목차 table of contents

1 프로젝트 소개

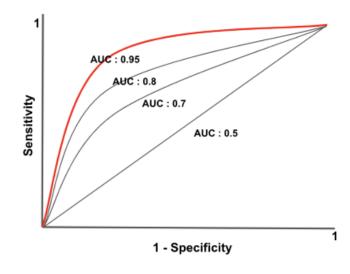
2 전체적인 알고리즘 구현

3 최종 발표 계획

1. 프로젝트 소개

- ★ Genetic Algorithm(GA)을 이용한 머신러닝 모델의 하이퍼파라미터 최적화(HPO)
- 데이콘 유저들의 행동 데이터를 활용
- 모델: RandomForest Classifier
- GA를 이용해 구한 하이퍼파라미터를 제출하여 스코어 비교
- Grid Search, Random Search, Optuna 등 다른 HPO Method와 비교





(0) 사용할 라이브러리 소개

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import roc_auc_score, accuracy_score, f1_score
import time
import warnings
warnings.filterwarnings('ignore')
pd.options.mode.chained_assignment = None
```

★ 라이브러리

• numpy: 데이터의 구조 변경 및 연산

• pandas: 데이터프레임 사용

• matplotlib : 시각화

• sklearn.ensemble의 RandomForestClassifier

: 랜덤포레스트 분류 모델 사용

• sklearn.metrics의 roc_auc_score, accuracy_score, f1_score

: 평가 지표 계산

• time : 실행 시간 계산

(1) 초기해 생성

```
def parameter_setting(params={}):
    try:
       rf_parameters = []
        if 'n_estimators' in params.keys():
            rf parameters.append(params['n estimators'])
           rf_parameters.append(np.arange(1, 1000))
        if 'criterion' in params.keys():
           rf_parameters.append(params['criterion'])
            rf_parameters.append(['gini', 'entropy'])
        if 'max_depth' in params.kevs():
            rf parameters.append(params['max depth'])
            rf_parameters.append(np.arange(2, 20))
        if 'min_samples_split' in params.keys():
            rf_parameters.append(params['min_samples_split'])
        else:
            rf parameters.append(2)
        if 'min_samples_leaf' in params.kevs():
            rf_parameters.append(params['min_samples_leaf'])
        else:
           rf_parameters.append(np.arange(1, 20))
        if 'min_weight_fraction_leaf' in params.keys():
            rf_parameters.append(params['min_weight_fraction_leaf'])
           rf_parameters.append(np.arange(0.0, 0.5, 0.02))
```

```
if 'max_features' in params.keys():
    | rf_parameters.append(params['max_features'])
    else:
    | rf_parameters.append(['sqrt', 'auto', 'log2', None])

if 'max_leaf_nodes' in params.keys():
    | rf_parameters.append(params['max_leaf_nodes'])
    else:
    | rf_parameters.append(None)

if 'min_impurity_decrease' in params.keys():
    | rf_parameters.append(params['min_impurity_decrease'])
    else:
    | rf_parameters.append(params['min_impurity_decrease'])
    else:
    | rf_parameters.append(params['bootstrap'])
    else:
    | rf_parameters.append([True, False])

return rf_parameters
except Exception as e:
    print("Exception parameter error:",e)
```

```
'n_estimators': [100, 300, 400, 600],
'criterion': ['gini', 'entropy'],
'max_depth': [None, 10, 20, 30, 40],
'min_samples_split' : [2, 4, 10],
'min_samples_leaf': [5,10, 15,30],
'min_weight_fraction_leaf': [0.0, 0.2],
'max_features':['auto','sqrt','log2',None],
'max_leaf_nodes':[None, 10, 20, 60],
'min_impurity_decrease':[0.0, 0.3],
'bootstrap': [True,False]
}
```

★ 초기해 생성에 필요한 함수

parameter_setting(params={})

: 입력 받는 각 하이퍼파라미터의 값(범위)를 딕셔너리 형태에서 리스트로 변경

★ 하이퍼파라미터(10개)

- n_estimators
- criterion
- max_depth
- min_samples_split
- min_samples_leaf

- min_weight_fraction_leaf
- max_features
- max_leaf_nodes

params = {

- min_impurity_decrease
- bootstrap

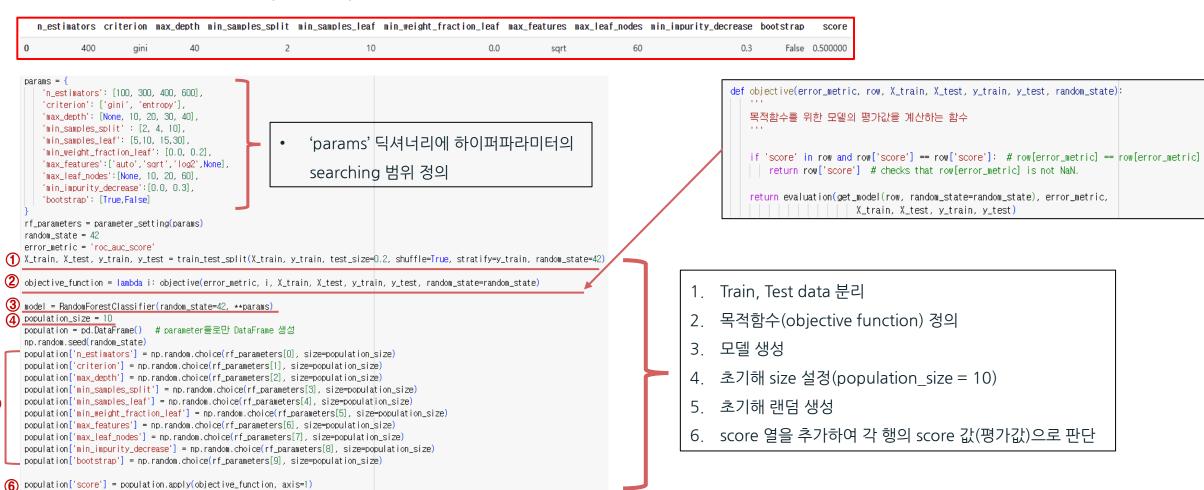
(1) 초기해 생성

def get_model(row, random_state):

```
★ 초기해 생성에 필요한 함수
   row: population의 row = 하이퍼파라미터 세트
                                                                                           get_model(row, random_state)
   random_state : 랜덤 고정 상수
                                                                                            : 각 row(하이퍼파라미터 세트)에 대한 모델을 return
   ** 각 row(하이퍼파라미터 세트)에 대한 모델을 return **
   return RandomForestClassifier(
                                                                                           evaluation(model, error metric, X train, X test, y train, y test)
          n_estimators = int(row[0]),
          criterion = row[1].
                                                                                            : 모델을 훈련시키고 예측을 수행한 후, 선택된 평가 지표를 사용하여 모델 성능을 평가
          \max depth = row[2].
          min_samples_split = int(row[3]),
                                                                                          model: 평가할 머신러닝 모델
          min_samples_leaf = int(row[4]),
          min_weight_fraction_leaf = float(row[5]),
                                                                                           error metric: 평가 지표
          \max_{f \in A} features = row[6],
          max_leaf_nodes = row[7],
                                                                                            ('accuracy score', 'f1 score', '<u>roc_auc_score</u>' 중 하나)
          min_impurity_decrease = float(row[8]),
          bootstrap = row[9].
                                                                                       ✓ X train, X test, y train, y test: 훈련 및 테스트 데이터
          random_state = random_state,
          n_{jobs} = -1
'def evaluation(model, error_metric, X_train, X_test, v_train, v_test);
   model.fit(X_train, y_train)
   predictions = model.predict(X_test)
   y_pred_proba = model.predict_proba(X_test)[:, 1]
   if error_metric == 'accuracy_score':
       eval = accuracy_score(y_test, predictions)
   elif error metric == 'f1 score':
       eval = f1_score(y_test, y_pred_proba, average='binary') # average = [None, 'micro', 'macro', 'samples', 'weighted', 'binary']
   elif error metric == 'roc auc score':
       eval = roc_auc_score(y_test, y_pred_proba, average='macro')  # average = [None, 'micro', 'macro', 'weighted']
   return eval
```

(1) 초기해 생성

★ 해표현: DataFrame의 열(column)을 하이퍼파라미터로 생성했을 때 <u>각 행 값을 갖는 모델</u>



(1) 초기해 생성

• 랜덤으로 생성된 10개의 초기해와 각 해의 평가값

popu	population										
	n_estimators	criterion	max_depth	min_samples_split	min_samples_leaf	min_weight_fraction_leaf	max_features	max_leaf_nodes	min_impurity_decrease	bootstrap	score
0	400	gini	40	2	10	0.0	sqrt	60	0.3	False	0.500000
1	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False	0.500000
2	100	gini	30	10	30	0.0	sqrt	60	0.3	False	0.500000
3	400	gini	10	10	15	0.0	auto	20	0.3	False	0.500000
4	400	entropy	30	10	30	0.2	sqrt	20	0.3	False	0.500000
5	600	gini	40	4	30	0.2	None	10	0.3	False	0.500000
6	100	entropy	None	10	5	0.0	None	None	0.3	False	0.500000
7	100	entropy	30	4	15	0.2	log2	60	0.3	False	0.500000
8	400	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	True	0.829825
9	300	gini	40	10	15	0.2	log2	60	0.0	False	0.658333

pairs = selection(population, random_state = 42)

(2) 선택 후 교배

- ★ 선택 함수(룰렛 휠 선택)
- selection(population, random_state)

: 높은 score를 가지는 parameter set가 높은 확률로 선택될 수 있도록 Roulette Wheel Selection

교배 시킬 Population쌍 DataFrame 생성

```
def selection(population, random_state = 42):
....

population : 전체 population
random_state : 랜덤 고정 상수

** 높은 score를 가지는 parameter set가 높은 확률로 선택될 수 있도록 Roulette
# 랜덤 시드 고정
np.random.seed(random_state)
# population 개수 저장
length = population.shape[0]
# 각 행의 score의 확률 계산
prob = population['score'] / population['score'].sum()
# 각 행의 score 확률에 기반해 랜덤 index 선택(size 개수만큼 선택)
indices = np.random.choice(np.arange(length), p=prob, size=length)

return population.iloc[indices]
```

	n_estimators	criterion	max_depth	min_samples_split	min_samples_leaf	min_weight_fraction_leaf	max_features	max_leaf_nodes	min_impurity_decrease	bootstrap	score
4	400	entropy	30	10	30	0.2	sqrt	20	0.3	False	0.500000
9	300	gini	40	10	15	0.2	log2	60	0.0	False	0.658333
8	400	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	True	0.829825
6	100	entropy	None	10	5	0.0	None	None	0.3	False	0.500000
1	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False	0.500000
1	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False	0.500000
0	400	gini	40	2	10	0.0	sqrt	60	0.3	False	0.500000
8	400	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	True	0.829825
6	100	entropy	None	10	5	0.0	None	None	0.3	False	0.500000
7	100	entropy	30	4	15	0.2	log2	60	0.3	False	0.500000

(2) 선택 후 교배

```
def crossover(pairs, random_state = 42):
   pairs : roughlette_wheel_selection으로 선택된 population 쌈
   random_state : 랜덤 고정 상수
   ** 전체 popuation을 기준으로 무작위 교차 **
   # 랜덤 시드 고정
   np.random.seed(random_state)
   # pairs의 행, 열 개수 저장
   length, width = pairs.shape
   # 열 개수 -1 --> 마지막 열 = 'score'이므로 score는 제외하고 교배
  width -= 1
   # 교배율X --> 0, 1을 각 parameter마다 랜덤 생성하여 새로운 배열의 자손 생성
   ## 0, 1을 전체 parameter 수 만큼 랜덤 생성
  a = np.random.choice((0, 1), size=length * width) (1)
   ## 교배(교차)를 시키기 위한 단계(짝수번째에 -1을 곱함)
   a[np.arange(1, length + width, 2)] += -1
   ## 새로운 배열을 생성할 인덱스 'i' 리스트 생성
   i = np.arange(length * width) + a
   # i 리스트를 이용하여 새로운 자손 생성
   ## score열을 제외하고 DataFrame을 flatten 시켜 1차원 배열로 생성
```

1차원 배열로 생성된 parameter 값들에 i 리스트에 해당하는 값들로 새롭게 저손 parameter 세트 생성 return pd.DataFrame(gene_list[i].reshape((-1, width), order='F'), columns=pairs.columns[:-1])

gene_list = np.array(pairs.drop('score', axis=1)),reshape(-1, order='F')

★ 교배 함수

crossover(pairs, random_state)

: 선택된 개체 쌍을 기반으로 무작위 교차를 수행하여 새로운 자손을 생성

score 열을 제외하여 교배

★ 교배 과정:

- 1. 각 parameter 마다 '0' 또는 '1'을 무작위로 생성
- 2. 무작위로 생성된 '0' 또는 '1'에 짝수 번째에만 '-1'을 곱함
- 3. 새로운 자손을 생성할 인덱스 리스트(i) 생성
- 4. parameter의 DataFrame을 1차워 배열로 변경하여 i 리스트에 맵핑하 여 교배된 새로운 자손 DataFrame 생성

(2) 선택 후 교배

- length = 10 (행 개수)
- width = 10 (열 개수)
- 생성할 배열의 길이(개수) = length × width = 100
- a: 무작위로 0 또는 1로 채워진 배열을 생성 후, 짝
 수 번째에 -1을 곱한 배열
- i: 0부터 99까지의 정수 배열을 생성하고, 'a'를 더한 새로운 배열 생성

(2) 선택 후 교배

```
gene_list = np.array(pairs.drop('score', axis=1)).reshape(-1, order='F')
gene_list
```

pd.DataFrame(gene_list[i].reshape((-1, width), order='F'), columns=pairs.columns[:-1])

- score 열을 제외한 하이퍼파라미터 값들을 1차워 배열로 저장
- 랜덤하게 선택된 하이퍼파라미터 값 출력

	n_estimators	criterion	max_depth	min_samples_split	min_samples_leaf	min_weight_fraction_leaf	max_features	max_leaf_nodes	min_impurity_decrease	bootstrap
0	300	entropy	30	10	30	0.2	sqrt	60	0.3	False
1	300	gini	40	10	15	0.2	sqrt	20	0.3	False
2	100	entropy	None	4	5	0.2	None	None	0.3	False
3	400	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	True
4	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False
5	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False
6	400	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	False
7	400	entropy	10	4	5	0.0	None	60	0.3	False
8	100	entropy	30	10	15	0.0	log2	60	0.3	False
9	100	entropy	None	4	5	0.0	None	60	0.3	False

- 앞에서 생성한 '' 배열을 맵핑시켜 교배
- 랜덤하게 교배된 새로운 자손 출력

(3) 돌연변이

```
def mutate(population, mutation_rate, rf_parameters, random_state):
   population : 돌연변이할 파라미터(자손)
   mutation_rate : 돌연변이뮬
   rf parameters : hyper-parameter 리스트
   random_state : 랜덤 고정 상수
   # children의 행, 열 개수 저장
   length, width = population.shape
   # 랜덤 시드 고정
   np.random.seed(random_state)
   # 전체 파라미터를 1차원 배열로 flatten
   pop_array = np.array(population).reshape(-1, order='F')
   # 돌연변이가 발생할 인덱스 리스트 생성
   change_indices = np.random.choice(
      np.arange(length * width),
      size = int(mutation_rate * length * width),
      replace = False
   # 돌연변이가 발생할 새 데이터 리스트 생성
   change_indices.sort()
   new_values = []
   for i in range(width):
      # change_indices에서 i번째 열에 해당하는 인덱스 범위 추출
      indices_in_column = change_indices[(i * length <= change_indices) & (change_indices < (i + 1) * length)]
      # print(f'indices_in_column: {indices_in_column}')
      # 해당 인덱스 수 만큼 랜덤 값을 선택하여 new_values에 추가
      new_values.extend(np.random.choice(rf_parameters[i], size=len(indices_in_column)))
   # 돌연변이가 발생할 랜덤 인덱스에 새 데이터로 업데이트(돌연변이)
   pop_array[change_indices] = new_values
   # mutants(return)는 자손에서 돌연변이 시킨 parameter DataFrame
   mutants = pd.DataFrame(pop_array.reshape((-1, width), order='F'))
   mutants.columns = population.columns
   return mutants
```

★ 돌연변이 함수

mutate(population, mutation_rate, rf_parameters, random_state)

: 교배로 생성된 자손을 돌연변이율에 따른 개수로 랜덤 돌연변이 수행

(3) 돌연변이

• 'children' 데이터 프레임을 1차원 배열로 변환

- 0부터 99까지의 숫자 중에서 20%에 해당하는 개수만큼의 숫자를 비복원 추출하여 change_indices에 저장
- 돌연변이율을 20%로 임의 지정

돌연변이 될 값의 인덱스(위치)

(3) 돌연변이

```
change indices.sort()
new values = []
for i in range(width):
   # change_indices에서 i번째 열에 해당하는 인덱스 범위 추출
   indices_in_column = change_indices[(i * length <= change_indices) & (change_indices < (i + 1) * length)]
   print(f'indices_in_column: {indices_in_column}')
   # 해당 인덱스 수 만큼 랜덤 값을 선택하여 new_values에 추가
   new_values.extend(np.random.choice(rf_parameters[i], size=len(indices_in_column)))
new_values
indices_in_column: [1 3 5]
indices_in_column: [15 16 19]
indices_in_column: [20 24 29]
indices_in_column: [31 35]
indices_in_column: [42 49]
                                          각 열에서 돌연변이 될 인덱스
indices_in_column: [51 53 56]
indices in column: [67]
indices_in_column: [78]
indices_in_column: [82]
indices in column: [98]
[300,
600,
600.
 'entropy'
 'entropy'
 'entropy'
20,
10,
30,
2,
                       돌연변이 된 값
 10,
 10.
5,
0.0.
0.0.
0.0,
 'sgrt',
 None,
0.3,
 True]
```

• 돌연변이 된 값으로 갱신

```
pop_array[change_indices] = new_values
pop_array
```

(3) 돌연변이

mutants = pd.DataFrame(pop_array.reshape((-1, width), order='F'))
mutants.columns = children.columns
mutants

	n_estimators	criterion	max_depth	min_samples_split	min_samples_leaf	min_weight_fraction_leaf	max_features	max_leaf_nodes	min_impurity_decrease	bootstrap
0	400	entropy	20	10	30	0.2	sqrt	60	0.3	False
1	300	gini	40	2	15	0.0	log2	20	0.3	False
2	400	entropy	None	10	10	0.2	None	10	0.3	False
3	600	entropy	10	4	5	0.0	None	10	0.0	True
4	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False
5	600	entropy	10	10	15	0.0	auto	None	0.3	False
6	400	entropy	10	4	5	0.0	None	10	0.0	True
7	400	gini	40	4	5	0.2	sqrt	60	0.0	False
8	100	entropy	30	10	15	0.0	log2	None	0.3	True
9	100	entropy	30	4	5	0.2	None	None	0.3	False

- 데이터프레임으로 변환
- 'mutants'는 'children'에서 돌연변이 시킨 DataFrame

mutants = mutate(children, mutation_rate = 0.2, rf_parameters = rf_parameters, random_state = 42)
mutants

- ★ 함수 사용
- children(자손)의 DataFrame을 돌연변이 처리

(4) Population 갱신

- population에 children과 mutants를 추가하고 children의 열을 기준으로 중복 행 제거
- 새로 추가된 parameter 세트의 score 값은 NaN

population에 children과 mutants를 추가하고 children의 열을 기준으로 중복 행 제거 population = pd.concat([population, children, mutants], ignore_index=True, sort=False).drop_duplicates(subset=children.columns)

	n_estimators	criterion	max_depth	min_samples_split	min_samples_leaf	min_weight_fraction_leaf	max_features	max_leaf_nodes	min_impurity_decrease	bootstrap	score
0	400	gini	40	2	10	0.0	sqrt	60	0.3	False	0.500000
1	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False	0.500000
2	100	gini	30	10	30	0.0	sqrt	60	0.3	False	0.500000
3	400	gini	10	10	15	0.0	auto	20	0.3	False	0.500000
4	400	entropy	30	10	30	0.2	sqrt	20	0.3	False	0.500000
5	600	gini	40	4	30	0.2	None	10	0.3	False	0.500000
6	100	entropy	None	10	5	0.0	None	None	0.3	False	0.500000
7	100	entropy	30	4	15	0.2	log2	60	0.3	False	0.500000
8	400	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	True	0.829825
9	300	gini	40	10	15	0.2		60	0.0	False	0.658333
10	400	entropy	40	10	30		sqrt	60	0.3	False	NaN
11	400	gini	40	10	15	0.2	log2	20	0.3	False	NaN
12	400	entropy	None	10	5			10	0.0	False	NaN
13	100	entropy	10	4	5	0.2		10	0.0	True	NaN
17	400	gini	40	4	5			60	0.0	False	NaN
18	100	entropy	30	10	15	0.0	log2	None	0.3	False	NaN
19	100	entropy	None	4	5			None	0.3	False	NaN
20	400	entropy	40	10	30	0.2		20	0.3	False	NaN
21	400	gini	40	2	15		-	20	0.3	False	NaN
22	400	gini	None	10	5	0.2		10	0.0	False	NaN
23	100	entropy	10	4	5			None	0.0		NaN
24	100	gini	10	2	10			None	0.3	False	NaN
25	600	gini	10	2	5			None	0.3	False	NaN
26	400	entropy	10	4	5	0.2		60	0.0	True	NaN
28	100	gini	30	10	15		-	None	0.3	False	NaN
29	100	entropy	None	10	5	0.2	None	None	0.3	False	NaN

• 새로 추가된 parameter 세트에 대해서만 score 계산

U	400	gini	40	2	10	0.0	sqrt	60	0.3	Faise	0.500000
1	600	gini	10	2	15	0.0	auto	None	0.3	False	0.500000
2	100	gini	30	10	30	0.0	sqrt	60	0.3	False	0.500000
3	400	gini	10	10	15	0.0	auto	20	0.3	False	0.500000
4	400	entropy	30	10	30	0.2	sqrt	20	0.3	False	0.500000
5	600	gini	40	4	30	0.2	None	10	0.3	False	0.500000
6	100	entropy	None	10	5	0.0	None	None	0.3	False	0.500000
7	100	entropy	30	4	15	0.2	log2	60	0.3	False	0.500000
8	400	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	True	0.829825
9	300	gini	40	10	15	0.2	log2	60	0.0	False	0.658333
10	400	entropy	40	10	30	0.2	sqrt	60	0.3	False	0.500000
11	400	gini	40	10	15	0.2	log2	20	0.3	False	0.500000
12	400	entropy	None	10	5	0.2	None	10	0.0	False	0.734211
13	100	entropy	10	4	5	0.2	None	10	0.0	True	0.829825
17	400	gini	40	4	5	0.2	None	60	0.0	False	0.734211
18	100	entropy	30	10	15	0.0	log2	None	0.3	False	0.500000
19	100	entropy	None	4	5	0.2	None	None	0.3	False	0.500000
20	400	entropy	40	10	30	0.2	sqrt	20	0.3	False	0.500000
21	400	gini	40	2	15	0.2	log2	20	0.3	False	0.500000
22	400	gini	None	10	5	0.2	None	10	0.0	False	0.734211
23	100	entropy	10	4	5	0.2	None	None	0.0	True	0.829825
24	100	gini	10	2	10	0.0	auto	None	0.3	False	0.500000
25	600	gini	10	2	5	0.0	auto	None	0.3	False	0.500000
26	400	entropy	10	4	5	0.2	None	60	0.0	True	0.829825
28	100	gini	30	10	15	0.0	log2	None	0.3	False	0.500000
29	100	entropy	None	10	5	0.2	None	None	0.3	False	0.500000

(4) Population 갱신

• score 기준으로 내림차순 정렬하여 population_size(=10) 수 만큼 population 갱신 -> 좋은 population을 다음 세대에 보내줌

score 기준 내림차순 정렬 후 population_size 수 만큼만 새롭게 갱신 population = population.sort_values(by=['score'], ascending=False).iloc[:populat|ion_size] population n_estimators criterion max_depth min_samples_split min_samples_leaf min_weight_fraction_leaf max_features max_leaf_nodes min_impurity_decrease bootstrap 13 10 0.2 10 0.0 True 0.829825 100 None entropy 26 400 10 0.2 60 0.0 True 0.829825 None entropy 23 10 0.2 True 0.829825 100 entropy None None 5 8 400 10 0.2 10 True 0.829825 entropy None 0.0 22 400 10 5 0.2 10 0.0 False 0.734211 gini None None 10 5 False 0.734211 12 400 0.2 10 0.0 entropy None None 5 0.2 False 0.734211 17 400 gini 40 None 60 0.0 9 300 gini 40 10 15 0.2 log2 60 0.0 False 0.658333 10 15 0.0 log2 0.3 False 0.500000 100 30 None entropy 28 100 30 10 15 0.0 log2 None 0.3 False 0.500000 gini

(5) Best Parameter Set 반환

```
# score가 가장 높은 parameter 세트를 반환
output_score = []
output_params = population.iloc[0]
# output_params[error_metric] = round(output_params['score'], 2)
output_score.append(output_params['score'])
output_params.drop('score', inplace=True)
print(output_score)
output_params
```

[0.8298245614035088]

n_estimators	100
criterion	entropy
max_depth	10
min_samples_split	4
min_samples_leaf	5
min_weight_fraction_leaf	0.2
max_features	None
max_leaf_nodes	10
min_impurity_decrease	0.0
bootstrap	True
Name: 13, dtype: object	

반환된 Best Parameter Set

(6) GA_HPO Optimizer 클래스 구현

```
class optimizer():
   def __init__(self):
     self.output_score = []
   def best_estimator(self, X_train, X_test, y_train, y_test, rf_parameters, error_metric, population_size,
        number_of_generation, mutation_rate, random_state=42):
       -X_train, X_test, y_train, y_test : X, y⊆| train, test data (**DataFrame)
       rf parameters : 모델에 최적화할 파라미터 (범위) 입력
       rf_parameters = {'n_estimators': [2,3,4,....1000],
            'max_features': ['sgrt', 'auto', 'log2', None],
           'min_samples_leaf': [2,3,4,5,6,.....16],
           'max depth': [2.3.4.5.6.....20].
           'criterion': ['gini', 'entropy'],
           'oob_score': [True, False]
       error metric : 평가 지표
       population_size :초기해 크기
       number_of_generation : 최대 세대수
       mutation_rate : 돌연변이율
       random_state : 랜덤 고정 상수
       # ----- Model function
       ## i라는 row에 대한 평가값을 계산하는 목적 함수.
       objective_function = lambda i: self.objective(error_metric, i, X_train, X_test, y_train, y_test,
       population = pd.DataFrame() # parameter들로만 DataFrame 생성
       np.random.seed(random_state)
       population['n_estimators'] = np.random.choice(rf_parameters[0], size=population_size)
       population['criterion'] = np.random.choice(rf_parameters[1], size=population_size)
       population['max_depth'] = np.random.choice(rf_parameters[2], size=population_size)
       population['min_samples_split'] = np.random.choice(rf_parameters[3], size=population_size)
       population['min_samples_leaf'] = np.random.choice(rf_parameters[4], size=population_size)
       population['min_weight_fraction_leaf'] = np.random.choice(rf_parameters[5], size=population_size)
       population['max_features'] = np.random.choice(rf_parameters[6], size=population_size)
       population['max leaf nodes'] = np.random.choice(rf parameters[7], size=population size)
       population['min_impurity_decrease'] = np.random.choice(rf_parameters[8], size=population_size)
       population['bootstrap'] = np.random.choice(rf parameters[9], size=population size)
       population['score'] = population.apply(objective_function, axis=1)
```

```
self.output_score = []
  for g in range(number of generation):
     # 부모 쌍 생성
     pairs = self.selection(population, random state)
     # 교배로 자손 생성
     children = self.crossover(pairs, random_state)
     if 'score' in children.columns:
        children.drop('score', axis=1, inplace=True)
     # 돌연변이 시행
     mutants = self.mutate(children, mutation_rate, rf_parameters, random_state)
     # 자손과 돌연변이를 population에 추가 후 자손의 열을 기준으로 중복되는 값 제거하여 population Update
     population = pd.concat([population, children, mutants], ignore index=True, sort=False), drop duplicates(subset=children.columns)
     # 새롭게 추가된 population에 대해서 평가
     # population.loc[:, error_metric] = population.apply(objective_function, axis=1)
     population.loc[population['score'].isna(), 'score'] = population[population['score'].isna()].apply(objective_function, axis=1)
     # population을 score 기준으로 내림차순 정렬
     population = population.sort_values(by=['score'], ascending=False).iloc[:population_size]
     # 가장 좋은 parameter 세트 선택
     output params = population.iloc[0]
     # output_params[error_metric] = round(output_params['score'], 2)
     self.output_score.append(output_params['score'])
     output_params.drop('score', inplace=True)
  return [self.get_model(population.loc[population['score'].idxmax()]), output_params]
# 룰렛 휠 선택
def selection(self, population, random state):
    population : 전체 population
    random state : 랜덤 고정 상수
   ** 높은 score를 가지는 parameter set가 높은 확률로 선택될 수 있도록 Roulette Wheel Selection **
    # 랜덤 시드 고정
    np.random.seed(random_state)
    # population 개수 저장
    length = population.shape[0]
    # 각 행의 score의 확률 계산
    prob = population['score'] / population['score'].sum()
    # 각 행의 score 확률에 기반해 랜덤 index 선택(size 개수만큼 선택)
    indices = np.random.choice(np.arange(length), p=prob, size=length)
    return population.iloc[indices]
```

(6) GA_HPO Optimizer 클래스 구현

```
def crossover(self, pairs, random_state):
  pairs : roughlette_wheel_selection으로 선택된 population 쌍
  random_state : 랜덤 고정 상수
  ** 전체 popuation을 기준으로 무작위 교차 **
  # 랜덤 시드 고정
  np.random.seed(random_state)
  # pairs의 행, 열 개수 저장
  length, width = pairs.shape
  # 열 개수 -1 --> 마지막 열 = 'score'이므로 score는 제외하고 교배
  # 교배율X --> (0, 1)을 각 parameter마다 랜덤 생성하여 새로운 배열의 자손 생성
  ## 0. 1을 전체 parameter 수 만큼 랜덤 생성
  a = np.random.choice((0, 1), size=length * width)
  ## 교배(교차)를 시키기 위한 단계(짝수번 째에 -1을 곱함)
  a[np.arange(1, length * width, 2)] *= -1
  ## 새로운 배열을 생성할 인덱스 '1' 리스트 생성
  i = np.arange(length * width) + a
  # i 리스트를 이용하여 새로운 자손 생성
  ## score열을 제외하고 DataFrame을 flatten 시켜 1차원 배열로 생성
  gene_list = np.array(pairs.drop('score', axis=1)).reshape(-1, order='F')
  ## 1차원 배열로 생성된 parameter 값들에 i 리스트에 해당하는 값들로 새롭게 자손 parameter 세트 생성
  return pd.DataFrame(gene_list[i].reshape((-1, width), order-'F'), columns-pairs.columns[:-1])
```

```
def mutate(self, population, mutation_rate, rf_parameters, random_state):
  mutation_rate : 돌연변이율
  rf_parameters : hyper-parameter 리스트
  random_state : 랜덤 고정 상수
  ** 돌연변이뮬에 따라 population 돌연변이 **
  # children의 행, 열 개수 저장
  length, width = population.shape
  # 랜덤 시드 고정
  np.random.seed(random_state)
  # 전체 파라미터를 1차원 배열로 flatten
  pop_array = np.array(population).reshape(-1, order='F')
  # 돌연변이가 발생할 인덱스 리스트 생성
  change_indices = np.random.choice(
     np.arange(length * width),
     size = int(mutation_rate + length + width),
     replace = False)
  # 돌연변이가 발생할 새 데이터 리스트 생성
  change_indices.sort()
  new_values = []
   for i in range(width):
      # change_indices에서 i번째 열에 해당하는 인덱스 범위 추출
      indices_in_column = change_indices[(i + length <= change_indices) & (change_indices < (i + 1) + length)]
      # 해당 인덱스 수 만큼 랜덤 값을 선택하여 new_values에 추가
      new_values.extend(np.random.choice(rf_parameters[i], size=len(indices_in_column)))
  # 돌연변이가 발생할 랜덤 인덱스에 새 데이터로 업데이트(돌연변이)
  pop_array[change_indices] = new_values
  # mutants(return)는 자손에서 돌연변이 시킨 parameter DataFrame
  mutants = pd.DataFrame(pop_array.reshape((-1, width), order='F'))
  mutants columns = population columns
return mutants
```

```
# 모델 return
def get model(self, row, random state=42);
   row : 평가값이 가장 좋은 population의 row
    random_state : 랜덤 고정 상수
    ** best hyper-parameter를 갖는 모델을 return **
    return RandomForestClassifier(
      n estimators = int(row[0])
       criterion = row[1].
       max_depth = row[2]
       min_samples_split = int(row[3]),
       min_samples_leaf = int(row[4]),
       min_weight_fraction_leaf = float(row[5]),
       max features = row[6].
       max_leaf_nodes = row[7].
       min_impurity_decrease = float(row[8]),
       bootstrap = row[9]
       random_state = random_state,
       n_{jobs} = -1)
# 평가값 계산
def evaluation(self, model, error_metric, X_train, X_test, y_train, y_test)
    model.fit(X_train, y_train)
   # predictions = model.predict(X_test)
   y_pred_proba = model.predict_proba(X_test)[:, 1]
    if error_metric == 'accuracy_score':
      eval = accuracy score(v test, v pred proba)
    elif error metric -- 'fl score'
      eval = f1_score(y_test, y_pred_proba, average='micro')
    elif error metric == 'roc auc score'
      eval = roc_auc_score(y_test, y_pred_proba, average='macro') # average = [None, 'micro', 'macro', 'weighted']
 # objective function에 적용되는 평가값 계산하여 반환
 def objective(self, error_metric, row, X_train, X_test, y_train, y_test, random_state):
     ** score를 계산 **
     if 'score' in row and row['score'] == row['score']: # row[error_metric] == row[error_metric]
       return row['score']
     return self.evaluation(self.get_model(row, random_state=random_state), error_metric,
        X_train, X_test, y_train, y_test)
 def get_output_score(self):
return self.output_score
```

(7) RandomForest Classifier_HPO 함수 구현

```
def optimize_rfc(X_train, X_test, y_train, y_test, params = {}, error_metric = 'roc_auc_score', population_size = 50,
                number_of_generation = 10, mutation_rate = 0.05, random_state = 42):
    trv:
        rf_parameters = []
        if 'n_estimators' in params.keys():
            rf_parameters.append(params['n_estimators'])
        else:
            rf_parameters.append(np.arange(1, 1000))
       if 'criterion' in params.keys():
            rf_parameters.append(params['criterion'])
        else:
            rf_parameters.append(['gini', 'entropy'])
        if 'max_depth' in params.kevs():
            rf_parameters.append(params['max_depth'])
        else:
            rf_parameters.append(np.arange(2, 20))
       # min_samples_split 구현
       if 'min_samples_split' in params.kevs():
            rf_parameters.append(params['min_samples_split'])
        else:
            rf_parameters.append(2)
        if 'min_samples_leaf' in params.keys():
            rf_parameters.append(params['min_samples_leaf'])
        else:
            rf_parameters.append(np.arange(1, 20))
```

★ RandomForest Classifier_HPO 함수

- optimize_rfc(X_train, X_test, y_train, y_test, params = {}, error_metric
 = 'roc_auc_score', population_size = 50, number_of_generation = 10,
 mutation_rate = 0.05, random_state = 42)
 - : RandomForest Classifier의 하이퍼파라미터를 최적화하여 최적화된 모델과 최적 하이퍼파라미터 출력

(7) RandomForest Classifier_HPO 함수 구현

```
# min_weight_fraction_leaf 구현
if 'min_weight_fraction_leaf' in params.keys():
    rf_parameters.append(params['min_weight_fraction_leaf'])
else:
    rf_parameters.append(np.arange(0.0, 0.5, 0.02))
if 'max_features' in params.keys():
    rf_parameters.append(params['max_features'])
else:
    rf_parameters.append(['sqrt', 'auto', 'log2', None])
# max_leaf_nodes 구현
if 'max_leaf_nodes' in params.keys():
    rf_parameters.append(params['max_leaf_nodes'])
else:
    rf_parameters.append(None)
# min_impurity_decrease 구현
if 'min_impurity_decrease' in params.keys():
    rf_parameters.append(params['min_impurity_decrease'])
else:
    rf_parameters.append(np.arange(0.0, 1.0, 0.05))
# bootstrap 구현
if 'bootstrap' in params.keys():
    rf_parameters.append(params['bootstrap'])
else:
    rf_parameters.append([True, False])
```

(8) 알고리즘 검증

```
start_time = time.time()
train = pd.read_csv('/content/drive/MyDrive/지능형알고리즘/dataset/train.csv')
X = train.drop(['person_id', 'login'], axis=1)
y = train['login']
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y, test_size=0.2,
                                                    shuffle = True, stratify = y, random_state=42)
# params = {
      'n_estimators': [100, 300, 600, 800, 850, 900, 950, 1000],
      'criterion': ['gini', 'entropy'],
      'max_depth': [1, 10, 20, 35, 50],
      'min_samples_split' : [2, 10, 20, 30],
      'min_samples_leaf': [5,30,50].
      'min_weight_fraction_leaf': [0.0, 0.2,0.35,0.5],
      'max_features':['auto','sqrt','log2',],
      'max_leaf_nodes':[10, 60, 100].
      'min_impurity_decrease':[0.0, 0.3, 0.5],
      'bootstrap': [True.False]
# param_search_space = {
      'n_estimators': [10, 50, 100,150,200,250,300,350,400,450,500,550,600,650,700,750.800.850.900.950.1000]
      'critertion': ['gini', 'entropy'],
      'max_depth': [None, 1,5,10,15,20,25,30,35,40,45,50],
      'min_samples_split' : [2,4,6,8,10,12,14,16,18,20,22,24,26,28,30],
      'min_samples_leaf': [1, 5,10,15,20,25,30,35,40,45,50],
      'min_weight_fraction_leaf': [0.0, 0.1,0.15,0.2,0.25,0.3,0.35,0.4,0.45,0.5]
      'max_features':['auto','sqrt','log2',None],
      'max_leaf_nodes':[None,10,20,30,40,50,60,70,80,90,100].
      'min_impurity_decrease':[0.0, 0.1,0.15,0.2,0.25,0.3,0.35,0.4,0.45,0.5],
      'bootstrap': [True,False]
```

- 최적의 랜덤 포레스트 모델 탐색
- optimize_rfc 함수를 호출
 - -> 다양한 하이터파라미터 값에 대한 모델 평가, 모델과 하이퍼파라미터 값 반환
- 평가지표: AUC(Area Under the ROC Curve)
- 매 세대마다 가장 좋은 score를 시각화

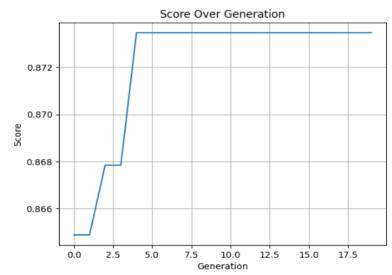
실제 성능 비교에 사용할 parameter search 범위

(8) 알고리즘 검증

★ 주어진 데이터에 대해 RandomForest Classifier 모델의 최적 하이퍼파라미터 탐색, 실행시간 측정 -> 모델 출력, 평가값 도출

최대 세대수 = 20, 초기해 수 = 50, 돌연변이율 = 0.1

```
params = {
    'n_estimators': [100, 300, 400, 600],
    'criterion': ['gini', 'entropy'].
    'max_depth': [None, 10, 20, 30, 40],
    'min_samples_split' : [2, 4, 10],
                                                   실험 parameter search 범위
    'min_samples_leaf': [5,10, 15,30],
    'min_weight_fraction_leaf': [0.0, 0.2].
    'max_features':['auto','sqrt','log2',None],
    'max_leaf_nodes':[None, 10, 20, 60],
    'min_impurity_decrease':[0.0, 0.3],
    'bootstrap': [True,False]
model, hyp_param = optimize_rfc(X_train=X_train, y_train=y_train, y_test=y_test, X_test=X_test,
                                params=params, number_of_generation=20, population_size=50,
                                error_metric='roc_auc_score', mutation_rate=0.1, random_state = 42)
end_time = time.time()
print(hvp_param)
print(end_time - start_time)
```



n_estimators	100	
criterion	entropy	
max_depth	30	
min_samples_split	4	
min_samples_leaf	15	
min_weight_fraction_leaf	0.0	
max_features	None	
max_leaf_nodes	10	
min_impurity_decrease	0.0	
bootstrap	True	
Name: O, dtype: object		
468.52419686317444		

model

RandomForestClassifier

```
y_pred_proba = model.predict_proba(X_test)[:, 1]
# predictions = model.predict(X_test)
auc_score = roc_auc_score(y_test, y_pred_proba, average='macro')
auc_score
```

0.8734645552760102

3. 최종 발표 계획

- ◆ <u>다양한 초기해, 최대 세대수를 설정</u>하여 실험 수행
- ◆ Grid Search, Random Search, Optuna 등 다른 HPO Method로 도 출한 결과와 비교
- ◆ GA_HPO로 도출한 최적 하이퍼파라미터를 DACON Competition에 제출하여 private score 비교 및 리더보드 확인

감사합니다. Q&A