目录

1. 什么是XGBoost

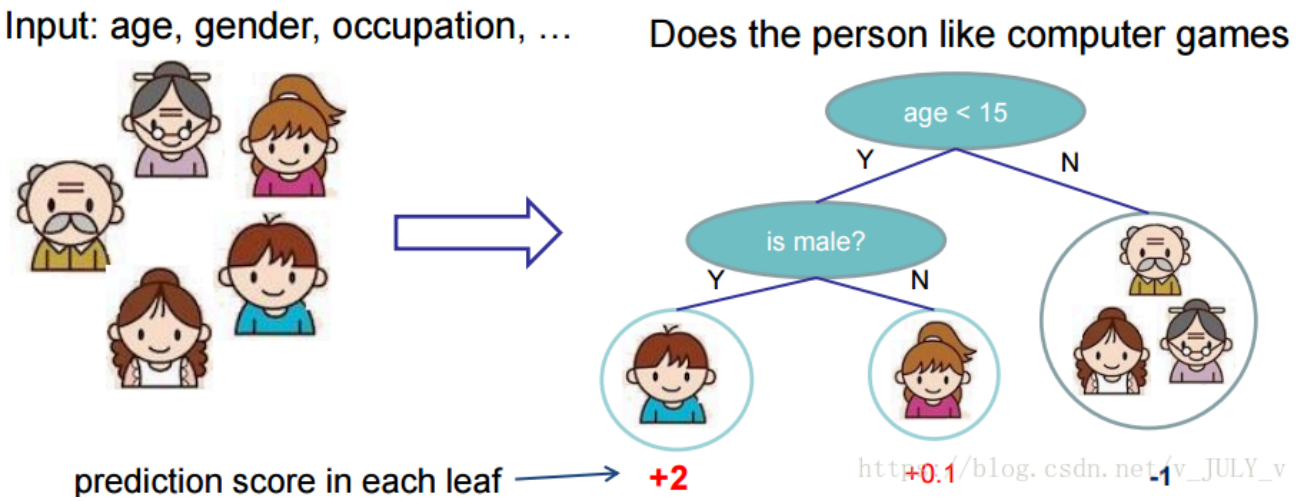
XGBoost是陈天奇等人开发的一个开源机器学习项目，高效地实现了GBDT算法并进行了算法和工程上的许多改进，被广泛应用在Kaggle竞赛及其他许多机器学习竞赛中并取得了不错的成绩。

说到XGBoost，不得不提GBDT(Gradient Boosting Decision Tree)。因为XGBoost本质上还是一个GBDT，但是力争把速度和效率发挥到极致，所以叫X (Extreme) GBoosted。包括前面说过，两者都是boosting方法。

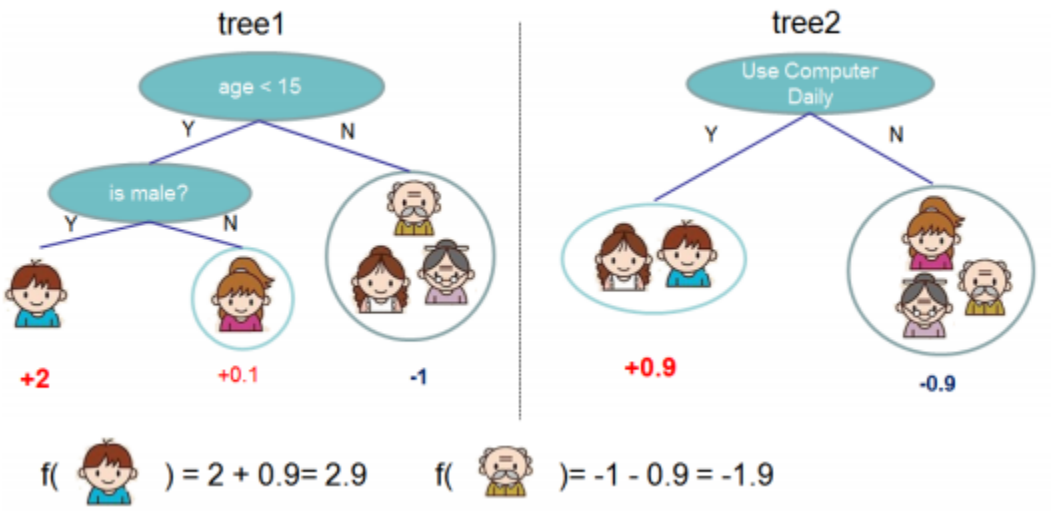
关于GBDT，这里不再提，可以查看我前一篇的介绍，点此跳转。

1.1 XGBoost树的定义

先来举个**例子**，我们要预测一家人对电子游戏的喜好程度，考虑到年轻和年老相比，年轻更可能喜欢电子游戏，以及男性和女性相比，男性更喜欢电子游戏，故先根据年龄大小区分小孩和大人，然后再通过性别区分开是男是女，逐一给各人在电子游戏喜好程度上打分，如下图所示。

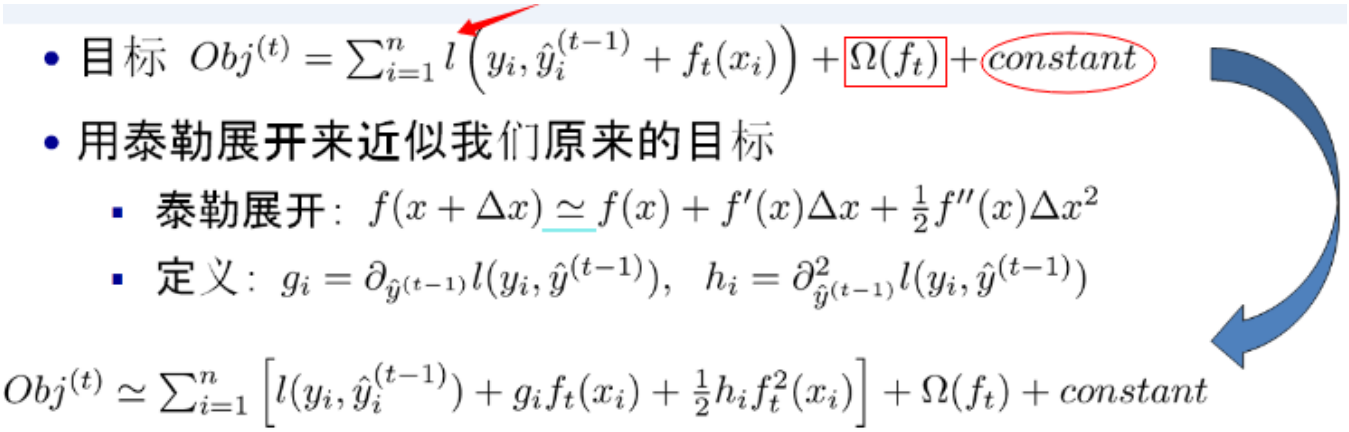


就这样，训练出了2棵树tree1和tree2，类似之前gbdt的原理，两棵树的结论累加起来便是最终的结论，所以小孩的预测分数就是两棵树中小孩所落到的结点的分数相加：2 + 0.9 = 2.9。爷爷的预测分数同理：-1 + （-0.9）= -1.9。具体如下图所示：



恩，你可能要拍案而起了，惊呼，这不是跟上文介绍的GBDT乃异曲同工么？

事实上，如果不考虑工程实现、解决问题上的一些差异，XGBoost与GBDT比较大的不同就是目标函数的定义。XGBoost的目标函数如下图所示：



其中：

- 红色箭头所指向的L 即为损失函数（比如平方损失函数：
  $l(y_i, y^i) = (y_i - y^i)^2$
  ）
- 红色方框所框起来的是正则项（包括L1正则、L2正则）
- 红色圆圈所圈起来的为常数项
- 对于f(x)，XGBoost利用泰勒展开三项，做一个近似。**f(x)表示的是其中一颗回归树。**

看到这里可能有些读者会头晕了，这么多公式，**我在这里只做一个简要式的讲解，具体的算法细节和公式求解请查看这篇博文，讲得很仔细**：通俗理解kaggle比赛大杀器xgboost

XGBoost的**核心算法思想**不难，基本就是：

1. 不断地添加树，不断地进行特征分裂来生长一棵树，每次添加一个树，其实是学习一个新函数**f(x)**，去拟合上次预测的残差。
2. 当我们训练完成得到k棵树，我们要预测一个样本的分数，其实就是根据这个样本的特征，在每棵树中会落到对应的一个叶子节点，每个叶子节点就对应一个分数
3. 最后只需要将每棵树对应的分数加起来就是该样本的预测值。

显然，我们的目标是要使得树群的预测值
$y_i^{'}$
尽量接近真实值
y_i
，而且有尽量大的泛化能力。类似之前GBDT的套路，XGBoost也是需要将多棵树的得分累加得到最终的预测得分（每一次迭代，都在现有树的基础上，增加一棵树去拟合前面树的预测结果与真实值之间的残差）。

- Start from constant prediction, add a new function each time

$$
\begin{aligned}
\hat{y}_i^{(0)} &= 0 \\
\hat{y}_i^{(1)} &= f_1(x_i) = \hat{y}_i^{(0)} + f_1(x_i) \\
\hat{y}_i^{(2)} &= f_1(x_i) + f_2(x_i) = \hat{y}_i^{(1)} + f_2(x_i) \\
&\cdots \\
\hat{y}_i^{(t)} &= \sum_{k=1}^{t} f_k(x_i) = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)
\end{aligned}
$$

New function

Model at training round t

Keep functions added in previous round

那接下来，我们如何选择每一轮加入什么 f 呢？答案是非常直接的，选取一个 f 来使得我们的目标函数尽量最大地降低。这里 f 可以使用泰勒展开公式近似。

$$
\begin{aligned}
Obj^{(t)} &= \sum_{i=1}^{n} l(y_i, \hat{y}_i^{(t)}) + \sum_{i=1}^{t} \Omega(f_i) \\
&= \sum_{i=1}^{n} l\left(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)\right) + \Omega(f_t) + constant
\end{aligned}
$$

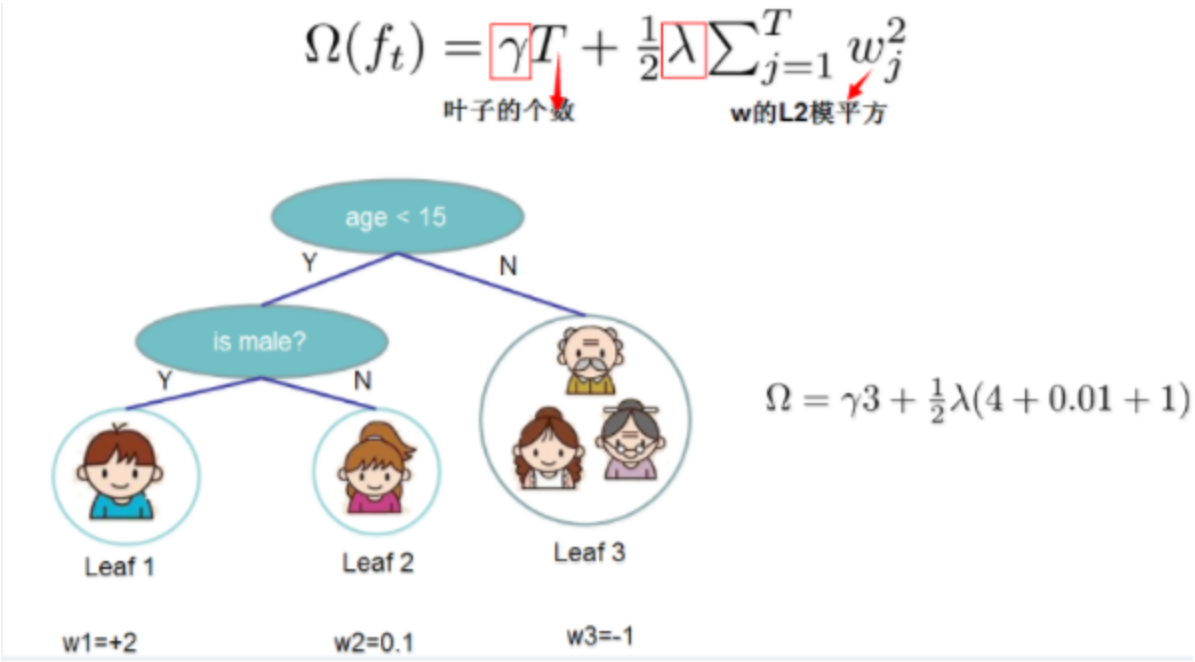
Goal: find f_t to minimize this

实质是把样本分配到叶子结点会对应一个obj，优化过程就是obj优化。也就是分裂节点到叶子不同的组合，不同的组合对应不同obj，所有的优化围绕这个思想展开。到目前为止我们讨论了目标函数中的第一个部分：训练误差。接下来我们讨论目标函数的第二个部分：正则项，即如何定义树的复杂度。

1.2 正则项：树的复杂度

XGBoost对树的复杂度包含了两个部分：

- 一个是树里面叶子节点的个数T
- 一个是树上叶子节点的得分w的L2模平方（对w进行L2正则化，相当于针对每个叶结点的得分增加L2平滑，目的是为了避免过拟合）



我们再来看一下XGBoost的目标函数（损失函数揭示训练误差 + 正则化定义复杂度）：

$$L(\phi) = \sum_i l(y_i^{'} - y_i) + \sum_k \Omega(f_t)$$

正则化公式也就是目标函数的后半部分，对于上式而言，

$y_i^{'}$

是整个累加模型的输出，正则化项∑kΩ(ft)是则表示树的复杂度的函数，值越小复杂度越低，泛化能力越强。

1.3 树该怎么长

很有意思的一个事是，我们从头到尾了解了xgboost如何优化、如何计算，但树到底长啥样，我们却一直没看到。很显然，一棵树的生成是由一个节点一分为二，然后不断分裂最终形成为整棵树。那么树怎么分裂的就成为了接下来我们要探讨的关键。对于一个叶子节点如何进行分裂，XGBoost作者在其原始论文中给出了一种分裂节点的方法：**枚举所有不同树结构的贪心法**

不断地枚举不同树的结构，然后利用打分函数来寻找出一个最优结构的树，接着加入到模型中，不断重复这样的操作。这个寻找的过程使用的就是**贪心算法**。选择一个feature分裂，计算loss function最小值，然后再选一个feature分裂，又得到一个loss function最小值，你枚举完，找一个效果最好的，把树给分裂，就得到了小树苗。

总而言之，XGBoost使用了和CART回归树一样的想法，利用贪婪算法，遍历所有特征的所有特征划分点，不同的是使用的目标函数不一样。具体做法就是分裂后的目标函数值比单子叶子节点

的目标函数的增益，同时为了限制树生长过深，还加了个阈值，只有当增益大于该阈值才进行分裂。从而继续分裂，形成一棵树，再形成一棵树，**每次在上一次的预测基础上取最优进一步分裂/建树。**

1.4 如何停止树的循环生成

凡是这种循环迭代的方式必定有停止条件，什么时候停止呢？简言之，设置树的最大深度、当样本权重和小于设定阈值时停止生长以防止过拟合。具体而言，则

1. 当引入的分裂带来的增益小于设定阀值的时候，我们可以忽略掉这个分裂，所以并不是每一次分裂loss function整体都会增加的，有点预剪枝的意思，阈值参数为（即正则项里叶子节点数T的系数）；
2. 当树达到最大深度时则停止建立决策树，设置一个超参数max_depth，避免树太深导致学习局部样本，从而过拟合；
3. 样本权重和小于设定阈值时则停止建树。什么意思呢，即涉及到一个超参数-最小的样本权重和min_child_weight，和GBM的 min_child_leaf 参数类似，但不完全一样。大意就是一个叶子节点样本太少了，也终止同样是防止过拟合；

2. XGBoost与GBDT有什么不同

除了算法上与传统的GBDT有一些不同外，XGBoost还在工程实现上做了大量的优化。总的来说，两者之间的区别和联系可以总结成以下几个方面。

1. GBDT是机器学习算法，XGBoost是该算法的工程实现。
2. 在使用CART作为基分类器时，XGBoost显式地加入了正则项来控制模 型的复杂度，有利于防止过拟合，从而提高模型的泛化能力。
3. GBDT在模型训练时只使用了代价函数的一阶导数信息，XGBoost对代 价函数进行二阶泰勒展开，可以同时使用一阶和二阶导数。
4. 传统的GBDT采用CART作为基分类器，XGBoost支持多种类型的基分类 器，比如线性分类器。
5. 传统的GBDT在每轮迭代时使用全部的数据，XGBoost则采用了与随机 森林相似的策略，支持对数据进行采样。
6. 传统的GBDT没有设计对缺失值进行处理，XGBoost能够自动学习出缺 失值的处理策略。

3. 为什么XGBoost要用泰勒展开，优势在哪里?

XGBoost使用了一阶和二阶偏导, 二阶导数有利于梯度下降的更快更准. 使用泰勒展开取得函数做自变量的二阶导数形式, 可以在不选定损失函数具体形式的情况下, 仅仅依靠输入数据的值就可以进行叶子分裂优化计算, 本质上也就把损失函数的选取和模型算法优化/参数选择分开了. 这种去耦合增加了XGBoost的适用性, 使得它按需选取损失函数, 可以用于分类, 也可以用于回归。

4. 代码实现

GitHub：点击进入

5. 参考文献

通俗理解kaggle比赛大杀器xgboost

> 作者：@mantchs
>
> GitHub：https://github.com/NLP-LOVE/ML-NLP
>
> 欢迎大家加入讨论！共同完善此项目！群号：【541954936】
> 
>