

调研报告

Oct 29 2018 聂雷海

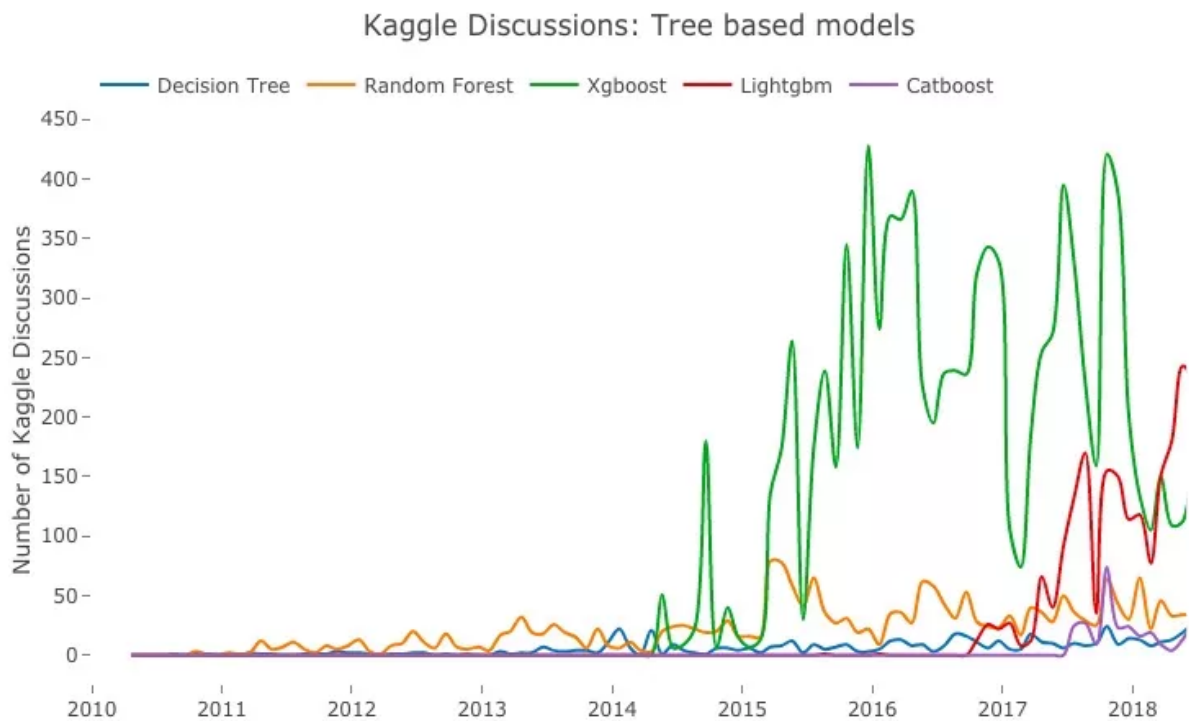
在数据挖掘竞赛中，基于GBDT(gradient boosted decision tree)算法，主要为xgb,lgb算法非常重要。本调研报告涉及xgb(XGBoost)相关算法介绍。

通过介绍boosting , gradient boosting tree引出xgb。

Introduction

Kaggle是全球最大数据建模和数据分析竞赛平台，也是检验个人水平的最佳舞台。现如今，随着社会对机器学习人才的需求提高，在Kaggle上刷到过前5%、10%也成了应聘的一个硬指标。考虑到Kaggle的权威性和受欢迎度，这么多年来，这个平台的数据应该能体现整个数据科学领域的发展轨迹。

下图展示了xgb算法在近些年来在kaggle比赛中重要地位。当然，随着Lightgbm的提出，xgb比重下滑。



related work

"传统决策树的启发式，指的是树的内部节点分裂时候的算法，（比如信息增益）

而xgboost的objective式的决策，是指在生长出一颗新树时候的算法，而树的内部还是启发式的

- 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正则化项的逻辑斯蒂回归（分类问题）或者线性回归（回归问题）。
- xgboost工具支持并行。boosting不是一种串行的结构吗？怎么并行的？注意xgboost的并行不是tree粒度的并行，xgboost也是一次迭代完才能进行下一次迭代的（第t次迭代的代价函数里包含了前面t-1次迭代的预测值）。xgboost的并行是在特征粒度上的。我们知道，决策树的学习最耗时的一个步骤就是对特征的值进行排序（因为要确定最佳分割点），xgboost在训练之前，预先对数据进行了排序，然后保存为block结构，后面的迭代中重复地使用这个结构，大大减小计算量。这个block结构也使得并行成为了可能，在进行节点的分裂时，需要计算每个特征的增益，最终选增益最大的那个特征去做分裂，那么各个特征的增益计算就可以开多线程进行。
- 可并行的近似直方图算法。树节点在进行分裂时，我们需要计算每个特征的每个分割点对应的增益，即用贪心法枚举所有可能的分割点。当数据无法一次载入内存或者在分布式情况下，贪心算法效率就会变得很低，所以xgboost还提出了一种可并行的近似直方图算法，用于高效地生成候选的分割点。

boosting方法

由于所要介绍的算法有关boosting方法，故可以简单了解boosting.

an example:

某个boosting算法可以表示为

$$f(x) = \omega_0 + \sum_{m=1}^M \omega_m \phi_m$$

ω 是权重， ϕ 是弱回归器的集合，实际上是一个加法模型(即基函数的线性组合)

我们对输入数据做一个极小化损失函数:

$$(\beta_m, \gamma_m) = \arg \min_{\beta, \gamma} \sum_{i=1}^N L(y_i, f_{m-1}(x_i) + \beta b(x_i; \gamma))$$

更新 β_m, γ_m 后, 计算 $f_m(x)$

$$f_m(x) = f_{m-1}(x) + \beta_m b(x; \gamma_m) \text{ (初值 } f_0(x) = 0 \text{)}$$

最终得到输出加法模型 $f(x)$

$$f(x) = f_M(x) = \sum_{m=1}^M \beta_m b(x; \gamma_m) \text{ } b \text{ 即为上面的 } \phi \text{ 弱分类器}$$

在我理解, **boosting**方法主要就是将最优的解视为一个加法模型.

而**gradient boosting** 与其类似, 只不过在更新参数时, 选取梯度的方向来找到最优结果。

gradient boosting tree

it equals GBDT algorithm.

本部分主要参考[ppt1](#) && [ppt2](#).

介绍gradient boosting tree前,我们先看下监督学习。

在监督学习中,我们会用输入 x_i 来预测 y_i 。

对于线性模型,我们可以有这样的预测函数

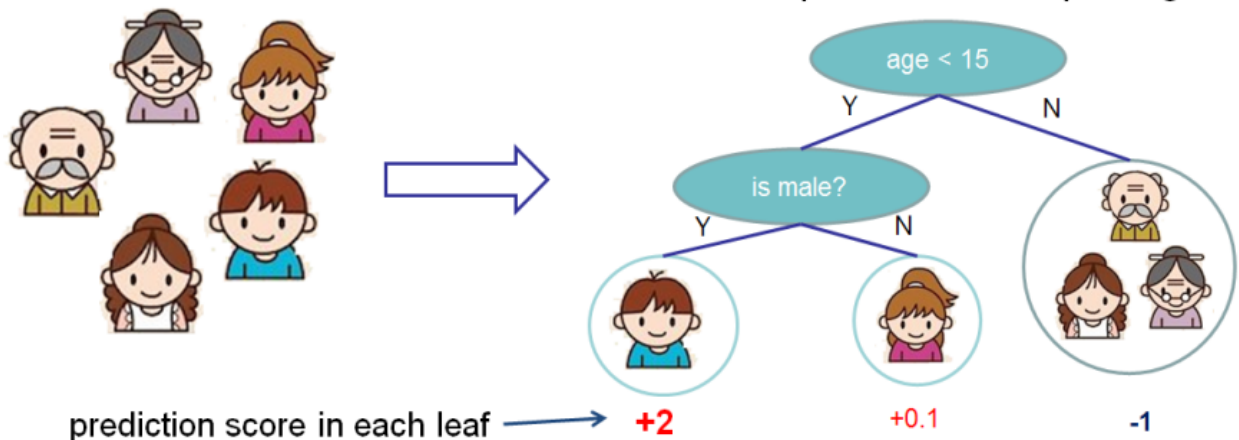
$$\hat{y}_i = \sum_j \omega_j x_{ij}$$

然后常规地构造objective function: $Obj(\Theta) = L(\Theta) + \Omega(\Theta)$ 即可

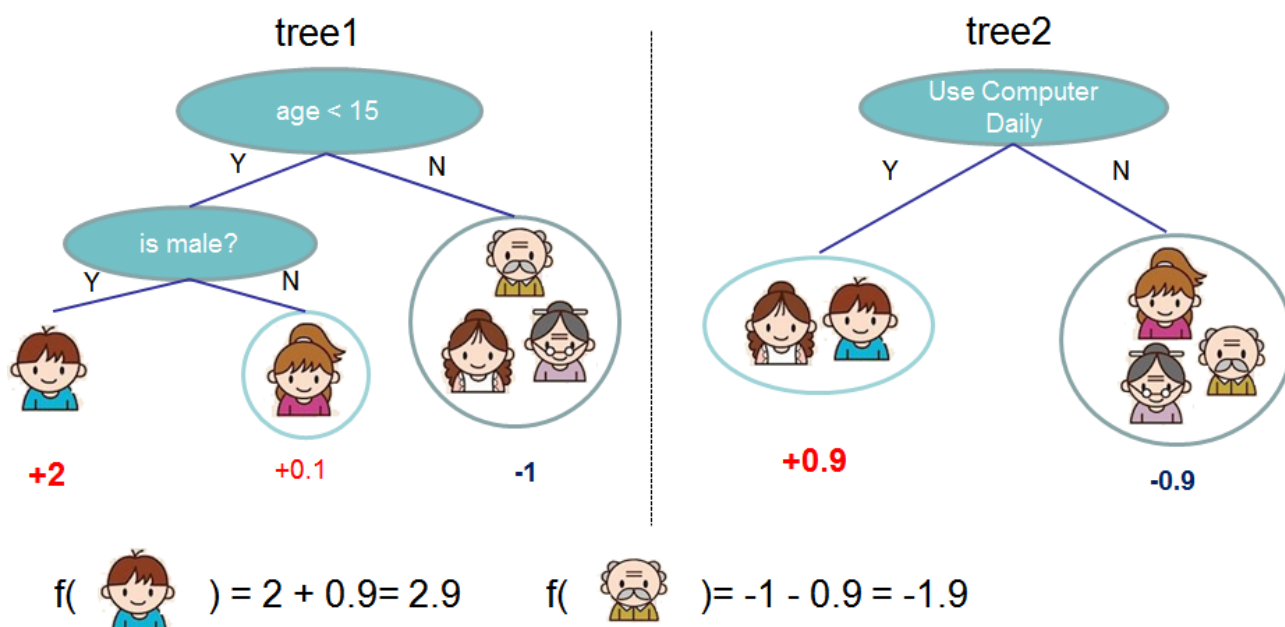
当我们尝试用树模型来研究这种监督学习问题时,可以像下图一样,对某个问题生成决策树,并对不同分支赋不同权值。

Input: age, gender, occupation, ...

Does the person like computer games



由于单个树对于较大特征的处理会导致深度过深,影响性能。所以可以利用树的集合来完成上述的想法。



换做数学语言描述上述过程,即为

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^K f_k(x_i), f_k \in F, F = \{f(x) = \omega_{q(x)}\} (q: R^m \rightarrow T, \omega \in R^T)$$

K为树的个数,F is the space of regression trees ,(我理解为,每棵树中元素所属类的权重)

T为树的叶节点数量, 因此每个 f_k 对应一个独立树结构的q以及权重 ω .

基于之前 [boosting_example](#) ,我们给出第t轮迭代得到的模型预测值(即把前t-1轮预测展开,相加)

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

那么对原问题求解(更好地预测y)可以转化为如何找到更优的树.(即找到效果更好的 f_i)

这就引出了下面tree boosting 算法思想的描述.(当然为了引出xgb,我们主要讲的是gradient的想法)

boosted Tree算法简要描述: 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, 去拟合上次预测的残差。一个树是这样生长的, 挑选一个最佳特征的最佳分裂点, 来进行特征分裂。 [source](#)

那么我们该选取怎样的函数去处理?

我们下面来看看具体的算法是怎么做的。

[Gradient Boosting Tree 算法原理](#)

F is defined as :

$$F(x; w) = \sum_{t=0}^T \alpha_t h_t(x; w_t) = \sum_{t=0}^T f_t(x; w_t)$$

where x is input data ,h is regression tree, w is parameter, α is the weight of every tree.

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:

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

2.2 学习第 t 棵树:

$$w^* = \arg \min_w \sum_{i=1}^N (\tilde{y}_i - h_t(x_i; w))^2$$

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

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

在2.1步中, \tilde{y} 选取一阶导数的逼近。

在2.2步中, 对权重 w 的选取采用了最小损失函数的方法, 试图对NP hard利用greedy strategy 寻求局部最优

在2.3步中, ρ 主要涉及学习率的问题。2.4步中, 即为加法模型的体现

总的来说, gbd算法在 T 次迭代中, 每次迭代都计算出加法模型的loss function在各方向上的梯度(注意为 L 只展开到一阶导数), 于是便计算regression tree的权重作用与 y 差距最小的权重。选取适当学习率, 更新模型。

XGBoost

清楚了gbd算法大概流程, 下面我们来着重看看xgb的优势体现在哪里。

1.

对于objective function, 在gbd基础上, 新增正则项处理。。

$$\widetilde{Obj}^{(t)} = \sum_{i=1}^n l(y_i, \hat{y}_i^t) + \sum_{i=1}^t \Omega(f_i) \text{ (wave lines mean approximation)}$$

where $\Omega(f_t) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T \omega_j^2$; T 指叶的数目, 右边为L2 norm.

在代价函数中, 加入正则项。从Bias-variance tradeoff角度来讲, 正则项降低了模型的variance, 使学习出来的模型更加简单, 防止过拟合, 降低模型的误差。

2.

这里尝试用MSE的方法来处理Loss function,将①式代入

这里我们同样采用了gradient tree boosting的方式，但泰勒展开到二阶

$$\hat{O}b_j^t = \sum_{i=1}^n [g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) \quad \textcircled{2}$$

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

损失函数是用泰勒展式二项逼近，而不是如同gbdt仅运用一阶导数。因此获取信息更多，有更高概率性能更优。

3.

shrinkage and column subsampling

在gbdt算法中，利用shrinkage技术来防止overfitting.

而在xgb还采用了column subsampling技术(based on RandomForest).

using column sub-sampling prevents over-fitting even more so than the traditional row sub-sampling (which is also supported). The usage of column sub-samples also speeds up computations of the parallel algorithm described later.

4.

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^K f_k(x_i), f_k \in F, F = \{f(x) = \omega_{q(x)}\} (q: R^m \rightarrow T, \omega \in R^T)$$

将②式 Ω 按①中展开，并将 $f(x)$ 替换为上式中相应 ω .经过若干步推导

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}}^{(t)} &= \sum_{i=1}^n [g_i f_t(\mathbf{x}_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(\mathbf{x}_i)] + \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2 \\ &= \sum_{j=1}^T [(\sum_{i \in I_j} g_i) w_j + \frac{1}{2} (\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda) w_j^2] + \gamma T \end{aligned}$$

其中, $I_j = \{i | q(x_i) = j\}$, 这里我理解为输入数据中符合该叶节点属性的元素下标。

计算 $\min \tilde{L}^{(t)}$ 下的 ω_j^* (上式左边取0),得到 w_j^* 并代入 $\tilde{L}^{(t)}$ 有,

$$\begin{aligned}\tilde{L}^{(t)} &= -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{(\sum_{i \in I_j} g_i)^2}{\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda} + \lambda T \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \lambda T\end{aligned}$$

红字可以理解为每个叶节点对总体损失的贡献值

那么这时候，我们就很容易定义叶节点分裂的收益了。(当然，收益越高，L越小，那么预测效果就越好。)

$$Score = \frac{G_L^2}{H_L + \lambda} + \frac{G_R^2}{H_R + \lambda} - \frac{(G_L + G_R)^2}{H_L + H_R + \lambda} - \lambda$$

在做出上述工作后，我们来看看算法的实现

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** $sorted(I, \text{by } \mathbf{x}_{jk})$ **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

algorithm1即遍历所有分类，取最大Score值。

Algorithm 2: Approximate Algorithm for Split Finding

```
for  $k = 1$  to  $m$  do
    | Propose  $S_k = \{s_{k1}, s_{k2}, \dots, s_{kl}\}$  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.
```

algorithm 2 为近似算法，对每个特征考虑分位点，作为候选切分，再计算max(Score).降低复杂度

XGBoost不会探索所有可能的树结构，它只是贪婪地构建一棵树，选择导致最大损失的方法，减少分叉。在上图中，树从节点I开始，根据标准，节点分为左右分叉。所以我们的实例一部分被放进了左侧的叶子节点，剩下的则去了右侧的叶子节点。现在，我们就可以计算损失值并选择导致损失减少最大的分叉。

5.

对于sparse value的处理:

sparse value:

deleted, one-hot code, zero value(massive)

比如说0值，xgb可将0值切分在左节点，从而支持这样特殊值的计算。

下图中，xgb对缺失值放置在右边.

```
// 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
```


about something implement

在课程中，参加了CCF某个数据挖掘的比赛，对数据主要用xgb算法处理。

```
feature = [value for value in train.columns.values if
            value not in ['user_id']]

#xgb模型
def XGB():
    clf = xgb.XGBClassifier(max_depth=12, learning_rate=0.05,
                            n_estimators=752, silent=True,
                            objective="multi:softmax",
                            nthread=4, gamma=0,
                            max_delta_step=0, subsample=1, colsample_bytree=0.9,
                            colsample_bylevel=0.9,
                            reg_alpha=1, reg_lambda=1, scale_pos_weight=1,
                            base_score=0.5, seed=2018, missing=None, num_class=15)

    return clf
```

feature为我们对train.csv提取出来的特征。(这里并没有做特征工程，主要起演示作用)

xgb调用python package，depth 为树最大深度，n_estimators指树集合数量.设置objective="multi:softmax"，表示使用softmax分类器，返回预测类别。num_class 表示类别数目，这里为15

```
train_x, test_x, train_y, test_y =
train_test_split(train[feature], label, test_size=0.1, shuffle=True, random_state=2018)
model = XGB()
model.fit(train_x[feature], train_y, eval_set=[(test_x[feature], test_y)],
          verbose=1, early_stopping_rounds=100)
pred = model.predict(test_x)
print(f1_score(test_y, pred, average='weighted'))
```

之后，将训练集和测试集分开，装入model内，执行lgb算法。

参考文献:

1. <https://homes.cs.washington.edu/~tqchen/pdf/BoostedTree.pdf>

2. <http://wepon.me/files/gbdt.pdf>
3. <https://www.kdd.org/kdd2016/papers/files/rfp0697-chenAemb.pdf>
4. <https://statweb.stanford.edu/~jhf/ftp/trebst.pdf>
5. <https://zhuanlan.zhihu.com/p/42489958>
6. [wechat page](#)