

-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	Motivation und Zielsetzung	1
1.2	Struktur der Arbeit	1
2	Grundlagen des Machine Learning (3-4 Seiten)	2
2.1	Modern Approaches in Machine Learning	2
2.2	Role of Boosting Algorithms in ML	2
2.3	Boosting Algorithms in Tabular Data Analysis	2
3	Boosting	3
3.1	Was ist Boosting am Beispiel Wettererkennung	3
3.1.1	Erzeugung eines starken Lernalgorithmus	4
3.2	Gewichtete Abstimmung	4
3.2.1	Grundlegende Annahmen	4
3.2.2	Fehlerberechnung	4
3.2.3	Gewichtung der schwachen Lernalgorithmen	5
3.2.4	Endgültige Vorhersage des starken Lernalgorithmus	5
3.3	Annahme des schwachen Lernalgorithmus	6
4	AdaBoost	7
4.1	Adaptives Lernen	7
4.1.1	Gewichtete Daten	7
4.2	Algorithmus-Struktur und Funktionsweise	8
4.3	Anwendungsbeispiel	9
5	Gradient Boosting (5-6 Seiten)	11
5.1	Unterschied zu AdaBoost	11
5.2	Die Loss-Funktion im Gradient Boosting Trees	11
5.3	Algorithmus-Struktur und Funktionsweise	12
5.4	Algorithmus-Struktur und Funktionsweise	12
5.5	Beispielanwendung mit Erläuterung	13
6	Vergleich von AdaBoost und Gradient Boosting (4-5 Seiten)	14
6.1	Gemeinsamkeiten und Unterschiede	14
6.2	Performance-Analyse in Benchmarks	14
6.3	Anwendungsbeispiele und Fallstudien	14
7	Aktuelle Trends und Entwicklungen (2-3 Seiten)	15
7.1	Neueste Forschungsergebnisse	15
7.2	Zukünftige Potenziale von Boosting-Algorithmen	15
7.3	Toleranz gegen Overfitting	15
7.4	Exponentieller Abstieg des Trainingsfehlers	15

8 Fazit und Ausblick (2-3 Seiten)	16
8.1 Zusammenfassung der Erkenntnisse	16
8.2 Reflexion über die Bedeutung für die Praxis	16
8.3 Ausblick auf zukünftige Forschungsthemen	16
Literaturverzeichnis	18
Abbildungsverzeichnis	19
Tabellenverzeichnis	20
Algorithmenverzeichnis	21

1 Einleitung

In der dynamischen Welt des maschinellen Lernens (ML) haben sich Boosting-Algorithmen als revolutionär erwiesen, indem sie beeindruckende Leistungen in einer Vielzahl von Anwendungen erbringen [1, Kapitel 1.1.2]. Besonders bei tabellarischen Datensätzen erzielen sie in fast allen Bereichen die besten Ergebnisse.

In dieser Seminararbeit liegt der Schwerpunkt auf AdaBoost und GradientBoosting, die gemäß Géron [2, S. 192] zu den bekanntesten Vertretern der Boosting-Familie gehören. Die Arbeit wird die beiden Algorithmen detailliert untersuchen und verständlich darstellen.

1.1 Motivation und Zielsetzung

Das Ziel dieser Seminararbeit ist es, ein tiefes Verständnis für die Funktionsweise von AdaBoost und GradientBoosting zu entwickeln und deren Einsatzmöglichkeiten anhand konkreter Beispiele zu demonstrieren. Hierbei wird besonderer Wert darauf gelegt, zunächst die Funktionsweise verständlich zu erläutern.

1.2 Struktur der Arbeit

Die Seminararbeit gliedert sich in mehrere Abschnitte, die schrittweise aufeinander aufbauen. Zunächst wird ein Überblick über die Grundlagen des maschinellen Lernens gegeben, gefolgt von einer detaillierten Betrachtung der Boosting-Algorithmen, insbesondere AdaBoost und GradientBoosting. Anschließend erfolgt ein Vergleich dieser beiden Methoden, wobei deren Stärken und Schwächen in verschiedenen Anwendungsszenarien beleuchtet werden. Abschließend wird ein Ausblick auf zukünftige Entwicklungen und mögliche Forschungsrichtungen im Bereich des Boostings gegeben.

[3, text] [1, text] [2, text] [4, text] [5, text]

2 Grundlagen des Machine Learning (3-4 Seiten)

2.1 Modern Approaches in Machine Learning

Überblick über aktuelle Trends und Innovationen im Machine Learning Vorstellung fortgeschrittener Techniken und Methoden Diskussion über die Bedeutung von Deep Learning und künstlichen neuronalen Netzen

2.2 Role of Boosting Algorithms in ML

Einführung in Boosting-Algorithmen und ihre Relevanz Spezifische Betrachtung von AdaBoost und Gradient Boosting Vergleich von Boosting-Algorithmen mit anderen fortgeschrittenen Methoden

2.3 Boosting Algorithms in Tabular Data Analysis

Bedeutung von tabellenartigen Datensätzen in fortgeschrittenen ML-Anwendungen Analyse, wie AdaBoost und Gradient Boosting bei tabellenartigen Daten effektiv sind Fallstudien und Beispiele aus der Praxis, die den Einsatz dieser Algorithmen zeigen

Daten Entscheidungsbäume Trainingsfehler

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 am Beispiel Wettererkennung

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

Die genannte Definition des Boosting 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.

3.1.1 Erzeugung eines starken Lernalers

Der nächste Schritt ist es, die Aussagen der schwachen Lernaler in ein nützliches Modell zusammenzufassen, einen sog. ‘starken Lernaler’. Im einfachsten Fall lässt man die schwachen Lernaler mit gleicher Stimmkraft abstimmen. Aus dem Stimmverhältnis der Vorhersagen der schwachen Lernaler 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 Lernalern. Die Werte dienen in erster Linie der Veranschaulichung.

3.2 Gewichtete Abstimmung

Aus der Mehrheitsentscheidung, bei der alle schwachen Lernaler 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 Lernalers α individuell, wie im Algorithmus 1.1 von Schapire und Freund beschrieben [1, S. 5].

3.2.1 Grundlegende Annahmen

Gegeben:

- Ein Datensatz X , 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 Lernaler t mit Vorhersagefunktion/Hypothese h_t .

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

3.2.2 Fehlerberechnung

Der Fehler ε_t eines schwachen Lernalers 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.

3.2.3 Gewichtung der schwachen Lerner

Die Gewichtung α_t jedes schwachen Lerner 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.

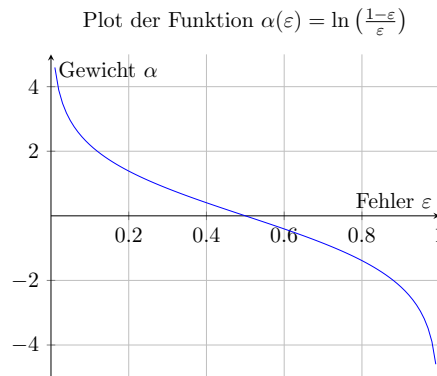


Abbildung 1: Visualisierung der Gewichtungsfunktion α in Abhängigkeit vom Fehler ε

3.2.4 Endgültige Vorhersage des starken Lerner

Die Gesamtvorhersage H des Boosting-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 Lerner 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.

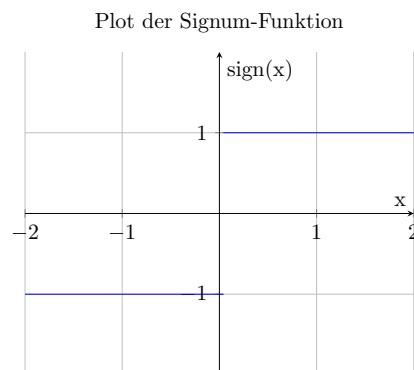


Abbildung 2: Visualisierung der Signum-Funktion

3.3 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 uninformierten 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 3).

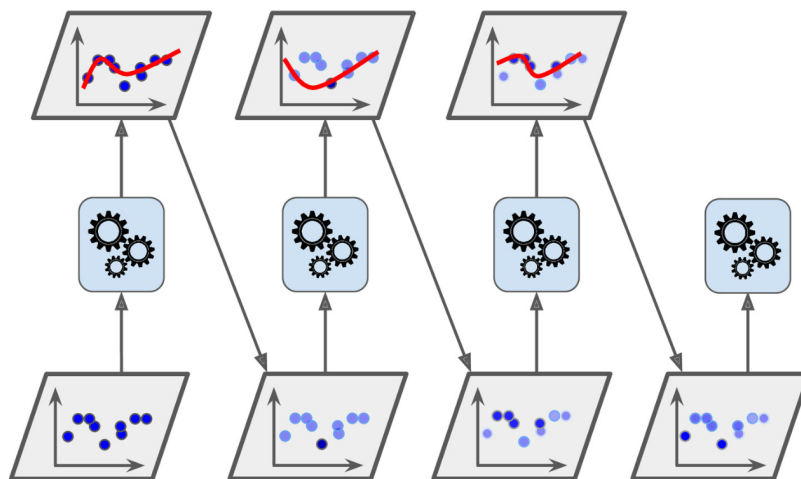


Abbildung 3: Sequentielles Training mit aktualisierten Gewichten der Datenpunkte bei AdaBoost (Quelle: Géron [Abbildung 7-7 2, S. 192])

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 3.2.2 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 3.2.3 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 4 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 3.3 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.

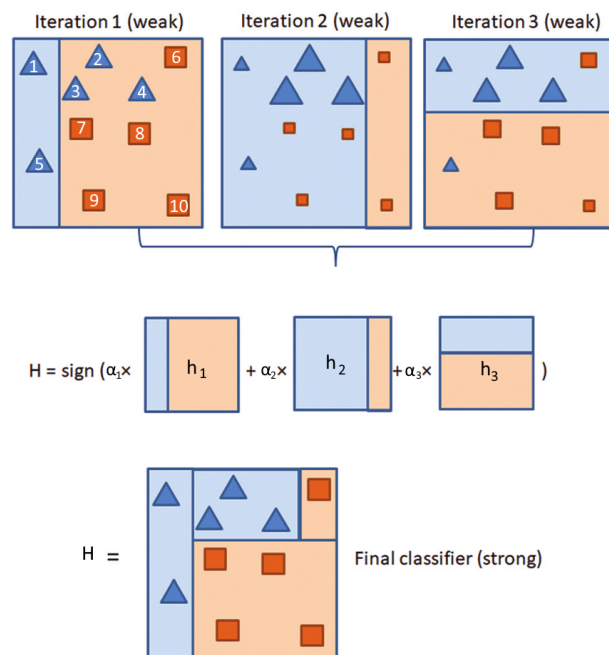


Abbildung 4: Schematische Darstellung des AdaBoost-Prozesses (Quelle: ResearchGate, Alex Henderson et al.)

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 4 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 4 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 (5-6 Seiten)

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. Genauer gesagt bedeutet dies, dass jeder neue Baum auf den Residuen (Unterschiede zwischen den tatsächlichen und den vorhergesagten Werten) des vorherigen trainiert wird.

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 im Gradient Boosting Trees

Bevor wir uns in die Einzelheiten des Gradient Boosting Trees Algorithmus vertiefen, sollten wir einen Blick auf die Loss-Funktion werfen, die eine zentrale Rolle in diesem Prozess spielt.

In der Welt des maschinellen Lernens ist die Loss-Funktion das Maß für den Fehler zwischen den vorhergesagten und den tatsächlichen Werten. Sie ist entscheidend für das Trainieren und die Verbesserung unserer Modelle. Beim Gradient Boosting Trees wird oft die Mean Squared Error (MSE) Loss-Funktion verwendet, welche die quadratische Differenz zwischen den vorhergesagten Werten und den tatsächlichen Werten berechnet.

Formal ausgedrückt wird die MSE Loss-Funktion wie folgt definiert:

$$L(y, F(x)) = \frac{1}{2}(y - F(x))^2 \quad (4)$$

Hierbei ist y der tatsächliche Wert und $F(x)$ der vom Modell vorhergesagte Wert. Diese Funktion wird so gestaltet, dass sie immer positiv ist und größer wird, je größer der Unterschied zwischen der Vorhersage und dem tatsächlichen Wert ist. Die Division durch 2 ist eine mathematische Bequemlichkeit, die das Berechnen der Gradienten in späteren Schritten vereinfacht.

In jedem Schritt des Algorithmus wird diese Loss-Funktion genutzt, um das sogenannte Pseudo-Residuum zu berechnen. Dies ist ein wichtiger Bestandteil des Algorithmus, da das Residuum angibt, wie weit unsere aktuellen Vorhersagen vom Zielwert abweichen. Diese Residuen werden dann verwendet, um den nächsten Entscheidungsbaum im Algorithmus zu trainieren, mit dem Ziel, die Gesamtvorhersage des Modells zu verbessern.

5.3 Algorithmus-Struktur und Funktionsweise

Der GBT-Algorithmus (siehe Algorithmus 3) ist in mehrere Schritte unterteilt, welche im folgenden genau erklärt werden:

5.4 Algorithmus-Struktur und Funktionsweise

Der Gradient Boosting Trees Algorithmus, im Folgenden GBT genannt, ist ein komplexer, aber hochgradig effektiver Boosting-Algorithmus. Der folgende Abschnitt erklärt die einzelnen Schritte des GBT-Algorithmus (siehe Algorithmus 3):

Schritt 1: Initialisierung (Zeile 2) Zu Beginn wird ein Basismodell $F_0(x)$ erstellt, welches oft der Durchschnitt oder Median der Zielwerte y ist. Dieses Modell bildet den Ausgangspunkt für die iterativen Verbesserungen.

Schritt 2: Iterationen (Zeile 3 bis 7) Im Kern des GBT-Algorithmus stehen iterative Schritte, die darauf abzielen, das aktuelle Modell schrittweise zu verbessern. Diese Iterationen laufen über einen vordefinierten Zeitraum T .

Schritt 2.1: Berechnung der Residuen (Zeile 4) In jeder Iteration t werden die Residuen $r_{t,i}$ für jeden Datenpunkt i berechnet. Diese Residuen repräsentieren die Differenz zwischen den tatsächlichen Werten y_i und den Vorhersagen des aktuellen Modells $F_{t-1}(x_i)$.

Schritt 2.2: Training der Entscheidungsbäume (Zeile 5) Ein neuer Entscheidungsbaum h_t wird auf den Residuen trainiert. Jeder Baum fokussiert sich darauf, die Fehler des vorherigen Modells zu minimieren.

Schritt 2.3: Optimierung des Multiplikators (Zeile 6) Für jeden Baum wird ein Multiplikator γ_t gefunden, der den Einfluss des Baumes auf das Gesamtmodell optimal anpasst. Dies kann beispielsweise durch eine Linearsuche erfolgen.

Schritt 2.4: Aktualisierung des Modells (Zeile 7) Das Modell wird durch Hinzufügen des neuen, gewichteten Entscheidungsbaumes $\gamma_t h_t(x)$ zum aktuellen Modell $F_{t-1}(x)$ aktualisiert. Dadurch wird das Modell iterativ verbessert.

Schritt 3: Ausgabe des finalen Modells (Zeile 8) Nach Abschluss aller Iterationen wird das finale Modell $F_T(x)$ als das Ergebnis des GBT-Algorithmus ausgegeben. Dieses Modell ist die Summe aller gewichteten Entscheidungsbäume und repräsentiert die kumulativen Verbesserungen über alle Iterationen.

Algorithm 2 Gradient Boosting Trees Algorithmus (nach Frochte [3, S. 346])

- 1: **Gegeben:** Trainingsdatensatz $(x_1, y_1), \dots, (x_m, y_m)$
 - 2: **Initialisierung:** Initialisiere das Modell mit einem konstanten Wert $F_0(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$
 - 3: **for** $t = 1, \dots, T$ **do**
 - 4: Berechne Residuen $r_{t,i} = y_i - F_{t-1}(x_i)$ für alle i
 - 5: Trainiere einen Entscheidungsbaum h_t auf $(x_i, r_{t,i})$
 - 6: Finde den besten Multiplikator α_t für $h_t(x)$, z.B. durch Linearsuche
 - 7: Aktualisiere das Modell: $F_t(x) = F_{t-1}(x) + \alpha_t \cdot h_t(x)$
 - 8: **end for**
 - 9: **Ausgabe:** Das endgültige Modell $F_T(x)$
-

Algorithm 3 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 das Pseudo-Residuum $r_{i,m} = y_i - F_{m-1}(x_i)$ für alle i
 - 5: Trainiere einen Entscheidungsbaum h_m auf $(x_i, r_{i,m})$
 - 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 $F_M(x)$
-

5.5 Beispielanwendung mit Erläuterung

6 Vergleich von AdaBoost und Gradient Boosting (4-5 Seiten)

6.1 Gemeinsamkeiten und Unterschiede

6.2 Performance-Analyse in Benchmarks

6.3 Anwendungsbeispiele und Fallstudien

!!! REFERENZ ZU 1. EINLEITUNG

7 Aktuelle Trends und Entwicklungen (2-3 Seiten)

7.1 Neueste Forschungsergebnisse

7.2 Zukünftige Potenziale von Boosting-Algorithmen

7.3 Toleranz gegen Overfitting

!!! VERWEISEN

7.4 Exponentieller Abstieg des Trainingfehlers

!!! VERWEISEN

8 Fazit und Ausblick (2-3 Seiten)

8.1 Zusammenfassung der Erkenntnisse

8.2 Reflexion über die Bedeutung für die Praxis

8.3 Ausblick auf zukünftige Forschungsthemen

Glossar

AdaBoost Ein Machine Learning-Algorithmus, der auf dem Prinzip des Boosting basiert.. 1, 2

Gradient Boosting Eine Methode des maschinellen Lernens, die für Regression und Klassifikation verwendet wird.. 1, 2

Literaturverzeichnis

- [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, Äuthorized 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; ÜS-Bestseller zu Deep Learning Umschlag"Dieses Buch erscheint in Kooperation mit O'Reilly Media, Inc. unter dem Imprint Ö'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] 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.
- [5] 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	Visualisierung der Gewichtsfunktion α in Abhängigkeit vom Fehler ε	5
2	Visualisierung der Signum-Funktion	5
3	Sequentielles Training mit aktualisierten Gewichten der Datenpunkte bei AdaBoost	7
4	Schematische Darstellung des AdaBoost-Prozesses	9

Tabellenverzeichnis

1	Individuelle Vorhersagen der Schwache Lerner	3
2	Wahrheitstabelle zur Vorhersage von Regen basierend auf schwachen Lernern. Die Werte dienen in erster Linie der Veranschaulichung.	4
3	Berechnungen für Abbildung 4	10

Algorithmenverzeichnis

1	AdaBoost Algorithmus	9
2	Gradient Boosting Trees Algorithmus	13
3	MSE Gradient Tree Boosting	13