Бустинг
Градиентный бустинг над решающими деревьями

Лазара В. И. Козлова Е. Р.

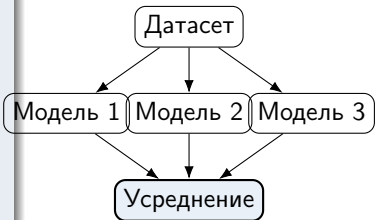
Лекция по машинному обучению

18 октября 2025 г.

Напоминание: бэггинг vs стэкинг vs бустинг

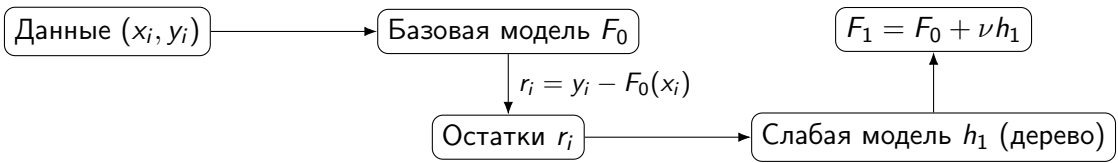
Коротко

- **Бэггинг** (Bootstrap Aggregating): параллельные независимые модели на бутстрап-подвыборках, усреднение/голосование $\Rightarrow$ снижение дисперсии.
- **Стэкинг**: мета-модель учится комбинировать ответы базовых моделей.
- **Бустинг**: *последовательно* добавляем слабые модели, каждая исправляет ошибки предыдущих $\Rightarrow$ снижение смещения.



Интуиция бустинга: исправление ошибок

- Модель $F_0(x)$ грубо приближает зависимость.
- Вычисляем **ошибки/остатки** и обучаем следующую слабую модель $h_1(x)$ предсказывать эти ошибки.
- Новая модель: $F_1(x) = F_0(x) + \nu h_1(x)$, где $\nu \in (0, 1]$ — *скорость обучения*.
- Повторяем M раз: $F_M(x) = F_{M-1}(x) + \nu h_M(x)$.


Данные (x_i, y_i)
Базовая модель F_0
$r_i = y_i - F_0(x_i)$
Остатки r_i
Слабая модель h_1 (дерево)
$F_1 = F_0 + \nu h_1$

Градиентный бустинг: оптимизация в пространстве функций

Задача

Дана выборка $\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$, хотим минимизировать

$$\mathcal{L}(F) = \sum_{i=1}^{n} \ell\big(y_i, F(x_i)\big),$$

где F — искомая функция, а ℓ — выбранная функция потерь.

Идея

Выполняем **градиентный спуск по** F: на шаге m подбираем слабую модель h_m, хорошо аппроксимирующую *антиградиент* по значениям F на обучающих объектах:

$$g_{im} = \left.\frac{\partial \ell(y_i, z)}{\partial z}\right|_{z=F_{m-1}(x_i)}, \qquad \text{учим } h_m \approx -g_{im} \text{ по } x_i.$$

Затем обновляем $F_m(x) = F_{m-1}(x) + \nu\,\gamma_m\,h_m(x)$

Бустинг над деревьями: шаг обучения

1. Дано F_{m-1}. Считаем **псевдо-остатки** (антиградиенты):

$$r_{im} \;=\; -\left.\frac{\partial \ell(y_i, z)}{\partial z}\right|_{z=F_{m-1}(x_i)}.$$

2. Обучаем регрессионное дерево $h_m(x)$ по парам $\big(x_i, r_{im}\big)$.
3. Находим оптимальные константы по листам: для каждого листа R_{jm}

$$\gamma_{jm} \;=\; \arg\min_{\gamma} \sum_{x_i \in R_{jm}} \ell\big(y_i,\; F_{m-1}(x_i) + \gamma\big).$$

4. Обновляем модель:

$$F_m(x) \;=\; F_{m-1}(x) + \nu \sum_j \gamma_{jm}\, 1\{x \in R_{jm}\}.$$

Градиентный бустинг над деревьями: псевдокод

Вход

$\mathcal{D} = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$, функция потерь $\ell(y, z)$, число итераций M, глубина дерева d, скорость обучения ν.

Алгоритм

- Инициализация: $F_0(x) = \arg\min_c \sum_{i=1}^n \ell(y_i, c)$ (например, среднее для MSE, логит-квантиль для логлосса).
- Для $m = 1, \ldots, M$:
  1. Вычислить $r_{im} = -\partial \ell(y_i, z)/\partial z \big|_{z=F_{m-1}(x_i)}$.
  2. Обучить регрессионное дерево h_m глубины $\leq d$ на $\{(x_i, r_{im})\}$.
  3. Для каждого листа R_{jm} найти $\gamma_{jm} = \arg\min_\gamma \sum_{x_i \in R_{jm}} \ell\big(y_i, F_{m-1}(x_i) + \gamma\big)$.
  4. Обновить $F_m(x) = F_{m-1}(x) + \nu \sum_j \gamma_{jm} 1\{x \in R_{jm}\}$.

Выбор потерь: регрессия и классификация

Регрессия

- Квадратичная: $\ell(y,z) = \frac{1}{2}(y-z)^2 \;\Rightarrow\; r_{im} = y_i - F_{m-1}(x_i)$ (классические «остатки»).
- Абсолютная: $\ell(y,z) = |y-z| \;\Rightarrow\; r_{im} = \operatorname{sign}\big(y_i - F_{m-1}(x_i)\big)$ (в слабом смысле).

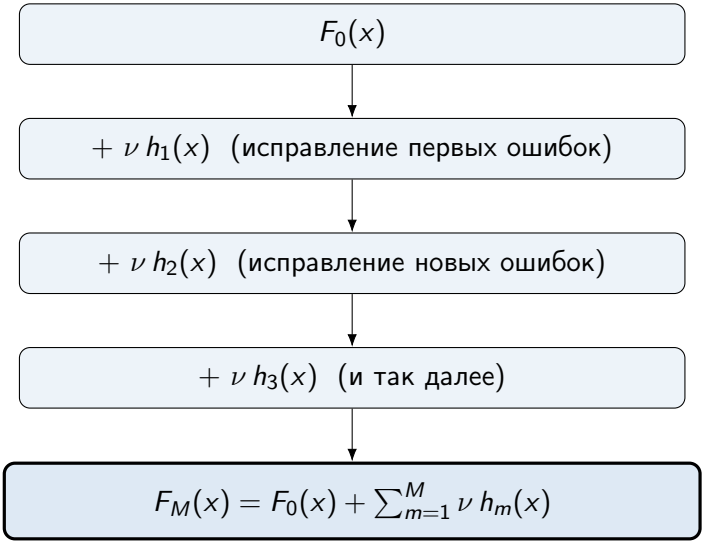
Классификация (бинарная)

- Логистическая потеря: $y \in \{0,1\}$, логиты $F(x)$, $p(x) = \sigma(F(x))$.

  $$\ell(y,z) = -\big(y \log \sigma(z) + (1-y)\log(1-\sigma(z))\big)$$

- Псевдо-остатки: $r_{im} = y_i - \sigma\big(F_{m-1}(x_i)\big)$.
- Итог: решение выдаём как $\mathbb{I}\{F_M(x) \geq 0\}$ или по $p(x)$.

Иллюстрация: «слоёный пирог» из деревьев



Каждое дерево — слабое (мелкое, с малым числом листьев), но сумма даёт сильную модель.

Регуляризация и борьба с переобучением

- **Скорость обучения** (*shrinkage*) $\nu \in (0, 1]$: меньше $\Rightarrow$ устойчивее, но нужно больше деревьев.
- **Глубина дерева / число листьев**: неглубокие деревья (3–8 уровней) $\Rightarrow$ слабые базовые модели.
- **Субсемплинг объектов** (`subsample`): обучаем h_m на случайной доле данных (напр., 0.5–0.9).
- **Субсемплинг признаков**: случайный поднабор признаков на сплите/уровне/дереве.
- **Минимальный размер листа**, **L2-штраф на веса листов**, **макс. число узлов**.
- **Ранняя остановка** по валидации: мониторим метрику и прекращаем рост M.

Стохастический градиентный бустинг

Идея

На каждом шаге используем случайную подвыборку объектов (и, опционально, признаков).

- Снижает коррелированность базовых деревьев, улучшая обобщающую способность.
- Даёт ускорение и повышает устойчивость к шуму.
- Хорошо комбинируется с малым ν и ранней остановкой.

Практика: XGBoost, LightGBM, CatBoost

- **XGBoost**: точный/приближённый поиск сплитов, регуляризация (L1/L2), колонки по блокам, эффективная параллелизация.
- **LightGBM**: лист-ориентированный рост (*leaf-wise*) с ограничением глубины, гистограммные сплиты, *Gradient-based One-Side Sampling*.
- **CatBoost**: обработка категориальных признаков порядковыми статистиками, упор на устойчивость к *target leakage*.

Замечание

Хотя детали реализации различаются, базовая идея — тот же градиентный бустинг над деревьями.

Диагностика: как понять, что мы переобучаемся

- Разрыв между train и valid метриками растёт со временем $\Rightarrow$ остановиться раньше.
- Локальные всплески ошибки при слишком глубоком дереве.
- Слишком малый *subsample* может добавить шум (слишком большой — повысит корреляцию базовых моделей).

Сравнение: бустинг vs бэггинг/стэкинг

Бустинг

- Последовательный, корректирует смещение.
- Высокая предсказательная сила «из коробки».
- Чувствителен к шуму/выбросам (важна регуляризация).

Бэггинг/Стэкинг

- Бэггинг — параллельный, снижает дисперсию.
- Стэкинг — мета-комбинация, требует аккуратной валидации.
- Часто менее чувствительны к отдельным выбросам.

Итоги

- Бустинг — **последовательное уменьшение смещения** путём добавления слабых моделей.
- Градиентный бустинг — **градиентный спуск в пространстве функций** по выбранной потере.
- Деревья — удобные слабые модели: быстрые, интерпретируемые на уровне сплитов.
- Ключ — **регуляризация**: шринкаж, ранняя остановка, контроль сложности деревьев и стохастичность.