

-Machine Learning: Boosting-Algorithmen-

Seminararbeit

Student:	David Erdös	67906
Universität:	Hochschule Karlsruhe – Technik und Wirtschaft	
Studiengang:	Informatik Bachelor	
Semester:	Wintersemester 2023	
Dozent:	Prof. Dr. Baier	
Bearbeitet am:	26. November 2023	

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Hintergrund und Motivation	1
1.2	AdaBoost und GradientBoosting: Ein Überblick	1
1.3	Zielsetzung und Struktur der Arbeit	1
2	Grundlagen des Machine Learning	3
2.1	Einordnung von Boosting im Kontext des maschinellen Lernens	3
2.2	Wichtige Terminologien	3
2.2.1	Modell	3
2.2.2	Problem und Aufgabe	3
2.2.3	Daten, Datensätze und Datenpunkte	3
2.2.4	Trainingsdaten und Zieldaten	4
2.2.5	Lerner	4
2.2.6	Hypothese und Vorhersage	4
2.2.7	Fehler und Bewertung	4
2.2.8	Entscheidungsbaum	5
3	Boosting	6
3.1	Was ist Boosting	6
3.1.1	Abgrenzung zu anderen ML-Modellen	6
3.2	Beispiel Wettererkennung	7
3.2.1	Erzeugung eines starken Lerner	7
3.3	Gewichtete Abstimmung	7
3.3.1	Grundlegende Annahmen	8
3.3.2	Fehlerberechnung	8
3.3.3	Gewichtung der schwachen Lerner	8
3.3.4	Endgültige Vorhersage des starken Lerner	8
3.4	Annahme des schwache Lernens	9
4	AdaBoost	10
4.1	Adaptives Lernen	10
4.1.1	Gewichtete Daten	10
4.2	Algorithmus-Struktur und Funktionsweise	11
4.3	Anwendungsbeispiel	12
5	Gradient Boosting	14
5.1	Unterschied zu AdaBoost	14
5.2	Die Loss-Funktion L	14
5.2.1	Der Quadratische Fehler (SE)	14
5.3	Algorithmus-Struktur und Funktionsweise	15
5.4	Beispielanwendung mit Erläuterung	16

5.5	Weiterentwicklung XGBoost	17
6	Vergleich von AdaBoost und Gradient Boosting	19
6.1	Theoretische Grundlagen	19
6.2	Praktische Umsetzung	19
6.3	Vor- und Nachteile	19
6.4	Einsatzgebiete und Leistungsbewertung	19
6.4.1	Datensatz ‘california housing’	20
6.4.2	Leistungsvergleich	20
7	Resistenz gegen Overfitting	21
7.1	AdaBoost und die Herausforderung des Overfittings	21
7.2	Wahl des Datensatzes	21
7.3	Ergebnisanalyse	22
7.4	Philosophisches Prinzip: Occams Racor	22
7.5	Erklärungsansatz: Margins Theorie	22
8	Vergleich von AdaBoost und GBT mit anderen Modellen	25
8.1	Auswahl und Leistung der Algorithmen	25
8.2	Auswahl der Datensätze	25
8.3	Ergebnisse der Studie	25
8.4	Interpretation der Ergebnisse	26
8.4.1	Bedeutung für AdaBoost und GBT	26
8.4.2	Empfehlungen für die Praxis	27
9	Fazit und Ausblick	28
	Literaturverzeichnis und Quellen	29
	Abbildungsverzeichnis	30
	Tabellenverzeichnis	31
	Algorithmenverzeichnis	32

1 Einleitung

Die voranschreitende Digitalisierung unserer Gesellschaft und die daraus folgende exponentielle Zunahme an Daten, hat das maschinelle Lernen als Schlüsselement der modernen Datenanalyse etabliert. In den vielen Teilgebieten des maschinellen Lernens haben Boosting-Algorithmen einen besonderen Stellenwert. Besonders auf tabellarischen Datensätzen erbringen sie in vergleichsweise kurzer Trainingszeit in fast allen Benchmarks die besten Ergebnisse. Diese Seminararbeit konzentriert sich auf zwei Vertreter der Boosting-Familie: AdaBoost und Gradient Boosting Trees. Inhaltlich wird die Seminararbeit darauf abzielen, diese Algorithmen zu untersuchen und anhand eigener Beispiele zu erklären.

1.1 Hintergrund und Motivation

In der heutigen Zeit gibt es ständige Fortschritte im Bereich künstlicher Intelligenz. Nicht zuletzt mit der Veröffentlichung von ChatGPT ist die Benutzung von KIs zum Alltag geworden und wird auch von der breiten Masse genutzt. Als Student im Bereich der Informatik kann man es sich nicht mehr leisten, sich nicht mit den Themen der künstlichen Intelligenz zu beschäftigen. Die Fortschritte im Bereich der KI, wie sie ChatGPT demonstriert, haben sogar die lang angenommene Sicherheit des Berufs als Softwareentwickler beeinflusst. Zwar ist meine Einschätzung, dass KI-Systeme in naher Zukunft vorrangig als Werkzeuge benutzt werden und keine Berufsgruppen komplett ersetzen, doch selbst wenn ich falsch liege, ist davon auszugehen, dass diejenigen, die solche Tools entwickeln, als letzte ersetzt werden. Diese Überlegungen zur Zukunftssicherheit und die Erwartung, dass bahnbrechende Entwicklungen vor allem im KI-Bereich stattfinden werden, fördern mein Interesse schon seit längerem. Die Wahl des Themas dieser Seminararbeit spiegelt also mein Interesse an KI wieder und bietet eine gute Gelegenheit um sich mit Boosting-Algorithmen auseinanderzusetzen, was mir sicherlich in Zukunft zu gute kommen wird.

1.2 AdaBoost und GradientBoosting: Ein Überblick

AdaBoost war eins der ersten Beispiele für Boosting und wird als Stellvertreter für diese Kategorie gesehen. Die Grundidee ist in einem iterativen Prozess des Trainings die Gewichtung der Daten zu ändern, sodass sie sich auf die Fehler fokussieren. Ähnlich dazu ist Gradient Boosting Trees, wobei dieser Algorithmus Entscheidungsbäume nutzt, welche auf dem Restfehler des Vorgängers trainiert werden. Beide Algorithmen nutzen das Prinzip der iterativen Verbesserung, allerdings auf unterschiedliche Weise, was ihre Anwendung in verschiedenen Kontexten und Aufgabentypen interessant macht.

1.3 Zielsetzung und Struktur der Arbeit

Diese Arbeit zielt darauf ab, die beiden genannten Algorithmen umfassend zu analysieren. Dabei wird ein Schwerpunkt auf die praktische Anwendung und die Veranschaulichung ihrer Funktionsweise durch eigene Beispiele gelegt. Der Aufbau der Arbeit ist wie folgt strukturiert: Zunächst wird ein grundlegendes Verständnis des Boosting-Konzepts geschaffen. Anschließend werden die

Algorithmen AdaBoost und Gradient Boosting Trees detailliert beschrieben, wobei deren theoretische Grundlagen, Funktionsweisen im Vordergrund stehen, aber durch Beispiele veranschaulicht werden. Darauf aufbauend folgt eine direkte Gegenüberstellung beider Algorithmen, in der ihre Unterschiede, Vor- und Nachteile sowie optimale Einsatzgebiete diskutiert werden.

2 Grundlagen des Machine Learning

2.1 Einordnung von Boosting im Kontext des maschinellen Lernens

Boosting lässt sich dem überwachten Lernen (supervised Learning) zuordnen. Diese Hauptkategorie des maschinellen Lernens beschäftigt sich mit Modellen, die auf Datensätzen mit Ein- und Ausgabe-Paaren trainiert werden. Durch Training versucht das Modell anhand der Eingabe Werte die Ausgabe Werte zu schätzen und wird je nach der Abweichung zur tatsächlichen Ausgabe angepasst. Das Ziel ist es das Modell zu nutzen um Aussagen auf bisher unbekannten Daten zu treffen.

Ein Teilgebiet davon ist das Ensemble-Lernen, eine Strategie die mehrere Modelle kombiniert, um eine bessere Lösung zu finden als die eines Einzelmodells. Boosting ist neben Bagging eine bekannte Methode in diesem Bereich. Während Boosting meist durch iteratives Trainieren versucht das Gesamtmodell zu verbessern, ist Bagging ein paralleler Prozess, der versucht vor allem die Varianz zu reduzieren.

2.2 Wichtige Terminologien

Um die Seminararbeit in Gänze zu verstehen erfordert es in meinen Augen eine kurze Klarstellung der wichtigsten Begrifflichkeiten. Das restliche Kapitel soll diese Begriffe im Kontext des maschinellen Lernens erklären:

2.2.1 Modell

Ein **Modell** ist das Produkt eines Lernprozesses und wird verwendet, um Aussagen auf neuen Daten zu treffen.

2.2.2 Problem und Aufgabe

Jede KI ist für einen bestimmten Zweck vorgesehen. Ein **Problem** ist dabei die spezifische Herausforderung, welche durch den Einsatz von Machine Learning Algorithmen gelöst werden soll. Ein Beispiel für ein solches Problem ist die Bilderkennung. Eine **Aufgabe** ist hingegen etwas konkreter und beschreibt die genaue Aktion, die ein ML-Modell ausführen soll. Ein Beispiel für eine Aufgabe beim Problem der Bilderkennung ist die Klassifikation von Bildern durch ein ML-Modell. Grundsätzlich ist die relevante Bedeutung der Begriffe Problem, Aufgabe, Herausforderung und Anwendung ähnlich.

2.2.3 Daten, Datensätze und Datenpunkte

Daten sind eine essentielle Grundlage für maschinelles Lernen. Zusammenhängende Daten werden **Datensatz** genannt, wie beispielsweise eine Tabelle. Ein Datensatz besteht dabei immer aus einer Menge von **Datenpunkten**, wobei jeder Datenpunkt eine zusammengehörende Instanz oder ein Beispiel ist. In einer Tabelle wird ein Datensatz durch eine Zeile repräsentiert. Diese Zeile hat für jede Spalte (Merkmal, Attribut, feature) einen Datenwert.

2.2.4 Trainingsdaten und Zieldaten

Es ist üblich die Daten in **Trainingsdaten** und Testdaten zu teilen. Trainingsdaten sind der Teil, auf denen das Modell trainiert wird. Die Genauigkeit, beziehungsweise der Fehler eines Modells kann objektiv nur auf den Testdaten gemessen werden, welche dem Modell im Training unbekannt waren.

Gerade im Bereich des maschinellen Lernens bestehen die Daten oft aus Ein- und Ausgabe-Paaren. Das Modell versucht anhand der Eingabe die Ausgabe zu schätzen. Im Trainingsprozess wird die Ausgabe des Modells dann mit den tatsächlichen **Zieldaten** verglichen und je nach Fehler angepasst.

2.2.5 Lerner

Der **Lerner** ist die Instanz eines angewendeten Lernalgorithmus, der verwendet wird um durch Training auf den Daten ein Modell zu erstellen. Ist die durch den Lernalgorithmus erzeugte Hypothese sehr einfach gehalten, was in der Regel wenig rechenaufwendig ist und nur geringfügig bessere Ergebnisse erzielt als zufälliges Raten, spricht man von einem **schwachen Lerner**.

2.2.6 Hypothese und Vorhersage

Die **Hypothese** ist die Beziehung zwischen der Eingabe und erwarteten Ausgabe. Sie ist eine mathematische Funktion, welche im Training angepasst wird und verkörpert eine Regel oder Aussage des Modells.

Wendet man die Hypothese auf neue Daten an, so spricht man bei dem Ergebnis von der **Vorhersage**.

Theoretisch sind die Begriffe Modell, Lerner, Hypothese und Vorhersage nicht gleichbedeutend. Oft wird dabei allerdings nicht genau unterschieden, da die die Essenz des Modells, also das was gesucht ist, ja die Vorhersage ist. Dadurch repräsentieren sich die Begriffe gegenseitig, auch wenn sie in ihrem Kern unterschiedliche Bedeutungen haben.

2.2.7 Fehler und Bewertung

Ein **Fehler** ist ein Maß für die Differenz zwischen den vorhergesagten Ausgaben des Modells und den Zielwerten. Für unterschiedliche Anforderungen eignen sich unterschiedliche Fehlermaße. Zwei der wichtigsten sind:

- Mittlerer quadratischer Fehler (MSE): Quadratische Differenz zwischen Vorhersage und Zielwert
- Genauigkeit (accuracy): Anteil der korrekt klassifizierten Datenpunkte

Ein geringer Fehler zeigt an, dass das Modell gute Hypothesen entwickelt hat und präzise Vorhersagen macht.

2.2.8 Entscheidungsbaum

Ein **Entscheidungsbaum** (decision tree) ist eine spezielle Art von Modell im ML, das Entscheidungen in einer baumähnlichen Struktur von Regeln darstellt. Während ein einzelner Entscheidungsbaum als Modell dienen kann, bezieht sich der Begriff häufig auf ein ganzes System aufeinanderfolgender Entscheidungen. In dieser Arbeit werden besonders einfache Entscheidungsbäume, sogenannte *decision stumps* (Entscheidungsstümpfe) mit nur einer Entscheidungsebene, betrachtet (siehe Abbildung 1).

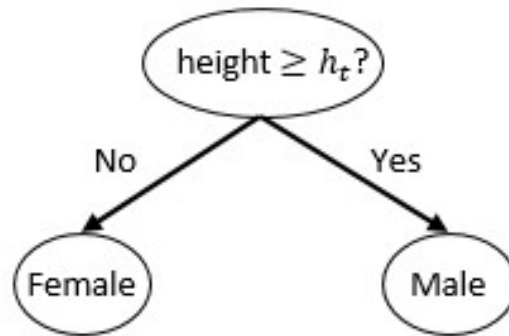


Abbildung 1: Beispiel eines Entscheidungsstumpfes (Quelle: Sefik Ilkin Serengil, sefiks.com)

3 Boosting

Nach meiner eigenen Erfahrung als Student fällt oft auf, dass Gruppenarbeit nicht immer die erwarteten Vorteile bringt. Oft dominiert in Lerngruppen ein einzelner Student, der über fundiertes Wissen verfügt, die Diskussion und die Gruppenleistung spiegelt im Wesentlichen seine individuelle Leistung wider.

In Fällen, wo alle Mitglieder einer Lerngruppe nur begrenztes Wissen zu einem Thema haben, kann die kollektive Leistung sogar hinter dem zurückbleiben, was man durch zufällige Antworten erwarten würde. Die Vorstellung, dass eine Gruppe von Individuen mit begrenztem Wissen gemeinsam Ergebnisse erzielen kann, die sowohl den Durchschnitt als auch jede individuelle Bestleistung übertreffen, widerspricht oft unserer Intuition. Selbst historische Weisheiten, wie sie in der Bibel gefunden werden, betonen die Risiken einer solchen Zusammenarbeit. Dort heißt es metaphorisch: “Wenn aber ein Blinder den andern führt, so fallen sie beide in die Grube” (Mt 23,16; Mt 23,24; Lk 6,39; Röm 2,19).

Doch im Bereich des maschinellen Lernens offenbart sich ein ganz anderes Szenario. Hier ermöglicht das Boosting-Verfahren, dass die Kombination von schwachen Modellen zu einem leistungsstarken Gesamtsystem führt. Dieser Ansatz, der die aggregierte Intelligenz mehrerer einfacher Modelle nutzt, um komplexe Probleme zu lösen, steht im starken Gegensatz zu den oft enttäuschenden Ergebnissen menschlicher Gruppenarbeit mit begrenztem Wissen [1, S. 3].

3.1 Was ist Boosting

Boosting (ursprünglich Hypothesis Boosting) bezeichnet eine beliebige Ensemble-Methode des Supervised Learning, bei der sich mehrere schwache Lerner durch Hintereinanderausführung (iterativ) zu einem starken Lerner kombinieren lassen. Géron [2, S. 191].

3.1.1 Abgrenzung zu anderen ML-Modellen

Es gibt eine entfernte Verwandtschaft des Boostings zu der ‘Attention’ in modernen Transformer-Architekturen wie GPT. Der meist verwendete Gradientenabstieg zur Fehlerminimierung in Boosting-Verfahren ähnelt wiederum den auch in Neuronalen Netzen verwendeten Gradientenabstiegsverfahren wie z.B. Backpropagation. Ein Unterschied sind jedoch meist wesentlich geringer benötigte Ressourcen und Lernzeiten als bei Deep Learning Modellen, wo sehr hohe Zahlen von Parametern nötig sind.

Zu einem bekannten anderen Verfahren des Ensemble Learning, den Random Forests besteht ein grundsätzlicher Unterschied: Random Forests sind **parallele** Lerninstanzen, deren Ergebnisse kombiniert werden, z.B. durch Mehrheitsentscheide, wohingegen Boosting Verfahren prinzipiell **sequentiell** ausgeführt werden, weil ja auf den Fehler des Vorgängers abgestellt wird. Andere Parallelisierungen sind natürlich möglich ([3, S.343]).

3.2 Beispiel Wettererkennung

Das Prinzip der Kombination der schwachen Lerner lässt sich gut anhand des Beispiels der Wettererkennung veranschaulichen. Betrachten wir folgende einfache Regeln (Schwache Lerner) zur Beurteilung, ob es regnet:

Schwache Lerner	Grenzwert
Nasser Boden	Ja
Wolken am Himmel	Ja
Hohe Luftfeuchtigkeit	$> 80\%$
Personen mit Regenschirm	Ja
Außentemperatur	$> 0^\circ\text{C}$

Tabelle 1: Individuelle Vorhersagen der Schwache Lerner

Beispielsweise ist ein nasser Boden zwar eine Voraussetzung und ein guter erster Filter, allerdings könnte der Boden genauso gut durch einen Rasensprenger nass sein.

Die Temperatur ist hingegen ein relativ schlechtes Indiz für die Frage, ob es gerade regnet. Es unterscheidet aber den Fall Regen und Schnee und ist somit trotzdem essentiell für die Klassifikation.

3.2.1 Erzeugung eines starken Lerner

Der nächste Schritt ist es, die Aussagen der schwachen Lerner in ein nützliches Model zusammenzufassen, einen sog. ‘starken Lerner’. Im einfachsten Fall lässt man die schwachen Lerner mit gleicher Stimmkraft abstimmen. Aus dem Stimmverhältnis der Vorhersagen der schwachen Lerner lässt sich in unserem Fall die Regenwahrscheinlichkeit ableiten.

Nasser Boden	Wolken	Hohe Luftfeuchte	Regenschirm	Über 0°C	Regenwahrscheinlichkeit (%)
Ja	Ja	Ja	Ja	Ja	100%
Ja	Ja	Nein	Nein	Ja	60%
Nein	Ja	Ja	Ja	Ja	80%
Ja	Nein	Ja	Nein	Ja	60%
Nein	Nein	Nein	Nein	Ja	20%
Ja	Ja	Ja	Nein	Nein	60%
Nein	Ja	Nein	Ja	Ja	80%
...

Tabelle 2: Wahrheitstabelle zur Vorhersage von Regen basierend auf schwachen Lerner. Die Werte dienen in erster Linie der Veranschaulichung.

3.3 Gewichtete Abstimmung

Aus der Mehrheitsentscheidung, bei der alle schwachen Lerner die gleiche Stimmkraft haben, eine Vorhersage zu treffen, liefert nur selten die besten Ergebnisse. Eine bessere Vorgehensweise, die auch von vielen Boosting-Algorithmen benutzt wird, ist die gewichtete Abstimmung. Diese Methode berechnet die Stimmkraft oder Gewichtung des Lerner α individuell, wie im Algorithmus 1 von Schapire und Freund beschrieben [1, S. 5].

3.3.1 Grundlegende Annahmen

Gegeben:

- Ein Datensatz bestehend aus n Beispielpaaren, wobei jedes Paar aus einem Eingabedatum x_i und dem entsprechenden Zielwert y_i besteht: $X = \{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)\}$.
- Schwache Lerner t mit Vorhersagefunktion/Hypothese h_t .

Jeder schwache Lerner trifft Vorhersagen basierend auf dem Datensatz. Der Erfolg dieser Vorhersagen wird durch den Fehler ε_t gemessen.

3.3.2 Fehlerberechnung

Der Fehler ε_t eines schwachen Lerners ist der Anteil der falschen Vorhersagen:

$$\varepsilon_t = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}(h_t(x_i) \neq y_i), \quad (1)$$

wobei \mathbb{I} die Indikatorfunktion ist, die 1 ist, wenn $h_t(x_i) \neq y_i$ (d.h., die Vorhersage ist falsch), und 0 sonst.

3.3.3 Gewichtung der schwachen Lerner

Die Gewichtung α_t jedes schwachen Lerners basiert auf seinem Fehler ε_t :

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

Ein zuverlässiger Lerner t hat eine höhere Gewichtung α_t je nach dem wie groß sein Fehler ε_t ist.

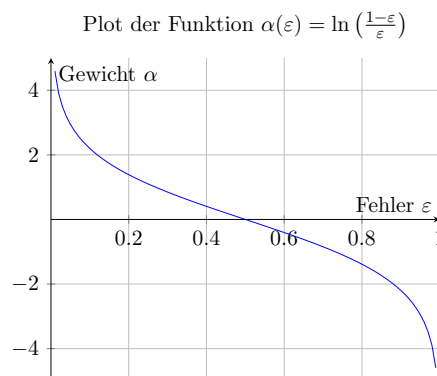


Abbildung 2: Visualisierung der Gewichtungsfunktion α in Abhängigkeit vom Fehler ε

3.3.4 Endgültige Vorhersage des starken Lerners

Die Gesamtvorhersage H des Modells ergibt sich aus der gewichteten Abstimmung aller schwachen Lerner.

$$H(x) = \text{sign} \left(\sum_{t=1}^T \alpha_t h_t(x) \right). \quad (3)$$

In anderen Worten wird die Vorhersage eines Lernalgorithmus auf den Daten $h_t(x)$ mit seiner Gewichtung α multipliziert. Die Summe dieses Produkts für alle Lerner T ergibt die Gesamtvorhersage H . Hier wird lediglich noch die Signum-Funktion angewendet, um den Wert zwischen 0 und 1 zu glätten.

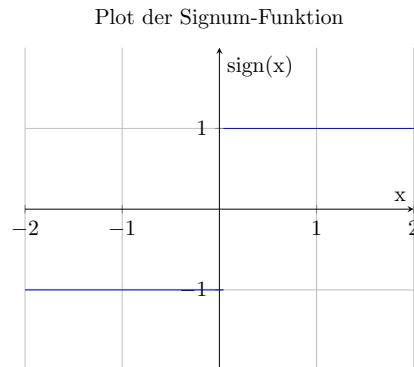


Abbildung 3: Visualisierung der Signum-Funktion

3.4 Annahme des schwachen Lernens

Die Voraussetzung jedes Boosting-Algorithmus ist ein bereits vorhandener schwacher Basis-Lernalgorithmus. Das Ziel ist es dann, durch mehrfache Ausführung des Boosting-Algorithmus' die Leistung des Lernalgorithmus zu verbessern, bzw. zu 'boosten'. Laut Schapire und Freund [1, S. S. 4] reicht es aus geringe Ansprüche an die Leistung der schwachen Lerner zu stellen. Es ist völlig hinreichend, wenn der Lernalgorithmus Hypothesen liefert mit etwas besseren Ergebnissen als 50% Fehlerquote, was dem uninformaten Raten gleich käme.

Diese Annahme, dass der Lerner schwache Hypothesen hervorbringt, die mindestens etwas besser sind als zufälliges Raten, wird die *Annahme des schwachen Lernens* genannt.

4 AdaBoost

4.1 Adaptives Lernen

Ein Großteil der Boosting-Algorithmen benutzt das Prinzip des sequenziellen adaptiven Lernens. Das heißt, dass man die Lerner sequentiell, also nacheinander, so trainiert, dass jeder Lerner versucht adaptiv die Fehler des vorherigen Lernalgorithmus auszubessern.

Der Vertreter dieser Methode ist der AdaBoost-Algorithmus, dessen Name sich von 'Adaptive Boosting' ableitet.

4.1.1 Gewichtete Daten

Um einen Lerner in einem Boosting-Algorithmus zu entwickeln, wird der Lernalgorithmus zunächst auf dem ursprünglichen Datensatz angewendet. Nach dieser ersten Runde bewertet der Algorithmus die Klassifikationsergebnisse, um festzustellen, welche Datenpunkte richtig und welche falsch klassifiziert wurden. Die falsch klassifizierten Datenpunkte erhalten dann ein höheres Gewicht, was ihre Bedeutung im Datensatz für den nächsten Schritt erhöht. Im Gegenzug werden die Gewichte der korrekt klassifizierten Datenpunkte verringert.

In der darauffolgenden Iteration wird der Lernalgorithmus erneut angewendet, diesmal aber auf den Datensatz, dessen Gewichte gerade angepasst wurden. Dadurch wird der Lernalgorithmus versuchen sich besonders auf die vom ersten Lerner falsch klassifizierten Daten zu konzentrieren. Nach dem Training des zweiten Lernalgorithmus erfolgt eine weitere Anpassung der Gewichte nach den gleichen Regeln.

Dieser Prozess wird fortgesetzt, wobei jeder nachfolgende Lerner darauf abzielt, die Fehler seiner Vorgänger zu korrigieren (siehe Abbildung 4).

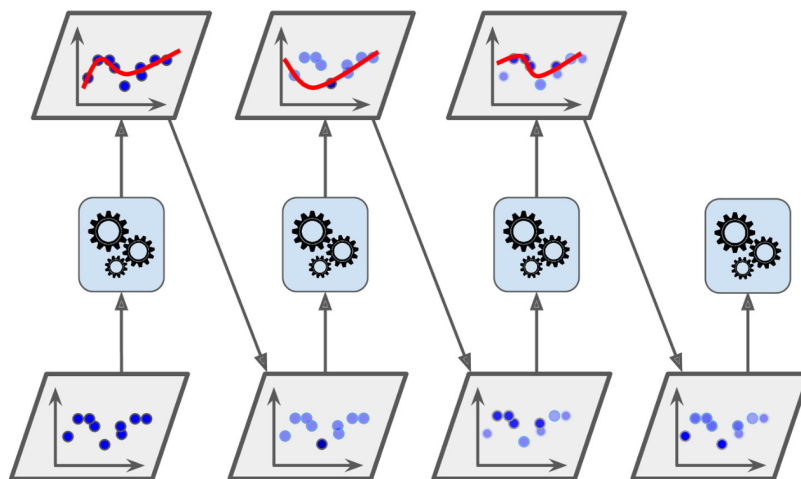


Abbildung 4: Sequentielles Training mit aktualisierten Gewichten der Datenpunkte bei AdaBoost (Quelle: Géron [Abbildung 7-7 2, S. 192])

4.2 Algorithmus-Struktur und Funktionsweise

Der AdaBoost-Algorithmus (siehe Algorithmus 1) ist in mehrere Schritte unterteilt, welche im folgenden genau erklärt werden:

Schritt 1: Initialisierung (Zeile 2) Hier werden die Gewichte $D_1(i)$ initial gleich verteilt. Das heißt, dass jeder Datenpunkt am Anfang das gleiche Gewicht hat, also gleich wichtig ist.

Schritt 2: Iterationen (Zeile 3 bis 13) Der Algorithmus durchläuft T Iterationen, in denen pro Durchlauf ein neuer schwacher Lerner trainiert und bewertet wird.

Schritt 2.1: Training der schwachen Lerner (Zeile 4-5) In jeder Iteration t wird ein schwacher Lerner h_t unter der aktuellen Gewichtsverteilung D_t der Daten trainiert. Dieser Lerner erzeugt eine Hypothese zur Klassifizierung der Daten.

Schritt 2.2: Fehlerberechnung (Zeile 6) Der Fehler ε_t des Lerners wird berechnet als Anteil der falsch klassifizierten Beispiele, gewichtet nach D_t . Weitere Details zur Fehlerberechnung sind in Unterunterabschnitt 3.3.2 erläutert.

Schritt 2.3: Gewichtung der Lerner (Zeile 7) Die Gewichtung α_t jedes schwachen Lerners basiert auf seinem Fehler ε_t und wird mithilfe der Formel $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1-\varepsilon_t}{\varepsilon_t} \right)$ berechnet. Diese Gewichtung bestimmt den Einfluss jedes Lerners auf das Endergebnis. Genauer dazu ist im Unterunterabschnitt 3.3.3 zu finden.

Schritt 2.4: Aktualisierung der Gewichte (Zeile 8-12) Die Gewichte der Datenpunkte $D_t(i)$ werden für die nächste Iteration $D_{t+1}(i)$ aktualisiert. Datenpunkte, die falsch klassifiziert wurden, erhalten ein höheres Gewicht, während korrekt klassifizierte Datenpunkte ein niedrigeres Gewicht bekommen. Die Aktualisierung erfolgt gemäß der Formel in Zeile 9. Z_t ist dabei ein Normalisierungsfaktor, der sicherstellt, dass D_{t+1} eine Wahrscheinlichkeitsverteilung bleibt.

Schritt 3: Ausgabe der finalen Hypothese (Zeile 14) Nach Abschluss aller Iterationen wird die finale Hypothese $H(x)$ als gewichtete Summe der Hypothesen aller schwachen Lerner ausgegeben:

$$H(x) = \text{sign} \left(\sum_{t=1}^T \alpha_t h_t(x) \right).$$

Diese Vorhersagefunktion repräsentiert das Endergebnis des AdaBoost-Algorithmus.

Algorithm 1 AdaBoost Algorithmus (nach Schapire und Freund, Algorithmus 1.1, S. 5)

1: **Gegeben:** Trainingssatz $(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)$, wobei $x_i \in X$, $y_i \in \{-1, +1\}$
2: **Initialisierung:** $D_1(i) = \frac{1}{m}$ für $i = 1, \dots, m$
3: **for** $t = 1, \dots, T$ **do**
4: Trainiere schwachen Lerner mit Verteilung D_t
5: Erhalte Hypothese $h_t : X \rightarrow \{-1, +1\}$
6: Berechne Fehler $\varepsilon_t = \Pr_{i \sim D_t}[h_t(x_i) \neq y_i]$
7: Wähle $\alpha_t = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1-\varepsilon_t}{\varepsilon_t} \right)$
8: Aktualisiere Gewichte:
9: **for** $i = 1, \dots, m$ **do**
10:
$$D_{t+1}(i) = \frac{D_t(i) \cdot e^{-\alpha_t y_i h_t(x_i)}}{Z_t}$$

11: **end for**
12: wobei Z_t ein Normalisierungsfaktor ist (gewählt so dass D_{t+1} eine Verteilung ist)
13: **end for**
14: **Ausgabe:** $H(x) = \text{sign} \left(\sum_{t=1}^T \alpha_t h_t(x) \right)$

4.3 Anwendungsbeispiel

Um den doch eher abstrakten AdaBoost-Algorithmus 1 zu veranschaulichen, wird im folgenden die Funktionsweise anhand des Beispiels in Abbildung 5 beschrieben. Die Werte der Berechnung sind in Tabelle 3 zu finden.

Im Trainingssatz gibt es 10 Datenpunkte i , die entweder durch ein blaues Dreieck oder ein oranges Viereck dargestellt sind. Wie gefordert, sind zu Beginn der 1. Iteration alle Datenpunkte mit den gleichen Gewichten D_1 initialisiert, was durch die gleiche Größe der geometrischen Formen veranschaulicht wird.

Unter der Annahme des schwachen Lernens aus Unterabschnitt 3.4 nehmen wir an, dass der genutzte schwache Lernalgorithmus die Fläche entweder horizontal, oder vertikal mit einer Linie

teilt. Die Hypothese h_1 der 1. Iteration identifiziert 7 von 10 Datenpunkten richtig und hat somit eine Fehlerquote ε_1 von 0.30. Tatsächlich gibt es keine Linie, die alle Formen richtig zuweisen kann, 7 von 10 ist also ein passables Ergebnis.

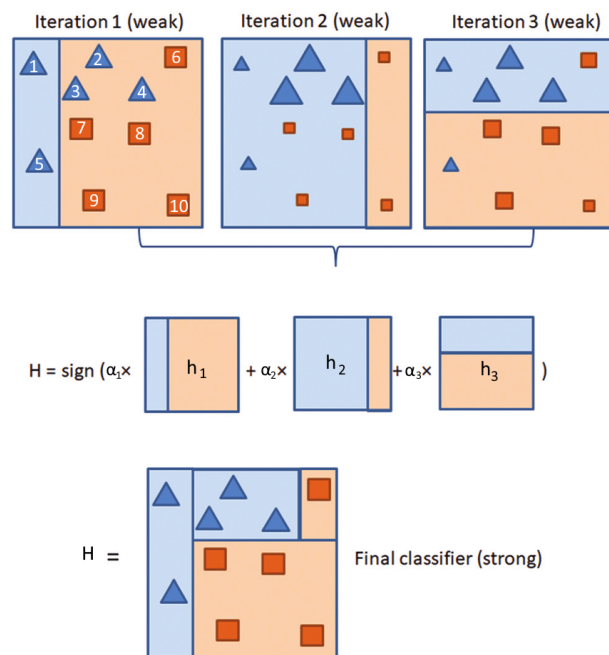


Abbildung 5: Schematische Darstellung des AdaBoost-Prozesses (Quelle: ResearchGate, Alex Henderson et al.)

Die aus der Fehlerquote ϵ_1 berechnete Gewichtung α_1 beträgt 0.42. Es lässt sich erkennen, dass die falsch klassifizierten Dreiecke 2-4 eine Erhöhung ihrer Gewichte mit dem Faktor $e^{-\alpha_1 y_i h_1(x_i)}$, der ungefähr 1.53 beträgt, erfahren, während die richtig klassifizierten Formen durch einen Faktor von etwa 0.65 eine Verringerung ihrer Gewichte erfahren.

Die aktualisierten Gewichte $D_2(i)$ für die zweite Iteration ergeben sich als Produkt der vorherigen Gewichte $D_1(i)$ und des Faktors $e^{-\alpha_1 y_i h_1(x_i)}$. Diese neuen Gewichte werden dann durch den Normalisierungsfaktor $Z_1 \approx 0.92$ geteilt, um sicherzustellen, dass die Gesamtsumme aller D_t gleich 1 bleibt.

Diese Abfolge an Schritten aus Algorithmus 1 wiederholt sich in jeder Iteration. In diesem Beispiel gibt es insgesamt drei Iterationen. Nach der 3. Iteration werden die Hypothesen h mit ihrer Gewichtung α in der finalen Hypothese H zusammengefasst.

Wie aus Abbildung 5 hervorgeht, reichen drei Iterationen aus, um einen starken Lerner hervorzu-bringen, welches alle Datenpunkte i richtig klassifiziert. Es ist unerwartet, dass die Fehlerrate auf den Trainingsdaten so rapide abnimmt. Der exponentielle Abstieg der Fehlerquote ist tatsächlich typisch für AdaBoost. Dies ist eine der Eigenschaften die viele Boosting-Algorithmen so ge-bräuchlich machen.

Tabelle 3: Berechnungen für Abbildung 5 gemäß Algorithmus 1 nach Vorlage von Schapire und Freund [Tabelle 1.1 1, S. 9]

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	
$D_1(i)$	0.10	<u>0.10</u>	<u>0.10</u>	<u>0.10</u>	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	0.10	$\epsilon_1 = 0.30$
$e^{-\alpha_1 y_i h_1(x_i)}$	0.65	1.53	1.53	1.53	0.65	0.65	0.65	0.65	0.65	0.65	$\alpha_1 \approx 0.42$
$D_1(i) \cdot e^{-\alpha_1 y_i h_1(x_i)}$	0.07	0.15	0.15	0.15	0.07	0.07	0.07	0.07	0.07	0.07	$Z_1 \approx 0.92$
$D_2(i)$	0.07	0.17	0.17	0.17	0.07	0.07	<u>0.07</u>	<u>0.07</u>	<u>0.07</u>	0.07	$\epsilon_2 = 0.21$
$e^{-\alpha_2 y_i h_2(x_i)}$	0.52	0.52	0.52	0.52	0.52	0.52	1.91	1.91	1.91	0.52	$\alpha_2 \approx 0.65$
$D_2(i) \cdot e^{-\alpha_2 y_i h_2(x_i)}$	0.04	0.09	0.09	0.09	0.04	0.04	0.14	0.14	0.14	0.04	$Z_2 \approx 0.82$
$D_3(i)$	0.05	0.11	0.11	0.11	<u>0.05</u>	<u>0.05</u>	0.17	0.17	0.17	0.05	$\epsilon_3 = 0.10$
$e^{-\alpha_3 y_i h_3(x_i)}$	0.33	0.33	0.33	0.33	3.00	3.00	0.33	0.33	0.33	0.33	$\alpha_3 \approx 1.10$
$D_3(i) \cdot e^{-\alpha_3 y_i h_3(x_i)}$	0.02	0.04	0.04	0.04	0.15	0.15	0.06	0.06	0.06	0.02	$Z_3 \approx 0.64$

5 Gradient Boosting

Der Gradient Boosting Trees (GBT) Algorithmus hat sich in den letzten Jahren als einer der führenden Boosting-Algorithmen etabliert. Charakteristisch für GBT ist die Verwendung von Entscheidungsbäumen als Basis-Lernalgorithmus. Ähnlich wie AdaBoost verfolgt GBT das Prinzip des adaptiven Lernens (Unterabschnitt 4.1), bei dem jeder nachfolgende Entscheidungsbaum darauf abzielt, die Fehler seines Vorgängers zu korrigieren.

5.1 Unterschied zu AdaBoost

Der entscheidende Unterschied zu AdaBoost 4.1 liegt jedoch in der Art und Weise, wie GBT die Trainingsdaten behandelt. Während AdaBoost die Gewichtung aller Trainingsdaten anpasst, um die Fehler des vorherigen Lernalgorithmus hervorzuheben, beschränkt sich GBT auf die Reduzierung des Restfehlers.

Obwohl GBT sowohl für Klassifikations- als auch für Regressionsprobleme einsetzbar ist, konzentriert sich diese Arbeit hauptsächlich auf die Anwendung von GBT im Kontext der Regression. Der Grund dafür ist, dass GBT deutlich einfacher verständlich ist in der Art und Weise, wie er kontinuierliche Werte vorhersagt.

5.2 Die Loss-Funktion L

Ein wesentlicher Bestandteil des Gradient Boosting Trees Algorithmus ist die Loss-Funktion $L(y_i, F(x))$, welche zur Bewertung der Genauigkeit des Modells genutzt wird. Einen zentralen Teil dabei spielen die Residuen. Ein Residuum ist umgangssprachlich ein Fehler, also die Differenz zwischen einem tatsächlichen Datenpunkt y_i und dem dazu aus dem Modell vorhergesagten Wert $F(x_i)$. Im Rahmen von GBT wird häufig der Begriff ‘Pseudo-Residuen’ verwendet. Diese werden in jeder Iteration m des Algorithmus berechnet und sind definiert als der negative Gradient der Loss-Funktion bezüglich der Modellvorhersage:

$$r_{i,m} = -\frac{\partial L(y_i, F(x_i))}{\partial F(x_i)} \bigg|_{F(x) = F_{m-1}(x)} \quad (4)$$

Im Gegensatz zu einfachen Residuen, welche den Fehler zwischen Vorhersage und tatsächlichem Wert angeben, gibt ein Pseudo-Residuum sowohl die Richtung als auch das Ausmaß der erforderlichen Anpassungen des Modells an. Bei GBT ist das besonders wichtig, da der in jeder Iteration hinzugefügte Entscheidungsbaum speziell darauf trainiert wird, diese Pseudo-Residuen zu minimieren.

5.2.1 Der Quadratische Fehler (SE)

Eine häufig genutzte Loss-Funktion bei GBT ist der quadratische Fehler (squared error, SE). Gerade für Regressionsprobleme eignet sich die Loss-Funktion SE besonders und ist definiert als:

$$L(y_i, F(x_i)) = \frac{1}{2}(y_i - F(x_i))^2 \quad (5)$$

(Die Konstante 0.5 wird hier o.B.d.A. zur schöneren Auflösung der Ableitung eingefügt.)
 Setzen wir den SE in die Gleichung 4 für Residuen ein, ergibt sich nach Frochte [3, S. 346]

$$r_{i,m} = y_i - F_{m-1}(x_i) \quad (6)$$

Die Gleichung 6 ist zwar nicht mehr so allgemein anwendbar wie Gleichung 4, ist aber durch die Spezialisierung auf den SE (Gleichung 5) deutlich anschaulicher und leichter zu verstehen.

5.3 Algorithmus-Struktur und Funktionsweise

Der folgende Abschnitt erklärt die einzelnen Schritte des GBT-Algorithmus (siehe Algorithmus 2):

Schritt 1: Initialisierung (Zeile 2) Zu Beginn wird ein Basismodell $F_0(x)$ erstellt. Häufig, wie auch in dem dargestellten Algorithmus 2, ist $F_0(x)$ eine Konstante, die sich aus dem Durchschnitt der Zielwerte y bildet. Der Hintergrund dafür ist, dass ein solches Basismodell einen guten Ausgangspunkt für die Optimierung bietet, da es bereits eine grundlegende Schätzung der Zielwerte liefert. Diese erste Schätzung wird dann in folgenden Iterationen verbessert.

Schritt 2: Iterationen (Zeile 3 bis 7) Der Hauptteil des Algorithmus ist die Erstellung von Entscheidungsbäumen, welche dann dem Gesamtbaum hinzugefügt werden. Dies passiert über insgesamt M Iterationen.

Schritt 2.1: Berechnung der Residuen (Zeile 4) In jeder Iteration m werden die Residuen $r_{m,i}$ für jeden Datenpunkt i berechnet. Wie in Unterabschnitt 5.2 erklärt, zeigen letztere die Abweichung der tatsächlichen Werte y_i von den Vorhersagen des aktuellen Modells $F_{m-1}(x_i)$ auf. Die in Algorithmus 2 dafür verwendete Loss-Funktion ist der in SE (5.)

Schritt 2.2: Training eines neuen Entscheidungsbaums (Zeile 5) In diesem Schritt wird ein neuer Entscheidungsbaum h_t trainiert, wobei der Fokus nicht auf den ursprünglichen Zielwerten der Trainingsdaten (y_i), sondern auf den Residuen $r_{m,i}$ liegt. Jeder Datenpunkt (x_i, y_i) wird also durch das Paar $(x_i, r_{m,i})$ ersetzt, wobei $r_{m,i}$ das Pseudo-Residuum ist.

Dies bedeutet konkret, dass der Entscheidungsbaum nicht darauf trainiert wird, die eigentlichen Zieldaten y direkt vorherzusagen. Stattdessen lernt der Baum, die Fehler des aktuellen Modells, also die Residuen, zu korrigieren. Dadurch dass der Baum lediglich die Fehler korrigiert, ergibt es hingegen zu AdaBoost keinen Sinn ihn einzeln zu betrachten. Lediglich im Zusammenhang des Gesamtmodells ist die Hypothese relevant.

Schritt 2.4: Aktualisierung des Modells (Zeile 6) Das Modell wird in jedem Schritt verbessert, indem der neue Entscheidungsbaum $h_m(x)$ zum bisherigen Modell $F_{t-1}(x)$ mit der Gewichtung α hinzugefügt wird. Statt als Lernrate einen festen Hyperparameter α zu benutzen, gibt es auch wie in Frochte [3, S. 345] die Möglichkeit, diesen dynamisch zu berechnen. Meist dann mit γ bezeichnet, ist der Wert meist für jeden Baum unterschiedlich. Für die Suche nach γ kann beispielsweise Linearsuche verwendet werden.

Während die Verwendung von α bedeutet, dass jeder Baum gleichgewichtet ist, lassen sich mit γ feinere und damit auch effizientere Anpassungen am Gesamtmodell machen. Dies ist natürlich aber auch mit einem höheren Rechenaufwand verbunden.

Schritt 3: Ausgabe des finalen Modells (Zeile 8) Nach M Iterationen steht das finale Modell $F_M(x)$ fest. Es fasst die kumulativen Verbesserungen aller Entscheidungsbäume zusammen und vereint damit alle Verbesserungen zur Anpassung auf die Zieldaten y .

Algorithm 2 MSE Gradient Tree Boosting (nach Frochte [3, S. 346])

- 1: **Gegeben:** Trainingsdatensatz $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$
 - 2: **Initialisierung:** Starte mit einem Basismodell $F_0(x)$, z.B. dem Mittelwert der Labels y
 - 3: **for** $m = 1, \dots, M$ **do**
 - 4: Berechne die Pseudo-Residuen $r_{i,m} = y_i - F_{m-1}(x_i)$ für alle i
 - 5: Trainiere einen Entscheidungsbaum h_m auf $(x_i, r_{i,m})_{i=1}^n$
 - 6: Führe das Update durch: $F_m(x) = F_{m-1}(x) + \alpha \cdot h_m(x)$
 - 7: **end for**
 - 8: **Ausgabe:** Das endgültige Modell $F_M(x)$
-

5.4 Beispielanwendung mit Erläuterung

Um den doch eher abstrakten GBT-Algorithmus 2 zu veranschaulichen, wird im folgenden die Funktionsweise anhand des Beispiels in Abbildung 6 beschrieben.

Die Abbildungen sowie die verwendeten Daten entstammen einem eigenen Programm, welches mithilfe von SKLearn in Python erstellt wurde. Die genaue Implementierung ist auf **meinem GitHub Repo** zu finden. Wir betrachten den folgenden synthetischen Datensatz als gegeben:

```
X, y = make_regression(n_samples=100, n_features=1, noise=10, random_state=42)
X_sorted, X_indices = np.sort(X, axis=0), np.argsort(X, axis=0)
```

Wie im oberen Bild der Abbildung 6 zu erkennen ist, wird im Schritt der Initialisierung zunächst das Basismodell aus dem Durchschnitt der Zielwerte gebildet. Wie zu erwarten, hat das Basismodell keine wirkliche Aussage über die Zieldaten mit einem MSE von 1690.

In der ersten Iteration wird dann eine erste Vorhersage auf die Daten getroffen. Für diese Iteration stehen natürlich noch keine Residuen des Vorgängermodells zur Verfügung, weshalb sich die Punkte der Daten und Residuen decken. Schon nach einer Iteration nimmt die Vorhersage die ungefähre Form der Daten an. Alleine in diesem Schritt kann der MSE um das 5-fache reduziert werden.

Hier lässt sich zum ersten mal das Prinzip der Residuen veranschaulichen. Nehmen wir als Beispiel den einzelnen Datenpunkt in der unteren linken Ecke. Die Gesamtvorhersage der ersten Iteration hat eine Abweichung von ca. 80. Genau diese Abweichung von ca. 80 spiegelt sich dann für die zweite Iteration bei dem Residuum in der unteren linken Ecke wieder. In der

zugehörigen Baumvorhersage lässt sich auch erkennen, dass sie deutlich besser auf die Residuen passt als die Ursprungsdaten. Trotzdem lässt sich in diesem Schritt der MSE fast halbieren. Dies veranschaulicht die Argumentation aus Schritt 2.2.

Nach der dritten Iteration entspricht die Gesamtvorhersage ziemlich genau den Daten mit einem verbleibenden MSE von 89. Neben der schrittweisen Verbesserung des Modells lässt sich eine weitere Beobachtung treffen: In jeder Iteration nähern sich die Residuen der X-Achse an. Nach einer unbekannten Iteration von Schritten ist davon auszugehen, dass, wenn die Gesamthypothese die Daten perfekt abbildet, sich alle Residuen auf der X-Achse befinden.

5.5 Weiterentwicklung XGBoost

Eine der am häufigsten in der Praxis zitierten Ausprägungen von GBT ist dessen Weiterentwicklung XGBoost. Hierbei wurden eine Reihe von Verbesserungen und Beschleunigungen vorgenommen.

Unter anderem verwendet XGBoost die Loss-Funktion direkt statt deren negativen Gradienten sowie führt sogenannte Regularisierungsterme ein, um Überanpassung des Lernens an die Trainingsdaten (Overfitting) zu vermeiden. XGBoost oder andere Weiterentwicklungen werden jedoch hier nicht weiter betrachtet.

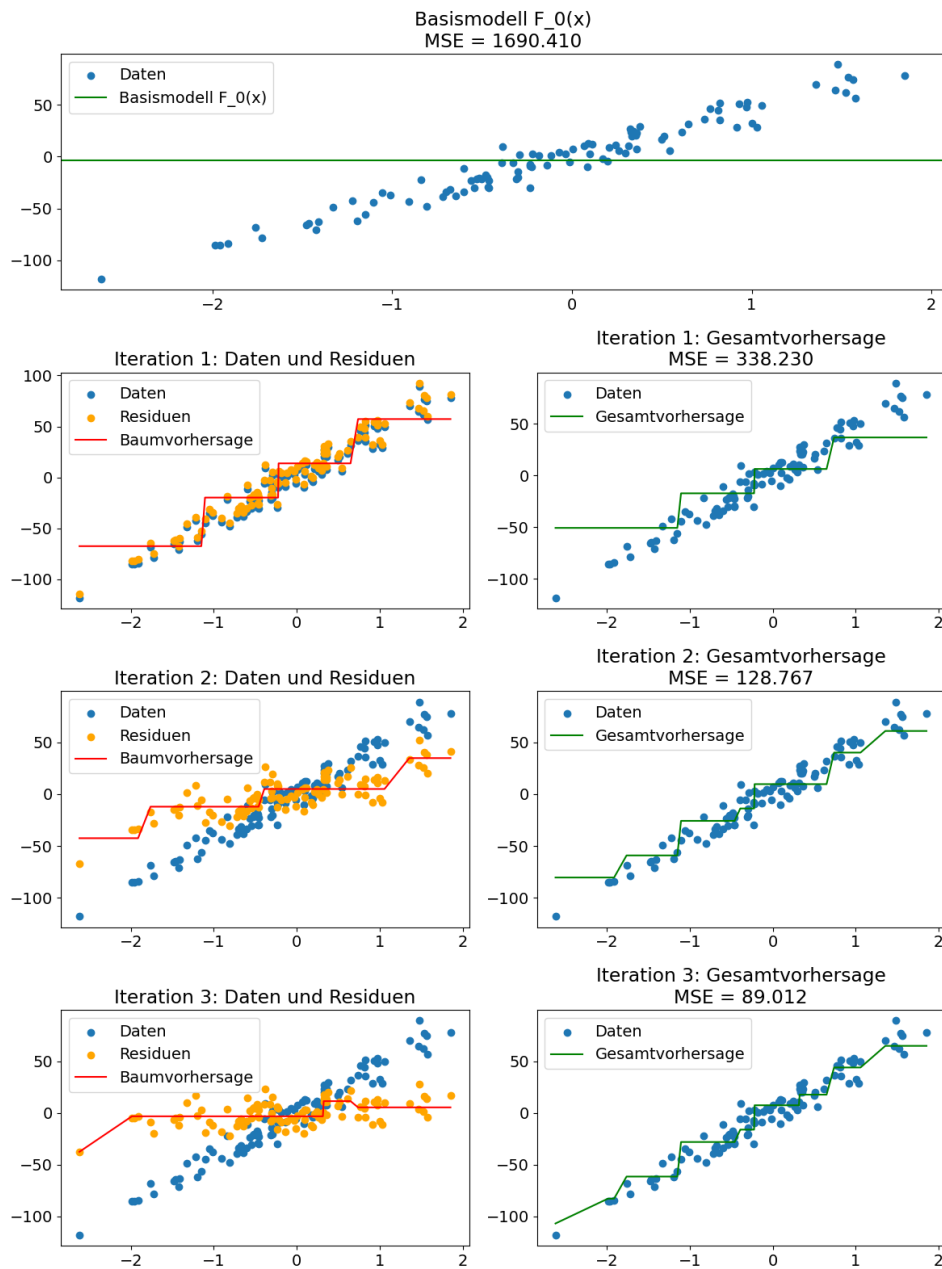


Abbildung 6: Visualisierung des Gradient Boosting Trees Algorithmus.

6 Vergleich von AdaBoost und Gradient Boosting

In diesem Abschnitt werden die Unterschiede zwischen den Boosting-Algorithmen AdaBoost und Gradient Boosting (GBT) diskutiert. Wir betrachten ihre theoretischen Grundlagen, praktische Umsetzung, Vor- und Nachteile sowie typische Anwendungsfälle.

6.1 Theoretische Grundlagen

AdaBoost und GBT sind beides Ensemble-Lernmethoden, die auf dem Prinzip des Boosting basieren. AdaBoost konzentriert sich darauf, die Gewichte von Trainingsdaten anzupassen, um die Fehler der vorherigen Lerner zu korrigieren. Dies führt zu einer sequenziellen Anpassung, bei der jeder nachfolgende Lerner versucht, die Schwächen des Vorgängers zu verbessern.

Im Gegensatz dazu arbeitet GBT mit Entscheidungsbäumen und konzentriert sich auf die Minimierung einer differenzierbaren Verlustfunktion, häufig unter Verwendung von Gradientenabstiegsverfahren. Dieser Ansatz ermöglicht es GBT, sowohl für Klassifikations- als auch für Regressionsprobleme effektiv zu sein.

6.2 Praktische Umsetzung

In der praktischen Anwendung wird AdaBoost häufig bei binären Klassifikationsproblemen eingesetzt, während GBT seine Stärken in komplexen Regressionsproblemen und Multiklassen-Klassifikationsaufgaben zeigt. AdaBoost ist in der Regel schneller in der Trainingsphase, da es einfacher in seiner Struktur ist. GBT hingegen, kann durch seine Flexibilität in der Anpassung von Entscheidungsbäumen und Verlustfunktionen komplexere Muster in den Daten erfassen.

6.3 Vor- und Nachteile

Ein wesentlicher Vorteil von AdaBoost liegt in seiner Einfachheit und Effizienz. Es ist leicht zu implementieren und bietet gute Ergebnisse bei einer Vielzahl von Problemen. Allerdings ist AdaBoost anfällig für Überanpassung, insbesondere bei Rauschen und Ausreißern in den Daten.

GBT hingegen ist flexibler und leistungsfähiger bei der Handhabung verschiedener Arten von Datenstrukturen und Verteilungen. Es kann jedoch rechenintensiver sein und erfordert eine sorgfältigere Abstimmung der Hyperparameter.

6.4 Einsatzgebiete und Leistungsbewertung

AdaBoost wird häufig in Anwendungen eingesetzt, bei denen die Geschwindigkeit der Modellerstellung kritisch ist und die Daten relativ frei von Ausreißern sind. GBT hingegen findet Anwendung in Szenarien, bei denen die Genauigkeit des Modells von höchster Bedeutung ist, wie beispielsweise in fortgeschrittenen Analytiken oder bei komplexen Regressionsproblemen.

6.4.1 Datensatz ‘california housing’

Um diese Unterschiede zu veranschaulichen, habe ich mich für eine komplexe Regressionsaufgabe, den bekannten Datensatz zu den Wohnungsdaten in Kalifornien, entschieden. Ziel bei diesem Datensatz ist es, den Hauspreis zu schätzen. Das selbstgeschriebene Programm ist wiederum auf **meinem GitHub Repo** zu finden.

Tabelle 4: Beispieldaten aus dem Kalifornien Wohnungsdatensatz

MedInc	HouseAge	AveRooms	AveBedrms	Population	AveOccup	Latitude	Longitude	Hauspreis
8.33	41.00	6.98	1.02	322.00	2.56	37.88	-122.23	4.53
8.30	21.00	6.24	0.97	2401.00	2.11	37.86	-122.22	3.58
7.26	52.00	8.29	1.07	496.00	2.80	37.85	-122.24	3.52
5.64	52.00	5.82	1.07	558.00	2.55	37.85	-122.25	3.41
3.85	52.00	6.28	1.08	565.00	2.18	37.85	-122.25	3.42

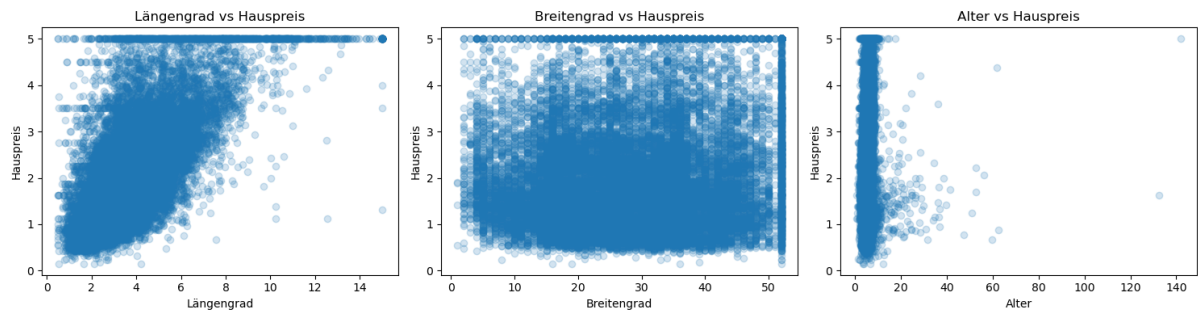


Abbildung 7: Visualisierung von Merkmalen des Kalifornien Wohnungsdatensatzes

6.4.2 Leistungsvergleich

Abbildung 8 zeigt einen Vergleich der Leistung von AdaBoost und GBT auf dem ‘california housing’ Datensatz. Es wird deutlich, dass GBT in Bezug auf den mittleren quadratischen Fehler (MSE) besser abschneidet, was seine Eignung für komplexe Regressionsprobleme unterstreicht. Allerdings war AdaBoost deutlich schneller bei der Berechnung. Auf einem für AdaBoost besser geeigneten Datensatz wäre also GBT weniger effizient.

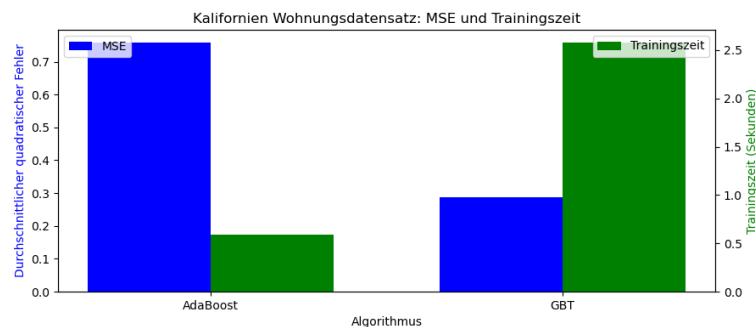


Abbildung 8: Leistungsvergleich von AdaBoost und GBT auf dem Kalifornien Wohnungsdatensatz

7 Resistenz gegen Overfitting

Overfitting beschreibt das Phänomen, dass durch viele Trainingsiterationen das Modell so gut an die Trainingsdaten angepasst ist, dass es (für andere Testdaten) nicht mehr genug generalisiert und sich mit zunehmenden Iterationen der Testfehler erhöht.

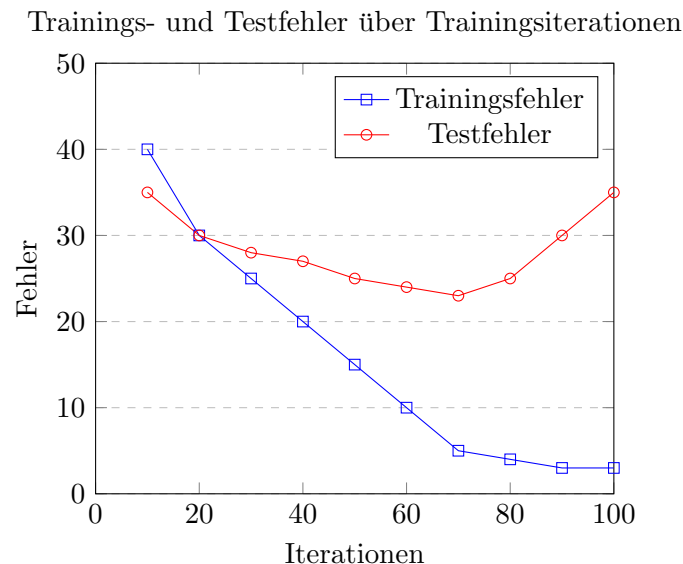


Abbildung 9: Hypothetische Darstellung von Overfitting: Während der Trainingsfehler mit zunehmenden Iterationen abnimmt, beginnt der Testfehler nach einem gewissen Punkt wieder zu steigen.

7.1 AdaBoost und die Herausforderung des Overfittings

In Schapire und Freund [1, Kapitel 1.2.3] wird das Phänomen des Overfitting für AdaBoost gezeigt. Trotz dieses theoretischen Hintergrunds war es mir in meinen praktischen Experimenten mit der SKLearn-Bibliothek in Python nicht möglich, Overfitting bei AdaBoost zu reproduzieren. Meine unzähligen Versuche mit unterschiedlichsten Anpassungen führten nicht zu den erwarteten Ergebnissen. Dies führt zu der Frage, warum AdaBoost in meinen Experimenten anscheinend resistent gegen Overfitting war. Der folgende Teil ist meine Theorie zu diesem Phänomen und basiert auf dem Erklärungsansatz den Schapire und Freund [1] liefern. Dieses eigene Beispiel sowie die Abbildungen wurden mithilfe von SKLearn in Python erstellt. Die Implementierung ist auf **meinem GitHub repo** zu finden.

7.2 Wahl des Datensatzes

Ich habe mich für eines der vielen Varianten an Datensätzen entschieden, um möglichst Overfitting zu provozieren:

```
x, y = make_classification(n_samples=200, n_features=2,
                           n_informative=2, n_redundant=0, n_clusters_per_class=1, flip_y
                           =0.4, random_state=1)
```


Ein relevanter Punkt ist die Menge der Datenpunkte ‘n_samples’. Ist dieser zu hoch gewählt, ist es für das Modell zu leicht zu generalisieren. Mit den hier gewählten 200 Datenpunkten neigte AdaBoost schon deutlich eher zum Overfitting als beispielsweise mit 10,000.

Ein zusätzlicher Teil ist die Auswahl Attribute. In dem Datensatz werden zwei Attribute ‘n_features’ verwendet. Normalerweise würde dies gut klassifizierbare Daten erstellen. Allerdings werden 40% der Datenwerte hier mittels ‘y_flip’ umgekehrt. Dies führt zu einem Datensatz, der keine eindeutige Klassifizierung erlaubt und viel Rauschen beinhaltet.

7.3 Ergebnisanalyse

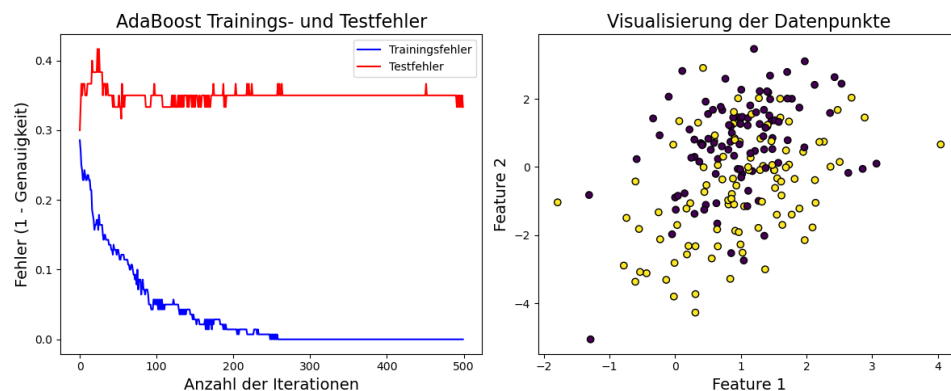


Abbildung 10: Trainings- und Testfehler des AdaBoost-Modells über die Iterationen.

In Abbildung 10 sind die Ergebnisse des AdaBoost-Algorithmus dargestellt. Interessanterweise zeigt sich, dass obwohl der Trainingsfehler stetig abnimmt, dass der Testfehler nicht in dem Maße ansteigt, wie man es bei klassischem Overfitting erwarten würde. Stattdessen bleibt er sehr konstant.

7.4 Philosophisches Prinzip: Occams Racor

Occams Racor, oder auf deutsch Occams Rasiermesser ist ein philosophisches Prinzip, welches besagt, dass, wenn es zwei Hypothesen zu einer Theorie gibt, die simplere vorzuziehen ist. Im Kontext des maschinellen Lernens, bedeutet dies, dass einfachere Modelle den komplexeren vorzuziehen sind, da anzunehmen ist, dass sie besser generalisieren. Dieses Prinzip suggeriert, dass bei der Klassifizierung unseres speziellen Datensatzes ein einfacheres Modell mit 250 Iterationen effektiver ist als das Endmodell mit 500 Iterationen, da es weniger anfällig für das ‘Auswendiglernen’ spezifischer Muster der Trainingsdaten und somit für Overfitting ist.

7.5 Erklärungsansatz: Margins Theorie

Eine Grundeigenschaft von AdaBoost ist, dass die Gewichtung α jedes Lernalgorithmus zum Gesamtmodell immer vom Beitrag zum Gesamtmodell abhängt. Für die Frage, warum sich der Testfehler nicht verschlechtert, könnte dies ab der 250. Iteration eine Antwort sein, da ab diesem Punkt der Trainingsfehler nahe 0 ist und sich das Modell nicht mehr verbessert. Dies kann aber offensichtlich nicht der Grund sein, da das Phänomen des konstanten Testfehlers auch bereits vor der 250.

Iteration auftritt.

Die Margins Theorie im Kontext von AdaBoost bietet eine mögliche Erklärung. Diese Theorie konzentriert sich auf den Abstand der Datenpunkte zur Entscheidungsgrenze des Klassifizierers, also den Margin. Die Entscheidungsgrenzen sind in Abbildung 11 dargestellt. Ein größerer Margin impliziert eine höhere Zuversicht in die Klassifizierung. Gegenätzlich dazu ist ein geringer Margin, also eine kleine Distanz zur Entscheidungsgrenze ein Zeichen für eine geringe Zuversicht in die Klassifizierung.

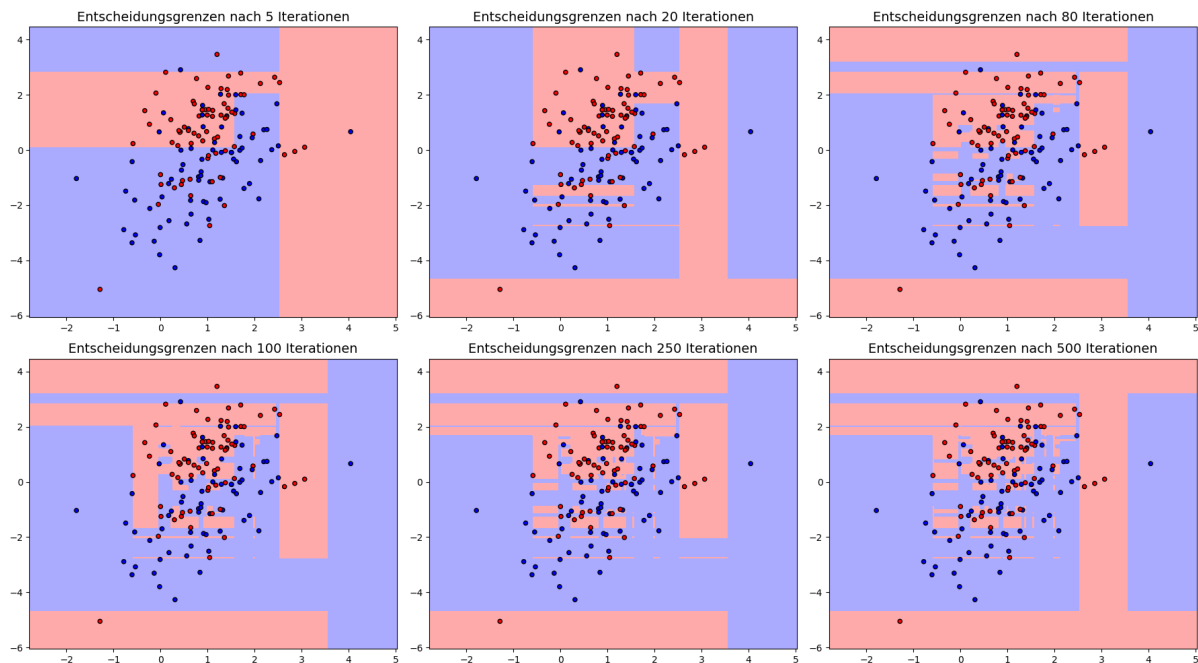


Abbildung 11: Entscheidungsgrenzen des Modells

Einfluss auf die Entscheidungsgrenzen In Abbildung 11 sind die Entscheidungsgrenzen des AdaBoost-Modells dargestellt. Es ist erkennbar, dass die Grenzen mit zunehmenden Iterationen präziser werden. Dies bedeutet jedoch nicht automatisch eine steigende Komplexität des Modells. Insbesondere bis zur 250. Iteration konzentriert sich AdaBoost darauf, die Margins zu vergrößern, was bedeutet, dass es die Entscheidungsgrenze so anpasst, dass die Klassifizierungen sicherer werden. Also sich möglichst nicht direkt an den Datenpunkten liegen, was wie wir wissen, eine höhere Zuversicht auf die Richtigkeit der Vorhersage widerspiegelt.

Vermeidung von Overfitting Die Vergrößerung der Margins trägt also dazu bei, dass das Modell nicht übermäßig an die Trainingsdaten anzupassen. Durch die Fokussierung auf schwierigere Fälle und die Erhöhung der Margins für diese Datenpunkte kann AdaBoost Overfitting vermeiden.

Zusammenfassung Die Margins Theorie ist meines Erachtens also eine plausible Erklärung dafür, wie AdaBoost die Balance zwischen hoher Trainingsgenauigkeit und der Vermeidung

von Overfitting hält. Das Modell führt offenbar dazu, die Margins effektiv zu vergrößern und dabei die Entscheidungsgrenzen anzupassen, ohne dabei die Generalisierung zu verringern. **Diese verhältnismäßig geringe Anfälligkeit gegen Overfitting macht Boosting Algorithmen wie AdaBoost so essentiell und populär.**

8 Vergleich von AdaBoost und GBT mit anderen Modellen

In diesem Kapitel werden die zwei vorgestellten Boosting Algorithmen AdaBoost und GBT mit anderen bekannten Vertretern von ML-Modellen verglichen werden. Die Ergebnisse und Grafiken basieren auf einer Studie von Randal Olson, Cava, Mustahsan u. a. [4], welche 13 unterschiedliche Algorithmen auf 165 Datensätzen evaluiert. Das Ziel dieses Kapitels ist nicht nur eine einfache Leistungsanalyse, sondern soll auch eine Empfehlung für die Praxis geben.

8.1 Auswahl und Leistung der Algorithmen

Die von Olson, Cava, Mustahsan u. a. [4] untersuchten Algorithmen sind eine Reihe von Klassifikationsmethoden, wie unter anderem Naive Bayes Varianten, logistische Regression, Support Vector Machines. Darüber hinaus werden auch baumbasierte Algorithmen wie Random Forests und Extra Trees analysiert.

8.2 Auswahl der Datensätze

Eine gute Auswahl der Datensätze ist entscheidend für eine aussagekräftige Bewertung. Insgesamt wurden 165 Datensätze aus dem Penn Machine Learning Benchmark (PMLB) ausgewählt. In dieser Sammlung sind viele Klassifikationsprobleme enthalten, die sowohl für die Öffentlichkeit verfügbar sind, als auch in einem einheitlichen Format dargestellt werden.

Bei der Auswahl wurde vor allem auf eine breite Abdeckung vieler Arten von Klassifikationsproblemen geachtet. Das bedeutet unterschiedliche Datengrößen, Anzahl der Attribute und Schwierigkeitsgrade. Ein großer Teil der Datensätze ist aus dem Bereich der Bioinformatik, jedoch nicht in einem Ausmaß, welches die Aussagekraft der Studie einschränken wurde. Diese breite Auswahl soll eine faire Leistungsbeurteilung ermöglichen, welche auch Stärken, Schwächen und daraus resultierende Anwendungsgebiete aufzeigt.

8.3 Ergebnisse der Studie

In Abbildung 12 schneidet GBT am besten ab mit einer durchschnittlichen Platzierung von ca. Platz 3. AdaBoost liegt in diesem Ranking im unteren Mittelfeld mit einer durchschnittlichen Platzierung von ca. Platz 8.

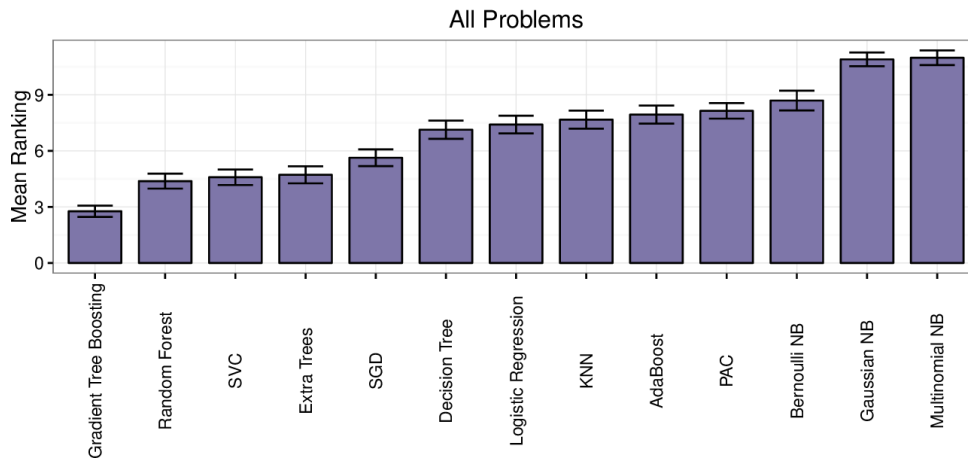


Abbildung 12: Durchschnittliche Platzierung der ML Algorithmen über allen Daten (Quelle [4, Abbildung 1])

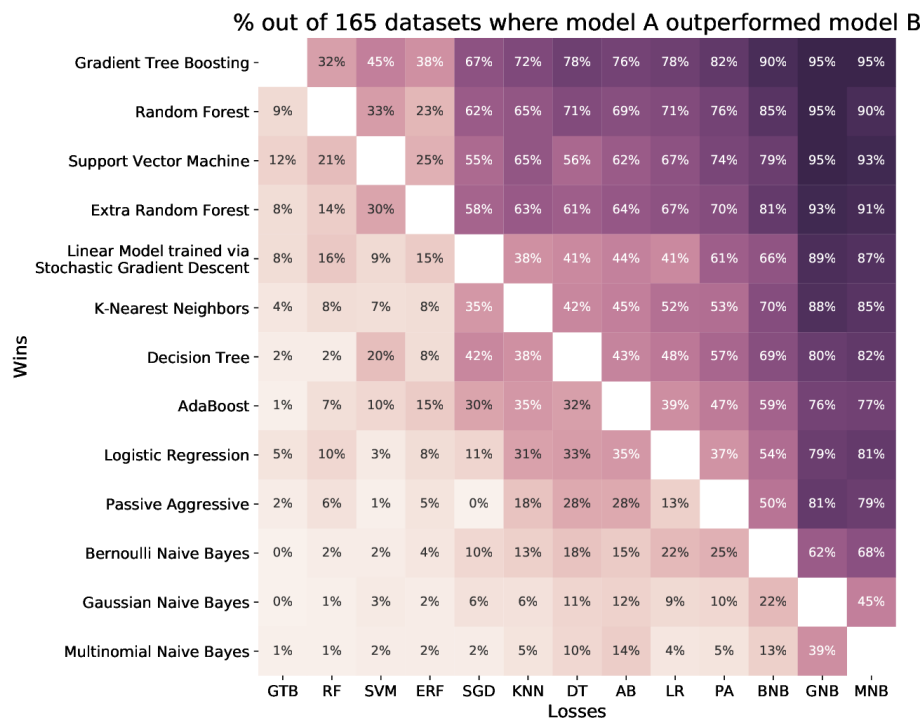


Abbildung 13: Die Abbildung zeigt eine Heatmap, welche den Prozentsatz der 165 Datensätze darstellt, bei denen ein Algorithmus in Bezug auf die beste Genauigkeit auf einem Problem einen anderen übertrifft. Zwei Algorithmen sind als gleichwertig angesehen werden, wenn ihre Genauigkeit innerhalb von 1% voneinander liegt. (Quelle [4, Abbildung 2])

8.4 Interpretation der Ergebnisse

8.4.1 Bedeutung für AdaBoost und GBT

Die Ergebnisse dieser Studie decken sich mit dem Leistungsvergleich aus Kapitel 6.4.2. Die Leistungsstärke von GBT wird verdeutlicht und unterstreicht seine Eignung für unterschiedlichste Probleme. Auch wenn AdaBoost vergleichsweise mittelmäßig abschneidet, ist das trotzdem eine

beachtliche Leistung. Gerade für Datenstrukturen, die weniger komplex sind oder eine schnellere Trainingszeit benötigen, sollt man AdaBoost nicht außer Acht lassen.

8.4.2 Empfehlungen für die Praxis

Auch wenn GBT in den Tests am besten abgeschnitten hat, ist es keines Falls ratsam zu versuchen alle Probleme ausschließlich mit diesem Algorithmus zu lösen. Wie in allen Bereichen des Machine Learnings wird es nie einen Algorithmus der in allen Bereichen immer am besten abschneidet. Olson betont in seiner Studie besonders, dass die Wahl der Hyperparameter eine signifikante Rolle spielt bis hin zu Leistungsunterschieden von über 50%. Jedes Problem muss einzeln betrachtet werden und durch feiner Abstimmung der Hyperparameter kann ein für den Einzelfall bestes Modell gefunden werden.

9 Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit wurde sich intensiv mit den vorgestellten Boosting Algorithmen AdaBoost und Gradient Boosting Trees beschäftigt. Beginnend mit einer Erklärung der theoretischen Funktionsweise und Erläuterung anhand praktischer Anwendung wurden die beiden Algorithmen intensiv untersucht. Anhand des Verständnis über ihre Funktionsweise konnten Unterschiede, Stärken, Schwächen analysiert und erklärt werden.

AdaBoost's Stärke zeigt sich besonders in seiner Resistenz gegen Overfitting. Auch wenn AdaBoost definitiv zum Overfitting gebracht werden kann, ist es doch eine nützliche Widerstandskraft, im Kontext des maschinellen Lernens. Durch konsequente Fokussierung auf Fehler während des Trainings, bei der die Daten gewichtet werden, gelingt es AdaBoost ein leistungsstarkes Model zu kreieren, was sich besonders für die zweiklassige Klassifikation eignet und sehr effizient arbeitet. GBT hingegen ist durch seine Flexibilität auf viele Probleme anwendbar und kann sich besonders bei Komplexen Problemen hervortun. Durch seine Verwendung von Entscheidungsbäumen und die Fokussierung auf die Minimierung des Restfehlers ist GBT ein leistungsstarker und vielseitig einsetzbarer Vertreter der Boosting-Algorithmen.

Abschließend lässt sich sagen, sowohl AdaBoost als auch GBT sind nicht zu unterschätzende ML-Modelle sind. Inzwischen gibt es viele Abwandlungen der Algorithmen, wie beispielsweise XGBoost (eXtreme Gradient Boosting), welche Verfeinerungen bieten, die sowohl neue Anwendungsgebiete ermöglichen, als auch die Leistung erhöhen können. In einer Zeit in der Neuronale Netze und Deep Learning an Popularität gewinnen, behalten AdaBoost und Gradient Boosting Trees (GBT) ihren wichtigen Stellenwert in der Welt des maschinellen Lernens. Sie bieten robuste, effiziente Lösungen für eine Vielzahl von Datenstrukturen und Problemen, vor allem in Bereichen, wo Daten möglicherweise nicht ausreichen für den Einsatz von Deep-Learning-Methoden.

Literaturverzeichnis und Quellen

- [1] R. E. Schapire und Y. Freund, *Boosting : foundations and algorithms* (Adaptive Computation and Machine Learning Series). Cambridge, Mass. [u.a.]: MIT Press, 2012, Includes bibliographical references and index, ISBN: 9780262017183. Adresse: <http://www.gbv.de/dms/ilmenau/toc/672276232.PDF%20;%20https://zbmath.org/?q=an:1278.68021>.
- [2] A. [Géron, *Praxiseinstieg Machine Learning mit Scikit-Learn und TensorFlow : Konzepte, Tools und Techniken für intelligente Systeme*, 1. Auflage, K. [Rother, Hrsg. Heidelberg: O'Reilly, 2018, Authorized German translation of the English edition of 'Hands-on machine learning with Scikit-Learn and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems', ISBN 978-1-491-96228-9, (c) 2017 - Impressum; 'US-Bestseller zu Deep Learning' - Umschlag 'Dieses Buch erscheint in Kooperation mit O'Reilly Media, Inc. unter dem Imprint O'Reilly.' - Rückseite der Titelseite. - 'Deutschsprachige O'Reilly-Bücher werden vom dpunkt.verlag in Heidelberg publiziert, vermarktet und vertrieben.' - Webseite www.oreilly.de; 201712; aa, ISBN: 9783960090618. Adresse: http://www.gbv.de/dms/ilmenau/toc/898831717.PDF%20;%20http://vub.de/cover/data/isbn%3A9783960090618/medium/true/de/vub/cover.jpg%20;%20http://deposit.d-nb.de/cgi-bin/dokserv?id=6ba05f7dfc5242d6bbc6f653e199e877&prov=M&dok_var=1&dok_ext=htm%20;%20https://www.oreilly.de/buecher/13111/9783960090618-praxiseinstieg-machine-learning-mit-scikit-learn-und-tensorflow.html.
- [3] J. [Frochte, *Maschinelles Lernen : Grundlagen und Algorithmen in Python* (Hanser eLibrary), 3., überarbeitete und erweiterte Auflage. München: Hanser, 2020, ISBN: 9783446463554. Adresse: <https://dx.doi.org/10.3139/9783446463554%20;%20https://doi.org/10.3139/9783446463554%20;%20https://www.hanser-elibrary.com/doi/book/10.3139/9783446463554%20;%20http://dx.doi.org/10.3139/9783446463554>.
- [4] R. S. Olson, W. L. Cava, Z. Mustahsan, A. Varik und J. H. Moore, *Data-driven Advice for Applying Machine Learning to Bioinformatics Problems*, 2018. arXiv: 1708.05070 [q-bio.QM].
- [5] G. [James, *An introduction to statistical learning : with applications in Python* (Springer texts in statistics), D. [Witten, T. [Hastie, R. [Tibshirani und J. E. [Taylor, Hrsg. Cham, Switzerland: Springer, 2023, ISBN: 9783031387463.
- [6] T. [Hastie, *The elements of statistical learning : data mining, inference, and prediction* (Springer series in statistics), Second edition, R. [Tibshirani und J. H. [Friedman, Hrsg. New York, NY: Springer, 2009, Hier auch später erschienene, unveränderte Nachdrucke; Literaturverzeichnis: Seite 699-727, ISBN: 9780387848570. Adresse: <http://www.gbv.de/dms/ilmenau/toc/572093853.PDF%20;%20https://zbmath.org/?q=an:1273.62005%20;%20https://swbplus.bsz-bw.de/bsz287727726kap.htm%20;%20https://swbplus.bsz-bw.de/bsz287727726vor.htm%20;%20https://swbplus.bsz-bw.de/bsz287727726inh.htm%20;%20https://swbplus.bsz-bw.de/bsz287727726cov.jpg>.

Abbildungsverzeichnis

1	Beispiel eines Entscheidungsstumpfes	5
2	Visualisierung der Gewichtsfunktion α in Abhängigkeit vom Fehler ε	8
3	Visualisierung der Signum-Funktion	9
4	Sequentielles Training mit aktualisierten Gewichten der Datenpunkte bei AdaBoost	10
5	Schematische Darstellung des AdaBoost-Prozesses	12
6	Visualisierung des Gradient Boosting Trees Algorithmus	18
7	Visualisierung von Merkmalen des Kalifornien Wohnungsdatensatzes	20
8	Leistungsvergleich von AdaBoost und GBT auf dem Kalifornien Wohnungsdatensatz	20
9	Hypothetische Darstellung von Overfitting	21
10	Trainings- und Testfehler des AdaBoost-Modells über die Iterationen.	22
11	Entscheidungsgrenzen des Modells	23
12	Durchschnittliche Platzierung der ML Algorithmen über allen Daten	26
13	Heatmap zum 1 zu 1 Vergleich der Algorithmen	26

Tabellenverzeichnis

1	Individuelle Vorhersagen der Schwache Lerner	7
2	Wahrheitstabelle zur Vorhersage von Regen basierend auf schwachen Lernern. Die Werte dienen in erster Linie der Veranschaulichung.	7
3	Berechnungen für Abbildung 5	13
4	Beispieldaten aus dem Kalifornien Wohnungsdatensatz	20

Algorithmenverzeichnis

1	AdaBoost Algorithmus	12
2	MSE Gradient Tree Boosting	16