K-Nearest Neighbors (KNN)

K-최근접이웃

분류와 회귀

- 지도 학습의 대표적인 머신 러닝 방법
  - 분류 (classification)
  - 회귀 (regression)

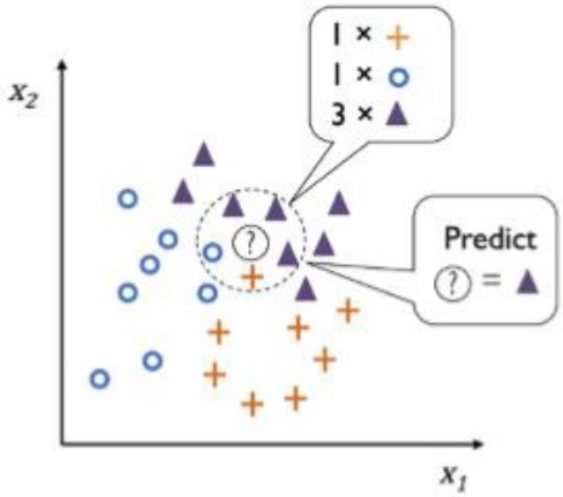
- 분류
  - 분류는 미리 정의된, 가능성 있는 여러 클래스 레이블(class label) 중 하나를 예측하는 것
  - 두 개로만 나누는 이진 분류(Binary classification)와 셋 이상의 클래스로 분류하는 다중 분류(multiclass classification)로 나뉨
  - 분류 예시: 얼굴 인식, 숫자 판별 (MNIST) 등

- 회귀
  - 연속적인 숫자 또는 부동소수점수 (실수)를 예측하는 것
  - 회귀 예시: 주식 가격을 예측하여 수익을 내는 알고리즘 등

KNN의 개념

KNN의 개념

- **KNN이란?**
  - 주변 k 개의 자료의 클래스(class) 중 가장 많은 클래스로 특정 자료를 분류하는 방식
  - 새로운 자료 ? 를 가장 가까운 자료 5개의 자료 (k=5) 를 이용하여 투표하여 가장 많은 클래스로 할당



  - Training-data 자체가 모형일 뿐 어떠한 추정 방법도 모형도 없음
    - 즉, 데이터의 분포를 표현하기 위한 파라미터를 추정하지 않음
  - 매우 간단한 방법이지만 performance는 떨어지지 않음

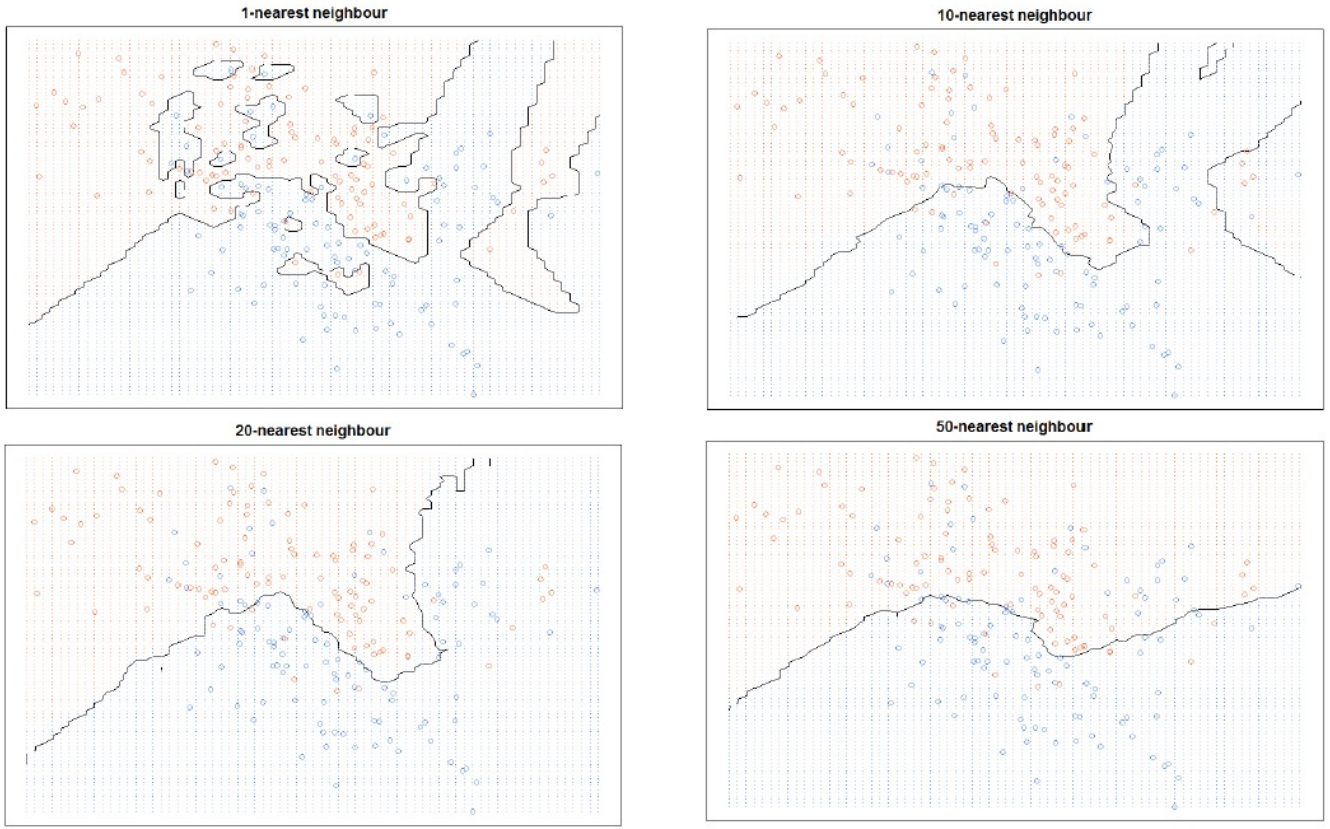
KNN의 개념

- **KNN이란?**
  - **게으른 학습(lazy learner) 또는 사례중심학습(instance-based learning)**
    - 게으른 학습이란: 알고리즘은 훈련 데이터에서 판별 함수(discriminative function)를 학습하는 대신 훈련 데이터 셋을 메모리에 저장하기 방법
  - **데이터의 차원이 증가하면 차원의 저주(curse of dimension) 문제가 발생함**
    - 즉, KNN은 차원이 증가할 수록 성능 저하가 심함
      - 데이터의 차원(dimensionality)이 증가할수록 해당 공간의 크기(부피)가 기하급수적으로 증가하여 동일한 개수의 데이터의 밀도는 차원이 증가할수록 급속도로 희박(sparse)해짐
      - 차원이 증가할수록 데이터의 분포 분석에 필요한 샘플 데이터의 개수가 기하급수적으로 증가하게 되는데 이러한 어려움을 표현한 용어가 차원의 저주임
  - i번째 관측치와 j번째 관측치의 거리로 **Minkowski 거리**를 이용

$$d(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}_j) = \sqrt[p]{\sum_{k=1}^{d} |x_{ik} - x_{jk}|^p}$$

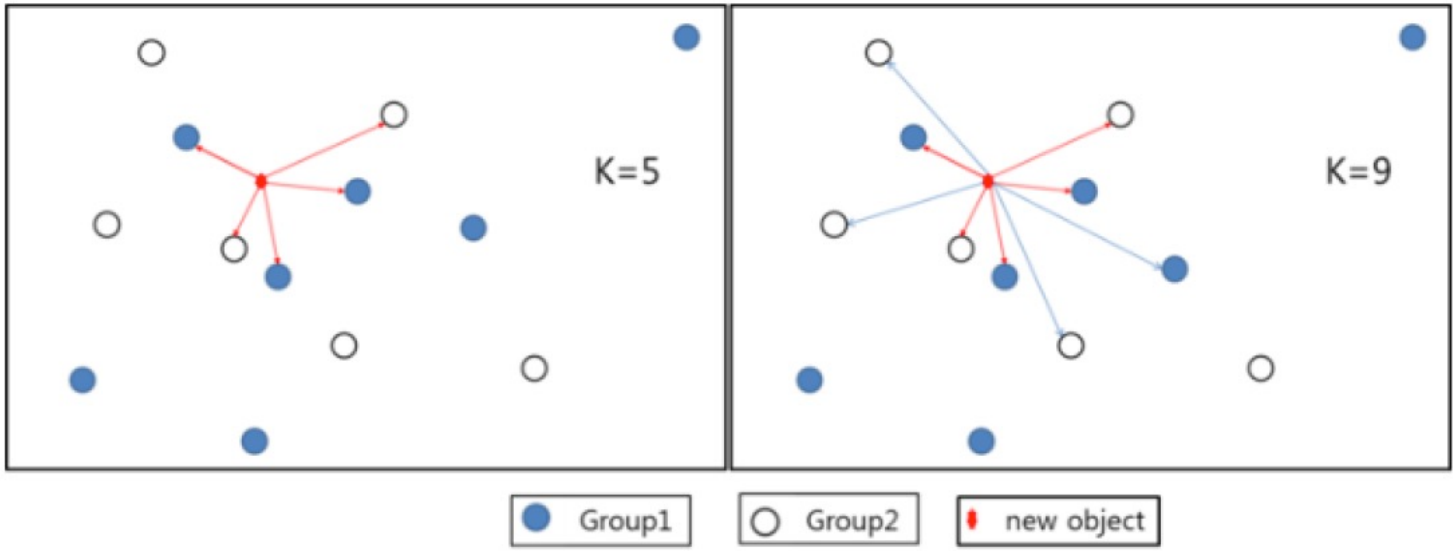
KNN의 하이퍼파라미터

- **탐색할 이웃 수(k)와 거리 측정 방법**
  - k가 작을 경우 데이터의 지역적 특성을 지나치게 반영하여 과접합(overfitting) 발생
  - 반대로 매우 클 경우 모델이 과하게 정규화 (underfitting) 발생



KNN의 K가 가지는 의미

- **새로운 자료에 대해 근접치 K의 개수에 따라 Group이 달리 분류됨**
  - 다수결 방식 (Majority voting) : 이웃 범주 가운데 빈도 기준 제일 많은 범주로 새 데이터의 범주를 예측하는 것



  - 가중 합 방식 (Weighted voting) : 가까운 이웃의 정보에 좀 더 가중치를 부여

KNN의 장단점 요약

// 장점

- 학습데이터 내에 끼어있는 노이즈의 영향을 크게 받지 않음
- 학습데이터 수가 많다면 꽤 효과적인 알고리즘
- 마할라노비스 거리와 같이 데이터의 분산을 고려할 경우 매우 **강건(robust)**한 방법론
  - 마할라노비스 거리(Mahalanobis distance)는 평균과의 거리가 표준편차의 몇 배인지를 나타내는 값
  - 즉, 어떤 값이 얼마나 일어나기 힘든 값인지, 또는 얼마나 이상한 값인지를 수치화하는 한 방법

// 단점

- 최적 이웃의 수(k)와 어떤 거리 척도(distance metric)가 분석에 적합한지 불분명해 데이터 각각의 특성에 맞게 연구자가 임의로 선정해야 함
  - best K는 데이터 마다 다르기 때문에 탐욕적인 방식(Grid Search)으로 탐색
- 새로운 관측치와 각각의 학습 데이터 사이의 거리를 전부 측정해야 하므로 계산 시간이 오래 걸리는 한계
- KNN의 계산복잡성을 줄이려는 시도들
  - Locality Sensitive Hashing, Network based Indexer, Optimized product quantization