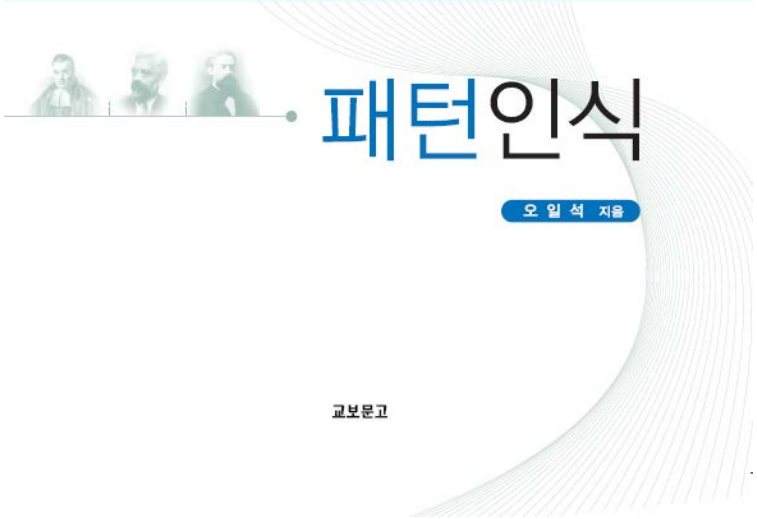
4 장. 신경망



들어가는 말

- 신경망
  - 1940년대 개발 (디지털 컴퓨터와 탄생 시기 비슷)
  - 인간 지능에 필적하는 컴퓨터 개발이 목표
- 4.1 절
  - 일반적 관점에서 간략히 소개
- 4.2–4.3 절
  - 패턴 인식의 분류 알고리즘으로서 구체적으로 설명
  - 4.2 절: 선형 분류기로서 퍼셉트론
  - 4.3 절: 비선형 분류기로서 다층 퍼셉트론

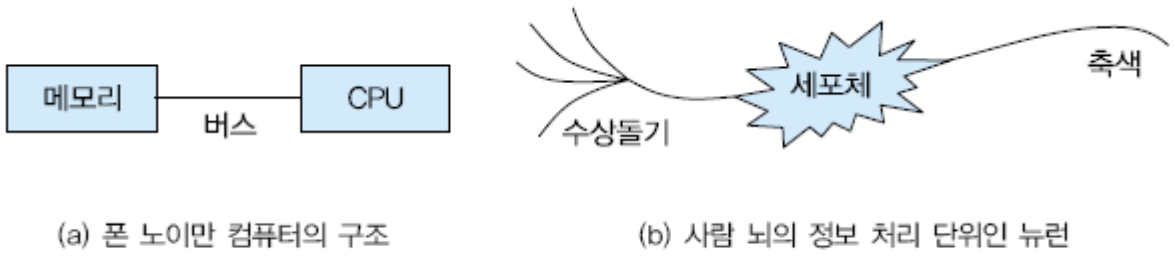
4.1.1 발상과 전개

- 두 줄기 연구의 시너지
  - 컴퓨터 과학
    - 계산 능력의 획기적 발전으로 지능 처리에 대한 욕구
  - 의학
    - 두뇌의 정보처리 방식 연구 → 얼마간의 성과 (뉴런의 동작 이해 등)

- 뇌의 정보처리 모방하여 인간에 필적하는 지능 컴퓨터에 도전
  - 인공 신경망 (ANN; Artificial Neural Network)이 대표적

4.1.1 발상과 전개

- 컴퓨터와 두뇌의 비교
  - 폰 노이만 컴퓨터
    - 순차 명령어 처리기
  - 두뇌
  - 뉴런으로 구성 (약 1011개, 약 1014 연결 (시냅스))
  - 고도의 병렬 명령어 처리기



(a) 폰 노이만 컴퓨터의 구조 (b) 사람 뇌의 정보 처리 단위인 뉴런

그림 4.1 컴퓨터와 사람

4.1.1 발상과 전개

- 간략한 역사
  - 1943, McCulloch과 Pitts 최초 신경망 제안
  - 1949, Hebb의 학습 알고리즘
  - 1958, Rosenblatt 퍼셉트론
  - Widrow와 Hoff, Adaline과 Madaline
  - 1960대, 신경망의 과대 포장
  - 1969, Minsky와 Papert, Perceptrons라는 저서에서 퍼셉트론 한계 지적
    - 퍼셉트론은 선형 분류기에 불과하고 XOR도 해결 못함
    - 이후 신경망 연구 퇴조
  - 1986, Rumelhart, Hinton, 그리고 Williams, 다층 퍼셉트론과 오류 역전파 학습 알고리즘
    - 필기 숫자 인식같은 복잡하고 실용적인 문제에 높은 성능
    - 신경망 연구 다시 활기 찾음
    - 현재 가장 널리 활용되는 문제 해결 도구

4.1.2 수학적 모델로서의 신경망

- 신경망 특성
  - 학습 가능
  - 뛰어난 일반화 능력
  - 병렬 처리 가능
  - 현실적 문제에서 우수한 성능
  - 다양한 문제 해결 도구 (분류, 예측, 함수 근사화, 합성, 평가, ...)

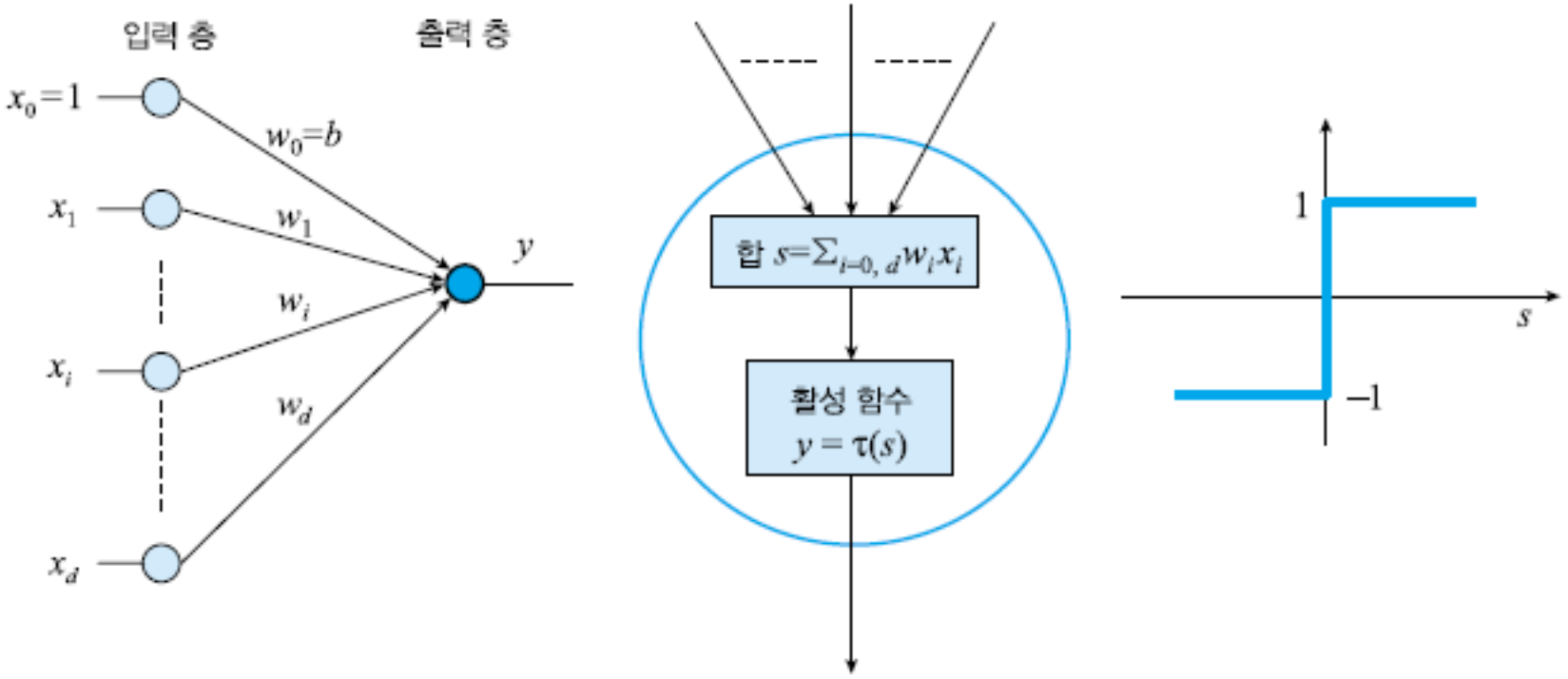
- 절반의 성공
  - 인간 지능에 필적하는 컴퓨터 만들지 못함
  - 제한된 환경에서 실용적인 시스템 만드는데 크게 기여 (실용적인 수학적 모델로서 자리매김)

4.2 퍼셉트론

- 새로운 개념들 등장
  - 층
  - 노드와 가중치
  - 학습
  - 활성 함수
- 비록 분명한 한계를 가지지만 MLP의 초석이 됨

4.2.1 구조와 원리

- 구조
  - 입력층: d+1개의 노드 (특징 벡터 $\mathbf{x}=(x_1,\ldots,x_d)^T$)
  - 출력층: 한 개의 노드 (따라서 2-부류 분류기)
  - 에지와 가중치



(a) 전체 구조 (b) 출력 노드의 연산 (c) 활성 함수

그림 4.2 퍼셉트론의 구조

4.2.1 구조와 원리

- 노드의 연산
  - 입력 노드: 받은 신호를 단순히 전달
  - 출력 노드: 합 계산과 활성 함수 계산

$$\left.\begin{aligned} y = \tau(s) = \tau\left(\sum_{i=1}^{d} w_i x_i + b\right) = \tau(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + b) \\ \text{이때 } \tau(s) = \begin{cases} +1, s \geq 0 \\ -1, s < 0 \end{cases} \end{aligned}\right\} \quad (4.2)$$

- 퍼셉트론은 선형 분류기

$$\left.\begin{aligned} d(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + b > 0 \text{이면} \quad \mathbf{x} \in \omega_1 \\ d(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + b < 0 \text{이면} \quad \mathbf{x} \in \omega_2 \end{aligned}\right\} \quad (4.3)$$

4.2.1 구조와 원리

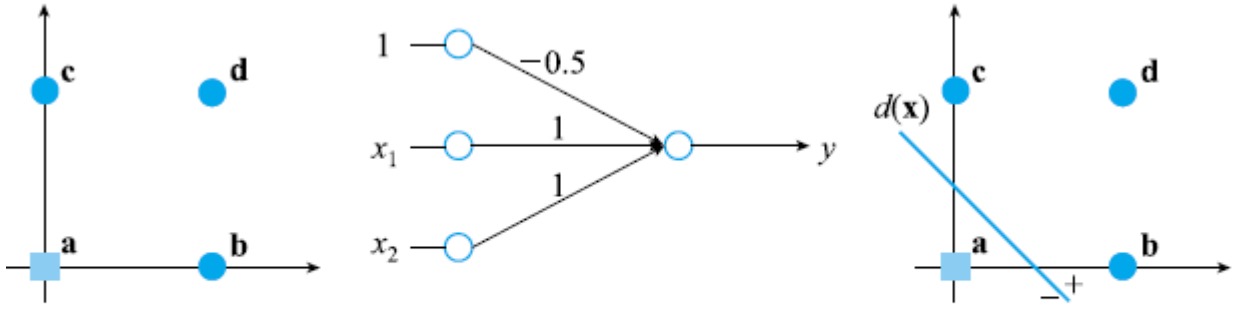
- 예제 4.1

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

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

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

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



(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 c를 제대로 분류함

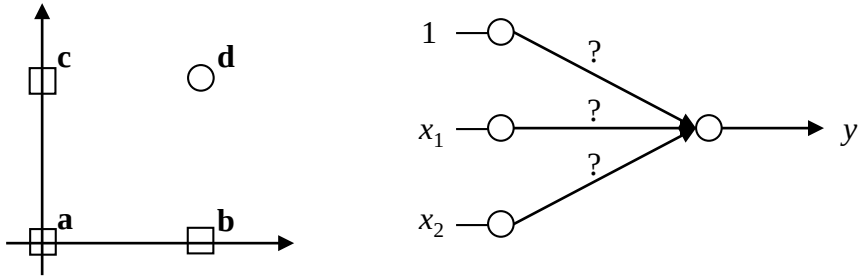
$$y=\tau(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{c}+b)=\tau((1,1)\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}-0.5)=\tau(0.5)=1$$

4.2.2 학습과 인식

- 퍼셉트론 학습이란?
  - 퍼셉트론 학습이란? 훈련 집합 $X = \{(\mathbf{x}_1, t_1), (\mathbf{x}_2, t_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, t_N)\}$이 주어졌을 때 이들을 모두 옳게 분류하는 퍼셉트론 (즉 $\mathbf{w}$와 b)을 찾아라. 샘플 $(\mathbf{x}_i, t_i)$에서 $\mathbf{x}_i$는 특징 벡터이고 t_i는 부류 표지로서 $\mathbf{x}_i \in \omega_1$이면 $t_i = 1$이고 $\mathbf{x}_i \in \omega_2$이면 $t_i = -1$이다. X는 선형 분리 가능하다고 가정한다.[3]
  - 예) AND 분류 문제

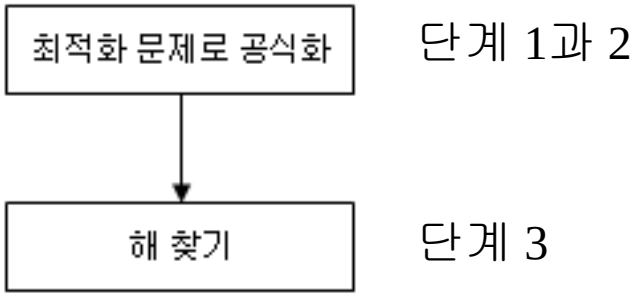
$\mathbf{a}=(0,0)^T$ $\mathbf{b}=(1,0)^T$ $\mathbf{c}=(0,1)^T$ $\mathbf{d}=(1,1)^T$

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



4.2.2 학습과 인식

- 패턴 인식에서 일반적인 학습 알고리즘 설계 과정
  - 단계 1: 분류기 구조 정의와 분류 과정의 수학식 정의
  - 단계 2: 분류기 품질 측정용 비용함수 $J(\Theta)$ 정의
  - 단계 3: $J(\Theta)$를 최적화하는 Θ를 찾는 알고리즘 설계



4.2.2 학습과 인식

- 단계 1: 분류기 구조 정의와 분류 과정의 수학식 정의
  - 식 (4.2)
  - 매개변수 집합 $\Theta=\{\mathbf{w}, b\}$

$$y = \tau(s) = \tau\left(\sum_{i=1}^{d} w_i x_i + b\right) = \tau(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + b)$$
$$\text{이때 } \tau(s) = \begin{cases} +1, s \geq 0 \\ -1, s < 0 \end{cases} \qquad (4.2)$$

- 단계 2: 분류기 품질 측정용 비용함수 $J(\Theta)$ 정의
  - 분류기 품질을 측정하는 $J(\Theta)$를 어떻게 정의할 것인가?

$$J(\Theta) = \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} (-t_k)(\mathbf{w}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_k + b) \qquad (4.4)$$

  - Y: 오분류된 샘플 집합
  - $J(\Theta)$는 항상 양수
  - Y가 공집합이면 $J(\Theta)=0$
  - $|Y|$가 클수록 $J(\Theta)$ 큼

4.2.2 학습과 인식

- 단계 3: $J(\Theta)$를 최적화하는 Θ를 찾는 알고리즘 설계
  - $J(\Theta)=0$인 Θ를 찾아라.
  - 내리막 경사법 (Gradient descent method)
    - 현재 해를 $-\partial/\partial\Theta$ 방향으로 이동
    - 학습률 ρ를 곱하여 조금씩 이동

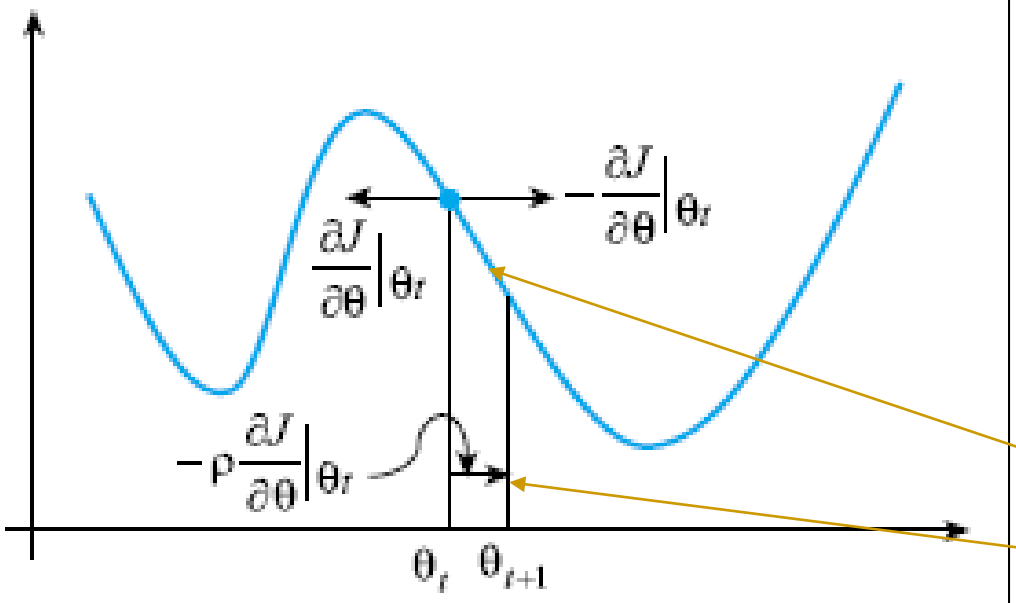


그림 11.9 내리막 경사법

$\frac{\partial J}{\partial \theta}$는 음의 값을 가짐

θ값이 더큰 곳에 최적점이 존재하므로

$\Delta\theta$를 양의 값으로 하기위해선 $-\frac{\partial J}{\partial \theta}$로 해야함

4.2.2 학습과 인식

$$J(\Theta) = \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} (-t_k)(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_k + b) \qquad (4.4)$$

- 알고리즘 스케치
  - 초기해를 설정한다.
  - 멈춤조건이 만족될 때까지 현재 해를 $-\partial/\partial\Theta$ 방향으로 조금씩 이동시킨다.
- 알고리즘에 필요한 수식들

$$\Theta(h+1) = \Theta(h) - \rho(h)\frac{\partial J(\Theta)}{\partial \Theta} \qquad (4.5)$$

$$\left.\begin{aligned} \frac{\partial J(\Theta)}{\partial \mathbf{w}} &= \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} (-t_k)\mathbf{x}_k \\ \frac{\partial J(\Theta)}{\partial b} &= \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} (-t_k) \end{aligned}\right\} \qquad (4.6)$$

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{w}(h+1) &= \mathbf{w}(h) + \rho(h) \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} t_k \mathbf{x}_k \\ b(h+1) &= b(h) + \rho(h) \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} t_k \end{aligned}\right\} \qquad (4.7)$$

←퍼셉트론 학습 규칙 (델타 규칙)

또는

$$\hat{\mathbf{w}}(h+1) = \hat{\mathbf{w}}(h) + \rho(h) \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} t_k \hat{\mathbf{x}}_k$$

4.2.2 학습과 인식

알고리즘 [4.1] 퍼셉트론 학습 (배치 모드 batch mode)

입력: 훈련 집합 $X = \{(\mathbf{x}_1, t_1), (\mathbf{x}_2, t_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, t_N)\}$, 학습률 ρ

출력: 퍼셉트론 가중치 $\mathbf{w}$, b

알고리즘:

1. $\mathbf{w}$와 b를 초기화한다.
2. **repeat** {
3. $Y = \varnothing$;
4. **for** $(i = 1$ **to** $N)$ {
5. $y = \tau(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b)$; // (4.2)로 분류를 수행함
6. **if** $(y \neq t_i)$ $Y = Y \cup \mathbf{x}_i$; // 오분류된 샘플 수집
7. }
8. $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \rho \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} t_k \mathbf{x}_k$; // (4.7)로 가중치 갱신
9. $b = b + \rho \sum_{\mathbf{x}_k \in Y} t_k$;
10. } **until** $(Y = \varnothing)$;
11. $\mathbf{w}$와 b를 저장한다.

4.2.2 학습과 인식

- 예제 4.2

$\mathbf{w}(0)=(-0.5,0.75)^T$, $b(0)=0.375$

① $d(\mathbf{x})= -0.5x_1+0.75x_2+0.375$

$Y=\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\}$

학습율

$$\mathbf{w}(1) = \mathbf{w}(0) + 0.4(t_a \cdot \mathbf{a} + t_b \cdot \mathbf{b}) = \begin{pmatrix} -0.5 \\ 0.75 \end{pmatrix} + 0.4\left[-\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 0.75 \end{pmatrix}$$

$$b(1) = b(0) + 0.4(t_a + t_b) = 0.375 + 0.4 * 0 = 0.375$$

② $d(\mathbf{x})= -0.1x_1+0.75x_2+0.375$

$Y=\{\mathbf{a}\}$

$$\mathbf{w}(2) = \mathbf{w}(1) + 0.4(t_a \mathbf{a}) = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 0.75 \end{pmatrix} + 0.4\left[-\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} -0.1 \\ 0.75 \end{pmatrix}$$

$$b(2) = b(1) + 0.4(t_a) = 0.375 - 0.4 = -0.025$$

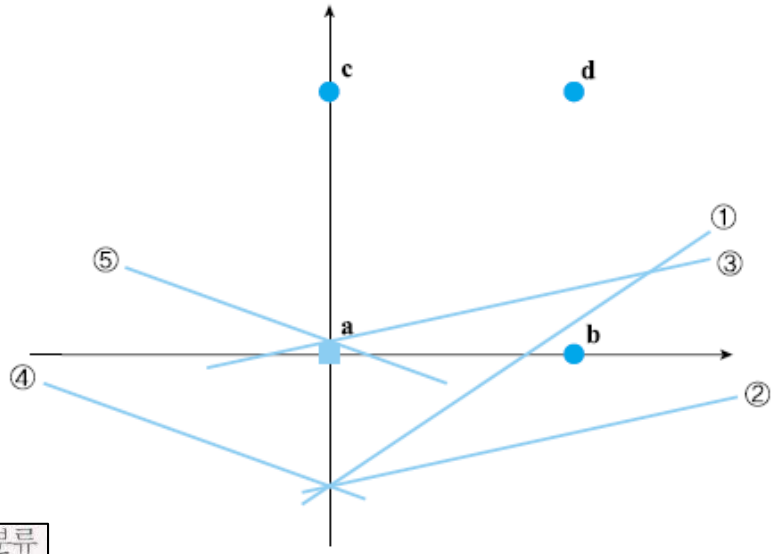


그림 4.4 예제 4.2의 퍼셉트론 학습 과정의 시각화

네 번째 세대의 결정 직선은 ⑤에 해당하는데 이 결정 직선은 모든 샘플을 옳게 분류하여 $Y=\varnothing$이 된다. 따라서 라인 2~10의 repeat 루프를 빠져 나와 $\mathbf{w}=(0.3,0.75)^T$와 $b=-0.025$를 저장하고 마친다.

4.2.2 학습과 인식

- 인식 알고리즘

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{w}^T\mathbf{x}+b>0 \text{이면}, \mathbf{x}\in\omega_1 \\ \mathbf{w}^T\mathbf{x}+b<0 \text{이면}, \mathbf{x}\in\omega_2 \end{array}\right\} \quad (4.8)$$

4.2.2 학습과 인식

- 구현
  - 초기값 어떻게?
    - w와 b의 초기화는? 일반적으로 작은 난수를 생성하여 설정함
  - 학습률 어떻게?
    - 고정된 학습율 사용
    - 세대 수에 따라 적응적 학습율 사용

$$\rho(h) = \rho_s - (\rho_s - \rho_e) * h / H$$

ρ_s : 시작 학습율

ρ_e : 종료시 학습율

h: 세대 수

H: 최대 세대수

  - 패턴 모드와 배치 모드
    - 배치 모드: 오분류된 모든 샘플을 모은 다음, 이들을 가지고 한꺼번에 가중치 갱신함
    - 패턴 모드: 샘플을 하나 입력하고 틀리게 인식하면 곧 바로 가중치를 갱신함

4.2.2 학습과 인식

- 구현
  - 초기값 어떻게?
  - 학습률 어떻게?
  - 패턴 모드와 배치 모드

- 패턴 모드 학습 알고리즘

알고리즘 [4.2] 퍼셉트론 학습 (패턴 모드)

입력: 훈련 집합 $X = \{(\mathbf{x}_1, t_1), (\mathbf{x}_2, t_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, t_N)\}$, 학습률 ρ

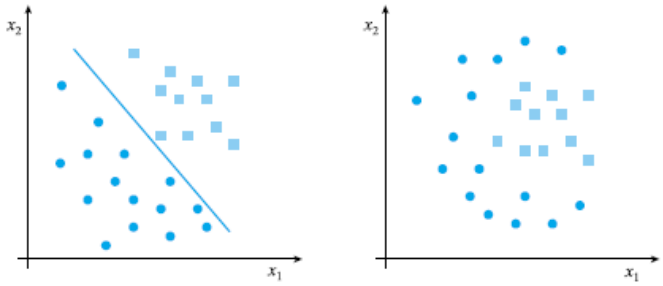
출력: 퍼셉트론 가중치 $\mathbf{w}$, b

알고리즘:

1. $\mathbf{w}$와 b를 초기화한다.
2. **repeat** {
3. QUIT = true;
4. **for** ($i = 1$ **to** N) {
5. $y = \tau(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b)$; // (4.2)로 분류를 수행함
6. **if** ($y \neq t_i$) { QUIT = false; $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \rho t_i \mathbf{x}_i$; $b = b + \rho t_i$;}
7. }
8. } **until** (QUIT);
9. $\mathbf{w}$와 b를 저장한다.

4.2.2 학습과 인식

- 포켓 알고리즘
  - 선형 분리 불가능한 상황
  - $J(\Theta)=0$(모든 샘플을 올바르게 분류하고자 함)이라는 목표를 버리고, $J(\Theta)$를 최소화하는 목표로 수정
  - 새로운 w를 계산한 후, 이것이 이전 것보다 좋은지 검사함 → 더 좋으면 이를 사용함



(a) 선형 분리 가능 (b) 선형 분리 불가능

그림 4.5 선형 분리 가능과 불가능

알고리즘 [4.3] 포켓 알고리즘 (패턴 모드)

입력: 훈련 집합 집합 $X = \{(\mathbf{x}_1, t_1), (\mathbf{x}_2, t_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, t_N)\}$, 학습률 ρ

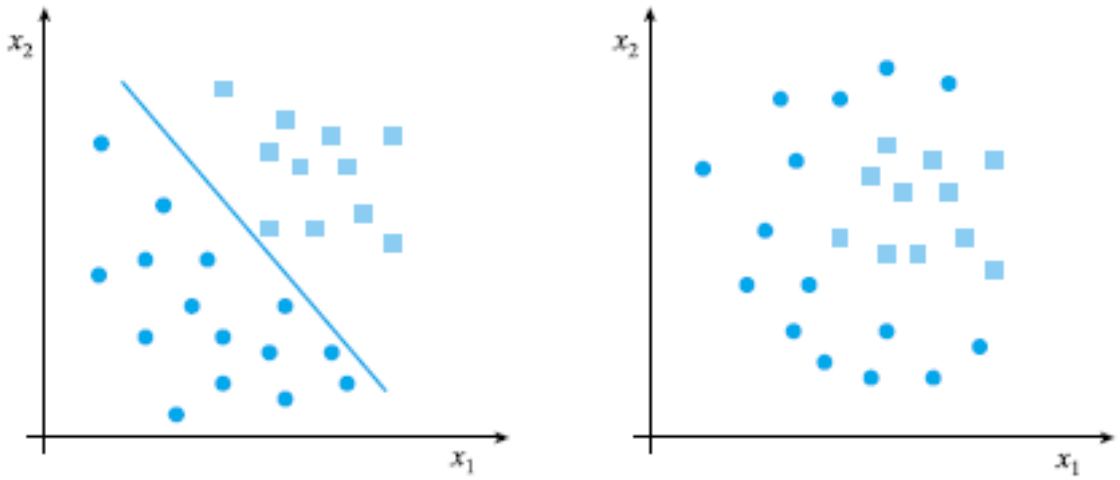
출력: 퍼셉트론 가중치 $\mathbf{w}$, b

알고리즘:

1. $\mathbf{w}$와 b를 초기화하고, 이들을 $\mathbf{w}_{best}$와 b_{best}에 저장한다.
2. $q_{best} = 0$; // 품질을 0으로 초기화
3. $h = 0$; // 세대 수
4. **repeat** {
5. **for** ($i = 1$ **to** N) {
6. $y = \tau(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_i + b)$; // 식 (4.2)
7. **if** ($y \neq t_i$) { $\mathbf{w} = \mathbf{w} + \rho t_i \mathbf{x}_i$; $b = b + \rho t_i$;} // $\mathbf{w}$와 b 갱신
8. }
9. $\mathbf{w}$와 b로 N 개의 샘플을 인식하여 정인식률 q를 구한다.
10. **if** ($q > q_{best}$) {$\mathbf{w}_{best} = \mathbf{w}$; $b_{best} = b$; $q_{best} = q$;} // 더 좋은 가중치 발견함
11. $h = h + 1$;
12. } **until** (stop-condition);
13. $\mathbf{w} = \mathbf{w}_{best}$; $b = b_{best}$;
14. $\mathbf{w}$와 b를 저장한다.

4.3 다층 퍼셉트론

- 선형 분리 불가능한 상황
  - 퍼셉트론의 한계
  - 그림 4.5(b)에서 퍼셉트론으로 최대 몇 개까지 맞출 수 있을까?

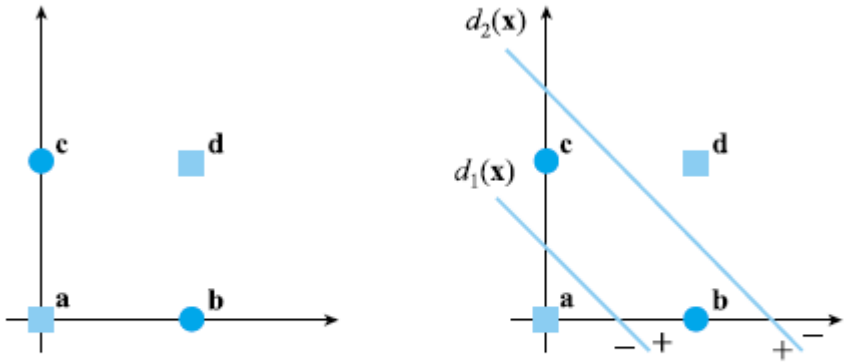


(a) 선형 분리 가능 (b) 선형 분리 불가능

그림 4.5 선형 분리 가능과 불가능

4.3.1 구조와 원리

- XOR 문제
  - 퍼셉트론은 75% 정인식률이 한계
  - 이 한계를 어떻게 극복?
    - 두 개의 퍼셉트론 (결정 직선) 사용



(a) XOR 분류 문제 (b) 두 개의 직선으로 해결

그림 4.6 XOR 분류 문제의 해결

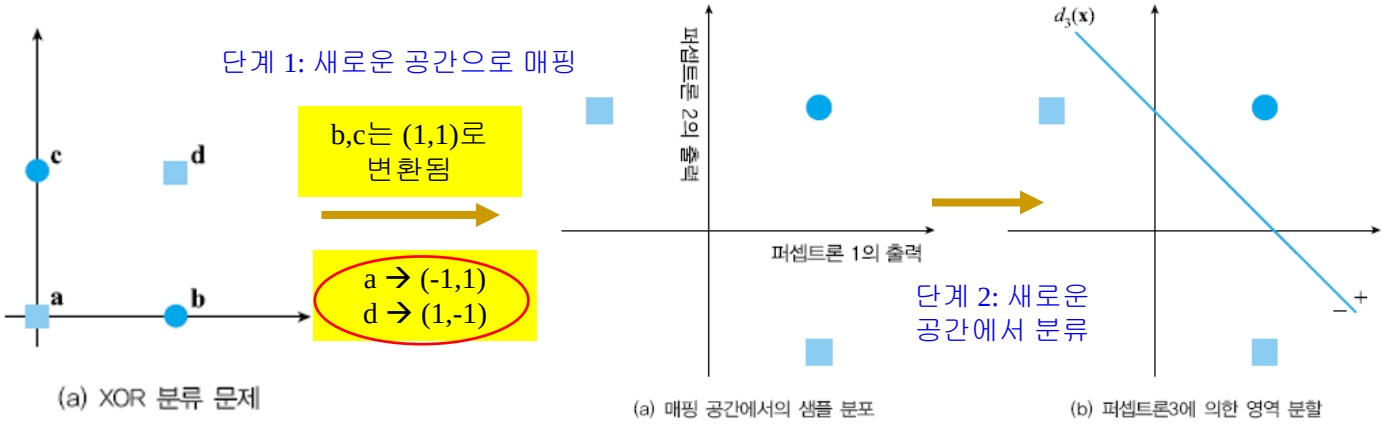
$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{w}_1^T\mathbf{x}+b_1>0 \text{이고 } \mathbf{w}_2^T\mathbf{x}+b_2>0 \text{이면, } \mathbf{x}\in\omega_1 \\ \mathbf{w}_1^T\mathbf{x}+b_1<0 \text{이거나 } \mathbf{w}_2^T\mathbf{x}+b_2<0 \text{이면, } \mathbf{x}\in\omega_2 \end{array}\right\} \quad (4.9)$$

4.3.1 구조와 원리

- 두 단계에 걸쳐 문제 해결
  - 단계 1: 원래 특징 공간을 새로운 공간으로 매핑
  - 단계 2: 새로운 공간에서 분류

표 4.1 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



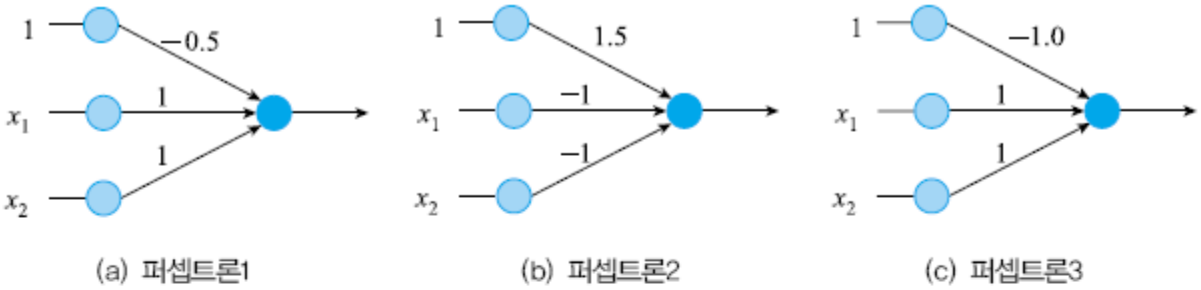
(a) XOR 분류 문제

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

그림 4.7 새로운 공간에서의 샘플 분포와 영역 분할

4.3.1 구조와 원리

- 다층 퍼셉트론 (MLP; Multi-layer perceptron)



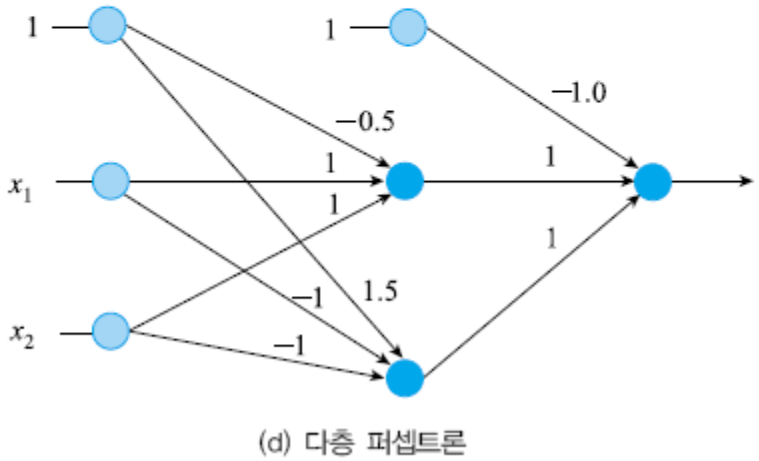


그림 4.8 세 개의 퍼셉트론과 이들을 연결하여 만든 다층 퍼셉트론

두개의 퍼셉트론1,2를 사용하여,
특징 벡터를 새로운 공간으로 매핑함

이후, 새로운 공간에서
하나의 퍼셉트론을 사용하여,
최종 분류함

4.3.1 구조와 원리

- 다층 퍼셉트론의 아키텍처
  - 입력층, 은닉층, 출력층을 가짐
  - 입력을 위한 d개의 노드, 1개의 bias를 위한 노드 (총 d+1)개의 노드
  - P+1개의 은닉층 노드 수(+1은 bias 값)
  - 가중치: u와 v

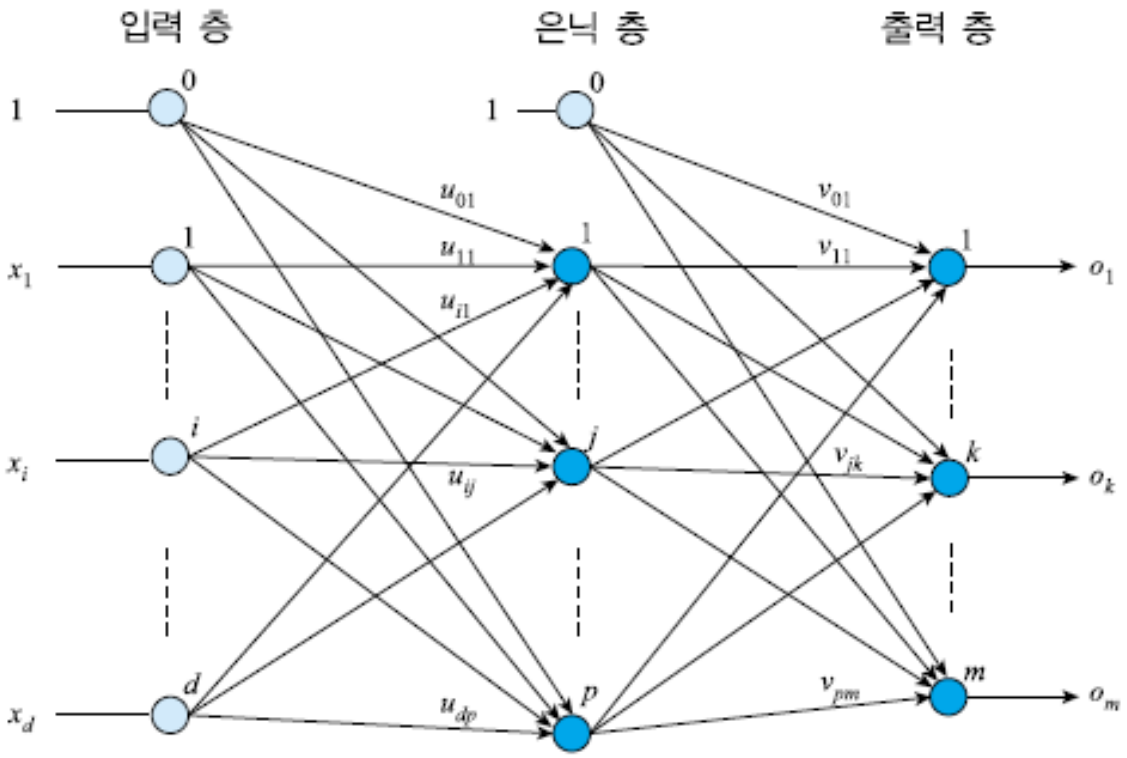


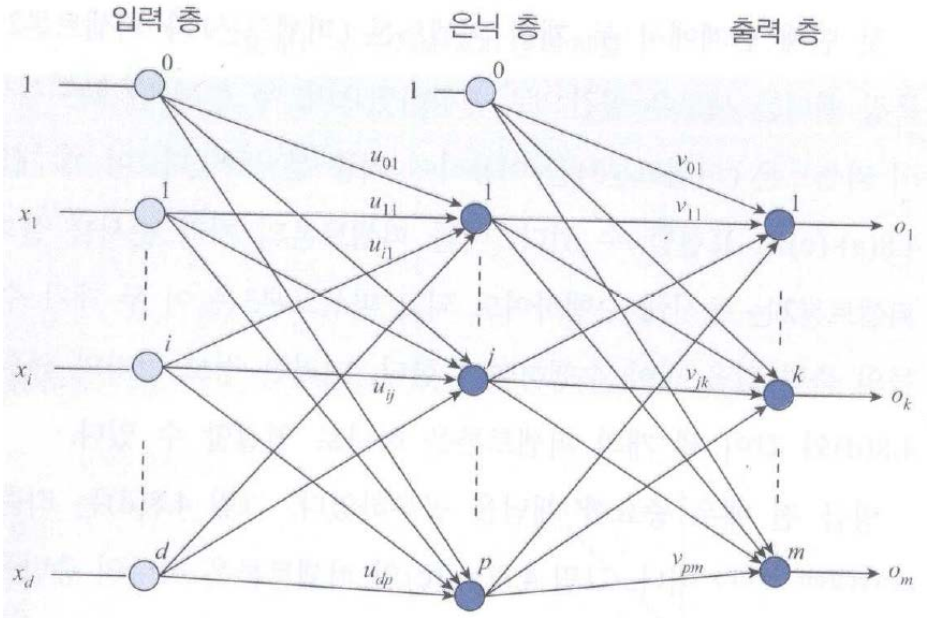
그림 4.9 다층 퍼셉트론의 구조와 표기

4.3.1 구조와 원리

- 신경망은 일종의 함수

$$\mathbf{o} = f(\mathbf{x}) \qquad (4.10)$$

$$\left.\begin{array}{l} \mathbf{z} = p(\mathbf{x}) \\ \mathbf{o} = q(\mathbf{z}) \\ \\ \text{또는} \\ \\ \mathbf{o} = q(p(\mathbf{x})) \end{array}\right\} \quad (4.11)$$



입력 **x**

은닉층 출력**z**

입력층에서 은닉층 매핑 함수(p(.))

출력벡터 **o**

은닉층에서 출력층 매핑 함수(q(.))

4.3.1 구조와 원리

- 전방 계산 (forward computation) : 신경회로망에서 왼쪽에서 오른쪽으로 계산이 이뤄짐

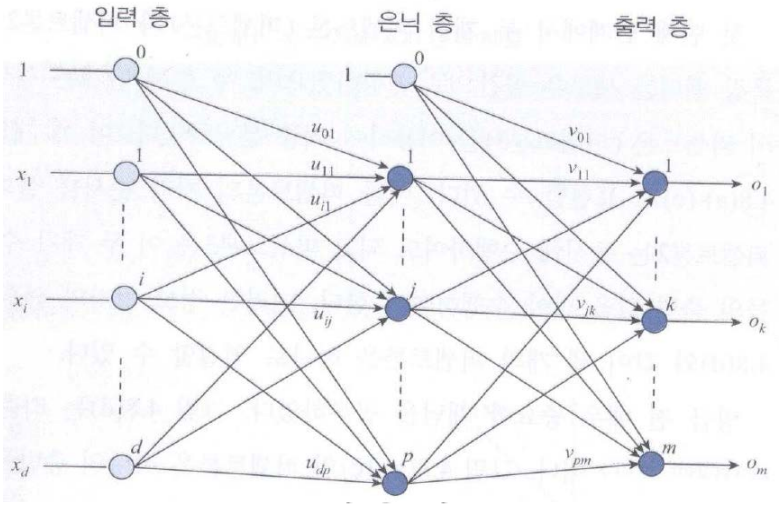
은닉 층의 j번째 노드, $1 \le j \le p$:

$$\left.\begin{aligned} z\_sum_j &= \sum_{i=1}^{n} x_i u_{ij} + u_{0j} \\ z_j &= \tau(z\_sum_j) \end{aligned}\right\} \quad (4.12)$$

출력 층의 k번째 노드, $1 \le k \le m$:

$$\left.\begin{aligned} o\_sum_k &= \sum_{j=1}^{p} z_j v_{jk} + v_{0k} \\ o_k &= \tau(o\_sum_k) \end{aligned}\right\} \quad (4.13)$$

활성함수 **(activation function)**



입력 **x**

은닉층 출력**z**

입력층에서 은닉층 매핑 함수(p(.))

출력벡터 **o**

은닉층에서 출력층 매핑 함수(q(.))

4.3.1 구조와 원리

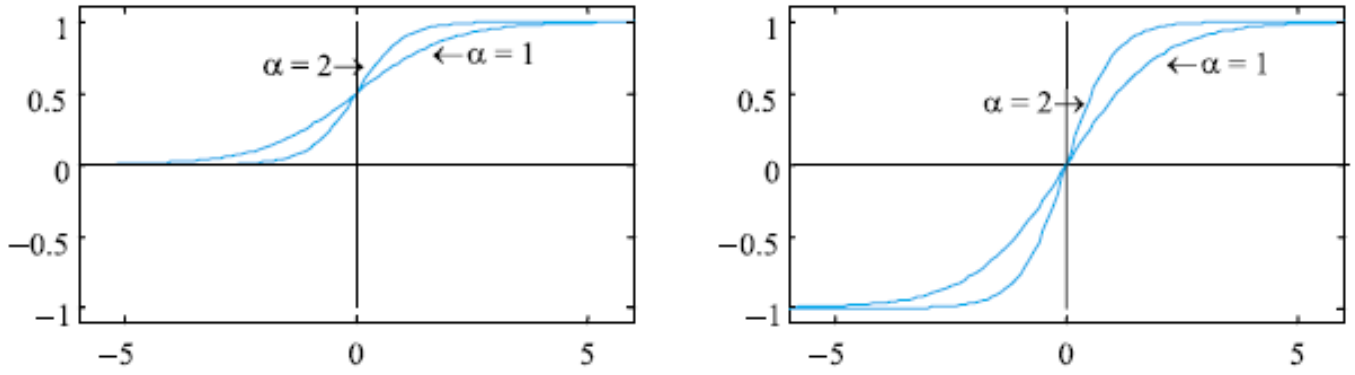
- 활성 함수 (activation function)
  - 시그모이드라는 비선형 함수 사용

이진 시그모이드 함수:

$$\left.\begin{aligned}\tau_1(x) &= \frac{1}{1+e^{-\alpha x}} \\ \tau_1'(x) &= \alpha\tau_1(x)(1-\tau_1(x))\end{aligned}\right\} \quad (4.14)$$

양극 시그모이드 함수:

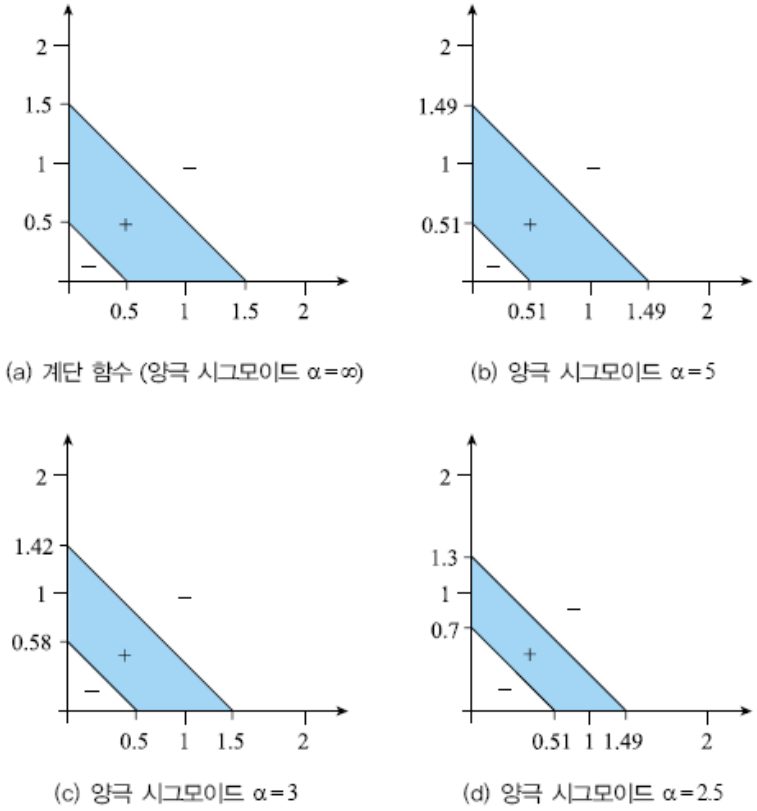
$$\left.\begin{aligned}\tau_2(x) &= \frac{2}{1+e^{-\alpha x}} - 1 \\ \tau_2'(x) &= \frac{\alpha}{2}(1+\tau_2(x))(1-\tau_2(x))\end{aligned}\right\} \quad (4.15)$$



(a) 이진 시그모이드 (b) 양극 시그모이드

그림 4.10 활성 함수로 널리 사용되는 두 가지 시그모이드 함수

- 예제 4.3 다층 퍼셉트론의 공간 분할 능력
  - 활성 함수에 따른 공간 분할



(a) 계단 함수 (양극 시그모이드 α=∞) (b) 양극 시그모이드 α=5

(c) 양극 시그모이드 α=3 (d) 양극 시그모이드 α=2.5

그림 4.11 활성 함수에 따른 다층 퍼셉트론의 공간 분할 능력

α 값이 줄어들 수록 w1 class 영역이 줄어들고 있음

4.3.1 구조와 원리

- FFMLP (Feed-Forward MLP) 의 아키텍처
  - 은닉층은 몇 개로?
  - 층간의 연결은 어떻게?
  - 각 층의 노드는 몇 개로?
  - 어떤 활성 함수 사용할까?

4.3.2 학습

- MLP의 학습이란?
  - MLP 학습이란? 훈련 집합 $X = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}_1), (\mathbf{x}_2, \mathbf{t}_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, \mathbf{t}_N)\}$이 주어졌을 때 이들을 분류하는 다층 퍼셉트론 (즉 $\mathbf{u}$와 $\mathbf{v}$)을 찾아라. $(\mathbf{x}_i, \mathbf{t}_i)$에서 $\mathbf{x}_i$는 특징 벡터이고 $\mathbf{t}_i$는 부류 표지 벡터로서 class label vector (또는 목적 벡터라고도 target vector 함) $\mathbf{x}_i \in \omega_j$이면 $\mathbf{t}_i = (0, \cdots, 1, \cdots, 0)^T$이다. 즉 j 번째 요소만 1이고 나머지 요소는 모두 0을 갖는다. 이것은 이진 모드를 사용할 때의 값이고 만일 양극 모드를 사용한다면 $\mathbf{t}_i = (-1, \cdots, 1, \cdots, -1)^T$로 하면 된다.

- 패턴 인식에서 일반적인 학습 알고리즘 설계 과정
  - 단계 1: 분류기 구조 정의와 분류 과정의 수학식 정의
  - 단계 2: 분류기 품질 측정용 비용함수 $J(\Theta)$ 정의
  - 단계 3: $J(\Theta)$를 최적화하는 Θ를 찾는 알고리즘 설계

4.3.2 학습

- 단계 1:분류기 구조 정의와 분류 과정의 수학식 정의
  - (4.12)와 (4.13)의 전방 계산이 분류기의 식
  - 매개변수 집합 Θ={u, v}

은닉 층의 j번째 노드, $1 \le j \le p$:

$$\left.\begin{aligned} z\_sum_j &= \sum_{i=1}^{n} x_i u_{ij} + u_{0j} \\ z_j &= \tau(z\_sum_j) \end{aligned}\right\} \quad (4.12)$$

출력 층의 k번째 노드, $1 \le k \le m$:

$$\left.\begin{aligned} o\_sum_k &= \sum_{j=1}^{p} z_j v_{jk} + v_{0k} \\ o_k &= \tau(o\_sum_k) \end{aligned}\right\} \quad (4.13)$$

- 단계 2 (비용 함수 정의):

$$E = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)^2 \quad (4.16)$$

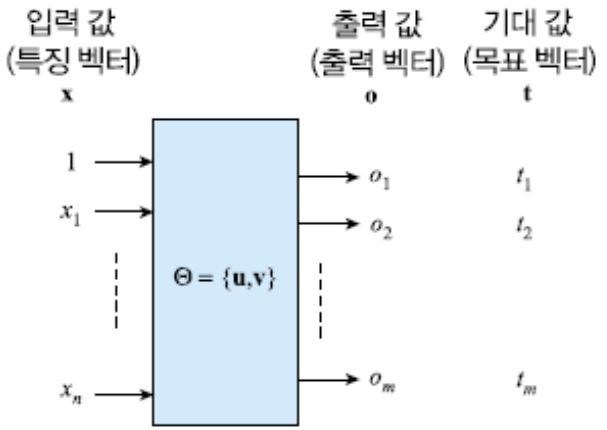


그림 4.12 다층 퍼셉트론의 입력, 출력, 그리고 기대값

4.3.2 학습

- 단계 3 (최적 해 찾음): $J(\Theta)$를 최적화하는 Θ를 찾는 알고리즘 설계
  - (4.16)의 오류를 줄이는 방향으로 Θ를 수정해 나감

$$\left.\begin{aligned}\mathbf{v}(h+1) &= \mathbf{v}(h) + \Delta\mathbf{v} = \mathbf{v}(h) - \rho\frac{\partial E}{\partial \mathbf{v}} \\ \mathbf{u}(h+1) &= \mathbf{u}(h) + \Delta\mathbf{u} = \mathbf{u}(h) - \rho\frac{\partial E}{\partial \mathbf{u}}\end{aligned}\right\} \quad (4.17)$$

알고리즘 [4.4] 다층 퍼셉트론 (MLP) 학습

입력: 훈련 집합 $X = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}_1), (\mathbf{x}_2, \mathbf{t}_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, \mathbf{t}_N)\}$, 학습률 ρ

출력: 가중치 $\mathbf{u}$와 $\mathbf{v}$

알고리즘:

1. $\mathbf{u}$와 $\mathbf{v}$를 초기화한다.
2. **repeat** {
3. **for** (X의 샘플 각각에 대해) {
4. (4.12)와 (4.13)으로 전방 계산을 한다.
5. $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{v}}$와 $\frac{\partial E}{\partial \mathbf{u}}$를 계산한다.
6. (4.17)로 새로운 $\mathbf{u}$와 $\mathbf{v}$를 계산한다.
7. }
8. } **until** (stop-condition);

라인 5를 어떻게?

4.3.2 학습

- v_{jk}를 위한 갱신값 Δv_{jk}의 유도

$$\frac{\partial E}{\partial v_{jk}} = \frac{\partial (0.5\sum_{r=1}^{m}(t_r - o_r)^2)}{\partial v_{jk}}$$

$$= \frac{\partial (0.5(t_k - o_k)^2)}{\partial v_{jk}}$$ 특정 출력노드 k에서

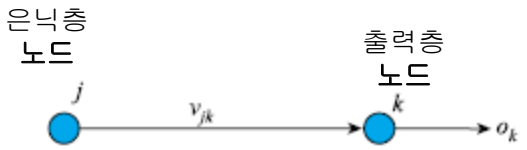
$$= -(t_k - o_k)\frac{\partial o_k}{\partial v_{jk}}$$ t_k는 상수임

$$= -(t_k - o_k)\frac{\partial \tau(o\_sum_k)}{\partial v_{jk}}$$ 출력 $o_k = \tau(o\_sum_k)$

$$= -(t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)\frac{\partial o\_sum_k}{\partial v_{jk}}$$

$$= -(t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)z_j$$

$$o\_sum_k = \sum_{j=1}^{p} z_j v_{jk} + v_{0k}$$



v_{jk}가 미치는 영향

$$\delta_k = (t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k), 1 \le k \le m \quad (4.18)$$

$$\Delta v_{jk} = -\rho\frac{\partial E}{\partial v_{jk}} = \rho\delta_k z_j, 0 \le j \le p, 1 \le k \le m \quad (4.19)$$

4.3.2 학습

- u_{ij}를 위한 갱신값 Δu_{ij}의 유도

$$\frac{\partial E}{\partial u_{ij}} = \frac{\partial (0.5\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)^2)}{\partial u_{ij}}$$

$$= -\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)\frac{\partial o_k}{\partial u_{ij}}$$

$$= -\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)\frac{\partial o\_sum_k}{\partial u_{ij}} \quad \text{출력 } o_k = \tau(o\_sum_k)$$

$$= -\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)\frac{\partial o\_sum_k}{\partial z_j}\frac{\partial z_j}{\partial u_{ij}}$$

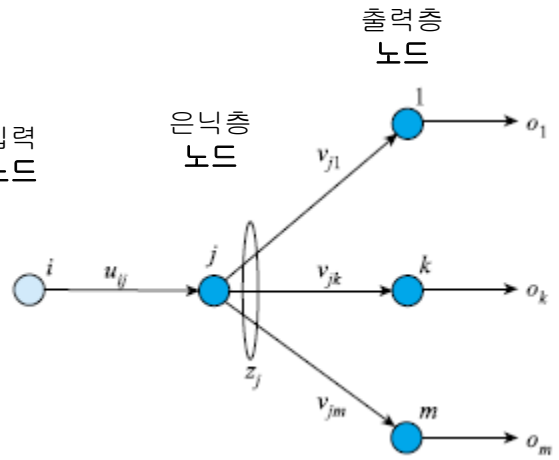
$$= -\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)v_{jk}\frac{\partial z_j}{\partial u_{ij}} \quad v_{jk} = \frac{\partial o\_sum_k}{\partial z_j}$$

$$= -\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)v_{jk}\tau'(z\_sum_j)x_i \quad z_j = \tau(z\_sum_j)$$

$$= -\sum_{k=1}^{m}\delta_k v_{jk}\tau'(z\_sum_j)x_i \quad \delta_k = (t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)$$

$$\eta_j = \tau'(z\_sum_j)\sum_{k=1}^{m}\delta_k v_{jk}, 1 \le j \le p \qquad (4.20)$$

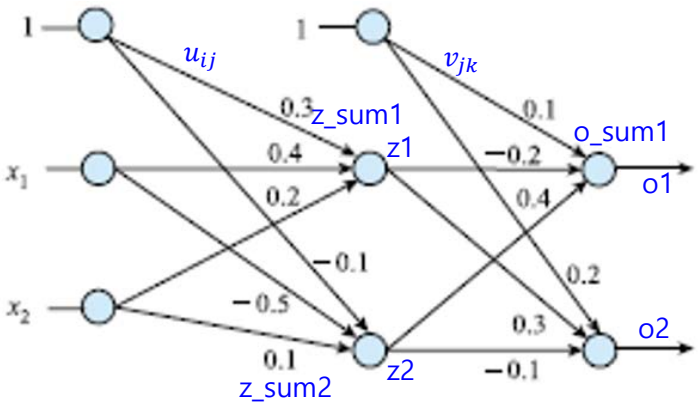
$$\Delta u_{ij} = -\rho\frac{\partial E}{\partial u_{ij}} = \rho\eta_j x_i, 0 \le i \le d, 1 \le j \le p \qquad (4.21)$$



u_{ij}가 미치는 영향

4.3.2 학습

다중퍼셉트로 학습을위한
오류 역전파 알고리즘
(패턴 모드)



입력: 훈련 집합 $X = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{t}_1), (\mathbf{x}_2, \mathbf{t}_2), \cdots, (\mathbf{x}_N, \mathbf{t}_N)\}$, 학습률 ρ

출력: 가중치 **u**와 **v**

알고리즘:

// 초기화

1. **u**와 **v**를 초기화한다.
2. $x_0 = z_0 = 1$; // 바이어스
3. **repeat** {
4. **for** (X의 샘플 각각에 대해) {
5. 현재 샘플을 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_d)^T$와 $\mathbf{t} = (t_1, t_2, \cdots, t_m)^T$으로 표기한다.

// 전방 계산

6. **for** ($j = 1$ **to** p) { $z\_sum_j = \sum_{i=0}^{d} x_i u_{ij}$; $z_j = \tau(z\_sum_j)$; } // (4.12)
7. **for** ($k = 1$ **to** m) { $o\_sum_k = \sum_{j=0}^{p} z_j v_{jk}$; $o_k = \tau(o\_sum_k)$; } // (4.13)

// 오류 역전파

8. **for** ($k = 1$ **to** m) $\delta_k = (t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)$; // (4.18)
9. **for** (모든 $v_{jk}, 0 \le j \le p, 1 \le k \le m$ 에 대해) $\Delta v_{jk} = \rho \delta_k z_j$; // (4.19)
10. **for** (j=1 **to** p) $\eta_j = \tau'(z\_sum_j) \sum_{k=1}^{m} \delta_k v_{jk}$; // (4.20)
11. **for** (모든 $u_{ij}, 0 \le i \le d, 1 \le j \le p$ 에 대해) $\Delta u_{ij} = \rho \eta_j x_i$; // (4.21)

// 가중치 갱신

12. **for** (모든 $v_{jk}, 0 \le j \le p, 1 \le k \le m$ 에 대해) $v_{jk} = v_{jk} + \Delta v_{jk}$; // (4.17)
13. **for** (모든 $u_{ij}, 0 \le i \le d, 1 \le j \le p$ 에 대해) $u_{ij} = u_{ij} + \Delta u_{ij}$; // (4.17)
14. }
15. } **until** (stop-condition);
16. **u**와 **v**를 저장한다.

4.3.2 학습

- 예제 4.4 다층 퍼셉트론의 학습

그림 4.13은 $d=2$, $p=2$, 그리고 $m=2$인 아키텍처를 가진 다층 퍼셉트론이다. 가중치는 그림에서처럼 초기화되어 있다고 하자. 활성 함수로 $\alpha=1$인 양극 시그모이드를 사용하고 학습률은 $\rho=0.2$라 한다. 아래 샘플을 가지고 알고리즘 [4.5]의 학습 과정을 살펴보자.

$$\mathbf{x}=(0.7,\ 0.2)^T,\ \mathbf{t}=(-1,1)^T$$

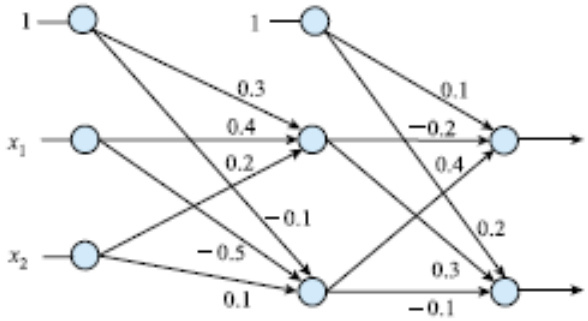
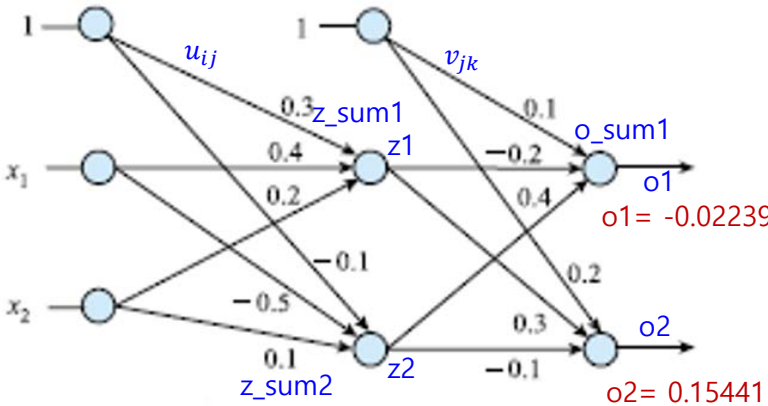


그림 4.13 다층 퍼셉트론 학습 과정의 예시

4.3.2 학습

- 예제 4.4



전방 계산을 해 보자. $\mathbf{x}=(0.7,\ 0.2)^{\mathrm{T}},\ \mathbf{t}=(-1,1)^{\mathrm{T}}$

라인 6:

$$z\_sum_1 = 1*0.3+0.7*0.4+0.2*0.2 = 0.62000$$

$$z\_sum_2 = 1*(-0.1)+0.7*(-0.5)+0.2*0.1 = -0.43000$$

$$z_1 = \tau_2(0.62000) = 2/(1+e^{-0.62000})-1 = 0.30044$$

$$z_2 = \tau_2(-0.43000) = 2/(1+e^{0.43000})-1 = -0.21175$$

for $(j=1$ to $p)$ $\{ z\_sum_j = \sum_{i=0}^{n} x_i u_{ij};\quad z_j = \tau(z\_sum_j); \}$ // (4.12)

라인 7:

$$o\_sum_1 = 1*0.1+0.30044*(-0.2)+(-0.21175)*0.4 = -0.04479$$

$$o\_sum_2 = 1*0.2+0.30044*0.3+(-0.21175)*(-0.1) = 0.31131$$

$$o_1 = \tau_2(-0.04479) = -0.02239$$

$$o_2 = \tau_2(0.31131) = 0.15441$$

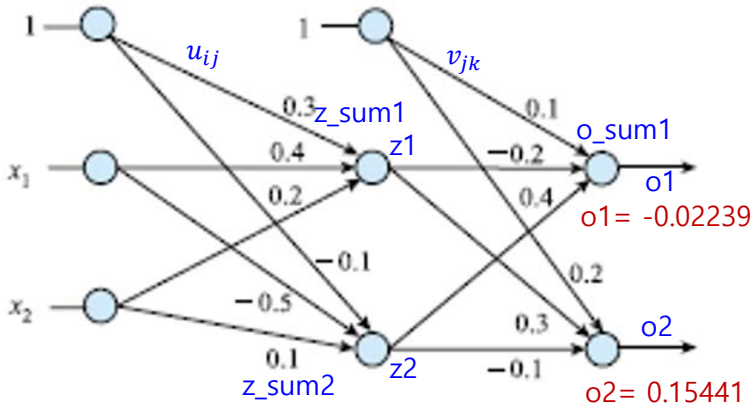
for $(k=1$ to $m)$ $\{ o\_sum_k = \sum_{j=0}^{p} z_j v_{jk};\quad o_k = \tau(o\_sum_k); \}$ // (4.13)

이 다층 퍼셉트론은 입력 $\mathbf{x}=(0.7,0.2)^{\mathrm{T}}$에 대해 $\mathbf{o}=(-0.02239,0.15441)^{\mathrm{T}}$을 출력하였다. 기대하는 값 $\mathbf{t}=(-1,1)^{\mathrm{T}}$과의 오류는 아래와 같이 계산할 수 있다.

$$E = 0.5*((-1.0-(-0.02239))^2 + (1.0-0.15441)^2) = 0.83537$$

$$E = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{m}(t_k - o_k)^2$$

4.3.2 학습



이제 오류 역전파 단계를 계산해 보자.

라인 8:

$$\delta_1 = (-1.0 + 0.02239)\tau_2'(-0.04479) = -0.97761 * 0.5 * (1 + \tau_2(-0.04479))(1 - \tau_2(-0.04479)) = -0.48856$$

$$\delta_2 = (1.0 - 0.15441)\tau_2'(0.31131) = 0.84559 * 0.5 * (1 + \tau_2(0.31131))(1 - \tau_2(0.31131)) = 0.41271$$

라인 9:

$$\Delta v_{01} = 0.2 * (-0.48856) * 1.0 = -0.09771$$

$$\Delta v_{02} = 0.2 * 0.41271 * 1.0 = 0.08254$$

$$\Delta v_{11} = 0.2 * (-0.48856) * 0.30044 = -0.02936$$

$$\Delta v_{12} = 0.2 * 0.41271 * 0.30044 = 0.02480$$

$$\Delta v_{21} = 0.2 * (-0.48856) * (-0.21175) = 0.02069$$

$$\Delta v_{22} = 0.2 * 0.41271 * (-0.21175) = -0.01748$$

// 오류 역전파

8. **for** $(k = 1$ **to** $m)$ $\delta_k = (t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)$; // (4.18)

9. **for** (모든 $v_{jk}, 0 \le j \le p, 1 \le k \le m$ 에 대해) $\Delta v_{jk} = \rho \delta_k z_j$; // (4.19)

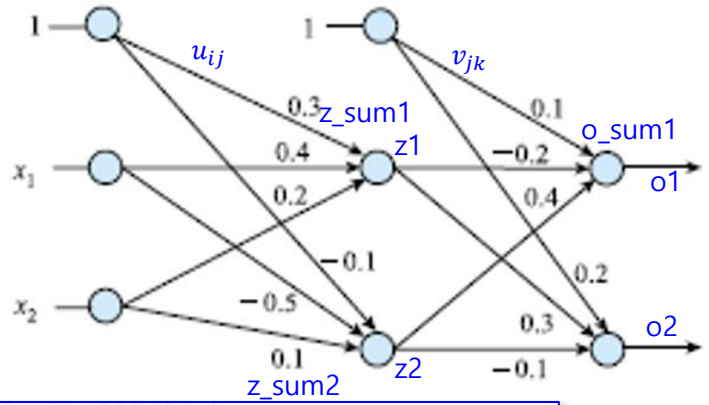
10. **for** $(j = 1$ **to** $p)$ $\eta_j = \tau'(z\_sum_j)\sum_{k=1}^{m} \delta_k v_{jk}$; // (4.20)

11. **for** (모든 $u_{ij}, 0 \le i \le d, 1 \le j \le p$ 에 대해) $\Delta u_{ij} = \rho \eta_j x_i$; // (4.21)

라인 10:

$$\eta_1 = \tau_2'(0.62000) * ((-0.48856) * (-0.2) + 0.41271 * 0.3) = 0.10076$$

$$\eta_2 = \tau_2'(-0.43000) * ((-0.48856) * (0.4) + 0.41271 * (-0.1)) = -0.11304$$



라인 11: $\Delta u_{ij} = \rho \eta_j x_i$

$$\Delta u_{01} = 0.2 * 0.10076 * 1.0 = 0.02015$$

$$\Delta u_{02} = 0.2 * (-0.11304) * 1.0 = -0.02261$$

$$\Delta u_{11} = 0.2 * 0.10076 * 0.7 = 0.01411$$

$$\Delta u_{12} = 0.2 * (-0.11304) * 0.7 = -0.01583$$

$$\Delta u_{21} = 0.2 * 0.10076 * 0.2 = 0.00403$$

$$\Delta u_{22} = 0.2 * (-0.11304) * 0.2 = -0.00452$$

// 오류 역전파

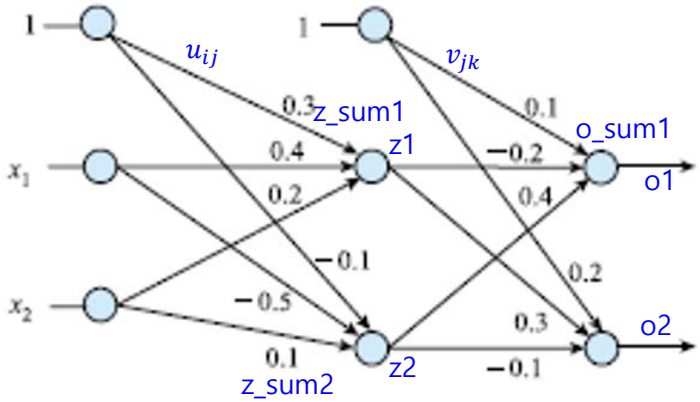
8. **for** $(k = 1$ **to** $m)$ $\delta_k = (t_k - o_k)\tau'(o\_sum_k)$; // (4.18)

9. **for** (모든 $v_{jk}, 0 \le j \le p, 1 \le k \le m$ 에 대해) $\Delta v_{jk} = \rho \delta_k z_j$; // (4.19)

10. **for** $(j = 1$ **to** $p)$ $\eta_j = \tau'(z\_sum_j) \sum_{k=1}^{m} \delta_k v_{jk}$; // (4.20)

11. **for** (모든 $u_{ij}, 0 \le i \le d, 1 \le j \le p$ 에 대해) $\Delta u_{ij} = \rho \eta_j x_i$; // (4.21)

4.3.2 학습



- 예제 4.4

이제 가중치 갱신 단계를 수행해 보자.

라인 12:

$v_{01} = 0.1 - 0.09771 = 0.00229$

$v_{02} = 0.2 + 0.08254 = 0.28254$

$v_{11} = -0.2 - 0.02936 = -0.22936$

$v_{12} = 0.3 + 0.02480 = 0.32480$

$v_{21} = 0.4 + 0.02069 = 0.42069$

$v_{22} = -0.1 - 0.01748 = -0.11748$

라인 13:

$u_{01} = 0.3 + 0.02015 = 0.32015$

$u_{02} = -0.1 - 0.02261 = -0.12261$

$u_{11} = 0.4 + 0.01411 = 0.41411$

$u_{12} = -0.5 - 0.01583 = -0.51583$

$u_{21} = 0.2 + 0.00403 = 0.20403$

$u_{22} = 0.1 - 0.00452 = 0.09548$

// 가중치 갱신

for (모든 $v_{jk}, 0 \le j \le p, 1 \le k \le m$ 에 대해) $v_{jk} = v_{jk} + \Delta v_{jk}$; // (4.17)

for (모든 $u_{ij}, 0 \le i \le d, 1 \le j \le p$ 에 대해) $u_{ij} = u_{ij} + \Delta u_{ij}$; // (4.17)

이 예제를 마치기 전에 학습한 효과를 확인해 보자. 이 작업은 새로 얻은 **u**와 **v**가 좋아졌는지를 확인하는 것이다. 라인 6과 라인 7로 전방 계산을 해보자.

라인 6과 7: 0.3 → 0.32015

$z\_sum_1 = 1.0*0.32015+0.7*0.41411+0.2*0.20403 = 0.65083$

$z\_sum_2 = 1.0*(-0.12261)+0.7*(-0.51583)+0.2*0.09548 = -0.46460$

$z_1 = 0.31440$

$z_2 = -0.22821$

$o\_sum_1 = 1.0*0.00229+0.31440*(-0.22936)+(-0.22821)*0.42069 = -0.16582$

$o\_sum_2 = 1.0*0.28254+0.31440*(0.32480)+(-0.22821)*(-0.11748) = 0.41147$

$o_1 = \tau_2(-0.04479) = -0.02239$

$o_2 = \tau_2(0.31131) = 0.15441$

$o_1 = -0.08272$

$o_2 = 0.20288$

$\mathbf{o} = (-0.08272, 0.20288)^T$을 얻어 우리가 원하는 $\mathbf{t} = (-1,1)^T$에 가까워졌음을 알 수 있다. 오류도 $E = 0.73840$이 되어 이전보다 줄어들었음을 확인할 수 있다.

4.3.2 학습

- 오류 역전파 알고리즘의 계산 복잡도
  - $\Theta((d+m)pHN)$
  - H는 세대 수
  - 많은 시간 소요
    - 예) MNIST 필기 숫자 데이터베이스는 N=60000

4.3.3 인식

- 학습된 다층 퍼셉트론을 사용하여, 입력에 대해 인식을 수행
- 인식 알고리즘

$$\left.\begin{array}{l}\mathbf{x}\text{를 } \omega_q\text{로 분류} \\ \text{이때 } q = \arg\max_j o_j, 1 \le j \le m\end{array}\right\}$$

알고리즘 [4.6] 다층 퍼셉트론 (MLP)에 의한 인식

입력: MLP (**u**와 **v**), 미지 패턴 **x**

출력: 부류 ω_q

알고리즘:

1. **u**와 **v**를 읽어 MLP를 설정한다.
2. $x_0 = z_0 = 1$; // 바이어스
3. **for** $(j = 1$ **to** $p)$ $\{ z\_sum_j = \sum_{i=0}^{d} x_i u_{ij}$; $z_j = \tau(z\_sum_j); \}$ // 은닉 층
4. **for** $(k=1$ **to** $m)$ $\{ o\_sum_k = \sum_{j=0}^{p} z_j v_{jk}$; $o_k = \tau(o\_sum_k); \}$ // 출력 층
5. **x**를 $q = \arg\max_j o_j$ 인 ω_q로 분류한다. // 가장 큰 값을 갖는 부류

- 시간 복잡도 $\Theta((d+m)p)$
  - N에 무관, 빠름

4.3.4 구현과 몇 가지 부연 설명

- 몇 가지 부연 설명
  - 네트워크 아키텍처 (은닉 노드 개수 등)
  - 가중치 초기화
  - 언제 종료할 것인가?

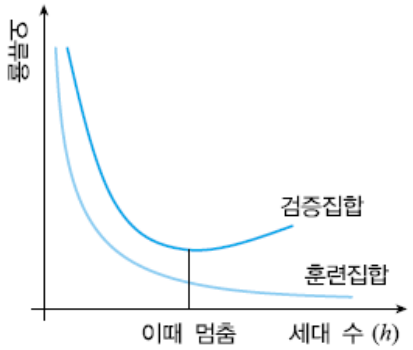


그림 4.15 일반화 기준에 따른 멈춤 조건

  - 목적 벡터의 표현과 활성 함수 (이진 모드와 양극 모드)
  - 샘플 처리 순서
  - 학습률
  - 국소 최적 점 탈출

4.3.4 구현과 몇 가지 부연 설명

- 매개변수 설정
  - 일반적인 경우에 적용되는 보편 규칙은 없다.
  - 경험과 실험을 통해 설정해야 한다.
  - 신경망 성능이 매개변수에 아주 민감하지는 않기 때문에 어느 정도의 실험과 경험을 통해 설정 가능