『我爱机器学习』集成学习（三）XGBoost

2018年5月20日 (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-xgboost/) hrwhisper (https://www.hrwhisper.me/author/hrsay/) Leave a comment (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-xgboost/#respond) 2,449 views

如果你打过诸如Kaggle、天池等数据挖掘的比赛，XGBoost的威名想必你也有所耳闻。

本文将详细介绍XGBoost相关内容，包括但不限于

- 泰勒公式
- XGBoost的推导
- XGBoost为什么快

泰勒公式

在介绍XGBoost前，首先要介绍一下泰勒公式，因为在之后的推导中会用到。假如你已经掌握，可以跳过本小节。

泰勒公式（Taylor’ s Formula）是一个用函数在某点的信息描述其**附近取值**的公式。其初衷是用多项式来近似表示函数在某点周围的情况。

比如在SVM的高斯核函数中，我们就用到了e^x在x=0处的展开：$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$ 。当然这个公式只对**0**附近的x有用，x离0越远，这个公式就越不准确。实际函数值和多项式的偏差称为泰勒公式的**余项**。

对于一般的函数，泰勒公式的系数的选择依赖于函数在**一点的各阶导数值**。函数$f(x)$在x_0处的基本形式如下：

$$
\begin{aligned}
f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n \\
&= f(x_0) + f^1(x_0)(x-x_0) + \frac{f^2(x_0)}{2}(x-x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n
\end{aligned} \tag{1-1}
$$

还有另外一种常见的写法，$x^{t+1} = x^t + \Delta x$，将$f(x^{t+1})$在x^t处进行泰勒展开，得：

$$
f(x^{t+1}) = f(x^t) + f^1(x^t)\Delta x + \frac{f^2(x^t)}{2}\Delta x^2 + \cdots
$$

如果你想更直观的了解泰勒公式，可以查看：如何通俗地解释泰勒公式？ – 马同学的回答 (https://www.zhihu.com/question/21149770/answer/111173412)

梯度下降法

梯度下降法其实可以泰勒公式来表示。假设要**最小化**损失函数$L(w)$, 我们知道，梯度下降法的过程为：

- 选取初值w^0
- 迭代更新$w^{t+1} = w^t - \eta L'(w)$

其中，η为学习率，一般设定为一个小的数，如0.1，当然，还有其它的可以变化的学习率的方式。

为什么这样是对的呢？用泰勒公式在w^t处一阶展开则可以表示为

$$
\begin{aligned}
L(w^{t+1}) &= L(w^t) + L'(w^t)(w^{t+1}-w^t) + R && R\text{为残差项} \\
&\approx L(w^t) + L'(w^t)(w^{t+1}-w^t) && \text{当}(w^{t+1}-w^t)\text{较小的时候，}R \approx 0 \\
&= L(w^t) + \eta v L'(w^t) && \text{设}w^{t+1}-w^t = \eta v, \eta\text{为学习率，}v\text{则为单位向量}
\end{aligned}
$$

要使得迭代后损失函数变小，即$L(w^{t+1}) < L(w^t)$，回想向量相乘的公式，
$\|v\| \cdot \|L'(w^t)\| \cdot cos\theta$, 则我们可以令v和$L'(w^t)$反向，这样可以让他们向量乘积最小，于是

$$
v = - \frac{L'(w^t)}{\|L'(w^t)\|}
$$

于是

$$
w^{t+1} = w^t - \eta \frac{L'(w^t)}{\|L'(w^t)\|}
$$

又因为$\|L'(w^t)\|$为标量，可以并入η中，即简化为：

$$
w^{t+1} = w^t - \eta L'(w^t) \tag{1-2}
$$

牛顿法

牛顿法其实是泰勒公式在w^t处二阶展开，即

$$
L(w^{t+1}) \approx L(w^t) + L'(w^t)(w^{t+1}-w^t) + \frac{L''(w^t)}{2}(w^{t+1}-w^t)^2 \tag{1-3}
$$

假设参数w为一维向量，若$L(w^{t+1})$极小，必然有其一阶导数为0，因此可以让L对w^{t+1}求偏导得

$$
\frac{\partial L}{\partial w^{t+1}} = L'(w^t) + (w^{t+1}-w^t)L''(w^t)
$$

令偏导为0，可得：

$$w^{t+1} = w^t - \frac{L'(w^t)}{L"(w^t)}$$

如果扩展到高维，即$\mathbf{w}$为向量，则

$$w^{t+1} = w^t - H^{-1}g \qquad H\text{为海森矩阵}，g = L'(w^t)$$

在数值分析中的做法

上面的做法是在最优化问题中的，求的是一阶导为0，即$f'(x) = 0$。

而在数值分析中，想要求的是方程式的根，即$f(x) = 0$，我们只需要进行一阶展开,并令其为0，得：

$$f(x^{t+1}) = f(x^t) + f'(x^t)(x^{t+1} - x^t) = 0$$

于是有：

$$x^{t+1} = x^t - \frac{f(x^t)}{f'(x^t)}$$

这就是迭代的公式。

如果你对这两个困惑的话，可以参考wiki百科：

- Newton’ s method (https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method)
- Newton’ s method in optimization (https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_method_in_optimization)

XGBoost

XGBoost其实也是GBDT的一种，等下你会发现，还是加性模型和前向优化算法。

在正式介绍之前，首先讲点别的。

在有监督学习中，可以分为：**模型，参数 、目标函数和学习方法。**

- 模型即给定输入x_i如何预测输出y_i，而这个y可以很多种形式，如回归，概率，类别、排序等
- 参数即比如线性回归的w
- 目标函数可以分为损失函数+正则 $Obj(\Theta) = L(\Theta) + \Omega(\Theta)$
  - 损失函数：如平方误差等，告诉我们模型拟合数据的情况。 => Bias
  - 正则项：惩罚复杂的模型，鼓励简单的模型。 => Variance
- 模型学习方法即解决给定目标函数后怎么学的问题。

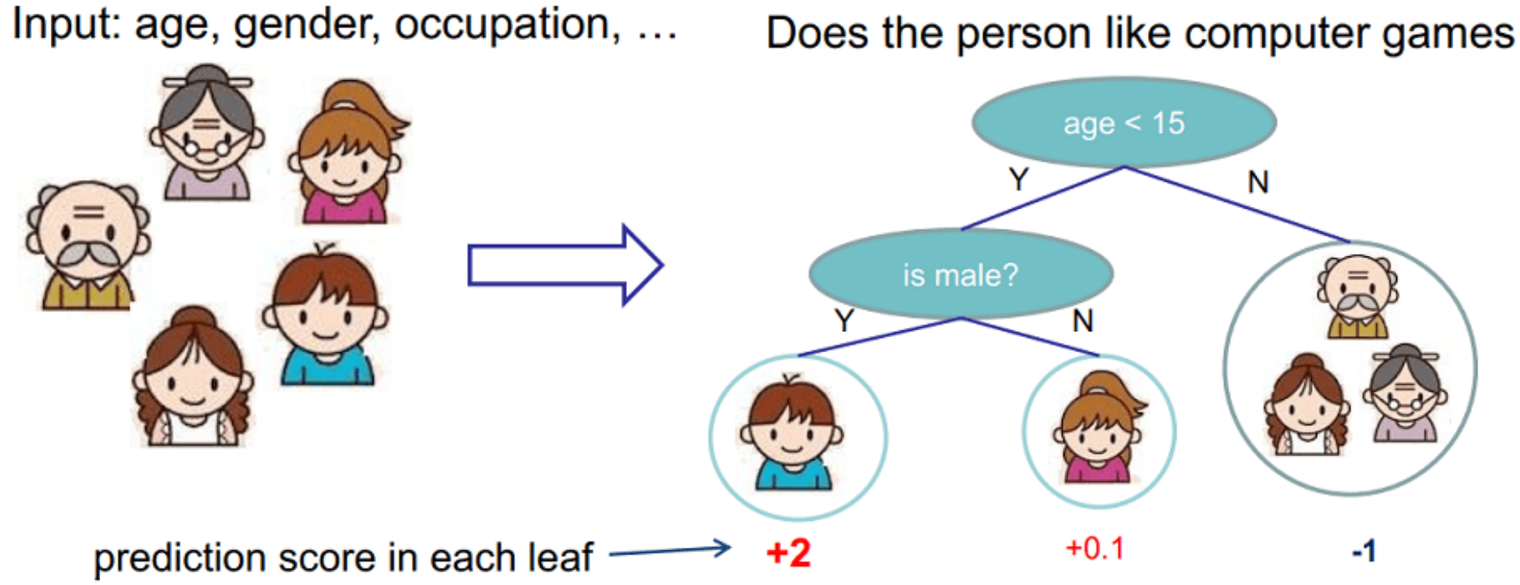
讲这三个方面的内容是为什么呢？ 这三个方面的内容指导着XGBoost整个系统的设计！下面你可以带着这三个看看XGBoost是怎么做的！

接下来开始XGBoost之旅~ 本小节主要是根据陈天奇大牛的博文以及PPT来进行介绍。

CART

前面讲过分类回归树CART，这里就当复习，过一遍就好。

假设要判断一个人是否喜欢电脑游戏，输入为年龄，性别职业等特征。可以得到如下的**回归树**:

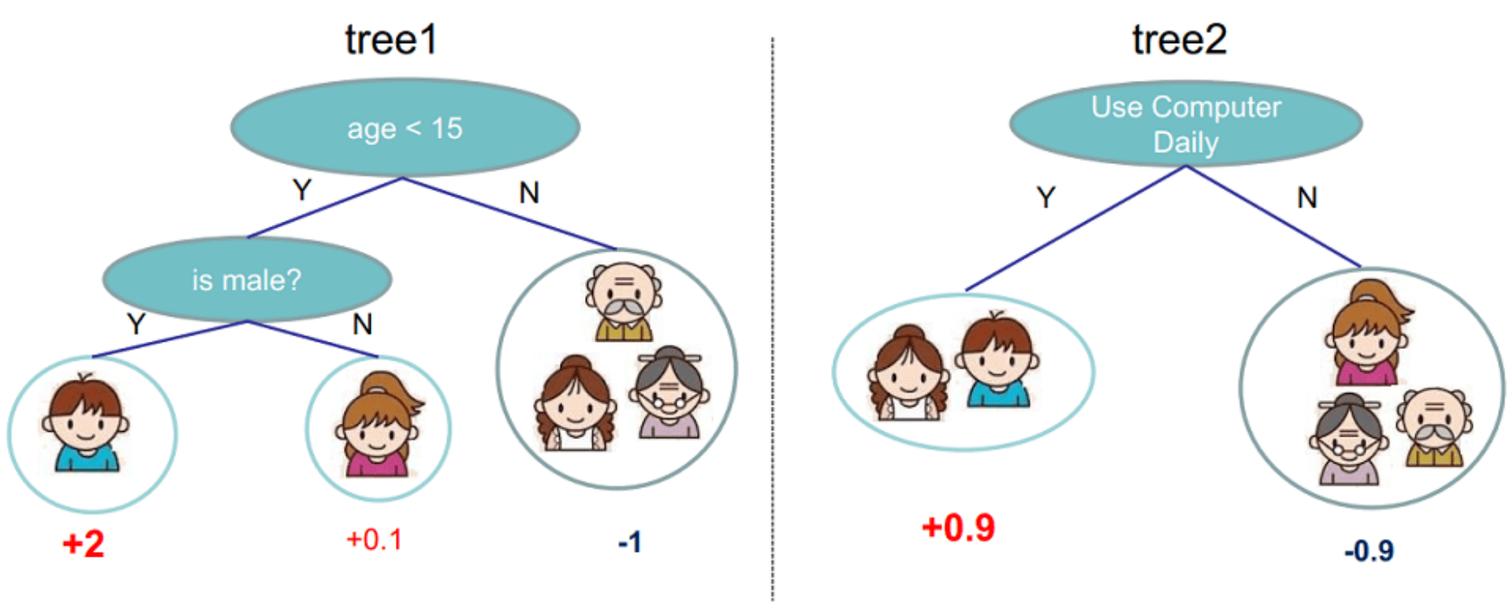


在叶子节点上会有一个分数，而这个分数我们可以做很多事情，诸如进行回归，映射成概率进行分类、排序等。

Tree ensemble

单棵CART拟合能力有限，想想我们之前的集成学习，可以使用多棵树！

比如下图用两棵树一起进行预测，样本的预测结果就是两棵树的和：



而“一起预测”的学习方法又分为随机森林（Random Forest）和提升树（Boosted tree）。这是不是把前面的集成学习的知识串起来了？这里，多棵树即我们的**模型**：

$$\hat{y}_i = \sum_{t=1}^{K} f_t(x_i), \quad f_t \in \mathcal{F}$$

这里假设有K棵树，f是回归树，而$\mathcal{F}$ 对应了所有回归树组成的函数空间。

那么模型的**参数**是什么呢？就是树的结构，以及每个叶子节点上预测的分数。或者说就是一棵棵的树。

模型学习

那么如何**学习模型**呢？这个问题的通用答案就是：**定义目标函数，然后去优化目标函数!**

目标函数

因此，这里定义目标函数如下，并带了正则项：

$$Obj(\Theta) = \sum_{i=1}^{N} l(y_i, \hat{y}_i) + \sum_{j=1}^{t} \Omega(f_j)\ , \quad f_j \in \mathcal{F} \tag{2-1}$$

那么，如何优化上面的目标函数？我们不能用诸如梯度下降的方法，因为f是树，而非数值型的向量。

这时候就要想起我们的**前向分步算法**，即贪心法找局部最优解：

$$\hat{y}_i^{(t)} = \sum_{j=1}^{t} f_j(x_i) = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)$$

因此，我们每一步找一个使得我们的损失函数降低最大的f（贪心法体现在这），因此我们的目标函数可以写为

$$\begin{aligned} Obj^{(t)} &= \sum_{i=1}^{N} l(y_i, \hat{y}_i^{(t)}) + \sum_{j=1}^{t} \Omega(f_j) \\ &= \sum_{i=1}^{N} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(\mathbf{x_i})) + \Omega(f_t) + constant \\ &= \sum_{i=1}^{N} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(\mathbf{x_i})) + \Omega(f_t) \end{aligned} \tag{2-2}$$

这里简单解释一下上式的意思，第1行的目标函数即在第t轮，每个样本的损失+t轮每棵树的正则项。而在第t轮，前面的t-1轮的正则项都相当于常数，可以不做考虑。

假设损失函数使用的是平方损失，则式2-2写为：

$$
\begin{aligned}
Obj^{(t)} &= \sum_{i=1}^{N}\left(y_i - \left(\hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(\mathbf{x_i})\right)\right)^2 + \Omega(f_t) \\
&= \sum_{i=1}^{N}(\underbrace{y_i - \hat{y}_i^{(t-1)}}_{\text{残差}} - f_t(\mathbf{x_i}))^2 + \Omega(f_t)
\end{aligned}
$$

这就是之前我们GBDT中使用平方损失，然后每一轮拟合的残差。

更一般的，我们之前使用“负梯度”，而现在，我们采用泰勒展开来定义一个近似的目标函数:

$$
\begin{aligned}
Obj^{(t)} &= \sum_{i=1}^{N} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(\mathbf{x_i})) + \Omega(f_t) \\
&= \sum_{i=1}^{N}\left(l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + g_i f_t(\mathbf{x_i}) + \frac{1}{2}h_i f_t^2(\mathbf{x_i})\right) + \Omega(f_t) \qquad (2\text{-}3)
\end{aligned}
$$

分享到：

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

移除对当前t轮来说是常数项的$l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)})$得到:

$$
Obj^{(t)} = \sum_{i=1}^{N}\left(g_i f_t(\mathbf{x_i}) + \frac{1}{2}h_i f_t^2(\mathbf{x_i})\right) + \Omega(f_t) \qquad (2\text{-}4)
$$

可以发现，2-4所示的目标函数**只依赖每个数据点在误差函数上的一阶导数和二阶导数。**

之所以要这么推导，是因为使得工具更一般化，陈天奇的解释原话如下:

> 因为这样做使得我们**可以很清楚地理解整个目标是什么，**并且一步一步推导出如何进行树的学习。

> 这一个抽象的形式对于实现机器学习工具也是非常有帮助的。传统的GBDT可能大家可以理解如优化平方残差，但是这样一个形式包含可所有可以求导的目标函数。也就是说有了这个形式，我们写出来的代码可以用来求解包括回归，分类和排序的各种问题，**正式的推导可以使得机器学习的工具更加一般。**

正则项

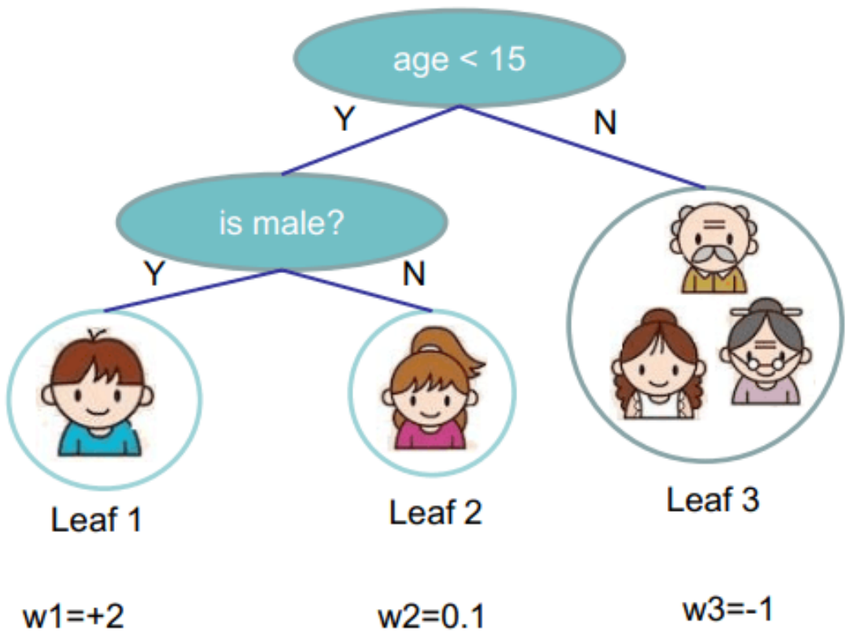
之前讨论了目标函数中训练误差的部分，接下来讨论树的复杂度定义，即正则项。

什么指标能衡量树的复杂度呢？如树的深度，内部节点个数，**叶子节点个数(T)，叶节点分数(W)**...

XGBoost采用衡量树复杂度的方式为:一棵树里面**叶子节点的个数T**，以及每棵树**叶子节点上面输出分数w**的平方和(相当于L2正则)：

$$\Omega(f_t) = \gamma T + \frac{1}{2}\lambda \sum_{j=1}^{T} w_j^2 \tag{2-5}$$

一个例子如下：



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

完整的目标函数

将2-4和2-5合起来，就是：

$$Obj^{(t)} = \underbrace{\sum_{i=1}^{N}\left(g_i f_t(\mathbf{x_i}) + \frac{1}{2}h_i f_t^2(\mathbf{x_i})\right)}_{\text{对样本累加}} + \gamma T + \underbrace{\frac{1}{2}\lambda\sum_{j=1}^{T} w_j^2}_{\text{对叶结点累加}}$$

第一项是对样本的累加，而最后一项是对叶结点的累加，我们可以进行改写，将其合并起来。

定义q函数将输入**x**映射到某个叶节点上，则$f_t(\mathbf{x}) = w_{q(\mathbf{x})}$，此外，定义每个叶子节点j上的样本集合为$I_j = \{i|q(x_i) = j\}$，则目标函数可以改写为：

$$\begin{aligned}
Obj^{(t)} &= \sum_{i=1}^{N}\left(g_i f_t(\mathbf{x_i}) + \frac{1}{2}h_i f_t^2(\mathbf{x_i})\right) + \gamma T + \frac{1}{2}\lambda\sum_{j=1}^{T} w_j^2 \\
&= \sum_{i=1}^{N}\left(g_i w_{q(\mathbf{x_i})} + \frac{1}{2}h_i w_{q(\mathbf{x_i})}^2\right) + \gamma T + \frac{1}{2}\lambda\sum_{j=1}^{T} w_j^2 \\
&= \sum_{j=1}^{T}\left(\sum_{i\in I_j} g_i w_j + \frac{1}{2}\sum_{i\in I_j} h_i w_j^2\right) + \gamma T + \frac{1}{2}\lambda\sum_{j=1}^{T} w_j^2 \\
&= \sum_{j=1}^{T}\left(G_j w_j + \frac{1}{2}(H_j + \lambda) w_j^2\right) + \gamma T \qquad (2\text{-}6)
\end{aligned}$$

这就得到了我们的完整的目标函数，其中，$G_j = \sum_{i\in I_j} g_i \quad H_j = \sum_{i\in I_j} h_i$

因此，现在要做的是两件事：

1. 确定树的结构, 这样，这一轮的目标函数就确定了下来

2. 求使得当前这一轮(第t轮)的目标函数最小的叶结点分数w。(Obj代表了当我们指定一个树的结构的时候，我们在目标上面最多减少多少，也称为**结构分数**，structure score)

假设已经知道了树的结构，那么第2件事情是十分简单的，直接对w求导，使得导数为0，就得到每个叶结点的预测分数为：

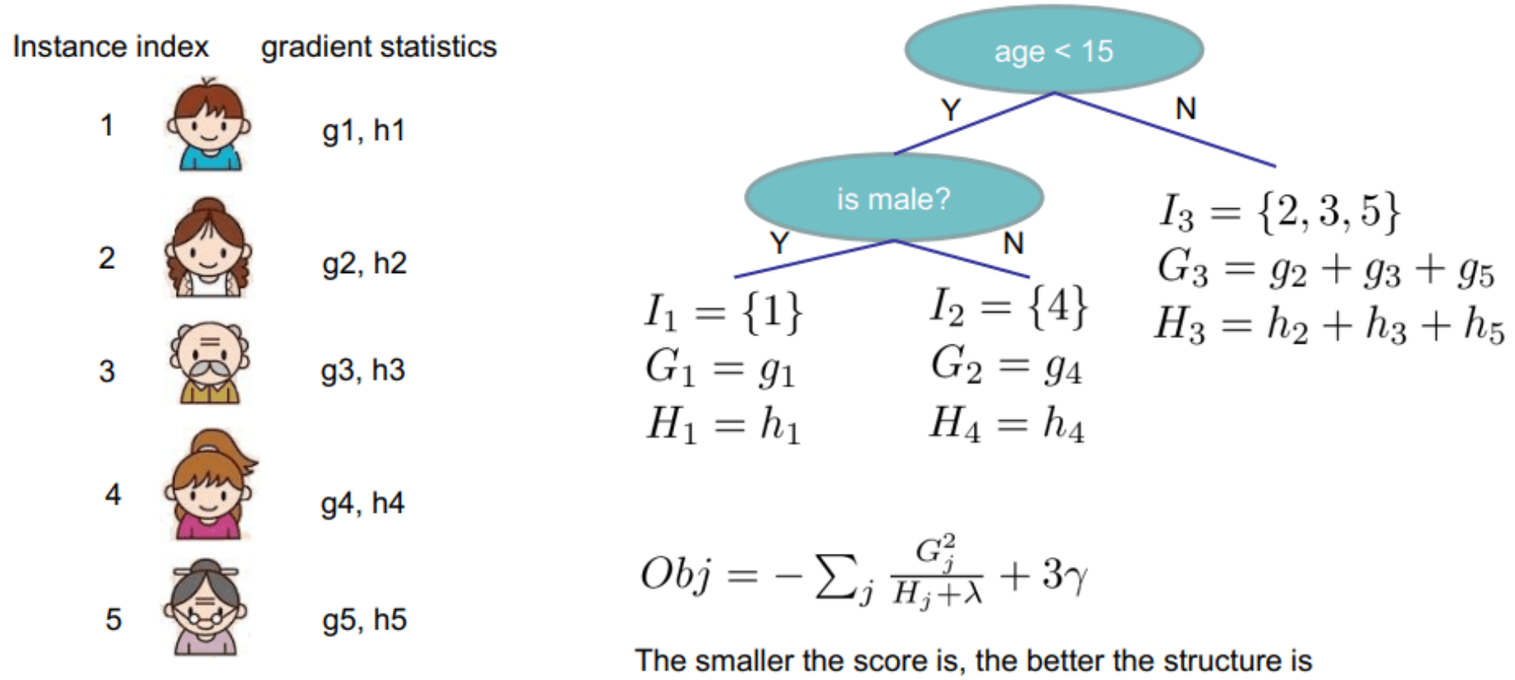
$$w_j = -\frac{G_j}{H_j+\lambda} \tag{2-7}$$

带入2-6得到最小的结构分数为：

$$\begin{aligned} Obj^{(t)} &= \sum_{j=1}^{T}\left(G_j w_j + \frac{1}{2}(H_j+\lambda)w_j^2\right) + \gamma T \\ &= \sum_{j=1}^{T}\left(-\frac{G_j^2}{H_j+\lambda} + \frac{1}{2}\frac{G_j^2}{H_j+\lambda}\right) + \gamma T \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{T}\left(\frac{G_j^2}{H_j+\lambda}\right) + \gamma T \end{aligned} \tag{2-8}$$

2-8所表示的目标函数越小越好。

一个结构分数计算例子如下图：



树的结构确定

接下来要解决的就是上面提到的问题，即如何确定树的结构。

暴力枚举所有的树结构，然后选择结构分数最小的。 树的结构太多了，这样枚举一般不可行。

通常采用贪心法，每次尝试分裂一个叶节点，**计算分裂后的增益**，选增益最大的。这个方法在之前的决策树算法中大量被使用。而增益的计算方式比如ID3的信息增益，C4.5的信息增益率，CART的Gini系数等。那XGBoost呢?

回想式子2-8标红色的部分，衡量了每个叶子节点对总体损失的贡献，我们希望目标函数越小越好，因此红色的部分越大越好。

XGBoost使用下面的公式计算增益：

$$Gain = \frac{1}{2}[\underbrace{\frac{G_L^2}{H_L+\lambda}}_{\text{左子树分数}} + \underbrace{\frac{G_R^2}{H_R+\lambda}}_{\text{右子树分数}} - \underbrace{\frac{(G_L+G_R)^2}{H_L+H_R+\lambda}}_{\text{分裂前分数}}] - \underbrace{\gamma}_{\text{新叶节点复杂度}} \tag{2-9}$$

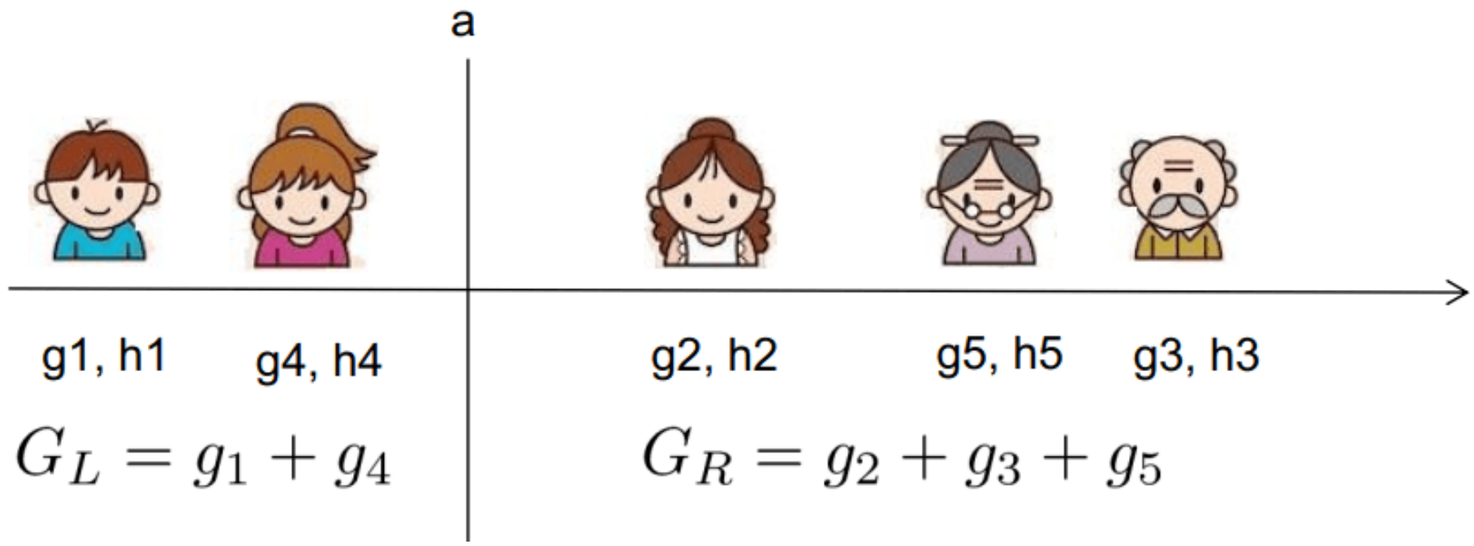
式2-9即2-8红色部分的**分裂后 – 分裂前**的分数。**Gain值越大，说明分裂后能使目标函数减少越多，就越好。**

因此，每次分裂，枚举所有可能的分裂方案，就和CART中回归树进行划分一样，要枚举所有特征和特征的取值。该算法称为**Exact Greedy Algorithm**，如下图所示：

Algorithm 1: Exact Greedy Algorithm for Split Finding

Input: I, instance set of current node
Input: d, feature dimension
$gain \leftarrow 0$
$G \leftarrow \sum_{i\in I} g_i,\ H \leftarrow \sum_{i\in I} h_i$
for $k = 1$ ***to*** m **do**
  $G_L \leftarrow 0,\ H_L \leftarrow 0$
  for j *in sorted*$(I,$ *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
end
Output: Split with max score

假设现在枚举的是年龄特征x_j。现在要考虑划分点a，因此要计算枚举$x_j < a$ 和 $a \leq x_j$ 的导数和：



可以看出，对于一个特征，对特征取值排完序后，枚举所有的分裂点a，只要从左到右扫描一遍就可以枚举出所有分割的梯度G_L和G_R，然后用式2-9计算即可。这样假设树的高度为H，特征数d，则复杂度为 $O(Hdn \log n)$。 其中，排序为$O(n \log n)$，每个特征都要排序所以乘以d，每一层都要这样一遍，所以乘以高度H。这个仍可以继续优化（之后再讲）。

此外需要注意的是：**分裂不一定会使得情况变好**，因为有一个引入新叶子的惩罚项γ，优化这个目标相当于进行树的剪枝。当引入的分裂带来的增益小于一个阀值的时候，不进行分裂操作。

再次回到之前说的为啥这么推导：

> 大家可以发现，当我们正式地推导目标的时候，**像计算分数和剪枝这样的策略都会自然地出现，而不再是一种因为启发式而进行的操作了**（反观决策树充满着启发式）。

XGBoost 一些trick

本小节介绍XGBoost的一些trick，最后总结XGBoost快的原因。

步长 step-size

同之前的GBDT一样，XGBoost也可以加入步长η（有的也叫收缩率Shrinkage），这也是防止过拟合的好方法：

$$\hat{y}_i^t = \hat{y}_i^{(t-1)} + \eta f_t(x_i) \tag{3-1}$$

通常步长 η 取值为0.1。当然GBDT也可以采用这个。

行、列抽样

XGBoost借鉴随机森林也使用了列抽样(在每一次分裂中使用特征抽样)，进一步防止过拟合，并加速训练和预测过程。

此外，在实现中还有行抽样（样本抽样）。

树节点划分算法 – Approximate Algorithm

前面提到过，XGBoost每一步选能使分裂后增益最大的分裂点进行分裂。而分裂点的选取之前是枚举所有分割点，这称为精确的贪心法（Exact Greedy Algorithm）.

当数据量十分庞大，以致于不能全部放入内存时，Exact Greedy 算法就会很慢。因此XGBoost引入了近似的算法。

简单的说，就是根据特征k的分布来确定l个候选切分点$S_k = \{s_{k1}, s_{k2}, \cdots s_{kl}\}$，然后根据这些候选切分点把相应的样本放入对应的**桶**中，对每个桶的G, H进行累加。最后在候选切分点集合上贪心查找，和Exact Greedy Algorithm类似。该算法描述如下：

Algorithm 2: Approximate Algorithm for Split Finding

for $k = 1$ ***to*** m **do**

  Propose $S_k = \{s_{k1}, s_{k2}, \cdots s_{kl}\}$ by percentiles on feature k.

  Proposal can be done per tree (global), or per split(local).

end

for $k = 1$ ***to*** m **do**

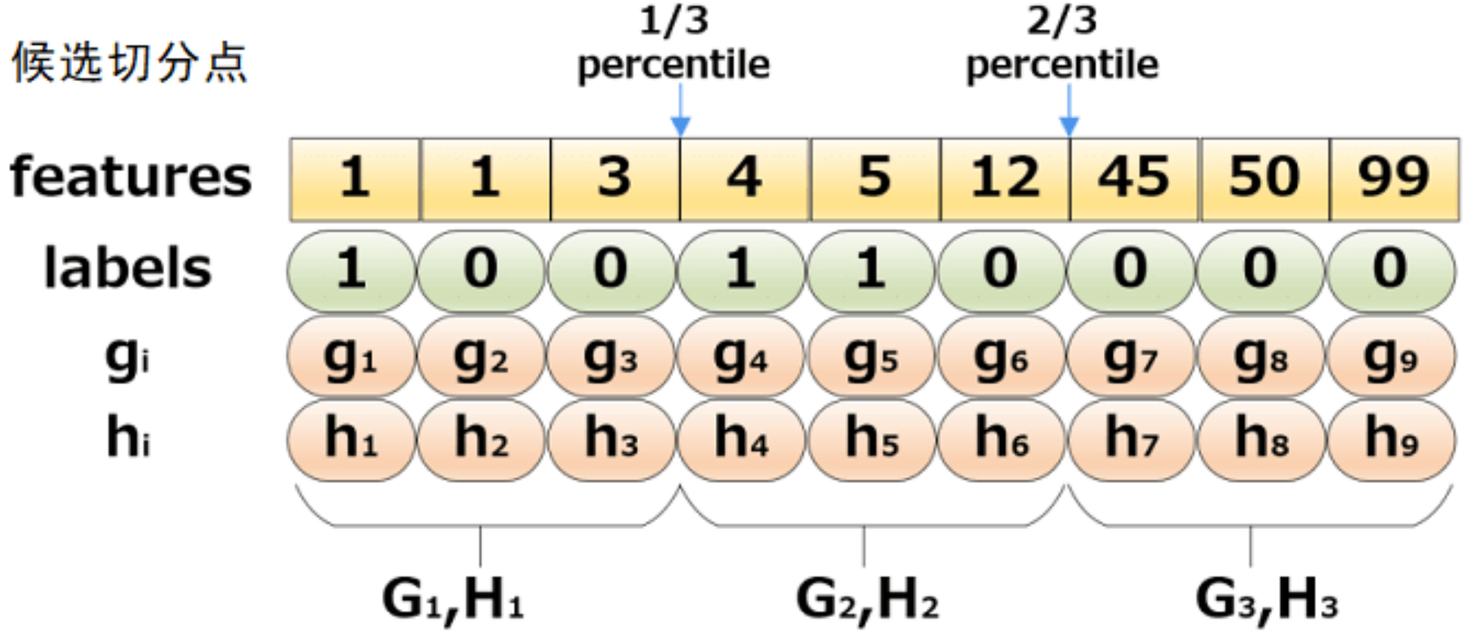
  $G_{kv} \leftarrow= \sum_{j \in \{j | s_{k,v} \geq \mathbf{x}_{jk} > s_{k,v-1}\}} g_j$

  $H_{kv} \leftarrow= \sum_{j \in \{j | s_{k,v} \geq \mathbf{x}_{jk} > s_{k,v-1}\}} h_j$

end

Follow same step as in previous section to find max score only among proposed splits.

给定了候选切分点后，一个例子为：



$$Gain = \max\{Gain, \frac{G_1^2}{H_1+\lambda} + \frac{G_{23}^2}{H_{23}+\lambda} - \frac{G_{123}^2}{H_{123}+\lambda} - \gamma,$$
$$\frac{G_{12}^2}{H_{12}+\lambda} + \frac{G_3^2}{H_3+\lambda} - \frac{G_{123}^2}{H_{123}+\lambda} - \gamma\}$$

那么，现在有两个问题：

1. 如何选取候选切分点$S_k = \{s_{k1}, s_{k2}, \cdots s_{kl}\}$呢?
2. 什么时候进行候选切分点的选取?

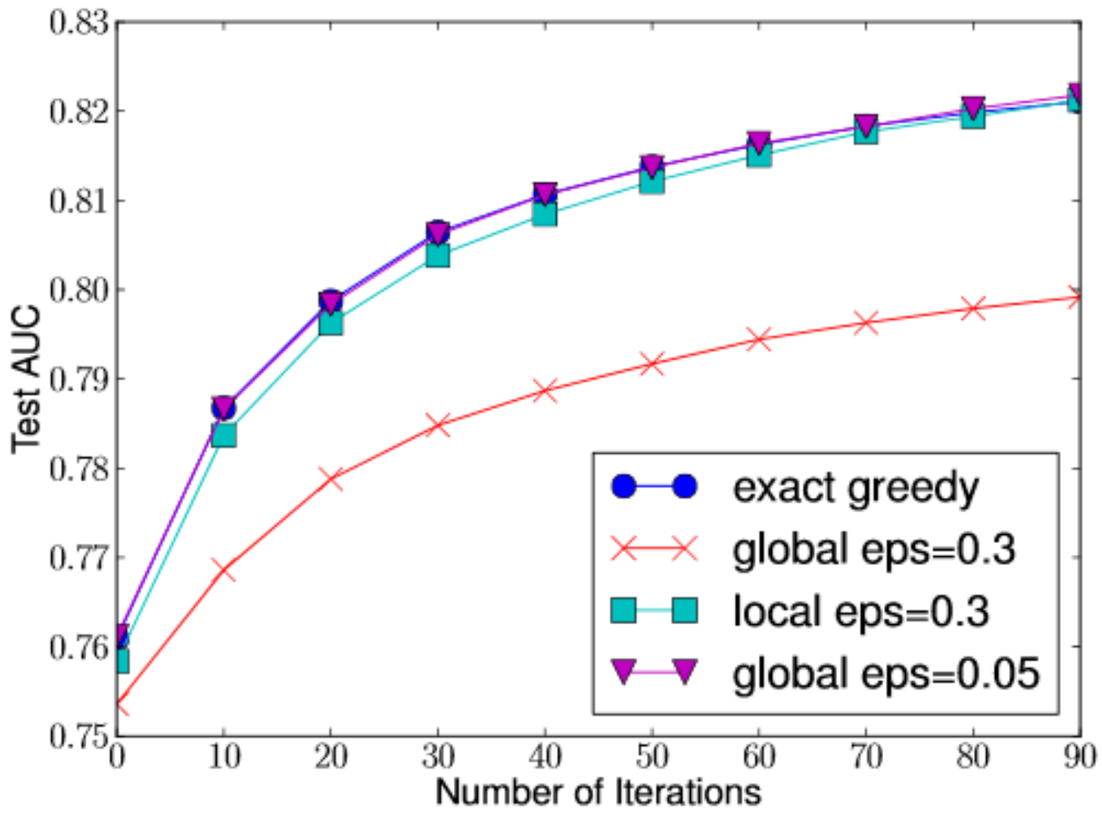
第1个问题在下一小节说明，先回答第2个问题。

分界点选取时机

对于问题2，XGBoost有两种策略，**全局策略（Global）和局部策略(Local)**

- Global： **学习每棵树前**， 提出候选切分点
- Local： **每次分裂前**， 重新提出候选切分点

一个对比如下图：



桶的个数等于 1 / eps， 可以看出:

- 全局切分点的个数够多的时候，和Exact greedy算法性能相当。
- 局部切分点个数不需要那么多，因为每一次分裂都重新进行了选择。

切分点的选取 – Weighted Quantile Sketch

对于问题1，可以采用分位数，也可以直接构造梯度统计的近似直方图等。

> Notably, it is also possible to directly construct approximate histograms of gradient statistics [22]. It is also possible to use other variants of binning strategies instead of quantile.

先回答一下什么是分位数，WIKI百科上是这么说的

> **quantiles** are cut points dividing the range of a probability distribution into contiguous intervals with equal probabilities, or dividing the observations in a sample in the same way.
>
> 即把概率分布划分为连续的区间，每个区间的概率相同。

以统计学常见的四分位数为例，就是：

> 四分位数（Quartile）把所有数值由小到大排列并分成四等份，处于三个分割点位置的数值就是四分位数。
>
> 1）**第一四分位数**(Q1)，又称“较小四分位数”，等于该样本中所有数值由小到大排列后第25%的数字；
>
> 2）**第二四分位数**(Q2)，又称“中位数”，等于该样本中所有数值由小到大排列后第50%的数字；
>
> 3）**第三四分位数**(Q3)，又称“较大四分位数”，等于该样本中所有数值由小到大排列后第75%的数字。

可以看出，简单的分位数就是先把数值进行排序，然后根据你采用的几分位数把数据分为几份即可。

而XGBoost不单单是采用简单的分位数的方法，而是**对分位数进行加权（使用二阶梯度h）**，称为：Weighted Quantile Sketch。PS:上面的那个例子采用的是没有使用二阶导加权的分位数。

对特征k构造multi-set 的数据集：$D_k = (x_{1k}, h_1), (x_{2k}, h_2), \ldots, (x_{nk}, h_n)$, 其中 x_{ik} 表示样本i的特征k的取值，而h_i则为对应的二阶梯度。

可以定义一个rank function为：

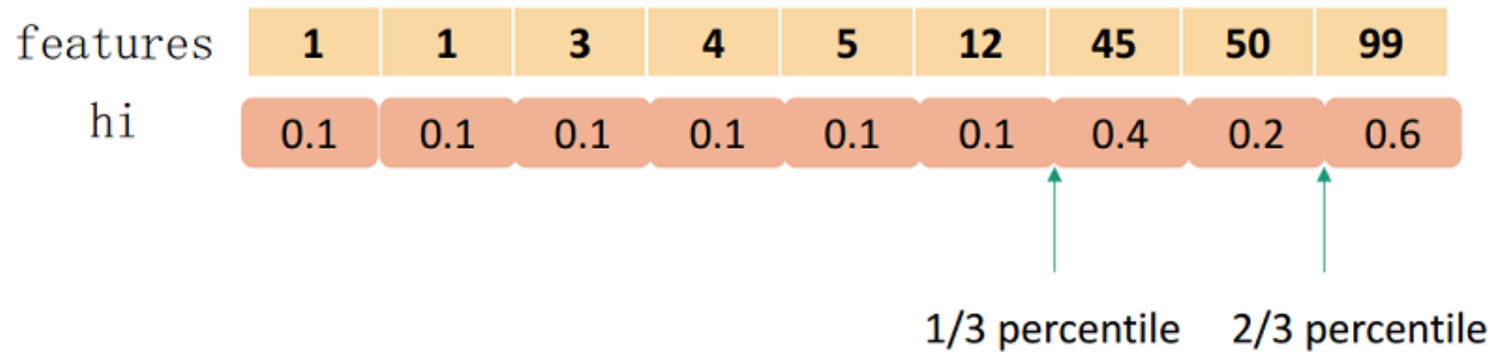
$$r_k(z) = \frac{1}{\sum_{(x,h)\in D_k} h} \sum_{(x,h)\in D_k, x<z} h \tag{3-2}$$

式3-2表达了第k个特征小于z的样本比例，和之前的分位数挺相似，不过这里是按照二阶梯度进行累计。而候选切分点$\{s_{k1}, s_{k2}, \cdots, s_{kl}\}$要求：

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

太数学了？用大白话说就是让相邻两个候选分裂点相差不超过某个值ε。因此，总共会得到$1/\varepsilon$个切分点。

一个例子如下：



要切分为3个，总和为1.8，因此第1个在0.6处，第2个在1.2处。

那么，**为什么要用二阶梯度加权**？将前面我们泰勒二阶展开后的目标函数2-4进行配方：

$$
\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{N}\left(g_i f_t(\mathbf{x_i})+\frac{1}{2}h_i f_t^2(\mathbf{x_i})\right)+\Omega(f_t)\\
=&\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}h_i\left(2\frac{g_i}{h_i}f_t(\mathbf{x_i})+f_t^2(\mathbf{x_i})\right)+\Omega(f_t)\\
=&\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}h_i\left(\frac{g_i^2}{h_i^2}+2\frac{g_i}{h_i}f_t(\mathbf{x_i})+f_t^2(\mathbf{x_i})\right)+\Omega(f_t)\\
=&\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}h_i\left(f_t(\mathbf{x_i})-(-\frac{g_i}{h_i})\right)^2+\Omega(f_t) \qquad \text{(3-3)}
\end{aligned}
$$

推导第三行可以加入$\frac{g_i^2}{h_i^2}$是因为g_i和h_i是上一轮的损失函数求导，是常量。

从式3-3可以看出，**就像是标签为$-g_i/h_i$，权重为h_i的平方损失，因此用h_i加权。**

PS: 原论文的g_i/h_i符号错了，我推导的时候觉得很奇怪，查了很多介绍XGBoost的资料，都没有说明如何推导，直接把原公式一贴，这是很不好的。最后看到了Stack Exchange上的回答：

> The second equation should have its **sign reversed**, as in:
>
> $$
> \begin{aligned}
> &\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}h_i[f_t(x_i)-(-g_i/h_i)]^2+constant\\
> =&\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}h_i[f_t^2(x_i)+2\frac{f_t(x_i)g_i}{h_i}+(g_i/h_i)^2]\\
> =&\sum_{i=1}^{N}[g_i f_t(x_i)+\frac{1}{2}h_i f_t^2(x_i)+\frac{gi^2}{2h_i}]
> \end{aligned}
> $$

> The last term is indeed constant: remember that the g_i and h_i are determined by the previous iteration, so they’re constant when trying to set f_t.
>
> So, now we can claim “this is exactly weighted squared loss with labels $-g_i/h_i$ and weights h_i
>
> Credit goes to Yaron and Avi from my team for explaining me this.
>
> ——from Need help understanding xgboost’s approximate split points proposal (https://datascience.stackexchange.com/questions/10997/need-help-understanding-xgboosts-approximate-split-points-proposal)

稀疏值处理 – Sparsity-aware Split Finding

在真实世界中，我们的特征往往是稀疏的，可能的原因有：

1. 数据缺失值
2. 大量的0值（比如统计出现的）
3. 进行了One-hot 编码

XGBoost能对缺失值自动进行处理，其思想是**对于缺失值自动学习出它该被划分的方向**（左子树or右子树）：

Algorithm 3: Sparsity-aware Split Finding

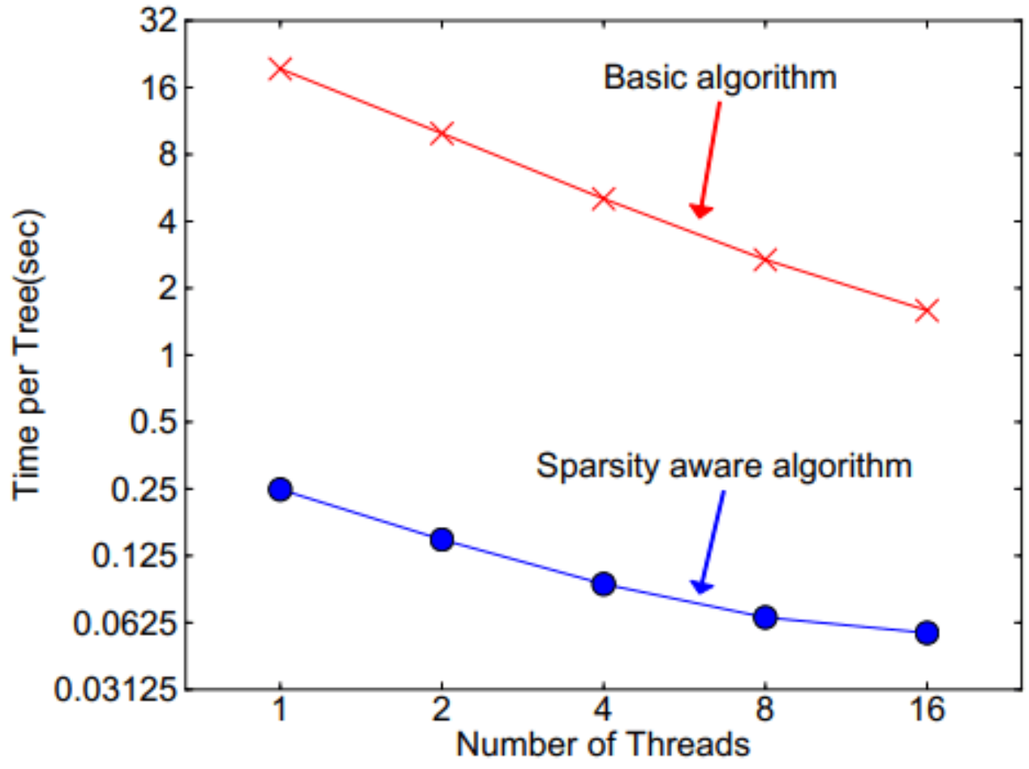
Input: I, instance set of current node
Input: $I_k = \{i \in I | x_{ik} \neq \text{missing}\}$
Input: d, feature dimension
Also applies to the approximate setting, only collect statistics of non-missing entries into buckets
$gain \leftarrow 0$
$G \leftarrow \sum_{i \in I}, g_i, H \leftarrow \sum_{i \in I} h_i$
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

注意，**上述的算法只遍历非缺失值。**划分的方向怎么学呢？很naive但是很有效的方法：

1. 让特征k的所有缺失值的都到右子树，然后和之前的一样，枚举划分点，计算最大的gain

2. 让特征k的所有缺失值的都到左子树，然后和之前的一样，枚举划分点，计算最大的gain

这样最后求出最大增益的同时，也知道了缺失值的样本应该往左边还是往右边。使用了该方法，相当于比传统方法多遍历了一次，但是它只在非缺失值的样本上进行迭代，因此其复杂度与非缺失值的样本成线性关系。在Allstate-10k数据集上，比传统方法快了50倍:

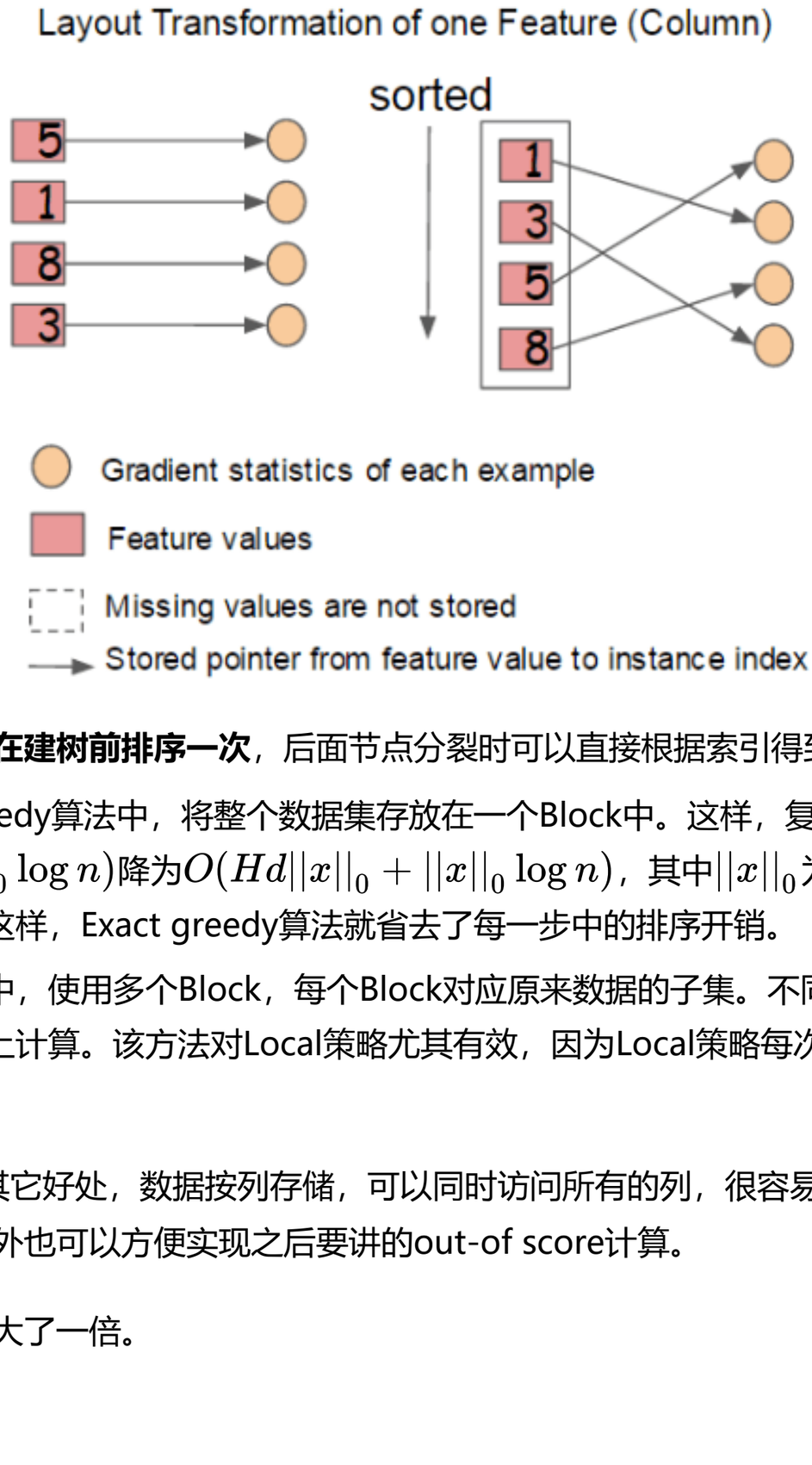


分块并行 – Column Block for Parallel Learning

在建树的过程中，最耗时是找最优的切分点，而这个过程中，最耗时的部分是将数据排序。为了减少排序的时间，提出Block结构存储数据。

- Block中的数据以稀疏格式**CSC**进行存储
- Block中的**特征进行排序**（不对缺失值排序）
- Block 中特征还需存储指向样本的**索引**，这样才能根据特征的值来取梯度。

- 一个Block中存储一个或多个特征的值



可以看出，**只需在建树前排序一次**，后面节点分裂时可以直接根据索引得到梯度信息。

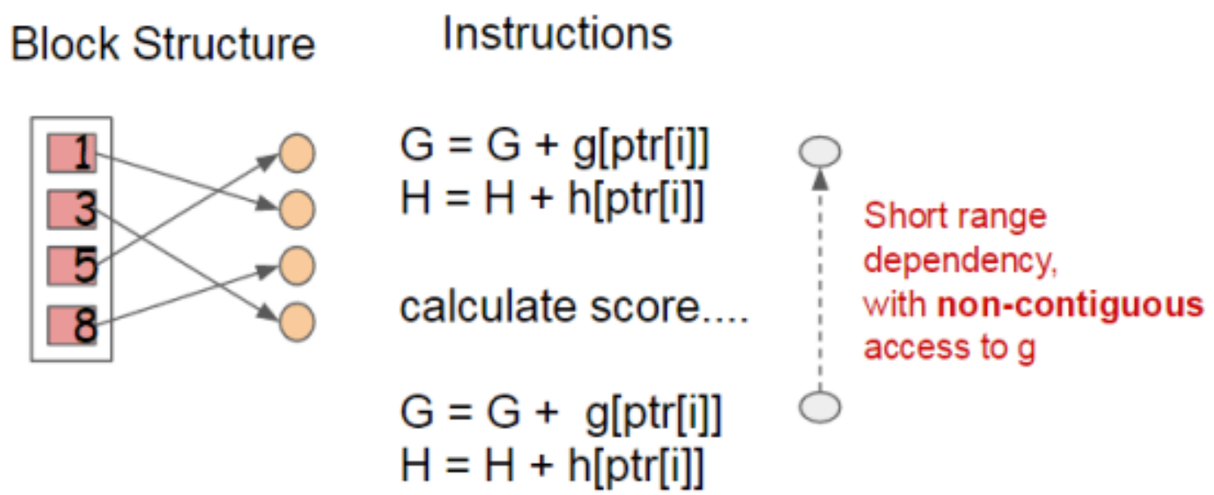
- 在Exact greedy算法中，将整个数据集存放在一个Block中。这样，复杂度从原来的$O(Hd||x||_0 \log n)$降为$O(Hd||x||_0 + ||x||_0 \log n)$，其中$||x||_0$为训练集中非缺失值的个数。这样，Exact greedy算法就省去了每一步中的排序开销。
- 在近似算法中，使用多个Block，每个Block对应原来数据的子集。不同的Block可以在不同的机器上计算。该方法对Local策略尤其有效，因为Local策略每次分支都重新生成候选切分点。

Block结构还有其它好处，数据按列存储，可以同时访问所有的列，很容易实现并行的寻找分裂点算法。此外也可以方便实现之后要讲的out-of score计算。

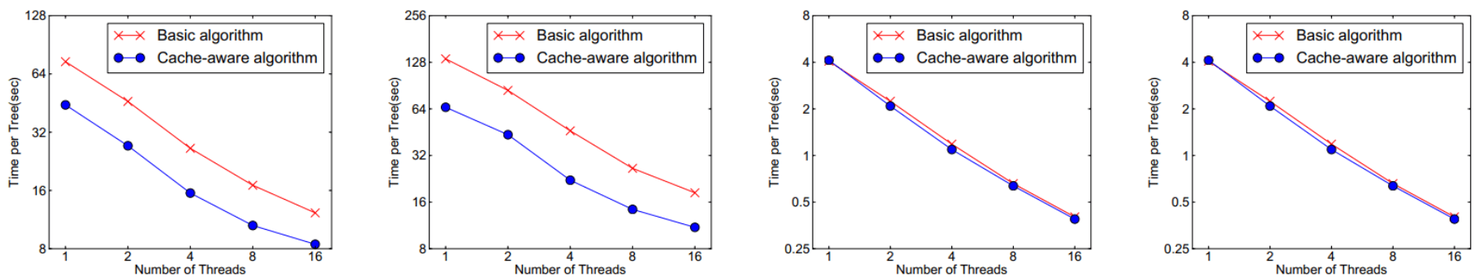
缺点是空间消耗大了一倍。

缓存优化 – Cache-aware Access

使用Block结构的一个缺点是取梯度的时候，是通过索引来获取的，而这些梯度的获取顺序是按照特征的大小顺序的。这将导致**非连续**的内存访问，可能使得CPU cache缓存命中率低，从而影响算法效率。

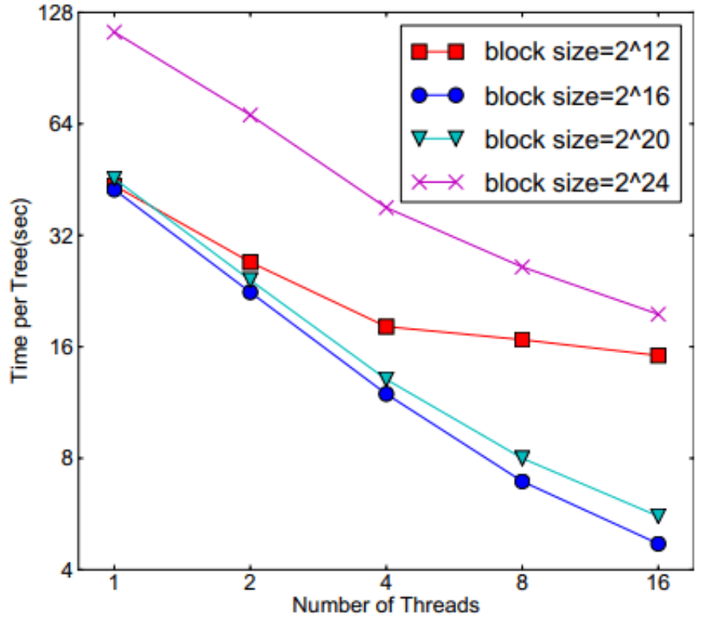


因此，对于exact greedy算法中, 使用**缓存预取**。具体来说，对每个线程分配一个连续的buffer，读取梯度信息并存入Buffer中（这样就实现了非连续到连续的转化），然后再统计梯度信息。该方式在训练样本数大的时候特别有用，见下图：

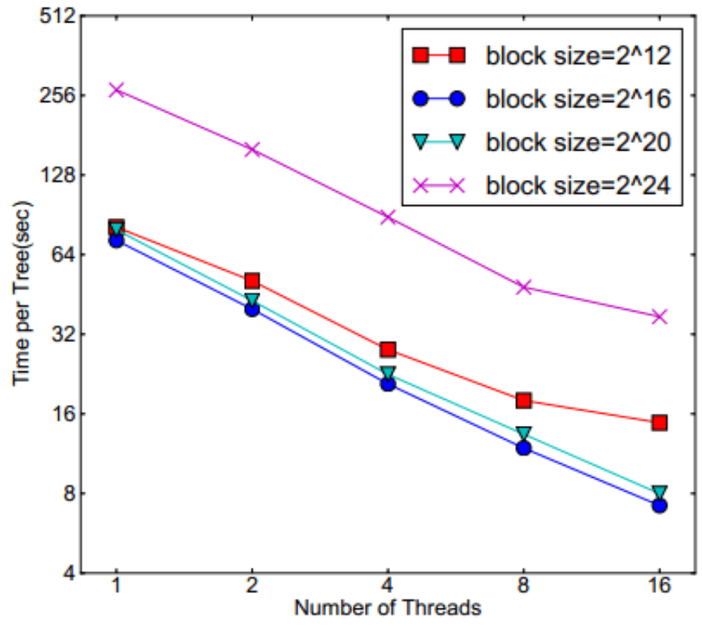


(a) Allstate 10M (b) Higgs 10M (c) Allstate 1M (d) Higgs 1M

在approximate 算法中，对Block的大小进行了合理的设置。定义Block的大小为Block中最多的样本数。设置合适的大小是很重要的，设置过大则容易导致命中率低，过小则容易导致并行化效率不高。经过实验，发现2^16比较好。



(a) Allstate 10M



(b) Higgs 10M

Blocks for Out-of-core Computation

当数据量太大不能全部放入主内存的时候，为了使得out-of-core (https://en.wikipedia.org/wiki/External_memory_algorithm)计算称为可能，将数据划分为多个Block并存放在磁盘上。

- 计算的时候，使用独立的线程预先将Block放入主内存，因此可以在计算的同时读取磁盘
- Block压缩，貌似采用的是近些年性能出色的LZ4 压缩算法，按列进行压缩，读取的时候用另外的线程解压。对于行索引，只保存第一个索引值，然后用16位的整数保存与该block第一个索引的差值。
- Block Sharding， 将数据划分到不同硬盘上，提高磁盘吞吐率

总结

读到这里，相信你对XGBoost已经很有了解。下面总结几个问题：

XGBoost为什么快

- 当数据集大的时候使用近似算法
- Block与并行
- CPU cache 命中优化
- Block预取、Block压缩、Block Sharding等

XGBoost与传统GBDT的不同

这里主要参考weapon的回答，答案在：机器学习算法中GBDT和XGBOOST的区别有哪些？ (https://www.zhihu.com/question/41354392/answer/98658997)

1. 传统GBDT以CART作为基分类器，XGBoost还支持线性分类器，这个时候XGBoost相当于带L1和L2正则化项的Logistic回归（分类问题）或者线性回归（回归问题）。
2. 传统的GBDT只用了一阶导数信息（使用牛顿法的除外），而XGBoost对损失函数做了二阶泰勒展开。并且XGBoost支持自定义损失函数，只要损失函数一阶、二阶可导。
3. XGBoost的目标函数多了正则项， 相当于**预剪枝**，使得学习出来的模型更加不容易过拟合。
4. XGBoost还有**列抽样**，进一步防止过拟合。
5. 对缺失值的处理。对于特征的值有缺失的样本，XGBoost可以自动学习出它的分裂方向。
6. XGBoost工具支持并行。当然这个并行是在特征的粒度上，而非tree粒度，因为本质还是boosting算法。

XGBoost Scalable的体现

XGBoost的paper在KKD上发表，名为：《Xgboost: A scalable tree boosting system》，那么scalable体现在哪?

参考知乎上王浩的回答(https://www.zhihu.com/question/41354392/answer/154686456)，修改如下：

- 模型的scalability：弱分类器可以支持cart也可以支持lr和linear， 但其实这是Boosting算法做的事情，XGBoost只是实现了而已。
- 目标函数的scalability： 支持不同的loss function, 支持自定义loss function，只要一、二阶可导。有这个特性是因为泰勒二阶展开，得到通用的目标函数形式。
- 学习方法的scalability：Block结构支持并行化，支持 Out-of-core计算（这点和王浩的看法不一样，他写的是优化的trick）

XGBoost 防止过拟合的方法

- 目标函数的正则项， 叶子节点数+叶子节点数输出分数的平方和 $\Omega(f_t) = \gamma T + \frac{1}{2}\lambda \sum_{j=1}^{T} w_j^2$
- 行抽样和列抽样：训练的时候只用一部分样本和一部分特征
- 可以设置树的最大深度
- η: 可以叫学习率、步长或者shrinkage
- Early stopping：使用的模型不一定是最终的ensemble，可以根据测试集的测试情况，选择使用前若干棵树

参考资料

- Chen, Tianqi, and Carlos Guestrin. "Xgboost: A scalable tree boosting system." *Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining*. ACM, 2016.
- XGBoost 与 Boosted Tree – 陈天奇 (http://www.52cs.org/?p=429)
- GBDT算法原理与系统设计简介 – weapon
- GBDT详解 – 火光摇曳
- XGBoost解读(2)–近似分割算法 (https://yxzf.github.io/2017/04/xgboost-v2/)
- XGboost核心源码阅读 (https://mlnote.com/2016/10/29/xgboost-code-review-with-paper/)
- XGboost – github (https://github.com/dmlc/xgboost)

---

learning-model/). 🔗 permalink (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-xgboost/).

❮『我爱机器学习』集成学习（二）Boosting与GBDT (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-model-ensemble-boostring-and-gbdt/)

『我爱机器学习』集成学习（四）LightGBM ❯ (https://www.hrwhisper.me/machine-learning-lightgbm/)

Leave a Reply

Your email address will not be published. Required fields are marked *

Comment

Name *

Email *

Website

Save my name, email, and website in this browser for the next time I comment.

Post Comment

(http://weibo.com/murmured)

(http://www.linkedin.com/in/huangrong-yang-548632119/)

(https://instagram.com/hr_say/)

(https://github.com/hrwhisper)

(https://www.hrwhisper.me/feed)

Csdn (http://blog.csdn.net/murmured)　　博客园 (http://www.cnblogs.com/murmured/)

Lofter (http://hrsay.lofter.com/)　　知 乎 (http://www.zhihu.com/people/hrwhisper)

豆瓣 (http://www.douban.com/people/hrwhisper/)

努力的人本身就有奇迹 | 快乐是我们共同的信仰

by hrwhipser.me