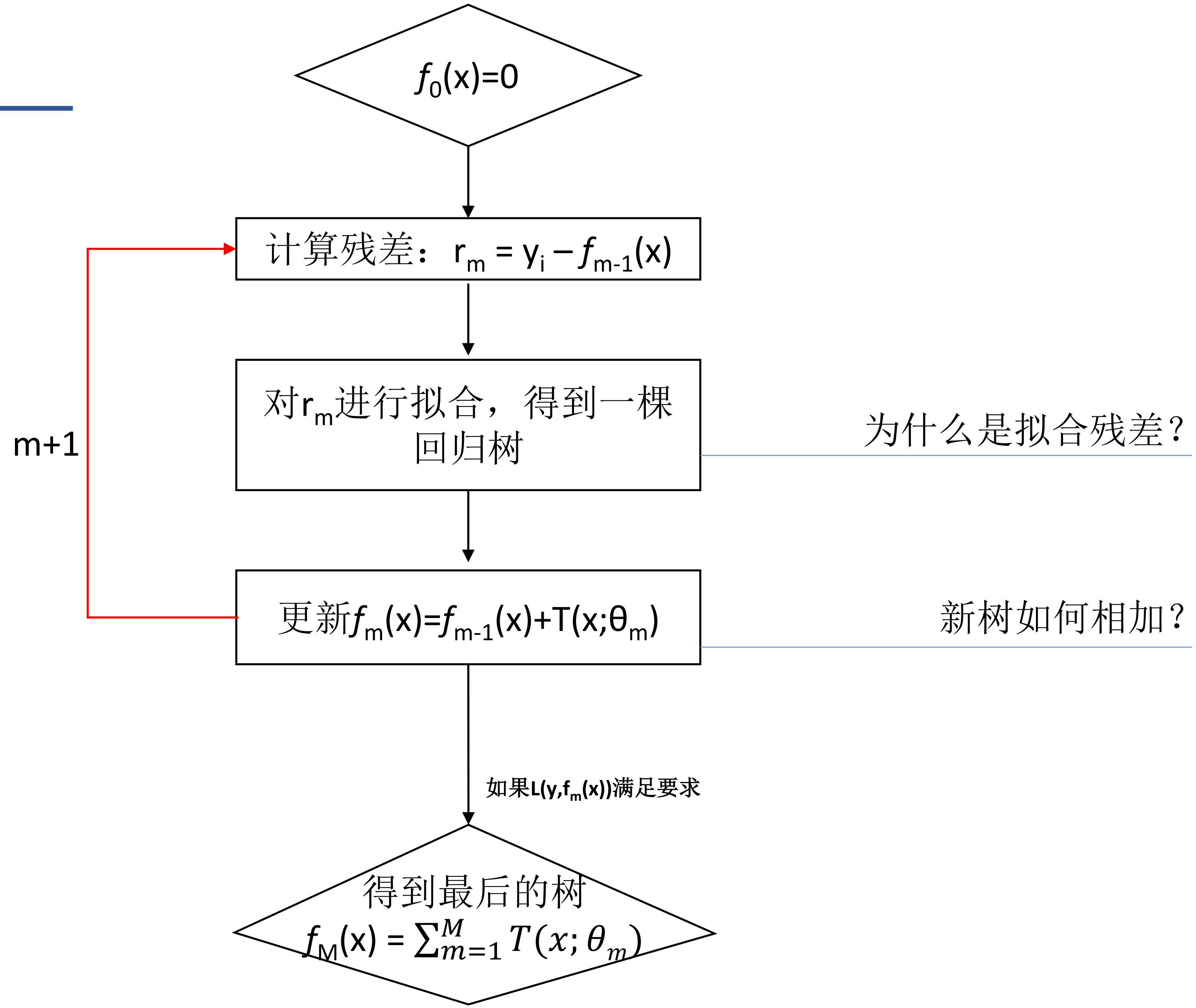
# 从提升到xgboost

jhs
2018/09/04

# 提升术



$f_0(x)=0$
计算残差：$r_m = y_i - f_{m-1}(x)$
对$r_m$进行拟合，得到一棵回归树
为什么是拟合残差？
m+1
更新$f_m(x)=f_{m-1}(x)+T(x;\theta_m)$
新树如何相加？
如果$L(y,f_m(x))$满足要求
得到最后的树
$f_M(x) = \sum_{m=1}^{M} T(x;\theta_m)$

# 为什么是拟合残差？

$f_M(x) = \sum_{m=1}^{M} T(x; \theta_m)$

$\hat{\theta}m = \underset{\theta m}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{N} L(yi, fm\ \_\ {}_{1}(x_i) + T(x_{i\,;}\ \theta m))$

$L(y, f_m(x)) = (y - f_m(x))^2$

$= L[y, f_{m-1}(x) + T(x;\theta)]^2$

$= [\boxed{y - f_{m-1}(x)} - T(x;\theta)]^2$

故，损失函数写为：

$L[r_{m-1}, T(x;\theta)]^2$

$r_{m-1}$ 的值，用于第m轮的拟合

# 树们如何相加？

$T_1(x) = \begin{cases} 6.24\ , & x < 6.5 \\ 8.91\ , & x \geq 6.5 \end{cases}$

$f_1 = f_0 + T_1(x;\theta)$

$f_1(x) = \begin{cases} 6.24\ , & x < 6.5 \\ 8.91\ , & x \geq 6.5 \end{cases}$

---

$T_2(x) = \begin{cases} -0.52\ , & x < 3.5 \\ 0.22\ , & x \geq 3.5 \end{cases}$

$f_2 = f_1 + T_2(x;\theta)$

$f_2(x) = \begin{cases} 5.72\ , & x < 3.5 \\ 6.46\ , & 3.5 \leq 6.46 < 6.5 \\ 9.13\ , & x \geq 6.5 \end{cases}$

---

$T_3(x) = \begin{cases} 0.15\ , & x < 6.5 \\ -0.22\ , & x \geq 6.5 \end{cases}$

$T_4(x) = \begin{cases} -0.16\ , & x < 4.5 \\ 0.11\ , & x \geq 4.5 \end{cases}$

$T_5(x) = \begin{cases} 0.07\ , & x < 6.5 \\ -0.11\ , & x \geq 6.5 \end{cases}$

$T_6(x) = \begin{cases} -0.15\ , & x < 2.5 \\ 0.04\ , & x \geq 2.5 \end{cases}$

# 树们如何相加？

$$f_6(x) = f_5(x) + T_6(x)$$
$$= T_1(x) + T_2(x) + T_3(x) + T_4(x) + T_5(x) + T_6(x)$$

$$T_1(x) = \begin{cases} 6.24 \;, & x < 6.5 \\ 8.91 \;, & x \geq 6.5 \end{cases} \qquad T_2(x) = \begin{cases} -0.52 \;, & x < 3.5 \\ 0.22 \;, & x \geq 3.5 \end{cases} \qquad T_3(x) = \begin{cases} 0.15 \;, & x < 6.5 \\ -0.22 \;, & x \geq 6.5 \end{cases}$$

$$T_4(x) = \begin{cases} -0.16 \;, & x < 4.5 \\ 0.11 \;, & x \geq 4.5 \end{cases} \qquad T_5(x) = \begin{cases} 0.07 \;, & x < 6.5 \\ -0.11 \;, & x \geq 6.5 \end{cases} \qquad T_6(x) = \begin{cases} -0.15 \;, & x < 2.5 \\ 0.04 \;, & x \geq 2.5 \end{cases}$$

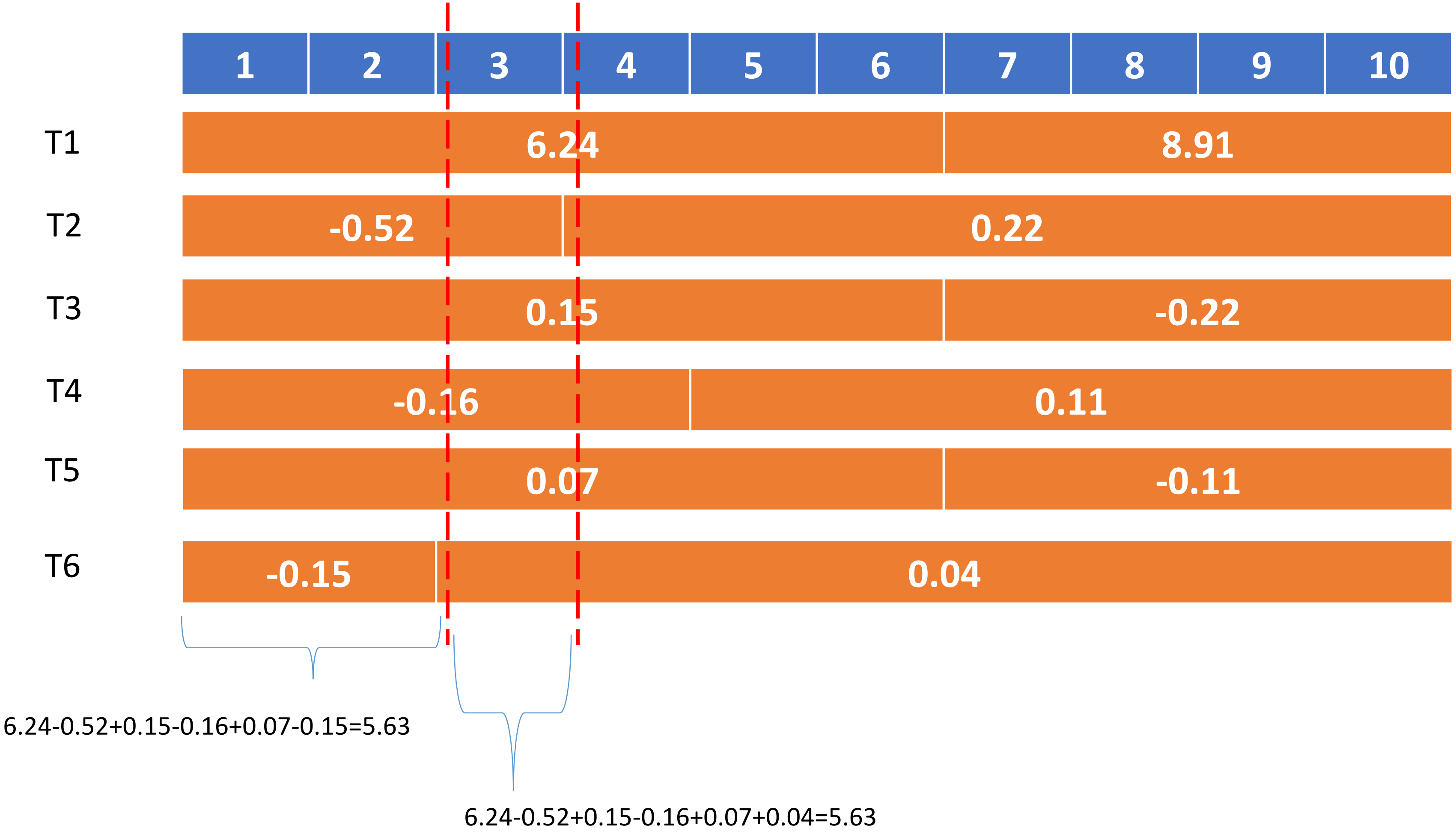
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|

| | | |
|---|---|---|
| T1 | 1,2,3,4,5,6 --> 6.24 | 7,8,9,10 --> 8.91 |
| T2 | 1,2,3 --> -0.52 | 4,5,6,7,8,9,10 --> 0.22 |
| T3 | 1,2,3,4,5, 6 --> -0.15 | 7,8,9,10 --> -0.22 |
| T4 | 1,2,3,4 --> -0.16 | 5,6,7,8,9,10 --> 0.11 |
| T5 | 1,2,3,4,5, 6 --> 0.07 | 6,7,8,9,10 --> -0.11 |
| T6 | 1,2 --> -0.15 | 3,4,5,6,7,8,9,10 --> 0.04 |

同时计算出
L1 , L2 , L3 , L4 , L5 , L6

# 树们如何相加？

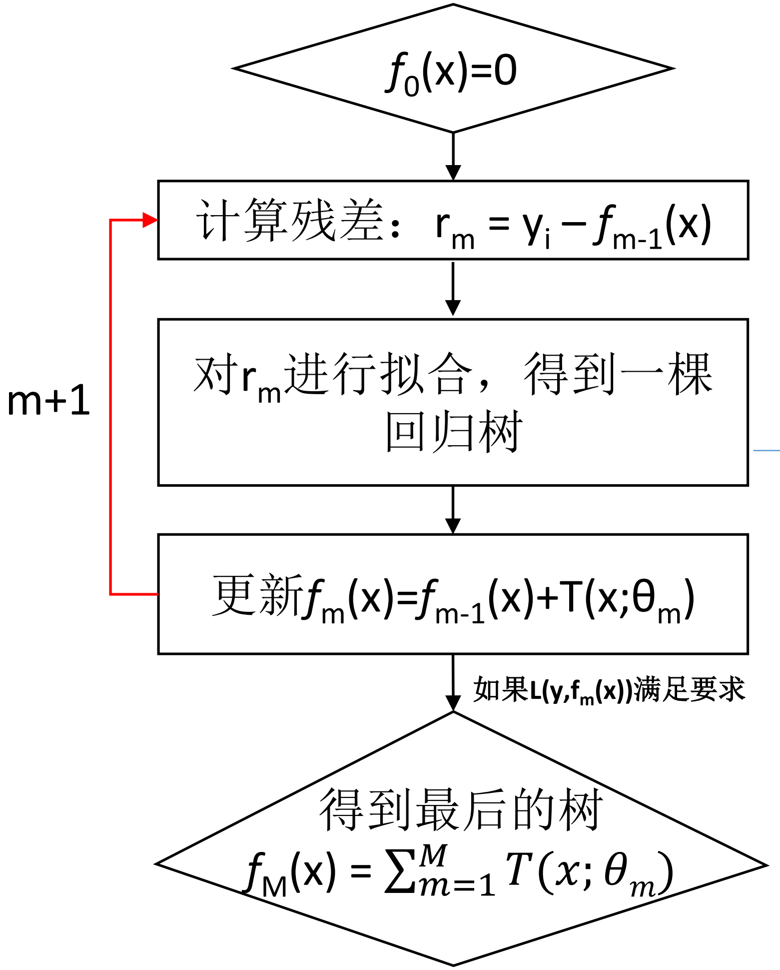
$f_6(x) = f_5(x) + T_6(x)$
$\quad = T_1(x) + T_2(x) + T_3(x) + T_4(x) + T_5(x) + T_6(x)$




$$F(x) = f_6(x) = \begin{cases} 5.63\,, & x < 2.5 \\ 5.82\,, & 2.5 \le x < 3.5 \\ 6.56\,, & 3.5 \le x < 4.5 \\ 6.83\,, & 4.5 \le x < 6.5 \\ 8.95\,, & x \ge 6.5 \end{cases}$$

此时，$L(y,f_6(x)) = 0.17$
我们假设此时已经满足要求，
就不在继续计算下去了

# GBDT的GB*(Gradient Boosting)*




$L(y, f_m(x))=(y - f_m(x))^2$

$=L[y, f_{m-1}(x) + T(x;\theta)]^2$

$=[\boxed{y - f_{m-1}(x)} - T(x;\theta)]^2$

$= [r_{m-1} - T(x;\theta)]^2$

$$r_m = -\left[\frac{\partial L(y,f(x))}{\partial f(x)}\right]_{f(x)=f_{m-1}(x)}$$

利用损失函数的负梯度在当前模型的值，
作为回归问题提升术算法中残差的近似值

这里需要注意的是，前面我们提到一个算法步骤是Line search（具体见论文）。在GBDT里，我们通过不会直接把上一个轮的预测值$F_{m-1}(x)$直接加上$\sum_{j=1}^{J}\gamma_{jm}I(x_i \in R_{jm})$，而是会在$\sum_{j=1}^{J}\gamma_{jm}I(x_i \in R_{jm})$乘上一个学习率。可以理解，因为如果每次完全加上（学习率为1）本轮模型的预测值容易导致过拟合。所以通常在GBDT中的做法（也叫Shrinkage）

# GBDT的算法流程

输入： $(x_i, y_i), T, L$

1. 初始化 $f_0$
2. for t = 1 to T do

   2.1 计算响应： $\tilde{y}_i = -\left[\frac{\partial L(y_i, F(x_i))}{\partial F(x_i)}\right]_{F(x)=F_{t-1}(x)}, i = 1, 2, \ldots N$

   2.2 学习第t棵树： $w^* = \arg\min_w \sum_{i=1}^{N} \left(\tilde{y}_i - h_t(x_i; w)\right)^2$

   2.3 line search找步长： $\rho^* = \arg\min_\rho \sum_{i=1}^{N} L\left(y_i, F_{t-1}(x_i) + \rho h_t(x_i; w^*)\right)$

   2.4 令 $f_t = \rho^* h_t(x; w^*)$

   更新模型： $F_t = F_{t-1} + f_t$

3. 输出 $F_T$

# xgboost

Xgboost仍然是基于boosting的思想，但是在实现过程中，其所需要优化的目标函数有所变化。

Xgboost的目标函数：

$$Obj(\theta) = L(\theta) + \Omega(\theta)$$

损失函数　　　　正则化项

# 损失函数

$$y_i^t = y^{t-1} + f_t(x)$$

$$L^t = \sum_{i=1}^{n} l\,(y_i\,,\, y_i^{t-1} + f_t(xi))$$

泰勒公式:

$$f(x + \Delta x) \approx f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2} f''(x)\Delta x^2 + o(\Delta x^3)$$

令 $$g_i = \frac{\partial L(yi, yit^{-1})}{\partial y_i^{t-1}} \qquad h_i = \frac{\partial^2 L(yi, yit^{-1})}{\partial y_i^{t-1}}$$

则，$L^t = \sum_{i=1}^{n} \left[ L(y_i, yit^{-1}) + gift(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^{2}(x_i) \right]$

# 目标函数作变换

$$L^t = \sum_{i=1}^{n} l\left(y_i, y_i^{t-1} + f_t(xi)\right) + \Omega(f_t)$$

$$L'^t = \sum_{i=1}^{n}\left[\underline{L(y_i, yit^{-1})} + gi(x_i)f_t(x_i) + \frac{1}{2}h_i f_t^{\,2}(x_i)\right] + \Omega(f_t)$$

均为已知，故舍去

$$L'^t = \sum_{i=1}^{n}\left[g_i(x_i)f_t(x_i) + \frac{1}{2}h_i f_t^{\,2}(x_i)\right] + \Omega(f_t)$$

$$= \sum_{i=1}^{n}\left[g_i w_{q(xi)} + \frac{1}{2}h_i w^2{}_{q(xi)}\right] + \gamma T + \lambda\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T} w_j^{\,2}$$

把 $f_t, \Omega(f_t)$ 写成树结构的形式，即把下式代入目标函数中

$$f(\mathbf{x}) = w_{q(\mathbf{x})} \qquad \Omega(f) = \gamma T + \frac{1}{2}\lambda\|w\|^2$$

对样本累加

对叶子累加

$$= \sum_{j=1}^{T}\left[\sum_{i\in I_j} g_{m,i}\, w_j + \frac{1}{2}\sum_{i\in I_j} h_{m,i}\, w_j^{\,2} + \frac{1}{2}\lambda\sum_{j=1}^{T} w_t^2\right] + \gamma T$$

$$= \sum_{j=1}^{T}\left[\underbrace{\sum_{i\in I_j} g_{m,i}}_{G_j} w_j + \frac{1}{2}\left(\underbrace{\sum_{i\in I_j} h_{m,i}}_{H_j} + \lambda\right) w_j^2\right] + \gamma T$$

$$= \sum_{j=1}^{T}\left[G_j w_j + \frac{1}{2}(H_j + \lambda)w_j^2\right] + \gamma T$$

$$L'^{t} = \sum_{j=1}^{T}\left[G_j w_j + \frac{1}{2}(H_j + \lambda) w_j^2\right] + \gamma T$$

假如，树的结构（q(x)）确定，为了使目标函数最小，
可以令其导数为0，解得每个叶节点的最优预测分数为：

$$w_j^* = -\frac{G_j}{H_j + \lambda}$$

代入，得：

$$L'^{t} = -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T}\frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T$$

# 填坑

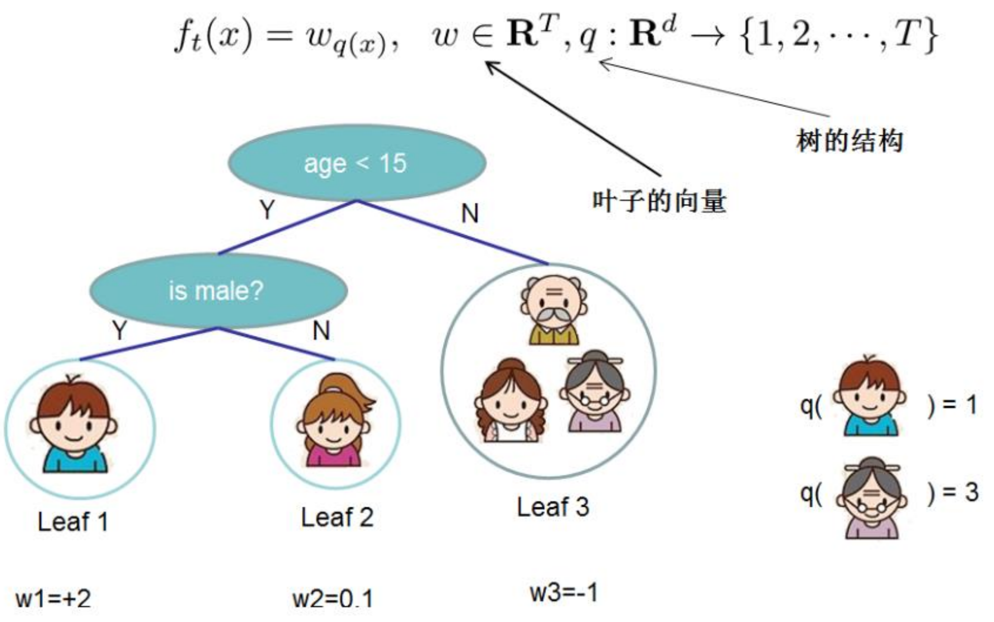
把 $f_t, \Omega(f_t)$ 写成树结构的形式，即把下式代入目标函数中

$$f(\mathbf{x}) = w_{q(\mathbf{x})} \qquad \Omega(f) = \gamma T + \frac{1}{2}\lambda \|w\|^2$$

树的定义：
把树拆分成结构部分q和叶子分数部分w

$$\phi(\mathbf{x}) = w_{q(\mathbf{x})}\ ,\ \mathbf{w} \in R^T, q\colon R^D \to \{1, \dots, T\}$$

- 结构函数$q$：把输入映射到叶子的索引号
- $w$：给出每个索引号对应的叶子的分数
- $T$为树中叶子结点的数目，$D$为特征维数



# 正则项

- XGBoost的目标函数（函数空间）

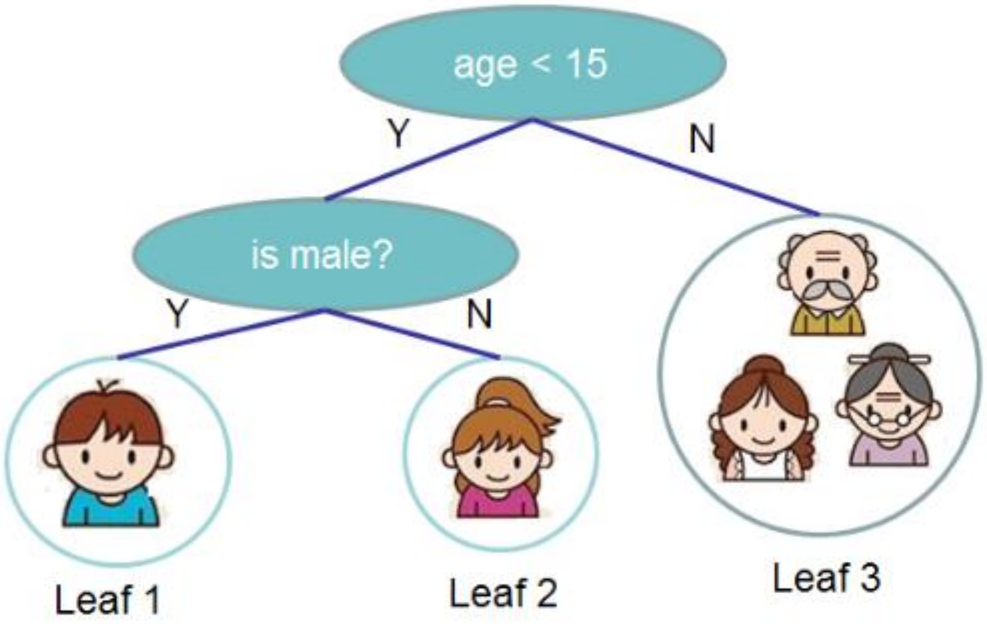
$$\mathcal{L}(\phi) = \sum_i l(\hat{y}_i, y_i) + \sum_k \Omega(f_k)$$

正则项对每棵回归树的复杂度进行了惩罚

- 相比原始的GBDT，XGBoost的目标函数多了正则项，使得学习出来的模型更加不容易过拟合。

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

叶子的个数　　　　**w的L2模平方**




w1=+2　　w2=0.1　　w3=-1

$$\Omega = \gamma 3 + \frac{1}{2}\lambda(4 + 0.01 + 1)$$

# 未涉及的内容

- 如何建树？
  - 树节点的分裂
  - 稀疏值的处理
- 特征的重要性

# Reference


- 1.《统计学习方法》 李航. 清华大学出版社
- 2.《XGBoost 从基础到实战》冒**.CSDN
- 3.《机器学习 升级版V》邹博.chinahadoop.cn
- 4.《GBDT 算法原理与系统设计简介》wepon
- 5.《GBDT原理与Sklearn源码分析-回归篇》kingsam_ https://blog.csdn.net/qq_22238533/article/details/79185969
- 6.《GBDT原理与Sklearn源码分析-分类篇》 kingsam_ https://blog.csdn.net/qq_22238533/article/details/79192579

- 水平有限，如有错误或不当之处，恳请批评指正！
- 517949233@qq.com