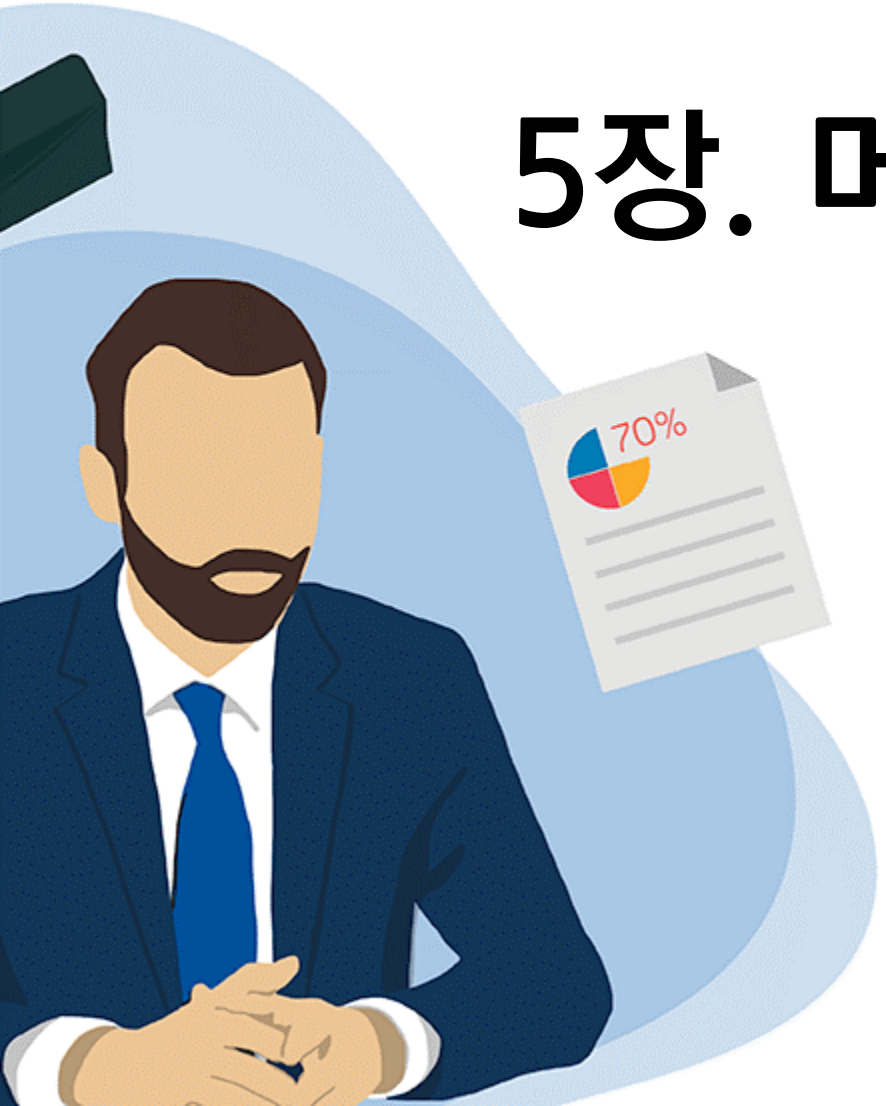


5장. 머신러닝 모형 최적화

1절. 변수 선택과 차원 축소

2절. 파라미터 탐색

3절. 자료 불균형 처리

4절. 최적 모형 탐색

5절. 투표를 통한 최적의 앙상블 모형 만들기

5장. 머신러닝 모형 최적화

1절. 변수 선택과 차원 축소

변수 선택과 차원 축소

- 종속변수에 영향을 주는 변수들을 찾아 학습에 사용할 독립변수의 수를 줄임
- 과적합과 변수들 사이의 다중공선성을 줄일 수 있음
- 모형의 학습 시간을 줄일 수 있음
- 주성분 분석, 상관 분석, 분류 모형의 feature_importance_, 예측 모형의 coef_
- SelectKBest: 가장 높은 score에 따라 k개의 특징을 선택

주성분 분석(PCA, Principal Component Analysis)

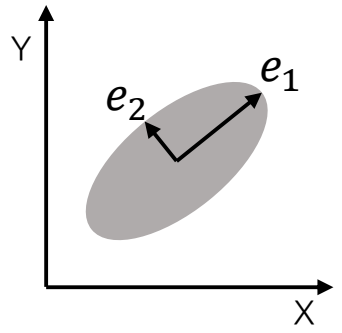
주성분 분석은 변수 선택 및 차원 축소 방법으로 널리 사용

주성분 분석은 상관관계가 있는 변수들을 선형결합(Linear combination)해서 분산이 극대화된 상관관계가 없는 새로운 변수(주성분)들로 축약하는 것

주성분 분석은 사실 선형대수학이라기보다는 선형대수학의 활용적인 측면이 강하며 영상인식, 통계 데이터 분석(주성분 찾기), 데이터 압축, 노이즈 제거 등 여러 분야에 사용

$$c = \begin{pmatrix} cov(x,x) & cov(x,y) \\ cov(x,y) & cov(y,y) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{1}{n}\sum(x_i - m_x)^2 & \frac{1}{n}\sum(x_i - m_x)(y_i - m_y) \\ \frac{1}{n}\sum(x_i - m_x)(y_i - m_y) & \frac{1}{n}\sum(y_i - m_y)^2 \end{pmatrix}$$



주성분 분석(PCA, Principal Component Analysis)


```
sklearn.decomposition.PCA(n_components=None,
        copy=True, whiten=False,
        svd_solver='auto', tol=0.0,
        iterated_power='auto', random_state=None)
```

```
1 import seaborn as sns
2 from sklearn.decomposition import PCA
3 iris = sns.load_dataset("iris")
4 iris_X, iris_y = iris.iloc[:,:-1], iris.species
5
6 pca = PCA(n_components=2)
7 iris_pca = pca.fit_transform(iris_X)
```

주성분 분석


```
1 iris_pca[:5,:]
```

```
array([[-2.68412563,  0.31939725],
       [-2.71414169, -0.17700123],
       [-2.88899057, -0.14494943],
       [-2.74534286, -0.31829898],
       [-2.72871654,  0.32675451]])
```

```
1 pca.explained_variance_
```

각각의 주성분 벡터가 이루는 축에 투영(projection)한 결과의 분산

```
array([4.22824171, 0.24267075])
```

```
1 pca.components_
```

```
array([[ 0.36138659, -0.08452251,  0.85667061,  0.3582892 ],
       [ 0.65658877,  0.73016143, -0.17337266, -0.07548102]])
```

pca1 = 0.36138659*x1 - 0.08452251*x2 + 0.85667061*x3 + 0.3582892*x4

상관관계 확인


```
import pandas as pd
redwine = pd.read_csv('winequality-red.csv', delimiter=';')
redwine.head()
```

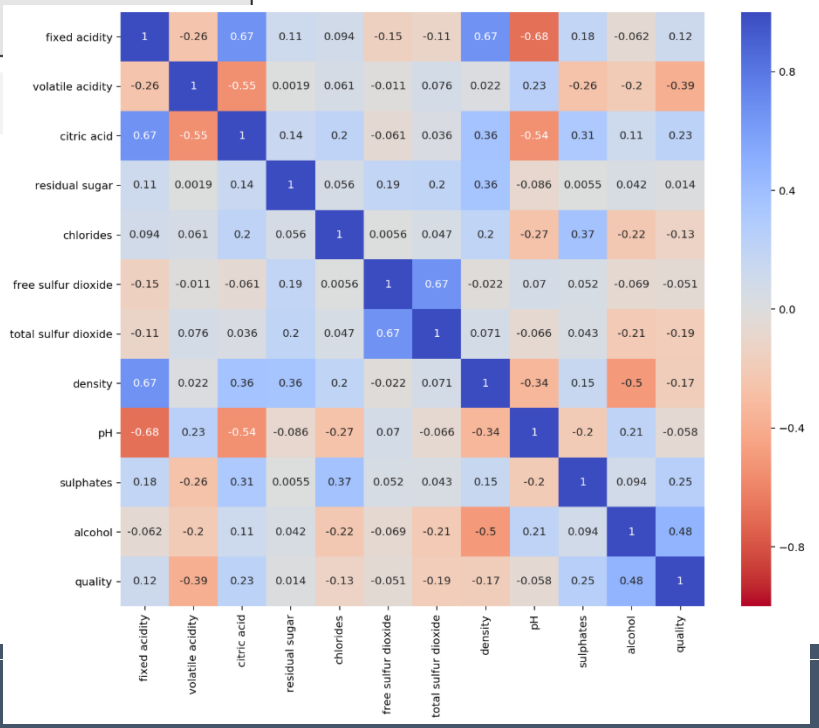
```
X = redwine.iloc[:, :-1]
y = redwine.iloc[:, -1]
from sklearn.model_selection import train_test_split
train_X, test_X, train_y, test_y = train_test_split(X, y, test_size=0.3)
train_X.shape, test_X.shape, train_y.shape, test_y.shape
```

```
((1119, 11), (480, 11), (1119,), (480,))
```

```
import seaborn as sns
import matplotlib.pyplot as plt
%matplotlib inline
```

```
plt.figure(figsize=(12,10))
sns.heatmap(redwine.corr(), annot=True,
            vmin=-1, vmax=1, cmap="coolwarm_r")
plt.show()
```

각 변수들끼리의 상관관계를 확인하고 시각화 해서 종속변수와 상관관계가 높은 변수들만 선택



분류모형의 Feature Importance

- 분류 모형의 feature_importances_ 속성은 각 독립변수들이 종속변수에 영향을 주는 정도를 저장

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rf_model = RandomForestClassifier(n_estimators=10, random_state=10)
rf_model.fit(X_train, y_train)
```

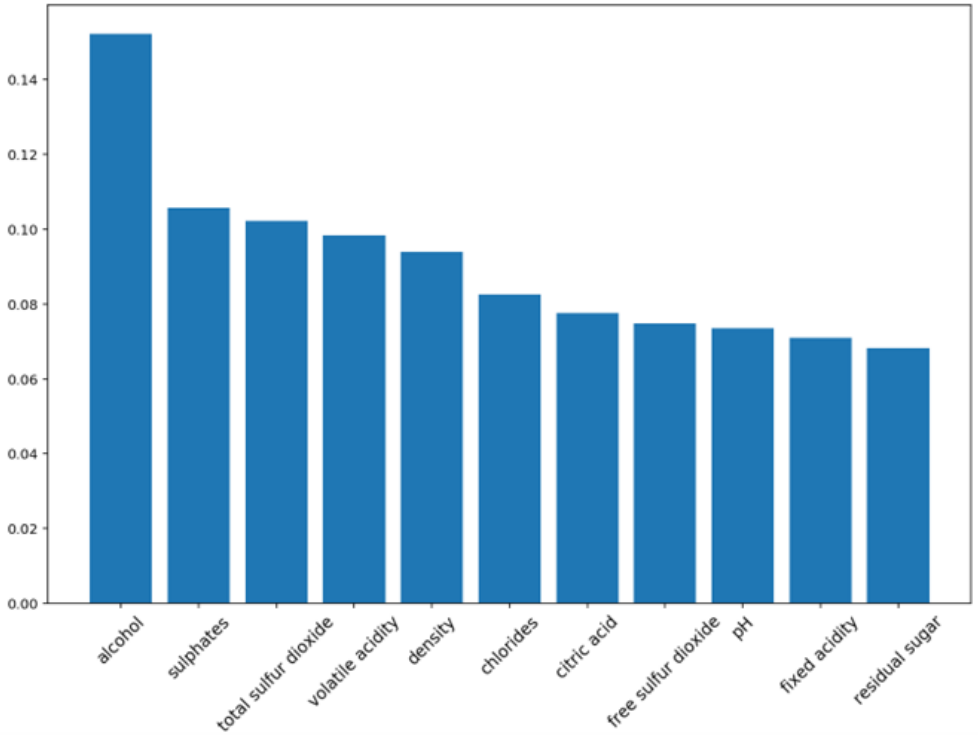
```
features = pd.DataFrame(data=np.c_[X.columns.values,
                                   rf_model.feature_importances_],
                        columns=["feature", "importance"])
```

```
features.sort_values(by="importance", ascending=False, inplace=True)
features.reset_index(drop=True, inplace=True)
features
```

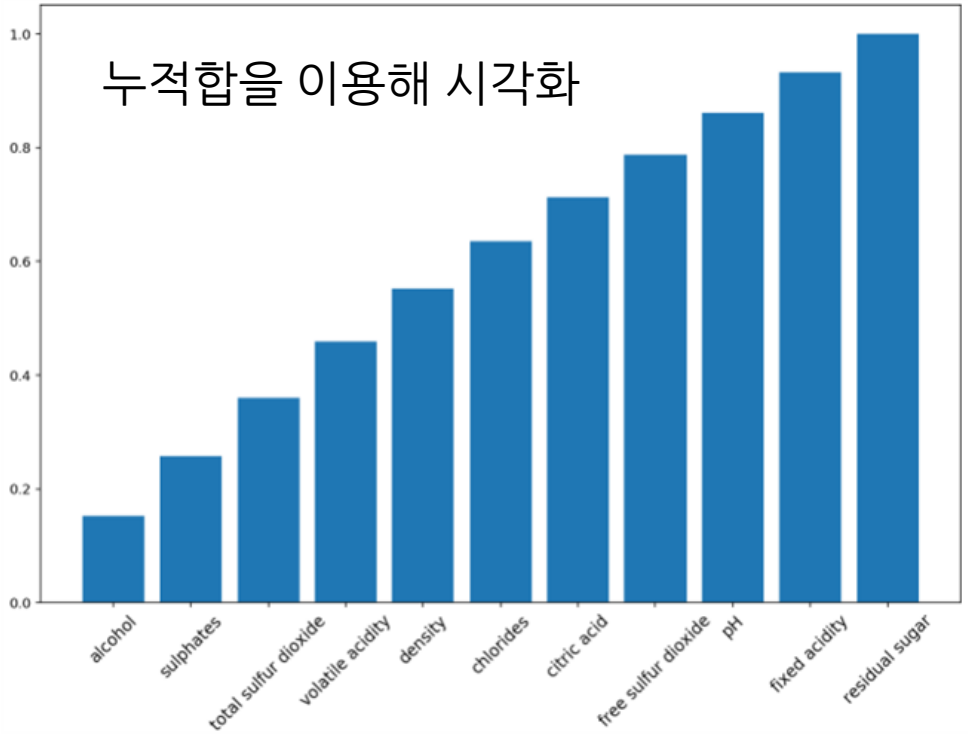
	feature	importance
0	alcohol	0.152202
1	sulphates	0.105698
2	total sulfur dioxide	0.102227
3	volatile acidity	0.0982629
4	density	0.0939209
5	chlorides	0.0825913
6	citric acid	0.077593
7	free sulfur dioxide	0.0749012
8	pH	0.0735724
9	fixed acidity	0.0708851
10	residual sugar	0.0681466

feature_importances_를 이용한 변수 중요도 시각화


```
plt.figure(figsize=(12, 8))
plt.bar(features.feature, features.importance)
plt.xticks(features.feature, fontsize=12, rotation=45)
plt.show()
```



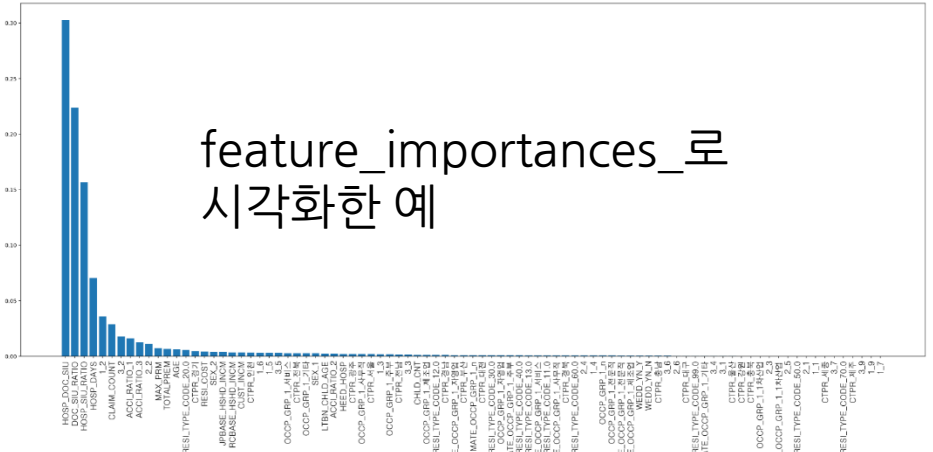

```
y_stack = np.cumsum(features.importance, axis=0)
plt.figure(figsize=(12, 8))
plt.bar(features.feature, y_stack)
plt.xticks(features.feature, fontsize=12, rotation=45)
plt.show()
```



변수를 선택하기 위해서…(부정탐지 사례에서)


```
imp_df.loc[imp_df.cum_sum <= 0.9]
```

	variable	importance	cum_sum
57	HOSP_DOC_SIU	0.30264	0.30264
55	DOC_SIU_RATIO	0.223687	0.526327
56	HOSP_SIU_RATIO	0.156792	0.683118
52	HOSP_DAYS	0.0705903	0.753709
62	1_2	0.0359992	0.789708
54	CLAIM_COUNT	0.0287546	0.818462
76	3_2	0.0178182	0.836281
58	ACCI_RATIO_1	0.0162699	0.85255
60	ACCI_RATIO_3	0.0128517	0.865402
70	2_2	0.0112797	0.876682
85	MAX_PRM	0.0075201	0.884202
84	TOTALPREM	0.0068085	0.891011
0	AGE	0.00656627	0.897577

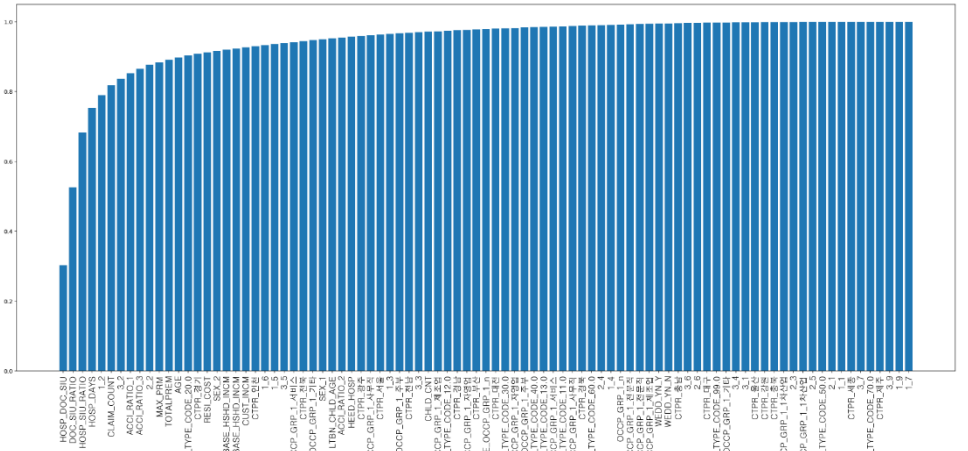


feature_importances_로
시각화한 예

```
imp_df.loc[imp_df.cum_sum <= 0.98]
```

	variable	importance	cum_sum
57	HOSP_DOC_SIU	0.30264	0.30264
55	DOC_SIU_RATIO	0.223687	0.526327
56	HOSP_SIU_RATIO	0.156792	0.683118
52	HOSP_DAYS	0.0705903	0.753709
62	1_2	0.0359992	0.789708
54	CLAIM_COUNT	0.0287546	0.818462
76	3_2	0.0178182	0.836281
58	ACCI_RATIO_1	0.0162699	0.85255
60	ACCI_RATIO_3	0.0128517	0.865402
70	2_2	0.0112797	0.876682
85	MAX_PRM	0.0075201	0.884202
84	TOTALPREM	0.0068085	0.891011
0	AGE	0.00656627	0.897577
8	RESI_TYPE_CODE_20.0	0.00568356	0.90326
16	CTPR_경기	0.00473011	0.907991
83	RESI_COST	0.00413631	0.912127
4	SEX_2	0.00404582	0.916173
88	JPBASE_HSHD_INCM	0.00391716	0.92009
87	RCBASE_HSHD_INCM	0.00343641	0.923526
86	CUST_INCM	0.00343145	0.926958
26	CTPR_인천	0.00321198	0.93017
66	1_6	0.0030781	0.933248
65	1_5	0.00295263	0.9362
79	3_5	0.00293687	0.939137
36	OCCP_GRP_1_서비스	0.00290774	0.942045
28	CTPR_전북	0.00275861	0.944804
34	OCCP_GRP_1_기타	0.00271893	0.947523
3	SEX_1	0.00269921	0.950222
2	LTBN_CHLD_AGE	0.00246022	0.952682
59	ACCI_RATIO_2	0.00243463	0.955117
53	HEED_HOSP	0.00213998	0.957257
19	CTPR_광주	0.00209687	0.959353
35	OCCP_GRP_1_사무직	0.00204848	0.961402
23	CTPR_서울	0.00195838	0.96336
63	1_3	0.00186628	0.965227
40	OCCP_GRP_1_주부	0.00181129	0.967038
27	CTPR_전남	0.00158721	0.968625
77	3_3	0.00148036	0.970105
1	CHLD_CNT	0.00145118	0.971557
39	OCCP_GRP_1_제조업	0.00140534	0.972962
6	RESI_TYPE_CODE_12.0	0.00133918	0.974301
17	CTPR_경남	0.00122426	0.975525
48	MATE_OCCP_GRP_1_자영업	0.0012064	0.976732
22	CTPR_부산	0.00119893	0.977931
44	MATE_OCCP_GRP_1_n	0.00117441	0.979105

누적합을
시각화



RFE(Recursive Feature Elimination) 방식

- RandomForestClassifier 모형을 이용한 예
- 5개 특징이 남을 때까지 변수를 제거 함

```
rfe_model = RFE(RandomForestClassifier(n_estimators=10, random_state=10),
                n_features_to_select=5)
rfe_model.fit(train_X, train_y)
```

```
import numpy as np
import pandas as pd
features_rfe = pd.DataFrame(data=np.c_[X.columns.values,
                                       rfe_model.get_support()],
                            columns=["feature", "selected"])
```

	feature	selected
1	volatile acidity	True
6	total sulfur dioxide	True
7	density	True
9	sulphates	True
10	alcohol	True
0	fixed acidity	False
2	citric acid	False
3	residual sugar	False
4	chlorides	False
5	free sulfur dioxide	False
8	pH	False

회귀 모형의 변수 선택

- 회귀모형의 회귀계수(Logistic Regression)를 이용해 여러 변수 중에서 유의미한 변수를 선택/추출

```
# 실습을 위한 데이터
from sklearn.datasets import load_boston
boston = load_boston()
X = boston.data
y = boston.target
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.3)

# 표준화
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
scaler = MinMaxScaler(feature_range=(0,1))
scaler.fit(X_train)
X_train_scaled = scaler.transform(X_train)
X_test_scaled = scaler.transform(X_test)
```

회귀계수(Logistic Regression)

- 회귀 계수를 이용해 중요도가 높은 변수들부터 출력

```
1 from sklearn.linear_model import LinearRegression
2 from sklearn.model_selection import cross_val_score
3 model_boston = LinearRegression().fit(X_train_scaled, y_train)
4 cross_val_score(model_boston, X_train_scaled, y_train, cv=5)
```

```
array([0.66541506, 0.69283113, 0.72288705, 0.61511159, 0.81259119])
```

```
1 model_boston.coef_
```

```
array([ -9.50190555,   3.858571  ,  -0.12986772,   3.90536934,
        -6.70234023,  23.49430309,  -2.37465004, -14.34704958,
         5.98429701,  -6.40514562,  -8.36634072,   3.77776711,
       -14.20153048])
```

```
1 import pandas as pd
2 import numpy as np
3 feature_importance_lr = pd.DataFrame(np.c_[boston.feature_names,
4 model_boston.coef_.ravel()])
5 feature_importance_lr.columns = ['feature', 'coef']
6 feature_importance_lr.sort_values("coef", ascending=False, inplace=True)
7 feature_importance_lr
```

	feature	coef
8	RAD	6.968344010893487
1	ZN	3.5461984520959238
11	B	3.544976377758699
5	RM	20.080739006833852
3	CHAS	2.071863522879258
6	AGE	0.7030211697195612
2	INDUS	0.16524086413405364
10	PTRATIO	-9.883084087675604
4	NOX	-8.933479107993003
0	CRIM	-8.530688531355986
9	TAX	-6.411024009415459
12	LSTAT	-18.44626666273288
7	DIS	-13.098085206433726

SelectKBest

- 가장 높은 score에 따라 k개의 특징을 선택
- sklearn.feature_selection.SelectKBest(*score_func=<function f_classif>, k=10*)

인자	타입	기본값	설명
score_func	callable	f_classif	함수는 두 개의 배열 X와 y를 취하고 한 쌍의 배열 (scores, pvalues) 또는 scores가 있는 단일 배열을 반환. 기본값은 f_classif. 기본 함수는 분류 작업에서만 동작. • f_classif : 분류를 위한 label/feature 사이의 ANOVA F-value • mutual_info_classif : 이산(discrete) 변수를 위한 상호정보(mutual information) • chi2 : 분류를 위한 비 음수의 카이제곱 통계 • f_regression : 회귀를 위한 label/feature 사이의 F-value • mutual_info_regression : 연속형 타겟을 위한 상호정보 • SelectPercentile : 가장 높은 점수의 백분위 수를 기반으로 특징을 선택 • SelectFpr : 오 탐지율(false positive rate)을 기반으로 특징을 선택 • SelectFdr : 추정된 오류 발견율을 기반으로 특징을 선택 • SelectFwe : 제1종오류가 발생할 가능성(FWER; family-wise error rate)을 기반으로 특징을 선택 • GenericUnivariateSelect : 구성 가능한 모드가 있는 단변량 특징 선택자
k	정수 또는 “all”	10	선택할 상위 특징 개수를 지정. “all”로 지정하면 파라미터 검색을 위해 사용할 선택 항목을 무시함

SelectKBest 예

- iris 데이터에서 score에 가장 큰 영향을 주는 변수 1개를 선택

```
1  from sklearn.datasets import load_iris
2  from sklearn.feature_selection import SelectKBest, chi2
3  X, y = load_iris(return_X_y=True)
4  X.shape
```

```
(150, 4)
```

```
1  X_new = SelectKBest(chi2, k=1).fit_transform(X, y)
2  X_new.shape
```

```
(150, 1)
```

```
1  X_new
```

```
array([[1.4],
       [1.4],
       [1.3],
       [1.5],
```

5장. 머신러닝 모형 최적화

2절. 파라미터 탐색

- 머신러닝 모형이 완성된 후에는 파라미터 탐색을 통해 모형을 최적화하고 예측 성능을 향상시켜야 함
- Scikit-learn 패키지는 하이퍼 파라미터 튜닝을 통해 모형의 최적화를 위한 여러 도구들을 제공
- validation_curve() : 단일 하이퍼 파라미터 최적화 함수
- GridSearchCV : 그리드를 사용한 복수 하이퍼 파라미터 최적화 클래스
- ParameterGrid : 복수 파라미터 최적화용 그리드 클래스

validation_curve

- 최적화할 파라미터의 이름과 범위, 그리고 성능 측정 기준을 각각 param_name, param_range, scoring 인수로 받아 파라미터 범위의 모든 경우에 대해 성능을 계산

```
sklearn.model_selection.validation_curve(estimator, X, y,
    param_name, param_range, groups=None, cv='warn',
    scoring=None, n_jobs=None, pre_dispatch='all', verbose=0,
    error_score='raise-deprecating')
```

validation_curve를 이용한 예


```
1 from sklearn.svm import SVC
2 model = SVC().fit(X, y)
3 model
```

```
SVC(C=1.0, break_ties=False, cache_size=200, class_weight=None, coef0=0.0,
    decision_function_shape='ovr', degree=3, gamma='scale', kernel='rbf',
    max_iter=-1, probability=False, random_state=None, shrinking=True,
    tol=0.001, verbose=False)
```

```
1 import numpy as np
2 param_range = np.logspace(-6, -1, 10)
```

gamma 값의 범위($\frac{1}{10^6} \sim \frac{1}{10^1}$)

가우시안 커널의 폭을 제어하는 매개변수

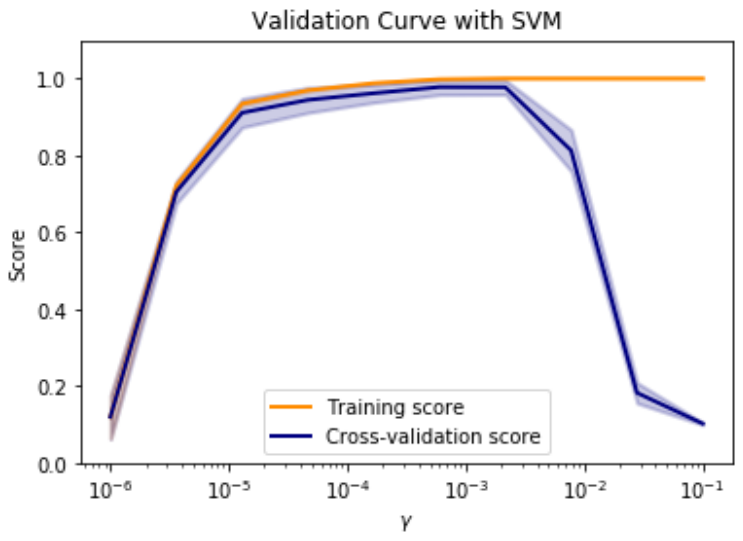
```
1 %%time
2 from sklearn.svm import SVC
3 from sklearn.model_selection import validation_curve
4 train_scores, test_scores = validation_curve(
5     SVC(), X, y, param_name="gamma", param_range=param_range,
6     cv=10, scoring="accuracy", n_jobs=1)
```

validation_curve를 이용한 예


```
import numpy as np
train_scores_mean = np.mean(train_scores, axis=1)
train_scores_std = np.std(train_scores, axis=1)
test_scores_mean = np.mean(test_scores, axis=1)
test_scores_std = np.std(test_scores, axis=1)
```

```
%matplotlib inline
import matplotlib.pyplot as plt

plt.title("Validation Curve with SVM")
plt.xlabel("$\gamma$")
plt.ylabel("Score")
plt.ylim(0.0, 1.1)
plt.semilogx(param_range, train_scores_mean, label="Training score",
             color="darkorange", lw=2)
plt.fill_between(param_range, train_scores_mean - train_scores_std,
                 train_scores_mean + train_scores_std, alpha=0.2,
                 color="darkorange", lw=2)
plt.semilogx(param_range, test_scores_mean, label="Cross-validation score",
             color="navy", lw=2)
plt.fill_between(param_range, test_scores_mean - test_scores_std,
                 test_scores_mean + test_scores_std, alpha=0.2, color="navy", lw=2)
plt.legend(loc="best")
plt.show()
```



GridSearchCV

- validation_curve 함수와 달리 모형 래퍼(Wrapper) 성격의 클래스임
- 중요 멤버는 fit(), predict()
- fit(), score(), predict(), predict_proba(), decision_function(), transform(), inverse_tranform() 메소드를 구현
- estimator의 파라미터들은 이들 메소드에 적용되어 파라미터 그리드를 통해 교차 검증된 그리드 검색에 의해 최적화

```
sklearn.model_selection.GridSearchCV(estimator, param_grid,
    scoring=None, fit_params=None, n_jobs=None, iid='warn',
    refit=True, cv='warn', verbose=0, pre_dispatch='2*n_jobs',
    error_score='raise-deprecating', return_train_score='warn')
```

GridSearchCV를 이용한 예


```
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.model_selection import GridSearchCV
from sklearn.svm import SVC
from sklearn.feature_selection import SelectKBest
import pandas as pd
redwine = pd.read_csv("winequality-red.csv", sep=";")
redwine_X, redwine_y = redwine.iloc[:,:-1], redwine.iloc[:,-1]
```

실행하는데 수분에서 수십분이 소요될 수 있음

```
selection = SelectKBest(k=1)
svm = SVC(kernel="linear")
pipeline = Pipeline([("univ_select", selection), ("svm", svm)])
param_grid = dict(univ_select__k=[4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11], svm__C=[0.1, 1, 10])
grid_search = GridSearchCV(pipeline, param_grid=param_grid, cv=2, verbose=10)
grid_search.fit(redwine_X, redwine_y)
```

```
Fitting 2 folds for each of 24 candidates, totalling 48 fits
[CV] svm__C=0.1, univ_select__k=4 ....................................
[CV] ........ svm__C=0.1, univ_select__k=4, score=0.516, total=   0.0s
[CV] svm__C=0.1, univ_select__k=4 ....................................
[CV] ........ svm__C=0.1, univ_select__k=4, score=0.584, total=   0.1s
[CV] svm__C=0.1, univ_select__k=5 ....................................
[CV] ........ svm__C=0.1, univ_select__k=5, score=0.516, total=   0.0s
[CV] svm__C=0.1, univ_select__k=5 ....................................
```

GridSearchCV를 이용한 예

best_estimator_ : 가장 높은 점수를 낸 파라미터의 모형, params_ : 최적 파라미터 정보

```
1 print(grid_search.best_estimator_)
```

```
Pipeline(memory=None,
         steps=[('univ_select',
                 SelectKBest(k=9,
                             score_func=<function f_classif at 0x000002339E555E58>)),
                ('svm',
                 SVC(C=1, break_ties=False, cache_size=200, class_weight=None,
                     coef0=0.0, decision_function_shape='ovr', degree=3,
                     gamma='scale', kernel='linear', max_iter=-1,
                     probability=False, random_state=None, shrinking=True,
                     tol=0.001, verbose=False))],
         verbose=False)
```

```
1 grid_search.best_params_
```

```
{'svm__C': 1, 'univ_select__k': 9}
```

사이킷런의 일부 클래스의 n_jobs 파라미터는 연산에 사용할 코어의 수를 지정할 수 있음

```
1 %%time
2 from sklearn.svm import SVC
3 from sklearn.model_selection import validation_curve
4 train_scores, test_scores = validation_curve(
5     SVC(), X, y, param_name="gamma", param_range=param_range,
6     cv=10, scoring="accuracy", n_jobs=-1)
```

n_jobs=1

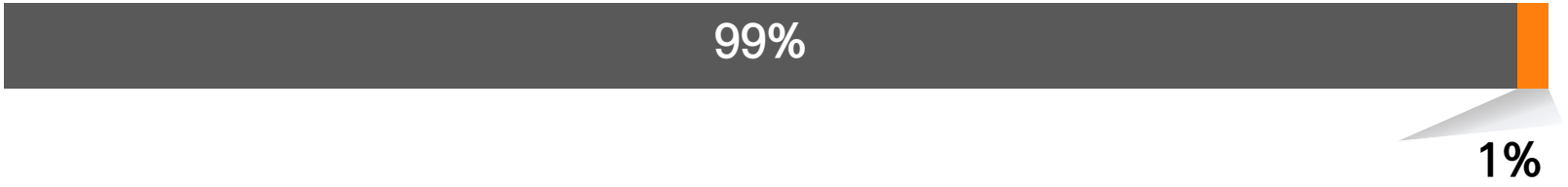
n_jobs=-1

5장. 머신러닝 모형 최적화

3절. 자료 불균형 처리

불균형 데이터

데이터셋이 정상:비정상 = 99:1로 매우 불균형



불균형 데이터의 문제점

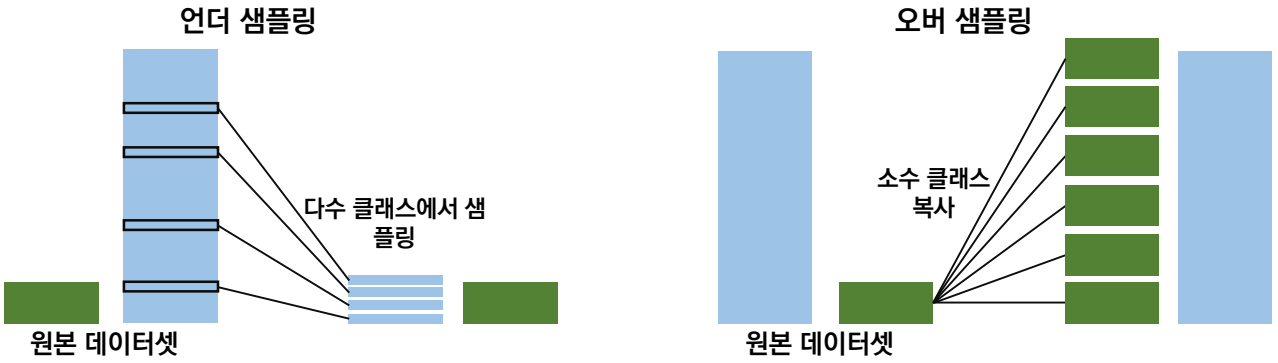
[case 1] 학습용-검증용 세트 분리 시, 학습용 세트에 비정상 데이터가 포함되지 않을 가능성 존재

→ 그 결과, 단일클래스로 학습되어 비정상 거래를 감지할 수 없음

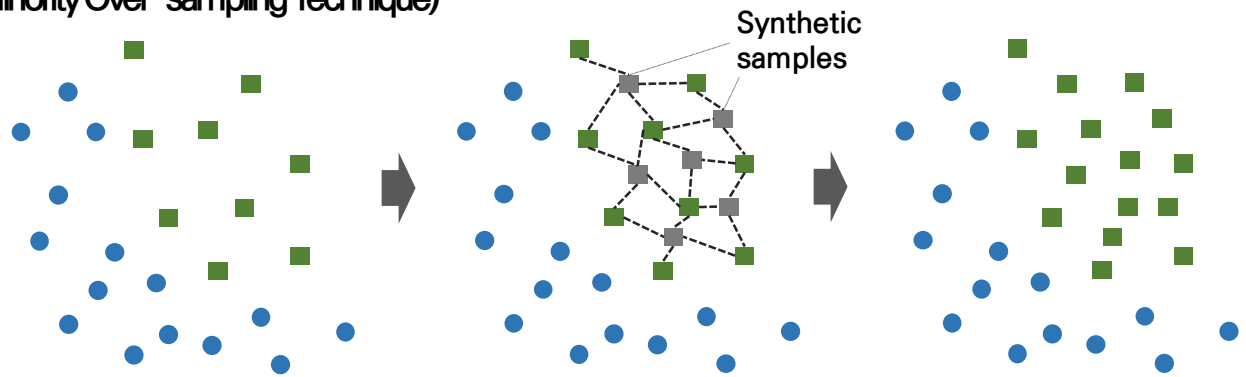
[case 2] 모델 학습 시, 비정상데이터의 절대적인 양이 적어 제대로 된 학습이 일어나지 않음

언더 샘플링과 오버 샘플링

단순 언더/오버 샘플링

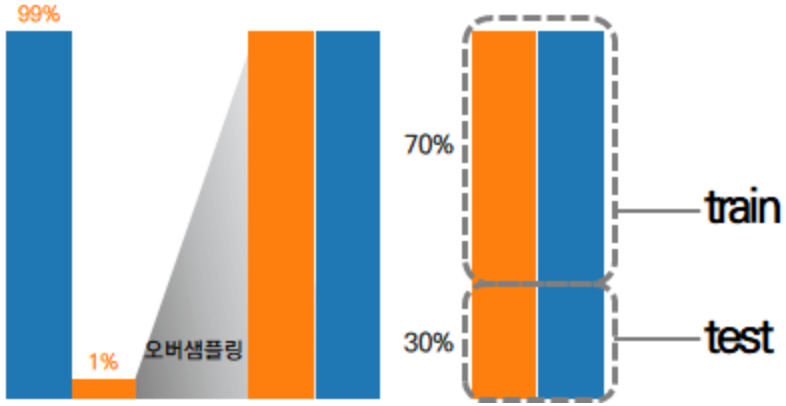


SMOTE(Synthetic Minority Over-sampling Technique)



계층적 샘플링후 오버샘플링

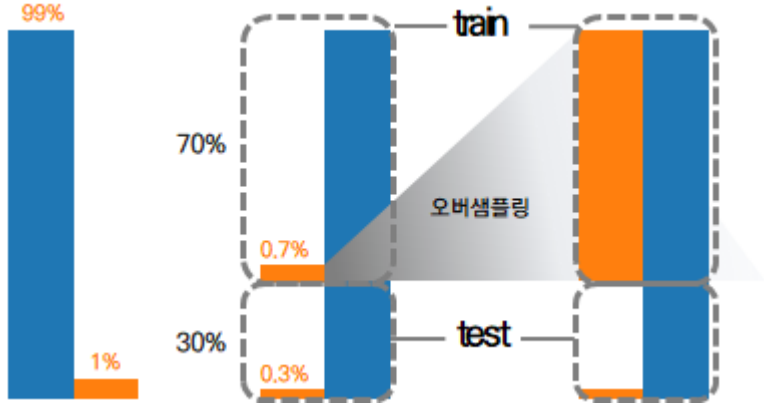
전체를 오버샘플링 하고 train-test set 분리



→ test set에도 오버샘플링이 들어가 정확한 판단이 되지 않음

→ 현실을 반영하지 못함

계층적 샘플링 후 train 데이터만 오버샘플링



→ 계층적 샘플링사용:
기존 클래스비율과 동일하게 train-test셋을 분리

→ 유사값을 생성해 Class(1)에 대한 학습을 강화하고
test에서는 원래 표본으로 예측해 정확도 판단

SMOTE를 이용한 오버샘플링

pip install imblearn 명령으로 패키지를 설치해야 함

```
imblearn.over_sampling.SMOTE(sampling_strategy='auto',
        random_state=None, k_neighbors=5,
        n_jobs=1, ratio=None)
```

```
1 from imblearn.over_sampling import SMOTE
2 sm = SMOTE()
3 X_resampled, y_resampled = sm.fit_sample(X, y)
4
5 X_resampled.shape, y_resampled.shape
```

```
((19720, 10), (19720,))
```

가중치 제어

가중치 제어(Weight Control)는 데이터가 불균형(imbalanced)일 경우에 모델 및 데이터에 따라 가중치(weight)를 부여하는 방법

Scikit-learn의 예측모형에 class_weight 매개변수를 이용해 설정

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rf_model = RandomForestClassifier(n_estimators=100, max_features=2,
                                  class_weight={0:1, 1:1.4},
                                  random_state=42)
rf_model.fit(X_train, y_train)
```

```
RandomForestClassifier(class_weight={0: 1, 1: 1.4}, max_features=2,
                       random_state=42)
```

5장. 머신러닝 모형 최적화

4절. 앙상블 모형

모델 앙상블이란?

Combine different classifiers into a meta-classifier that has a better generalization performance than each individual classifier alone

여러가지 분류기를 메타 분류기로 결합하여
개별 분류기 하나보다 더 나을 일반화 성능을 갖게 하는 것

→ 주로 의사결정나무 사용

앙상블

- 어떤 데이터의 값을 예측한다고 할 때, **하나의 모델**을 활용하지만 **여러 개의 모델을 조화롭게 학습**시켜 그 모델들의 예측 결과들을 이용한다면 더 **정확한 예측값**을 구할 수 있음
- **앙상블 학습**은 **여러 개의 결정 트리**(Decision Tree)를 **결합**하여 하나의 결정 트리보다 더 좋은 성능을 내는 머신러닝 기법
- 앙상블 학습의 핵심은 **여러 개의 약 분류기**(Weak Classifier)를 **결합**하여 **강 분류기**(Strong Classifier)를 만들어 모델의 정확성을 향상5시킴
  - **약 분류기를 병렬적으로 사용하면 배깅**
  - **Variance(데이터 밀집도)**를 **감소**시키고 싶다면 배깅
  - **약 분류기를 순차적으로 사용하면 부스팅**
  - **Bias(중심과의 거리)**를 **감소**시키고 싶다면 부스팅

K-폴드 교차검증

- 데이터의 수 적으면 검증데이터의 수도 적기 때문에 모형 성능의 신뢰도가 떨어짐
- 만일 검증데이터의 수를 증가시키면 학습용 데이터의 수가 적어지므로 정상적인 학습이 되지 않음

적은 데이터에서 머신러닝 평가 결과의 신뢰도를 높이기 위해 사용하는 방법

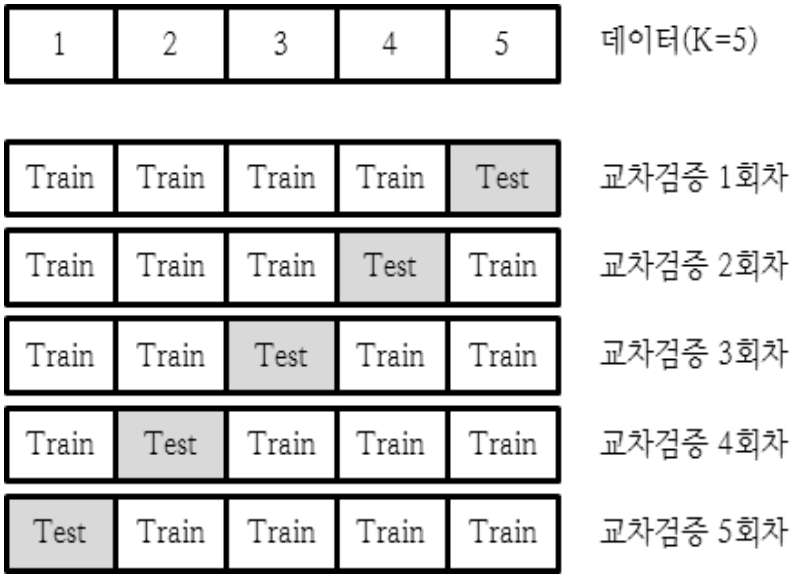
K-폴드 교차검증에서는 전체 데이터를 K개의 부분 집합 ({1,2,⋯,K})으로 나눈 후 다음과 같이 학습과 검증을 반복

1. 데이터 {1,2,⋯,K-1}을 학습용 데이터로 사용하여 분석 모형을 만들고 데이터 {K}로 검증
2. 데이터 {1,2,⋯,K-2,K}를 학습용 데이터로 사용하여 분석모형을 만들고 데이터 {K-1}로 검증

⋮

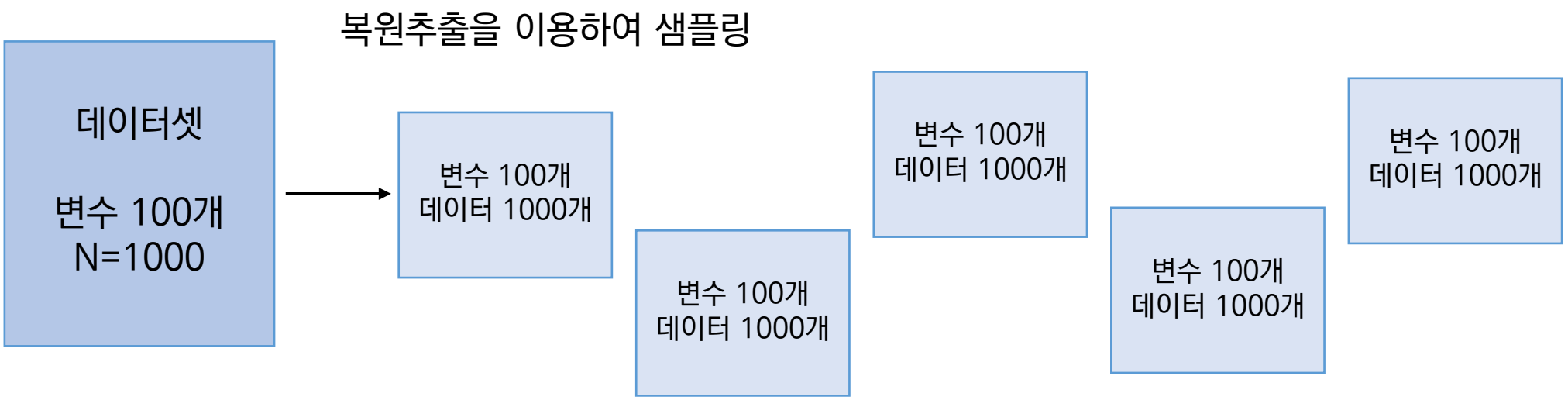
k. 데이터 {2,⋯,K}를 학습용 데이터로 사용하여 분석모형을 만들고 데이터 {1}로 검증

총 K개의 모형과 K개의 검증 결과가 나오며, 이 K개의 검증 결과를 평균하여 최종 교차검증 성능을 계산함



부트스트래핑

부트스트래핑은 n개의 관찰로 구성된 모집단을 대체하여 무작위 샘플링을 수행하는 프로세스



복원추출을 허락했으므로 중복되는 데이터가 존재할 수 있음

복원추출의 예를 들어 모집단이 (2,3,4,5,6)이고 대체 가능한 크기로 크기가 4인 두 개의 랜덤 샘플링 했을경우 샘플 1은 (2,3,3,6)이고 샘플 2는 (4,4,6,2)가 되어 샘플 내에 중복된 데이터가 존재할 수 있음

부트스트래핑의 0.632 규칙(.632+rule)

훈련 오차는…

$$TrainingError = \frac{1}{n}\sum L(y_i, \hat{y_i})$$

교차 검증은 표본 오류의 예상 출력을 추정하는 방법

$$Error = E[L(y_i, f(x_i))]$$

K-폴드 교차 검증의 경우라면…

$$Error\ of\ CV = \sum L(y_i, f(x_i))$$

Training 데이터는 X= (x1,x2.....,xn)이고, 각 zi가 n개의 샘플 집합인 이 집합 (z1,.....,zb)에서 부트스트랩 샘플링을 하면, 샘플 외 오류(OOSE, out-of-sample error)율은

$$OOSE = L(y_i, fb(x_i))$$

$$Error = 0.368 * TrainingError + 0.632 * OOSE$$

OOSE : 앞서 뽑힌 63.2%가 아닌 원 데이터의 남은 37.8%의 데이터에 결정적인 정보가 존재할 경우 이를 반영할 수 없다는 에러

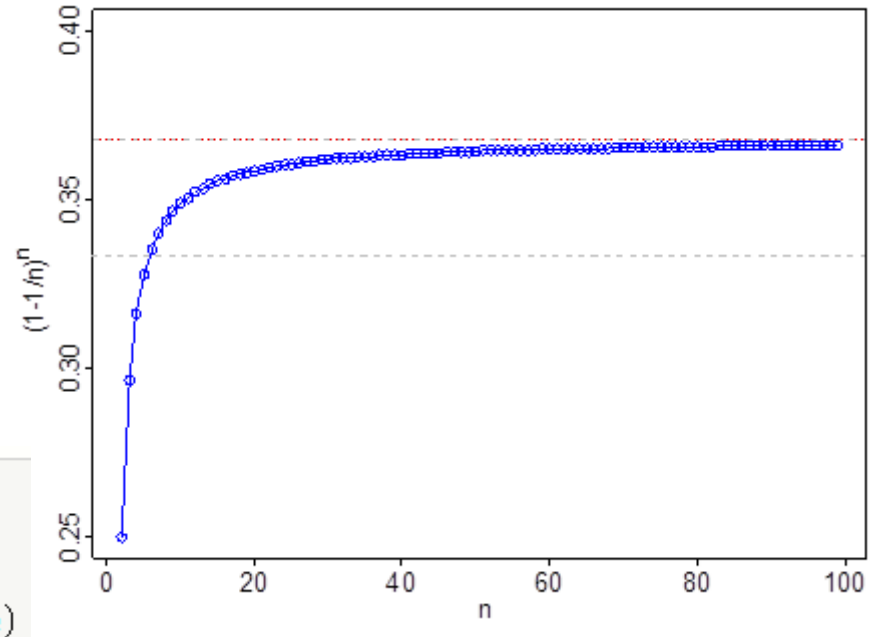
출처 : Efron, B. and R. Tibshirani (1997), "Improvements on Cross-Validation: The .632+ Bootstrap Method," *Journal of the American Statistical Association* Vol. 92, No. 438. (Jun), pp. 548-560 https://www.jstor.org/stable/2965703

0.368은 어디에서?

$$\lim_{n\to\infty}\left(1-\frac{1}{n}\right)^{n} = e^{-1} \approx 0.368$$

n=6일 경우 1/3, n=11일 경우 0.35, n=99일 경우 0.366,
N=10000 이상일 경우 0.368에 수렴

0.368 : 어떤 물건이 선택되지 않을 확률
1−0.368 = 0.632 : 선택한 항목의 확률




```
1  import numpy as np
2
3  N = 1000000 #
4  bootstrap = np.random.choice(N, N, replace=True)
5  np.round(len(set(bootstrap))/N, 3)
```

executed in 307ms, finished 16:55:33 2021-06-24

```
0.632
```

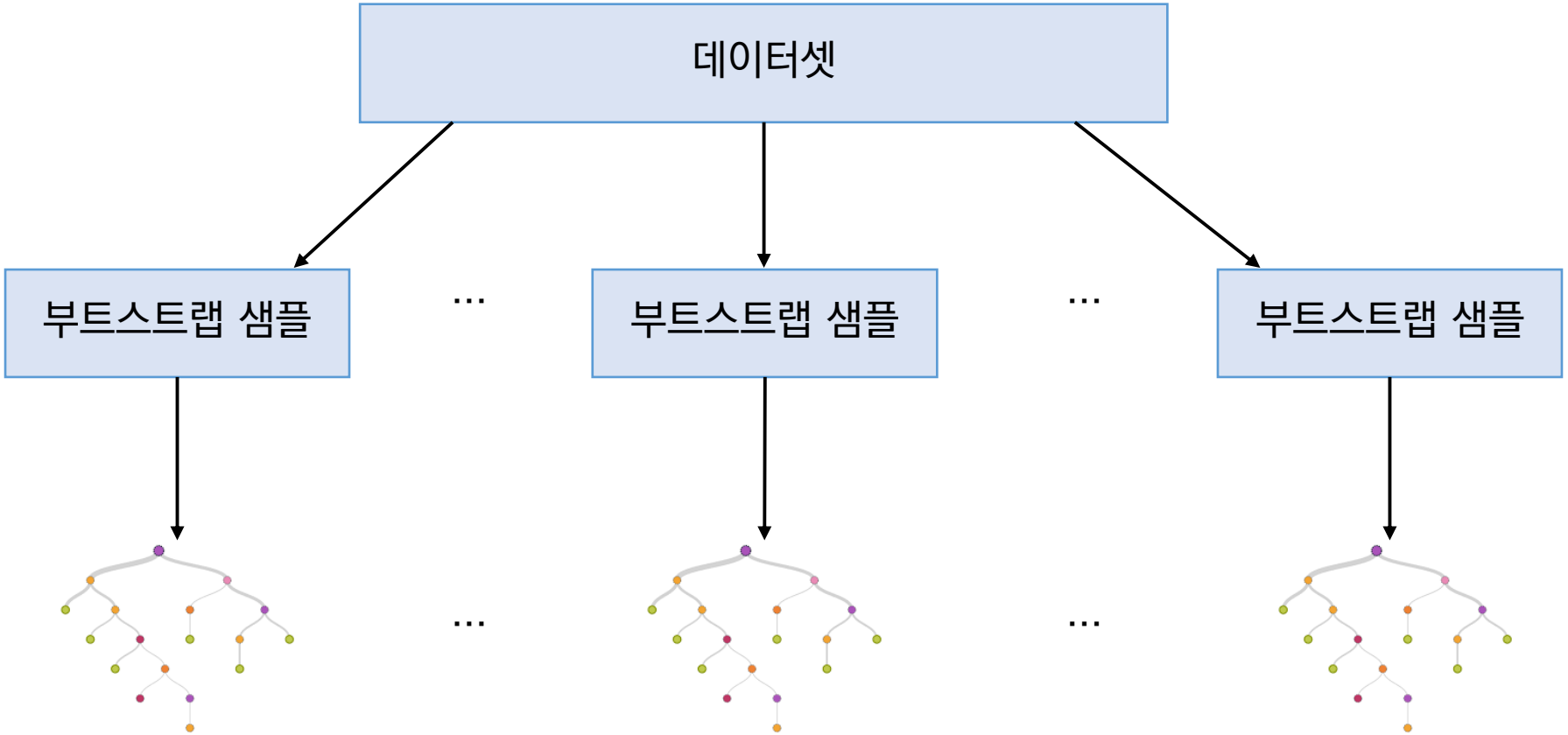
```
1  np.exp(-1), 1-np.exp(-1)
```

executed in 13ms, finished 17:13:03 2021-06-24

```
(0.36787944117144233, 0.6321205588285577)
```

베깅(Bagging)

**원데이터에서 Bootstrap으로 샘플링 후, 각 샘플에 대한 의사결정나무를 만들고,
그 나무들을 모아 최종 의사결정을 하는 모델**



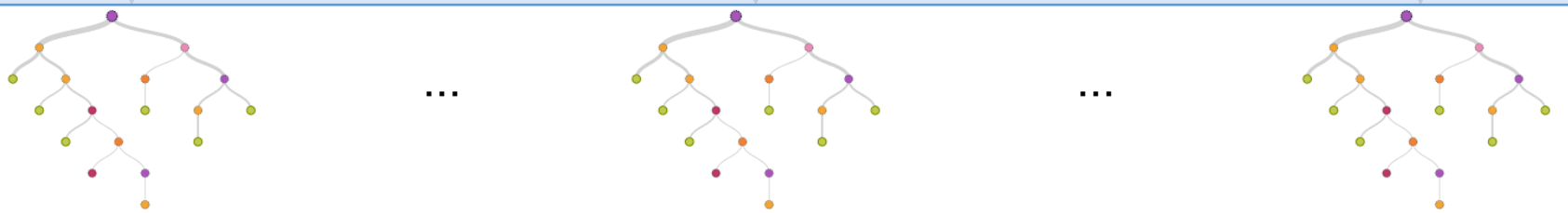
부트스트랩을 이용하여 데이터를 샘플링하면, 그 데이터를 바탕으로 의사결정나무 모델을 선정한다.

베깅(Bagging)

원데이터에서 Bootstrap으로 샘플링 후, 각 샘플에 대한 의사결정나무를 만들고,
그 나무들을 모아 최종 의사결정을 하는 모델

이 의사결정나무들은 모두 같은 의사결정나무일 수 없다.

부트스트랩으로 샘플링 했으므로, .632+rule에 의해 어느정도의 중복과
함께 각기 다른 샘플로 의사결정나무 모델을 만들었다고 할 수 있다.



부트스트랩을 이용하여 데이터를 샘플링하면, 그 데이터를 바탕으로 의사결정나무 모델을 선정한다.

Sample 데이터

https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/wine/wine.data

변수명	의미
Class label	등급(1,2,3)
Alcohol	알코올
Malic acid	능금산
Ash	회분
Alcalinity of ash	회분의 알칼리도
Magnesium	마그네슘
Total phenols	총 페놀
Flavanoids	플라보노이드
Nonflavanoid phenols	비플라보노이드 페놀
Proanthocyanins	프로안토시아닌
Color intensity	색상 강도
Hue	색조
OD280/OD315 of diluted wines	희석 된 와인의 OD280 / OD315
Proline	프롤린

와인데이터 불러오기

```
1 import pandas as pd
2
3 wine_df = pd.read_csv("https://archive.ics.uci.edu/ml/"
4                       "machine-learning-databases/wine/wine.data", header=None)
```

https://archive.ics.uci.edu/ml/machine-learning-databases/wine/wine.data

executed in 743ms, finished 19:34:24 2021-06-24

```
1 wine_df.columns = ['Class label', 'Alcohol', 'Malic acid', 'Ash', 'Alcalinity of ash',
2                    'Magnesium', 'Total phenols', 'Flavanoids', 'Nonflavanoid phenols',
3                    'Proanthocyanins', 'Color intensity', 'Hue', 'OD280/OD315 of diluted wines',
4                    'Proline']
```

executed in 6ms, finished 19:34:35 2021-06-24

```
1 wine_df.head()
```

executed in 18ms, finished 19:34:40 2021-06-24

	Class label	Alcohol	Malic acid	Ash	Alcalinity of ash	Magnesium	Total phenols	Flavanoids	Nonflavanoid phenols	Proanthocyanins	Color intensity	Hue	OD280/OD315 of diluted wines	Proline
0	1	14.23	1.71	2.43	15.6	127	2.80	3.06	0.28	2.29	5.64	1.04	3.92	1065
1	1	13.20	1.78	2.14	11.2	100	2.65	2.76	0.26	1.28	4.38	1.05	3.40	1050
2	1	13.16	2.36	2.67	18.6	101	2.80	3.24	0.30	2.81	5.68	1.03	3.17	1185
3	1	14.37	1.95	2.50	16.8	113	3.85	3.49	0.24	2.18	7.80	0.86	3.45	1480
4	1	13.24	2.59	2.87	21.0	118	2.80	2.69	0.39	1.82	4.32	1.04	2.93	735

독립변수와 종속변수 분리

4.2. 배깅

독립변수(X)와 종속변수(y) 분리하기

```
1 wine_df = wine_df[wine_df['Class label'] != 1]
2 wine_df.head()
```

executed in 261ms, finished 19:35:40 2021-06-24

	Class label	Alcohol	Malic acid	Ash	Alcalinity of ash	Magnesium	Total phenols	Flavanoids	Nonflavanoid phenols	Proanthocyanins	Color intensity	Hue	OD280/OD315 of diluted wines	Proline
59	2	12.37	0.94	1.36	10.6	88	1.98	0.57	0.28	0.42	1.95	1.05	1.82	520
60	2	12.33	1.10	2.28	16.0	101	2.05	1.09	0.63	0.41	3.27	1.25	1.67	680
61	2	12.64	1.36	2.02	16.8	100	2.02	1.41	0.53	0.62	5.75	0.98	1.59	450
62	2	13.67	1.25	1.92	18.0	94	2.10	1.79	0.32	0.73	3.80	1.23	2.46	630
63	2	12.37	1.13	2.16	19.0	87	3.50	3.10	0.19	1.87	4.45	1.22	2.87	420

```
1 X = wine_df[['Alcohol', 'Hue']].values
2 y = wine_df['Class label'].values
```

executed in 11ms, finished 19:38:38 2021-06-24

```
1 X.shape, y.shape
```

executed in 9ms, finished 19:38:38 2021-06-24

```
((119, 2), (119,))
```

레이블인코딩 후 샘플링하기

```
1  from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
2  from sklearn.model_selection import train_test_split
3
4  le = LabelEncoder()
5  y = le.fit_transform(y)
6
7  train_X, test_X, train_y, test_y = train_test_split(X, y, test_size=0.4, random_state=1)
```

executed in 11ms, finished 19:38:38 2021-06-24

```
1  print(train_y)
2  print(test_y)
```

executed in 7ms, finished 19:38:40 2021-06-24

```
[0 0 0 1 0 0 1 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1 0 1 0 1 0 0 0 1 0 0
 0 0 0 1 0 1 1 1 0 1 0 0 0 0 1 0 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 1 0 1 0 1 0 1 0]
[1 0 0 1 1 0 0 1 0 1 1 1 0 1 1 0 1 1 0 0 1 0 1 1 0 1 0 0 1 1 0 0 0 0 0 0 0
 1 0 0 1 0 0 1 0 1 1 1]
```

의사결정나무 모형과 배깅 모형

```
1 from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
2 from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
3
4 tree = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', max_depth=None, random_state=1)
5 bag = BaggingClassifier(base_estimator=tree, n_estimators=500, bootstrap=True, bootstrap_features=False, random_state=1)
```

executed in 16ms, finished 20:02:19 2021-06-24

```
1 tree.fit(train_X, train_y)
```

executed in 19ms, finished 20:02:19 2021-06-24

```
DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', random_state=1)
```

```
1 tree.score(test_X, test_y)
```

executed in 9ms, finished 20:02:20 2021-06-24

```
0.8333333333333334
```

DT모형의 결과와 Bagging 모형의 결과를 비교하세요.

```
1 bag.fit(train_X, train_y)
```

executed in 657ms, finished 20:02:21 2021-06-24

```
BaggingClassifier(base_estimator=DecisionTreeClassifier(criterion='entropy',
                                                        random_state=1),
                  n_estimators=500, random_state=1)
```

```
1 bag.score(test_X, test_y)
```

executed in 59ms, finished 20:02:21 2021-06-24

```
0.8958333333333334
```

RandomForest

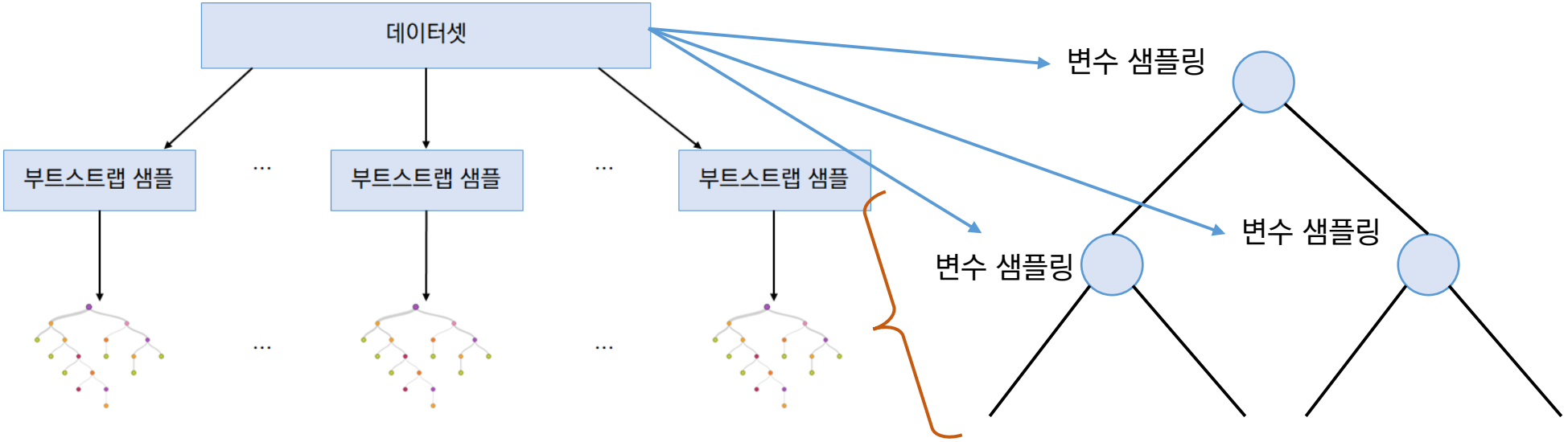
4.2. 배깅

부트스트랩을 이용하여 데이터를 샘플링하고 그 데이터를 바탕으로 의사결정나무 모델을 설정

+

의사결정나무 모델을 설정하는 과정에서 각 노드를 분류할 변수들도 샘플링

$\sqrt{p}(p = \text{변수개수})$ 만큼 선택



매번 다른 변수들로 노드에서 분류가 되므로 각각의 DT들에는 큰 차이가 있음

→ 더 나은 일반화 성능을 만족시킴

RandomForest

4.2. 배깅

```
1 from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
2 rf = RandomForestClassifier()
```

executed in 13ms, finished 00:05:00 2021-07-14

```
1 rf.fit(train_X, train_y)
```

executed in 141ms, finished 00:05:06 2021-07-14

```
RandomForestClassifier()
```

```
1 rf.score(test_X, test_y)
```

executed in 20ms, finished 00:05:13 2021-07-14

```
0.9166666666666666
```

의사결정나무 모형과 배깅 모형

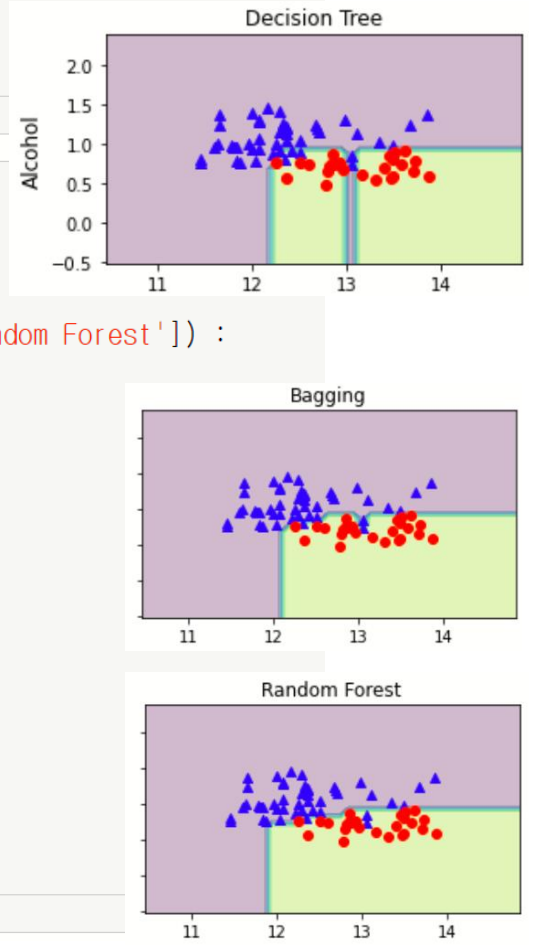
4.2. 배깅

```
1  import numpy as np
2
3  x_min, x_max = train_X[:,0].min()-1, train_X[:,0].max()+1
4  y_min, y_max = train_X[:,1].min()-1, train_X[:,1].max()+1
5  xx, yy = np.meshgrid(np.arange(x_min, x_max, 0.1), np.arange(y_min, y_max, 0.1))
```

executed in 18ms, finished 22:55:32 2021-07-13

```
1  import matplotlib.pyplot as plt
2
3  fig, axes = plt.subplots(nrows=1, ncols=3, sharex='col', sharey='row', figsize=(12,3))
4
5  for idx, model, title_txt in zip([0,1,2], [tree, bag, rf], ['Decision Tree', 'Bagging', 'Random Forest']) :
6      model.fit(train_X, train_y)
7
8      Z = model.predict(np.c_[xx.ravel(), yy.ravel()])
9      Z = Z.reshape(xx.shape)
10
11     axes[idx].contourf(xx, yy, Z, alpha=0.3)
12     axes[idx].scatter(train_X[train_y==0, 0], train_X[train_y==0, 1], c='blue', marker='^')
13     axes[idx].scatter(train_X[train_y==1, 0], train_X[train_y==1, 1], c='red', marker='o')
14     axes[idx].set_title(title_txt)
15
16 axes[0].set_ylabel('Alcohol', fontsize=12)
17 plt.text(10.2, -1.2, s='Hue', ha='center', va='center', fontsize=12)
18
19 plt.tight_layout()
20 plt.show()
```

executed in 1.27s, finished 00:07:17 2021-07-14



부스팅(Boosting)

여러 개의 알고리즘이 순차적으로 학습/예측을 하면서 이전에 학습한 알고리즘의 예측이 틀린 데이터를 올바르게 예측할 수 있도록, 다음 알고리즘에, 가중치를 부여하여 학습과 예측을 진행하는 방식

부스팅은 기본적으로 앙상블(Ensemble) 아이디어에서 Sequential이 추가된 형태

부스팅 알고리즘 종류

- AdaBoost
- GBM(Gradient Boosting Machine)
- XGBoost
- LightGBM
- CatBoost

AdaBoost

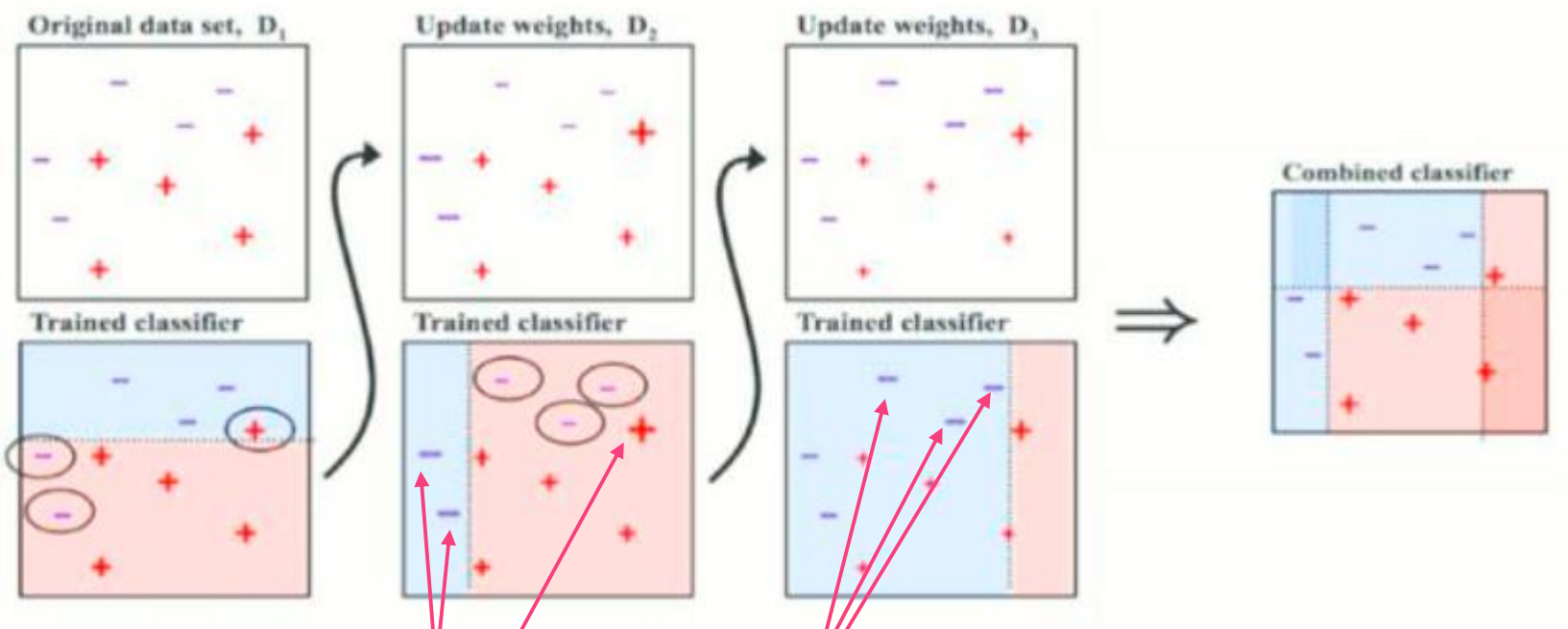
AdaBoost는 Adaptive Boosting를 줄여서 부르는 말로 관측치들에 가중치를 더하면서 동작을 함

분류하기 어려운 Instances에는 가중치를 더하고 이미 잘 분류되어진 (다루어진) Instances는 가중치를 덜 함

- 즉, 약한 학습기(weak learner)의 오류에 가중치를 더하면서 부스팅을 수행하는 알고리즘
- 약한 학습기(weak learner)로 의사 결정 트리(Decision Tree)를 사용

AdaBoost

Adaptive Boosting : 이진 분류기가 틀린 부분을 적응적으로(Adaptive) 바꿔가며 잘못 분류되는 데이터에 집중하도록 하는 것



동그라미 친 데이터는
틀린 데이터

-와 +가 가중치가
부여됨
(그림에서 커짐)

-에 가중치가 부여됨

Gradient Boosting Machine(GBM)

GBM은 AdaBoost처럼 앙상블에 이전까지의 오차를 보정하도록 예측기를 순차적(Sequential)으로 추가함

AdaBoost처럼 매 반복 마다 샘플의 가중치를 조정하는 대신에 이전 예측기가 만든 잔여 오차(Resudial Error)에 새로운 예측기를 학습시킴

- 가중치 업데이트를 **경사하강법(Gradient Descent)** 기법을 사용하여 최적화된 결과를 얻는 알고리즘
- Sequential + Additive Model
- 이전 모델의 Residual를 가지고 weak learn를 강화함
  즉, **Residual를 예측**하는 형태의 모델임

- 과적합(Overfitting) 이슈가 있음

AdaBoost 분류 모형


```
1 from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
2 abm = AdaBoostClassifier()
```

executed in 18ms, finished 23:05:48 2021-07-13

```
1 abm.fit(train_X, train_y)
```

executed in 83ms, finished 23:05:53 2021-07-13

```
AdaBoostClassifier()
```

```
1 abm.score(test_X, test_y)
```

executed in 22ms, finished 23:06:00 2021-07-13

```
0.8958333333333334
```

GradientBoosting

Gradient가 현재까지 학습된 분류기의 약점(weak)을 알려주고, 이후 모델이 그것을 중점으로 해서 보완을 하는 방식

```
1 from sklearn.ensemble import GradientBoostingClassifier
2 gbm = GradientBoostingClassifier()
```

executed in 13ms, finished 23:03:19 2021-07-13

```
1 gbm.fit(train_X, train_y)
```

executed in 54ms, finished 23:03:22 2021-07-13

```
GradientBoostingClassifier()
```

```
1 gbm.score(test_X, test_y)
```

executed in 14ms, finished 23:03:37 2021-07-13

```
0.8958333333333334
```

Gradient Boosting의 문제점

- 느리다.
- 과적합(overfitting) 우려가 있다.

eXtreme Gradient Boosting

- gbm보다 빠르다
- 과적합 방지가 가능한 규제가 포함되어 있다.
- CART(Classification And Regression Tree)를 기반으로 하므로 분류와 회귀 둘 다 가능하다.
- 조기종료(early stopping)을 제공한다.
- 앙상블 부스팅의 특징인 가중치 부여를 경사하강법(gradient descent)으로 한다.

LightGBM

LightGBM은 기존의 Tree 기반 알고리즘과는 다르게 동작함

Tree 기반 알고리즘인 XGBoost의 경우 **균형 트리 분할(Level Wise)** 방식을 사용했다면, LightGBM은 **리프 중심 트리 분할(Leaf Wise)** 방식을 사용함

- **Level Wise** 트리 분석은 균형을 잡아주어야 하기 때문에 Tree의 깊이(depth)가 줄어들고 연산이 추가되는 것이 단점이면,
- **Leaf Wise**은 트리의 균형을 맞추지 않고 **최대 손실 값(Max data loss)**를 가지는 leaf 노드를 지속적으로 분할하면서 Tree의 깊이(depth)가 깊어지고 비대칭적인 트리가 생성

최대 손실값을 가지는 leaf node를 반복할 수록 균형 트리 분할(Lever wise) 방식보다 예측 오류 손실을 최소화 할 수 있음

$$\hat{y} = \alpha * tree_A + \beta * tree_B + \gamma * tree_C \ \ldots$$

K개의 트리를 가지고 있음

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

$\hat{y}$: 예측 값

f_k : F 공간 안에서 k번째 $decision\ tree$

$$Obj = \boxed{\sum_{t=1}^{n} l(y_i, \hat{y}_i)} + \boxed{\sum_{k=1}^{K} \Omega(f_k)}$$

Training loss Regularization term

XGBoost 설치


```
(base) C:\Users\JK>pip install xgboost
Collecting xgboost
  Downloading xgboost-1.4.2-py3-none-win_amd64.whl (97.8 MB)
     |████████████████████████████████| 97.8 MB 37 kB/s
Requirement already satisfied: numpy in c:\users\jk\anaconda3\lib\site-packages (from xgboost) (1.19.5)
Requirement already satisfied: scipy in c:\users\jk\anaconda3\lib\site-packages (from xgboost) (1.6.2)
Installing collected packages: xgboost
Successfully installed xgboost-1.4.2

(base) C:\Users\JK>
```

xgboost 오류 발생할 경우 https://www.lfd.uci.edu/~gohlke/pythonlibs/#xgboost 에서 파이썬 버전에 맞는 whl 파일 다운받아 설치

pip install xgboost-1.4.2-cp38-cp38-win_amd64.whl

XGBoost 분류 모형


```
1  from xgboost import XGBClassifier
2  xgb = XGBClassifier()
```

executed in 13ms, finished 23:18:08 2021-07-13

```
1  xgb.fit(train_X, train_y, eval_metric='logloss')
```

executed in 62ms, finished 23:22:28 2021-07-13

...

```
1  xgb.score(test_X, test_y)
```

executed in 11ms, finished 23:22:33 2021-07-13

0.8958333333333334

전체 코드는 실습파일을 참고하세요.

XGBoost Parameters

- 학습 하이퍼파라미터
  - objective [기본설정값=reg:linear]: 지도학습 손실 최소화 함수를 정의
    - binary:logistic: 이항 분류 문제 로직스틱 회귀모형으로 반환값이 클래스가 아니라 예측 확률.
    - multi:softmax: 다항 분류 문제의 경우 소프트맥스(Softmax)를 사용해서 분류하는데 반환되는 값이 예측확률이 아니라 클래스임. 또한 num_class도 지정해야함.
    - multi:softprob: 각 클래스 범주에 속하는 예측확률을 반환함.
  - eval_metric: 설정한 objective별로 기본설정값이 지정되어 있음.
    - rmse: root mean square error
    - mae: mean absolute error
    - logloss: negative log-likelihood
    - error: Binary classification error rate (0.5 threshold)
    - merror: Multiclass classification error rate
    - mlogloss: Multiclass logloss
    - auc: Area under the curve
  - seed [기본설정값: 0]: 재현가능하도록 난수를 고정시킴.

참고 : https://statkclee.github.io/model/model-python-xgboost-hyper.html
https://xgboost.readthedocs.io/en/latest/parameter.html
https://www.analyticsvidhya.com/blog/2016/03/complete-guide-parameter-tuning-xgboost-with-codes-python/

XGBoost Parameters

4.3. 부스팅

- 일반 하이퍼 파라미터
  - booster: 의사결정 기반 모형(gbtree), 선형 모형(linear)
  - mthread: 병렬처리에 사용되는 코어수, 특정값을 지정하지 않는 경우 자동으로 시스템 코어수를 탐지하여 병렬처리에 동원함.
- 부스팅 하이퍼 파라미터
  - eta [기본설정값: 0.3]: GBM에 학습율과 유사하고 일반적으로 0.01 ~ 0.2 값이 사용됨
  - min_child_weight [기본설정값: 1]: 과적합(overfitting)을 방지할 목적으로 사용되는데, 너무 높은 값은 과소적합(underfitting)을 야기하기 때문에 CV를 사용해서 적절한 값이 제시되어야 한다.
  - max_depth [기본설정값: 6]: 과적합 방지를 위해서 사용되는데 역시 CV를 사용해서 적절한 값이 제시되어야 하고 보통 3-10 사이 값이 적용된다.
  - max_leaf_nodes: max_leaf_nodes 값이 설정되면 max_depth는 무시된다. 따라서 두값 중 하나를 사용한다.
  - max_delta_step [기본설정값: 0]: 일반적으로 잘 사용되지 않음.
  - subsample [기본설정값: 1]: 개별 의사결정나무 모형에 사용되는 임의 표본수를 지정. 보통 0.5 ~ 1 사용됨.
  - colsample_bytree [기본설정값: 1]: 개별 의사결정나무 모형에 사용될 변수갯수를 지정. 보통 0.5 ~ 1 사용됨.
  - lambda [기본설정값: 1]: 능선 회쉬(Ridge Regression)의 L2 정규화(regularization) 하이퍼 파라미터. 그다지 많이 사용되고 있지는 않음.
  - alpha [기본설정값: 0]: 라쏘 회귀(Lasso Regression)의 L1 정규화(regularization) 하이퍼 파라미터로 차원이 높은 경우 알고리즘 속도를 높일 수 있음.
  - scale_pos_weight [기본설정값: 1]: 클래스 불균형이 심한 경우 0보다 큰 값을 지정하여 효과를 볼 수 있음.

하이퍼 파라미터 탐색

4.3. 부스팅

```
1 from sklearn.model_selection import GridSearchCV
2 xgb_param_grid = {'max_depth': [3,5,7,9],
3                   'subsample': [0.4, 0.6, 0.8, 1.0]}
4 grid = GridSearchCV(estimator=xgb, param_grid=xgb_param_grid,
5                     scoring='roc_auc', n_jobs=-1, cv=5,
6                     refit=True, return_train_score=True)
```

executed in 7ms, finished 23:32:50 2021-07-13

```
1 grid.fit(train_X, train_y)
```

executed in 5.53s, finished 23:33:07 2021-07-13

...

```
1 grid_df = pd.DataFrame(grid.cv_results_)
```

executed in 16ms, finished 23:33:35 2021-07-13

```
1 grid_df.head()
```

executed in 37ms, finished 23:33:38 2021-07-13

	mean_fit_time	std_fit_time	mean_score_time	std_score_time	param_max_depth	param_subsample	params	split0_te
0	0.136756	0.057495	0.008997	0.007507	3	0.4	{'max_depth': 3, 'subsample':	

```
1 grid_df.loc[:, ['mean_test_score', 'params']]
```

executed in 25ms, finished 23:34:12 2021-07-13

	mean_test_score	params
0	0.962667	{'max_depth': 3, 'subsample': 0.4}
1	0.963556	{'max_depth': 3, 'subsample': 0.6}
2	0.959111	{'max_depth': 3, 'subsample': 0.8}
3	0.958222	{'max_depth': 3, 'subsample': 1.0}

```
1 grid_df[grid_df['rank_test_score'] == 1]
```

executed in 25ms, finished 23:34:51 2021-07-13

	mean_fit_time	std_fit_time	mean_score_time	std_score_time	p
1	0.048584	0.003665	0.005398	7.997037e-04	

Voting에 의한 앙상블의 앙상블

여러 모형을 사용해서 다수의 규칙에 투표해서 예측된 클래스의 레이블을 사용할 수 있음

	Model A	Model B	Model C	분류 결과
0/1 이진분류	1	0	1	1
	0	0	1	0
	1	1	0	1
	1	1	1	1

VotingClassifier

- VotingClassifier를 사용하면 여러 모형을 사용해서 다수의 규칙에 투표해서 예측된 클래스의 레이블을 사용할 수 있음

```
sklearn.ensemble.VotingClassifier(estimators,
        voting='hard', weights=None, n_jobs=None,
        flatten_transform=True)
```

voting : 문자열, 'hard' 또는 'soft', 기본값 'hard', 'hard'인 경우 다수의 규칙 투표에 예측된 클래스 레이블을 사용합니다. 'soft'인 경우 예측된 확률의 합 argmax를 기반으로 클래스 레이블을 예측하며 이것은 잘 보정된 분류모형의 앙상블에 권장됩니다. 예를 들면 어떤 데이터를 분류 예측할 경우 'hard'인 경우 분류모형 A, B, C가 이진분류(0 또는 1) 결과가 각각 0, 0, 1인 경우 그 결과는 0으로 분류되지만 'soft'인 경우 분류모형 A, B, C의 결과가 각각 (0.6, 0.4), (0.55, 0.45), (0.2, 0.8)이라면 각 결과의 합은 (1.35, 1.65)가 되어 1로 분류됩니다.

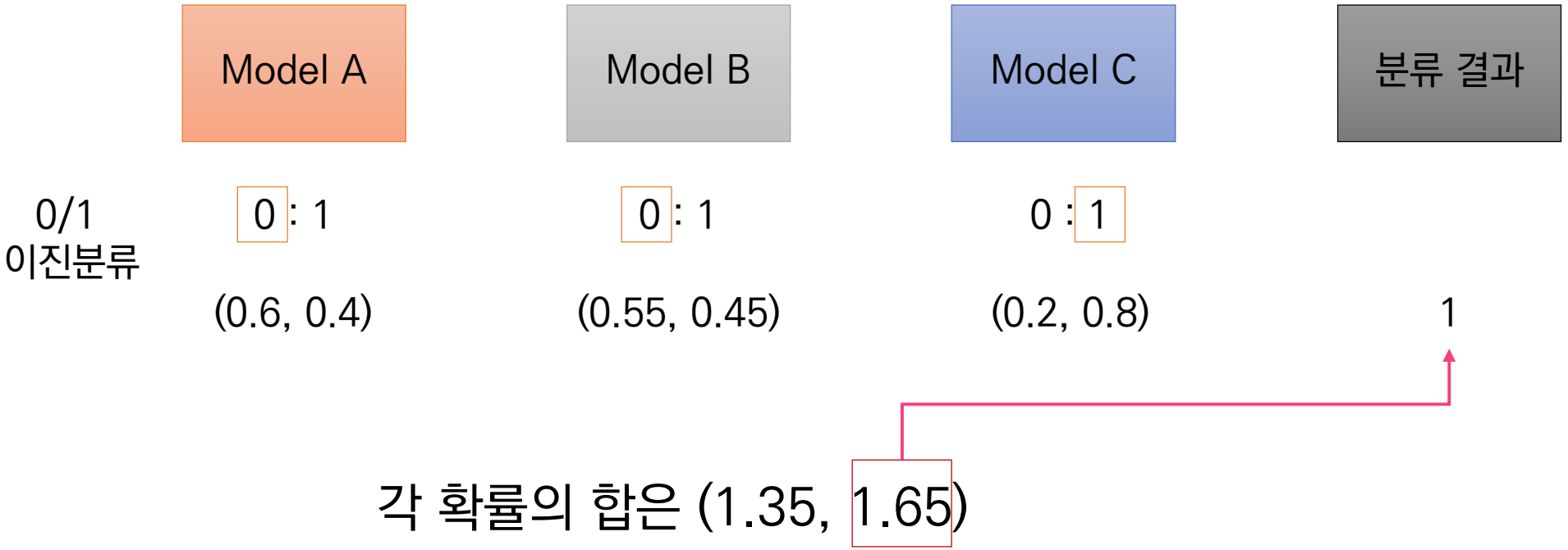
hard voting

다수의 규칙 투표에 예측된 클래스 레이블을 사용

	Model A	Model B	Model C	분류 결과
0/1 이진분류	1	0	1	1
	0	0	1	0
	1	1	0	1
	1	1	1	1

soft voting

분류할 확률의 총 합을 이용해서 결정함



VotingClassifier – hard


```
1  from sklearn.ensemble import VotingClassifier
2  voting_model = VotingClassifier(estimators=[("bagging", bag),
3                                               ("random forest", rf),
4                                               ("xgboost", xgb)],
5                                  voting="hard")
```

executed in 4ms, finished 00:19:27 2021-07-14

```
1  voting_model.fit(train_X, train_y)
```

executed in 778ms, finished 00:21:39 2021-07-14

...

```
1  voting_model.score(test_X, test_y)
```

executed in 68ms, finished 00:21:41 2021-07-14

0.9166666666666666

VotingClassifier – soft


```
1  voting_model = VotingClassifier(estimators=[("bagging", bag),
2                                              ("random forest", rf),
3                                              ("xgboost", xgb)],
4                                  voting="soft")
```

executed in 8ms, finished 00:23:17 2021-07-14

```
1  voting_model.fit(train_X, train_y)
```

executed in 771ms, finished 00:23:19 2021-07-14

...

```
1  voting_model.score(test_X, test_y)
```

executed in 73ms, finished 00:23:24 2021-07-14

0.875