기계학습

숙제2

일시: 2019. 4. 30.



컴퓨터공학과 M2018076 최정우

ML_homework2

April 30, 2019

이름: 최정우 학번: M2018076

Colab link: http://bit.ly/2vnWSEn

1 [overfitting; 10p] 다음 코드를 실행하고 결과를 해석하세요.

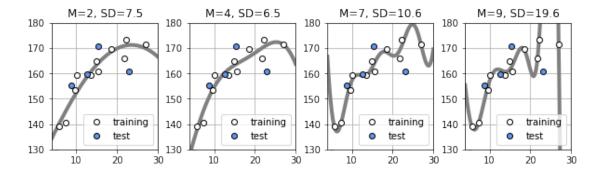
1.1 추가. 라이브러리 및 기본코드

```
In [0]: import numpy as np
       import matplotlib.pyplot as plt
       # 데이터 생성 추가-----
       np.random.seed(seed=1)
       X_{min} = 4
       X_{max} = 30
       X_n = 16
       X = 5 + 25 * np.random.rand(X_n)
       Prm_c = [170, 108, 0.2]
       T = Prm_c[0] - Prm_c[1] * np.exp(-Prm_c[2] * X) \setminus
       + 4 * np.random.randn(X_n)
       # 선형 기저 함수 모델 추정 -----
       def fit_gauss_func(x, t, m):
           mu = np.linspace(5, 30, m)
           s = mu[1] - mu[0]
           n = x.shape[0]
           psi = np.ones((n, m+1))
           for j in range(m):
               psi[:, j] = gauss(x, mu[j], s)
           psi_T = np.transpose(psi)
           b = np.linalg.inv(psi_T.dot(psi))
           c = b.dot(psi_T)
           w = c.dot(t)
           return w
```

```
def gauss(x, mu, s):
           return np.exp(-(x - mu)**2 / (2 * s**2))
       # 선형 기저 함수 모델 MSE -----
       def mse_gauss_func(x, t, w):
           y = gauss_func(w, x)
           mse = np.mean((y - t)**2)
           return mse
       # 선형 기저 함수 모델 -----
       def gauss_func(w, x):
           m = len(w) - 1
           mu = np.linspace(5, 30, m)
           s = mu[1] - mu[0]
           y = np.zeros_like(x) # x와 같은 크기로 요소가 o의 행렬 y를 작성
           for j in range(m):
               y = y + w[j] * gauss(x, mu[j], s)
           y = y + w[m]
           return y
       # 가우스 기저 함수 표시 -----
       def show_gauss_func(w):
           xb = np.linspace(X_min, X_max, 100)
           y = gauss_func(w, xb)
           plt.plot(xb, y, c=[.5, .5, .5], lw=4)
1.2 A. 코드
In [0]: # 라이브러리 생략
       X_{test} = X[:int(X_n / 4 +1)]
       T_{test} = T[:int(X_n / 4 +1)]
       X_{train} = X[int(X_n / 4 +1):]
       T_{train} = T[int(X_n / 4 +1):]
       plt.figure(figsize=(10, 2.5))
       plt.subplots_adjust(wspace=0.3)
       M = [2, 4, 7, 9]
       for i in range(len(M)):
           plt.subplot(1, len(M), i +1)
           W = fit_gauss_func(X_train, T_train, M[i])
           show_gauss_func(W)
           plt.plot(X_train, T_train, marker='o',
                   linestyle='None', color='white',
                   markeredgecolor='black', label='training')
           plt.plot(X_test, T_test, marker='o',
                   linestyle='None', color='cornflowerblue',
```

가우스 함수 ------

```
markeredgecolor='black', label='test')
plt.legend(loc='lower right', fontsize=10, numpoints=1)
plt.xlim(X_min, X_max)
plt.ylim(130, 180)
plt.grid(True)
mse= mse_gauss_func(X_test, T_test, W)
plt.title("M={0:d}, SD={1:.1f}".format(M[i], np.sqrt(mse)))
plt.show()
```



1.2.1 결과 해석

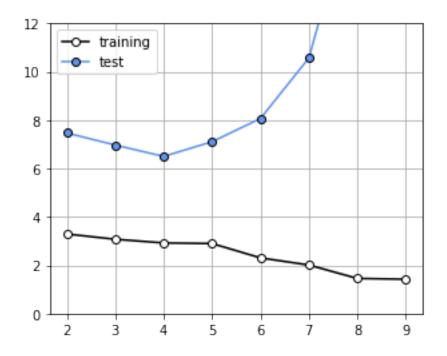
M이 4까지 증가 할때까지는 오차(SD)값이 감소하지만 그보다 커지면 오버피팅 되어 test set에 대한 오차는 점차 커지는것을 확인 할 수 있다.

1.3 B. 코드

```
label='test')

plt.legend(loc='upper left', fontsize=10)
plt.ylim(0, 12)
plt.grid(True)

plt.show()
```



1.3.1 결과해석

M의 크기에 따른 훈련집합과 테스트집합에 대한 오차의 경향성을 가시화한 그래프이다. 훈련집합에 대한 오차는 M의 크기가 커질수록 점차 작아지지만 테스트집합에 대한 오차는 M=4

일때 최저값을 가지고 그 이후부터는 급격하게 증가하는것을 확인할수 있다.

2 [linear model; 20p]

2.1 logistic regression의 $\nabla E_{in}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N -y_n \mathbf{x}_n \theta(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n)$ 임을 보이고, 이는 오분 류된 것이 정확하게 분류된 것보다 경사에 더 큰 기여를 함을 설명하세요.

2.1.1 풀이

Logistic regression 의 in-sample error는 다음과 같다.

$$E_{in}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} ln(1 + e^{-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n})$$

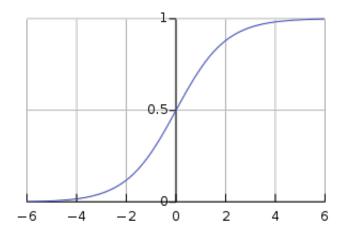


Fig 1. Logistic graph

이를 미분하면 *ln* 과 합성함수의 미분법으로 계산하면.

$$\nabla E_{in}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{(1 + e^{-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n})} (1 + e^{-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n})'$$
$$= \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{(1 + e^{-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n})} (-y_n \mathbf{x}_n e^{-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n})$$

가 된다.

다음으로 경사에 기여도에 대해 정리하면 다음과 같다.

먼저 주어진 라벨이 $y_n=+1$ 이라 가정하자. 오분류를 가정하였기 때문에, $\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n=-1$ 이 된다.

따라서 $-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n = 1$ 이 된다. $\theta(s)$ 의 그래프는 Fig 1.과 같으므로, $\theta(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n) = \theta(1)$ 은 0.5보다 큰 값을 가지게 된다. 반대로 데이터가 제대로 분류가 되었다면 $\mathbf{w}^T \mathbf{x}_n = +1$ 이 된다. 따라서 $\theta(-y_n \mathbf{w}^T \mathbf{x}_n) = \theta(-1)$ 이 되고 0.5보다 작은 값을 가지게된다.

따라서 오분류 된값이 정확하게 분류된 값보다 더 큰 경사도를 가지게 된다.

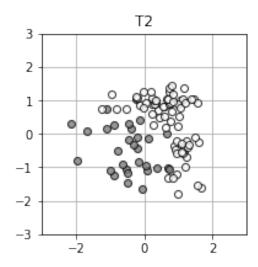
[logistic regression; 25p]

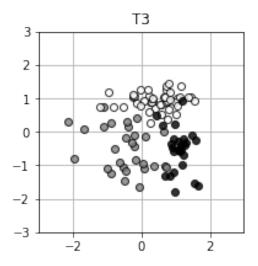
다음 코드를 실행하고 결과를 해석하세요.

In [0]: import numpy as np import matplotlib.pyplot as plt %matplotlib inline

np.random.seed(seed=1) # 난수 시드 고정

```
N = 100 # 데이터의 수
K = 3 \# 분포 수
T3 = np.zeros((N,3), dtype=np.uint8) # 3클래스의 라벨데이터 (0,1,2)
T2 = np.zeros((N,2), dtype=np.uint8) # 2클래스의 라벨데이터 (0,1)
X = np.zeros((N,2)) # 입력데이터
X_range0 = [-3, 3] # X0 범위
X range1 = [-3, 3] # X1 범위
Mu = np.array ([[-.5, -.5] , [.5, 1.0], [1, -.5]]) # 분포의 평균(중심)
Sig = np.array ([[0.7, 0.7],[0.8, 0.3],[0.3, 0.8]]) # 분포의 분산
Pi = np.array ([0.4, 0.8, 1]) # 각 분포에 대한 비율
# 데이터 생성
for n in range (N):
   wk = np.random.rand()
   for k in range(K):
       if wk < Pi[k]:</pre>
           T3[n, k] = 1
           break
    for k in range(2):
       X[n, k] = (np.random.randn() * Sig[T3[n,:] == 1, k] + Mu[T3[n,:] == 1, k])
T2[:,0] = T3[:,0] # T3의 0번째 클래스로 T2의 1번째 클래스를 만든다.
T2[:,1] = T3[:, 1] | T3[:, 2] # T3의 클래스 1,2를 합쳐서 T2의 2번째 클래스를 만든다.
def show_data2 (x, t):
   wk, K = t.shape
    c = [[.5, .5, .5], [1, 1, 1], [0, 0, 0]]
   for k in range (K):
       plt.plot (x[t[:, k] == 1, 0], x[t[:, k] == 1, 1],
                 linestyle = 'none', markeredgecolor = 'black',
                 marker = 'o', color = c[k], alpha = 0.8)
       plt.grid (True)
plt.figure(figsize=(7.5, 3))
plt.subplots adjust(wspace=0.5)
plt.subplot(1, 2, 1)
show data2(X, T2)
plt.xlim(X_range0)
plt.ylim(X_range1)
plt.title("T2")
plt.subplot(1, 2, 2)
show_data2(X, T3)
plt.xlim(X_range0)
plt.ylim(X_range1)
plt.title("T3")
plt.show()
```



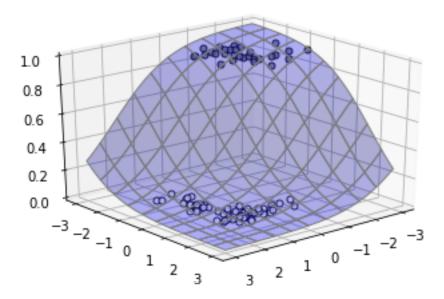


3.1.1 결과해석

데이터 분포를 가시화하는 코드다. 데이터는 $0\sim1$ 사이의 균일한 분포에서 난수를 생성해 wk에 넣는다. 생성된 난수를 Pi 에 따라서 클래스를 분류한다. 각 클래스마다 각각 다른 가우스 분포로 입력하여 입력데이터를 생성한다.

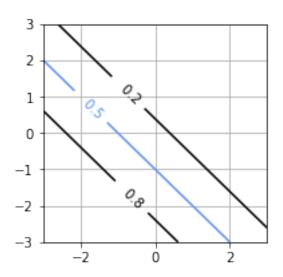
```
In [0]: # 로지스틱 회귀 모델
        def logistic2(x0, x1, w):
            y = 1 / (1 + np.exp(-(w[0] * x0 + w[1] * x1 + w[2])))
            return y
        from mpl_toolkits.mplot3d import axes3d
        from scipy.optimize import minimize
        def show3d_logistic2(ax, w):
           xn = 50
            x0 = np.linspace(X range0[0], X range0[1], xn)
            x1 = np.linspace(X_range1[0], X_range1[1], xn)
           xx0, xx1 = np.meshgrid(x0, x1)
            y = logistic2(xx0, xx1, w)
            ax.plot_surface(xx0, xx1, y, color = 'blue', edgecolor = 'gray',
                             rstride = 5, cstride = 5, alpha = 0.3)
        def show_data2_3d(ax, x, t):
            c = [[.5, .5, .5], [1, 1, 1]]
            for i in range (2):
                ax.plot(x[t[:, i] == 1, 0], x[t[:, i] == 1, 1], 1-i,
                        marker = 'o', color = c[i], markeredgecolor = 'black',
                        linestyle = 'none', markersize = 5, alpha = 0.8)
```

```
Ax.view_init(elev = 25, azim = 50)
Ax = plt.subplot(1,1,1, projection='3d')
W = [-1,-1,-1]
show3d_logistic2(Ax,W)
show_data2_3d(Ax,X, T2)
```



3.1.2 결과해석

W = [-1, -1, -1] 로 했을 때의 2차원 로지스틱 회귀모델과 데이터를 3차원으로 표기한다. 클래스에 따라서 두 데이터가 0또는 1로 분리됨을 확인할 수 있다.



3.1.3 결과해석

```
W = [-1, -1, -1] 로 했을 때의 2차원 로지스틱 회귀모델의 출력이 등고선 형태로 표기된다.
```

```
In [0]: # 크로스 엔트로피 오차
        def cee_logistic2(w, x, t):
           X_n = x.shape[0]
           y = logistic2(x[:, 0], x[:, 1], w)
            cee = 0
            for n in range(len(y)):
                cee = cee - (t[n, 0] * np.log(y[n]) +
                             (1-t[n, 0]) * np.log(1 - y[n])
            cee = cee / X n
            return cee
        # 크로스 엔트로피 오차의 미분
        def dcee_logistic2(w, x, t):
           X_n = x.shape[0]
            y = logistic2(x[:, 0], x[:, 1], w)
           dcee = np.zeros(3)
            for n in range (len (y)):
                dcee[0] = dcee[0] + (y[n] - t[n, 0]) * x[n, 0]
                dcee[1] = dcee[1] + (y[n] - t[n, 0]) * x[n, 1]
                dcee[2] = dcee[2] + (y[n] - t[n, 0])
            dcee = dcee / X_n
            return dcee
       W = [-1, -1, -1]
        dcee_logistic2(W, X, T2)
Out[0]: array([ 0.10272008,  0.04450983, -0.06307245])
```

3.1.4 결과해석

크로스 엔트로피 오차 함수는 다음 수식을 통해서 구성한다.

$$CEE(w) = -\frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} t_n log y_n + (1 - t_n) log (1 - y_n)$$

위 함수의 매개변수별 편미분을 구하면 다음과 같은 수식을 얻을수 있다.

$$\frac{\partial CEE(w)}{\partial w_0} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y_n - t_n) x_0$$

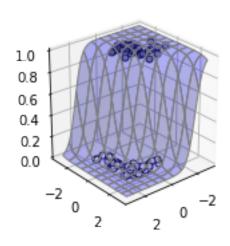
$$\frac{\partial CEE(w)}{\partial w_1} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y_n - t_n) x_1$$

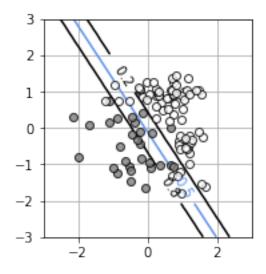
$$\frac{\partial CEE(w)}{\partial w_2} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} (y_n - t_n)$$

dcee_logistic2 함수를 통해서 W = [-1, -1, -1] 일때의 편미분값을 구할 수 있다.

In [0]: from scipy.optimize import minimize

```
# 로지스틱 회귀모델의 매개변수 검색
        def fit_logistic2(w_init, x, t):
            res = minimize(cee_logistic2, w_init, args = (x, t),
                           jac = dcee logistic2, method = "CG")
            return res.x
       plt.figure(1, figsize = (7, 3))
       plt.subplots_adjust(wspace = 0.5)
        Ax = plt.subplot(1, 2, 1, projection = '3d')
        W_{init} = [-1, 0, 0]
        W = fit_logistic2(W_init, X, T2)
        print("w0 = {0: .2f}, w1 = {1: .2f}, w2 = {2: .2f}". format (W[0], W[1], W[2]))
        show3d_logistic2(Ax, W)
        show_data2_3d(Ax, X, T2)
        cee = cee_logistic2 (W, X, T2)
        print("CEE = {0: .2f}".format(cee))
        Ax = plt.subplot (1, 2, 2)
        show_data2(X, T2)
        show_contour_logistic2(W)
        plt.show()
w0 = -3.70, w1 = -2.54, w2 = -0.28
CEE = 0.22
```





3.1.5 결과해석

평균 크로스엔트로피 오차가 최소가 되도록 로지스틱 회귀모델의 매개변수를 구하고 그 결과를 가시화한다.

scipy library에서 제공되는 minimize 최적화 함수를 통해서 찾은 매개변수는 다음과 같다.

$$w0 = -3.70$$
, $w1 = -2.54$, $w2 = -0.28$

사용한 minimize 최적화 함수는 미분함수(자코비안)을 통해 Conjugate Gradient Method으로 최소의 오차를 가지는 매개변수를 찾는 방법입니다.

왼쪽 그림은 로지스틱 회귀 모델의 3차원 가시화이고 오른쪽그림은 그 모델의 결정직선을 표시한 그림입니다. 오른쪽그림에서 파란선을 기점으로 클래스의 분류가 일어 나는것을 확인할수 있습니다.

4 [bias-variance tradeoff; 20p]

4.1 데이터가 $y(x)=f(x)+\epsilon$ (ϵ 는 평균 0, 분산은 σ^2 인 잡음) 인 잡음이 포함되어 있을 때, $E_{out}(g^{(D)})=\mathbb{E}_{x,y}[\left((g^{(D)}(x)-y(x)\right)^2]$ 부터 다음의 bias-variance tradeoff 식을 유도하세요.

$$\mathbb{E}_D[E_{out}(g^{(D)})] = \sigma^2 + bias + variance$$

4.1.1 풀이

주어진 $\mathbb{E}_{out}(g^{(D)})$ 는 다음과 같이 정리할수 있다.

$$\mathbb{E}_{D}[E_{out}(g^{(D)})] = \mathbb{E}_{D}[\mathbb{E}_{x,y}[((g^{(D)}(x) - y(x))^{2}]]$$
(1)

$$= \mathbb{E}_D[\mathbb{E}_x[((g^{(D)}(x) - f(x) - \epsilon)^2]] \tag{2}$$

$$= \mathbb{E}_{x} \left[\mathbb{E}_{D} \left[\left(\left(g^{(D)}(x) - f(x) - \epsilon \right)^{2} \right] \right]$$
 (3)

let focus on $\mathbb{E}_D[\left((g^{(D)}(x)-f(x)-\epsilon\right)^2]$ Average hypothesis $\bar{g}(x)$ 아래와 같이 정의한다.

$$\bar{g}(x) \triangleq \mathbb{E}_D[E_{out}(g^{(D)})]$$

평균 $\bar{g}(x)$ 을 이용하면

$$\mathbb{E}_{D}[(g^{(D)}(x) - f(x) - \epsilon)^{2}] = \mathbb{E}_{D}[(g^{(D)}(x) - f(x) - \epsilon)^{2}]$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} + f(x)^{2} + \epsilon^{2} - 2\bar{g}(x)f(x) - 2\epsilon f(x) - 2\epsilon \bar{g}(x)]$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2} + \bar{g}(x)^{2} + f(x)^{2} + \epsilon^{2} - 2\bar{g}(x)f(x) + 2\epsilon f(x) - 2\epsilon \bar{g}(x)]$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2}] + \mathbb{E}_{D}[\bar{g}(x)^{2} + f(x)^{2} + \epsilon^{2} - 2\bar{g}(x)f(x) + 2\epsilon f(x) - 2\epsilon \bar{g}(x)]$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2}] + \bar{g}(x)^{2} + f(x)^{2} - 2\bar{g}(x)f(x) + \mathbb{E}_{D}[\epsilon^{2} + 2\epsilon f(x) - 2\epsilon \bar{g}(x)]$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2}] + (\bar{g}(x) - f(x))^{2} + \mathbb{E}_{D}[\epsilon^{2}] + \mathbb{E}_{D}[2\epsilon]\mathbb{E}_{D}[f(x) - \bar{g}(x)]$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2}] + (\bar{g}(x) - f(x))^{2} + \mathbb{E}_{D}[\epsilon^{2}] - \mathbb{E}_{D}[\epsilon]^{2}$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2}] + (\bar{g}(x) - f(x))^{2} + Var(\epsilon)$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2}] + (\bar{g}(x) - f(x))^{2} + Var(\epsilon)$$

$$= \mathbb{E}_{D}[g^{(D)}(x)^{2} - \bar{g}(x)^{2}] + (\bar{g}(x) - f(x))^{2} + \sigma^{2}$$

$$\therefore \bar{\epsilon} = 0, Var(\epsilon) = \sigma^{2}$$
(12)

$$\therefore \mathbb{E}_D[E_{out}(g^{(D)})] = variance + bias + \sigma^2$$
(13)

$$= \mathbb{E}_D[g^{(D)}(x)^2 - \bar{g}(x)^2] + (\bar{g}(x) - f(x))^2 + \sigma^2$$
(14)

variance =
$$\mathbb{E}_D[g^{(D)}(x)^2 - \bar{g}(x)^2]$$

bias = $(\bar{g}(x) - f(x))^2$

5 [regularization; 25p] 가중치 감쇠의 경우,

5.1 A. $|\mathbf{w}_{reg}| \leq |\mathbf{w}_{lin}|$ 을 증명하세요. $(\mathrm{Hint:}~|\mathbf{w}_{reg}| > |\mathbf{w}_{lin}|$ 가정이 모순임을 보임)

5.1.1 증명

Regularization 이 없는 Linear regression 에서 in-sample error를 다음과 같이 정의할수 있다.

$$E_{in}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (\mathbf{w}^T \mathbf{z}_n - y_n)^2$$
(15)

$$= \frac{1}{N} (Z\mathbf{w} - \mathbf{y})^T (Z\mathbf{w} - \mathbf{y}) \tag{16}$$

이를 최소화하는 \mathbf{w}_{lin} 은 다음과 같다.

$$\mathbf{w}_{lin} = (Z^T Z)^{-1} Z^T \mathbf{y}$$

Regularization 이 적용된 Linear regression 에서 in-sample error를 다음과 같이 정의할수 있다.

$$E_{in}(\mathbf{w}) = \frac{1}{N} (Z\mathbf{w} - \mathbf{y})^T (Z\mathbf{w} - \mathbf{y})$$

subject to:

$$\mathbf{w}^T\mathbf{w} \leq C$$

$$E_{aug}(\mathbf{w}) = E_{in}(\mathbf{w}) + \lambda_C \mathbf{w}^T \mathbf{w}$$

여기서 λ_C 는 lagrange multiplier 로 양수 이다. 이를 최소화하는 \mathbf{w}_{reg} 은 다음과 같다.

$$\mathbf{w}_{reg} = (Z^T Z + \lambda I)^{-1} Z^T \mathbf{y}$$

둘의 크기 차이를 알아보기위해 서로 빼보면

$$|\mathbf{w}_{reg}| - |\mathbf{w}_{lin}| = |(Z^T Z + \lambda I)^{-1} Z^T \mathbf{y}| - |(Z^T Z)^{-1} Z^T \mathbf{y}|$$
 (17)

$$= (|(Z^T Z + \lambda I)^{-1}| - |(Z^T Z)^{-1}|)|Z^T \mathbf{y}|$$
(18)

$$= (|(Z^T Z + \lambda I)^{-1}|(\lambda I)|(-Z^T Z)^{-1}|)|Z^T \mathbf{y}|$$
(19)

$$= -(|(Z^TZ + \lambda I)^{-1}|(\lambda I)|(Z^TZ)^{-1}|)|Z^T\mathbf{y}|$$
 (20)

$$A^{-1} + B^{-1} = A^{-1}(A+B)B^{-1}$$
$$|\mathbf{w}_{reg}| - |\mathbf{w}_{lin}| \le 0$$
$$|\mathbf{w}_{reg}| \le |\mathbf{w}_{lin}|$$

$$\therefore \lambda > 0$$

5.2 B. $\lambda > 0$, E_{in} 가 미분 가능하면 아래의 두 식이 동일함을 보이세요.

$$w(t+1) \leftarrow w(t) - \eta \nabla E_{aug}(w(t))$$

= $w(t+1) \leftarrow (1 - 2\eta\lambda)w(t) - \eta \nabla E_{in}(w(t))$

5.2.1 증명

주어진 두 식을 정리하면 다음과 같다.

$$\nabla E_{aug}(w(t)) = \nabla E_{in}(w(t)) + (2\lambda)w(t)$$

이는 A.에서 정의한 다음식을 미분한 것과 같다.

$$E_{aug}(\mathbf{w}) = E_{in}(\mathbf{w}) + \lambda_C \mathbf{w}^T \mathbf{w}$$

따라서 E_{in} 이 미분가능하다면 위 두식은 동일하다.