다층 퍼셉트론

- 퍼셉트론은 선형 분류기라는 한계
- 선형 분리 불가능한 상황에서는 일정한 양의 오류

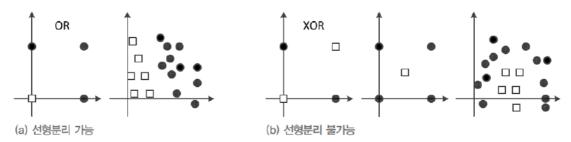
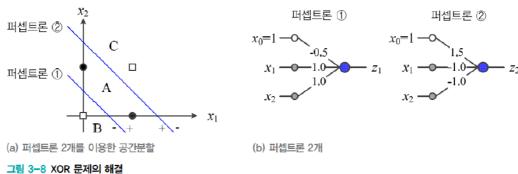


그림 3-7 선형분리가 가능한 상황과 불가능한 상황

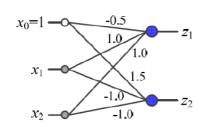
- XOR 문제에서는 75%가 정확률 한계
- 1969년 민스키의 Perceptrons: 극복 방안 제시, 당시 기술로 실현 불가능
- 1974년 웨어보스의 박사 논문에서 오류 역전파 알고리즘 제안
- 1986년 루멜하트의 저서 Parallel Distributed Processing 다층 퍼셉트론 이론 정립, 신경망 부활
- 핵심 아이디어
 - o 은닉층을 둔다. 은닉층은 원래 특징 공간을 분류하는 데 훨씬 유리한 새로운 특징 공간으로 변
 - **시그모이드 활성함수를 도입**한다
 - 계단함수를 활성함수로 사용하면 경성 의사결정에 해당
 - 다층 퍼셉트론은 연성 의사결정이 가능한 **시그모이드 활성함수** 사용
 - 출력이 연속값이고, 출력을 신뢰도로 간주함으로써 더 융통성 있게 의사결정
 - ㅇ 오류 역전파 알고리즘 사용
 - 역방향으로 진행하면서 한 번에 한 층 씩 그레디언트를 계산하고 가중치를 갱신

특징 공간 변환

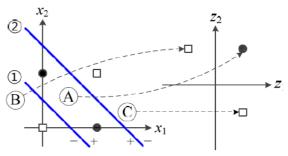
- 퍼셉트론 2개를 사용한 XOR 문제의 해결
 - 퍼셉트론 1과 퍼셉트론 2가 모두 +1이면 O 부류, 아니면 □ 부류



- 퍼셉트론 2개를 **병렬 결합**하면
 - \circ 원래 공간 $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^{\mathrm{T}}$ 를 새로운 특징 공간 $\mathbf{z} = (z_1, z_2)^{\mathrm{T}}$ 로 변환
 - o 새로운 특징 공간 z에서는 선형 분리 가능함







(b) 원래 특징 공간 x를 새로운 특징 공간 z로 변환

그림 3-9 특징 공간의 변환

- ㅇ 사람이 수작업으로 특징 학습을 수행한 것과 유사함
- 이후, 퍼셉트론 1개를 순차 결합하면
 - o 새로운 특징 공간 z에서 선형 분리를 수행하는 퍼셉트론3을 순차 결합하면 다층 퍼셉트론

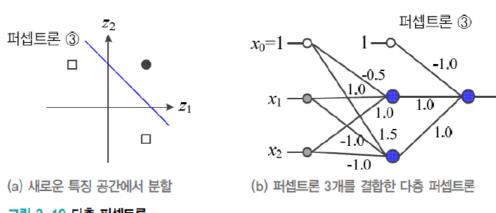


그림 3-10 다층 퍼셉트론

- o 이 다층 퍼셉트론은 훈련집합에 있는 4개 샘플 (0,0) (0,1) (1,0) (1,1)을 제대로 분류하는가?
- 다층 퍼셉트론의 용량
 - o 3개 퍼셉트론을 결합하면, 2차원 공간을 7개 영역으로 나누고 각 영역을 3차원 점으로 변환
 - \circ 활성함수 τ 로 계단함수를 사용하므로 영역을 점으로 변환

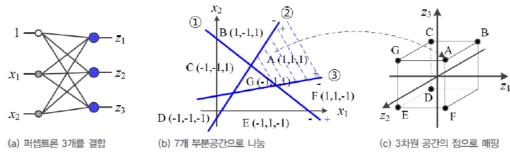


그림 3-11 퍼셉트론을 3개 결합했을 때 공간 변환

- 일반화하여, p개 퍼셉트론을 결합하면 p차원 공간으로 변환
 - 1 + ∑^p_{i=1} i 개의 영역으로 분할

구 조	결정 구역	Exclusive -or	Classes with Meshed Regions	Most General Region Shapes
Single-layer j	Half Plane Bounded by Hyperplane	(A) (B) (B) (A)	B	
Two-layer k j i	Convex Open or Closed Regions	B A	В	
Three-layer l k j i	Arbitrary (Complexity limited by Number of Units)		B	

활성 함수

- 딱딱한 공간 분할과 부드러운 공간 분할
 - ㅇ 계단함수는 딱딱한 의사결정(영역을 점으로 변환)
 - ㅇ 나머지 활성함수는 부드러운 의사결정(영역을 영역으로 변환)

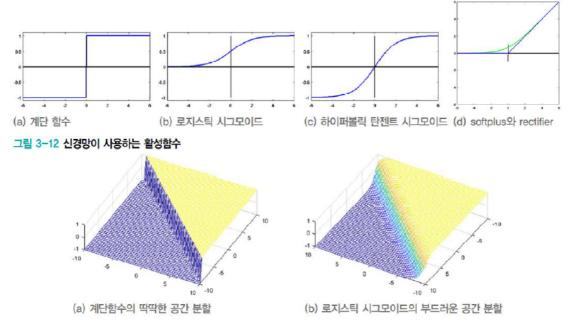
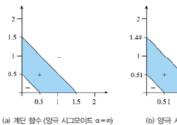


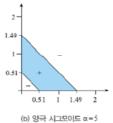
그림 3-13 퍼셉트론의 공간 분할 유형

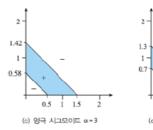
• 대표적인 비선형 함수인 시그모이드를 활성함수로 사용

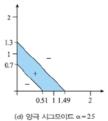
이진 시그모이드 함수:

• 활성 함수에 따른 다층 퍼셉트론의 공간 분할 능력 변화









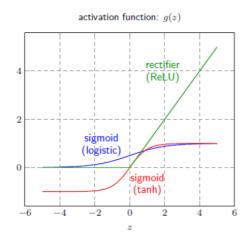
활성 함수에 따른 다층 퍼셉트론의 공간 분할 능력

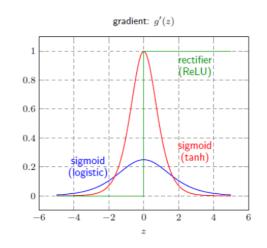
- 신경망이 사용하는 다양한 활성함수
 - 로지스틱 시그모이드와 하이퍼볼릭 탄젠트는 a가 커질수록 계단함수에 가까워짐
 - 모두 1차 도함수 계산이 빠름 (특히 ReLU는 비교 연산 한 번)

표 3-1 활성함수로 사용되는 여러 함수

함수 이름	함수	1차 도함수	범위
계단	$\tau(s) = \begin{cases} 1 & s \ge 0 \\ -1 & s < 0 \end{cases}$	$\tau'(s) = \begin{cases} 0 & s \neq 0 \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{cases} s = 0$	-1과 1
로지스틱 시그모이드	$\tau(s) = \frac{1}{1 + e^{-as}}$	$\tau'(s) = a\tau(s)\big(1-\tau(s)\big)$	(O,1)
하이퍼볼릭 탄젠트	$\tau(s) = \frac{2}{1 + e^{-as}} - 1$	$\tau'(s) = \frac{a}{2}(1 - \tau(s)^2)$	(-1,1)
소프트플러스	$\tau(s) = \log_e(1 + e^s)$	$\tau'(s) = \frac{1}{1 + e^{-s}}$	(0, ∞)
렉티파이어(ReLU)	$\tau(s) = \max(0, s)$	$\tau'(s) = \begin{cases} 0 & s < 0 \\ 1 & s > 0 \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\$	[0, ∞)

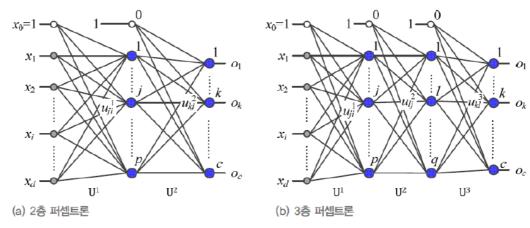
- o 퍼셉트론은 계단함수, 다층 퍼셉트론은 로지스틱 시그모이드와 하이퍼볼릭 탄젠트, **딥러닝**은 **ReLU**(Rectified Linear Activation)를 주로 사용
- 일반적으로 은닉층에서 **로지스틱 시그모이드**를 활성함수로 많이 사용
 - 시그모이드의 넓은 포화곡선은 그레디언트 기반한 학습을 어렵게 함
 - o ReLU 대두됨





구조

- 입력층-은닉층-출력층의 2층 구조
 - o d+1개의 입력 노드(d는 특징의 개수). c개의 출력 노드(c는 부류 개수)
 - o p개의 은닉 노드: p는 하이퍼 매개변수(사용자가 정해주는 매개변수)
 - p가 너무 크면 과잉적합, 너무 작으면 과소적합 ▶ 하이퍼 매개변수 최적화



- o b는 3층구조
- 다층 퍼셉트론의 매개변수 (가중치)
 - \circ 입력층 은닉층을 연결하는 $\mathbf{U}^1 \; (u^1_{ji}$ 은 입력층의 i번째 노드를 은닉층의 j번째 노드와 연결)
 - \circ 은닉층 출력층을 연결하는 $\mathbf{U}^2\left(u_{kj}^2\leftarrow \,\,$ 은닉층의 j번째 노드를 출력층의 k번째 노드와 연결)

2층 퍼셉트론의 가중치 행렬

$$\mathbf{U}^{1} = \begin{pmatrix} u_{10}^{1} & u_{11}^{1} & \cdots & u_{1d}^{1} \\ u_{20}^{1} & u_{21}^{1} & \cdots & u_{2d}^{1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{p0}^{1} & u_{p1}^{1} & \cdots & u_{pd}^{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U}^{2} = \begin{pmatrix} u_{10}^{2} & u_{11}^{2} & \cdots & u_{1p}^{2} \\ u_{20}^{2} & u_{21}^{2} & \cdots & u_{2p}^{2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{c0}^{2} & u_{c1}^{2} & \cdots & u_{cp}^{2} \end{pmatrix}$$
(3.11)

- \circ 일반화하면 u^l_{ji} 은 l-1번째 은닉층의 i번째 노드를 l번째 은닉층의 j번째 노드와 연결하는 가중치
 - 입력층을 0번째 은닉층, 출력층을 마지막 은닉층으로 간주

동작

• 특징 벡터 x를 출력 벡터 o로 매핑하는 함수로 간주할 수 있음

2층 퍼셉트론:
$$\mathbf{o} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_2 \left(\mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \right)$$
 3층 퍼셉트론: $\mathbf{o} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}_3 \left(\mathbf{f}_2 \left(\mathbf{f}_1(\mathbf{x}) \right) \right)$

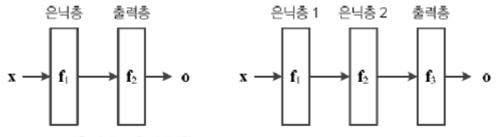


그림 3-15 다층 퍼셉트론을 간략화한 구조

• 깊은 신경망은 $\mathbf{o} = \mathbf{f}_L\left(\cdots\mathbf{f}_2ig(\mathbf{f}_1(\mathbf{x})ig)
ight)$, $L \geq 4$ (딥러닝)

• 노드가 수행하는 연산을 구체적으로 쓰면

j 번째 은닉 노드의 연산:

$$z_j = \tau(zsum_j), \ j = 1, 2, \cdots, p$$
 (3.13)
 $\circ | \mathbb{H} | zsum_j = \mathbf{u}_j^1 \mathbf{x} \circ | \mathbb{L} | \mathbf{u}_j^1 = (u_{j0}^1, u_{j1}^1, \cdots, u_{jd}^1), \ \mathbf{x} = (1, x_1, x_2, \cdots, x_d)^T$

k번째 출력 노드의 연산:

- " \mathbf{u}_j^1 은 j번째 은닉 노드에 연결된 가중치 벡터 (식 (3.11)의 \mathbf{U}^1 의 j번째 행)
- \mathbf{u}_{k}^{2} 는 k번째 출력 노드에 연결된 가중치 벡터 (식 (3.11)의 \mathbf{U}^{2} 의 k번째 행)
- 다층 퍼셉트론의 동작을 행렬로 표기하면

$$\mathbf{o} = \mathbf{\tau} \big(\mathbf{U}^2 \mathbf{\tau}_h(\mathbf{U}^1 \mathbf{x}) \big) \tag{3.15}$$

- 은닉층은 특징 추출기
 - 은닉층은 **특징 벡터**를 분류에 더 유리한 **새로운 특징 공간으로 변환**
 - o 현대 기계 학습에서는 특징 학습이라 (feature learning 혹은 data-driven features) 부름
 - 딥러닝은 더 많은 단계를 거쳐 특징학습을 함

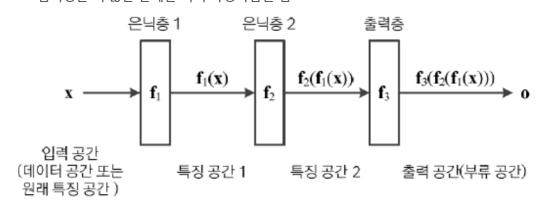
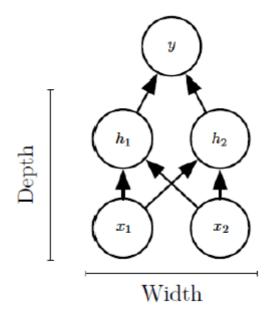
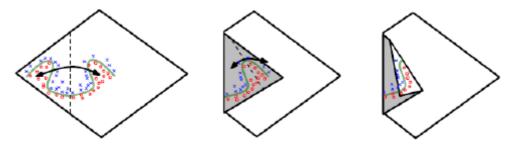


그림 3-16 특징 추출기로서의 은닉층

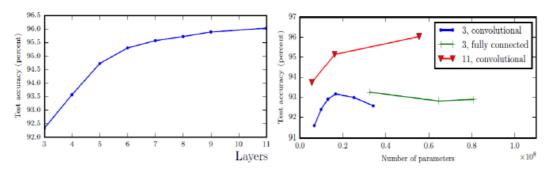
• 기본 구조



- 하나의 **은닉**층은 **함수의 근사**를 표현
- **다층 퍼셉트론도 공간을 변환하는 함수를 근사**함
- **얕은 은닉층의 구조**보다
 - 지수적으로 더 넓은 폭이 필요할 수 있음
 - 더 과잉적합 되기 쉬움
 - 일반적으로 **깊은 은닉층의 구조가 좋은 성능**을 가짐
- 은닉층의 깊이에 따른 이점
 - ㅇ 지수의 표현



- 각 **은닉층**은 입력 **공간을 어디서 접을지 지정** ▶ 지수적으로 **많은 선형적인 영역 조각들**
- 일반화 성능 향상과 과잉적합 해소



오류 역전파 알고리즘

목적함수의 정의

- 훈련집합
 - \circ 특징 벡터 집합 $\mathbb{X}=\{\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2,\cdots,\mathbf{x}_n\}$ 과 부류 벡터 집합 $\mathbb{Y}=\{\mathbf{y}_1,\mathbf{y}_2,\cdots,\mathbf{y}_n\}$
 - \circ 부류 벡터는 원핫 코드로 표현됨, 즉 $\mathbf{y}_i = (0,0,\cdots,1,\cdots,0)^{\mathrm{T}}$
 - ㅇ 설계 행렬로 쓰면

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{1}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{x}_{2}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{n}^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_{1}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{y}_{2}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{n}^{\mathrm{T}} \end{pmatrix}$$
(3.16)

- 기계 학습의 목표
 - 모든 <mark>샘플을 옳게 분류</mark>하는 **함수 f를 찾는 일**

$$\mathbf{Y} = \mathbf{f}(\mathbf{X})$$

풀어 쓰면 $\mathbf{y}_i = \mathbf{f}(\mathbf{x}_i), i = 1, 2, \cdots, n$ (3.17)

- 목적함수
 - o 평균 제곱 오차로 정의

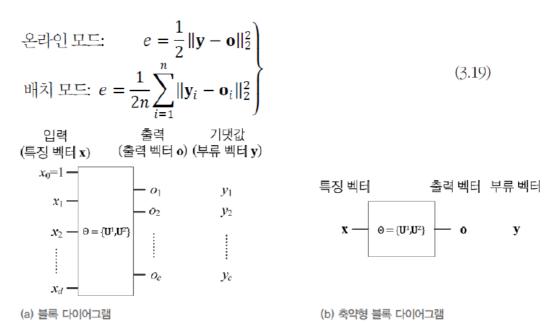
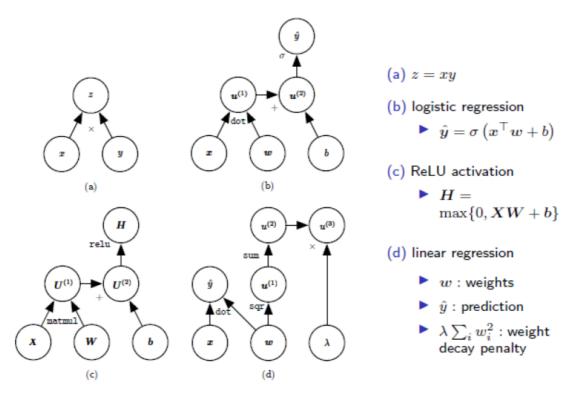


그림 3-17 목적함수 정의에 사용하는 입력과 출력, 기댓값

• 연산 그래프의 예 : 연산을 그래프로 표현



오류 역전파 알고리즘 설계

• 간단한 오류 역전파의 연산 그래프 예

Compute loss

Back-prop

doud prewrod

x1

Suoite vitatives

- 오류 역전파 미분의 연쇄 법칙을 이용
 - 연쇄 법칙

• 수인 경우:
$$\frac{dz}{dx} = \frac{dz}{dy} \frac{dy}{dx}$$
.

■ 벡터인 경우:
$$abla_{m{x}}z = \left(rac{\partial m{y}}{\partial m{x}}
ight)^{ op}
abla_{m{y}}z_{:}$$

 $x \in \mathbb{R}^m$, $y \in \mathbb{R}^n$ 라고 가정하면

 $g: \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}^n$

 $f:\mathbb{R}^n\mapsto\mathbb{R}$

$$\Rightarrow$$
 $y = g(x) : x \in \mathbb{R}^m \mapsto \mathbb{R}^n \ni y$

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_m} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_n}{\partial x_m} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times m}$$

$$\nabla_{y}z = \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial y_{1}} & \cdots & \frac{\partial z}{\partial y_{n}} \end{bmatrix}^{\top} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$$

$$\left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^{\top} \nabla_{y}z = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_{1}}{\partial x_{1}} & \cdots & \frac{\partial y_{n}}{\partial x_{1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_{1}}{\partial x_{m}} & \cdots & \frac{\partial y_{n}}{\partial x_{m}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial y_{1}} \\ \vdots \\ \frac{\partial z}{\partial y_{n}} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial y_{1}} & \frac{\partial y_{1}}{\partial x_{1}} + \cdots + \frac{\partial z}{\partial y_{n}} & \frac{\partial y_{n}}{\partial x_{1}} \\ \vdots \\ \frac{\partial z}{\partial y_{1}} & \frac{\partial y_{1}}{\partial x_{m}} + \cdots + \frac{\partial z}{\partial y_{n}} & \frac{\partial y_{n}}{\partial x_{m}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial z}{\partial x_{1}} \\ \vdots \\ \frac{\partial z}{\partial x_{m}} \end{bmatrix} = \nabla_{x}z$$

• **야코비안 행렬과 그레디언트를 곱한 연쇄 법칙**을 얻어서 구해짐

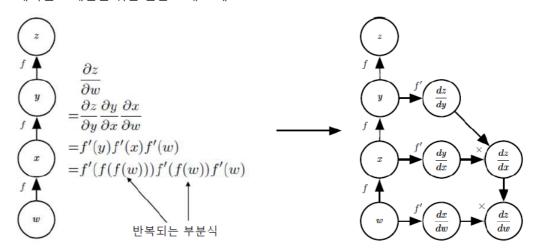
$$\nabla_x z = \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)^\top \nabla_y z \qquad \underbrace{x \in \mathbb{R}^m \overset{g}{\mapsto} y}_{\text{Jacobian: } \frac{\partial y}{\partial x}} \in \underbrace{\mathbb{R}^n \overset{f}{\mapsto} \mathbb{R} \ni z}_{\text{gradient: } \nabla_y z}$$

- 연쇄법칙의 구현
 - o 반복되는 부분식들을 저장하거나 재연산을 최소화
 - ex) 동적 프로그래밍
 - 연산속도와 저장 공간의 Trade-off

$$(f\circ g\circ h\circ i)'(x)=(f'\circ g\circ h\circ i)(x)\times (g'\circ h\circ i)(x)\times (h'\circ i)(x)\times i'(x)$$



ㅇ 그레디언트 계산을 위한 연산 그래프 예



- 식 (3.19)의 목적함수를 다시 쓰면
 - \circ 2층 퍼셉트론의 경우 $\Theta = \{\mathbf{U^1}, \mathbf{U^2}\}$

$$J(\Theta) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \mathbf{o}(\Theta)\|_2^2$$
 (3.20)

• 경사하강법

$J(\Theta) = J(\{\mathbf{U}^1, \mathbf{U}^2\})$ 의 최저점을 찾아주는 경사 하강법

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^1 &= \mathbf{U}^1 - \rho \frac{\partial J}{\partial \mathbf{U}^1} \\ \mathbf{U}^2 &= \mathbf{U}^2 - \rho \frac{\partial J}{\partial \mathbf{U}^2} \end{aligned}$$
 (3.21)

• 식 (3.21)을 알고리즘 형태로 쓰면

알고리즘 3-3 다층 퍼셉트론을 위한 스토케스틱 경사 하강법

입력: 훈련집합 $\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}, \ \mathbb{Y} = \{\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \cdots, \mathbf{y}_n\}, \ \text{학습률} \ \rho$

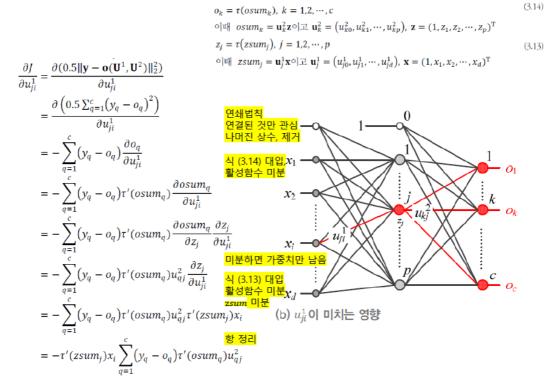
출력: 가중치 행렬 U¹과 U²

```
1 U<sup>1</sup>과 U<sup>2</sup>를 초기화한다.
2 repeat
3 ※의 순서를 섞는다.
4 for (※의 샘플 각각에 대해)
5 식 (3.15)로 전방 계산을 하여 o를 구한다.
6 ਰਿੱਧਾ와 ਰਿੱਧਾ을 계산한다.
7 식 (3.21)로 U<sup>1</sup>과 U<sup>2</sup>를 갱신한다.
8 until (멈축 조건)
```

- 오류 역전파의 유도
 - 알고리즘 3-3의 라인 6을 위한 도함수 값 $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{U^1}}$ 와 $\frac{\partial J}{\partial \mathbf{U^2}}$ 의 계산 과정
 - ㅇ 먼저 $\mathbf{U^2}$ 를 구성하는 u_{kj}^2 로 미분하면,

$$\begin{split} \frac{\partial J}{\partial u_{kj}^2} &= \frac{\partial (0.5 \| \mathbf{y} - \mathbf{o}(\mathbf{U}^1, \mathbf{U}^2) \|_2^2)}{\partial u_{kj}^2} \\ &= \frac{\partial \left(0.5 \sum_{q=1}^c (y_q - o_q)^2\right)}{\partial u_{kj}^2} \\ &= \frac{\partial (0.5 (y_k - o_k)^2)}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \frac{\partial o_k}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \frac{\partial \tau (osum_k)}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \frac{\partial \tau (osum_k)}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \tau'(osum_k) \frac{\partial osum_k}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \tau'(osum_k) \frac{\partial osum_k}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \tau'(osum_k) \frac{\partial osum_k}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \tau'(osum_k) \frac{\partial osum_k}{\partial u_{kj}^2} \\ &= -(y_k - o_k) \tau'(osum_k) z_j \end{split} \qquad \text{(a) } u_{kj}^2 \uparrow \text{ \square} \text{$$

 \circ · \mathbf{U}^1 을 구성하는 u_{ii}^1 로 미분하면



ㅇ 지금까지 유도한 식을 정리하면

$$\delta_k = (y_k - o_k)\tau'(osum_k), \qquad 1 \le k \le c \tag{3.22}$$

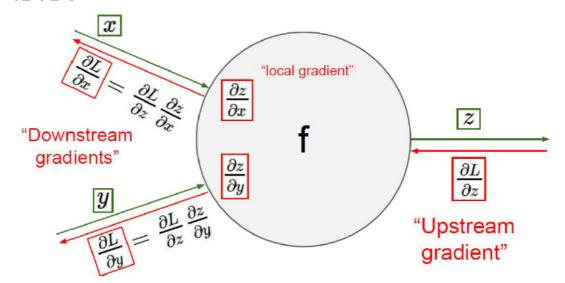
반복되는 부분식

$$\frac{\partial J}{\partial u_{kj}^2} = \Delta u_{kj}^2 = -\delta_k z_j, \qquad 0 \le j \le p, 1 \le k \le c \tag{3.23}$$

$$\eta_j = \tau'(zsum_j) \sum_{q=1}^c \delta_q u_{qj}^2, \qquad 1 \le j \le p$$
 (3.24)

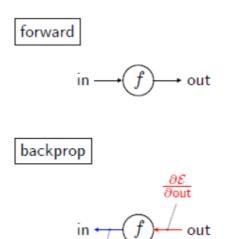
$$\frac{\partial J}{\partial u_{ji}^1} = \Delta u_{ji}^1 = -\eta_j x_i, \qquad 0 \le i \le d, 1 \le j \le p \tag{3.25}$$

- ㅇ 오류 역전파 알고리즘
 - 식 (3.22) ~ (3.25)를 이용하여 **출력층의 오류**를 **역방향(왼쪽)으로 전파**하며 **그레이디언 트를 계산**하는 알고리즘
- 역전파 분해



• 단일 노드의 역전파 예

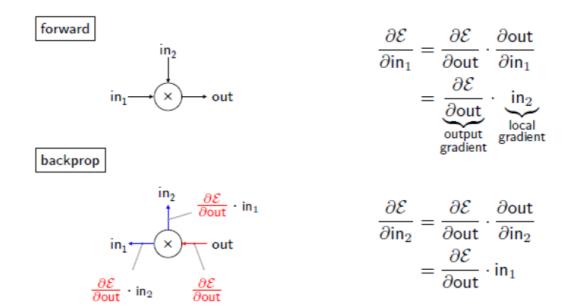
$$out = f(in)$$



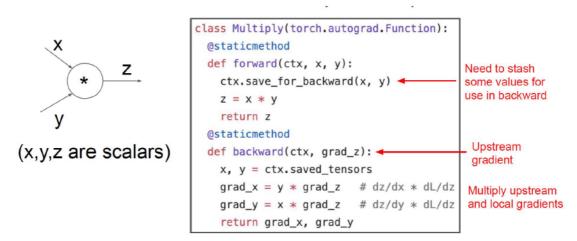
$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{in}} = \underbrace{\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{out}}}_{\substack{\mathsf{output} \\ \mathsf{gradient}}} \cdot \underbrace{\frac{\partial \mathsf{out}}{\partial \mathsf{in}}}_{\substack{\mathsf{local} \\ \mathsf{gradient}}}$$
$$= \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{out}} \cdot f'(\mathsf{in})$$

• **곱셈**의 역전파 예

$$\mathsf{out} = \mathsf{in}_1 \cdot \mathsf{in}_2$$



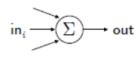
• 곱셈의 역전파 PyTorch 구현 예



• 덧셈의 역전파 예

$$\mathsf{out} = \sum_i \mathsf{in}_i$$





backprop

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \text{out}}$$
out
$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \text{out}}$$

$$\begin{split} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathrm{in}_i} &= \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathrm{out}} \cdot \frac{\partial \mathrm{out}}{\partial \mathrm{in}_i} \\ &= \underbrace{\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathrm{out}}}_{\substack{\mathrm{output} \\ \mathrm{gradient}}} \cdot \underbrace{\frac{1}{\mathrm{local}}}_{\substack{\mathrm{local} \\ \mathrm{gradient}}} \\ &= \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathrm{out}} \\ &\triangleq \delta \end{split}$$

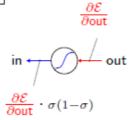
sum (forward) ⇔ fanout (backprop)

시그모이드의 역전파 예
 out = σ(in)

forward

in
$$\longrightarrow$$
 out

backprop



$$\begin{split} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{in}} &= \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{out}} \cdot \frac{\partial \mathsf{out}}{\partial \mathsf{in}} \\ &= \underbrace{\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{out}}}_{\substack{\mathsf{output} \\ \mathsf{gradient}}} \cdot \underbrace{\frac{\sigma'(\mathsf{in})}{\mathsf{local}}}_{\substack{\mathsf{local} \\ \mathsf{gradient}}} \\ &= \underbrace{\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{out}}} \cdot [\sigma(\mathsf{in}) \left(1 - \sigma(\mathsf{in})\right)] \end{split}$$

• 최대화의 역전파 예

$$\mathsf{out} = \max_i \{\mathsf{in}_i\}$$

forward



$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{in}_i} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{out}} \cdot \underbrace{\frac{\partial \mathsf{out}}{\partial \mathsf{in}}}_{1 \text{ or } 0}$$

backprop

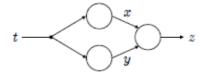
$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \text{out}}$$
 out $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \text{out}}$ or 0

$$= \begin{cases} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{out}} & \text{if } \mathsf{in}_i \mathsf{ is } \mathsf{max} \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

 $max (forward) \Leftrightarrow mux (backprop)$

전개의 역전파 예
 multivariable chain rule

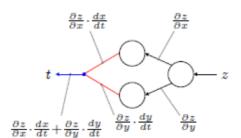
forward



let

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

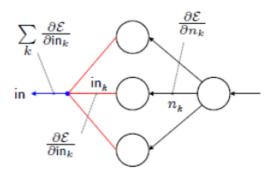
backprop



then

$$\frac{\partial z}{\partial t} = \frac{\partial z}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial t}$$

fanout



assuming

$$\mathcal{E} = f(n_1, \dots, n_k, \dots)$$

and

$$n_k = n_k(\mathsf{in})$$

gives

$$\begin{split} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{in}} &= \sum_k \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial n_k} \cdot \frac{\partial n_k}{\partial \mathsf{in}} \\ &= \sum_k \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \mathsf{in}_k} \end{split}$$

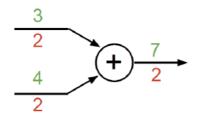
where

$$\operatorname{in}_k \triangleq \operatorname{input} \operatorname{to} n_k$$

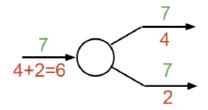
fanout (forward) ⇔ sum (backprop)

• 역전파 주요 예

add gate: gradient distributor

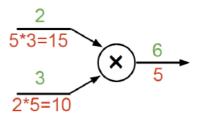


copy gate: gradient adder

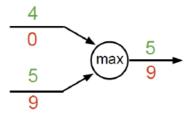


• 실제 역전파 예

mul gate: "swap multiplier"

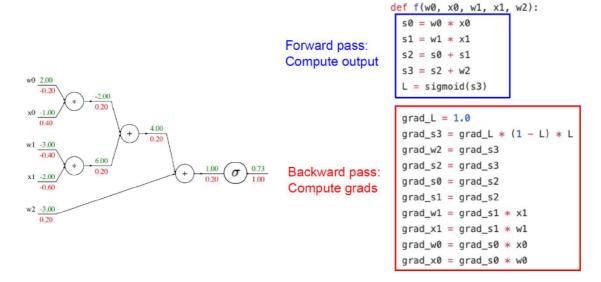


max gate: gradient router



$$\left(\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}\right) \cdot \sigma'(s_{j}) \cdot \underbrace{x_{i}}_{} \implies \underbrace{\left(\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}\right) \cdot \sigma'(s_{j}) \cdot x_{i}}_{} \\ \underbrace{x_{i}}_{} \implies \underbrace{\left(\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}\right) \cdot \sigma'(s_{j}) \cdot x_{i}}_{} \\ \underbrace{\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}}_{} \\ \delta_{k} \cdot \underbrace{w_{kj}}_{} + \underbrace{\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}}_{} \\ \underbrace{\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}}_{} + \underbrace{\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}}_{} + \underbrace{\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}}_{} \\ \underbrace{\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj}}_{} + \underbrace{\sum_{k} \delta_{k} \cdot w_{kj$$

• 역전파의 간단한 구현



오류 역전파를 이용한 학습 알고리즘

• 식 (3.22) ~ (3.25)를 이용한 **스토캐스틱 경사 하강법**

알고리즘 3-4 다층 퍼셉트론 학습을 위한 스토캐스틱 경사 하강법

입력: 훈련집합 ※와 ※, 학습률 ρ 출력: 가중치 행렬 U¹과 U²

```
U<sup>1</sup>과 U<sup>2</sup>를 초기화한다.
2
     repeat
3
         ™의 순서를 섞는다.
         for (X의 샘플 각각에 대해)
4
               현재 처리하는 샘플을 \mathbf{x} = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_d)^T, \mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_c)^T라 표기한다.
5
               x<sub>0</sub>과 z<sub>0</sub>을 1로 설정한다. // 바이어스
6
                                       // 전방 계산
               for (j=1 \text{ to } p) zsum_i = \mathbf{u}_i^1 \mathbf{x}, z_i = \tau(zsum_i) // 4 (3.13)
7
               for (k=1 \text{ to } c) osum_k = \mathbf{u}_k^2 \mathbf{z}, o_k = \tau(osum_k) // 4 (3.14)
8
                                      // 오류 역전파
               for (k=1 \text{ to } c) \delta_k = (y_k - o_k)\tau'(osum_k) // 4 (3.22)
9
               for (k=1 to c) for (j=0 to p) \Delta u_{kj}^2 = -\delta_k z_i // \Delta (3.23)
10
               for (j=1 \text{ to } p) \eta_j = \tau'(zsum_j) \sum_{a=1}^c \delta_a u_{aj}^2 // 4 (3.24)
11
               for (j=1 \text{ to } p) for (i=0 \text{ to } d) \Delta u_{ii}^1 = -\eta_i x_i // 4 (3.25)
12
                                         // 가중치 갱신
               for (k=1 \text{ to } c) for (j=0 \text{ to } p) u_{kj}^2 = u_{kj}^2 - \rho \Delta u_{kj}^2 // 4 (3.21)
13
                for (j=1 \text{ to } \rho) for (i=0 \text{ to } d) u_{ii}^1 = u_{ii}^1 - \rho \Delta u_{ii}^1 // 4 (3.21)
14
15 until (멈춤 조건)
```

- 임의 샘플링 방식으로 바꾸려면

 - 4. for (\mathbb{X} 의 샘플 각각에 대해) 5. 현재 처리하는 샘플을 $\mathbf{x}=(x_0,x_1,x_2,\cdots,x_d)^\mathsf{T},\ \mathbf{y}=(y_1,y_2,\cdots,y_c)^\mathsf{T}$ 라 표기한다.

• 도함수의 종류

Scalar to Scalar Vector to Scalar Vector to Vector $x \in \mathbb{R}^N, y \in \mathbb{R}^M$ $x \in \mathbb{R}, y \in \mathbb{R}$ $x \in \mathbb{R}^N, y \in \mathbb{R}$ Regular derivative: Derivative is **Gradient**: Derivative is Jacobian:

$$\frac{\partial y}{\partial x} \in \mathbb{R} \qquad \frac{\partial y}{\partial x} \in \mathbb{R}^N \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_n = \frac{\partial y}{\partial x_n} \quad \frac{\partial y}{\partial x} \in \mathbb{R}^{N \times M} \quad \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{n,m} = \frac{\partial y_m}{\partial x_n}$$

If x changes by a small amount, how much will y change?

For each element of x. if it changes by a small amount then how much will y change?

For each element of x, if it changes by a small amount then how much will each element of y change?

• 행렬 표기 : GPU를 사용한 고속 행렬 연산에 적합

알고리즘 3-5 다층 퍼셉트론 학습을 위한 스토캐스틱 경사 하강법(행렬 표기)

 \mathbf{Q} **급:** 훈련집합 \mathbb{X} 와 \mathbb{Y} , 학습률 ρ 출력: 가중치 행렬 \mathbf{U}^1 과 \mathbf{U}^2

```
1 U<sup>1</sup>과 U<sup>2</sup>를 초기화한다.
2 repeat
3
      ™의 순서를 섞는다.
       for (X의 샘플 각각에 대해)
               현재 처리하는 샘플을 \mathbf{x} = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_d)^T, \mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_c)^T라 표기한다.
6
             x_0과 z_0을 1로 설정한다.
                                                                          // 바이어스
                              // 전방 계산
                                                                         // 식 (3.13), zsum_{p*1}, U^{1}_{p*(d+1)}, x_{(d+1)*1}, \tilde{z}_{p*1}
7
              zsum = U^1x, \tilde{z} = \tau(zsum)
                                                                          // 식 (3.14), osum_{c*1}, U^2_{c*(p+1)}, \mathbf{z}_{(p+1)*1}, \mathbf{o}_{c*1}
               osum = U^2z, o = \tau(osum)
                            // 오류 역전파
             \delta = (y - o) \odot \tau'(osum)
                                                                         // 식 (3,22), δ<sub>c*1</sub>
              \Delta \mathbf{U}^2 = -\mathbf{\delta} \mathbf{z}^T
                                                                        // 식 (3.23), \Delta U^2_{c*(n+1)}
10
               \eta = \left(\delta^{\mathrm{T}}\widetilde{\mathbf{U}}^{2}\right)^{\mathrm{T}} \odot \tau'(\mathbf{zsum})
                                                                         // 식 (3.24), \tilde{\mathbf{U}}^{2}_{c*p}, \mathbf{\eta}_{p*1}
               \Delta U^1 = -\eta x^T
12
                                                                          // 식 (3.25), \Delta U^{1}_{v*(d+1)}
                            // 가중치 갱신
               \mathbf{U}^2 = \mathbf{U}^2 - \rho \Delta \mathbf{U}^2
13
                                                                        // 식 (3.21)
14
               \mathbf{U}^1 = \mathbf{U}^1 - \rho \Delta \mathbf{U}^1
                                                                          // 식(3.21)
15 until (멈춤 조건)
```

미니배치 스토캐스틱 경사 하강법

- 미니배치 방식
 - o 한번에 t개의 샘플을 처리함 (t는 미니배치 크기)
 - t = 1이면 스토캐스틱 경사 하강법
 - t = n이면 배치 경사 하강법
 - o 미니배치 방식은 보통 t = 수십 ~ 수백
 - 그레이디언트의 잡음을 줄여주는 효과 때문에 수렴이 빨라짐
 - GPU를 사용한 **병렬처리에도 유리함**
 - o 현대 기계 학습은 **미니배치를 표준**처럼 여겨 널리 사용함

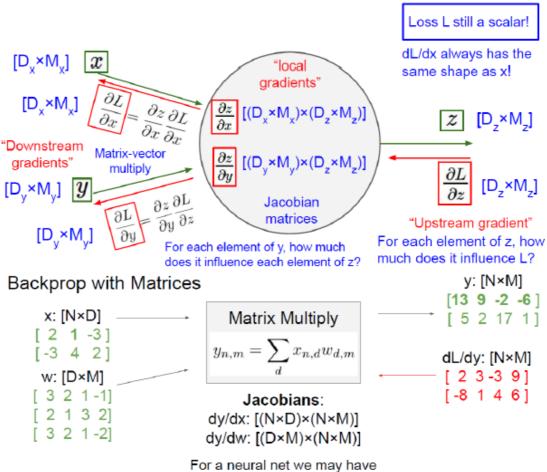
알고리즘 3-6 다층 퍼셉트론 학습을 위한 '미니배치' 스토캐스틱 경사 하강법

입력: 훈련집합 \mathbb{X} 와 \mathbb{Y} , 학습률 ρ , 미니배치 크기 t

출력: 가중치 행렬 U¹과 U²

```
U^1과 U^2를 초기화한다.
1
2
      repeat
           \mathbb{X}와 \mathbb{Y}에서 t개의 샘플을 무작위로 뽑아 미니배치 \mathbb{X}'와 \mathbb{Y}'를 만든다.
3
           \Delta \mathbf{U}^2 = \mathbf{0}, \ \Delta \mathbf{U}^1 = \mathbf{0}
4
           for (X'의 샘플 각각에 대해)
5
                  현재 처리하는 샘플을 \mathbf{x} = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_d)^T, \mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_c)^T라 표기한다.
6
                 x_0와 z_0를 1로 설정한다.
                                                                                // 바이어스
7
                                  // 전방 계산
                  zsum = U^1x, \tilde{z} = \tau(zsum)
                                                                                // 식 (3.13), \mathbf{zsum}_{p*1}, \mathbf{U}^{1}_{p*(d+1)}, \mathbf{x}_{(d+1)*1}, \mathbf{\tilde{z}}_{p*1}
8
                  osum = U^2z, o = \tau(osum)
                                                                                // 식 (3.14), osum_{c*1}, U^2_{c*(p+1)}, \mathbf{z}_{(p+1)*1}, \mathbf{o}_{c*1}
9
                                 // 오류 역전파
                  \delta = (y - o) \odot \tau'(osum)
10
                                                                                // 식 (3.22), \delta_{c*1}
                  \Delta \mathbf{U}^2 = \Delta \mathbf{U}^2 + (-\delta \mathbf{z}^{\mathrm{T}})
                                                                                // 식 (3.23)을 누적, \Delta U^2_{c*(p+1)}
11
                  \eta = (\delta^T \widetilde{\mathbf{U}}^2)^T \odot \tau'(\mathbf{zsum})
                                                                                // 식 (3.24), \tilde{\mathbf{U}}^{2}_{c*p}, \eta_{p*1}
12
                  \Delta \mathbf{U}^1 = \Delta \mathbf{U}^1 + (-\eta \mathbf{x}^\mathsf{T})
                                                                                // 식 (3.25)를 누적, \Delta U^{1}_{p*(d+1)}
13
                                  // 가중치 갱신
           \mathbf{U}^2 = \mathbf{U}^2 - \rho \left(\frac{1}{t}\right) \Delta \mathbf{U}^2
14
                                                                                                   // 식 (3.21) - 평균 그레이디언트로 갱신
           \mathbf{U}^1 = \mathbf{U}^1 - \rho \left(\frac{1}{\epsilon}\right) \Delta \mathbf{U}^1
                                                                                                   // 식 (3.21) - 평균 그레이디언트로 갱신
15
     until (멈춤 조건)
```

• 행렬의 역전파를 위한 도함수



N=64, D=M=4096
Each Jacobian takes 256 GB of memory!

다층 퍼셉트론에 의한 인식

- 예측 단계 (또는 테스트 단계)
 - ㅇ 학습을 마친 후 현장 설치하여 사용(또는 테스트 집합으로 성능 테스트)

알고리즘 3-7 다층 퍼셉트론을 이용한 인식

입력: 테스트 샘플 \mathbf{x} // 신경망의 가중치 \mathbf{U}^1 과 \mathbf{U}^2 는 이미 설정되었다고 가정함.

출력: 부류 🗸

1 $\mathbf{x} = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_d)^{\mathrm{T}}$ 로 확장하고, x_0 과 z_0 을 1로 설정한다.

2 $\mathbf{zsum} = \mathbf{U}^1\mathbf{x}$

 $3 \mid \tilde{\mathbf{z}} = \tau(\mathbf{zsum}) \mid // \stackrel{\triangle}{\rightarrow} (3.13)$

4 osum = U^2z

 $5 | \mathbf{o} = \mathbf{\tau}(\mathbf{osum}) // 4 (3.14)$

6 o에서 가장 큰 값을 가지는 노드에 해당하는 부류 번호를 y에 대입한다.

。 ਜਾਹ 6을 ਸਪੀ ਸ਼ਰੀ ਸ਼ਰੀ $y = \operatorname*{argmax}_k o_k$

ㅇ 전방 계산 한번만 사용하므로 빠름

다층 퍼셉트론의 특성

오류 역전파 알고리즘의 빠른 속도

• 연산 횟수 비교

표 3-2 전방 계산과 오류 역전파 과정이 사용하는 연산 횟수

과정	수식	덧셈	곱셈
THE WILL	식 (3.13)	dp	dp
전방 계산	식 (3.14)	pc	pc
	식 (3.22)	с	c
	식 (3.23)		cp
오류 역전파	식 (3.24)	cp	cp
	식 (3.25)		dp
	식 (3.21)	cp+dp	cp+dp

- 오류 역전파는 전방 계산보다 약 1.5~2배의 시간 소요 ▶ 빠른 계산 가능
- 하지만 학습 알고리즘은 수렴할 때 까지 오류 역전파를 반복해야 하므로 점근적 시간복잡도는

O((dp + pc)nq) (n은 훈련집합의 크기, q는 에포크epoch 수)

ㅇ 에포크는 전체 학습 집합을 수행한 단위

모든 함수를 정확하게 근사할 수 있는 능력

- 호닉의 주장[Hornik1989]
 - ㅇ 은닉층을 하나만 가진 다층 퍼셉트론은 범용근사자

- **은닉 노드가 충분히 많다면** 활성함수로 무엇을 사용하든 표준 다층 퍼셉트론은 어떤 함수라도 원하는 정확도만큼 **근사화**할 수 있다
- 은닉 노드를 무수히 많게 할 수 없으므로, 실질적으로는 복잡한 구조의 데이터에서는 성능 한 계

성능 향상을 위한 휴리스틱의 중요성

- 순수한 최적화 알고리즘으로 높은 성능 불가능
 - ㅇ 데이터 희소성, 잡음, 미숙한 신경망 구조 등의 이유
 - o 성능 향상을 위한 갖가지 휴리스틱을 개발하고 공유함
- 휴리스틱 개발에서 중요 쟁점
 - o 아키텍쳐
 - 은닉층과 은닉노드의 개수를 정해야 한다. 은닉층과 은닉 노드를 놀리면 신경망의 용량
 은 커지는 대신, 추정할 매개변수가 많아지고 학습 과정에서 과잉적합할 가능성이 커진다.
 - 현대 기계학습은 복잡한 모델을 사용하되, 적절한 규제기법을 적용하는 경향이 있음
 - o 초깃값
 - 가중치를 초기화할때 보통 난수를 생성하여 설정하는데, 값의 범위와 분포가 중요
 - ㅇ 학습률
 - 처음부터 끝까지 같은 학습률을 사용하는 방식과 처음에는 큰 값으로 시작하고 점점 줄이는 적용적 방식이 있음
 - o 활성함수
 - 초창기 다층 퍼셉트론은 주로 로지스틱 시그모이드나 tanh 함수를 사용했는데, 은닉층의 개수를 늘림에 따라 그레이디언트 소멸과 같은 몇가지 문제가 발생한다
 - 깊은 신경망은 주로 ReLU 함수를 사용
- 실용적인 성능
 - o 1980 ~ 1990년대에 다층 퍼셉트론은 실용 시스템 제작에 크게 기여
 - 인쇄/필기 문자 인식으로 우편물 자동 분류기, 전표 인식기, 자동차 번호판 인식기 등
 - 음성 인식, 게임, 주가 예측, 정보 검색, 의료 진단, 유전자 검색, 반도체 결함 검사 등
- 하지만 한계 노출
 - ㅇ 잡음이 섞인 상황에서 음성인식 성능 저하
 - ㅇ 필기 주소 인식 능력 저하
 - ㅇ 바둑 등의 복잡한 문제에서의 한계
- 이러한 한계를 딥러닝은 극복함