



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

1절. 변수 선택과 차원축소

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)

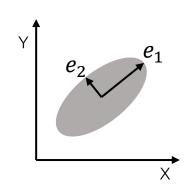
1절. 변수 선택과 차원축소

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

$$\begin{split} c &= \begin{pmatrix} \cos(x,x)\cos(x,y) \\ \cos(x,y)\cos(y,y) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \frac{1}{n}\sum(x_i - m_x)^2 & \frac{1}{n}\sum(x_i - m_x)(y_i - m_y) \\ \frac{1}{n}\sum(x_i - m_x)(y_i - m_y) & \frac{1}{n}\sum(y_i - m_y)^2 \end{pmatrix} \end{split}$$



# 주성분 분석(PCA, Principal Component Analysis)

1절. 변수 선택과 차원축소

```
import seaborn as sns
from sklearn.decomposition import PCA
iris = sns.load_dataset("iris")
iris_X, iris_y = iris.iloc[:,:-1], iris.species

pca = PCA(n_components=2)
iris_pca = pca.fit_transform(iris_X)
```

### 주성분 분석

1절. 변수 선택과 차원축소

```
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]
                                   각각의 주성분 벡터가 이루는 축에 투
1 pca.explained_variance_
                                   영(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

plt.figure(figsize=(12,10))

plt.show()

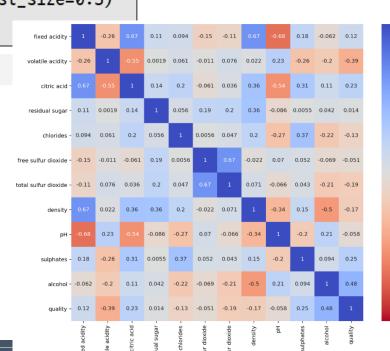
sns.heatmap(redwine.corr(), annot=True,

1절. 변수 선택과 차원축소

```
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
```

vmin=-1, vmax=1, cmap="coolwarm\_r")

각 변수들끼리의 상관관계를 확인 하고 시각화 해서 종속변수와 상관 관계가 높은 변수들만 선택



## 분류모형의 Feature Importance

1절. 변수 선택과 차원축소

● 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)
```

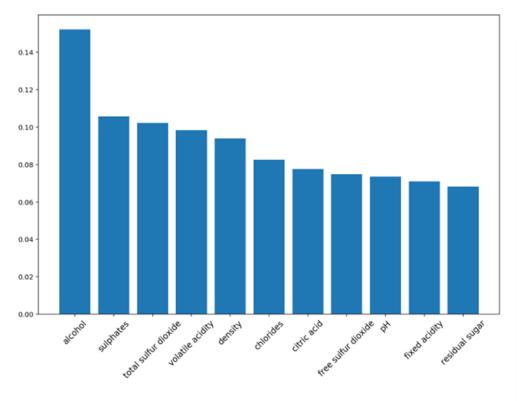
features.sort\_values(by="importance", ascending=False, inplace=True)
features.reset\_index(drop=True, inplace=True)
features

	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

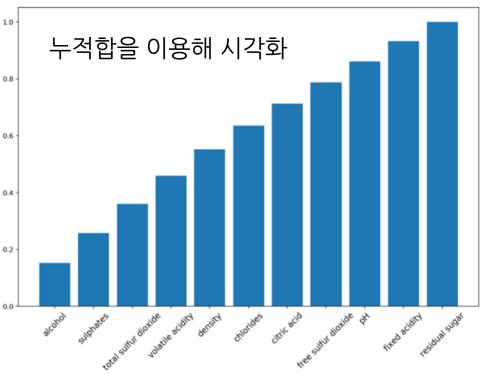
# feature\_importances\_를 이용한 변수 중요도 시각화

1절. 변수 선택과 차원축소

```
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)

1절. 변수 선택과 차원축소

### imp df.loc[imp\_df.cum\_sum <= 0.9]</pre>

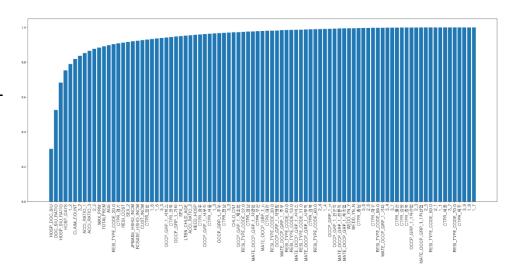
	variable	importance	cum_sum
57	HOSP_DOC_SIU	0.30264	0.30264
55	DOC_SIU_RATIO	0.223687	0.526327
56	HOSP_SIU_RATIO	0.156792	0.683118
52	HOSP_DAYS	0.0705903	0.753709
62	1_2	0.0359992	0.789708
54	CLAIM_COUNT	0.0287546	0.818462
76	3_2	0.0178182	0.836281
58	ACCI_RATIO_1	0.0162699	0.85255
60	ACCI_RATIO_3	0.0128517	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

### imp\_df.loc[imp\_df.cum\_sum <= 0.98]</pre>

	variable	importance	cum_sum				
57	HOSP_DOC_SIU	0.30264	0.30264	79	3_5	0.00293687	0.939137
55	DOC_SIU_RATIO	0.223687	0.526327	36	OCCP_GRP_1_서비스	0.00290774	0.942045
56	HOSP_SIU_RATIO	0.156792	0.683118	28	CTPR_전북	0.00275861	0.944804
52	HOSP_DAYS	0.0705903	0.753709	34	OCCP_GRP_1_기타	0.00271893	0.947523
62	1_2	0.0359992	0.789708	3	SEX_1	0.00269921	0.950222
54	CLAIM_COUNT	0.0287546	0.818462	2	LTBN_CHLD_AGE	0.00246022	0.952682
76	3_2	0.0178182	0.836281	59	ACCI_RATIO_2	0.00243463	0.955117
58	ACCI_RATIO_1	0.0162699	0.85255	53	HEED_HOSP	0.00213998	0.957257
60	ACCI_RATIO_3	0.0128517	0.865402	19	CTPR_광주	0.00209687	0.959353
70	2_2	0.0112797	0.876682	35	OCCP GRP 1 사무직	0.00204848	0.961402
85	MAX_PRM	0.0075201	0.884202	23	CTPR_서울	0.00195838	0.96336
84	TOTALPREM	0.0068085	0.891011	63	1.3	0.00186628	0.965227
0	AGE	0.00656627	0.897577	40	OCCP GRP 1 주부	0.00181129	0.967038
8	RESI_TYPE_CODE_20.0	0.00568356	0.90326	27	CTPR 전남	0.00158721	0.968625
16	CTPR_경기	0.00473011	0.907991	77	3.3	0.00138721	0.970105
83	RESI_COST	0.00413631	0.912127	1	CHLD CNT	0.00145030	0.971557
4	SEX_2	0.00404582	0.916173	39	OCCP GRP 1 제조업	0.00140118	0.972962
88	JPBASE_HSHD_INCM	0.00391716	0.92009	6		0.00140534	0.974301
87	RCBASE_HSHD_INCM	0.00343641	0.923526		RESI_TYPE_CODE_12.0		
86	CUST_INCM	0.00343145	0.926958	17	CTPR_경남	0.00122426	0.975525
26	CTPR_인천	0.00321198	0.93017	48	MATE_OCCP_GRP_1_자영업	0.0012064	0.976732
66	1_6	0.0030781	0.933248	22	CTPR_부산	0.00119893	0.977931
65	1_5	0.00295263	0.9362	44	MATE_OCCP_GRP_1_n	0.00117441	0.979105

### 누적합<del>을</del> 시각화





## RFE(Recursive Feature Elimination) 방식

1절. 변수 선택과 차원축소

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

	•	
	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

### SelectKBest

1절. 변수 선택과 차원축소

- 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

1절. 변수 선택과 차원축소

### ● iris 데이터에서 score에 가장 큰 영향을 주는 변수 1개를 선택

```
from sklearn.datasets import load_iris
   from sklearn.feature_selection import SelectKBest, chi2
    X, y = load_iris(return_X_y=True)
    X.shape
(150, 4)
    X_new = SelectKBest(chi2, k=1).fit_transform(X, y)
    X_new.shape
(150, 1)
    X_new
array([[1.4],
       [1.4],
       [1.3],
       [1.5],
```



5장. 머신러닝 모형 최적화

## 파라미터 탐색과 모형 최적화

- 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

## validation\_curve

2절. 파라미터 탐색

 최적화할 파라미터의 이름과 범위, 그리고 성능 측정 기준을 각각 param\_name, param\_range, scoring 인수로 받아 파라미터 범위의 모 든 경우에 대해 성능을 계산

## validation\_curve를 이용한 예

2절. 파라미터 탐색

```
# Effored
from sklearn.datasets import load_digits
digits = load_digits()
X, y = digits.data, digits.target
```

```
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)

```
import numpy as np param_range = np.logspace(-6, -1, 10) gamma 값의 범위(\frac{1}{10^6} \sim \frac{1}{10^1})
```

```
기우시안커널의폭을 제어하는 매개변수

from sklearn.svm import SVC

from sklearn.model_selection import validation_curve

train_scores, test_scores = validation_curve(

SVC(), X, y, param_name="gamma", param_range=param_range,

cv=10, scoring="accuracy", n_jobs=1)
```

## validation\_curve를 이용한 예

```
Validation Curve with SVM
1 import numpy as np
2 train scores mean = np.mean(train scores, axis=1)
                                                                   1.0
3 train_scores_std = np.std(train_scores, axis=1)
4 test scores mean = np.mean(test scores, axis=1)
                                                                   0.8
5 test scores std = np.std(test scores, axis=1)
                                                                 9.0
2005
 1 %matplotlib inline
                                                                   0.4
   import matplotlib.pyplot as plt
                                                                   0.2
                                                                                   Training score
   plt.title("Validation Curve with SVM")
                                                                                   Cross-validation score
   plt.xlabel("$\gamma$")
                                                                   0.0
                                                                     10<sup>-6</sup>
                                                                                                10^{-2}
                                                                            10-5
                                                                                                      10^{-1}
  plt.vlabel("Score")
   plt.ylim(0.0, 1.1)
   plt.semilogx(param_range, train_scores_mean, label="Training score",
                 color="darkorange", lw=2)
9
   plt.fill_between(param_range, train_scores_mean - train_scores_std,
                     train scores mean + train scores std, alpha=0.2,
11
                      color="darkorange", lw=2)
12
   plt.semilogx(param_range, test_scores_mean, label="Cross-validation score",
13
                 color="navy", lw=2)
14
   plt.fill between(param range, test scores mean - test scores std,
16
                     test scores mean + test scores std, alpha=0.2, color="navy", lw=2)
   plt.legend(loc="best")
18 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

```
1 from sklearn.pipeline import Pipeline
                                                        실행하는데 수분에서 수십분이
2 from sklearn.model selection import GridSearchCV
3 from sklearn.svm import SVC
                                                        소요될 수 있음
4 from sklearn.feature selection import SelectKBest
5 import pandas as pd
6 redwine = pd.read csv("winequality-red.csv", sep=";")
7 redwine X, redwine y = redwine.iloc[:,:-1], redwine.iloc[:,-1]
1 | selection = SelectKBest(k=1)
2 svm = SVC(kernel="linear")
3 pipeline = Pipeline([("univ select", selection), ("svm", svm)])
4 param grid = dict(univ select k=[4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11], svm C=[0.1, 1, 10])
5 grid search = GridSearchCV(pipeline, param_grid=param_grid, cv=2, verbose=10)
6 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

2절. 파라미터 탐색

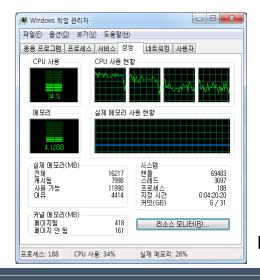
best\_estimator\_: 가장 높은 점수를 낸 파라미터의 모형, params\_: 최적 파라미터 정보

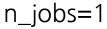
```
1 print(grid search.best estimator )
Pipeline(memory=None.
        steps=[('univ_select',
                SelectKBest(k=9,
                            score func=<function f classif at 0x000002339E555E58>)),
               ('svm',
                SVC(C=1, break_ties=False, cache_size=200, class_weight=None,
                    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}
```

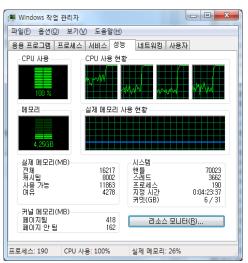
## 병렬처리

2절. 파라미터 탐색

### 사이킷런의 일부 클래스의 n\_jobs 파라미터는 연산에 사용할 코어의 수를 지정할 수 있음







 $n_{jobs}=-1$ 



# 5장. 머신러닝 모형 최적화

3절. 자료 불균형 처리

## 불균형 데이터

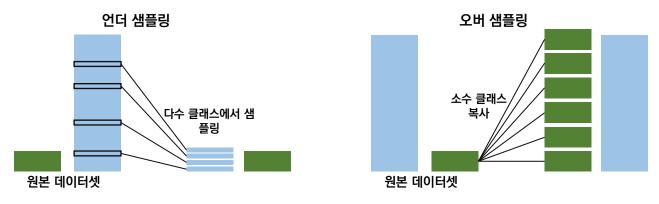
3절. 자료 불균형 처리

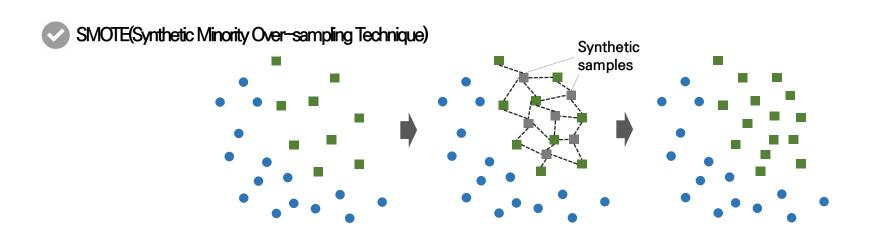
데이터셋이 정상비정상=99:1로 매우불균형 99% 1% 불균형 데이터의 문제점 [case 1] 학습용 검증용 세트 분리시, 학습용 세트에 비정상 데이터가 포함되지 않을 가능성 존재 train test → 그 결과, 단일클래스로 학습되어 비정상 거래를 감지할 수 없음 [case 2] 모델 학습시, 비정상데이터의 절대적인 양이 적어 제대로 된 학습이 일어나지 않음 train test

## 언더 샘플링과 오버 샘플링

3절. 자료 불균형 처리

### ₩ 단순 언더/오버샘플링

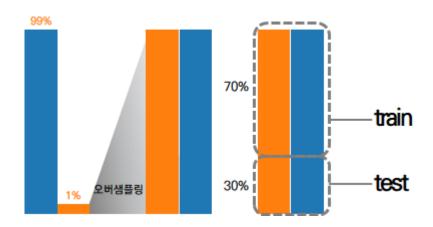




## 계층적 샘플링후 오버샘플링

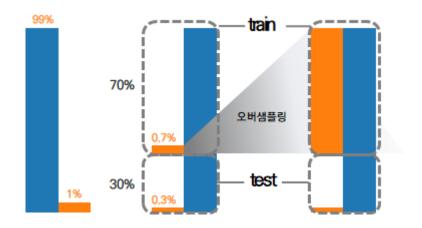
3절. 자료 불균형 처리

### 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 <mark>원래 표본으로 예측해</mark> 정확도 판단

## SMOTE를 이용한 오버샘플링

3절. 자료 불균형 처리

### pip install imblearn 명령으로 패키지를 설치해야 함

```
from imblearn.over_sampling import SMOTE
sm = SMOTE()
X_resampled, y_resampled = sm.fit_sample(X, y)

X_resampled.shape, y_resampled.shape
((19720, 10), (19720,))
```

## 가중치 제어

3절. 자료 불균형 처리

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

### Scikit-learn의 예측모형에 class\_weight 매개변수를 이용해 설정

RandomForestClassifier(class\_weight={0: 1, 1: 1.4}, max\_features=2, random\_state=42)



5장. 머신러닝 모형 최적화

4절. 앙상블 모형

# 모델 앙상블이란?

4.1 부트스트래핑과 0.632규칙

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 학습이란?

4.1 부트스트래핑과 0.632규칙

● 목적 : 여러 분류기(분류모델)를 하나의 메타 분류기(통합분류모델)로 연결 하여 개별분류기보다 더 좋은 일반화 성능을 달성

### ● 방법

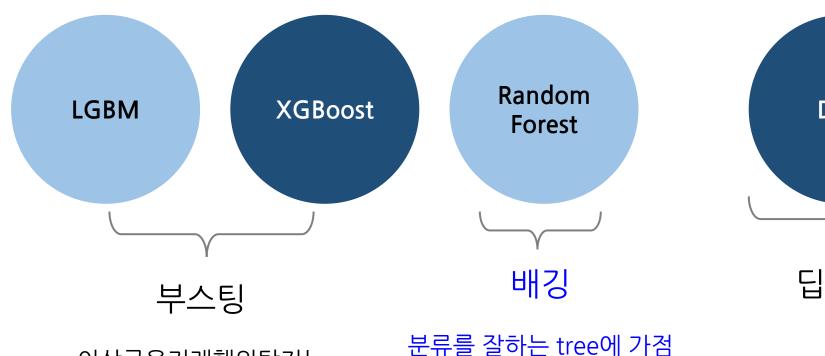
- 여러 분류 알고리즘 사용 : 다수결 투표(Voting)
- 하나의 분류 알고리즘 이용: 배깅(bagging), 부스팅(Boosting)

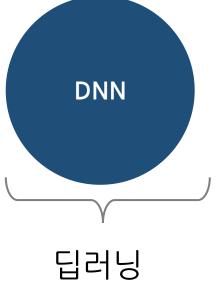
### ● 종류

- 투표(Majority Voting) : 동일한 훈련세트
- 배깅(Bagging): 훈련샘플에서 알고리즘마다 별도의 훈련세트 추출(복원추출, bootstrapping)해서 모델 구축 후 투표하면서 학습
  - ex. Random Forest: 의사결정나무 알고리즘 이용
- 부스팅(Boosting): 샘플을 뽑을 때 잘못된 분류 data 50%를 가중치 적용

# 주요 알고리즘

최적 모형 탐색





이상금융거래행위탐지는 성능과 동시에 속도가 중요

자료불균형인 데이터일 경우 RandomForest보다 좀더 잘 맞는 경향 속도: LGBM > XGBoost



# 앙상블

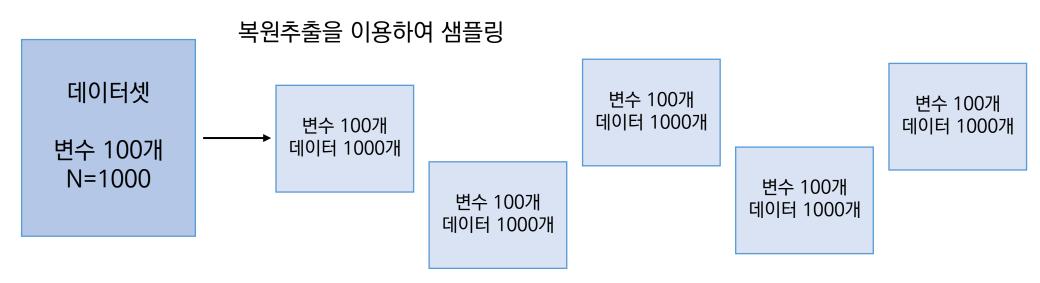
4.1 부트스트래핑과 0.632규칙

- 어떤 데이터의 값을 예측한다고 할 때, 하나의 모델을 활용하지만 여러 개의 모델을 조화롭게 학습시켜 그 모델들의 예측 결과들을 이용한다 면 더 정확한 예측값을 구할 수 있음
- **앙상블 학습**은 **여러 개의 결정 트리**(Decision Tree)를 **결합**하여 하나 의 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 향상5 시킴
  - 약 분류기를 병렬적으로 사용하면 배깅
  - Variance(데이터 밀집도)를 감소시키고 싶다면 배깅
  - 약 분류기를 순차적으로 사용하면 부스팅
  - Bias(중심과의 거리)를 감소시키고 싶다면 부스팅

# 부트스트래핑

4.1 부트스트래핑과 0.632규칙

### 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)

4.1 부트스트래핑과 0.632규칙

훈련 오차는…

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

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 <a href="https://www.jstor.org/stable/2965703">https://www.jstor.org/stable/2965703</a>

# 0.368은 어디에서?

4.1 부트스트래핑과 0.632규칙

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

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

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

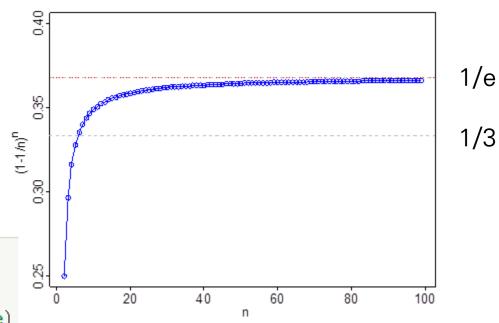
```
import numpy as np

N = 1000000 #
bootstrap = np.random.choice(N, N, replace=True)
np.round(len(set(bootstrap))/N, 3)
```

0.632

```
1 np.exp(-1), 1-np.exp(-1)
executed in 13ms, finished 17:13:03 2021-06-24
```

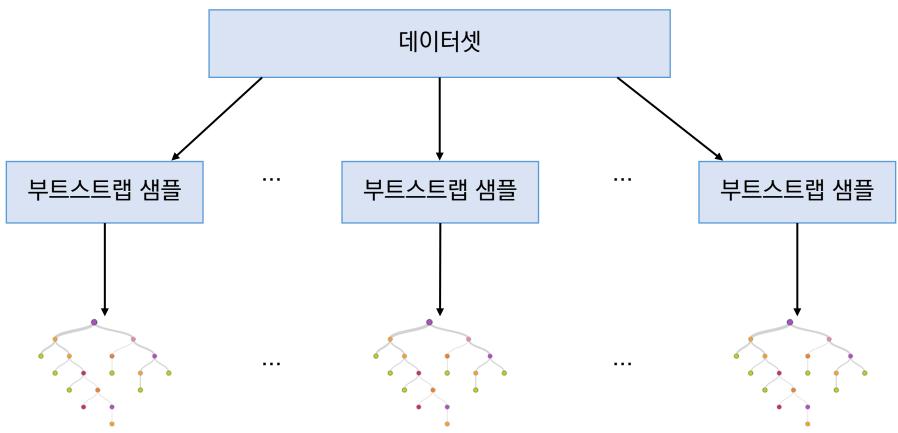
(0.36787944117144233, 0.6321205588285577)



# 베깅(Bagging)

4.2. 배깅

#### 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)

4.2. 배깅

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

4.2. 배깅

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				

## 데이터 불러오기

4.2. 배깅

#### 와인데이터 불러오기

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

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

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

import pandas as pd

	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

```
wine_df = wine_df[wine_df['Class label'] != 1]
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 및 데이터 샘플링

4.2. 배깅

10010010111

### 레이블인코딩 후 샘플링하기

```
from sklearn.preprocessing import LabelEncoder
     from sklearn.model_selection import train_test_split
     le = LabelEncoder()
     y = le.fit_transform(y)
     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
   print(train_y)
 2 print(test_y)
executed in 7ms, finished 19:38:40 2021-06-24
                          0 0 0 1 0 0 0 0 1 1 0 0 0 0 1
```

# 분류 모형

4.2. 배깅

0.89583333333333334

#### 의사결정나무 모형과 배깅 모형

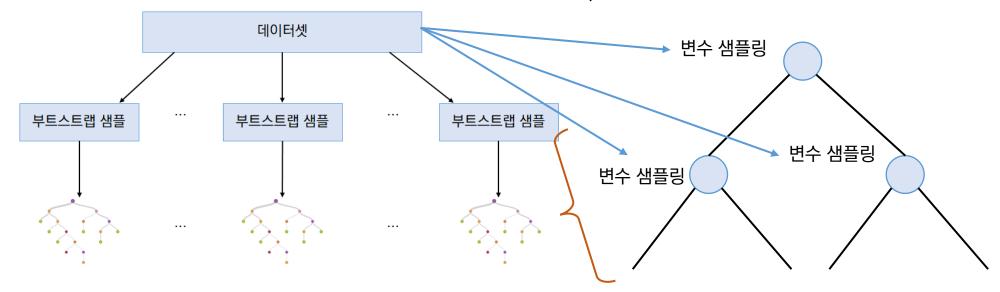
```
from sklearn.ensemble import BaggingClassifier
     from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
    tree = DecisionTreeClassifier(criterion='entropy', max_depth=None, random_state=1)
    bag = BaggingClassifier(base_estimator=tree, n_estimators=500, bootstrap=True, bootstrap_features=False, random_state=1)
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
    bag.fit(train X, train y)
                                                                                        모형의 결과를 비교하세요.
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)
    bag.score(test_X, test_y)
executed in 59ms, finished 20:02:21 2021-06-24
```

### RandomForest

4.2. 배깅

부트스트랩을 이용하여 데이터를 샘플링하고 그 데이터를 바탕으로 의사결정나무 모델을 설정 + 의사결정나무 모델을 설정하는 과정에서 각 노드를 분류할 <mark>변</mark>수들도 샘플링

 $\sqrt{p}(p = 변수개수)$  만큼 선택



매번 다른 변수들로 노드에서 분류가 되므로 각각의 DT들에는 큰 차이가 있음
→ 더 나은 일반화 성능을 만족시킴

### RandomForest

4.2. 배깅

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
  2 | rf = RandomForestClassifier()
executed in 13ms, finished 00:05:00 2021-07-14
     rf.fit(train_X, train_y)
executed in 141ms, finished 00:05:06 2021-07-14
RandomForestClassifier()
     rf.score(test_X, test_y)
executed in 20ms, finished 00:05:13 2021-07-14
0.9166666666666666
```

# 부스팅(Boosting)

4.3. 부스팅

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 추 가된 형태

#### 부스팅 알고리즘 종류

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

### AdaBoost

4.3. 부스팅

AdaBoost는 Adaptive Boosting를 줄여서 부르는 말로 관측치들에 가 중치를 더하면서 동작을 함

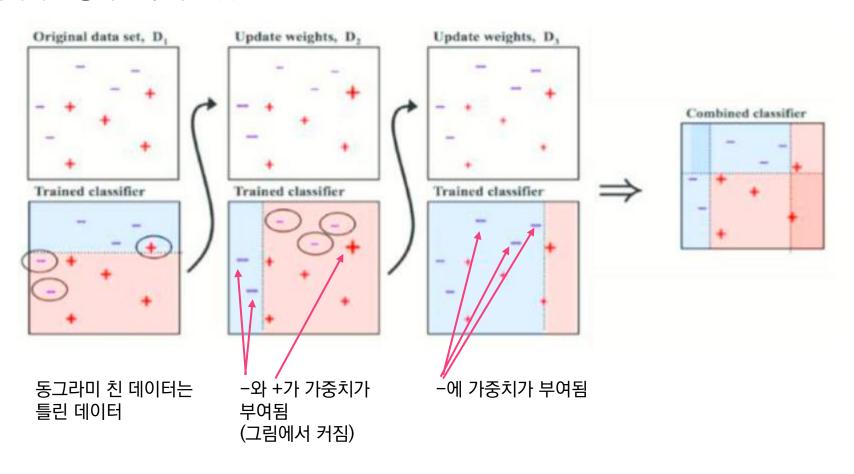
분류하기 어려운 Instances에는 가중치를 더하고 이미 잘 분류되어진 (다루어진) Instances는 가중치를 덜 함

- 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

4.3. 부스팅

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



# **Gradient Boosting Machine(GBM)**

4.3. 부스팅

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 예측하는 형태의 모델임
- 과적합(Overfitting) 이슈가 있음

## AdaBoost 분류 모형

0.89583333333333334

4.3. 부스팅

```
from sklearn.ensemble import AdaBoostClassifier
  2 abm = AdaBoostClassifier()
executed in 18ms, finished 23:05:48 2021-07-13
     abm.fit(train_X, train_y)
executed in 83ms, finished 23:05:53 2021-07-13
AdaBoostClassifier()
     abm.score(test_X, test_y)
executed in 22ms, finished 23:06:00 2021-07-13
```

# GradientBoosting

4.3. 부스팅

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

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

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

gbm.fit(train_X, train_y)

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

GradientBoostingClassifier()

gbm.score(test_X, test_y)
```

0.89583333333333334

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

### 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

4.3. 부스팅

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 Wise은 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

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

$$K 개의 트리를 가지고 있음$$

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

ŷ: 예측 값

 $f_k: F$  공간 안에서 k번째  $decision\ tree$ 

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

Training loss Regularization term

### XGBoost 설치

4.3. 부스팅

xgboost 오류 발생할 경우 <a href="https://www.lfd.uci.edu/~gohlke/pythonlibs/#xgboost">https://www.lfd.uci.edu/~gohlke/pythonlibs/#xgboost</a> 에서 파이썬 버전에 맞는 whl 파일 다운받아 설치 pip install xgboost-1.4.2-cp38-cp38-win\_amd64.whl

# XGBoost 분류 모형

4.3. 부스팅

```
from xgboost import XGBClassifier
  2 xgb = XGBClassifier()
executed in 13ms, finished 23:18:08 2021-07-13
     xgb.fit(train_X, train_y, eval_metric='logloss')
                                               对利 混仁上 独在取到 对 对 方
executed in 62ms, finished 23:22:28 2021-07-13
     xgb.score(test_X, test_y)
executed in 11ms, finished 23:22:33 2021-07-13
0.89583333333333334
```

### **XGBoost Parameters**

4.3. 부스팅

- 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 반횐되는 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://www.analyticsvidhya.com/blog/2016/03/complete-guide-parameter-tuning-xgboost-with-codes-python/

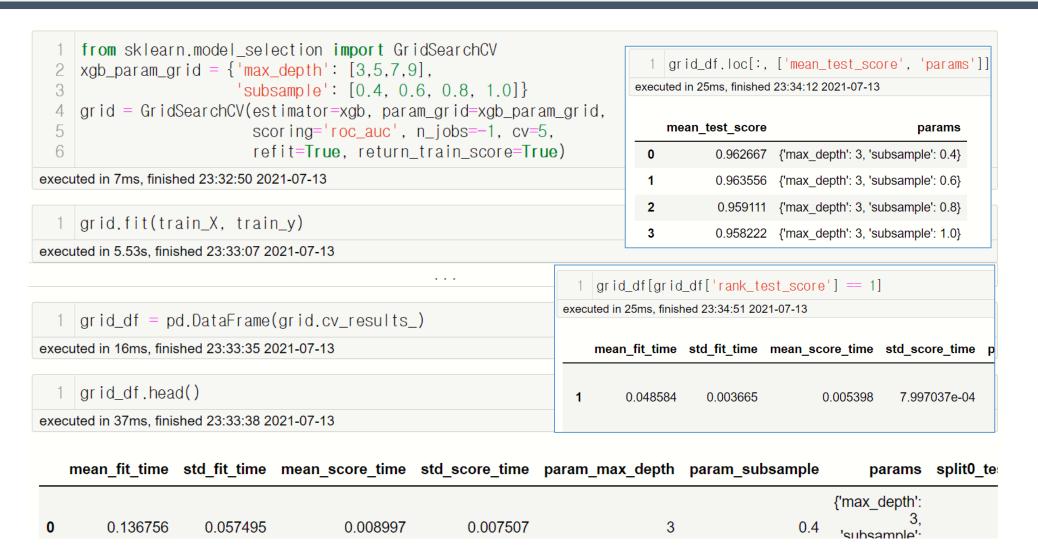
### **XGBoost Parameters**

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



# Voting에 의한 앙상블의 앙상블

4.5. 투표를 이용한 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

4.5. 투표를 이용한 앙상블

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

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 경우분류모형 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

4.5. 투표를 이용한 앙상블

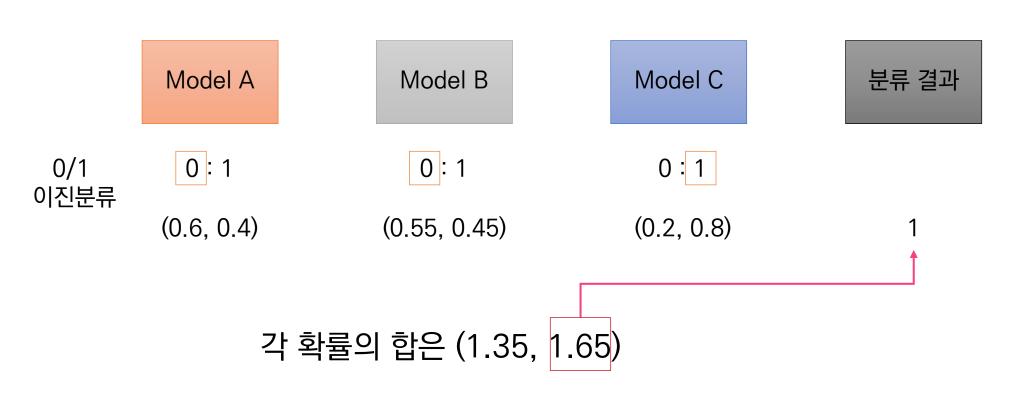
#### 다수의 규칙 투표에 예측된 클래스 레이블을 사용

	Model A	Model B	Model C	분류 결과
0/1 이진분류	1	0	1	1
1 – – 11	0	0	1	0
	1	1	0	1
	1	1	1	1

# soft voting

4.5. 투표를 이용한 앙상블

#### 분류할 확률의 총 합을 이용해서 결정함



# VotingClassifier - hard

4.5. 투표를 이용한 앙상블

```
from sklearn.ensemble import VotingClassifier
     voting_model = VotingClassifier(estimators=[("bagging", bag),
                                                      ("random forest", rf),
                                                      ("xgboost", xgb)],
                                         voting="hard"
executed in 4ms, finished 00:19:27 2021-07-14
     voting_model.fit(train_X, train_y)
executed in 778ms, finished 00:21:39 2021-07-14
     voting_model.score(test_X, test_y)
executed in 68ms, finished 00:21:41 2021-07-14
0.916666666666666
```

# VotingClassifier – soft

4.5. 투표를 이용한 앙상블

```
voting_model = VotingClassifier(estimators=[("bagging", bag),
                                                       ("random forest", rf),
                                                       ("xgboost", xgb)],
                                         voting="soft")
executed in 8ms, finished 00:23:17 2021-07-14
     voting_model.fit(train_X, train_y)
executed in 771ms, finished 00:23:19 2021-07-14
     voting_model.score(test_X, test_y)
executed in 73ms, finished 00:23:24 2021-07-14
0.875
```