



# Aichemist Session

CHAP 04 분류(2)

# CONTENTS

## 분류

01. 결정 트리

02. 앙상블 학습

03. 랜덤 포레스트

04. GBM

05. XGBoost

→ 4주차는 여기부터!

06. LightGBM

07. 베이지안 최적화 기반의 HyperOpt를 이용한 하이퍼 파라미터 튜닝

08. 스택킹 앙상블



05.

XGBoost

# XGBoost

: GBM 기반, 단점을 보완하여 각광받는 알고리즘

분류에서 일반적으로 다른 ML보다 뛰어난 예측 성능 가짐

- 주요 장점

- 분류, 회귀 영역에서 뛰어난 예측 성능

- 병렬 수행 및 병렬 수행 등 다양한 기능으로 GBM에 비해 빠른 수행 속도

- **과적합** 규제 기능

- 나무 가지치기 : 긍정 이득이 없는 분할 줄임

- **교차검증** : 최적화된 반복 수행 횟수를 채웠거나 최적화가 이뤄지면 반복 중단

- 결손값 자체 처리

## XGBoost 패키지

파이썬 래퍼 XGBoost	사이킷런 래퍼 XGBoost
<ul style="list-style-type: none"><li>- 사이킷런과 호환되지 않는 초기의 독자적인 XGBoost 전용 패키지</li><li>- 고유의 API와 하이퍼 파라미터 사용</li><li>- 주로 XGBoost의 고급 기능과 하이퍼파라미터 튜닝을 수행할 때 사용</li></ul>	<ul style="list-style-type: none"><li>- 사이킷런과 연동되어 표준 사이킷런 개발 프로세스 및 유틸리티 사용 가능</li><li>- 클래스 : XGBClassifier, XGBRegressor</li></ul>

## 파이썬 래퍼 XGBoost 하이퍼 파라미터

- 일반 파라미터 : 스레드의 개수나 silent 모드 등 선택, 일반적으로 default값 유지
- 부스터 파라미터 : 트리 최적화, 부스팅, regularization(정규화) 관련
- 학습 태스크 파라미터 : 학습에 사용되는 객체 함수, 평가 지표 등 설정

- 주요 일반 파라미터

booster	gbtree(트리 기반 모델, 디폴트) / gblinear(선형 모델)
silent	0(출력 메시지 x, 디폴트) / 1(출력 메시지 o)
nthread	CPU의 실행 스레드 개수(디폴트: 전체 스레드 사용)

# 파이썬 래퍼 XGBoost 하이퍼 파라미터

- 주요 일반 파라미터

alias : 별칭. 이 이름으로 사용해도 동일한 설정 적용

eta	GBM의 learning rate와 같은 역할, 학습 반영률 0~1(디폴트: 0.3, 보통: 0.01~0.2, alias: learning_rate)
num_boost_rounds	GBM의 n_estimator와 같은 역할, weak learner의 개수
min_child_weight	트리 분할을 결정하는 데이터들의 weight 총합 (디폴트: 1) 클수록 분할 자제, 과적합 제어
gamma	트리의 리프 노드를 추가적으로 나눌지 결정하는 최소 손실 감소 값 (디폴트: 0, alias: min_split_loss) 값이 클수록 과적합 제어
max_depth	트리 기반 알고리즘의 max_depth와 같은 역할, 과적합 제어 (디폴트: 6, 보통: 3~10)
sub_sample	GBM의 subsample과 같은 역할, 데이터의 샘플링 비율 0~1(디폴트: 1, 보통: 0.5~1)
colsample_bytree	GBM의 max_features와 같은 역할, 반영할 피쳐 개수 (디폴트: 1)

## 파이썬 래퍼 XGBoost 하이퍼 파라미터

- 주요 부스터 파라미터

lambda	L2 Regulation 적용 값, 피쳐 많을 때 사용 검토 (디폴트: 1, alias: reg_lambda)
alpha	L1 Regulation 적용 값, 피쳐 많을 때 사용 검토 (디폴트: 0, alias: reg_alpha)
scale_pos_weight	비대칭한 클래스로 구성된 데이터 세트의 균형을 위한 파라미터 (디폴트: 1)



# 파이썬 래퍼 XGBoost 하이퍼 파라미터

- 주요 학습 태스크 파라미터

objective	최솟값을 가져야 할 손실 함수를 정의 binary:logistic : 이진 분류 / multi:softmax : 다중 분류 / multi:softprob : 개별 레이블 클래스에 해당되는 예측 확률 반환
eval_metric	검증에 사용되는 함수 rmse(회귀 디폴트) / mae / logloss / error(분류 디폴트) / merror / mlogloss / auc

- 과적합 제어

- eta↓, num\_round↑
- gamma↑
- max\_depth ↓
- subsample, colsample\_bytree 조절
- min\_child\_weight↑

## 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

- (1) 모듈 임포트, 데이터 로드 및 확인
- (2) 데이터 분리
- (3) XGBoost 모델 학습/예측/평가 (조기 중단 기능)
- (4) 피처 중요도 시각화

# 파이썬 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (1) 모듈 임포트, 데이터 로드 및 확인

```
# 데이터 로드 및 확인
import xgboost as xgb
from xgboost import plot_importance
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_breast_cancer
from sklearn.model_selection import train_test_split
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
```

```
# 데이터 로드
dataset = load_breast_cancer()
features = dataset.data
labels = dataset.target
```

```
# DF 만들고 살펴보기
cancer_df = pd.DataFrame(data=features, columns=dataset.feature_names)
cancer_df['target'] = labels
cancer_df.head(3)
```

```
# 레이블 값 분포 확인
print(dataset.target_names)
print(cancer_df['target'].value_counts())
```

```
['malignant' 'benign']
1      357
0      212
Name: target, dtype: int64
```

### 타깃 레이블

- 악성(malignant): 0
- 양성(benign): 1

	mean radius	mean texture	mean perimeter	mean area	mean smoothness	mean compactness	mean concavity	mean concave points	mean symmetry	mean fractal dimension	...	target
0	17.99	10.38	122.8	1001.0	0.11840	0.27760	0.3001	0.14710	0.2419	0.07871	...	0
1	20.57	17.77	132.9	1326.0	0.08474	0.07864	0.0869	0.07017	0.1812	0.05667	...	0
2	19.69	21.25	130.0	1203.0	0.10960	0.15990	0.1974	0.12790	0.2069	0.05999	...	0

3 rows × 31 columns

# 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (2) 데이터 분리

### - 피쳐 / 레이블 데이터 세트 분리, 학습 / 테스트 / 검증 데이터 세트 분리

```
# cancer_df에서 feature용 DataFrame과 Label용 Series 객체 추출
# 맨 마지막 칼럼이 Label. Feature용 DataFrame은 cancer_df의 첫번째 칼럼에서 맨 마지막 두번째 칼럼까지를 :-1 슬라이싱으로 추출
# 검증용 데이터 분할하여 XGBoost의 검증 성능 평가, 조기 중단 수행할 예정
```

```
X_features = cancer_df.iloc[:, :-1]
y_label = cancer_df.iloc[:, -1]
```

```
# 전체 데이터 중 80%는 학습용 데이터, 20%는 테스트용 데이터 추출
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_features, y_label, test_size=0.2, random_state=156)
```

```
# 위에서 만든 X_train, y_train을 다시 쪼개서 90%는 학습과 10%는 검증용 데이터로 분리
X_tr, X_val, y_tr, y_val = train_test_split(X_train, y_train, test_size=0.1, random_state=156)
```

```
# 나뉜 데이터 수 확인
print(X_train.shape, X_test.shape)
print(X_tr.shape, X_val.shape)
```

```
(455, 30) (114, 30)
(409, 30) (46, 30)
```

### - DataFrame을 XGBoost 전용 데이터 객체 Dmatrix로 변경

```
# XGBoost만의 전용 데이터 객체 DMatrix 사용 => Numpy, Pandas 데이터 세트를 Dmatrix로 생성해 모델에 입력해야함!!
# 학습, 검증, 테스트용 DMatrix를 생성
dtr = xgb.DMatrix(data=X_tr, label=y_tr)
dval = xgb.DMatrix(data=X_val, label=y_val)
dtest = xgb.DMatrix(data=X_test, label=y_test)
```

# 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (3) XGBoost 모델 학습/예측/평가 (조기 중단 기능)

### - 하이퍼 파라미터 설정

```
# XGBoost 하이퍼 파라미터 설정 (주로 딕셔너리 형태로 입력)
params = {'max_depth': 3,
          'eta': 0.05,
          'objective': 'binary:logistic',
          'eval_metric': 'logloss'
        }
num_rounds = 400
```

eval\_metric = logloss 지정

### - 평가용 데이터 세트 설정, 학습 수행 (조기 중단)

```
# 평가용 데이터 세트 설정
# 학습 데이터 셋은 'train' 또는 평가 데이터 셋은 'eval'로 명기
eval_list = [(dtr, 'train'), (dval, 'eval')] # 또는 eval_list = [(dval, 'eval')] 만 명기해도 무방

# 학습
# 하이퍼 파라미터와 early stopping 파라미터를 train() 함수의 파라미터로 전달
xgb_model = xgb.train(params = params, dtrain=dtr, num_boost_round=num_rounds,
                      early_stopping_rounds=50, evals=eval_list)
```

평가용 데이터 세트 지정:

학습용, 검증용 DMatrix

train() 으로 학습

```
[125] train-logloss:0.01998 eval-logloss:0.25714
[126] train-logloss:0.01973 eval-logloss:0.25587
[127] train-logloss:0.01946 eval-logloss:0.25640
[128] train-logloss:0.01927 eval-logloss:0.25685

[174] train-logloss:0.01278 eval-logloss:0.26229
[175] train-logloss:0.01267 eval-logloss:0.26086
[176] train-logloss:0.01258 eval-logloss:0.26103
```

조기 중단 기능: train() 함수에 `early_stopping_rounds` 입력하여 설정,  
더 이상 지표 개선 없을 경우 `num_boost_rounds` 횟수 채우지 않고 빠져나옴  
반드시 `평가용 데이터 세트 지정` 과 `eval_matrices` 함께 설정해야

⇒[126] 이후 early\_stopping\_rounds=50 동안 지표 개선x, 빠져나옴

# 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (3) XGBoost 모델 학습/예측/평가 (조기 중단 기능)

### - 예측

```
# 예측 수행 predict()
pred_probs = xgb_model.predict(dtest)
print('predict() 수행 결과값을 10개만 표시, 예측 확률 값으로 표시됨')
print(np.round(pred_probs[:10], 3))

# 예측 결과값이 아닌 예측 확률 값 반환, 예측값 결정 로직 추가
# 예측 확률이 0.5보다 크면 1, 그렇지 않으면 0으로 예측값 결정하여 List 객체인 preds에 저장
preds = [ 1 if x > 0.5 else 0 for x in pred_probs]
print('예측값 10개만 표시:', preds[:10])
```

```
predict() 수행 결과값을 10개만 표시, 예측 확률 값으로 표시됨
[0.845 0.008 0.68  0.081 0.975 0.999 0.998 0.998 0.996 0.001]
예측값 10개만 표시: [1, 0, 1, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 0]
```

predict() 로 예측,

예측 확률 값 반환

### - 평가

```
from sklearn.metrics import accuracy_score, precision_score, recall_score, roc_auc_score
from sklearn.metrics import f1_score, confusion_matrix, precision_recall_curve, roc_curve
def get_clf_eval(y_test, pred=None, pred_proba=None):
    confusion = confusion_matrix(y_test, pred)
    accuracy = accuracy_score(y_test, pred)
    precision = precision_score(y_test, pred)
    recall = recall_score(y_test, pred)
    f1 = f1_score(y_test, pred)
    roc_auc = roc_auc_score(y_test, pred_proba)
    print('오차 행렬')
    print(confusion)
    print('정확도: {0:.4f}, 정밀도: {1:.4f}, 재현율: {2:.4f}, #
F1: {3:.4f}, AUC: {4:.4f}'.format(accuracy, precision, recall, f1, roc_auc))

# 예측 성능 평가
get_clf_eval(y_test, preds, pred_probs)
```

오차 행렬

[[34 3]

[ 2 75]]

정확도: 0.9561, 정밀도: 0.9615, 재현율: 0.9740, F1: 0.9677, AUC: 0.9937

3장의 get\_clf\_eval() 함수 적용

# 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (4) 피쳐 중요도 시각화

- plot\_importance()

```
# plot_importance() 로 피쳐 중요도 시각화
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 12))
plot_importance(xgb_model, ax=ax)
```

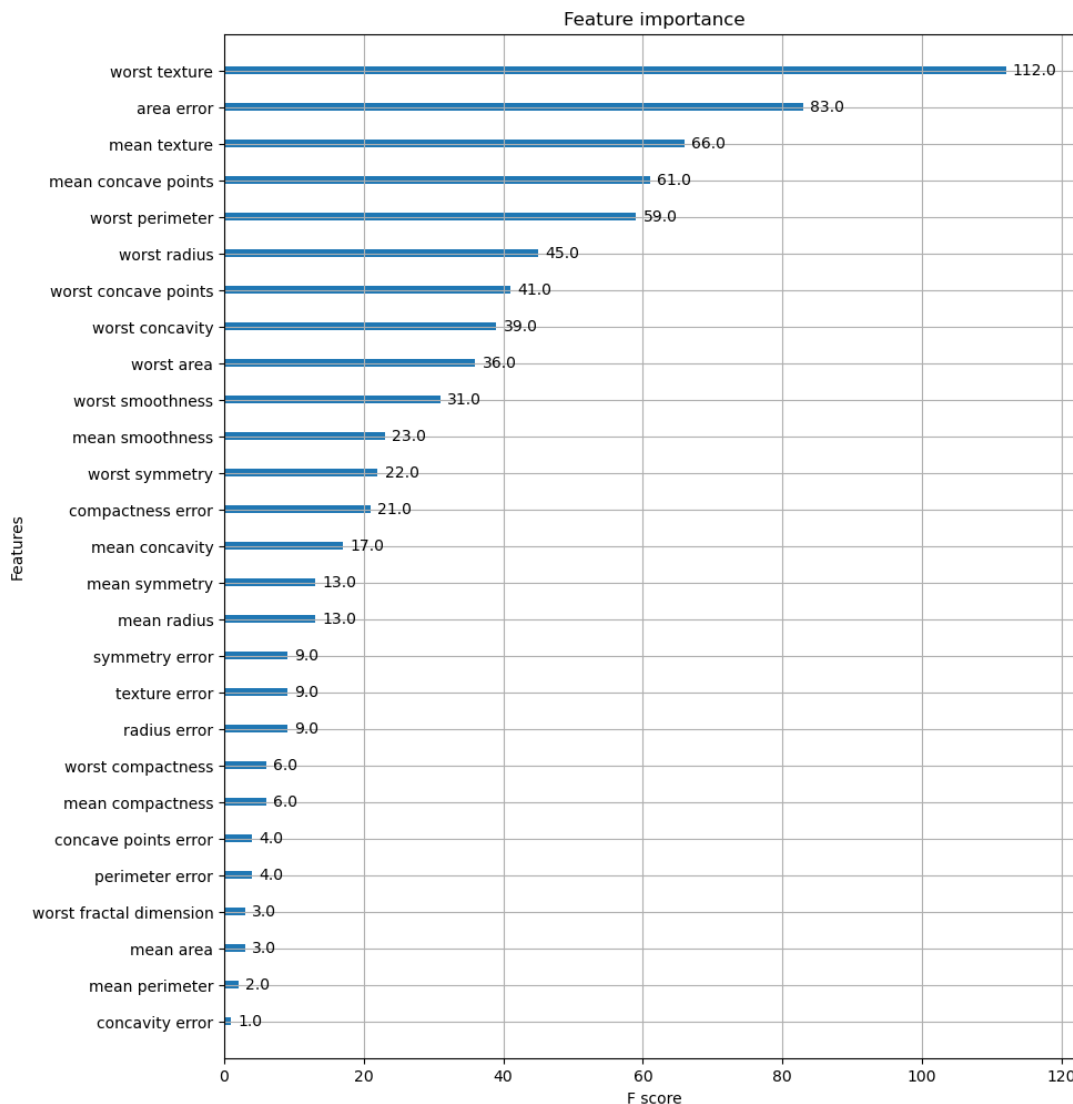
평가 지표: f 스코어

해당 피쳐가 트리 분할 시 얼마나 자주

사용되었는지 지표로 나타냄

to\_graphviz():

xgboost에서 트리 기반 규칙 구조 시각화 가능



## 파이썬 래퍼 XGBoost 교차 검증

xgboost.cv(params, dtrain, num\_boost\_round, nfold, stratified, folds, metrics, obj, feval, maximize, early\_stopping\_rounds, fpreproc, as\_pandas, verbose\_eval, show\_stdv, seed, call\_back, shuffle )

사이킷런 GridSearchCV와 유사

데이터 세트에 대한 교차 검증 수행 후 최적 파라미터 구할 수 있음

이름	설명
params (dict)	부스터 파라미터
dtrain (DMatrix)	학습 데이터
num_boost_round (int)	부스팅 반복 횟수
nfold (int)	CV 폴드 개수
stratified (bool)	CV 수행 시 층화 표본 추출(Stratified sampling) 수행 여부
metrics (string or list of string)	CV 수행 시 모니터링할 성능 평가 지표
early_stopping_rounds (int)	조기 종단을 활성화시킴, 반복 횟수 지정



## 사이킷런 래퍼 XGBoost 하이퍼 파라미터

- 파이썬 - 사이킷런 파라미터명 차이

파이썬 래퍼 XGBoost	사이킷런 래퍼 XGBoost
eta	learning_rate
sub_sample	subsample
lambda	reg_lambda
alpha	reg_alpha
num_boost_round	n_estimators

- 조기 중단 파라미터

early_stopping_rounds	평가 지표가 향상될 수 있는 반복 횟수 정의
eval_metric	조기 중단을 위한 평가 지표
eval_set	성능 평가를 수행할 데이터 세트 - 학습 데이터가 아닌 별도의 데이터 세트여야 한다

## 사이킷런 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

- (1) 기본 학습/예측/평가
- (2) 조기 중단 학습/예측/평가 (early\_stopping\_rounds=50)
- (3) 조기 중단 학습/예측/평가 (early\_stopping\_rounds=10)
- (4) 피처 중요도 시각화

# 파이썬 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (1) 기본 학습/예측/평가

```
# 파이썬 래퍼 XGBoost 실습 예제 노트북 이어서 사용
# 사이킷런 래퍼 XGBoost 클래스인 XGBClassifier 임포트
from xgboost import XGBClassifier

# Warning 메시지를 없애기 위해 eval_metric 값을 XGBClassifier 생성 인자로 입력.
# 모델 생성
xgb_wrapper = XGBClassifier(n_estimators=400, learning_rate=0.05, max_depth=3, eval_metric='logloss')
# 학습
xgb_wrapper.fit(X_train, y_train, verbose=True)
# 예측
w_preds = xgb_wrapper.predict(X_test)
w_pred_proba = xgb_wrapper.predict_proba(X_test)[:, 1]
# 평가
get_clf_eval(y_test, w_preds, w_pred_proba)
```

오차 행렬

[[34 3]

[ 1 76]]

정확도: 0.9649, 정밀도: 0.9620, 재현율: 0.9870, F1: 0.9744, AUC: 0.9954

데이터 세트가 작아서 검증 데이터 분리 또는 교차 검증 등을 적용할 때 성능 수치가 불안정함

# 파이썬 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (2) 조기 중단 학습/예측/평가 (early\_stopping\_rounds=50)

```
# 조기 중단 수행
from xgboost import XGBClassifier

xgb_wrapper = XGBClassifier(n_estimators=400, learning_rate=0.05, max_depth=3)
evals = [(X_tr, y_tr), (X_val, y_val)] # 파이썬 래퍼와 다르게 맨 앞이 학습용, 뒤 튜플이 검증용 데이터로 자동 인식
xgb_wrapper.fit(X_tr, y_tr, early_stopping_rounds=50, eval_metric="logloss", eval_set=evals, verbose=True)

ws50_preds = xgb_wrapper.predict(X_test)
ws50_pred_proba = xgb_wrapper.predict_proba(X_test)[:, 1]
```

```
[125] validation_0-logloss:0.01998 validation_1-logloss:0.25714
[126] validation_0-logloss:0.01973 validation_1-logloss:0.25587
[127] validation_0-logloss:0.01946 validation_1-logloss:0.25640

[174] validation_0-logloss:0.01278 validation_1-logloss:0.26229
[175] validation_0-logloss:0.01267 validation_1-logloss:0.26086
[176] validation_0-logloss:0.01258 validation_1-logloss:0.26103
```

파이썬 래퍼의 조기 중단과 동일하게 학습 마무리

```
# 평가
get_clf_eval(y_test, ws50_preds, ws50_pred_proba)
```

오차 행렬  
[[34 3]  
 [ 2 75]]  
정확도: 0.9561, 정밀도: 0.9615, 재현율: 0.9740, F1: 0.9677, AUC: 0.9933

파이썬 래퍼의 조기 중단과 성능 동일

# 파이썬 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (3) 조기 중단 학습/예측/평가 (early\_stopping\_rounds=10)

```
# early_stopping_rounds를 10으로 설정하고 재학습
xgb_wrapper.fit(X_tr, y_tr, early_stopping_rounds=10, eval_metric="logloss", eval_set=evals, verbose=True)

ws10_preds = xgb_wrapper.predict(X_test)
ws10_pred_proba = xgb_wrapper.predict_proba(X_test)[:, 1]

get_clf_eval(y_test, ws10_preds, ws10_pred_proba)
```

```
[92] validation_0-logloss:0.03152 validation_1-logloss:0.25918
[93] validation_0-logloss:0.03107 validation_1-logloss:0.25864
[94] validation_0-logloss:0.03049 validation_1-logloss:0.25951
```

```
[101] validation_0-logloss:0.02751 validation_1-logloss:0.25955
[102] validation_0-logloss:0.02714 validation_1-logloss:0.25901
[103] validation_0-logloss:0.02668 validation_1-logloss:0.25991
```

오차 행렬

```
[[34  3]
```

```
 [ 3 74]]
```

정확도: 0.9474, 정밀도: 0.9610, 재현율: 0.9610, F1: 0.9610, AUC: 0.9933

조기 중단값이 너무 작아서 아직 성능이 향상될 여지가 있음에도 학습이 멈춰 예측 성능 저하

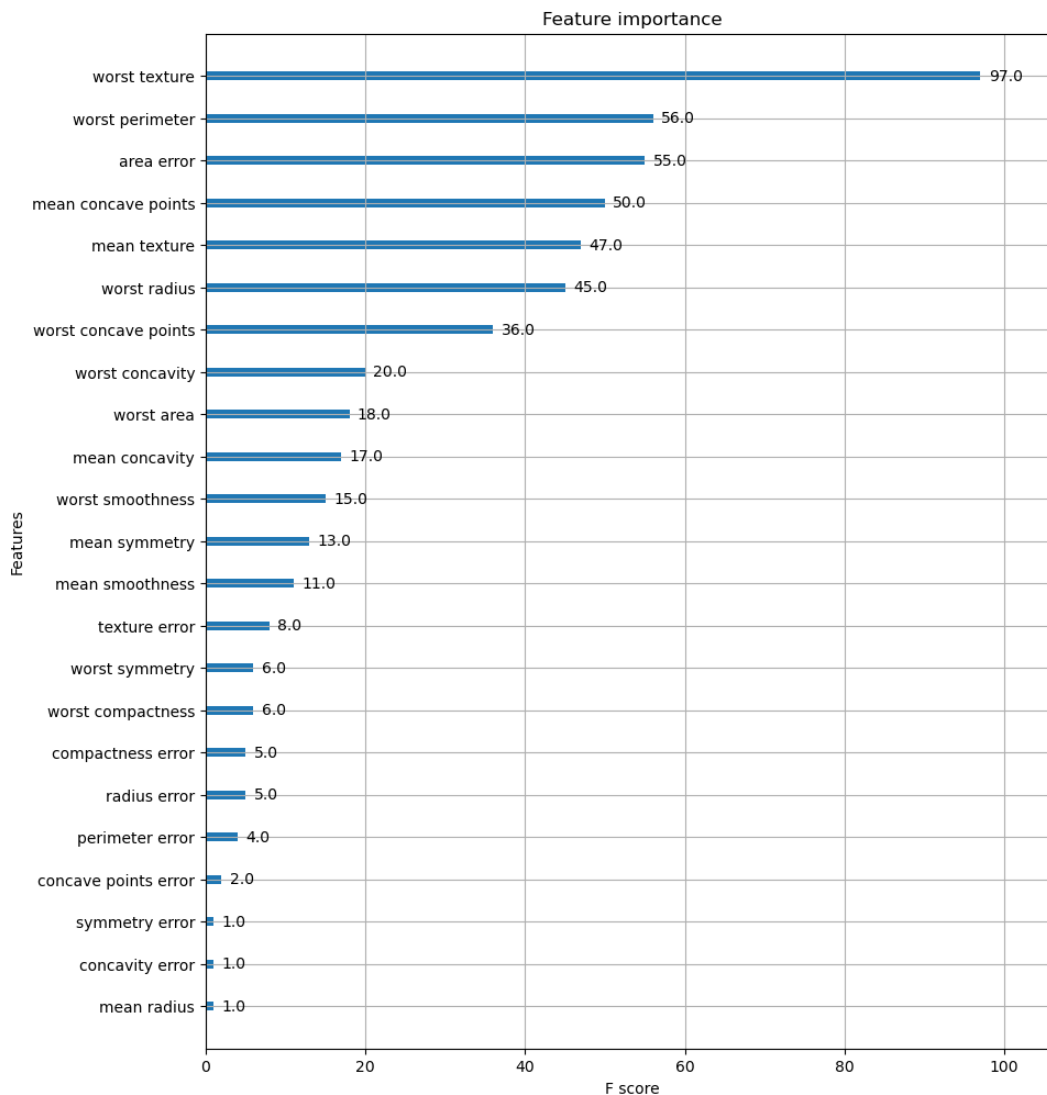
# 파이썬 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (4) 피쳐 중요도 시각화

```
# 피쳐 중요도 시각화
from xgboost import plot_importance
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 12))
# 사이킷런 래퍼 클래스를 입력해도 무방
plot_importance(xgb_wrapper, ax=ax)
```

파이썬 래퍼 클래스와 결과 동일





06.

LightGBM

# LightGBM

: GBM 기반, XGBoost 장점 계승, 단점 보완한 알고리즘

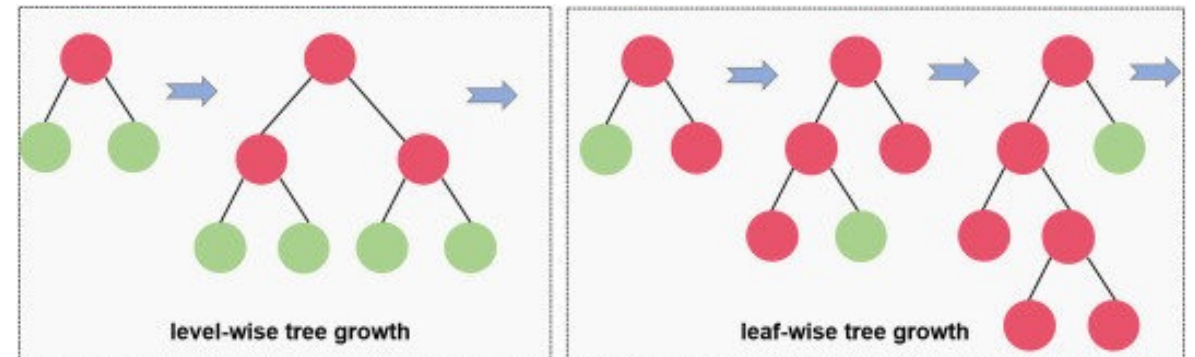
- XGBoost 대비 장점

- 빠른 학습과 예측 수행 시간, 더 작은 메모리 사용량
- XGBoost와 예측 성능은 비슷하지만 기능상 더 다양
- 카테고리형 피처의 자동 변환과 최적 분할

- **리프 중심** 트리 분할(Leaf Wise) : 일반적인 트리 분할 방식처럼 **균형 잡힌 트리**를 맞추는 대신

**최대 손실 값을 가진 노드**를 지속적으로 분할하면서 트리의 깊이가 깊어지고 비대칭적인 규칙 트리가 생성  
*가치는 리프 노드*

➡ 단점 : **과적합** 가능성 증가





# LightGBM 하이퍼 파라미터

- 주요 파라미터

<code>num_iterations</code>	반복 수행하려는 트리의 개수 일정 수준까지 증가 시 예측 성능 향상 (디폴트: 100, 사이킷런 클래스: <code>n_estimators</code> )
<code>learning_rate</code>	부스팅 스텝을 반복적으로 수행할 때 업데이트되는 학습률 0~1(디폴트: 0.1)
<code>max_depth</code>	트리 기반 알고리즘의 <code>max_depth</code> < 0 이면 깊이 제한X (디폴트: -1)
<code>min_data_in_leaf</code>	결정 트리의 <code>min_samples_leaf</code> 와 같은 역할 (디폴트: 20, 사이킷런 클래스: <code>min_child_samples</code> )
<code>num_leaves</code>	하나의 트리가 가질 수 있는 최대 리프 개수 (디폴트: 31)
<code>boosting</code>	부스팅의 트리를 생성하는 알고리즘 <code>gbdt</code> (디폴트) : GBM / <code>rf</code> : 랜덤 포레스트

## LightGBM 하이퍼 파라미터

bagging_fraction	데이터 샘플링 비율 지정, 과적합 제어 (디폴트: 1, 사이킷런 클래스: 동일)
feature_fraction	개별 트리를 학습할 때마다 무작위로 선택하는 feature의 비율 (디폴트: 1, 사이킷런 클래스: 동일)
lambda_l2	L2 regulation 제어, 과적합 제어(피쳐 많을 때 적용) (디폴트: 0, 사이킷런 클래스: reg_lambda)
lambda_l1	L1 regulation 제어, 과적합 제어(피쳐 많을 때 적용) (디폴트: 0, 사이킷런 클래스: reg_alpha)

- 학습 태스크 파라미터

objective	최솟값 가져야 할 손실 함수 정의 binary:logistic : 이진 분류 / multi:softmax : 다중 분류 / multi:softprob : 개별 레이블 클래스에 해당되는 예측 확률 반환
-----------	---

## 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

- (1) LGBMClassifier 학습/예측/평가
- (2) 피쳐 중요도 시각화

# 파이썬 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (1) LGBMClassifier 학습/예측/평가

```
# LightGBM의 파이썬 패키지인 lightgbm에서 LGBMClassifier 임포트
from lightgbm import LGBMClassifier

# 모듈 임포트
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_breast_cancer
from sklearn.model_selection import train_test_split

# 데이터 로드 및 피쳐/레이블 분리
dataset = load_breast_cancer()

cancer_df = pd.DataFrame(data=dataset.data, columns=dataset.feature_names)
cancer_df['target']=dataset.target
X_features = cancer_df.iloc[:, :-1]
y_label = cancer_df.iloc[:, -1]

# 학습/테스트/검증용 데이터 분리
# 전체 데이터 중 80%는 학습용 데이터, 20%는 테스트용 데이터 추출
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_features, y_label, test_size=0.2, random_state=156)

# 위에서 만든 X_train, y_train을 다시 쪼개서 90%는 학습, 10%는 검증용 데이터로 분리
X_tr, X_val, y_tr, y_val = train_test_split(X_train, y_train, test_size=0.1, random_state=156)

# 모델 생성
# 앞서 XGBoost와 동일하게 n_estimators는 400
lgbm_wrapper = LGBMClassifier(n_estimators=400, learning_rate=0.05)

# LightGBM도 XGBoost와 동일하게 조기 중단 수행 가능
evals = [(X_tr, y_tr), (X_val, y_val)]
# 학습
lgbm_wrapper.fit(X_tr, y_tr, early_stopping_rounds=50, eval_metric="logloss", eval_set=evals, verbose=True)
# 예측
preds = lgbm_wrapper.predict(X_test)
pred_proba = lgbm_wrapper.predict_proba(X_test)[:, 1]

[61] training's binary_logloss: 0.0532381 valid_1's binary_logloss: 0.260236
[62] training's binary_logloss: 0.0514074 valid_1's binary_logloss: 0.261586

[111] training's binary_logloss: 0.00850714 valid_1's binary_logloss: 0.280894
```

## XGBoost와 동일하게 진행

- 모듈 임포트
- 데이터 로드
- 피쳐/레이블 데이터 분리
- 학습/테스트/검증용 데이터 분리
- 모델 생성
- 평가용 데이터 지정
- 학습
- 예측
- 평가

```
# 예측 성능 평가
get_clf_eval(y_test, preds, pred_proba)
```

오차 행렬

```
[[34  3]
 [ 2 75]]
```

정확도: 0.9561, 정밀도: 0.9615, 재현율: 0.9740, F1: 0.9677, AUC: 0.9877

## 3장 평가 함수 사용

# 파이썬 래퍼 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

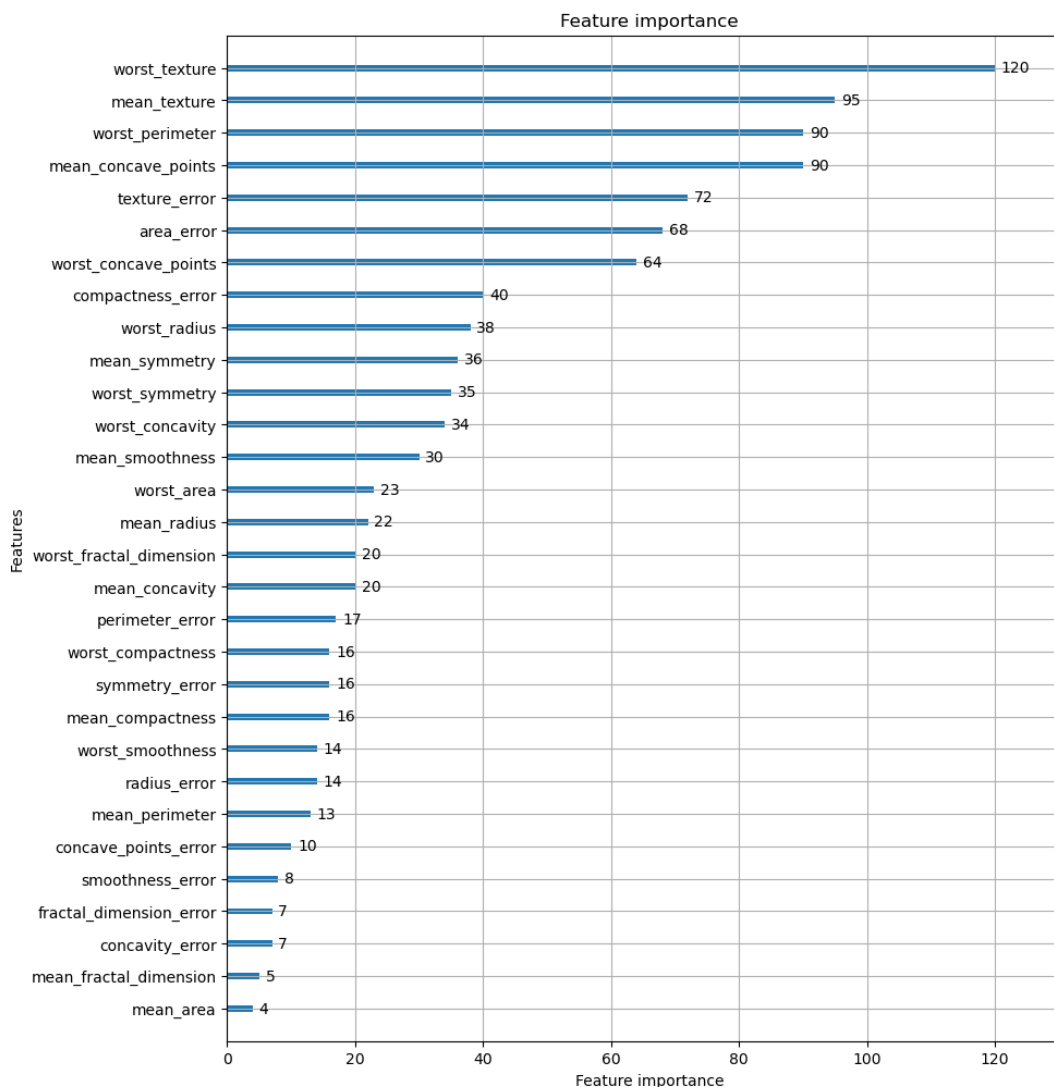
## (2) 피쳐 중요도 시각화

```
# plot_importance()를 이용해 feature 중요도 시각화
from lightgbm import plot_importance
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline

fig, ax = plt.subplots(figsize=(10,12))
plot_importance(lgbm_wrapper, ax=ax)
```

xgboost와 동일하게

피쳐 중요도 시각화 내장 API 제공



---

# 07.

베이지안 최적화 기반의 HyperOpt를 이용한  
하이퍼 파라미터 튜닝

# 베이지안 최적화 기반의 HyperOpt를 이용한 하이퍼 파라미터 튜닝

부스팅 알고리즘 모델은 하이퍼 파라미터가 많아 Grid Search로 튜닝 시,  
대용량 데이터의 경우 기하급수적으로 최적화 시간이 증가

다른 방식 적용 ⇒ 베이지안 최적화 기법

- 하이퍼 파라미터 최적화 방식

Manual Search : 직관, 노하우 등에 의존하여 최적 하이퍼 파라미터를 직접 탐색하는 방법

Grid Search : 특정 탐색 구간의 하이퍼 파라미터 값들을 일정 간격으로 선정하여 탐색하는 방법

Random Search : 특정 탐색 구간의 하이퍼 파라미터 값들을 랜덤 샘플링으로 선정하여 탐색하는 방법

Bayesian optimization

...

# 베이지안 최적화

: 목적 함수 식을 제대로 알 수 없는 블랙 박스 형태의 함수에서

최대 또는 최소 함수 반환 값을 만드는 최적 입력값 **최적함수** *목적* 을 효과적으로 찾아주는 방식

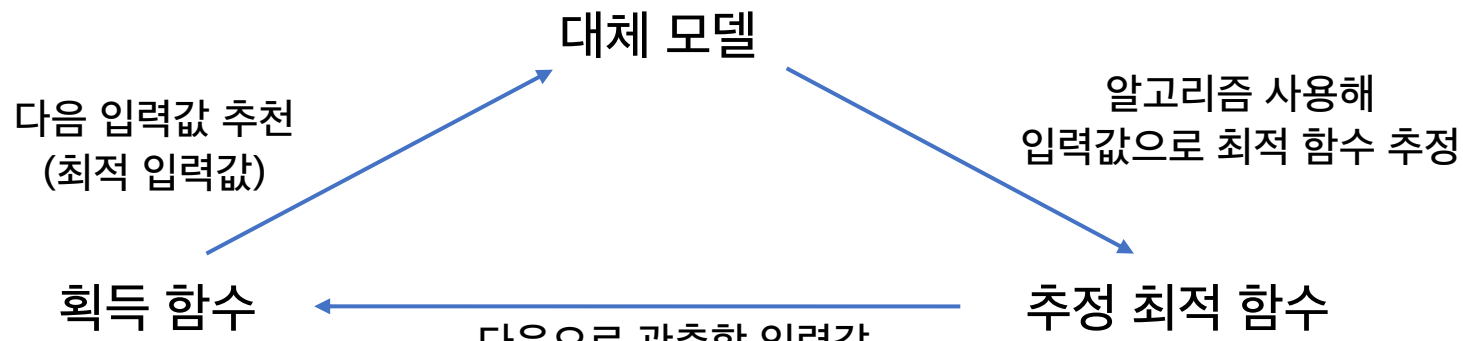
- 베이지안 확률 기반 최적화 기법

- 필수 구성 요소:

① 대체 모델: 획득 함수의 **입력값** 바탕으로, 미지의 목적 함수의 형태에 대해 확률적인 추정을 하는 모델

② 획득 함수: **대체모델** 이 목적 함수에 대해 확률적으로 추정한 결과를 바탕으로,

최적 입력값을 찾는 데 있어 가장 유용할 만한 다음 입력값 추천하는 함수

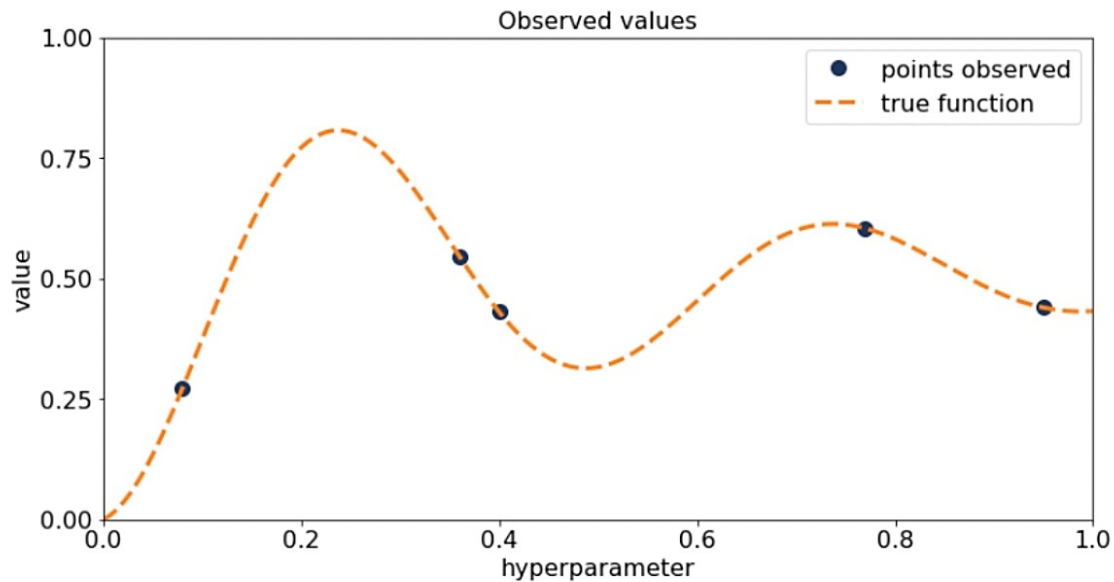


하이퍼 파라미터 튜닝 시,  
입력값 = 하이퍼 파라미터

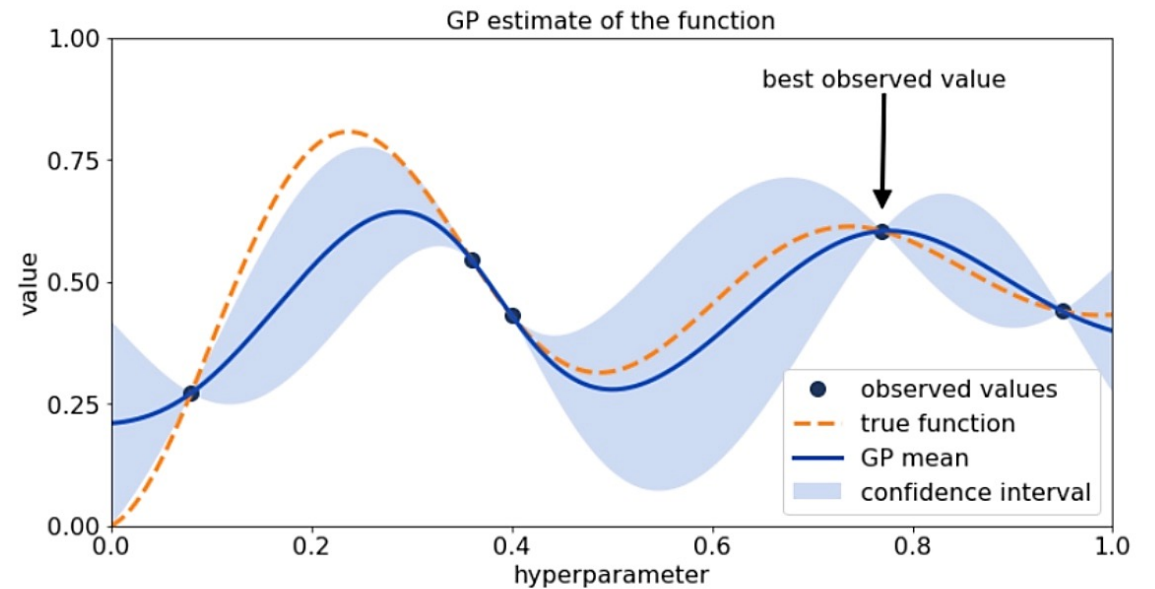


# 베이지안 최적화

Step 1



Step 2



- 최초에는 랜덤하게 하이퍼 파라미터들을 샘플링하고 성능 관찰

- 주황색 실선 : 목표 최적함수

- 검은색 점 : 특정 하이퍼 파라미터 값에 대한 성능 지표 결과값

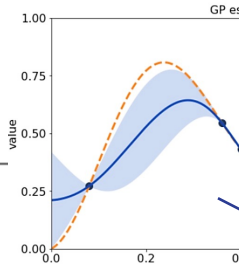
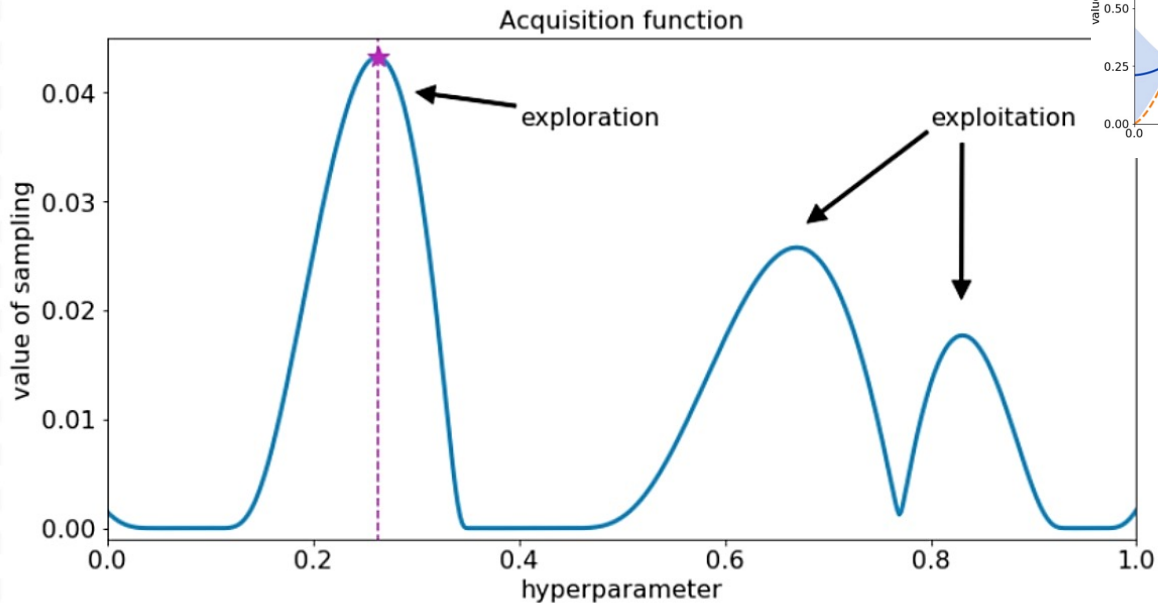
- 관측된 값을 기반으로 대체 모델은 **최적함수**를 추정

- 파란색 영역 : 예측된 함수의 신뢰구간 분산

- 최적 관측값은 **y축 value에서**의 하이퍼 파라미터  
가장 높은 값

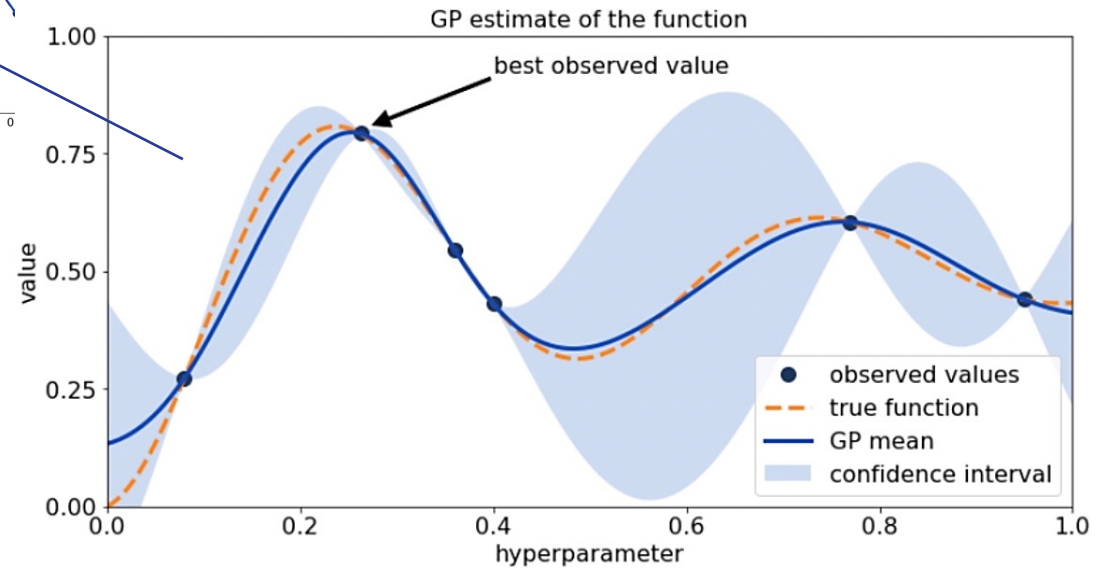
# 베이지안 최적화

## Step 3



신뢰구간 줄어들음 → 불확실성 개선  
→ 최적 함수 추정 개선

## Step 4



- 획득 함수는 다음으로 관측할 **하이퍼 파라미터** 값 계산
- 획득 함수는 이전의 최적 관측값보다 더 **큰** 최댓값을 가질 가능성이 높은 지점을 찾아서 대체 모델에 전달

- 획득 함수로부터 전달된 하이퍼 파라미터를 수행하여 관측된 값을 기반으로 대체 모델은 갱신되어 다시 **최적함수** 예측

# HyperOPT

: 베이지안 최적화를 하이퍼 파라미터 튜닝에 적용할 수 있도록 제공되는 파이썬 패키지 중 하나

대체 모델이 최적 함수를 추정할 때 트리 파르젠 사용

목적 함수 반환값의 **최솟값** 을 가지는 최적 입력값 유추

- 활용 로직

① 입력 변수명, 입력값의 검색 공간 설정

② 목적 함수 설정

③ 목적 함수의 반환값이 **최솟값** 을 가지게 하는 최적 입력값 유추

# HyperOPT

- 입력값의 검색 공간 제공 함수

hyperopt의 hp 모듈: from hyperopt import hp

함수명	설명
<code>hp.uniform()</code>	검색 공간을 범위를 이용해서 설정 매개 변수 : label(파라미터명), low(최솟값), high(최댓값), q(간격)
<code>hp.loguniform()</code>	검색 공간을 정규 분포 형태로 설정 매개 변수 : label(파라미터명), low(최솟값), high(최댓값)
<code>hp.randint()</code>	검색 공간을 일정 범위 내에서 랜덤한 정숫값으로 설정 매개 변수 : label(파라미터명), upper(최댓값)
<code>hp.loguniform()</code>	반환값 : $\exp(\text{uniform}(\text{low}, \text{high}))$ 반환값의 log 변환된 값이 정규 분포를 띄도록 검색 공간 설정
<code>hp.choice()</code>	검색값에 문자열이 포함되어 있을 경우 설정

# HyperOPT

- 목적 함수의 최적 입력값 유추 함수   ?

hyperopt의 fmin 모듈: `from hyperopt import fmin`

`fmin(fn, space, algo, max_evals, trials)`

파라미터명	설명
<span style="background-color: #00AEEF; color: white; padding: 2px 5px;">fn</span>	목적 함수
<span style="background-color: #00AEEF; color: white; padding: 2px 5px;">space</span>	search_space와 같은 검색 공간 딕셔너리
<span style="background-color: #00AEEF; color: white; padding: 2px 5px;">algo</span>	베이지안 최적화 적용 알고리즘 - tpe.suggest (TPE)
<span style="background-color: #00AEEF; color: white; padding: 2px 5px;">max_evals</span>	최적 입력값을 찾기 위한 입력값 시도 횟수
<span style="background-color: #00AEEF; color: white; padding: 2px 5px;">trials</span>	최적 입력값을 찾기 위해 시도한 입력값 및 해당 입력값의 목적 함수 반환값 저장에 사용
rstate	fmin()을 수행할 때마다 동일한 결괏값을 가질 수 있도록 설정하는 랜덤 시드

## 실습1 - 기본 로직

- (1) 입력 변수명, 입력값의 검색 공간 설정
- (2) 목적 함수 생성
- (3) 목적 함수의 반환값이 최솟값을 가지도록 하는 최적 입력값 유추
- (4) Trials 객체 results, vals 속성

# 실습1 - 기본 로직

## (1) 입력 변수명, 입력값의 검색 공간 설정

```
# 입력 변수명과 입력값의 검색 공간 설정
from hyperopt import hp

# -10 ~ 10까지 1 간격을 가지는 입력 변수 x와 -15 ~ 15까지 1 간격으로 입력 변수 y 설정
search_space = {'x': hp.quniform('x', -10, 10, 1), 'y': hp.quniform('y', -15, 15, 1)} # 값이 순차적으로 입력되지는 않음
```

## (2) 목적 함수 생성

```
from hyperopt import STATUS_OK

# 목적 함수 생성 변수값과 변수 검색 공간을 가지는 딕셔너리를 인자로 받고, 특정 값을 반환
def objective_func(search_space):
    x = search_space['x']
    y = search_space['y']
    retval = x**2 - 20*y # 목적 함수식

    return retval
```

목적 함수 =  $x^2 - 20y$

현 입력값 검색 공간에서  $x=0, y=15$ 에 가까울수록 최소 반환값 근사

# 실습1 - 기본 로직

(3) 목적 함수의 반환값이 최솟값을 가지도록 하는 최적 입력값 유추

- fmin(), max\_evals=5

```
from hyperopt import fmin, tpe, Trials
import numpy as np
# 입력 결괏값을 저장한 Trials 객체값 생성
trial_val = Trials()

# 목적 함수의 최솟값을 반환하는 최적 입력 변수값을 5번의 입력값 시도(max_evals=5)로 찾아냄
best_01 = fmin(fn=objective_func, space=search_space, algo=tpe.suggest, max_evals=5, trials=trial_val,
               rstate = np.random.default_rng(seed=0))
print('best:', best_01)
```

```
100%|██████████████████████████████████████████████████████████| 5/5 [00:00<00:00, 238.16trial/s, best loss: -224.0]
best: {'x': -4.0, 'y': 12.0}
```

- fmin(), max\_evals=20

```
trial_val = Trials()

# max_evals=20 로 늘려서 재테스트
best_02 = fmin(fn=objective_func, space=search_space, algo=tpe.suggest, max_evals=20, trials=trial_val,
               rstate = np.random.default_rng(seed=0))
print('best:', best_02)
```

```
100%|██████████████████████████████████████████████████████████| 20/20 [00:00<00:00, 499.78trial/s, best loss: -296.0]
best: {'x': 2.0, 'y': 15.0}
```

x=2, y=15로 최소 반환값 가지도록 하는 최적 입력값에 근사함



# 실습1 - 기본 로직

## (4) Trials 객체 results, vals 속성

### - results 확인

```
# Trials 객체의 result 속성에 파이썬 리스트로 목적 함수 반환값들이 저장됨  
# 리스트 내부의 개별 원소는 {'loss': 함수 반환값, 'status': 반환 상태값}와 같은 딕셔너리  
print(trial_val.results)
```

```
[{'loss': -64.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -184.0, 'status': 'ok'}, {'loss': 56.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -224.0, 'status': 'ok'},  
{ 'loss': 61.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -296.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -40.0, 'status': 'ok'}, {'loss': 281.0, 'status': 'ok'},  
{ 'loss': 64.0, 'status': 'ok'}, {'loss': 100.0, 'status': 'ok'}, {'loss': 60.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -39.0, 'status': 'ok'}, {'l  
oss': 1.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -164.0, 'status': 'ok'}, {'loss': 21.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -56.0, 'status': 'ok'}, {'los  
s': 284.0, 'status': 'ok'}, {'loss': 176.0, 'status': 'ok'}, {'loss': -171.0, 'status': 'ok'}, {'loss': 0.0, 'status': 'ok'}]
```

fmin()이 max\_evals=20으로 20회 반복 수행 → 20개 딕셔너리를 개별 원소로 가지는 리스트

loss: 함수반환값, status: 반환상태값 (ok-평가 성공적으로 완료, fail-평가 중 오류 발생)

results: [{'loss': 함수 반환값, 'status': 반환 상태값}, ... 반복 수행 시마다 반환]

### - vals 확인

```
# Trials 객체의 vals 속성에 {'입력변수명': 개별 수행 시마다 입력된 값의 리스트} 형태로 저장됨  
print(trial_val.vals)
```

```
{ 'x': [-6.0, -4.0, 4.0, -4.0, 9.0, 2.0, 10.0, -9.0, -8.0, -0.0, -0.0, 1.0, 9.0, 6.0, 9.0, 2.0, -2.0, -4.0, 7.0, -0.0], 'y': [5.0, 10.  
0, -2.0, 12.0, 1.0, 15.0, 7.0, -10.0, 0.0, -5.0, -3.0, 2.0, 4.0, 10.0, 3.0, 3.0, -14.0, -8.0, 11.0, -0.0]}
```

20회 반복 수행 → x, y 각 수행 시마다 사용된 입력값들 리스트

vals: {'입력변수명1': 개별 수행시마다 입력된 값 리스트, ...입력 변수마다}

# 실습1 - 기본 로직

## (4) Trials 객체 results, vals 속성

### - results, vals 이용한 최적화 경과 보기

```
# Trials 객체의 results, vals 속성 이용해 최적화 경과 보기
# 각 회마다 x, y, loss 값 보여줌
import pandas as pd

# results에서 loss 값들을 추출하여 list로 생성
losses = [loss_dict['loss'] for loss_dict in trial_val.results]

# DF으로 생성
result_df = pd.DataFrame({'x': trial_val.vals['x'], 'y': trial_val.vals['y'], 'losses': losses})
result_df
```

	x	y	losses
0	-6.0	5.0	-64.0
1	-4.0	10.0	-184.0
2	4.0	-2.0	56.0
3	-4.0	12.0	-224.0
4	9.0	1.0	61.0
16	-2.0	-14.0	284.0
17	-4.0	-8.0	176.0
18	7.0	11.0	-171.0
19	-0.0	-0.0	0.0

Trials 객체의 속성을 이용해  
최적화 경과를 직관적으로 볼 수 있음

## 실습2 - XGBoost 하이퍼 파라미터 최적화 (위스콘신 데이터)

- (1) 데이터 로드 및 분리
- (2) 입력 변수명, 입력값의 검색 공간 설정
- (3) 목적 함수 생성
- (4) 목적 함수의 반환값이 최솟값을 가지도록 하는 최적 입력값 유추
- (5) 최적 하이퍼 파라미터로 XGBClassifier 재학습/예측/평가

실습1과 같은 흐름,

주의점

- ① 정수형 하이퍼 파라미터 입력시, HyperOPT 반환값이 실수형이면 **정수형**하여 입력
- ② HyperOPT의 목적함수는 **최솟값** 반환하도록 최적화하므로 정확도처럼 클수록 좋은 지표는  **$-f$** 을 곱해야

# 실습2 - XGBoost 하이퍼 파라미터 최적화 (위스콘신 데이터)

## (1) 데이터 로드 및 분리

```
# 데이터 로드 및 분리
import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.datasets import load_breast_cancer
from sklearn.model_selection import train_test_split
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')

dataset = load_breast_cancer()

cancer_df = pd.DataFrame(data=dataset.data, columns=dataset.feature_names)
cancer_df['target'] = dataset.target
# 피쳐, 레이블 분리
X_features = cancer_df.iloc[:, :-1]
y_label = cancer_df.iloc[:, -1]

# 전체 데이터 중 80%는 학습용 데이터, 20%는 테스트용 데이터 추출
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X_features, y_label, test_size=0.2, random_state=156)

# 앞에서 추출한 학습 데이터를 다시 학습과 검증 데이터로 분리
X_tr, X_val, y_tr, y_val = train_test_split(X_train, y_train, test_size=0.1, random_state=156)
```

XGBoost, LightGBM 예제에서 사용한 코드

## 실습2 - XGBoost 하이퍼 파라미터 최적화 (위스콘신 데이터)

### (2) 입력 변수명, 입력값의 검색 공간 설정

```
# 입력 변수명, 입력값의 검색 공간 설정
from hyperopt import hp

# max_depth는 5에서 20까지 1칸격으로, min_child_weight는 1에서 2까지 1칸격으로 (정수)
# colsample_bytree는 0.5에서 1사이, learning_rate는 0.01에서 0.2 사이 정규 분포된 값으로 검색 (실수)
xgb_search_space = {'max_depth': hp.quniform('max_depth', 5, 20, 1),
                    'min_child_weight': hp.quniform('min_child_weight', 1, 2, 1),
                    'learning_rate': hp.uniform('learning_rate', 0.01, 0.2),
                    'colsample_bytree': hp.uniform('colsample_bytree', 0.5, 1),
                    }
```

정수형: XGBoost,

실수형: int 사용

## 실습2 - XGBoost 하이퍼 파라미터 최적화 (위스콘신 데이터)

### (3) 목적 함수 생성

```
# 목적 함수 생성
from sklearn.model_selection import cross_val_score
from xgboost import XGBClassifier
from hyperopt import STATUS_OK

# !주의1! fmin()에서 입력된 search_space 값으로 입력된 모든 값은 실수형
# XGBClassifier의 정수형 하이퍼 파라미터는 정수형 변환 필요

# !주의2! 정확도는 높을수록 더 좋은 수치. -1 * 정확도를 곱해서 큰 정확도 값일수록 최소가 되도록 변환
def objective_func(search_space):
    # 수행 시간 절약을 위해 n_estimators는 100으로 축소
    xgb_clf = XGBClassifier(n_estimators=100, max_depth=int(search_space['max_depth']),
                           min_child_weight=int(search_space['min_child_weight']),
                           learning_rate=search_space['learning_rate'],
                           colsample_bytree=search_space['colsample_bytree'],
                           eval_metric='logloss')
    accuracy = cross_val_score(xgb_clf, X_train, y_train, scoring='accuracy', cv=3)

    # accuracy는 cv=3 개수만큼 roc-auc 결과를 리스트로 가짐. 이를 평균해서 반환하되 -1을 곱함.
    return {'loss': -1 * np.mean(accuracy), 'status': STATUS_OK}
```

XGBClassifier 생성, 교차검증

목적 함수 반환값:

교차 검증 기반의 평균 **정확도**

정수형 파라미터 명시적 **정수변환**

최종 반환값은 평균 정확도\* **-1**

## 실습2 - XGBoost 하이퍼 파라미터 최적화 (위스콘신 데이터)

(4) 목적 함수의 반환값이 최솟값을 가지도록 하는 최적 입력값 유추

# 최적 입력값 유추

```
from hyperopt import fmin, tpe, Trials
```

```
trial_val = Trials()
```

```
best = fmin(fn=directfunc,
```

space = rgb-search-space

```
algo=tpe.suggest,
```

```
max_evals=50, # 최대 반복 횟수 50 지정
```

```
trials=trial_val, rstate=np.random.default_rng(seed=9))
```

```
print('best:', best)
```

```
100% ██████████ | 50/50 [00:29<00:00, 1.70trial/s, best loss: -0.9670616939700244]
```

```
best: {'colsample_bytree': 0.5424149213362504, 'learning_rate': 0.12601372924444681, 'max_depth': 17.0, 'min_child_weight': 2.0}
```

## 정수형 하이퍼 파라미터가 실수형 값으로 도출됨 주의

# 실수형 소수점 5자리까지, 정수형 변환하여 확인

```
print('colsample_bytree:{0}, learning_rate:{1}, max_depth:{2}, min_child_weight:{3}'.format(
```

```
round(best['colsample_bytree'], 5), round(best['learning_rate'], 5),
```

```
int(best['max_depth'], int(best['min_child_weight']))
```

```
colsample_bytree:0.54241, learning_rate:0.12601, max_depth:17, min_child_weight:2
```

## 실습2 - XGBoost 하이퍼 파라미터 최적화 (위스콘신 데이터)

### (5) 최적 하이퍼 파라미터로 XGBClassifier 재학습/예측/평가

```
# 최적 하이퍼 파라미터로 XGBClassifier 재학습/예측/평가
xgb_wrapper = XGBClassifier(n_estimators=400,
                             learning_rate=round(best['learning_rate'], 5),
                             max_depth=int(best['max_depth']),
                             min_child_weight=int(best['min_child_weight']),
                             colsample_bytree=round(best['colsample_bytree'], 5)
                             )

evals = [(X_tr, y_tr), (X_val, y_val)]
xgb_wrapper.fit(X_tr, y_tr, early_stopping_rounds=50, eval_metric='logloss',
                eval_set=evals, verbose=True)

preds = xgb_wrapper.predict(X_test)
pred_proba = xgb_wrapper.predict_proba(X_test)[:, 1]

get_clf_eval(y_test, preds, pred_proba)
```

```
[0]    validation_0-logloss:0.58942    validation_1-logloss:0.62048
[1]    validation_0-logloss:0.50801    validation_1-logloss:0.55913
[2]    validation_0-logloss:0.44160    validation_1-logloss:0.50928

[234]  validation_0-logloss:0.01324    validation_1-logloss:0.22773
[235]  validation_0-logloss:0.01322    validation_1-logloss:0.22743
[236]  validation_0-logloss:0.01320    validation_1-logloss:0.22713
```

오차 행렬

```
[[35  2]
```

```
 [ 2 75]]
```

정확도: 0.9649, 정밀도: 0.9740, 재현율: 0.9740, F1: 0.9740, AUC:0.9944

get\_clf\_eval() 3장 평가 함수 사용

앞에서 튜닝하지 않은 결과보다는 약간 좋지만,  
데이터 세트가 작기 때문에 불안정한 성능 결과



---

---

---

08.

스태킹 앙상블

# 스태킹 앙상블

: 개별 알고리즘으로 예측한 데이터 기반으로 다시 예측 수행하는 방식

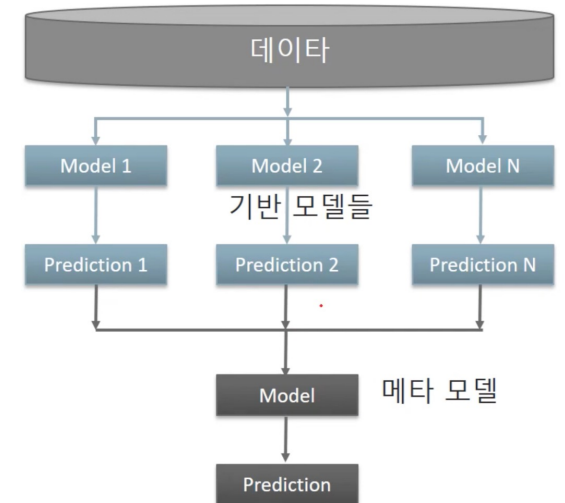
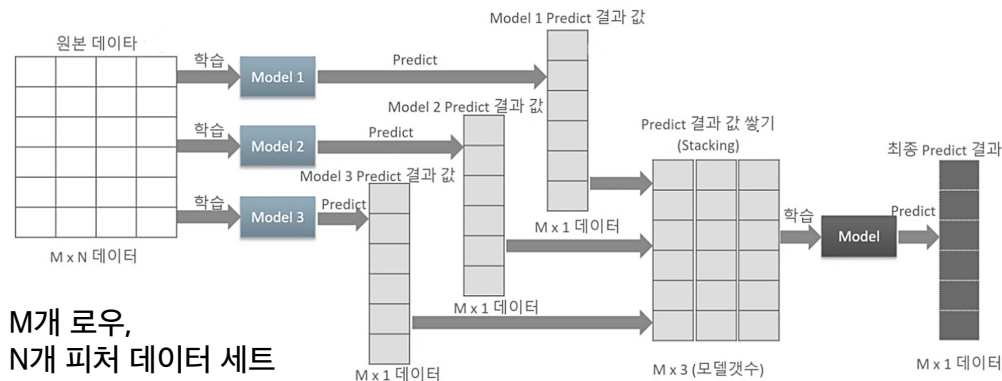
- 스택킹 앙상블 모델

- 구성모델

① **개별기반** 모델: 많은 개별 모델 필요

② **최종예측** 모델: 개별 기반 모델의 예측 데이터를 **스태킹** 형태로 결합해 학습 데이터로 만들어 학습

**스태킹**: 개별 모델의 예측된 데이터 세트를 기반으로 학습하고 예측하는 방식



## 기본 스타킹 모델 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

- (1) 모듈 임포트, 데이터 준비
- (2) 개별, 최종 모델 Classifier 생성
- (3) 개별 모델 학습/예측/평가
- (4) 최종 메타 모델 학습 데이터 생성
- (5) 최종 메타 모델 학습/예측/평가

# 기본 스타킹 모델 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (1) 모듈 임포트, 데이터 준비

```
# 모듈 임포트
import numpy as np

from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
from sklearn.linear_model import LogisticRegression

from sklearn.datasets import load_breast_cancer
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import accuracy_score

# 데이터 로드
cancer_data = load_breast_cancer()

X_data = cancer_data.data
y_label = cancer_data.target

# 학습/테스트용 데이터 셋 분리
X_train , X_test , y_train , y_test = train_test_split(X_data , y_label , test_size=0.2 , random_state=0)
```

# 기본 스택킹 모델 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (2) 개별, 최종 모델 Classifier 생성

```
# 개별 ML 모델 생성
knn_clf = KNeighborsClassifier(n_neighbors=4)
rf_clf = RandomForestClassifier(n_estimators=100, random_state=0)
dt_clf = DecisionTreeClassifier()
ada_clf = AdaBoostClassifier(n_estimators=100)

# 최종 Stacking 모델 생성
lr_final = LogisticRegression(C=10)
```

개별 모델: KNN, 랜덤 포레스트, 결정 트리, 에이다부스트

최종 모델: 로지스틱 회귀

## (3) 개별 모델 학습/예측/평가

```
# 개별 모델들 학습
knn_clf.fit(X_train, y_train)
rf_clf.fit(X_train, y_train)
dt_clf.fit(X_train, y_train)
ada_clf.fit(X_train, y_train)

# 학습된 개별 모델들 각자 예측 데이터 셋을 생성, 정확도 측정
knn_pred = knn_clf.predict(X_test)
rf_pred = rf_clf.predict(X_test)
dt_pred = dt_clf.predict(X_test)
ada_pred = ada_clf.predict(X_test)

print('KNN 정확도: {0:.4f}'.format(accuracy_score(y_test, knn_pred)))
print('랜덤 포레스트 정확도: {0:.4f}'.format(accuracy_score(y_test, rf_pred)))
print('결정 트리 정확도: {0:.4f}'.format(accuracy_score(y_test, dt_pred)))
print('에이다부스트 정확도: {0:.4f} :'.format(accuracy_score(y_test, ada_pred)))
```

KNN 정확도: 0.9211  
랜덤 포레스트 정확도: 0.9649  
결정 트리 정확도: 0.9035  
에이다부스트 정확도: 0.9561 :

# 기본 스타킹 모델 실습 - 위스콘신 유방암 데이터 세트

## (4) 최종 메타 모델 학습 데이터 생성

```
# 최종 메타 모델의 학습 데이터 생성
# 개별 알고리즘의 예측값을 옆으로 붙여 피쳐값으로 만들

pred = np.array([knn_pred, rf_pred, dt_pred, ada_pred])
print(pred.shape)

# transpose를 이용해 행과 열의 위치 교환. 컬럼 레벨로 각 알고리즘의 예측 결과를 피쳐로 만들.
pred = np.transpose(pred)
print(pred.shape)

(4, 114)
(114, 4)
```

## (5) 최종 메타 모델 학습/예측/평가

```
# 최종 메타 모델 학습/예측/평가
lr_final.fit(pred, y_test)
final = lr_final.predict(pred)

print('최종 메타 모델의 예측 정확도: {0:.4f}'.format(accuracy_score(y_test, final)))
```

최종 메타 모델의 예측 정확도: 0.9737

개별 모델 정확도보다 향상됨

(무조건 좋아지는 것은 아님)

KNN 정확도: 0.9211

랜덤 포레스트 정확도: 0.9649

결정 트리 정확도: 0.9035

에이다부스트 정확도: 0.9561 :

## CV 세트 기반 스택킹

: 과적합 개선을 위해 개별 모델이 각각 **검증용**으로 메타 모델을 위한 **학습용** 스택킹 데이터 생성과 예측을 위한 **테스트용** 스택킹 데이터를 생성해 이를 기반으로 메타 모델이 학습, 예측하는 방식

- 단계

① 개별 기반 모델별로 학습/예측 수행

- 학습 데이터를 K개의 fold로 나눔

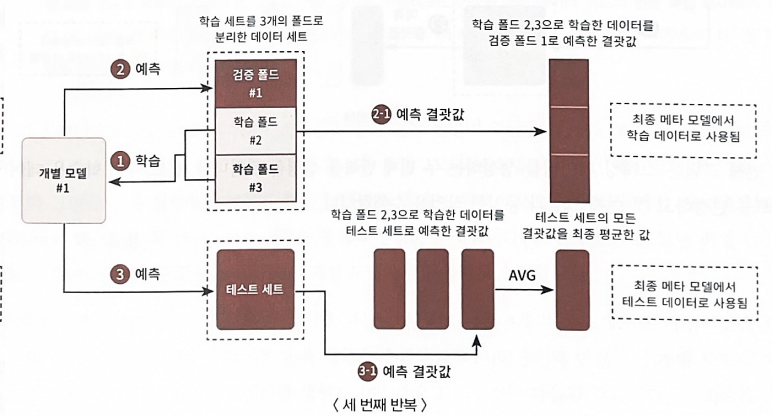
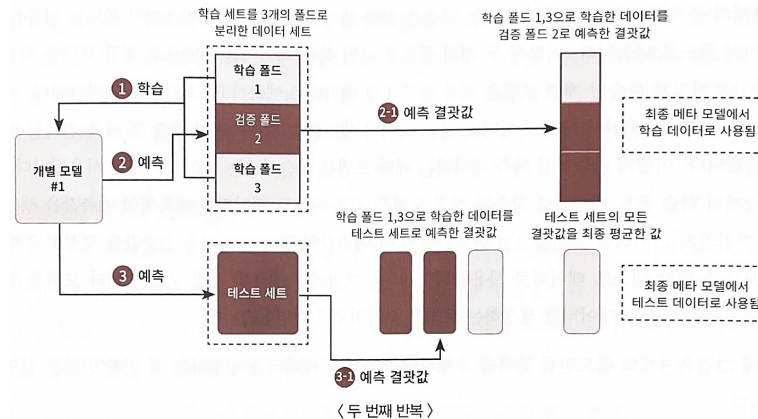
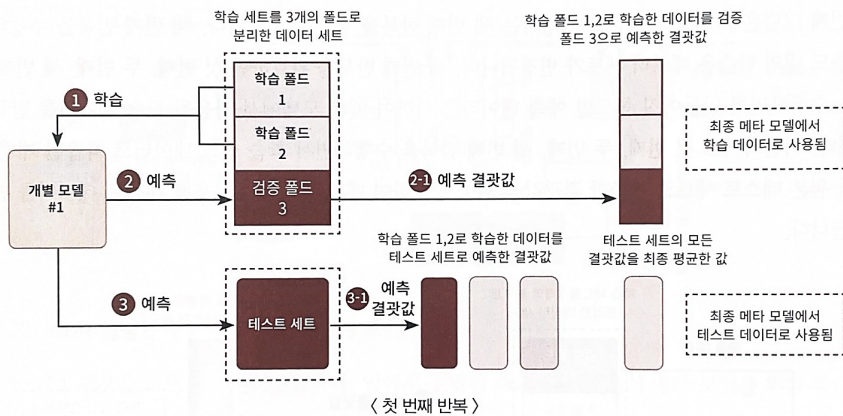
- K-1 개의 fold를 학습 데이터로 하여 base 모델 학습 (K번 반복)

\* 검증 fold 1개를 예측한 결과 (K fold)      -> 최종 meta 모델의 **학습데이터**

\* 테스트 데이터를 예측한 결과의 평균      -> 최종 meta 모델의 **최종결과값**

# CV 세트 기반 스택킹

## ① 개별 기반 모델별로 학습/예측 수행

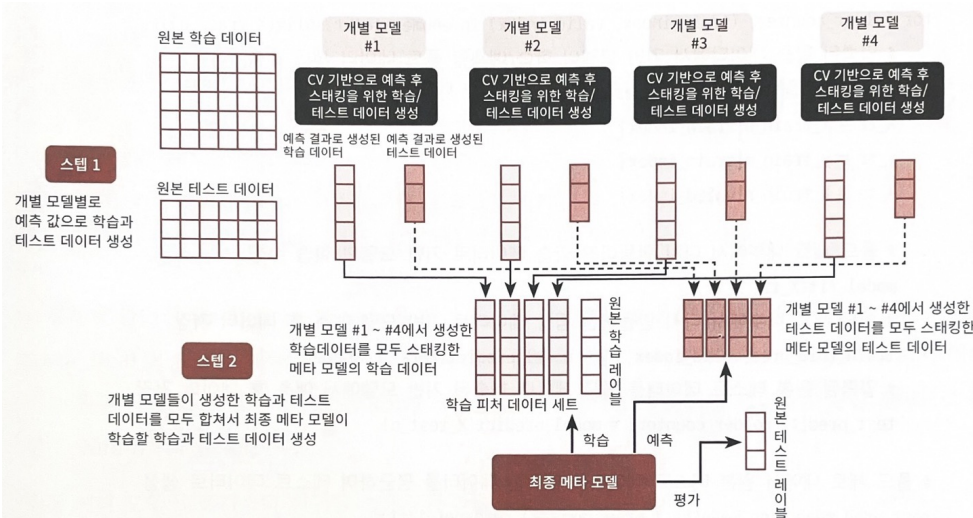




# CV 세트 기반 스택킹

## ② 최종 메타 모델 학습/예측/평가

- 각 base 모델이 생성한 학습용 데이터를 stacking -> 최종 meta 모델의 **학습** 데이터 세트
- 각 base 모델이 생성한 테스트용 데이터를 stacking -> 최종 meta 모델의 **테스트** 데이터 세트
- 최종 학습용 데이터 + 원본 학습 레이블 데이터로 학습
- 최종 테스트용 데이터로 예측 -> 원본 테스트 레이블 데이터로 평가



## 실습 - CV 세트 기반 스택킹 구현

- (1) 최종 메타 모델 학습/테스트용 데이터 생성 함수 정의
- (2) 개별 모델로 최종 메타 모델 학습/테스트용 데이터 생성
- (3) 스택킹 학습/테스트용 데이터 생성
- (4) 최종 메타 모델 학습/예측/평가

# 실습 - CV 세트 기반 스택킹 구현

## (1) 최종 메타 모델 학습/테스트용 데이터 생성 함수 정의

```
from sklearn.model_selection import KFold
from sklearn.metrics import mean_absolute_error

# 개별 기반 모델에서 최종 메타 모델의 학습 및 테스트용 데이터 생성 함수
def get_stacking_base_datasets(model, X_train_n, y_train_n, X_test_n, n_folds):
    # 지정된 n_folds값으로 KFold 생성
    kf = KFold(n_splits=n_folds, shuffle=False)
    # 추후에 메타 모델이 사용할 학습 데이터 반환을 위한 넘파이 배열 초기화
    train_fold_pred = np.zeros((X_train_n.shape[0], 1))
    test_pred = np.zeros((X_test_n.shape[0], n_folds))
    print(model.__class__.__name__, ' model 시작 ')

    for folder_counter, (train_index, valid_index) in enumerate(kf.split(X_train_n)):
        # 입력된 학습 데이터에서 기반 모델이 학습/예측할 폴드 데이터 셋 추출
        print('### 폴드 세트: ', folder_counter, ' 시작 ')
        X_tr = X_train_n[train_index]
        y_tr = y_train_n[train_index]
        X_te = X_train_n[valid_index]

        # 폴드 세트 내부에서 다시 만들어진 학습 데이터로 기반 모델의 학습 수행
        model.fit(X_tr, y_tr)
        # 폴드 세트 내부에서 다시 만들어진 검증 데이터로 기반 모델 예측 후 데이터 저장
        train_fold_pred[valid_index, :] = model.predict(X_te).reshape(-1, 1)
        # 입력된 원본 테스트 데이터를 폴드 세트내 학습된 기반 모델에서 예측 후 데이터 저장.
        test_pred[:, folder_counter] = model.predict(X_test_n)

    # 폴드 세트 내에서 원본 테스트 데이터를 예측한 데이터를 평균하여 테스트 데이터로 생성
    test_pred_mean = np.mean(test_pred, axis=1).reshape(-1, 1)

    # train_fold_pred는 최종 메타 모델이 사용하는 학습 데이터, test_pred_mean은 테스트 데이터
    return train_fold_pred, test_pred_mean
```

# 실습 - CV 세트 기반 스택킹 구현

## (2) 개별 모델로 최종 메타 모델 학습/테스트용 데이터 생성

```
# 각 개별 모델로 최종 메타 모델의 학습/테스트 데이터 생성
knn_train, knn_test = get_stacking_base_datasets(knn_clf, X_train, y_train, X_test, 7)
rf_train, rf_test = get_stacking_base_datasets(rf_clf, X_train, y_train, X_test, 7)
dt_train, dt_test = get_stacking_base_datasets(dt_clf, X_train, y_train, X_test, 7)
ada_train, ada_test = get_stacking_base_datasets(ada_clf, X_train, y_train, X_test, 7)
```

## (3) 스택킹 학습/테스트용 데이터 생성

```
# 각 학습/테스트 데이터 합치기
Stack_final_X_train = np.concatenate((knn_train, rf_train, dt_train, ada_train), axis=1)
Stack_final_X_test = np.concatenate((knn_test, rf_test, dt_test, ada_test), axis=1)
print('원본 학습 피쳐 데이터 Shape:', X_train.shape, '원본 테스트 피쳐 Shape:', X_test.shape)
print('스태킹 학습 피쳐 데이터 Shape:', Stack_final_X_train.shape,
      '스태킹 테스트 피쳐 데이터 Shape:', Stack_final_X_test.shape)
```

원본 학습 피쳐 데이터 Shape: (455, 30) 원본 테스트 피쳐 Shape: (114, 30)  
스태킹 학습 피쳐 데이터 Shape: (455, 4) 스택킹 테스트 피쳐 데이터 Shape: (114, 4)

## (4) 최종 메타 모델 학습/예측/평가

```
# 개별 모델의 학습/테스트 데이터로 최종 메타 모델 학/예/평
lr_final.fit(Stack_final_X_train, y_train)
stack_final = lr_final.predict(Stack_final_X_test)

print('최종 메타 모델의 예측 정확도: {0:.4f}'.format(accuracy_score(y_test, stack_final)))
```

최종 메타 모델의 예측 정확도: 0.9737

```
KNeighborsClassifier model 시작
폴드 세트: 0 시작
폴드 세트: 1 시작
폴드 세트: 2 시작
폴드 세트: 3 시작
폴드 세트: 4 시작
폴드 세트: 5 시작
폴드 세트: 6 시작
RandomForestClassifier model 시작
폴드 세트: 0 시작
폴드 세트: 1 시작
폴드 세트: 2 시작
폴드 세트: 3 시작
폴드 세트: 4 시작
폴드 세트: 5 시작
폴드 세트: 6 시작
DecisionTreeClassifier model 시작
폴드 세트: 0 시작
폴드 세트: 1 시작
폴드 세트: 2 시작
폴드 세트: 3 시작
폴드 세트: 4 시작
폴드 세트: 5 시작
폴드 세트: 6 시작
AdaBoostClassifier model 시작
폴드 세트: 0 시작
폴드 세트: 1 시작
폴드 세트: 2 시작
폴드 세트: 3 시작
폴드 세트: 4 시작
폴드 세트: 5 시작
폴드 세트: 6 시작
```



수고하셨습니다