

04.01 함수

04.01 함수

0) 연속과 불연속

불연속 : 함수의 값이 중간에 갑자기 변하는 것(discontinuous)

- 부호함수, 단위계단함수, 지시함수

연속 : 그렇지 않은 것

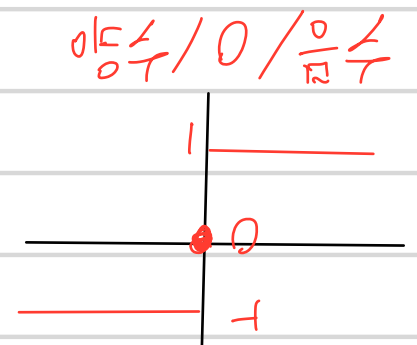
1. 입력이 1개인 경우

1) 부호함수

- 입력이 양수이면 1, 음수이면 -1, 0이면 0 출력

- `np.sign()`

- 표시 : `sgn(x)`

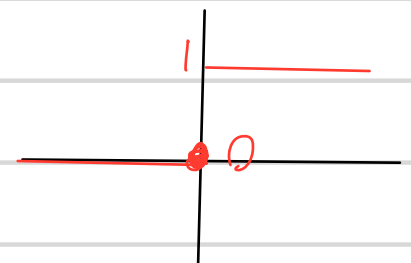


2) 단위계단함수

- 양수이면 1, 아니면 0 출력

- 직접 구현(넘파이 구현x)

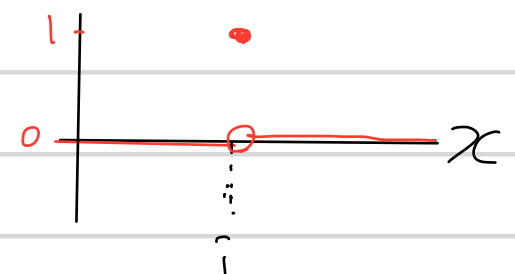
- `H(x)`



3) 지시함수(indicator function)

- 1 (if $x=i$)

- 0 (if $x \neq i$)



04.01 함수

1. 데이터분석에서 많이 사용되는 함수들

1) 다항함수 (polynomial)

2) 최대함수와 최소함수

- ReLU (Rectified Linear Unit)

3) 지수함수

- 단조증가 $X1 > X2$ 이면, $\exp(X1) > \exp(X2)$

4) 로지스틱함수

- 시그모이드 함수 중 하나 (로지스틱함수가 제일 많이 쓰임)
- 그래프 그려보기

5) 로그함수

- 단조증가
- 확률론에서 가장 많이 사용되는 함수

1) 로그함수는 곱하기를 더하기로 변환함 $\log AB = \log A + \log B$

2) 어떤 함수에 로그를 적용해도 함수의 최고점, 최저점의 위치는 변하지 않음
(최적화 시, 로그 취한 함수에 대해 최적화 가능)

3) 로그함수는 0부터 1사이의 작은 값을 확대시켜 보여준다.

6) 소프트플러스 함수

- 지수함수와 로그함수의 결합(ReLU와 유사)

2. 입력이 여러개인 경우

04.01 함수

7) 다변수 함수

- $z = f(x,y)$

(높이, 거리, 군)

- 2차원 함수는 평면상의 지면과 같기 때문에, 3차원의 서피스 플롯(surface plot),
컨투어 플롯(contour, 등고선 plot) 으로 표현

8) 분리가능 다변수 함수

- 단변수 함수의 곱으로 표현 가능한 다변수 함수

= 분리가능 다변수 함수(단변수로 분리가능하다는 의미)

- $f(x,y) = f_1(x)f_2(y)$

3. 다변수 다출력 함수

9) 입력과 출력모두 여러개 <== 이 경우, 출력을 벡터나 행렬로 나타낼 수 있음

ex) 소프트맥스 함수

- 소프트맥스 함수 : 다차원 벡터를 입력받아, 다차원 벡터를 출력

- 소프트맥스 함수 특징

1) 지수함수로 다 감싸고 있기 때문에, 출력값은 항상 양수

2) 각 출력값은 0과 1사이이고, 모든 출력(출력값이 여러개, 벡터를 이룸)의 합은

1이다. => 확률이 아닌 것을 확률처럼 보이게 함

4. 함수의 평행이동, 스케일링

10) 단변수함수 ($f(x) = (x+2)**2 + 2x$) 를 오른쪽으로 a만큼, 위로 b만큼 평행이동
시키기

11) x축 방향으로 a배 만큼 늘리기 / y축 방향으로 b배 만큼 늘리기
(ex_로지스틱함수)

04.02 심파이를 1) 미분 목적 1 : 예측 모형의 성능

사용한 함수 미분 - 오류의 크기 출력하는 함수

손실함수(loss function), 비용함수(cost function), 오차함수(error function)

==> 최적화의 대상이 되는 함수(목적함수)

*최적화 : 목적함수의 max값, min값을 만들어내는 모수(입력값)을 구하는 것
(미분을 통해서)

2) 기울기 (민감도, sensitivity, slope)

3) 수치미분

$$\textcircled{B} \cdot \frac{1}{h} \cdot \frac{1}{h} \cdot \textcircled{A}$$

① 계산, ② 계산 → 17 줄이 2 줄이

4) 미분

- 도함수(f')와 미분($f'(x)$)

- 미분 가능, 미분 불가능

ex) ReLU함수 -> 미분 불가능 (대안 : softplus 함수)

- 연속의 기준 : 함수값 = 우극한값 = 좌극한값

- 미분가능 기준 : 좌미분계수($h \rightarrow +0$) \neq 우미분계수($h \rightarrow -0$)

- 상수, 거듭제곱, 로그함수, 지수함수 미분

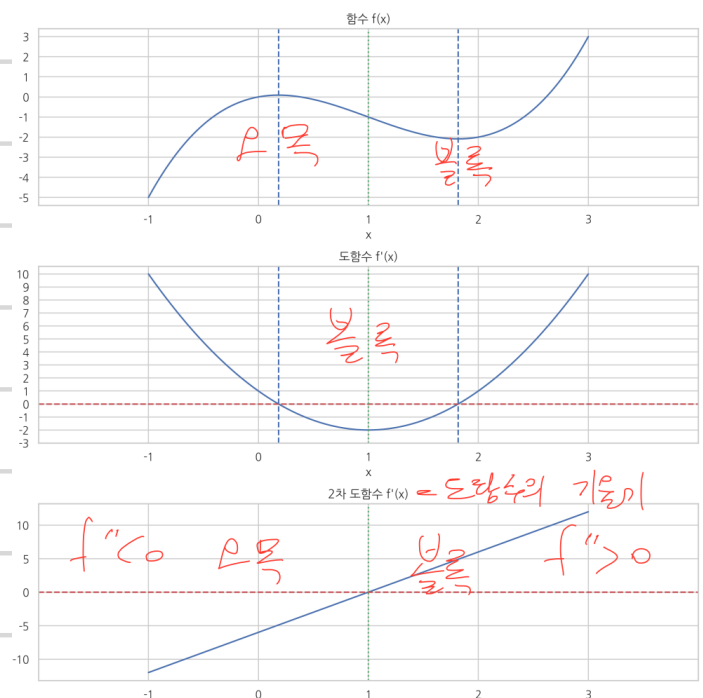
5) 미분 곱셈법칙, 체인룰

6) 2차도함수와 Convexity

- 2차도함수 $> 0 \iff$ 볼록

- 2차도함수 = 도함수의 기울기, 도함수값이 증가하면 2차도함수(기울기) 값은 양수, 감소하면 2차도함수(기울기) 값은 음수

- 04.02 13page, 15page



04.02 심파이를
사용한 함수 미분

7) 편미분

- 편미분 시에는, 델타 대신 라운드를 사용해 표기

8) 이차 편미분

- (슈와르츠 정리) f 함수가 연속 + 미분 가능하면, $f_{xy} = f_{yx}$ 이다. 미분의 순서는 상관 없다.
- ex) ReLU함수는 미분불가능 하기 때문에 해당 안됨.

9) 테일러 정리 (=테일러 전개, 테일러 급수)

- 테일러 정리 = 한 점에서의 직선의 방정식
- 함수를 근사할 때 사용됨 (테일러 정리 = Taylor approximation)

- 우리가 잘 모르거나 복잡한 함수를 테일러 전개를 통해 비교적 다루기 쉬운 다항함수로 대체하기 위해 쓰인다. 이렇게 어떤 함수를 테일러 급수로 바꿔 표현하면, 그 함수의 특성을 분석/이해하기 더 쉬운 경우가 있기 때문에 종종 쓰이는 것

- 모든 함수를 다 테일러 급수로 표현할 수 있는건 아니고 $f(x)$ 가 $x=x_0$ 인 곳에서 미분 가능하면 저렇게 표현하는 것이 가능하다.

즉, 함수가 모든 구역에서 미분될 필요 없고, anchor point(x_0) 에서만 미분되어도 테일러 전개로 근사할 수 있다는 것이다.

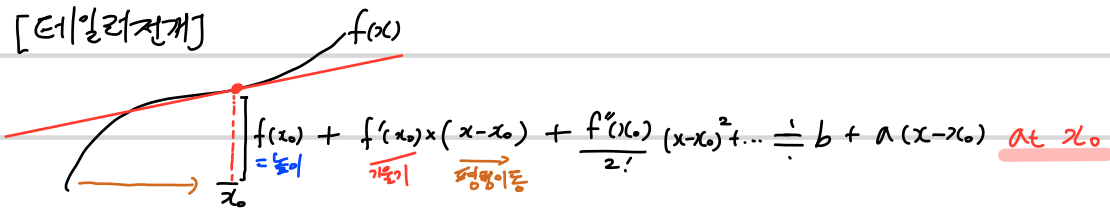
"테일러 급수를 활용하면 한 점에서만 미분 가능해도 함수값을 구할 수 있다"는 것은 아주아주 매력적이다.

04.02 심파이를 사용한 함수 미분

- 테일러 급수 식

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(x_0)(x-x_0)^2}{2!} + \dots$$

- 테일러 급수 식 이해



- 테일러 급수 식 (다변수 함수 경우)

$$f(x, y) \approx f(x_0, y_0) + \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x}(x - x_0) + \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y}(y - y_0)$$

- 맥클로린 급수 식

$x_0 = 0$ 일 때, 가장

$$f(x) \approx f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)x^2}{2!} + \dots$$

10) sympy - symbolic 연산

- x라는 문자를 문자 그대로 인정하는 것(symbolize)
- $x = 2$ 처럼, 문자에 숫자 대입하면 망가짐

04.03 적분

04.03 적분

1) 부정적분

- 부정적분 : anti-derivative

- 편미분의 부정적분

4.3.6

- 다차도함수와 다중적분

4.3.10

2) sympy 이용한 부정적분

3) 정적분

- 면적을 구하는 것 (부정적분은 함수를 구하는 과정. 정적분은 면적(수치)를 구하는 과정)

- 4.3.14

4) 다변수 정적분

- 4.3.18

5) 다차원 함수의 단일 정적분

- 4.3.22

04.04 행렬의 미분

- 스칼라, 벡터, 행렬 모두 입력과 출력에 사용가능

- 행렬 미분 : 행렬을 입력이나 출력으로 갖는 함수를 미분하는 것
(정확하게는 편미분을 하는 것)

- 분모중심 표현법(Denominator-layout notation)을 활용할 것

1) *스칼라를 벡터로 미분하는 경우*

- 다변수 함수 : 벡터 입력 --> 스칼라 출력 (f = 스칼라, 입력변수인 벡터로 결과 값을 미분(스칼라를 미분), 편미분)

- 다변수 함수의 미분 : 기울기가 변수의 갯수만큼 생성(편미분)

- 스칼라의 벡터미분 : 그래디언트 벡터(기울기로 이루어진 벡터)

$$\nabla f = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_N} \end{bmatrix}$$

2) 컨투어플롯, 쿼버플롯, 그래디언트 벡터

- 컨투어플롯 : 등고선, 2차원함수의 평면상 표기 플롯

- 쿼버플롯 : 벡터로 현 위치에서 경사 높은 방향 보여줌

(컨투어플롯 위에 그래디언트 벡터를 화살표로 나타낸 것)

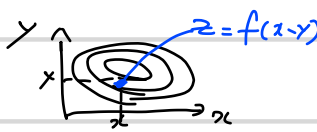
- 그래디언트 벡터 : 다변수 함수의 출력값(스칼라)를 벡터로 미분해서 얻은 벡터
(각 원소는 1차 편미분값. 기울기. 현재 위치의 기울기. 증감 여부)

변수 개수만큼
기울기 생성
⇒ 그래디언트 벡터

<컨투어 플롯> 등고선 표기
: 2차원 함수의 평면상 표기 플롯

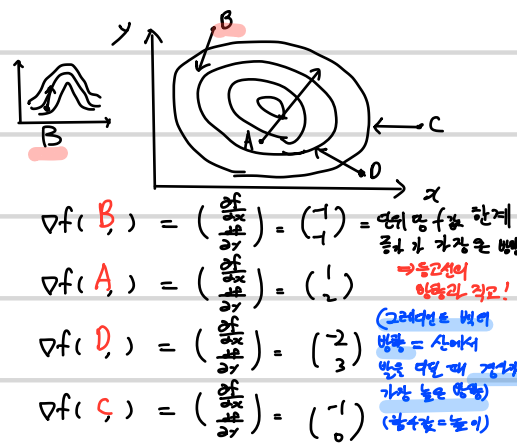
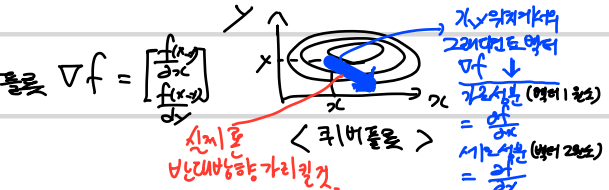
ex) 2차원 함수

$$z = f(x, y)$$



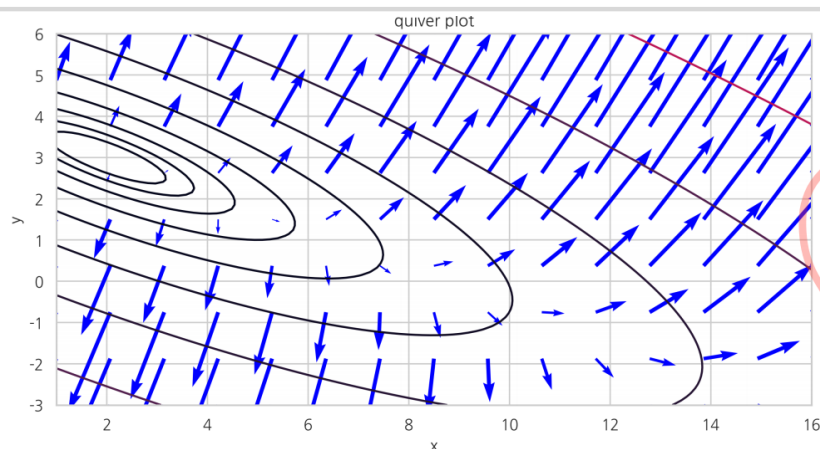
<쿼버 플롯>

: 컨투어 플롯 위에
그래디언트 벡터를
화살표로 나타낸 플롯



- 쿼버플롯의 역할 : 쿼버플롯을 보고 실제 곡면의 모양을 유추할 수 있어야함

*4page필기



<곡면의 모양>

⇒ '분지' 일 것

3) 행렬미분법칙

04.04 행렬의 미분

[주요 공식 정리] (04.04 11page)

<정리>

$$1. \nabla f = \frac{\partial f}{\partial x_i}$$

$$W^T x$$

벡터 \rightarrow 스칼라

$$(W^T)^T$$

$$x^T A x$$

벡터 \rightarrow 스칼라

$$(A + A^T) x$$

$$2. J f(x) = \begin{bmatrix} -\nabla f_1^T \\ -\nabla f_2^T \\ \vdots \\ -\nabla f_m^T \end{bmatrix}$$

$$A x$$

벡터 \rightarrow 벡터

$$(A)^T$$

$$\text{tr}(AX)$$

행렬 \rightarrow 스칼라

$$(A)^T$$

$$3. H = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$$

$$\log |X|$$

행렬 \rightarrow 스칼라

$$(X^{-1})^T$$

[스칼라를 벡터로 미분 : 다변수함수 (선형모형, 이차형식)]

1) 선형모형 ($W \cdot T \cdot x$)

- f : 스칼라 / input : 벡터 x / f 를 벡터로 미분 (스칼라를 벡터로 미분)

- 04.04 5page

행렬미분법칙 1: 선형 모형

선형 모형을 미분하면 그레디언트 벡터는 가중치 벡터이다.

· 벡터 \rightarrow 스칼라

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \nabla f \quad (4.4.25)$$

$$\nabla f = \frac{\partial w^T x}{\partial x} = \frac{\partial x^T w}{\partial x} = w \quad (4.4.26)$$

(증명)

$$\frac{\partial (w^T x)}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial (w_1 x_1 + \dots + w_N x_N)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial (w_1 x_1 + \dots + w_N x_N)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial (w_1 x_1 + \dots + w_N x_N)}{\partial x_N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_N \end{bmatrix} = w$$

2) 이차형식 ($x \cdot T \cdot A \cdot x$)

- f : 스칼라 / input : 벡터 x / f 를 벡터로 미분 (스칼라를 벡터로 미분)

- 04.04 6page, 8page

행렬미분법칙 2: 이차 형식

이차 형식을 미분하면 행렬과 벡터의 곱으로 나타난다.

· 벡터 \rightarrow 스칼라

$$f(x) = x^T A x \quad (4.4.28)$$

$$\nabla f(x) = \frac{\partial x^T A x}{\partial x} = (A + A^T) x \quad (4.4.29)$$

[벡터를 스칼라로 미분 : 여러 함수에 입력]

- 각 벡터의 원소를 스칼라로 미분 (표시는 행벡터로 표시. 그레디언트벡터와 헷갈

리지 않도록)

- 04.04 8page

벡터를 스칼라로 미분하는 경우

벡터

스칼라

벡터

$$x_1 \begin{cases} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{cases} \quad f(x) = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_M \end{bmatrix} \quad (4.4.35)$$

를 스칼라 x 로 미분하는 경우에는 결과를 행 벡터로 표시한다.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \left[\frac{\partial f_1}{\partial x} \quad \frac{\partial f_2}{\partial x} \quad \dots \quad \frac{\partial f_M}{\partial x} \right] \quad (4.4.36)$$

[벡터를 벡터로 미분]

- 04.04 8page

벡터를 벡터로 미분하면 미분을 당하는 벡터의 원소가 여러개($i = 1, \dots, N$)이고 미분을 하는 벡터의 원소도 여러개($j = 1, \dots, M$)이므로 미분의 결과로 나온 도함수는 2차원 배열 즉, 행렬이 된다.

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial x} & \dots & \frac{\partial f_N}{\partial x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_N}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_N}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_M} & \frac{\partial f_2}{\partial x_M} & \dots & \frac{\partial f_N}{\partial x_M} \end{bmatrix} \quad (4.4.37)$$

04.04 행렬의 미분

다차원함수의
1차미분
(기울기, ∇)

다차원함수의
2차미분
(곡률)

3) 행렬과 벡터의 곱(Ax)의 미분 : 벡터를 벡터로 미분

- 04.04 9page

행렬미분법칙 3: 행렬과 벡터의 곱의 미분

행렬 A 와 벡터 x 의 곱 Ax 를 벡터 x 로 미분하면 행렬 A^T 가 된다.

$$f(x) = Ax$$
$$\nabla f(x) = \frac{\partial(Ax)}{\partial x} = A^T \tag{4.4.38}$$

(증명)

$$Ax = c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_Mx_M \tag{4.4.40}$$
$$\frac{\partial(Ax)}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(Ax)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial(Ax)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial(Ax)}{\partial x_M} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial(c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_Mx_M)}{\partial x_1} \\ \frac{\partial(c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_Mx_M)}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial(c_1x_1 + c_2x_2 + \dots + c_Mx_M)}{\partial x_M} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1^T \\ c_2^T \\ \vdots \\ c_M^T \end{bmatrix} = A^T \tag{4.4.41}$$

- 자코비안 행렬 : 벡터함수를 벡터로 미분해서 생기는 행렬의 전치행렬
- 벡터를 벡터로 미분 = 행렬

(04.04 9page)

$Jf(x)$
=> 그래디언트
벡터들
만들어야함!

함수의 출력변수와 입력변수가 모두 벡터(다차원) 데이터인 경우에는 입력변수 각각과 출력변수 각각의 조합에 대해 모두 미분이 존재한다. 따라서 도함수는 행렬 형태가 된다. 이렇게 만들어진 도함수의 행렬을 **자코비안 행렬(Jacobian matrix)** 이라고 한다. 자코비안 행렬은 벡터함수를 벡터변수로 미분해서 생기는 행렬의 **전치행렬**이다. 따라서 행/열의 방향이 다르다는 점에 유의한다.

$$Jf(x) = J = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^T = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial f_1}{\partial x}\right)^T \\ \vdots \\ \left(\frac{\partial f_M}{\partial x}\right)^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \nabla f_1^T \\ \vdots \\ \nabla f_M^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_M}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_M}{\partial x_N} \end{bmatrix} \tag{4.4.42}$$

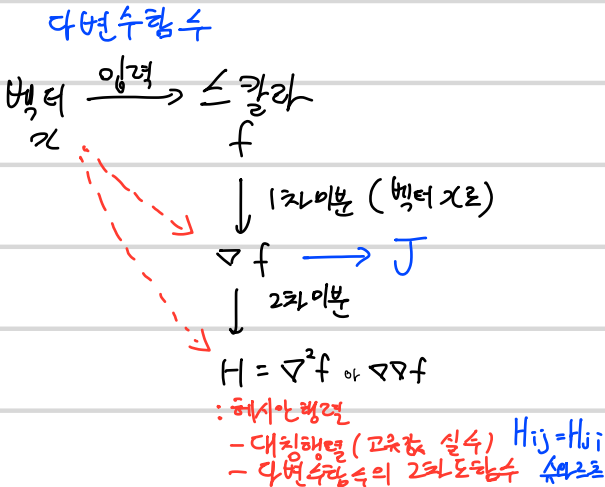
$\left(\frac{\partial f_M}{\partial x}\right)^T = \nabla f_M^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_M}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_M}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f_M}{\partial x_N} \end{bmatrix}^T$

$J = \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)^T = \begin{bmatrix} -\nabla f_1^T \\ \vdots \\ -\nabla f_M^T \end{bmatrix}$

자코비안 = (∇모음)^T

- 헤시안 행렬 : 다변수함수의 2차 도함수 (대칭행렬 <==> 실수 고유값)
- 벡터를 벡터로 미분 = 행렬

(04.04 10page)



- 스칼라를 행렬로 미분
- 행렬 X의 각 원소들로 스칼라를 미분해주면 그만

(04.04 10page)

출력변수 f 가 스칼라값이고 입력변수 X 가 행렬인 경우에는 도함수 행렬의 모양이 입력변수 행렬 X 와 같다.

$$\frac{\partial f}{\partial X} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_{1,1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{1,2}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_{1,N}} \\ \frac{\partial f}{\partial x_{2,1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{2,2}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_{2,N}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_{M,1}} & \frac{\partial f}{\partial x_{M,2}} & \dots & \frac{\partial f}{\partial x_{M,N}} \end{bmatrix}$$

4) 행렬 곱의 대각성분

(04.04 11page)

행렬미분법칙 4: 행렬 곱의 대각성분

두 정방행렬을 곱해서 만들어진 행렬의 대각성분(trace)는 스칼라이다. 이 스칼라를 뒤의 행렬로 미분하면 앞의 행렬의 전치행렬이 나온다.

$$f(X) = \text{tr}(WX) \tag{4.4.49}$$
$$W \in R^{N \times N}, X \in R^{N \times N} \tag{4.4.50}$$
$$\frac{\partial f}{\partial X} = \frac{\partial \text{tr}(WX)}{\partial X} = W^T \tag{4.4.51}$$

(증명)

$$\text{tr}(WX) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_{ji}x_{ij} \tag{4.4.52}$$
$$\frac{\partial \text{tr}(WX)}{\partial x_{ij}} = w_{ji} \tag{4.4.53}$$

5) 행렬식의 로그

(04.04 11page)

행렬식(determinant)은 스칼라값이고 이 값의 로그 값도 스칼라이다. 이 값을 원래의 행렬로 미분하면 원래 행렬의 역행렬의 전치 행렬이 된다.

$$f(X) = \log |X| \tag{4.4.54}$$
$$\frac{\partial f}{\partial X} = \frac{\partial \log |X|}{\partial X} = (X^{-1})^T \tag{4.4.55}$$

[gradient, J, H]

1. gradient 다변수 스칼라 함수의 미분 (차이분은 다변수 함수로 확장)
 (x_1, \dots, x_n) f

2. J 다변수 벡터 함수의 미분 (기울기의 모음)
 (x_1, \dots, x_n) f_1, \dots, f_m

$$\begin{bmatrix} -\nabla f_1^T \\ \vdots \\ -\nabla f_m^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

3. H 다변수 함수의 2차 미분 (곡률 확인 가능)
 (x_1, \dots, x_n) f

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dots & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$

$$\nabla f_i = \frac{\partial f}{\partial x}$$

$$J_{ij} = \left(\frac{\partial f}{\partial x} \right)^T$$

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = H_{ji} \quad (\because \text{슈미트츠})$$

H = 헤시 행렬
(실수 곱셈)

Why $H_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$?

$$\begin{aligned} \bullet \ J f(x) &= \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right)^T = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right)^T = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \\ \bullet \ H_{ij} &= J(\nabla f)^T = \left(\frac{\partial}{\partial x} \nabla f \right)^T = \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial x} \right)^T \end{aligned}$$