0.前言

解析源码之前,还是介绍说明下XGBoost原理,网上对于XGBoost原理已有各种版本的解读。而这篇博客,笔者主要想根据自己的理解,梳理看证资料,包括陈天奇的论文以及引用论文内容,本文主要内容基于陈天奇的论文与PPT,希望能够做到系统地介绍XGBoost,同时加入源码新特性让内容

XGBoost不仅能在单机上通过OMP实现高度并行化,还能通过MPI接口与近似分位点算法(论文中是weighted quantiles sketch)实现高效的分 其中近似分位点算法(approximate quantiles)会附加一篇博客进行详细说明,分位点算法在分布式系统、流式系统中真的是个很天才的想法,很多基石。最早由M.Greenwald和S. Khanna与2001年提出的GK Summay算法,直到到2007年被Q. Zhang和W. Wang提出的多层level的merge与com框架进行高度优化,而被称为A fast algorithm for approximate quantiles,详情见下一篇博客。

## 1.Boosting算法框架

XGBoost算法属于集成学习中的boosting分支,其算法框架遵循1999年Friedman提出的boosting框架,该分支还有GBDT(Gradient Boosting I Tree),boosting集成是后一个模型是对前一个模型产生误差信息进行矫正。gradient boost更具体,新模型的引入是为了减少上个模型的残差(residu以在残差减少的梯度(Gradient)方向上建立一个新的模型。Friedman论文中针对回归过程提出boost框架如下:

```
Algorithm 1: Gradient_Boost

\begin{array}{ll}
I & F_0(\mathbf{x}) = \arg\min_{\rho} \sum_{i=1}^{N} L\left(y_i, \rho\right) \\
2 & \text{For } m = 1 \text{ to } M \text{ do:} \\
3 & \tilde{y}_i = -\left[\frac{\partial L(y_i, F(\mathbf{x}_i))}{\partial F(\mathbf{x}_i)}\right]_{F(\mathbf{x}) = F_{m-1}(\mathbf{x})}, i = 1, N \\
4 & \mathbf{a}_m = \arg\min_{\mathbf{a}, \beta} \sum_{i=1}^{N} [\tilde{y}_i - \beta h(\mathbf{x}_i; \mathbf{a})]^2 \\
5 & \rho_m = \arg\min_{\rho} \sum_{i=1}^{N} L\left(y_i, F_{m-1}(\mathbf{x}_i) + \rho h(\mathbf{x}_i; \mathbf{a}_m)\right) \\
6 & F_m(\mathbf{x}) = F_{m-1}(\mathbf{x}) + \rho_m h(\mathbf{x}; \mathbf{a}_m) \\
7 & \text{endFor} \\ & \text{end Algorithm}
\end{array}
```

Friedman提出boost算法框架过程描述如下:

- 1. 设定函数初始值 $F_0$ ,为一个恒值函数,论文中基于变量优化出恒值,实际上也可以给定任意值或者直接为0。
- 2. 根据参数M,进行M次迭代,不断将当前函数 $F_{m-1}$ 往最优函数 $F^*$ 空间上逼近,逼近方向就是当前函数下的函数负梯度方向 $-\nabla L(y,F)|_{F=}$ 化函数,而非变量,本质上属于泛函优化。
- 3. 每次迭代计算出函数负梯度,基于训练数据构建模型来拟合负梯度。原则上可以选择任何模型:树模型,线性模型或者神经网络等等,很少框架络,推测:神经网络容易过拟合,后续函数负梯度恒为0就无法继续迭代优化下去。如果用树模型进行拟合,就是我们熟悉的CA  $\odot$  对过程。
- 4. 优化步长,根据目标函数来最优步长 $\rho_m$ ,属于变量优化,并更新当前函数,继续迭代。框架并没有shrinkage机制来控制可能过度拟合,目前现代的boosting框架都支持shrinkage,即最终的优化步长应乘以shrinkage参数: $\rho_m=\rho_m\gamma$ 。

该框架实际上是泛函梯度下降优化过程,尽管中间局部包含变量优化步骤,对比变量优化迭代不难发现相似之处。准确来说  $^{\circ}$  是量优化的其他策函优化: 1) 基于梯度下降优化,步长优化可以是精确优化和非精确优化。2) 基于牛顿法,根据二阶梯度直接计算步长 $f^{''}(x)^{-1}$ ,即更新变量

位 寺征候选集(列3 10 完成,因此能够写 记 与续优化实现并 2型过拟合,XGE

W

### 2. XGBoost原理推导

1. XGBoost考虑正则化项,目标函数定义如下:

$$L(\phi) = \sum_i l(y_i, \hat{y}_i) + \sum_k \Omega(f_k)$$
,其中 $\Omega(f_k) = \gamma T + rac{1}{2} \lambda ||w||^2$ 

其中 $\hat{y}_i$ 为预测输出, $y_i$ 为label值, $f_k$ 为第k树模型,T为树叶子节点数,w为叶子权重值, $\gamma$ 为叶子树惩罚正则项,具有其,, $\lambda$ 为叶子权重项,防止过拟合。XGBoost也支持一阶正则化,容易优化叶子节点权重为0,不过不常用。

根据Boosting框架,可以优化出树的建模函数 $f_t(x)$ :

$$\begin{split} L^{(t)} &= \sum_{i=1} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)) + \Omega(f_t) \\ &\approx \sum_{i=1}^n [l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_t f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) \\ &= \sum_{i=1}^n [g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_t f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) + constant \end{split}$$

2. 因此,每次建树优化以下目标:

$$\hat{L}^{(t)} = \sum_{i=1}^n [g_i f_t(x_i) + rac{1}{2} h_t f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t)$$

其中
$$g_i=\partial_{\hat{y}_i^{(t-1)}}l(y_i,\hat{y}_i^{(t-1)})$$
, $h_i=\partial_{\hat{y}_i^{(t-1)}}^2l(y_i,\hat{y}_i^{(t-1)})$ ,而且:

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

3. 假设我们已知树结构q,即每个样本 $x_i$ 能通过该结构q找到对应的叶子节点j,可以定义  $I_j=\{i|q(x_i)=j\}$ 为在树结构q下,落入叶子节点j的集合。展开上述表达式并通过配方法不难得到:

$$\begin{split} \hat{L}^{(t)} &= \sum_{i=1}^n [g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_t f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) \\ &= \sum_{i=1}^n [g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_t f_t^2(x_i)] + \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2 \\ &= \sum_{j=1}^T [(\sum_{i \in I_j} g_i) w_j + \frac{1}{2} (\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda) w_j^2] + \gamma T \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j=1}^T (H_j + \lambda) (w_j + \frac{G_j}{H_j + \lambda})^2 + \gamma T - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} \end{split}$$

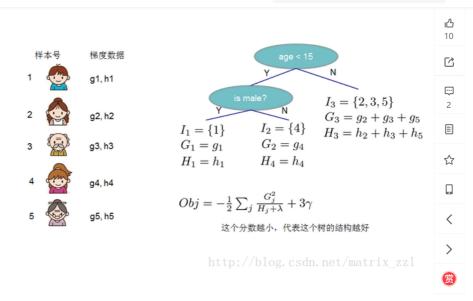
其中 $G_j = \sum\limits_{i \in I_j} g_i$ 为落入叶子i所有样本一阶梯度统计值总和, $H_j = \sum\limits_{i \in I_j} h_i$ 为落入叶子i所有样本二阶梯度统计值总和。最终得到叶子权重值为:

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

4. 最终的目标值为:

$$\hat{L}^* = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{T} \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T$$

举报



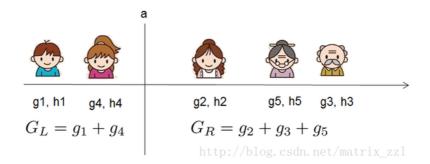
5. 回顾步骤3,可以发现前提假设是已知树结构q,除非遍历所有树结构,否则无法优化最优目标值,而且为了优化目标值,我们也不可能遍历所有树结构。论文提出了类似于CART定义增益公式来启发式的寻找最优树结构,若当前树结构I能被分裂成 $I_L$ 与 $I_R$ , $I=I_L\bigcup I_R$ ,XGBoost的增益公式:

$$L_{split} = \frac{1}{2}[\frac{G_L^2}{H_L + \lambda} + \frac{G_R^2}{H_R + \lambda} - \frac{(G_L + G_R)^2}{H_L + H_R + \lambda}] - \gamma$$

## 3. XGBoost算法

#### 1) XGBoost精确贪婪算法

构建树流程如下:1.遍历每个特征k, 2)遍历当前特征k下每个取值 $x_{jk}$ ,对于特征分裂值将前节点样本样本划分到左右子树,根据上述公式通过证取增益最大对应的特征以及特征分裂值,执行节点分裂, $L_{split}$ 最大值小于0则停止分裂, $\gamma$ 可以视为分裂阈值,起到一定程度的预剪枝的作用,再不断根据特征值排序,从左到右进行扫描来找出当前特征下最优分裂值。



论文提出的精确贪婪算法流程如下:



Q

#### 2) XGBoost近似算法

精确算法由于需要遍历特征的所有取值,计算效率低,适合单机小数据,对于大数据、分布式场景并不适合。论文基于Weighted Quantile Sketc 提出相应的近似算法,也证明了该分位点的正确性。通过设置 e来设置近似程度,而且论文给出近似算法的2种方案:

- 1. 在建树之前预先将数据进行全局分桶,需要设置更小的 $\epsilon$ ,产生更多的桶,特征分裂查找基于候选点多,计算较慢,但只需在全局执行一次。
- 2. 每次分裂重新局部分桶,可以设置较大的 $\epsilon$ ,产生更少的桶,每次特征分裂查找基于候选点少,计算速度快,但是需要每次节点分裂后重新执行方案更适合树深的场景。

论文给出Higgs案例下,方案1全局分桶设置 $\epsilon=0.05$ 与精确算法效果差不多,方案2局部分桶设置 $\epsilon=0.3$ 与精确算法仅稍差点,方案1全局分桶  $\epsilon=0.3$ 则效果极差。

近似算法为什么能用于分布式?主要原因是分桶是基于分位点算法,分位点算法支持merge和prune操作,**想了解该过程可以移步《分位点算法详** XGBoost场景属于weighted分位点算法,作者在论文后面也证明weighted分位点算法支持merge和prune操作,因此适合与分布式场景。近似算法主进行分桶,同时希望每个桶尽量均匀。考虑数据集:

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

定义rank函数为 $r_k:R \to [0,+\infty)$ ,二阶导数 $h_i$ 一定大于等于0,而一阶导数 $g_i$ 则不具备该条件,所以无法构建分位点。实际上XGBoost源代码不仅会构建 $h_i$ 的分位行拆分,分别构建 $g_i>0$ 集合分位点和 $g_i<0$ 集合分位点(取负),目前按照论文中仅考虑二阶导数统计值 $h_i$ :

$$r_k(z) = rac{1}{\sum_{(x,h) \in D_k} h} \sum_{(x,h) \in D_k, x < z} h$$

 $r_k(z)$ 表示特征值小于z的样本集合中,h累计值的百分占比。在这个排序函数下,我们找到一组点 $s_{k1},s_{k2},\ldots,s_{kl}$ ,满足:

$$|r_k(s_{k,j}) - r_k(s_{k,j+1})| < arepsilon,$$
  $\sharp + s_{k1} = \min_i x_{ik}, s_{kl} = \max_i x_{ik}$ 

上述条件1为均匀条件,条件2为边界条件。这样就能得到 $1/\varepsilon$ 个特征值分割候选点,假设数据量为1kw,设置 $\epsilon=0.01$ ,则由候选点1kw降低为100,速度提升10w倍,精确含婪算法流程如下:



http://blog.csdn.net/matrix\_zz

### 赏

>

Q

**凸** 10

2

#### 3) XGBoost近似算法

对于数据缺失数据、one-hot编码等造成的特征稀疏现象,作者在论文中提出可以处理稀疏特征的分裂算法,主要是对稀疏特征值miss的样本学习分裂方向:

score only among proposed splits.

- 1. 默认miss value进右子树,对non-missing value的样本在左子树的统计值 $G_L$ 与 $H_L$ ,右子树为 $G-G_L$ 与 $H-H_L$ ,其中包含miss的样本。
- 2. 默认miss value进左子树,对non-missing value的样本在右子树的统计值 $G_R$ 与 $H_R$ ,左子树为 $G-G_R$ 与 $H-H_R$ ,其中包含miss的样本。最后,找出增益最大对于的特征、特征对于的值、以及miss value的分裂方向,作者在论文中提出基于稀疏分裂算法:

```
Algorithm 3: Sparsity-aware Split Finding

Input: I_i instance set of current node
Input: I_k = \{i \in I | x_{ik} \neq \text{missing} \}
Input: d_i 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 | net / matrix | zz|
```

## 4. XGBoost工程优化

内部数据存储格式

从算法上看,每种算法都依赖特征排序,然后扫描,为了减少特征排序,XGBoost引入一种名为block的数据存储结构,将数据存储在内存单元,征进行排序。block中的数据以CSC格式存储。实际上源代码中XGBoost会把文件数据读入先生成CSR格式,然后转化为CSC格式。其中CSR格式如下:



172853964

http://blogentriesdn.net/matrix\_zz

Q

凸 10

0 3 9

CSR包含非0数据块values,行偏移offsets,列下标indices。offsets数组大小为(总行数目+1),CSR是对稠密矩阵的压红 🗸 际上直接访问稠料 (i,j)并不高效,毕竟损失部分信息,访问过程如下:

与非0的列下表

- 1. 根据行i得到偏移区间开始位置offsets[i]与区间结束位置offsets[i+1]-1,得到i行数据块values[offsets[i]..(offsets[i+1]indices[offsets[i]..(offsets[i+1]-1)],
  - 2. 在列下标数据块中二分查找j,找不到则返回0,否则找到下标值k,返回values[offsets[i]+k]

从访问单个元素来说,从O(1)时间复杂度升到O(logN), N为该行非稀疏数据项个数。但是如果要遍历访问整行非0数据,则无需访问indices数(logN)度反而更低,因为少了大量的稀疏为0的数据访问。

CSC与CSR变量结构上并无差别,只是变量意义不同,其中values仍然为非0数据块,offsets为列偏移,即特征id对应数组,indices为行下标,对 组,XBGoost使用CSC主要用于对特征的全局预排序。预先将CSR数据转化为无序的CSC数据,遍历每个特征,并对每个特征i进行排序: sort(&value &values[offsets[i+1]-1])。全局特征排序后,后期节点分裂可以复用全局排序信息,而不需要重新排序。

**Cache-aware Access** 

CSDN

CSC存储优化会导致获取每个样本获取统计值而不连续,造成样本计算cache不断切换而导致cache-miss,XGBoost通过选择适当的block size来 小样本量带来的资源浪费以及大样本量带来的cache-miss之间的权衡问题,XGBoost选择的block size为 $2^{16}$ 。

**Out-of-core Computation** 

XGBoost中提出Out-of-core Computation优化,解决了在硬盘上读取数据耗时过长,吞吐量不足:

- 1) Block Compression基于block,数据分块,每块 $2^{16}$ 个样例,使用16bit来存储offset。利用压缩算法将硬盘中的数据进行压缩,在读取数据达 中利用一个独立的线程对数据进行解压缩,将disk reading cost转换为解压缩所消耗的计算资源。
- 2) Block Sharding将数据shard到多块硬盘上,每块硬盘分配一个预取线程,将数据fetche到in-memory buffer中。训练线程交替读取多块buff 盘总体的吞吐量。

## 5. XGBoost算法复杂度

针对精确贪婪算法,考虑数据样本量为N,特征数量为M,设置树的个数为K,树深为D,不考虑行采样与列采样,其时间复杂度分析如下:

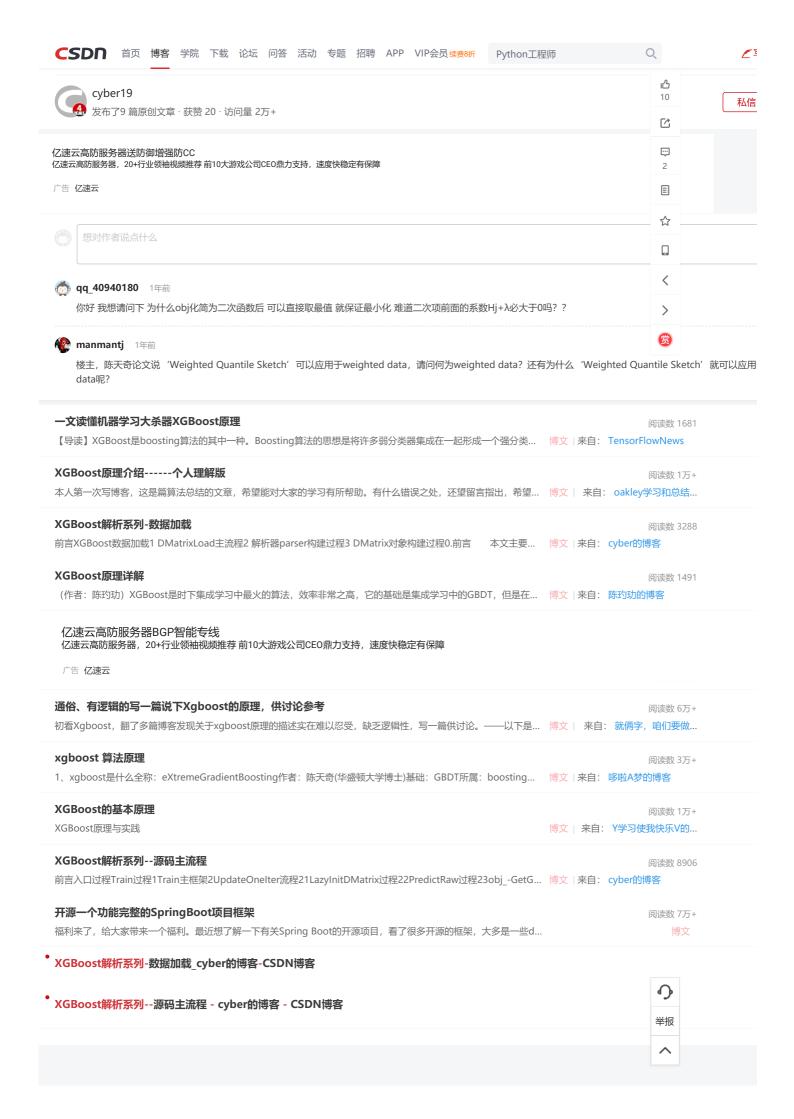
- 1. 全局特征预排序,由于全局排序,后期节点再分裂可以复用全局排序信息,而不需要重新排序,因此排序复杂度为 $O(MN\log(N))$
- 2. 构建单树复杂度:由于XGBoost实现基于level-wise, 每层的时间复杂度是为O(MN),K颗树复杂度为O(KMND)
- 3. 最终时间复杂度为:  $O(MN\log(N)) + O(KMND)$ ,注意: 跟论文的分析不同,主要按照笔者的理解,后期仔细分析后,如果有出入会

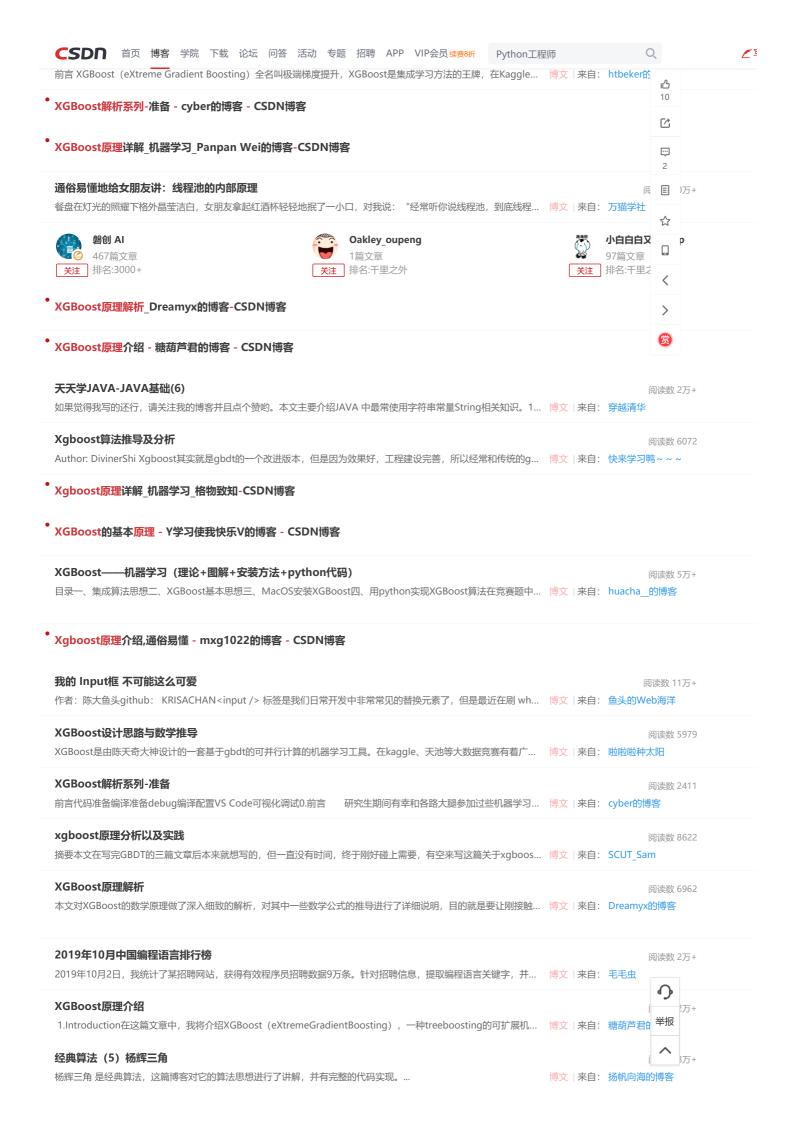
# 参考资料

- 1. Friedman Boosting框架论文: https://statweb.stanford.edu/~jhf/ftp/trebst.pdf
- 2. 陈天奇XGBoost论文: https://arxiv.org/pdf/1603.02754.pdf
- 3. XGBoost项目: https://github.com/dmlc/xgboost
- 4. GK Summary算法论文: http://infolab.stanford.edu/~datar/courses/cs361a/papers/quantiles.pdf
- 5. A fast algorithm for approximate quantiles论文: https://pdfs.semanticscholar.org/03a0/f978de91f70249dc39de7 举报 \$8c49df4583.pd
- 6. wepon GDBT ppt: http://202.38.196.91/cache/2/03/wepon.me/5aa84bcab4e621a09cc475c348590c35/gbdt.pdf

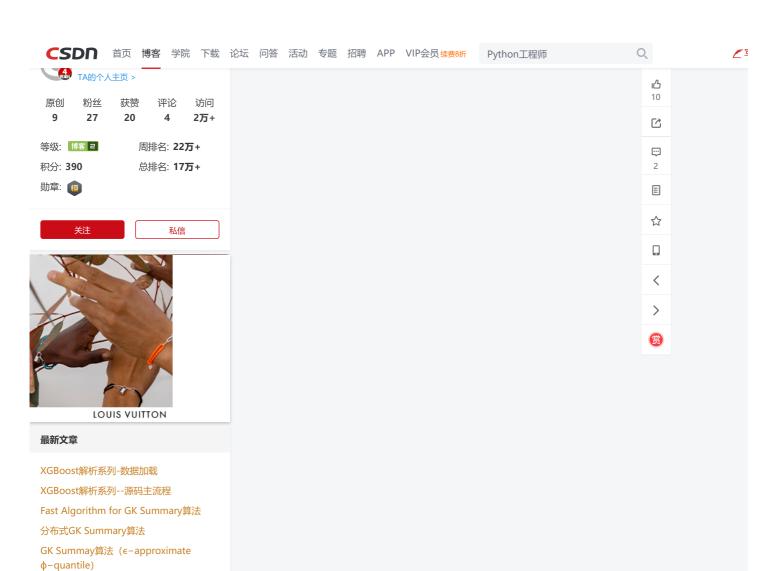














IJ	3	栏	ř
•	_		•

2017年12月2篇2017年11月7篇

### 热门文章

XGBoost解析系列--源码主流程

阅读数 8902

XGBoost解析系列-原理

阅读数 5886

GDB配置 (打印STL容器、VS code配置、远程调试debug)

阅读数 3436

XGBoost解析系列-数据加载

阅读数 3288

XGBoost解析系列-准备



举报



