

## Error Backpropagation of Feedforward Networks

- 참고. 1. Learning Internal Representations by Error Propagation  
in the book "Parallel Distributed Processing" 1986  
by Rumelhart, Hinton, Williams
2. 기계 학습, 오일석, 한빛아카데미

### 1. 그래디언트.

오류 역전파는 사실 합성 함수에서 그래디언트를 계산하는 것과 같다. 따라서 합성 함수의 그래디언트를 이해한다면 오류 역전파에 대한 모든 것을 이해하게 된다.

다음 합성 함수를 생각해 보자.

$$\mathbb{R}^p \xrightarrow{F} \mathbb{R}^q \xrightarrow{g} \mathbb{R}$$

변수  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)$ ,  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_q)$ 를 대입하여 적으면 다음과 같다.

$$\mathbf{y} = F(\mathbf{x}), \quad z = g(\mathbf{y})$$

함수  $F$ 는  $q$  개의 함수  $y_1 = f_1(\mathbf{x}), \dots, y_q = f_q(\mathbf{x})$ 로 이루어져 있으며

$$F(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_q(\mathbf{x}))$$

또는

$$F(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}) \dots f_q(\mathbf{x})]^T$$

로 적을 수 있다.

두 함수  $z = g(\mathbf{y})$ 와  $z = (g \circ F)(\mathbf{x})$ 의 그래디언트는 각각

$$\nabla g(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial y_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial z}{\partial y_q} \end{bmatrix}, \quad \nabla (g \circ F)(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial z}{\partial x_p} \end{bmatrix}$$

이다. 합성 함수의 미분법은  $\nabla (g \circ F)(\mathbf{x})$ 가

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial z}{\partial x_p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial y_q}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_p} & \dots & \frac{\partial y_q}{\partial x_p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial y_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial z}{\partial y_q} \end{bmatrix} \quad (1.1)$$

임을 말해준다.  $F$ 의 야코비 행렬  $J_F$ 를 써서 표현하면

$$\nabla (g \circ F)(\mathbf{x}) = J_F(\mathbf{x})^T \nabla g(\mathbf{y})$$

이다. 간단히

$$\nabla (g \circ F) = J_F^T \nabla g \quad (1.2)$$

로 나타내기도 한다.

일반적으로

$$\mathbb{R}^{p_1} \xrightarrow{F_1} \dots \xrightarrow{F_{n-1}} \mathbb{R}^{p_n} \xrightarrow{F_n} \mathbb{R}^q \xrightarrow{g} \mathbb{R} \quad (1.3)$$

에서 합성 함수  $g \circ F_n \circ \dots \circ F_1$ 의 그래디언트는

$$\nabla (g \circ F_n \circ \dots \circ F_1) = J_{F_1}^T \dots J_{F_n}^T \nabla g$$

이다.  $\mathbb{R}^q$ 에서 정의된  $g$ 의 그래디언트  $\nabla g$ 를 한 단계씩 차례로 앞으로 이동(역전파)시켜 각 단계의 그래디언트를 얻을 수 있다.

$$\nabla (g \circ F_n \circ \dots \circ F_1) \xleftarrow{J_{F_1}^T} \dots \xleftarrow{J_{F_{n-1}}^T} \nabla (g \circ F_n) \xleftarrow{J_{F_n}^T} \nabla g \quad (1.4)$$

이 과정은 네트워크에서 오류 역전파 알고리즘과 일치한다.

## 2. Feedforward networks.

Internal layer가 하나인 경우 오류 역전파를 살펴보자. internal layer가 없거나 둘 이상인 경우는 하나인 경우와 유사하다.

### 2.1 네트워크

Internal layer가 하나이고 bias가 없는 네트워크는 다음과 같다.

$$\begin{bmatrix} x_1^0 \\ \vdots \\ x_p^0 \end{bmatrix} \xrightarrow{W^1} \begin{bmatrix} z_1^1 \\ \vdots \\ z_q^1 \end{bmatrix} \xrightarrow{F^1} \begin{bmatrix} x_1^1 \\ \vdots \\ x_q^1 \end{bmatrix} \xrightarrow{W^2} \begin{bmatrix} z_1^2 \\ \vdots \\ z_r^2 \end{bmatrix} \xrightarrow{F^2} \begin{bmatrix} x_1^2 \\ \vdots \\ x_r^2 \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

$x_i^0$ 는 입력,  $x_i^2$ 는 출력,  $W^k$ 는 가중치 행렬,  $F^k$ 는 활성화 함수이다. 이 네트워크에 손실 함수  $g$ 를 붙여 적으면

$$\mathbb{R}^p \xrightarrow{W^1} \mathbb{R}^q \xrightarrow{F^1} \mathbb{R}^q \xrightarrow{W^2} \mathbb{R}^r \xrightarrow{F^2} \mathbb{R}^r \xrightarrow{g} \mathbb{R} \quad (2.2)$$

가 된다.

기호를 단순화하기 위하여

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^0 &= [x_1^0 \dots x_p^0]^T \\ \mathbf{z}^1 &= [z_1^1 \dots z_q^1]^T \end{aligned}$$

등으로 적기로 한다. 그러면

$$\begin{aligned} \mathbf{z}^1 &= W^1 \mathbf{x}^0 \\ \mathbf{x}^1 &= F^1(\mathbf{z}^1) \end{aligned}$$

이 된다. target은

$$\mathbf{t} = [t_1 \dots t_r]^T$$

로 적는다. 손실 함수의 값, 곧 오류는

$$E = g(\mathbf{x}^2)$$

로 나타낸다.

가중치 행렬의 성분은

$$W^1 = \begin{bmatrix} w_{11}^1 & \dots & w_{1p}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{q1}^1 & \dots & w_{qp}^1 \end{bmatrix}$$

로 적는다.

### 2.2 그래디언트

(2.2)의 각 단계에서의 그래디언트를 (1.4)와 같이 구한다.

$$\nabla (g \circ F^2 \circ W^2 \circ F^1) \xleftarrow{J_{F^1}^T} \nabla (g \circ F^2 \circ W^2) \xleftarrow{J_{W^2}^T} \nabla (g \circ F^2) \xleftarrow{J_{F^2}^T} \nabla g \quad (2.3)$$

이것이 오류 역전파를 계산하기 쉽게 해준다. 각 단계의 그래디언트를 바로 전 단계의 그래디언트로부터 구할 수 있기 때문이다.

그런데 여기서 생각해 볼 것은 그래디언트를 구할 때에는 네트워크의 독립 변수가  $W^1$ 과  $W^2$ 라는 것이다. (2.3)에서는  $W^1$ 과  $W^2$ 가 함수이기 때문에 그것을 직접 적용할 수 없다.

먼저  $E$ 를  $W^2$ 로 미분하기 위하여 함수  $\phi^2$ 를

$$\phi^2(W^2) = W^2 \mathbf{x}^1$$

이라 정의하자. 오류는

$$E = (g \circ F^2 \circ \phi^2)(W^2) \quad (2.4)$$

가 된다. 합성 함수로 표현하면

$$\mathbb{R}^q \xrightarrow{\phi^2} \mathbb{R}^r \xrightarrow{F^2} \mathbb{R}^r \xrightarrow{g} \mathbb{R}^r$$

이다.  $W^2$ 는  $r \times q$  행렬이므로  $\mathbb{R}^q$ 의 원소로 간주할 수 있다.

결국 (2.4)의 그래디언트  $\nabla (g \circ F^2 \circ \phi^2)$ 를 구하는 것이 목표가 된다. 이것을  $W^2$ 에 대한  $E$ 의 그래디언트라 하고  $\nabla_{W^2} E$ 로 쓰기로 하자.

$$\nabla_{W^2} E = \nabla (g \circ F^2 \circ \phi^2)(W^2)$$

이것을 계산해 보자.  $z_k^2 = \sum_{l=1}^q w_{kl}^2 x_l^1$ 에서

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{ij}^2} &= \frac{\partial E}{\partial z_i^2} \frac{\partial z_i^2}{\partial w_{ij}^2} \\ &= \frac{\partial E}{\partial z_i^2} x_j^1 \end{aligned}$$

를 얻을 수 있다. 이 식을 행렬로 나타내면

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial w_{11}^2} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial w_{1q}^2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial w_{r1}^2} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial w_{rq}^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial z_1^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial z_r^2} \end{bmatrix} [x_1^1 \cdots x_q^1] = \nabla (g \circ F^2) \mathbf{x}^{1T}$$

가 된다. 야코비 행렬과  $\mathbf{x}^1$ 으로 표현하면

$$\nabla_{W^2} E = J_{F^2}^T \nabla g \mathbf{x}^{1T} \quad (2.5)$$

이다.

◇  $W^2$ 를 벡터로 표현하여 계산할 때는

$$\nabla_{W^2} E = J_{\phi^2} J_{F^2}^T \nabla g$$

가 된다. 식 (2.5)는  $W^2$ 를 행렬로 표현했을 때의 식이다.

같은 방법으로  $W^1$ 에 대한  $E$ 의 그래디언트를 구한다.

$$\mathbb{R}^q \xrightarrow{\phi^1} \mathbb{R}^q \xrightarrow{F^1} \mathbb{R}^q \xrightarrow{W^2} \mathbb{R}^r \xrightarrow{F^2} \mathbb{R}^r \xrightarrow{g} \mathbb{R}$$

이 때에는  $W^2$ 가 함수로 작용하므로

$$\nabla_{W^1} E = J_{F^1}^T W^{2T} J_{F^2}^T \nabla g \mathbf{x}^{0T} \quad (2.6)$$

를 얻는다.  $W^2$ 가 행렬이므로  $J_{W^2} = W^2$ 이다.

훈련은  $W^k$ 를  $W^k - \eta \nabla_{W^k} E$ 로 반복하여 바꾸는 것으로 이루어진다. 이렇게 행렬로 계산하기 위하여  $\nabla_{W^k} E$ 를 행렬로 표현하였다.  $\eta$ 는 학습률이다.

### 2.3 bias

네트워크 (2.1), (2.2)에 bias를 추가하면

$$\begin{bmatrix} x_1^0 \\ \vdots \\ x_p^0 \end{bmatrix} \xrightarrow{(b^1, W^1)} \begin{bmatrix} z_1^1 \\ \vdots \\ z_q^1 \end{bmatrix} \xrightarrow{F^1} \begin{bmatrix} x_1^1 \\ \vdots \\ x_q^1 \end{bmatrix} \xrightarrow{(b^2, W^2)} \begin{bmatrix} z_1^2 \\ \vdots \\ z_r^2 \end{bmatrix} \xrightarrow{F^2} \begin{bmatrix} x_1^2 \\ \vdots \\ x_r^2 \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

$$\mathbb{R}^p \xrightarrow{(b^1, W^1)} \mathbb{R}^q \xrightarrow{F^1} \mathbb{R}^q \xrightarrow{(b^2, W^2)} \mathbb{R}^r \xrightarrow{F^2} \mathbb{R}^r \xrightarrow{g} \mathbb{R} \quad (2.8)$$

이 된다. bias는

$$b^1 = \begin{bmatrix} b_1^1 \\ \vdots \\ b_q^1 \end{bmatrix}, \quad b^2 = \begin{bmatrix} b_1^2 \\ \vdots \\ b_r^2 \end{bmatrix}$$

이고, 두 함수  $(b^1, W^1)$ 과  $(b^2, W^2)$ 는 각각

$$(b^1, W^1)(\mathbf{x}^0) = b^1 + W^1 \mathbf{x}^0$$

$$(b^2, W^2)(\mathbf{x}^1) = b^2 + W^2 \mathbf{x}^1$$

로 정의된다.

bias가 있는 경우 그래디언트를 계산해보자.  $W^k$ 에 대한  $E$ 의 그래디언트는 식 (2.5), (2.6)과 일치한다.  $b^k$ 에 대한  $E$ 의 그래디언트  $\nabla_{b^k} E$ 를 구해보자.

먼저  $\nabla_{b^2} E$ 를 구한다.  $z_i^2 = b_i^2 + \sum_{j=1}^q w_{ij}^2 x_j^1$ 이므로

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial b_i^2} &= \frac{\partial E}{\partial z_i^2} \frac{\partial z_i^2}{\partial b_i^2} \\ &= \frac{\partial E}{\partial z_i^2} \end{aligned}$$

임을 알 수 있다. 따라서

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial b_1^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial b_r^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial z_1^2} \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial z_r^2} \end{bmatrix}$$

이고 야코비 행렬을 써서

$$\nabla_{b^2} E = J_{F^2}^T \nabla g \quad (2.9)$$

를 얻는다. 마찬가지로

$$\nabla_{b^1} E = J_{F^1}^T W^{2T} J_{F^2}^T \nabla g \quad (2.10)$$

를 얻을 수 있다. 함수  $(b^2, W^2)$ 의 야코비 행렬은 bias가 없을 때와 일치한다. 곧

$$J_{(b^2, W^2)} = J_{W^2} = W^2$$

이다.

### 3. 활성 함수와 손실 함수

training에서는 네 식 (2.5), (2.6), (2.9), (2.10)을 계산한다. 이 식들은 활성 함수와 손실 함수에 따라 간단하게 줄일 수도 있다.

#### 3.1 활성 함수

활성 함수  $F^1$ 과  $F^2$ 는 각 성분별로 정의되고 각 성분의 함수가 같은 경우가 대부분이다. 곧,

$$\begin{aligned} F^1(\mathbf{z}^1) &= (f^1(z_1^1), \dots, f^1(z_q^1)) \\ F^2(\mathbf{z}^2) &= (f^2(z_1^2), \dots, f^2(z_r^2)) \end{aligned} \quad (3.1)$$

와 같은 형태로 정의된다. 이것은 빠른 계산을 위한 현실적인 선택이다. 이론적으로는 야코비 행렬을 구할 수 있는, 미분 가능한 함수이면 충분하다.

식 (3.1)과 같이 정의된 두 활성 함수  $F^1$ 과  $F^2$ 의 야코비 행렬은 대각행렬이다. 예를 들어  $F^2$ 의 야코비 행렬은 다음과 같다.

$$J_{F^2} = \begin{bmatrix} f^{2'}(z_1^2) & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & f^{2'}(z_r^2) \end{bmatrix}$$

대각행렬과 벡터의 곱은 Hadamard product로 고쳐 쓸 수 있으므로  $\nabla(g \circ F^2)$ 는

$$J_{F^2}^T \nabla g = \begin{bmatrix} f^{2'}(z_1^2) \\ \vdots \\ f^{2'}(z_r^2) \end{bmatrix} * \nabla g \quad (3.2)$$

로 계산할 수 있다. \*는 Hadamard product이다.

◇ 식 (3.2)는 (3.1)과 같이 각 성분별로 정의된 함수에만 적용할 수 있다. 일반적인 활성 함수, 예를 들어 softmax에는 이 식을 적용할 수 없다.

**3.1.1 logistic sigmoid.** logistic sigmoid는  $\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$ 로 정의된다. 이 함수의 도함수는

$$\sigma'(x) = \sigma(x)(1 - \sigma(x))$$

를 만족한다. 따라서  $f^k$ 가 logistic sigmoid이면

$$f^{k'}(z_i^k) = x_i^k(1 - x_i^k) \quad (3.3)$$

가 성립한다.

**3.1.2 hyperbolic tangent.** hyperbolic tangent는  $\tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$ 로 정의된다. 이 함수의 도함수는

$$\tanh'(x) = 1 - \tanh(x)^2$$

를 만족한다. 따라서  $f^k$ 가 hyperbolic tangent이면

$$f^{k'}(z_i^k) = 1 - (x_i^k)^2$$

이 성립한다.

**3.1.3 softmax.** 함수  $F^2$ 가 softmax이면

$$F^2(z_1^2, \dots, z_r^2) = \left( \frac{e^{z_1^2}}{e^{z_1^2} + \dots + e^{z_r^2}}, \dots, \frac{e^{z_r^2}}{e^{z_1^2} + \dots + e^{z_r^2}} \right) \quad (3.4)$$

이다. 각 성분

$$x_i^2 = \frac{e^{z_i^2}}{e^{z_1^2} + \dots + e^{z_r^2}}, \quad k = 1, \dots, r$$

를 미분하여 야코비 행렬

$$J_{F^2} = \begin{bmatrix} x_1^2(1-x_1^2) & \dots & -x_1^2 x_r^2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -x_r^2 x_1^2 & \dots & x_r^2(1-x_r^2) \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

를 얻을 수 있다.

## 3.2 손실 함수

이 보고서에서  $g$ 로 나타낸 손실 함수는 mean squared error와 cross entropy가 있다. 전자는 유클리드 거리를 제공한 것이다. 후자는  $r=1$ 인 경우 binary cross entropy라 불리는 형태로 사용되며,  $r>1$ 인 경우 categorical cross entropy라 불리는 형태가 사용된다.

### 3.2.1 mean squared error

Mean squared error는

$$g(\mathbf{x}^2) = \frac{1}{2} \|\mathbf{t} - \mathbf{x}^2\|^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^r (t_i - x_i^2)^2$$

로 정의된다. 이 함수의 그래디언트는

$$\nabla g(\mathbf{x}^2) = \mathbf{x}^2 - \mathbf{t} = \begin{bmatrix} x_1^2 - t_1 \\ \vdots \\ x_r^2 - t_r \end{bmatrix}$$

이다. 그래디언트의 계수를 1로 맞추기 위하여  $\frac{1}{2}$ 을 곱하였다.

**3.2.2 binary cross entropy와 logistic sigmoid.** 각 target  $t_i$ 가 베르누이 분포를 따르는 확률이거나 그렇게 이해되는 경우 손실 함수로 binary cross entropy를 사용할 수 있다.

$$g(\mathbf{x}^2) = - \sum_{i=1}^r (t_i \log x_i^2 + (1-t_i) \log (1-x_i^2))$$

이 때  $g$ 의 그래디언트는

$$\nabla g(\mathbf{x}^2) = \begin{bmatrix} \frac{x_1^2 - t_1}{x_1^2(1 - x_1^2)} \\ \vdots \\ \frac{x_r^2 - t_r}{x_r^2(1 - x_r^2)} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

이다.

이 형태에서 활성 함수가 logistic sigmoid이면 매우 단순한 그래디언트 식을 얻는다.  $F^2$ 가 식 (3.1)과 같이 주어지고 각 성분  $f^2$ 가 logistic sigmoid이면, 식 (3.2), (3.3), (3.6)으로부터

$$\nabla (g \circ F^2)(\mathbf{z}^2) = \mathbf{x}^2 - \mathbf{t} \quad (3.7)$$

를 얻을 수 있다.

**3.2.3 categorical cross entropy와 softmax.** target  $t_1, \dots, t_r$ 가  $t_i \geq 0$ ,  $\sum t_i = 1$ 을 만족할 경우, 곧 확률인 경우에는 손실 함수  $g$ 를

$$g(\mathbf{x}^2) = - \sum_{k=1}^c t_k \log x_k^2$$

로 정의할 수 있다. 이것을 categorical cross entropy라 한다. 이 때  $g$ 의 그래디언트는

$$\nabla g(\mathbf{x}^2) = - \begin{bmatrix} t_1/x_1^2 \\ \vdots \\ t_r/x_r^2 \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

이다. 이 형태에서는 softmax를 활성 함수로 사용하면 간단한 그래디언트 식을 얻는다.  $F^2$ 가 (3.4)와 같이 주어지면, 식 (3.5), (3.8)로부터

$$\nabla (g \circ F^2)(\mathbf{z}^2) = \mathbf{x}^2 - \mathbf{t} \quad (3.9)$$

를 얻을 수 있다. 식 (3.7)과 동일한 결과이다.

#### 4. 프로그래밍

Feedforward network은 많은 양의 데이터를 다룬다. 따라서 벡터에 대하여 정의된 식 (2.5), (2.6), (2.9), (2.10)은 그대로 적용되지 않는다. 코딩에 사용할 수 있는 표현법을 알아보자.

##### 4.1 열 벡터 표현

$p$  차원 input  $x_1^0, \dots, x_n^0$ 과 대응되는  $r$  차원 target  $t_1, \dots, t_n$ 이 주어졌다고 하자. 이 데이터를 식 (2.7), (2.8)의 네트워크에 적용해 보자.

먼저 input과 target을 결합하여 두 행렬

$$X^0 = \begin{bmatrix} x_{11}^0 & \cdots & x_{1n}^0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{p1}^0 & \cdots & x_{pn}^0 \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{r1} & \cdots & t_{rn} \end{bmatrix}$$

을 정의한다. 마찬가지로

$$Z^1 = \begin{bmatrix} z_{11}^1 & \cdots & z_{1n}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{q1}^1 & \cdots & z_{qn}^1 \end{bmatrix}, \quad X^1 = \begin{bmatrix} x_{11}^1 & \cdots & x_{1n}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{q1}^1 & \cdots & x_{qn}^1 \end{bmatrix}$$

$Z^2$ ,  $X^2$  등을 정의한다. 이들은 다음 식을 만족한다.

$$Z^1 = b^1 + W^1 X^0, \quad X^1 = F^1(Z^1), \quad \dots$$

$X^2$ 에 대한  $g$ 의 그래디언트를  $r \times n$  행렬로 다음과 같이 나타낸다.

$$\nabla g = \nabla_{X^2} E = \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial x_{11}^2} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial x_{1n}^2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial x_{r1}^2} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial x_{rn}^2} \end{bmatrix}$$

그래디언트는 일반적으로 벡터로 표현되지만 여기서는 계산을 위하여 행렬로 나타낸다.

$\nabla_{Z^2} E$ ,  $\nabla_{X^1} E$ ,  $\nabla_{Z^1} E$  등도 유사하게 행렬로 나타내기로 한다.  $F^1(Z^1)$ 은 행렬

$$F^1(Z^1) = \begin{bmatrix} f^1(z_{11}^1) & \cdots & f^1(z_{1n}^1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f^1(z_{q1}^1) & \cdots & f^1(z_{qn}^1) \end{bmatrix}$$

이며  $F^2(Z^2)$ 도 유사하다. 이 행렬의 각 성분의 도함수를 다시 행렬로 표현한다.

$$F^{1'}(Z^1) = \begin{bmatrix} f^{1'}(z_{11}^1) & \cdots & f^{1'}(z_{1n}^1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f^{1'}(z_{q1}^1) & \cdots & f^{1'}(z_{qn}^1) \end{bmatrix}$$

이 행렬은  $F^1$ 의 야코비 행렬과 다름을 확인하기 바란다. 참고로 야코비 행렬  $J(F^1)$ 은  $qn \times qn$  행렬이다.  $F^{2'}(Z^2)$ 도 마찬가지로  $r \times n$  행렬로 나타낸다.

주의를 기울여 계산하면 행렬  $\nabla_{Z^2} E$ ,  $\nabla_{X^1} E$ ,  $\nabla_{Z^1} E$ 가

$$\nabla_{Z^2} E = F^{2'}(Z^2) * \nabla g$$

$$\nabla_{X^1} E = W^{2T} \nabla_{Z^2} E$$

$$\nabla_{Z^1} E = F^{1'}(Z^1) * \nabla_{X^1} E$$

임을 확인할 수 있다. 여기서  $*$ 는 hadamard product이다.

식 (2.5), (2.6), (2.9), (2.10)로 주어진 오류 역전파는 다음과 같이 변형된다.

$$\nabla_{W^2} E = \nabla_{Z^2} E X^{1T}$$

$$\nabla_{b^2} E = \text{row\_sum}(\nabla_{Z^2} E)$$

$$\nabla_{W^1} E = \nabla_{Z^1} E X^{0T}$$

$$\nabla_{b^1} E = \text{row\_sum}(\nabla_{Z^1} E)$$

여기서 row\_sum은 행렬의 row 성분의 합이다. 곧,

$$\text{row\_sum} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} + \cdots + a_{1n} \\ \vdots \\ a_{m1} + \cdots + a_{mn} \end{bmatrix}$$

이다.

## 4.2 행 벡터 표현

프로그램을 작성하다 보면 때때로 열 벡터 대신 행 벡터를 사용하고 싶은 유혹이 생긴다. 주어진 데이터가 행 벡터 표현인 경우가 많을뿐더러 numpy의 행렬과도 잘 어울린다.

행 벡터 표현은 행렬을 전치(transpose)하여 표현하면 된다.



$$X^0 = \begin{bmatrix} x_{11}^0 & \cdots & x_{1p}^0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1}^0 & \cdots & x_{np}^0 \end{bmatrix}, \quad T = \begin{bmatrix} t_{11} & \cdots & t_{1r} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{n1} & \cdots & t_{nr} \end{bmatrix}$$

$$Z^1 = \begin{bmatrix} z_{11}^1 & \cdots & z_{1q}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{n1}^1 & \cdots & z_{nq}^1 \end{bmatrix}, \quad X^1 = \begin{bmatrix} x_{11}^1 & \cdots & x_{1q}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1}^1 & \cdots & x_{nq}^1 \end{bmatrix}$$

bias와 가중치 행렬도 전치시킨다.

$$b^1 = [b_1^1 \cdots b_q^1], \quad W^1 = \begin{bmatrix} w_{11}^1 & \cdots & w_{1q}^1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{p1}^1 & \cdots & w_{pq}^1 \end{bmatrix}$$

행렬의 곱은 순서를 바꾼다.

$$Z^1 = b^1 + X^0 W^1, \quad X^1 = F^1(Z^1), \quad \dots$$

그래디언트를 계산해 보자.

$$\nabla g = \nabla_{X^2} E = \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial x_{11}^2} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial x_{1r}^2} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial x_{n1}^2} & \cdots & \frac{\partial E}{\partial x_{nr}^2} \end{bmatrix}, \quad F^{1'}(Z^1) = \begin{bmatrix} f'(z_{11}^1) & \cdots & f'(z_{1q}^1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f'(z_{n1}^1) & \cdots & f'(z_{nq}^1) \end{bmatrix}$$

Hadamard product는 영향을 받지 않는다.

$$\nabla_{Z^2} E = F^{2'}(Z^2) * \nabla g$$

행렬 곱은 순서를 바꾼다.

$$\nabla_{X^1} E = \nabla_{Z^2} E W^{2T}$$

이 식에서  $W^2$ 가 아닌  $W^{2T}$ 를 곱해야 한다.  $W^2$ 가 이미 전치된 행렬이기 때문이다.

$$\nabla_{Z^1} E = F^{1'}(Z^1) * \nabla_{X^1} E$$

$b^k$ 와  $W^k$ 의 그래디언트는 다음과 같다.

$$\nabla_{W^2} E = X^{1T} \nabla_{Z^2} E$$

$$\nabla_{b^2} E = \text{column\_sum}(\nabla_{Z^2} E)$$

$$\nabla_{W^1} E = X^{0T} \nabla_{Z^1} E$$

$$\nabla_{b^1} E = \text{column\_sum}(\nabla_{Z^1} E)$$

column\_sum은 열 성분의 합이다.

### 4.3 softmax

함수 Softmax는 categorical cross entropy와 결합하여 사용할 때가 많다. 이 때에는 (3.9)와 같이 그래디언트 계산이 단순하다. 여기서는 일반적인 경우에 대하여 알아본다.

$p$  차원 입력 벡터들  $x_1, \dots, x_n$ 에 대하여

$$y_i = \text{softmax}(x_i),$$

곧,  $y_{ij} = e^{x_{ij}} / \sum_{k=1}^p e^{x_{kj}}$ 라 하자. 행렬로 나타내면

$$X = [x_1 \cdots x_n] = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{p1} & \cdots & x_{pn} \end{bmatrix}$$

와

$$Y = [y_1 \cdots y_n] = \begin{bmatrix} y_{11} & \cdots & y_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ y_{p1} & \cdots & y_{pn} \end{bmatrix}$$

이 된다. 식 (2.8)과 같은 일반적인 네트워크에서  $X$ 와  $Y$ 는 각각  $Z^k$ 와  $X^k$ 의 역할을 한다.  
 $i$  열  $x_i$ 에 대하여

$$\nabla_{x_i} E = J_{\text{softmax}}(x_i)^T \nabla_{y_i} E$$

를 만족한다. 식 (3.5)를 적용하여 계산하면 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial x_{1i}} \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial x_{pi}} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} y_{1i}(1-y_{1i}) & \cdots & -y_{1i}y_{pi} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ -y_{pi}y_{1i} & \cdots & y_{pi}(1-y_{pi}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial E}{\partial y_{1i}} \\ \vdots \\ \frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} y_{1i}(1-y_{1i})\frac{\partial E}{\partial y_{1i}} - \cdots - y_{1i}y_{pi}\frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \\ \vdots \\ -y_{pi}y_{1i}\frac{\partial E}{\partial y_{1i}} - \cdots + y_{pi}(1-y_{pi})\frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \end{bmatrix} \\ &= y_i^* \begin{bmatrix} (1-y_{1i})\frac{\partial E}{\partial y_{1i}} - \cdots - y_{pi}\frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \\ \vdots \\ -y_{1i}\frac{\partial E}{\partial y_{1i}} - \cdots + (1-y_{pi})\frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \end{bmatrix} \\ &= y_i^* \left( \nabla_{y_i} E - \begin{bmatrix} y_{1i}\frac{\partial E}{\partial y_{1i}} + \cdots + y_{pi}\frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \\ \vdots \\ y_{1i}\frac{\partial E}{\partial y_{1i}} + \cdots + y_{pi}\frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \end{bmatrix} \right) \\ &= y_i^* \left( \nabla_{y_i} E - \left( y_{1i}\frac{\partial E}{\partial y_{1i}} + \cdots + y_{pi}\frac{\partial E}{\partial y_{pi}} \right) \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right) \\ &= y_i^* \left( \nabla_{y_i} E - \text{sum}(y_i^* \nabla_{y_i} E) \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right) \end{aligned}$$

따라서

$$\nabla_X E = Y^* \left( \nabla_Y E - \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \text{column\_sum}(Y^* \nabla_Y E) \right)$$

를 얻는다.

numpy 코드로 쓰면

```
gradXE = Y * (gradYE - np.sum(Y * gradYE, axis=0))
```

이다. 이것은 열 벡터 표현법이다. 행 벡터 표현법은

```
gradXE = Y * (gradYE - np.sum(Y * gradYE, axis=1, keepdims=True))
```

이다.