# djjowfy



Blog address: http://djjowfy.com/2017/08/01/XGBoost%E7%9A%84%E5%8E%9F%E7%90%86/

# XGBoost的原理

₾ 2017-08-01 | □ 原创 , 机器学习 | ● 4998

# 这篇博客的由来 (瞎扯)

我在学习机器学习的时候,发现网上很少有对XGBoost原理探究的文章。而XGBoost用途是很广泛的。据kaggle在2015年的统计,在29只冠军队中,有17只用的是XGBoost,其中有8只只用了XGBoost。于是只能自己在网上找资料,幸而XGBoost的作者陈天奇在arixv上发布了一篇关于XGBoost的论文,于是就有了这篇博客。这篇博客首先将回顾监督学习,给出它的通用的优化函数。然后介绍回归树,它是XGBoost里的得到的最终模型的基本组成单元,许多裸回归树组成的回归森林就是XGBoost最终的学习模型。进而为了构造回归树,介绍了gradient tree boosting。从而引出了两种算法,一种是用于单线程的贪婪算法,一种是可以并行的近似算法,并作了结果的对比,显示出近似算法比较高的精确性。最后将介绍XGBoost的用法。

# 监督学习的回顾(背景知识)

## 概念

符号	含义
$R^d$	特征数目为d的数据集
$x_i \in R^d$	第 $i$ 个样本
$w_{j}$	第 $j$ 个特征的权重
$\hat{y}_i$	$x_i$ 的预测值
$y_i$	第 $i$ 个训练集的对应的标签
Θ	特征权重的集合, $\Theta=\{w_j j=1,\cdots,d\}$

### 模型

基本上相关的所有模型都是在下面这个线性式子上发展起来的

$$\hat{y}_i = \sum_{j=0}^d w_j x_{ij}$$

上式中 $x_0=1$ ,就是引入了一个偏差量,或者说加入了一个常数项。由该式子可以得到一些模型:

- 线性模型,最后的得分就是 $\hat{y}_i$
- logistic模型,最后的得分是 $1/(1+exp(-\hat{y}_i))$ 。然后设置阀值,转为正负实例。
- 其余的大部分也是基于 $\hat{y}_i$ 做了一些运算得到最后的分数

## 参数

参数就是 $\Theta$ ,这也正是我们所需要通过训练得出的。

### 训练时的目标函数

训练时通用的目标函数如下:

$$Obj(\Theta) = L(\Theta) + \Omega(\Theta)$$

在上式中 $L(\Theta)$ 代表的是训练误差,表示该模型对于训练集的匹配程度。 $\Omega(\Theta)$ 代表的是正则项,表明的是模型的复杂度。训练误差可以用 $L=\sum_{i=1}^n l(y_i,\hat{y}_i)$ 来表示,一般有方差和logistic误差。

- 方差:  $l(y_i, \hat{y}_i) = (y_i \hat{y}_i)^2$
- logstic误差:  $l(y_i, \hat{y}_i) = y_i ln(1 + e^{-\hat{y}_i}) + (1 y_i) ln(1 + e^{\hat{y}_i})$

正则项按照Andrew NG的话来说,就是避免过拟合的。为什么能起到这个作用呢?正是因为它反应的是模型复杂度。模型复杂度,也就是我们的假设的复杂度,按照奥卡姆剃刀的原则,假设越简单越好。所以我们需要这一项来控制。

- L2 范数:  $\Omega(w) = \lambda ||w||^2$
- L1 范数(lasso):  $\Omega(w) = \lambda ||w||_1$

常见的优化函数有有岭回归,logstic回归和Lasso,具体的式子如下

- 岭回归,这是最常见的一种,由线性模型,方差和L2范数构成。具体式子为 $\sum_{i=1}^n (y_i w^T x_i)^2 + \lambda ||w||^2$
- logstic回归,这也是常见的一种,主要是用于二分类问题,比如爱还是不爱之类的。由线性模型,logistic 误差和L2范数构成。具体式子为 $\sum_{i=1}^n [y_i ln(1+e^{-w^Tx_i})+(1-y_i)ln(1+e^{w^Tx_i})]+\lambda||w||^2$

lasso比较少见,它是由线性模型,方差和L1范数构成的。具体式子为 $\sum_{i=1}^n (y_i - w^T x_i)^2 + \lambda ||w||_1$ 

我们的目标的就是让 $Obj(\Theta)$ 最小。那么由上述分析可见,这时必须让 $L(\Theta)$ 和 $\Omega(\Theta)$ 都比较小。而我们训练模型的时候,

根据Andrew Ng的课程,要在bias和variance中间找平衡点。bias由 $L(\Theta)$ 控制,variance由 $\Omega(\Theta)$ 

控制。欠拟合,那么 $L(\Theta)$ 和 $\Omega(\Theta)$ 都会比较大,过拟合的话 $\Omega(\Theta)$ 会比较大,因为模型的扩展性不强,或者说稳定性不好。

# 回归树的介绍 (基础学习模型)

#### 概述

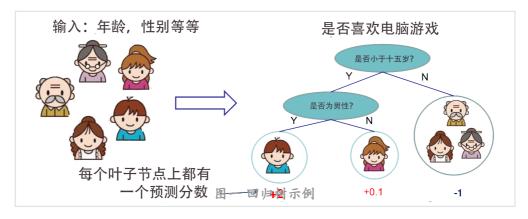
回归树,也叫做分类与回归树,我认为就是一个叶子节点具有权重的二叉决策树。它具有以下两点特征

- 决策规则与决策树的一样

- 每个叶子节点上都包含了一个权重,也有人叫做分数

下图就是一个回归树的示例:





回归树有以下四个优点:

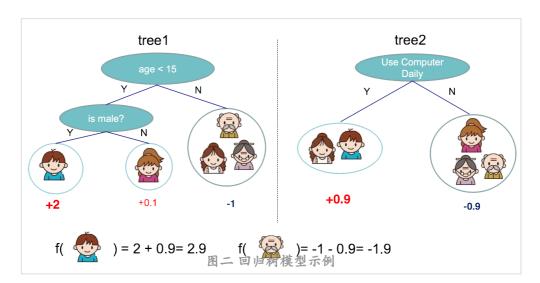
- 1. 使用范围广,像GBM,随机森林等。(PS:据陈天奇大神的统计,至少有超过半数的竞赛优胜者的解决方案都是用回归树的变种)
  - 2. 对于输入范围不敏感。所以并不需要对输入归一化
  - 3. 能学习特征之间更高级别的相互关系
  - 4. 很容易对其扩展

### 模型

假设我们有K棵树,那么

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^K f_k(x_i), \ \ f_k \in \mathcal{F}$$

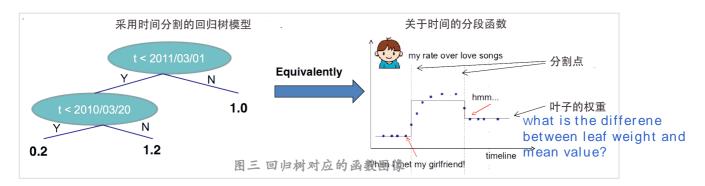
上式中 $\mathcal{F}$ 表示的是回归森林中的所有函数空间。 $f_k(x_i)$ 表示的就是第i个样本在第k棵树中落在的叶子的权重。以下图为例



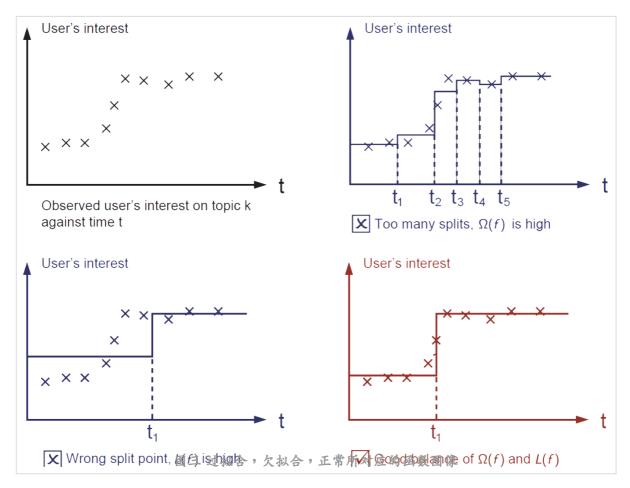
可见小男孩落在第一棵树的最左叶子和第二棵树的最左叶子,所以它的得分就是这两片叶子的权重之和,其余也同理。m么现在我们需要求的参数就是每棵树的结构和每片叶子的权重,或者简单的来说就是求 $f_k$ 。那么为了和上一节所说的通用结构统一,可以设

$$\Theta = \{f_1, f_2, f_3, \cdot, f_k\}$$

如果我们只看一棵回归树,那么它可以绘成分段函数如下



可见分段函数的分割点就是回归树的非叶子节点,分段函数每一段的高度就是回归树叶子的权重。那么就可以直观地看到欠拟合和过拟合曲线所对应的回归树的结构。根据我们上一节的讨论, $\Omega(f)$ 表示模型复杂度,那么在这里就对应着分段函数的琐碎程度。L(f)表示的就是函数曲线和训练集的匹配程度。



综上所述,我们可以得出该模型的表达式如下

$${\hat y}_i = \sum_{k=1}^K f_k(x_i), \;\; f_k \in \mathcal{F}$$

## 训练时的目标函数

训练误差如下

$$L(\Theta) = \sum_{i=1}^n l(y_i, \hat{y}_i) = \sum_{i=1}^n l(y_i, \sum_{k=1}^K f_{m{k}})$$

模型复杂度如下

$$\Omega(\Theta) = \sum_{k=1}^K \Omega(f_k)$$

因此,训练时的目标函数如下

$$Obj = \sum_{i=1}^n l(y_i, \hat{y}_i) + \sum_{k=1}^K \Omega(f_k)$$

如果训练误差

- 
$$l(y, \hat{y}_i) = (y_i - \hat{y}_i)^2$$
,那么这就叫做 ${f g}$ radient boosted machine

- 
$$l(y,\hat{y}_i) = y_i ln(1+e^{-\hat{y}_i} + (1-y_i)ln(1+e^{\hat{y}_i}))$$
,那么这就叫做logistBosst

对于 $\Omega(f_k)$ 来说,可以用树的节点个数,树的深度,树叶权重的L2范数等等来进行描述。

### 参数

于是现在未知的就是 $f_k$ ,这就是我们下一节所要解决的问题

$$\Theta = \{f_1, f_2, f_3, \cdots, f_k\}$$

# Gradient Boosting(如何构造回归树)

上一节说明来回归树长啥样,也就是我们的模型最后长啥样。但是该模型应该怎么去求出 $\Theta$ 呢?这一节就介绍两种算法,一种是贪心算法,一种是近似算法。

# 贪心算法

### 完善目标函数的定义

这个算法的思想很简单,一棵树一棵树地往上加,一直到K棵树停止。过程可以用下式表达:

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

 $\hat{y}_i^{(t)}$ 表示的是第i次循环后,对 $x_i$ 所得到的得分。于是带入目标函数可得

$$egin{align} Obj^{(t)} &= \sum_{i=1}^n l(y_i, \hat{y}_i^{(t)}) + \sum_{i=1}^t \Omega(f_i) \ &= \sum_{i=1}^n \underline{l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i))} + \Omega(f_t) + constant \ &\downarrow &\downarrow &\downarrow &\downarrow &\downarrow \end{pmatrix}$$

可由泰勒公式得到下式

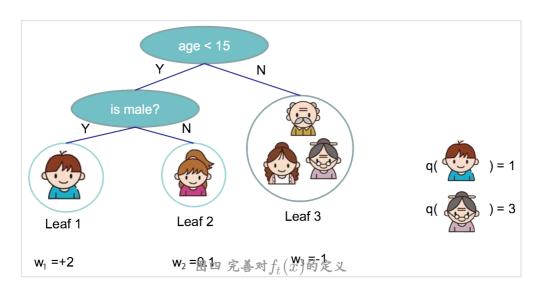
 $g_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}} \; l(y_i, \hat{y}^{(t-1)})$ , 用 $h_i$ 代表f''(x), 于是 $h_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}}^2 \; l(y_i, \hat{y}^{(t-1)})$ 于是现在目标函数就为下式:

$$Obj^{(t)} pprox \sum_{i=1}^{n} [l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + g_i f_t(x_i) + rac{1}{2} h_i f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) + constant$$
 $= \sum_{i=1}^{n} [g_i f_t(x_i) + rac{1}{2} h_i f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) + [\sum_{i=1}^{n} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + constant]$ 

很明显,上式中后面那项 $\left[\sum_{i=1}^n l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + constant
ight]$ 对于该目标函数我们求最优值点的时候并无影响,所以,现在 可把优化函数写为

$$m{7}$$
  $m{7}$   $Obj^{(t)}pprox\sum_{i=1}^n[g_if_t(x_i)+rac{1}{2}h_if_t^2(x_i)]+\Omega(f_t)$ 

上一节讨论了 $f_t(x)$ 的物理意义,现在我们对其进行数学公式化。设 $w \in R^T$ ,w为树叶的权重序列,  $\{1,2,\cdots,T\}$  ,q为树的结构。那么q(x)表示的就是样本x所落在树叶的位置。可以用下图形象地表示



于是 $f_t(x)$ 可以用下式进行表示

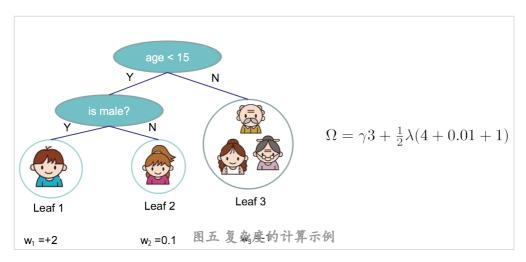
$$f_t(x) = w_{q(x)}, w \in R^T \ q: R^d 
ightarrow \{1, 2, \cdot \cdot \cdot, T\}$$

现在对训练误差部分的定义已经完成。那么对模型的复杂度应该怎么定义呢?

树的深度?最小叶子权重?叶子个数?叶子权重的平滑程度?等等有许多选项都可以描述该模型的复杂度。为了方便,现在 用叶子的个数和叶子权重的平滑程度来描述模型的复杂度。可以得到下式:

$$\Omega(f_t) = \gamma T + rac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2$$

上式中前一项用叶子的个数乘以一个收缩系数,后一项用L2范数来表示叶子权重的平滑程度。下图就是计算复杂度的一个示例:



最后再增加一个定义,用 $I_j$ 来表示第j个叶子里的样本集合。也就是图四中,每第i个圈,就用 $I_j$ 来表示。

$$I_j = \{i | q(x_i) = j\}$$

好了,最后把优化函数重新按照每个叶子组合,并舍弃常数项:

$$egin{align} Obj^{(t)} &pprox \sum_{i=1}^n [g_i f_t(x_i) + rac{1}{2} h_i f_t^2(x_i)] + \Omega(f_t) \ &= \sum_{i=1}^n [g_i w_{q(x_i)} + rac{1}{2} h_i w_{q(x)}^2] + \gamma T + rac{1}{2} \lambda \sum_{j=1}^T w_j^2 \ &= \sum_{j=1}^T [(\sum_{i \in I_j} g_i) w_j + rac{1}{2} (\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda) w_j^2] + \gamma T \end{array}$$

### 求最优值

初中时所学的二次函数的最小值可以推广到矩阵函数里

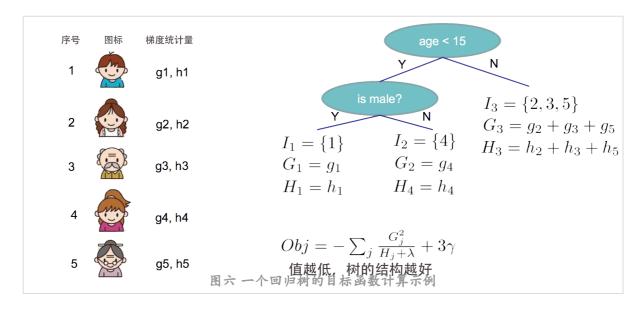
设 
$$Gx+rac{1}{2}Hx^2$$
  $=-rac{1}{2}rac{G^2}{H}$  ,  $H>0$  设  $G_j=\sum_{i\in I_j}g_i$  ,  $H_j=\sum_{i\in I_j}h_i$  ,那么

$$egin{align} Obj^{(t)} &= \sum_{j=1}^T [(\sum_{i \in I_j} g_i) w_j + rac{1}{2} (\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda) w_j^2] + \gamma T \ &= \sum_{j=1}^T [G_j w_j + rac{1}{2} (H_j + \lambda) w_j^2] + \gamma T \ \end{aligned}$$

因此,若假设我们的树的结构已经固定,就是q(x)已经固定,那么

$$egin{aligned} W_j^* &= -rac{G_j}{H_j + \lambda} \ Obj &= -rac{1}{2} \sum_{i=1}^T rac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T \end{aligned}$$

为了形象地理解,下图就是一个示例:



#### 求树结构

现在只要知道树的结构,就能得到一个该结构下的最好分数。可是树的结构应该怎么确定呢?没法用枚举,毕竟可能的状态 基本属于无穷种。

这种情况,贪婪算法是个好方法。从树的深度为0开始,每一节点都遍历所有的特征。对于某个特征,先按照该特征里的值进行排序,然后线性扫描该特征来决定最好的分割点,最后在所有特征里选择分割后,Gain最高的那个特征。

$$egin{aligned} Obj_{split} &= -rac{1}{2}[rac{G_L^2}{H_L + \lambda} + rac{G_R^2}{H_R + \lambda}] + \gamma T_{split} \ Obj_{noSplit} &= -rac{1}{2}rac{(G_L + G_R)^2}{H_L + H_R + \lambda} + \gamma T_{noSplit} \ Gain &= Obj_{noSplit} - Obj_{split} \ &= rac{1}{2}[rac{G_L^2}{H_L + \lambda} + rac{G_R^2}{H_R + \lambda} - rac{(G_L + G_R)^2}{H_L + H_R + \lambda}] - \gamma (T_{split} - T_{nosplit}) \end{aligned}$$

这时,就有两种后续。一种是当最好的分割的情况下,*Gain*为负时就停止树的生长,这样的话效率会比较高也简单,但是这样就放弃了未来可能会有更好的情况。另外一种就是一直分割到最大深度,然后进行修剪,递归得把划分叶子得到的Gain为负的收回。一般来说,后一种要好一些,于是我们采用后一种,完整的算法如下(没有写修剪)

# 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_{i \in I} score_i
```

## 算法复杂度

- 1. 按照某特征里的值进行排序,复杂度是O(nlog n)
- 2. 扫描一遍该特征所有值得到最优分割点,因为该层(兄弟统一考虑)一共有n个样本,所以复杂度是O(n)
- 3. 一共有d个特征,所以对于一层的操作,复杂度是O(d(nlog n + n)) = O(d nlog n)
- 4. 该树的深度为k。所以总复杂度是O(k d n log n)

#### 注意事项

对某个节点的分割时,是需要按某特征的值排序,那么对于无序的类别变量,就需要进行one-hot化。不然的话,假设某特征有1,2,3三种变量。我们进行比较时,就会只比较左子树为1,2或者右子树为2,3,或者不分割,哪个更好。这样的话就没有考虑,左子树为1,3的分割。

因为Gain于特征的值范围是无关的,它采用的是已经生成的树的结构与权重来计算的。所以不需要对特征进行归一化处。

#### 回顾和完善

- 1. 每次循环增加一棵树
- 2. 在每次循环的开始时计算 $g_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}} \; l(y_i, \hat{y}^{(t-1)}), \; h_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}}^2 \; l(y_i, \hat{y}^{(t-1)})$
- 3. 采用贪婪算法生长树 $f_t(x)$ , $Ohj = -rac{1}{2}\sum_{j=1}^Trac{G_j^2}{H_{t+\lambda}}+\gamma T$
- 4. 把 $f_t(x)$ 加在模型之中 $\hat{y}_i^{(t)}=\hat{y}_i^{(t-1)}+\epsilon f_t(x)$ 。注意,这里多了个 $\epsilon$ 算子,这个是作为一个收缩系数,或者叫做步进。加上它的好处就是每一步我们都不是做一个完全的最优化,留下余地给未来的循环,这样能防止过拟合。

以上就是贪婪算法。显而易见,这种算法并行的效率很低,我们常用的scikit-learn等用的就是这个算法。XGBoost在单线程版本的时候,用的也是这种算法。

## 近似算法

根据前面的讨论,我们可以发现我们的模型对特征中的值的范围不敏感,只对顺序敏感。举个例子,假设一个样本集中某特征出现的值有1,4,6,7,那么把它对应的换成1,2,3,4。生成的模型里树的结构是一样的,只不过对应的判断条件变了,比如把小于6换成了小于3而已。这也给我们一个启示,我们完全可以用百分比作为基础来构造模型。

我们用 $\mathcal{D}_k = \{(x_{1k},h_1),(x_{2k},h_2),(x_{3k},h_3),\cdots,(x_{nk},h_n)$ 代表每个样本的第k个特征和其对应的二阶梯度所组成的集合。那么我们现在就能用百分比来定义下面的这个排名函数 $r_k:\mathbb{R}\to[0,1]$ 

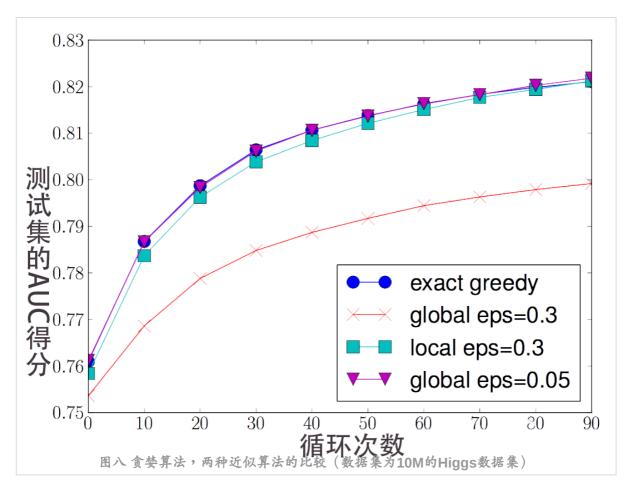
$$r_k(z) = rac{1}{\sum_{(x,h) \in \mathcal{D}_k} h} \sum_{(x,h) \in \mathcal{D}_k, x < z} h$$

上式表示的就是该特征的值小于z的样本所占总样本的比例。于是我们就能用下面这个不等式来寻找分离点  $\left\{s_{k1},s_{k2},s_{k3},\cdot,\cdot,\cdot,s_{kl}\right\}$ 

$$\|r_k(s_{k,j}) - r_k(s_{k,j+1})\| < \epsilon, \ \min_i \, x_{ik}, \ \max_i \, x_{ik}$$

上式中 $\epsilon$ 表示的是一个近似比例,或者说一个扫描步进。就从最小值开始,每次增加 $\epsilon*(\max_i x_{ik} - \min_i x_{ik})$ 作为分离点。然后在这些分离点中选择一个最大分数作为最后的分离点。

很明显 $\mathcal{D}_k$ 有两种选择,或者说 $\min_i x_{ik}$ 和 $\max_i x_{ik}$ 有两种选择。一种是一开始选好,然后每次分离都不变,也就是说是在总体样本里选最大值和最小值。另外一种就是每次分离后,在分离出来的样本里选,也就是在以前的所定义的 $I_j$ 里选。很容易就觉得后面这种选择方式虽然会繁琐一点,但是效果会比前面的那种好。现在我们定义前面的那种里的叫做全局选择,后面的这种叫做局部选择。陈天奇做了一个比较,曲线如下图:



由此可见,局部选择的近似算法的确比全局选择的近似算法优秀的多,所得出的结果和贪婪算法几乎不相上下。

算法的伪代码如下图所示

# 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

### end

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

图九 近似算法的伪代码

## 一些进一步优化

在机器学习中,one-hot后,经常会得到的是稀疏矩阵,于是XGBoost也对这个作出了优化。还可以处理缺失值,毕竟这也是 树模型一贯的优点。但这里就不细表了,毕竟太过于细节了。下一节我们就来看XGBoost这种强大的模型应该怎么使用吧。

# 使用

### 例程

官方例程如下:

```
1
2
    import xgboost as xgb
 3 # read in data
    dtrain = xgb.DMatrix('demo/data/agaricus.txt.train')
 5
    dtest = xgb.DMatrix('demo/data/agaricus.txt.test')
    # specify parameters via map
 6
    param = {'max_depth':2, 'eta':1, 'silent':1, 'objective':'binary:logistic' }
7
    num_round = 2
8
    bst = xgb.train(param, dtrain, num_round)
9
    # make prediction
10
    preds = bst.predict(dtest)
11
```

## 参数

很明显,上面重要的就是param,这个参数应该怎么设。在官网上有整整一个 $\overline{\text{MQ}}$ 的说明。在这里我们只挑选一些重要常用的说一下。

### 与过拟合有关的参数

在机器学习中,欠拟合很少见,但是过拟合却是一个很常见的东西。XGBoost与其有关的参数也不少。

#### 增加随机性

- eta 这个就是学习步进,也就是上面中的 $\epsilon$ 。
- subsample 这个就是随机森林的方式,每次不是取出全部样本,而是有放回地取出部分样本。有人把这个称为行抽取, subsample就表示抽取比例
- colsample\_bytree和colsample\_bylevel 这个是模仿随机森林的方式,这是列抽取。colsample\_bytree是每次准备构造一棵新树时,选取部分特征来构造,colsample\_bytree就是抽取比例。colsample\_bylevel表示的是每次分割节点时,抽取特征的比例。
- $\max_{\mathbf{delta\_step}}$  这个是构造树时,允许得到 $f_t(x)$ 的最大值。如果为0,表示无限制。也是为了后续构造树留出空间,和eta相似

#### 控制模型复杂度

- max\_depth 树的最大深度
- min\_child\_weight 如果一个节点的权重和小于这玩意,那就不分了
- gamma每次分开一个节点后,造成的最小下降的分数。类似于上面的Gain
- alpha和lambda就是目标函数里的表示模型复杂度中的L1范数和L2范数前面的系数

## 其他参数

- booster 表示用哪种模型,一共有gbtree, gbline, dart三种选择。一般用gbtree。
- nthread 并行线成数。如果不设置就是能采用的最大线程。
- sketch\_eps 这个就是近似算法里的 $\epsilon$ 。
- scale\_pos\_weight 这个是针对二分类问题时,正负样例的数量差距过大。

# 参考文献

- XGBoost: A Scalable Tree Boosting System
- o Introduction to Boosted Trees
- 。 XGBoost官网

# 机器学习

# XGBoost

#XGBoost的原理

《 对双调欧几里得旅行商问题的一些思考

对java中关于文件读取方法效率的比较 >

分享到: 收藏夹 复制网址 邮件 微信 QQ空间 腾讯微博 豆瓣 一键分享 更多