# 集成学习-提升方法

七月算法

# 主要内容

• 集成学习算法的思路

• AdaBoost算法

• Gradient boosting算法

# 集成学习算法思路

- 假如有T个朋友,每个人拥有一个预测A股的函数gi(x),如何更好的 预测股价升降
  - · validation: 选择一个炒股成绩最好的gi(x)
  - · uniformly: 平均每个人预测结果, 投票的方式
  - · non-uniformly: 加权求和每个人的结果, 某些人的权重更大
  - · conditionally: 有条件的加权求和每个的结果,满足条件下某些人的权重更大

- 存在函数  $g_1 g_2 \dots g_T$ , 每个 $g_i(x)$  函数表示股价升降预测
  - · validation: 选择一个炒股成绩最好的

$$G(x)=g_t(x)$$
,  $\operatorname{argmin}_{t\in\{1..T\}} E_{val}(g_t)$ 

· uniformly: 平均每个人预测结果

$$G(x) = \operatorname{sign}\left(\sum_{i=1}^{T} 1 \cdot g_i(x)\right)$$

· non-uniformly: 加权求和每个人的结果, 某些人的权重更大

$$G(x) = \operatorname{sign}\left(\sum_{i=1}^{T} \alpha_i \cdot g_i(x)\right) \text{ with } \alpha_i \ge 0$$

· conditionally: 有条件的加权求和每个的结果,满足条件下某些人的权重更大

$$G(x) = \operatorname{sign}\left(\sum_{i=1}^{T} q_i(x) \cdot g_i(x)\right) \text{ with } q_i(x) \ge 0$$

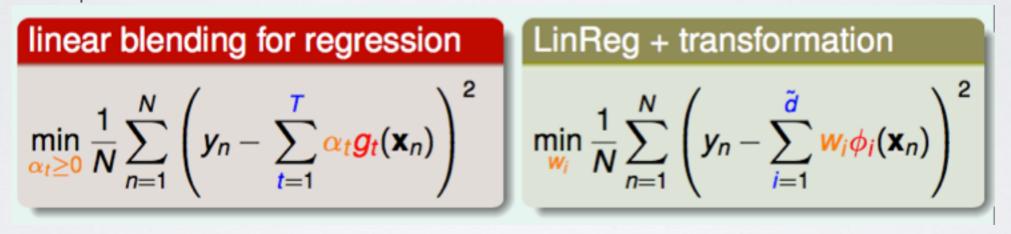
- Uniform blending
  - · 利用函数的多样化, 实现G(x)比单个g(x)好
  - 分类应用
    - $G(x) = \operatorname{argmax}_{k=1,...K} \sum_{i}^{T} [g_i(x) = k]$
  - 回归应用

$$G(x) = \frac{1}{T} \sum_{i}^{T} g_i(x)$$

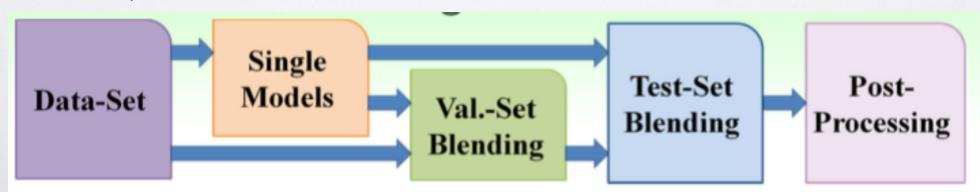
- Linear blending
  - 选择一组权重,满足

$$G(x) = \operatorname{sign}\left(\sum_{i=1}^{T} \alpha_i g_i(x)\right) \text{ with } \alpha_i \ge 0 \qquad \min_{\alpha_i \ge 0} \operatorname{Error}(G(x, \alpha))$$

· 回归问题,等价于新的特征下的线性回归,唯一的约束条件 是alpha非负



• 验证集, 训练集



- · 如果构造多样性的 g1 g2 ··· gT
  - 基于模型
    - 不同的算法
    - 不同的参数
  - 基于数据
    - 随机采样
    - 设置权重, 改变概率
    - 随机选择特征

# 自适应提升算法

- Adaptive Boosting (AdaBoost)
  - 对样本赋予权重,采用迭代方式构造

• 线性加权得到最后结果

## • 利用权重构造不同的函数

· 对同样的算法,相同的训练集,如果样本的权重 不一样,能够得到不同的函数

$$argmin \sum_{g_t}^{N} u_i^t [g_t(x_i) \neq y_i] \longrightarrow g_t$$
  $argmin_{g_t}^{N} \sum_{i}^{N} u_i^{t-1} [g_{t-1}(x_i) \neq y_i] \longrightarrow g_{t-1}$ 

• 反过来,已知一个函数,可以通过设置权重,使得这个函数看起来像随机的  $\sum_{i=1}^{N} [a_{i}(x_{i}) \neq y_{i}]$ 

$$\frac{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t} \left[ g_{t}(x_{i}) \neq y_{i} \right]}{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t}} = \frac{1}{2}$$

• 权重 - >函数, 函数 - >权重, 因此构造出 - 个迭代的方式, 通过这个迭代的方法可以制造出一系列的 g(x)

want: 
$$\frac{\sum_{n=1}^{N} u_n^{(t+1)} \llbracket y_n \neq g_t(\mathbf{x}_n) \rrbracket}{\sum_{n=1}^{N} u_n^{(t+1)}} = \frac{\blacksquare_{t+1}}{\blacksquare_{t+1} + \bullet_{t+1}} = \frac{1}{2}, \text{ where}$$
$$\blacksquare_{t+1} = \sum_{n=1}^{N} u_n^{(t+1)} \llbracket y_n \neq g_t(\mathbf{x}_n) \rrbracket, \bullet_{t+1} = \sum_{n=1}^{N} u_n^{(t+1)} \llbracket y_n = g_t(\mathbf{x}_n) \rrbracket$$

• need: 
$$\underbrace{(\text{total } u_n^{(t+1)} \text{ of incorrect})}_{t+1} = \underbrace{(\text{total } u_n^{(t+1)} \text{ of correct})}_{t+1}$$

- · 即在已有的权重下, 迭代构造新的权重(对应新的判别函数)
  - 把分错样本的权重放大,分对样本的权重缩小即可

'optimal' re-weighting: let 
$$\epsilon_t = \frac{\sum_{n=1}^N u_n^{(t)} [y_n \neq g_t(\mathbf{x}_n)]}{\sum_{n=1}^N u_n^{(t)}}$$
, multiply incorrect  $\propto (1 - \epsilon_t)$ ; multiply correct  $\propto \epsilon_t$ 

define scaling factor 
$$\blacklozenge_t = \sqrt{\frac{1-\epsilon_t}{\epsilon_t}}$$
 incorrect  $\leftarrow$  incorrect  $\cdot$   $\blacklozenge_t$  correct  $\leftarrow$  correct  $\wedge$   $\downarrow_t$ 

- 基于权重构造系列函数的方法
  - u1 = [1/N, ... 1/N];
  - for t = 1... T
    - ·在ut权重下选择gt,使得权重分类误差最小
    - · 根据gt的结果,重新生产ut+1
  - · 最后得到一组gt(x)函数(实际上可以认为g0(x)为随机猜测函数)

• 得到了gl(x)... gt(x)一系列函数, 那么如何 构造G(x)呢?

· AdaBoost 是一个在迭代中直接构造权重 alpha的算法

$$\alpha_{t} = \ln\left(\frac{1-\varepsilon_{t}}{\varepsilon_{t}}\right) \quad \varepsilon_{t} = \frac{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t} \left[g_{t}(x_{i}) \neq y_{i}\right]}{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t}}$$

$$\alpha_{t} = \ln\left(\frac{1-\varepsilon_{t}}{\varepsilon_{t}}\right) \quad \varepsilon_{t} = \frac{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t} \left[g_{t}(x_{i}) \neq y_{i}\right]}{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t}}$$

· 当加权错误率接近0的时候, a变得非常大

· 当加权错误率接近1/2的时候, a接近0

#### ·完整的AdaBoost算法

(1) 初始化权重 
$$U^1 = \left[\frac{1}{N}...\frac{1}{N}\right]$$

\* 选择最优的函数

$$g_t = \operatorname{argmin}_g \sum_{i=1}^N u_i^{t-1} [(g(x_i) - y_i)]$$

\* 计算错误率

$$\varepsilon_{t} = \frac{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t} [g_{t}(x_{i}) \neq y_{i}]}{\sum_{i}^{N} u_{i}^{t}}$$

\* 根据当前的结果更新权重

\* xi 正确分类: 
$$u_i^{t+1} = u_i^t \sqrt{\frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}}$$
\* xi 错误分类:  $u_i^{t+1} = u_i^t \sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}}$ 

$$u_i^{t+1} = u_i^t \sqrt{\frac{\varepsilon}{1-\varepsilon}}$$

\*记录权重

$$\alpha_t = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1 - \varepsilon_t}{\varepsilon_t} \right)$$

• 输出判别函数

$$G(x) = \operatorname{sign}\left(\sum_{t}^{T} \alpha_{t} g_{t}(x)\right)$$

· AdaBoost函数也可以看作是前向分步算法的一种实现

• 集成模型为加法模型

• 损失函数为指数函数

- 前向分步算法
- □考虑加法模型

$$f(x) = \sum_{m=1}^{M} \beta_m b(x; \gamma_m)$$

- □ 其中:
  - 基函数:  $b(x, \gamma_m)$
  - 基函数的参数 γ<sub>m</sub>
  - 基函数的系数: β<sub>m</sub>

- 前向分步算法含义
- □ 在给定训练数据及损失函数L(y,f(x))的条件下,学习加法模型f(x)成为经验风险极小化即损失函数极小化问题:

$$\min_{\beta_m, \gamma_m} \sum_{i=1}^N L\left(y_i, \sum_{m=1}^M \beta_m b(x_i; \gamma_m)\right)$$

口 算法简化:如果能够从前向后,每一步只学习一个基函数及其系数,逐步逼近上式。 即:每步只优化损失函数: $\min_{\beta,\gamma}\sum_{i=1}^{N}L(y_{i},\beta b(x_{i};\gamma))$ 

• 前向分步算法的算法框架

- □ 输入:
  - 训练数据集T={(x1,y1), (x2,y2)...(xN,yN)}
  - 损失函数L(y,f(x))
  - 基函数集{b(x; γ)}
- □ 输出:
  - 加法模型f(x)
- □ 算法步骤:

- □ 初始化 $f_0(x) = 0$
- □ 对于m=1,2,..M
  - 极小化损失函数  $(\beta_m, \gamma_m) = \arg\min_{\beta, \gamma} \sum_{i=1}^N L(y_i, f_{m-1}(x_i) + \beta b(x_i; \gamma))$ 
    - $\square$  得到参数  $\beta_m \gamma_m$
  - 更新当前模型:

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

口 得到加法模型  $f(x)=f_M(x)=\sum_{m=1}^M \beta_m b(x;\gamma_m)$ 

• 前向分步算法与AdaBoost

- □ AdaBoost算法是前向分步算法的特例,这时,模型是基本分类器组成的加法模型,损失函数是指数函数。
- □ 损失函数取:

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

### • 证明

- 口 假设经过m-1轮迭代,前向分步算法已经得到 $f_{m-1}(x)$ :  $f_{m-1}(x) = f_{m-2}(x) + \alpha_{m-1}G_{m-1}(x)$ 
  - $= \alpha_1 G_1(x) + \cdots + \alpha_{m-1} G_{m-1}(x)$
- 口在第m轮迭代得到 $\alpha_m$ ,  $G_m(x)$ 和  $f_m(x)$
- $\square$  目标是使前向分步算法得到的 $\alpha_m$ 和 $G_m(x)$ 使  $f_m(x)$ 在训练数据集T上的指数损失最小,即

$$(\alpha_m, G_m(x)) = \arg\min_{\alpha, G} \sum_{i=1}^N \exp(-y_i (f_{m-1}(x_i) + \alpha G(x_i)))$$

证明

□ 进一步:

$$(\alpha_m, G_m(x)) = \arg\min_{\alpha, G} \sum_{i=1}^N \overline{w}_{mi} \exp(-y_i \alpha G(x_i))$$

- $\square \not \perp \varphi : \overline{w}_{mi} = \exp(-y_i f_{m-1}(x_i))$
- $\square$   $\overline{w}_{mi}$  既不依赖  $\alpha$  也不依赖 G,所以与最小化无关。但 $\overline{w}_{mi}$ 依赖于  $f_{m-1}(x)$ ,所以,每轮迭代会发生变化。

• 证明

- □ 首先求分类器G\*(x)
- 口对于任意  $\alpha > 0$ ,是上式最小的G(x)由下式得到:

$$G_m^*(x) = \arg\min_G \sum_{i=1}^N \overline{w}_{mi} I(y_i \neq G(x_i))$$

口 其中,  $\overline{w}_{mi} = \exp(-y_i f_{m-1}(x_i))$ 

## 证明

### □ 分类错误率为:

$$e_{m} = \frac{\sum_{i=1}^{N} \overline{w}_{mi} I(y_{i} \neq G(x_{i}))}{\sum_{i=1}^{N} \overline{w}_{mi}} = \sum_{i=1}^{N} \overline{w}_{mi} I(y_{i} \neq G(x_{i}))$$

• 证明

立 求权值:  $\sum_{i=1}^{N} \overline{w}_{mi} \exp(-y_i \alpha G(x_i))$   $= \sum_{y_i = G_m(x_i)} \overline{w}_{mi} e^{-\alpha} + \sum_{y_i \neq G_m(x_i)} \overline{w}_{mi} e^{\alpha}$   $= \left(e^{\alpha} - e^{-\alpha}\right) \sum_{i=1}^{N} \overline{w}_{mi} I(y_i \neq G(x_i)) + e^{-\alpha} \sum_{i=1}^{N} \overline{w}_{mi}$ 

- **为 将 G**\*(x) **带 六**:  $G_m^*(x) = \arg\min_G \sum_{i=1}^N \overline{w}_{mi} I(y_i \neq G(x_i))$
- 口求导,得到  $\alpha_m = \frac{1}{2} \log \frac{1 e_m}{e_m}$

证明

## 权值的更新

□由模型

$$f_m(x) = f_{m-1}(x) + \alpha_m G_m(x)$$

□ 以及权值

$$\overline{w}_{mi} = \exp(-y_i f_{m-1}(x_i))$$

□ 可以方便的得到:

$$\overline{w}_{m+1,i} = \overline{w}_{m,i} \exp(-y_i \alpha_m G_m(x))$$

### Theoretical Guarantee of AdaBoost

From VC bound

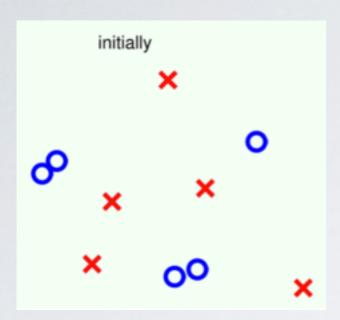
$$E_{\text{out}}(G) \leq E_{\text{in}}(G) + O\left(\sqrt{\underbrace{O(d_{\text{VC}}(\mathcal{H}) \cdot T \log T)}_{d_{\text{VC}} \text{ of all possible } G} \cdot \frac{\log N}{N}}\right)$$

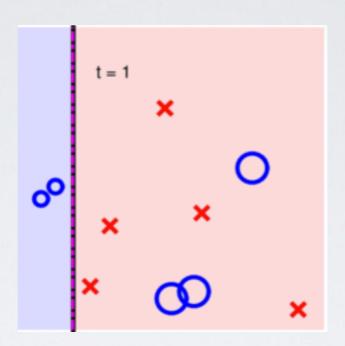
- first term can be small:
  - $E_{in}(G) = 0$  after  $T = O(\log N)$  iterations if  $\epsilon_t \le \epsilon < \frac{1}{2}$  always
- second term can be small:
   overall d<sub>VC</sub> grows "slowly" with T

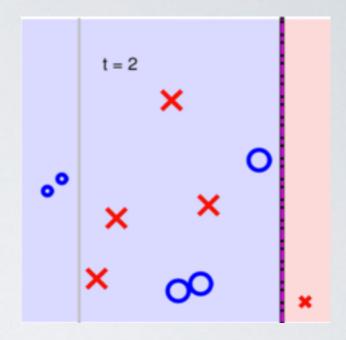
#### boosting view of AdaBoost:

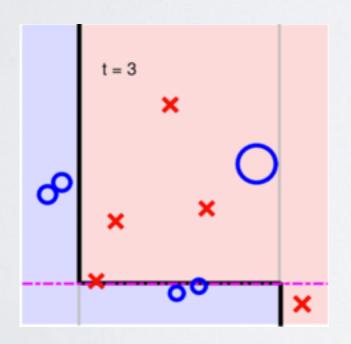
if A is weak but always slightly better than random ( $\epsilon_t \leq \epsilon < \frac{1}{2}$ ), then (AdaBoost+A) can be strong ( $E_{in} = 0$  and  $E_{out}$  small)

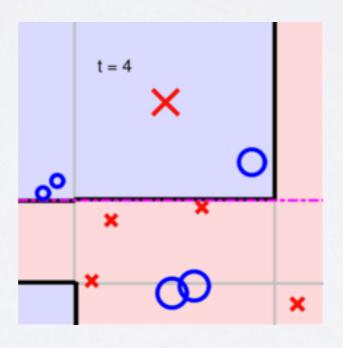
## • 图示

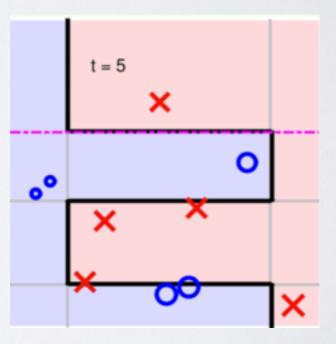




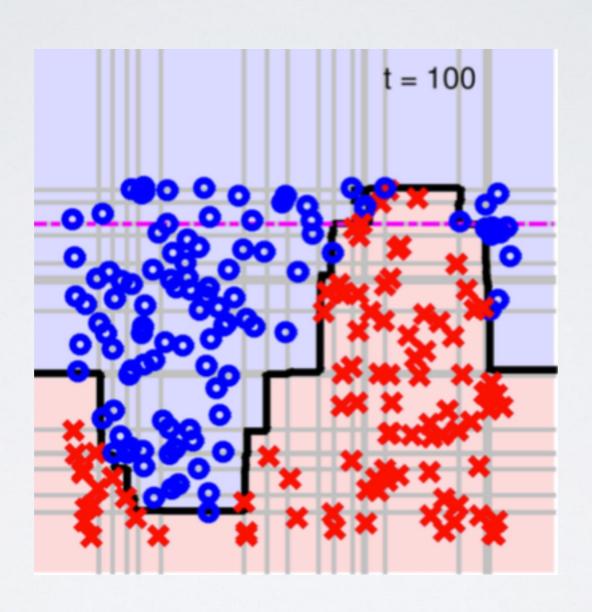








## • 图示



• 著名案例

### AdaBoost-Stump in Application



original picture by F.U.S.I.A. assistant and derivative work by Sylenius via Wikimedia Commons

### The World's First 'Real-Time' Face Detection Program

- AdaBoost-Stump as core model: linear aggregation of key patches selected out of 162,336 possibilities in 24x24 images —feature selection achieved through AdaBoost-Stump
- modified linear aggregation G to rule out non-face earlier
   —efficiency achieved through modified linear aggregation

# 提升树

- GBRT (gradient boosted regression tree)
- GBDT(gradient boosted decision tree)
- LambdaMART

etc

- 集成树方法(Tree Ensemble methods)
  - 有许多的决策树构成,继承了树的优点:
    - Invariant to scaling of inputs
    - · Learn higher order interaction between features
  - 集成的方法
    - 提高整体的泛化能力,克服单一树的过拟合

### • 树集成模型

• 模型

$$\hat{y}_i = \sum_{k=1}^K f_k(x_i), \quad f_k \in \mathcal{F}$$
 Space of functions containing all Regression trees

每一个回归树,就是把样本映射到一个score,使用加性模型

- · 参数 每棵树的结构,每个非叶节点对应一个feature,一个split value
- 目标 学习出函数的集合,每个函数实际构成又是个单一的树

· 假设我们拥有k个树

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

• 目标函数

• 如何设计复杂度函数? 损失函数?

- CART树回顾
  - · 信息增益->用gini指数作为损失函数
  - 树的减枝操作->用节点数目作为正则函数
  - 最大深度 -> 树空间的约束
  - 回归树叶节点score L2 Norm->正则函数

- 模型可以应用到回归, 分类等多种问题
  - 尽管我们使用回归树作为基函数

- · 只需要通过设计合适的目标函数,可以应用到分类问题
  - 回归证:  $l(y_i, \hat{y}_i) = (y_i \hat{y}_i)^2$

- 如何实现函数的学习?
  - 我们寻找的对象是一棵棵的回归树,不再是向量空间,因此 无法使用SGD算法
  - · 采用加性提升训练方法: Additive Training
    - 从最简单起点开始, 一步步增加

$$\begin{array}{ll} \hat{y}_i^{(0)} &= 0 \\ \hat{y}_i^{(1)} &= f_1(x_i) = \hat{y}_i^{(0)} + f_1(x_i) \\ \hat{y}_i^{(2)} &= f_1(x_i) + f_2(x_i) = \hat{y}_i^{(1)} + f_2(x_i) \\ & \cdots \\ \hat{y}_i^{(t)} &= \sum_{k=1}^t f_k(x_i) = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i) \\ \hline \end{array}$$
 New function

Model at training round t

Keep functions added in previous round

• 通过最优化目标函数,来确定选择什么样的 $f_t(x)$ 加入到模型当中

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

This is what we need to decide in round t

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

$$= \sum_{i=1}^{n} l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + \sum_{i=1}^{t} \Omega(f_i) + Constant$$

Goal: find  $f_t$  to minimize this

· 如采用L2损失函数

$$Obj^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} \left( y_i - (\hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)) \right)^2 + \Omega(f_t) + const$$
  
=  $\sum_{i=1}^{n} \left[ 2(\hat{y}_i^{(t-1)} - y_i) f_t(x_i) + f_t(x_i)^2 \right] + \Omega(f_t) + const$ 

前一次迭代的残差

·对目标函数进行Talay展开,保留两阶

目标逐数:  $Obj^{(t)} = \sum_{i=1}^{n} l\left(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)\right) + \Omega(f_t) + constant$ 

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

$$\hat{y}_{i}^{(t)} = \hat{y}_{i}^{(t-1)} + f_{t}(x_{i})$$
$$f(x + \Delta x) \simeq f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^{2}$$

· 如采用L2损失函数

• If you are not comfortable with this, think of square loss

$$g_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}} (\hat{y}^{(t-1)} - y_i)^2 = 2(\hat{y}^{(t-1)} - y_i) \quad h_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}}^2 (y_i - \hat{y}^{(t-1)})^2 = 2$$

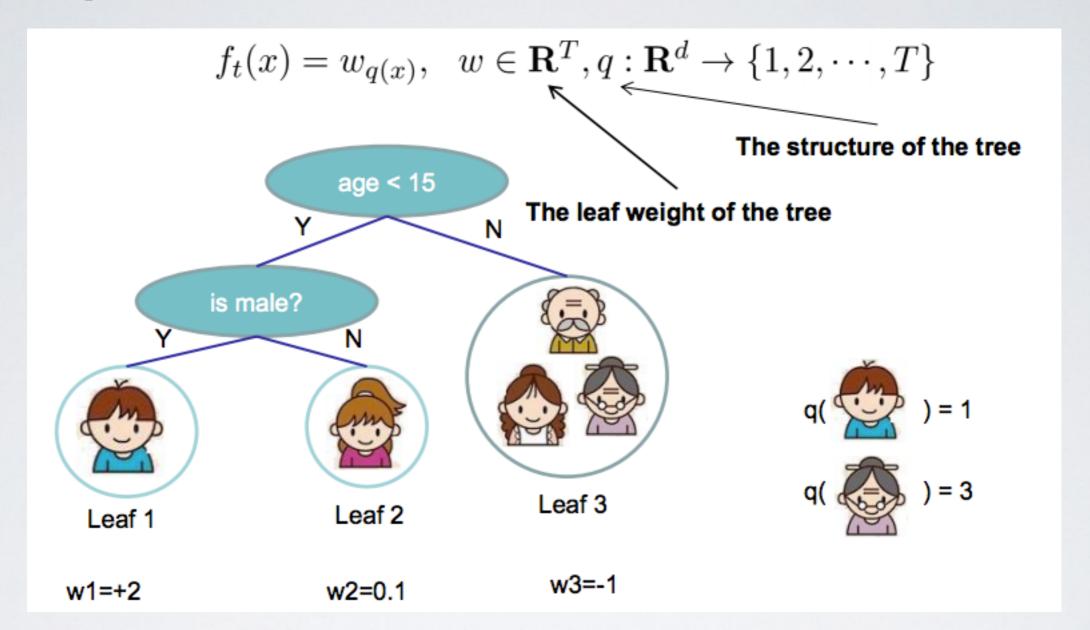
• 去掉常数项目,观察新的目标函数

$$\begin{split} \sum_{i=1}^n \left[ g_i f_t(x_i) + \tfrac{1}{2} h_i f_t^2(x_i) \right] + \Omega(f_t) \\ \bullet \quad \text{where} \quad g_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}} l(y_i, \hat{y}^{(t-1)}), \quad h_i = \partial_{\hat{y}^{(t-1)}}^2 l(y_i, \hat{y}^{(t-1)}) \end{split}$$

很明显 gi hi 都是可以计算, 已知的

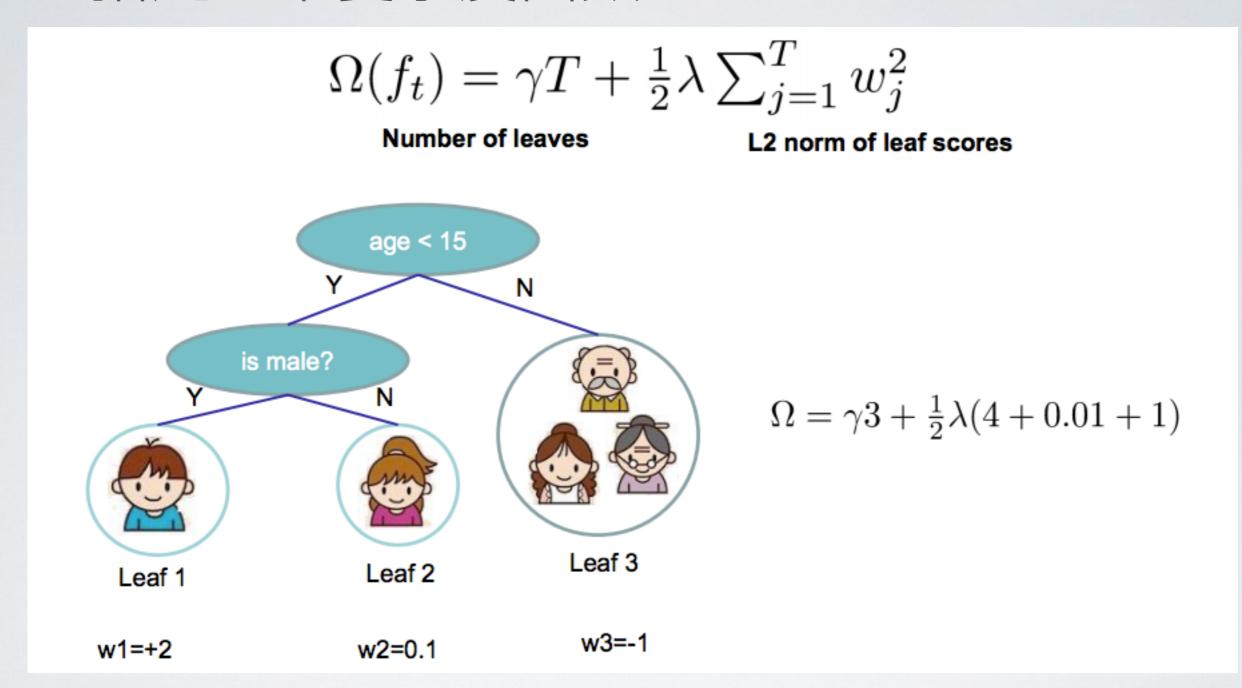
•接下来仔细考察  $f_t(x)$ , 即一棵独立的回归树

## • 考察 $f_t(x)$



- · 每个叶节点输出标量,所有叶子节点输出构成T维向量W
- · q 为样本到叶节点的映射

# • 指定一个复杂度函数



#### 注意不是唯一的方法

• 对某一个 $f_t(x)$  , 遍历所有叶节点  $I_j = \{i | q(x_i) = j\}$  首先定义叶节点训练样本集合

$$Obj^{(t)} \simeq \sum_{i=1}^{n} \left[ g_{i} f_{t}(x_{i}) + \frac{1}{2} h_{i} f_{t}^{2}(x_{i}) \right] + \Omega(f_{t})$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left[ g_{i} w_{q(x_{i})} + \frac{1}{2} h_{i} w_{q(x_{i})}^{2} \right] + \gamma T + \lambda \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{T} w_{j}^{2}$$

$$= \sum_{j=1}^{T} \left[ \left( \sum_{i \in I_{j}} g_{i} \right) w_{j} + \frac{1}{2} \left( \sum_{i \in I_{j}} h_{i} + \lambda \right) w_{j}^{2} \right] + \gamma T$$

#### T个变量的二次函数

## • 树的评价计算

Two facts about single variable quadratic function

$$argmin_x Gx + \frac{1}{2}Hx^2 = -\frac{G}{H}, \ H > 0$$
  $\min_x Gx + \frac{1}{2}Hx^2 = -\frac{1}{2}\frac{G^2}{H}$ 

• Let us define  $G_j = \sum_{i \in I_j} g_i \ H_j = \sum_{i \in I_j} h_i$ 

$$Obj^{(t)} = \sum_{j=1}^{T} \left[ (\sum_{i \in I_j} g_i) w_j + \frac{1}{2} (\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda) w_j^2 \right] + \gamma T$$
  
=  $\sum_{j=1}^{T} \left[ G_j w_j + \frac{1}{2} (H_j + \lambda) w_j^2 \right] + \gamma T$ 

 Assume the structure of tree (q(x)) is fixed, the optimal weight in each leaf, and the resulting objective value are

$$w_j^* = -\frac{G_j}{H_j + \lambda}$$
  $Obj = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^T \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T$ 

This measures how good a tree structure is!

- 知道如何评价树, 如何搜索出最佳树?
  - 枚举所有树结构
    - 计算树的评价函数

$$Obj = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{T} \frac{G_j^2}{H_j + \lambda} + \gamma T$$

• 选择最优树, 计算对应的W

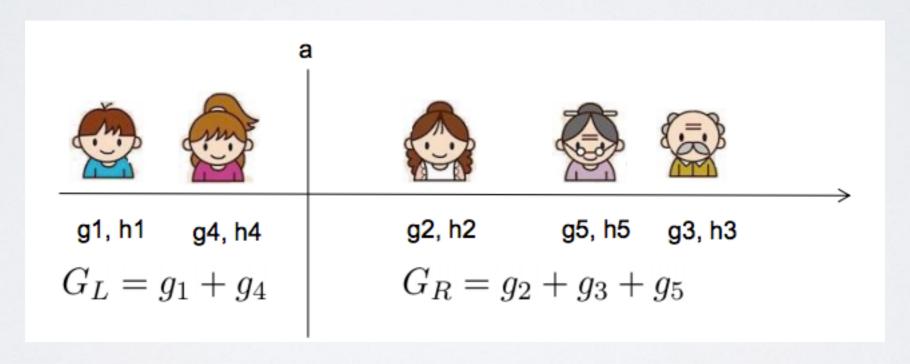
$$w_j^* = -\frac{G_j}{H_j + \lambda}$$

• 不是搜索所有树结构,而是从根节点开始,一层层 成长出一颗最佳树

- Start from tree with depth 0
- For each leaf node of the tree, try to add a split. The change of objective after adding the split is The complexity cost by

the score of right child

- 如何发现最佳的分支点
  - 遍历所有特征维度
    - · 在选中的特征维度上,按样本值排序,选择对应的split value
    - 计算目标函数



### • 完整的算法

- Add a new tree in each iteration
- Beginning of each iteration, calculate

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

• Use the statistics to greedily grow a tree  $f_t(x)$ 

$$Obj = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^{T} \frac{G_j^2}{H_i + \lambda} + \gamma T$$

- Add  $f_t(x)$  to the model  $\hat{y}_i^{(t)} = \hat{y}_i^{(t-1)} + f_t(x_i)$ 
  - Usually, instead we do  $y^{(t)} = y^{(t-1)} + \epsilon f_t(x_i)$
  - ullet is called step-size or shrinkage, usually set around 0.1
  - This means we do not do full optimization in each step and reserve chance for future rounds, it helps prevent overfitting

• 随机森林 vs AdaBoost vs Gradient boosting

• 随机 vs 权重 vs 梯度

· 梯度提升算法实现包,刷Kaggle数据的神器

https://github.com/dmlc/xgboost