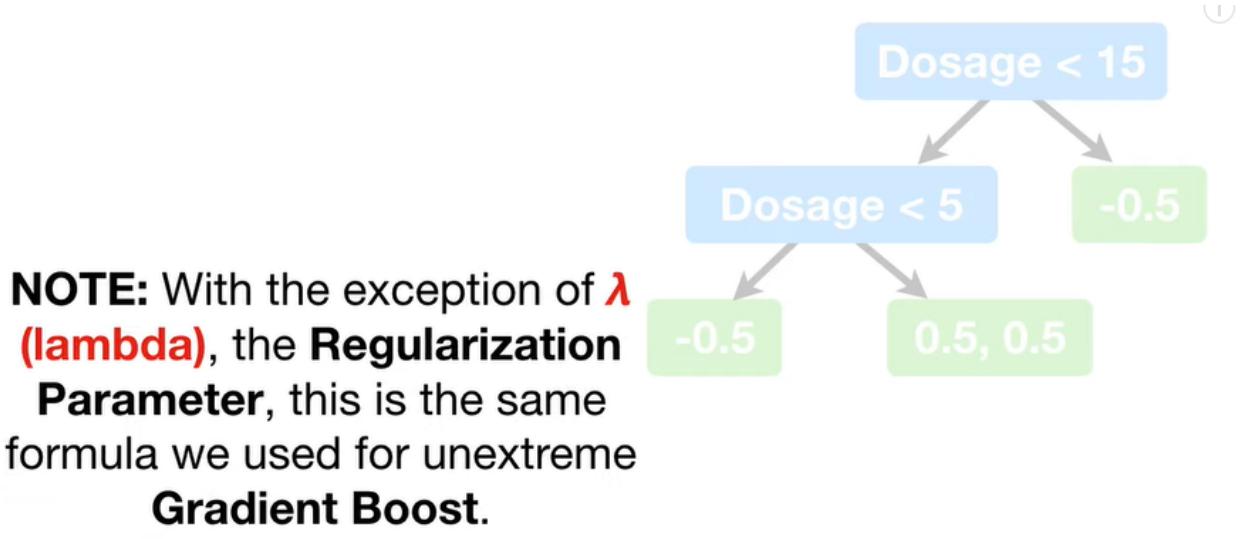






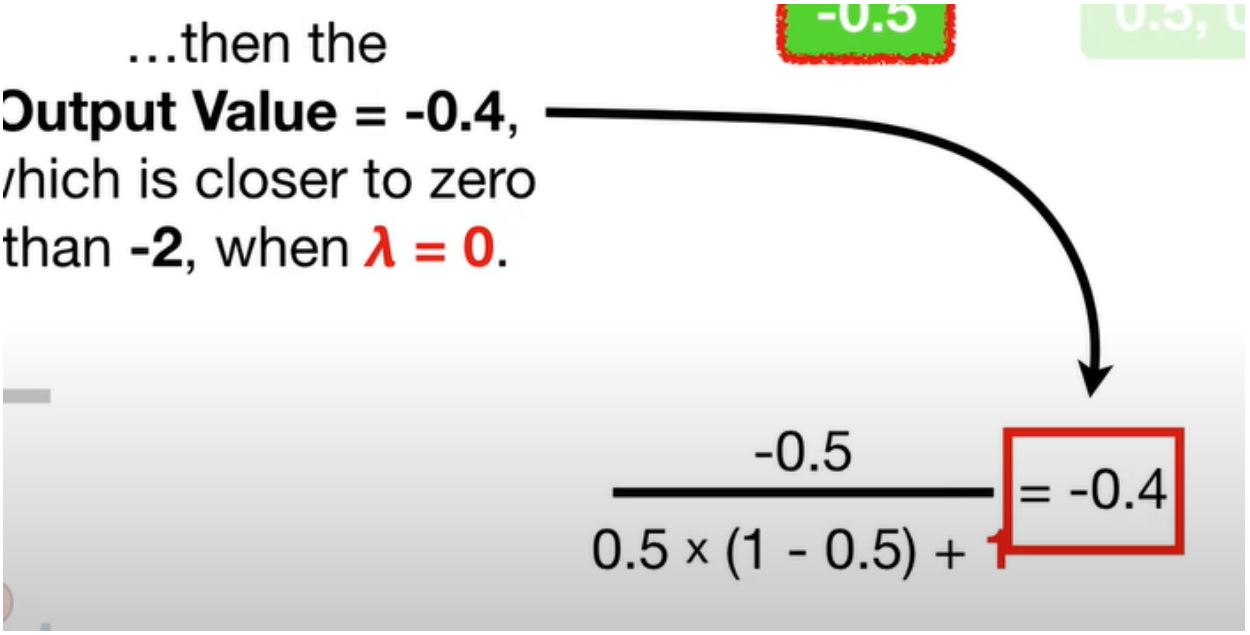
计算每个节点的输出值

计算公式跟Gradient Boost的大体相同，分母部分多加正则化项λ



$$\frac{\left(\sum \text{Residual}_i\right)}{\sum\left[\text{Previous Probability}_i \times (1 - \text{Previous Probability}_i)\right] + \lambda}$$

当λ=1时，输出值为-0.4，当λ=0时，输出值为-2.

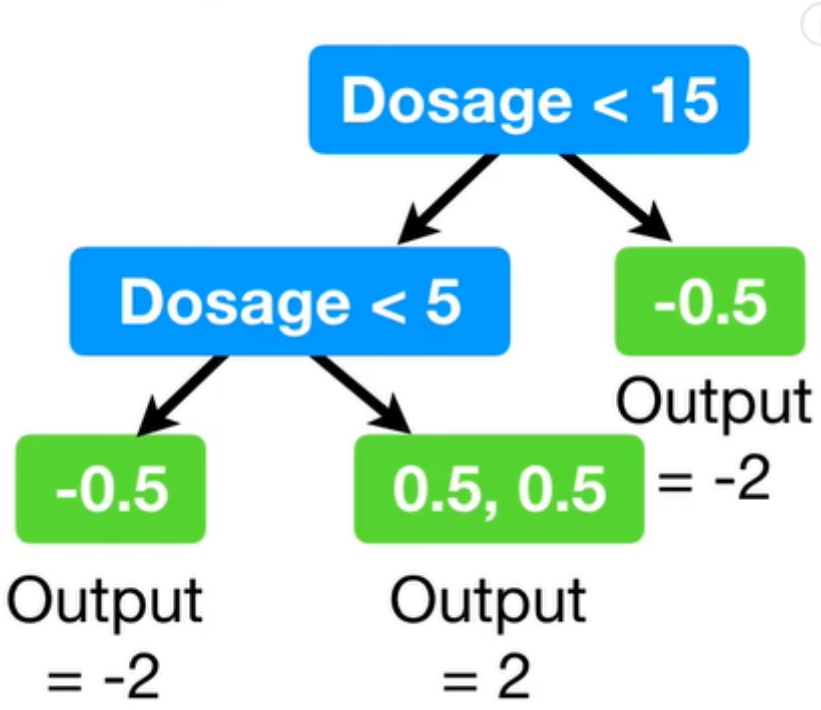


当λ越大时，节点的输出值会越小。当做预测时，节点的输出值变小，预测值也会变小，从而达到解决过拟合的问题。

In other words, when $\lambda > 0$, then it reduces the amount that this single observation adds to the new prediction.

Thus, **λ (lambda)**, the **Regularization Parameter**, reduces the prediction's sensitivity to isolated observations.

最后计算出第一棵树的所有叶节点的输出值

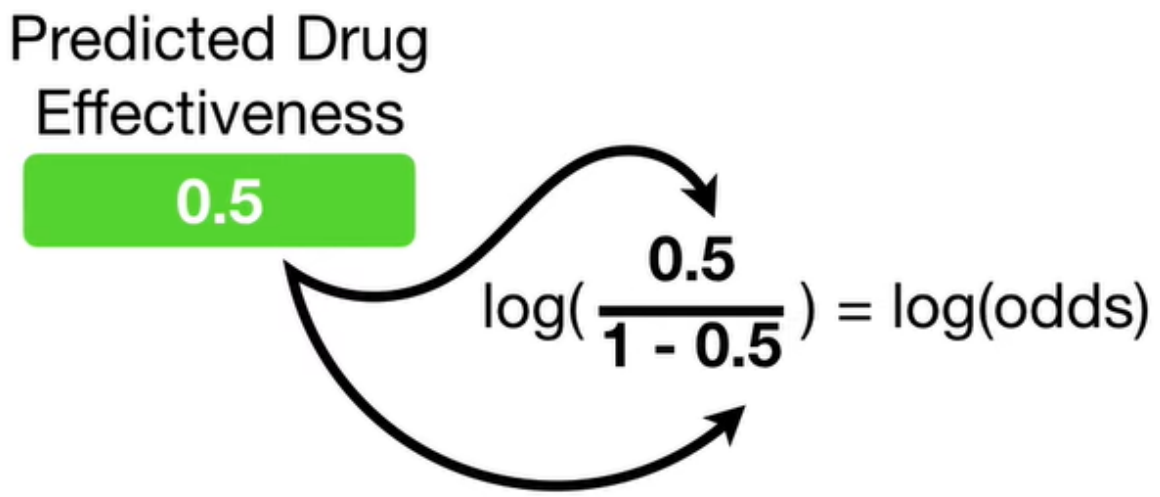


如何做预测（更新）

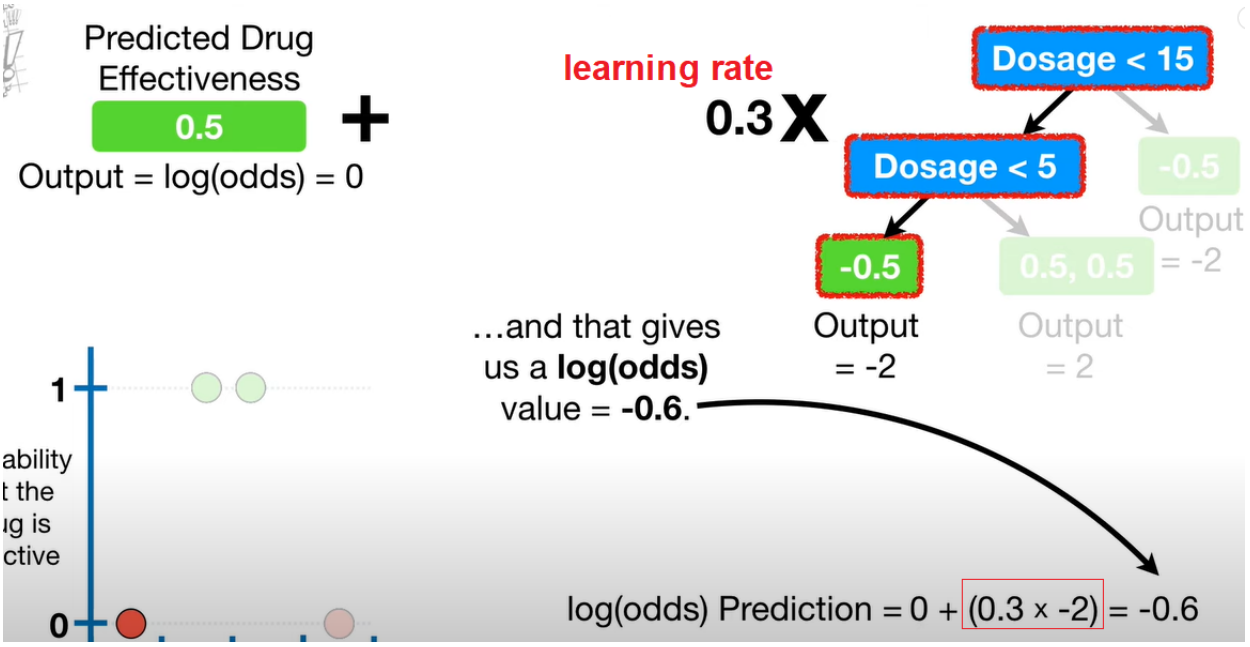
和其他boosting方法一样，probability要转换为log(odd)

$$\frac{p}{1-p} = \text{odds}$$

$$\log\left(\frac{p}{1-p}\right) = \log(\text{odds})$$



$$0 = \log(odds)$$



将log(odds)转回成probability

To convert a **log(odds)** value into a probability, we plug it into the **Logistic Function**.

$$\text{Probability} = \frac{e^{\log(\text{odds})}}{1 + e^{\log(\text{odds})}}$$

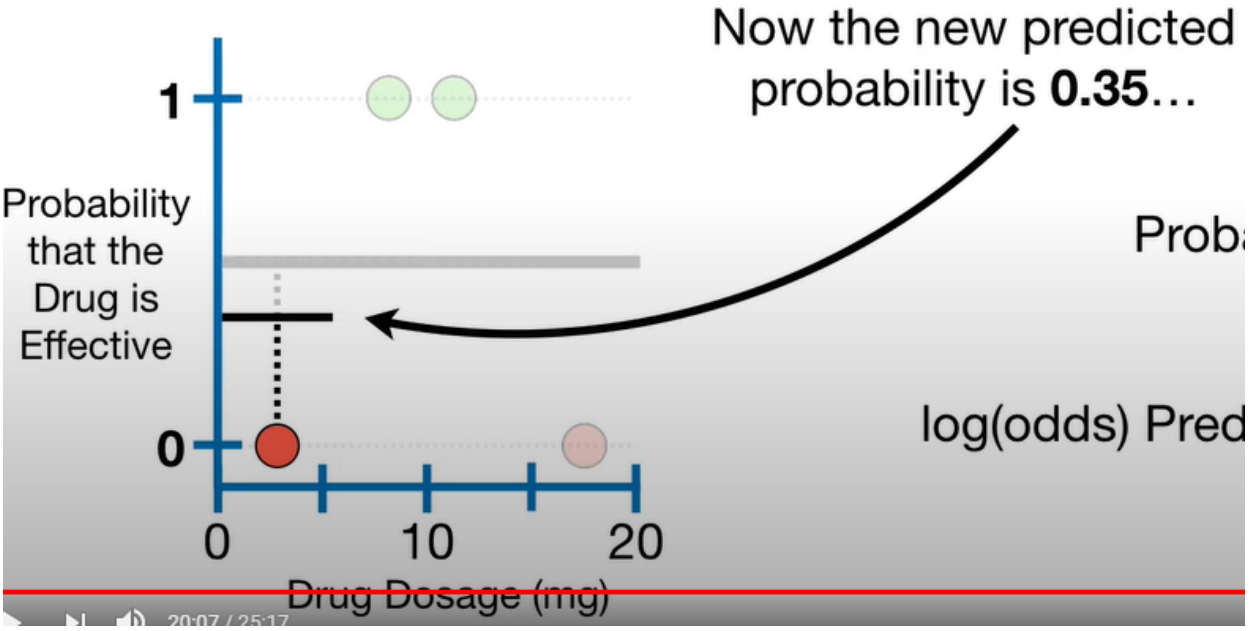
log(odds) Prediction = 0 + (0.3 × -2) = -0.6

…and the the new predicted probability is **0.35**.

$$\text{Probability} = \frac{e^{-0.6}}{1 + e^{-0.6}} \boxed{= 0.35}$$

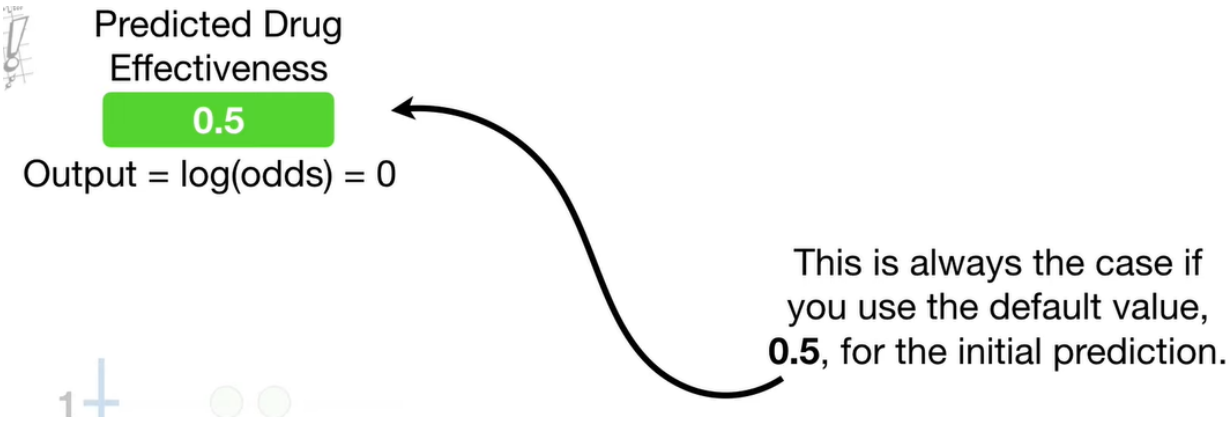
log(odds) Prediction = 0 + (0.3 × -2) = -0.6

可以看到，和原来的0.5对比，样本和0.35之间的residual比和0.5之间的要小。证明已经得到了优化。

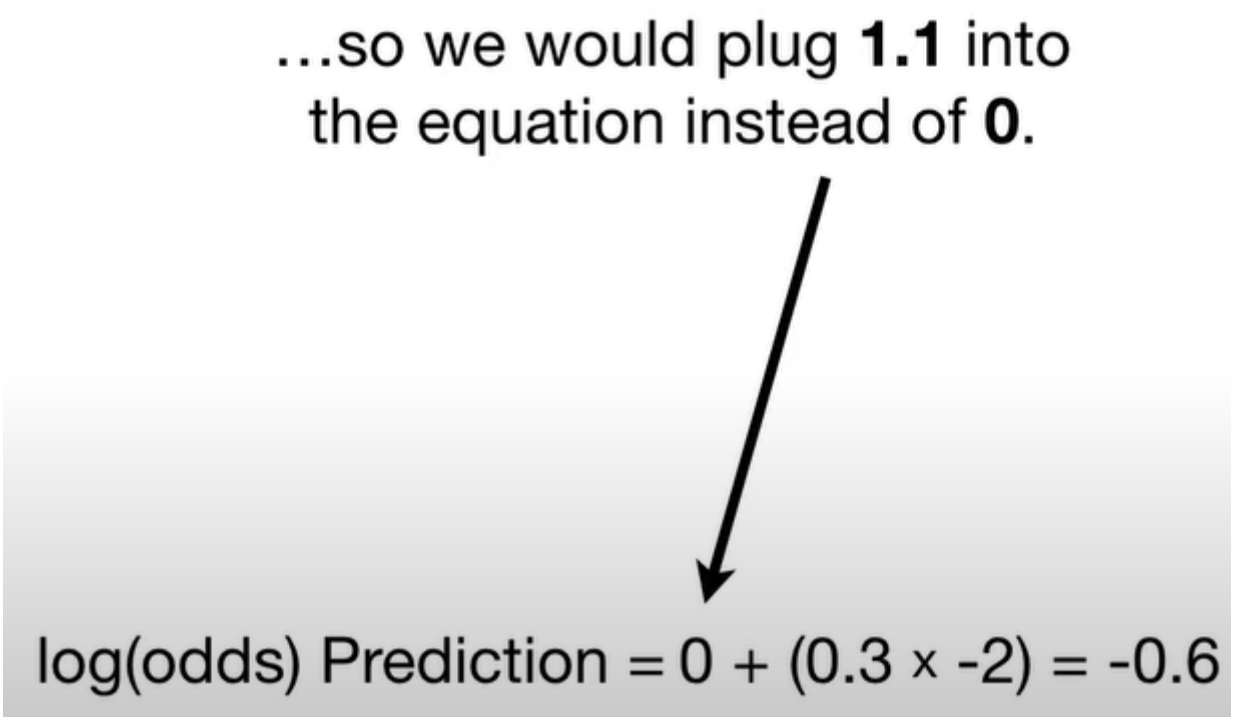


当最初预测值假设为0.5时，他的output一定为0. log[p/(1-p)]。

这个例子中的0.5是这样来的：4个样本中，有两个为正例，因此假设为0.5.



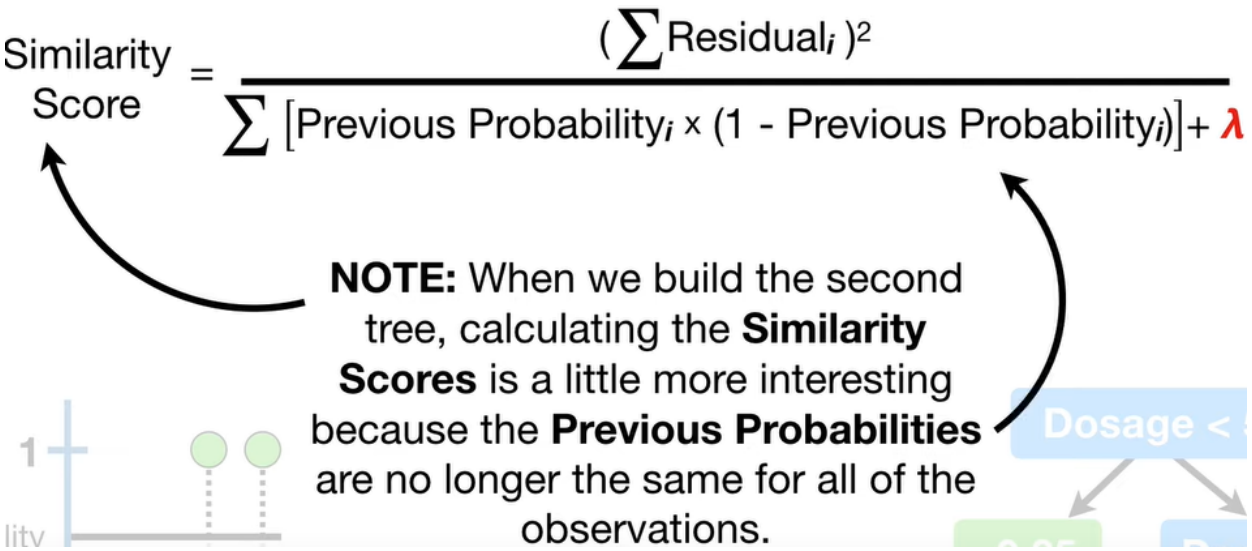
For example, if **75%** of the observations in the **Training Data** said that the drug was effective, we might set the initial prediction to **0.75** and now the initial **log(odds) = 1.1**…



构造下一个树的注意事项

previous probability已经不是0.5了，是经过第一棵树计算后得到的结果。

因此计算similarity和output value时也会根据经过第一棵树计算后，样本更新的结果进行计算。



而且第二棵树的Root中的residual也会不同（是先把residuals放到节点中，再决定该节点的分裂条件是哪个）

构建达到预设数量的树（或误差小于一个值时）停止构件树。

将样本在所有树的predicted value相加（包括initial prediction），得到最后的结果。