머신러닝(Machine Learning)

지도학습 알아보기(knn, linear regression)

목 차

01 머신러닝(Machine Learning)

▶ 머신러닝(Machine Learning)은 지도학습과 비지도학습으로 나누어진다.

▶ 지도학습은 예측하려는 값이 존재하는 것이고, 비지도학습은 존재하지 않는다.

▶ 지도학습은 다시 회귀(regression)과 분류(classification)으로 나누어진다.

▶ 머신러닝 시스템의 종류의 다른 범주로 준지도학습, 강화 학습 등이 있습니다.

01 머신러닝(Machine Learning)

▶ 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-shot Learning

01 머신러닝(Machine 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)

01 머신러닝(Machine Learning)

▶ 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 성능**을 평가

▶ 선형 회귀(Linear Regression), 다항 회귀(Polynomial Regression), 릿지 회귀, 라소 회귀, 엘라스틱 넷, 결정트리, 랜덤 포레스트, XGBoost, LightGBM, CatBoost등

01 머신러닝(Machine Learning)

▶ 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.

01 머신러닝(Machine Learning)

▶ 과대 적합, 과소적합, 일반화

▶ 과대적합(overfitting)은 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.

01 머신러닝(Machine Learning)

▶ 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, 일반화 성능이 급격히 떨어질 수 있음(“레어 케이스”만 지나치게 학습).

▶ Prompt Engineering에서도, 너무 구체적이거나 한정적인 맥락에만 모델을 맞추면 본래의 풍부한 표현력을 잃고 특정 패턴에 과대적합.

01 머신러닝(Machine Learning)

▶ 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

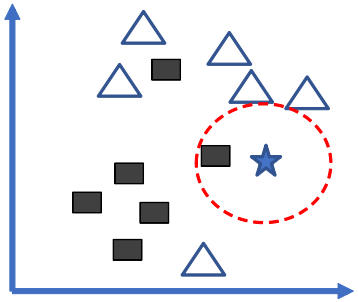
▶ 교차 검증(Cross-Validation): 데이터 분할을 여러 방식으로 반복 학습·평가하여 일반화 성능 확인

▶ Early Stopping: 검증 세트 성능이 정체 혹은 나빠지기 시작하면 학습을 중단

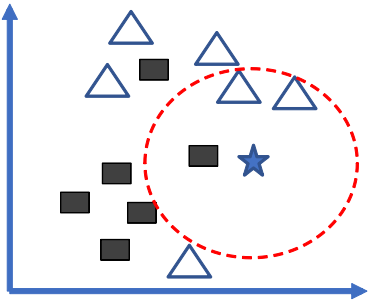
02 k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)

▶ 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.



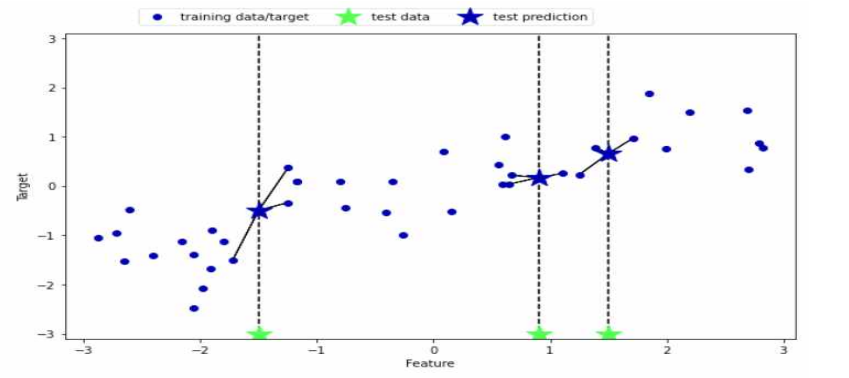
k=1



k=3

02 k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)

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



k=3의 경우, 가장 가까운 데이터 3개를 찾는다.

02 k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)

▶ KNN 모델 설명

A. KNN은 데이터 간의 유사성을 기반으로 예측을 수행한다.

K-NN은 “새로운 데이터가 주어졌을 때, 기존 훈련 데이터 중에서 **가장 가까운(유사한) K개**를 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

02 k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)

▶ 지도학습 – knn, 회귀(Regression)

A. 가장 가까운 훈련 데이터 포인트를 찾아 이를 예측에 활용한다.

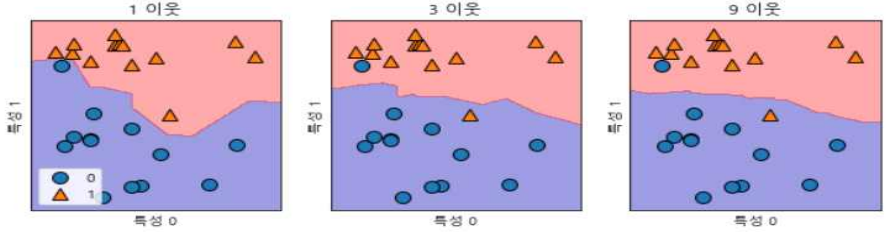
B. 새로운 데이터는 해당 거리안의 k개 데이터가 예측하는 타깃(목표변수)의 값의 평균으로 예측

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 **정규화**하는 것이 일반적이다.

02 k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)

▶ 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.

02 k-최근접 이웃(k-Nearest Neighbors)

▶ 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 조정(스케일링)

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

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

$\hat{y}$: 모델이 만들어낸 예측값

x_i : 특성

w_i : 각 특성에 대한 기울기(가중치)

▶ 선형모델은 w(가중치 or 계수)와 b(편향(offset) 또는 절편)를 학습하여 정한다.

▶ 선형모델은 특성이 하나일 때는 직선, 두 개일 때는 평면, 더 높은 차원에서는 초평면이 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 둘 이상인 경우를 다중회귀분석(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 평균제곱오차(MSE)를 최소화하는 파라미터(w,b)를 찾는다.

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

▶ 선형 회귀는 매개변수(직접 지정하는 변수)가 없는 것이 장점

- 따라서 모델의 복잡도를 제어할 방법이 없음.

05 선형 회귀(linear regression)- 결정계수

▶ 결정계수(R^2)

(1) scikit-learn의 score메소드에서 결정계수 값을 확인할 수 있다.

(2) 결정계수는 회귀 모델에서 예측의 적합도를 측정한 것이다.

▶ 결정계수(R^2)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (y - \hat{y})^2}{\sum (y - \bar{y})^2}$$

- y : 타깃값
- $\hat{y}$: 예측값
- $\bar{y}$: 평균

선형회귀에 대한 과대적합 해결 방법은 있을까?

06 정규화항을 통한 일반화

▶ 과적합을 해소하기 위해 우리는 정규화 항을 사용한다.

MSE + regular-term(정규화 항)

▶ 선형회귀 모델

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

▶ 오차함수(cost function)

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

07 라쏘 회귀(Lasso)와 릿지회귀(Ridge)

▶ 라쏘 회귀(Ridge) - L1규제

A. 선형 모델,

B. 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

A. 선형 모델,

B. 가중치(w..)의 절대값을 가능한 한 작게 만든다. w의 모든 원소가 0에 가깝게

C. 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

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

08 ElasticNet(엘라스틱넷)

▶ 엘라스틱 넷

A. 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

