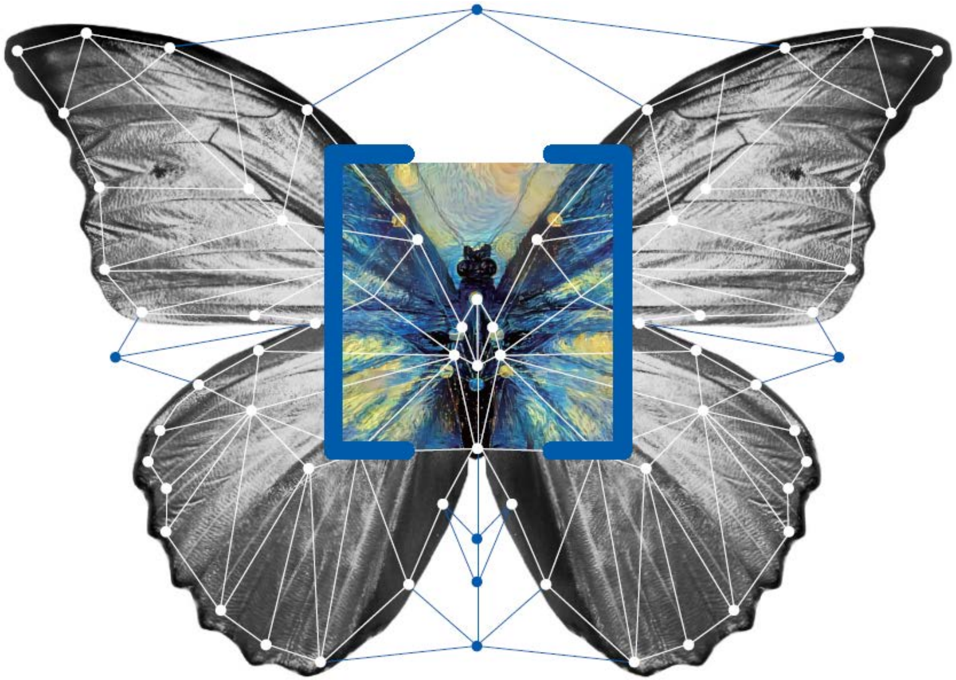
한빛아카데미
Hanbit Academy, Inc.



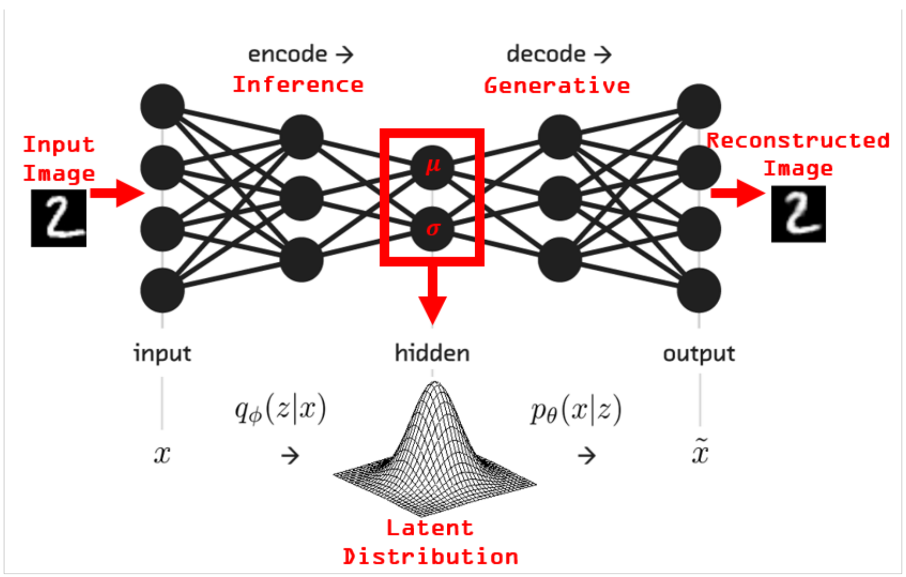
MACHINE LEARNING 기계 학습

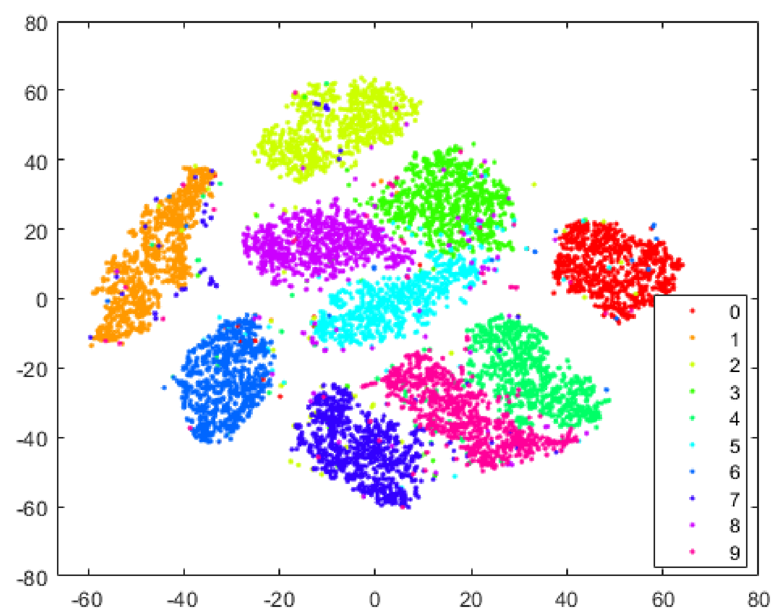
오일석 지음

6장. 비지도 학습

PREVIEW

- 지도 학습(supervised learning)과 비지도 학습(unsupervised learning)
  - 지금까지는 훈련집합으로 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$가 주어지는 지도 학습supervised learning
  - 6장은 $\mathbb{X}$만 주어지는 비지도 학습unsupervised learning
- 다양한 응용
  - 맞춤 광고, 차원 축소, 데이터 압축, 데이터 가시화, 특징 추출, 생성 모델 구축 등
- 현대 기계 학습에서 더욱 중요해짐





각 절에서 다루는 내용

6.1절_ 비지도 학습을 지도 학습, 준지도 학습과 비교한다.

6.2절_ 비지도 학습의 일반 연산으로 군집화, 밀도 추정, 공간 변환을 소개한다.

6.3절_ 군집화 알고리즘으로 *k*-평균 알고리즘을 설명한다.

6.4절_ 밀도 추정 방법으로 커널 밀도 추정과 가우시안 혼합을 설명한다.

6.5절_ 기계 학습에서 공간 변환의 중요성을 강조한다.

6.6절_ 선형 인자 모델로서 PCA, ICA, 희소 코딩을 소개한다.

6.7절_ 오토인코더를 소개하고 규제 오토인코더로서 SAE, DAE, CAE를 설명한다.

6.1 지도 학습과 비지도 학습, 준지도 학습

■ 세 가지 유형의 학습

- 지도 학습: 모든 훈련 샘플이 레이블 정보를 가짐
- 비지도 학습: 모든 훈련 샘플이 레이블 정보를 가지지 않음 ← 6장의 주제
- 준지도 학습: 레이블을 가진 샘플과 가지지 않은 샘플이 섞여 있음 ← 7장의 주제

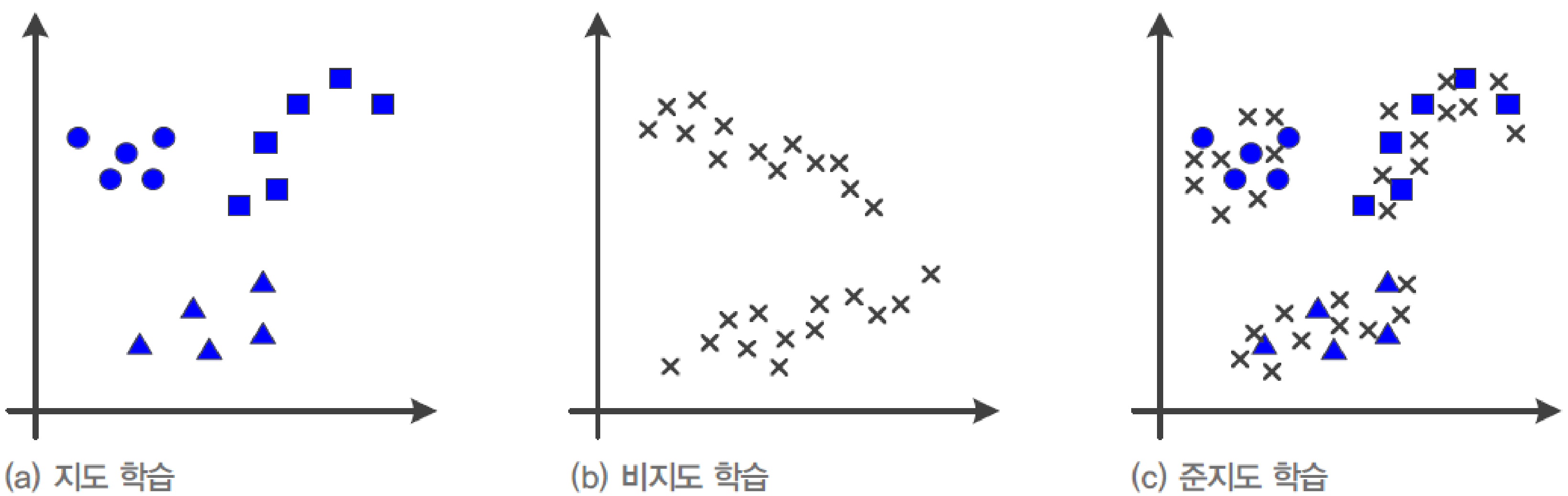


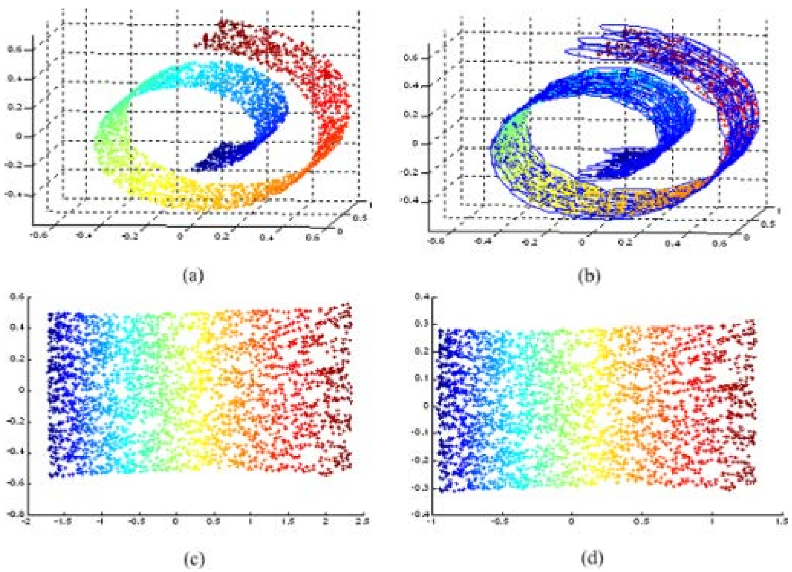
그림 6-1 기계 학습의 유형(속이 찬 샘플은 레이블이 있고, x 표시된 샘플은 레이블이 없음)

6.1 지도 학습과 비지도 학습, 준지도 학습

- 기계 학습이 사용하는 두 종류의 지식
  - 훈련집합
  - 사전 지식prior knowledge(세상의 일반적인 규칙)
- 중요한 두 가지 사전 지식
  - 매니폴드 가정manifold hypothesis: 데이터집합은 하나의 매니폴드 또는 여러 개의 매니폴드를 구성하며, 모든 샘플은 매니폴드와 가까운 곳에 있다. 매니폴드와 매니폴드 가정은 6.8.1절에서 자세히 설명한다.
  - 매끄러움 가정smoothness hypothesis: 샘플은 어떤 요인에 의해 변화한다. 예를 들어, 장면과 카메라 위치를 고정한 상태에서 조명을 조금씩 변화하면서 영상을 획득한 경우, 획득된 영상 샘플은 특징 공간에서 위치가 조금씩 바뀔 것이다. 이때 [그림 6-1(b)]와 같이 매끄러운 곡면을 따라 위치가 변한다.

비지도 학습과 준지도 학습은

사전 지식을 더 명시적으로 사용



6.2 비지도 학습

- 6.2.1 비지도 학습의 일반 과업
- 6.2.2 비지도 학습의 응용 과업

6.2.1 비지도 학습의 일반 과업

- 세 가지 일반 과업
  - 군집화: 유사한 샘플을 모아 같은 그룹으로 묶는 일
  - 밀도 추정: 데이터로부터 확률분포를 추정하는 일
  - 공간 변환: 원래 특징 공간을 저차원 또는 고차원 공간으로 변환하는 일
- 데이터에 내재한 구조를 잘 파악하여 새로운 정보를 발견해야 함

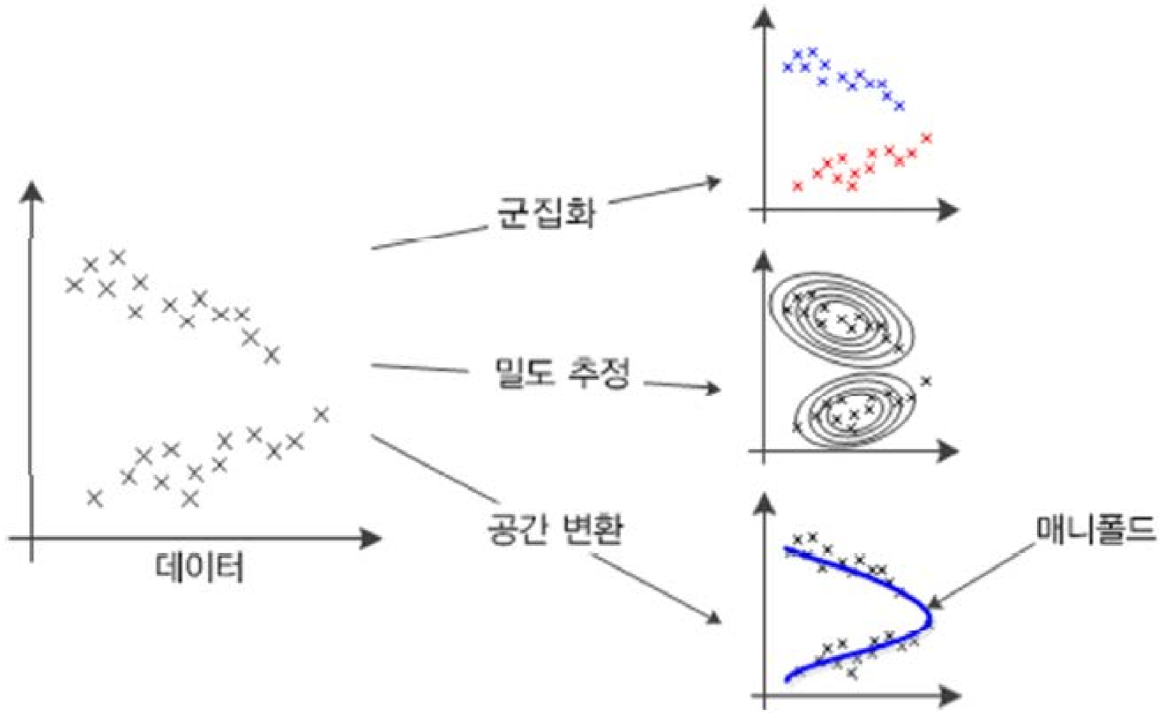


그림 6-2 비지도 학습의 군집화, 밀도 추정, 공간 변환 과업이 발견하는 정보

6.2.2 비지도 학습의 응용 과업

- 아주 많은 응용(서로 밀접하게 연관)
  - 군집화의 응용
    - 맞춤 광고, 영상 분할, 유전자 데이터 분석, SNS 실시간 검색어 분석하여 사람들의 관심 파악 등
  - 밀도 추정의 응용
    - 분류, 생성 모델 구축 등
  - 공간 변환의 응용
    - 데이터 가시화, 데이터 압축, 특징 추출(표현 학습) 등

6.3 군집화(clustering)

- 6.3.1 *k*-평균(k-means)알고리즘

6.3 군집화(clustering)

군집화 문제

- $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$에서 식 (6.1)을 만족하는 군집집합 $C = \{c_1, c_2, \cdots, c_k\}$를 찾아내는 작업

$$\left.\begin{array}{l} c_i \neq \emptyset, i = 1,2,\cdots,k \\ \bigcup_{i=1}^{k} c_i = \mathbb{X} \\ c_i \bigcap c_j = \emptyset, i \neq j \end{array}\right\} \qquad (6.1)$$

- 군집의 개수 k는 주어지는 경우와 자동으로 찾아야 하는 경우가 있음
- 군집화를 부류 발견 작업이라 부르기도 함

군집화의 주관성 (최적의 k *개수*?)

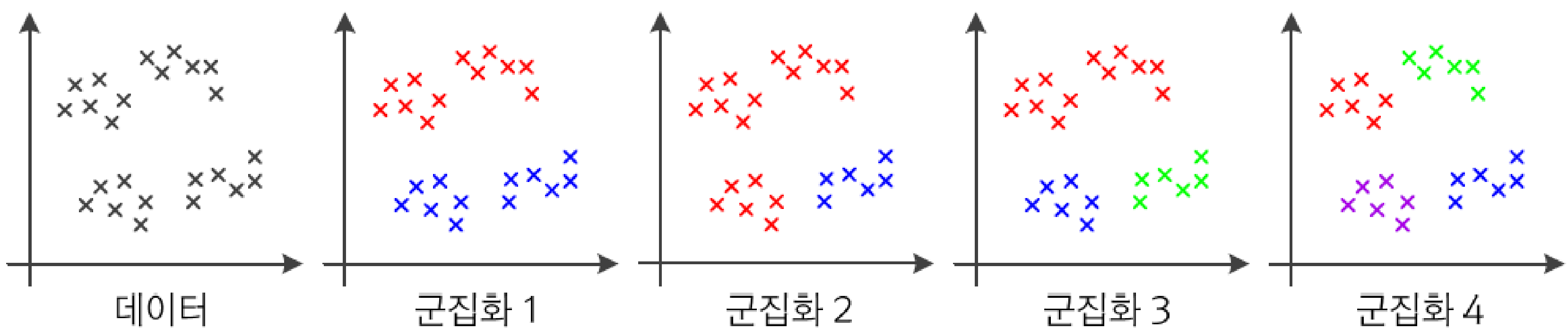
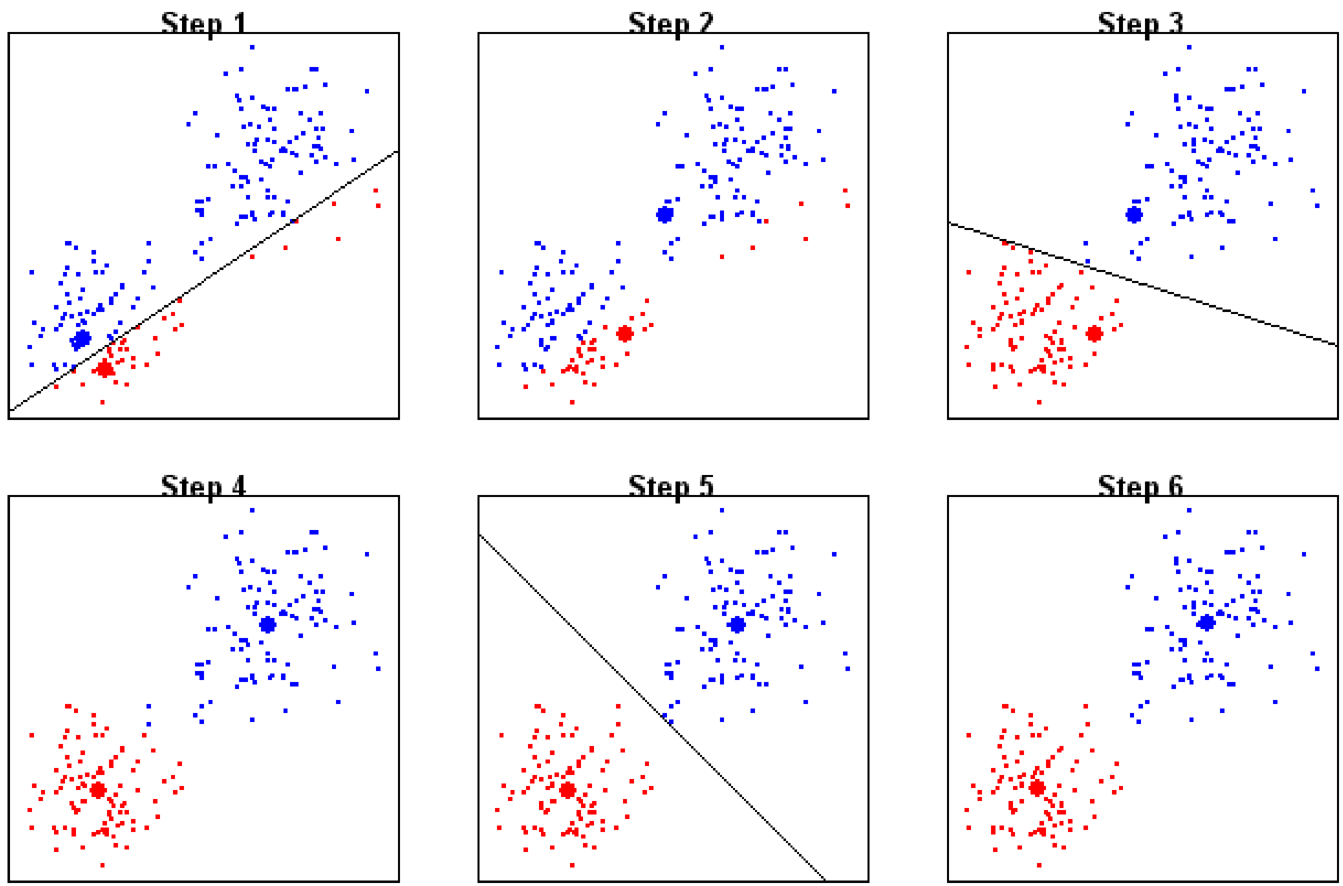


그림 6-3 군집화의 주관성

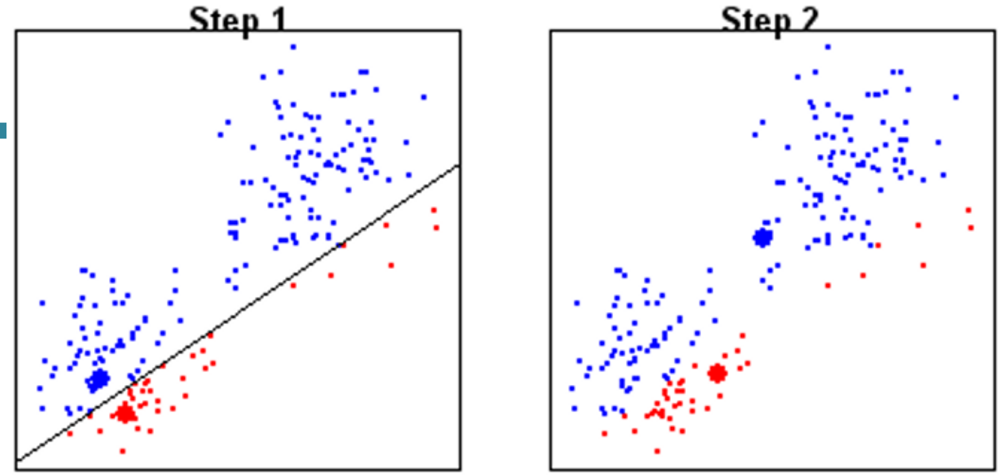
6.3.1 *k*-평균 알고리즘

k-평균 알고리즘의 특성

- 군집 개수(*k*)와 군집 중심의 초기 위치(z_1, z_2,..., 카)가 주어질 때,
- 1. 각 샘플 별로 가까운 군집으로 할당
- 2. 군집 중심의 위치는 군집의 할당된 샘플 평균으로 갱신
- 3. 1과 2를 반복



6.3.1 *k*-평균 알고리즘



■ *k*-평균 알고리즘의 특성

- 원리 단순하지만 성능이 좋아 인기 좋음
- 직관적으로 이해하기 쉽고 구현 쉬움
- 군집 개수 *k*를 알려줘야 함

알고리즘 6-1 *k*-평균

입력: 훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$, 군집의 개수 k
출력: 군집집합 $C = \{c_1, c_2, \cdots, c_k\}$

1 k개의 군집 중심 $Z = \{\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \cdots, \mathbf{z}_k\}$를 초기화한다.
2 while (true)
3   for (i=1 to n)
4         $\mathbf{x}_i$를 가장 가까운 군집 중심에 배정한다.
5   if (라인 3~4에서 이루어진 배정이 이전 루프에서의 배정과 같으면) break
6   for (j=1 to k)
7         $\mathbf{z}_j$에 배정된 샘플의 평균으로 $\mathbf{z}_j$를 대치한다.
8 for (j=1 to k)
9     $\mathbf{z}_j$에 배정된 샘플을 c_j에 대입한다.

6.3.1 *k*-평균 알고리즘

■ *k*-평균과 *k*-medoids

- *k*-평균은 [알고리즘 6-1]의 라인 7에서 샘플의 평균으로 군집 중심을 갱신
- *k*-medoids는 대표를 뽑아 뽑힌 대표로 군집 중심을 갱신(*k*-평균에 비해 잡음에 둔감)

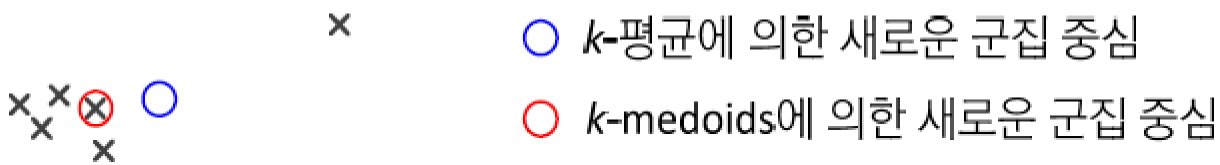


그림 6-4 *k*-평균과 *k*-medoids가 군집 중심을 갱신하는 과정

■ 최적화 문제로 해석

- *k*-평균은 식 (6.2)의 목적함수를 최소화하는 알고리즘
- 행렬 $\mathbf{A}$는 군집 배정 정보를 나타내는 k*n 행렬(i번째 샘플이 j번째 군집에 배정되었다면 a_{ji}는 1, 그렇지 않으면 0)

$$J(Z,\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{k} a_{ji}\,dist(\mathbf{x}_i, \mathbf{z}_j) \tag{6.2}$$

예제 6-1 *k*-평균의 동작

[그림 6-5]는 훈련집합이 7개의 샘플을 가진 *n*=7인 예를 보여 준다. 좌표는 다음과 같다.

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix}18\\5\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix}20\\9\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix}20\\14\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_4 = \begin{pmatrix}20\\17\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_5 = \begin{pmatrix}5\\15\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_6 = \begin{pmatrix}9\\15\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_7 = \begin{pmatrix}6\\20\end{pmatrix}$$

군집의 개수 *k*=3이라 하자. 맨 왼쪽 그림은 초기 군집 중심을 보여 준다. [알고리즘 6-1]의 라인 3~4는 7개 샘플을 아래와 같이 배정할 것이다.

$$\{\mathbf{x}_1\}\text{은 } \mathbf{z}_1,\ \{\mathbf{x}_2\}\text{은 } \mathbf{z}_2,\ \{\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6, \mathbf{x}_7\}\text{은 } \mathbf{z}_3$$

이 배정을 행렬 **A**로 표현하면 다음과 같다.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1\end{pmatrix}$$

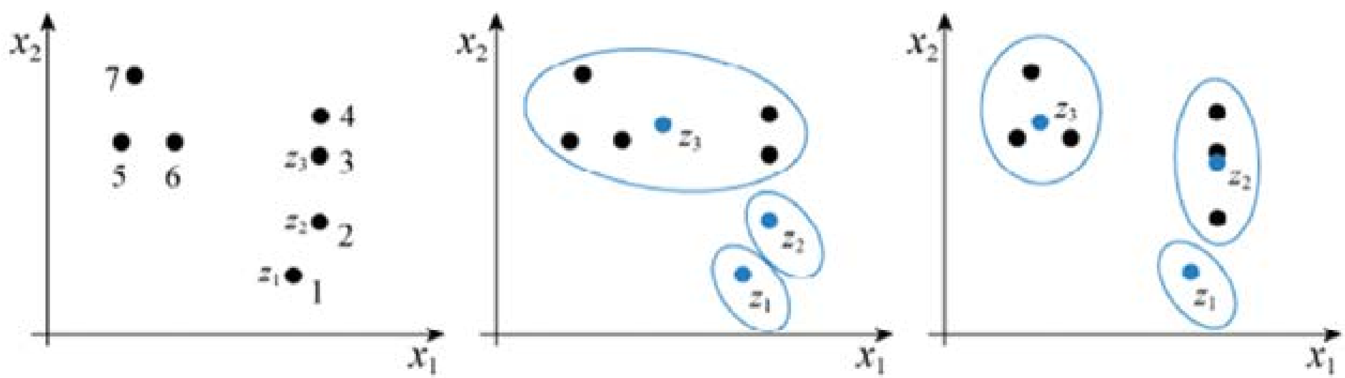


그림 6-5 *k*-평균의 동작 예제

6.3.1 k-평균 알고리즘

[그림 6-5]의 가운데 그림은 새로 계산한 군집 중심이다. $\mathbf{z}_1 = (18, 5)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{z}_2 = (20, 9)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{z}_3 = (12, 16.2)^{\mathrm{T}}$이고, 식 (6.2)에 대입하면 $J = 244.8$이 된다. 이때 거리함수 dist로 식 (1.7)의 유클리디언 거리를 사용한다.

두 번째 루프를 실행하면 행렬 **A**는 아래와 같이 바뀐다. 군집 중심은 $\mathbf{z}_1 = (18, 5)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{z}_2 = (20, 13.333)^{\mathrm{T}}$, $\mathbf{z}_3 = (6.667, 16.667)^{\mathrm{T}}$이다. 이것을 식 (6.2)에 대입하면 $J = 58.0$이 된다. [그림 6-5]의 맨 오른쪽 그림은 두 번째 루프 수행 후의 상황이다.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

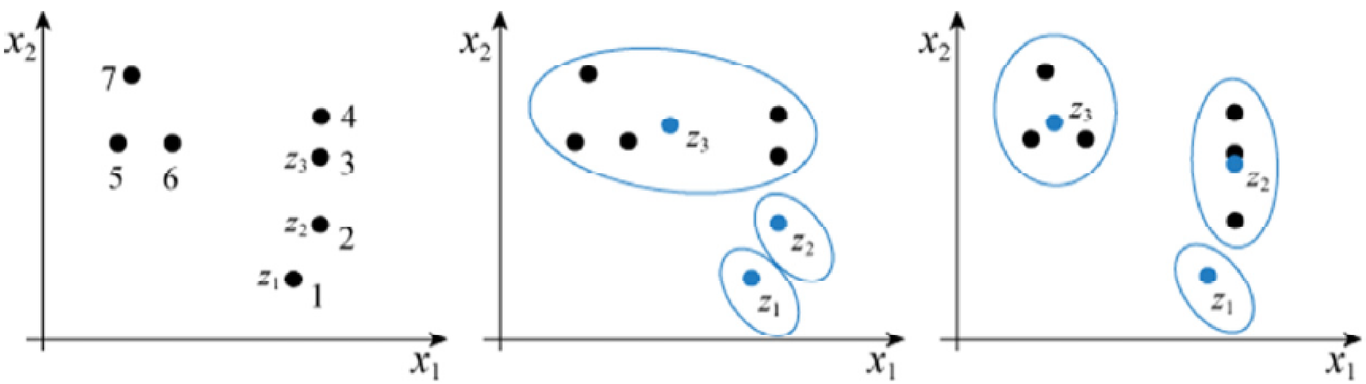


그림 6–5 k–평균의 동작 예제

6.3.1 *k*-평균 알고리즘

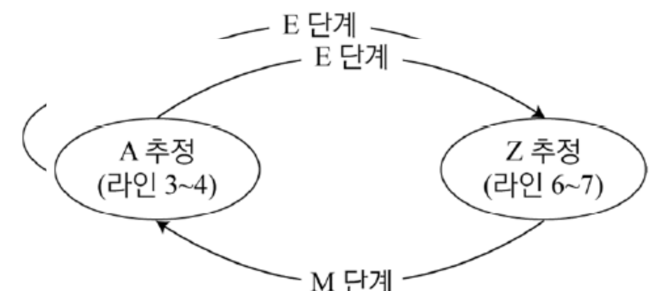
EM(Expectation Maximization)기초

- *k*-평균에서 훈련집합 $\mathbb{X}$와 군집집합 C(행렬 $\mathbf{A}$)는 각각 입력단과 출력단에서 관찰 가능
- 중간 단계의 임시 변수 Z(입출력단에서 보이지 않기 때문에 은닉변수라latent variable 부름)
- *k*-평균은 Z의 추정(E 단계)과 $\mathbf{A}$의 추정(M 단계)을 번갈아 가면 수행하는 EM 알고리즘

알고리즘 6-1 *k*-평균

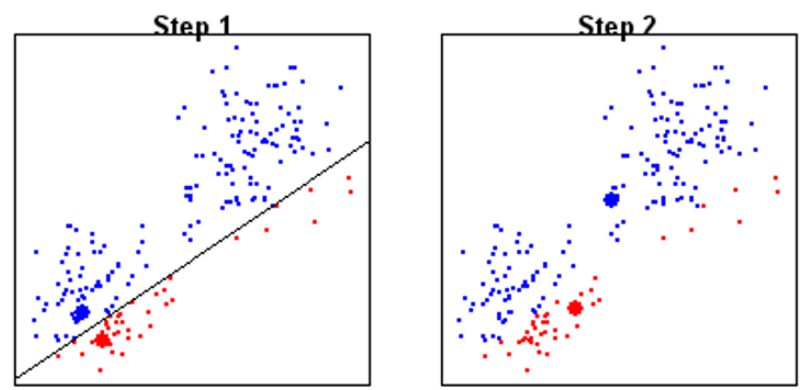
입력: 훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$, 군집의 개수 k
출력: 군집집합 $C = \{c_1, c_2, \cdots, c_k\}$

1 k개의 군집 중심 $Z = \{\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \cdots, \mathbf{z}_k\}$를 초기화한다.
2 while (true)
3   for (i=1 to n)
4     $\mathbf{x}_i$를 가장 가까운 군집 중심에 배정한다.
5   if (라인 3~4에서 이루어진 배정이 이전 루프에서의 배정과 같으면) break
6   for (j=1 to k)
7     $\mathbf{z}_j$에 배정된 샘플의 평균으로 $\mathbf{z}_j$를 대치한다.
8 for (j=1 to k)
9   $\mathbf{z}_j$에 배정된 샘플을 c_j에 대입한다.



그

그림 6-6 *k*-평균을 EM 알고리즘으로 해석



6.4 밀도 추정

- 6.4.1 커널 밀도 추정
- 6.4.2 가우시안 혼합
- 6.4.3 EM 알고리즘

- 밀도 추정 문제
  - 어떤 점 $\mathbf{x}$에서 데이터가 발생할 확률, 즉 확률 분포 $P(\mathbf{x})$를 구하는 문제
  - 예를 들어, 그림 6-8에서 $P(\mathbf{x}_1) > P(\mathbf{x}_2) > P(\mathbf{x}_3)$

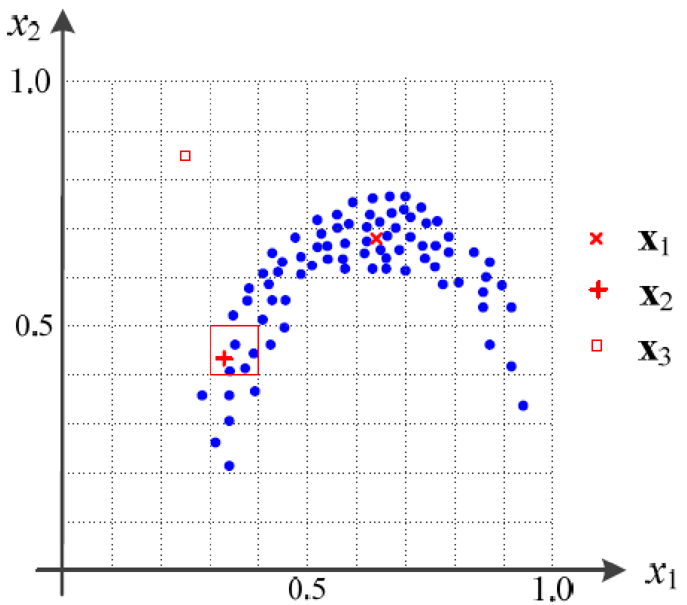


그림 6-8 밀도 추정 문제

6.4.1 커널(kernel) 밀도 추정

히스토그램 방법

- 특징 공간을 칸의 집합으로 분할한 다음, 칸에 있는 샘플의 빈도를 세어 식 (6.7)로 추정
- 예, $P(\mathbf{x}=+)=\frac{4}{80}=0.05$

$$P(\mathbf{x})=\frac{bin(\mathbf{x})}{n} \tag{6.7}$$

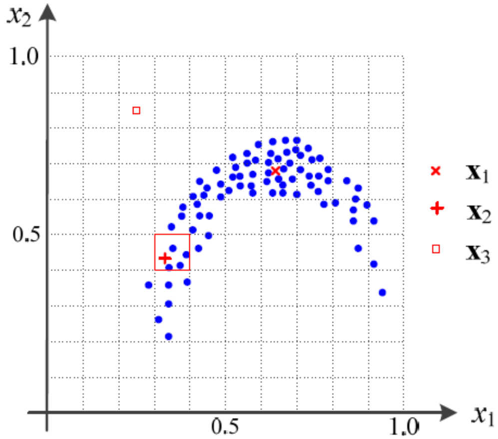


그림 6-8 밀도 추정 문제

- 여러 문제점
  - 매끄럽지 못하고 계단 모양을 띠는 확률밀도함수가 됨
  - 칸의 크기와 위치에 민감함

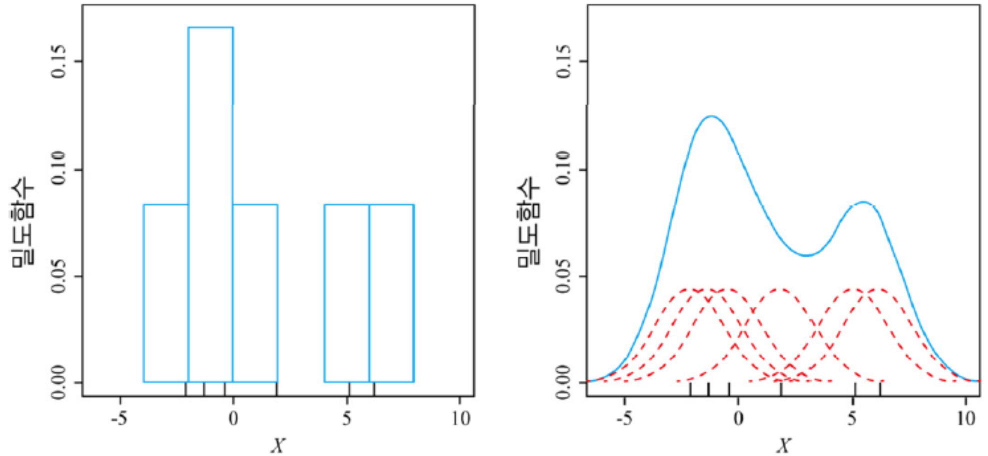


그림 6-10 히스토그램 방법(왼쪽)과 커널 밀도 추정법(오른쪽)의 비교

6.4.1 커널 밀도 추정

커널 밀도 추정법

- 커널(kernel): *n*차원공간을 *n′*차원 공간으로 사상하는 함수
- 점 $\mathbf{x}$에 [그림 6-9]가 예시하는 커널을 씌우고 커널 안에 있는 샘플의 가중 합을 이용함
- 대역폭 h의 크기가 중요

$$\left.\begin{aligned} P_h(\mathbf{x}) &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} K_h(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i) = \frac{1}{nh^d}\sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_i}{h}\right) \\ \text{여기서} \quad K_h(\mathbf{x}) &= \frac{1}{h^d} K\left(\frac{\mathbf{x}}{h}\right) \end{aligned}\right\} \qquad (6.8)$$

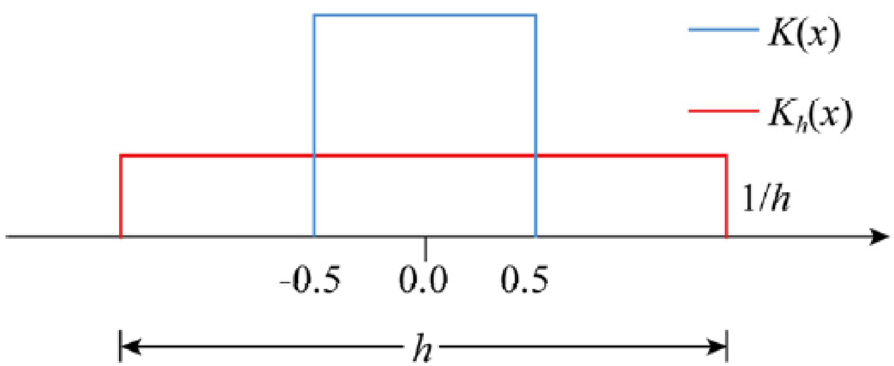


그림 6-9 표준커널함수 K와 크기 변환된 커널함수 K_h

6.4.1 커널 밀도 추정

히스토그램 방법과 커널 밀도 추정법의 비교

- 커널 밀도 추정법은 매끄러운 확률밀도함수를 추정함

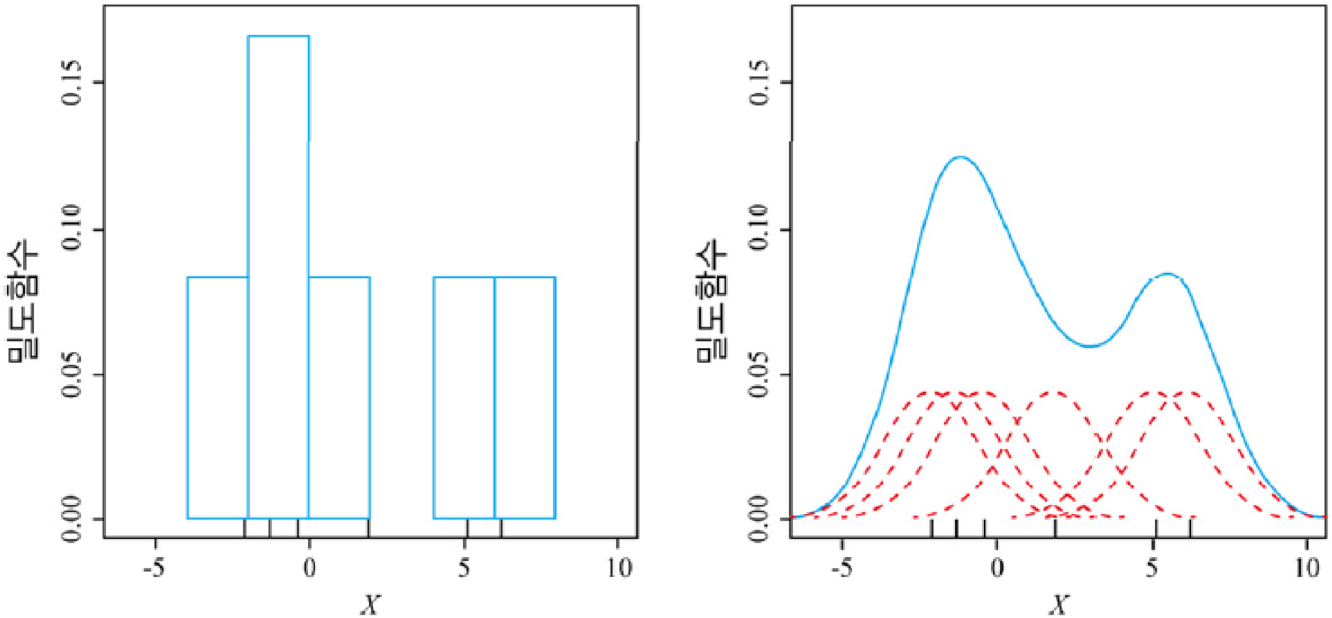


그림 6-10 히스토그램 방법(왼쪽)과 커널 밀도 추정법(오른쪽)의 비교

6.4.1 커널 밀도 추정

- 커널 밀도 추정법에서 대역폭 h의 중요성
  - h가 너무 작으면(빨강) 뾰족뾰족한 모양

    h가 너무 크면(녹색) 뭉개짐

    → 적절하게 설정해야 함(검정)

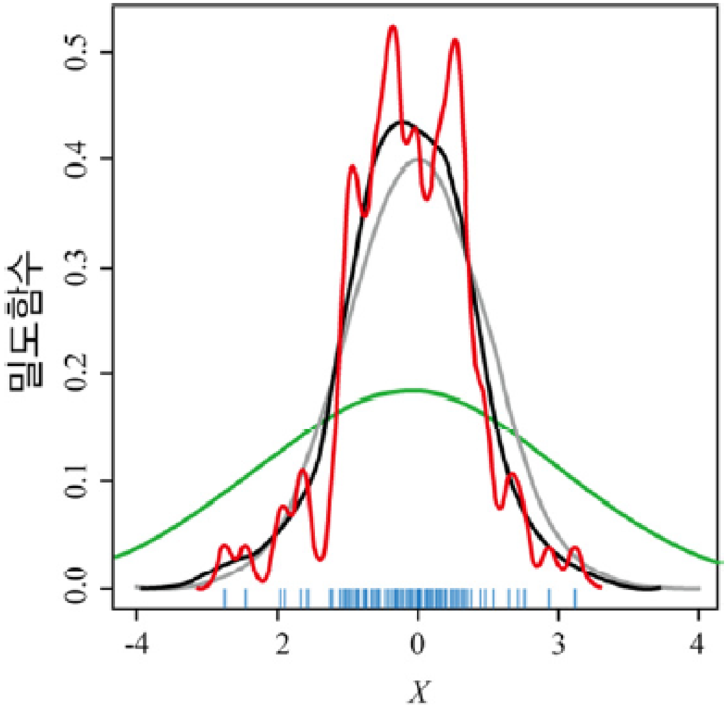


그림 6-11 대역폭이 확률밀도함수 추정에 미치는 영향

- 커널 밀도 추정 기법의 근본적 문제점
  - 샘플을 모두 저장하고 있어야 하는 메모리 기반 방법(새로운 샘플이 주어질 때마다 식 (6.8)을 처음부터 다시 계산)
  - 데이터 희소성(차원의 저주)

  → 데이터가 낮은 차원인 경우로 국한하여 활용

6.4.2 가우시안 혼합(Gaussian mixture)

- 가우시안을 이용한 방법(모수적 방법: parametric method)
  - 데이터가 가우시안 분포를 따른다고 가정하고 평균 벡터 $\boldsymbol{\mu}$와 공분산 행렬 $\boldsymbol{\Sigma}$를 추정함

$$\left.\begin{aligned} &P(\mathbf{x}) = N(\mathbf{x};\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}|}\sqrt{(2\pi)^d}}\exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right) \\ &\text{이때 } \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1,n}\mathbf{x}_i\,,\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{i=1,n}(\mathbf{x}_i-\boldsymbol{\mu})\,(\mathbf{x}_i-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \end{aligned}\right\} \qquad (6.9)$$

- 대부분 데이터가 하나의 가우시안으로 불충분([그림 6-12]의 오른쪽)

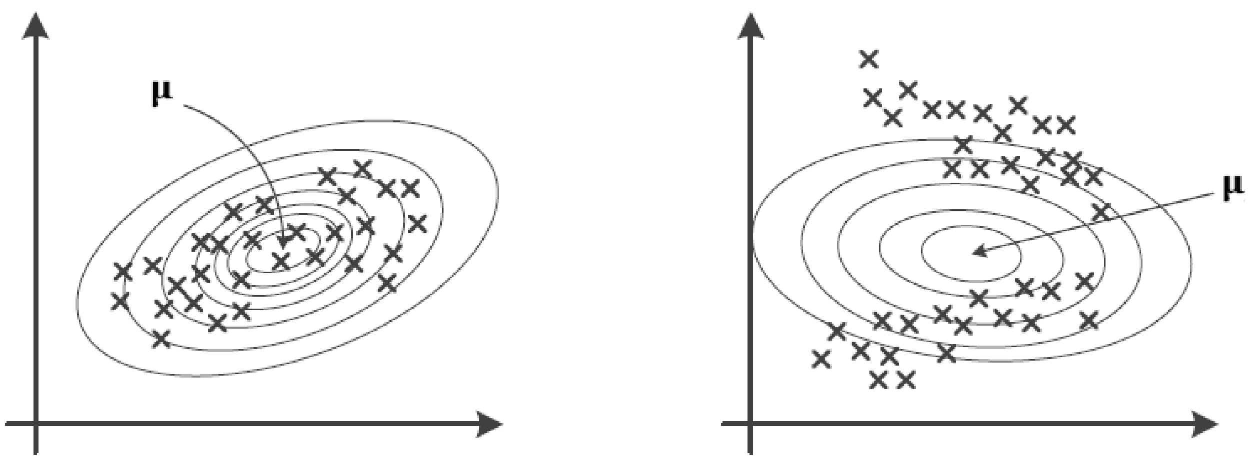
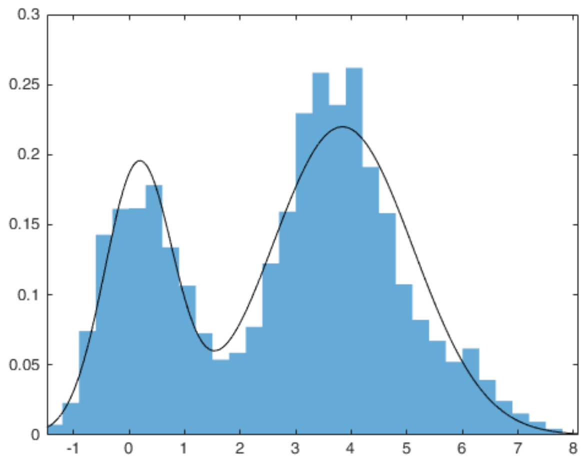


그림 6-12 하나의 가우시안으로 밀도 추정

6.4.2 가우시안 혼합

- 가우시안 혼합
  - [그림 6-13]은 2개의 가우시안을 사용한 예



가우시언 혼합 모델(k=2)

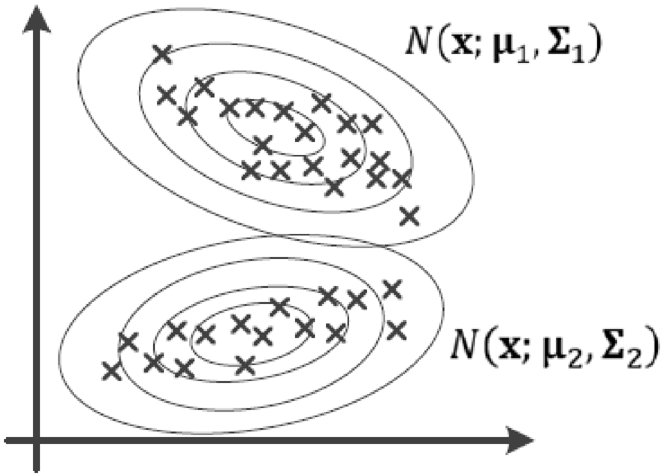


그림 6-13 가우시안 혼합으로 밀도 추정

$$P(\mathbf{x}) = \frac{21}{37} N(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1) + \frac{16}{37} N(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2)$$

- k개의 가우시안으로 일반화하면,
  - 확률분포 $P(\mathbf{x})$는 k개 가우시안의 선형 결합으로 표현(식 (6.10))

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{k} \pi_j N(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j) \tag{6.10}$$

6.4.2 가우시안 혼합

- 주어진 데이터와 추정해야 할 매개변수를 정리하면,

주어진 데이터: 훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$, 가우시안의 개수 k

추정해야 할 매개변수집합: $\Theta = \{\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \cdots, \pi_k), (\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1), (\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2), \cdots, (\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)\}$

- 최대 우도를 이용한 최적화 문제로 공식화

$$P(\mathbb{X}|\Theta) = \prod_{i=1}^{n} P(\mathbf{x}_i|\Theta) = \prod_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{k} \pi_j N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j) \right) \tag{6.11}$$

$$\log P(\mathbb{X}|\Theta) = \sum_{i=1}^{n} \log \left(\sum_{j=1}^{k} \pi_j N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j) \right) \tag{6.12}$$

$$\widehat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} \log P(\mathbb{X}|\Theta) \tag{6.13}$$

6.4.3 EM 알고리즘

- EM 알고리즘을 이용한 식 (6.13)의 풀이
  - Θ를 모르므로 난수로 설정하고 출발([그림 6-14]의 예시)

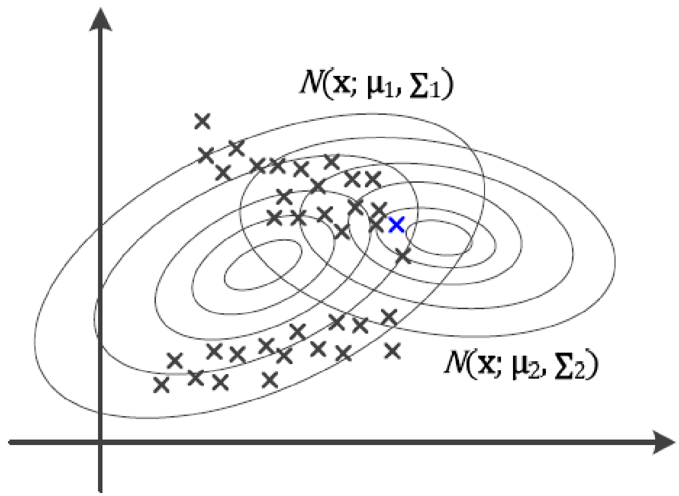


그림 6-14 샘플의 소속 확률을 어떻게 추정할 것인가

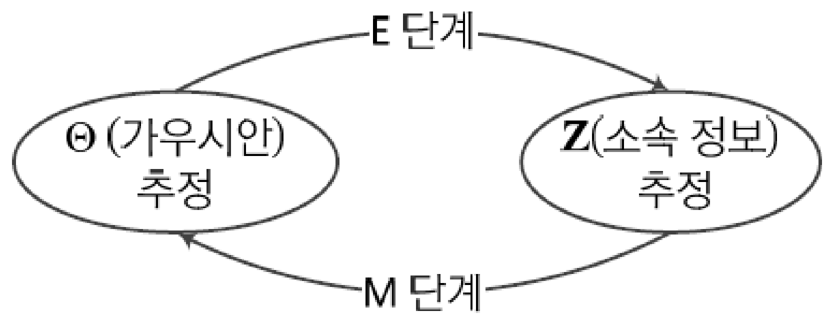


그림 6-15 가우시안 혼합을 위한 EM 알고리즘

  - 가우시안으로 샘플의 소속 정보 개선(E단계) → 샘플의 소속 정보로 가우시안 개선(M단계) → 가우시안으로 샘플의 소속 정보 개선(E단계) → 샘플의 소속 정보로 가우시안 개선(M단계) → .... ([그림 6-15])

6.4.2 가우시안 혼합

- 가우시안 혼합 알고리즘
  - Expectation, Maximization(EM)을 반복

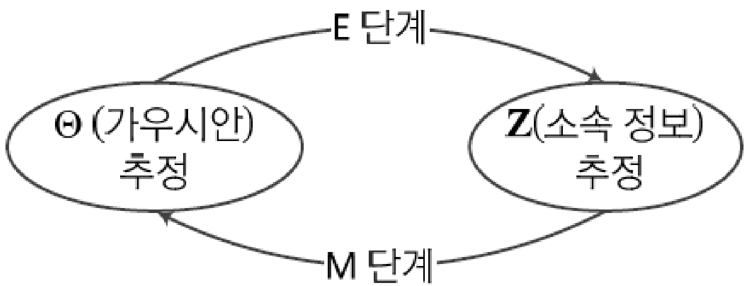
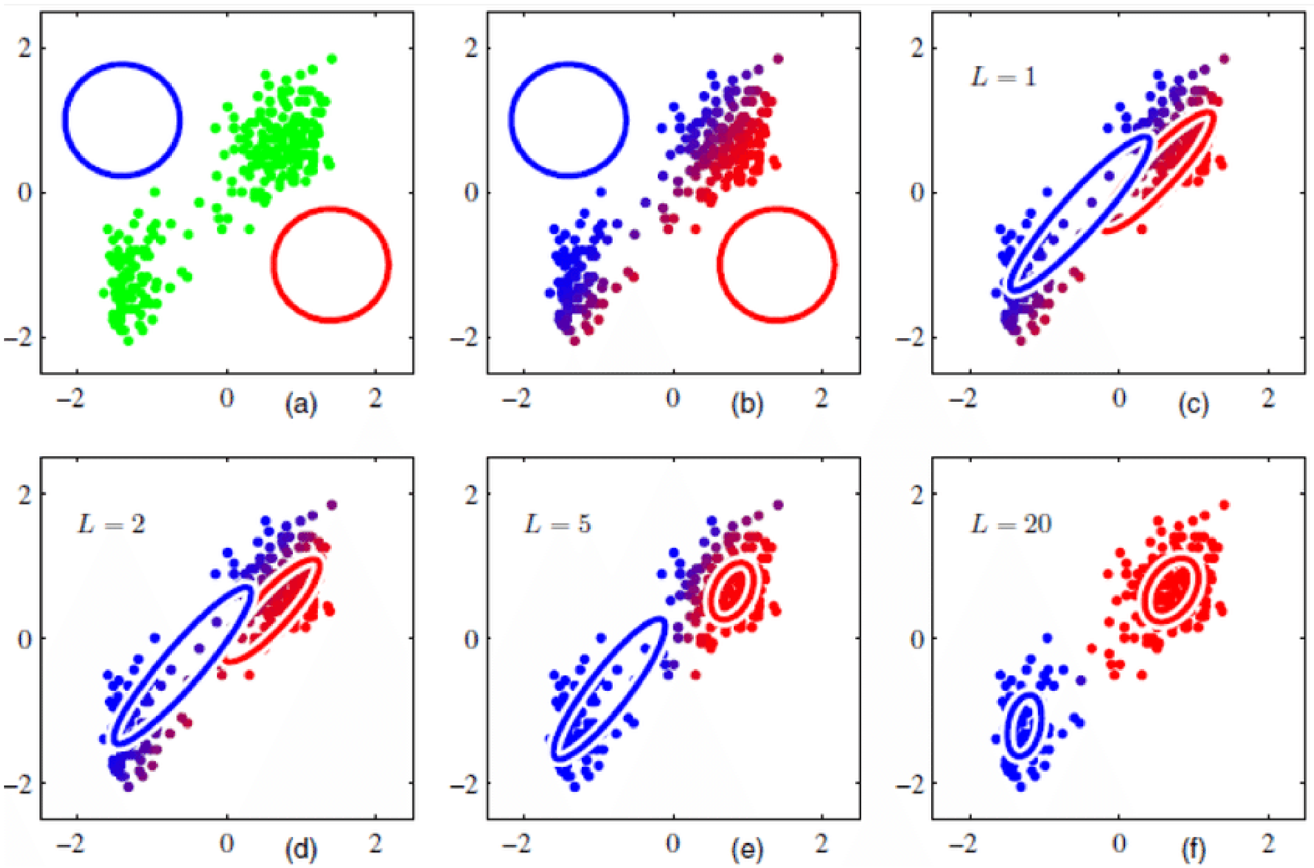
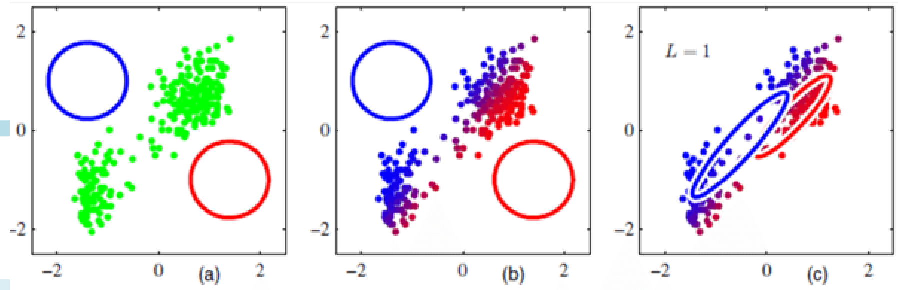


그림 6-15 가우시안 혼합을 위한 EM 알고리즘



6.4.3 EM 알고리즘

가우시안 혼합을 위한 EM 알고리즘



E단계　　M단계

알고리즘 6-4　가우시안 혼합을 위한 EM 알고리즘

입력: 훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$, 가우시안의 개수 k

출력: 최적의 가우시안과 혼합 계수 $\Theta = \{\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \pi_2, \cdots, \pi_k), (\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1), (\boldsymbol{\mu}_2, \boldsymbol{\Sigma}_2), \cdots, (\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)\}$

1 Θ를 초기화한다.
2 while (!멈춤조건)
3 　Θ를 이용하여 소속확률 행렬 **Z**를 추정한다.　// E단계
4 　**Z**를 이용하여 Θ를 추정한다.　// M단계

- 라인 3과 라인 4를 위한 수식
- z_{ji}는 $\mathbf{x}_i$가 j번째 가우시안에 속할 확률

$$z_{ji} = \frac{\pi_j N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_j, \boldsymbol{\Sigma}_j)}{\sum_{q=1}^{k} \pi_q N(\mathbf{x}_i; \boldsymbol{\mu}_q, \boldsymbol{\Sigma}_q)} \tag{6.14}$$

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_j &= \frac{1}{n_j}\sum_{i=1}^{n} z_{ji}\mathbf{x}_i \\ \boldsymbol{\Sigma}_j &= \frac{1}{n_j}\sum_{i=1}^{n} z_{ji}(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_j)(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}_j)^{\mathrm{T}} \\ \pi_j &= \frac{n_j}{n} \\ \text{이때 } n_j &= \sum_{i=1}^{n} z_{ji} \end{aligned}\right\} \tag{6.15}$$

6.5 공간 변환의 이해

- 간단한 상황 예시
  - 2개 군집을 가진 [그림 6-16]의 2차원 특징 공간을 극좌표 공간으로 변환하면 1차원만으로 2개 군집 표현 가능

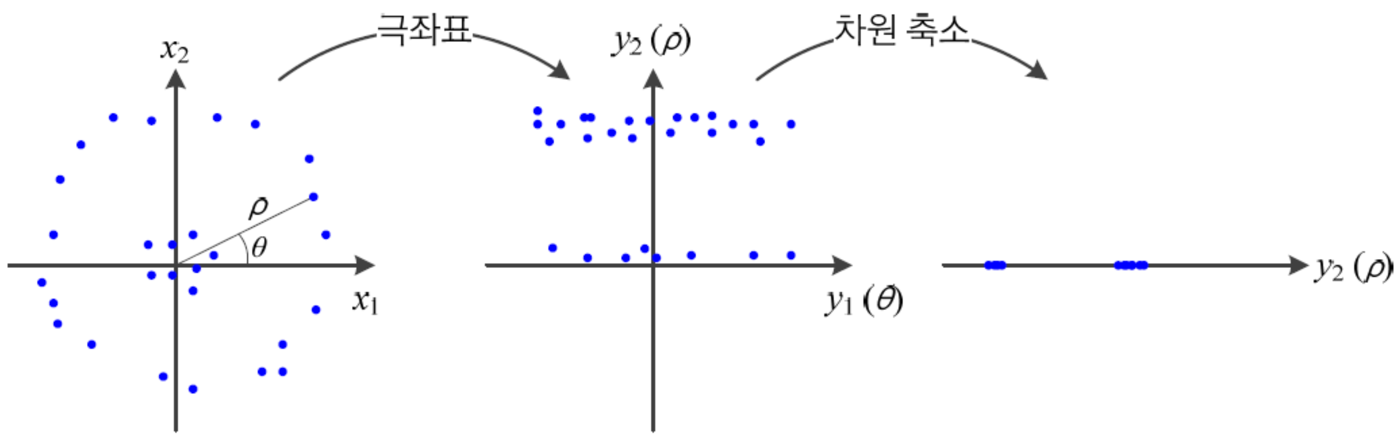


그림 6-16 공간 변환의 예

- 실제 문제에서는 비지도 학습을 이용하여 최적의 공간 변환을 자동으로 알아내야 함

6.5 공간 변환의 이해

인코딩과 디코딩

- 원래 공간을 다른 공간으로 변환하는 인코딩 과정(f), 변환 공간을 원래 공간으로 역변환하는 디코딩 과정(g)

$$\hat{\mathbf{x}} = g(f(\mathbf{x})) \tag{6.16}$$

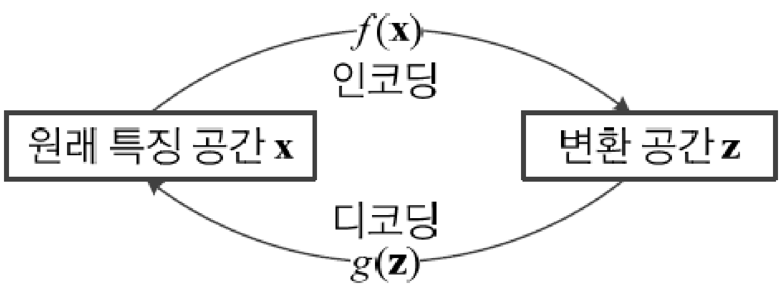
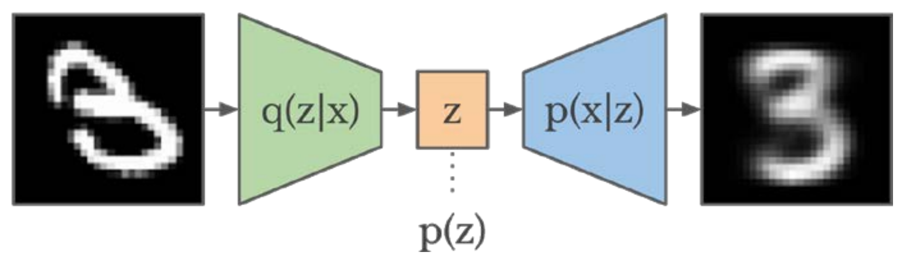


그림 6-17 공간 변환과 역변환



- 예) 데이터 압축의 경우, 역변환으로 얻은 $\hat{\mathbf{x}}$은 원래 신호 $\mathbf{x}$와 가급적 같아야 함
- 예) 데이터 가시화에서는 2차원 또는 3차원의 $\mathbf{z}$ 공간으로 변환. 디코딩은 불필요

6.6 선형 인자 모델(linear factor model)

- 6.6.1 주성분 분석(PCA, principle component alaysis)
- 6.6.2 독립 성분 분석(ICA, independent component analysis)
- 6.6.3 희소 코딩(SC, sparse coding)

6.6 선형 인자 모델

선형 인자 모델

- 선형 연산을 이용한 공간 변환 기법
- 선형 연산을 사용하므로 행렬 곱으로 인코딩(식 (6.17))과 디코딩(식 (6.18)) 과정을 표현

$$f\colon\ \mathbf{z} = \mathbf{W}_{enc}\mathbf{x} + \boldsymbol{\alpha}_{enc} \tag{6.17}$$

$$g\colon\ \mathbf{x} = \mathbf{W}_{dec}\mathbf{z} + \boldsymbol{\alpha}_{dec} \tag{6.18}$$

- $\boldsymbol{\alpha}$는 데이터를 원점으로 이동하거나 잡음을 추가하는 등의 역할
- 인자 $\mathbf{z}$와 추가 항 $\boldsymbol{\alpha}$에 따라 여러 가지 모델이 존재
  - $\mathbf{z}$에 확률 개념이 없고 $\boldsymbol{\alpha}$를 생략하면 PCA(6.6.1절) – 관찰 벡터 $\mathbf{x}$와 인자 $\mathbf{z}$는 결정론적인 1:1 매핑 관계 종 모양
  - $\mathbf{z}$와 $\boldsymbol{\alpha}$가 가우시안 분포를 따른다고 가정하면 확률 PCA[probabilistic PCA]
  - $\mathbf{z}$가 비가우시안 분포를 따른다고 가정하는 ICA(6.6.2절)

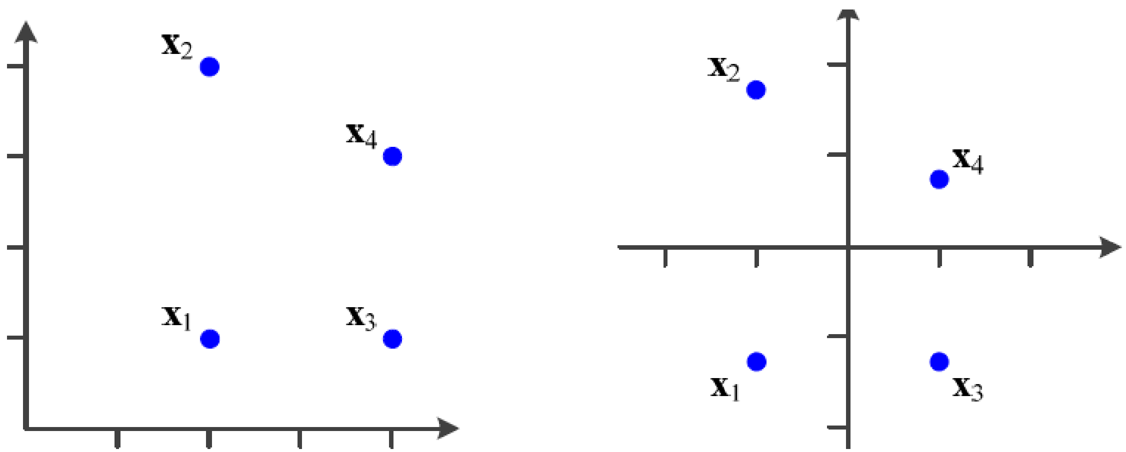
가우시안 아닌거

6.6.1 주성분 분석(PCA, principle component analysis)

- 데이터를 원점 중심으로 옮기는 전처리를 먼저 수행

$$\left.\begin{aligned} &\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu}, \qquad i = 1,2,\cdots,n \\ &\text{이때 } \boldsymbol{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbf{x}_i \end{aligned}\right\} \qquad (6.19)$$

평균이 0이 되도록



(a) 원래 훈련집합 $\mathbb{X}$ (b) $\mathbb{X}$에 식 (6.19)를 적용한 이후

그림 6-18 $\mathbb{X}$의 평균을 0으로 변환

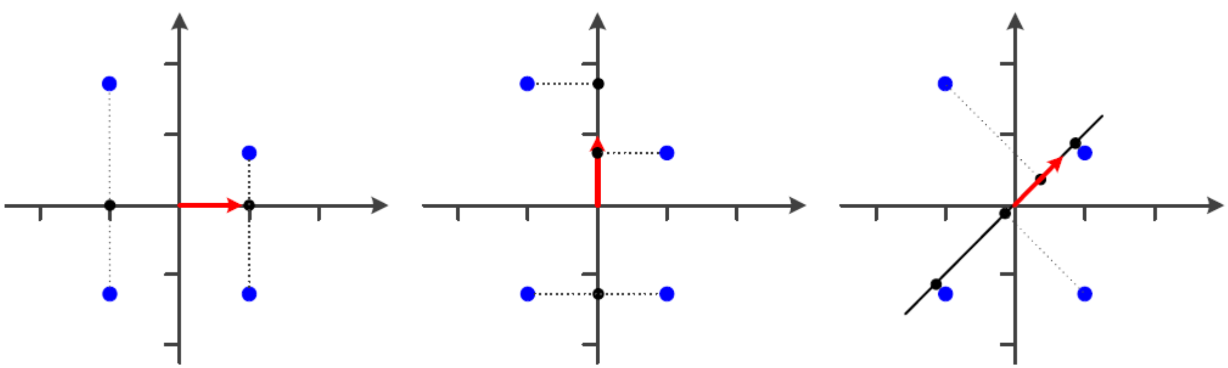
6.6.1 주성분 분석

주성분 분석이 사용하는 변환식

- 일반적인 선형 변환식인 식 (6.17)에서 $\mathbf{z}$에 확률 개념이 없고 $\boldsymbol{\alpha}$를 생략하면 주성분 분석
- 변환 행렬 $\mathbf{W}$는 $d * q$로서 주성분 분석은 d차원의 $\mathbf{x}$를 q차원의 $\mathbf{z}$로 변환 $(q < d)$
  - $\mathbf{W}$의 j번째 열 벡터와의 내적 $\mathbf{u}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{x}$는 $\mathbf{x}$를 $\mathbf{u}_j$가 가리키는 축으로 투영(projection)

$$\left.\begin{array}{l}\mathbf{z} = \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} \\ \text{이때 } \mathbf{W} = (\mathbf{u}_1\ \mathbf{u}_2\ \cdots\ \mathbf{u}_q)\text{이고, } \mathbf{u}_j = \left(u_{1j}, u_{2j}, \cdots, u_{dj}\right)^{\mathrm{T}}\end{array}\right\} \qquad (6.20)$$

- 예, 2차원을 1차원으로 변환하는 상황$(d = 2, q = 1)$



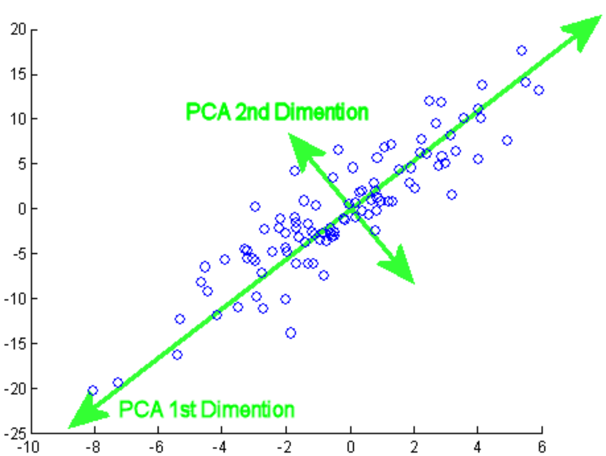
(a) $\mathbf{u} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ 축으로 투영 (b) $\mathbf{u} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ 축으로 투영 (c) $\mathbf{u} = \begin{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\\frac{1}{\sqrt{2}}\end{pmatrix}$ 축으로 투영

그림 6-19 투영에 의해 2차원을 1차원으로 변환

6.6.1 주성분 분석

주성분 분석의 목적

- 손실을 최소화하면서 저차원으로 변환하는 것
  - [그림 6-19]에서 정보 손실 예
    - [그림 6-19(a)]는 $\mathbf{x}_1$과 $\mathbf{x}_2$ 쌍, $\mathbf{x}_3$과 $\mathbf{x}_4$ 쌍이 같은 점으로 변환되는 정보 손실
    - [그림 6-19(b)]는 $\mathbf{x}_1$과 $\mathbf{x}_3$ 쌍이 같은 점으로 변환되는 정보 손실
    - [그림 6-19(c)]는 4개 점이 모두 다른 점으로 변환되어 정보 손실이 가장 적음
- 주성분 분석은 변환된 훈련집합 $\mathbb{Z} = \{\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \cdots, \mathbf{z}_n\}$의 분산이 클수록 정보 손실이 적다고 판단



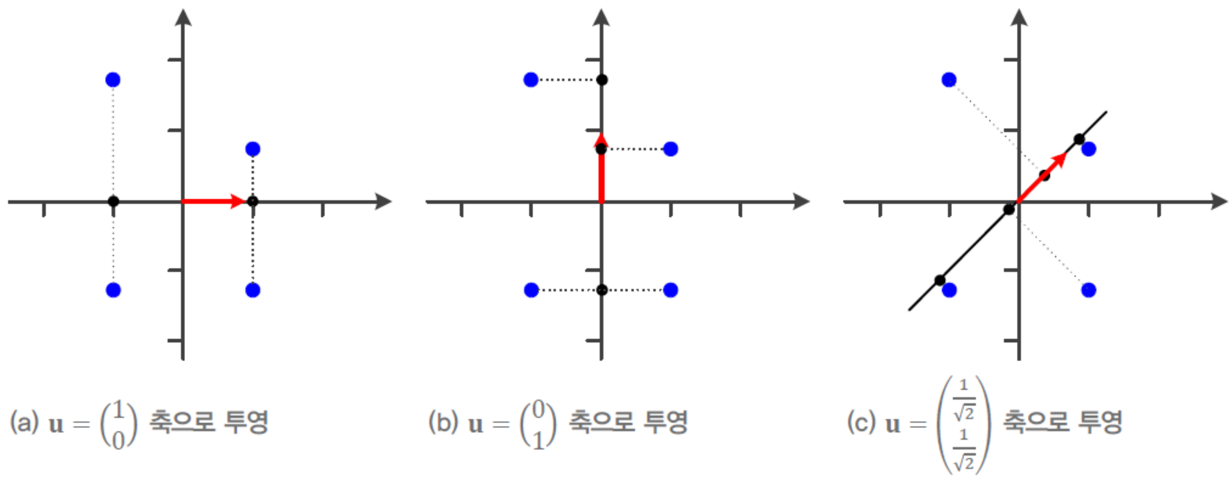


그림 6-19 투영에 의해 2차원을 1차원으로 변환

6.6.1 주성분 분석

예제 6-2 **[그림 6-19]의 세 가지 경우의 분산**

[그림 6-18(a)]의 훈련집합에 식 (6.19)를 적용하기 전과 후는 다음과 같다.

$$\mathbf{x}_1=\begin{pmatrix}2\\1\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_2=\begin{pmatrix}2\\4\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_3=\begin{pmatrix}4\\1\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_4=\begin{pmatrix}4\\3\end{pmatrix}\ \Rightarrow\ \mathbf{x}_1=\begin{pmatrix}-1\\-1.25\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_2=\begin{pmatrix}-1\\1.75\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_3=\begin{pmatrix}1\\-1.25\end{pmatrix},\ \mathbf{x}_4=\begin{pmatrix}1\\0.75\end{pmatrix}$$

[그림 6-19(a)]의 $\mathbf{u}=(1\ 0)^{\mathrm{T}}$ 축으로 투영된 점은 다음과 같다. $z_1 \sim z_4$의 분산은 1.00이다.

$$z_1=(1\ 0)\begin{pmatrix}-1\\-1.25\end{pmatrix}=-1,\ \ z_2=(1\ 0)\begin{pmatrix}-1\\1.75\end{pmatrix}=-1,\ \ z_3=(1\ 0)\begin{pmatrix}1\\-1.25\end{pmatrix}=1,\ \ z_4=(1\ 0)\begin{pmatrix}1\\0.75\end{pmatrix}=1$$

이제 [그림 6-19(c)]의 $\mathbf{u}=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\ \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\mathrm{T}}$ 축으로 투영된 점을 구해 보자. $z_1 \sim z_4$의 분산은 1.093이다.

$$z_1=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\begin{pmatrix}-1\\-1.25\end{pmatrix}=-1.591,\ \ z_2=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\begin{pmatrix}-1\\1.75\end{pmatrix}=0.530,$$
$$z_3=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\begin{pmatrix}1\\-1.25\end{pmatrix}=-0.177,\ \ z_4=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\begin{pmatrix}1\\0.75\end{pmatrix}=1.237$$

따라서 $\mathbf{u}=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\ \frac{1}{\sqrt{2}}\right)^{\mathrm{T}}$ 축이 $\mathbf{u}=(1\ \ 0)^{\mathrm{T}}$보다 우수하다고 할 수 있다. 그렇다면 $\mathbf{u}=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\ \frac{1}{\sqrt{2}}\right)$보다 더 좋은 축이 있을까? 이제부터 최적해를 찾는 방법을 살펴보자.

6.6.1 주성분 분석

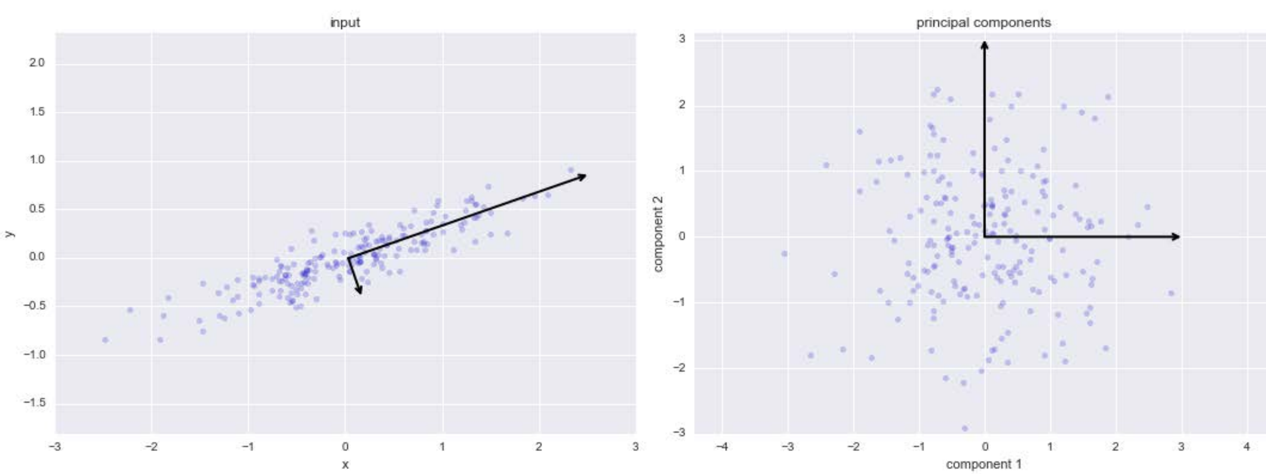
PCA의 최적화 문제

문제 6.1 $\mathbb{Z} = \{\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \cdots, \mathbf{z}_n\}$의 분산을 최대화하는 q개의 축, 즉 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \cdots, \mathbf{u}_q$를 찾아라. 이 단위 벡터는 식 (6.20)에 따라 변환 행렬 $\mathbf{W}$를 구성한다.

- $q = 1$로 국한하고 분산을 쓰면,

$$\sigma^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(z_i - \bar{z})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}{z_i}^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_i\right)^2 = \mathbf{u}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathbf{u} \qquad (6.21)$$

- [문제 6.1]을 바꾸어 쓰면, **문제 6.2** 식 (6.21)의 분산 σ^2을 최대로 하는 $\mathbf{u}$를 찾아라.

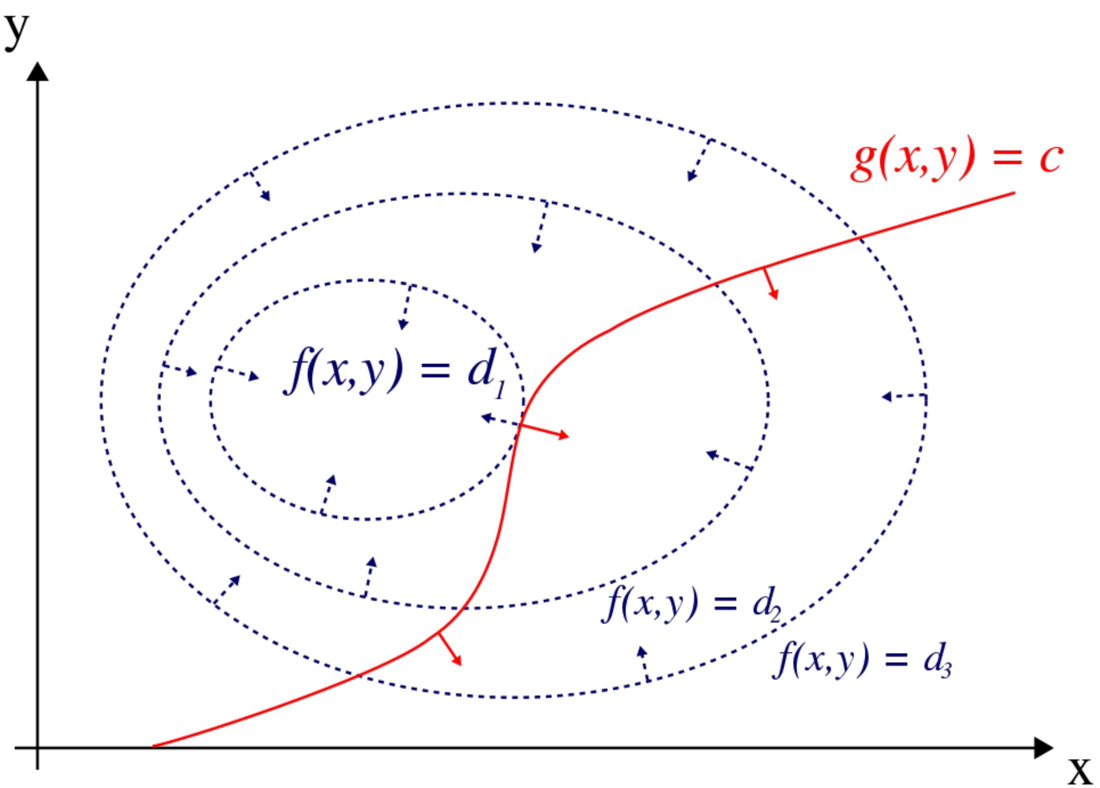


6.6.1 주성분 분석

- **u**는 단위벡터($\mathbf{u}^T\mathbf{u} = 1$)라는 조건을 가지는 최대화 문제
  - 조건이 있는 최적화 문제는 라그랑주 승수(Lagrangian multiplier)를 이용

Original problem: maximize $f(\cdot)$ subject to $g(\cdot) = c$

Reformulated with Lagrangian multiplier: maximize $f(\cdot) + \lambda(g(\cdot) - c)$



6.6.1 주성분 분석

PCA의 최적화 문제

- $\mathbf{u}$가 단위 벡터라는 사실을 적용하여 문제를 다시 쓰면,

문제 6.3 $L(\mathbf{u}) = \mathbf{u}^{\mathrm{T}}\Sigma\mathbf{u} + \lambda(1 - \mathbf{u}^{\mathrm{T}}\mathbf{u})$를 최대로 하는 $\mathbf{u}$를 찾아라.

- $L(\mathbf{u})$를 $\mathbf{u}$로 미분하면, $\dfrac{\partial L(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} = 2\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{u} - 2\lambda\mathbf{u}$
- $\dfrac{\partial L}{\partial \mathbf{u}} = 0$을 풀면,

$$\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{u} = \lambda\mathbf{u} \qquad (6.22)$$

주성분 분석의 학습 알고리즘

1. 훈련집합으로 공분산 행렬 $\boldsymbol{\Sigma}$를 계산한다.
2. 식 (6.22)를 풀어 d개의 고윳값과 고유 벡터를 구한다.
3. 고윳값이 큰 순서대로 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \cdots, \mathbf{u}_d$를 나열한다. (이들을 주성분이라 부름)
4. q개의 주성분 $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \cdots, \mathbf{u}_q$를 선택하여 식 (6.20)에 있는 행렬 $\mathbf{W}$에 채운다.

6.6.1 주성분 분석

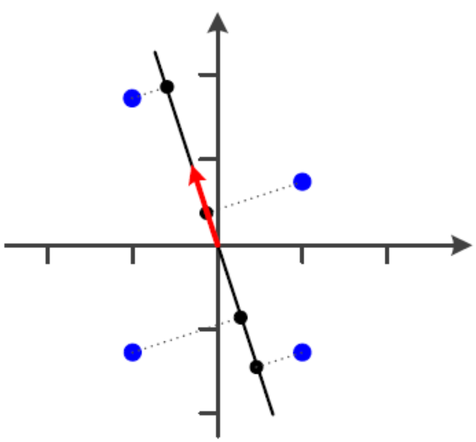
예제 6-3 **PCA 수행**

식 (6.22)를 풀어 [그림 6-18]에 있는 데이터의 최적해를 구해 보자. 먼저 공분산 행렬 $\mathbf{\Sigma}$와 $\mathbf{\Sigma}$의 고윳값과 고유 벡터를 구하면 다음과 같다. 공분산을 구하는 방법은 2장의 식 (2.39)를 참조하라.

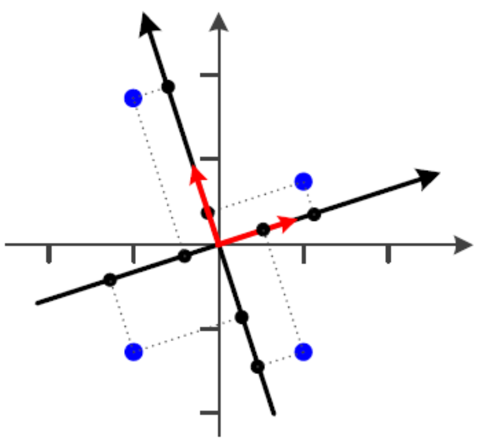
$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} 1.000 & -0.250 \\ -0.250 & 1.688 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = 1.7688, \boldsymbol{u}_1 = \begin{pmatrix} -0.3092 \\ 0.9510 \end{pmatrix}, \ \lambda_2 = 0.9187, \boldsymbol{u}_2 = \begin{pmatrix} -0.9510 \\ -0.3092 \end{pmatrix}$$

고유 벡터 2개 중 고윳값이 큰 $\mathbf{u}_1$을 선택하고, $\mathbf{u}_1$에 샘플 4개를 투영하면 [그림 6-20(a)]가 된다. 변환된 점의 분산은 1.7688로 [그림 6-19]에 있는 축보다 훨씬 크다는 사실을 확인할 수 있다. $\mathbf{u}_1$은 PCA 알고리즘으로 찾은 최적으로서 더 좋은 축은 없다.



(a) 축 1개 사용



(b) 축 2개 사용

그림 6-20 PCA가 찾은 최적 변환

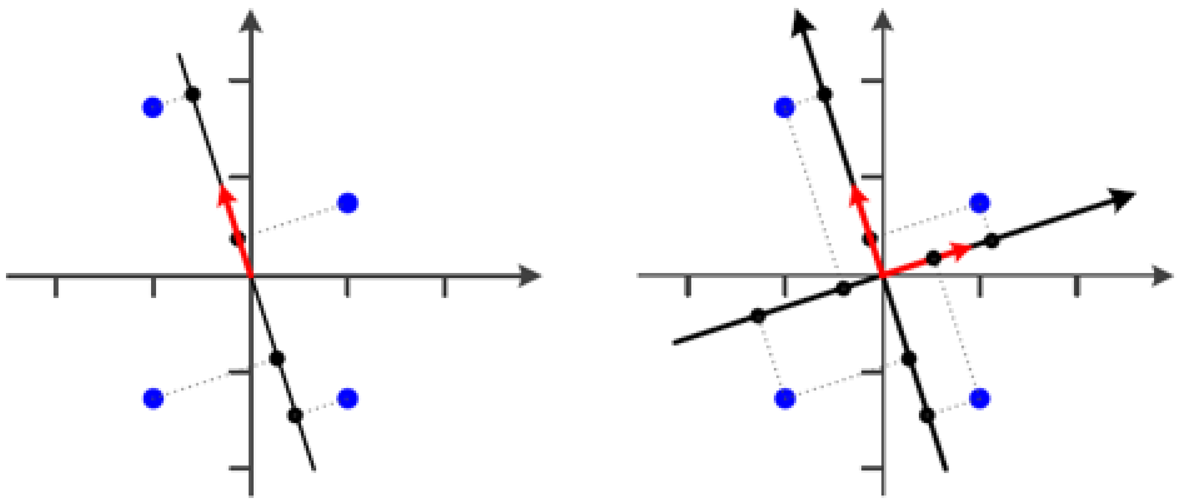
6.6.1 주성분 분석

디코딩 과정

- 역변환은 $\mathbf{x} = \left(\mathbf{W}^{\mathrm{T}}\right)^{-1}\mathbf{z}$인데, $\mathbf{W}$가 정규직교 행렬($\mathbf{W}^{\mathrm{T}} = \mathbf{W}^{-1}$성립)이므로 식 (6.23)이 됨

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{W}\mathbf{z} \tag{6.23}$$

- $q = d$로 설정하면 $\mathbf{W}$가 $d * d$이고 $\tilde{\mathbf{x}}$는 원래 샘플 $\mathbf{x}$와 같게 됨([그림 6-20(b)]의 예시)
  - 원래 공간을 단지 일정한 양만큼 회전하는 것에 불과



(a) 축 1개 사용 (b) 축 2개 사용

그림 6-20 PCA가 찾은 최적 변환

6.6.1 주성분 분석

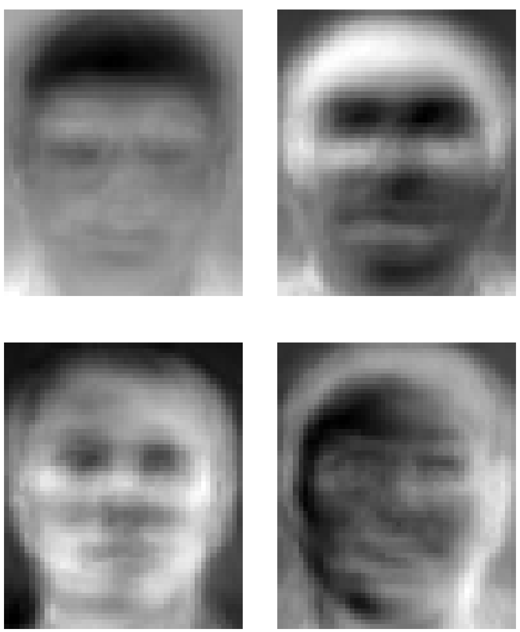
- 실제로는 $q < d$로 설정하여 차원 축소를 꾀함
  - 많은 응용이 있음
    - 데이터 압축
    - $q = 2$ 또는 $q = 3$으로 설정하여 2차원 또는 3차원으로 축소하여 데이터 가시화
    - 고유얼굴 기법: 256*256 얼굴 영상($d = 65536$)을 $q = 7$차원으로 변환하여 얼굴 인식(정면 얼굴에 대해 96% 정확률) → 상위 몇 개의 고유 벡터가 대부분 정보를 가짐

1. 주성분 분석 정보 측정 척도: Z의 분산 최대화하는 축찾기

2. LM 무엇: 조건이 있는 최적화 문제 해결 $f(x) + \lambda(g(x) - c)$

같은 방향 or 90도

$\nabla f \cdot \nabla g = 1$ or -1 반대 방향



6.6.2 독립 성분 분석

■ 블라인드 원음 분리 문제

- 실제 세계에서는 여러 신호가 섞여 나타남([그림 6-21]은 음악과 대화가 섞이는 예)

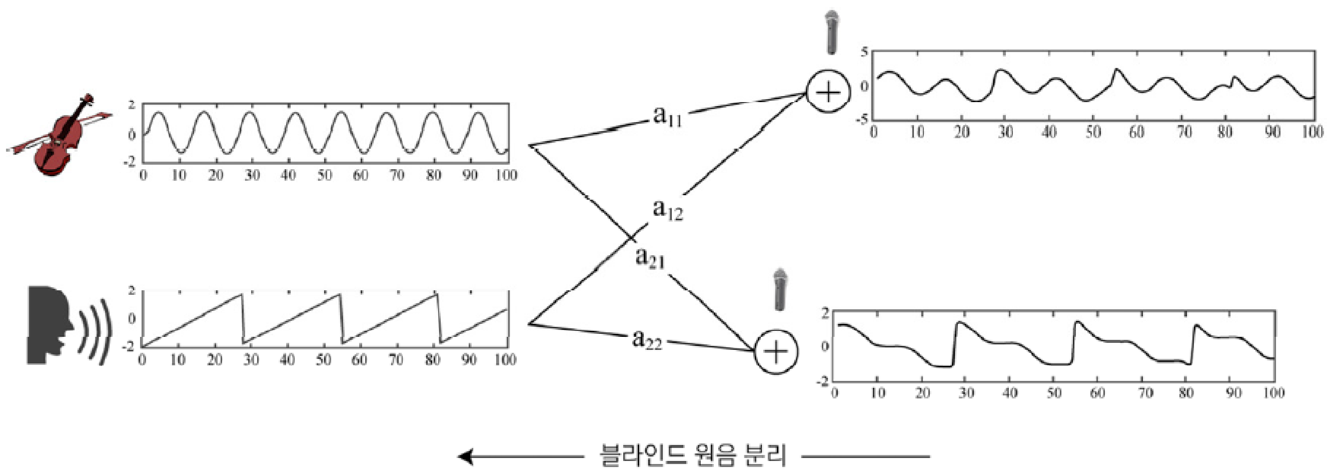


그림 6-21 블라인드 원음 분리 문제

- 마이크로 측정한 혼합 신호로부터 원음(음악과 목소리)을 복원할 수 있나? → 블라인드 원음 분리 문제라 부르며 독립 성분 분석 기법으로 해결 가능
- 아주 많은 예, 뇌파와 다른 장기 신호가 섞인 EEG, 장면과 잡음이 섞인 영상, ...

6.6.2 독립 성분 분석

문제 정의

- 표기
  - 원래 신호를 $z_1(t)$와 $z_2(t)$, 측정된 혼합 신호를 $x_1(t)$와 $x_2(t)$로 표기
  - t 순간에 획득된 $\mathbf{x}_t = (x_1(t), x_2(t))^{\mathrm{T}}$를 훈련 샘플로 취함. 따라서 훈련집합은 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$
- 블라인드 원음 분리 문제는 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$로부터 $\mathbb{Z} = \{\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \cdots, \mathbf{z}_n\}$를 찾는 문제

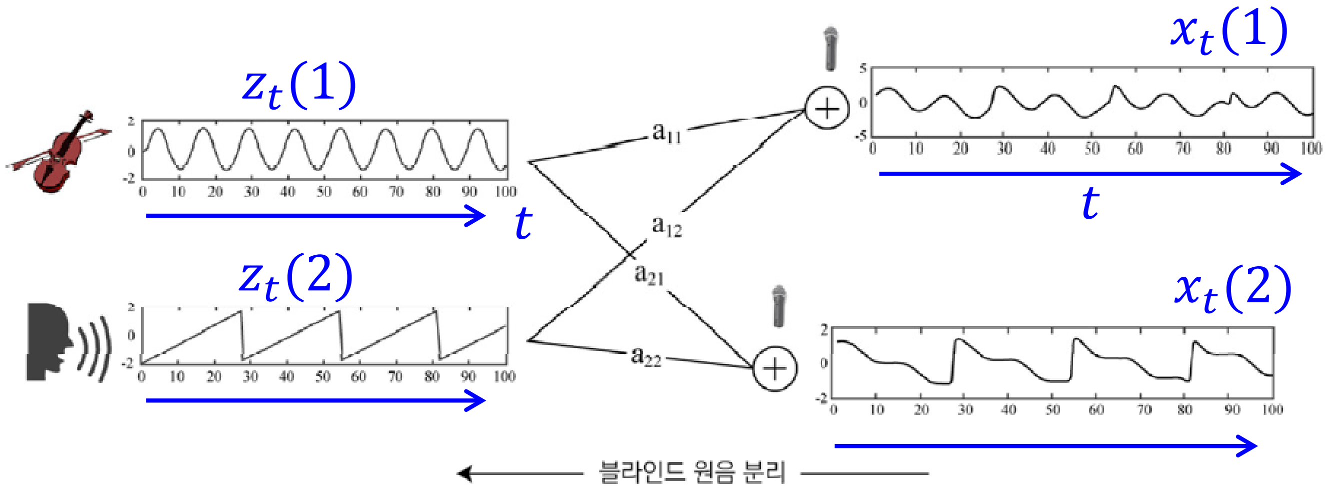


그림 6-21 블라인드 원음 분리 문제

6.6.2 독립 성분 분석

- 문제 공식화
  - 혼합 신호 $\mathbf{x}$를 원래 신호 $\mathbf{z}$의 선형 결합으로 표현 가능($z_1(t)$와 $z_2(t)$가 독립이라는 가정)

$$\left.\begin{array}{l} x_1 = a_{11}z_1 + a_{12}z_2 \\ x_2 = a_{21}z_1 + a_{22}z_2 \end{array}\right\} \quad (6.24)$$

  - 행렬 표기로 쓰면,

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{z} \quad (6.25)$$

  - 블라인드 원음 분리 문제란 $\mathbf{A}$를 구하는 것. $\mathbf{A}$를 알면, 식 (6.26)으로 원음 복원

$$\tilde{\mathbf{z}} = \mathbf{W}\mathbf{x}, \quad \text{이때} \quad \mathbf{W} = \mathbf{A}^{-1} \quad (6.26)$$

- 식 (6.25)는 과소 조건 문제 (ill-posed problem)
  - 정수 하나를 주고 어떤 두 수의 곱인지 알아내라는 문제와 비슷함 (예를 들어, 32는 1*32, 2*16, 4*8 등 여러 답이 가능) ← 추가 조건을 주면 유일 해가 가능
  - 문제도 과소 적합
  - 추가 조건을 이용하여 식 (6.25)의 해를 찾음 → 독립성 가정과 비가우시안 가정

6.6.2 독립 성분 분석

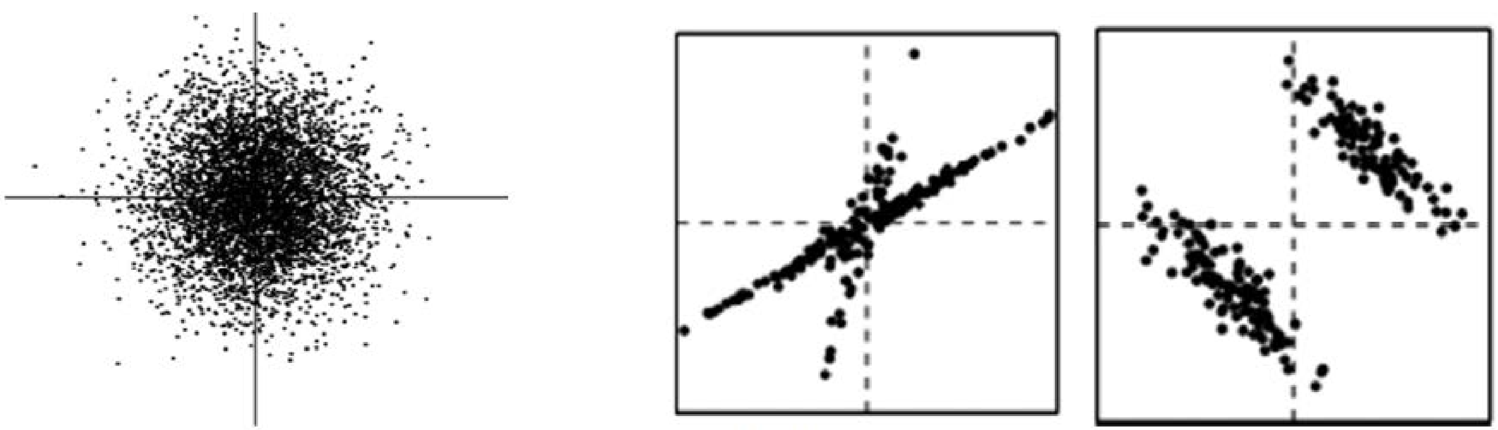
독립성 가정

- 원래 신호가 서로 독립이라는 가정(예, 음악과 대화는 서로 무관하게 발생함)

$$P(\mathbf{z}) = P(z_1, z_2, \cdots, z_d) = \prod_{j=1}^{d} P(z_j) \qquad (6.27)$$

비가우시안 가정

- 원래 신호가 가우시안이라면 혼합 신호도 ([그림 6-22(a)]처럼) 가우시안이 되므로 분리할 실마리 없음. 비가우시안이면 ([그림 6-22(b)]처럼) 실마리가 있음



(a) 확률변수가 가우시안일 때 (b) 확률변수가 비가우시안일 때

그림 6-22 서로 독립인 두 확률변수의 결합 분포

6.6.2 독립 성분 분석

ICA의 문제 풀이

- 원래 신호의 비가우시안인 정도를 최대화하는 가중치를 구하는 전략 사용
  - 원래 신호를 식으로 쓰면,

$$\left.\begin{array}{l} z_j = w_{j1}x_1 + w_{j2}x_2 \\ \text{행렬 형태로 쓰면 } z_j = \mathbf{w}_j\mathbf{x} \end{array}\right\} \qquad (6.28)$$

  - 비가우시안을 최대화하는 가중치를 구하는 식을 쓰면,

$$\hat{\mathbf{w}}_j = \underset{\mathbf{w}_j}{\operatorname{argmax}}\, \breve{G}(\mathbb{z}_j) \qquad (6.29)$$

    – $\breve{G}$는 비가우시안 정도를 측정하는 함수
    – 주로 식 (6.31)의 첨도(Kurtosis)를 사용

$$kurtosis(\mathbb{z}_j) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} z_{ji}^4 - 3\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} z_{ji}^2\right)^2 \qquad (6.31)$$

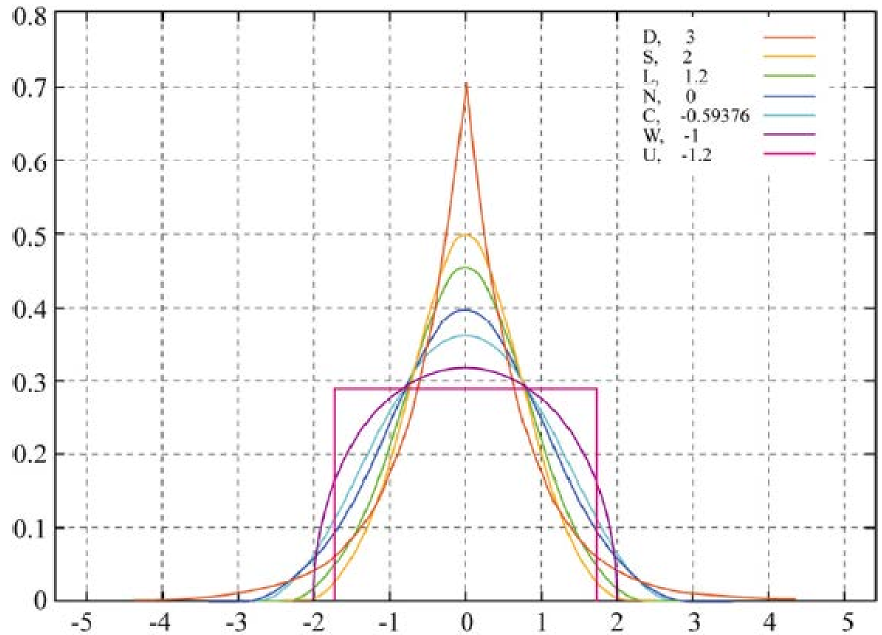


그림 6-23 여러 가지 분포의 첨도 측정

6.6.2 독립 성분 분석

ICA 학습

1. 전처리 수행
   - 훈련집합 $\mathbb{X}$의 평균이 $\mathbf{0}$이 되도록 이동(식 (6.19) 적용)
   - 식 (6.30)의 화이트닝 (PCA를 통해 uncorrelated 된 정규 분포 생성)변환 적용

x와 y의 관계가 없음

$$\mathbf{x}_i' = \left(\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{x}_i,\ i = 1,2,\cdots,n \qquad (6.30)$$

분산 0, 평균 1로 만듦

2. 식 (6.29)를 풀어 최적 가중치 구함

PCA와 ICA 비교

변환된 축간의 상관 X

- ICA는 비가우시안과 독립성 가정, PCA는 가우시안과 비상관을 가정
- ICA는 4차 모멘트까지 사용, PCA는 2차 모멘트까지 사용

z^4 z^2

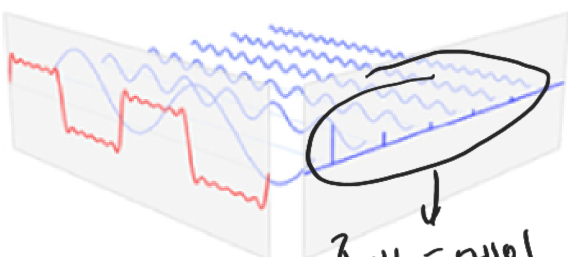
- ICA로 찾은 축은 수직 아님, PCA로 찾은 축은 서로 수직
- ICA는 주로 블라인드 원음 분리 문제를 푸는데, PCA는 차원 축소 문제를 품

목소리+음악 : 음악 제거

6.6.3 희소 코딩(sparse coding) Sparse : 계산량 감소
정규화에 효과적

- 기저함수(basis function) 또는 기저 벡터(basis vector)의 선형 결합으로 신호를 표현
  - 푸리에 변환([그림 6-24(a)) 또는 웨이블릿 변환 등
- 희소 코딩
  - 사전 $\mathbf{D}$를 구성하는 기저 벡터(단어) $\mathbf{d}_1, \mathbf{d}_2, \cdots, \mathbf{d}_m$의 선형 결합으로 신호(영상) $\mathbf{x}$를 표현

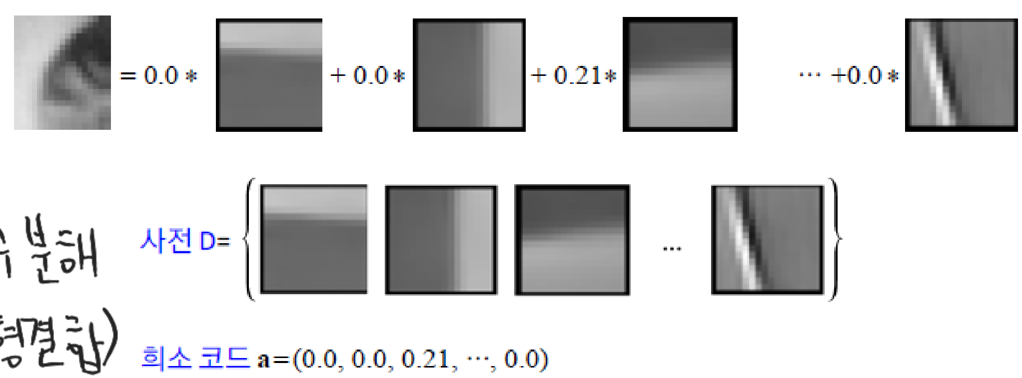
$$\left.\begin{array}{l}\mathbf{x} = \mathbf{D}\mathbf{a} \\ \text{이때 } \mathbf{D} = (\mathbf{d}_1\ \mathbf{d}_2 \cdots \mathbf{d}_m)\end{array}\right\} \tag{6.32}$$



주파수 도메인

주파수 분해
(선형결합)

(a) 푸리에 변환



(b) 희소 코딩

그림 6-24 신호를 기저함수 또는 기저 벡터의 선형 결합으로 근사 표현

6.6.3 희소 코딩 → PCA보다 압축 성능이 좋음

- 희소 코딩이 다른 변환 기법과 다른 점
  - 비지도 학습이 사전(즉 기저 벡터)를 자동으로 알아냄(푸리에 변환은 삼각함수를 사용함)
    → 희소 코딩은 데이터에 맞는 기저 벡터를 사용하는 셈
  - 사전의 크기를 과잉 완벽(over complete)하게 책정($m > d$) basis patch 복원하는데 필요한 patch보다 많은 basis 사용 → sparse ↑
  - 희소 코드 $\mathbf{a}$를 구성하는 요소 대부분이 0 값을 가짐
- 희소 코딩 구현
  - 최적의 사전과 최적의 희소 코드를 알아내야 함
  - ϕ는 희소 코드의 희소성을 강제하는 규제항 (보통 L_1 놈 사용)

$$\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{A}} = \underset{D,A}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{D}\mathbf{a}_i\|_2^2 + \lambda\phi(\mathbf{a}_i) \tag{6.33}$$

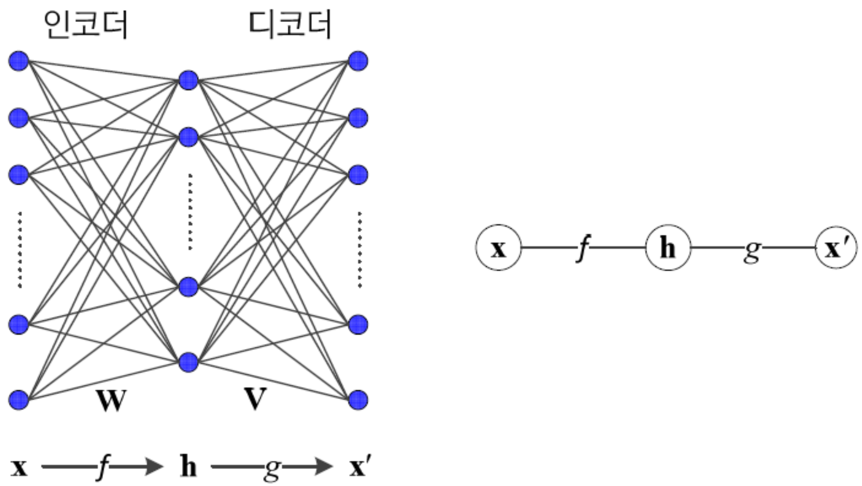
6.7 오토인코더

- 6.7.1 규제 오토인코더
- 6.7.2 적층 오토인코더

6.7 오토인코더

오토인코더

- 특징 벡터 **x**를 입력 받아 동일한 또는 유사한 벡터 **x**′를 출력하는 신경망



(a) 오토인코더의 구조와 동작 (b) 축약형

그림 6-25 오토인코더

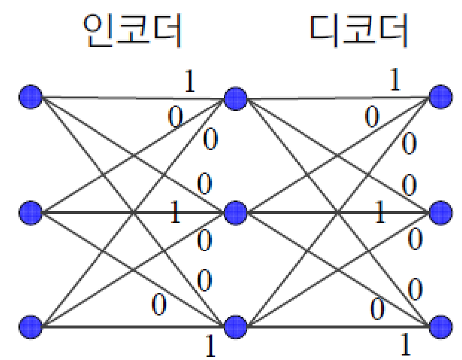


그림 6-26 단위 행렬로 오토인코더 구현

- 단순 복사하는 단위 행렬([그림 6-26])은 무의미

$$\mathbf{x} = g\left(f(\mathbf{x})\right) = \mathbf{VWx} = \mathbf{IIx}$$

- 여러 가지 규제 기법 적용하여 유용한 신경망으로 활용

6.7 오토인코더

병목 구조 오토인코더의 동작 원리

- $m < d$인 구조(예, 256*256 영상을 입력 받아 256*256 영상을 출력하는 경우 $d = 65536$인데 $m = 1024$로 설정)
- 은닉층의 $\mathbf{h}$는 훨씬 적은 메모리로 데이터 표현. 필요하면 디코더로 원래 데이터 복원
- $\mathbf{h}$는 $\mathbf{x}$의 핵심 정보를 표현 → 특징 추출, 영상 압축 등의 응용

여러 형태의 오토인코더

- 은닉 노드의 개수에 따라 $m < d$, $m = d$, $m > d$ 구조
- 활성함수에 따라 선형(식 (6.34))과 비선형(식 (6.35))

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{h} &= f(\mathbf{x}) = \mathbf{W}\mathbf{x} \\ \mathbf{x} &= g(\mathbf{h}) = \mathbf{V}\mathbf{h} \end{aligned}\right\} \tag{6.34}$$

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{h} &= f(\mathbf{x}) = \tau_{encode}(\mathbf{W}\mathbf{x}) \\ \mathbf{x} &= g(\mathbf{h}) = \tau_{decode}(\mathbf{V}\mathbf{h}) \end{aligned}\right\} \tag{6.35}$$

6.7 오토인코더

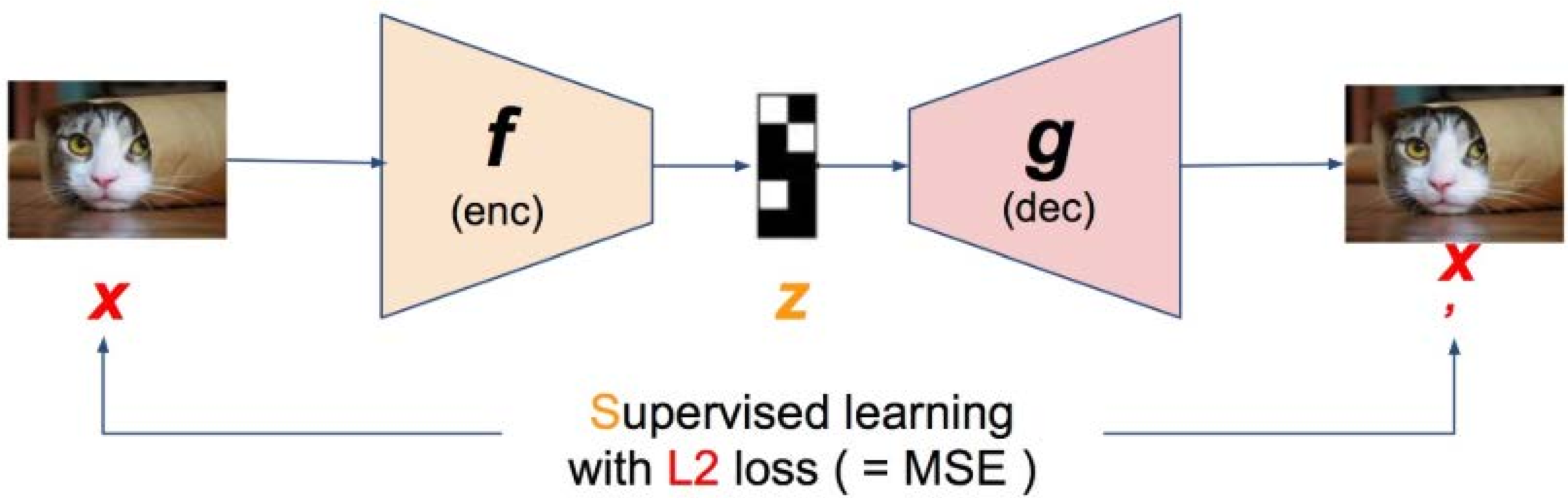
■ 오토인코더의 학습

- 주어진 데이터는 훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$, 알아내야 하는 매개변수는 f와 g라는 매핑 함수, 즉 가중치집합 $\Theta = \{\mathbf{W}, \mathbf{V}\}$

- 오토인코더 학습을 최적화 문제로 쓰면,

$$\hat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} L\left(\mathbf{x}_i, g\left(f(\mathbf{x}_i)\right)\right) \tag{6.36}$$

$$L\left(\mathbf{x}_i, g\left(f(\mathbf{x}_i)\right)\right) = \|\mathbf{x}_i - g(f(\mathbf{x}_i))\|_2^2 \tag{6.37}$$



6.7.1 규제 오토인코더

- 여러 규제 기법을 적용
  - $m > d$인 상황에서도 단순 복사를 피할 수 있음 ← 충분히 큰 모델을 사용하되 적절한 규제 기법을 적용하는 현대 기계 학습 추세를 오토인코더로 따르는 셈
- SAE(sparse autoencoder)
  - 은닉 벡터 $\mathbf{h}_i$가 희소하도록 강제화(0이 아닌 요소의 개수를 적게 유지)
  - $\phi(\mathbf{h}_i)$는 벡터 $\mathbf{h}_i$가 희소하도록 강제하는 규제항

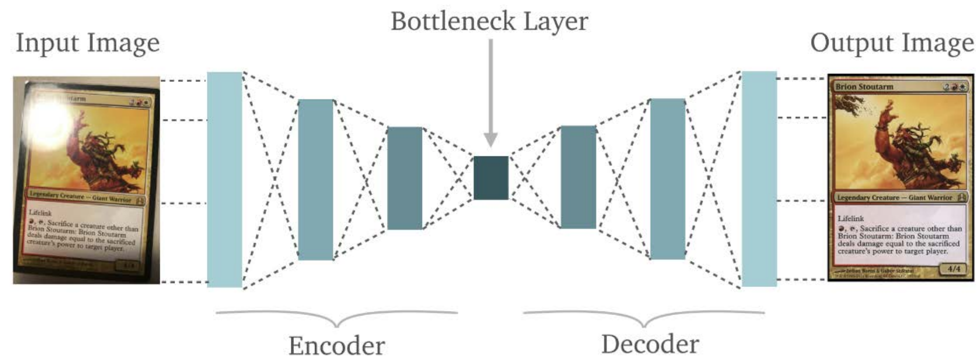
$$\text{SAE: } \widehat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} L\left(\mathbf{x}_i, g\left(f(\mathbf{x}_i)\right)\right) + \lambda\phi(\mathbf{h}_i) \tag{6.38}$$

- DAE(denoising autoencoder)
  - 잡음을 추가한 다음 원본을 복원하도록 학습하는 원리
  - 특징 벡터 $\mathbf{x}_i$에 적절한 양의 잡음을 추가한 $\tilde{\mathbf{x}}_i$를 입력으로 사용

$$\text{DAE: } \widehat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^{n} L\left(\mathbf{x}_i, g\left(f(\tilde{\mathbf{x}}_i)\right)\right) \tag{6.39}$$

6.7.1 규제 오토인코더

- 다양한 응용
  - 영상 복원, 영상 편집
  - 시각화, 군집화



잡음을 잘 걸러냄