IIT4316 Deep Learning Homework #1: MLP 학습 (2025 년 10 월 6 일)

마감: 2025 년 10 월 18 일 23 시 59 분까지

2-layer neural network (MLP)를 학습하여 XOR 문제를 해결한다. 학습 식을 손으로 유도하고, 이를 Pytorch 구현으로 확인한다.

0. 문제

아래 그림과 같이 hidden neuron 이 2 개인 2-layer MLP 를 사용한다. $w_{21}^{(1)}$ 과 $w_{12}^{(1)}$ 를 제외한 나머지 가중치 및 바이어스의 값은 그림에 보인 값으로 고정되어 있다고 하자. activation function 은 모두 logistic sigmoid 로 한다. 즉,

$$\sigma(u) = \frac{1}{1 + \exp(-u)}$$

$$x_1 \frac{w_{11}^{(1)} = 7}{w_{21}^{(1)} = ?}$$

$$x_2 \frac{w_{12}^{(1)} = ?}{b_1^{(1)} = -11}$$

$$x_3 \frac{w_{11}^{(1)} = 7}{w_{12}^{(1)} = ?}$$

$$x_4 \frac{w_{11}^{(1)} = 7}{w_{12}^{(1)} = ?}$$

$$x_5 \frac{w_{12}^{(1)} = -13}{w_{12}^{(1)} = -11}$$

$$y \frac{w_{12}^{(1)} = -13}{b_2^{(1)} = -11}$$

$$y \frac{w_{12}^{(1)} = -13}{b_2^{(1)} = -11}$$

$$y \frac{w_{12}^{(1)} = -13}{b_2^{(1)} = -11}$$

두 hidden neuron 의 출력은 각각 h_1 과 h_2 라 하자.

XOR 에 대한 입력과 정답출력(target)은 다음과 같다.

x_1	x_2	t
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

loss function 은 모든 데이터에 대한 cross-entropy 의 평균을 사용한다. 즉,

$$L = -\frac{1}{4} \sum_{n=1}^{4} \left[t^{(n)} \log y^{(n)} + \left(1 - t^{(n)} \right) \log \left(1 - y^{(n)} \right) \right]$$

여기서 로그는 자연로그이며, 위 첨자 (n) 은 n 번째 데이터를 가리킨다. (반면, MLP 의 가중치/바이어스에서 위 첨자는 layer 를 의미함에 유의하자.) 클래스가 2 개인 경우이기 때문에 위 식을 특별히 binary cross-entropy 라 부른다.

학습은 4 개의 데이터를 모두 한꺼번에 사용하는 batch 방식을 가정한다.

 $w_{21}^{(1)}$ 과 $w_{12}^{(1)}$ 의 초기값은 모두 0 으로 한다.

1. Weight update 식 구하기 (손으로 풀기. 계산기 사용 가능)

- (1) 학습하기 전 MLP 의 출력과 loss 값을 계산하라. 계산 과정을 보여라.
- (2) loss 의 gradient, 즉 $\frac{\partial L}{\partial w_{21}^{(1)}}$ 와 $\frac{\partial L}{\partial w_{12}^{(1)}}$ 의 식을 구하라. $w_{21}^{(1)}$ 과 $w_{12}^{(1)}$ 를 제외한 나머지 가중치의 값 및 입력값을 모두 사용해 계산하여, 각각 $w_{21}^{(1)}$ 과 $w_{12}^{(1)}$ 및 $\sigma(\cdot)$ 의 식으로 표현하라. (힌트: $\frac{d\sigma(u)}{du} = \sigma(u) \big(1 \sigma(u)\big)$ 임을 이용한다.)
- (3) $w_{21}^{(1)}$ 과 $w_{12}^{(1)}$ 의 초기값에 대해 (2)에서 얻은 gradient 의 식을 계산하고, 이를 이용하여 한 번의 업데이트(학습)을 적용한 $w_{21}^{(1)}$ new 과 $w_{12}^{(1)}$ new를 구하라. 그리고 새로운 MLP 의 출력과 loss 값을 구하여 (1)에서 구한 것과 비교하라. learning rate 는 $\eta=100$ 를 사용하라.(참고: 이 값은 이 문제에서 계산을 위해 사용하는 것이며, 일반적으로 사용하기에는 큰 값이다.)
- (4) 이번에는 Adam 알고리즘을 사용해보자. (3)에서 계산한 gradient 값을 이용하여 한 번의 업데이트(학습)을 적용한 $w_{21}^{(1)\,new}$ 과 $w_{12}^{(1)\,new}$ 를 구하고, 새로운 MLP 의 출력과 loss 값을 구하라. $\beta_1=0.9$, $\beta_2=0.999$, $\epsilon=0$, $\eta=0.01$ 을 사용한다.

2. 모델 학습 및 시각화(Pytorch 활용)

주어진 .ipynb 에서 TODO 로 표시한 부분을 작성한다. 1 번에서 구한 gradient descent 와 Adam 의 식을 코드로 작성하고, 학습을 여러 epoch 에 대해 진행하여 결과를 확인한다. 학습과정에서 loss 가 변하는 양상과 loss landscape 상에서 $w_{21}^{(1)}$ 과 $w_{12}^{(1)}$ 의 이동 경로를 관찰하고 이에 대해 논의하라. learning rate 와 최대 epoch 은 적절히 정하라. Adam 에서 $\beta_1=0.9$, $\beta_2=0.999$, $\epsilon=10^{-8}$ 을 사용하라. 필요하다면 TODO 로 표기된 부분 이외에 추가로 작성하여도 무방하다.

제출항목

- 리포트 (pdf 파일)
- 코드 (ipynb 파일)

리포트 작성 요령

- 우리말로 작성하기
- 표지 만들지 않기 (첫 장 상단에 학번과 이름 표기)
- 완성된 문장으로 작성하기
- 그림과 표가 포함되는 경우, 이를 본문에서 설명하기
- 토의한 사람이 있다면 명시하기