梯度提升树算法原理小结

原创 石头 机器学习算法那些事 2018-12-12

前言

本文介绍了boosting族的提升树算法和梯度提升（GBDT）算法，GBDT算法常用来解决回归和分类问题，且泛化能力很强，本文深入浅出的总结了GBDT算法 。

目录

决策树与提升树的不同

决策树是单一学习器，提升树是以CART决策树为基本学习器的提升方法。本节从结果评价角度和损失函数角度去描述两者的不同。假设决策树的学习器模型是 f(x)，提升树共有K个弱学习器 $G_i(x)$，其中 i=1,2,...,K。

1.结果评价方法：

对某一个输入数据xi

决策树模型的输出结果 yi：

$$y_i = f(x_i)$$

提升树模型的输出结果 yi：

若是回归：

$$y_i = \sum_{i=1}^{K} G_i(x_i)$$

若是分类：

$$f_i = \sum_{i=1}^{K} G_i(x_i)$$

$$y_i = T(f_i)$$

其中，i 表示某一个弱学习器，T代表分类模型（如逻辑线性回归，或sign函数）

2. 模型构建方法

（1）决策树模型构建方法

决策树运用基尼指数来计算模型的损失函数，决策树生成阶段是最小化模型的损失函数，最大化决策树的深度；决策树剪枝阶段是采用正则化的损失函数来完成，最后通过交叉验证法选择最佳子树；

（2）提升树模型构建方法

提升树是多个决策树组合为强学习器的提升方法，每个决策树的复杂度比单一决策树低得多，因此不能像单一决策树那样最大化决策树深度来最小化损失函数。决策树是boosting族的成员，弱学习器是串行迭代生成的，通过最小化每一步的弱学习器损失函数来构建提升树模型。

提升树算法

提升树算法的基本学习器是决策树，且提升树算法是加法模型，因此，提升树模型可以表示为：

$$f_M(x) = \sum_{m=1}^{M} T(x;\Theta_m)$$

其中，$T(x;\Theta_m)$表示决策树，Θ_m表示决策树的参数，M为树的个数。

提升树算法：

提升树算法采用前向分布算法，假设初始提升树$f_0(x) = 0$，第m步的模型是：

$$f_m(x) = f_{m-1}(x) + T(x;\Theta_m)$$

其中，$f_{m-1}(x)$为上一个模型，通过经验风险极小化确定当前模型的参数Θ_m，

$$\hat{\Theta}_m = \arg\min_{\Theta_m} \sum_{i=1}^{N} L(y_i, f_{m-1}(x_i) + T(x_i;\Theta_m)) \qquad (1)$$

其中L表示损失函数，$f_{m-1}(x)$和y_i为常数，由（1）式可知，我们只要知道损失函数L，我们就能得到每一轮的模型参数Θ_m，也可以理解为用当前模型$T(x_i,\Theta_m)$去拟合上一轮模型的残差。因此，提升树算法原理是用当前的决策树去拟合上一轮的模型残差，使当前的损失函数值最小。

> 【例】假如有个人30岁，我们首先用20岁去拟合发现损失有10岁，这时我们用6岁去拟合，这样迭代下去，直到损失函数达到我们的要求，这就是提升树的思想。
> 大家有没有想过，为什么我们不直接去用30岁去拟合，这么做的步骤相当于最大化该决策树的深度，得到的模型不是一个弱分类器，导致过拟合问题的出现。

GBDT算法

> 我们再次回顾上一节例题，如果我们首先用10岁去拟合发现损失有20岁，然后再用8岁去拟合损失有12岁，这样迭代下去，与上节达到相同的损失函数值则需要更多的迭代次数，这就是GBDT算法思想：用损失函数负梯度近似残差，回归树拟合负梯度得到本轮的最小损失函数。因为提升树是直接拟合残差，所以达到相同的损失函数值时，提升树需要的迭代步骤要小得多。

步骤：

（1）用损失函数的负梯度近似残差，表示为：

$$r_{mi} = -[\frac{\partial L(y_i, f(x_i))}{\partial f(x_i)}]_{f(x)=f_{m-1}(x)}$$

（2） 回归树拟合负梯度，得到叶节点区域Rmj，j=1,2,...,J。其中J为叶节点个数，m为第m颗回归树。

（3） 针对每一个叶子节点里的样本，我们求出使损失函数最小，得到拟合叶子节点最好的输出值Cmj，如下：

$$c_{mj} = \underbrace{\arg\min}_{c} \sum_{x_i \in R_{mj}} L(y_i, f_{t-1}(x_i) + c)$$

（4）更新回归树模型：

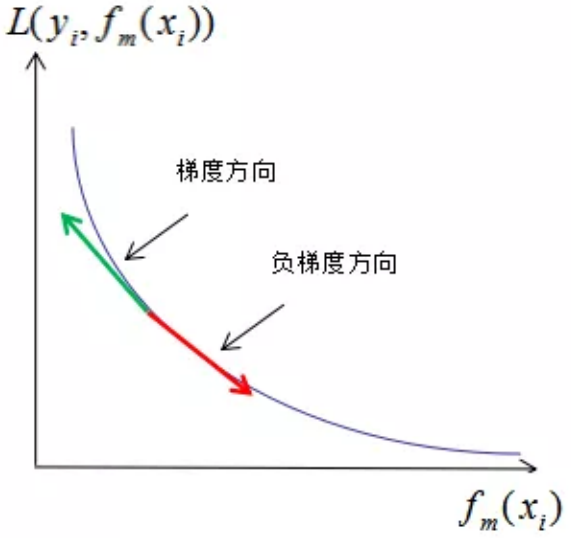
$$f_m(x) = f_{m-1}(x) + \sum_{j=1}^{J} c_{mj} I(x \in R_{mj})$$

（5）得到最终的回归树模型：

$$\hat{f}(x) = f_M(x) = f_0(x) + \sum_{m=1}^{M}\sum_{j=1}^{J} c_{mj} I(x \in R_{mj})$$

可能最难理解的是第三步，我们可以理解为在负梯度方向上去求模型最小化。负梯度方向理解成损失函数负梯度的回归树划分规则，用该规则去求损失函数最小化。

假设损失函数曲线如下图：



其中，m表示迭代次数，$f_m(x_i)$表示共迭代m轮后的学习模型，$L(y_i, f_m(x_i))$表示模型的损失函数，由提升树的原理可知，模型的损失函数随着迭代次数的增加而降低。如上图，梯度和负梯度分别为绿色线和红色线，当我们用当前的学习模型$f_m(x_i)$沿着负梯度方向增加时，损失函数是下降最快的，因此，GBDT算法思想是可行的。

PS：李航老师《统计学习方法》P152的GBDT算法表达式：

$$\hat{f}(x) = f_M(x) = \sum_{m=1}^{M}\sum_{j=1}^{J} c_{mj} I(x \in R_{mj})$$

个人觉得下式的模型表示法可能会更好：

$$\hat{f}(x) = f_M(x) = f_0(x) + \sum_{m=1}^{M}\sum_{j=1}^{J} c_{mj} I(x \in R_{mj})$$

GBDT常用损失函数

由上面两节可知，提升树是用决策树去拟合上一轮的损失函数，GBDT是用决策树去拟合上一轮损失函数的梯度。因此，只要知道模型的损失函数，就能通过前向分布算法计算每轮弱学习器模型的参数，本节总结了GBDT常用的损失函数。

（1）分类算法

a) 指数损失函数：

$$L(y, f(x)) = \exp(-y \cdot f(x))$$

对应负梯度：

$$y \cdot e^{-f(x)}$$

b) 对数损失函数

$$L(y, f(x)) = Ln(1 + \exp(-y \cdot f(x)))$$

对应负梯度：

$$\frac{y \cdot \exp(-y \cdot f(x))}{1 + \exp(-y \cdot f(x))}$$

（2）回归算法

这里不讨论最常用的损失函数，如均方差和绝对损失函数。本节介绍对异常点有较好鲁棒性的Huber损失和分位数损失。

a) Huber损失函数：它是均方差和绝对损失的折衷产物，对于远离中心的异常点，采用绝对损失，而中心附近的点采用均方差。这个界限一般用分位数点度量。损失函数如下：

$$L(y,f(x))=\begin{cases}\frac{1}{2}(y-f(x))^2 & |y-f(x)|\le\delta\\ \delta(|y-f(x)|-\frac{\delta}{2}) & |y-f(x)|>\delta\end{cases}$$

对应的负梯度：

$$r(y_i,f(x_i))=\begin{cases}y_i-f(x_i) & |y_i-f(x_i)|\le\delta\\ \delta\cdot sign(y_i-f(x_i)) & |y_i-f(x_i)|>\delta\end{cases}$$

b) 分位数损失。它对应的是分位数回归的损失函数，表达式为

$$L(y,f(x))=\sum_{y\ge f(x)}\theta|y-f(x)|+\sum_{y<f(x)}(1-\theta)|y-f(x)|$$

其中，θ为分位数，需要在回归前设置，对应的负梯度：

$$r(y_i,f(x_i))=\begin{cases}\theta & y_i\ge f(x_i)\\ \theta-1 & y_i<f(x_i)\end{cases}$$

GBDT正则化

正则化是为了防止模型处于过拟合，GBDT的正则化主要有三种方式：

（1）GBDT是加法模型，因此，模型可表示为：

$$f_k(x)=f_{k-1}(x)+h_k(x) \qquad (1)$$

加上正则化项v，则有：

$$f_k(x)=f_{k-1}(x)+v\cdot h_k(x) \qquad (2)$$

v的取值范围为：0< v ≤ 1。达到同样的训练集学习效果，（2）式需要更多的迭代次数，即（2）式模型的复杂度较小。

（2） 对训练集进行无放回抽样，抽样比例为 v（0 < v ≤ 1）。取部分样本去做GBDT决策树的拟合可以降低方差，但是会增加偏差。

（3） 对每轮拟合的损失函数梯度的回归树进行剪枝，剪枝算法参考CART剪枝过程。

GBDT与AdaBoost的模型比较

假设初始化$f_0(x)=0$

AdaBoost模型表示为：

$$f_M(x)=\sum_{i=1}^{M}\alpha_i\cdot f_i(x)$$

GBDT模型表示为：

$$f_M(x) = \sum_{i=1}^{M} f_i(x)$$

比较这两式，你会发现GBDT模型没有权值 αi，原因是：AdaBoost每次都是对不同分布（权值）的原始数据集进行训练，得到一系列弱学习器，然后结合权值得到最终模型；GBDT模型没有权值是因为弱学习器是拟合上一轮的残差，随着回归树个数的增加，残差越来越小，因此弱学习器不需要权值。

总结

本文介绍了boosting族的提升树算法和GBDT算法，提升树算法的每轮弱学习器是拟合上一轮的残差生成的，GBDT算法的每轮弱学习器是拟合上一轮损失函数的负梯度生成的。提升树算法和GBDT算法都是用CART回归树作为弱学习器，只要确定模型的损失函数，提升树和GBDT就可以通过前向分布算法进行构建。

参考：

https://www.cnblogs.com/pinard/p/6140514.html

推荐阅读

集成学习原理总结

比较全面的随机森林算法总结

比较全面的Adaboost算法总结

从机器学习谈起

-END-

长按二维码关注

机器学习算法那些事

微信：beautifulife244

砥砺前行 不忘初心