지도학습 알아보기(knn, linear regression)

### 목 차

- 01 머신러닝
- 02 k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)
- 03 선형모델
- 04 하이퍼 파라미터
- 05 선형회귀
- 06 릿지 회귀와 랏소 회귀
- 07 ElasticNet(엘라스틱넷)

- ▶ 머신러닝(Machine Learning)은 지도학습과 비지도학습으로 나누어진다.
- ▶ 지도학습은 예측하려는 값이 존재하는 것이고, 비지도학습은 존재하지 않 는다.
- ▶ 지도학습은 다시 회귀(regression)과 분류(classification)으로 나누어 진다.
- ▶ 머신러닝 시스템의 종류의 다른 범주로 준지도학습, 강화 학습 등이 있습니다.

- ▶ 지도학습(supervised learning)
  - ▶ 머신러닝 방법 중의 하나. 분류와 회귀로 구분
  - ▶ 지도학습은 입력과 출력 샘플 데이터가 있다.
  - ▶ 비지도학습은 입력이 있고 출력 샘플 데이터가 없다.
  - ▶ 최신 트렌드 트랜스퍼 러닝(Transfer Learning) Few-shot/Zero-shor Learning

- ▶ 분류(classification)
  - ▶ 분류는 미리 정의된, 가능성 있는 여러 클래스 레이블(class label)중 하나를 예측
  - ▶ 두 개의 클래스로 분류하는 이진 분류(binary classification)
    - 예/아니오 또는 생존/사망 등으로 분류
    - 이진 분류에서 한 클래스를 양성(positive) 클래스, 다른 하나를 음성(negative) 클래스라고 한다.
  - ▶ 셋 이상의 클래스로 분류하는 다중 분류(multiclass classification)

- ▶ 회귀(Regression)
  - ▶ 타깃이 연속적인 값(숫자)일 때(예: 주택 가격 예측, 주가 예측 등)
  - ▶ 회귀 문제에서는 "예측값과 실제값 차이(오차)"를 어떻게 줄일 수 있는가가 핵심이며, 주로 MSE(평균제곱오차), MAE(평균절댓값오차), RMSE(평균제곱근오차) 등의 지표로 모델 성능을 평가
- ▶ 선형 회귀(Linear Regression), 다항 회귀(Polynomial Regression), 릿지 회귀, 라소 회귀, 엘라스틱 넷, 결정트리, 랜덤 포레스트, XGBoost, LightGBM, CatBoost등

- ▶ 과대 적합, 과소적합, 일반화
  - ▶ 모델이 처음보는 데이터에 대해 정확하게 예측할 수 있으면 이를 훈련 세트에서 테스트 세트로 일반화(generalization)되었다고 함.
  - ▶ 일반화는 모델이 아직 보지 못한 새 데이터(테스트 세트나 실무 환경에 투입된 데이터)에 대해서도 훈련 시와 비슷한 예측 성능을 내는 능력을 의미합니다.
  - ▶ 머신러닝 모델의 최종 목표는, 단순히 훈련 집합(Training set) 내에서 좋은 성능을 내는 것이 아니라 미래 데이터에서도 안정적으로 좋은 성능을 내는 것.

- ▶ 과대 적합, 과소적합, 일반화
  - ▶ <u>과대적합(overfitting)은</u> 모델이 훈련 데이터의 노이즈나 불필요한 패턴까지 지나치게 학습하여, 새 데이터에서는 성능이 떨어지는 현상.
  - ▶ 가진 정보를 너무 사용해서(과도 학습) 복잡한 모델을 만든 것을 과대적합(overfitting)이라 한다. 모델이 훈련 세트의 너무 최적화 되어, 새로운 데이터에 적합하지 않음. 이를 일반화 되지 않았다라고 이야기하기도 함.
  - ▶ 반대로 학습이 안된 너무 간단한 모델이 선택되는 것을 과소 적합(underfitting)라고 한다.

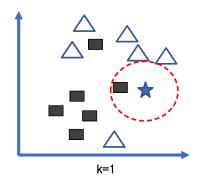
- ▶ 과대 적합, 과소적합, 일반화 예
  - ▶ 대규모 모델(예: 딥러닝·초거대 언어모델)에서도, 데이터가 풍부하지 않으면 특정 분포(훈련 데이터)에 과도하게 맞춰져 일반화에 실패
  - ▶ Fine-tuning 단계에서 라벨 개수가 적거나 특정 데이터에만 초점을 맞추면, 일반화성능이 급격히 떨어질 수 있음("레어 케이스"만 지나치게 학습).
  - ▶ Prompt Engineering에서도, 너무 구체적이거나 한정적인 맥락에만 모델을 맞추면 본래의 풍부한 표현력을 잃고 특정 패턴에 과대적합.

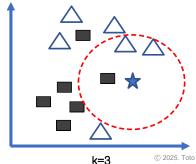
### ▶ 과대 적합의 보완

- ▶ 규제(Regularization): L1·L2 규제, 드롭아웃(Dropout), 배치 정규화(Batch Normalization)
- ▶ 데이터 보강(Data Augmentation): 이미지·텍스트·오디오 등 다양한 형태로 증강
- ▶ 앙상블(Ensemble): 랜덤 포레스트, XGBoost 등 다양한 모델 결합
- ▶ 교차 검증(Cross-Validation): 데이터 분할을 여러 방식으로 반복 학습·평가하여 일반화성능 확인
- ▶ Early Stopping: 검증 세트 성능이 정체 혹은 나빠지기 시작하면 학습을 중단

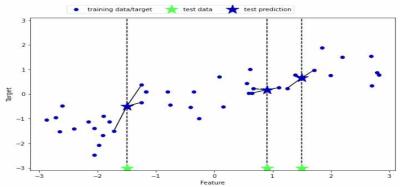
### ▶ 지도학습 – 분류(Classification)

- 새로운 데이터는 해당 거리안의 데이터가 가장 많이 예측하는 값(클래스)으로 분류하게 된다.
- 가장 가까운 학습 데이터 포인트를 찾아 이를 예측에 활용한다.





▶ 가장 가까운 훈련 데이터 포인트를 찾아 이 값이 예측하는 값(레이블)의 평균으로 예측한다.(회귀의 경우)



k=3의 경우, 가장 가까운 데이터 3개를 찾는다.

### ▶ KNN 모델 설명

A. KNN은 데이터 간의 유사성을 기반으로 예측을 수행한다.

K-NN은 "새로운 데이터가 주어졌을 때, 기존 훈련 데이터 중에서 가장 가까운(유사한) K개를 찾아, 그들의 라벨(분류) 또는 값(회귀)을 투표나 평균으로 결정"한다는 원리(Instance-based Learning(사례 기반 학습) 또는 Lazy Learning(게으른 학습) 방식으로 불린다.

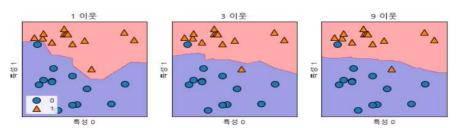
- B. [학습 단계] 모델 파라미터를 학습하지 않고, 훈련 데이터를 그대로 저장.
- C. 예측 단계에서 거리를 계산하고 이웃을 찾는다.
  - 01. 해당 데이터의 k개의 최근접 이웃(Nearest Neighbors)를 찾는다.
  - 02. 유클리디안 거리(Euclidean Distance) 또는 다른 거리 측정 방법을 사용하여 데이터 포인트 간의 거리 계산
  - 03. 찾은 k개의 데이터의 레이블의 가장 많은 것(분류), 평균(회귀)로 값을 예측

### ▶ 지도학습 - knn, 회귀(Regression)

- A. 가장 가까운 훈련 데이터 포인트를 찾아 이를 예측에 활용한다.
- B. 새로운 데이터는 해당 거리안의 k개 데이터가 예측하는 <mark>타깃(목표변수)의 값의 평균</mark>으로 예측
- C. 이웃 간의 거리를 계산할 때 특성마다 값의 범위가 다를 경우, 범위가 작은 특성에 영향을 받는다. 따라서 k-NN 알고리즘을 사용할 때는 특성들이 같은 스케일을 갖도록 <mark>정규화</mark>하는 것이 일반적이다.

#### ▶ k의 값에 따른 결정 경계(decision boundary)

새로운 데이터가 어느 값으로 분류될지 결정되는 경계를 말한다. 분류 문제에서, 입력 데이터가 주어졌을 때 어떤 클래스로 분류될지를 가르는 경계선을 말합니다.



K-NN은 "가장 가까운 K개 이웃을 보고 다수결(분류)" 또는 "이웃의 평균(회귀)"으로 결과를 냅니다. 이웃의 개수 K가 달라지면 "어떤 점이 누구와 가까운가?"라는 관계가 달라지고, 이에 따라 분류 경계도 달라집니다.

#### ▶ knn 모델의 장점

- A. 매우 쉬운 모델이다.
- B. 많이 조정하지 않아도 자주 좋은 성능 발휘
- C. 머신러닝의 지도학습(분류, 회귀)에 모두 적용 가능

#### ▶ knn 모델의 단점

- A. 수백 개 이상의 많은 특성을 가진 데이터 셋을 가진 데이터 셋에는 잘 동작하지 않음.
- B. 특성(feature) 값 대부분이 0인 데이터 셋은 잘 동작하지 않음.
- C. KNN 알고리즘은 특성 간의 스케일이 다를 경우, 올바른 예측이 힘듬.(전처리 단계에서 특성 값

### 03 선형모델(linear model)

- ▶ 선형 모델은 1885년 갈톤의 연구에서 유래. 가장 간단하고 오래된 회귀용 선형 알고리즘.
- ▶ 선형모델은 입력 특성(feature)에 대한 선형 함수를 만들어 예측 수행

$$\hat{y}$$
(예측값) =  $w_1 * x_1 + w_2 * x_2 + ... + w_p * x_p + b$ 

 $\hat{y}$  : 모델이 만들어낸 예측값

*x<sub>i</sub>* : 특성

 $W_i$  : 각 특성에 대한 기울기(가중치)

- ▶ 선형모델은 w(가중치 or 계수)와 b(편향(offset) 또는 절편)를 학습하여 정한다.
- ▶ 선형모델은 특성이 <mark>하나일 때는 직선, 두 개</mark>일 때는 <mark>평면, 더 높은 차원에서는 초평면</mark>이 된다.

### 03 선형모델(linear model)

- ▶ 선형 모델은 기업에서도 많이 사용하는 모델
- ▶ '유전에 의하여 보통사람의 신장으로 회귀'(1885년 갈톤의 논문)에서 유래
  - 부모와 자식들 간의 키의 상관관계를 분석해 본 갈톤은 다음과 같은 재미있는 관계를 찾아냄.
  - 특이하게 큰 부모의 자식들은 크지만, 부모들보다는 대부분 작았고, 작은 부모의 자식은 작지만 부모들보다 대부분 크다.. 이러한 경향은 사람들의 키가 평균키로 회귀하려는 경향이 있다. 이 연구로부터 회귀분석이라는 용어가 사용되게 되었음.
- ▶ 회귀 모형의 형태에 따라 하나의 종속변수에 대해 독립변수가 하나인 경우를 단순회귀분석(Simple Regression Analysis)
- ▶ 하나의 종속변수에 대해 독립변수가 <mark>둘 이상인 경우를 다중회귀분석</mark>(Multiple Regression Analysis)

### 03 선형모델(linear model)

▶ 회귀 분석을 통해 다음과 같은 것을 알 수 있다.

A. 종속 변수와 독립변수 간에 선형관계가 존재하는지 알 수 있음.

B. 종속 변수에 영향을 미치는 독립변수가 유의한지와 영향력의 정도를 알 수 있음.

# 04 하이퍼 파라미터(hyperparameter)

▶ 모델 파라미터 or 계수

머신러닝에서 알고리즘이 주어진 데이터로 부터 학습하는 파라미터

▶ 하이퍼파라미터(hyperparameter) or 매개변수

모델이 학습할 수 없는 파라미터로서 사람이 직접 설정해 주어야 하는 파라미터 (예) knn의 k 값 등.

### 05 선형 회귀(linear regression)

▶ 선형회귀는 <del>평균제곱오차(MSE)를</del> 최소화하는 파라미터(w,b)를 찾는다.

$$MSE = \frac{1}{n(샘플개수)} \sum_{i=1}^{n} (y_i(실제값) - \hat{y}_i(예측값))^2$$

- ▶ 선형 회귀는 매개변수(직접 지정하는 변수)가 없는 것이 장점
  - 따라서 모델의 복잡도를 제어할 방법이 없음.

# 05 선형 회귀(linear regression)- 결정계수

### ▶ 결정계수(R<sup>2</sup>)

- (1) scikit-learn의 score메소드에서 결정계수 값을 확인할 수 있다.
- (2) 결정계수는 회귀 모델에서 예측의 적합도를 측정한 것이다.

### ▶ 결정계수(R<sup>2</sup>)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y - \hat{y})^2}{\sum (y - \bar{y})^2}$$
 
$$\begin{bmatrix} y : \text{타깃값} \\ \hat{y} : \text{예측값} \\ \bar{y} : \text{평균} \end{bmatrix}$$

# 선형회귀에 대한 과대적합 해결 방법은 있을까?

### 06 정규화항을 통한 일반화

▶ 과적합을 해소하기 위해 우리는 <mark>정규화 항</mark>을 사용한다. MSE + regular-term(정규화 항)

▶ 선형회귀 모델

$$\hat{y}$$
(예측값) =  $w_1 * x_1 + w_2 * x_2 + ... + w_p * x_p + b$ 

▶ 오차함수(cost function)

$$\sum_{i=1}^{M} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{M} (y_i - \sum_{i=0}^{p} w_j - x_{ij})^2$$

# 07 라쏘 회귀(Lasso)와 릿지회귀(Ridge)

#### ▶ 라쏘 회귀(Ridge) - L1규제

- . 선형 모델,
- . 가중치(w..)의 절대값을 w의 모든 원소가 0에 가깝게, 어떤 것은 정말 0이 된다.
  - 일부 계수를 0으로 만들면 모델을 이해하기 쉽고 모델의 가장 중요한 특성이 드러남
  - 자동으로 특성 선택(feature selection)이 이루어짐.
- C. 모든 특성(feature)이 특성에 영향을 주는 영향을 최소한으로 함. 이런 제약을 우리는 규제(regularization)이라고 한다. 라쏘 회귀에 사용하는 규제를 L1규제라 한다.
- D. Lasso는 계수를 얼마나 강하게 0으로 규제할지 alpha 매개변수를 이용.

### 07 라쏘 회귀(Lasso)와 릿지회귀(Ridge)

#### ▶ 릿지 회귀(Ridge) - L2규제

- . 선형 모델,
- . 가중치(w..)의 절대값을 가능한 한 작게 만든다. w의 모든 원소가 0에 가깝게
- 모든 특성(feature)가 특성에 영향을 주는 영향을 최소한으로 만든다. 이런 제약을 우리는 규제(regularization)이라고 한다. 릿지 회귀에 사용하는 규제를 L2규제라 한다.
- D. 데이터를 충분히 주면 릿지 회귀에서의 규제항(alpha)은 덜 중요해 진다.

### 07 라쏘 회귀(Lasso)와 릿지회귀(Ridge)

▶ 라쏘 회귀 - L1규제

$$\sum_{i=1}^{M} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{M} (y_i - \sum_{j=0}^{p} w_j - x_{ij})^2 + \lambda \sum_{j=0}^{p} |w_j|$$

▶릿지 회귀 - L2규제

$$\sum_{i=1}^{M} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{M} (y_i - \sum_{i=0}^{p} w_i - x_{ij})^2 + \lambda \sum_{i=0}^{p} w_i^2$$

### 08 ElasticNet(엘라스틱넷)

### ▶ 엘라스틱 넷

- Lasso와 Ridge을 결합한 모델.
- B. 가장 좋은 성능을 내지만 L1과 L2규제를 위한 매개변수 두개를 조정해야 함.

### 09 기타

- ▶ 조기 종료(Early Stopping)
- ▶ 이상치(Outlier) 처리
- ▶ 모델 복잡도 조절
- ▶ 교차 검증(Cross Validation) 활용
- ▶ 데이터 확보 & 증강(Data Augmentation)
- ▶ 특징(Feature) 수 줄이기 & Feature Selection