2장. 기계학습과 수학 (2)

실전코딩

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

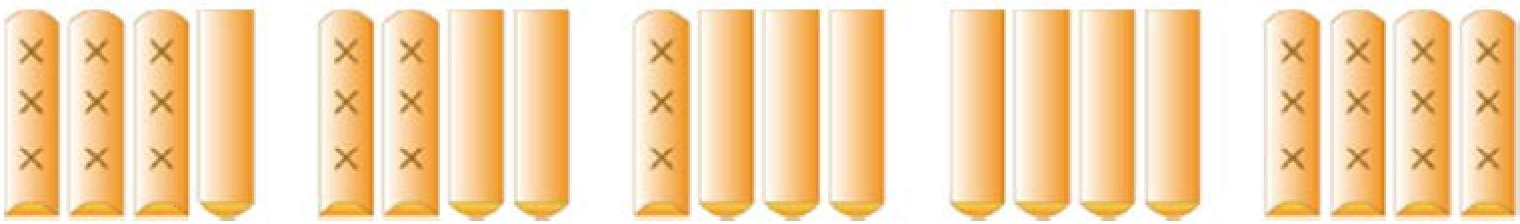
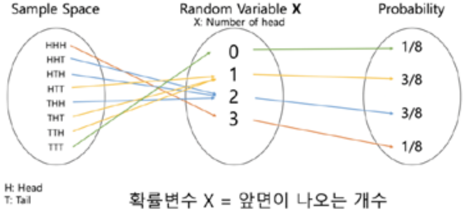


그림 2-13 윷을 던졌을 때 나올 수 있는 다섯 가지 경우(왼쪽부터 도, 개, 걸, 윷, 모)

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

- Random variable(확률변수) is a function that assigns real number to each element of the sample space
  - 확률변수: 함수이다. 표본 공간에 있는 요소(실험으로부터 나온 모든 결과)를 실수로 대응시키는 함수이다.
  - 실수로 바꿔야 통계적인 처리가 가능하다!

Toss 3 Coin Example



확률변수 X = 앞면이 나오는 개수

2.2.1 확률 기초

확률분포

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

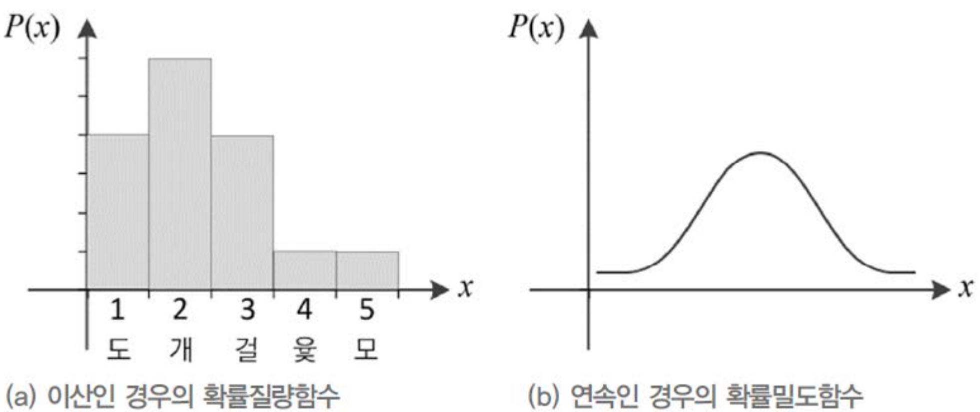


그림 2-14 확률분포

확률벡터random vector

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

2.2.1 확률 기초

간단한 확률실험 장치

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

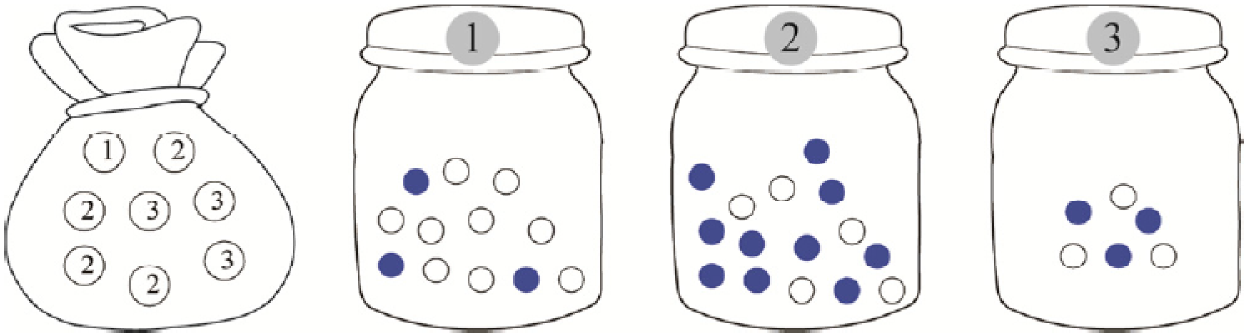


그림 2-15 확률 실험

2.2.1 확률 기초

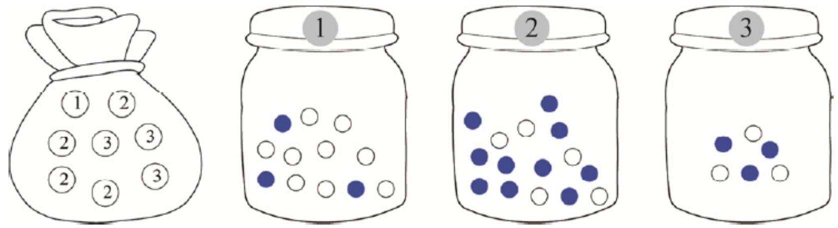


그림 2-15 확률 실험

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

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

- 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

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

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

$$P(y|x) = \frac{P(x|y)P(y)}{P(x)}$$

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

- 베이즈 정리 (식 (2.26))
  - 베이즈 정리를 적용하면,

$$\hat{y} = \underset{y}{\text{argmax}}\, P(y|x = \text{하얀}) = \underset{y}{\text{argmax}} \frac{P(x = \text{하얀}|y)P(y)}{P(x = \text{하얀})}$$

  - 세 가지 경우에 대해 확률을 계산하면,

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

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

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

$\longrightarrow$ ③번 병일 확률이 가장 높음

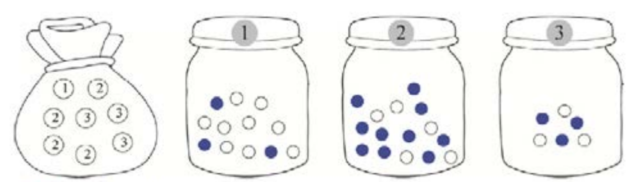


그림 2-15 확률 실험

- 베이즈 정리의 해석

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

2.2.2 베이즈 정리와 기계 학습

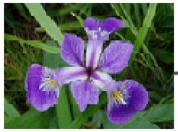
기계 학습에 적용

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

posterior likelihood prior

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

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



$\xrightarrow{\text{특징추출}}$ $\mathbf{x} = (7.0, 3.2, 4.7, 1.4)^{\mathrm{T}}$ $\xrightarrow{\text{사후확률 추정}}$

$P(\text{setosa}|\mathbf{x}) = 0.18$
$P(\text{versicolor}|\mathbf{x}) = 0.72$
$P(\text{virginica}|\mathbf{x}) = 0.10$

$\xrightarrow{\text{argmax}}$ versicolor

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

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

- 앞서 확률 실험에서는 주머니와 병 내부를 모두 볼 수 있어서 쉽게 풀 수 있었다. → 즉 모든 데이터가 나올 수 있는 확률적인 상황을 다 알고 있는 것을 가정했지만, 현실 세계에서는 우리는 항상 일부의 데이터셋만 보고 학습을 해야 한다.

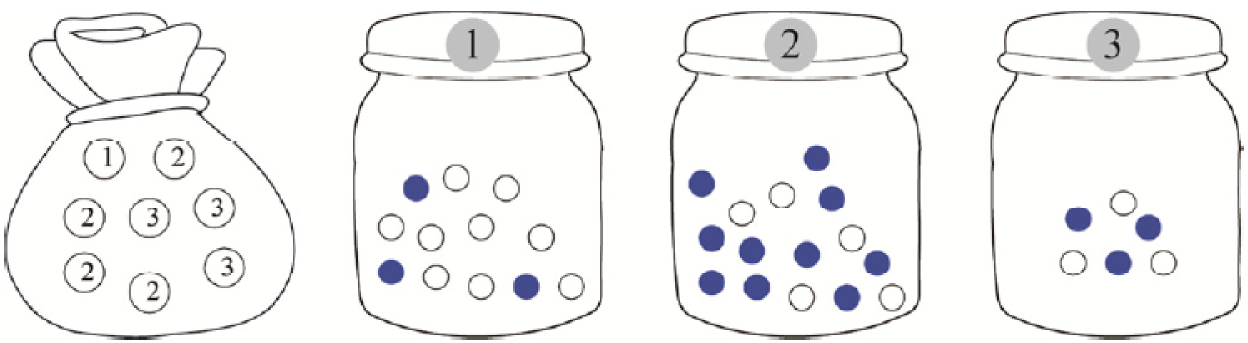


그림 2-15 확률 실험

2.2.3 최대 우도

■ 매개변수 Θ를 모르는 상황에서 매개변수를 추정하는 문제

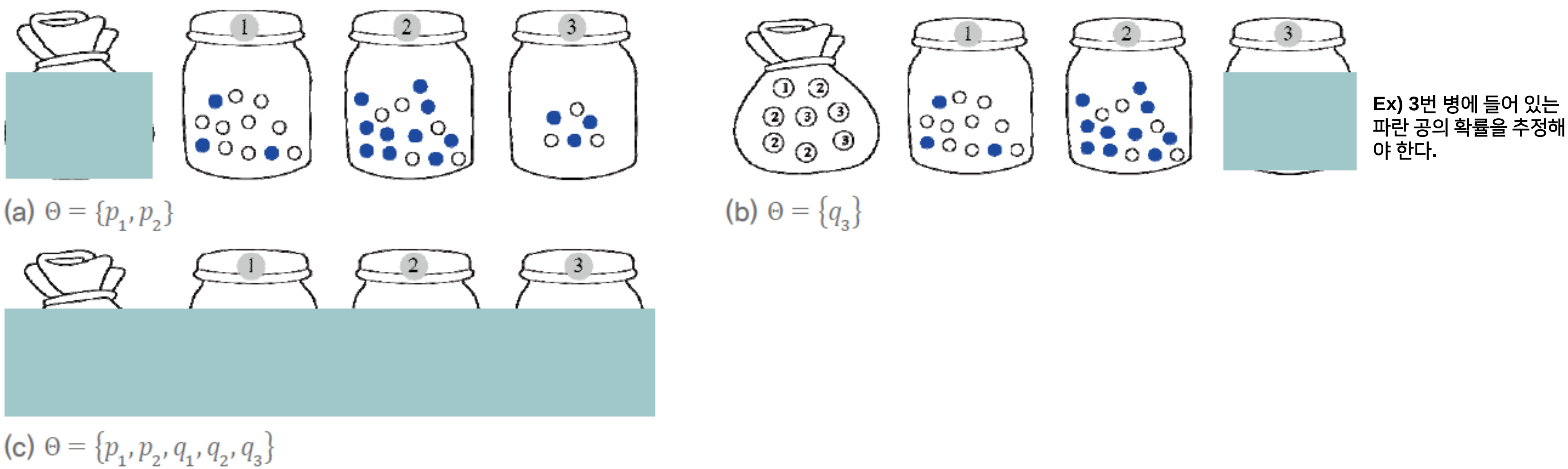


그림 2-17 매개변수가 감추어진 여러 가지 상황

- 예) [그림 2-17(b)] 상황
  - 만약 실험을 여러 번 반복하여, X를 얻었다고 하자, 3번 병에는 파란공/하얀공이 어떤 확률로 들어 있을지 θ를 추정해보자

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

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

최대 우도법

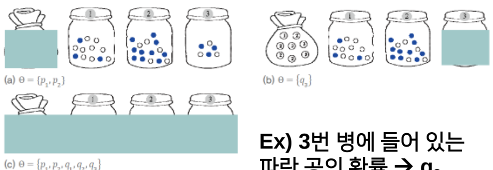


그림 2-17 매개변수가 감추어진 여러 가지 상황

Ex) 3번 병에 들어 있는 파란 공의 확률 → q_3

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

- [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,

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

- 수치 문제를 피하기 위해 로그 표현으로 바꾸면,
  - n은 수천을 넘어, n번 곱하면 너무 작은 값이 되어 버림 될 가능성 있음

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

기계 학습에 적용해보면,
(파란공 or 하얀공) 관찰 결과 → 훈련집합 X
추정해야 할 매개변수 θ → 신경망의 가중치 집합 W

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

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

두개 이상의 변량들에서, 다수의 두 변량 값들 간의 공분산 또는 상관계수들을 행렬로 표현한 것

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

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

공분산 행렬 예

실험 \ 변량	x_1	x_2	x_3
1	1	0	1
2	1	1	1
3	0	0	0
4	0	1	1

$$Var[\mathbf{X}] = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.333 & 0.000 & 0.167 \\ 0.000 & 0.333 & 0.167 \\ 0.167 & 0.167 & 0.250 \end{bmatrix}$$

x_1,x_2 간에는, 상관성 없음
- σ_{12} : (0.000)

x_1,x_3 및 x_2,x_3 간에는, 같은 정도의 상관성 보임
- σ_{13} : (0.167)
- σ_{23} : (0.167)

x_3은, x_1,x_2 보다 자체 데이터 분산이 작음
- σ_{33} : (0.250)
- σ_{11},σ_{22} : (0.333)

[참고] http://www.ktword.co.kr/test/view/view.php?m_temp1=5596

2.2.4 평균과 분산

평균 벡터와 공분산 행렬 예제

예제 2-7

Iris 데이터베이스의 샘플 중 8개만 가지고 공분산 행렬을 계산하자.

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

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.

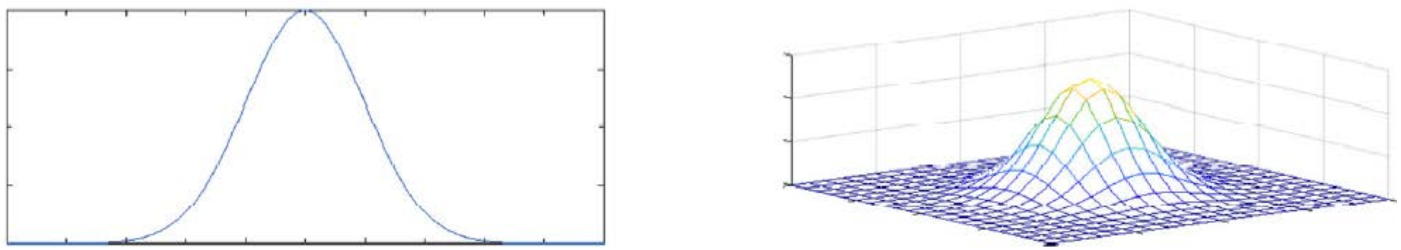
$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 0.0661 & 0.0527 & 0.0181 & 0.0083 \\ 0.0527 & 0.0736 & 0.0181 & 0.0130 \\ 0.0181 & 0.0181 & 0.0125 & 0.0056 \\ 0.0083 & 0.0130 & 0.0056 & 0.0048 \end{pmatrix}$$

2.2.5 유용한 확률분포

가우시안 분포

- 평균 μ와 분산 σ^2으로 정의 (보통 정규분포(standard distribution)로 알려져 있음)

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



(a) 1차원 (b) 2차원

그림 2-19 가우시안 분포

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

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

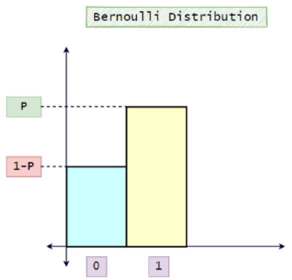
2.2.5 유용한 확률분포

베르누이 분포

- 성공(x=1) 확률 p이고 실패(x=0) 확률이 1-p인 분포

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

- 베르누이 확률변수는 두 값 중 하나만 가질 수 있으므로 이산확률변수(discrete random variable)
- Ex) 동전 던지기



이항 분포

- 성공 확률이 p인 베르누이 실험을 m번 수행할 때 성공할 횟수의 확률분포

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

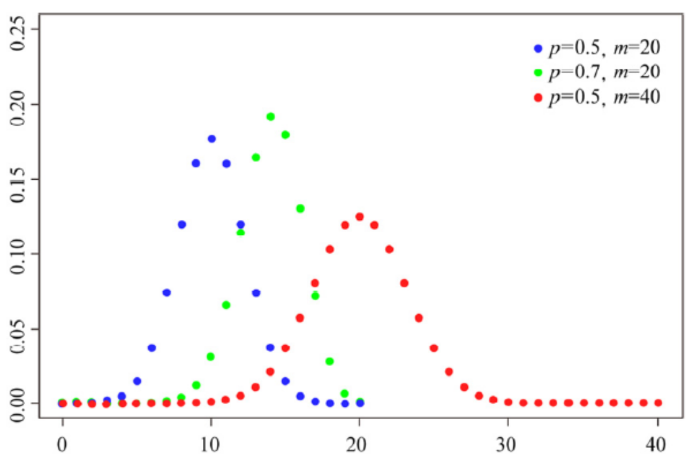


그림 2-20 이항 분포

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_i의 정보량 (단위: 비트 또는 나츠) → 확률로 측정. -log를 붙이기 때문에 확률값이 작을 수록 정보량이 커짐

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

- 엔트로피
  - 확률변수 x의 불확실성을 나타내는 엔트로피 (확률 분포의 무질서도/불확실성 측정)

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

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

2.2.6 정보이론

자기 정보와 엔트로피 예제

예제 2-8

윷을 나타내는 확률변수를 x라 할 때 x의 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?
  - 주사위는 모든 사건이 동일한 확률을 가진다. 즉, 어떤 사건이 일어날 지 윷보다 예측하기 어렵다. 주사위가 윷보다 더 무질서하고 불확실성이 크다고 할 수 있다. 따라서 엔트로피가 더 높다.

2.2.6 정보이론

■ 교차 엔트로피cross entropy

- 두 확률분포 P와 Q 사이의 교차 엔트로피

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

- 식을 전개하면,

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

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

$$\begin{aligned} H(P,Q) &= -\sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) \\ &= -\sum_{x} P(x)\log_2 P(x) + \sum_{x} P(x)\log_2 P(x) - \sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) \\ &= \underline{H(P) + \sum_{x} P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)}} \end{aligned}$$

P의 엔트로피 + P와 Q 간의 KL 다이버전스

- KL divergence(Kullback–Leibler divergence, KLD)는 두 확률 분포가 얼마나 다른지 특정한다. (P와 Q가 같다면 $\log_2 1=0$ 이다)

2.2.6 정보이론

KL 다이버전스

- 식 (2.48)은 P와 Q 사이의 KL 다이버전스
- 두 확률분포 사이의 거리를 계산할 때 주로 사용 (교환법칙이 성립하지 않는다. 거리 개념 아님)

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

교차 엔트로피와 KL 다이버전스의 관계

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

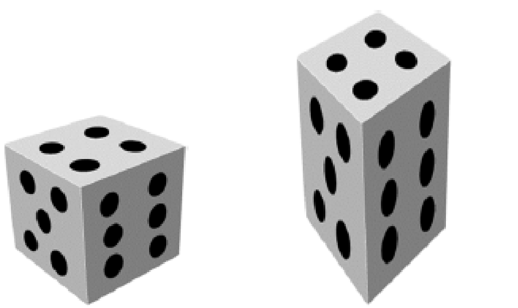
- **머신러닝에서 주로 사용되는 neural network에 대해 생각해보면, supervised learning 셋팅에서 ground true가 존재하기 때문에 true probability distribution P가 존재하고, neural network가 학습을 통해 approximate probability distribution Q를 배우게 됩니다. 이 때, P와 Q 사이의 거리 혹은 차이를 최소화할 필요가 있음 → cross entropy를 classification의 loss term으로 쓴다**

2.2.6 정보이론

예제 2-9

[그림 2-21]과 같이 정상적인 주사위와 찌그러진 주사위가 있는데, 정상적인 주사위의 확률분포는 P, 찌그러진 주사위의 확률분포는 Q를 따르며, P와 Q가 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

$$\begin{aligned} H(P,Q) &= -\sum_x P(x)\log_2 Q(x) \\ &= -\sum_x P(x)\log_2 P(x) + \sum_x P(x)\log_2 P(x) - \sum_x P(x)\log_2 Q(x) \\ &= H(P) + \sum_x P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)} \end{aligned}$$

$$KL(P \parallel Q) = \sum_x P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)} \qquad (2.48)$$

확률분포 P와 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 P의 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 (Θ는 매개변수, $J(\Theta)$는 목적함수)

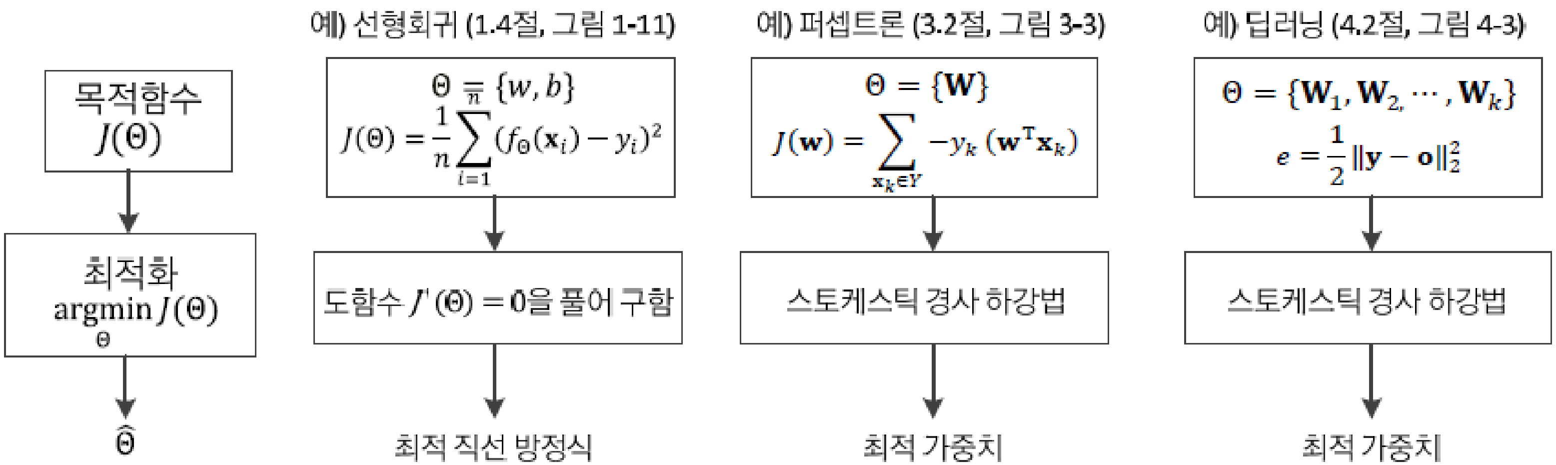
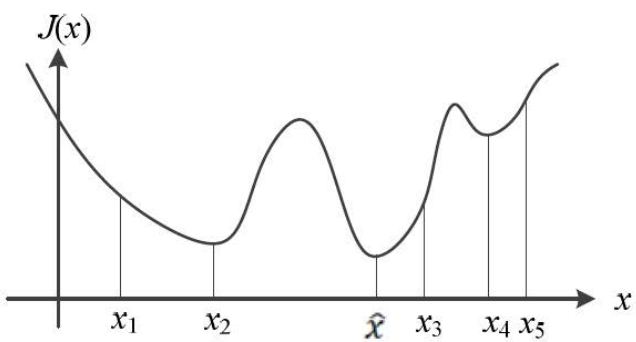


그림 2-22 최적화를 이용한 기계 학습의 문제풀이 과정

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(x축), 매개변수 공간은 2차원(w, b)
    - MNIST 인식하는 딥러닝 모델은 784차원 특징 공간, 수십만~수백만 차원의 매개변수 공간
  - [그림 2-23] 개념도의 매개변수 공간: $\hat{x}$은 전역 최적해(global minimum), x_2와 x_4는 지역 최적해(local minimum)
  - x_2와 같이 전역 최적해에 가까운 지역 최적해를 찾고 만족하는 경우 많음



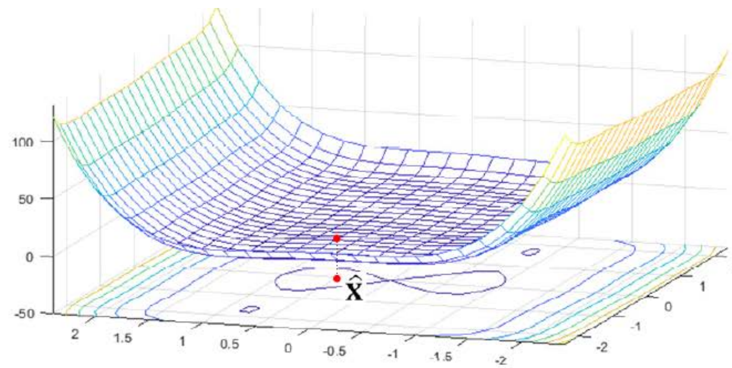


그림 2-23 최적해 탐색

- 기계 학습이 해야 할 일을 식으로 정의하면,

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

2.3.1 매개변수 공간의 탐색

최적화 문제 해결

- 낱낱탐색exhaustive search 알고리즘 (완전탐색)
  - 차원이 조금만 높아져도 적용 불가능
  - 예) 4차원 Iris에서 각 차원을 1000구간으로 나눈다면 총 1000^4개의 점을 평가해야 함

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 $\mathbf{\Theta}_{current}$에 대해)
    if($J(\mathbf{\Theta}_{current})< min$) $min=J(\mathbf{\Theta}_{current})$, $\mathbf{\Theta}_{best} = \mathbf{\Theta}_{current}$
$\hat{\mathbf{\Theta}} = \mathbf{\Theta}_{best}$

- 무작위 탐색 알고리즘
  - 아무 전략이 없는 순진한 알고리즘

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 $\mathbf{\Theta}_{current}$라 한다.
    if($J(\mathbf{\Theta}_{current})<min$) $min=J(\mathbf{\Theta}_{current})$, $\mathbf{\Theta}_{best} = \mathbf{\Theta}_{current}$
until(멈춤 조건)
$\hat{\mathbf{\Theta}} = \mathbf{\Theta}_{best}$

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 $\widehat{\mathbf{\Theta}}$

1 난수를 생성하여 초기해 $\mathbf{\Theta}$을 설정한다.
2 repeat
3 　$J(\mathbf{\Theta})$가 작아지는 방향 $d\mathbf{\Theta}$를 구한다.
4 　$\mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta} + d\mathbf{\Theta}$
5 until(멈춤 조건)
6 $\widehat{\mathbf{\Theta}} = \mathbf{\Theta}$

2.3.2 미분

미분에 의한 최적화

- 미분의 정의

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

1차 도함수 2차 도함수

- 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

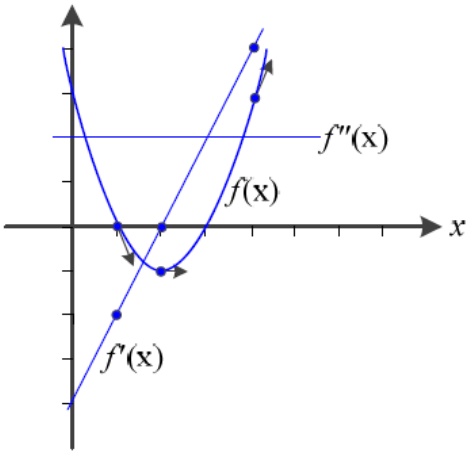


그림 2-24 간단한 미분 예제

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

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

X=4에서 1차 도함수 값은 4인데, 최저점은 왼쪽에 있다.
X=1에서 1차 도함수 값은 -2인데 최저점은 오른쪽에 있다.

도함수값이 +이면 –방향으로 가야 최저점을 만나고,
도함수값이 –이면 +방향으로 가야 최저점을 찾을 수 있다.
(얼만큼 x를 이동시킬지는 언급되지 않았음. 추후 언급될 예정)

*θ’ = θ+α*dθ*
dθ ← -f’(x)
기울기가 0이 되는 지점(θ값)을 찾는 것

2.3.2 미분

편미분

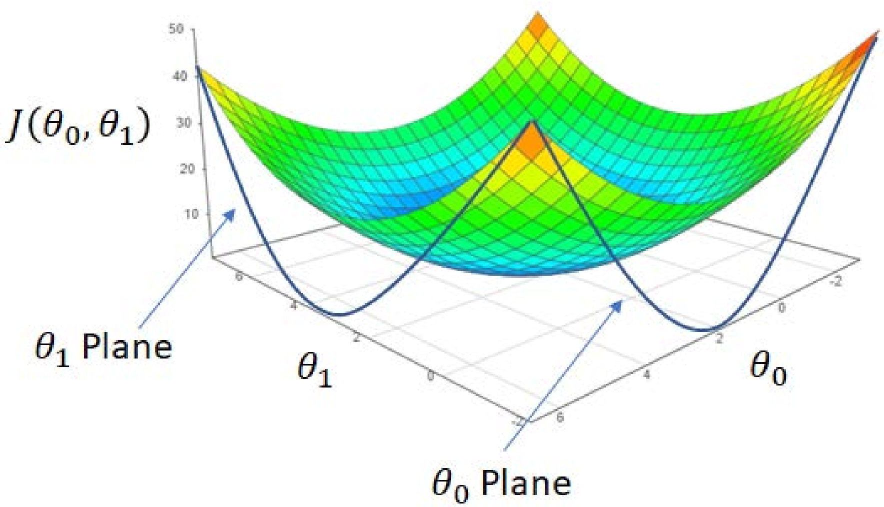
- 변수가 여러 개인 함수의 미분
- 미분값이 이루는 벡터를 그레이디언트라 부름
- 여러 가지 표기: $\nabla f, \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}, \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^{\mathrm{T}}$
- 예)

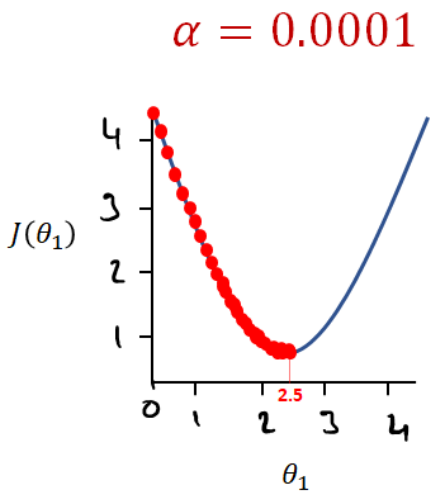
$$\left.\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(x_1, x_2) = \left(4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3}\right)x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2 \\ \nabla f &= f'(\mathbf{x}) = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^{\mathrm{T}} = (2x_1^5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

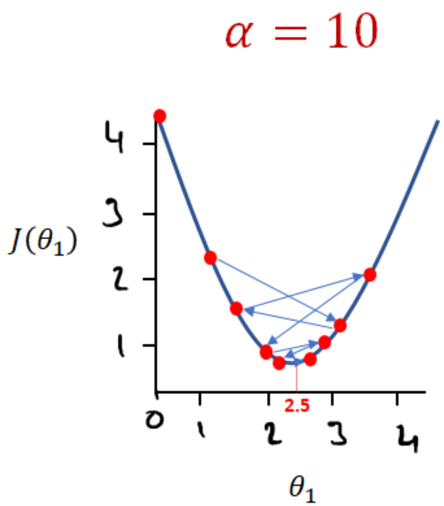
기계 학습에서 편미분

- 매개변수 집합 Θ에 많은 변수가 있으므로 편미분을 많이 사용

2.3.2 미분







$\theta_0 = 0$
$\theta_1 = 0$

Repeat until convergence

{

$$\theta_0 = \theta_0 - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_0} J(\theta_0, \theta_1)$$

$$\theta_1 = \theta_1 - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_1} J(\theta_0, \theta_1)$$

}

편미분을 통해서 각 파라미터가 어느 방향으로 얼만큼 이동해야하는지 알아낼 수 있다.

2.3.2 미분

연쇄법칙(chain rule)

- 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

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

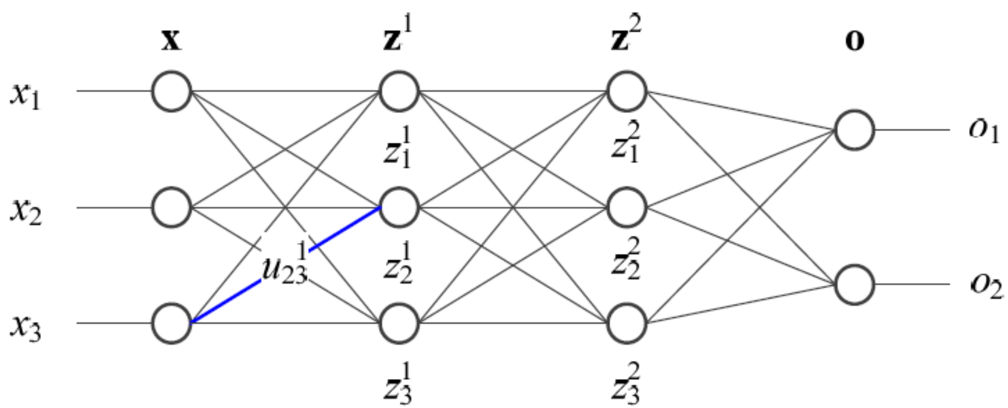


그림 2-26 다층 퍼셉트론은 합성함수

2.3.3 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

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

- 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 ρ

출력 : 최적해 $\widehat{\boldsymbol{\Theta}}$

난수를 생성하여 초기해 $\boldsymbol{\Theta}$를 설정한다.
repeat
  $\mathbb{X}$에 있는 샘플의 그레이디언트 $\boldsymbol{\nabla}_1, \boldsymbol{\nabla}_2, \cdots, \boldsymbol{\nabla}_n$을 계산한다.
  $\boldsymbol{\nabla}_{total} = \frac{1}{n}\sum_{i=1,n} \boldsymbol{\nabla}_i$ // 그레이디언트 평균을 계산
  $\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Theta} - \rho\boldsymbol{\nabla}_{total}$
until(멈춤 조건)
$\widehat{\boldsymbol{\Theta}} = \boldsymbol{\Theta}$

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

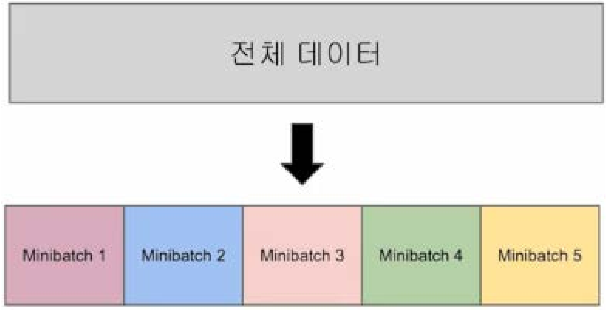
알고리즘 2-5 스토케스틱 경사 하강 알고리즘(SGD)

입력 : 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$, 학습률 ρ
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

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



배치 경사 하강법은 경사 하강법을 할 때, 전체 데이터를 사용하므로 가중치 값이 최적값에 수렴하는 과정이 매우 안정적이지만, 계산량이 너무 소요됨

미니 배치 경사 하강법은 경사 하강법을 할 때, 전체 데이터의 일부만을 보고 수행하므로 최적값으로 수렴하는 과정에서 값이 조금 헤매기도 하지만 훈련 속도가 빠름

Q&A