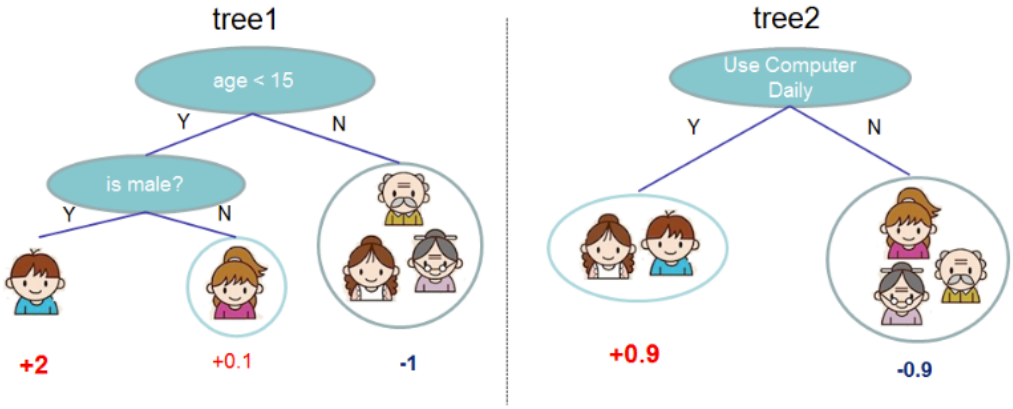
XGboost (eXtreme Gradient Boosting) 極限梯度提升

XGBoost 即是數顆「分類與回歸樹(Classification and Regression Tree；CART)」組合成一個高準確率的模型。每加入一次新的函數至原模型中，修正上一顆樹的錯誤，不斷的迭代以提升整體的模型。如圖一所示，Tree1 根據年紀與性別分類，藍衣小男孩所得的葉子分數為+2；Tree2 為每日使用電腦習慣，小男孩所得的葉子分數為+0.9，因此最後的模型結果，小男孩總共獲得 2.9 分，反之，阿公的分數為-1.9，而這個累加結果則會作為預測結果。



圖一、數集成模型（Chen and Guestrin, 2016）。

每棵樹的模型可被定義為：

$$\hat{y}_i = \phi(\mathbf{x}_i) = \sum_{k=1}^{K} f_k(\mathbf{x}_i), \quad f_k \in \mathcal{F}, \tag{1}$$

其中，$f(x) = w_{q(x)}$，w為權重、q 為這棵樹中該葉子的 index（這棵樹共有T片葉子；$q: \mathbb{R}^m \to T,\ w \epsilon \mathbb{R}^T$）；$K$為樹的總數量。換句話說，對於第 i 個樣本而言，在第 k 顆樹的中，所對應的葉子權重為$f_k(x) = w_{q(x)}$；在第 k+1 顆樹的中，所對應的葉子權重為$f_{k+1}(x) = w_{q(x)}$，而這個樣本所得的分數即為$f_k(x) + f_{k+1}(x)$+…..。

為了修正上顆樹的錯誤，則需要定義目標函數$Obj(\Theta)$來優化，目標函數函數可表示成：

$$\sum_i l(\hat{y}_i, y_i) + \sum_k \Omega(f_k) \tag{2}$$

前項為損失函數（loss function），用來量化預測$\hat{y}_i$與真實y_i的差異；後項為懲罰項，其描述樹的複雜度，也用來避免迭代有 overfitting 的狀況出現。而 XGB 是基於「修正上一顆樹的錯誤」來求得最佳模型，因此，在第 t 次迭代中，都在修正第 t-1 次的迭代情形，故式 2 可寫成：

$$\sum_{i=1}^{n} l(y_i, \hat{y_i}^{(t-1)} + f_t(\mathbf{x}_i)) + \Omega(f_t) \tag{3}$$

每一次的迭代（t）即希望$f_k(x_i)$擁有最小值。接續使用泰勒展開式（Taylor expansion）：$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-\alpha)^n$，來尋找目標函數的近似值，式 3 的$\hat{y}_i^{(t-1)}$可對應泰勒展開式的$x$、$f_t(x_i)$則對應$\alpha$，進而將式 3 寫成：

$$\sum_{i=1}^{n} [l(y_i, \hat{y_i}^{(t-1)}) + g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) + constant \tag{4}$$

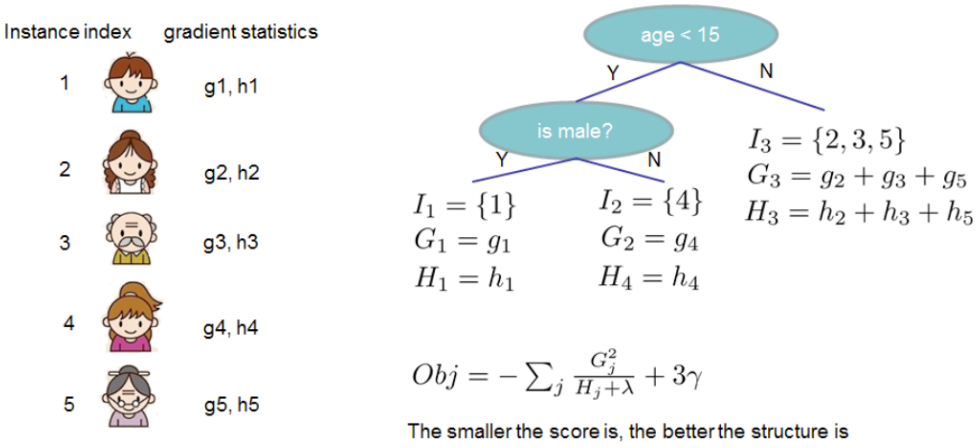
其中，$g_i = \partial_{\hat{y}^{\{t-1\}}} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})$、$h_i = \partial^2{}_{\hat{y}^{\{t-1\}}} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})$，也就是對應泰勒展開式的一（二）階導數，尤其，二階導數使梯度收斂的更快更準確。因為對於第 t 次迭代而言，$l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})$為常數，故後續推倒可省略。此外，懲罰項$\Omega(f) = \gamma T + \frac{1}{2}\lambda \sum_{j=1}^{T} w_j^2$、每棵樹可得的分數$f(x) = w_{q(x)}$，可將式 4 改寫（詳細推導見 https://www.hrwhisper.me/machine-learning-xgboost/）：

$$\sum_{j=1}^{T} [G_j w_j + \frac{1}{2}(H_j + \lambda) w_j^2] + \gamma T \tag{5}$$

其中，$G_i = \sum_{i=I_j}^{n} g_i$、$H_i = \sum_{i=I_j}^{n} h_i$。式 5 也就寫成了$ax^2 + bx + c$的形式，若欲求此式的最小值，則$w_j^* = \frac{-G_j}{H_j + \lambda}$，將$w_j^*$代回式 5，Loss function 可改寫為：

$$-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{T} \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T \tag{6}$$

該式可用於判斷該模型的好壞（圖二）。

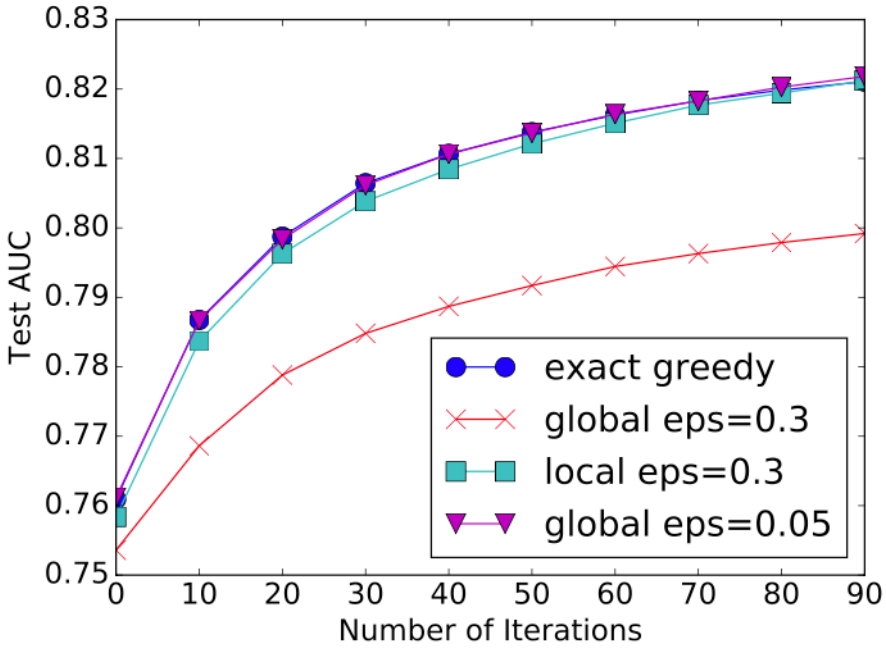


圖二、樹結構計算範例（Chen and Guestrin, 2016）。

一棵樹主要使用兩種方法進行劃分：Exact Greedy Algorithm 與 Approximate Algorithm，前者較適用於數據量小的狀況，該算法會將「所有的特徵列出且劃分」，計算「劃分後的左葉與右葉分數和」及「劃分前的分數」差（式七），即為 Gain，當 Gain 越大時代表 Loss function 下降的越多，進而找出最好的劃分點；後者則適用於數據量大的狀況，先根據 k 個特徵選擇分位點（Quartile），將這些分位點視為要觀察的劃分點，只要考慮這些劃分點的結果即可衡量該模型的好壞。

$$\frac{1}{2}\left[\frac{G_L^2}{H_L+\lambda}+\frac{G_R^2}{H_R+\lambda}-\frac{(G_L+G_R)^2}{H_L+H_R+\lambda}\right]-\gamma \tag{7}$$

Approximate Algorithm 的分點選取時間點策略可分為 Global 與 Local，前者在「學習每棵樹前」，提出候選的分位點；後者在「每次分裂前」，重新提出候選的分位點，直覺上來說，Local 需要較多計算步驟、Global 需要提出較多的候選分位點。從圖三來看，global 的分位點夠多（1/0.05=200）時，與 Exact Greedy Algorithm 的效能一致，同時，local 的分位點少量（1/0.3=33.3）即可達到一樣的效果。



圖三、以 Approximate Algorithm 建立樹模型的分位點方式（Chen and Guestrin, 2016）。eps 的倒數為分位點數量。

對於缺失值的處理，在 GBDT（Gradient Boosting Decistion Tree；梯度提升決策樹）中，會先手動對缺失值填充（沒有任何依據的狀況），當作有值的特徵處理；相反地，XGB 僅先利用有值的數據尋找特徵建立模型，再嘗試將缺失值劃入對應分支，選擇損失最優的值作為分裂點，並且其複雜度降低，計算速度提升。

對於抽樣，XGB 借用了隨機森林（Random forest）的欄抽樣（每一次分裂只使用被抽取的特徵），防止 overfitting 也加速訓練過程。

XGB 參數設定（詳見 *XGBoost_iris.ipynb*）

1. `n_estimators:` 樹的數量。[default= 10]
2. `booster:` 模型種類。[default= gbtree]
   - `gbtree:` tree-based models
   - `gblinear:` linear models
3. `max_depth:` 每棵樹的最大深度，越大越能學到更局部的樣本，但也有可能 over fitting。[default= 6]
4. `objective`: 定義最小化 loss function 類型（詳見官方手冊）。[default= reg:linear]
   - `reg:squarederror`: squared loss 的迴歸
   - `binary:logistic:` 邏輯斯回歸，return 值為預測機率
   - `multi:softmax`: 邏輯斯回歸的延伸，每個 class 都有機率分佈，return 值為 class
   - `multi:softprob`: 與 softmax 相同，但 return 的是每個資料點在每個 class 的機率
5. `eta/learning_rate:` 學習速率，完成一次迭代後會把葉子權重乘上此係數，削弱前棵樹的影響，讓後面的樹有更大的空間可學習/修正。[default= 0.3]
6. `tree_method:` 樹的劃分方法。[default= “auto”]
   - `auto`：對於小數據集--> “exact”; 對於大數據集-->”approx”
   - `exact`：Exact Greedy Algorithm
   - `approx`：Approximate Algorithm
   - `hist`：更快的直方圖優化法（based on Exact Greedy Algorithm ）
   - `gpu_hist`：加入 GPU 的 hist 計算
7. `min_child_weight`: 葉子的最小樣本數，與式 5 的H_j（二階導數項的和）有關。假設 h 在 0.01 附近，min_child_weight 為 1，代表葉子最少需要 100 個樣

本。此值愈小愈容易 overfitting。[default= 1]

8. gamma: 即「γ」(式 5 至式 7)，越大越保守。[default= 0]
9. lambda: L2 正歸化參數，用於控制模型複雜度，參數越大越不容易 overfitting。[default= 1]
10. alpha: L1 正歸化參數，用於控制模型複雜度，參數越大越不容易 overfitting。[default= 0]
11. max_leaves: 不與 tree_method="exact"同用。[default= 0]
12. colsample_bytree: 生成樹時所進行的 column 採樣，通常設置為 0.5-1。[default= 1]
13. seed: 隨機種子，用於產生可重現的結果。[default= 1000]
14. max_delta_step: 取正值使迭代步驟更加保守，若該值為 0 則沒有約束，但當使用 logtstics regression 時調整此參數可能有效果。[default= 0]
15. subsample: 若該值為 0.6，每次迭代隨機抽取六成的訓練數據，以防止 overfitting。[default= 0]
16. scale_pos_weight: 大於 0（設定值）的值可以處理類別不平衡狀況，幫助模型更快收斂。[default=0]
17. eval_metric: 驗證數據所需要的衡量方法（詳見官方手冊）。[default= according to objective]
    - rms: root mean square error (for regression)
    - auc: area under the curve for ranking evaluation
    - error: binary classification error rate (for classification)

參考文章與網址

Chen, T., & Guestrin, C. (2016). XGBoost. *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*. https://doi.org/10.1145/2939672.2939785

https://blog.csdn.net/sb19931201/article/details/52557382

https://medium.com/chung-yi/xgboost%E4%BB%8B%E7%B4%B9-b31f7ec8295e

https://www.hrwhisper.me/machine-learning-xgboost/

https://zhuanlan.zhihu.com/p/145041410

https://www.gushiciku.cn/pl/p8al/zh-tw

https://ithelp.ithome.com.tw/articles/10268984

https://ithelp.ithome.com.tw/articles/10301273