기계학습과 수학

선형대수

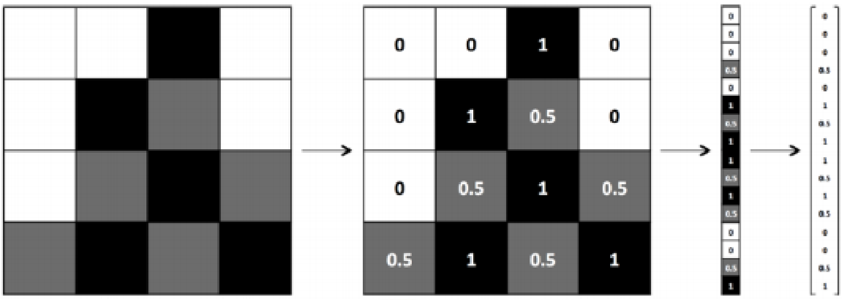
벡터와 행렬

- 벡터
  - 샘플을 **특징 벡터**로 표현

    예) Iris 데이터에서 꽃받침의 길이, 꽃받침의 너비, 꽃잎의 길이, 꽃잎의 너비라는 4개의 특징이 각각 5.1, 3.5, 1.4, 0.2인 샘플

    $$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5.1 \\ 3.5 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}$$

    예) 사진image을 벡터화하여 표현하는 과정

  - 여러 개의 특징 벡터를 첨자로 구분 (X_i)

    $$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 5.1 \\ 3.5 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}, \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 4.9 \\ 3.0 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix}, \mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix} 4.7 \\ 3.2 \\ 1.3 \\ 0.2 \end{pmatrix}, \cdots, \mathbf{x}_{150} = \begin{pmatrix} 5.9 \\ 3.0 \\ 5.1 \\ 1.8 \end{pmatrix}$$

  - 종류와 크기 표현의 예) x ∈ R^n
- 행렬
  - 여러 개의 벡터를 담음

    요소: $X_{i,j}$, i번째 행: $X_{i,:}$,번째 열: $X_{:,j}$

  - 훈련집합을 담은 행렬 : 설계행렬

    $$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 5.1 & 3.5 & 1.4 & 0.2 \\ 4.9 & 3.0 & 1.4 & 0.2 \\ 4.7 & 3.2 & 1.3 & 0.2 \\ 4.6 & 3.1 & 1.5 & 0.2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 6.2 & 3.4 & 5.4 & 2.3 \\ 5.9 & 3.0 & 5.1 & 1.8 \end{pmatrix} = \begin{array}{c} \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{149,1} & x_{149,2} & x_{149,3} & x_{149,4} \\ x_{150,1} & x_{150,2} & x_{150,3} & x_{150,4} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow \text{행row} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \\ \uparrow \\ \text{열column} \end{array}$$

- 전치 행렬 : A (i,j) 를 A' (j,i)로 바꾸는 것
- 행렬을 이용하면 방정식을 간결하게 표현 가능하다

  예) 다항식의 행렬 표현

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{x}) &= f(x_1, x_2, x_3) \\
&= 2x_1x_1 - 4x_1x_2 + 3x_1x_3 + x_2x_1 + 2x_2x_2 + 6x_2x_3 - 2x_3x_1 + 3x_3x_2 + 2x_3x_3 + 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 + 5 \\
&= \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -4 & 3 \\ 1 & 2 & 6 \\ -2 & 3 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2 & 3 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + 5 \\
&= \mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + c
\end{aligned}
$$

- 특수한 행렬들
  - 정사각행렬(정방행렬)
  - 대각행렬
  - 단위행렬
  - 대칭행렬

$$
\text{정사각행렬} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 1 & 21 & 5 \\ 4 & 5 & 12 \end{pmatrix}, \quad \text{대각행렬} \begin{pmatrix} 50 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix},
$$

$$
\text{단위행렬} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \text{대칭행렬} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 11 \\ 2 & 21 & 5 \\ 11 & 5 & 1 \end{pmatrix}
$$

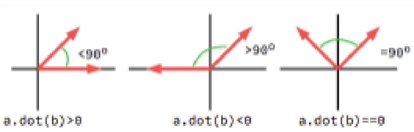
- 행렬 연산
  - 행렬 곱셈

$$
\mathbf{C} = \mathbf{AB}, \text{ 이때 } c_{ij} = \sum_{k=1,s} a_{ik} b_{kj}
$$

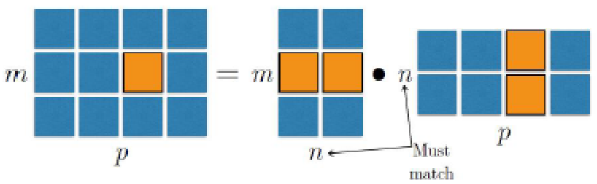
    - 교환법칙 성립 X : AB ≠ BA
    - 분배법칙 / 결합법칙 성립 : A(B+C) = AB + AC , A(BC) = (AB)C
  - 벡터의 내적(Inner Product)

$$
\text{벡터의 내적 } \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{a}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} = \sum_{k=1,d} a_k b_k \qquad (2.2)
$$

$$
\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 5.1 \\ 3.5 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix} \text{와 } \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 4.9 \\ 3.0 \\ 1.4 \\ 0.2 \end{pmatrix} \text{의 내적 } \mathbf{x}_1 \cdot \mathbf{x}_2 \text{는 } 37.49
$$

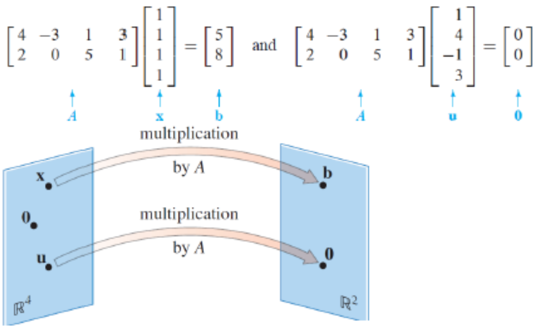


  - C = AB 예시

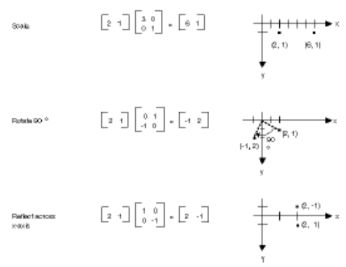


- $C_{i,j} = \sum_k A_{i,k} B_{k,j}$
- A: m × n, B: n × p, C: m × p

  - 행렬 곱셈을 통한 벡터의 변환(Function / Mapping) 예시

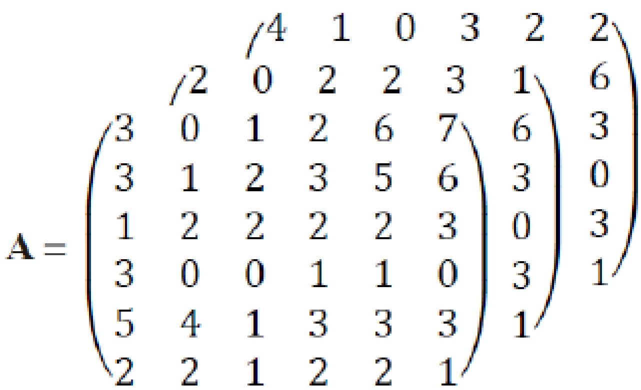


대표적 변환 예)



- 텐서
  - 3차원 이상의 구조를 가진 숫자 배열
    - 0차 : 수(Scalar)
    - 1차 : 벡터
    - 2차 : 행렬
    - 고차원 ...

예) 3차원 구조의 RGB 컬러 영상



놈과 유사도

- 벡터와 행렬의 크기를 놈(Norm)으로 측정
  - 벡터의 p차 놈

$$p\text{차 놈: } \|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_{i=1,d} |x_i|^p\right)^{\frac{1}{p}} \qquad (2.3)$$

1차 $(p = 1)$ 놈, 2차 $(p = 2)$ 놈 Euclidean norm, 최대 $(p = infinite)$ 놈 max norm

$$\text{최대 놈: } \|\mathbf{x}\|_\infty = \max(|x_1|, |x_2|, \cdots, |x_d|) \qquad (2.4)$$

예) $\mathbf{x} = (3 \ \ -4 \ \ 1)$ 일 때, 2차 놈은 $\|\mathbf{x}\|_2 = (3^2 + (-4)^2 + 1^2)^{1/2} = 5.099$

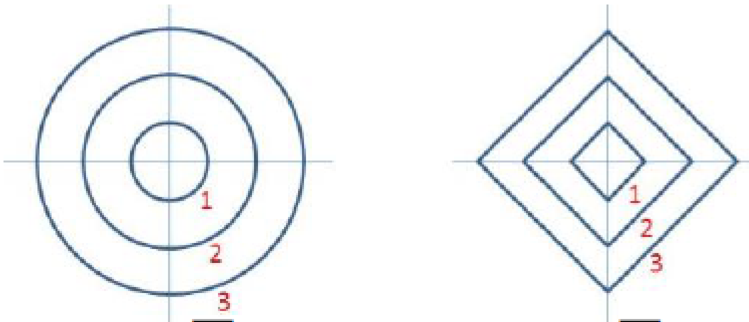
  - 행렬의 프로베니우스(Frobenius Norm) : 행렬의 크기를 측정

$$\text{프로베니우스 놈: } \|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i=1,n} \sum_{j=1,m} a_{ij}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2.6)$$

$$\text{예를 들어, } \left\| \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 6 & 4 \end{pmatrix} \right\|_F = \sqrt{2^2 + 1^2 + 6^2 + 4^2} = 7.550$$

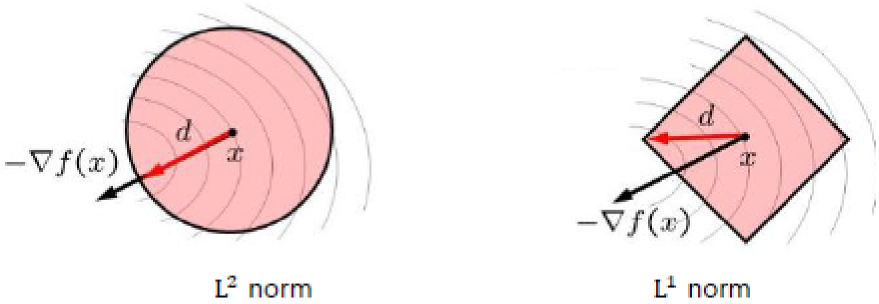
- 1차 놈(Manhattan Distance, L1)과 2차 놈(Euclidean Distance, L2) 비교

크기의 차이

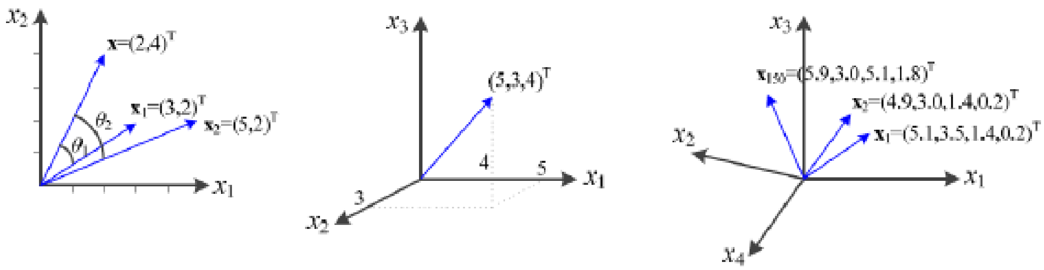


$$||\boldsymbol{x}||_2 = \sum_i x_i^2 \qquad ||\boldsymbol{x}||_1 = \sum_i |x_i|$$

하강 기울기의 적용한 경우



- 유사도(Similarity)와 거리(Distance)
  - 벡터를 기하학적으로 해석



(a) 2차원 벡터 (b) 3차원 벡터 (c) 4차원 벡터(Iris 데이터)

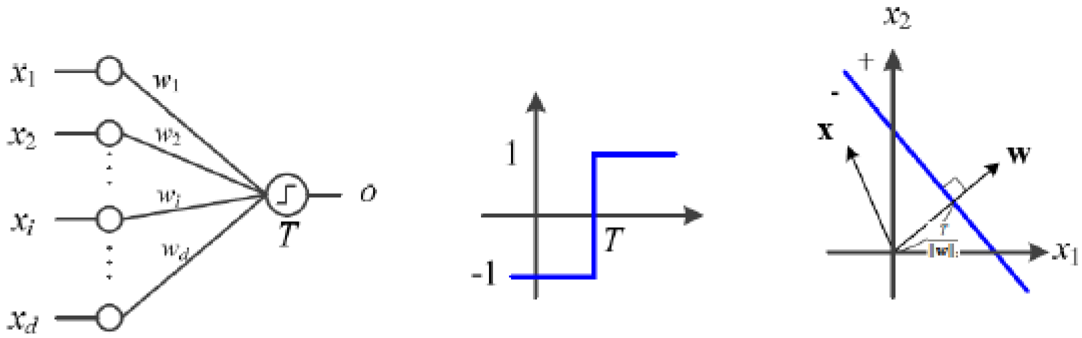
그림 2-2 **벡터를 기하학적으로 해석**

  - 코사인 유사도(Cosine Similarity)

$$cosine\_similarity(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|} \cdot \frac{\mathbf{b}}{\|\mathbf{b}\|} = cos(\theta) \quad (2.7)$$

퍼셉트론의 해석

- 퍼셉트론 : 1958년 로젠블라트가 고안한 **분류기(Classifier) 모델**



(a) 퍼셉트론 구조 (b) 계단형 활성함수(비선형) (c) 퍼셉트론의 공간 분할

그림 2-3 퍼셉트론의 구조와 동작

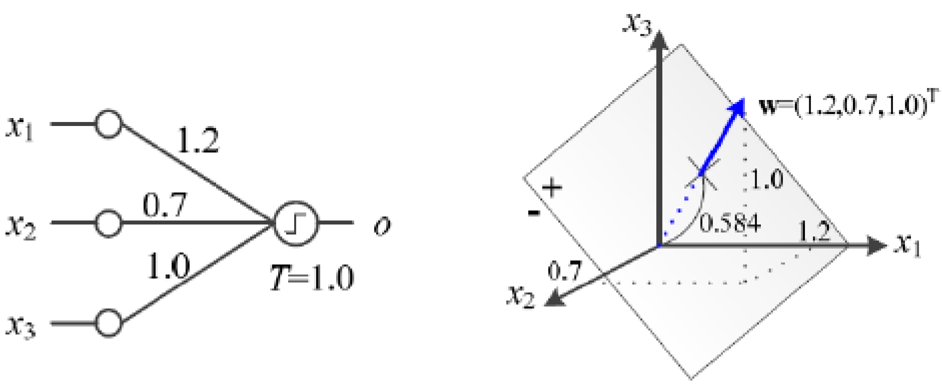
- 그림 2-3의 c의 파란 직선은 두 개의 부분공간을 나누는 결정직선(Decision Line)

$\mathbf{w}$에 수직이고 원점으로부터 $\frac{T}{\|\mathbf{w}\|_2}$만큼 떨어져 있음

- 동작을 수식으로 표현하면

$$o = \tau(\mathbf{w}\cdot\mathbf{x}), \quad \text{이때} \quad \tau(a) = \begin{cases} 1, & a \geq T \\ -1, & a < T \end{cases} \tag{2.8}$$

  - 활성 함수(Activation Function)으로는 계단함수(Step Function) 사용
- 3차원 특징공간은 결정평면(Decision Plane), 4차원 이상은 결정 초평면(Decision Hyperplane)
  - 3차원 특징공간을 위한 퍼셉트론



(a) 퍼셉트론 (b) 공간 분할(2부류 분류)

그림 2-4 퍼셉트론의 예(3차원)

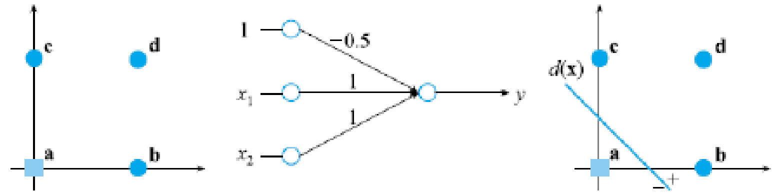
- 예제

$\mathbf{a}=(0,0)^{\mathrm{T}},\ t_a=-1$

$\mathbf{b}=(1,0)^{\mathrm{T}},\ t_b=1$

$\mathbf{c}=(0,1)^{\mathrm{T}},\ t_c=1$

$\mathbf{d}=(1,1)^{\mathrm{T}},\ t_d=1$

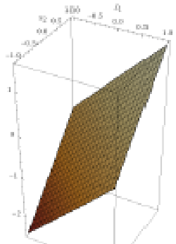


(a) OR 분류 문제 (b) OR 분류기로서 퍼셉트론 (c) 퍼셉트론은 선형 분류기

그림 4.3 퍼셉트론의 예

이 퍼셉트론은 $\mathbf{w}=(1,1)^{\mathrm{T}}$, b=-0.5

따라서 결정 직선은 $d(\mathbf{x})=x_1+x_2-0.5$

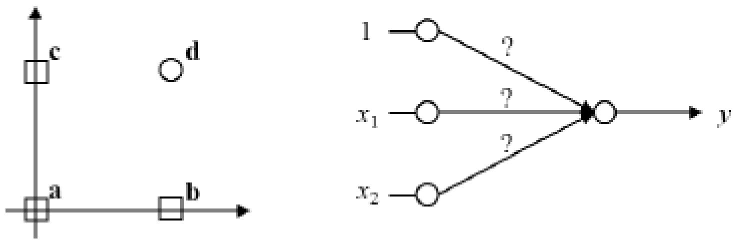


- 샘플 a를 맞추나 보자? $y=\tau(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{c}+b)=\tau((1,1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}-0.5)=\tau(0.5)=1$
- 나머지 샘플 b, c, d도 맞추는가?

- AND 분류 문제는?

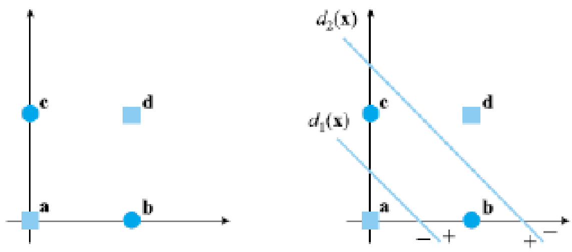
$\mathbf{a}=(0,0)^{\mathrm{T}}$ $\mathbf{b}=(1,0)^{\mathrm{T}}$ $\mathbf{c}=(0,1)^{\mathrm{T}}$ $\mathbf{d}=(1,1)^{\mathrm{T}}$

$t_a=-1$ $t_b=-1$ $t_c=-1$ $t_d=1$



- XOR 분류 문제는?
  - 퍼셉트론은 75% 분류 한계
  - 이 한계를 어떻게 극복?

  → 두 개의 퍼셉트론 (결정 직선) 사용



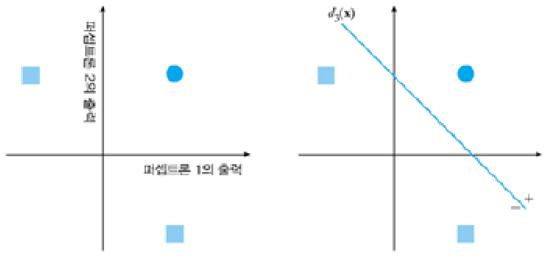
(a) XOR 분류 문제 (b) 두 개의 직선으로 해결

- 다층 퍼셉트론(**M**ulti-**L**ayer **P**erceptron)
  - 두 단계에 걸쳐 문제해결
    - 단계 1 : 원래 특징 공간을 새로운 공간으로 매핑
    - 단계 2 : 새로운 공간에서 분류
  - XOR의 경우, 다음과 같은 조건을 활용

$$\left.\begin{array}{l}\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+b_1>0\text{이고 }\mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+b_2>0\text{이면, }\mathbf{x}\in\omega_1\\ \mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+b_1<0\text{이거나 }\mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{x}+b_2<0\text{이면, }\mathbf{x}\in\omega_2\end{array}\right\}$$

두 단계로 XOR 문제 해결

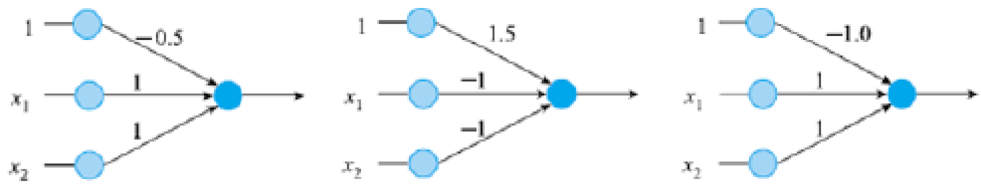
샘플	특징 벡터 (x)		첫 번째 단계		두 번째 단계
	x_1	x_2	퍼셉트론1	퍼셉트론2	퍼셉트론3
a	0	0	−1	+1	−1
b	1	0	+1	+1	+1
c	0	1	+1	+1	+1
d	1	1	+1	−1	−1



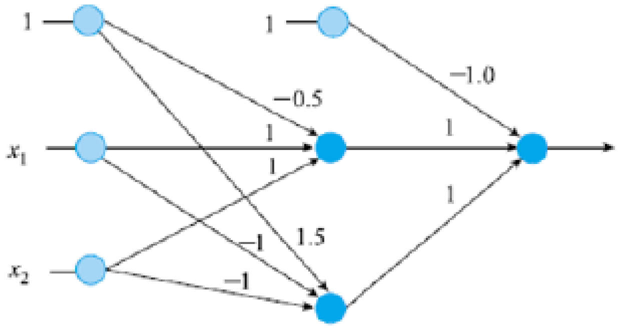
(a) 매핑 공간에서의 샘플 분포 (b) 퍼셉트론3에 의한 영역 분할

새로운 공간에서의 샘플 분포와 영역 분할

- 다층 퍼셉트론을 활용한 XOR 분류 문제



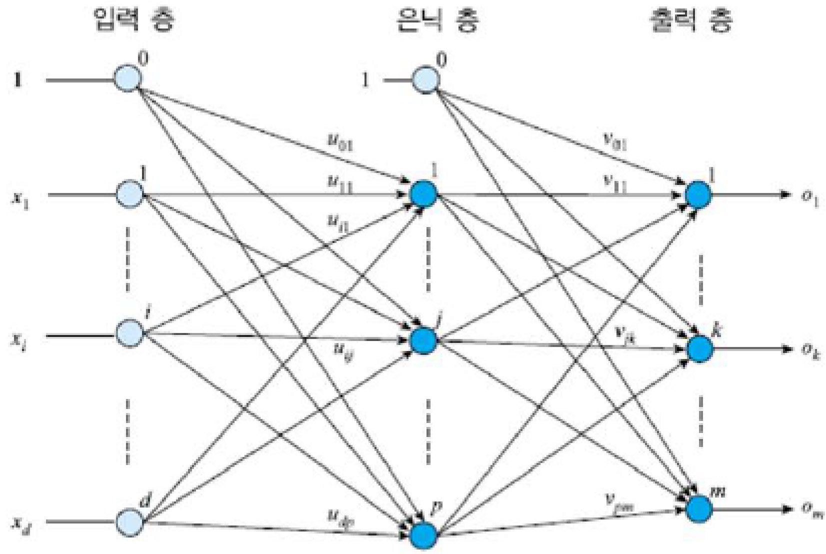
(a) 퍼셉트론1 (b) 퍼셉트론2 (c) 퍼셉트론3



(d) 다층 퍼셉트론

세 개의 퍼셉트론과 이들을 연결하여 만든 다층 퍼셉트론

- 다층 퍼셉트론의 구조(입력층, 은닉층, 출력층)



다층 퍼셉트론의 구조와 표기

- 출력이 여러 개인 퍼셉트론의 표현

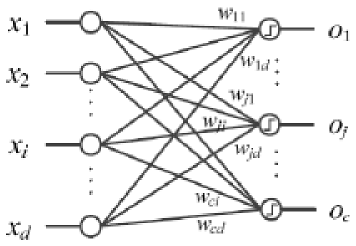


그림 2-5 출력이 여러 개인 퍼셉트론

출력은 벡터 $\mathbf{o} = (o_1, o_2, \cdots, o_c)^\mathrm{T}$로 표기

j번째 퍼셉트론의 가중치 벡터를
$\mathbf{w}_j = (w_{j1}, w_{j2}, \cdots, w_{jd})^\mathrm{T}$와 같이 표기

동작을 수식으로 표현하면,

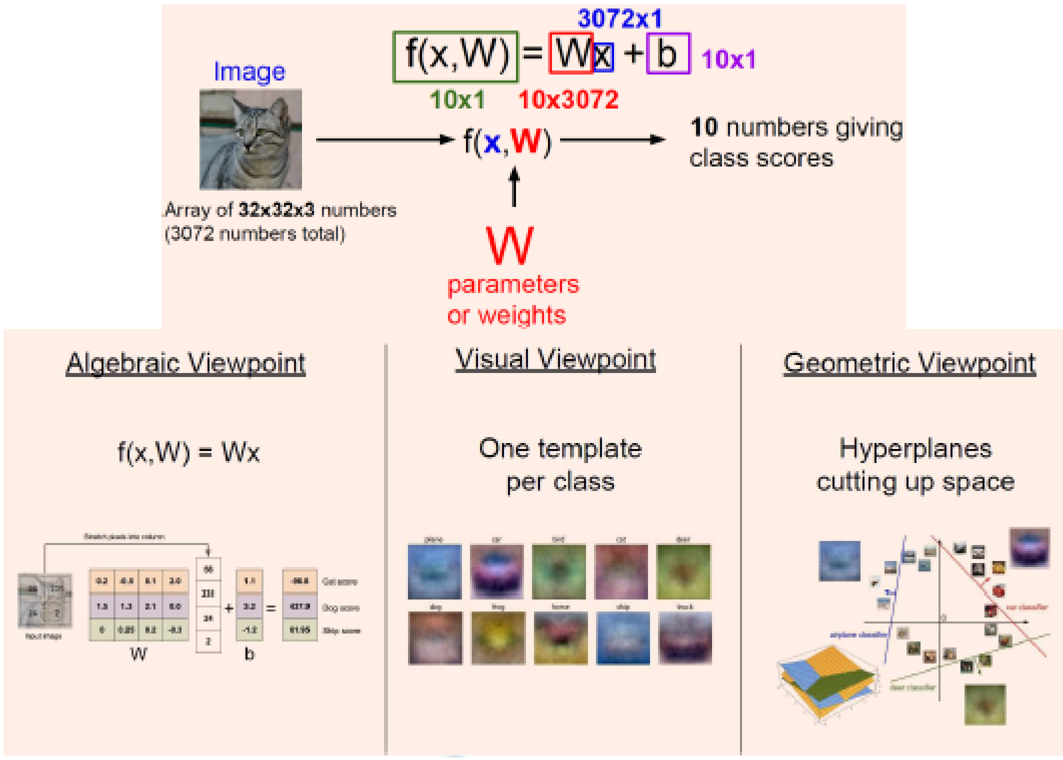
$$\mathbf{o} = \boldsymbol{\tau}\begin{pmatrix} \mathbf{w}_1 \cdot \mathbf{x} \\ \mathbf{w}_2 \cdot \mathbf{x} \\ \vdots \\ \mathbf{w}_c \cdot \mathbf{x} \end{pmatrix} \longrightarrow$$

행렬로 간결하게 쓰면 $\mathbf{o} = \boldsymbol{\tau}(\mathbf{W}\mathbf{x})$

이때 $\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^\mathrm{T} \\ \mathbf{w}_2^\mathrm{T} \\ \vdots \\ \mathbf{w}_c^\mathrm{T} \end{pmatrix}$

가중치 벡터를 각 부류의 기준 벡터로 간주하면, c개 부류의 유사도를 계산하는 셈

- 선형 분류기 이해



- 학습의 정의
  - 추론(Inferring) :
    식(2,10)은 학습을 마친 알고리즘을 현장의 새로운 데이터에 적용했을 때 일어나는 과정

$$\text{분류라는 과업:} \quad \overset{?}{\tilde{\mathbf{o}}} = \boldsymbol{\tau}(\overset{앎}{\tilde{\mathbf{W}}}\overset{앎}{\tilde{\mathbf{x}}}) \tag{2.10}$$

  - 학습(Learning) : 훈련집합의 샘플에 대해 식(2.11)을 가장 잘 만족하는 W를 찾아내는 과정

$$\text{학습이라는 과업:} \quad \overset{앎}{\tilde{\mathbf{o}}} = \boldsymbol{\tau}(\overset{?}{\tilde{\mathbf{W}}}\overset{앎}{\tilde{\mathbf{x}}}) \tag{2.11}$$

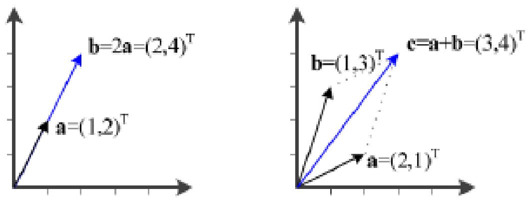
- 현대 기계 학습에서 퍼셉트론의 중요성
  - 딥러닝은 퍼셉트론을 여러 층으로 확장하여 만듦

선형결합과 벡터공간

- 벡터 : 공간상의 한 점으로 화살표 끝이 벡터의 좌표에 해당
- 선형결합이 만드는 벡터공간
  - 기저(basis)벡터 a와 b의 선형 결합(Linear Combination)

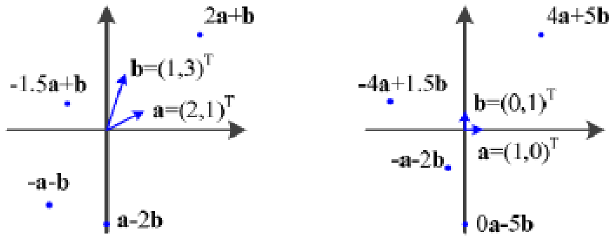
$$\mathbf{c} = \alpha_1 \mathbf{a} + \alpha_2 \mathbf{b} \tag{2.12}$$

  - 선형결합으로 만들어지는 공간을 벡터공간(Vector Space)이라 부름



(a) 벡터에 스칼라 곱 (b) 두 벡터의 덧셈

그림 2-6 벡터의 연산

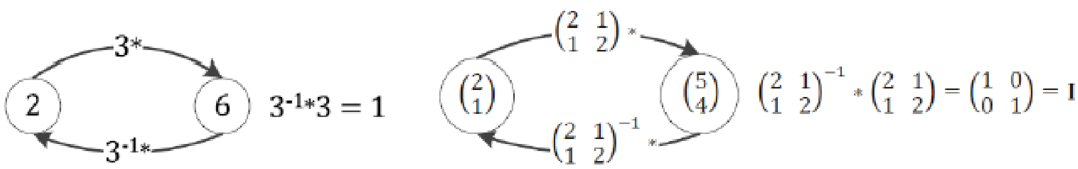


(a) 기저 벡터와 벡터공간 (b) 정규직교 기저 벡터

그림 2-7 벡터공간

역행렬

- 원리



(a) 역수의 원리 (b) 역행렬의 원리

그림 2-9 역행렬

  - 정사각행렬 $\mathbf{A}$의 역행렬 $\mathbf{A}^{-1}$

$$\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$$

  - 예를 들어, $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}$의 역행렬은 $\begin{pmatrix} 2 & -0.5 \\ -3 & 1 \end{pmatrix}$

- 역행렬을 활용한 방정식 표현과 해

- 방정식: $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$의 확장
  - $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$: 알고 있는 행렬
  - $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{n}$: 알고 있는 벡터
  - $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{m}$: 알고 싶은 알지 못한 벡터

$$A_{1,:}\mathbf{x} = A_{1,1}x_1 + A_{1,2}x_2 + \cdots + A_{1,n}x_n = b_1$$
$$A_{2,:}\mathbf{x} = A_{2,1}x_1 + A_{22}x_2 + \cdots + A_{2,n}x_n = b_2$$
$$\cdots$$
$$A_{m,:}\mathbf{x} = A_{m,1}x_1 + A_{m,2}x_2 + \cdots + A_{m,n}x_n = b_m$$

- 선형 방정식의 경우
  - 불능: 해 없음
  - 부정: 다수의 해 존재
  - 유일해 존재 → 역행렬을 이용하여 해를 구함 →

$$\begin{aligned} \mathbf{Ax} &= \mathbf{b} \\ \mathbf{A}^{-1}\mathbf{Ax} &= \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \\ \mathbf{I}_n\mathbf{x} &= \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \\ \mathbf{x} &= \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \end{aligned}$$

- 정리

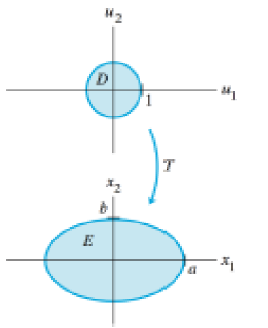
정리 2-1 다음 성질은 서로 필요충분조건이다.

- **A**는 역행렬을 가진다. 즉, 특이행렬이 아니다.
- **A**는 최대계수를 가진다.
- **A**의 모든 행이 선형독립이다.
- **A**의 모든 열이 선형독립이다.
- **A**의 행렬식은 0이 아니다.
- $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$는 양의 정부호positive definite 대칭 행렬이다.
- **A**의 고윳값은 모두 0이 아니다.

- 행렬식(**Determinant**)

$$\left.\begin{aligned} det\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} &= ad - bc \\ det\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} &= aei + bfg + cdh - ceg - bdi - afh \end{aligned}\right\} \quad (2.15)$$

예를 들어 $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}$의 행렬식은 2*4−1*6=2



{변환된 E 공간 부피}
= |*det*(**A**)|·{원래 D 공간 부피}

- 기하학적 의미
  - 행렬식의 절대값은 주어진 행렬의 곱에 의한 공간의 확장 또는 축소로 볼 수 있음
    - If det(A) = 0, 하나의 차원을 따라 축소되어 공간의 부피를 잃게 됨

        - If det(A) = 1, 공간의 부피를 유지한 변환
    - 차원에서의 기하학적인 예시
        - 2차원에서는 2개의 행 벡터가 이루는 평행사변형 넓이
        - 3차원에서는 3개의 행 벡터가 이루는 평행사각기둥의 부피

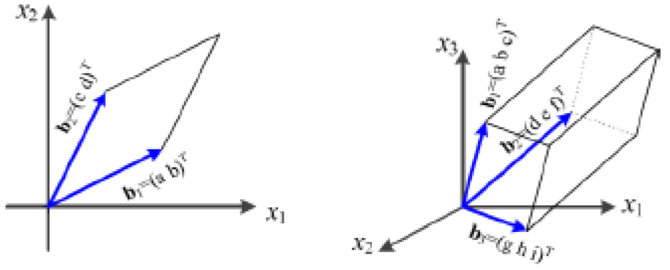


그림 2-10 행렬식의 기하학적 해석

- 정부호(**Definiteness**) 행렬

    양의 정부호 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}>0$

    - 예를 들어, $\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 2\end{pmatrix}$는 $(x_1 \quad x_2)\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x_1\\x_2\end{pmatrix} = x_1^2 + 2x_2^2$ 이므로

    $\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & 2\end{pmatrix}$는 양의 정부호 행렬

    - 종류

        양의 준정부호positive semi-definite 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}\geq 0$

        음의 정부호negative definite 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}< 0$

        음의 준정부호negative semi-definite 행렬 : $\mathbf{0}$이 아닌 모든 벡터 $\mathbf{x}$에 대해, $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}\leq 0$

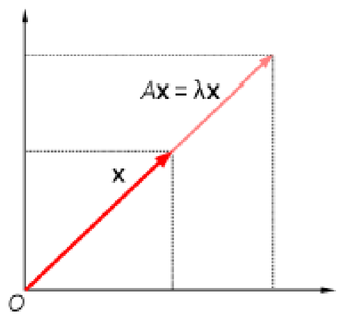
행렬 분해

- **분해**(Decomposition)란?
    - 정수 3717은 특성이 보이지 않지만, 3*3*7*59로 소인수분해하면 특성이 보이듯 분해하는 것
- 고윳값(**Eigenvalue**)과 고유 벡터(**Eigenvector**)

    고유 벡터 $\mathbf{v}$와 고윳값 λ

    $$\mathbf{A}\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v} \qquad (2.20)$$

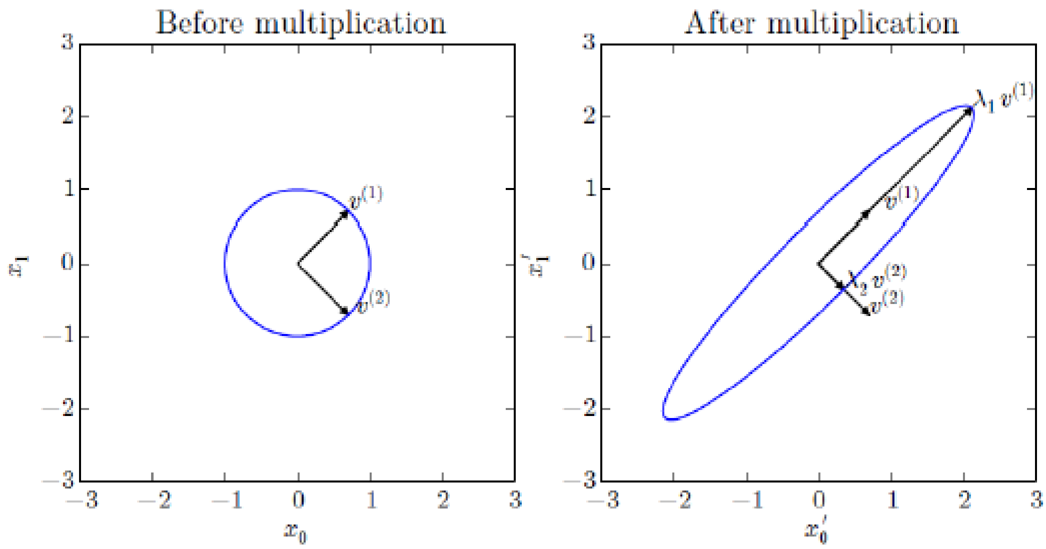
    - 2차원 공간에서의 고윳값과 고유 벡터의 기하학적 해석



    예를 들어, $\begin{pmatrix}2 & 1\\1 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} = 3\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$이고 $\begin{pmatrix}2 & 1\\1 & 2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix} = 1\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$이므로,

    $\lambda_1 = 3, \lambda_2 = 1$이고 $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$, $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}$

- 고윳값의 효과



- 왼쪽: 원으로 표현된 단위 벡터 $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^2$의 모든 점
- 오른쪽: 행렬 $\mathbf{A}$의 곱에 의한 $\mathbf{Au}$ 모든 점, $\mathbf{A}$는 원을 고유 벡터 방향으로는 고유값만큼 크기 변환만 시킴

- 고윳값과 고유 벡터의 기하학적 해석

예제 2-5

[그림 2-12]의 반지름이 1인 원 위에 있는 4개의 벡터 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4$가 $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$에 의해 어떻게 변환되는지 살펴보자. 변환 후의 벡터를 각각 $\mathbf{x}_1', \mathbf{x}_2', \mathbf{x}_3', \mathbf{x}_4'$로 표기한다.

$$\mathbf{x}_1' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/\sqrt{2} \\ 3/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{x}_2' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{x}_3' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{x}_4' = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \end{pmatrix}$$

눈 여겨 볼 점은 $\mathbf{A}$의 고유 벡터 $\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$과 방향이 같은 $\mathbf{x}_1$과 $\mathbf{x}_3$이다. 이들은 변환 때문에 길이가 달라지더라도 방향은 그대로 유지한다. 식 (2.20)을 충실히 따르고 있다. 이때 길이의 변화는 고윳값 λ에 따른다. 즉, $\mathbf{x}_1$은 3배만큼, $\mathbf{x}_3$은 1배만큼 길이가 변한다. 나머지 $\mathbf{x}_2$와 $\mathbf{x}_4$는 길이와 방향이 모두 변한다. 파란 원 위에 있는 모든 점을 변환하면 빨간색의 타원이 된다. 파란 원 위에 존재하는 무수히 많은 점(벡터) 중에 방향이 바뀌지 않는 것은 고유 벡터에 해당하는 $\mathbf{x}_1$과 $\mathbf{x}_3$뿐이다.

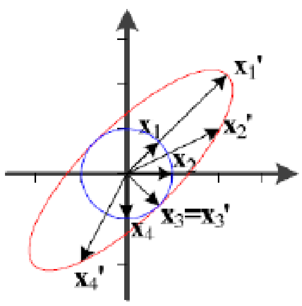


그림 2-12 고유 벡터의 공간 변환

- 고유 분해(**Eigen-decomposition**)

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{Q}^{-1} \qquad (2.21)$$

- $\mathbf{Q}$는 $\mathbf{A}$의 고유 벡터를 열에 배치한 행렬이고 $\boldsymbol{\Lambda}$는 고윳값을 대각선에 배치한 대각행렬

$$
\begin{aligned}
A &= Q\Lambda Q^T \\
&= \begin{bmatrix} v_1 & v_2 & \cdots & v_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \lambda_1 v_1 & \lambda_2 v_2 & \cdots & \lambda_n v_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \\
&= \lambda_1 v_1 v_1^T + \lambda_2 v_2 v_2^T + \cdots + \lambda_n v_n v_n^T
\end{aligned}
$$

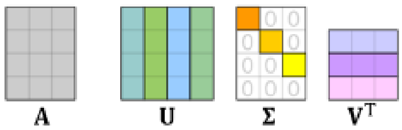
- 예를 들어, $\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 \end{pmatrix}$
- 고유 분해는 고유값과 해당 고유 벡터가 존재하는 정사각행렬에만 적용 가능
- 하지만, 기계 학습에서는 정사각행렬이 아닌 경우의 분해도 필요하므로

  고유 분해는 한계를 가짐

- n*m 행렬 A의 **특잇값 분해**(**S**ingular **V**alue **D**ecomposition)

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^{\mathbf{T}} \qquad (2.22)$$

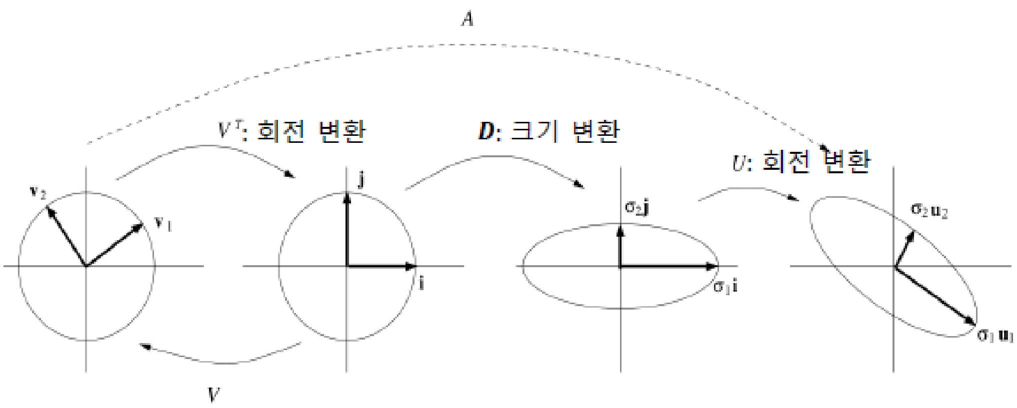
- 왼쪽 특이행렬 $\mathbf{U}$는 $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$의 고유 벡터를 열에 배치한 n*n 행렬
- 오른쪽 특이행렬 $\mathbf{V}$는 $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$의 고유 벡터를 열에 배치한 m*m 행렬
- $\boldsymbol{\Sigma}$는 $\mathbf{A}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$의 고윳값의 제곱근을 대각선에 배치한 n*m 대각행렬



예를 들어, $\mathbf{A}$를 4*3 행렬이라고 했을 때 다음과 같이 특잇값 분해가 된다.

$$
\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 3 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.1914 & -0.2412 & 0.1195 & -0.9439 \\ -0.5144 & 0.6990 & -0.4781 & -0.1348 \\ -0.6946 & -0.6226 & -0.2390 & 0.2697 \\ -0.4651 & 0.2560 & 0.8367 & 0.1348 \end{pmatrix}
$$
$$
\begin{pmatrix} 3.7837 & 0 & 0 \\ 0 & 2.7719 & 0 \\ 0 & 0 & 1.4142 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.7242 & -0.4555 & -0.5177 \\ -0.6685 & 0.2797 & 0.6891 \\ 0.1690 & -0.8452 & 0.5071 \end{pmatrix}
$$

- 기하학적 해석



- 정사각행렬이 아닌 행렬의 역행렬을 구하는데 사용됨

$$\text{SVD} \qquad\qquad\qquad\qquad \text{Pseudoinverse}$$

$$A = U\begin{pmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_s \\ & & 0 \end{pmatrix}V^T \longrightarrow A^+ = V\begin{pmatrix} 1/\sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & 1/\sigma_s & 0 \end{pmatrix}U^T$$

확률과 통계

확률 기초

- **확률변수** (Random value)

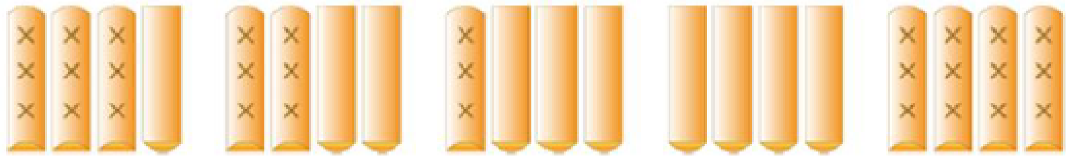
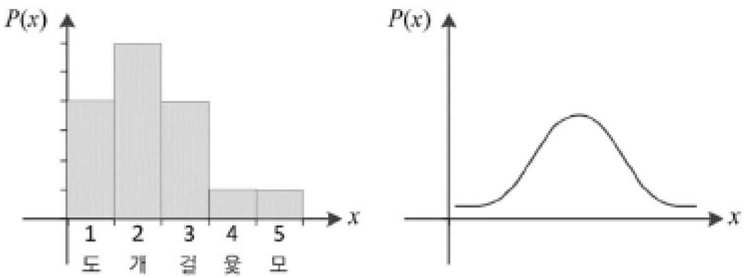


그림 2-13 윷을 던졌을 때 나올 수 있는 다섯 가지 경우(왼쪽부터 도, 개, 걸, 윷, 모)

  - 다섯 가지 경우 중 한 값을 갖는 확률변수 x
  - x의 정의역 : { 도, 개, 걸, 윷, 모 }
- **확률분포** (probability distribution)
  - 확률질량함수 (probability mass function) : 이산 확률 변수

$$P(x = \text{도}) = \frac{4}{16}, P(x = \text{개}) = \frac{6}{16}, P(x = \text{걸}) = \frac{4}{16}, P(x = \text{윷}) = \frac{1}{16}, P(x = \text{모}) = \frac{1}{16}$$

  - 확률밀도함수 (probability density function) : 연속 확률 변수



(a) 이산인 경우의 확률질량함수 (b) 연속인 경우의 확률밀도함수

그림 2-14 확률분포

- **확률벡터** (random vector)
  - Iris에서 x는 4차원 확률 벡터

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^{\mathrm{T}} = (\text{꽃받침 길이}, \text{꽃받침 너비}, \text{꽃잎 길이}, \text{꽃잎 너비})^{\mathrm{T}}$$

- 간단한 확률실험 장치
  - 주머니에서 번호르를 뽑은 다음, 번호에 따라 해당 병에서 공을 뽑고 색을 관찰함
  - 번호를 y, 공의 색을 x라는 확률변수로 표현하면

정의역은 $y \in \{①, ②, ③\}$, $x \in \{$파랑, 하양$\}$

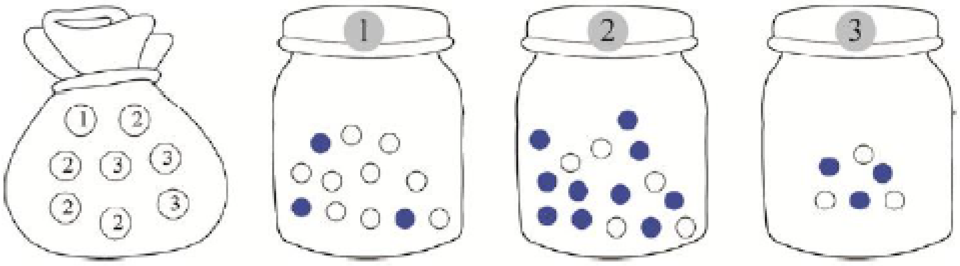


그림 2-15 확률 실험

- **곱** 규칙 (product rule) 과 **합** 규칙 (sum rule)

  1568701322664

  - 조건부 확률 (conditional probability)에 의한 결합확률 계산

    $$\text{곱 규칙: } P(y,x) = P(x|y)P(y) \tag{2.23}$$

    - 하얀 공이 뽑힐 확률

      $$P(\text{하양}) = P(\text{하양}|①)P(①) + P(\text{하양}|②)P(②) + P(\text{하양}|③)P(③) = \frac{9}{12}\frac{1}{8} + \frac{5}{15}\frac{4}{8} + \frac{3}{6}\frac{3}{8} = \frac{43}{96}$$

  - 합 규칙과 곱 규칙에 의한 주변확률 (marginal probability) 계산

    $$\text{합 규칙: } P(x) = \sum_y P(y,x) = \sum_y P(x|y)P(y) \tag{2.24}$$

- **조건부 확률**

  $$P(\mathrm{y} = y \mid \mathrm{x} = x) = \frac{P(\mathrm{y} = y, \mathrm{x} = x)}{P(\mathrm{x} = x)}$$

- 확률의 **연쇄 법칙** (chain rule)

  $$P(\mathrm{x}^{(1)}, \ldots, \mathrm{x}^{(n)}) = P(\mathrm{x}^{(1)})\Pi_{i=2}^{n} P(\mathrm{x}^{(i)} \mid \mathrm{x}^{(1)}, \ldots, \mathrm{x}^{(i-1)})$$

- **독립** (indepedence)

  $$\forall x \in \mathrm{x}, y \in \mathrm{y},\ p(\mathrm{x} = x, \mathrm{y} = y) = p(\mathrm{x} = x)p(\mathrm{y} = y)$$

- **조건부 독립** (conditional independence)

  $$\forall x \in \mathrm{x}, y \in \mathrm{y}, z \in \mathrm{z},\ p(\mathrm{x} = x, \mathrm{y} = y \mid \mathrm{z} = z) = p(\mathrm{x} = x \mid \mathrm{z} = z)p(\mathrm{y} = y \mid \mathrm{z} = z)$$

- **기대값** (expectation)

  $$\mathbb{E}_{\mathrm{x} \sim P}[f(x)] = \sum_x P(x)f(x) \quad \rightarrow \quad \text{linearity of expectations:}$$

  $$\mathbb{E}_{\mathrm{x}}[\alpha f(x) + \beta g(x)] = \alpha \mathbb{E}_{\mathrm{x}}[f(x)] + \beta \mathbb{E}_{\mathrm{x}}[g(x)]$$

베이즈 정리와 기계 학습

- **베이즈 정리** (Bayes's rule)

$$P(y,x) = P(x|y)P(y) = P(x,y) = P(y|x)P(x)$$

$$\longrightarrow \quad P(y|x) = \frac{P(x|y)P(y)}{P(x)} \qquad (2.26)$$

- 다음 질문을 식으로 쓰면

  "하얀 공이 나왔다는 사실만 알고 어느 병에서 나왔는지 모르는데, 어느 병인지 추정하라."

  $$\hat{y} = \underset{y}{\text{argmax}}\, P(y|x) \qquad (2.27)$$

  베이즈 정리를 적용하면, $\hat{y} = \underset{y}{\text{argmax}}\, P(y|x = \text{하양}) = \underset{y}{\text{argmax}} \frac{P(x = \text{하양}|y)P(y)}{P(x = \text{하양})}$

  세 가지 경우에 대해 확률을 계산하면,

  $$P(①|\text{하양}) = \frac{P(\text{하양}|①)P(①)}{P(\text{하양})} = \frac{\frac{9}{12}\frac{1}{8}}{\frac{43}{96}} = \frac{9}{43}$$

  $$P(②|\text{하양}) = \frac{P(\text{하양}|②)P(②)}{P(\text{하양})} = \frac{\frac{5}{15}\frac{4}{8}}{\frac{43}{96}} = \frac{16}{43} \longrightarrow ③\text{번 병일 확률이 가장 높음}$$

  $$P(③|\text{하양}) = \frac{P(\text{하양}|③)P(③)}{P(\text{하양})} = \frac{\frac{3}{6}\frac{3}{8}}{\frac{43}{96}} = \frac{18}{43}$$

- 해석 : **사후 (posteriori) 확률 = 우도 (likelihood) 확률 * 사전 (prior) 확률**

  $$\overbrace{P(y|x)}^{\text{사후확률}} = \frac{\overbrace{P(x|y)}^{\text{우도}}\ \overbrace{P(y)}^{\text{사전확률}}}{P(x)}$$

- 기계학습에 적용
  - 예시) Iris 데이터 부류 문제
    - 특징 벡터 $\mathbf{x}$, 부류 $y \in$ {setosa, versicolor, virginica}
    - 분류 문제를 argmax로 표현하면 식 (2.29)

    $$\hat{y} = \underset{y}{\text{argmax}}\, P(y|\mathbf{x}) \qquad (2.29)$$

    그림 2-16 붓꽃의 부류 예측 과정

  - 사후확률 P(y|x)를 직접 추정하는 일은 아주 단순한 경우를 빼고 불가능
  - 따라서 베이즈 정리를 이용하여 추정
    - 사전확률

      $$\text{사전확률:}\ P(y = c_i) = \frac{n_i}{n} \qquad (2.30)$$

    - 우도확률 : 밀도추정기법으로 추정

최대 우도

- 매개변수 (모수) Θ를 모르는 상황에서 매개변수를 추정하는 문제

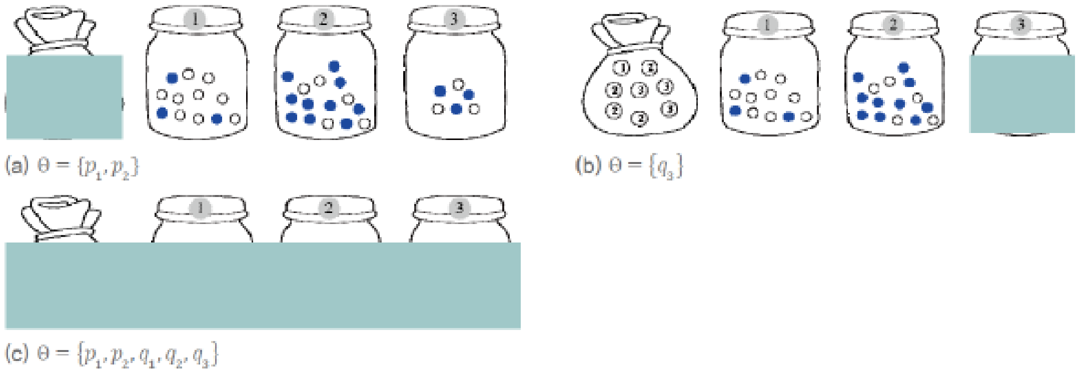


그림 2-17 매개변수가 감추어진 여러 가지 상황

관측된 데이터집합 $\mathbb{X}$={●○○●○●○○●●○○} 라 할 때,

"데이터 $\mathbb{X}$가 주어졌을 때, $\mathbb{X}$를 발생시켰을 가능성을 최대로 하는 매개변수 $\Theta = \{q_3\}$의 값을 찾아라."

- 최대 우도법 (maximum likelihood)
  - 어떤 확률변수의 관찰된 값들을 토대로 그 확률변수의 매개변수를 구하는 방법
  - [그림 2-17(b)] 문제를 수식으로 쓰면,

$$\hat{q}_3 = \underset{q_3}{\operatorname{argmax}} P(\mathbb{X}|q_3) \tag{2.31}$$

  - 일반화 하면,

최대 우도 추정: $$\hat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} P(\mathbb{X}|\Theta) \tag{2.32}$$

  - 수치 문제를 피하기 위해 로그 표현으로 바꾸면,

최대 로그우도 추정: $$\hat{\Theta} = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} \log P(\mathbb{X}|\Theta) = \underset{\Theta}{\operatorname{argmax}} \sum_{i=1}^{n} \log P(\mathbf{x}_i|\Theta) \tag{2.34}$$

    - 단조 증가하는 로그 함수를 이용하여 계산 단순화

평균과 분산

- 데이터의 **요약 정보**로서 **평균**과 **분산**

$$\left.\begin{aligned} \text{평균} \quad \mu &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \\ \text{분산} \quad \sigma^2 &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \mu)^2 \end{aligned}\right\} \tag{2.36}$$

$$\operatorname{Var}(f(x)) = \mathbb{E}\left[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2\right]$$

- 평균 벡터(치우침 정도)와 공분산 행렬 (covariance matrix) (확률변수의 상관정도)

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \tag{2.37}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_i - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \tag{2.39}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2d} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \sigma_{d1} & \sigma_{d2} & \cdots & \sigma_{dd} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1d} \\ \sigma_{21} & \sigma_2^2 & \cdots & \sigma_{2d} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \sigma_{d1} & \sigma_{d2} & \cdots & \sigma_d^2 \end{pmatrix}$$

Covariance matrix:

$$\operatorname{Cov}(\mathbf{x})_{i,j} = \operatorname{Cov}(\mathrm{x}_i, \mathrm{x}_j)$$

- 평균 벡터와 공분산 행렬 예제

예제 2-7

Iris 데이터베이스의 샘플 중 8개만 가지고 공분산 행렬을 계산하자.

$$\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix}5.1\\3.5\\1.4\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix}4.9\\3.0\\1.4\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_3 = \begin{pmatrix}4.7\\3.2\\1.3\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_4 = \begin{pmatrix}4.6\\3.1\\1.5\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_5 = \begin{pmatrix}5.0\\3.6\\1.4\\0.2\end{pmatrix}, \mathbf{x}_6 = \begin{pmatrix}5.4\\3.9\\1.7\\0.4\end{pmatrix}, \mathbf{x}_7 = \begin{pmatrix}4.6\\3.4\\1.4\\0.3\end{pmatrix}, \mathbf{x}_8 = \begin{pmatrix}5.0\\3.4\\1.5\\0.2\end{pmatrix}\}$$

먼저 평균벡터를 구하면 $\boldsymbol{\mu} = (4.9125,\ 3.3875,\ 1.45,\ 0.2375)^{\mathrm{T}}$이다. 첫 번째 샘플 $\mathbf{x}_1$을 식 (2.39)에 적용하면 다음과 같다.

$$(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu})(\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix}0.1875\\0.1125\\-0.05\\-0.0375\end{pmatrix}(0.1875 \quad 0.1125 \quad -0.05 \quad -0.0375)$$

$$= \begin{pmatrix}0.0325 & 0.0211 & -0.0094 & -0.0070\\ 0.0211 & 0.0127 & -0.0056 & -0.0042\\ -0.0094 & -0.0056 & 0.0025 & 0.0019\\ -0.0070 & -0.0042 & 0.0019 & 0.0014\end{pmatrix}$$

나머지 7개 샘플도 같은 계산을 한 다음, 결과를 모두 더하고 8로 나누면 다음과 같은 공분산 행렬을 얻는다.

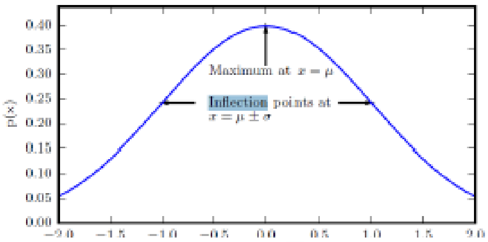
$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix}0.0661 & 0.0527 & 0.0181 & 0.0083\\ 0.0527 & 0.0736 & 0.0181 & 0.0130\\ 0.0181 & 0.0181 & 0.0125 & 0.0056\\ 0.0083 & 0.0130 & 0.0056 & 0.0048\end{pmatrix}$$

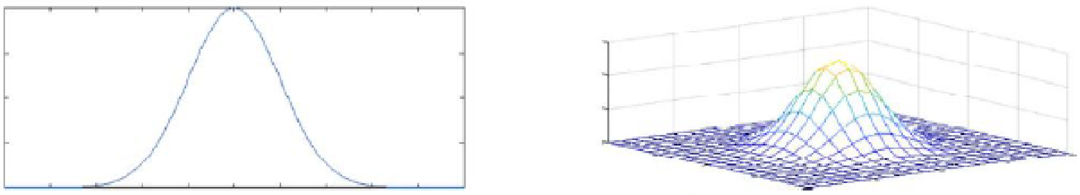
유용한 확률분포

- **가우시안** 분포 (Gaussian distribution)

  - 평균 μ와 분산 σ^2으로 정의

$$N(x;\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right)$$





(a) 1차원 (b) 2차원

그림 2-19 가우시안 분포

  - 다차원 가우시안 분포

평균벡터 $\boldsymbol{\mu}$와 공분산행렬 $\boldsymbol{\Sigma}$로 정의

$$N(\mathbf{x};\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}|}\sqrt{(2\pi)^d}}\exp\left(-\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu})\right)$$

- **베르누이** 분포 (Bernoulli distribution)

성공(x=1) 확률 p이고 실패(x=0) 확률이 1-p인 분포

$$Ber(x;p) = p^x(1-p)^{1-x} = \begin{cases} p, & x = 1\text{일 때} \\ 1-p, & x = 0\text{일 때} \end{cases}$$

- **이항** 분포 (Binomial distribution)

  성공 확률이 p인 베르누이 실험을 m번 수행할 때 성공할 횟수의 확률분포

$$B(x;m,p) = C_m^x p^x(1-p)^{m-x} = \frac{m!}{x!\,(m-x)!}p^x(1-p)^{m-x}$$

  확률질량함수

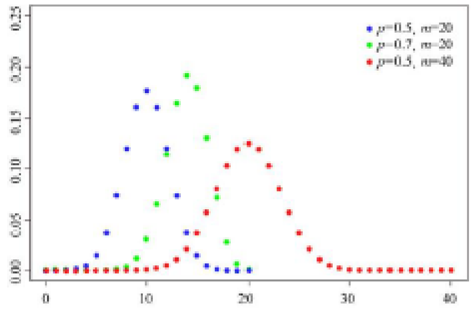
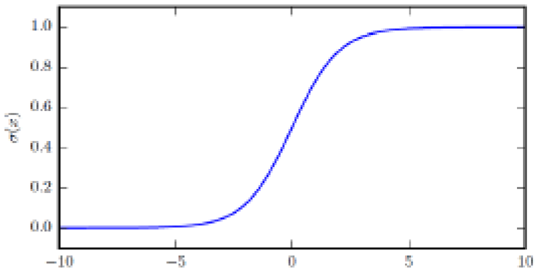


그림 2-20 이항 분포

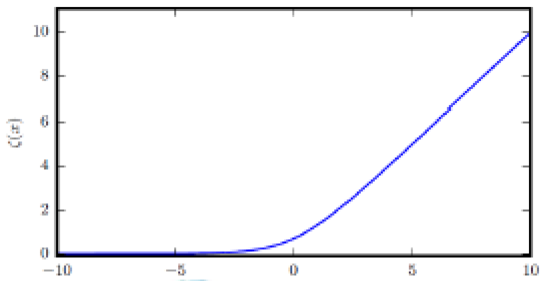
- 확률 분포와 연관된 유용한 함수들
  - **로지스틱 시그모이드** 함수 (logistic sigmoid function)

    일반적으로 베르누이 분포의 매개변수를 조정을 통해 얻어짐



  - **소프트플러스** 함수 (softplus function)

    정규 분포의 매개변수의 조정을 통해 얻어짐



- **지수** 분포 (exponential distribution)

$$p(x;\lambda) = \lambda \mathbf{1}_{x\geq 0}\exp(-\lambda x)$$

- 라플라스 분포 (laplace distribution)

$$\text{Laplace}(x;\mu,\gamma) = \frac{1}{2\gamma}\exp\left(-\frac{|x-\mu|}{\gamma}\right)$$

- 디랙 분포 (dirac distribution)

$$p(x) = \delta(x-\mu)$$

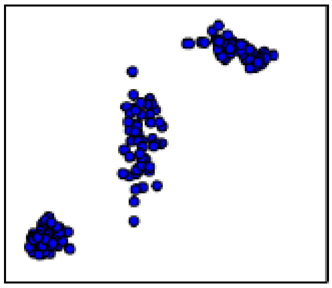
- 경험적 분포 (empirical distribution)

$$\hat{p}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(i)})$$

- 혼합 분포들 (mixture distributions)

$$P(\mathrm{x}) = \sum_i P(\mathrm{c} = i)P(\mathrm{x} \mid \mathrm{c} = i)$$

3개의 요소를 가진 가우시안 혼합 분포 예시 (가우시안 혼합 모델 추청 가능)



- 변수 변환 (change of variables)
    - 기존 확률변수를 새로운 확률변수로 바꾸는 것
    - 변환 y = g(x)와 가역성을 가진 g에 의해 정의되는 x,y 두 확률변수를 가정할 때
      두 확률 변수는 다음과 같이 상호 정의될 수 있음

$$p_x(\boldsymbol{x}) = p_y(g(\boldsymbol{x}))\left|\det\left(\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right)\right|$$

예) 확률변수 x의 확률질량함수가 다음과 같을 때,

$$\left(\frac{4}{5}\right)\left(\frac{1}{5}\right)^{x-1}, \ x=1,2, \ldots$$

새로운 확률변수 $y=x^2$의 확률질량함수는 다음과 같이 정의됨

$$y=x^2 \ \Rightarrow \ x=\sqrt{y}$$

$$f(x)=f(\sqrt{y})=\left(\frac{4}{5}\right)\left(\frac{1}{5}\right)^{\sqrt{y}-1}=g(y) \longrightarrow g(y)=\begin{cases}\left(\frac{4}{5}\right)\left(\frac{1}{5}\right)^{\sqrt{y}-1}, & y=1,4,9,\ldots \\ 0, & \text{elsewhere}\end{cases}$$

정보이론

- **정보이론**과 **확률통계**는 많은 **교차점**을 가짐
- 확률통계는 기계학습의 기초적인 **근간**을 제공
    - 정보이론 관점에서 기계학습을 접근이 가능
        - 해당 확률 분포를 추정하거나 확률 분포 간의 유사성을 정량화 등의 기계 학습에 정보이론을 활용한 예로서 **엔트로피, 교차 엔트로피, KL 다이버전스**
- 정보이론 : 사건이 지닌 **정보를 수량화**할 수 있나?
    - "아침에 해가 뜬다" 와 오늘 "아침에 일식이 있었다"라는
      두 사건중 어느 것이 더 많은 정보를 가지는지
    - 정보이론의 기본 원리 ▶ **확률이 작을수록 많은 정보**
        - **자주 발생하는 사건보다 잘 일어나지 않는 사건 (unlikely event)의 정보량이 많음**

자기 정보 (self information)

사건(메시지) e_i의 정보량

(단위: 로드의 밑이 2인 경우, 비트bit 또는 로그의 밑이 자연상수 경우, 나츠nat)

$$h(e_i) = -\log_2 P(e_i) \quad \text{또는} \quad h(e_i) = -\log_e P(e_i) \qquad (2.44)$$

예를 들면, 동전에서 앞면이 나오는 사건의 정보량은 $-log_2\ (1/2)=1$이고,
주사위에서 1이 나오는 사건의 정보량은 $-log_2\ (1/6)≒2.58$임
따라서, 후자의 사건이 전자의 사건보다 높은 정보량을 가짐

엔트로피 (entropy)

- 확률 변수 x의 불확실성을 나타내는 엔트로피
- 모든 사건 정보량의 기대값으로 표현

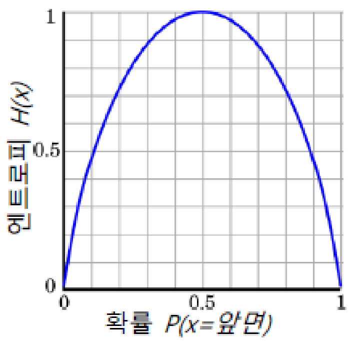
$$\text{이산 확률분포} \quad H(x) = -\sum_{i=1,k} P(e_i)\log_2 P(e_i) \quad \text{또는} \quad H(x) = -\sum_{i=1,k} P(e_i)\log_e P(e_i) \qquad (2.45)$$

$$\text{연속 확률분포} \quad H(x) = -\int_{\mathbb{R}} P(x)\log_2 P(x) \quad \text{또는} \quad H(x) = -\int_{\mathbb{R}} P(x)\log_e P(x) \qquad (2.46)$$

  - 예를 들면, 동전의 앞뒤의 발생 확률이 동일한 경우의 엔트로피는

$$\begin{aligned} H(x) &= -\sum_x P(x)\log P(x) \\ &= -(0.5 \times \log_2 0.5 + 0.5 \times \log_2 0.5) \\ &= -\log_2 0.5 \\ &= -(-1) \end{aligned}$$

  - 동전의 발생 확률에 따른 엔트로피 변화



→ 공평한 동전을 사용할 때에 가장 큰 엔트로피를 구할 수 있으며, 동전 던지기 결과 전송에는 최대 1비트가 필요함을 의미

▪ 모든 사건이 동일한 확률을 가질 때 즉, 불확실성이 가장 높은 경우, 엔트로피가 최고임

- 자기 정보와 엔트로피 예제

예제 2-8

윷을 나타내는 확률변수를 x라 할 때 x의 엔트로피는 다음과 같다.

$$H(x) = -\left(\frac{4}{16}\log_2\frac{4}{16} + \frac{6}{16}\log_2\frac{6}{16} + \frac{4}{16}\log_2\frac{4}{16} + \frac{1}{16}\log_2\frac{1}{16} + \frac{1}{16}\log_2\frac{1}{16}\right) = 2.0306\text{비트}$$

주사위는 눈이 6개인데 모두 1/6이라는 균일한 확률을 가진다. 이 경우 엔트로피를 계산하면 다음과 같다.

$$H(x) = -\left(\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6} + \frac{1}{6}\log_2\frac{1}{6}\right) = 2.585 \text{ 비트}$$

- 주사위가 윷보다 엔트로피가 높은 이유는?
  - 주사위는 모든 사건이 동일한 확률 → 어떤 사건이 일어날지 윷보다 예측이 어려움
  - 주사위가 윷보다 더 무질서하고 불확실성이 큼 → 엔트로피가 높음
  - 정의역의 크기가 크면 엔트로피도 커짐
    - – 주사위 6개, 윷 5개 하지만 해당 주사위와 윷의 정의역을 동일하게 해도 주사위의 엔트로피가 큼

- **교차 엔트로피** (cross entropy) : 두 확률분포 P와 Q 사이의 교차 엔트로피

$$H(P,Q) = -\sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) = -\sum_{i=1,k} P(e_i)\log_2 Q(e_i) \qquad (2.47)$$

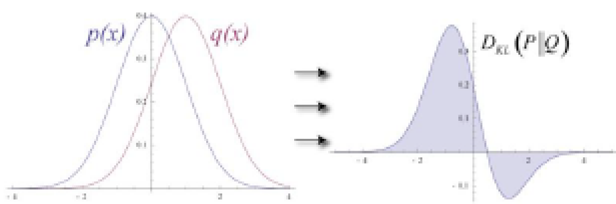
  - 딥러닝의 **손실함수**로 자주 사용됨
  - 식을 전개하면

$$\begin{aligned} H(P,Q) &= -\sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) \\ &= -\sum_{x} P(x)\log_2 P(x) + \sum_{x} P(x)\log_2 P(x) - \sum_{x} P(x)\log_2 Q(x) \\ &= H(P) + \underbrace{\sum_{x} P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)}}_{\text{KL 다이버전스}^{\text{divergence}}} \end{aligned}$$

    - 여기서 **P**를 **데이터의 분포**라 하면, 이는 학습 과정에서 **변화하지 않음**
      - 교차 엔트로피를 손실함수로 사용하는 경우, **KL 다이버전스의 최소화함과 동일**

- KL 다이버전스
  - 식 (2.48)은 P와 Q 사이의 KL 다이버전스
  - **두 확률분포 사이의 거리를 계산**할 때 주로 사용

$$KL(P \parallel Q) = \sum_{x} P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)} \qquad (2.48)$$



Original Gaussian PDF's　　KL Area to be Integrated

- 교차 엔트로피와 KL 다이버전스의 관계

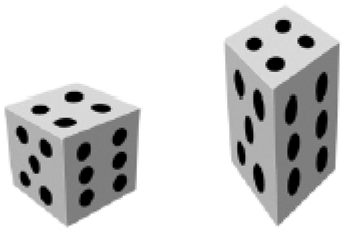
$$P\text{와 } Q\text{의 교차 엔트로피 } H(P,Q) = H(P) + \sum_x P(x)\log_2 \frac{P(x)}{Q(x)} \qquad (2.49)$$
$$= P\text{의 엔트로피} + P\text{와 } Q \text{ 간의 } KL \text{ 다이버전스}$$

  - **가지고 있는 데이터 분포 P(x)와 추정한 데이터 분포 Q(x)간의 차이 최소화하는데 교차 엔트로피 사용**

예제 2-9

[그림 2-21]과 같이 정상적인 주사위와 찌그러진 주사위가 있는데, 정상적인 주사위의 확률분포는 P, 찌그러진 주사위의 확률분포는 Q를 따르며, P와 Q가 다음과 같이 분포한다고 가정하자.

$$P(1)=\frac{1}{6},\ P(2)=\frac{1}{6},\ P(3)=\frac{1}{6},\ P(4)=\frac{1}{6},\ P(5)=\frac{1}{6},\ P(6)=\frac{1}{6}$$
$$Q(1)=\frac{3}{12},\ Q(2)=\frac{1}{12},\ Q(3)=\frac{1}{12},\ Q(4)=\frac{1}{12},\ Q(5)=\frac{3}{12},\ Q(6)=\frac{3}{12}$$



(a) 정상 주사위 (b) 찌그러진 주사위

그림 2-21 확률분포가 다른 두 주사위

확률분포 P와 Q 사이의 교차 엔트로피와 KL 다이버전스는 다음과 같다.

$$H(P,Q) = -\left(\frac{1}{6}\log_2\frac{3}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{1}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{3}{12}+\frac{1}{6}\log_2\frac{3}{12}\right) = 2.7925$$
$$KL(P \parallel Q) = \frac{1}{6}\log_2\frac{2}{3}+\frac{1}{6}\log_2 2+\frac{1}{6}\log_2 2+\frac{1}{6}\log_2 2+\frac{1}{6}\log_2\frac{2}{3}+\frac{1}{6}\log_2\frac{2}{3} = 0.2075$$

[예제 2-8]에서 P의 엔트로피 $H(P)$는 2.585이었다. 따라서 식 (2.49)가 성립함을 알 수 있다.

최적화

- 순수 수학 최적화와 기계 학습 최적화의 차이
  - 기계학습의 처적화는 단지 **훈련집합**이 주어지고,
    훈련집합에 따라 정해지는 **목적함수의 최저점**을 찾아야 함
    - 주로 SGD(스토캐스틱 경사 하강법) 사용
    - 데이터로 미분하는 과정 필요 ▶ 오류 역전파 알고리즘

매개변수 공간의 탐색

- 학습 모델의 매개변수 공간
  - 높은 차원에 비해 **훈련집합의 크기가 작아 참인 확률분포를 구하는 일은 불가능**
  - 기계학습은 **적절한 모델을 선택**하고, **목적함수를 정의**하고, 모델의 **매개변수 공간을 탐색**하여 **목적함수가 최저가 되는 최적점을 찾는 전략** 사용
    - 특징공간에서 해야 하는 일을 모델의 **매개변수 공간**에서 하는 일로 대치

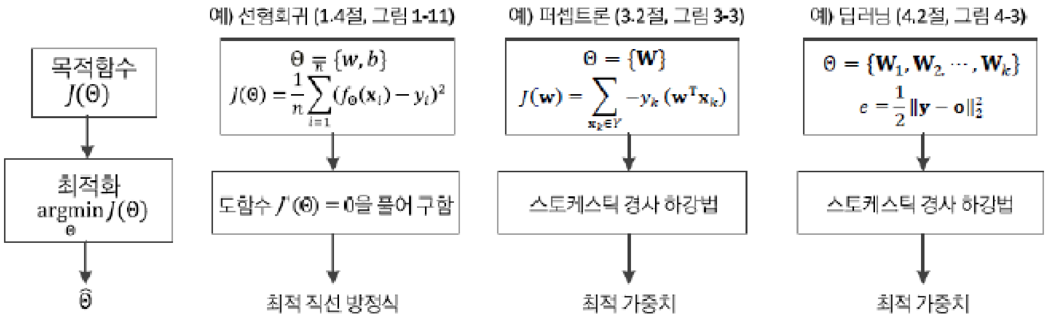


그림 2-22 최적화를 이용한 기계 학습의 문제풀이 과정

- 특징공간보다 수 배 ~ 수만배 넓음
  - 선형회귀에서의 특징공간은 1차원, 매개변수 공간은 2차원
  - MNIST 인식하는 딥러닝 모델 : 784차원 특징공간, 수십~수백만 차원 매개변수 공간

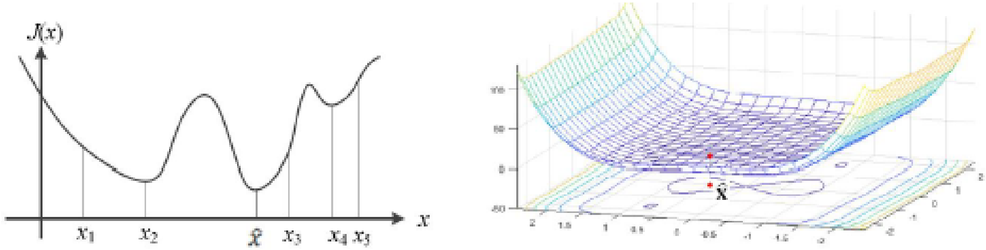


그림 2-23 최적해 탐색

[그림 2-23] 개념도의 매개변수 공간: $\hat{x}$은 전역global 최적해, x_2와 x_4는 지역local 최적해

x_2와 같이 전역 최적해에 가까운 지역 최적해를 찾고 만족하는 경우 많음

- 최적화 문제 해결
  - **낱낱탐색**(exhaustive search) 알고리즘
    - 차원이 조금만 높아져도 적용 불가능

알고리즘 2-1 낱낱탐색 알고리즘

입력: 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$

출력: 최적해 $\hat{\Theta}$

```
가능한 해를 모두 생성하여 집합 S에 저장한다.
min을 충분히 큰 값으로 초기화한다.
for (S에 속하는 각 점 Θ_current에 대해)
    if(J(Θ_current)< min) min=J(Θ_current), Θ_best = Θ_current
Θ̂ = Θ_best
```

  - **무작위탐색**(random search) 알고리즘
    - 아무 전략이 없는 순진한 알고리즘

알고리즘 2-2 무작위 탐색 알고리즘

입력: 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$

출력: 최적해 $\hat{\Theta}$

```
min을 충분히 큰 값으로 초기화한다.
repeat
    무작위로 해를 하나 생성하고 Θ_current 라 한다.
    if(J(Θ_current)<min) min=J(Θ_current), Θ_best = Θ_current
until(멈춤 조건)
Θ̂ = Θ_best
```

  - 기계학습이 사용하는 전형적인 알고리즘

- **목적함수가 작아지는 방향**을 주로 **미분으로 찾아냄**(라인 3)

알고리즘 2-3 기계 학습이 사용하는 전형적인 탐색 알고리즘(1장의 [알고리즘 1-1]과 같음)

입력 : 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$

출력 : 최적해 $\widehat{\mathbf{\Theta}}$

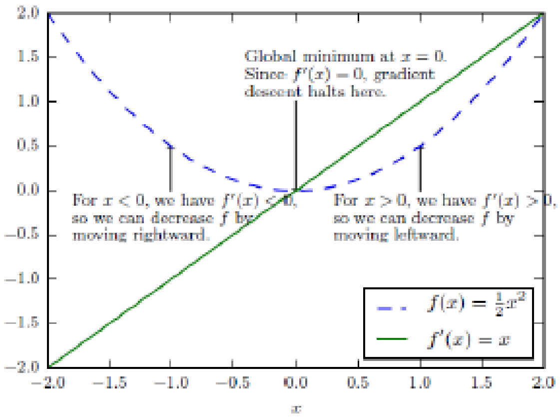
```
1  난수를 생성하여 초기해 Θ을 설정한다.
2  repeat
3     J(Θ)가 작아지는 방향 dΘ를 구한다.
4     Θ = Θ + dΘ
5  until(멈춤 조건)
6  Θ̂ = Θ
```

미분

- 미분에 의한 최적화
  - 미분의 정의

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}, \qquad f''(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f'(x+\Delta x) - f'(x)}{\Delta x} \tag{2.51}$$

  - **1차 도함수** f'(x)는 함수의 **기울기**, 즉 **값이 커지는 방향**을 지시
    - **-f'(x) 방향에 목적함수의 최저점**이 존재



[알고리즘 2-3]에서 $d\mathbf{\Theta}$로 $-f'(x)$를 사용함 ← 경사 하강 알고리즘의 핵심 원리

- 편미분(Partial Derivative)
  - **변수가 여러 개인 함수의 미분**
  - **미분값이 이루는 벡터**를 **그래디언트**라 부름

여러 가지 표기: $\nabla f, \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}, \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^{\mathrm{T}}$

예)

$$\left.\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(x_1, x_2) = \left(4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3}\right)x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2 \\ \nabla f &= f'(\mathbf{x}) = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}\right)^{\mathrm{T}} = (2x_1^5 - 8.4x_1^3 + 8x_1 + x_2, 16x_2^3 - 8x_2 + x_1)^{\mathrm{T}} \end{aligned}\right\} \tag{2.52}$$

- 기계 학습에서 편미분
  - 매개변수 집합 Θ에 많은 변수가 있으므로 편미분 사용
- 편미분으로 얻은 그래디언트에 따라 최적점을 찾아가는 예제

예제 2-10

초기점 $\mathbf{x}_0=(-0.5,0.5)^T$라고 하자. $\mathbf{x}_0$에서의 그레이디언트는 $f'(\mathbf{x}_0) = (-2.5125, -2.5)^T$ 즉, $\nabla f|_{\mathbf{x}_0} = (-2.5125, -2.5)^T$이다. [그림 2-25]는 $\mathbf{x}_0$에서 그레이디언트를 화살표로 표시하고 있어, $-f'(\mathbf{x}_0)$은 최저점의 방향을 제대로 가리키는 것을 확인할 수 있다. 하지만 얼마만큼 이동하여 다음 점 $\mathbf{x}_1$로 옮겨갈지에 대한 방안은 아직 없다. 2.3.3절에서 공부하는 경사 하강법은 이에 대한 답을 제공한다.

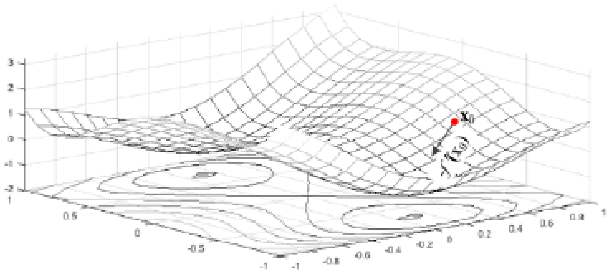


그림 2-25 그레이디언트는 최저점으로 가는 방향을 알려 줌

- 독립변수와 종속변수의 구분
  - [y = wx + b]에서 x는 **독립변수**, y는 **종속변수**
  - 기계학습에서 이런 해석은 **무의미**(예측을 위한 해석에 불과)
  - 최적화는 예측이 아니라 **학습 단계에 필요**

식 (1.8)에서 Θ가 독립변수이고 $e = J(\Theta)$라 하면 e가 종속변수임

$$J(\Theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(f_\Theta(\mathbf{x}_i) - y_i)^2 \qquad (1.8)$$

- **연쇄법칙**

합성함수 $f(x) = g(h(x))$와 $f(x) = g(h(i(x)))$ 의 미분

$$\left.\begin{array}{l} f'(x) = g'\big(h(x)\big)h'(x) \\ f'(x) = g'\Big(h\big(i(x)\big)\Big)h'\big(i(x)\big)i'(x) \end{array}\right\} \qquad (2.53)$$

예) $f(x) = 3(2x^2-1)^2 - 2(2x^2-1) + 5$일 때 $h(x) = 2x^2 - 1$로 두면,

$$f'(x) = \underbrace{(3*2(2x^2-1)-2)}_{g'(h(x))}\underbrace{(2*2x)}_{h'(x)} = 48x^3 - 32x$$

- **다층 퍼셉트론은 합성함수**

$\frac{\partial o_i}{\partial u_{23}^1}$를 계산할 때 연쇄법칙 적용

3.4절 (오류 역전파)에서 설명

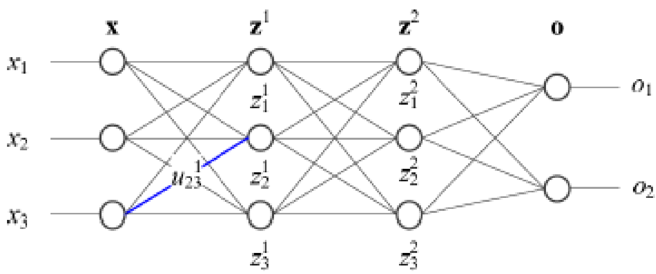


그림 2-26 다층 퍼셉트론은 합성함수

- 야코비언 행렬(Jacobian Matrix)

함수 $\mathbf{f}: \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^m$을 미분하여 얻은 행렬

$$\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla f_1 \\ \vdots \\ \nabla f_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

예)

$\mathbf{f}: \mathbb{R}^2 \mapsto \mathbb{R}^3$인 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (2x_1 + x_2^2, -x_1^2 + 3x_2, 4x_1x_2)^{\mathrm{T}}$

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 2 & 2x_2 \\ -2x_1 & 3 \\ 4x_2 & 4x_1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{J}|_{(2,1)^{\mathrm{T}}} = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ -4 & 3 \\ 4 & 8 \end{pmatrix}$$

- 헤시안 행렬(Hessian Matrix)

2차 편도함수

$$\text{헤시안 행렬 } \mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_n} \end{pmatrix}$$

예)

$$f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2) = \left(4 - 2.1x_1^2 + \frac{x_1^4}{3}\right)x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 10x_1^4 - 25.2x_1^2 + 8 & 1 \\ 1 & 48x_2^2 - 8 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{H}|_{(0,1)^{\mathrm{T}}} = \begin{pmatrix} 8 & 1 \\ 1 & 40 \end{pmatrix}$$

경사 하강 알고리즘

- 경사하강법**(gradient desent)이** 낮은곳을 찾아가는 원리**

$\mathbf{g} = d\boldsymbol{\Theta} = \frac{\partial J}{\partial \boldsymbol{\Theta}}$ (기울기)이고, ρ는 학습률 (이동할 거리 조절)

$$\boxed{\boldsymbol{\Theta} = \boldsymbol{\Theta} - \rho\mathbf{g}} \qquad (2.58)$$

함수의 기울기 (경사)를 구하여 기울기가 낮은 쪽으로 반복적으로 이동하여 극값에 도달

- **배치**(batch) 경사 하강 알고리즘
  - 샘플의 그레이디언트를 평균한 후 **한꺼번에 갱신**
  - 훈련집합 전체를 다 봐야 갱신이 일어나므로 학습 과정이 **오래 걸리는 단점**

알고리즘 2-4 배치 경사 하강 알고리즘(BGD)

입력: 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$, 학습률 ρ
출력: 최적해 $\hat{\boldsymbol{\Theta}}$

```
1  난수를 생성하여 초기해 Θ를 설정한다.
2  repeat
3     X에 있는 샘플의 그레이디언트 ∇1, ∇2, ⋯, ∇n을 계산한다.
4     ∇total = (1/n) Σi=1,n ∇i   // 그레이디언트 평균을 계산
5     Θ = Θ − ρ∇total
6  until(멈춤 조건)
7  Θ̂ = Θ
```

훈련집합

$$\mathbb{X} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots, \mathbf{x}_n\}$$
$$\mathbb{Y} = \{y_1, y_2, \cdots, y_n\}$$

- **스토캐스틱 경사 하강**(SGD) 알고리즘
  - **한 샘플 혹은 미니배치**의 그레디언트를 계산한 후 즉시 갱신
  - 라인 3~6을 한번 반복 : 한 세대(epoch)

알고리즘 2-5 스토케스틱 경사 하강 알고리즘(SGD)

입력 : 훈련집합 $\mathbb{X}$와 $\mathbb{Y}$, 학습률 ρ
출력 : 최적해 $\hat{\mathbf{\Theta}}$

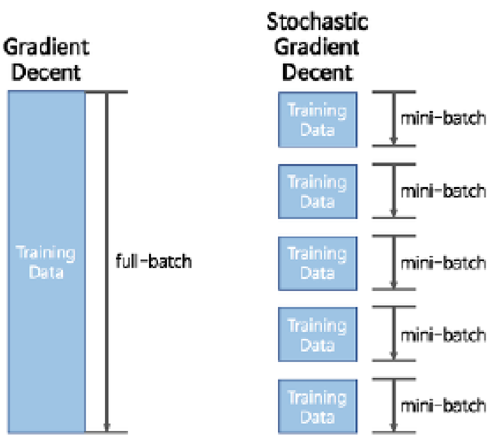
1 난수를 생성하여 초기해 $\mathbf{\Theta}$를 설정한다.
2 repeat
3 　$\mathbb{X}$의 샘플의 순서를 섞는다.
4 　for (i=1 to n)
5 　　i번째 샘플에 대한 그레이디언트 ∇_i를 계산한다.
6 　　$\mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta} - \rho\nabla_i$
7 until(멈춤 조건)
8 $\hat{\mathbf{\Theta}} = \mathbf{\Theta}$

- 다른 방식의 구현 (라인 3~6 대치)

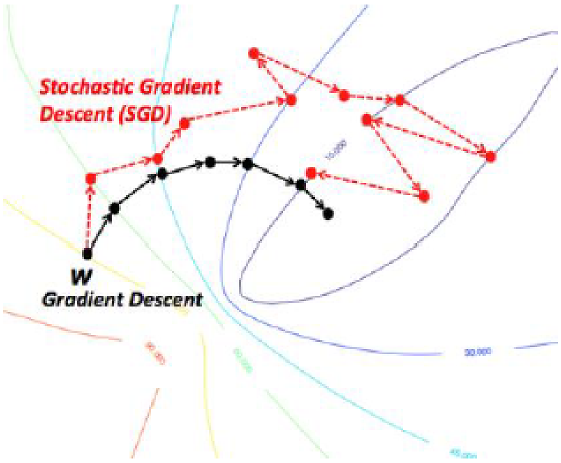
3 $\mathbb{X}$에서 임의로 샘플 하나를 뽑는다.
4 뽑힌 샘플의 그레이디언트 ∇를 계산한다.
5 $\mathbf{\Theta} = \mathbf{\Theta} - \rho\nabla$

- 경사 하강 알고리즘 비교

갱신 단위



경사 하강 알고리즘 동작



- 배치 경사 하강 알고리즘 : 정확한 방향으로 수렴, 느림
- 스토캐스틱 경사 하강 알고리즘 : 수렴이 다소 헤맬 수 있음, 빠름

- 추가 경사 하강 알고리즘 비교