GBDT+LR算法解析及Python实现

AI派 2019-10-20

> 来源：AI研习社
> 参考：https://www.cnblogs.com/wkang/p/9657032.html

1. GBDT + LR 是什么

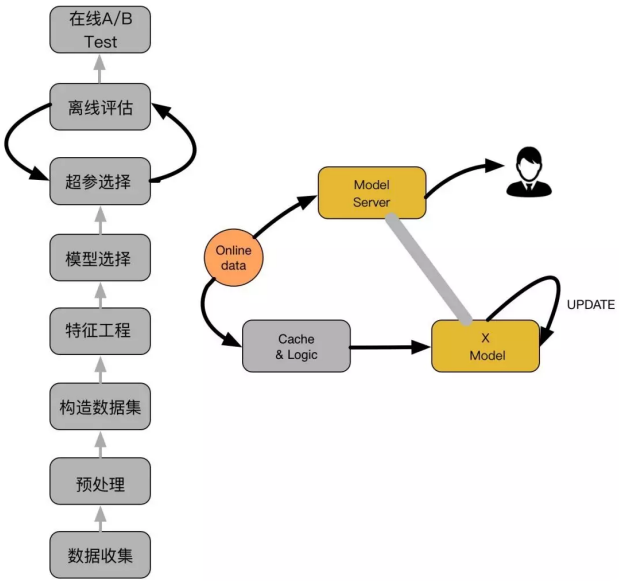
本质上 GBDT+LR 是一种具有 stacking 思想的二分类器模型，所以可以用来解决二分类问题。这个方法出自于 Facebook 2014 年的论文 Practical Lessons from Predicting Clicks on Ads at Facebook 。

2. GBDT + LR 用在哪

GBDT+LR 使用最广泛的场景是 CTR 点击率预估，即预测当给用户推送的广告会不会被用户点击。

点击率预估模型涉及的训练样本一般是上亿级别，样本量大，模型常采用速度较快的 LR。但 LR 是线性模型，学习能力有限，此时特征工程尤其重要。现有的特征工程实验，主要集中在寻找到有区分度的特征、特征组合，折腾一圈未必会带来效果提升。GBDT 算法的特点正好可以用来发掘有区分度的特征、特征组合，减少特征工程中人力成本。

从知乎https://zhuanlan.zhihu.com/p/29053940上看到了一个关于CTR的流程，如下图所示：



如上图，主要包括两大部分：离线部分、在线部分，其中离线部分目标主要是训练出可用模型，而在线部分则考虑模型上线后，性能可能随时间而出现下降，若出现这种情况，可选择使用 Online-Learning 来在线更新模型：

2.1 离线部分

- 数据收集：主要收集和业务相关的数据，通常会有专门的同事在 app 位置进行埋点，拿到业务数据
- 预处理：对埋点拿到的业务数据进行去脏去重；
- 构造数据集：经过预处理的业务数据，构造数据集，在切分训练、测试、验证集时应该合理根据业务逻辑来进行切分；
- 特征工程：对原始数据进行基本的特征处理，包括去除相关性大的特征，离散变量 one-hot，连续特征离散化等等;
- 模型选择：选择合理的机器学习模型来完成相应工作，原则是先从简入深，先找到 baseline，然后逐步优化；
- 超参选择：利用 gridsearch、randomsearch 或者 hyperopt 来进行超参选择，选择在离线数据集中性能最好的超参组合；
- 在线 A/B Test：选择优化过后的模型和原先模型（如 baseline）进行 A/B Test，若性能有提升则替换原先模型；

2.2 在线部分

- Cache & Logic：设定简单过滤规则，过滤异常数据；
- 模型更新：当 Cache & Logic 收集到合适大小数据时，对模型进行 pretrain+finetuning，若在测试集上比原始模型性能高，则更新 model server 的模型参数；
- Model Server：接受数据请求，返回预测结果；

3. GBDT + LR 的结构

正如它的名字一样，GBDT+LR 由两部分组成，其中 GBDT 用来对训练集提取特征作为新的训练输入数据，LR 作为新训练输入数据的分类器。

具体来讲，有以下几个步骤：

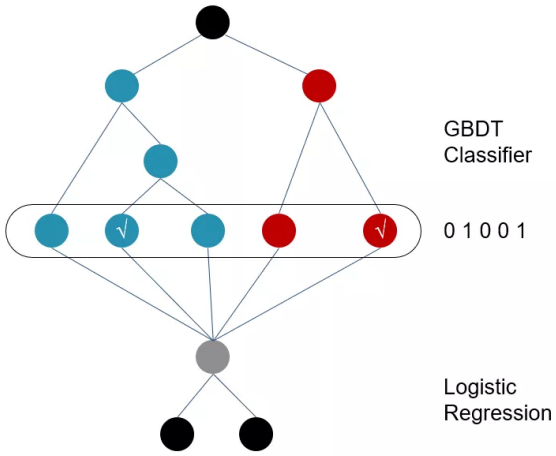
- GBDT 首先对原始训练数据做训练，得到一个二分类器，当然这里也需要利用网格搜索寻找最佳参数组合。

- 与通常做法不同的是，当 GBDT 训练好做预测的时候，输出的并不是最终的二分类概率值，而是要把模型中的每棵树计算得到的预测概率值所属的叶子结点位置记为 1，这样，就构造出了新的训练数据。

> 举个例子，下图是一个 GBDT+LR 模型结构，设 GBDT 有两个弱分类器，分别以蓝色和红色部分表示，其中蓝色弱分类器的叶子结点个数为 3，红色弱分类器的叶子结点个数为 2，并且蓝色弱分类器中对 0-1 的预测结果落到了第二个叶子结点上，红色弱分类器中对 0-1 的预测结果也落到了第二个叶子结点上。那么我们就记蓝色弱分类器的预测结果为[0 1 0]，红色弱分类器的预测结果为[0 1]，综合起来看，GBDT 的输出为这些弱分类器的组合[0 1 0 0 1]，或者一个稀疏向量（数组）。

> 这里的思想与 One-hot 独热编码类似，事实上，在用 GBDT 构造新的训练数据时，采用的也正是 One-hot 方法。并且由于每一弱分类器有且只有一个叶子节点输出预测结果，所以在一个具有 n 个弱分类器、共计 m 个叶子结点的 GBDT 中，每一条训练数据都会被转换为 1*m 维稀疏向量，且有 n 个元素为 1，其余 m-n 个元素全为 0。

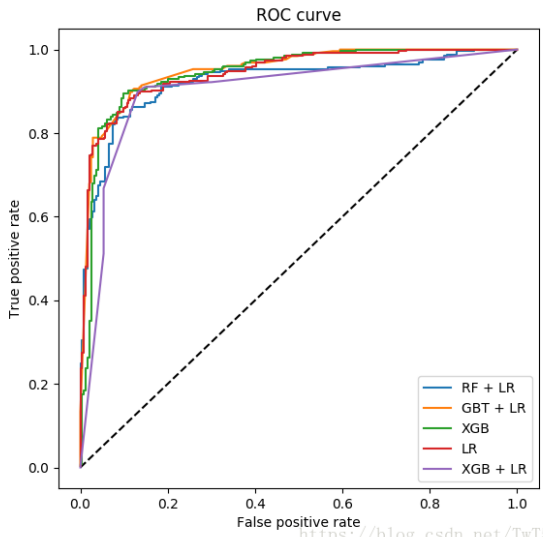
- 新的训练数据构造完成后，下一步就要与原始的训练数据中的 label(输出)数据一并输入到 Logistic Regression 分类器中进行最终分类器的训练。思考一下，在对原始数据进行 GBDT 提取为新的数据这一操作之后，数据不仅变得稀疏，而且由于弱分类器个数，叶子结点个数的影响，可能会导致新的训练数据特征维度过大的问题，因此，在 Logistic Regression 这一层中，可使用正则化来减少过拟合的风险，在 Facebook 的论文中采用的是 L1 正则化。

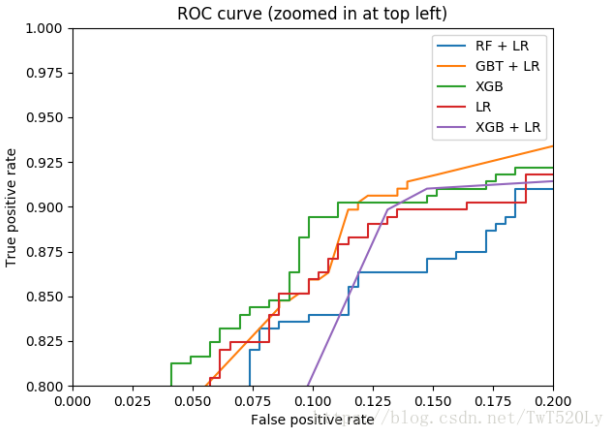


4. RF + LR ? Xgb + LR?

有心的同学应该会思考一个问题，既然 GBDT 可以做新训练样本的构造，那么其它基于树的模型，例如 Random Forest 以及 Xgboost 等是并不是也可以按类似的方式来构造新的训练样本呢？没错，所有这些基于树的模型都可以和 Logistic Regression 分类器组合。至于效果孰优孰劣，我个人觉得效果都还可以，但是之间没有可比性，因为超参数的不同会对模型评估产生较大的影响。下图是 RF+LR、GBT+LR、Xgb、LR、Xgb+LR 模型效果对比图，然而这只能做个参考，因为模型超参数的值的选择这一前提条件都各不相同。

顺便来讲，RF 也是多棵树，但从效果上有实践证明不如 GBDT。且 GBDT 前面的树，特征分裂主要体现对多数样本有区分度的特征；后面的树，主要体现的是经过前 N 颗树，残差仍然较大的少数样本。优先选用在整体上有区分度的特征，再选用针对少数样本有区分度的特征，思路更加合理，这应该也是用 GBDT 的原因。





5. GBDT + LR 代码分析

在网上找到了两个版本的 GBDT+LR 的代码实现，通过阅读分析，认为里面有一些细节还是值得好好学习一番的，所以接下来这一小节会针对代码实现部分做一些总结。

目前了解到的 GBDT 的实现方式有两种：

- Scikit-learn 中的 ensemble.GradientBoostingClassifier
- lgb 里的 params={ 'boosting_type': 'gbdt' }参数

接下里分别对这两种实现方式进行分析。

5.1 Scikit-learn 的实现：

```
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder
from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier


gbm1 = GradientBoostingClassifier(n_estimators=50, random_state=10, subsample=0.6, max_depth=7,
                                  min_samples_split=900)
gbm1.fit(X_train, Y_train)
train_new_feature = gbm1.apply(X_train)
train_new_feature = train_new_feature.reshape(-1, 50)

enc = OneHotEncoder()

enc.fit(train_new_feature)

# # 每一个属性的最大取值数目
# print('每一个特征的最大取值数目:', enc.n_values_)
# print('所有特征的取值数目总和:', enc.n_values_.sum())
```

```
train_new_feature2 = np.array(enc.transform(train_new_feature).toarray())
```

划重点：

5.1.1 model.apply(X_train)的用法

model.apply(X_train)返回训练数据 X_train 在训练好的模型里每棵树中所处的叶子节点的位置（索引）

5.1.2 sklearn.preprocessing 中 OneHotEncoder 的使用

除了 pandas 中的 get_dummies()，sklearn 也提供了一种对 Dataframe 做 One-hot 的方法。

OneHotEncoder() 首先 fit() 过待转换的数据后，再次 transform() 待转换的数据，就可实现对这些数据的所有特征进行 One-hot 操作。

由于 transform() 后的数据格式不能直接使用，所以最后需要使用.toarray() 将其转换为我们能够使用的数组结构。

```
enc.transform(train_new_feature).toarray()
```

5.1.3 sklearn 中的 GBDT 能够设置树的个数，每棵树最大叶子节点个数等超参数，但不能指定每颗树的叶子节点数。

5.2 lightgbm 的实现

```
params = {
'task': 'train',
'boosting_type': 'gbdt',
'objective': 'binary',
'metric': {'binary_logloss'},
'num_leaves': 64,
'num_trees': 100,
'learning_rate': 0.01,
'feature_fraction': 0.9,
'bagging_fraction': 0.8,
'bagging_freq': 5,
```

```
    'verbose': 0
    }

    # number of leaves,will be used in feature transformation

    num_leaf = 64

    print('Start training...')

    # train

    gbm = lgb.train(params=params,
    train_set=lgb_train,
    valid_sets=lgb_train, )

    print('Start predicting...')

    # y_pred 分别落在 100 棵树上的哪个节点上

    y_pred = gbm.predict(x_train, pred_leaf=True)
    y_pred_prob = gbm.predict(x_train)

    result = []
    threshold = 0.5
    for pred in y_pred_prob:
    result.append(1 if pred > threshold else 0)
    print('result:', result)

    print('Writing transformed training data')
    transformed_training_matrix = np.zeros([len(y_pred), len(y_pred[1]) _ num_leaf],
    dtype=np.int64) # N _ num_tress _ num_leafs
    for i in range(0, len(y_pred)): # temp 表示在每棵树上预测的值所在节点的序号（0,64,128,...,6436 为 100
    temp = np.arange(len(y_pred[0])) _ num_leaf + np.array(y_pred[i]) # 构造 one-hot 训练数据集
    transformed_training_matrix[i][temp] += 1

    y_pred = gbm.predict(x_test, pred_leaf=True)
    print('Writing transformed testing data')
    transformed_testing_matrix = np.zeros([len(y_pred), len(y_pred[1]) _ num_leaf], dtype=np.int64)
    for i in range(0, len(y_pred)):
    temp = np.arange(len(y_pred[0])) _ num_leaf + np.array(y_pred[i]) # 构造 one-hot 测试数据集
    transformed_testing_matrix[i][temp] += 1
```

划重点：

5.2.1 params 字典里超参数的设置

因为是二分类问题，所以设置 {'boosting_type': 'gbdt','objective': 'binary','metric': {'binary_logloss'}}，然后设置树的个数及每棵树的叶子结点个数{'num_leaves': 64,'num_trees': 100}

5.2.2 model.predict(x_train, pred_leaf=True)

使用

```
model.predict(x_train, pred_leaf=True)
```

返回训练数据在训练好的模型里预测结果所在的每棵树中叶子节点的位置（索引），形式为 7999*100 的二维数组。

5.2.3 构造 Ont-hot 数组作为新的训练数据

这里并没有使用 sklearn 中的 OneHotEncoder()，也没有使用 pandas 中的 get_dummies()，而是手工创建一个 One-hot 数组。(当然也可以像 5.1.2 那样操作)

- 首先，创建一个二维零数组用于存放 one-hot 的元素；
- 然后，获取第 2 步得到的二维数组里每个叶子节点在整个 GBDT 模型里的索引号，因为一共有 100 棵树，每棵树有 64 个叶子节点，所以索引范围是 0~6400；（这里有一个技巧，通过把每棵树的起点索引组成一个列表，再加上由落在每棵树叶子节点的索引组成的列表，就得到了往二维零数组里插入元素的索引信息）
- 最后，

```
temp = np.arange(len(y_pred[0])) \* num_leaf + np.array(y_pred[i])
```

5.2.4 对二维数组填充信息，采用"+=" 的方法

```
# 构造 one-hot 训练数据集

transformed_training_matrix[i][temp] += 1
```

6. GBDT + LR 模型提升

现在，我们思考这样一个问题，Logistic Regression 是一个线性分类器，也就是说会忽略掉特征与特征之间的关联信息，那么是否可以采用构建新的交叉特征这一特征组合方式从而提高模型的效果？

其次，我们已经在 2.3 小节中了解到 GBDT 很有可能构造出的新训练数据是高维的稀疏矩阵，而 Logistic Regression 使用高维稀疏矩阵进行训练，会直接导致计算量过大，特征权值更新缓慢的问题。

针对上面可能出现的问题，可以翻看我之前的文章：FM 算法解析及 Python 实现 ，使用 FM 算法代替 LR，这样就解决了 Logistic Regression 的模型表达效果及高维稀疏矩阵的训练开销较大的问题。然而，这样就意味着可以高枕无忧了吗？当然不是，因为采用 FM 对本来已经是高维稀疏矩阵做完特征交叉后，新的特征维度会更加多，并且由于元素非 0 即 1，新的特征数据可能也会更加稀疏，那么怎么办？

所以，我们需要再次回到 GBDT 构造新训练数据这里。当 GBDT 构造完新的训练样本后，我们要做的是对每一个特征做与输出之间的特征重要度评估并筛选出重要程度较高的部分特征，这样，GBDT 构造的高维的稀疏矩阵就会减少一部分特征，也就是说得到的稀疏矩阵不再那么高维了。之后，对这些筛选后得到的重要度较高的特征再做 FM 算法构造交叉项，进而引入非线性特征，继而完成最终分类器的训练数据的构造及模型的训练。

7. 参考资料

[1] CTR 预估中 GBDT 与 LR 融合方案

[2] 常见计算广告点击率预估算法总结

[3] GBDT+LR 算法进行特征扩增

[4] 推荐系统遇上深度学习(十)--GBDT+LR 融合方案实战

(完)