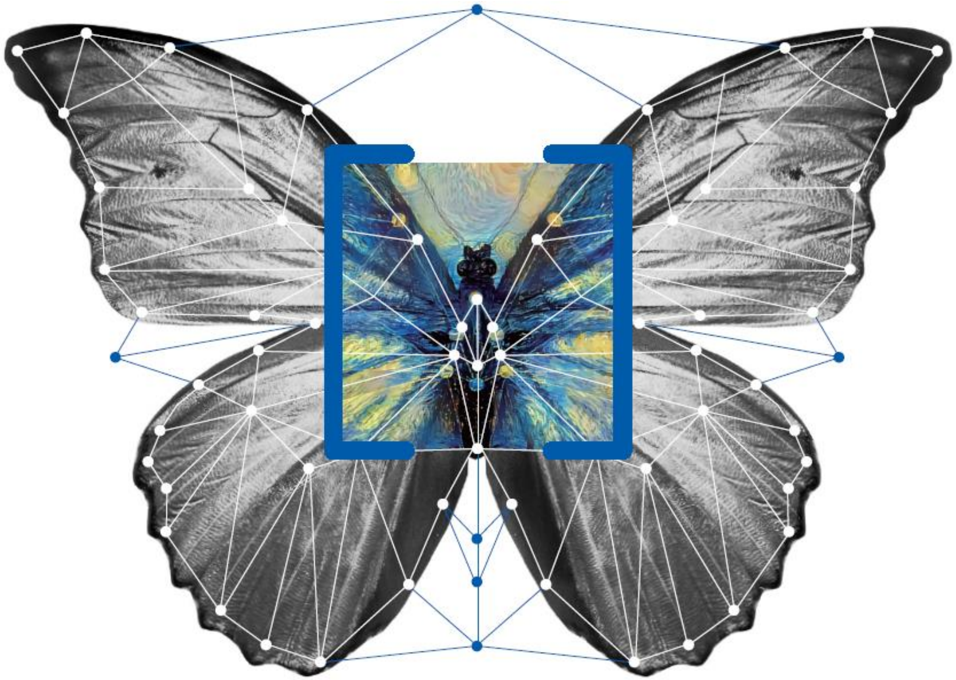
한빛아카데미 Hanbit Academy, Inc.



# MACHINE LEARNING 기계 학습

오일석 지음

# 2장. 기계 학습과 수학

# PREVIEW

## 기계 학습에서 수학의 역할

- 수학은 목적함수를 정의하고, 목적함수가 최저가 되는 점을 찾아주는 최적화 이론 제공
- 최적화 이론에 규제, 모멘텀, 학습률, 멈춤조건과 같은 제어를 추가하여 알고리즘 구축
- 사람은 알고리즘을 설계하고 데이터를 수집함

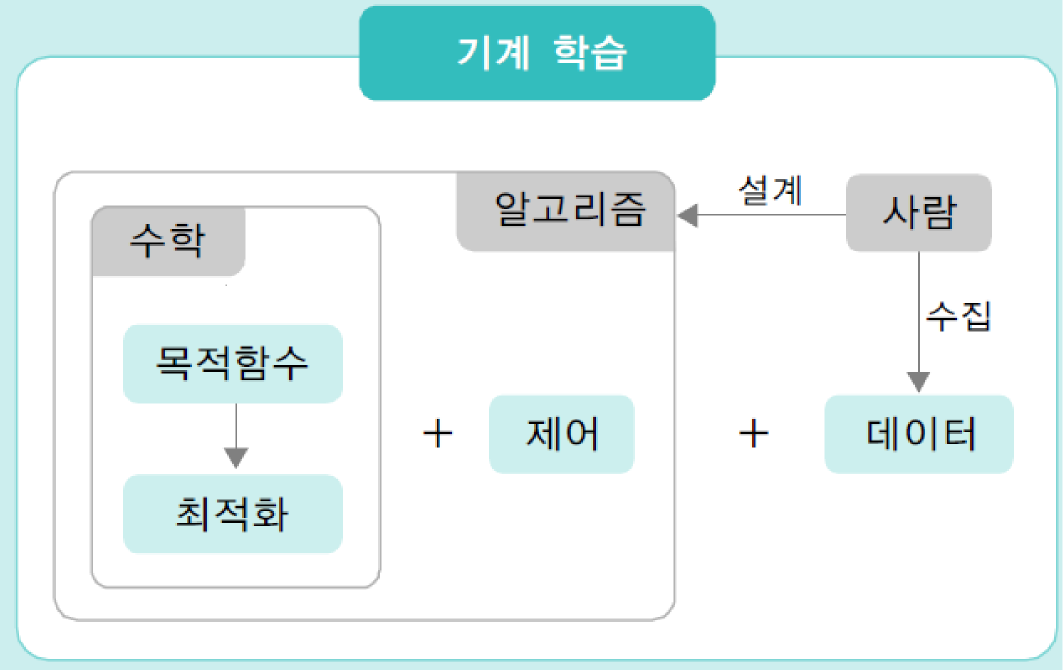



그림 2-1 기계 학습의 개념도

# 각 절에서 다루는 내용

- 2.1절: 선형대수를 다룬다.
- 2.2절: 확률과 통계를 다룬다.
- 2.3절: 최적화 이론을 다룬다.

- 선형대수: 이 분야의 개념을 이용하면 학습 모델의 매개변수집합, 데이터, 선형연산의 결합 등을 행렬 또는 텐서로 간결하게 표현할 수 있다. 데이터를 분석하여 유용한 정보를 알아내거나 특징 공간을 변환하는 등의 과업을 수행하는 데 핵심 역할을 한다.
- 확률과 통계: 데이터에 포함된 불확실성을 표현하고 처리하는 데 활용한다. 베이즈 이론과 최대 우도 기법을 이용하여 확률 추론을 수행한다.
- 최적화: 목적함수를 최소화하는 최적해를 찾는 데 활용하며, 주로 미분을 활용한 방법을 사용한다. 수학자들이 개발한 최적화 방법을 기계 학습이라는 도메인에 어떻게 효율적으로 적용할지가 주요 관심사이다.

# 2.1 선형대수

- 2.1.1 벡터와 행렬
- 2.1.2 놈과 유사도
- 2.1.3 퍼셉트론의 해석
- 2.1.4 선형결합과 벡터공간
- 2.1.5 역행렬
- 2.1.6 행렬 분해

# 2.1.1 벡터와 행렬

## 벡터

- 샘플을 특징 벡터로feature vector 표현
- 예) Iris 데이터에서 꽃받침의 길이, 꽃받침의 너비, 꽃잎의 길이, 꽃잎의 너비라는 4개의 특징이 각각 5.1, 3.5, 1.4, 0.2인 샘플

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.1 \\ 3.5 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}$$

- 여러 개의 특징 벡터를 첨자로 구분

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 5.1 \\ 3.5 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}, \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 4.9 \\ 3.0 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}, \mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix} 4.7 \\ 3.2 \\ 1.3 \\ 0.2 \end{pmatrix}, \cdots, \mathbf{x}_{150} = \begin{pmatrix} 5.9 \\ 3.0 \\ 5.1 \\ 1.8 \end{pmatrix}$$

# 2.1.1 벡터와 행렬

## 행렬

- 여러 개의 벡터를 담음
- 훈련집합을 담은 행렬을 설계행렬이라 부름
- 예) Iris 데이터에 있는 150개의 샘플을 설계 행렬 **X**로 표현

$$
\begin{array}{c}
\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 5.1 & 3.5 & 1.4 & 0.2 \\ 4.9 & 3.0 & 1.4 & 0.2 \\ 4.7 & 3.2 & 1.3 & 0.2 \\ 4.6 & 3.1 & 1.5 & 0.2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 6.2 & 3.4 & 5.4 & 2.3 \\ 5.9 & 3.0 & 5.1 & 1.8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{149,1} & x_{149,2} & x_{149,3} & x_{149,4} \\ x_{150,1} & x_{150,2} & x_{150,3} & x_{150,4} \end{pmatrix} \leftarrow \text{행row}
\\
\uparrow \\
\text{열column}
\end{array}
$$

# 2.1.1 벡터와 행렬

- 행렬 $\mathbf{A}$의 전치행렬 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1m} & a_{2m} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix}$$

예를 들어, $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 1 \\ 0 & 5 & 2 \end{pmatrix}$라면 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 5 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$

  - Iris의 설계 행렬을 전치행렬 표기에 따라 표현하면,

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{x}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{150}^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$$

# 2.1.1 벡터와 행렬

- 행렬을 이용하면 수학을 간결하게 표현할 수 있음
  - 예) 다항식의 행렬 표현

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{x}) &= f(x_1, x_2, x_3) \\
&= 2x_1x_1 - 4x_1x_2 + 3x_1x_3 + x_2x_1 + 2x_2x_2 + 6x_2x_3 - 2x_3x_1 + 3x_3x_2 + 2x_3x_3 + 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 + 5 \\
&= \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -4 & 3 \\ 1 & 2 & 6 \\ -2 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 3 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + 5 \\
&= \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + c
\end{aligned}
$$

- 특수한 행렬들

$$
\text{정사각행렬} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 1 & 21 & 5 \\ 4 & 5 & 12 \end{pmatrix}, \quad \text{대각행렬} \begin{pmatrix} 50 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix},
$$

$$
\text{단위행렬} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{대칭행렬} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 11 \\ 2 & 21 & 5 \\ 11 & 5 & 1 \end{pmatrix}
$$

# 2.1.1 벡터와 행렬

## 행렬 연산

- 행렬 곱셈 $\mathbf{C} = \mathbf{AB}$, 이때 $c_{ij} = \sum_{k=1,s} a_{ik} b_{kj}$ (2.1)

2*3 행렬 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 4 & 1 \\ 0 & 5 & 2 \end{pmatrix}$와 3*3행렬 $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 5 \\ 4 & 5 & 1 \end{pmatrix}$을 곱하면 2*3 행렬 $\mathbf{C} = \mathbf{AB} = \begin{pmatrix} 14 & 5 & 24 \\ 13 & 10 & 27 \end{pmatrix}$

  - 교환법칙 성립하지 않음: $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$
  - 분배법칙과 결합법칙 성립: $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC}$이고 $\mathbf{A}(\mathbf{BC}) = (\mathbf{AB})\mathbf{C}$

- 벡터의 내적

벡터의 내적 $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} = \sum_{k=1,d} a_k b_k$ (2.2)

$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 5.1 \\ 3.5 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}$와 $\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 4.9 \\ 3.0 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}$의 내적 $\mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2$는 37.49

# 2.1.1 벡터와 행렬

## ■ 텐서

- 3차원 이상의 구조를 가진 숫자 배열
- 예) 3차원 구조의 RGB 컬러 영상

$$\mathbf{A} = \begin{array}{cccccccc} & & 4 & 1 & 0 & 3 & 2 & 2 \\ & 2 & 0 & 2 & 2 & 3 & 1 & 6 \\ 3 & 0 & 1 & 2 & 6 & 7 & 6 & 3 \\ 3 & 1 & 2 & 3 & 5 & 6 & 3 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & 2 & 3 & 0 & 3 \\ 3 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 3 & 1 \\ 5 & 4 & 1 & 3 & 3 & 3 & 1 & \\ 2 & 2 & 1 & 2 & 2 & 1 & & \end{array}$$

# 2.1.2 놈과 유사도

- 벡터와 행렬의 크기를 놈으로 측정
  - 벡터의 $p$차 놈

$$p\text{차 놈: } \|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1,d} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \tag{2.3}$$

$$\text{최대 놈: } \|\mathbf{x}\|_\infty = \max(|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_d|) \tag{2.4}$$

- 예) $\mathbf{x} = (3 \;\; -4 \;\; 1)$ 일 때, 2차 놈은 $\|\mathbf{x}\|_2 = (3^2 + (-4)^2 + 1^2)^{1/2} = 5.099$

  - 행렬의 프로베니우스 놈

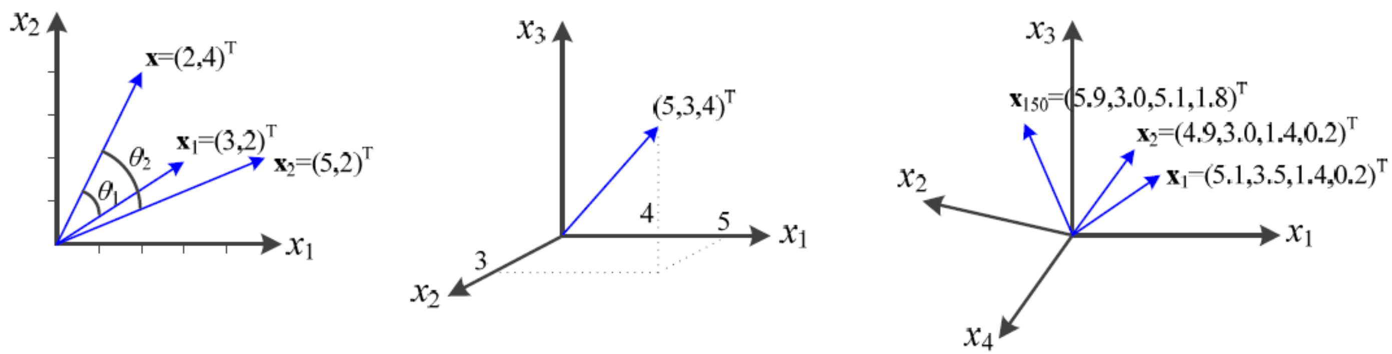
$$\text{프로베니우스 놈: } \|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i=1,n} \sum_{j=1,m} a_{ij}^2\right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.6}$$

예를 들어, $\left\| \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 6 & 4 \end{pmatrix} \right\|_F = \sqrt{2^2 + 1^2 + 6^2 + 4^2} = 7.550$

# 2.1.2 놈과 유사도

## 유사도와 거리

- 벡터를 기하학적으로 해석




(a) 2차원 벡터 (b) 3차원 벡터 (c) 4차원 벡터(Iris 데이터)

**그림 2-2 벡터를 기하학적으로 해석**

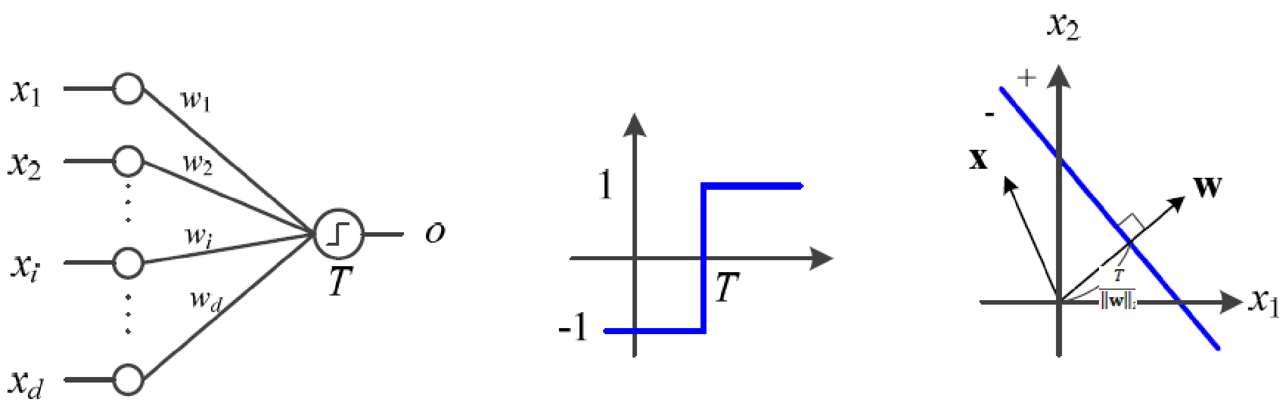
- 코사인 유사도

$$cosine\_similarity(\mathbf{a},\mathbf{b}) = \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \cdot \frac{\mathbf{b}}{\|\mathbf{b}\|} = cos(\theta) \quad (2.7)$$

# 2.1.3 퍼셉트론의 해석

## 퍼셉트론

- 1958년 로젠블렛이 고안한 분류기 모델




(a) 퍼셉트론 구조 (b) 계단형 활성함수(비선형) (c) 퍼셉트론의 공간 분할

**그림 2-3 퍼셉트론의 구조와 동작**

- 퍼셉트론의 동작을 수식으로 표현하면,

$$o = \tau(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}), \quad \text{이때} \quad \tau(a) = \begin{cases} 1, & a \geq T \\ -1, & a < T \end{cases} \qquad (2.8)$$

  - 활성 함수 $\tau$로는 계단함수 사용

# 2.1.3 퍼셉트론의 해석

## 퍼셉트론

- [그림 2-3(c)]의 파란 직선은 두 개의 부분공간을 나누는 결정직선decision line
  - $\mathbf{w}$에 수직이고 원점으로부터 $\frac{T}{\|\mathbf{w}\|_2}$만큼 떨어져 있음
- 3차원 특징공간은 결정평면decision plane, 4차원 이상은 결정 초평면decision hyperplane
- 예) 3차원 특징공간을 위한 퍼셉트론

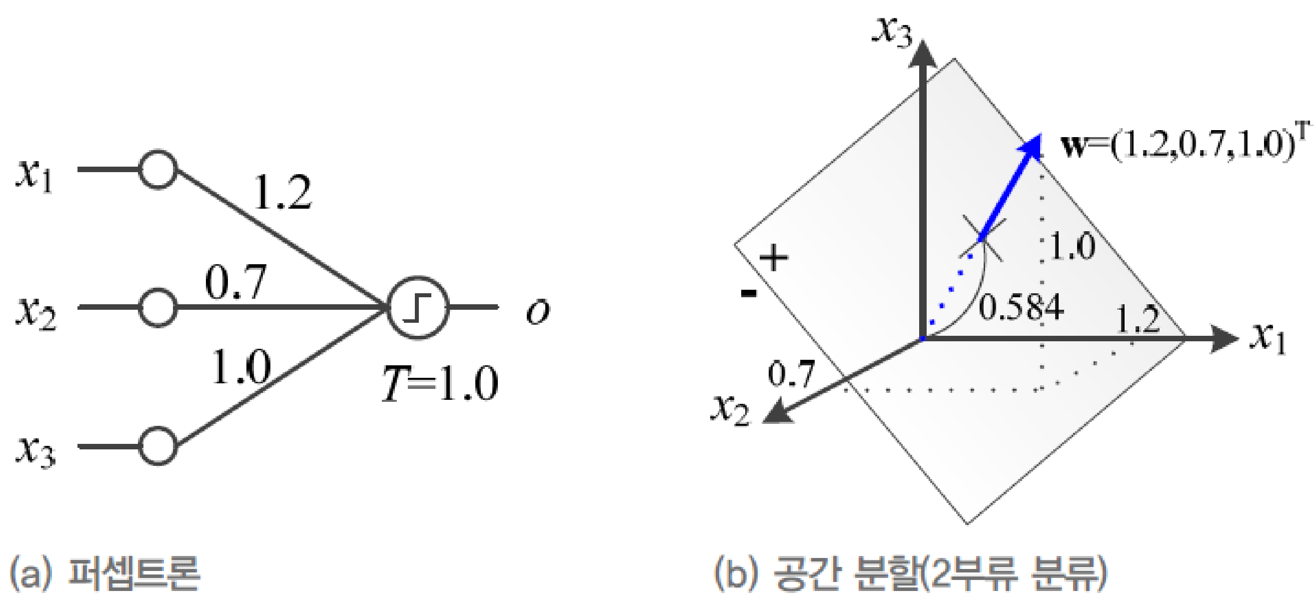



그림 2-4 퍼셉트론의 예(3차원)

# 2.1.3 퍼셉트론의 해석

## 출력이 여러 개인 퍼셉트론

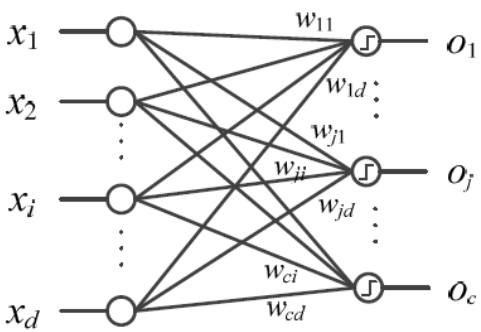


그림 2-5 출력이 여러 개인 퍼셉트론

출력은 벡터 $\mathbf{o} = (o_1, o_2, \cdots, o_c)^{\mathrm{T}}$로 표기

$j$번째 퍼셉트론의 가중치 벡터를
$\mathbf{w}_j = (w_{j1}, w_{j2}, \cdots, w_{jd})^{\mathrm{T}}$와 같이 표기

- 동작을 수식으로 표현하면,

$$\mathbf{o} = \tau\begin{pmatrix} \mathbf{w}_1 \cdot \mathbf{x} \\ \mathbf{w}_2 \cdot \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{w}_c \cdot \mathbf{x} \end{pmatrix} \longrightarrow$$

행렬로 간결하게 쓰면 $\mathbf{o} = \boldsymbol{\tau}(\mathbf{Wx})$

이때 $\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{w}_2^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{w}_c^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$

- 가중치 벡터를 각 부류의 기준 벡터로 간주하면, $c$개 부류의 유사도를 계산하는 셈

# 2.1.3 퍼셉트론의 해석

- 학습의 정의
  - 식 (2.10)은 학습을 마친 프로그램을 현장에 설치했을 때 일어나는 과정

$$\text{분류라는 과업:} \quad \overbrace{\mathbf{o}}^{?} = \tau(\overbrace{\mathbf{W}}^{앎}\overbrace{\mathbf{x}}^{앎}) \tag{2.10}$$

  - 식 (2.11)은 학습 과정
    - 학습은 훈련집합의 샘플에 대해 식 (2.11)을 가장 잘 만족하는 **w**를 찾아내는 작업

$$\text{학습이라는 과업:} \quad \overbrace{\mathbf{o}}^{앎} = \tau(\overbrace{\mathbf{W}}^{?}\overbrace{\mathbf{x}}^{앎}) \tag{2.11}$$

- 현대 기계 학습에서 퍼셉트론의 중요성
  - 딥러닝은 퍼셉트론을 여러 층으로 확장하여 만듦

# 2.1.4 선형결합과 벡터공간

## 벡터

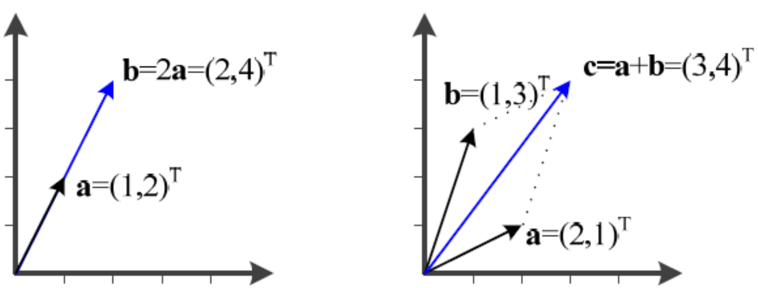
- 공간상의 한 점으로 화살표 끝이 벡터의 좌표에 해당

## 선형결합이 만드는 벡터공간

- 기저벡터 **a**와 **b**의 선형결합

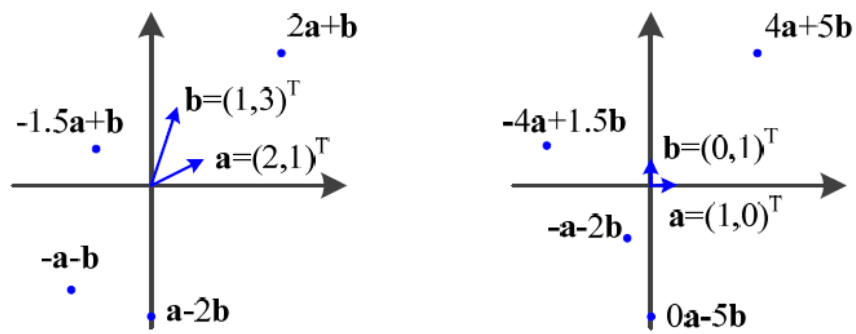
$$\mathbf{c} = \alpha_1 \mathbf{a} + \alpha_2 \mathbf{b} \tag{2.12}$$

- 선형결합으로 만들어지는 공간을 벡터공간이라 부름




(a) 벡터에 스칼라 곱 (b) 두 벡터의 덧셈

그림 2-6 벡터의 연산

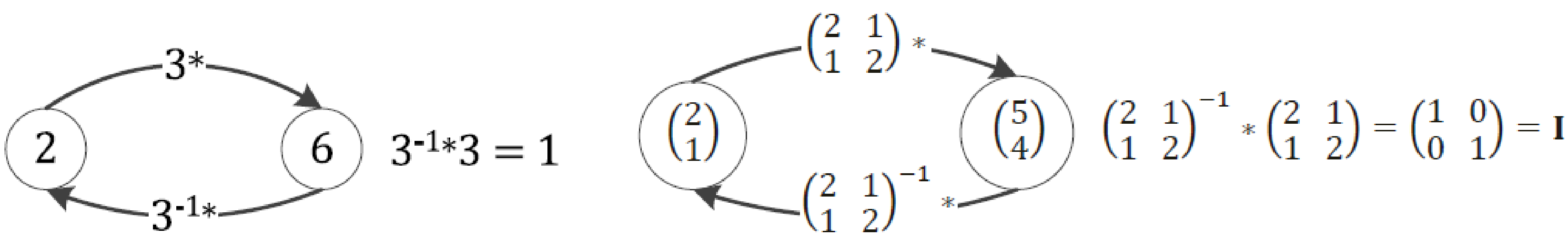



(a) 기저 벡터와 벡터공간 (b) 정규직교 기저 벡터

그림 2-7 벡터공간

# 2.1.5 역행렬

## ■ 역행렬의 원리




(a) 역수의 원리　　(b) 역행렬의 원리

그림 2-9 역행렬

- 정사각행렬 **A**의 역행렬 $\mathbf{A}^{-1}$

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$$

- 예를 들어, $\begin{pmatrix}2&1\\6&4\end{pmatrix}$의 역행렬은 $\begin{pmatrix}2&-0.5\\-3&1\end{pmatrix}$

# 2.1.5 역행렬

■ 정리

**정리 2-1 다음 성질은 서로 필요충분조건이다.**

- $\mathbf{A}$는 역행렬을 가진다. 즉, 특이행렬이 아니다.
- $\mathbf{A}$는 최대계수를 가진다.
- $\mathbf{A}$의 모든 행이 선형독립이다.
- $\mathbf{A}$의 모든 열이 선형독립이다.
- $\mathbf{A}$의 행렬식은 0이 아니다.
- $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$는 양의 정부호positive definite 대칭 행렬이다.
- $\mathbf{A}$의 고윳값은 모두 0이 아니다.

# 2.1.5 역행렬

- 행렬 **A**의 행렬식 *det*(**A**)

$$\left.\begin{aligned} det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} &= ad - bc \\ det\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} &= aei + bfg + cdh - ceg - bdi - afh \end{aligned}\right\} \quad (2.15)$$

예를 들어 $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}$의 행렬식은 2*4−1*6=2

- 기하학적 의미
  - 2차원에서는 2개의 행 벡터가 이루는 평행사변형의 넓이
  - 3차원에서는 3개의 행 벡터가 이루는 평행사각기둥의 부피

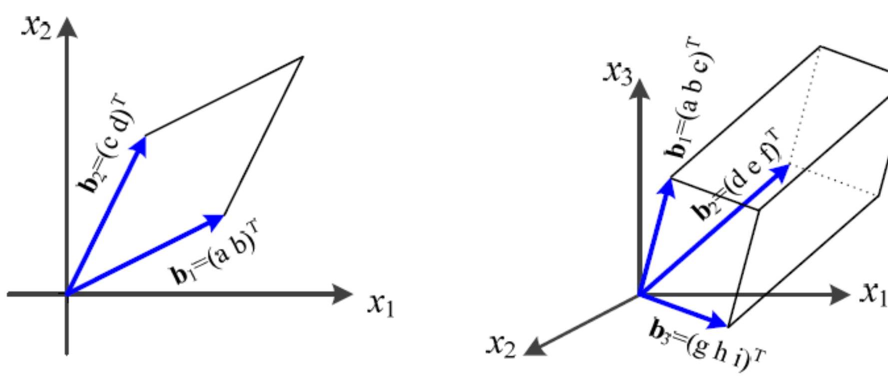



그림 2-10 행렬식의 기하학적 해석

# 2.1.5 역행렬

- 정부호 행렬

양의 정부호 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}>0$

- 예를 들어, $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$는 $(x_1 \quad x_2)\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = x_1^2 + 2x_2^2$ 이므로

  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$는 양의 정부호 행렬

양의 준정부호positive semi-definite 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0$

음의 정부호negative definite 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} < 0$

음의 준정부호negative semi-definite 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} \leq 0$

# 2.1.6 행렬 분해

## 분해란?

- 정수 3717은 특성이 보이지 않지만, 3*3*7*59로 소인수 분해를 하면 특성이 보이듯이, 행렬도 분해하면 여러모로 유용함

## 고윳값과 고유 벡터

- 고유 벡터 $\mathbf{v}$와 고윳값 $\lambda$

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \qquad (2.20)$$

- 예를 들어, $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 3\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$이고 $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$이므로, $\lambda_1 = 3, \lambda_2 = 1$이고 $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

# 2.1.6 행렬 분해

## ■ 고윳값과 고유 벡터의 기하학적 해석

**예제 2-5**

[그림 2-12]의 반지름이 1인 원 위에 있는 4개의 벡터 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4$가 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$에 의해 어떻게 변환되는지 살펴보자. 변환 후의 벡터를 각각 $\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', \mathbf{x}_3', \mathbf{x}_4'$로 표기한다.

$$\mathbf{x}_1' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{x}_2' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{x}_3' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{x}_4' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

눈 여겨 볼 점은 $\mathbf{A}$의 고유 벡터 $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$과 방향이 같은 $\mathbf{x}_1$과 $\mathbf{x}_3$이다. 이들은 변환 때문에 길이가 달라지더라도 방향은 그대로 유지한다. 식 (2.20)을 충실히 따르고 있다. 이때 길이의 변화는 고윳값 $\lambda$에 따른다. 즉, $\mathbf{x}_1$은 3배만큼, $\mathbf{x}_3$은 1배만큼 길이가 변한다. 나머지 $\mathbf{x}_2$와 $\mathbf{x}_4$는 길이와 방향이 모두 변한다. 파란 원 위에 있는 모든 점을 변환하면 빨간색의 타원이 된다. 파란 원 위에 존재하는 무수히 많은 점(벡터) 중에 방향이 바뀌지 않는 것은 고유 벡터에 해당하는 $\mathbf{x}_1$과 $\mathbf{x}_3$뿐이다.

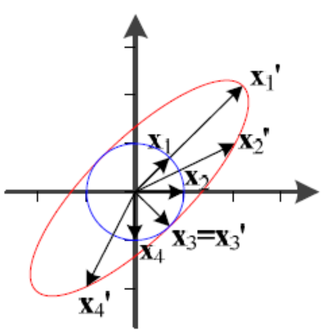



그림 2-12 고유 벡터의 공간 변환

# 2.1.6 행렬 분해

- 고윳값 분해eigen value decomposition

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}^{-1} \tag{2.21}$$

  - $\mathbf{Q}$는 $\mathbf{A}$의 고유 벡터를 열에 배치한 행렬이고 $\mathbf{\Lambda}$는 고윳값을 대각선에 배치한 대각행렬
  - 예를 들어, $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 \end{pmatrix}$
  - 고윳값 분해는 정사각행렬에만 적용 가능한데, 기계 학습에서는 정사각행렬이 아닌 경우의 분해도 필요하므로 고윳값 분해는 한계를 가짐

# 2.1.6 행렬 분해

- $n*m$ 행렬 **A**의 특잇값 분해SVD(singular value decomposition)

$$\mathbf{A} = \mathbf{U\Sigma V}^{\mathrm{T}} \tag{2.22}$$

  - 왼쪽 특이행렬 **U**는 $\mathbf{AA}^{\mathrm{T}}$의 고유 벡터를 열에 배치한 $n*n$ 행렬
  - 오른쪽 특이행렬 **V**는 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$의 고유 벡터를 열에 배치한 $m*m$ 행렬
  - **Σ**는 $\mathbf{AA}^{\mathrm{T}}$의 고윳값의 제곱근을 대각선에 배치한 $n*m$ 대각행렬

예를 들어, **A**를 4*3 행렬이라고 했을 때 다음과 같이 특잇값 분해가 된다.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 3 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1914 & -0.2412 & 0.1195 & -0.9439 \\ -0.5144 & 0.6990 & -0.4781 & -0.1348 \\ -0.6946 & -0.6226 & -0.2390 & 0.2697 \\ -0.4651 & 0.2560 & 0.8367 & 0.1348 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 3.7837 & 0 & 0 \\ 0 & 2.7719 & 0 \\ 0 & 0 & 1.4142 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.7242 & -0.4555 & -0.5177 \\ -0.6685 & 0.2797 & 0.6891 \\ 0.1690 & -0.8452 & 0.5071 \end{pmatrix}$$

# 2.2 확률과 통계

- 2.2.1 확률 기초
- 2.2.2 베이즈 정리와 기계 학습
- 2.2.3 최대 우도
- 2.2.4 평균과 분산
- 2.2.5 유용한 확률분포
- 2.2.6 정보이론

- 기계 학습이 처리할 데이터는 불확실한 세상에서 발생하므로, 불확실성을 다루는 확률과 통계를 잘 활용해야 함

# 2.2.1 확률 기초

- 확률변수random variable
  - 예) 윷

그림 2-13 윷을 던졌을 때 나올 수 있는 다섯 가지 경우(왼쪽부터 도, 개, 걸, 윷, 모)

  - 다섯 가지 경우 중 한 값을 갖는 확률변수 $x$
  - $x$의 정의역은 {도, 개, 걸, 윷, 모}

# 2.2.1 확률 기초

- 확률분포

$$P(x=\text{도})=\frac{4}{16}, P(x=\text{개})=\frac{6}{16}, P(x=\text{걸})=\frac{4}{16}, P(x=\text{윷})=\frac{1}{16}, P(x=\text{모})=\frac{1}{16}$$

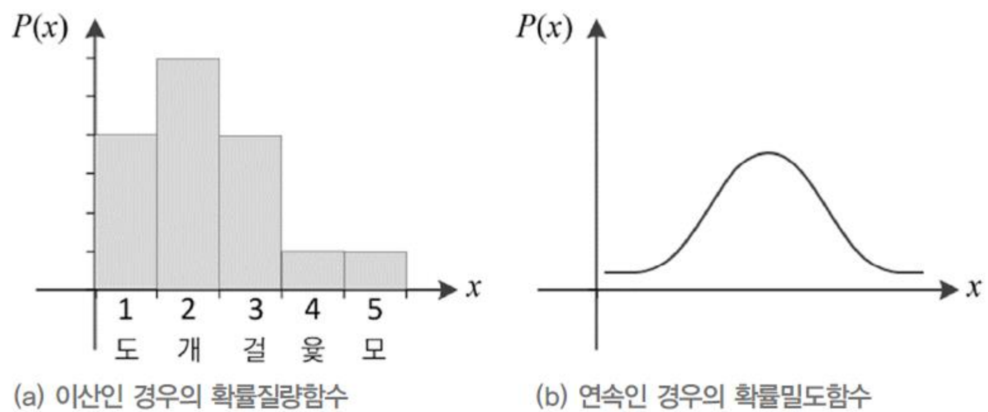



그림 2-14 확률분포

- 확률벡터random vector
  - 예) Iris에서 확률벡터 $\mathbf{x}$는 4차원 $\mathbf{x}=(x_1,x_2,x_3,x_4)^{\mathrm{T}}=(\text{꽃받침 길이},\text{꽃받침 너비}_1,\text{꽃잎 길이},\text{꽃잎 너비})^{\mathrm{T}}$

# 2.2.1 확률 기초

## 간단한 확률실험 장치

- 주머니에서 번호를 뽑은 다음, 번호에 따라 해당 병에서 공을 뽑고 색을 관찰함
- 번호를 $y$, 공의 색을 $x$라는 확률변수로 표현하면 정의역은 $y \in \{①,②,③\}$, $x \in \{파랑, 하양\}$

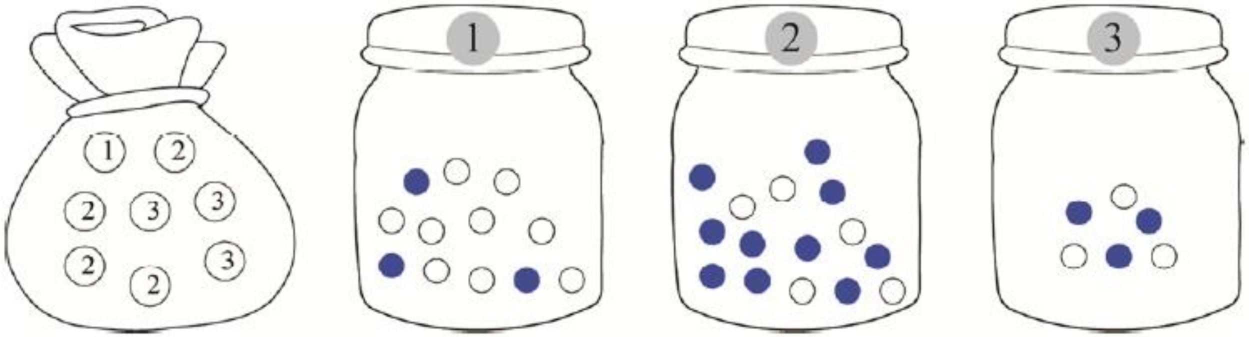



그림 2-15 확률 실험

# 2.2.1 확률 기초

## 곱 규칙과 합 규칙

- ①번 카드를 뽑을 확률은 $P(y=①)=P(①)=1/8$
- 카드는 ①번, 공은 하양일 확률은 $P(y=①,x=\text{하양})=P(①,\text{하양})$ ← 결합확률

$$P(y=①,x=\text{하양})=P(x=\text{하양}|y=①)P(y=①)=\frac{9}{12}\frac{1}{8}=\frac{3}{32}$$

- 곱 규칙

$$\text{곱 규칙: } P(y,x)=P(x|y)P(y) \tag{2.23}$$

- 하얀 공이 뽑힐 확률

$$P(\text{하양})=P(\text{하양}|①)P(①)+P(\text{하양}|②)P(②)+P(\text{하양}|③)P(③)$$
$$=\frac{9}{12}\frac{1}{8}+\frac{5}{15}\frac{4}{8}+\frac{3}{6}\frac{3}{8}=\frac{43}{96}$$

- 합 규칙

$$\text{합 규칙: } P(x)=\sum_y P(y,x)=\sum_y P(x|y)P(y) \tag{2.24}$$

# 2.2.2 베이즈 정리와 기계 학습

- 베이즈 정리 (식 (2.26))

$$P(y,x) = P(x|y)P(y) = P(x,y) = P(y|x)P(x)$$

$$\longrightarrow \quad P(y|x) = \frac{P(x|y)P(y)}{P(x)} \qquad (2.26)$$

  - 다음 질문을 식 (2.27)로 쓸 수 있음

    "하얀 공이 나왔다는 사실만 알고 어느 병에서 나왔는지 모르는데, 어느 병인지 추정하라."

$$\hat{y} = \underset{y}{\operatorname{argmax}}\, P(y|x) \qquad (2.27)$$

## 2.2.2 베이즈 정리와 기계 학습

- 베이즈 정리 (식 (2.26))
  - 베이즈 정리를 적용하면, $\hat{y} = \underset{y}{\operatorname{argmax}} P(y|x = \text{하양}) = \underset{y}{\operatorname{argmax}} \frac{P(x = \text{하양}|y)P(y)}{P(x = \text{하양})}$
  - 세 가지 경우에 대해 확률을 계산하면,

$$P(①|\text{하양}) = \frac{P(\text{하양}|①)P(①)}{P(\text{하양})} = \frac{\frac{9}{12}\frac{1}{8}}{\frac{43}{96}} = \frac{9}{43}$$

$$P(②|\text{하양}) = \frac{P(\text{하양}|②)P(②)}{P(\text{하양})} = \frac{\frac{5}{15}\frac{4}{8}}{\frac{43}{96}} = \frac{16}{43} \longrightarrow$$

③번 병일 확률이 가장 높음

$$P(③|\text{하양}) = \frac{P(\text{하양}|③)P(③)}{P(\text{하양})} = \frac{\frac{3}{6}\frac{3}{8}}{\frac{43}{96}} = \frac{18}{43}$$

- 베이즈 정리의 해석

$$\overbrace{P(y|x)}^{\text{사후확률}} = \frac{\overbrace{P(x|y)}^{\text{우도}}\ \overbrace{P(y)}^{\text{사전확률}}}{P(x)}$$

# 2.2.2 베이즈 정리와 기계 학습

## ■ 기계 학습에 적용

- 예) Iris 데이터 분류 문제
  - 특징 벡터 $\mathbf{x}$, 부류 $y \in$ {setosa, versicolor, virginica}
  - 분류 문제를 argmax로 표현하면 식 (2.29)

$$\hat{y} = \underset{y}{\operatorname{argmax}}\, P(y|\mathbf{x}) \qquad (2.29)$$

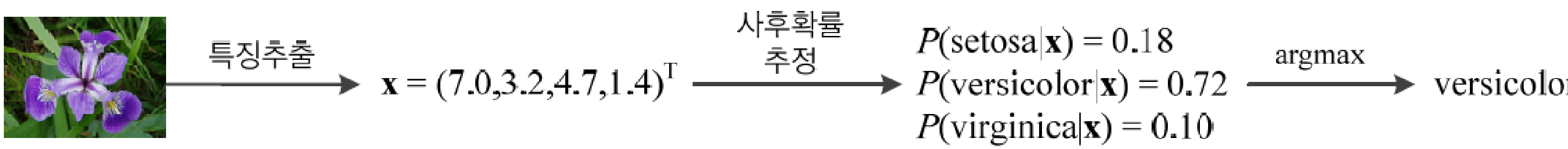



그림 2-16 붓꽃의 부류 예측 과정

- 사후확률 $P(y|\mathbf{x})$를 직접 추정하는 일은 아주 단순한 경우를 빼고 불가능
- 따라서 베이즈 정리를 이용하여 추정함
  - 사전확률은 식 (2.30)으로 추정
  - 우도는 6.4절의 밀도 추정 기법으로 추정

사전확률: $P(y = c_i) = \dfrac{n_i}{n} \qquad (2.30)$

# 2.2.3 최대 우도

- 매개변수 Θ를 모르는 상황에서 매개변수를 추정하는 문제

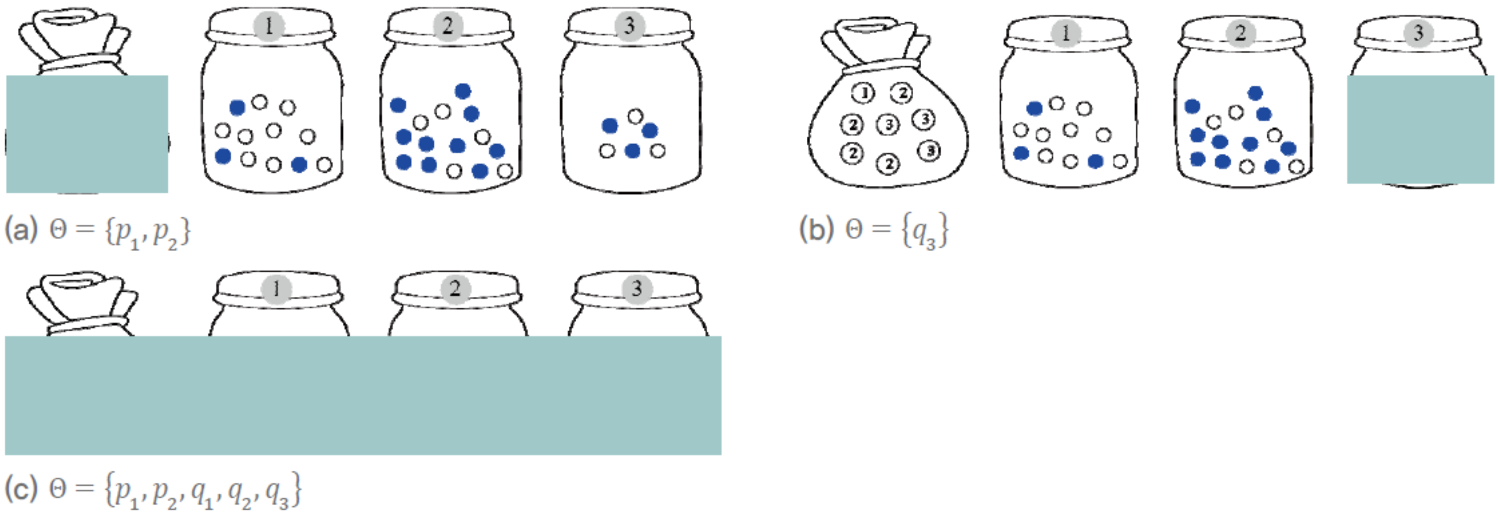



**그림 2-17 매개변수가 감추어진 여러 가지 상황**

  - 예) [그림 2-17(b)] 상황

데이터집합 $\mathbb{X}$={●○○●○●○○●●○○}

"데이터 $\mathbb{X}$가 주어졌을 때, $\mathbb{X}$를 발생시켰을 가능성을 최대로 하는 매개변수 $\Theta = \{q_3\}$의 값을 찾아라."

# 2.2.3 최대 우도

## 최대 우도법

- [그림 2-17(b)] 문제를 수식으로 쓰면,

$$\hat{q}_3 = \underset{q_3}{\operatorname{argmax}} P(\mathbb{X}|q_3) \qquad (2.31)$$

- 일반화 하면,

$$\text{최대 우도 추정:} \quad \widehat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} P(\mathbb{X}|\Theta) \qquad (2.32)$$

- 수치 문제를 피하기 위해 로그 표현으로 바꾸면,

$$\text{최대 로그우도 추정:} \quad \widehat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} \log P(\mathbb{X}|\Theta) = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{n} \log P(\mathbf{x}_i|\Theta) \qquad (2.34)$$

## 2.2.4 평균과 분산

- 데이터의 요약 정보로서 평균과 분산

$$\left.\begin{aligned} &\text{평균}\quad \mu = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \\ &\text{분산}\quad \sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (x_i - \mu)^2 \end{aligned}\right\} \qquad (2.36)$$

- 평균 벡터와 공분산 행렬

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \qquad (2.37)$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \qquad (2.39)$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & & \sigma_{2d} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \sigma_{d1} & \sigma_{d2} & \cdots & \sigma_{dd} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & & \sigma_{2d} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \sigma_{d1} & \sigma_{d2} & \cdots & \sigma_d^2 \end{pmatrix}$$

# 2.2.4 평균과 분산

## 평균 벡터와 공분산 행렬 예제

**예제 2-7**

Iris 데이터베이스의 샘플 중 8개만 가지고 공분산 행렬을 계산하자.

$$\mathbb{X} = \left\{\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix}5.1\\3.5\\1.4\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix}4.9\\3.0\\1.4\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix}4.7\\3.2\\1.3\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_4 = \begin{pmatrix}4.6\\3.1\\1.5\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_5 = \begin{pmatrix}5.0\\3.6\\1.4\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_6 = \begin{pmatrix}5.4\\3.9\\1.7\\0.4\end{pmatrix}, \mathbf{x}_7 = \begin{pmatrix}4.6\\3.4\\1.4\\0.3\end{pmatrix}, \mathbf{x}_8 = \begin{pmatrix}5.0\\3.4\\1.5\\0.2\end{pmatrix}\right\}$$

먼저 평균벡터를 구하면 $\boldsymbol{\mu} = (4.9125,\ 3.3875,\ 1.45,\ 0.2375)^{\mathrm{T}}$이다. 첫 번째 샘플 $\mathbf{x}_1$을 식 (2.39)에 적용하면 다음과 같다.

$$(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix}0.1875\\0.1125\\-0.05\\-0.0375\end{pmatrix}(0.1875 \quad 0.1125 \quad -0.05 \quad -0.0375)$$

$$= \begin{pmatrix}0.0325 & 0.0211 & -0.0094 & -0.0070\\0.0211 & 0.0127 & -0.0056 & -0.0042\\-0.0094 & -0.0056 & 0.0025 & 0.0019\\-0.0070 & -0.0042 & 0.0019 & 0.0014\end{pmatrix}$$

나머지 7개 샘플도 같은 계산을 한 다음, 결과를 모두 더하고 8로 나누면 다음과 같은 공분산 행렬을 얻는다.

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix}0.0661 & 0.0527 & 0.0181 & 0.0083\\0.0527 & 0.0736 & 0.0181 & 0.0130\\0.0181 & 0.0181 & 0.0125 & 0.0056\\0.0083 & 0.0130 & 0.0056 & 0.0048\end{pmatrix}$$

# 2.2.5 유용한 확률분포

## 가우시안 분포

- 평균 $\mu$와 분산 $\sigma^2$으로 정의

$$N(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)$$

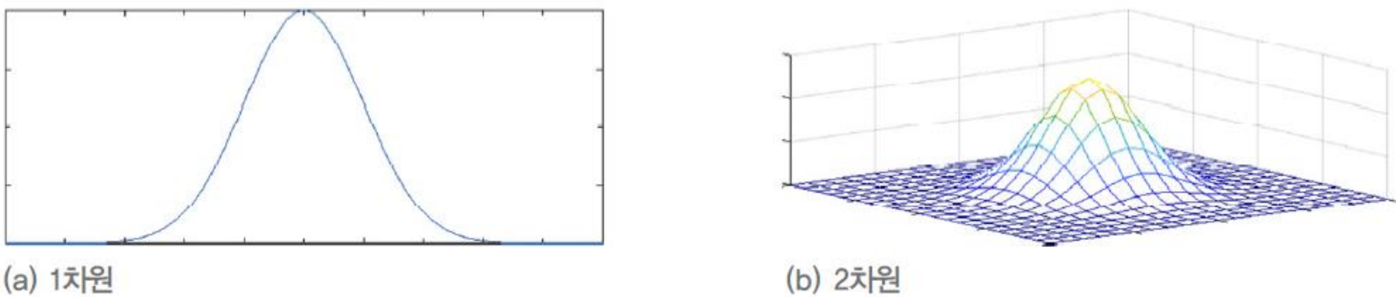



그림 2-19 가우시안 분포

- 다차원 가우시안 분포: 평균벡터 $\boldsymbol{\mu}$와 공분산행렬 $\boldsymbol{\Sigma}$로 정의

$$N(\mathbf{x};\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}|\sqrt{(2\pi)^d}}}\exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right)$$

# 2.2.5 유용한 확률분포

## 베르누이 분포

- 성공($x$=1) 확률 $p$이고 실패($x$=0) 확률이 1-$p$인 분포

$$Ber(x;p) = p^x(1-p)^{1-x} = \begin{cases} p, & x = 1\text{일 때} \\ 1-p, & x = 0\text{일 때} \end{cases}$$

## 이항 분포

- 성공 확률이 $p$인 베르누이 실험을 $m$번 수행할 때 성공할 횟수의 확률분포

$$B(x;m,p) = C_m^x p^x(1-p)^{m-x} = \frac{m!}{x!\,(m-x)!}p^x(1-p)^{m-x}$$

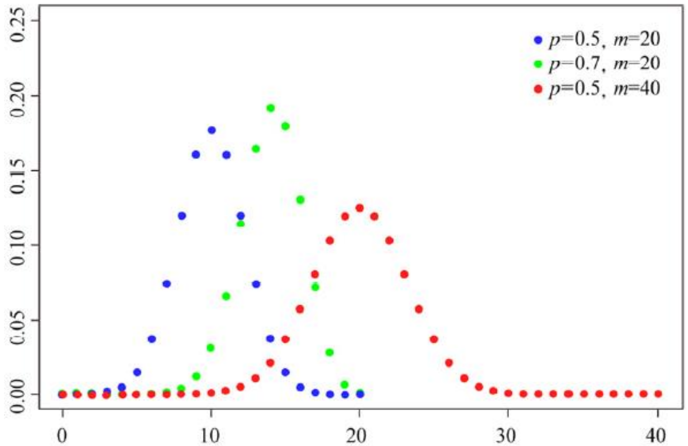



그림 2-20 이항 분포

# 2.2.6 정보이론

- 메시지가 지닌 정보를 수량화할 수 있나?
  - "고비 사막에 눈이 왔다"와 "대관령에 눈이 왔다"라는 두 메시지 중 어느 것이 더 많은 정보를 가지나?
  - 정보이론의 기본 원리 → 확률이 작을수록 많은 정보
- 자기 정보self information
  - 사건(메시지) $e_i$의 정보량 (단위: 비트 또는 나츠)

$$h(e_i) = -\log_2 P(e_i) \quad \text{또는} \quad h(e_i) = -\log_e P(e_i) \tag{2.44}$$

- 엔트로피
  - 확률변수 $x$의 불확실성을 나타내는 엔트로피

$$\text{이산 확률분포} \quad H(x) = -\sum_{i=1,k} P(e_i)\log_2 P(e_i) \quad \text{또는} \quad H(x) = -\sum_{i=1,k} P(e_i)\log_e P(e_i) \tag{2.45}$$

$$\text{연속 확률분포} \quad H(x) = -\int_{\mathbb{R}} P(x)\log_2 P(x) \quad \text{또는} \quad H(x) = -\int_{\mathbb{R}} P(x)\log_e P(x) \tag{2.46}$$

## 자기 정보와 엔트로피 예제

**예제 2-8**

윷을 나타내는 확률변수를 *x*라 할 때 *x*의 엔트로피는 다음과 같다.

$$H(x) = -\left(\frac{4}{16}\log_2\frac{4}{16} + \frac{6}{16}\log_2\frac{6}{16} + \frac{4}{16}\log_2\frac{4}{16} + \frac{1}{16}\log_2\frac{1}{16} + \frac{1}{16}\log_2\frac{1}{16}\right) = 2.0306\text{비트}$$

주사위는 눈이 6개인데 모두 1/6이라는 균일한 확률을 가진다. 이 경우 엔트로피를 계산하면 다음과 같다.

$$H(x) = -\left(\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6}\right) = 2.585\text{ 비트}$$

- 주사위가 윷보다 엔트로피가 높은 이유는?

# 2.2.6 정보이론

- 교차 엔트로피cross entropy
  - 두 확률분포 $P$와 $Q$ 사이의 교차 엔트로피

$$H(P,Q) = -\sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) = -\sum_{i=1,k} P(e_i)\log_2 Q(e_i) \tag{2.47}$$

  - 식을 전개하면,

$$\begin{aligned} H(P,Q) &= -\sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) \\ &= -\sum_{x} P(x)\log_2 P(x) + \sum_{x} P(x)\log_2 P(x) - \sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) \\ &= H(P) + \underbrace{\sum_{x} P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)}}_{\text{KL 다이버전스}} \end{aligned}$$

# 2.2.6 정보이론

## KL 다이버전스

- 식 (2.48)은 $P$와 $Q$ 사이의 KL 다이버전스
- 두 확률분포 사이의 거리를 계산할 때 주로 사용

$$KL(P \parallel Q) = \sum_{x} P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)} \tag{2.48}$$

## 교차 엔트로피와 KL 다이버전스의 관계

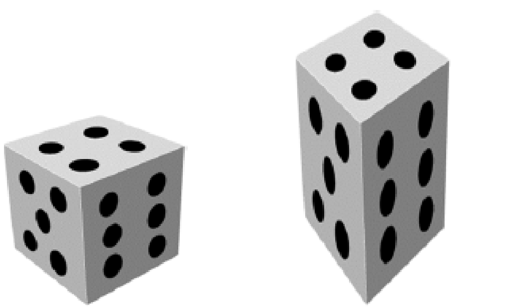
$$\begin{aligned} P\text{와 } Q\text{의 교차 엔트로피 } H(P,Q) &= H(P) + \sum_{x} P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)} \\ &= P\text{의 엔트로피} + P\text{와 } Q \text{ 간의 } KL \text{ 다이버전스} \end{aligned} \tag{2.49}$$

# 2.2.6 정보이론

**예제 2-9**

[그림 2-21]과 같이 정상적인 주사위와 찌그러진 주사위가 있는데, 정상적인 주사위의 확률분포는 $P$, 찌그러진 주사위의 확률분포는 $Q$를 따르며, $P$와 $Q$가 다음과 같이 분포한다고 가정하자.

$$P(1)=\frac{1}{6},\ P(2)=\frac{1}{6},\ P(3)=\frac{1}{6},\ P(4)=\frac{1}{6},\ P(5)=\frac{1}{6},\ P(6)=\frac{1}{6}$$
$$Q(1)=\frac{3}{12},\ Q(2)=\frac{1}{12},\ Q(3)=\frac{1}{12},\ Q(4)=\frac{1}{12},\ Q(5)=\frac{3}{12},\ Q(6)=\frac{3}{12}$$



(a) 정상 주사위　　(b) 찌그러진 주사위

**그림 2-21 확률분포가 다른 두 주사위**

확률분포 $P$와 $Q$ 사이의 교차 엔트로피와 KL 다이버전스는 다음과 같다.

$$H(P,Q) = -\left(\frac{1}{6}\log_2\frac{3}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{3}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{3}{12}\right) = 2.7925$$
$$KL(P \parallel Q) = \frac{1}{6}\log_2\frac{2}{3}+\frac{1}{6}\log_2 2+\frac{1}{6}\log_2 2+\frac{1}{6}\log_2 2+\frac{1}{6}\log_2\frac{2}{3}+\frac{1}{6}\log_2\frac{2}{3} = 0.2075$$

[예제 2-8]에서 $P$의 엔트로피 $H(P)$는 2.585이었다. 따라서 식 (2.49)가 성립함을 알 수 있다.

# 2.3 최적화

- 2.3.1 매개변수 공간의 탐색
- 2.3.2 미분
- 2.3.3 경사 하강 알고리즘

- 순수 수학 최적화와 기계 학습 최적화의 차이
  - 순수 수학의 최적화 예) $f(x_1, x_2) = -\left(\cos\left(x_1{}^2\right) + \sin\left(x_2{}^2\right)\right)^2$의 최저점을 찾아라.
  - 기계 학습의 최적화는 단지 훈련집합이 주어지고, 훈련집합에 따라 정해지는 목적함수의 최저점을 찾아야 함
    - 데이터로 미분하는 과정 필요 → 오류 역전파 알고리즘 (3.4절)
    - 주로 SGD(스토캐스틱 경사 하강법) 사용

# 2.3.1 매개변수 공간의 탐색

## ■ 학습 모델의 매개변수 공간

- 높은 차원에 비해 훈련집합의 크기가 작아 참인 확률분포를 구하는 일은 불가능함
- 따라서 기계 학습은 적절한 모델을 선택하고, 목적함수를 정의하고, 모델의 매개변수 공간을 탐색하여 목적함수가 최저가 되는 최적점을 찾는 전략 사용 → 특징 공간에서 해야 하는 일을 모델의 매개변수 공간에서 하는 일로 대치한 셈
- [그림 2-22]는 여러 예제 ($\Theta$는 매개변수, $J(\Theta)$는 목적함수)

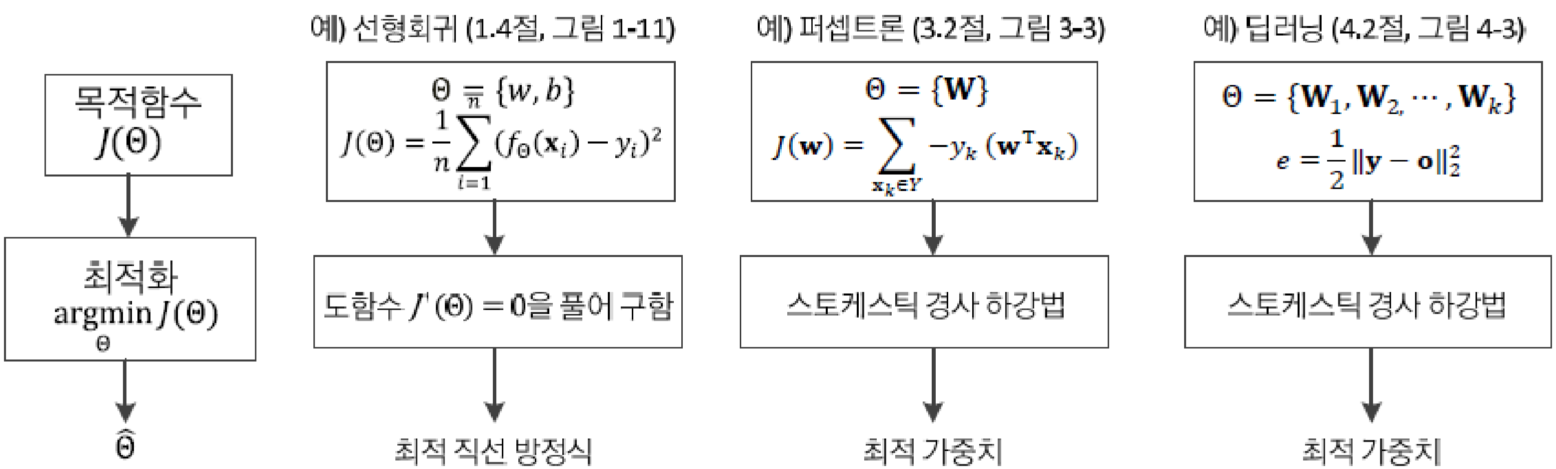



**그림 2-22 최적화를 이용한 기계 학습의 문제풀이 과정**

# 2.3.1 매개변수 공간의 탐색

- 학습 모델의 매개변수 공간
  - 특징 공간보다 수 배~수만 배 넓음
    - [그림 2-22]의 선형회귀에서는 특징 공간은 1차원 , 매개변수 공간은 2차원
    - MNIST 인식하는 딥러닝 모델은 784차원 특징 공간, 수십만~수백만 차원의 매개변수 공간
  - [그림 2-23] 개념도의 매개변수 공간: $\hat{x}$은 전역 최적해, $x_2$와 $x_4$는 지역 최적해
  - $x_2$와 같이 전역 최적해에 가까운 지역 최적해를 찾고 만족하는 경우 많음

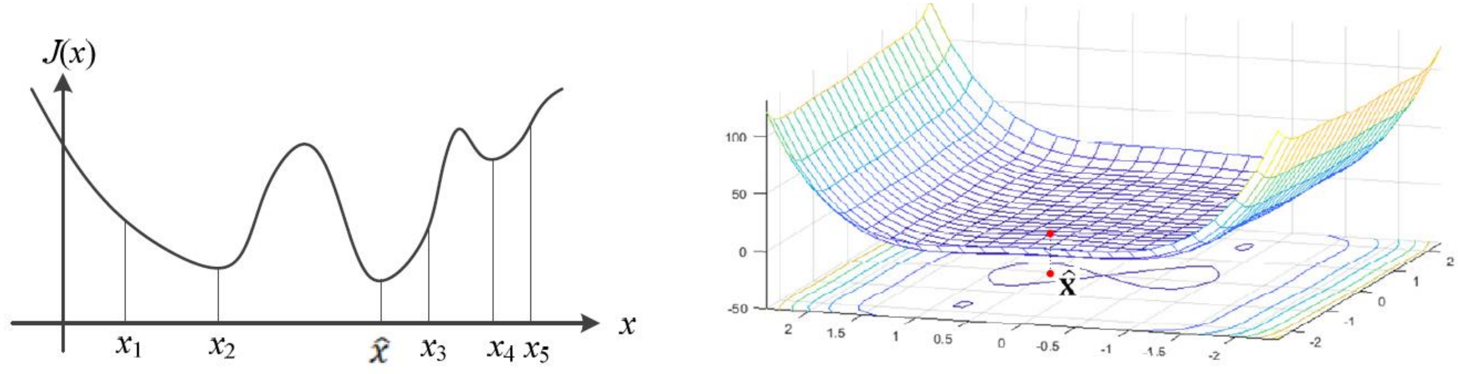



그림 2-23 최적해 탐색

- 기계 학습이 해야 할 일을 식으로 정의하면,

$J(\mathbf{\Theta})$를 최소로 하는 최적해 $\hat{\mathbf{\Theta}}$을 찾아라. 즉, $\hat{\mathbf{\Theta}} = \underset{\mathbf{\Theta}}{\operatorname{argmin}} J(\mathbf{\Theta})$ (2.50)

# 2.3.1 매개변수 공간의 탐색

- 최적화 문제 해결
  - 낱낱탐색exhaustive search 알고리즘
    - 차원이 조금만 높아져도 적용 불가능
    - 예) 4차원 Iris에서 각 차원을 1000 구간으로 나눈다면 총 $1000^4$개의 점을 평가해야 함
  - 무작위 탐색 알고리즘
    - 아무 전략이 없는 순진한 알고리즘

**알고리즘 2-1 낱낱탐색 알고리즘**

**입력 :** 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$
**출력 :** 최적해 $\hat{\mathbf{\Theta}}$

```
가능한 해를 모두 생성하여 집합 S에 저장한다.
min을 충분히 큰 값으로 초기화한다.
for (S에 속하는 각 점 Θ_current에 대해)
    if(J(Θ_current) < min) min=J(Θ_current), Θ_best = Θ_current
Θ̂ = Θ_best
```

**알고리즘 2-2 무작위 탐색 알고리즘**

**입력 :** 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$
**출력 :** 최적해 $\hat{\mathbf{\Theta}}$

```
min을 충분히 큰 값으로 초기화한다.
repeat
    무작위로 해를 하나 생성하고 Θ_current라 한다.
    if(J(Θ_current) < min) min=J(Θ_current), Θ_best = Θ_current
until(멈춤 조건)
Θ̂ = Θ_best
```

# 2.3.1 매개변수 공간의 탐색

- [알고리즘 2-3]은 기계 학습이 사용하는 전형적인 알고리즘
  - 라인 3에서는 목적함수가 작아지는 방향을 주로 미분으로 찾아냄

**알고리즘 2-3 기계 학습이 사용하는 전형적인 탐색 알고리즘(1장의 [알고리즘 1-1]과 같음)**

**입력 :** 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$

**출력 :** 최적해 $\hat{\mathbf{\Theta}}$

```
1  난수를 생성하여 초기해 Θ을 설정한다.
2  repeat
3      J(Θ)가 작아지는 방향 dΘ를 구한다.
4      Θ = Θ + dΘ
5  until(멈춤 조건)
6  Θ̂ = Θ
```

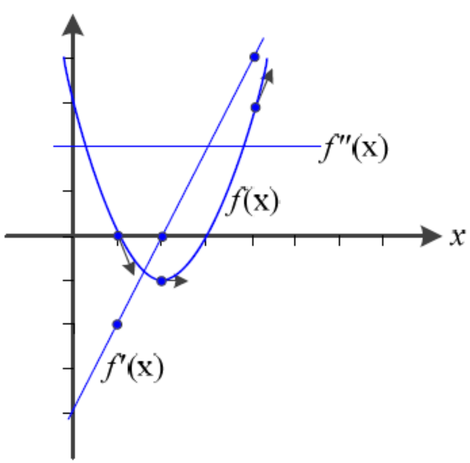
# 2.3.2 미분

## 미분에 의한 최적화

- 미분의 정의

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}, \qquad f''(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f'(x+\Delta x) - f'(x)}{\Delta x} \tag{2.51}$$

- 1차 도함수 $f'(x)$는 함수의 기울기, 즉 값이 커지는 방향을 지시함
- 따라서 $-f'(x)$ 방향에 목적함수의 최저점이 존재
- [알고리즘 2-3]에서 $d\mathbf{\Theta}$로 $-f'(x)$를 사용함← 경사 하강 알고리즘의 핵심 원리




$$y = f(x) = x^2 - 4x + 3$$

$$y' = f'(x) = 2x - 4$$

그림 2-24 간단한 미분 예제

# 2.3.2 미분

## 편미분

- 변수가 여러 개인 함수의 미분
- 미분값이 이루는 벡터를 그레이디언트라 부름
- 여러 가지 표기: $\nabla f, \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}, \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^{\mathrm{T}}$
- 예)

$$\left.\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(x_1, x_2) = \left(4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3}\right)x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2 \\ \nabla f &= f'(\mathbf{x}) = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^{\mathrm{T}} = (2x_1^5 - 8.4x_1^3 + 8x_1 + x_2, 16x_2^3 - 8x_2 + x_1)^{\mathrm{T}} \end{aligned}\right\} \quad (2.52)$$

## 기계 학습에서 편미분

- 매개변수 집합 $\Theta$에 많은 변수가 있으므로 편미분을 사용

# 2.3.2 미분

■ 편미분으로 얻은 그레이디언트에 따라 최저점을 찾아가는 예제

**예제 2-10**

초기점 $\mathbf{x}_0=(-0.5,0.5)^T$라고 하자. $\mathbf{x}_0$에서의 그레이디언트는 $f'(\mathbf{x}_0)=(-2.5125,-2.5)^T$ 즉, $\nabla f|_{\mathbf{x}_0}=(-2.5125,-2.5)^T$이다. [그림 2-25]는 $\mathbf{x}_0$에서 그레이디언트를 화살표로 표시하고 있어, $-f'(\mathbf{x}_0)$은 최저점의 방향을 제대로 가리키는 것을 확인할 수 있다. 하지만 얼마만큼 이동하여 다음 점 $\mathbf{x}_1$로 옮겨갈지에 대한 방안은 아직 없다. 2.3.3절에서 공부하는 경사 하강법은 이에 대한 답을 제공한다.

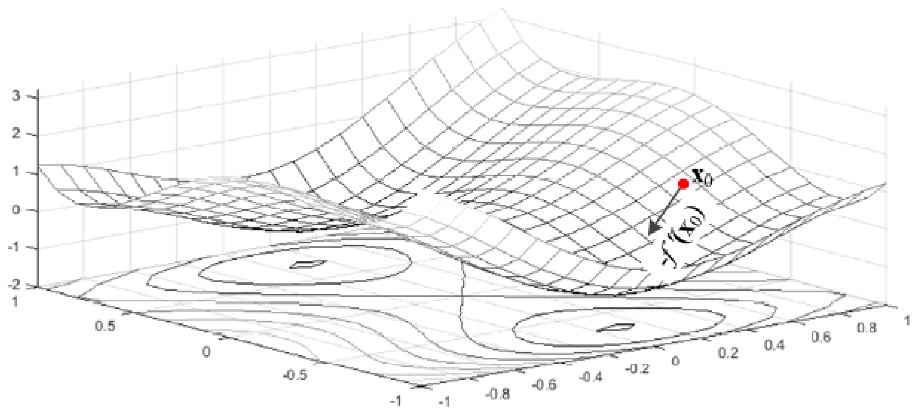



그림 2-25 그레이디언트는 최저점으로 가는 방향을 알려 줌

# 2.3.2 미분

- 독립변수와 종속변수의 구분
  - 식 (1.2)에서 $x$는 독립변수, $y$는 종속변수

$$y = wx + b \qquad (1.2)$$

  - 기계 학습에서 이런 해석은 무의미 (왜냐하면 예측 단계를 위한 해석에 불과)
  - 최적화는 예측 단계가 아니라 학습 단계에 필요
    - 식 (1.8)에서 $\Theta$가 독립변수이고 $e = J(\Theta)$라 하면 $e$가 종속변수임

$$J(\Theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(f_{\Theta}(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 \qquad (1.8)$$

    - [그림 2-22]는 여러 가지 사례를 보여줌

# 2.3.2 미분

## 연쇄법칙

- 합성함수 $f(x) = g(h(x))$와 $f(x) = g(h(i(x)))$ 의 미분

$$\left.\begin{aligned} f'(x) &= g'\big(h(x)\big)h'(x) \\ f'(x) &= g'\big(h(i(x))\big)h'(i(x))i'(x) \end{aligned}\right\} \qquad (2.53)$$

- 예) $f(x) = 3(2x^2 - 1)^2 - 2(2x^2 - 1) + 5$일 때 $h(x) = 2x^2 - 1$로 두면,

$$f'(x) = \underbrace{(3 * 2(2x^2 - 1) - 2)}_{g'(h(x))}\underbrace{(2 * 2x)}_{h'(x)} = 48x^3 - 32x$$

## 다층 퍼셉트론은 합성함수

- $\frac{\partial o_i}{\partial u_{23}^1}$를 계산할 때 연쇄법칙 적용
- 3.4절(오류 역전파)에서 설명

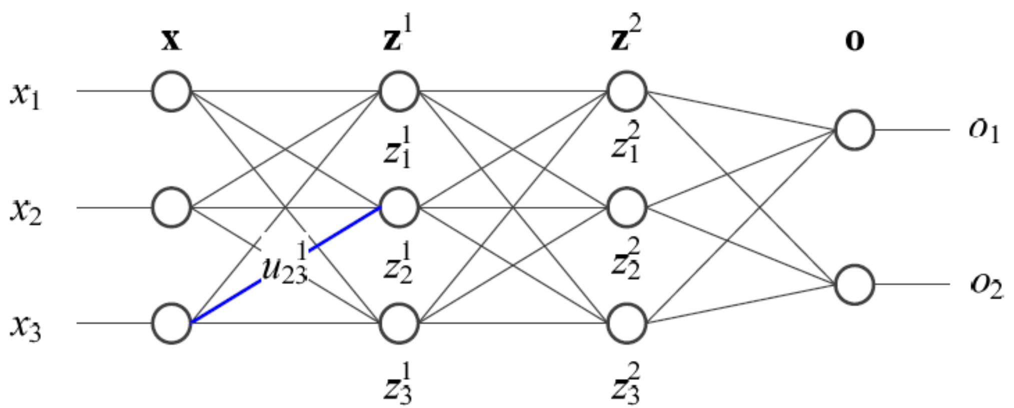



그림 2-26 다층 퍼셉트론은 합성함수

# 2.3.2 미분

## 야코비언 행렬

- 함수 $\mathbf{f}: \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^m$을 미분하여 얻은 행렬

$$
\text{야코비안 행렬 } \mathbf{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_d} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_d} \end{pmatrix}
$$

예)

$\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^3$인 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (2x_1 + x_2^2, -x_1^2 + 3x_2, 4x_1x_2)^{\mathrm{T}}$

$$
\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 2 & 2x_2 \\ -2x_1 & 3 \\ 4x_2 & 4x_1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{J}|_{(2,1)^{\mathrm{T}}} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -4 & 3 \\ 4 & 8 \end{pmatrix}
$$

## 헤시안 행렬

- 2차 편도함수

$$
\text{헤시안 행렬 } \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_n} \end{pmatrix}
$$

예)

$$
f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2) = \left(4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3}\right)x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2
$$

$$
\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 10x_1^4 - 25.2x_1^2 + 8 & 1 \\ 1 & 48x_2^2 - 8 \end{pmatrix}
$$

$$
\mathbf{H}|_{(0,1)^{\mathrm{T}}} = \begin{pmatrix} 8 & 1 \\ 1 & 40 \end{pmatrix}
$$

# 2.3.3 경사 하강 알고리즘

- 식 (2.58)은 경사 하강법이 낮은 곳을 찾아가는 원리
  - $\mathbf{g} = d\mathbf{\Theta} = \frac{\partial J}{\partial \mathbf{\Theta}}$이고, $\rho$는 학습률

$$\boxed{\mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta} - \rho\mathbf{g}} \qquad (2.58)$$

- 배치 경사 하강 알고리즘
  - 샘플의 그레이디언트를 평균한 후 한꺼번에 갱신

**알고리즘 2-4 배치 경사 하강 알고리즘(BGD)**

**입력 :** 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$, 학습률 $\rho$
**출력 :** 최적해 $\widehat{\mathbf{\Theta}}$

난수를 생성하여 초기해 $\mathbf{\Theta}$를 설정한다.
repeat
  $\mathbb{X}$에 있는 샘플의 그레이디언트 $\nabla_1, \nabla_2, \cdots, \nabla_n$을 계산한다.
  $\nabla_{total} = \frac{1}{n}\sum_{i=1,n} \nabla_i$ // 그레이디언트 평균을 계산
  $\mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta} - \rho\nabla_{total}$
until(멈춤 조건)
$\widehat{\mathbf{\Theta}} = \mathbf{\Theta}$

훈련집합

$$\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$$

$$\mathbb{Y} = \{y_1, y_2, \cdots, y_n\}$$

# 2.3.3 경사 하강 알고리즘

- 스토캐스틱 경사 하강SGD(stochastic gradient descent) 알고리즘
  - 한 샘플의 그레이디언트를 계산한 후 즉시 갱신
  - 라인 3~6을 한 번 반복하는 일을 한 세대라 부름

**알고리즘 2-5 스토케스틱 경사 하강 알고리즘(SGD)**

**입력 :** 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$, 학습률 $\rho$
**출력 :** 최적해 $\hat{\mathbf{\Theta}}$

```
1  난수를 생성하여 초기해 Θ를 설정한다.
2  repeat
3    𝕏의 샘플의 순서를 섞는다.
4    for (i=1 to n)
5        i번째 샘플에 대한 그레이디언트 ∇ᵢ를 계산한다.
6        Θ = Θ − ρ∇ᵢ
7  until(멈춤 조건)
8  Θ̂ = Θ
```

  - 다른 방식의 구현([알고리즘 2-5]의 라인 3~6을 다음 코드로 대치)

```
3  𝕏에서 임의로 샘플 하나를 뽑는다.
4  뽑힌 샘플의 그레이디언트 ∇를 계산한다.
5  Θ = Θ − ρ∇
```