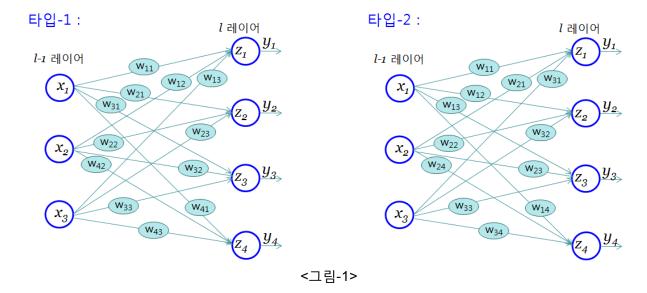
신경망에서 인접한 두 단(layer)간의 연결(connection) weight들을 나타낼 때 보통 다음 두 가지 중 하나의 방법을 사용한다.



- 타입-1) 에서 w_{jk} 는 앞의 (l-1) 단의 k번 neuron과 뒷단인 l 단의 j번 neuron간의 connection weight를 표기. 이 경우 weight 행렬의 모양이 l 단사이즈 X (l-1) 단사이즈. 이 그림에서는 4X3 사이즈
- 타입-2) 에서 w_{jk} 는 (l-1) 단의 j번 nuron과 l 단의 k번 neuron간의 connection weight를 의미. 이 경우 weight 행렬의 모양이 (l-1) 단사이즈 X l 단사이즈. 3X4 사이즈

어느 형태를 선택하는가에 따라 행렬(matrix)식이 달라진다. 이 이유로 신경망을 처음 배우는 사람들이 혼란스러워 한다. 불행이도 가르치는 내용 중에도 틀린(wrong) 얘기가 가끔씩 있음. 이 두 표기에 따른 차이에 확실히 익숙해지자. 잠깐 선형대수학을 돌아보자.

선형대수 잠깐 돌아보기

길이가 같은 두 벡터(rank 1 텐서) a, b 간의 내적(dot product)

- 보통 $a \circ b$ 로 나타낸다. Dot product이 곱들의 합으로 (sum of products) 그 결과가 스케일러(scalar)임을 모든 사람들이 알기에 두 벡터가 row 벡터인지, 또는 column 벡터인지 잘 묻지 않는다. 그러나 dot product을 행렬 곱하기로 나타낼 때에는 사정이 달라진다.
- 두 벡터 a, b 가 모두 column vector이면 이들의 dot product은 행렬식으로 a^Tb 또는 b^Ta 이다. (ba^T 또는 ab^T 이면 outer product가 되어 전혀 다른 얘기)

Matrix(rank 2 텐서)와 벡터의 곱

 $n \times p$ 행렬 X와 사이즈가 p인 column 벡터 β 가 있다. 이들의 행렬-벡터 곱 $X\beta$ 는 사이즈가 n인 column 벡터가 되며, 아래와 같이 column 벡터 β 의 원소가 coefficient로 된, 행렬 X의 column들의 linear combination.

$$\begin{pmatrix}
x_{11} & x_{12} & x_{13} & & x_{1p} \\
x_{21} & x_{22} & x_{23} & & x_{2p} \\
x_{31} & x_{32} & x_{33} & & x_{3p} \\
& \cdot & & \cdot \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\
x_{n1} & x_{n2} & x_{n3} & & x_{np}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\beta_{1} \\
\beta_{2} \\
\beta_{3} \\
\beta_{p}
\end{pmatrix} = \beta_{1}
\begin{pmatrix}
x_{11} \\
x_{21} \\
x_{21} \\
x_{31} \\
x_{21} \\
x_{31}
\end{pmatrix} + \beta_{2}
\begin{pmatrix}
x_{12} \\
x_{22} \\
x_{32} \\
x_{32} \\
x_{33}
\end{pmatrix} + \beta_{3}
\begin{pmatrix}
x_{13} \\
x_{23} \\
x_{33} \\
x_{33}
\end{pmatrix} + \dots + \beta_{p}
\begin{pmatrix}
x_{1p} \\
x_{2p} \\
x_{3p} \\
x_{np}
\end{pmatrix}$$

Matrix의 곱

행렬 곱을 해당 row와 column의 dot product로 정의하거나, 또는 matrix-vector 곱의 집합이라고 정의한다. 이 두가지 해석을 살펴보자.

 $m \times n$ 행렬 A와, $n \times p$ 행렬 B가 있다.

Interpretation1 : 어린 방법

행렬곱 C=AB는 mxp 행렬로 그 (i,j)번 원소는 행렬 A의 i번 행(row) a_i^T 와 행렬 B의 j번 열 (column) b_j 간의 dot product이다.

$$\begin{bmatrix} - & a_1^T & - \\ - & a_2^T & - \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ - & a_m^T & - \end{bmatrix} \begin{bmatrix} | & | & & | \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_p \\ | & | & & | \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1^T b_1 & a_1^T b_2 & \cdots & a_1^T b_p \\ a_2^T b_1 & a_2^T b_2 & \cdots & a_2^T b_p \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_m^T b_1 & a_m^T b_2 & \cdots & a_m^T b_p \end{bmatrix}$$

즉, $c_{i,j} = a_i^T b_i$ ($a_i^T : row$ 벡터, $b_i : column$ 벡터)

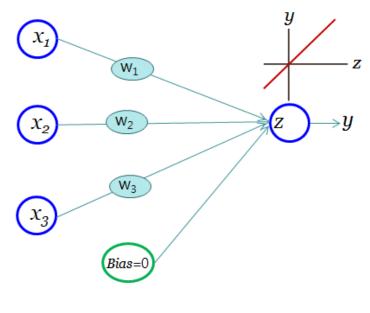
Interpretation2 : 성숙한 방법

행렬 B가 b_1,b_2,\ldots,b_p 열들로 되어 있으면, 행렬곱 C=AB는 mxp 행렬로 Ab_1,Ab_2,\ldots,Ab_p 를 column으로 갖는다. $(Ab_i$ (i=1, ... p)는 행렬-벡터 곱)

$$C = AB = A[b_1 \ b_2 \ \dots b_p] = [Ab_1 \ Ab_2 \ \dots Ab_p]$$

[중요] 매트릭스 곱하기를 두번째 방식, 즉 C의 p개 column 들을 매트릭스 A와 매트릭스 B의 p개 column간의 (앞에서 본 것 같이) matrix-vector a으로 생각하는 것이 좋은, 우아한 해석. 이래야 span, linear independence ... 로 이어지는 선형대수학을 이해함. 신경망 공부에도 물론 더 좋음.

신경망



<그림-2>

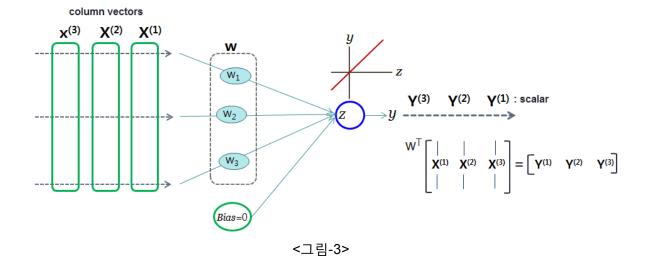
매우 익숙한 그림. 우리 관심은 weight 표기에 따른 행렬식의 표현이기에 Bias=0, activation 함수를 linear identity로 하여 y = z로 단순화.

- $y = z = \sum_{i=1}^{3} w_i x_i$ $w = [w_1 \ w_2 \ w_3]^T$, $x = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T$ 하여 w와 x가 column vector이면 $y = w^T x$

입력이 여럿일 경우

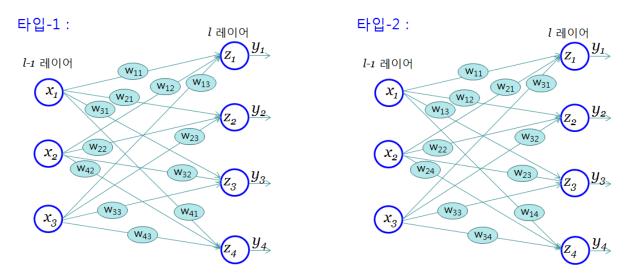
 \mathbf{x} 를 하나의 입력 instance(샘플), x_1, x_2, x_3 들을 \mathbf{x} 의 세 feature 값이라 생각하자. (가령, \mathbf{x} 는 하나 의 이미지, x_1, x_2, x_3 는 이미지를 구성하는 세 픽셀). x같은 instance들이 여러개 들어온다고 하고 이들을 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots x^{(n)}, \dots$ 라 표시하자. 각각의 $x^{(i)}$ 는 column vector. $y^{(1)}, y^{(2)}, \dots y^{(n)}, \dots$ 는 $x^{(1)}, x^{(2)}, ... x^{(n)}$...에 따른 (scalar) output.

이 경우에도 $Y = w^T X$ 행렬식이 성립된다. 이 때 X는 $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots x^{(n)}$... 입력 샘플들을 column 으로 갖는 행렬.



레이어에 뉴런들이 여럿일 때

일반적인 신경망 모양이다. 여기서는 인접한 두 레이어의 뉴런 수가 3과 4개인 신경망을 예로 들지만, 다른 일반적인 신경망에도 아래의 내용이 통한다. 앞의 <그림-1>을 다시 본다.



- 타입-1) 에서 w_{jk} 는 (l-1) 레이어의 k번 neuron과 l layer의 j번 neuron간의 connection weight를 의미
- 타입-2) 에서 w_{jk} 는 (l-1) 레이어의 j번 neuron과 l layer의 k번 neuron간의 connection weight를 의미

위 그림에서 weight connection을 벡터형태로 표현하기에 적당하지 않다. 행렬로 해야 하는데, 문제는 weight의 표기를 어떻게 해야 weight들이 행렬의 원소로 되면서 두 레이어의 뉴런간 연결이 행렬식으로 자연스럽게 표현될까 하는 것.

[주의] 타입-1 이나 타입-2 에서 같은 위치에 있는 weight 값은 같다. 즉, 타입-1 에서 w_{ij} 는 타입-2 에서 w_{ji} 와 값이 같다.

1) weight 표기를 타입-2 형태로 하면:

$$z_1 = w_{11}x_1 + w_{21}x_2 + w_{31}x_3$$

:
 $z_4 = w_{14}x_1 + w_{24}x_2 + w_{34}x_3$

위와 같은 선형식이 된다. 타입-2 에서 weight 행렬은 아래와 같다.

$$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} & w_{14} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} & w_{24} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} & w_{34} \end{bmatrix} \qquad \text{따라서}, W^T = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{21} & w_{31} \\ w_{12} & w_{22} & w_{32} \\ w_{13} & w_{23} & w_{33} \\ w_{14} & w_{24} & w_{34} \end{bmatrix}$$

X, Z, Y 벡터를 다음과 같이 column 벡터로 정하면,

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \qquad Z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{bmatrix} \qquad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{21} & w_{31} \\ w_{12} & w_{22} & w_{32} \\ w_{13} & w_{23} & w_{33} \\ w_{14} & w_{24} & w_{34} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$
으로 식을 세우면, z_1, z_2, z_3, z_4 선형식과 딱 맞는다. 행렬식으로는,

 $Z=W^TX$. 앞에서 bias=0, activation 함수를 identity 함수로 가정했기에 Y=Z 이므로, $Y=W^TX$

<식-1>

X와 Y는 여기서 하나의 instance를 나타내는 column 벡터이지만, X가 여러 instance들로 된 행렬, Y는 그에 따른 output 행렬일 경우에도 물론 위 식이 성립한다. (행렬 곱하기의 'interpretation-2', remember?) 각각의 instance들이 행렬 X와 Y의 column.

난 이 모양새를 처음 익힐 때 "여러 feature들로 된 input 인스턴스 $x^{(i)}$ 들이 (column 모양으로) 서서 들어와, W^T 로 된 weight matrix를 거쳐 $y^{(i)}$ 가 되어, column 모양으로 출력쪽으로 빠져 나간다"라 머리 속에서 그렸음. 이 y들은 다시 뒷 단의 입력 x가 되거나, recurrent network에선 feedback되어 이 과정이 반복되고.

 $Y = W^T X$: 오래전 패턴인식, 신경망을 익힌 사람들이 익숙한 형태. 나 역시.

W의 transpose T'가 그리도 눈에 거슬리면, 양 쪽을 transpose 하여,

$$Y^T = (W^T X)^T = X^T W$$

--> instance(샘플)들이 column이던 X가 transpose 되었으니 입력 instance(샘플)들이 row로 됨. 이 입력 instance가 W를 거쳐 역시 row 형태의 y instance들이 되어 나감. (신경망으로의 입력과 레이어 출력이 테이블, pandas/R의 데이타프레임과 같은 형태)

정리하면,

타입-2 로 두 레이어의 뉴런간 연결 weight들을 표기하면, 식-1의 weight 행렬 W가 만들어지고, 역 시 식-1 에서 같이 X, Y를 만들면,

```
Y = W^T X (X, Y instances are columnar), 또는 Y^T = X^T W
```

간단히 numpy로,

```
In [1]: import numpy as np
       W2 = np.array([[11, 12, 13, 14],
                                          # W2: 타입-2 형태 신경망 weight 매트릭스
                     [21, 22, 23, 24],
                     [31, 32, 33, 34]])
        # input sample 을 5개 만듬
        x1 = np.array(np.arange(1, 4).reshape(3, 1))
                                                     # 첫번째 입력 샘플 : 사이즈 3 인 column
        x2 = np.array(np.arange(-2, 1).reshape(3, 1))
        x3 = np.array(np.arange(2, 5).reshape(3, 1))
        x4 = np.array(np.arange(5, 8).reshape(3, 1))
        x5 = np.array(np.arange(4, 1, -1).reshape(3, 1))
        X = \text{np.hstack}([x1, x2, x3, x4, x5])
                                             # 다섯 인스턴스로 된 입력 매트릭스 (batch 사이즈
In [2]: x1
               # column 벡터 (3x1 행렬)
Out[2]: array([[1],
              [2],
              [3]])
In [3]: x2
Out[3]: array([[-2],
              [-1].
              [ 0]])
In [4]: X
               # batch 입력 : 5개 샘플로 된 3x5 행렬
Out [4]: array([[1, -2, 2, 5, 4],
              [2, -1, 3, 6, 3].
              [3, 0, 4, 7, 2]
```

```
In [5]: W2
Out[5]: array([[11, 12, 13, 14],
              [21, 22, 23, 24],
              [31, 32, 33, 34]])
In [6]: W2_T = W2.transpose() # W2_T : W2\in transpose
        W2_T
Out[6]: array([[11, 21, 31],
              [12, 22, 32],
              [13, 23, 33],
              [14, 24, 34]])
        첫번 째 입력 샘플 x^{(1)}이 들어올 때 z^{(1)}의 component 값들을 구해보면;
In [7]: z0 = W2[0,0]*x1[0] + W2[1,0]*x1[1] + W2[2,0]*x1[2] # python 인덱성은 0 부터
        z1 = W2[0,1]*x1[0] + W2[1,1]*x1[1] + W2[2,1]*x1[2]
        z2 = W2[0,2]*x1[0] + W2[1,2]*x1[1] + W2[2,2]*x1[2]
        z3 = W2[0,3]*x1[0] + W2[1,3]*x1[1] + W2[2,3]*x1[2]
        z0, z1, z2, z3
Out[7]: (array([146]), array([152]), array([158]), array([164]))
        x^{(1)}이 들어올 때 z^{(1)}의 component 값들을 행렬식으로 구하면, 앞에서 언급했듯이 column 벡터로
        나옴
In [8]: z = np.dot(W2_T, x1)
        Ζ
Out[8]: array([[146],
              [152],
              [158].
              [164]])
        5개 샘플로 된 입력 배치가 행렬 X로 들어오면, Z=W^TX
In [9]:
       Z = np.dot(W2_T, X)
Out[9]: array([[146, -43, 209, 398, 169],
              [152, -46, 218, 416, 178],
              [158, -49, 227, 434, 187],
              [164, -52, 236, 452, 196]])
        Z^T = X^T W 으로 할 수도 있으므로.
         • 이 때는 입력행렬 내 x 샘플들이 row 벡터들로 되어있고,
```

• 출력 y들도 row 벡터로 됨

2) weight 표기를 타입-1 형태로 하면:

 w_{24} 를 단순히 보면 앞 레이어의 2번 뉴런과 뒷 레이어의 4번 뉴런을 연결하는 weight라 생각하는 것이 자연스럽다. 그런데, 타입-1 표기에서 w_{24} 는 앞단의 4번 뉴런과 뒷단의 2번 뉴런을 연결하는 weight다. 왜 이렇게 했을까?

일단 타입-1에 따라 식을 만들어보자.

$$z_1 = w_{11}x_1 + w_{12}x_2 + w_{13}x_3$$

:
 $z_4 = w_{41}x_1 + w_{42}x_2 + w_{43}x_3$

위와 같은 선형식이 된다. 타입-1 에서 weight 행렬은 4x3 행렬로 아래와 같다.

$$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & w_{13} \\ w_{21} & w_{22} & w_{23} \\ w_{31} & w_{32} & w_{33} \\ w_{41} & w_{42} & w_{43} \end{bmatrix}$$

그런데, 위 W를 보니 행렬의 모양이 타입-2의 W^T 의 모양과 같고, 원소값들도 그 W^T 의 것들과 같음을 알 수 있다. (타입-1 에서 w_{ii} 는 타입-2 에서 w_{ii} 와 값이 같다)

즉, 타입-1로 weight를 표기한 weight 매트릭스는, 타입-2 weight 매트릭스 의 transpose 와 같다. 이 말은,

$$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \qquad Z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ z_4 \end{bmatrix} \qquad Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \end{bmatrix}$$

으로 하면 타입-1 weight matrix W 으로는,

$$Y = WX$$
, 또는

 $Y^T = X^T W^T$ (여기서 W^T 는 타입-2 에서의 W와 같음)

So, 타입-1에서 weight를 이상하게 표현하고 헷갈리게 한 것이 타입-2 weight 매트릭스의 transpose 'T' 를 없애려고?

그렇다!

내 기억으론, Rumelhart, Hinton, Williams의 PDP 책

(http://www.cs.toronto.edu/~fritz/absps/pdp8.pdf)에서 이 표기를 쓰기 전에 별로 이런 표기를 본적이 없는데, 이들이 이렇게 쓴 이후로 타입-1 표현이 틈틈이 보임. 어떤 표기를 써도 괜찮은데, 좀 알고 일관적으로 사용하면 좋겠음.

Tensorflow 에서는,

<u>여기의 (https://www.tensorflow.org/tutorials/mnist/beginners/)</u> 텐서플로 우 설명은 타입-1 weight 표기를 사용했음. (아래 그림 참조)

• 입력 x, 출력 y, bias 모두 어여쁘게 column vector로 나타내었음

In [11]: import tensorflow as tf

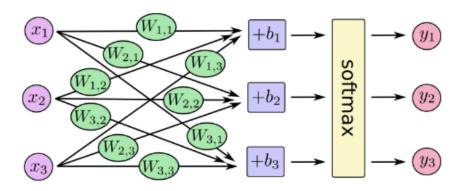
from | Python.display import | mage
sess = tf.InteractiveSession()

print("Tensorflow version : ", tf.__version__)

Tensorflow version: 1.0.0

In [12]: Image(filename='./images/NN_tensorflow.PNG', width=600) # from tensorflow.

Out[12]:



If we write that out as equations, we get:

```
In [13]: # x들이 그대로 있나 확인
        x1, x5
Out[13]: (array([[1],
               [3]]), array([[4],
               [3],
               [2]]))
In [14]: X
Out[14]: array([[1, -2, 2, 5, 4],
              [2, -1, 3, 6, 3],
              [3, 0, 4, 7, 2]
        tensorflow 데이타 준비
In [15]: tf_x1 = tf.constant(x1, dtype=tf.int32)
        tf_x1 # co/umn 벡터
Out[15]: <tf.Tensor 'Const:0' shape=(3, 1) dtype=int32>
In [16]: | tf_X = tf.constant(X, dtype=tf.int32)
             # 3x5 모양의 2D 텐서로 5개의 샘플(input)이 5개의 column 벡터로
        tf_X
Out[16]: <tf.Tensor 'Const_1:0' shape=(3, 5) dtype=int32>
In [17]: W1 = W2_T
                    # 타입-1의 W는 타입-2의 Weight 매트릭스의 transpose
        tf_W1 = tf.constant(W1, dtype=tf.int32)
                    # 4x3 모양의 weight matrix로 tensorflow 예를 따른 것
        tf_W1
Out[17]: <tf.Tensor 'Const_2:0' shape=(4, 3) dtype=int32>
        위 그림이 타입-1으로 되었기에, Y=WX 로 출력을 구하면,
In [18]: # tensorflow의 행렬 곱하기
        Y = tf.matmul(tf_W1, tf_X) # 당연히 맞는 결과.
        Y.eval()
Out[18]: array([[146, -43, 209, 398, 169],
              [152, -46, 218, 416, 178],
```

물론 잘 됨. Y의 instance들이 column으로 나옴

[164, -52, 236, 452, 196]], dtype=int32)

[158, -49, 227, 434, 187],

--> 당연히 numpy와 tensorflow 행렬 곱하기는 똑 같이 동작

방금 보았듯이 X가 여러개의 샘플로 된 2D 텐서(행렬) 이더라도 텐서플로우에서 Y=WX 식이 당연히 생각한 그대로 동작하고 잘 됨. 따라서, 텐서플로우설명에서 적었듯이 :

....

y = tf.nn.softmax(tf.matmul(x, W) + b)

First, we multiply x by W with the expression tf.matmul(x, W). This is flipped from when we multiplied them in our equation, where we had $\mathbf{W}\mathbf{x}$, as a small trick to deal with x being a 2D tensor with multiple inputs. We then add b, and finally apply tf.nn.softmax.

,,,,,,

[주의] *단순히 X 가 여러개의 input(sample) 들로 된 행렬이라서 Y=XW 로 행렬 곱하기를 하는 것 이 아니라, X 내의 input(인스턴스) 들이 column 이 아니라, row 이기 때문.* (DB 테이블, pandas/R 의 data frame 모양으로).

장황하게 말해,

y = tf.matmul(x, W) 를 함은,

- X가 여러 입력 샘플들로 된 행렬이고, 각각의 input이 row 로 배치되었기 때문. MNIST 예에서 "x = tf.placeholder(tf.float32, [None, 784])"에서 보듯이 MNIST 데이터에서 각각 입력 샘플인 이미지들은 row로 배열됨. (row_size에 None을 넣어 임의의 input 개수가 들어올 수 있음을 나타냄)
- 이 때 W는 tensorflow 웹페이지의 그림(설명)과 같이 타입-1 weight 표기가 **아니고**, 타입-2 표기 사용을 전제. 이는 MNIST feature(pixel) 갯수 784에 대해 W를 "W = tf. Variable(tf.zeros([784, 10]))" 로 놓은 것으로도 알 수 있음. 따라서, matmul(X, W)를 말하려면 tensorflow 웹페이지의 weight 표기를 타입-2 모양으로 바꾸어야 함.

Tensorflow 으로,

텐서플로우 예에서 입력 샘플이 x1, x1, ... x5 이어 5개 라면, 이들을 담은 행렬 X는 5x3 행렬이 되고,

```
X_t f
         tf_X = tf.constant(X_tf, dtype=tf.int32)
         tf_X.eval()
                                # 5 input instances
Out[20]: array([[ 1, 2, 3],
                [-2, -1, 0],
                [2, 3, 4],
                [5, 6, 7],
                [ 4, 3, 2]], dtype=int32)
         W는 타입-2 에 따른 3x4 weight matrix W 이기에 (W^T가 아니라),
In [21]: | tf_W = tf.constant(W2, dtype=tf.int32)
         tf_W.eval()
Out[21]: array([[11, 12, 13, 14],
                [21, 22, 23, 24],
                [31, 32, 33, 34]], dtype=int32)
In [22]: Y = tf.matmul(tf_X, tf_W)
         Y.eval()
Out[22]: array([[146, 152, 158, 164],
                [-43, -46, -49, -52],
                [209, 218, 227, 236],
                [398, 416, 434, 452],
                [169, 178, 187, 196]], dtype=int32)
         --> Y의 인스턴스들이 row 형태로 나온다.
In [23]: print('exit 0')
         exit 0
```

In [20]: X_tf = X.transpose() # 원래 X에선 인스턴스들이 column으로 있었기에.