# GBRT를 소개합니다

Web & Image 임민섭

- 2010 Yahoo L2R Challenge
  - 36k 질의, 883k 문서, 700개의 feature를 사용

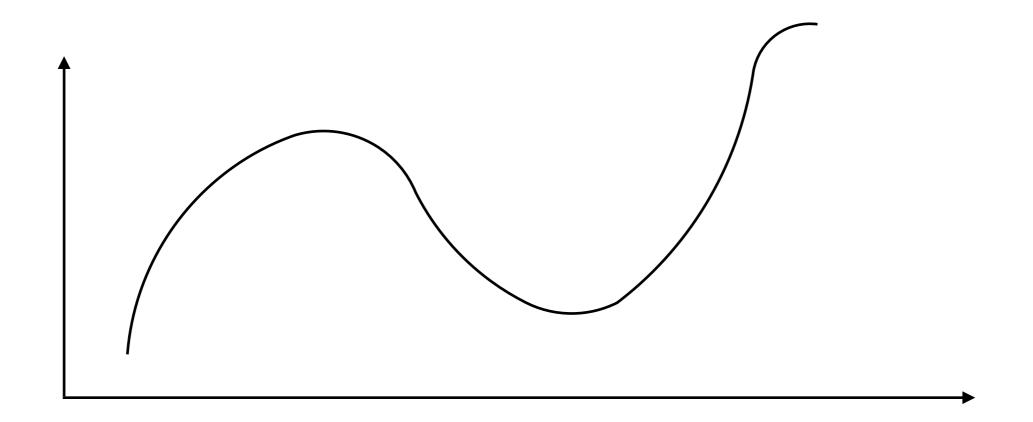
- 2010 Yahoo L2R Challenge
  - 36k 질의, 883k 문서, 700개의 feature를 사용
  - · Challenge 내 몇가지 특징들:
    - (1) 탑 랭커들은 decision tree를 주로 사용했다. (상위 5 팀이 모두 앙상블 트리를 사용함)

- 2010 Yahoo L2R Challenge
  - 36k 질의, 883k 문서, 700개의 feature를 사용
  - · Challenge 내 몇가지 특징들:
    - (1) 탑 랭커들은 decision tree를 주로 사용했다. (상위 5 팀이 모두 앙상블 트리를 사용함)
    - (2) 앙상블 기법(boosting, bagging and random forests)들이 주로 사용됐다.

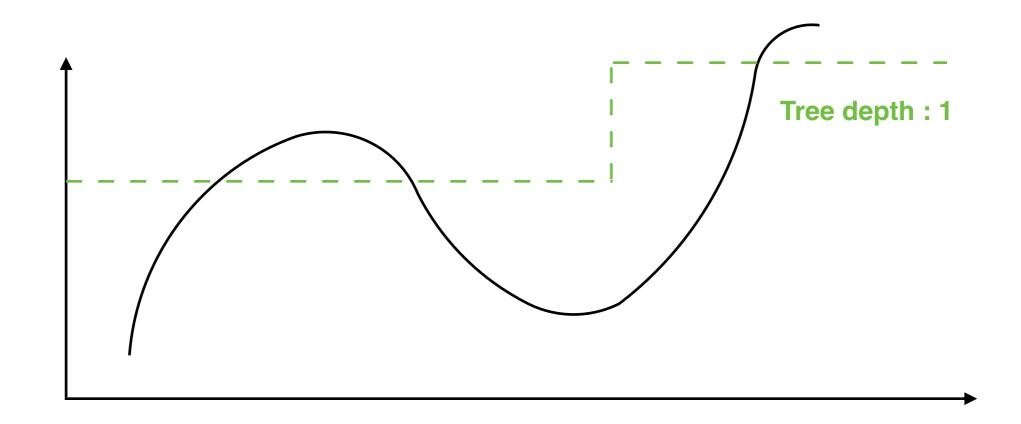
- 2010 Yahoo L2R Challenge
  - 36k 질의, 883k 문서, 700개의 feature를 사용
  - · Challenge 내 몇가지 특징들:
    - (1) 탑 랭커들은 decision tree를 주로 사용했다. (상위 5 팀이 모두 앙상블 트리를 사용함)
    - (2) 앙상블 기법(boosting, bagging and random forests)들이 주로 사용됐다.
    - (3) 탑 랭커들 사이의 점수차는 굉장히 미미했다. (비슷한 방식을 사용했으니 당연한 것일수도…)

- Boosting 컨셉은?
- "The idea is to used the weak learning method several times to get a succession of hypotheses, each one refocused on the examples that the previous ones found difficult and misclassified. ... Note, however, it is not obvious at all how this can be done" - Probably Approximately Correct: Nature's Algorithms for Learning and Prospering in a Complex World, page 152, 2013

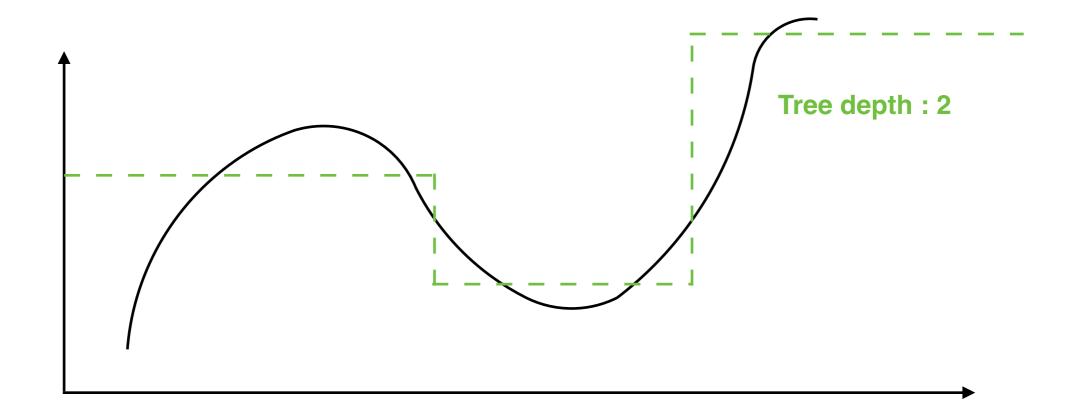
- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 깊 어보자
- Ex1) 1차원 feature를 가진 data를 트리로 regression 하기.



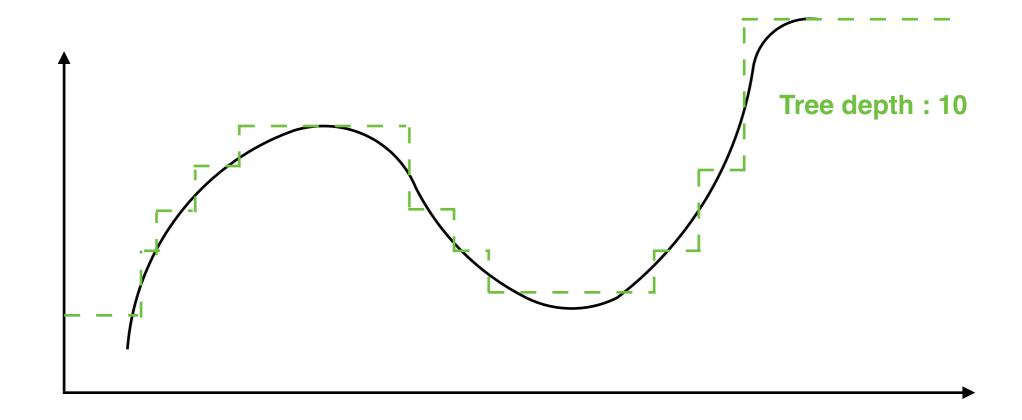
- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 짚 어보자
- Ex1) 1차원 feature를 가진 data를 트리로 regression 하기.



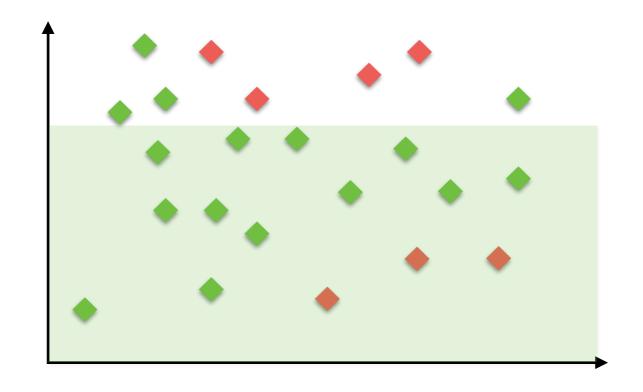
- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 깊 어보자
- Ex1) 1차원 feature를 가진 data를 트리로 regression 하기.



- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 깊 어보자
- Ex1) 1차원 feature를 가진 data를 트리로 regression 하기.

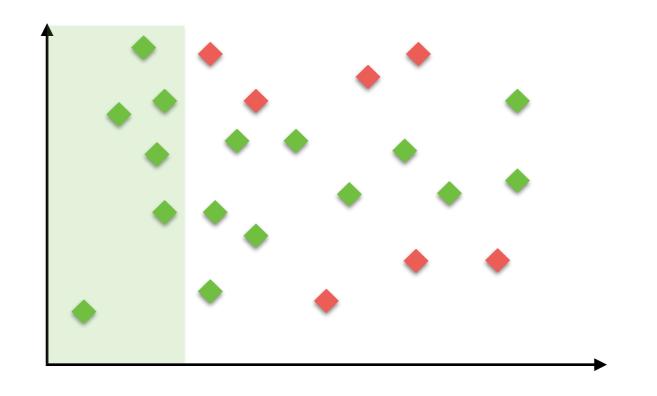


- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 깊 어보자
- Ex2) 2차원 feature를 가진 data를 앙상블 트리로 classification 하기.



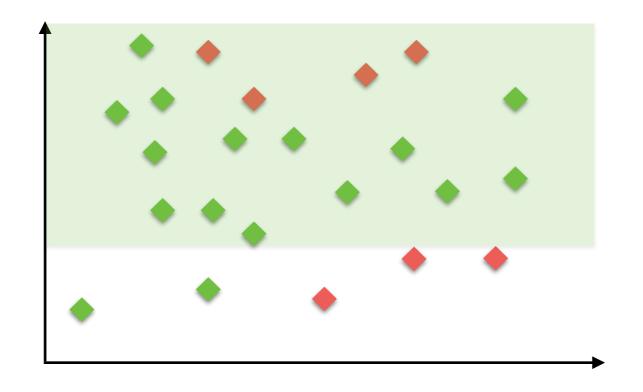
TREE1 of depth 1

- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 짚 어보자
- Ex2) 2차원 feature를 가진 data를 앙상블 트리로 classification 하기.



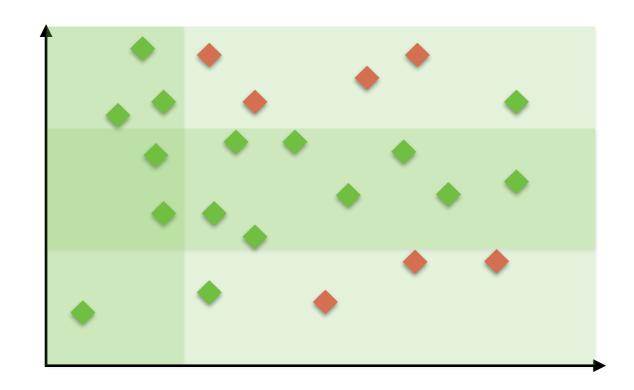
TREE2 of depth 1

- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 짚 어보자
- Ex2) 2차원 feature를 가진 data를 앙상블 트리로 classification 하기.



TREE3 of depth 1

- 더러운 수식에 들어가기 전에 그림으로 먼저 컨셉을 짚 어보자
- Ex2) 2차원 feature를 가진 data를 앙상블 트리로 classification 하기.



**Ensemble of all TREEs** 

• 그렇다면 짱짱이라고 하는 GBRT에 대해선 좀 자세히 보도록 하자.

- 그렇다면 짱짱이라고 하는 GBRT에 대해선 좀 자세히 보도록 하자.
- 우선 ML의 공통적인 목표 함수를 review해 보면:

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

- 그렇다면 짱짱이라고 하는 GBRT에 대해선 좀 자세히 보도록 하자.
- 우선 ML의 공통적인 목표 함수를 review해 보면:

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

- training data의 loss:  $L = \sum_{i=1}^{n} l(y_i, \hat{y}_i)$ 
  - square loss:  $l(y_i, \hat{y}_i) = (y_i \hat{y}_i)^2$
  - logistic loss:  $l(y_i, \hat{y}_i) = y_i \ln(1 + e^{-\hat{y}_i}) + (1 y_i) \ln(1 + e^{\hat{y}_i})$

- 그렇다면 짱짱이라고 하는 GBRT에 대해선 좀 자세히 보도록 하자.
- 우선 ML의 공통적인 목표 함수를 review해 보면:

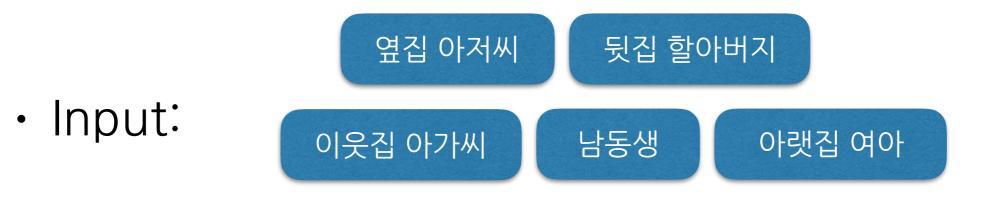
$$Obj(\Theta) = L(\Theta) + \Omega(\Theta)$$
 Regularisation

- Regularisation: how complicated the model is
  - L2 norm:  $\Omega(w) = \lambda ||w||^2$
  - L1 norm:  $\Omega(w) = \lambda ||w||_1$

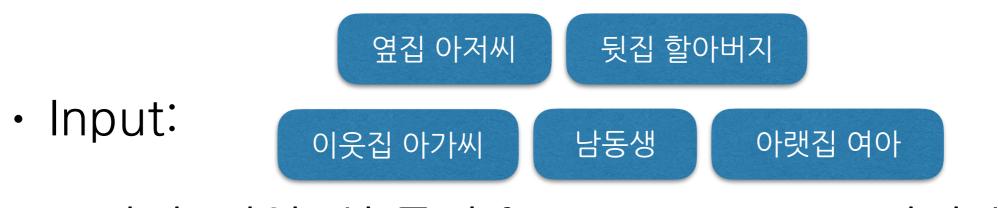
• Loss 를 최적화하면 예측값이 더 잘나오고, regularization을 최적화하면 좀 더 simple한 모델이 된다. Simple한 모델은 unseen data 예측에 variance 가 작아서 좀 더 stable 하다.

- Loss 를 최적화하면 예측값이 더 잘나오고, regularization을 최적화하면 좀 더 simple한 모델이 된다. Simple한 모델은 unseen data 예측에 variance 가 작아서 좀 더 stable 하다.
- Regression tree는 decision tree와 같은 decision rule 을 가지며, 각 leaf node당 score를 가지고 있다.

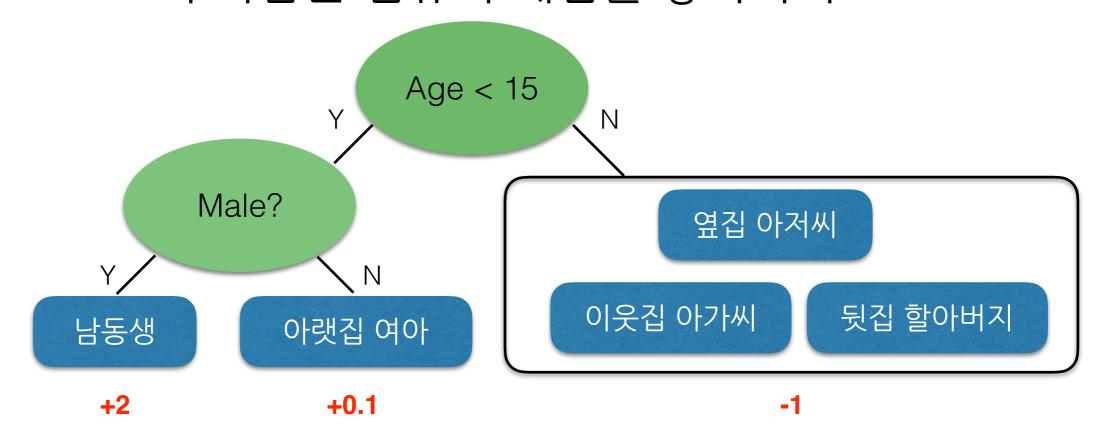
- Loss 를 최적화하면 예측값이 더 잘나오고, regularization을 최적화하면 좀 더 simple한 모델이 된다. Simple한 모델은 unseen data 예측에 variance 가 작아서 좀 더 stable 하다.
- Regression tree는 decision tree와 같은 decision rule 을 가지며, 각 leaf node당 score를 가지고 있다.
- · 이제 regression tree의 예제를 보며 배워보자!



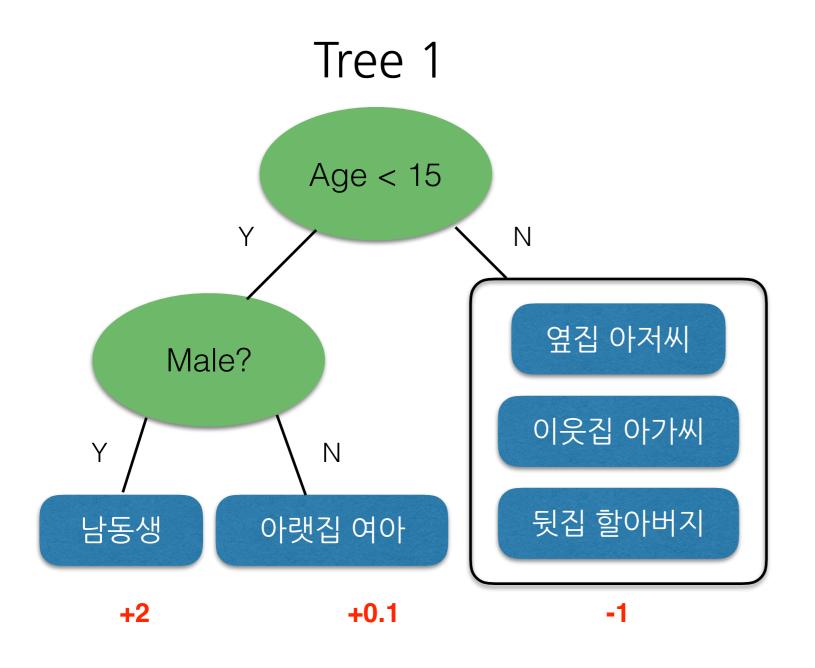
• 나이, 직업, 성 등의 feature vector 로 나타냄.



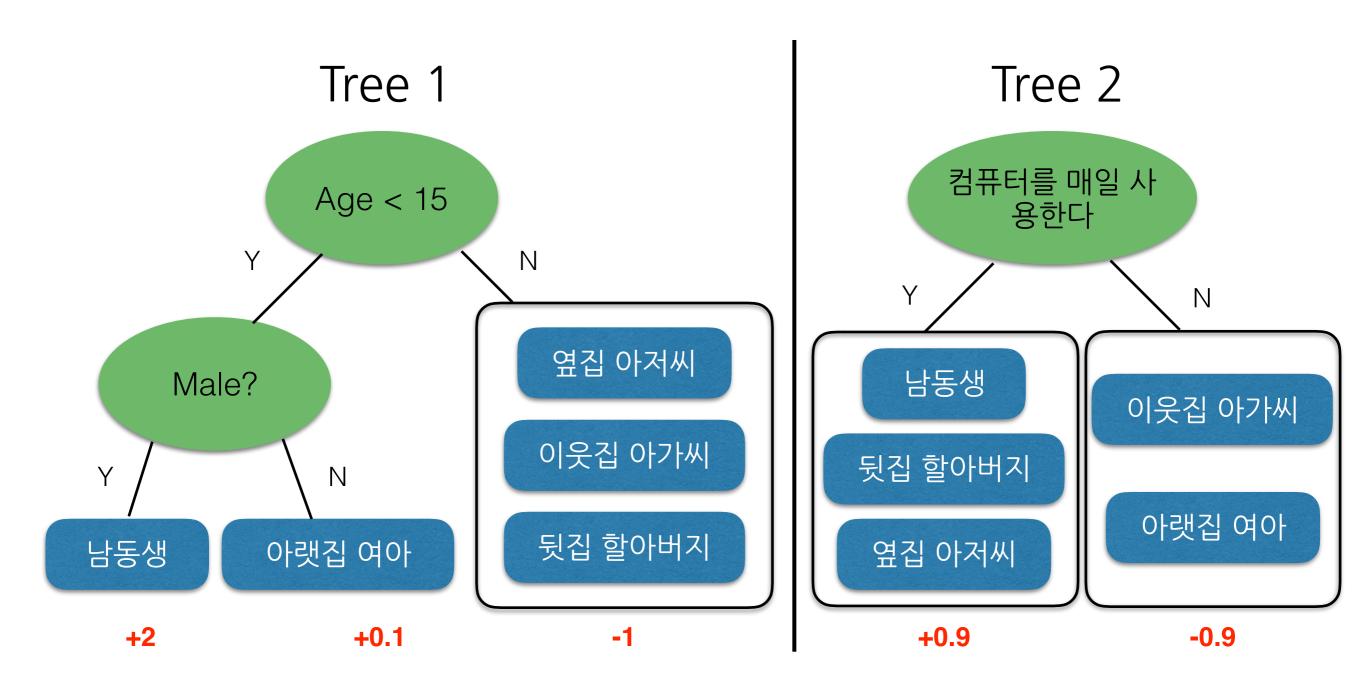
- 나이, 직업, 성 등의 feature vector 로 나타냄.
- Problem: 이 사람은 컴퓨터 게임을 좋아하나요?



Tree Ensemble



Tree Ensemble



• 이런 tree ensemble을 통해서 fine tuning을 해 나가 는 것이다!

- 이런 tree ensemble을 통해서 fine tuning을 해 나가 는 것이다!
- tree가 split되는 로직을 보면 input scaling을 요하지 않기 때문에 feature normalization이 필요없다!

- 이런 tree ensemble을 통해서 fine tuning을 해 나가 는 것이다!
- tree가 split되는 로직을 보면 input scaling을 요하지 않기 때문에 feature normalization이 필요없다!
- 트리 모델링을 시작해보자! (Let's get dirty…)

Model: assuming we have K trees

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

Model: assuming we have K trees

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

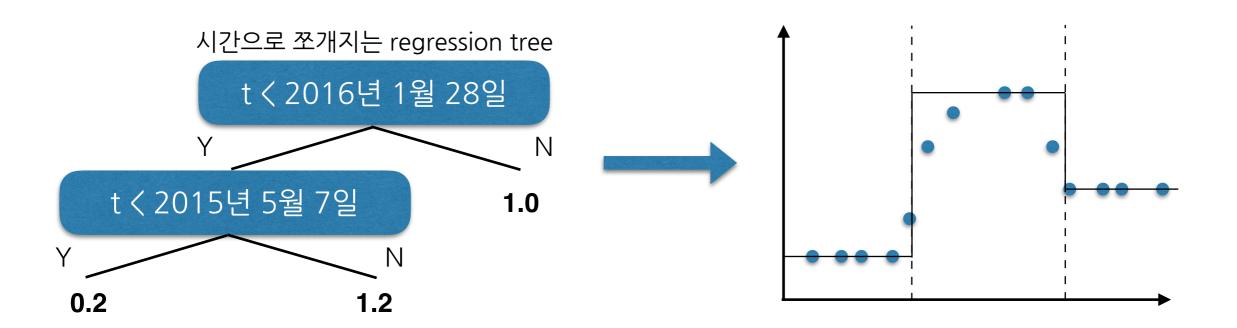
- Parameters
  - · 각 tree의 구조와 leaf의 score를 포함한다
  - ・weight를 학습하는 게 아니라 function(tree)를 학습하는 것!

• 어떻게 함수를 학습할 수 있지?

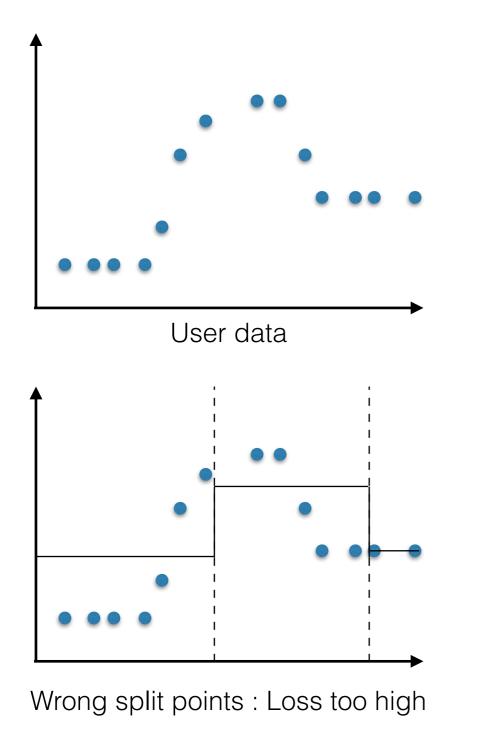
- 어떻게 함수를 학습할 수 있지?
- 이전과 똑같이 objective(loss,regularization)을 정해놓고 최적화 하면 된다!

- 어떻게 함수를 학습할 수 있지?
- 이전과 똑같이 objective(loss,regularization)을 정해놓고 최적화 하면 된다!
- 예를 들어볼까:
  - ・하나의 input t(time)을 가지는 regression tree
  - 내가 불특정 시간 t에서 사랑노래를 듣고 싶어하는지 예측을 해보고 싶다.

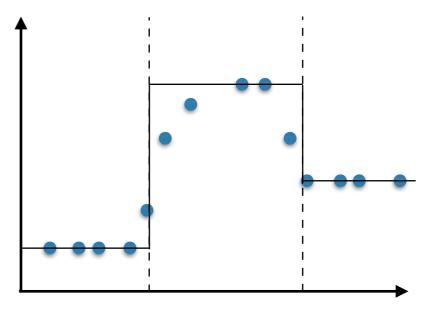
- 어떻게 함수를 학습할 수 있지?
- 이전과 똑같이 objective(loss,regularization)을 정해놓고 최적화 하면 된다!
- 예를 들어볼까:
  - ・하나의 input t(time)을 가지는 regression tree
  - 내가 불특정 시간 t에서 사랑노래를 듣고 싶어하는지 예측을 해보고 싶다.



• Step function 학습 예



Too many splits: Regularisation loss too high



Good balance of L and R

· 다시 Object 로 돌아가서:

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

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

Goal: find f\_t to minimize this

• 다시 Object 로 돌아가서:

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

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

Goal: find f\_t to minimize this

· Square loss 를 사용한다면:

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

· Square loss 가 아니라면 상당이 복잡한데…

- Square loss 가 아니라면 상당이 복잡한데…
- Taylor expansion을 써보자:

Taylor Expansion: 
$$f(x + \Delta x) \approx f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^2$$
  
Define:  $g_i = \frac{\partial l(y_i, \hat{y}^{(t-1)})}{\partial \hat{y}^{(t-1)}}$ , and  $h_i = \frac{\partial^2 l(y_i, \hat{y}^{(t-1)})}{\partial^2 \hat{y}^{(t-1)}}$ 

- Square loss 가 아니라면 상당이 복잡한데…
- Taylor expansion을 써보자:

Taylor Expansion: 
$$f(x + \Delta x) \approx f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)\Delta x^2$$
  
Define:  $g_i = \frac{\partial l(y_i, \hat{y}^{(t-1)})}{\partial \hat{y}^{(t-1)}}$ , and  $h_i = \frac{\partial^2 l(y_i, \hat{y}^{(t-1)})}{\partial^2 \hat{y}^{(t-1)}}$ 

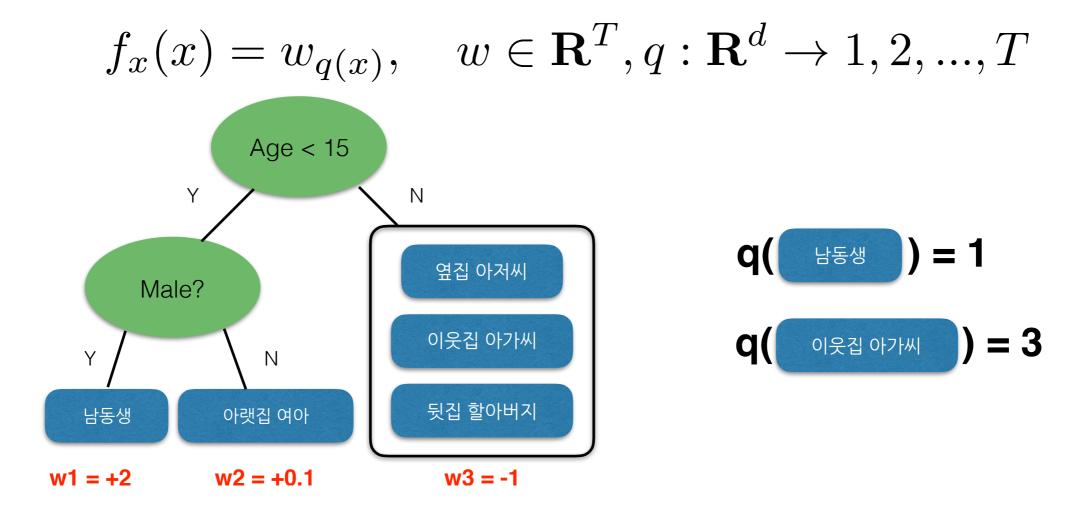
$$Obj^{(t)} \approx \sum_{i=1}^{n} \left[ l(y_i, \hat{y}_i^{(t-1)}) + g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i) \right] + \Omega(f_t) + constant$$

$$Obj^{(t)} \approx \sum_{i=1}^{n} \left[ g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i) \right] + \Omega(f_t)$$
 with constants removed

- Tree의 정의를 좀 더 디테일하게 해보자:
  - Tree를 leaf score의 벡터와 각 instance를 leaf로 매 핑해주는 함수(q)로 나타낸다:

$$f_x(x) = w_{q(x)}, \quad w \in \mathbf{R}^T, q : \mathbf{R}^d \to 1, 2, ..., T$$

- Tree의 정의를 좀 더 디테일하게 해보자:
  - Tree를 leaf score의 벡터와 각 instance를 leaf로 매 핑해주는 함수(q)로 나타낸다:

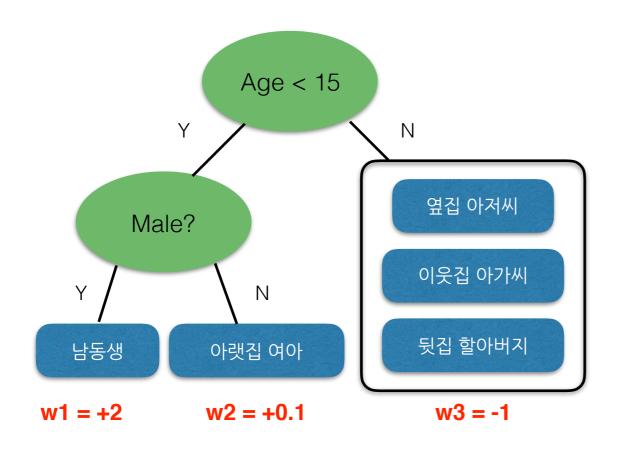


• Tree의 complexity도 정의해 보고:

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

• Tree의 complexity도 정의해 보고:

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



$$\Omega = \gamma \cdot 3 + \frac{1}{2}\lambda(4 + 0.01 + 1)$$

• 마지막으로 leaf j에 있는 instance set을 정의:

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

• 마지막으로 leaf j에 있는 instance set을 정의:

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

· Objective 함수를 다시 적어보면:

$$Obj^{(t)} \approx \sum_{i=1}^{n} \left[ g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i) \right] + \Omega(f_t)$$

• 마지막으로 leaf j에 있는 instance set을 정의:

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

· Objective 함수를 다시 적어보면:

$$Obj^{(t)} \approx \sum_{i=1}^{n} \left[ g_i f_t(x_i) + \frac{1}{2} h_i f_t^2(x_i) \right] + \Omega(f_t)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \left[ g_i w_{q(x_i)} + \frac{1}{2} h_i w_{q(x_i)}^2 \right] + \gamma T + \lambda \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{T} w_j^2$$

• 마지막으로 leaf j에 있는 instance set을 정의:

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

· Objective 함수를 다시 적어보면:

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

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

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

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

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

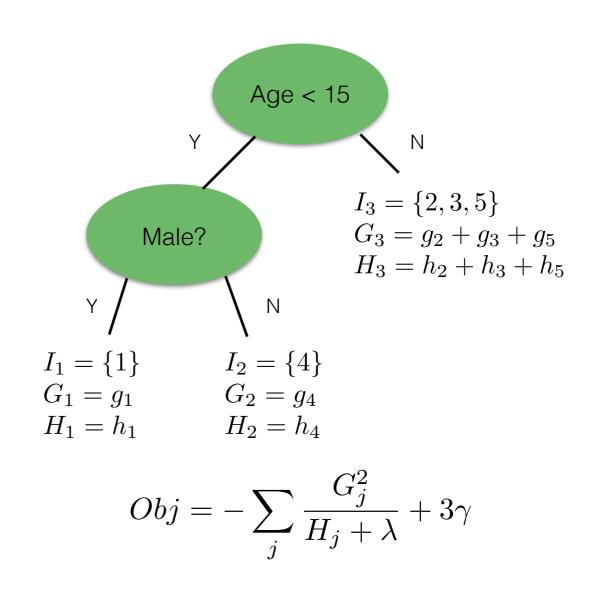
$$= \sum_{j=1}^{T} \left[ (\sum_{i \in I_j} g_i) w_j + \frac{1}{2} (\sum_{i \in I_j} h_i + \lambda) w_j^2 \right] + \gamma T$$

$$= \sum_{j=1}^{T} \left[ G_j w_j + \frac{1}{2} (H_j + \lambda) w_j^2 \right] + \gamma T$$

• w에 관한 2차 방정식이므로 optimal weight w\*:

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

Index	Instance	Gradient Statistics
1	남동생	g1, h1
2	이웃집 아가씨	g2, h2
3	뒷집 할아버지	g3, h3
4	아랫집 여아	g4, h4
5	옆집 아저씨	g5, h5



• 알고리즘:

• 알고리즘:

(1) 가능한 tree structure q들을 listing한다

- 알고리즘:
  - (1) 가능한 tree structure q들을 listing한다
  - (2) 각 q의 Obj 값을 구한다.

- 알고리즘:
  - (1) 가능한 tree structure q들을 listing한다
  - (2) 각 q의 Obj 값을 구한다.
  - (3) 가장 Obj값이 낮은 tree structure를 찿고 optimal weight w\*를 사용한다.

- 알고리즘:
  - (1) 가능한 tree structure q들을 listing한다
  - (2) 각 q의 Obj 값을 구한다.
  - (3) 가장 Obj값이 낮은 tree structure를 찿고 optimal weight w\*를 사용한다.
- 하지만 엄청나게 많은 tree structure q들이 있겠지…

• 그래서 practical하게: Greedy learning of the Tree:

- 그래서 practical하게: Greedy learning of the Tree:
  - (1) depth 0인 트리로 시작

- 그래서 practical하게: Greedy learning of the Tree:
  - (1) depth 0인 트리로 시작
  - (2) 각 leaf 노드에서 split을 했을때의 gain을 연산:

- 그래서 practical하게: Greedy learning of the Tree:
  - (1) depth 0인 트리로 시작
  - (2) 각 leaf 노드에서 split을 했을때의 gain을 연산:

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

Left child score

Right child score split을 하지 않을 때 score

- 그래서 practical하게: Greedy learning of the Tree:
  - (1) depth 0인 트리로 시작
  - (2) 각 leaf 노드에서 split을 했을때의 gain을 연산:

$$Gain = \left(\frac{G_L^2}{H_L + \lambda}\right) + \left(\frac{G_R^2}{H_R + \lambda}\right) - \left(\frac{(G_L + G_R)^2}{H_L + H_R + \lambda}\right) - \gamma$$

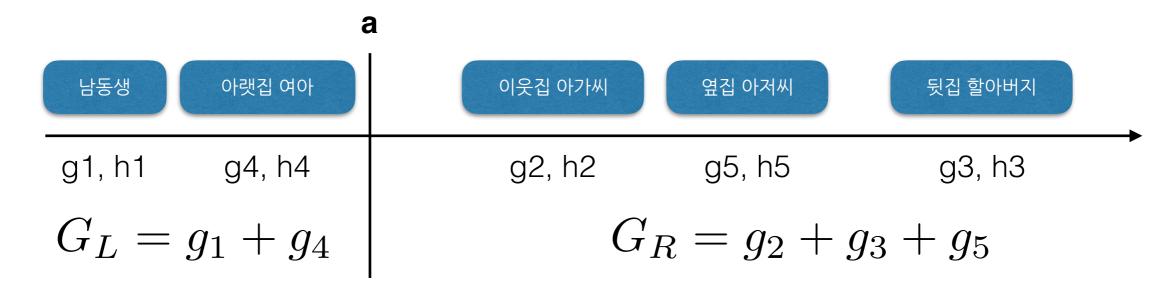
Left child score

Right child score split을 하지 않을 때 score

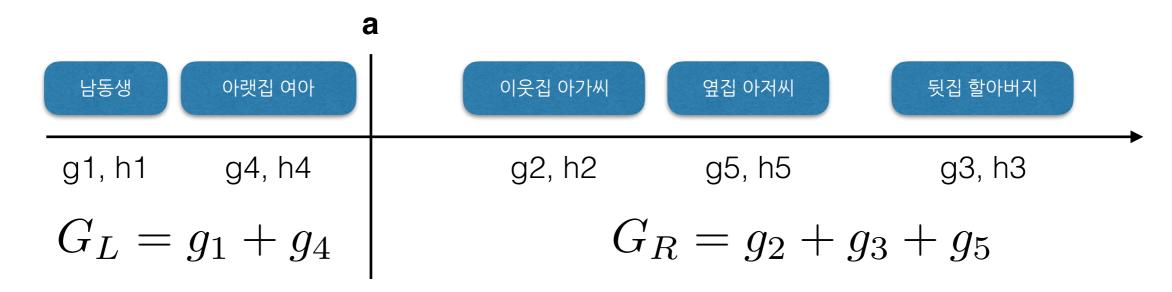
· 어떻게 best split을 찾을까?

•  $x_j < a$ 로 split을 했을 때의 gain은 얼마지?  $x_j$ 가 나이라 고 가정해보자.

•  $x_j < a$ 로 split을 했을 때의 gain은 얼마지?  $x_j$ 가 나이라 고 가정해보자.



•  $x_j < a$ 로 split을 했을 때의 gain은 얼마지?  $x_j$ 가 나이라고 가정해보자.



• 이 값들을 사용해서 gain을 구하고:

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

· Linear 스캔을 통해 best split을 찿으면 된다!

· 각 leaf node에서 모든 feature을 iterate 하는데

- · 각 leaf node에서 모든 feature을 iterate 하는데
  - Leaf node의 instance들을 feature value로 정렬

- · 각 leaf node에서 모든 feature을 iterate 하는데
  - Leaf node의 instance들을 feature value로 정렬
  - Linear 스캐닝을 통해서 best split 찿고

- · 각 leaf node에서 모든 feature을 iterate 하는데
  - Leaf node의 instance들을 feature value로 정렬
  - Linear 스캐닝을 통해서 best split 찿고
  - 모든 feature들 중에서 가장 좋은 split으로 한다

- · 각 leaf node에서 모든 feature을 iterate 하는데
  - · Leaf node의 instance들을 feature value로 정렬
  - Linear 스캐닝을 통해서 best split 찿고
  - 모든 feature들 중에서 가장 좋은 split으로 한다
- Depth가 K인 tree로 만드는 데 걸리는 Time Complexity는  $O(n \cdot d \cdot K \cdot log(n))$

• Gain 이 음수일 경우도 있다는 사실!

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

• Gain 이 음수일 경우도 있다는 사실!

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

- training loss reduction < regularisation 일 때.
- Predictiveness 와 simplicity의 tradeoff.

• Gain 이 음수일 경우도 있다는 사실!

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

- training loss reduction < regularisation 일 때.
- Predictiveness 와 simplicity의 tradeoff.
- Best split이 음수일 때 stop하는 pre-stopping과 tree
   를 먼저 max depth로 키운 후에 negative gain split
   을 pruning 하는 post pruning 기법이 있다.

· GBRT 총 정리:

- · GBRT 총 정리:
  - 각 iteration에서 나무 하나를 추가한다

- · GBRT 총 정리:
  - · 각 iteration에서 나무 하나를 추가한다
  - iteration은 grad stats를 계산하는 것으로 시작:

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

- · GBRT 총 정리:
  - · 각 iteration에서 나무 하나를 추가한다
  - · iteration은 grad stats를 계산하는 것으로 시작:

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

• stats 사용해서 greedy하게 tree  $f_t(x)$ 를 키운다

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

- · GBRT 총 정리:
  - · 각 iteration에서 나무 하나를 추가한다
  - iteration은 grad stats를 계산하는 것으로 시작:

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

• stats 사용해서 greedy하게 tree  $f_t(x)$ 를 키운다

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

• 마지막으로 tree를 지금까지 모델에다가 추가해 준다:

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

- · GBRT 총 정리:
  - · 각 iteration에서 나무 하나를 추가한다
  - iteration은 grad stats를 계산하는 것으로 시작:

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

• stats 사용해서 greedy하게 tree  $f_t(x)$ 를 키운다

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

• 마지막으로 tree를 지금까지 모델에다가 추가해 준다:

$$\hat{y}_i^{(t)} = \hat{y}_i^{(t-1)} + \epsilon f_t(x_i)$$
 shrinkage (~0.1) : helps prevent overfitting

#### References

- "Introduction to Boosted Trees": <a href="https://bnumes.cs.washington.edu/~tqchen/pdf/">https://bnumes.cs.washington.edu/~tqchen/pdf/</a>
   BoostedTree.pdf
- "A Gentle Introduction to the Gradient Boosting Algorithm for Machine Learning": <a href="http://machinelearningmastery.com/gentle-introduction-gradient-boosting-algorithm-machine-learning/">http://machinelearningmastery.com/gentle-introduction-gradient-boosting-algorithm-machine-learning/</a>
- "Yahoo! Learning to Rank Challenge Overview"

# Questions?