머신러닝을 위한 수학

선형대수와 최적화 이론

7기 교육부 홍승기

선형대수

벡터(Vector)

벡터의 정의

- 벡터 공간(vector space)의 원소.
- 가장 대표적인 벡터 공간: n차원 실수 공간($\mathbb{R}^n$)
- 따라서 $\mathbb{R}^n$에서의 원소인 $(x_1, \cdots, x_n)$이 곧 벡터.
- 이 뒤에선 편의를 위해 벡터 공간을 $\mathbb{R}^n$으로만 간주한다.

벡터(Vector)

벡터의 연산

- $(x_1, \cdots, x_n) + (y_1, \cdots, y_n) = (x_1 + y_1, \cdots, x_n + y_n)$
- 즉, 각 성분끼리 덧셈을 하면 된다. (뺄셈도 마찬가지)
- $k \cdot (x_1, \cdots, x_n) = (kx_1, \cdots, kx_n) \quad k \in \mathbb{R}$
- 곱셈도 각 성분에 실수 k 만큼 곱해주면 된다.

노름(Norm)

노름의 정의

- 함수 $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^+$ 가 다음 성질들을 만족할 때, 노름(norm)이라고 한다:
- $\forall x \in \mathbb{R}^n,\ \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
- $\forall x \in \mathbb{R}^n, \forall \alpha \in \mathbb{R},\ \|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$
- $\forall x, y \in \mathbb{R}^n,\ \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$
- 특히, 마지막의 절대 부등식을 삼각부등식(triangle inequality), 혹은 준가법성(subadditivity)이라 부른다.

노름(Norm)

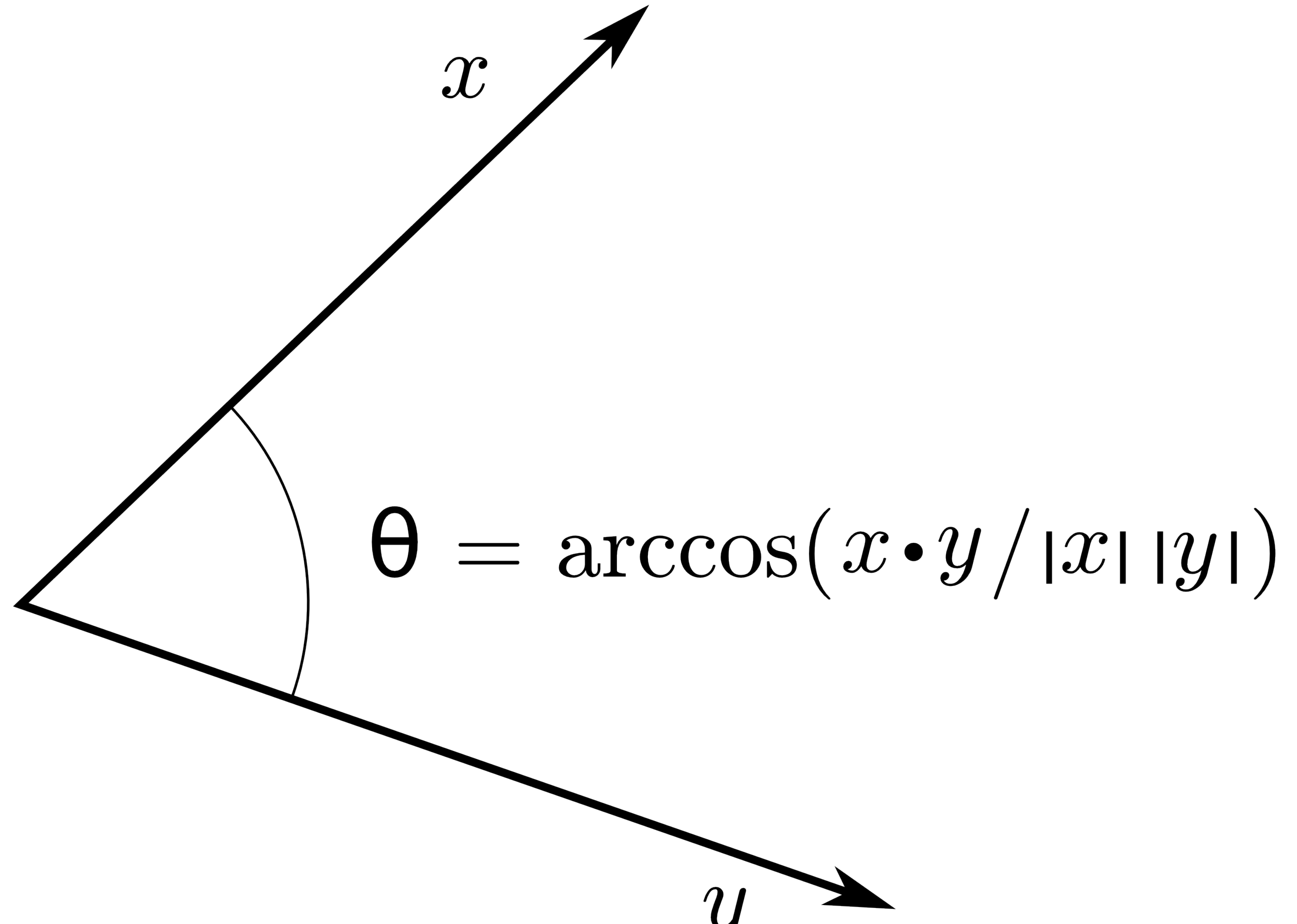
노름의 예시

- 실수 공간에서 L^p-norm 의 정의는 다음과 같다:
- $$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}}, \quad x = (x_1, \cdots, x_n) \in \mathbb{R}^n$$
- $p = 2$ 인 경우, 우리가 아는 거리의 정의와 같다.
- 즉 노름이란, 일반적인 논의에서의 '거리'를 의미한다.

내적(inner product)

연산 방법과 의미

- 실수 공간에서 내적 연산은 다음과 같다:
- $(x_1, \cdots, x_n) \cdot (y_1, \cdots, y_n) = x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n$
- 즉, 원소별로 각각 곱한 다음, 다 더해주면 된다.
- 만약 $x, y \in \mathbb{R}^n$의 크기가 $\|x\|_2 = \|y\|_2 = 1$ 라면,
  두 벡터의 내적은 곧 두 벡터의 '유사성'을 의미하기도 한다.
  이는 군집화(clustering)나 자연어 분야에서 주로 쓰이는 성질이기도 하다.



내적(inner product)

노름과 내적의 관계

- 내적이 주어져 있을 때, 노름을 다음과 같이 정의할 수 있다:
- $\|x\|_2 = \sqrt{x \cdot x}, \quad x \in \mathbb{R}^n$
- 내적과 노름 간의 대표적인 부등식으로 코시-슈바르츠 부등식이 있다.
- $|x \cdot y| \leq \|x\|_2 \|y\|_2, \quad x, y \in \mathbb{R}^n$
- 벡터 $x, y \in \mathbb{R}^n$ 사이의 각도를 θ 라고 하면, 다음의 식이 성립한다:
- $x \cdot y = \|x\|_2 \|y\|_2 \cos\theta, \quad \theta \in [-\pi, \pi)$
- 위의 내적이 0인 경우, $\theta = \pm \dfrac{\pi}{2}$로 이러한 경우 두 벡터가 '직교'(orthogonal)한다고 한다.

행렬(Matrix)

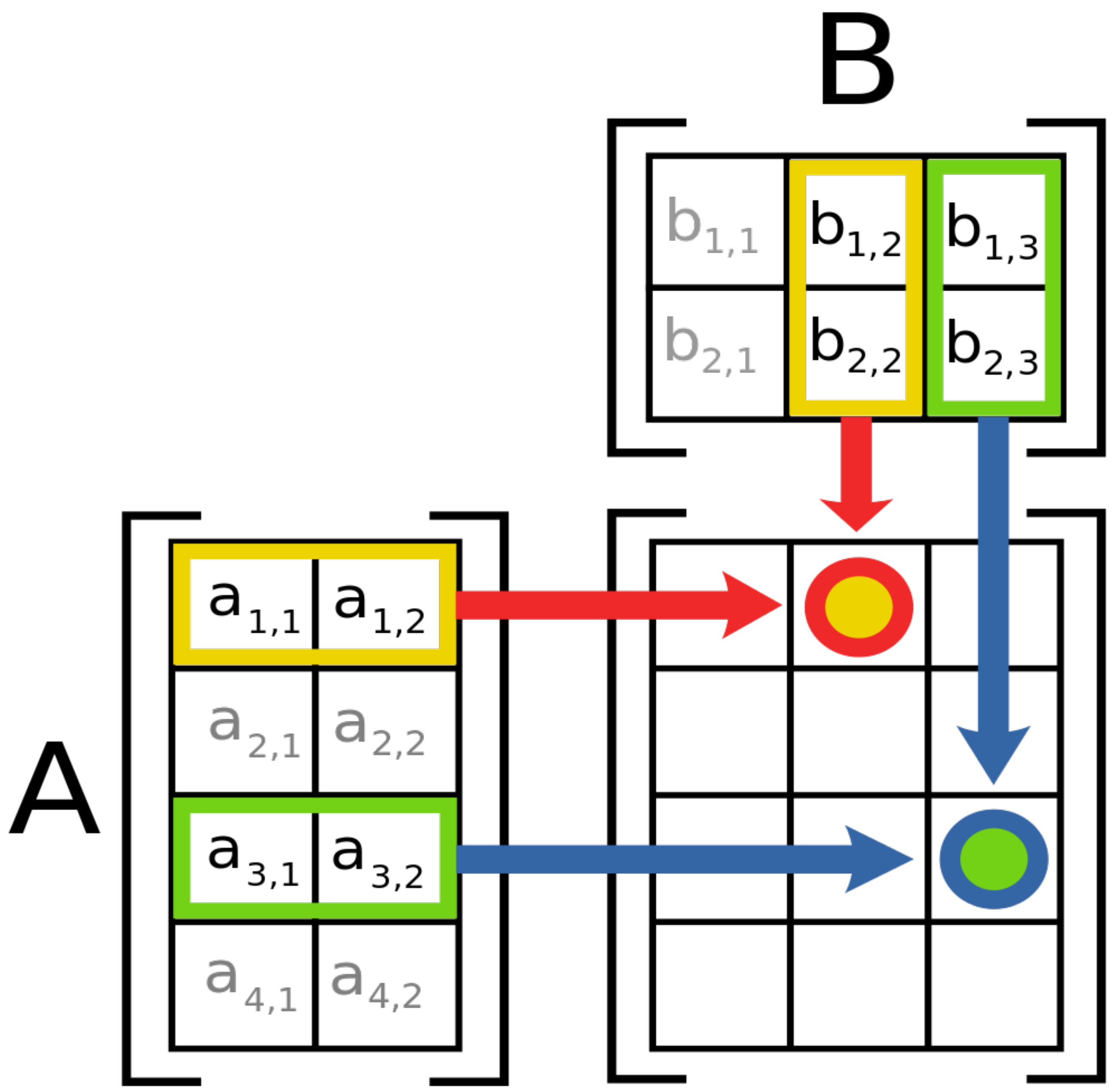
행렬의 정의

- 행렬은 실수의 사각배열으로, 다음과 같이 표기한다.
- $$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} = (a_{ij})_{\substack{1 \le i \le m, \\ 1 \le j \le n}} \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$
- $m \times n$ 행렬, m 행, n 열

행렬(Matrix)

행렬의 연산

- 행렬의 덧셈은 벡터의 경우와 마찬가지로 각 성분별로 연산:
- $A = (a_{ij}),\ B = (b_{ij})$ 둘 다 $m \times n$ 행렬이면
- 덧셈: $A + B = (a_{ij} + b_{ij})$
- 행렬 간 곱셈의 경우엔 행과 열을 순서대로 연산(그림 참고):
- $A = (a_{ij}) \in \mathbb{R}^{m \times n},\ B = (b_{jk}) \in \mathbb{R}^{n \times p}$ 행렬이면
- $AB = ((ab)_{ik}) = (a_{i1}b_{1k} + \cdots + a_{in}b_{nk}),\ AB \in \mathbb{R}^{m \times p}$



행렬(Matrix)

행렬의 전치(transpose)

- 행렬의 전치(transpose)는 행과 열을 바꾸는 연산이다:
- $m \times n$ 행렬 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$라 하면 $A^T = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{m1} \\ a_{12} & \cdots & a_{m2} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{1n} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}$
- 행렬의 전치 연산에는 다음과 같은 성질이 있다:
- $(A+B)^T = A^T + B^T, \quad (AB)^T = B^T A^T$

A

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}$$

행렬(Matrix)

행렬의 대각합(trace)

- 행렬의 대각합(trace)은 $n \times n$ 행렬(정사각행렬)의 대각원소들의 합을 의미한다.
- $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$ 일 때 $tr(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$
- 행렬의 대각합 연산에는 다음과 같은 성질이 있다:
- $tr(AB) = tr(BA), \quad tr(A+B) = tr(A) + tr(B)$
- $tr(A^T A) = tr(AA^T) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2$

행렬(Matrix)

행렬과 벡터, 내적

- 일반적으로 벡터를 열이 1개인 행렬로 간주한다. 즉, 다음과 같이 표기한다:
- $$x = (x_1, \cdots, x_n) = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$$
- 이를 행렬의 관점에서 열벡터(column vector)라고 부르기도 한다.
  한 편, 첫 번째 등식처럼 표기하는 것을 행벡터(row vector)라 한다.
- 이렇게 표기할 경우, 벡터 간의 내적을 행렬 연산으로 표기할 수 있다:
- $\forall x, y \in \mathbb{R}^n, x \cdot y = x^T y = y^T x$

행렬(Matrix)

행렬의 열벡터공간(column space)

- 행렬 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$ 의 열벡터를 $a_1 = \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix}, \cdots, a_n = \begin{pmatrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix}$ 라 하면
- 열벡터들의 선형결합(linear combination)으로 이루어지는 집합을 의미한다.
- $col(A) = \{\beta_1 a_1 + \cdots + \beta_n a_n : \beta_i \in \mathbb{R}^n\}$
- 즉, A의 열벡터들로 만들어내는 모든 벡터들을 의미한다.

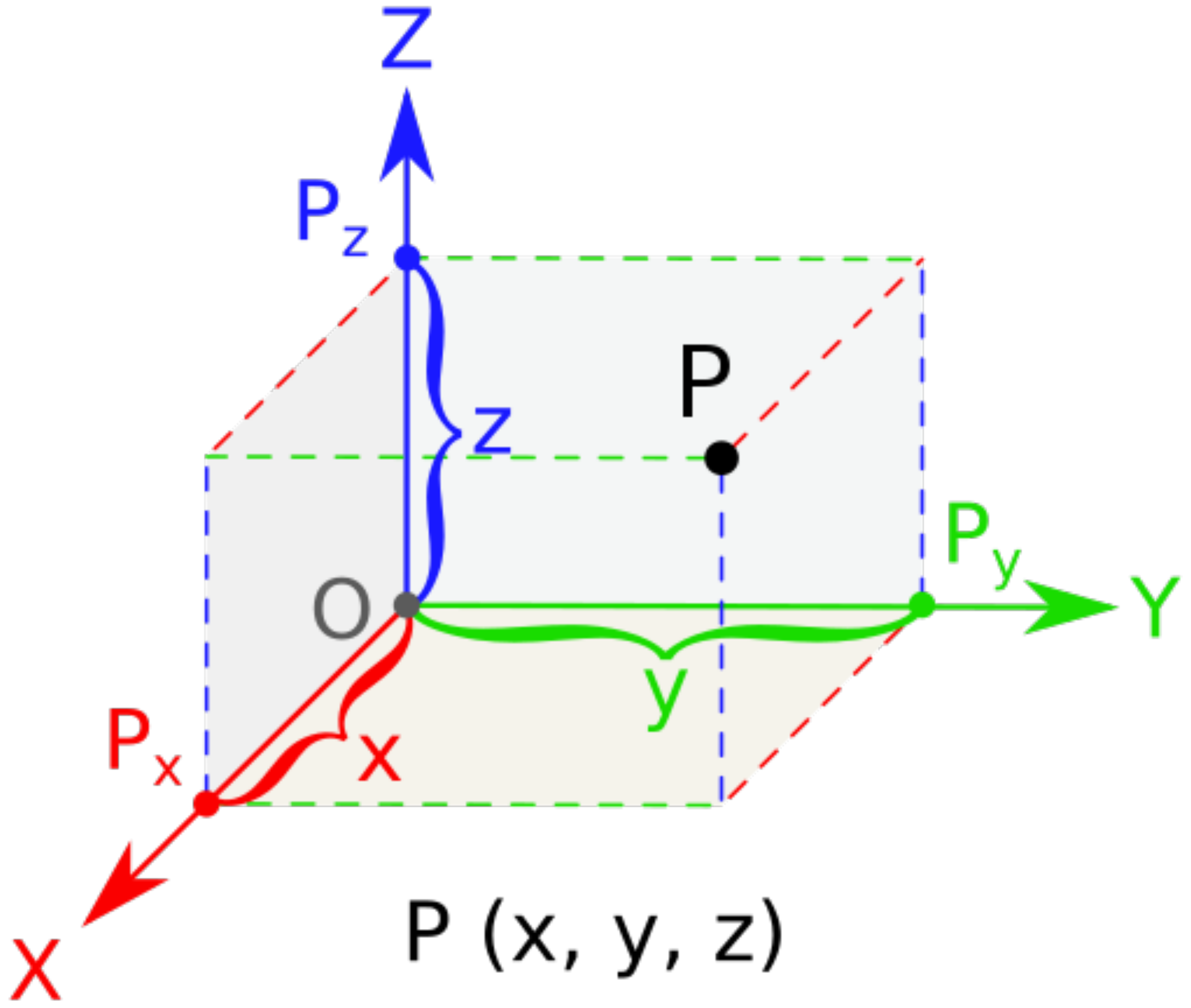
행렬(Matrix)

선형독립성(linearly independence)

- 벡터 $a_1 = \begin{pmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix}, \cdots, a_n = \begin{pmatrix} a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{pmatrix}$ 중의 어느 하나도 나머지 벡터들의 선형결합으로 표현되지 않을 때, $a_1, \cdots, a_n$ 이 선형독립(linearly independent)라 한다.
이를 수식적으로 다음과 같이 표현한다:

- $\beta_1 a_1 + \cdots + \beta_n a_n = 0 \Leftrightarrow \beta_1 = \cdots = \beta_n = 0$

- 가장 대표적인 선형독립인 벡터는 3차원 실수공간에서의 각 축을 대표하는 $e_1 = (1,0,0)^T,\ e_2 = (0,1,0)^T,\ e_3 = (0,0,1)^T$ 를 들 수 있다.



행렬(Matrix)

행렬의 계수(rank)

- 행렬 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$의 계수(rank)란, A의 열벡터 $a_1, \cdots, a_n$ 중에서 선형독립인 열벡터들의 최대개수를 의미한다.

행렬(Matrix)

열벡터공간의 기저(basis)와 차원(dimension)

- 행렬 $A = (a_1, \cdots, a_n)$ 의 열벡터공간 $col(A) = \{\beta_1 a_1 + \cdots + \beta_n a_n : \beta_i \in \mathbb{R}^n\}$ 의 임의의 벡터를 선형결합으로 표현할 수 있는 벡터 $b_1, \cdots, b_k$ 들로서 선형독립인 벡터들을 열벡터공간의 기저(basis)라고 하고, 그 개수 k를 열벡터공간의 차원(dimension)이라 한다.

- 앞선 e_1, e_2, e_3를 열로 가지는 행렬 $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$의 경우, 열벡터 공간이 곧 $\mathbb{R}^3$ 이고, e_1, e_2, e_3 이 곧 기저가 되므로 $\mathbb{R}^3$은 3차원 공간이다.

행렬(Matrix)

항등행렬(identity matrix)과 역행렬(inverse matrix)

- $n \times n$ 항등행렬 : $I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$
- 역행렬: $n \times n$ 행렬 A에 대해 $AA^{-1} = A^{-1}A = I_n$ 인 행렬 A^{-1}이 존재하면, A^{-1}를 A의 역행렬이라고 한다. 또한, 역행렬이 존재하는 행렬을 정칙행렬(nonsingular matrix)이라 하기도 한다.
- A, B의 역행렬을 각각 A^{-1}, B^{-1}이라 하면, AB의 역행렬이 존재하고 다음이 성립한다:
- $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$

행렬(Matrix)

행렬 계수의 성질

- $rank(A^T) = rank(A)$
- $rank(A + B) \leq rank(A) + rank(B)$
- $rank(AB) \leq rank(A)$, $rank(AB) \leq rank(B)$
- A가 정칙행렬이면 $rank(AB) = rank(B)$
- B가 정칙행렬이면 $rank(AB) = rank(A)$

행렬(Matrix)

행렬식

- 행렬 $A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$ 에서 첫번째 행과 j번째 열을 빼버린 $(n-1) \times (n-1)$행렬을 $\tilde{A}_{1j}$ 라 하면 A의 행렬식(determinant) $\det(A)$ 또는 $|A|$는 다음과 같이 정의한다:
- $\det(A) = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{1+j} a_{1j} \det(\tilde{A}_{1j})$
- $|A| = \begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}$

행렬(Matrix)

행렬식의 성질

- $\det(AB) = \det(A)\det(B),\ \det(A^T) = \det(A),\ \det(I) = 1$
- A의 역행렬 A^{-1}이 존재한다 $\Leftrightarrow\ \det(A) \neq 0$
- A의 역행렬 A^{-1}이 존재할 때, $\det(A^{-1}) = \dfrac{1}{\det(A)}$
- $\det(A) \neq 0$ 일 때, $(A^{-1})_{ij} = (-1)^{j+i}\dfrac{\det(\tilde{A}_{ji})}{\det(A)}$

행렬(Matrix)

고유값(eigenvalue)과 고유벡터(eigenvector)

- $n \times n$ 행렬 A에 대해 $Ax = \lambda x,\ x \neq 0$ 을 만족시키는 복소수 λ와 복소수를 성분으로 하는 벡터 x를 각각 A의 고유값과 그에 대응하는 고유벡터라고 한다.
- 고유값 λ를 구하기 위해선 다음의 고유방정식(characteristic equation)을 풀어야 한다:
- $\det(A - \lambda I_n) = 0$

행렬(Matrix)

행렬의 종류

- 대칭행렬(symmetric matrix) : 대각 원소에 대하여 대칭인 원소가 같은 $n \times n$ 행렬.
  즉, $A = A^T$ 이면 A 는 대칭행렬이다.

- 직교행렬(orthogonal matrix) : 열벡터들이 서로 직교하고 길이가 1인 행렬.
  즉, 행렬 P 가 $PP^T = P^TP = I$를 만족하면 P는 직교행렬이다.

- 특히 직교행렬의 경우, 역행렬의 정의에 따라 전치행렬이 곧 역행렬이 된다. 즉, 다음이 성립한다:

- $P^{-1} = P^T, (P^T)^{-1} = P = (P^T)^T = (P^{-1})^T$

행렬(Matrix)

대칭행렬의 대각화정리(Spectral Theorem)

- 원소가 실수인 $n \times n$ 행렬 A가 대칭행렬이면,

  $$Ax_i = \lambda_i x_i,\ x_i^T x_i = 1,\ x_i^T x_j = 0 \quad \forall i \neq j,\ \ i, j = 1, \cdots, n$$

  를 만족시키는 실수의 고유값 λ_i 와 실수 성분의 고유벡터 x_i 가 존재한다. 즉,

  $$A = PD(\lambda_i)P^T,\ PP^T = P^T P = I_n$$

  인 직교행렬 $P = (x_1, \cdots, x_n)$ 가 존재한다.

- 위의 정리를 이용하여 대칭행렬 A에 대한 다음의 성질들을 쉽게 보일 수 있다:

- $$\det(A) = \det(D(\lambda_i)) = \Pi_{i=1}^n \lambda_i, \quad tr(A) = tr(D(\lambda_i)) = \sum_{i=1}^n \lambda_i$$

- 이 정리는 후에 다룰 주성분분석(Principal Component Analysis), 주성분회귀(PC regression), 요인분석(Factor Analysis) 등의 이론적 근거가 되며, 공분산 행렬 성질 연구에 큰 역할을 한다. 또한 행렬 계산의 효율성 극대화를 보장해주는 역할을 한다.

행렬(Matrix)

대칭 양준정부호 행렬(symmetric positive semi-definite matrix)

- 줄여서 SPSD 행렬이라고 부르기도 한다.
- 실수가 원소인 $n \times n$ 대칭행렬 A에 대해 $x^T Ax \geq 0,\ x \in \mathbb{R}^n$ 가 성립하면 A가 음이 아닌 정부호(nonnegative definite), 또는 양의 준정부호(positive semi-definite) 행렬이라 한다.
- 위의 정의는 다음의 조건들과 동치이다:
- A의 모든 고유값이 0 이상이다.
- $A = A^{1/2}A^{1/2}$ 인 실수가 원소인 대칭행렬 $A^{1/2}$가 존재한다.
- 바로 위의 성질은 대칭행렬, 더 일반적으로 에르미트 행렬(Hermitian matrix)의 분해인 촐레츠키 분해(Cholesky decomposition)의 이론적 근거가 될 수 있다. 이 또한 행렬 연산의 효율성을 보장해주는 분해 기법이다.

행렬(Matrix)

대칭 양정부호 행렬(symmetric positive definite matrix)

- 줄여서 SPD 행렬이라고 부르기도 한다.
- 실수가 원소인 $n \times n$ 대칭행렬 A에 대해 $x^TAx > 0,\ x \in \mathbb{R}^n \backslash \{0\}$ 가 성립하면 A가 양의 정부호(positive definite) 행렬이라 한다.
- 이는 음이 아닌 정부호의 행렬로서 역행렬을 갖는 정칙행렬인 것을 뜻한다.
- 즉, 모든 고유값이 0보다 크다는 것과 동치이다.
- SPSD, SPD 행렬의 대표적인 예시로 공분산 행렬을 들 수 있으며, 이는 곧 금융데이터에서 포트폴리오 최적화, 리스크 관리와 같이 확률적인 접근이 필요한 모든 영역에서 찾아볼 수 있다.
- 또한 고급 머신러닝 기법에 주로 이용되는 커널(kernel)을 이해하는 데에 필수적이다.

행렬(Matrix)

특이값 분해(singular value decomposition; SVD)

- $m \times n$ 행렬 M 의 계수가 $r = rank(M) \leq \min(m, n)$ 일 때, 행렬 $U_{m\times r}, \Sigma_{r\times r}, V_{n\times r}$이 존재하여 다음을 만족한다:
- $M = U\Sigma V^T, \quad U^TU = VV^T = I_r, \Sigma = D(\sigma_i), \sigma_1 \geq \cdots \geq \sigma_r > 0$
- 이 때 σ_i 들을 특이값(singular value)이라 하며, U, V의 열벡터를 각각 좌-특이벡터(left singular vector), 우-특이벡터라 하기도 한다.
- 한 편, MM^T, M^TM 둘 다 SPSD 행렬이므로, 대칭행렬의 대각화정리에 의해 U, V의 열벡터들이 각각 MM^T, M^TM의 고유벡터임을 알 수 있으며, 이에 따라 특이값은 0보다 큰 고유값의 양의 제곱근임을 알 수 있다.
- 특이값 분해또한 PCA와 같은 행렬 분해 기반 기법의 이론적 근거가 되며, 특히 이미지 인식이나 의생명과학 데이터들을 연구하는 데에 주력으로 이용되고 있다.

행렬(Matrix)

대칭행렬의 멱등 조건과 정사영 행렬

- 원소가 실수인 $n \times n$ 대칭행렬 A 에 대해 $AA = A$ 가 성립하면, 이를 $A^2 = A$ 로 나타내고 대칭행렬 A 가 멱등(idempotent) 이라 한다. 다음의 각 조건은 모두 대칭행렬 A가 멱등일 조건과 동치이다:

- A의 모든 고유값은 0 또는 1이다.

- $rank(A) + rank(I_n - A) = rank(I_n) = n$

- 한 편, 대칭행렬 A가 멱등이면 임의의 $x \in \mathbb{R}^n$ 에 대해

  $$x = x_1 + x_2,\ x_1 \in col(A),\ x_2 \perp col(A),\ \text{즉 } x_2^T A = 0$$

  을 만족하는 x_1, x_2 가 유일하게 존재한다. 실제로 $x_1 = Ax$, $x_2 = (I_n - A)x$ 이고, 이러한 의미에서 $x_1 = Ax$ 를 x 의 열공간 $col(A)$ 으로의 정사영이라고 한다. 즉, 멱등행렬은 자신의 열공간으로의 정사영 행렬이다.

행렬(Matrix)

열벡터공간으로의 정사영 행렬

- 원소가 실수인 $n \times k$ 행렬 X 의 계수가 k 일 때, 행렬

  $\Pi_X = X(X^T X)^{-1} X^T$ 는 X 의 열벡터공간으로의 정사영 행렬이다.

- 이러한 행렬은 회귀분석의 최적 비편향 선형 예측기(best linear unbiased predictor; BLUP) 에서 확인할 수 있다.

- 즉, 선형 회귀분석을 통한 예측은 정사영을 통해 예측하는 것으로 이해할 수 있다.

행렬(Matrix)

직교여공간(orthogonal complement)

- 원소가 실수인 $n \times k$ 행렬 $(X_0\ X_1)$ 의 열벡터공간

  $col((X_0\ X_1)) = \{X_0\beta_0 + X_1\beta_1 : \beta_0 \in \mathbb{R}^{k-r}, \beta_1 \in \mathbb{R}^r\}$

  의 벡터로서 X_0의 열벡터들과 직교하는 벡터들의 집합, 즉

  $\{a \in col((X_0\ X_1)) : a^T X_0 = 0\}$

  을 X_0 의 열벡터공간의 직교여공간(orthogonal complement)이라고 한다.

- 즉, X_0 로 표현되는 공간과 직교하는 모든 $(X_0\ X_1)$ 의 열벡터공간의 원소들의 집합이다.

행렬(Matrix)

열벡터공간의 직교 분해(orthogonal decomposition)

- 원소가 실수인 $n \times k$ 행렬 X 의 계수가 k 이고

  $X = (X_0\ X_1),\ X_0 : n \times r,\ X_1 : n \times (k - r)$ 일 때,

  $\Pi_{0,1} = X(X^T X)^{-1} X^T,\ \Pi_0 = X_0(X_0^T X_0)^{-1} X_0^T,$

  $X_{1|0} = (I - \Pi_0)X,\ \Pi_{1|0} = X_{1|0}(X_{1|0}^T X_{1|0})^{-1} X_{1|0}^T$

  라고 하면 다음이 성립한다:

- $col((X_0\ X_1)) = col((X_0\ X_{1|0}))$

- $col(X_{1|0})$ 는 $(X_0\ X_1)$ 의 열벡터공간에서 X_0 의 열벡터공간의 직교여공간이다.

- $\Pi_{0,1} = \Pi_0 + \Pi_{1|0},\ \Pi_0 \Pi_{1|0} = 0$

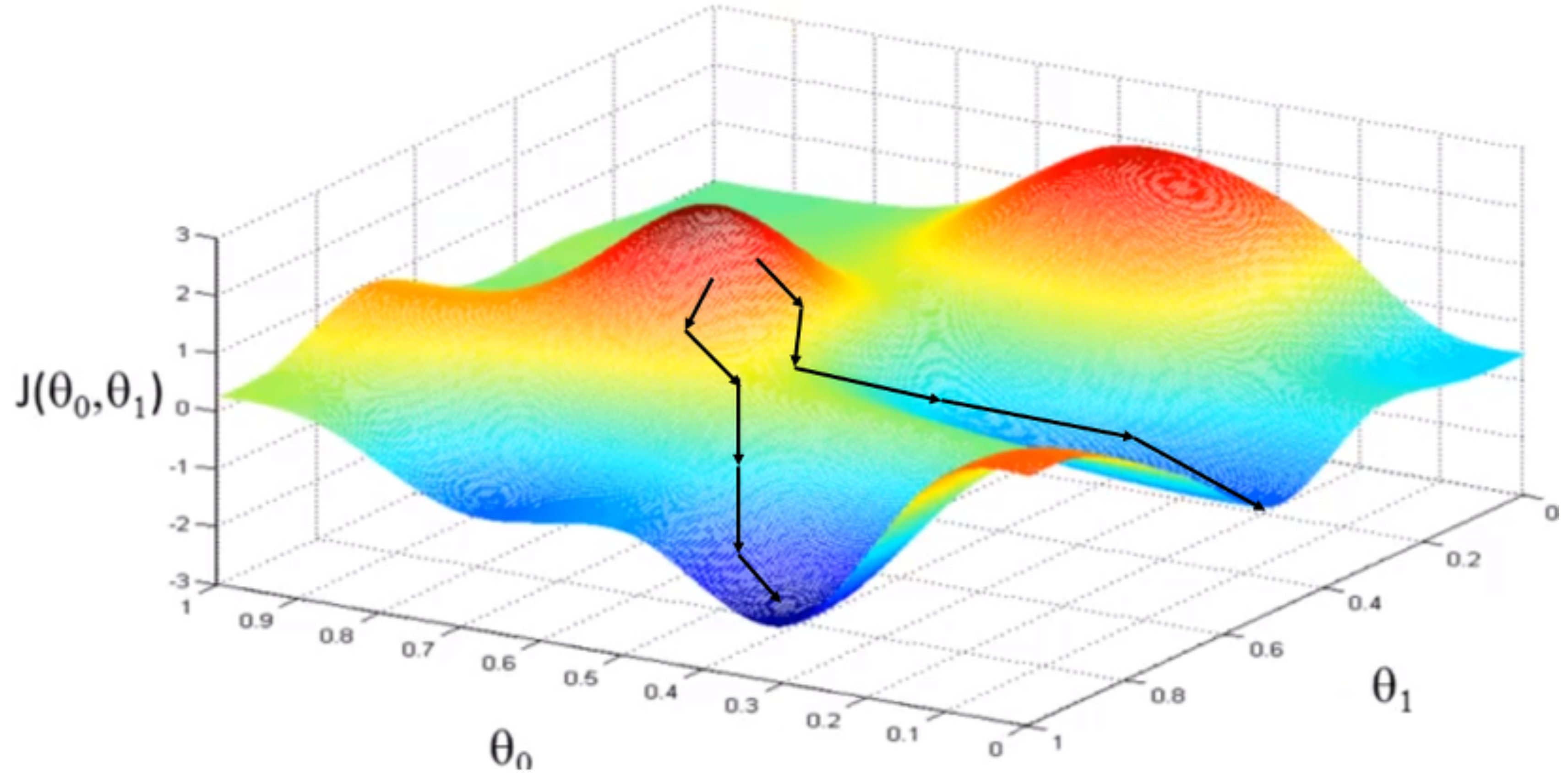
- 즉, X 에서 X_0 에 직교하는 성분들을 $X_{1|0}$ 으로 추출해내고, 각각의 정사영 행렬을 $\Pi_0, \Pi_{1|0}$ 으로 나타냈을 때 두 정사영 행렬 또한 서로 직교하게 만들 수 있다.

최적화 이론

미분과 비제약 최적화

기울기(gradient)와 헤세 행렬(Hessian matrix)

- $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ 이 미분가능한 함수라고 하자. 이 때, f 의 $x = (x_1, \cdots, x_N)^T \in \mathbb{R}^N$ 에서의 기울기(gradient)는 다음과 같이 정의한다:
- $\nabla f(x) = \left(\dfrac{\partial f}{\partial x_1}, \cdots, \dfrac{\partial f}{\partial x_N} \right)^T$, 라 표기하며 나블라 f, 또는 델 f 라고 부른다.
- 즉, f 의 기울기는 x 의 각 성분들로 편미분한 것들을 원소로 하는 벡터이다.
- 기울기 벡터를 화살표로 표현한다면, 화살표의 방향은 증가율이 최대가 되는 방향이며
  화살표의 크기는 증가율이 최대일 때의 증가율의 크기를 의미한다.
  이러한 기하적 성질을 이용한 알고리즘이 딥러닝의 경사하강법(gradient descent)이다.



- 한 편, $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ 가 두 번 미분가능한 함수라고 하자. 이 때 f 의 $x = (x_1, \cdots, x_N)^T \in \mathbb{R}^N$ 에서의
  헤세 행렬(Hessian matrix)는 다음과 같이 정의한다:
- $\nabla^2 f(x) = \left(\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{1 \le i,j \le N}$
- 즉, 마치 1차원 함수에서의 이계도함수와 같은 역할을 하는 행렬으로, 자세한 성질은 볼록성에서 다룬다.

미분과 비제약 최적화

페르마 정리(Fermat's Theorem)

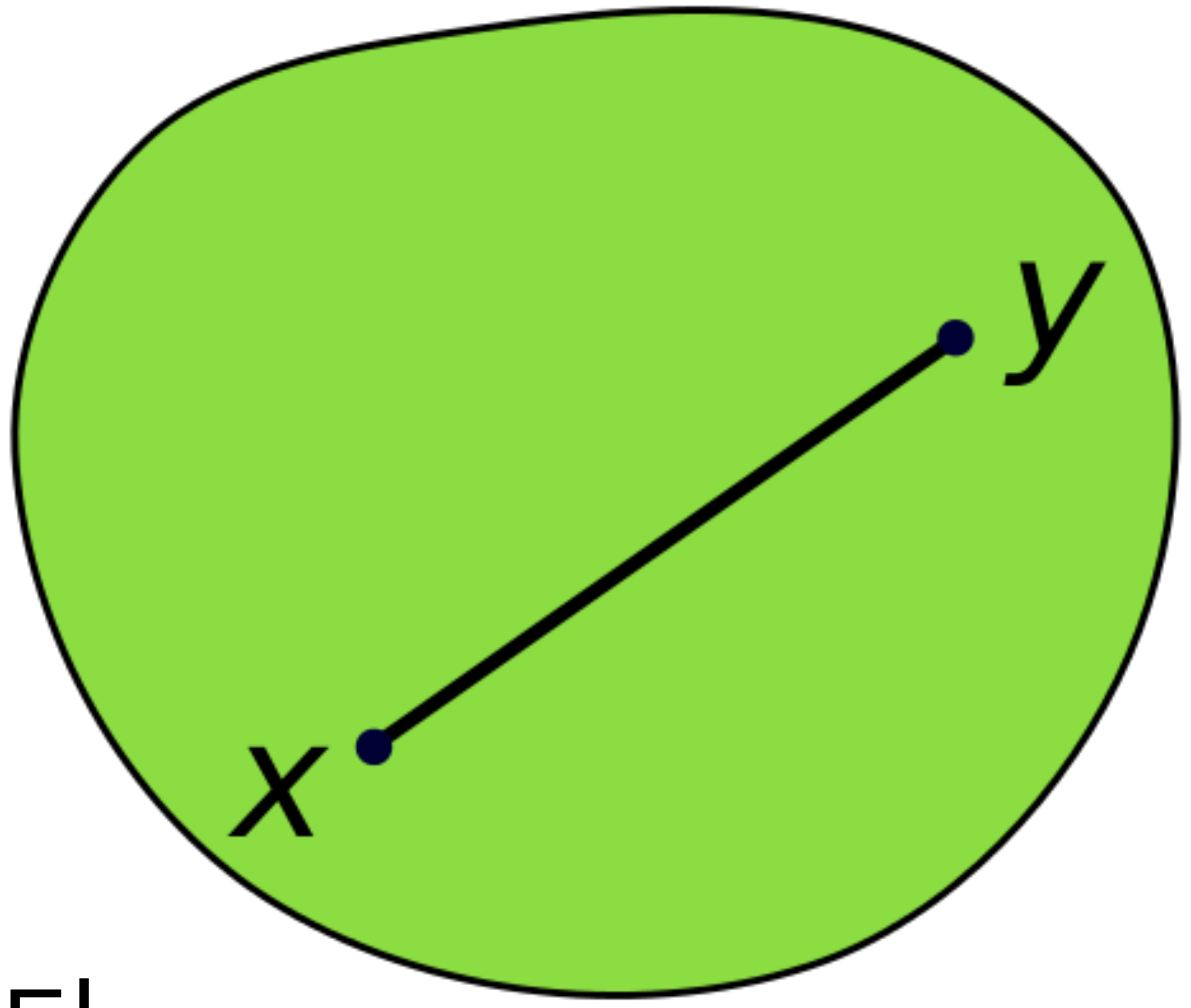
- $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$가 미분가능하다고 하자. 만약 f가 $x' \in \mathbb{R}^N$에서 극값(local extremum; 극댓값 또는 극솟값을 의미)을 가진다면, $\nabla f(x') = 0$이 성립한다.
- 이는 마치 1차원 함수가 극값에서 미분값이 0인 것과 같다. 즉, 1차원 함수를 고차원으로 확장시킨 결과물으로 생각할 수 있다.

볼록성(Convexity)

볼록집합(convex set)

- 집합 $\mathscr{X} \in \mathbb{R}^N$ 가 다음 조건을 만족한다면 $\mathscr{X}$ 를 볼록집합(convex set)이라 부른다:

$$\{\alpha x + (1 - \alpha)y : 0 \leq \alpha \leq 1\} \subseteq \mathscr{X}$$

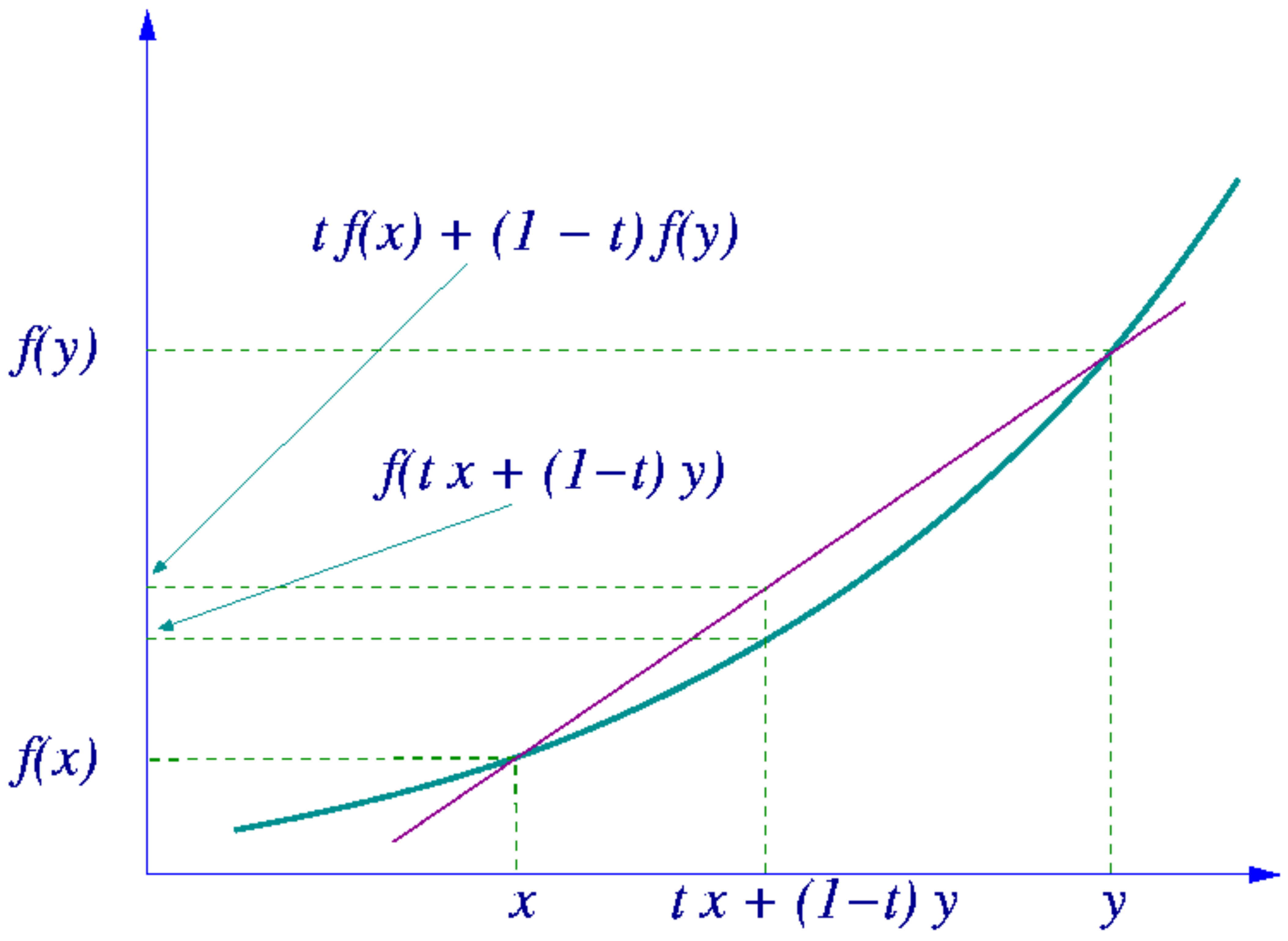


- 뒤에 정의할 볼록함수는 항상 볼록집합 위에서 정의되어야 한다.
- 즉, 볼록함수의 정의역은 항상 볼록집합이어야 한다.
- 그러나, 편의상 볼록함수의 정의역을 실수공간으로 두고 정의한다.

볼록성(Convexity)

볼록함수(convex function)의 정의

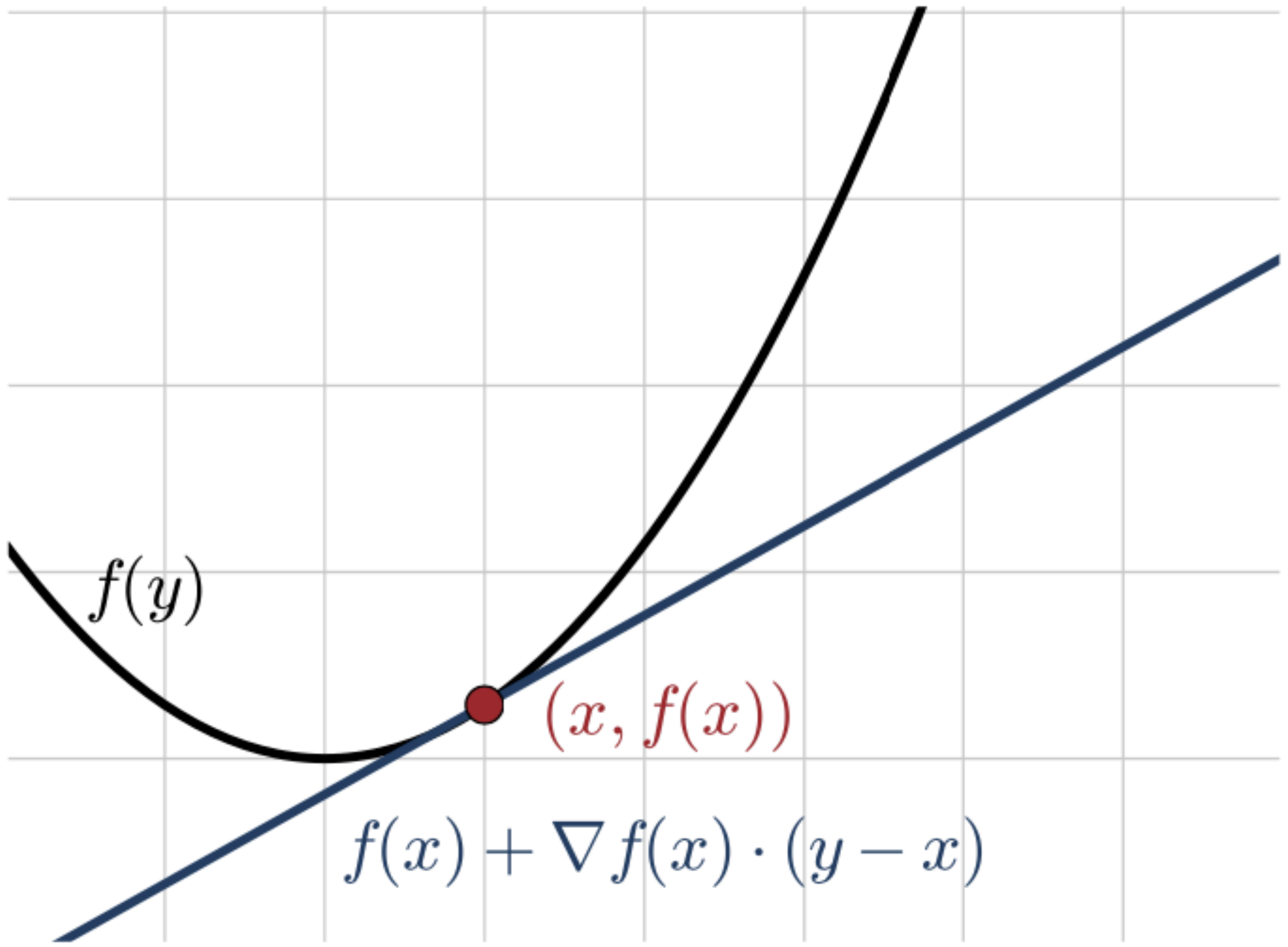
- 함수 $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ 가 모든 $x, y \in \mathbb{R}^N$ 와 $\alpha \in [0,1]$ 에 대해 다음이 성립할 때, 함수 f 를 볼록함수(convex function)이라 부른다:
- $f(\alpha x + (1-\alpha)y) \leq \alpha f(x) + (1-\alpha)f(y)$
- 부등호가 반대로 되어있으면 오목함수 (concave function)이라 부른다.



볼록성(Convexity)

볼록함수의 성질

- 함수 $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ 가 볼록함수임은 다음 조건들과 동치이다:
- $\forall x, y \in \mathbb{R}^N,\ \ f(y) - f(x) \geq \nabla f(x) \cdot (y - x)$
- $\forall x \in \mathbb{R}^N, \nabla^2 f(x)$ 가 SPSD 행렬. 즉, $a^T \nabla^2 f(x) a \geq 0, \forall a \in \mathbb{R}^N$
- 첫 번째 조건은 볼록함수의 접선은 항상 볼록함수 밑에 있다는 사실을 확장한 결과이다.
- 두 번째 조건은 이계도함수가 양수일 때 볼록함수임을 확장한 결과이다.



볼록성(Convexity)

볼록함수의 예시

- 선형함수(linear function) : $f(x) = a^T x + b,\ f(x) = x_1 + \cdots + x_n$ 등등
- 2차 함수(quadratic function) : $f(x) = x^2$ 등등
- 노름(Norm)
- 최대 함수(maximum function) : $f(x) = \max_{i=1,\cdots,n} x_i$

제약 최적화

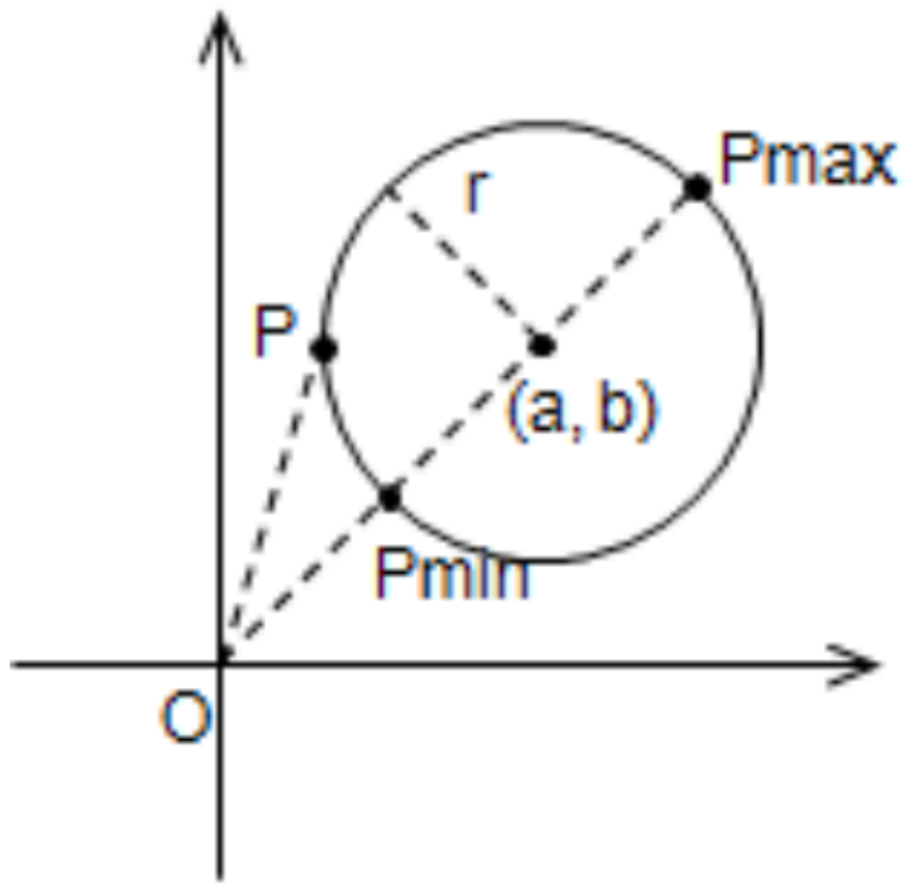
내부(interior), 최소상한과 최대하한(supremum, infimum)

- $\mathscr{X} \in \mathbb{R}^N$ 의 내부(interior) $int(\mathscr{X})$ 또는 $\mathscr{X}^\circ$ 은 $\mathscr{X}$ 를 근방으로 하는 점들로 구성된 집합이다. 즉, 다음 조건을 만족시키는 점 $x \in \mathscr{X}$ 들의 집합이다:
- $B(x, r)$ 을 x를 중심으로 하는 반지름 r 인 원 또는 구라고 할 때, 적당한 $\epsilon > 0$ 이 존재하여 $x \in B(x, \epsilon) \subset \mathscr{X}$ 를 만족한다.
- 즉, x 주변 사방에 $\mathscr{X}$에 포함되는 다른 점이 항상 존재하다면, x 를 내부점(interior point) 라 하고, 그러한 점들의 집합을 $\mathscr{X}$의 내부라고 한다.
- 한 편, 어떤 집합 $S \in \mathbb{R}$ 의 모든 원소가 다음을 만족한다고 하자:
- $\forall s \in S, s \leq M$
- 만약 $m < M$ 이면 어떤 $s \in S$ 가 존재하여 $m < s < M$ 을 만족한다.
- 이러한 M 을 S의 최소상한(least upper bound, supremum)이라 부르며, $M = \sup_{s \in S} s = \sup S$ 로 표기한다.
- 마찬가지로, 정확히 반대의 개념으로 최대하한(greatest lower bound, infimum)이 있으며, $m = \inf_{s \in S} s = \inf S$ 로 표기한다.
- 즉, 최소상한과 최대하한은 각각 $\max$, $\min$ 을 확장한 개념이라 볼 수 있다.

볼록성(Convexity)

부분 하한 정리(partial infimum)

- 볼록함수 f 가 볼록집합 $\mathscr{C} \subseteq \mathscr{X} \times \mathscr{Y}$ 에서 정의되고, $\mathscr{A} = \{x \in \mathscr{X} : \exists y \in \mathscr{B} \,|\, (x, y) \in \mathscr{C}\}$ 가 공집합이 되지 않도록 하는 볼록집합을 $\mathscr{B} \subseteq \mathscr{Y}$ 라 할 때, $\mathscr{A}$ 는 볼록집합이며 $\mathscr{A}$ 상에서 정의되는 함수 $g(x) = \inf_{y \in \mathscr{B}} f(x, y)$ 는 볼록함수이다.
- 정리 자체의 서술이 어려우니, 예시를 통해 정리가 무엇을 의미하는지 이해해보자.
- 2차원 공간에서의 원 B를 생각하자. 이 때 점 $x \in \mathbb{R}^2$에서 B 까지의 거리는 다음과 같이 정의할 수 있다:
- $g(x) = d(x, B) = \inf_{y \in B} \|x - y\|_2$
- 즉, 원 내부에 있는 모든 점들 중 x와 가장 가까운 점을 찾아서 그 점과의 거리를 $g(x)$라고 정의할 수 있다.
- 이 때 부분 하한 정리는 함수 $g(x)$가 볼록함수임을 말해주는 정리이다.
- 정리 자체가 중요한 것이 아니라 뒤에 나올 쌍대성에서 중요하게 쓰이기 때문에, 의미하는 바만 이해하고 넘어가자!



제약 최적화

제약 최적 문제와 라그랑지안

- $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^N$에서 실수값을 가지는 함수 $f, g_i,\ i = 1,\cdots,n$ 의 정의역이라 하자.
  이 때 제약 최적화 문제(constrained optimization problem)는 다음과 같은 형식이다:
- $\min_{x\in\mathcal{X}} f(x)$ subject to $g_i(x) \le 0,\ i = 1,\cdots,n$
- 이를 보통 원초 문제(primal problem) 라 부르기도 한다.
- 한 편, 위의 제약 최적화 문제에 대응되는 라그랑지안(Lagrangian) 또는 라그랑지 함수는 다음과 같이 정의된다:
- $$\forall x \in \mathcal{X}, \forall \alpha_i \ge 0, \quad \mathcal{L}(x,\alpha) = f(x) + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i g_i(x)$$
- 이 때 $\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_n)^T$ 를 라그랑지(Lagrange) 또는 쌍대 변수(dual variable) 라 부른다.
- 만약 제약 최적화 문제에서 제약식이 $g_i(x) = 0$ 으로 부등호가 아닌 등호로 주어진 경우
  $g_i(x) \le 0, \ -g_i(x) \le 0$ 인 것과 동치이므로 이를 이용하면 α 의 각 성분이 0보다 크다는 조건이 필요 없어진다.
- 원초 문제를 푸는 것과 라그랑지안을 최소화 시키는 것이 동치임은 알려져 있으며, 일반적으로 페르마 정리를 활용하여 접근한다. 특히 라그랑지안이 항상 미분가능하다면, 연립방정식의 해 중에 최적해가 존재한다.

제약 최적화

쌍대성(duality)

- 앞서 주어진 제약 최적화 문제에 상응하는 쌍대 함수(dual function)는 다음과 같이 정의된다:
- $\forall \alpha_i \geq 0, \quad F(\alpha) = \inf_{x \in \mathscr{X}} \mathscr{L}(x, \alpha) = \inf_{x \in \mathscr{X}} \left(f(x) + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i g_i(x) \right)$
- 이 때, 앞서 살펴본 부분 하한 정리에 의해 $F(\alpha)$ 는 항상 오목함수이다.
- 한 편, 앞서 주어진 제약 최적화 문제에 상응하는 쌍대적 문제(dual problem) 은 다음과 같이 정의된다:
- $\max_{\alpha} F(\alpha)$ subject to $\alpha \geq 0,\ i = 1, \cdots, n$
- 따라서 쌍대적 문제는 항상 볼록 최적화 문제(convex optimization problem) 이다.
- $p*$를 원초 문제의 최적값, $d*$를 쌍대적 문제의 최적값이라 하면
  약쌍대성(weak duality), 강쌍대성(strong duality)는 다음과 같이 정의된다:
- $d* \leq p*$ (weak duality), $d* = p*$ (strong duality)

제약 최적화

쌍대성(duality)

- 볼록 최적화 문제는 경사하강법과 같은 방법으로 매우 쉽게 최적해를 구할 수 있다.
- 약쌍대성은 어느 경우에나 항상 성립한다.
- 만약 강쌍대성이 성립한다면, 원래 함수가 볼록 또는 오목함수가 아니더라도 쉽게 최적해를 구할 수 있을 것이다.
- 따라서, 강쌍대성이 성립하는 조건들을 만족한다면 쌍대적 문제를 이용하여 제약 최적화 문제를 쉽게 풀 수 있을 것이다.
- 이러한 강쌍대성이 만족하기 위한 조건으로 Slater’s condition이 있다.

제약 최적화

슬레터 조건(Slater's condition)

- 강 슬레터 조건(strong Slater's condition) : $\mathscr{X}^\circ \neq \emptyset$ 일 때,

  $\exists \bar{x} \in \mathscr{X}^\circ : g(\bar{x}) < 0$

- 약 슬레터 조건(weak Slater's condition) : $\mathscr{X}^\circ \neq \emptyset$ 일 때,

  $\exists \bar{x} \in \mathscr{X}^\circ : \forall i = 1, \cdots, n,\ (\ g_i(\bar{x}) < 0\ ) \vee (\ g_i(\bar{x}) = 0\ \ \wedge g_i \text{ affine }\ )$

- 함수 h 가 $h(x) = w^T x + b$ 와 같이 초평면(hyperplane) 꼴으로 정의될 때 아핀(affine)이라 한다.

제약 최적화

Karush-Kuhn-Tucker(KKT) 정리

- $\mathcal{X} \subseteq \mathbb{R}^N$에서 실수값을 가지는 함수 $f, g_i,\ i = 1,\cdots,n$ 가 볼록함수이고 미분가능하며, Slater's condition이 만족한다고 하자. 그러면, $\bar{x} \in \mathcal{X}$ 가 제약 최적화 문제의 최적해임은 다음과 동치이다:
- 적당한 $\bar{\alpha} \geq 0$ 가 존재하여 다음 세 조건을 만족한다:
- $\nabla_x \mathscr{L}(\bar{x}, \bar{\alpha}) = \nabla_x f(\bar{x}) + \bar{\alpha} \cdot \nabla_x g(\bar{x}) = 0$
- $\nabla_\alpha \mathscr{L}(\bar{x}, \bar{\alpha}) = g(\bar{x}) \leq 0$
- $\bar{\alpha} \cdot g(\bar{x}) = 0$
- 한 편, 위의 세 조건을 KKT 조건이라 부른다.
- 만약 슬레터 조건, 볼록함수 등의 조건이 만족되지 않으면, KKT 조건을 만족하는 $\bar{x} \in \mathcal{X}$ 가 항상 최적해라는 보장을 할 수 없다.
- 따라서, 만약 어떤 볼록 최적화 문제가 강쌍대성의 필요조건을 만족한다면, KKT 조건을 이용하여 연립방정식을 푸는 방식으로 최적해를 얻어낼 수 있다.
- 이는 단일 분류기로 매우 훌륭한 성능을 보여주는 Support Vector Machine 의 이론적 근거가 되며, 이를 확장한 Kernel SVM에서 또한 마찬가지로 이용된다. 특히 모든 분류, 예측 문제는 제약 최적화 문제로 귀결되기 때문에, 수리적 접근을 위해서라면 기억해두는 것이 좋다!

고생하셨습니다!

참고자료

- 김우철, 수리통계학(2012), 민영사
- 응용통계 강의자료, 정성규(2020), 서울대학교 통계적학습이론 연구실
- 회귀분석 및 실습 강의자료, 박병욱(2020), 서울대학교 비모수추론 연구실
- Linear Algebra with Applications, O. Bretscher, et al.(2014), Pearson
- Convex Optimization, S. Boyd, et al.(2004), Cambridge University Press
- The Elements of Statistical Learning, T. Hastie, et al.(2017), Springer
- Foundations of Machine Learning, M. Mohri, et al.(2018), MIT Press
- Linear Models in Statistics, A. C. Rencher, et al.(2008), John Wiley & Sons, Inc
- Principles of Mathematical Analysis, W. Rudin(2006), McGraw-Hill
- Topology, J. R. Munkres(2000), Prentice Hall