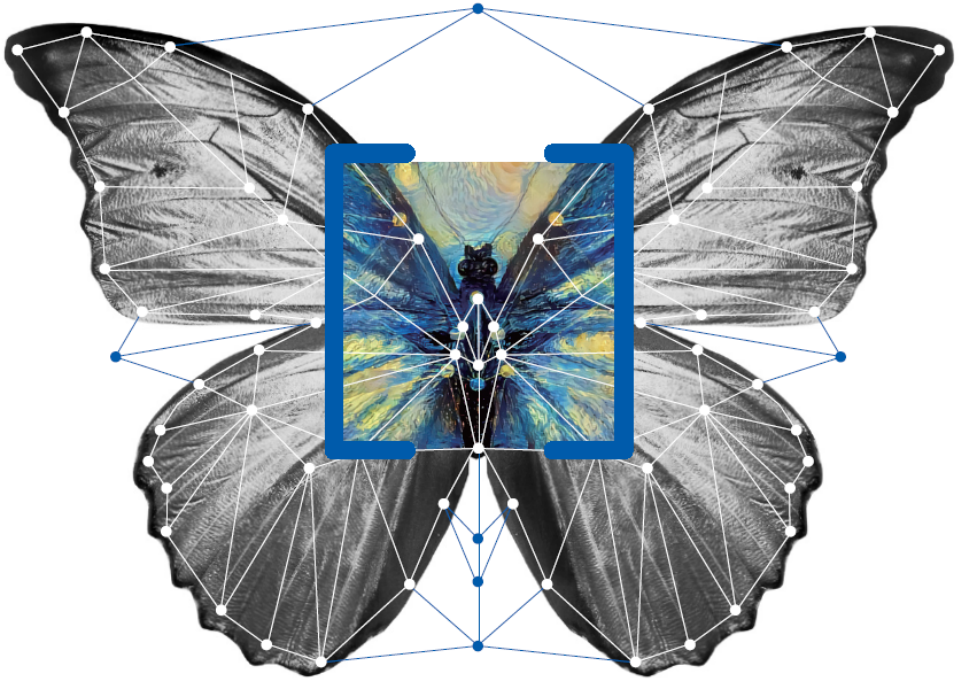
한빛아카데미
Hanbit Academy, Inc.



MACHINE LEARNING 기계 학습

오일석 지음

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

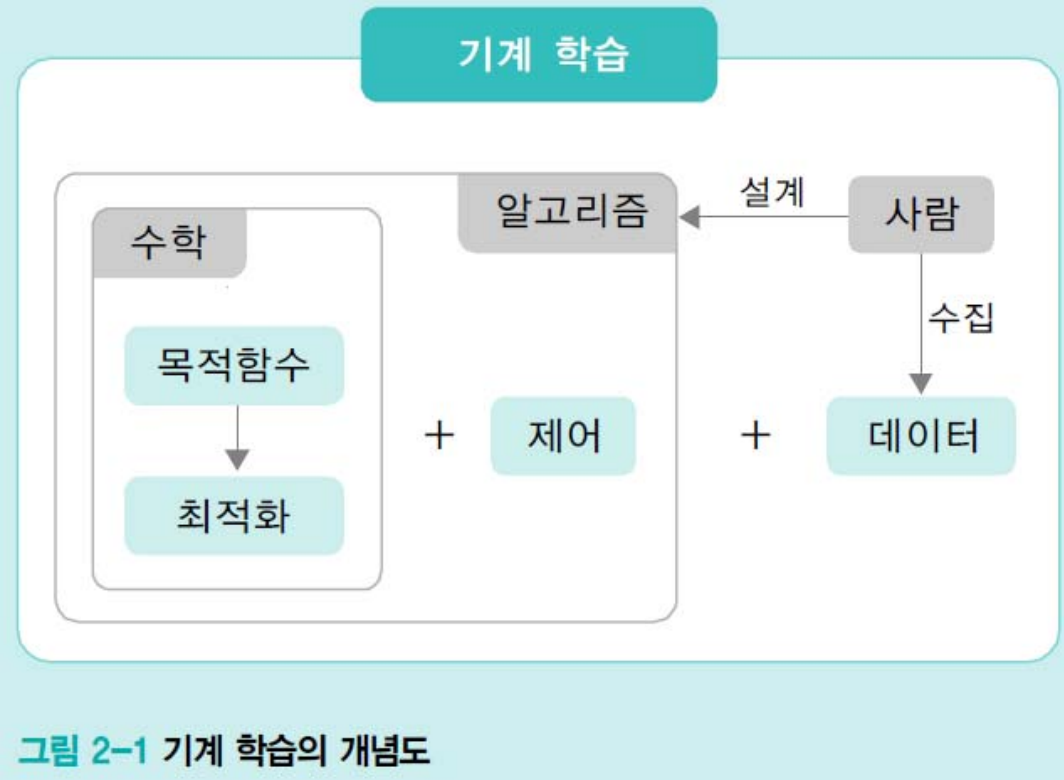


그림 2-1 기계 학습의 개념도

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 $\mathbf{X}$로 표현

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

← 행 row

↑ 열 column

2.1.1 벡터와 행렬

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

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

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

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

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

2.1.1 벡터와 행렬

행렬 연산

행렬 곱셈

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

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

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

$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 5.1 \\ 3.5 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}$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

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

tensor flow

2.1.2 놈과 유사도

- 벡터와 행렬의 크기를 놈으로 측정
  - 벡터의 p차 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) $\mathbf{x} = (3 \quad -4 \quad 1)$ 일 때, 2차 놈은 $\|\mathbf{x}\|_2 = (3^2 + (-4)^2 + 1^2)^{1/2} = 5.099$

  - 행렬의 프로베니우스 놈

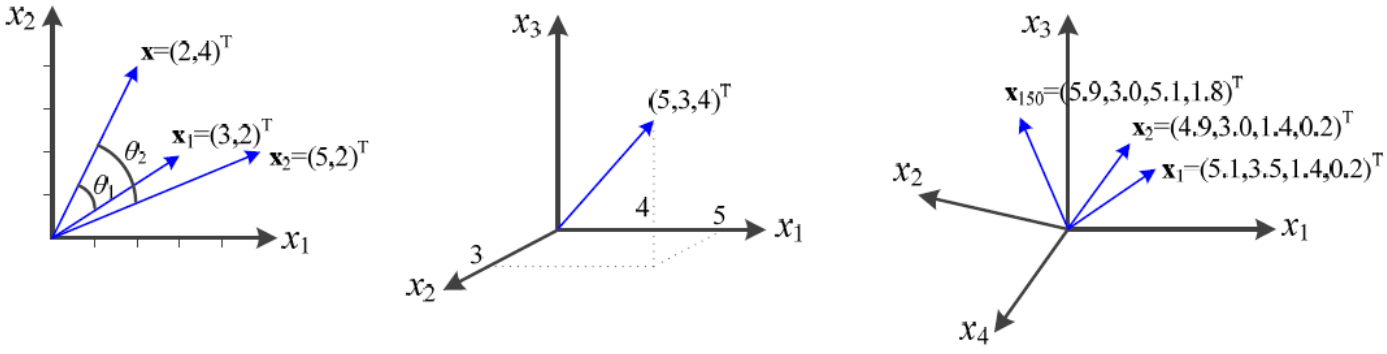
$$\text{프로베니우스 놈: } \|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i=1,n} \sum_{j=1,m} a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.6}$$

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

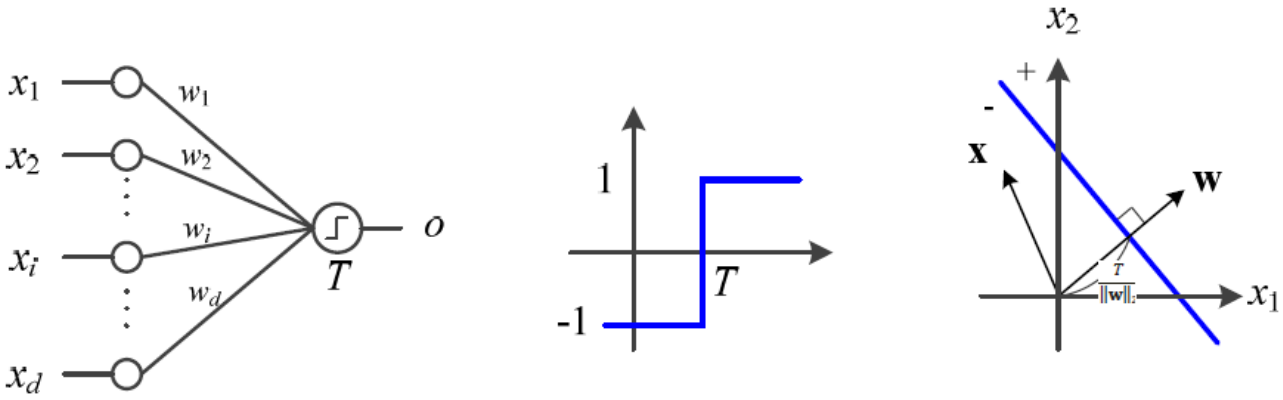
코사인 유사도

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

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,

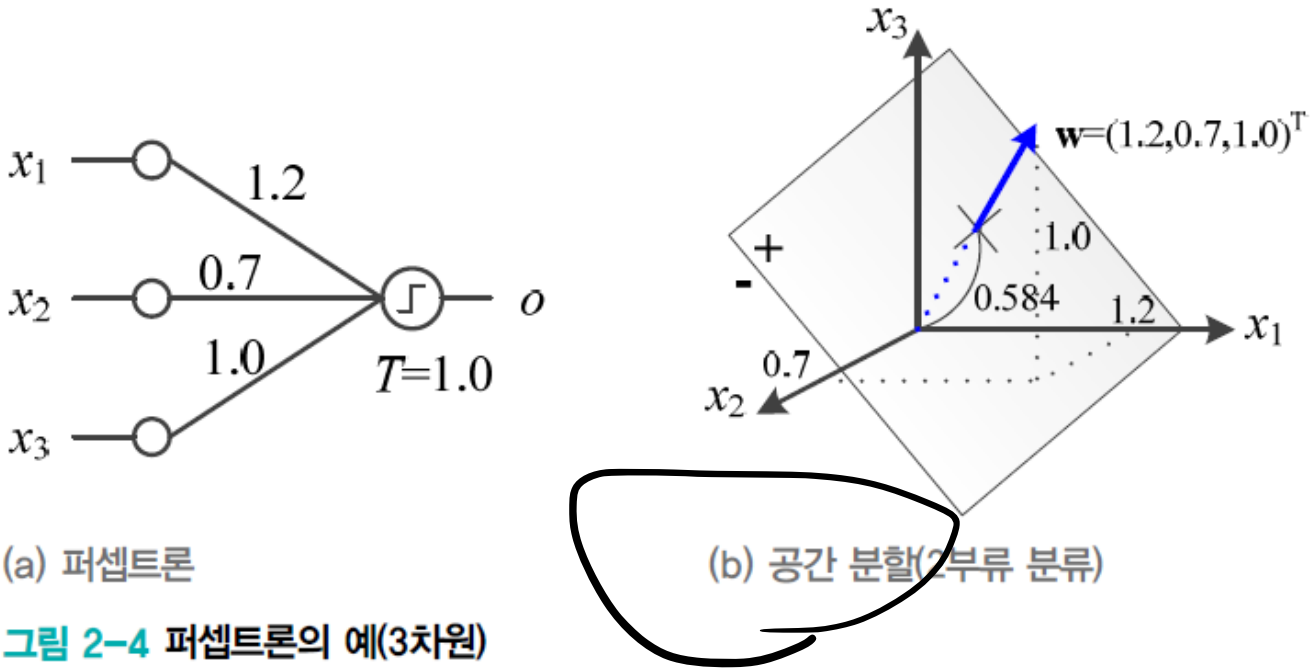
$$o = \tau(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}), \quad \text{이때} \quad \tau(a) = \begin{cases} 1, & a \geq T \\ -1, & a < T \end{cases} \tag{2.8}$$

  - 활성 함수 τ로는 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 $\frac{T}{\|\mathbf{w}\|_2}$만큼 떨어져 있음
- 3차원 특징공간은 결정평면decision plane, 4차원 이상은 결정 초평면decision hyperplane
- 예) 3차원 특징공간을 위한 퍼셉트론



(a) 퍼셉트론 (b) 공간 분할(2부류 분류)

그림 2-4 퍼셉트론의 예(3차원)

2.1.3 퍼셉트론의 해석

- 출력이 여러 개인 퍼셉트론

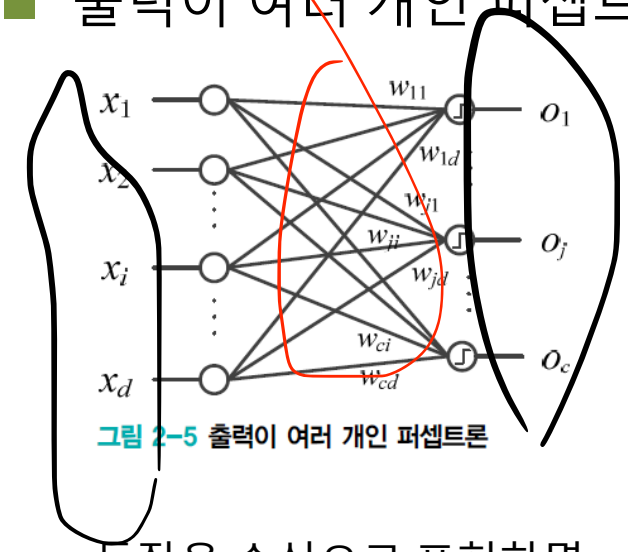


그림 2-5 출력이 여러 개인 퍼셉트론

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

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

- 동작을 수식으로 표현하면,

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

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

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

- 가중치 벡터를 각 부류의 기준 벡터로 간주하면, c개 부류의 유사도를 계산하는 셈

2.1.3 퍼셉트론의 해석

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

분류라는 과업: $\hat{\mathbf{o}} = \tau(\hat{\mathbf{W}}\hat{\mathbf{x}})$ (2.10)

  - 식 (2.11)은 학습 과정
    - 학습은 훈련집합의 샘플에 대해 식 (2.11)을 가장 잘 만족하는 $\mathbf{W}$를 찾아내는 작업

학습이라는 과업: $\mathbf{o} = \tau(\hat{\mathbf{W}}\mathbf{x})$ (2.11)

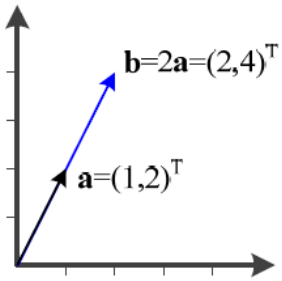
- 현대 기계 학습에서 퍼셉트론의 중요성
  - 딥러닝은 퍼셉트론을 여러 층으로 확장하여 만듦

2.1.4 선형결합과 벡터공간

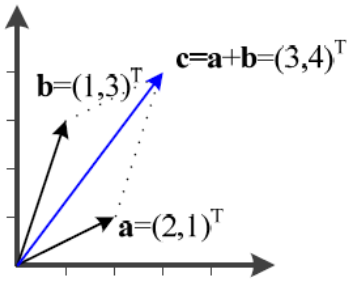
- 벡터
  - 공간상의 한 점으로 화살표 끝이 벡터의 좌표에 해당
- 선형결합이 만드는 벡터공간
  - 기저벡터 **a**와 **b**의 선형결합

$$\mathbf{c} = \alpha_1 \mathbf{a} + \alpha_2 \mathbf{b} \qquad (2.12)$$

  - 선형결합으로 만들어지는 공간을 벡터공간이라 부름

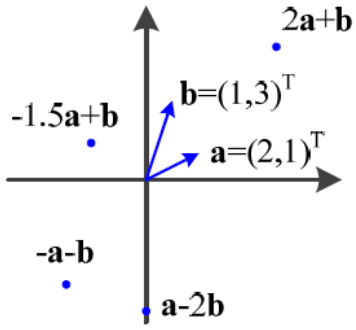


(a) 벡터에 스칼라 곱

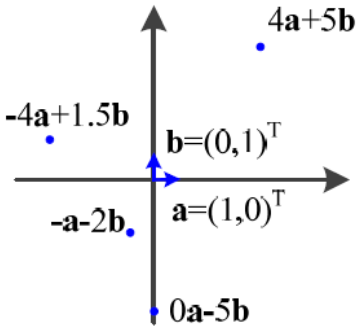


(b) 두 벡터의 덧셈

그림 2-6 벡터의 연산



(a) 기저 벡터와 벡터공간

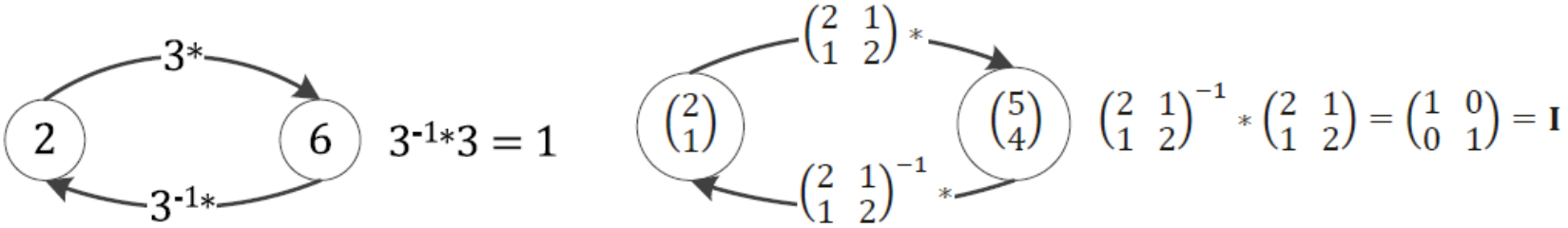


(b) 정규직교 기저 벡터

그림 2-7 벡터공간

2.1.5 역행렬

역행렬의 원리



(a) 역수의 원리 (b) 역행렬의 원리

그림 2-9 역행렬

- 정사각행렬 $\mathbf{A}$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 $\begin{pmatrix} 2 & -0.5 \\ -3 & 1 \end{pmatrix}$

2.3.1 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 (Θ는 매개변수, $J(\Theta)$는 목적함수)

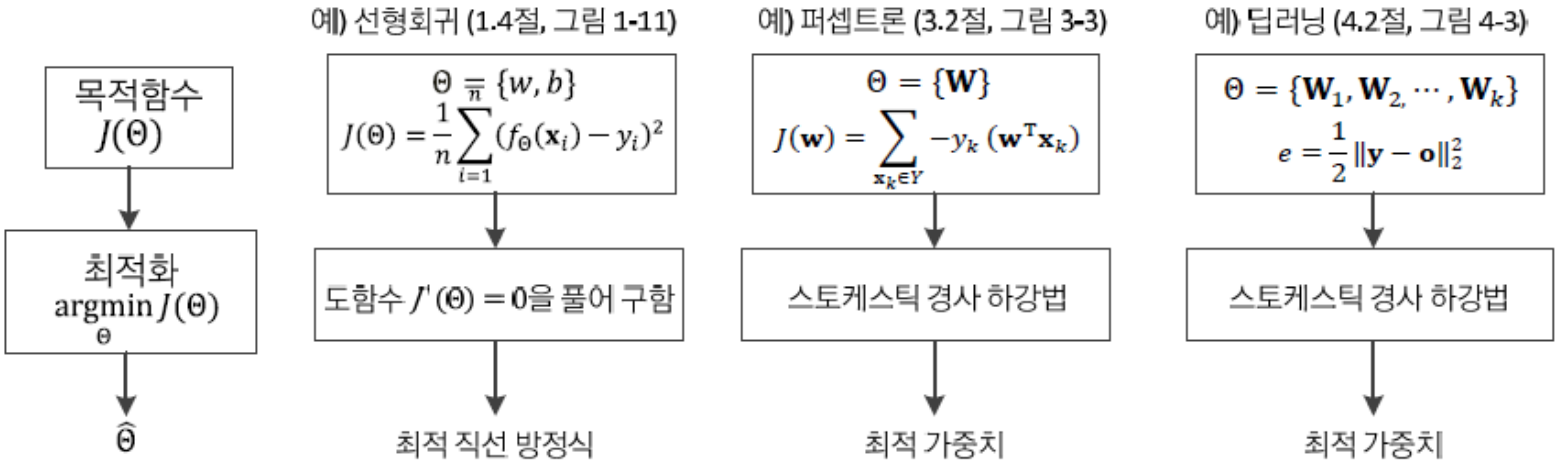


그림 2-22 최적화를 이용한 기계 학습의 문제풀이 과정

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_2와 x_4는 지역 최적해
  - x_2와 같이 전역 최적해에 가까운 지역 최적해를 찾고 만족하는 경우 많음

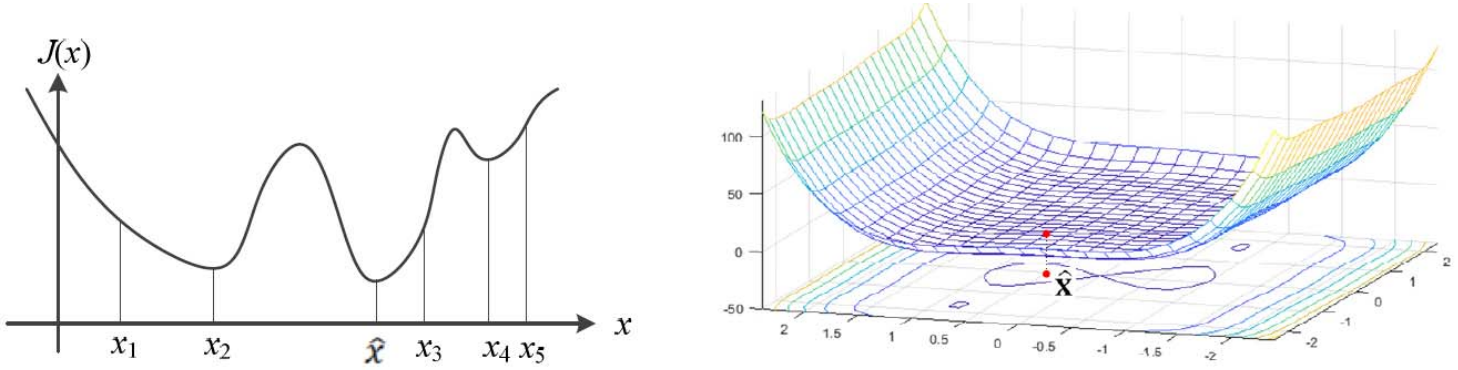


그림 2-23 최적해 탐색

- 기계 학습이 해야 할 일을 식으로 정의하면,

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

2.3.1 매개변수 공간의 탐색

최적화 문제 해결

- 낱낱탐색exhaustive search 알고리즘
  - 차원이 조금만 높아져도 적용 불가능
  - 예) 4차원 Iris에서 각 차원을 1000구간으로 나눈다면 총 1000^4개의 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 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}$

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

알고리즘 2-2 무작위 탐색 알고리즘

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

```
1  min을 충분히 큰 값으로 초기화한다.
2  repeat
3     무작위로 해를 하나 생성하고 Θ_current라 한다.
4     if(J(Θ_current)<min) min=J(Θ_current), Θ_best = Θ_current
5  until(멈춤 조건)
6  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 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}$

```
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
```

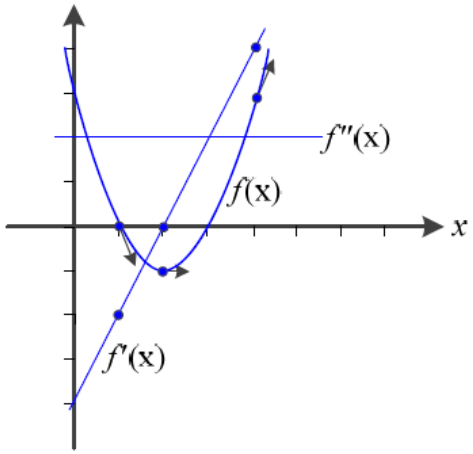
2.3.2 미분

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 $d\boldsymbol{\theta}$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 Θ에 많은 변수가 있으므로 편미분을 많이 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.

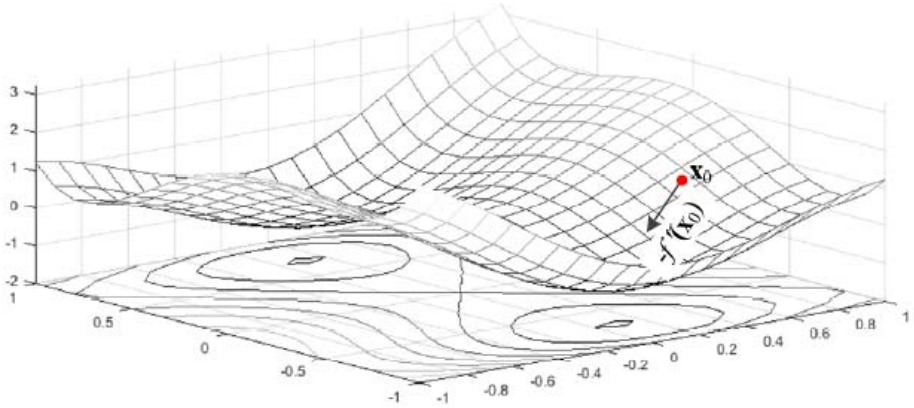


그림 2-25 그레이디언트는 최저점으로 가는 방향을 알려 줌

2.3.2 미분

연쇄법칙

- 합성함수 $f(x) = g(h(x))$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

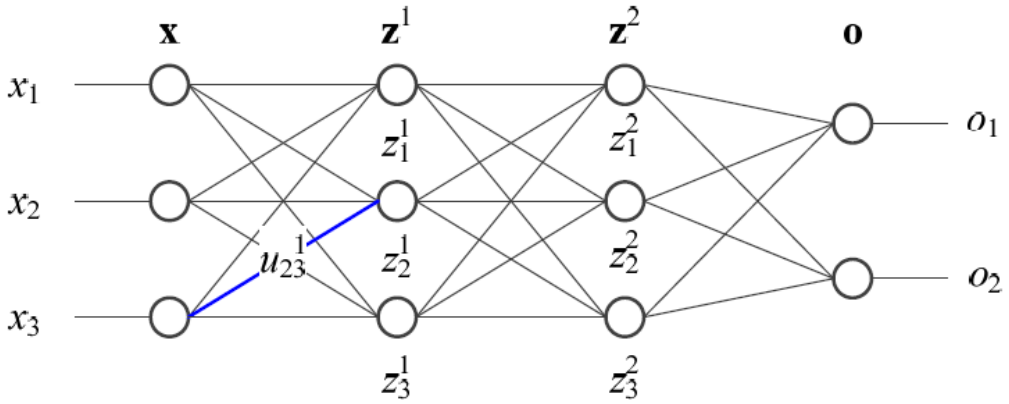


그림 2-26 다층 퍼셉트론은 합성함수

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
  - $\mathbf{g} = d\boldsymbol{\Theta} = \frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{\Theta}}$이고, ρ는 학습률

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

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

훈련집합

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

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

알고리즘 2–4 배치 경사 하강 알고리즘(BGD)

입력: 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$, 학습률 ρ
출력: 최적해 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}$

```
1  난수를 생성하여 초기해 Θ를 설정한다.
2  repeat
3     𝕏에 있는 샘플의 그레이디언트 ∇1, ∇2, ⋯, ∇n을 계산한다.
4     ∇total = (1/n) Σ(i=1,n) ∇i   // 그레이디언트 평균을 계산
5     Θ = Θ − ρ∇total
6  until(멈춤 조건)
7  Θ̂ = Θ
```

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 ρ
출력 : 최적해 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}$

```
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

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