Mathematical Backgound for Machine Learning

Jang-Hyun Kim

Seoul National University
Mathematical science department
Deepest

2018. Summer

Contents

1 Preliminary **7**

1.1 Basic Concepts 7

1.1.1 집합 7

1.1.2 실수(Real number) 10

1.1.3 대수적 대상(군,환,체) 11

1.1.4 공간 12

1.1.5 함수 13

1.1.6 색인(index) 14

1.2 수학적 관점에 대하여 (*) 15

2 미분 **17**

2.1 극한 (Limit) 17

2.2 선형 변환 (Linear map) 19

2.3 미분 (Differentation) 19

2.4 Applications 21

2.4.1 Gradient Descent 21

2.4.2 Optimization - KKT condition 22

3 벡터 공간 **25**

3.1 좌표와 행렬 25

3.2 행렬식 (Determinant) 27

3.3 Spectral Theorem 29

3.3.1 내적 공간 (inner product space) 29

3.3.2 Spectral Theorem 33

3.3.3 SVD (singular value decomposition) 35

3.3.4 Norm of Linear map 35

4 위상 공간 **39**

4.1 위상 (Topology) 39

4.1.1 열린 집합 (Open set) 39

4.1.2 내부와 경계 40

4.1.3 Basis (*) 42

4.1.4 부분 공간 (Subspace) (*) 42

4.2 연속 (Continuity) 42

4.2.1 거리 공간 (Metric Space) 43

4.2.2 연속 함수 43

4.3 Compact set 45

4.3.1 유클리드 공간의 Compact Set 45

4.3.2 거리공간의 Compact Set (*) 46

5 측도와 확률 **49**

5.1 측도 (Measure) 49

5.2 적분 (Integration) 50

5.3 Lebesgue Measure (*) 53

5.4 Application 54

5.4.1 Probability Measure 54

5.4.2 Jensen's inequality 56

6 힐베르트 공간 **59**

6.1 Basics of Hilbert Space 59

6.1.1 Orthonormal basis 59

6.1.2 L_2 space 60

6.1.3 Counting measure 61

6.1.4 푸리에 급수 (Fourier series) 62

6.2 Kernel induced Hilbert Space 63

6.2.1 Kernel to Hilbert space 64

6.2.2 reproducing kernel hilbert space 65

6.2.3 Examples 66

6.2.4 Applications 66

개 요

본 노트에서는 크게 다음의 3가지를 다루고자 합니다: 1) 미분(differentiation), 2) 측도(Measure)와 적분(Integration), 3) 힐베르트 공간(Hilbert Spaces). 개념들에 대한 설명 및 문제는 처음 접한 사람의 지식에 맞추어 이루고자 합니다. 다만 여기서 다루는 내용들은 여러 수학 교재들에 걸쳐 등장하는 것들로 처음 접한다면 다소 어렵게 느껴질 수도 있습니다. 본 노트에서는 구체적인 증명보다는 직관적인 설명을 하고자 합니다. 개념들이 무엇을 의미하고 현실 혹은 직관과 어떻게 연결 지을 수 있는지를 쫓아가고자 합니다. 개념에 익숙해지기 위해선 보고 듣는 것 이외에 각자의 방식대로 정리하는 시간을 가져야 한다고 생각합니다. 이를 위해 개념을 잘 알고 있는지 확인할 수 있는 문제나 질문을 포함하려고 합니다.

끝으로, 전체적인 흐름에 대해 간단히 설명하겠습니다. 우선 기본적인 개념들과 표기에 대해 소개합니다. 본문은 한글로 작성하려고 합니다. 다만, 옹골 집합(compact set)과 같이 수학을 한글로 번역하는 과정에서 듣도 보도 못한 단어들이 등장하므로 처음 본 단어라면 영어 원어를 유의해서 기억할 필요가 있습니다.

2장에서는 미분을 다루고 있습니다. 미분을 다루기 위해선 극한(limit)과 선형성(linearity)에 대한 이해가 필요합니다. 미분을 다룬 후에 gradient descent에 대해 간단히 설명하고자 합니다.

3장과 4장은 이후에 다룰 측도(measure)와 함수공간을 위한 기초 개념들을 다룹니다. 직관과 일치하는 유클리드 공간(Euclidean space)에서 여러 아이디어들을 얻고 이를 추상화하는 연습을 합니다. 이 과정에서 가장 근본적인 구조를 지닌 공간인 위상 공간(topological space)과 벡터 공간(Vector space)에 대해 접하고자 합니다.

5장에서는 적분을 다룹니다. 구분구적법을 이용한 리만 적분(Riemann integration)은 적용가능한 함수 범위가 작아 수학적으로 체계를 만들기에 다소 부족합니다. 20세기 초에 새로운 관점으로 적분을 개발하여 수학 체계를 제작했는데, 바로 르벡 적분(Lebesgue integration)입니다. 함수 간 거리는 두 함수 사이의 넓이로 정의할 수가 있는데, 이러한 넓이를 재기 위해선 밑면의 ’크기’에 대한 정의가 필요합니다.[1] 이를 체계화 한 것이 측도론(measure theory)입니다. 이는 확률론의 토대가 되고, 특히 기댓값(expectation)에 대한 일반적인 표현을 가능하게 해줍니다. 이를 더불어 확률 분포를 학습하는 VAE와 GAN에서 등장하는 수식을 간단히 다룰 수 있을 것 같습니다. 추가적으로 기계적인 계산과정에서 자주 등장하는 적분, 미분 순서 교환에 대해 다루고자 합니다. 적분 순서 교환은 Fubini’s theorem으로 알려져 있으며 언제 순서 교환이 가능한 지 알아둘 필요가 있습니다.

마지막 6장은 앞에서 했던 내용을 이용하여 완비성(completeness)을 지닌 힐베르트 공간에 대해 다룹니다. 힐베르트 공간은 푸리에 변환이나 머신 러닝에서 SVM이나 kernel PCA같이 kernel을 통해 주어진 데이터 공간을 고차원 공간로 옮겨 작업을 하는데서 자주 등장합니다. 최근 딥 러닝에서도 이런 방법을 이용하는 시도가 이루어지고 있어 끝으로 다루고자 합니다.

(마지막 주에는 통계 관련해서 간단하게 Fisher의 MLE의 성질과 기초적인 Bayesian을 다룰려고 하는데 앞과는 무관한 내용이라 노트를 따로 만들 것 같습니다.)

[1] 예를 들어 평면에서 정의된 함수의 넓이(혹은 부피)는 2차원 밑면의 넓이와 높이를 통해 계산할 수 있습니다. 여기서 ’크기’란 밑면, 즉 정의역의 부분집합의 크기를 의미합니다.

Chapter 1

Preliminary

이 장에서는 기본적인 개념들과 수학의 역사적 배경에 대해 알아봅니다. 다양한 개념들을 처음 접한다면 생소하여 어렵게 느껴질 수 있지만, 기술적으로 복잡한 것은 등장하지 않습니다. 마치 언어공부하는 것과 비슷한데, 직관 혹은 현실과 빗대어 보면서 생각한다면 좀 더 쉽고 흥미롭게 공부할 수 있으리라 생각합니다. (*) 표시는 생략해도 됨을 의미합니다.

1.1 Basic Concepts

1.1.1 집합

- Zermelo-Frankel axioms

수학이 어려운 이유 중 하나는, 아주 직관적인 개념도 정의내리기 어려울 때가 있기 때문입니다. 예를 들어, 누구나 상상할 수 있는 집합이라는 개념도 막상 정의하기가 쉽지 않습니다. 집합론에서 유명한 역설인 러셀의 역설을 살펴 봅시다.

Question) 다음과 같은 집합이 존재할 수 있는가? $B = \{A \mid A \notin A, A \text{ is a set}\}$

이것이 역설로 불리는 이유는 B를 집합으로 정하는 순간 모순이 발생하기 때문입니다. 만약 $B \in B$라면, 조건에 의해 B는 B의 원소들이 만족하는 성질($A \notin A$)을 만족하지 않으므로, B는 B의 원소가 아닙니다. 즉, $B \notin B$여서 모순이 발생합니다. 반대로 B가 자기 자신을 포함하지 않는다면 마찬가지로 모순이 발생합니다. 따라서 B라는 것은 집합이 될 수 없고, 이 예로부터 단순히 특정 조건을 만족하는 대상들의 모임으로 집합을 정의한다면 문제가 발생함을 알 수 있습니다.

1900년대 초에 나온 이 역설로 인해, 사람들은 집합의 개념부터 다시 잡기 시작합니다. 이러한 모순이 발생하는 상황을 배제하기 위해 현재는 Zermelo-Frankel 공리계(ZF-axioms)를 채택하고 있습니다. 공리란, 증명의 레고블럭과 같은 것입니다. 증명하기 위해선, 이전에 성립하는 명제가 있어야 하고 맨 시작점을 사람들의 합의로 설정한 것입니다. 현재로서는 이 공리들에 대해서 자세히 알 필요는 없습니다. 간단히 설명하자면, 원소가 유한개인 집합들을 정의하고 합집합과 같이 집합이라면 만족할 성질들

을 공리로 설정한 것입니다. 여기에 자연수 집합 같은 원소수가 무한히 많은 집합을 위한 공리를 추가함으로써 버틀란트 역설을 피하고, 상식적으로 우리가 집합으로 여기는 것들(ex. 자연수 집합)이 공리계에서 집합이 되도록 만듭니다.

- Uncountable set and Axiom of Choice

버틀란드 역설이 문제를 제기한 이후, ZF 공리계 말고도 비슷한 다른 공리계들도 많이 제안되었습니다. 그럼에도 ZF 공리들은 상식에서 크게 벗어나는 문제를 만들지 않고, 집합론에서 가장 일반적인 체계로 채택됩니다. 이러한 ZF 공리계에 선택 공리(Axiom of choice)를 추가한 것을 ZFC 공리계라 합니다. 선택 공리는 셀 수 없이 많은 개수의 집합들의 모임[1]의 각 집합에서 원소들을 하나씩 뽑을 수 있음을 말합니다. 선택 공리는 다소 논쟁의 여지가 있는데, 자명해 보이는 이 공리로부터 비자명한 결과들이 도출되기 때문입니다.[2]

이에 대해 좀 더 자세히 알아보기 위해선, 집합론의 관점에서의 '크기'에 대해 알아야 합니다. 즉, 어떤 집합이 큰가에 대해 답할 수 있어야 합니다. 아마 일반적으로 원소의 개수가 많은 집합을 크다고 할 것입니다. 원소의 개수에 따라서 집합의 대소 관계를 부여할 수 있습니다. 예를 들어 {0,1}은 크기가 2로 크기가 3인 {0,1,2}보다 작습니다. 문제는 자연수의 집합과 같이 크기가 무한한 집합들입니다. 정수의 집합의 크기 또한 무한하기 때문에 자연수의 집합과 '원소의 개수' 관점에서 비교가 불가합니다. 만약 자연수는 정수에 포함되기 때문에 정수의 집합이 더 크다고 말한다면, 이는 원소의 개수의 비교가 아닌 포함관계에 근거하는 주장일 것입니다.

흥미로운 사실은 자연수와 정수 간에는 1-1 대응이 가능하다는 점입니다.[3] 유한한 집합의 경우 원소의 개수가 같으면 1-1 대응이 존재합니다. 이것을 확장하여 무한한 집합의 크기가 같음을 1-1 대응이 존재함으로 자연스럽게 정의할 수 있습니다.

Question) 무한집합의 크기가 다를 수 있는가?

자연수 집합과 실수 집합 간에는 1-1 대응이 존재하지 않습니다. 이때, 자연수의 집합에서 실수의 부분집합으로의 1-1 대응이 존재하기 때문에 (how?) 실수 집합의 크기는 자연수 집합의 크기보다 큽니다.

Proof. 사실 아직 실수에 대해 정의하지 않았지만, 우선은 실수를 $0.a_1a_2a_3... \cdot 10^n$ 꼴의 수들로 생각합니다. 이때, 자연수와 실수 간에 1-1 대응이 존재한다고 가정하고 이 대응함수를 f라 표기 하겠습니다. $f(1) = n_1 + 0.a_{11}a_{12}a_{13}...$, $f(2) = n_2 + 0.a_{21}a_{22}a_{23}...$ (n_i는 정수, a_{ij}들은 모두 $0 \sim 9$중 하나) 이런 식으로 각 자연수마다 실수 값이 대응된다고 할 때, $x_i \neq a_{ii}$인 x_i에 대해, $x = 0.x_1x_2x_3...$라 놓으면 어떠한 자연수 n에 대해서도 f(n)의 n번째 소숫점 값인 a_{nn}과 x의 n번째 소숫점 x_n은 다르므로 f(n)은 x와 다릅니다. 다시 말해, 어떠한 자연수 n에 대해서도 f(n)은 x와 다릅니다. 따라서 f는 전사함수가 아니므로 가정에 모순이 됩니다. □

이 논리는 19세기 수학자 칸토어가 생각해 내었습니다. 당시에는 사람들이 칸토어를 미친 사람 취급할 정도로 무한에 대한 이러한 사고방식은 받아들여지지 않았습니다. 결국 칸토어는 정신병원에서 생을 마감하게 됩니다. 위에서 보였듯이 실수 집합은 자연수 집합보다 큽니다. 이때, 자연수 집합은 자연

[1] 집합들의 집합을 의미합니다. 혼동을 피하기 위해 영어로는 collection(혹은 family) of sets라는 표현을 사용합니다.

[2] 사실 선택공리가 자명해 보이는 것은 착시현상과 같은 것일 수도 있습니다. 선택공리는 셀 수도 없이 많은 집합들에 대해 말을 하고 있습니다. 우리가 일반적으로 사용하는 귀납법은 자연수에 관한 것입니다. 이러한 셀 수 있는 무한에 대한 인식을 자연스럽게 셀 수 없는 무한으로 확장하는 것은 착시현상과 같은 것입니다.

[3] Let f : N → Z, f(0)=0, f(2n)=n, f(2n-1)=-n.

스럽게 순서가 매겨져 있는데, 자연수와 1-1 대응이 존재하는 집합의 경우 이 대응에 따라 순서를 매길 수 있습니다. 이러한 집합들을 countable하다고 말합니다. 그리고 실수와 같이 자연수와 1-1대응이 존재하지 않은 무한 집합은 uncountable하다고 합니다.

Question) uncountable한 집합이 countable한 집합보다 큰가?

Proof. 임의의 무한집합에는 countable 부분집합이 존재한다: 무한 집합은 비어있지 않으므로 원소가 하나 이상 존재하고 하나를 고른 뒤 번호를 부여합니다. 그리고 이 원소를 빼도 무한 집합이므로 이 과정을 반복하면 귀납적으로 countable한 부분집합을 얻게 됩니다. □

멱집합(power set)은 어떤 집합의 모든 부분집합들의 모임을 의미합니다. ZF 공리계에서 멱집합의 공리는 멱집합의 존재를 보증합니다.

Theorem 1.1.1. 집합 S 보다 S의 멱집합이 더 크다.

Proof. 앞서 말한 Cantor의 방법과 유사하게 보일 수 있습니다. 주어진 집합을 S라하고 멱집합을 P(S)라 할 때, f: S→P(S)에 대해 A= $\{a \in S \mid a \notin f(a)\}$라 하면 A는 ZF 공리계에서 집합이 됩니다. (버틀란트 역설과 차이점은?) 만약 어떤 s가 존재해서 f(s)=A라 가정해봅시다. 이때, s가 A의 원소라면 s가 f(s)의 원소이고 A의 조건에 의해 s는 A에 속하면 안 됩니다. 반대로 s가 A의 원소가 아니라면 s가 f(s)의 원소가 아니고 A의 조건에 의해 s는 A의 원소가 됩니다. 따라서 모순이 발생하여 A는 f의 치역에 들어가지 않습니다. 따라서 f는 전사함수가 될 수 없고, P(S)는 S보다 큽니다. □

Thm1.1으로부터 크기가 다른 무한 집합을 계속 만들 수 있음을 알 수 있습니다. 자연수 집합의 멱집합은 실수 집합과 크기가 같습니다.[4] 그리고 실수의 멱집합을 이용해 더 큰 무한집합을 얻을 수가 있습니다. 그렇다면 이렇게 얻어지는 집합 이외에 다른 무한집합이 있을까요? 크기가 자연수와 실수 사이에 있는 무한집합의 존재성은 20세기의 대난제 중 하나로, 괴델과 코언 두 명의 수학자에 의해 ZF 공리계에서는 증명 불가능함이 증명되었습니다. 즉, 주어진 공리들로는 집합이 존재함을 보일 수도 없고 존재하지 않음을 보일 수도 없습니다.

- Axiom of Choice와 동치인 명제(*)

여지껏 무한집합에 대해 간단히 알아보았습니다. 이제 선택공리에 대해 다시 들여다 보면, 어떤 uncountable개의 집합들에서 원소를 하나씩 뽑을 수가 있다가 이 공리가 주장하는 것입니다. 무언가 당연해 보이는 이 공리가 논쟁이 되는 이유는, 이로부터 zorn's lemma나 well ordering principal과 같이 다소 자명하지 않은 명제들이 도출되기 때문입니다. zorn's lemma는 약간 복잡하므로 자세한 설명은 뒤로 미루고 well ordering principal에 대해서만 알아보겠습니다. well ordering principal은 모든 집합은 순서를 매길 수 있다는 것을 말합니다. 여기서 순서를 매길 수 있다는 것은 임의의 부분집합에서 순서가 제일 빠른 원소가 존재함을 말합니다. 따라서 (0,1)의 경우 주어진 실수의 순서로는 최소 원소가 존재하지 않으므로 다들 아는 실수의 순서는 well ordered하지 않습니다. 그런데 well ordering principal은 의해 다시 잘 배치를 하면 순서가 존재합니다. [5]

[4] 우선 자연수 집합의 멱집합을 구간 [0,1]와 1-1대응이 존재함을 보인 다음, [0,1]과 실수간의 1-1대응이 존재함을 tan함수를 이용해 보일 수가 있습니다. 예를 들어, 자연수의 부분집합이 {1,3}라면 $0.101_{(2)}$의 2진법 수에 대응을 시킬 수 있습니다.

[5] Axiom of choice는 증명이 불가능한 명제입니다. 즉, 성립해도 문제는 없고 성립 안해도 문제는 없는데, well ordering principal은 이와 동치입니다. 따라서 well ordering이 존재함은 입증은 불가능하고 단지 사람들간에 합의의 결과인 것입니다. 실제로 실수의 well ordering을 구체적으로 제시하는 것은 불가능할 것 입니다.

선택공리와 앞서 이야기한 zorn's lemma를 통해 무한에 대해 많은 것을 이야기 할 수 있게 됩니다. 특히 uncountable하게 많은 것에 대해 이야기를 할 수 있는데, 측도나 힐베르트 공간에서 등장합니다. 선택공리를 포함하는 공리계는 ZFC 공리계로 불리며 수학자들은 ZF에서 보일 수 없으나 ZFC에서 보일 수 있는 명제들을 민감하게 구분하기도 합니다.

1.1.2 실수(Real number)

간단히 '모임'이라는 개념을 추상화한 집합에 대해 알아보았습니다. 이어서 '수'에 대해 간단히 알아봅니다.

가장 직관적인 수는 자연수입니다. 여기서 빼기라는 연산을 생각한다면 음수를 같이 얻게 됩니다. 음수는 자연수보다는 다소 추상적입니다. 그 다음은 나누기를 생각하고 유리수를 얻게 됩니다.

유리수에서 실수로 넘어가는 과정은 빽빽하지 않은 유리수를 빽빽하게 만드는 것입니다. 예를 들어 $x^2 = 2$인 x의 경우 유리수가 아닌 어떤 수가 됩니다. 이를 $\sqrt{2}$라 표기합니다. 모든 유리수를 직선위에 일렬로 나열 했을 때, 대소 관계로부터 $\sqrt{2}$가 직선 위에 어느 지점에 위치함을 알 수 있습니다.[6] 이는 유리수를 직선위에 놓았을 때, 중간 중간 비는 지점들이 존재함을 말합니다. 반면에, 직선위에서 어떤 짧은 구간을 잡더라도, 그 안에는 유리수가 들어갈 것입니다.[7] 직선 위에서 겉보기에도 텅텅 빈 정수들과는 달리 유리수는 매우 조밀하나 중간 중간 빈 지점들이 있고, 이를 채우면 실수가 됩니다. 좀 더 엄밀하게 서술을 하자면, 유리수가 직선 위에서 조밀하다는 것은 직선의 어떤 지점을 잡더라도 그 지점에 가까운 유리수가 존재함을 말합니다. 예를 들어 정수의 경우 1/2와는 1/2보다 가까워 질 수 없기에 조밀하지 않습니다.

만약 위에서 말한 직선 위의 각 지점을 실수와 대응시켜 생각해본다면, 모든 실수는 그 실수에 가까워지는 유리수들의 수열이 존재하므로 이런 유리수들의 극한으로 실수를 대응시킬 수 있습니다. 여기서 문제는 실수를 만드는 과정에서는 아직 실수를 사용할 수 없으므로, '어떤 실수에 가까워진다' 라는 말은 사용할 수 없다는 점입니다. 이때, 목적지가 없이 수렴하는 코시 수열이 등장하게 됩니다.

Definition 1. 코시 수열 (Cauchy sequence)
코시 수열은 주어진 수열의 index가 충분히 커지면 수열의 수들이 서로 가까워지는 수열입니다. 주어진 수열을 a_n이라 할때, 임의의 작은 양수 $\epsilon > 0$에 대해 충분히 큰 N이 존재하여, $n, m > N$ 인 임의의 n, m에 대해 $|a_n - a_m| < \epsilon$.

목적지가 지정된 수렴은 다음과 같이 정의됩니다.

Definition 2. 수열의 수렴 (convergence of sequence)
주어진 수열을 $\{a_n\}$이라 할때, 임의의 작은 양수 $\epsilon > 0$에 대해 충분히 큰 N이 존재하여, $n > N$ 인 임의의 n에 대해 $|a_n - r| < \epsilon$ 라면 a_n은 r로 수렴한다고 하고 $a_n \to r$라 표기합니다.

Theorem 1.1.2. 모든 수렴하는 수열은 코시 수열이다.

Proof. $|a_n - a_m| \leq |a_n - r| + |a_m - r|$ 이용하면 바로 보일 수가 있습니다. □

[6] 반면에 $\sqrt{-1}$은 어디에 위치할까요?

[7] 구간의 길이가 s일 때 1/s보다 큰 자연수 N이 존재합니다 (아르키메데스 성질). 즉, s보다 작은 1/N이 존재하므로 분모가 N인 유리수들 중 하나는 그 구간에 들어갑니다.

만약 어떤 실수로 유리수 수열이 수렴한다면, 이 유리수 수열은 코시 수열이 됩니다. 따라서 모든 실수는 코시 수열로 대응시킬 수가 있습니다. 반대로 유리수의 코시 수열을 실수 각 값으로 대응 시킬 수가 있는데, 서로 다른 코시 수열이 같은 실수 값으로 수렴할 수 있으므로 이들을 다 묶어서 하나의 실수로 대응시킨다면 유리수 코시 수열로부터 실수를 얻을 수 있습니다.

앞에서 유리수에서 실수를 만드는 과정을 설명하였습니다. 실수와 유리수의 가장 큰 차이점은 코시수열의 수렴성입니다. 유리수의 경우 유리수 안에서 코시수열이 수렴하지 않을 수 있습니다: $\sqrt{2} = 1.414...$이므로 1.4, 1.41, ...은 $\sqrt{2}$로 수렴하는 유리수 수열입니다. 이때 1.4, 1.41, ...은 코시 수열임을 알 수가 있습니다. 하지만 어떠한 유리수 q에 대해서도 앞의 수열은 언젠간 ($\sqrt{2}$와 q가 다른 소숫점부터) q와 일정 거리만큼 멀어지게 됩니다. 따라서 앞의 수열은 유리수 안에서는 수렴하지 않습니다. 반면 앞에서 언급한 방법으로 실수를 만들면 실수의 모든 코시 수열은 실수안에서 수렴합니다.[8] 이와 같이 코시 수열이 수렴하는 공간을 'complete'하다고 합니다.

1.1.3 대수적 대상(군,환,체)

앞에서 간단히 여러 수들에 대해 알아보았습니다. 이러한 수들의 성질을 포착해 추상화할 수 있습니다. 예를 들자면, 1, 2, 3,... 하나, 둘, 셋, ...은 같습니다. 여기서 '같음'은 단순히 1이 '하나'로 대응되고 2와 '둘'이 대응되는 것 뿐 만 아니라, 1 더하기 1은 2이고 '하나' 더하기 '하나'는 '둘' 같이 '관계' 또한 대응이 됨을 의미합니다. 만약 각 1이나 '하나' 같은 기호들이 대응이 되며 그들의 관계 또한 대응이 된다면 둘은 바꾸어 사용해도 아무 문제가 없습니다.

이때 기호는 단지 표기를 위한 것일 뿐 기호 모양에는 아무런 의미는 없습니다. 이에 대해 기호를 버리고 원소와 관계를 다루는 것이 대수(algebra)입니다. 가장 간단한 대수적 대상은 군(group)입니다. 군은 집합에서 연산을 추가한 것입니다. 이때, 집합을 S라 할 때 연산 $*$는 $S \times S \to S$인 함수로 주어집니다. 이때, 연산의 결과가 S의 원소인 경우, 연산이 집합 S에 대해 닫혀 있다고 합니다. 이때, 추가적으로 다음을 만족하는 집합과 연산을 군이라고 합니다.

Definition 3. 군(S, *)

1) $(a * b) * c = a * (b * c)$ (결합법칙, associative)[9]
2) $\forall s \in S$, $s * e = e * s = s$인 e가 존재. (항등원)
3) $s \in S$, $s * s^{-1} = s^{-1} * s = e$인 s^{-1}이 존재. (역원)

사실 위의 조건 중에서 일부만 만족하는 대상을 다룰 수도 있지만, 이 경우 너무 성질이 부족하여 의미 있는 결과들이 나오지 않는 편입니다.

군은 정수를 모티브로 삼은 것입니다. (정수, 덧셈)은 군을 형성합니다. 이때, 항등원은 0이고 각 수의 역원은 −가 붙은 수입니다. 이외에 흥미로운 군들이 많습니다. 예를 들어 2차원 회전변환들의 집합도 변환의 합성을 연산으로 한다면[10] 군이 됨을 알 수가 있습니다. 이와 비슷하게 큐브의 상태의 집합과 큐브를 돌리는 행위 연산은 군을 이루고 따라서 큐브에 군과 관련된 이론들을 적용할 수 있습니다. 군과 관련된 자세한 내용들은 이 노트의 흐름에서 벗어나므로 여기서 다루지는 않도록 하겠습니다.

앞서 군은 정수와 더하기를 모티브로 한 것임을 말하였습니다. 정수에는 더하기가 아닌 곱하기라는 연산도 존재합니다. 이를 모티브로 하여 군에 연산을 추가한 것을 환(Ring)이라고 합니다.

[8] 이 부분에 관한 증명은 생략합니다. 일부 수학자는 이 성질을 공리로 만들어버립니다.(실수의 완비성)
[9] 실수의 빼기, 나누기의 경우 결합법칙이 성립하지 않습니다.
[10] 간단히 30도 회전과 60도 회전의 연산을 90도 회전으로 생각하는 것을 말합니다.

Definition 4. 환 (S, +, ∗)
1) (S, +)는 $a+b=b+a$를 만족. (가환군, abelian group)
2) ∗에 대해 결합법칙이 성립
3) ∗에 대해 항등원이 존재 (보통 1로 표기)
4) $a*(b+c)=a*b+a*c$ (분배 법칙)

이러한 정의는 철저히 정수의 성질에 의해 도출되는 것입니다. 정수의 곱셈은 덧셈과는 다릅니다. 둘 다 항등원은 각각 0, 1로 존재하지만, 곱셈의 경우 역원이 존재하지 않습니다. 따라서 환의 정의에는 곱셈의 역원의 존재성은 제외되어 있습니다. 다만 연산이 2개가 됨에 따라 두 연산 간의 관계를 나타내는 분배법칙이 추가 되었습니다.
환은 군보다 더 다양한 결과들을 만들어 냅니다. 대표적으로 다항식들의 집합은 환이 됩니다. 다항식 집합은 더하기 연산에 대해 가환군이 되며, 곱하기에 대해서는 역원이 존재하지 않지만 연산 자체에 대해서는 닫혀 있습니다. 따라서 다항식의 집합에는 환의 이론들을 적용할 수 있게 되는데, 다항식의 인수 분해나 다항식들 간의 해집합에 관한 많은 이론들이 전개 됩니다.
다항식을 푸는 것은 모든 이론에서 궁극적인 목표 중 하나입니다. 물리나 금융에서는 미분 방정식을 푸는 것이 주요 관심사인데, 모두 어떤 관계를 만족하는 해(수나 함수)를 찾는 다는 점에서는 동일합니다.

같은 이유로 환에 대해서는 짤막히 언급만 하고 체(Field)에 대해 다루도록 하겠습니다. 체는 유리수를 모티브로 한 것입니다. 정수에서 나누기를 생각하면 유리수를 얻게 되는데, 이는 곱하기의 역원을 생각하는 것과 동일합니다. 환이 0을 제외한 모든 원소가 곱하기에 대해 역원이 존재한다면 체가 됩니다.

Definition 5. 체(S, +, ∗)
1) (S, +, ∗)는 가환환 ($a*b=b*a$)
2) $0\neq 1$
3) $\forall s\neq 0$인 s는 ∗에 대한 역원이 존재

대표적으로 실수와 복소수의 집합이 체가 됩니다. 벡터공간은 집합과 체에 대한 연산으로 이루어진 공간입니다. 구체적으로, 어떤 집합 V와 체 F에 대해 V가 F-벡터 공간이라면 F의 원소 a, b와 V의 원소 v, w에 대해 연산 $a*v+b*w$은 V에 닫혀있습니다. 이어서 공간에 다루도록 하겠습니다.

1.1.4 공간

공간과 집합의 가장 큰 차이점은 관계의 유무입니다. 우리가 살고 있는 공간은 각 상태 혹은 지점 간에 많은 관계들이 존재합니다. 우리가 살고 있는 공간을 수학의 세계로 옮겨와 표현한다면 수학에서의 공간이 됩니다. 집합에서 특정 관계를 부여하면 공간을 얻어낼 수 있습니다. 이 과정은 크게 두 갈래로 나뉘어 진행됩니다.

topological space – metric space – normed space – Banach space- Euclidean space
vector space ———————— inner product space – Hilbert space - Euclidean space [11]

[11] 여기서 normed space는 inner product space의 일종이고 Banach space는 Hilbert space의 일종이 됩니다. 오른쪽의 공간은 왼쪽의 공간에 조건을 추가해 얻어집니다. 즉, 오른쪽의 공간은 왼쪽 공간의 일종입니다.

그중 첫 번째 접근은 집합의 각 원소에서 근방을 정의하는 것입니다. 예를 들어, 2차원 평면에서 각 점에서 반지름이 1/n 이내의 영역을 생각 할 수 있습니다. 낱낱이 흩어진 집합의 각 원소에서 근방이라는 부분집합을 부여하여 집합을 위상 공간으로 만들 수가 있습니다. 이에 대해서는 뒤에서 자세히 다루도록 하겠습니다.

두 번째 접근은, 앞서 이야기 하였듯 원소 간에 연산을 부여하는 것입니다. 우리가 살고 있는 공간은 원점으로부터 크기를 늘리는 상수배라는 것이 가능합니다. 예를 들어, 3차원 공간의 경우 각 벡터간의 합이 가능하지만 벡터를 늘리는 것도 가능합니다. 이를 모티브하여 집합과 체(실수 혹은 복소수)를 묶어서 벡터 공간을 만들어 냅니다.

Definition 6. 벡터 공간 (V, F)

1) V 안에서 덧셈 가능 $(v + w)$
2) F는 체
3) $\forall a \in F, v \in V$, a와 v간의 연산이 가능하고 V에 닫혀있음 (상수배, $av \in V$)
4) 덧셈에 대해 결합법칙, 교환법칙
5) 덧셈과 상수곱의 분배 법칙

벡터 공간은 그야말로 연산만 가능한 (즉, 연산에 대해서 닫혀있는) 집합입니다. 우리가 살고 있는 공간은 거리도 잴 수 있고, 내적이라는 더하기가 아닌 또 다른 벡터연산이 가능합니다. 이를 추상화 한 것이 normed space와 inner product space입니다. metric space의 경우 벡터 공간이 아닌 위상 공간에서 거리라는 개념을 추가한 공간입니다. 따라서 metric space에서는 원소 간에 더하기와 같은 연산이 정의되어 있지 않습니다. 끝으로 이름이 붙은, Banach space나 Hilbert space는 거리가 주어진 상황에서 실수와 같이 완비성(completeness)이 갖추어진 공간입니다.

이러한 다양한 공간들은 모두 가장 직관적인 Euclidean space에서 출발되었습니다.[12] 사람들은 우리가 살고 있는 공간의 특정 지점들의 정보뿐만 아니라, 변화에도 관심이 있습니다. 왜냐하면 변화를 수학적으로 표현가능하다면 예측을 할 수 있기 때문입니다. 이를 통해 비행기를 만들거나 이미지를 생성하는 프로그램을 짤 수 있습니다. 또는 주식을 예측하려는 시도도 가능합니다. 이러한 변화들은 수학에서 함수로 표현 가능하고 이를 다루기 위한 수학적인 도구들이 필요하게 됩니다. 함수공간의 경우 함수들의 집합에서 함수 더하기와 같은 연산이 부여된 공간인데, 이들은 Euclidean space와는 다릅니다. 대표적으로 함수 공간의 경우 차원이 무한하며, 함수간의 거리를 재는 것 또한 쉬운 일이 아닙니다. 따라서 이들을 다루기 위해 몇 가지 조건들이 요구되고 이것들이 추가가 된다면 Banach space나 Hilbert space와 같은 공간들이 얻어지게 됩니다.

한편으로는 앞서 이야기한 응용 분야에서의 출발이 아닌, 순수하게 수학적 질문에서 위의 많은 공간들이 연구되기도 합니다. 갈루아가 보인 5차 방정식 근의 공식의 비존재성이나 페렐만이 보인 3차원 공간에 대한 푸앙카레 추측이 이에 해당됩니다. 한편, 위에서 언급한 공간 말고도 다양한 공간들이 존재합니다. 다른 공간들은 위의 공간들과 관계되어 생겨난 것들로 중심 개념들을 잘 알고 있다면 보다 쉽게 확장해 나갈 수 있을 것 같습니다.

1.1.5 함수

함수는 이 노트에서 주요 관심사입니다. 사실 모든 network는 일종의 함수이므로 만약 네트워크에 관한 이론이 존재한다면 함수에 관한 이론을 토대로 구성될 것이라 생각합니다. 함수의 가장 중요한

[12] Euclidean space는 평면을 일반화한 유한차원 내적 벡터공간입니다.

점은 정의역의 모든 점에서 유일하게 함수 값이 정의가 된다는 것입니다. 이 단순한 하나의 사실로부터 매우 많은 것들이 생겨납니다. 일반적으로 함수는 역함수가 존재하지 않습니다. 이러한 점에서, 함수의 정의역과 공역은 비대칭적입니다. 어떤 함수 $f : X \to Y$가 존재한다고 합시다. 이때, Y의 부분집합 B에 대해, 함수 값이 B에 속하는 x들의 집합을 $f^{-1}(B)$라 표기하고 역상이라 부릅니다.

Definition 7. 상 (image)
$f(A) = \{y | \exists a \in A \ s.t. \ f(a) = y\}$

Definition 8. 역상 (pre-image)[13]
$f^{-1}(B) = \{x | f(x) \in B\}$

역상은 비어있을 수도 있고, B보다 클 수도 있습니다. 만약, f가 전단사함수라면, $f(B)$와 $f^{-1}(B)$는 크기가 같을 것입니다.[14]

함수는 시간적 흐름을 내포한다고 생각할 수 있습니다. 즉, X의 각 원소를 발생가능한 사건들이라 여길 때, X에서 어떤 사건 x가 발생한다면 이에 대응하여 $f(x)$라는 Y에서의 사건이 발생한다고 생각할 수가 있습니다. 이때, X를 잠재적인(latent)한 사건들의 집합이라 여기고 Y_i를 우리가 관측 가능한 사건들의 집합들이라고 여길 때, X와 Y_i들이 f_i로 관계되어 있다면 한 X의 사건 x는 f_i들에 의해 Y_i의 사건들을 발생시킵니다. 이런 식으로 어떤 잠재 요인 하나가 관측 가능한 세상의 여러 사건들을 동시에 발생시키는 상황을 모델링 할 수 있습니다.

1.1.6 색인(index)

색인은 집합의 원소들에 번호를 붙이는 것입니다. 어떤 색인(index) 집합 I와 집합 A가 1-1대응이라면, 집합 A의 각 원소는 I의 원소 i를 사용해 a_i로 표현할 수 있습니다. 이때, 특별히 i 대신 n을 쓴다면 색인 집합이 자연수 집합 $\mathbb{N}$인 경우입니다. 즉, 집합 A가 countable한 경우를 의미합니다. 일반적으로 i라는 색인을 사용한다면 I는 uncountable 함을 의미합니다.

다음의 함수에 관한 기본 성질들은 자주 사용됩니다.

Proposition 1.1.3.
a) $f(\cup A_i) = \cup f(A_i)$[15]
b) $f(\cap A_i)) = \cap f(A_i)$
c) $f^{-1}(\cup B_i) = \cup f^{-1}(B_i)$[16]

Proof. a)와 b)의 증명은 c)와 유사하므로 c)만 하겠습니다. c)의 좌우변은 모두 집합입니다. 집합이 같음은 일반적으로 양쪽이 서로 포함함을 보임으로서 증명합니다.
1) $f^{-1}(\cup B_i) \subseteq \cup f^{-1}(B_i)$
$(a \in f^{-1}(\cup B_i)) \Rightarrow (\exists b \in \cup B_i, f(a) = b) \Rightarrow (\exists i \in I, \exists b \in B_i, f(a) = b) \Rightarrow (\exists i \in I, a \in f^{-1}(B_i)) \Rightarrow (a \in \cup f^{-1}(B_i))$
2) $f^{-1}(\cup B_i) \supseteq \cup f^{-1}(B_i)$

[13] inverse가 아닌 pre라 불리는 이유는?
[14] 크기가 같다는 것은?
[15] $f(\cup_{i \in I} A_i)$에서 $i \in I$를 생략한 것.
[16] $f^{-1}(\cap B_i) = \cap f^{-1}(B_i)$은 일반적으로 성립하지 않습니다. 어느쪽이 클까요? 등호가 성립 안하는 반례도 쉽게 찾을 수가 있습니다.

2)의 증명은 1)의 증명에서 역으로 진행해도 됩니다. 보다 간단하게는 각 i에 대하여 $f^{-1}(\cup B_i) \supseteq f^{-1}(B_i)$ 임으로부터 자명합니다. ($f^{-1}(\cup B_i)$는 i와 무관하므로 $\cup_{i \in I}$를 양변에 취하면 2)가 얻어집니다.)

□

1.2 수학적 관점에 대하여 (*)

끝으로 20세기에 등장한 수학의 기초적인 관점들에 대해 알아보겠습니다. 수학은 기원전부터 시작되었다고 이야기 됩니댜. 고대의 수학은 매우 직관적이었고 실용적이었습니다.[17] 고대 사람들은 거리나 높이, 넓이를 재는데 수학을 개발하였으며 유클리드에 이르러 이를 체계화 합니다. 고대 사람들이 한 수학은 기하학(Geometry)입니다. Geometry라는 단어는 geo+metry가 합쳐진 것으로, 지구를 측정한다는 의미입니다. 즉, 기하학은 다름이 아닌 지구에 관한 학문입니다. 다만, 고대 사람들의 지구는 현대인들의 지구와는 다소 차이가 있었던것 같습니다. 코페르니쿠스(1500년대)가 나오기 전까지 그들의 지구는 평면이었습니다. 아마 유클리드의 기하학이 평면에 대한 것은 이러한 사고관에서 비롯된 것이라 생각됩니다.

유클리드의 기하학은 평면에 국한되지만 공리 기반의 체계적인 수학이라는 점에서 매우 의미가 있습니다. 너무나 당연해서 더 이상의 논증을 할 수 없는 5개의 공리를 받아들이고 이것들을 이용해 평면도형에 관한 여러 성질들을 유도해 냅니다. 문제는 마지막 공리인 평행선의 공리입니다. 평행선의 공리는 직선과 점이 있으면 점을 지나고 직선에 평행한 직선이 있음을 말합니다. 이것이 문제가 되는 이유는 직선을 그릴 수 있음과 같이 아주 기초적인 앞의 네 공리를 이용해 증명될 수 있어 보였기 때문입니다. 19세기에 이르러서야 수학자들은 평행선의 공리가 없어도 체계적인 기하학이 만들어짐을 발견해내었고, 이것이 곡면에 대한 비유클리드 기하학의 탄생으로 이어집니다.

20세기에 이르러 등장한 러셀의 역설은 기존 개념들에 대한 수학자들의 의심을 증대시켰고 비유클리드 기하학의 등장은 수학의 기초에 대해 엄밀한 합의를 요구하였습니다. 이에 따라 크게 3가지 수학기초에 대한 주류가 등장하였습니다. 첫째로, 러셀이 주장한 논리주의가 있습니다. 이들은 논리가 진리라 주장하며 수학을 논리를 이용해 건설하려 하였습니다. 그 결과 수리논리학이라는 학문이 체계화되었으나 논리만으론 수학을 다 담기에는 한계가 있고 지나치게 복잡한 점이 단점입니다. 둘째로는 힐베르트가 주장한 형식주의가 있습니다. 형식주의는 수학에 의미를 부여하지 않고 주어진 공리로부터 생겨난 기호조작으로 수학을 여깁니다. 힐베르트는 주어진 공리체계로부터 만들어지는 결과물들로부터 모순이 발생하지 않는 체계를 만들고자 하였습니다. 만약 이러한 체계가 세상을 모방한다면 수학이 유용성을 지니게 됩니다. 하지만 1930년대에 무모순한 체계가 없음을 증명한 괴델로 인해 형식주의는 타격을 받습니다. 이 불완전성의 정리는 "나는 거짓말쟁이이다."라는 에피메니데스의 역설을 수학 형식에 적용함으로서 증명됩니다. 끝으로 직관주의가 있습니다. 이들은 수학자들의 직관이 수학의 기초를 이룬다고 말합니다. 이들은 직관에서 벗어난 선택공리나 직접 만들 수 없는 무리수들을 배제합니다. 회의적인 관점이라 여길 수가 있는데 이들은 지나치게 회의적이라 이들의 수학의 영역이 좁다는 것이 문제가 됩니다. 결국 논리, 형식, 직관 모두 진리라 불리기에는 결함이 있습니다.

이러한 기초에 대한 질문들은 인공지능에도 적용이 가능합니다. 실제로 튜링은 판정 문제(decision problem)의 일종인 정지 문제(halting problem)가 해결 불가능함을 보였습니다. 정지 문제는 어떤 프로그램에 초기값이 주어질 때 무한 루프에 빠지게 되는지를 알려주는 프로그램이 있는지를 물어봅니다.

[17] 현대 수학의 목표는 이와는 다소 먼 것 같습니다.

답은 no인데, 이 또한 에피메니데스의 역설과 같이 자기지시를 통해 모순에 빠지게 만듬으로서 증명가능합니다.

이 장을 마무리하기에 앞서 개인적인 사변을 덧붙이자면, 사람들은 때론 자기지시적 물음을 하곤 합니다. "생각은 무엇인가?", "언어는 무엇인가?", "나는 무엇인가?"가 모두 해당이 된다고 생각합니다. 생각으로 생각을 묻고, 언어로 언어를 물으며 주체가 주체에 대해 질문을 하는 것은 다소 희한해 보입니다. 사실 제 생각엔 이러한 질문들에 대해 답을 하는 것은 생각,언어,나에 대한 사전적 정의나 관찰결과 대해 답하는 것에 불과하다고 생각합니다. 질문 자체가 어불성설인데 사람들은 끊임없이 이러한 질문을 하고 더 깊이 생각합니다. 이러한 자기지시적 질문을 회피하되 끊임없이 질문에 깊이 다가서려 하는 것이 사람이라면, 후대의 인공지능은 이러한 질문에 어떻게 대응할지가 참 궁금합니다.

Chapter 2

미분

이 장에서는 벡터함수의 미분과 응용에 대해 알아봅니다. 벡터함수의 미분은 고등학교때 배운 1차원 실수 함수 미분의 일반화입니다. 이때 미분은 정의역의 각 점에서 주어진 함수를 '선형함수'로 '근사'하는 것을 의미하게 됩니다. 따라서 미분을 이해하기 위해서는 선형함수와 근사를 우선적으로 이해해야 하는데, 근사의 경우 극한을 이용해 설명합니다. 미분을 다룬 뒤에 미분의 응용으로 gradient descent 방법과 Karush-Kuhn-Turker(KKT) condition에 대해 설명합니다.

2.1 극한 (Limit)

극한은 직관적이면서도 미묘한 개념입니다. 직관적인 면은 극한이 '점점'이라는 일상 개념과 연결지어 볼 때 찾을 수 있습니다. 반면 미묘한 점은, 극한은 정확히 언제 혹은 얼마나에 대해 알려주지 않는다는 것입니다. 즉, 극한은 언젠가는 무엇이 될 것이라고 말하지만 일반적으론 정확히 언제 그리고 얼마나 가까이 무엇이 된다는 것은 알려주지 않습니다.

미분 그리고 중심 극한 정리(Central Limit Theorem)와 같이 매우 핵심적인 기법들이 극한에 기반되어 서술되어 있습니다. 앞에서 이야기 했듯 극한은 우리에게 구체적인 근사치를 제공해준다기 보다는 근사 가능성만을 알려주기 때문에 이러한 기법들은 구체적이라기 보다는 우리에게 일종의 믿음과 어느 정도의 설명력을 가져다 주는데 그칩니다. 물론 특수한 경우에는 극한의 근사 정도를 정확히 계산해 낼 수도 있습니다. 하지만 함수가 조금만 복잡해지던가(ex. Neural Network) 확률 분포가 복잡해 진다면 정확한 계산은 어렵습니다. 그럼에도 이러한 극한에 기반한 기법들로부터 얻을 수 있는 일종의 믿음과 어느 정도의 설명력은 현실에 적용하여 문제를 해결하기에 효과적이기에 핵심적인 기법으로 사용되고 있습니다.

Definition 9. 실수 수열의 극한. [1] 어떤 수열 $\{a_n\}$이 극한을 가지는 경우는 다음과 같다.

1) 수렴하는 경우 $(lim_{n\to\infty} a_n = r)^2$: $\forall\epsilon > 0, \exists N\ s.t.\ n \geq N \Rightarrow |a_n - r| < \epsilon$

2) 양의 무한으로 발산하는 경우 : $\forall M > 0, \exists N\ s.t.\ n \geq N \Rightarrow a_n > M$

[1] 앞으로 여기서는 별다른 언급이 없다면 모든 수열은 실수 수열 즉, a_n은 실수 값을 의미합니다.

[2] 왼쪽부터 읽으면 됩니다. 참고로 앞으로 모든 경우에 n,m,N,M은 자연수를 의미하고 ϵ과 δ는 양의 실수를 의미합니다.. 다음을 만족하는 어떤 r이 있다. 모든 양수 ϵ마다 자연수 N이 있는데, 이 N보다 큰 n에 대해 a_n과 r의 거리는 ϵ보다 가깝다. 즉, ϵ이 아무리 작아도 어떤 경계 N을 넘는 순간 수열이 r과 ϵ보다 가까워진다.

2) 음의 무한으로 발산하는 경우 : $\forall M > 0, \exists N \ s.t. \ n \geq N \Rightarrow a_n < -M$

1장에서 언급하였든 index는 자연수가 아닌 일반적인 집합으로 확장할 수 있습니다.[3] 일반적인 집합을 index로 가지는 경우는 현재로서는 필요하지 않고 미분을 위한 실수 index에 대한 극한은 다음과 같습니다.

Definition 10. 실수 index 수열의 극한. 어떤 실수 index 수열 $\{a_h\}$이 극한을 가지는 경우는 다음과 같다.
1) 수렴하는 경우 ($lim_{h\to\infty} a_h = r$): $\forall \epsilon > 0, \exists K \in \mathbb{R} \ s.t. \ h \geq K \Rightarrow |a_h - r| < \epsilon$
2) 양의 무한으로 발산하는 경우 : $\forall M, \exists K \in \mathbb{R} \ s.t. \ h \geq K \Rightarrow a_h > M$
2) 음의 무한으로 발산하는 경우 : $\forall M, \exists K \in \mathbb{R} \ s.t. \ h \geq K \Rightarrow a_h < -M$

띄엄띄엄 있는 자연수와 달리 빽빽한 실수의 특성상 다음과 같은 정의도 가능합니다.[4]

$$(lim_{h\to 0} a_h = r) : \forall \epsilon > 0, \exists \delta > 0 \ s.t. |h| < \delta \Rightarrow |a_h - r| < \epsilon \tag{2.1}$$

극한의 정의가 제대로 작동하기 위해서는 Def.1에서 1)과 2)가 동시에 성립하여 수렴하면서 발산한다던지 혹은 1)이 복수적으로 성립하여 서로 다른 수로 수렴한다던지 하는 경우가 없어야 합니다. 이에 대해 다음의 정리는 필수적입니다.[5]

Proposition 2.1.1. 극한의 유일성.[6] if $lim_{n\to\infty} a_n = r_1$, $lim_{n\to\infty} a_n = r_2$ then, $r_1 = r_2$

Proof. 정의에 의해, $\forall \epsilon > 0$, $\exists N_1 \ s.t. \ n \geq N_1 \Rightarrow |a_n - r_1| < \epsilon$ 이고 $\exists N_2 \ s.t. \ n \geq N_2 \Rightarrow |a_n - r_2| < \epsilon$. $N = max(N_1, N_2)$라 하면, $n \geq N \Rightarrow |a_n - r_1| < \epsilon \ \& \ |a_n - r_2| < \epsilon$. 삼각부등식에 의해, $|r_1 - r_2| < |a_n - r_1| + |a_n - r_2| < 2\epsilon$. $\forall \epsilon > 0$에 대해 $|r_1 - r_2| < 2\epsilon$이므로 $r_1 = r_2$. □

실수 index의 경우 여기에 등장하는 정리가 모두 같은 방식으로 증명가능하므로 별다른 언급은 생략하고 수열 $\{a_n\}$만 다루도록 하겠습니다. 극한의 중요한 성질은 더하기와 곱하기가 가능하다는 점입니다. 부연하자면, $\{a_n\}$은 r로 가까워지고 $\{b_n\}$은 s로 가까워 질 때 $\{a_n + b_n\}$은 $r + s$로 가까워 집니다. 이게 성립하는 핵심적인 이유는 주어진 순서 n에 따라 두 수열이 대응되어 덧셈이 이루어지기 때문입니다.

Proposition 2.1.2. 극한 관련 연산. $lim_{n\to\infty} a_n = r$, $lim_{n\to\infty} b_n = s$인 경우.[7]
1) $lim_{n\to\infty}(a_n + b_n) = r + s$
2) $lim_{n\to\infty}(-a_n) = -r$
3) $lim_{n\to\infty}(a_n \cdot b_n) = rs$
4) $r \neq 0$인 경우, $lim_{n\to\infty} 1/a_n = 1/r$

Proof. 증명은 기계적입니다. 우선 1)과 2)에 의해 빼기도 유지되고, 3)과 4)에 의해 나누기도 유지됩니

[3] 보통 index가 자연수가 아닌 보다 일반적인 경우 수열을 net이라고 부릅니다.
[4] s.t.는 such that의 약자입니다.
[5] 자연수 index나 실수 index나 증명은 동일합니다.
[6] 수렴하면서 발산하지 않는다 같은 것도 비슷하게 보일 수 있습니다.
[7] 무한대로 발산하는 경우, $\infty - \infty$가 문제되므로 둘 중 하나만 발산해야 합니다.

다. 1)은 앞에서의 증명과 유사하게, 삼각부등식을 이용하면 됩니다. 4)에 대한 증명만 연습문제로 남겨두고 3)만 증명하겠습니다.

더하기는 일반적으로 삼각부등식을 활용한다면 곱은 변수처리를 위해 더하고 빼기 기법을 활용합니다. 목적은 n이 커지면 $|a_n \cdot b_n - rs| < \epsilon$이 됨을 보이는 것입니다. 이는 $|a_n \cdot b_n - rs| = |a_n \cdot b_n - rb_n + rb_n - rs| = |(a_n - r)b_n - r(b_n - s)| \leq |(a_n - r)b_n| + |r(b_n - s)|$입니다. 이때 정의를 이용하면, $\forall \epsilon_1 > 0\ \forall \epsilon_2 > 0$, $\exists N$, $s.t.\ n \geq N$에 대해, $|a_n - r| < \epsilon_1$ & $|b_n - s| < \epsilon_2$. 이를 이용하면, $|(a_n - r)b_n| + |r(b_n - s)| < \epsilon_1 |b_n| + r\epsilon_2 < \epsilon_1(|s| + \epsilon_2) + r\epsilon_2$. 이때, ϵ_1, ϵ_2을 충분히 작게 잡으면 주어진 ϵ에 대해 $\epsilon_1(|s| + \epsilon_2) + r\epsilon_2 < \epsilon$. 정리하면, ϵ_1, ϵ_2에 대한 N에 대해 $n \geq N$이면 $|a_n \cdot b_n - rs| < \epsilon$. □

2.2 선형 변환 (Linear map)

일반적으로 함수(function)가 집합에서 집합으로 가는 가장 일반적인 것이라면 변환(map)은 특정 공간에서 특정 공간으로 가는 조금 더 구체적인 것을 의미합니다. 예를 들어, 벡터공간에서 실수로 가는 함수를 일반적으론 변환(map)이라 부르지 않고 형식(form)이라 합니다.[8] 이때 선형 변환은 선형성이 '보존'이 되는 변환을 의미합니다. 여기서 선형성이 보존된다는 것은 다음을 의미합니다.

Definition 11. F-벡터 공간 V, W에 대해 선형 변환 L : V → W는 다음의 성질을 만족하는 함수이다. $\forall a, b \in F$, $\forall v_1, v_2 \in V$, $L(av_1 + av_2) = aL(v_1) + bL(v_2)$.

정의에 기반하여 선형성이 보존된다는 것에 대해 부연 설명을 하면 다음과 같습니다. V의 원소 v_1, v_2, av_1, bv_2, $av_1 + bv_2$ 에 대해, $L(v_1)$, $L(v_2)$, $L(av_1)$, $L(bv_2)$, $L(av_1 + bv_2)$는 W의 원소입니다. 따라서 각각에 대응 되는 W의 원소 w_1, w_2, w_3, w_4, w_5가 있고, 선형성이 보존된다는 것은 'V에서의 관계'가 그대로 유지가 됨을 의미합니다. 즉, $w_3 = aw_1$이고 $w_5 = aw_1 + bw_2$임을 의미합니다.

선형대수학의 기본정리는 벡터공간 V, W가 유한차원 기저(basis) B, C를 지닐때, 모든 V, W의 원소는 좌표로 표현되고 모든 선형 변환들은 행렬로 표현가능하다는 것을 말해줍니다. 여기서 중요한 점은 기저에 따라 좌표와 행렬은 달라질 수 있다는 것입니다. 벡터 공간은 이후 3장에서 더 자세히 다루도록 하고 우리가 미분할 공간인 Euclid 공간에서 선형 변환에 대해 알아봅니다.

가장 단순한 공간 중 하나인 벡터 공간과 가장 현실적인 공간인 Euclid 공간의 차이점은, Euclid 공간은 유한 차원 직교 기저가 존재한다는 것입니다. 예를 들어 2차원의 경우 (1,0)과 (0,1)로 기저를 표현할 때, 이것들의 선형결합으로 모든 원소를 표현할 수 있고 내적을 정의되며 (1,0)·(0,1) = 0 임을 의미합니다. 따라서 선형대수학의 기본정리에 따라 n차원 Euclid 공간($\mathbb{R}^n$)에서 정의되고 $\mathbb{R}^m$으로 가는 모든 선형 변환(L)은 어떤 $m \times n$ 행렬 A가 있어서 $L(x) = Ax\ \forall x \in \mathbb{R}^n$로 표현됩니다.

2.3 미분 (Differentation)

미분은 함수를 주어진 점 x에서 선형 변환으로 근사하는 것을 의미합니다. 1차원에의 미분은 $\lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = a$로 정의됩니다. 이때 극한 연산에 의해, $\lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x) - ah}{h} = 0$가 성립합니다. 즉, 주어진 점 x에서 f가 미분 가능하다면 $f(x+h) - f(x)$와 선형 변환 ah과의 차이는 h보다

[8] Linear algebra에서 form은 이것을 의미하지만 Differential Geometry에서는 다른 의미로 사용됩니다.

빨리 감소합니다. 이는 h에 대한 함수 $f(x+h)-f(x)-ah$를 원점에서 돋보기로 2배씩 확대해 가며 본다면, 이 함수가 점점 수평축처럼 됨을 의미합니다.[9] 이러한 맥락에서 벡터 함수의 미분은 다음과 같이 정의됩니다.

Definition 12. 벡터 함수 미분. 함수 F: $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$는 $x \in \mathbb{R}^n$에서 미분 가능할 때, 다음을 만족하는 $m \times n$ 행렬 A가 존재한다.[10]

$$\lim_{h \to 0} \frac{|F(x+h) - F(x) - Ah|}{|h|} = 0 \tag{2.2}$$

이때, 위의 행렬 A를 F의 x에서의 미분값(derivative, DF(x), ∇ F(x)) 혹은 행렬임을 강조해서 Jacobian 행렬이라 부릅니다. 일반적으로 F가 미분가능하다고 표현되면 모든 $\mathbb{R}^n$의 점에서 미분이 가능함을 의미합니다. 이 경우 $\mathbb{R}^n$의 각 점마다 F의 미분값 혹은 선형 변환(행렬)이 배정이 되고 이때 DF는 x가 주어지면 미분값 혹은 선형 변환(행렬)를 반환하는 함수를 의미합니다.[11]

일반적으로 $\lim_{h \to 0} \frac{|F(h)|}{|h|} = 0$를 만족하는 함수 F는 $o(|h|)$로 표기하며 이를 이용하면 미분 가능 함수 F는 $F(x+h) = F(x) + DF(x)h + o(|h|)$로 표현가능합니다.

다음으로 미분과 관련된 몇 가지 중요한 사실들을 소개하겠습니다. 이것들의 증명은 Spivak-Calculus on Manifolds의 2장으로 대체합니다.

Proposition 2.3.1. 미분값의 유일성 : *Def* 4를 만족하는 A는 유일하다.

Proposition 2.3.2. 기본적인 사실들. 여기서 $F, G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$이고 x에서 미분 가능 함수.
1) 선형 함수의 도함수. $m \times n$ 행렬 A에 대해 $F(x) = Ax$일때, $DF(x) = A$
2) 선형 연산 후 미분. $D(aF + bG)(x) = aDF(x) + bDG(x)$

$F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$에 대해 m차원 벡터 $F(x)$는 $(F^1(x), F^2(x), ..., F^m(x))$로 표현 가능하고 이때, $F^i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$입니다.

Theorem 2.3.3. F가 미분 가능하다 $\Leftrightarrow$ $i = 1, 2, ..., m$에 대해 F^i가 미분이 가능하다.
이때 $DF(x)$의 i번째 행 $= DF^i(x)$이 된다.

Proof. 다음의 사실을 *Def* 4에 적용하면 보일 수 있습니다. A의 i번째 행을 A^i라 할때, $|F^i(x+h) - F^i(x) - A^i h| \le |F(x+h) - F(x) - Ah| \le \sum_{i=1}^m |F^i(x+h) - F^i(x) - A^i h|$.[12] □

Chain rule이라 불리는 합성함수의 미분은 Neural Net의 핵심 원리 중 하나 입니다.

Theorem 2.3.4. Chain rule. $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $G : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^k$에 대해

$$D(G \circ F)(x) = DG(F(x)) \cdot DF(x) \tag{2.3}$$

Proof. Chain rule은 F와 G가 선형 함수인 경우에는 자명합니다. Chain rule은 합성 함수의 선형 근사가 각 함수의 선형 근사를 통해 이루어 짐을 알려줍니다. 우선 G의 $F(x)$에서의 선형 근사식

[9] $\frac{f(x+h)-f(x)-ah}{h}$는 $f(x+h) - f(x) - ah$를 원점에서 1/h배 만큼 확대했을때 x축 상 1의 지점에서의 높이와 같습니다.
[10] $|\cdot|$는 m차원에서 벡터간 거리(l2)를 의미합니다. 이를 이용해 수식 (1)을 m차원의 h에 대해 해석을 해보시길 바랍니다.
[11] 이것을 differential form이라 부릅니다.
[12] $|F(x+h) - F(x) - Ah|$는 정의에 의해 $\sqrt{\sum_{i=1}^m (F^i(x+h) - F^i(x) - A^i h)^2}$이므로 제곱하면 비교 가능합니다.

$G(F(x)+h)-G(F(x)) = DG(F(x))h+o(|h|)$에서 h에 $F(x+h)-F(x)$를 대입하면, $G(F(x+h)) - G(F(x)) = DG(F(x))(F(x+h)-F(x))+o(|F(x+h)-F(x)|)$를 얻게 됩니다. 즉, $\mathbb{R}^m$의 두 점 $F(x+h)$와 $F(x)$에서의 G 함수값의 차이를 근사식으로 표현을 한 것입니다. 이번에는 F의 x에서의 선형 근사식을 이용해 $F(x+h)-F(x) = DF(x)h+o(|h|)$를 대입하면

$$G(F(x+h)) - G(F(x)) = DG(F(x))(DF(x)h + o(|h|)) + o(|F(x+h) - F(x)|) \tag{2.4}$$

를 얻게 됩니다. Chain rule은 $G(F(x+h)) - G(F(x)) = DG(F(x))DF(x)h + o(|h|)$가 성립함을 의미합니다.[13] 수식 (4)와 비교하면, $DG(F(x))o(|h|) + o(|F(x+h) - F(x)|) = o(|h|)$이면 Chain rule이 성립함을 알 수 있습니다. 이는 다음 식이 0임을 의미합니다.

$$\begin{aligned}\lim_{h\to 0}\frac{DG(F(x))o(|h|)+o(|F(x+h)-F(x)|)}{|h|} &= \lim_{h\to 0}\frac{o(|F(x+h)-F(x)|)}{|h|}\\ &= \lim_{h\to 0}\frac{o(|F(x+h)-F(x)|)}{|F(x+h)-F(x)|}\frac{|F(x+h)-F(x)|}{|h|}\end{aligned} \tag{2.5}$$

이때, 미분 가능 함수는 연속 함수이므로 $\lim_{h\to 0}|F(x+h)-F(x)| = 0$입니다. 따라서 $o(\cdot)$의 정의에 의해, $\lim_{h\to 0}\frac{o(|F(x+h)-F(x)|)}{|F(x+h)-F(x)|} = 0$입니다. 수식 (5)의 뒤의 항은, 어떤 상수 C가 존재해서[14]

$$\lim_{h\to 0}\frac{|F(x+h)-F(x)|}{|h|} \le \lim_{h\to 0}\frac{|DF(x)h|+|o(h)|}{|h|} = \lim_{h\to 0}\frac{|DF(x)h|}{|h|} \le C \tag{2.6}$$

를 만족합니다. 앞의 두 결과를 합치면 수식 (5)가 0이 되므로 Chain rule이 증명됩니다. □

다소 증명이 길어졌지만, Chain rule의 증명은 $G\circ F(x)$의 선형 근사를 G의 선형 근사를 이용한 후 F의 선형 근사를 이용한 것이 전부입니다. 증명 과정에서 엄밀성을 위해 도입한 $o(\cdot)$에 익숙하다면 기계적인 증명 과정이라 생각됩니다.

2.4 Applications

2.4.1 Gradient Descent

미분은 주어진 함수의 특정 점에서의 선형 함수로의 근사입니다. Gradient Descent는 $F:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$의 최소 값을 찾는 알고리즘입니다. 시각화를 위해 $n=2$를 가정하면, 2차원 평면에서 정의되는 선형 함수들은 $f(x,y) = ax+by$꼴로 함수를 3차원 공간에 그리면 평면이 됩니다. 따라서 미분은 F를 각 점에서 함수를 평면으로 근사를 하는 것이고 Gradient Descent는 평면에서 가장 빨리 하강하는 방향으로 내려가는 것을 의미합니다. 따라서 Gradient Descent는 '국소적'으로는 가장 효과적인 방법입니다. 이때, $f(x,y)=ax+by$가 만드는 평면에서 가장 빨리 하강하는 방향은 $-(a,b)$ 즉, $-Df(x,y)$입니다. 이를 확인하는 방법으로 2가지를 제시하겠습니다.

[13] $G\circ F(x) = G(F(x))$이므로 이 식이 성립한다면 미분의 정의에 의해 $D(G\circ F)(x) = DG(F(x))\cdot DF(x)$가 됩니다.

[14] $DF(x)$는 $m\times n$행렬인데 수식 (6)의 마지막 부등식을 만족하는 상수 C중 가장 작은 값을 행렬의 norm이라 하고 $|DF(x)|$로 표기합니다. 자세한 것은 3장에서 다루도록 하겠습니다.

첫 번째로, 그림을 그려서 확인가능한 기하학적 관점으로 $f(x,y) = ax + by$의 level set을 그리는 방법이 있습니다. Level set은 등고선을 의미합니다. 즉 $f(x,y) = c$가 되는 집합이 level set입니다. Level set은 $ax + by = c$의 자취이므로 (x,y)평면에서 직선이 됩니다. Level set 위에서 f의 값은 일정하므로 직선과 수직한 방향이 f가 가장 빠르게 감소하는 방향일 것입니다. 여기서 이 직선에 수직인 방향이 $-(a,b)$가 됨은 쉽게 확인 가능합니다.

두 번째로는, 코시-슈와르츠 부등식[15]을 이용해 직접 계산하는 방법이 있습니다. $f(x,y) = ax + by$가 주어졌을때, f가 가장 빨리 감소하는 방향이란 크기가 1인 (x,y)를 의미합니다. 이는 $x^2 + y^2 = 1$을 의미하므로 코시-슈와르츠 방정식에 의해 $-\sqrt{(a^2+b^2)} \le ax + by \le \sqrt{(a^2+b^2)}$가 됩니다. 이때 왼쪽 부등식 등호 성립 조건 $x/a = y/b = -c$ (c>0)가 만족될 때 $f(x,y) = ax + by$가 가장 빨리 감소함을 알 수 있습니다. 따라서 $(x,y) = -c(a,b)$, 즉 (a,b)와 반대인 방향이 평면에서 가장 빨리 감소하는 방향이 됩니다.

보다 일반적인 n차원의 경우 동일하게 확인 가능합니다.

2.4.2 Optimization - KKT condition

Karuch-Kuhn-Turker condition은 $f, g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$에 대해 $g(x) \le 0$꼴의 제약식에서 미분 가능한 함수 $f(x)$의 극소점에 대한 필요 조건입니다.[16] 예를 들어, 제약식이 없다면 어떤 지점이 극소점이라면 $Df(x) = 0$이어야 합니다. 이를 제약 조건하에서 일반화한 것이 KKT condition이라 할 수 있습니다. 안장점의 문제와 같이 단순히 1차 미분에 의한 조건을 만족해도 극소점이라는 보장은 없습니다. 이 경우 2차 미분에 의한 조건이 더해지면 특정 점이 극소점인지 판단 가능합니다.
만약 주어진 목적 함수 f와 제약 함수 g가 모두 convex라면 convex의 볼록한 특성에 의해 안장점을 가지지 않고 local minima가 global minima가 되며 추가적으로 만약 f가 strictly convex[17]라면 global minima가 유일합니다. 따라서 이 경우 KKT condition을 만족하는 해는 유일한 global minima가 됩니다.

KKT condition의 정의를 소개하기 앞서 문제의 적용 범위를 넓히자면, 우선 f의 극대점을 구하는 문제는 $-f$의 극소점을 구하는 문제와 같습니다. 또한 $g(x) = 0$이라는 제약은 $g(x) \le 0$과 $-g(x) \le 0$이라는 두 제약으로 나누어 쓸 수가 있기에 $g(x) \le 0$꼴의 제약식에서 $f(x)$의 극소점을 구하는 문제만 해결하면 보다 일반적인 경우로 쉽게 확장 가능합니다.

Theorem 2.4.1. KKT condition. 만약 $f, g_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, ..., m$가 연속적으로 미분 가능하고[18] x^*가 $g_i(x) \le 0$ 제약 조건 안에서 f의 극소점이라면, 다음을 만족하는 μ_i가 존재한다.[19]
1) Stationarity : $-Df(x^*) = \Sigma_{i=1}^{m} \mu_i Dg_i(x^*)$
2) Primal feasiblity : $g_i(x^*) \le 0$
3) Dual feasibility : $\mu_i \ge 0$
4) Complementary slackness : $\mu_i g_i(x^*) = 0$

[15] $(a_1b_1 + ... + a_nb_n)^2 \le (a_1^2 + ... + a_n^2)(b_1^2 + ... + b_n^2)$ 등호성립조건은 $a = (a_1, ..., a_n), b = (b_1, ...b_n)$라 할때, $a = 0$ or $b = 0$ or $\exists k \in \mathbb{R}, a = kb$
[16] 일반적으로 f의 극소점이 제약 조건 하에서 f의 극소점이 되지는 않습니다.
[17] 상수함수도 convex가 되는데, 상수함수 같이 평평하지 않고 볼록한 경우.
[18] 도함수가 연속함수.
[19] 엄밀하게는 여기에 약간의 조건이 더 추가가 되어야 합니다. 이를 regularity condition이라하는데 매우 다양하므로 각자 인터넷이나 서적에서 찾아보시는걸로 하겠습니다.

Feasibility는 실현 가능함을 의미합니다. 당연히 주어진 제약 하에서 극소점을 구하고자 하기에 2)는 자명한 조건입니다. Dual feasibility는 주어진 primial problem을 변형하는 과정에서 생겨나는 조건입니다. Complementary slackness는 만약 x^*가 어떤 제약 $g_j(x) \leq 0$의 경계 $g_j(x) = 0$가 아니라면, 대응되는 μ_j가 0임을 말해줍니다. 따라서 1)의 stationarity에서 x^*에서 값이 0이 되는 g_i들만이 고려됩니다.

Sketch of proof. (1) 시각화를 위해 $n = 2$를 가정합니다. 주어진 제약들 $g_i \leq 0$은 각각 $\mathbb{R}^2$에서 가능한 해집합에 제약을 가합니다. 이 가능한 해집합을 feasible set이라 부르겠습니다. 우리가 관심있는 것은 x^* 근방의 feasible set에서 $f(x^*)$가 가장 작음을 보이는 것입니다. 그리고 이에 대해 충분조건은 아니지만 1차 선형 근사를 통해 필요조건을 얻고자 합니다. 만약 어떤 g_j에 대해 $g_j(x^*) < 0$이라면 g_j의 연속성에 의해 x^*의 조그만 근방안에서는 항상 $g_j(x) < 0$가 성립합니다. 따라서 g_j는 x^* 근방의 feasible set에는 아무런 제약을 가하지 않습니다. 따라서 x^*가 극소점이라는 것에 영향을 미치는 제약은 $g_i(x^*) = 0$인 제약들이고 이들을 편의상 g_i, $i = 1, ..., k$, $k \leq m$이라 하겠습니다.

(2) 가장 중요한 사실은 주어진 함수들이 미분 가능하므로 국소적으로는 선형함수와 같다는 것입니다. 보다 엄밀한 서술이 필요하겠지만 여기서는 KKT condition에 대한 직관을 가지는걸 목표로 주어진 함수들을 x^*에서의 선형 근사인 $f(x) \approx f(x^*) + Df(x^*)(x - x^*)$와 $g_i(x) \approx Dg_i(x^*)(x - x^*)$ for $i = 1, ..., k$로 간주해도 무방하다 여기고 이후 과정을 전개하겠습니다.[20]

x^*에서 f가 극소라는 사실과 g_i의 선형 근사에 의하면 $Dg_i(x^*)(x - x^*) \leq 0$인 x들에 한해서 $f(x^*) \leq f(x)$여야 합니다. f를 선형 근사식으로 간주하면, 이는 $-Df(x^*)(x - x^*) \leq 0$ 임을 의미합니다. 이 결과에 다음의 Farkas's lemma를 적용하면 어떤 양의 실수 $\mu_i \geq 0$ for $i = 1, ..., k$가 존재해서 $-Df(x^*) = \Sigma_{i=1}^k \mu_i Dg_i(x^*)$가 성립합니다. 완전한 KKT condition을 위해 $i = k + 1, ..., m$, 즉 $g_i(x^*) < 0$인 i들에 대해서 $\mu_i = 0$이라 설정을 한 뒤 결과들을 정리하면 KKT condition의 1), 3), 4)가 얻어집니다.

Lemma 2.4.2. Farkas' lemma for linear space. n차원 벡터 a_i for $i = 1, ..., m$와 n차원 벡터 b가 $x \in \mathbb{R}^n$, $a_i^t x \leq 0\ \forall i = 1, ..., m \Rightarrow b^t x \leq 0$이라면 어떤 양의 실수 μ_i가 존재하여 $\Sigma_{i=1}^m \mu_i a_i = b$가 된다.

위의 Farkas' lemma는 사실 linear programming의 duality를 보이는데 사용이 됩니다. 그리고 보다 일반화 된 Farkas' lemma는 convex programming의 duality를 보이는데 필요합니다. 여기서는 Farkas' lemma의 증명을 다루는 대신에 직관적으로 해석하는 시도를 갖고자 합니다.

n차원 벡터공간에서 $\mathbb{R}$로 가는 선형 함수는 특별히 linear functional이라 부릅니다. Linear functional은 선형대수학의 기본정리에 의해 $1 \times n$행렬로 표현가능하고 이로 부터 linear fuctional의 집합은 n차원 벡터공간을 이룸을 알 수 있습니다. 원래 공간과 차원이 같은 대칭성에 착안하여 linear fuctional의 집합을 쌍대 공간(dual space)이라 부릅니다. 이때, duality는 벡터와 $\mathbb{R}$로 가는 선형 함수간의 대응성을 의미합니다.

사람들이 linear functional에 관심을 갖는 이유는 duality 대칭성에서 비롯된 순수한 호기심도 있지만 linear functional이 hyperplane과 관련이 있기 때문입니다. Hyperplane은 쉽게 한 차원 낮은 공간이라 생각해도 됩니다. 예를 들어, 3차원의 hyperplane은 평면입니다. 주어진 Linear functional의 값이 0이 되는 집합을 그 linear functional의 kernel이라 하는데 이 kernel이 hyperplane이 됩니다.[21] 따라서 linear functional을 통해 hyperplane을 다룰 수 있게 되고 convex optimization에서 dual problem을 유도하는데 쓰이듯이 실용성이 뛰어납니다.

이제 Farkas' lemma의 의미에 대해 설명을 두 단계로 나누어 진행하겠습니다. 우선 Farkas' lemma의

[20] 만약 g_i들이 완전히 선형 함수라면 feasible set의 모양은 어떻게 생겼을까요?
[21] 한번 3차원 linear functional의 kernel을 그려보시길 바랍니다.

대우 명제를 생각합니다. 이는 $\Sigma_{i=1}^{m}\mu_i a_i = b$을 만족하는 양의 실수 μ_i가 없다면, 어떤 $x \in \mathbb{R}^n$가 있어서 $a_i^t x \leq 0 \; \forall i = 1, ..., m$ & $b^t x > 0$임을 의미합니다.

(1) n차원 벡터 a_i에 대해 $\{\Sigma_{i=1}^{m}\mu_i a_i | \mu_i \geq 0\}$을 cone이라 부릅니다.[22] $\Sigma_{i=1}^{m}\mu_i a_i = b$을 만족하는 양의 실수 μ_i가 없음은 b가 a_i들의 cone에 들어있지 않음으로 해석할 수 있습니다.

(2) $a_i^t x = x^t a_i$입니다. 앞에서 말하였듯이 $1 \times n$벡터는 linear functional처럼 여길 수가 있고 x에 대응되는 linear functional을 L_x이라 쓰면 $x^t a_i = L_x(a_i)$입니다. 따라서 $a_i^t x \leq 0 \; \forall i = 1, ..., m$ & $b^t x > 0$는 $L_x(a_i) \leq 0 \; \forall i = 1, ..., m$, $L_x(b) > 0$인 L_x가 있음과 동일합니다. $L_x(a_i) \leq 0 \; \forall i = 1, ..., m$은 임의의 양의 실수 μ_i에 대해 $\Sigma_{i=1}^{m}\mu_i L_x(a_i) \leq 0$임과 동치이고 이는 L_x의 선형성에 의해 $L_x(\Sigma_{i=1}^{m}\mu_i a_i) \leq 0$임과 같습니다. 따라서 a_i들의 cone에 대해 L_x의 값은 0이하 이므로, 값이 0인 level set을 의미하는 L_x의 kernel[23]의 한쪽에 cone이 들어가 있고 b는 $L_x(b)$가 양수 이므로 그 반대쪽에 놓여야 합니다.

정리하자면 Farkas' lemma는 cone과 cone에 포함되지 않은 b를 갈라 놓는 hyperplane이 있음을 보이면 증명됩니다. 이것 또한 엄밀한 증명은 어렵지만 이번 장에서는 dual의 개념에 조금 익숙해진 것에 만족하고 증명은 생략한 채 마치도록 하겠습니다.

[22] 낮은 차원에서 그림을 그려보면 왜 cone이라 불리는지 확인할 수 있습니다.

[23] hyperplane, n=2에선 평면

Chapter 3

벡터 공간

이번 장에서는 벡터공간과 그들간의 변환을 좌표 또는 행렬로 표현하는 것을 주로 다루고 있습니다. 선형변환과 행렬 간의 대응은 선형대수학의 기본정리로 알려져 있으며 행렬의 성질을 선형변환에 적용하거나 그 역과정이 가능하게 만듭니다. 이후에 살펴볼 Spectral theorem의 경우 대표적으로 선형변환의 성질을 행렬에 적용하여 좋은 행렬 표현을 얻어내는 예 입니다. 끝으로 Spectral theorem의 응용으로 SVD 분해와 선형변환의 크기(norm)에 대해 다룹니다.

3.1 좌표와 행렬

우선 벡터공간의 기초적인 성질에 대해 알아보겠습니다. 벡터공간은 집합 V에 벡터 연산(+)과 체 F와의 연산(상수곱)이 부여된 공간입니다.[1] 쉽게 말해 $a, b \in F$와 $v, w \in V$에 대해 $av + bw$라는 선형 연산(v,w의 선형결합)이 부여된 공간입니다. 벡터공간 V의 각 원소들은 이러한 선형 관계에 의해 서로 얽매여 있습니다. V의 유한부분집합 $V_1 = \{v_i\}_{i=1,...,n}$에 대해 $\exists v_j \in V_1$이 있어서 v_j가 $\{v_i\}_{i=1,...,n, i\neq j}$의 선형 결합으로 표현된다면 V_1의 원소들은 *dependent*하다고 합니다. 그리고 *dependent*하지 않은 벡터들의 집합을 *independent*하다고 합니다.

Proposition 3.1.1. independent $V_1 = \{v_i\}_{i=1,...,n}$에 대해, $\sum_{i=1}^n a_i v_i = 0 \Rightarrow a_i = 0,\ \forall i = 1, ..., n$

이 성질은 정의에 의해 바로 유도됩니다. 간단한 벡터공간은 몇 개의 원소들로 벡터공간 안의 모든 관계를 풀어헤쳐 표현할 수가 있습니다. 이를 유한차원 벡터공간이라 부르고 정의는 다음과 같습니다.

Definition 13. 유한차원 벡터공간 V는 다음을 만족하는 independent 유한부분집합 $\mathcal{E} = \{\epsilon_i\}_{i=1,...n}$가 존재한다. "$\forall v \in V$, v는 $\mathcal{E}$의 선형결합으로 표현가능하다." 이때, $\mathcal{E}$을 V의 기저(basis)라 부른다.

이때, 정의에 의해 $\forall v \in V$, $\exists \{a_i\}_{i=1,...n}$ $s.t.$ $v = \sum_{i=1}^n a_i \epsilon_i$가 성립합니다. 여기서 우리는 기저 $\mathcal{E}$이 주어진 상황에서 V의 임의의 원소 v를 $\{a_i\}_{i=1,...n}$로 표현될 수 있음을 알 수 있습니다. indenpendent라는 속성은 각 v마다 이러한 표현이 유일함을 알려줍니다.

[1] 1장 참조.

Proposition 3.1.2. 기저 $\mathcal{E}$에 대해, $\sum_{i=1}^{n} a_i\epsilon_i = \sum_{i=1}^{n} b_i\epsilon_i$라면, $a_i = b_i\ \forall i = 1, ..., n$.

증명은 한쪽 변으로 모든 성분들을 넘긴 뒤 *prop* 1.1을 적용하면 됩니다. 한편 역으로 $\forall a_i \in F$, $\sum_{i=1}^{n} a_i\epsilon_i \in V$이므로, 기저 $\mathcal{E}$하에서 V와 $\{\{a_i\}_{i=1,...,n} | a_i \in F\}$간에는 1-1 대응이 성립합니다. 이때 우리는 $\{a_i\}_{i=1,...,n}$를 v의 $\mathcal{E}$-좌표($(v)_{\mathcal{E}}$)라 부르고 a_i를 v의 ϵ_i-계수($(v)_{\mathcal{E},i}$)라 하겠습니다.

한편 유한차원 벡터공간의 기저는 모두 크기가 같습니다. 이러한 사실로부터 유한차원 벡터공간에 '차원'을 정의할 수 있습니다.

Theorem 3.1.3. 유한차원 벡터공간 V와 기저 $\mathcal{E} = \{\epsilon_i\}_{i=1,...,n}$가 주어졌을때, 다른 기저 $\mathcal{F} = \{f_j\}_{j=1,...,m}$에 대해 $n = m$이다. 이때 V의 차원은 기저의 크기 n으로 정의한다.

Proof. 우선 기저는 independent이므로 0을 지니지 않습니다. 일반성을 잃지 않고 $n < m$이라 할 때, f_j는 V의 원소이고 $\mathcal{E}$-좌표가 유일하게 존재합니다. f_j의 ϵ_1-계수를 a_j라 할 때, 어떤 a_k가 0이 아니면 $\mathcal{F}_1 = \{f_j - a_j f_k\}_{j=1,...,m, j\neq k}$를 생각합니다. $\mathcal{F}_1$의 각 원소의 ϵ_1-계수는 0이고 $\mathcal{F}_1$은 independent입니다. 모든 a_k가 0이면 아무거나 하나 빼서 똑같은 조건을 만족하는 $m-1$크기의 $\mathcal{F}_1$을 얻을 수 있습니다. 여기에 ϵ_2에 대해 같은 과정을 반복하고 이를 ϵ_{n-1}까지 해서 얻은 independent한 $\mathcal{F}_{n-1}$은 $m > n$이므로 적어도 원소가 2개 있으며 $i = 1, ..., n-1$에 대해 ϵ_i-계수가 0입니다. 이때 $\mathcal{E}$는 기저이므로 $\mathcal{F}_{n-1}$의 모든 원소는 ϵ_n의 상수배이고 이는 independent에 모순입니다. □

정리하면, 유한차원 벡터공간이 지니는 기저에 대해 알아보았고 이를 이용해 각 원소를 좌표로 표현할 수 있음을 확인하였습니다. 2 장에서 살펴본 선형변환의 경우에도 이러한 '표현'이 가능합니다.

Theorem 3.1.4. 유한차원 선형대수학의 기본정리. 유한차원 벡터공간 V, W에 대해 각각의 기저 $\mathcal{E} = \{\epsilon_i\}_{i=1,...,n}$, $\mathcal{F} = \{f_j\}_{j=1,...,m}$가 주어졌을때, 선형변환 $L : V \to W$를 다음의 방법을 통해 $m \times n$ 행렬 A에 대응가능하다.

$$A\text{의 } i^{th}\text{열 } A^i = (L(\epsilon_i))_{\mathcal{F}}$$

이렇게 정의된 A에 대해 A$\cdot$ $(v)_{\mathcal{E}}$라는 행렬 연산의 결과는 $L(v)$의 $\mathcal{F}$-좌표, 즉 $(L(v))_{\mathcal{F}}$와 같다.[2] 이때, 기저 $\mathcal{E}, \mathcal{F}$에서 선형변환 L의 대응 행렬 A를 $(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{F}}$로 표기한다.

풀어 말하면, 1) 모든 유한차원 벡터공간은 기저가 주어지면 각 기저에 대응되는 좌표로 표현가능하므로, 벡터를 벡터로 바꾸는 선형변환은 좌표를 좌표로 바꾸는 것과 같습니다. 2) 선형성은 이러한 좌표변환에 제약을 가해 이 좌표변환이 특정 행렬연산으로 표현된다는 것을 의미합니다.

역으로 마찬가지로 '기저가 주어진 상황'에서 행렬이 주어지면 이 행렬 곱으로 이루어지는 좌표 변환에 대응되는 선형 변환이 존재합니다. 구체적으로 Thm 1.4의 조건에서 벡터 공간과 각각의 기저가 주어지고 $m \times n$행렬 A가 주어졌을 때 이에 대응되는 선형변환은 다음과 같습니다.

$$(L(v))_{\mathcal{F}} = A \cdot (v)_{\mathcal{E}} \tag{3.1}$$

따라서 '기저가 주어졌을때' 선현변환과 행렬은 1-1 대응이 되고, 선형변환을 행렬로 표현해 행렬의

[2] 이것을 한번 확인해 보는 것은 필요하다고 생각합니다. 행렬 A는 기저 ϵ_i의 변환값에 의해서 결정이 되는데 선형변환이 지니는 '선형성'으로 인해 임의의 벡터 v에 대한 변환값을 ϵ_i의 변환값의 선형변환으로 표현가능합니다. 자세하게 한번 정리해 보면 좋을 것 같습니다.

성질들을 적용할 수 있으며 (ex. Gauss elimination) 반대로 행렬을 선형변환으로 생각해 선형변환의 성질들을 적용할 수가 있습니다 (ex. SVD).

끝으로 다음의 chain rule과 유사한 성질이 쉽게 유도됩니다.

Proposition 3.1.5. 유한차원 벡터공간 V, W, U에 각각 기저 $\mathcal{E}$, $\mathcal{F}$, $\mathcal{G}$가 주어졌을때, 선형변환 $L : V \to W$, $K : W \to U$에 대해

$$(K \circ L)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{E}} = (K)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{F}} \cdot (L)^{\mathcal{F}}_{\mathcal{E}} \tag{3.2}$$

이 성립한다.

Proof. 증명의 논리는 chain rule과 유사합니다. Thm. 1.4에 의해, $(K \circ L)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{E}} \cdot (v)_{\mathcal{E}} = (K \circ L(v))_{\mathcal{G}} = (K(L(v)))_{\mathcal{G}} = (K)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{F}} \cdot (L(v))_{\mathcal{F}} = (K)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{F}} \cdot (L)^{\mathcal{F}}_{\mathcal{E}} \cdot (v)_{\mathcal{E}}$이므로 $\forall v \in V$, $((K \circ L)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{E}} - (K)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{F}} \cdot (L)^{\mathcal{F}}_{\mathcal{E}}) \cdot (v)_{\mathcal{E}} = 0$. 따라서 $(K \circ L)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{E}} - (K)^{\mathcal{G}}_{\mathcal{F}} \cdot (L)^{\mathcal{F}}_{\mathcal{E}} = 0$. □

3.2 행렬식 (Determinant)

행렬식은 행렬을 통한 선형변환이 넓이를 얼마나 변화시키는지 알려줍니다. 또한, 행렬식은 행렬 곱을 보존합니다.[3] 이런 좋은 성질을 지니고 있어 자주 등장하는 행렬식에 대해 간단히 알아봅니다.

행렬식은 $n \times n$행렬을 받아서 실수를 반환하는 함수입니다. $n \times n$행렬은 크기가 n인 벡터가 n개 있는 것과 같으므로, 행렬식은 $\mathbb{R}^n \times ... \times \mathbb{R}^n$에서[4] 정의된 형식(form)이라 생각할수 있습니다. 이렇게 벡터 n개를 받아 실수를 반환하는 함수를 n-form이라 부릅니다. 행렬식은 n-form 중에서 선형성을 비롯한 다음의 성질을 만족하는 '유일한' n-form입니다.

Definition 14. n차 행렬식 (det) : $\mathbb{R}^n \times ... \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$는 다음의 조건을 만족한다. [5]
1) linearity[6] : det(... $, av + bw,$ ...) = $a$det(... $, v,$ ...)+$b$det(... $, w,$ ...)
2) alternating : det(... $, v,$ ..., $w,$ ...) = - det(... $, w,$ ..., $v,$ ...)
3) det($e_1, ..., e_n$)= 1

위의 성질들을 만족하는 n-form을 alternating multilinear n-form이라 하고, 이러한 alternating multilinear n-form이라는 함수는 하나 밖에 존재하지 않음을 보일 수가 있습니다. 이는 elementary 행렬들의 곱하는 것이 1) linearity조건에서의 선형 결합과 2) alternating에서의 두 벡터를 교환하는 행위와 같다는 사실에서 기인합니다. Elementary 행렬란 다음과 같습니다.

Definition 15. $n \times n$ left elementary 행렬 E는 $n \times m$행렬 A의 왼쪽에 곱해졌을 때, 다음 중 하나를 만족시킨다.[7]
type 1) i, j행 순서 교환
type 2) i행 a배
type 3) i행에 j행의 a배를 더함

[3]det(AB)=det(A)det(B)
[4]$\mathbb{R}^n$이 n개가 결합된 공간. 이러한 곱을 Cartesian product라 합니다.
[5]e_i는 $\mathbb{R}^n$에서 i^{th}성분은 1이고 나머지는 0인 벡터
[6]한 벡터 혹은 한 행이나 열에 대해서만 선형성이지 det(A+B)=det(A)+det(B)를 의미하는것이 아닙니다.
[7]E가 구체적으로 어떤 형태의 행렬인지 확인해보는 것이 필요합니다.

이렇게 정의된 elementary 행렬들은 모두 역행렬이 존재하고 이 역행렬 또한 elementary matrix가 됩니다.[8] 놀라운 사실은 모든 $n \times n$행렬들은 적절한 elementary 행렬들을 곱함으로써 상삼각행렬(upper triangle matrix)이 된다는 것입니다.[9] 이러한 과정을 Gauss elimination이라 합니다.[10]

Def. 2를 만족하는 n-form이 유일하고 det(AB)=det(A)det(B)를 보이기 위해선 우선 행렬을 elementary matrix들로 분해를 해야합니다. 임의의 $n \times n$행렬 A를 Gauss elimination을 통해

$$E_1...E_kA = U \tag{3.3}$$

로 표현가능합니다. 이때, U는 상삼각행렬입니다. 역행렬들을 다 곱하면

$$A = E_k^{-1}...E_1^{-1}U \tag{3.4}$$

이고 E_i^{-1} 또한 elementary matrix가 됩니다. 간단한 확인을 통해 type 1의 경우 $n \times n$ identity matrix I_n의 두 행을 바꾼 행렬임을 알 수 있습니다. 따라서 type 1 elementary matrix E_{t1}의 경우 def 2-2),3)에 의해 $det(E_{t1}) = -1$입니다. 다시 def 2-2)에 의해 임의의 $n \times n$ 행렬 A에 대해, $det(E_{t1}A) = -det(A) = det(E_{t1})det(A)$가 되어 행렬곱을 분해하여 표현 가능합니다. type 2 E_{t2}는 I_n에서 i번째 행만 a배가 된 행렬이고 이번에는 def 2-1),3)에 의해 $det(E_{t2}) = a$가 되고 마찬가지로 행렬곱이 분해 됩니다. type 3 E_{t3}는 I_n에서 (i,j)성분에 a가 추가된 행렬입니다. 즉,

$$E_{t3} = (e_1, ...e_i + ae_j, ..., e_j, ..., e_n) \tag{3.5}$$

입니다.[11] Def 2-1),3)에 의해 $det(E_{t3}) = 1+adet(e_1, ..., e_j, ..., e_j, ..., e_n)$이고 def 2-2)로부터 $det(e_1, ..., e_j, ..., e_j, ..., e_n) = 0$임을 알 수 있습니다. 따라서 $det(E_{t3}) = 1$이고, $det(E_{t3}A)$ 또한 같은 방식으로 $det(A)$와 같음을 보일 수 있습니다. 따라서 $det(E_{t3}A) = det(E_{t3})det(A)$입니다.

위의 결과들을 종합해서 (5)에 적용하면,

$$det(A) = det(E_k^{-1})...det(E_1^{-1})det(U) \tag{3.6}$$

가 됩니다. 여기서 간단하게 경우를 나눠서, 1) U의 대각성분 중 0이 있는 경우, Gauss elimination을 추가적으로 진행하여 U의 한 행이 0이 되게 할 수가 있고 0인 행은 2배를 해도 그대로 이기에 def 2-1)에 의해 det(U)=0이 됨을 알 수 있습니다. 따라서 det(A)=0입니다. 2) U의 대각성분 중 0이 없는 경우, Gauss elimination을 추가적으로 진행하여

$$E_{k+1}...E_{k+m}U = I_n \tag{3.7}$$

이 되게 할 수 있습니다. 따라서

$$det(A) = det(E_k^{-1})...det(E_1^{-1})det(U) = det(E_k^{-1})...det(E_1^{-1})det(E_{k+m}^{-1})...det(E_{k+1}^{-1}) \tag{3.8}$$

이 됩니다.

결과를 요약하면 def 2의 alternating multilinear n-form의 성질들에 의해 모든 elementary 행렬들의

[8]구체적 계산 없이 def 3의 행위들의 역과정이 elementary matrix로 표현됨을 파악하는 것으로 충분합니다.
[9]여기서 상삼각행렬은 $i > j$일때, (i, j)성분이 0인 $n \times n$행렬을 의미합니다.
[10]이에 대한 자세한 내용은 각자에게 맡깁니다.
[11]여기서 $A = (v_1, ..., v_n)$은 각 행을 순서대로 나타내는 표현입니다. 즉, A의 i번째 행이 v_i입니다.

det는 결정이 되고 식 (6)에 의해 det(A) 또한 결정이 됩니다. 따라서 def 2를 만족하는 det라는 함수는 유일합니다. 그리고 앞에서 elementary 행렬들이 곱해진 경우 det를 취했을 때 분해할 수 있음을 보였는데, 이 성질과 함께 앞에서 U의 대각성분에 0이 들어감에 따라 나눈 것처럼 경우를 나누면 det(AB)=det(A)det(B)가 됨을 보일 수가 있습니다.

위의 사실은 det가 가진 기본적인 성질들이라면 이런 det의 성질로부터 생겨나는 의미가 있습니다. 앞의 U의 대각성분에 따른 구분은 사실 A가 역행렬이 있는지 없는 지의 구분과 동일합니다. ,즉 U의 대각성분에 0이 있는 경우는 A가 역행렬이 없는 경우이고 이 경우 $det(A) = 0$ 입니다. 역행렬이 있는 경우 식 (8)에 의해 $det(A) \neq 0$입니다.

역행렬이 있는 A의 경우 식 (8)을 좀 더 들여다 보면, type 1의 elementary 행렬의 det는 -1로 det(A)의 부호를 결정합니다. 즉, A라는 행렬을 elementary 행렬들로 완전히 분해했을때 행의 순서 교환 즉, 좌표 축의 순서를 교환하는 행위가 짝수번인지 홀수번인지가 det(A)의 부호를 결정합니다. type 2의 elementary 행렬의 det는 a로 A의 elementary 행렬들 중에서 행을 늘리는 크기들의 곱이 det(A)의 크기가 됩니다. 즉, 어느 한 축 방향으로 총 몇 배를 늘리는지가 det(A)의 크기가 됩니다. 끝으로 type 3의 elementary 행렬의 det는 1로 det(A)에 아무런 영향을 안 미칩니다. type 3는 직사각형을 윗 변만 밀어서 평행사변형으로 만드는 것과 같습니다. 즉, type 3는 변환 전후 넓이가 동일합니다.

행렬 A를 elementary 행렬들로 분해해서 표현하는 것은 x에 A를 곱하는 것을 연쇄적인 작용으로 표현하는 것과 같습니다. x가 type 1,2,3 중 하나의 행위를 돌아가며 여러번 하는 것으로 A를 해석하는 것 입니다. 이렇게 해석했을때 det(A)는 축 교환이 짝수번 만큼 이루어졌는지, 늘리는 행위가 총 얼마만큼 일어났는지에 대한 정보를 담고 있습니다.[12]

3.3 Spectral Theorem

Spectral Theorem은 좋은 직교 기저를 찾는 문제입니다. 그리고 이 문제는 '행렬' 표현에서의 문제가 아니라 철저히 선형변환이라는 추상적인 영역에서 주어지고 해결됩니다. 이에 따름정리로 행렬의 eigen decomposition이나 SVD가 얻어집니다. Spectral theorem을 다루기 위해서는 다소 긴 호흡이 필요합니다. 이에 대해 차근차근 사전준비를 해나가 보겠습니다. 본문에서 V는 유한차원 내적공간을 의미하며 v, w는 V의 원소를 의미합니다.

3.3.1 내적 공간 (inner product space)

내적

Spectral theorem은 직교기저의 존재성에 대해 말하고 있습니다. 이때 직교는 내적에 따라오는 개념입니다. 앞으로의 내용에서는 복소수를 고려한 표기를 사용합니다.

Definition 16. 내적의 정의. 내적 $< \cdot, \cdot >: V \times V \to F$는 다음을 만족한다.[13]

[12] 따라서 선형변환 f에 대해 |det(Df)|는 넓이 변화율을 의미합니다. 일반적인 미분가능 함수 f 또한 근사적으로 선형변환과 같기 때문에, 점 x에서 순간적인 넓이 변화율을 |det(Df)|로 여길 수 있습니다. 이는 다변수 함수의 적분에서 매개변수를 바꾸었을때 넓이 변화를 보정하는 역할을 합니다.

[13] F는 실수나 복소수로 실수의 경우 conjugate는 자기자신입니다. 만약 복소수가 어색하다면 conjugate bar를 무시하고 한번 읽어보는 것을 추천합니다.

1) linearity : $< av+bw, u >= a < v, u > +b < w, u >$
2) conjugate symmetry : $< v, w >= \overline{< w, v >}$
3) positive definiteness : a)$< v, v > \geq 0$ b) $< v, v >= 0 \Leftrightarrow v = 0$

정의를 이용하면 $< v, bw >= \overline{< bw, v >} = \overline{b < w, v >} = \bar{b} < v, w >$가 됩니다. 주어진 정의에서 F를 복소수로 포함하여 생각하는 이유는 spectral theorem이 복소수에서 증명가능한 정리이기 때문입니다.[14] 이것에 대하여는 뒤에서 다루고, 위의 conjugate symmetry에 대해 첨언을 하자면, 복소수 $x_1 = a+bi$에 대해 x_1의 크기의 제곱은 $a^2+b^2 = x_1\bar{x_1}$입니다. n개 복소수로 이루어진 벡터 $x = (x_1, ..., x_n)$과 $y = (y_1, ..., y_n)$ 간 내적은 따라서 $\sum_{i=1}^n x_i\bar{y_i}$로 정의하는 것이 자연스럽고 이러한 이유로 2)가 자연스러운 정의입니다. Def 4는 실수의 내적도 포함하는 정의입니다. 만약 F가 실수라면, conjugate는 자기 자신이므로 지워집니다.

이때 (V, <,>)를 내적공간이라고 합니다. 내적공간은 크기 개념이 있는 노름공간(normed space)에 포함된다고 1장에서 이야기 했었습니다. $||v||^2 =< v, v >$식으로 norm이 자연스럽게 따라오기 때문에 내적공간이 노름공간이 됩니다.[15] 내적은 크기와 함께 직교 개념을 지닙니다.

내적 값이 0인 두 벡터를 직교한다고 합니다. 여러 벡터가 서로 직교한다는 것은 모든 쌍에 대해 내적 값이 0임을 말합니다. 직교 기저라는 것은 서로 직교인 기저를 의미합니다. 여기에 기저들이 크기($||v||$)가 1이라면 이를 정규직교 기저라 부릅니다. 정규직교 기저 $\mathcal{E} = \{e_i\}_{i=1,...,n}$가 주어졌을때, 다음이 성립하고 이것이 정규직교 기저를 사용하는 핵심 이유입니다.

Proposition 3.3.1. 정규직교 기저 $\mathcal{E}$에 대해, $< v, w >= \overline{(w)_{\mathcal{E}}^t}(v)_{\mathcal{E}}$.

Proof. $v = \sum_{i=1}^n a_i\epsilon_i$, $w = \sum_{i=1}^n b_i\epsilon_i$라면 우리의 표기약속 상 $(v)_{\mathcal{E}} = (a_1, ..., a_n)$, $(w)_{\mathcal{E}} = (b_1, ..., b_n)$를 의미합니다. '벡터' v, w에 대해 <v,w>는 내적의 linearity에 의해 $< e_i, e_j >$의 선형결합으로 표현되는데 $< e_i, e_j >$는 정규직교 기저의 성질에 의해 $i \neq j$이면 0이고 $i = j$이면 1이므로 $< v, w >= \sum_{i=1}^n a_i\overline{b_i}$가 됩니다. 이는 $(v)_{\mathcal{E}}$, $(w)_{\mathcal{F}}$를 $n \times 1$ 행렬로 보았을 때, 행렬연산 $\overline{(w)_{\mathcal{E}}^t}(v)_{\mathcal{E}}$와 같습니다. □

다시 한번 강조를 해도 지나치지 않는 사실은 좌표화 되지 않은 추상적 공간에서 정의되는 '내적'이 적규직교 기저가 주어지면, 즉 좌표화 되면 '행렬연산'으로 표현된다는 것입니다. Prop 3.1으로부터 다음은 자명합니다.

Corollary. 피타고라스 정리. $||v||^2 = \overline{(v)_{\mathcal{E}}^t}(v)_{\mathcal{E}} = ||(v)_{\mathcal{E}}||^2$.[16]

Corollary. V의 정규직교 기저 $\mathcal{E}, \mathcal{F}$에 대해, $\overline{(w)_{\mathcal{E}}^t}(v)_{\mathcal{E}} = \overline{(w)_{\mathcal{F}}^t}(v)_{\mathcal{F}}$.

한편 V의 두 기저 $\mathcal{E}, \mathcal{F}$가 주어 졌을 때, $(v)_{\mathcal{E}} = (a_1, ..., a_n)$, $(v)_{\mathcal{F}} = (b_1, ..., b_n)$ 간에는 일종의 변환법칙이 존재합니다. 기저의 정의에 의해 $\epsilon_j = \sum_{i=1}^n p_{ij}f_i$인 p_{ij}가 존재합니다. 따라서 $v = \sum_{j=1}^n a_j\epsilon_j = \sum_{j=1}^n a_j \sum_{i=1}^n p_{ij}f_i = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_j p_{ij} f_i$ 입니다. 한편 $v = \sum_{i=1}^n b_i f_i$이므로 앞의 결과와 비교하면 $b_i = \sum_{j=1}^n a_j p_{ij}$를 얻게 됩니다. 이를 행렬 $P = (p_{ij})$로 표현하면 $b = Pa$, 즉 $(v)_{\mathcal{F}} = P \cdot (v)_{\mathcal{E}}$입니다. 따라서 $(v)_{\mathcal{E}} \leftrightarrow (v)_{\mathcal{F}}$간의 변환은 행렬연산의 일종임을 알 수 있습니다. 이때 좌표는 유일하게 항상 존재하므로 이러한 대응은 1-1이고 따라서 P는 역행렬이 존재합니다.

[14] 다항식의 해가 복소수라는 사실을 이용합니다.
[15] positive definiteness에 의해 0 아닌 원소의 크기(norm)가 양수가 됩니다.
[16] 여기서 오른쪽 $|| \cdot ||$는 l2 norm을 의미합니다.

한편 $\epsilon_j = \sum_{i=1}^{n} p_{ij} f_i$이므로 행렬 P의 j^{th}열은 $(\epsilon_j)_\mathcal{F}$임을 알 수 있습니다. 즉, 행렬 P는 하나의 기저를 다른 기저로 '표현'함으로써 얻어집니다. 한편 주어진 기저들이 정규직교 기저라면 P는 좀 더 특별합니다. 위의 보조정리에 의해 다음이 성립합니다.

Corollary. V의 정규직교 기저 $\mathcal{E},\mathcal{F}$에 대해, $\overline{(\epsilon_i)^t_\mathcal{E}}(\epsilon_j)_\mathcal{E} = \overline{(\epsilon_i)^t_\mathcal{F}}(\epsilon_j)_\mathcal{F}$는 $i \neq j$이면 0 $i = j$이면 1이다. 따라서 $\overline{P^t}P = I_n$이다.[17] 이때, AB=I이면 BA=I가 되므로[18] $\overline{P^t}P = P\overline{P^t} = I_n$이다.

따라서 $(v)_\mathcal{F} = P \cdot (v)_\mathcal{E}$는 $\overline{P^t} \cdot (v)_\mathcal{F} = (v)_\mathcal{E}$를 의미하고, $\overline{P^t}$의 j^{th}열은 $(f_j)_\mathcal{E}$임을 알 수 있습니다. 위에서 $\overline{P^t}P = P\overline{P^t} = I_n$인 행렬을 *unitary matrix*라 부릅니다. 위의 논의에 의해 unitary matrix는 두 직교기저의 좌표 표현 간의 대응관계를 나타냄을 알 수 있습니다. 참고로 행렬 P는 항등사상 $(I)^\mathcal{F}_\mathcal{E}$와 같음을 thm. 1.4의 정의에 의해 알 수 있습니다.

한편 Unitary matrix P는 직교기저의 변환이 아닌 다른 고정된 직교기저에서 선형변환으로도 해석이 가능합니다. 구체적으로 V의 정규직교 기저 $\mathcal{E}$가 주어졌을때,

$$\|P \cdot (v)_\mathcal{E}\|^2 = \overline{(P \cdot (v)_\mathcal{E})^t} P \cdot (v)_\mathcal{E} = \overline{(v)^t_\mathcal{E}} \cdot \overline{P^t} P \cdot (v)_\mathcal{E} = \overline{(v)^t_\mathcal{E}}(v)_\mathcal{E} = \|(v)_\mathcal{E}\|^2 \tag{3.9}$$

이므로 P는 좌표의 크기를 유지하는 행렬입니다. 선형대수학의 기본정리에 의해 $L : V \to V$, $(L)^\mathcal{E}_\mathcal{E} = P$인 선형변환 L이 존재하고 이때 $(L(v))_\mathcal{E} = P \cdot (v)_\mathcal{E}$입니다. 따라서 식 (9)는 prop 3.1과 V의 norm의 정의[19]에 의해 $\|L(v)\|^2 = \|v\|^2$을 의미합니다. 따라서 행렬 P를 크기(norm)를 유지하는 선형변환의 '표현'으로 여길 수가 있고 이러한 선형변환을 isometry라 부릅니다.

Normal map and Hermition map (*)

앞에서 unitary matrix와 그에 대응되는 선형변환에 대해 알아보았습니다. 이와 함께 자주 등장하는 normal matrix와 hermition matrix[20]에 대해 간단히 설명하고자 합니다. 이를 위해선 conjugate transpose[21] matrix에 대응되는 선형변환인 adjoint map을 알아야 합니다.

n차원 유한차원 내적공간 V의 정규직교 기저 $\mathcal{E}$과 선형변환 $L : V \to V$에 대해, $(L)^\mathcal{E}_\mathcal{E} = A$라 합시다. L의 adjoint map L^*는 $\overline{A^t}$에 대응이 되는 변환입니다. 이때, $< L(v), w >= \overline{(w)^t_\mathcal{E}} \cdot (L(v))_\mathcal{E} = \overline{(w)^t_\mathcal{E}} \cdot A(v)_\mathcal{E} = \overline{(\overline{A^t}(w)_\mathcal{E})^t} \cdot (v)_\mathcal{E} = \overline{(L^*(w))^t} \cdot (v)_\mathcal{E} =< v, L^*(w) >$입니다. 일반적으로 adjoint map은 다음과 같이 정의합니다.

Definition 17. 유한차원 내적공간 V과 선형변환 $L : V \to V$에 대해 $< L(v), w >=< v, K(w) >$, $\forall v, w \in V$인 선형변환 $K : V \to V$이 존재하고 유일하다. 이때 K를 L의 adjoint map이라 부르고 L^*로 표기한다.

존재성은 앞에서 보였던대로 정규직교 기저를 잡고 L를 행렬로 표현한 뒤 conjugate transpose를 통해 밝힐 수 있습니다. 유일성은 $< v, K_1(w) >=< L(v), w >=< v, K_2(w) >$이라면 선형성에 의해 $< v, K_1(w) - K_2(w) >= 0$, $\forall v, w \in V$이고 v에 $K_1(w) - K_2(w)$를 대입하여 $K_1(w) - K_2(w) = 0$, $\forall w \in V$임을 보일 수 있습니다. 따라서 $K_1 = K_2$입니다.

[17] 행렬 P의 j^{th}열은 $(\epsilon_j)_\mathcal{F}$이므로. I_n은 n차 identity matrix

[18] Gauss elimination을 통한 elementary행렬로 A를 분해해서 표현하면 보일 수 있습니다.

[19] $||v||^2 =< v, v >$

[20] 실수라면 symmetric이라 부릅니다.

[21] 실수라면 그냥 transpose와 동일.

Proposition 3.3.2. 유한차원 내적공간 V의 정규직교 기저 $\mathcal{E}$과 선형변환 $L : V \to V$에 대해, $\overline{(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}}}^t = (L^*)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}}$.

Proof. $(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}} = A$, $(L^*)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}} = B$라 표기하겠습니다. 그러면 $\overline{(\overline{A^t}(w)_{\mathcal{E}})^t} \cdot (v)_{\mathcal{E}} = \overline{(w)_{\mathcal{E}}^t} \cdot A(v)_{\mathcal{E}} = \overline{(w)_{\mathcal{E}}^t} \cdot (L(v))_{\mathcal{E}} =< L(v), w >=< v, L^*(w) >= \overline{(L^*(w))^t} \cdot (v)_{\mathcal{E}} = \overline{(B(w)_{\mathcal{E}})^t} \cdot (v)_{\mathcal{E}}$이므로 $\overline{((\overline{A^t} - B)(w)_{\mathcal{E}})^t} \cdot (v)_{\mathcal{E}} = 0$, $\forall v, w \in V$. 이를 이용해 $\overline{A^t} - B =$임을 보일 수 있습니다. □

위의 증명은 def. 5 앞에서 등장한 등식들의 순서만 재배열한 것에 불과합니다. 이는 단지 이미 알고 있는 사실을 좀 더 깔끔한 정의에 하에 살짝 바꾼 것에 불과합니다.

Definition 18. 유한차원 내적공간 V과 선형변환 $L : V \to V$에 대해 $L^* \circ L = L \circ L^*$이면 L을 normal map이라 부르고 $L = L^*$이면 hermition map이라 부릅니다.

위 정의에 의해 hermition map은 normal map임을 알 수 있습니다.

Definition 19. $n \times n$행렬 A에 대해 $\overline{A^t}A = A\overline{A^t}$이면 A을 normal matrix라 부르고 $A = \overline{A^t}$이면 hermition matrix라 부릅니다.

Proposition 3.3.3. 선형변환 $L : V \to V$과 V의 정규직교 기저 $\mathcal{E}$에 대해, L이 normal map이라면 $(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}}$이 normal matrix이고 L이 hermition map이라면 $(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}}$이 hermition matrix이다.

Proof. prop 1.5와 prop. 3.2를 이용하면 확인할 수 있습니다. □

한편 위 성질의 역도 성립합니다. 즉, 행렬 A가 normal matrix이거나 hermition matrix이면 기저 $\mathcal{E}$가 주어졌을때 A와 대응되는 선형변환 $L : V \to V$는 normal map이거나 hermition map이 됩니다. 이에 대한 증명 또한 위의 방식과 유사하므로 생략합니다. 중요한 것은 행렬과 선형변환 간의 대응성에 대해서 익숙해지는 것입니다.

Eigenvector

Spectral theorem을 위한 마지막 준비입니다.

Definition 20. 선형 변환 $L : V \to V$의 eigenvector v와 이에 대응 되는 eigenvalue $\lambda \in F$는 다음을 만족한다.

$$L(v) = \lambda v, v \neq 0 \tag{3.10}$$

즉, eigenvector는 L이라는 변환 후에도 방향이 유지되거나 정반대인 벡터를 의미합니다.

정의 (9)에 직교기저 $\mathcal{E}$ 좌표계를 도입하면 $(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}} \cdot (v)_{\mathcal{E}} = \lambda(v)_{\mathcal{E}}$입니다. 표기를 위해 $(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}} = A$라 하면 eigenvector는 $Ax = \lambda x$의 해로 주어집니다. 이는

$$(A - \lambda I_n)x = 0 \tag{3.11}$$

를 푸는 것과 같습니다. 이때 위의 방정식은 $det(A - \lambda I_n) = 0$일 때 해가 존재합니다. 한편, det의 귀납적인 계산식에 의하면 $det(A - \lambda I_n)$은 λ에 대한 n차 다항식이 됩니다. 하지만 일반적으로 n차 다항식은 실수해를 안 가질 수도 있습니다.[22]

한편 대수학의 기본정리는 n차 다항식이 n개의 복소수해를 지님을 알려줍니다.[23] 이를 이용하면 다음을 보일 수 있습니다.

Theorem 3.3.4. $L : (V, \mathbb{R}) \to (V, \mathbb{R})$이 symmetric map[24]이라면 실수 eigenvalue를 지닌다.

Proof. 이 정리로부터 symmetric map에 대한 spectral theorem이 유도됩니다. V의 정규직교 기저 $\mathcal{E}$라 하고, $(L)_{\mathcal{E}}^{\mathcal{E}} = A$라 합시다. 체가 실수이므로 A는 실수행렬입니다. 문제는 $det(A - \lambda I_n) = 0$인 실수 λ가 있음을 보여야 합니다. 대수학의 기본정리에 의해 $det(A - \lambda I_n) = 0$인 복소수 λ_1이 있고 $(A - \lambda_1 I_n)x = 0$은 0아닌 복소수 해 x_1을 지닙니다. 이로부터 $\overline{x^t}Ax = \lambda_1 \|x\|^2$임을 알 수 있습니다. 여기에 conjugate transpose를 양변에 취하면 $\overline{x^t A^t}x = \overline{\lambda_1}\|x\|^2$이고 조건에 의해 $A = \overline{A^t}$이므로, $\lambda_1 \|x\|^2 = \overline{\lambda_1}\|x\|^2$입니다. x_1은 0이 아니므로 $\lambda_1 = \overline{\lambda_1}$이고 λ_1은 실수입니다.

다시 $(A - \lambda_1 I_n)x = 0$로 돌아와서 이를 실수 연립방정식으로 여기면 $det(A - \lambda I_n) = 0$이므로 실수 해 y_1이 존재합니다. 따라서 y_1을 $\mathcal{E}$-좌표로 갖는 $(V, \mathbb{R})$의 원소가 존재하고 이것이 λ_1의 eigenvector가 됩니다. □

위의 증명은 매우 '기교적'입니다. 모든 준비가 끝났습니다. 이제 spectral theorem을 마주해 보도록 하겠습니다.

3.3.2 Spectral Theorem

Theorem 3.3.5. *Spectral Theorem for normal map.* 유한차원 내적공간 (V, $\mathbb{C}$)와 선형변환 $L : V \to V$에 대해, L이 normal $\Leftrightarrow$ L의 eigenvector들로 이루어진 정규직교 기저가 존재함 이다.

Theorem 3.3.6. *Spectral Theorem for symmetric map.* 유한차원 내적공간 (V, $\mathbb{R}$)과 선형변환 $L : V \to V$에 대해, L이 symmetric $\Leftrightarrow$ L의 eigenvector들로 이루어진 정규직교 기저가 존재함 이다.

- 결과

증명을 소개하기 앞서 이 정리를 행렬에 적용해봅시다. A라는 $n \times n$이라는 행렬이 주어졌다고 합시다. 단순히 숫자들의 모임에 불과한 행렬은 그 자체로는 어떠한 의미도 지니지 않고 어떤 벡터공간의 선형변환의 표현이 될때 비로서 의미를 지닙니다. 이를 이미 직교기저 $\mathcal{E} = \{e_i\}$로 좌표화 된 $\mathbb{R}^n$에서의 선형변환의 표현이라 생각하도록 하겠습니다. 이때, $\mathbb{R}^n$에서 A에 대응되는 선형변환 L:$\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$을 생각할 수 있습니다. L에 대해 서로 직교이고 크기가 1인 eigenvector($\{v_i\}_{i=1,\ldots,n}$)들로 이루어진 $\mathbb{R}^n$의 기저가 존재하고 각각에 대응되는 eigenvalue를 λ_i라고 합시다. $\mathbb{R}^n$의 모든 점들은 이러한 직교기저 좌표계로 모두 좌표화 되어 있는 상황이고, A에 대응되는 L이라는 변환은 $(L(e_i))_{\mathcal{E}} = A \cdot (e_i)_{\mathcal{E}} =$ A의 i열 $(= A^i)$로 정의되는 변환입니다.[25] 다시 돌아와서 eigenvector 정의에 따라, $L(v_i) = \lambda_i v_i$가 성

[22] $x^2 = 1$
[23] https://www.youtube.com/watch?v=shEk8sz1oOw가 시각적으로 이를 설명합니다.
[24] 체가 실수이므로 hermition map임과 같습니다.
[25] $(e_i)_{\mathcal{E}}$는 맨 첫 장의 좌표 표현의 정의에 따라 (0,0,...,1,0,...,0) i번째만 1인 좌표입니다.

립합니다. 여기서 식의 좌우변은 모두 '벡터'입니다. 이를 직교기저 $\mathcal{E} = \{e_i\}$를 이용해 좌표화하면 $(L(v_i))_{\mathcal{E}} = \lambda_i(v_i)_{\mathcal{E}}$가 되고 Thm 1.4의 결과 $(L(v_i))_{\mathcal{E}} = A \cdot (v_i)_{\mathcal{E}}$를 적용하면 $A \cdot (v_i)_{\mathcal{E}} = \lambda_i(v_i)_{\mathcal{E}}$입니다. $(v_i)_{\mathcal{E}}$를 i번째 열로 가지는 행렬을 P라 하고 대각성분이 $\{\lambda_i\}$인 대각행렬을 D라고 할때, $i = 1, ..., n$에 대해 $A \cdot (v_i)_{\mathcal{E}} = \lambda_i(v_i)_{\mathcal{E}}$는 $AP = PD$로 한번에 표현가능합니다. 그리고 prop 3.1의 corr에 의해 $\bar{P}^t P = P\bar{P}^t = I_n$이므로 $A = PD\bar{P}^t$를 얻게 됩니다. 실수의 경우 conjugate bar가 지워지고 각 성분은 실수가 됩니다.

이 결과를 행렬의 eigen decomposition이라 부릅니다. 한편 역으로 $A = PD\bar{P}^t$와 $\bar{P}^t P = P\bar{P}^t = I_n$가 성립한다면, $A\bar{A}^t = PD\bar{D}\bar{P}^t = P\bar{D}D\bar{P}^t = \bar{A}^t A$가 됩니다.[26] 이로부터 eigenvector 직교기저가 존재하면 주어진 선형변환이 normal임을 보일 수가 있습니다. 실수의 경우 $A = PDP^t$이므로 $A = A^t$가 되어 대응되는 선형변환 L은 symmetric이 됩니다.[27]

- 해석

한편 L을 eigenvector 정규직교 기저 $\mathcal{F}$를 이용해 표현한다면 위에서 등장한 eigenvalue 대각행렬 D가 얻어짐을 쉽게 확인가능 합니다. 즉, $(L)_{\mathcal{F}}^{\mathcal{F}} = D$입니다. 따라서 normal(symmetric) map은 eigenvector 정규직교 기저의 각 축 방향으로 상수배만큼 늘리는 변환으로 해석가능합니다.

실수 symmetric matrix를 살펴봅시다. 결과적으로 $A = PD\bar{P}^t$인 unitary matrix P가 존재합니다. 한편 3.1.1절에서 unitary matrix P는 isometry의 일종임을 확인하였습니다. 일반적으로 isometry는 평행, 회전, 대칭으로 이루어집니다. 다만 행렬연산은 원점을 원점으로 보내므로 평행이동은 제외가 되어 unitary matrix P는 회전 또는 대칭 변환을 의미합니다. 그리고 대각행렬 D는 n차원 벡터 왼쪽에 곱해졌을때 각 성분을 상수배, 즉 축 방향으로 늘리는 역할을 합니다. 따라서 A를 곱하는 것은 좌표를 돌리거나 뒤집고, 축 방향으로 늘리고, 다시 되돌리거나 되뒤집는 과정입니다.
3.1.1에서 unitary matrix는 고정된 기저에서의 선형 변환이 아니라 기저(좌표 축)의 변환으로 해석가능하다고 하였습니다. 즉, 위에서의 선형변환 L의 해석처럼 대칭행렬 A도 좌표 축을 변환한 뒤 그 좌표축 방향으로 늘리거나 줄이고 다시 처음의 좌표축으로 표현하는 과정으로 해석할 수 있습니다.

- 증명

sketch of proof. 여기서는 개략적으로 어떻게 위의 결과들이 성립하는지를 살펴보겠습니다.[28] 방법은 귀납법입니다.
1) V가 1차원인 경우 $L \neq 0$이면 쉽게 정리를 확인가능합니다. 2) 일반적인 n에 대해, 대수학의 기본 정리 혹은 thm. 3.4로 부터 eigenvalue λ와 eigenvector v가 최소 하나는 존재함을 알 수 있습니다. 이때, V에서 v와 내적 값이 0인 부분 공간을 $< v >^{\perp}$라 하는데, 이 공간은 차원이 $n-1$인 내적공간이 됩니다. 또한 주어진 선형변환 L의 정의역을 이 부분공간으로 축소할 수 있습니다. 즉, $L|_{<v>^{\perp}} :< v >^{\perp} \rightarrow V$가 얻어집니다. 즉, $L|_{<v>^{\perp}}(w) = L(w), \forall w \in < v >^{\perp}$로 정의되는 선형변환을 의미합니다. 이때 L이 normal이면 $L|_{<v>^{\perp}}(w)$의 치역이 $< v >^{\perp}$안에 속하게 됩니다. 여기서 normal이 핵심적으로 사용이 됩니다. 그리고 $L|_{<v>^{\perp}}$ 또한 normal이 되어 귀납적으로 n개의 eigenvector를 얻을 수 있게 됩니다.

symmertric이라는 조건은 normal이라는 조건보다 강력한 조건인데, 내적공간이 실수 체를 지니는 경우 eigenvalue의 존재성이 보장이 안되므로 더 강한 조건이 요구됩니다. 처음 eigenvalue의 존재성 이후에는 symmetric이라는 조건이 추가적으로 사용되지는 않습니다.

[26] 대각행렬D는 $D\bar{D} = \bar{D}D$가 성립함을 쉽게 확인 가능합니다.
[27] 3.1.2절 참조
[28] 자세한 증명은 교재나 인터넷을 통해 각자에게 맡깁니다.

3.3.3 SVD (singular value decomposition)

SVD는 spectral theorem을 이용해 얻을 수 있는 결과입니다.

Theorem 3.3.7. *SVD.* $m \times n$행렬 A에 대해 다음을 만족하는 $m \times m$ unitary matrix U, $m \times n$ 대각 행렬 D[29], $n \times n$ unitary matrix V가 존재한다.

$$A = UD\overline{V^t} \tag{3.12}$$

A가 실수 행렬이면 실수 행렬 U, D, V가 존재합니다.

Proof. 증명의 핵심은 $\overline{A^t}A$이 hermition matrix가 된다는 사실과 eigenvalue들이 0 또는 양의 실수가 된다는 것 입니다. 이는 x가 λ에 대응되는 $\overline{A^t}A$의 eigenvector라면 $\lambda||x||^2 = \overline{x^t}\lambda x = \overline{x^t A^t}Ax = ||Ax||^2 \geq 0$입니다.[30] eigenvector는 0이 아니므로 λ가 0 또는 양의 실수임이 얻어집니다. 참고로 $\overline{x^t}Bx \geq 0$, $\forall x \in \mathbb{F}^n$인[31] 행렬 B를 semi-positive라 합니다.

이 사실과 spectral theorem에 의해, $\overline{A^t}A = V\tilde{D}^2\overline{V^t}$인 $n \times n$ 실수 대각행렬 $\tilde{D}$와 $n \times n$ unitary matrix V를 얻게 됩니다. 이제 $\tilde{D}$에서 0아닌 부분과 0인 부분으로 나누어 몇 가지 조작을 거치면 (12)를 만족하는 $m \times m$ unitary matrix U, $m \times n$ 대각 행렬 D를 얻을 수 있습니다. 자세한 과정은 생략합니다.[32] □

Spectral theorem은 대칭적인 행렬에 적용가능합니다. 예를 들어 분산행렬이나 함수의 이계도 함수가 주 적용 대상입니다. 반면 SVD는 일반적인 행렬에 적용 가능합니다. 예를 들어, d차원 데이터를 n개 만큼 모아 만든 $n \times d$ data matrix에 적용이 가능하여 PCA같이 data를 분석할 때 자주 사용됩니다.

3.3.4 Norm of Linear map

끝으로 GAN 논문에서 자주 등장하는 변환의 크기에 대해 알아보겠습니다. 어떤 공간 V에서 W로 가는 변환 L을 생각해봅시다. 변환의 크기를 생각하기 위해선 최소한 V와 W에 크기라는 개념이 주어져 있어야 합니다. 이러한 공간을 normed space라 합니다.

Definition 21. Norm의 정의. 벡터 공간 V에 대해 norm $|| \cdot || : V \to \mathbb{R}$은 다음을 만족한다.
1) $||av|| = |a| \cdot ||v||$
2) $||v + w|| \leq ||v|| + ||w||$
3) $||v|| \geq 0$
4) $||v|| = 0 \Leftrightarrow v = 0$

위 정의는 Euclidean space에서 norm을 추상화한 것입니다. 변환의 크기로 해석될 수 있는 여러 정의들이 있겠지만, 일반적으로 변환의 크기는 정의역에서 차이가 변환에 의해 얼마나 커지는지로 정의합

[29] (i,i)성분만 0아닌 행렬.
[30] 복소수가 0 이상이라는 것은 실수임도 내포합니다.
[31] $\mathbb{F}$는 실수거나 복소수. 실수면 $x^tBx \geq 0$이 조건.
[32] https://en.wikipedia.org/wiki/Singular-value_decomposition 참조.

니다. 문제는 x^2과 같이 간단한 다항식의 경우에도 x가 커짐에 따라 x축에서의 차이에 비해 y축에서의 차이가 매우 커진다는 사실입니다. 따라서 이런 관점의 변환의 크기는 특수한 변환에 대해서만 정의될 수 있습니다.

Definition 22. Lipschitz function. Normed space V, W에서 립쉬츠 함수 $L : V \to W$은 어떤 양수 K에 대해 다음을 만족하는 함수입니다.

$$||L(v_1) - L(v_2)|| \leq K||v_1 - v_2|| \quad \forall v_1, v_2 \in V \tag{3.13}$$

이때, 앞의 논의대로 차이가 얼마나 커지는지를 함수 L의 크기가 한다면, 식 (13)을 만족하는 K중 가장 작은 값을 L의 크기라 정의하는 것이 자연스럽습니다. 이러한 K는 다음과 같이 표현할 수 있습니다.

$$||L|| = \sup_{v_1, v_2 \in V} \frac{||L(v_1) - L(v_2)||}{||v_1 - v_2||} \tag{3.14}$$

하지만 식 (14)의 $|| \cdot ||$이 립쉬츠 함수의 norm이 되기 위해선 우선적으로 립쉬츠 함수들의 집합이 벡터공간을 이루어야 합니다.[33] 이는 두 립쉬츠 함수 L_1, L_2에 대해 $(aL_1 + bL_2)(v) = aL_1(v) + bL_2(v)$로 $aL_1 + bL_2$를 정의하고 $aL_1 + bL_2$이 립쉬츠 함수가 됨을 보임으로서 확인가능 합니다.

립쉬츠 함수이 벡터 공간이 됨을 확인한 후에 (14)가 Def. 9의 조건들을 만족하는지 확인해보면 1), 2), 3)을 만족함을 V, W의 norm의 성질들을 이용해 보일 수 있습니다.[34] 문제는 $y = a$와 같은 함수도 립쉬츠 함수이고 0 항등함수는 아니지만 (14)에 의한 크기는 0이 되는 경우와 같이 4)가 성립하지 않는다는 점입니다. 이를 위해 약간의 추가적인 term이 요구됩니다.

하지만 관심사를 선형변환으로 축소하면 (14)가 norm이 됩니다! 우선 V에서 W로의 선형변환들의 모임이 벡터공간이 됨을 립쉬츠와 동일하게 보일 수 있습니다. 그리고 선형변환의 선형성과 def 9-1)에 의해,

$$(14) = \sup_{v_1, v_2 \in V} \frac{||L(x_1 - x_2)||}{||x_1 - x_2||} = \sup_{v \in V} \frac{||L(v)||}{||v||} = \sup_{v \in V} ||L(\frac{v}{||v||})|| = \sup_{v \in V, ||v||=1} ||L(v)|| \tag{3.15}$$

가 됩니다. 따라서 (14)가 0이라면 L의 선형성에 의해 모든 $v \in V$에 대해 $L(v) = 0$가 되어 $L = 0$이 됩니다.

Definition 23. Norm of linear map. Normed space V, W의 선형함수 $L : V \to W$의 norm $|| \cdot ||$은 다음과 같이 정의할 수 있다.

$$||L|| = \sup_{v \in V, ||v||=1} ||L(v)|| \tag{3.16}$$

즉, 단위 벡터를 최대로 얼마나 크기를 늘리는지가 linear map의 크기가 됩니다. 만약 V, W가 정규직교 기저 $\mathcal{E}$, $\mathcal{F}$가 주어진 유한차원 내적공간이라면, SVD에 의해 $(L)^{\mathcal{F}}_{\mathcal{E}} = UD\overline{V^t}$로 표현가능합니다. 이를 A라 줄여 표현하겠습니다. 이때, U와 $\overline{V^t}$가 unitary matrix이고 이는 크기를 보존함을 3.1.1 절에서

[33] Def. 9의 전제조건

[34] 기계적인 계산이므로 한번 확인해보면 좋을 것 같습니다.

확인하였습니다. 따라서 prop 3.1의 cor.과 thm 1.4에 의해

$$\begin{aligned}\sup_{v\in V,||v||=1}||L(v)|| &= \sup_{v\in V,||v||=1}||(L(v))_{\mathcal{F}}|| = \sup_{v\in V,||v||=1}||A\cdot(v)_{\mathcal{E}}|| \\ &= \sup_{x\in\mathbb{R}^n,||x||=1}||A\cdot x|| = \sup_{x\in\mathbb{R}^n,||x||=1}||D\cdot x||\end{aligned} \tag{3.17}$$

가 됩니다. 즉, l2 norm이 1인 n차원 벡터를 $m\times n$ 대각행렬을 곱했을 때 크기의 최댓값이 L의 norm이 됩니다. 이때 코쉬-슈와르츠 부등식에 의해, 이 값은 D의 대각성분들의 절댓값 중 최댓값이 됩니다. 따라서 L이 $V \to V$인 normal map이라면 spectral theorem을 적용할 수 있고 L의 norm은 L의 eigenvalue의 크기들 중 최댓값이 됩니다.

Chapter 4

위상 공간

이번 장에서는 위상의 기초적인 성질을 다룹니다. 위상의 정의에 충분히 익숙해진 뒤, 위상 공간 간의 함수인 연속 함수와 compact라는 위상적 특성에 대해 알아 봅니다. 만약 위상을 처음 접한다면 Munkres-Topology 교재가 친절하므로 추천합니다.

4.1 위상 (Topology)

위상이란 집합 X의 부분집합들의 모임입니다. 이때 위상 $\mathcal{T}$는 다음의 정의를 만족합니다.

Definition 24. 위상의 정의. 집합 X의 위상 $\mathcal{T}$는 다음의 조건을 만족한다. [1]
1) 공집합, $X \in \mathcal{T}$
2) $O_i \in \mathcal{T}$ for $i \in I$, $\cup_i O_i \in \mathcal{T}$
3) $O_n \in \mathcal{T}$ for $n = 1, ..., N$, $\cap_{n=1}^{N} O_n \in \mathcal{T}$

합집합은 임의의 index set에 대해 이루어지지만, 교집합은 유한개만 고려 대상이라는 점을 유의해야 합니다. 이때 집합과 위상을 합쳐서 $(X, \mathcal{T})$를 위상공간라 부르고 위상 $\mathcal{T}$의 원소를 열린 집합 (open set)이라 합니다. 그리고 열린 집합의 여집합을 닫힌 집합 (closed set)이라 합니다. 이 정의에 대해 좀 더 알아보도록 하겠습니다.

4.1.1 열린 집합 (Open set)

한번 $\mathbb{R}^2$에서 부분집합의 내부와 경계에 대해 생각해 봅시다. $D = \{x \in \mathbb{R}^2 | \, ||x|| < 1\}$은 경계 $C = \{x \in \mathbb{R}^2 | \, ||x| = 1\}$를 포함하지 않습니다. 중심이 x이고 반지름이 r인 경계를 포함하지 않는 원판 $B_r(x) = \{y \in \mathbb{R}^2 | \, ||y - x|| < r\}$들을 생각해 봅시다. 이때 $B_r(x)$들을 이용하면 D의 내부와 경계를 표현할 수 있습니다. 만약 x가 D에 속한다면, 매우 작은 r이 있어서 $B_r(x)$이 D에 속하게 할 수 있습니다. 반면 D의 경계 C에 x가 속하는 경우 어떤 r을 잡아도 $B_r(x)$은 D와 D^c랑 동시에 만나게 됩니다.

[1] $\cup_i A_i = \{x | \, \exists i, x \in A_i\}$, $\cap_i A_i = \{x | \, \forall i, x \in A_i\}$

살짝 변경하여 $\overline{D} = \{x \in \mathbb{R}^2 | \, ||x|| \le 1\}$를 생각해 봅시다. 직관적으로 $\overline{D}$의 내부는 D이고 경계는 C입니다. 위와 비슷한 논리로 x가 내부인 D에 속한다면 매우 작은 r이 있어서 $B_r(x)$이 $\overline{D}$에 속하게 할 수 있습니다. 반면 x가 경계인 C에 속한다면 어떠한 r에 대해서도 $B_r(x)$이 $\overline{D}$와 $\overline{D}^c$와 동시에 만나게 됩니다.

이때 $B_r(x)$들의 합집합으로 표현되는 집합을 열린 집합이라고 합니다.[2] 위의 논리에서 $B_r(x)$대신 열린 집합으로 바꾸어도 내부와 경계에 대해 같은 결과가 성립함을 알 수 있습니다. 즉, x가 D의 내부라면 x를 포함하고 D에 속하는 어떤 열린 집합이 있습니다. 반면, x가 D의 경계라면 x를 포함하는 어떠한 열린 집합들도 D와 D^c와 만납니다.[3]

이러한 방식으로 정의된 열린 집합은 각각이 $B_r(x)$들의 합집합이기에 열린 집합의 합집합은 결국 $B_r(x)$들의 합집합이므로 열린 집합이 됩니다. 즉, def. 1-2)가 성립합니다. 반면, $\cap_{n=1}^{\infty} B_{1/n}(0)$은 $\{0\}$이 되어 열린 집합이 아닙니다. 그럼에도 두 열린 집합 $O_1 = \cup_i B_{r_i}(x_i)$과 $O_2 = \cup_j B_{r'_j}(x'_j)$의 교집합은 열린 집합이 됩니다. 이에 대해 자세히 서술하면, $O_1 \cap O_2 = \cup_i B_{r_i}(x_i) \cap \cup_j B_{r'_j}(x'_j) = \cup_i \cup_j (B_{r_i}(x_i) \cap B_{r'_j}(x'_j))$입니다. 이때 두 경계가 없는 원판의 교집합은 공집합이거나 작은 원판들의 합집합으로 표현이 가능합니다 (why?). 따라서 $B_{r_i}(x_i) \cap B_{r'_j}(x'_j)$은 열린 집합이 됩니다. 열린 집합의 합집합은 열린 집합이므로 $O_1 \cap O_2$은 열린 집합이 됩니다. 이를 N번 반복하면 def. 1-3)이 성립함을 알 수 있습니다.

정리하면 우리는 경계가 없는 원판을 이용해 집합의 내부와 경계를 구분할 수 있음을 확인하였고, 이들의 합집합을 열린 집합으로 정의하였습니다. 그리고 이러한 열린 집합은 def. 1의 조건들을 모두 만족함을 확인하였습니다. 문제는 이러한 접근 방식은 거리를 이용해 원판을 정의할 수 있어야 한다는 것 입니다. 거리라는 개념에 의존하지 않기 위해, def. 1을 만족하는 부분 집합들의 모임을 위상이라 아예 정의해버리고 이 위상만이 주어져 있을 때 어떤 결과들이 도출되는지 파악하는 것이 위상 수학의 주 목표입니다.

4.1.2 내부와 경계

이제 def. 1에 따라 위상공간 (X, T)가 주어졌다고 합시다. 이때 X의 임의의 부분집합 A에 대해 A의 내부(interior)와 경계(boundary) 그리고 외부(exterior)는 다음과 같이 정의 됩니다. 앞으로 O_x라는 표현은 x를 포함하는 열린 집합(open set)을 의미합니다. 이때, O_x를 x의 열린 근방(open neighborhood)이라 부릅니다.[4]

Definition 25. A의 내부. $A^{int} = \{x | \, \exists O_x \in T \ s.t. \ O_x \subset A\}$
A의 경계. $A^{bd} = \{x | \, \forall O_x \in T, \ O_x \cap A \neq \emptyset \ \& \ O_x \cap A^c \neq \emptyset\}$
A의 외부. $A^{ext} = \{x | \, \exists O_x \in T \ s.t. \ O_x \subset A^c\}$

위의 정의를 잘 따져보면 X의 모든 원소는 위 셋 중 하나에 속함을 알 수 있습니다. 한편 $x \in A^{int}$의 경우 $\exists O_x$, $x \in O_x \subset A$이므로, $A^{int} \subset A$입니다. 또한 O_x는 O_x의 각 원소의 열린 근방이므로 모든 O_x의 원소가 A^{int}에 속함을 알 수 있습니다. 즉, $O_x \subset A^{int}$이므로 모든 A^{int}의 원소마다 적용하면

$$A^{int} = \bigcup_{x \in A^{int}} \{x\} \subset \bigcup_{x \in A^{int}} O_x \subset A^{int} \tag{4.1}$$

[2] $\cup_i B_{r_i}(x_i)$ 꼴의 집합들. Index set은 크기가 1일 수도 있다. 따라서 $B_r(x)$은 열린 집합이다.
[3] 구체적으로 확인해 보시길 바랍니다.
[4] 헷갈릴거 같아 첨언하자면 아래의 $\exists O_x$는 x의 어떤 열린 근방이 있다는 말이고 $\forall O_x$는 x의 임의의 근방을 의미합니다.

입니다. 따라서 등호가 성립하여 $\cup_{x\in A^{int}} O_x = A^{int}$이고, def. 1에 의해 A^{int}는 열린 집합입니다. 같은 이유로 A^{ext} 또한 열린 집합이 됩니다. 참고로 일반적으로 x의 근방(neighborhood) N은 $x \in N^{int}$인 부분 집합을 의미합니다.

위의 정의에서 A의 경계는 A에 속할 수도 있고 A에 속하지 않을 수도 있습니다. 반면 A^{ext}는 A에 속하지 않음을 알 수 있습니다.

Definition 26. A의 closure. $\overline{A} = A^{int} \cup A^{bd} = (A^{ext})^c$.

A^{ext}는 A에 속하지 않으므로 $A \subset \overline{A}$임을 알 수 있습니다. 위의 정의에서 $\overline{A}$는 A에 경계를 더한 것을 의미합니다. 그리고 def. 2를 이용해 확인해보면 $\overline{A}$의 내부, 경계, 외부는 A의 것들과 일치함을 알 수 있습니다. 열린 집합의 여집합을 닫힌 집합(closed set)이라 정의하였고 A^{ext}는 열린 집합이므로 $\overline{A}$는 닫힌 집합이 됩니다.

Proposition 4.1.1. 닫힌 집합 C_i들에 대해, $\cap_i C_i$는 닫힌 집합.

Proof. Def. 1-2)에서 여집합을 생각하면 됩니다. □

Proposition 4.1.2. $\overline{A}$는 A를 포함하는 가장 작은 닫힌 집합. 따라서 A가 닫힌 집합이면 $\overline{A} = A$

Proof. $A \subset C$, C가 닫힌 집합이라 합시다. 그러면 C^c는 열린 집합입니다. 이때 $C^c \in A^c$이므로 def. 2에 의해, $C^c \subset A^{ext}$입니다. 따라서 $\overline{A} \subset C$입니다. □

참고로 prop. 1.1에 의해 $\overline{A}$는 A를 포함하는 모든 닫힌 집합들의 교집합과 같습니다.

$$\overline{A} = \bigcap_{A\subset C_i,\ C_i closed} C_i \tag{4.2}$$

$\overline{A}$은 A를 포함하는 닫힌 집합이므로 (2)의 우항에 속하고 이로 인해 좌항이 우항을 포함하는 것은 자명합니다. 또한 우항은 prop 1.1에 의해 닫힌 집합이고 각 항이 모두 A를 포함하므로 우항은 A를 포함합니다. 따라서 prop 1.2에 의해 우항은 $\overline{A}$를 포함해 등호가 성립합니다.

간단히 집합의 내부와 경계 그리고 경계를 치는 것에 대해 알아 보았습니다. 이외에도 많은 기초적인 성질들이 있지만 우리의 흐름에서는 벗어나 나머지는 책으로 대체 하겠습니다.

한편 A^{bd}의 원소는 A에 속할 수도 안 속할 수도 있다고 하였습니다. A^{bd}에 안 속하는 A의 원소 x가 주어졌다고 합시다 (즉, $x \in A^c$). Def. 2에 의해 모든 x의 open neighborhood O_x들은 A와 만나야 합니다. x는 A의 원소가 아니므로 모든 O_x는 x가 아닌 A의 원소를 지니고 있습니다.

Definition 27. accumulation point x. $\forall O_x,\ (O_x - \{x\}) \cap A \neq \emptyset$. 즉, 어떤 열린 근방을 잡아도 자신을 제외한 A의 원소를 지닐 때 x를 A의 accumulation point라 합니다.

Accumulation point들의 집합을 A^a라 합시다. 위의 논의에 의해 A^{bd} 중 A에 속하지 않는 원소들은 모두 A^a에 속하므로 $A^{bd} \subset A \cup A^a$입니다. 따라서 $\overline{A} \subset A \cup A^a$입니다. 한편 def. 4의 정의에 따르면 A^a 중에는 A에 속하지 않는 원소도 있습니다.[5] A^a 중에 A의 속하지 않는 x는 임의의 O_x에 대해

[5] 역으로 A의 원소 중에 A^a에 속하지 않는 원소는 고립점(isolated point)이라고 합니다. 한번 def. 4를 이용해 이 명칭을 확인해 보면 좋을 것 같습니다.

A와 A^c랑 만나므로[6] 이들은 A^{bd}에 속합니다. 따라서 $A^a \subset A \cup A^{bd}$이고 $A \cup A^{bd} = \overline{A}$ 이므로 (why?) $A \cup A^a \subset \overline{A}$입니다. 이 두 결과를 종합하면 다음을 알 수 있습니다.

Proposition 4.1.3. $A \cup A^a = \overline{A}$

4.1.3 Basis (*)

우리는 처음에 평면에서 원판들로 열린 집합들을 만들어 내었습니다. 이때, 이러한 원판들을 basis라 합니다.

Definition 28. Basis B는 부분 집합들의 모임으로서 다음을 만족한다.
1) $\emptyset, X \in B$
2) $B_1, B_2 \in B$에 대해, $x \in B_1 \cap B_2 \Rightarrow \exists B_x \in B, B_x \in B_1 \cap B_2$

평면에서 원판들은 두개가 교집합이 있다면 그 교집합이 원소를 포함하는 작은 원판을 그 교집합 안에 넣을 수가 있습니다. 이 성질은 열린 집합을 basis의 합집합으로 정의할 때, 위상의 조건을 만족하기 위해 필수적입니다.

Def. 5를 만족하는 basis B에 대해 이것의 원소들의 합집합을 열린 집합이라 정의한다면 def. 1을 만족해 위상이 얻어 집니다. 이에 대해서는 1.1절의 간략한 설명으로 대체합니다. 이때 만들어진 위상을 T라 하면, T가 B에 의해 생성되었다고(generated) 합니다. 많은 경우에 모든 열린 집합에 대해 확인할 필요 없이 basis에 대해서만 확인을 하면 증명이 완료되는 경우가 있어 간단한 basis를 통해 주어진 위상을 생성할 수 있다면 좋습니다. 대표적으로 원판이라는 간단한 것들로 복잡한 열린 집합들을 만들어 내는 평면이 해당됩니다.

4.1.4 부분 공간 (Subspace) (*)

위상공간 (X, T)가 주어졌을때, 이것의 부분공간이 자연스럽게 존재합니다. A가 X의 부분집합일때, A에 다음과 같이 위상을 줄 수 있습니다.

$$T_A = \{O \cap A | \ O \in T\} \tag{4.3}$$

간단한 집합 연산을 통해 이 T_A가 def. 1을 만족함을 확인할 수 있습니다. 즉, 전체 공간의 위상이 주어져 있다면 부분 집합에 위상이 자연스럽게 정의되고 부분 집합은 위상 공간이 됩니다. 이러한 상속은 위상 뿐만 아니라 거리, norm, 내적, 벡터 연산 등등 모든 공간을 이루는 요소들에 대해 적용이 됩니다.

4.2 연속 (Continuity)

이 절에서는 연속 함수에 대해 알아봅니다. 연속함수는 일반적으로 다루어지는 가장 간단한 형태의 함수 중 하나이므로 매우 중요합니다. 익숙한 연속함수의 정의는 거리가 주어졌을때 가능합니다. 따라서 함수의 연속성에 대해 알아보기 전에 거리부터 정의하고 나아가겠습니다.

[6] A^c랑은 x에서 만납니다.

4.2.1 거리 공간 (Metric Space)

Definition 29. 거리의 정의. 거리 공간 (X, d)에서 거리 $d : X \times X \to \mathbb{R}$는 다음을 만족한다.
1) $d(x, y) \geq 0$
2) $d(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$
3) $d(x, y) = d(y, x)$
4) $d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z)$

거리에서 가장 특이한 것은 4)번 삼각부등식입니다. 이 조건이 있어야지만 우회해서 가는 것이 더 멀다는 것이 성립하여 상식과 일치하는 거리를 얻게 됩니다.
3절 막바지에 norm(크기)에 대해 정의하였습니다. Norm $||\cdot||$가 주어졌을 때, $d(x, y) = ||x - y||$라 정의하면 norm의 조건들을 이용해 def. 6의 조건이 만족됨을 쉽게 확인 가능합니다. 즉, norm이 주어진 노름공간 (normed space)은 거리가 주어진 거리공간 (metric space)가 됩니다. 이때 한가지 중요한 점은 norm은 벡터 공간임을 '전제'한다는 사실입니다. 벡터 공간에서 빼기가 성립하기에 원소의 크기만 재는 norm을 가지고 거리를 정의해 낼 수 있는 것입니다. 한편, 거리라는 것은 더 추상적이라 굳이 원소 간에 연산이 없이도 정의 가능합니다. 즉, 거리공간은 벡터공간을 전제하지 않습니다.

한편 거리가 주어지면 다음과 같이 원판들을 생각해 낼 수 있습니다.[7]

$$B_r(x) = \{y \in X|\ d(x, y) < r\} \tag{4.4}$$

이 익숙한 식은 1.1절 처음 부분에서 등장하였습니다. 거리의 정의를 이용하면 이들이 def. 5를 만족해 basis가 됨을 쉽게 확인 할 수 있습니다. 따라서 이들의 합집합으로 열린 집합을 정의하면 위상이 얻어집니다. 이들은 수식적으로 자연스럽기에 거리공간은 이렇게 얻어진 위상을 지니고 있다고 가정합니다. 따라서 거리공간은 위상공간이 됩니다.

4.2.2 연속 함수

Definition 30. 거리공간 (X, d_x), (Y, d_y)에서 함수 $f : X \to Y$가 $x_0 \in X$에서 연속이라면 다음을 만족합니다.

$$\forall \epsilon > 0,\ \exists \delta > 0\ s.t.\ d_x(x, x_0) < \delta \Rightarrow d_y(f(x), f(x_0)) < \epsilon. \tag{4.5}$$

즉, 아무리 조건 ϵ을 작게 잡아도 x_0의 근방을 작게만 잡으면 이 '근방'에서의 함수값이 $f(x_0)$과 ϵ보다 가까울 때, f가 x_0에서 연속이라고 합니다. 단, 여기서 정의역과 공역이 서로 다른 거리를 사용한다는 점을 유의해야 합니다. 그리고 모든 점에서 연속인 함수를 연속함수라 합니다.

한편 Def. 7은 보다 친숙한 다음과 동치입니다.

Proposition 4.2.1. 거리공간 (X, d_x), (Y, d_y)에서 함수 $f : X \to Y$가 $x_0 \in X$에서 연속임은 다음과 동치이다.[8]

$$x_n \to x_0\ as\ n \to \infty\ \Rightarrow\ f(x_n) \to f(x_0)\ as\ n \to \infty \tag{4.6}$$

[7] 비유적으로 원판이라는 것이지 실제로 생김새가 원판이라는 것은 아닙니다.
[8] $x_n \to x_0\ as\ n \to \infty$는 $lim_{n\to\infty} d(x_n, x_0) = 0$임을 의미합니다.

Proof. 1) Def. 7 ⇒ prop. 2.1. 대우 명제를 생각하면, $\{f(x_n)\}$이 $f(x_0)$로 수렴하지 않는 x_0로 수렴하는 $\{x_n\}$이 있을 때, (5)가 성립하지 않음을 보이면 됩니다. $\{f(x_n)\}$이 $f(x_0)$로 수렴하지 않는다는 것은 어떤 $\epsilon > 0$이 있어서, $d_y(f(x_0), f(x_{n_k})) > \epsilon$인 n_k가 무한히 많음을 의미합니다. 한편, $\{x_n\}$이 x_0으로 수렴하므로 $\{x_{n_k}\}$ 또한 x_0로 수렴합니다. 따라서 아무리 δ를 작게 잡아도, $d_x(x_{n_k}, x_0) < \delta$인 x_{n_k}가 있으므로 (5)가 성립하지 않습니다.

2) prop. 2.1 ⇒ Def. 7. 마찬가지로 대우명제를 보일 수 있습니다. (5)가 성립하지 않는다면 어떤 $\epsilon > 0$이 있어서, 각 $n \in \mathbb{N}$마다 $d_x(x_n, x_0) < 1/n$, $d_y(f(x_n), f(x_0)) \geq \epsilon$인 x_n이 있습니다. 이 $\{x_n\}$은 (6)이 성립하지 않는 예이므로 대우명제가 성립합니다. □

연속은 두 가지로 표현가능함을 확인하였습니다. 한편 prop. 2.1의 경우 거리가 없는 위상공간으로 확장하기엔 def. 7보다 어렵습니다.[9] 반면 def. 7은 다음과 같이 자연스럽게 위상공간에서 연속성으로 확장 됩니다.

Definition 31. 위상공간 (X, T), (Y, S)에서 함수 $f : X \to Y$가 $x_0 \in X$에서 연속이라면 다음을 만족합니다. 이때 X안의 x의 open neighborhood는 O_x라 표기하고 Y안의 $f(x)$의 open neighborhood는 $U_{f(x)}$라 표기하겠습니다.

$$\forall U_{f(x_0)},\ \exists O_{x_0}\ s.t.\ x \in O_{x_0} \Rightarrow f(x) \in U_{f(x_0)}. \tag{4.7}$$

즉, $f(x_0)$에서 어떠한 근방을 잡더라도, x에서 충분히 작은 근방이 있어서 이 근방에서 함수 값이 주어진 $f(x_0)$의 근방 안에 들어간다는 것을 의미합니다.

똑같이 모든 점에서 연속인 함수를 연속함수라 합니다. 이때 연속함수는 다음과 동치입니다.[10]

Proposition 4.2.2. 위상공간 (X, T), (Y, S)에서 함수 $f : X \to Y$가 연속이라면

$$\forall U \in S,\ f^{-1}(U) \in T \tag{4.8}$$

Proof. 1) Def. 8 ⇒ prop. 2.2. Y의 열린 집합 U에 대해, $f^{-1}(U)$의 원소 x를 생각합시다. Def. 8에 의한 연속함수는 (7)을 만족하고 역상의 정의에 의해 $f(x) \in U$이므로, 어떤 O_x가 있어서 $f(O_x) \subset U$입니다. 다시 역상의 정의에 의해 $O_x \subset f^{-1}(U)$입니다. 따라서

$$f^{-1}(U) = \bigcup_{x \in f^{-1}(U)} \{x\} \subset \bigcup_{x \in f^{-1}(U)} O_x \subset f^{-1}(U) \tag{4.9}$$

가 성립하여 $f^{-1}(U)$가 열린 집합임을 알 수 있습니다.

2) Prop. 2.2 ⇒ Def. 8. f가 Prop. 2.2를 만족한다면 임의의 $U_{f(x_0)}$에 대해 $f^{-1}(U_{f(x_0)})$가 X에서 열린 집합입니다. $f^{-1}(U_{f(x_0)})$를 (7)에서 O_x라 여기면 $f(O_x) = f(f^{-1}(U_{f(x_0)})) \subset U_{f(x_0)}$이므로 (7)이 성립합니다.[11] □

[9] 물론 가능은 합니다. 다만 index가 자연수가 아니라 더 복잡해집니다. Prop. 2.1에서 index가 자연수인 이유는 metric space에서 basis가 자연수 n에 대해 $B_{1/n}(x)$으로도 충분하다는 사실에 기인합니다.

[10] 역상 $f^{-1}(B)$의 정의는 1장을 참조. 함수값이 B에 속하는 모든 원소들을 모아놓은 것을 의미합니다.

[11] 맨 마지막 포함관계는 역상의 정의에 의해 자명합니다. 함수값이 어떤 집합에 속하는 원소들을 다시 함수에 넣으면? 이때 전사가 아닌 경우 처음 집합이 다 못 얻어질 수 있습니다.

식이 놀랍게도 간결해졌습니다. 즉, 연속함수는 열린 집합의 역상이 열린 집합인 함수 입니다. 이러한 연속함수는 X에서의 몇 가지 성질을 보존하는데 그중 하나가 compact입니다.

4.3 Compact set

Definition 32. Compact set. 위상공간 (X, T)에서 compact 집합 A는 다음을 만족한다.
임의의 열린 덮개 (open cover) $\{O_i\}_{i\in I}$ (i.e. $A \subset \cup_i O_i$)에 대해 유한 열린 덮개가 존재한다. 즉, $\{O_n\}_{n=1,\ldots,N} \subset \{O_i\}_{i\in I}$ & $A \subset \cup_{n=1}^{N} O_n$.

이러한 정의는 굉장히 비직관적인데 위상공간이 아닌 좀 더 구체적인 공간에서는 보다 직관적으로 표현 가능합니다. 이를 다루기에 앞서 compact가 지니는 좋은 성질 중 하나를 소개하고자 합니다.

Proposition 4.3.1. 위상공간 (X, T), (Y, S)과 연속함수 $f : X \to Y$에 대해 A가 (X, T)에서 compact set이라면, f(A)는 (Y, S)에서 compact set이다.

Proof. f(A)의 열린 덮개 $\{U_i\}_{i\in I}$가 주어졌다고 합시다. 이때 역상의 정의에 의해 $A \subset f^{-1}(f(A))$이고 연속함수의 성질에 의해 $f^{-1}(U_i)$는 열린 집합입니다. $f(A) \subset \cup_i U_i$이므로 $A \subset f^{-1}(f(A)) \subset f^{-1}(\cup_i U_i) = \cup_i f^{-1}(U_i)$입니다.[12] 따라서 $\{f^{-1}(U_i)\}_{i\in I}$는 A의 열린 덮개입니다. A가 compact이므로 이들 중 유한 덮개가 존재하고 이를 $\{f^{-1}(U_n)\}_{n=1,\ldots,N}$이라 하면, $f(A) \subset f(\cup_n f^{-1}(U_n)) = \cup_n f(f^{-1}(U_n)) \subset \cup_n U_n$이 되어 처음 주어진 $f(A)$의 열린 덮개에서 유한 덮개가 존재합니다. □

4.3.1 유클리드 공간의 Compact Set

유클리드 공간의 compact set은 닫히고 유계인 집합과 동치입니다. 이때 집합이 유계임은 어떤 $r > 0$에 대해, 집합이 $B_r(0)$에 포함됨을 의미합니다.

Theorem 4.3.2. Heine-Borel Theorem. 유클리드 공간에서 compact set은 닫히고 유계임과 동치이다.

Proof. 증명은 해석이나 위상 교재에서 쉽게 찾을 수 있습니다. 증명 방법은 $\mathbb{R}$에서 [a,b]가 compact임을 보이고 이를 확장합니다. Compact set의 closed set은[13] compact라는 성질과 거리공간에서 compact는 closed라는 사실을 이용하면 보일 수 있습니다. 이들에 관한 증명 또한 간단하게 확인가능하지만 여기서는 명제만 강조하고 생략하겠습니다. □

닫히고 유계인 집합의 예로 닫힌 box가 있습니다. 1차원에서는 닫힌 구간, 2차원에서는 닫힌 직사각형 등이 compact set의 예입니다.

Prop. 3.1에 의해 다음이 성립합니다.

[12] 역상은 전사, 단사로 경우를 나누어 포함관계나 합집합, 교집합이 어떻게 변하는지 각자 확인해볼 필요가 있습니다. 혹은 1장을 참조하시길 바랍니다.

[13] compact set안에 포함되는 closed set을 의미합니다. 부분공간이 상속받는 위상의 정의에 따라 이 closed set은 compact set 자체의 위상에서도 closed입니다.

Theorem 4.3.3. 연속함수 $f : X \to \mathbb{R}$에 대해, A가 X의 compact set이라면, $f(A)$는 최댓값이랑 최솟값을 지닌다.

Proof. Prop. 3.1에 의해 $f(A)$는 $\mathbb{R}$의 compact set입니다. Heine-Borel 정리에 의해 $\mathbb{R}$에서 compact set는 유계이므로 $supf(A)$가 존재합니다.[14] 만약 $f(A)$가 최댓값을 지니지 않는다면, 이는 $supf(A)$가 $f(A)$의 원소가 아님을 의미합니다. 이때, $supf(A)$의 정의상 임의의 ϵ에 대해 $a \in f(A)$가 있어서 $0 < supf(A) - a < \epsilon$을 만족합니다. 따라서 $supf(A)$는 $f(A)$의 accumulation point가 됩니다. 하지만 $f(A)$는 compact이므로 닫힌집합이고 prop. 1.2와 prop. 1.3에 의해 모든 accumulation point를 지녀야 합니다. 따라서 모순이 발생하였으므로 $f(A)$는 최댓값을 지닙니다. 최솟값도 동일하게 확인 가능합니다. □

Compact set이 닫히고 유계임과 동치라는 사실은 유클리드 공간의 특별한 성질들에 의해 성립하는 것입니다. 보다 일반적인 거리공간에서는 compact는 살짝 다르게 표현 가능합니다.

4.3.2 거리공간의 Compact Set (*)

Proposition 4.3.4. 거리공간 (X,d)에서 부분집합 A에 대해 다음의 명제들은 서로 동치이다.
1) A는 compact set.
2) A는 complete하고 totally bounded
3) A안의 임의의 무한 수열은 A안에서 수렴하는 부분수열을 가진다.

이때, Totally bounded는 임의의 양수 r이 주어졌을때 유한개의 $B_r(x_n)$으로 A를 덮을 수 있음을 의미합니다.[15] 그리고 3)의 성질을 *sequentially compactness*라 부릅니다.

본 명제에 대한 증명은 다른 교재들로 대체를 하고 명제에 대해 직관적인 해석만 덧붙이겠습니다. 이를 위해서 compact의 정의를 살짝 바꾸어 보아야 합니다. Def. 9에서 여집합을 취해서 명제를 닫힌 집합들로 표현을 하려고 합니다. 이때, 전체 공간을 X가 아닌 주어진 compact set A로 바꾸면 표기가 간결해집니다. 이를 위해서 다음을 확인할 필요가 있습니다.

Proposition 4.3.5. 위상공간 (X, T)에서 compact set A는 (A, T_A)에서도 compact이다.

Proof. (A, T_A)의 열린 집합 O_A는 어떤 X의 열린 집합 O가 있어서 $O_A = O \cap A$입니다. 따라서 (A, T_A)의 열린 덮개에 대응되는 (X, T)에서의 A의 열린 덮개가 있고, A가 (X, T)에서 compact라면 이들 중 유한 덮개가 있으므로 A가 (A, T_A)에서 compact임을 알 수 있습니다. □

따라서 X의 compact set A는 A의 compact set으로 봐도 무방합니다. 이때, (A, T_A)안의 A의 열린 덮개 $\{O_i\}_{i\in I}$는 $A = \cup_i O_i$를 만족합니다. 따라서 여기에 여집합을 취하면 (여기선 A가 전체집합)

[14] 상한의 존재는 공리로 받아들입니다. 참고로 상한의 존재성은 실수의 코시수열의 수렴성과 동치입니다. 한 가지 강조할 점은 f(A)의 상한은 f(A)에 속할 필요가 없다는 것 입니다. 하지만 최댓값은 f(A)의 원소여야 합니다. 예를 들어 $\{1 - 1/n\}_{n\in\mathbb{N}}$의 경우 상한은 1입니다. 하지만 1이 이 집합에 속하진 않으므로 이 집합의 경우 최댓값을 지니지는 않습니다.

[15] 참고로 totally bounded이면 bounded이지만 그 역은 성립하지 않습니다. 이는 비자명한데, 다소 인위적으로 거리를 주면 됩니다. 예를 들어 무한 집합 X에 모든 서로 다른 원소간의 거리를 1/2로 주면 X는 $B_1(0)$에 포함되지만, $r = 1/4$에 대해 totally bounded하지 않습니다.

$\cap_i(A - O_i) = \emptyset$가 됩니다. 즉, 덮개는 여집합의 교집합이 공집합임을 의미합니다. $A - O_i$는 (A, T_A)에서 닫힌 집합이므로 def. 9의 대우명제는 다음과 같습니다.

Proposition 4.3.6. Finite intersection property. X의 compact A는 다음을 만족한다. (A, T_A)에서 임의의 닫힌 집합들의 모임 $\{F_i\}_{i \in I}$에 대해, 임의의 유한 교집합 $\{F_n\}_{n=1,\ldots,N}$이 $\cap_{n=1,\ldots,N} F_n \neq \emptyset$를 만족하면 $\cap_{i \in I} F_i \neq \emptyset$이다.

이제 준비는 다 끝났습니다. Prop. 3.4를 살펴봅시다. A가 compact라면 totally bounded 임은 $\{B_r(x)\}_{x \in A}$가 A의 열린 덮개이고 이들 중 유한 덮개가 있으므로 totally bounded가 성립합니다. Compact의 유한 덮개가 존재한다는 정의는 유계(bounded)보다는 totally bounded와 자연스럽게 연결이 됩니다.

Completeness는 prop. 3.6으로 부터 확인가능합니다. 이는 A안의 코시수열이 A안에서 수렴함을 보이면 됩니다. 한편, 코시수열 $\{a_n\}_{n=1,\ldots}$은 정의로부터 두 점 간의 거리가 유계이므로 두 점간의 거리가 유계인 어느 닫힌 집합 F_1안에 넣을 수 있습니다. 그리고 k번째 부터의 수열 $\{a_n\}_{n=k,\ldots}$는 더 '축소'된 닫힌 집합 F_k안에 넣을 수 있습니다. 코시 수열은 서로 가까워지므로 k가 커짐에 따라 F_k의 두 점간 거리의 상한이 0으로 점점 작아지게 F_k들을 잡을 수 있습니다. 이렇게 얻어지는 $\{F_k\}_{k=1,\ldots}$에 대해 prop. 3.6을 적용하면 코시수열이 수렴함을 확인가능합니다. Compact와 completeness간에는 연관이 있다는 정도만 느끼면 좋을 것 같아서 이렇게 말로 대충 때웠는데 오히려 더 어려워 보이는 것 같습니다. 자세한 증명은 Royden-real analysis의 compact space장에서 제시되어 있습니다.

끝으로 sequentially compactness는 completeness와 totally boundness로 부터 쉽게 확인 가능합니다. 이는 A안의 무한 수열 $\{a_n\}_{n=1,\ldots}$이 수렴하는 부분수열을 지님을 의미하는데, totally boundness로부터 A를 유한개의 $\{B_1(x_n)\}_{n=1,\ldots,N}$, $x_n \in A$로 덮을 수 있고 이들 덮개 중 하나는 $\{a_n\}_{n=1,\ldots}$ 중에 무한히 많은 원소를 포함합니다. 그 열린 집합을 $B_1(x_1)$이라 한다면 $B_1(x_1) \cap A$안에 무한히 많은 $\{a_{n_k}\}$가 들어갑니다. A가 totally bounded이므로 $B_1(x_1) \cap A$도 totally bounded이고 이번에는 반경을 1/2로 줄여서 유한 덮개를 찾고 그 중 $\{a_{n_k}\}$의 원소가 무한히 많이 들어가는 열린 집합이 있고 ... 이를 계속 반복합니다. 그럼 $\{a_n\}$의 부분수열 중에 코시수열을 찾을 수 있습니다. 그리고 completeness로부터 이들의 수렴성이 보장이 되어 sequentially compactness가 증명됩니다.

만약 compact를 처음 접하면 혼란스러울 것 같습니다. 만약 관심이 있다면 교재를 찬찬히 보고 이 내용을 보면 정리하는데 도움이 될 것 같습니다.

Chapter 5

측도와 확률

이번 장에서는 집합의 길이(크기)를 재고 집합에서 실수로 가는 함수의 넓이를 재는 걸 다룹니다. 사실 앞에서 다루었던 미분, 선형변환, 위상보다 직관적인 개념이라 생각됩니다. 그럼에도 뒤에 등장해야만 하는 이유가 있는데, 엄밀하게 기술하기 위해선 앞에서 다룬 추상적이지만 기초적인 개념들이 요구되기 때문입니다. 물론 추상적인 개념 없이 측도를 정의할 수 있지만, 적용 범위가 작아지고 구체적이라 복잡해집니다.

측도론을 다루는 책으로 Royden-real analysis와 Rudin-Real and complex analysis가 있습니다. 전자는 직관적이고 친절하여 처음 읽기 좋지만 반복적이고 정리가 오히려 잘 안됩니다. 후자는 추상적이지만 좀 더 본질적인 것을 포착하기에 좋은 접근을 유지합니다.

길이를 재는 것은 넓이를 잴 수 있게 하고 이는 함수간 거리를 의미하여 함수공간을 다룰 수 있게 합니다. 또한 전체 길이가 1인 측도는 확률로 해석이 가능하여 확률론의 근간을 이룹니다. 이번 장에서는 약간의 추상적인 내용을 다룬 뒤 많이 쓰이는 확률 분포의 reparameterization, 미분과 적분(기댓값)의 순서교환 등에 익숙해 지는 것이 목표입니다.

5.1 측도 (Measure)

이 장에서 목적은 집합의 크기를 재는 것입니다. 만약 집합이 실수라면 이는 선의 일부분의 크기를 재는 것과 같습니다. 다만, 여기서 크기란 '자'로 재는 길이처럼 평행 이동에 영향을 받지 않는 것 뿐만 아니라, 평행이동하면 크기가 달리지는 보다 일반적인 경우를 의미합니다. 이때, 크기라는 개념이 만족해야할 성질은 서로 겹치지 않는 집합들의 크기의 합은 합집합의 크기와 같다는 것입니다. 이 조건을 만족하는 집합의 크기 함수를 측도 (measure)라 합니다.

즉, 측도 μ는 서로 교집합이 공집합인 부분 집합들의 모임 $\{A_n\}_{n=1,\ldots}$에 대해

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mu(A_n) = \mu(\cup_{n=1}^{\infty} A_n) \tag{5.1}$$

을 만족해야 합니다. 이러한 측도 중 가장 친숙한 것은 유클리드 공간에서 1차원-길이, 2차원-넓이, 3차원-부피를 재는 측도입니다. 이들은 평행이동에 불변(invariant)입니다. 놀라운 사실은 유클리드 공간

에서 모든 부분집합의 크기를 잴 수 있으면서 평행이동에 불변인 측도는 존재하지 않는 다는 것입니다.

이는 개략적으로 다음의 관찰을 통해 확인 가능합니다. 1차원 유클리드 공간을 예로 들면, 우선 [0,1]의 실수들에 반을 배정을 합니다. 이때, 두 수가 같은 반에 들어간다면 두 수의 차이는 유리수여야 하고 반대로 차이가 유리수면 같은 반이어야 합니다. 이러한 조건을 만족하도록 [0,1]안의 모든 실수들에 반을 부여할 수가 있습니다.[1] 그 뒤에 각 반에서 반장을 뽑습니다. 이 선출과정은 선택 공리(axiom of choice)에 의해 가능합니다. 이제 반장들의 모임을 A라고 합시다. 여기서 수들은 0과 1사이이고 반을 만든 과정에 의해, 특정 반의 수들은 그 반의 반장을 [0,1]사이의 유리수만큼 평행이동을 시킴으로서 모두 얻어집니다. 따라서 $B = \cup_{q\in\mathbb{Q}\cap[-1,1]}(A+q)$은[2] [0,1]의 모든 수들을 포함함을 알 수 있습니다. 또한 B는 [-1,2]에 포함됨을 알 수 있습니다. 이때 $\{A+q\}_{q\in\mathbb{Q}\cap[-1,1]}$들은 서로 교집합이 없지만[3] 평행이동을 통해 서로 정확히 겹쳐집니다. 그렇다면 A의 크기는 몇이어야 할까요? 양수라면 B는 크기가 무한대가 됩니다. 이는 곧 [-1,2]의 크기가 무한대임을 의미합니다. 반대로 크기가 0이라면 B의 크기가 0이 되고 이는 [0,1]의 크기가 0임을 의미합니다. 결국 선택 공리가 성립한다면, 우리의 실수에서의 '자'는 존재할 수 없습니다.

다소 비직관적인 결과입니다. 이는 선택 공리가 비자명함을 의미함과 동시에 실수라는 것이 생각보다 직관적이지 않고 심오한 것임을 알려줍니다. 이러한 문제로 어떤 집합의 모든 부분집합의 크기를 재는 것은 어렵습니다. 따라서 집합에서 일부 부분집합들의 크기를 재는것이 최선입니다. 이때 우리는 측도의 개념적인 특성 상, 귀납적으로 셀 수 있는 자연수 개의 합집합에 대해 측도가 (1)을 만족하기를 원하므로 잴 수 있는 집합 (measurable set)은 다음을 만족해야합니다.

Definition 33. σ-Algebra. 집합 X의 부분집합들의 모임 Ω가 $\emptyset$, $X\in\Omega$이면서 $A_n\in\Omega$에 대해

$$1)A_n^c \in \Omega, \quad 2)\bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \Omega \tag{5.2}$$

를 만족하면, Ω를 σ-Algebra라 부른다.

즉, 이는 측도를 정의하기 위해 필요한 부분 집합들의 모임에 대한 조건입니다. 이를 이용해 측도는 다음과 같이 정의됩니다.

Definition 34. 측도 μ. 집합 X의 σ-Algebra Ω에 대해, 측도 $\mu:\Omega\to[0,\infty]$는 다음을 만족한다.
1) $\mu(\emptyset)=0$
2) $\sum_{n=1}^{\infty}\mu(A_n)=\mu(\cup_{n=1}^{\infty}A_n)$, for $A_n\in\Omega$ are disjoint (i.e $A_n\cap A_m=\emptyset$)

이때, (X,Ω,μ)를 세트로 모아 measure space라 부릅니다. 그리고 Ω의 각 원소는 측도(measure) μ에 의해 크기가 주어지므로 measurable set이라 부릅니다.

5.2 적분 (Integration)

이제 measure space (X,Ω,μ)에 대해 $f:X\to\mathbb{R}$을 생각해 봅시다. 우리는 구분구적법을 통해 계산하는 리만적분보다 더 멋진 적분법을 알아보려 합니다. 리만적분의 문제점은 체계화하기 어렵다는 것입

[1] 이러한 작업을 partition이라 합니다.
[2] A+q는 집합 A의 각 원소에 q들을 모두 더한 집합을 의미합니다.
[3] A는 반장들의 모임이고 차이가 유리수면 한 반이므로 각 반장의 차이는 유리수일 수 없습니다.

니다. 좀 더 쉬운 이유는 리만 적분은 적분가능한 함수들의 범위가 너무 작다라는 것입니다. 대표적인 예로 $f:[0,1] \to \mathbb{R}$, $f(x)=1$ when $x \in \mathbb{Q}$, else $f(x)=0$의 경우, 구분구적법으로 넓이를 잴 수 없습니다. 반면 이를 구분구적법처럼 세로로 잘라보는 것이 아닌 가로로 잘라 본다면 넓이를 $\mu(\mathbb{Q})$로 자연스럽게 정의할 수 있음을 알 수 있습니다.

우선 가장 간단한 치역이 유한한 경우를 살펴 봅시다. 치역을 $\{a_n\}_{n=1,\ldots,N}$이라 할 때, 임의의 X의 점에서의 함수값은 이들 중 하나의 값입니다. 만약 $f^{-1}(a_n)$들이 measurable하다면 다음과 같이 넓이를 정의할 수 있습니다.

Definition 35. Simple function. Measure space (X,Ω,μ)의 simple function $f:X\to\mathbb{R}$는 치역이 유한하고 이를 $\{a_n\}_{n=1,\ldots,N}$이라 할 때, $f^{-1}(a_n)\in\Omega$.

Definition 36. Integration of Simple function. Def. 3과 같은 설정에서 f의 넓이를 다음과 같이 표기하고 정의한다.

$$\int f d\mu = \sum_{n=1}^{N} a_n \mu(f^{-1}(a_n)). \tag{5.3}$$

이는 세로로 가른 뒤, 정의역에서의 크기를 재고 높이를 곱한 다음 다 합친 것에 불과합니다. 이 표기는 f와 μ가 X에서 정의된 것들이라는 것을 사전에 명확히 표기해 주어야 합니다. 본문에서는 적분 영역을 생략하여 $\int_X$를 $\int$로 표기합니다. X의 부분 집합에서 적분을 하면 반드시 첨자를 적어주어야 합니다. 그리고 때로 표기가 복잡해 혼란스러울 수 있는 경우는 $\int f(x)d\mu(x)$와 같이 표기하기도 합니다.

다음으로 simple function들을 이용해 복잡한 함수의 넓이를 정의할 차례입니다. 만약 $f(x)\geq g(x)$, for $\forall x\in X$라면 간략히 $f\geq g$이라 표기합니다. 이때 $f\geq 0$의 경우 $f\geq s\geq 0$인 simple function s들을 f와 최대한 가깝게 만듬으로서 f의 적분값을 근사적으로 구할 수 있습니다. 예를 들어, X가 실수라면 f와 x축 간의 영역을 simple function들로 쌓아 올리면서 넓이를 근사하겠다는 것을 의미합니다. 이때 simple function으로 근사를 하는 것이 가능하려면 f가 추가적인 성질을 만족해야 합니다.

Definition 37. Measurable function. Measure space (X,Ω,μ)에 대해 measurable function $f:X\to\mathbb{R}$은 $\forall$*open set* $O\in\mathbb{R}$에 대해, $f^{-1}(O)$가 measurable이다.

만약 f가 measurable function이라면, $f^{-1}(O)$가 measurable이고 def. 1에 의해, $f^{-1}(O)^c$ 또한 measurable입니다. $f^{-1}(O)^c = f^{-1}(O^c)$이므로 임의의 closed set $C\in\mathbb{R}$에 대해 $f^{-1}(C)$가 measurable입니다. 즉 $f^{-1}([a,b-\frac{1}{n}])$이 measurable이고 다시 def. 1에 의해 $\cup_{n=1,\ldots}f^{-1}([a,b-\frac{1}{n}]) = f^{-1}(\cup_{n=1,\ldots}[a,b-\frac{1}{n}]) = f^{-1}([a,b))$가 measurable임을 알 수 있습니다. 이와 같이 open set에 대해서만 역상이 measurable임을 정의하면 부수적으로 많은 집합들의 역상이 measurable임을 알 수 있습니다.

왜 이런 measurable function이라는 조건이 필요한지 알아보겠습니다. 르벡적분의 관점은 가로로 가른 뒤 적분을 하는 것입니다. 이런 관점에서 $f\geq 0$의 넓이는 $\sum_{n=0}^{N-1}\frac{n}{m}\mu(f^{-1}([\frac{n}{m},\frac{n+1}{m}))) + \frac{N}{m}\mu(f^{-1}([\frac{N}{m},\infty)))$로 근사할 수 있습니다. 이때, $f^{-1}([\frac{n}{m},\frac{n+1}{m}))$와 $f^{-1}([\frac{N}{m},\infty)$가 measurable이어야 μ에 의해 크기가 재어져야 계산이 가능하므로 최소한으로 open set들의 역상에 대해서만 조건을 부여한 것입니다.

Definition 38. Integration of $f\geq 0$. Measure space (X,Ω,μ)의 measurable function $f:X\to\mathbb{R}$가 $f\geq 0$일 때,

$$\int f d\mu = \sup\{\int s\ d\mu |\ s\ is\ simple\ function,\ f\geq s\geq 0\} \tag{5.4}$$

로 정의한다.

즉, f보다 아래에 있는 simple function들의 넓이의 상한으로 f의 넓이를 정의합니다. 무한대도 포함하여 생각한다면 상한은 임의의 실수 부분집합에 대해 항상 존재합니다. 일반적인 함수 f는 $f^+(x) = max(f(x), 0)$과 $f^-(x) = -min(f(x), 0)$으로 쪼개어 생각합니다. 이러면 $f^+ \geq 0$이고 $f^- \geq 0$입니다. 또한 $f = f^+ - f^-$가 됨을 알 수 있습니다. 따라서 f의 넓이는 다음과 같이 정의할 수 있습니다.

Definition 39. Integration of f. Measure space (X, Ω, μ)의 measurable function $f : X \to \mathbb{R}$의 f^+와 f^-의 def. 5에 의한 적분이 유한하다면,

$$\int f d\mu = \int f^+ d\mu - \int f^- d\mu \tag{5.5}$$

로 정의한다.

Def. 5의 조건을 만족하는 함수는 적분값이 유한함을 알 수 있습니다. 이와 같이 적분값이 유한한 함수를 *integrable*하다고 합니다. 여태의 과정처럼 simple function들을 통해 함수의 적분을 정의하고 나면, 다음의 좋은 정리들이 성립합니다. 여태까지의 정의 설계는 다음의 정리들을 미리 염두해두고 만들어진게 아닐까 생각도 듭니다.

Theorem 5.2.1. Monotone convergence thm (MCT). Measure space (X, Ω, μ)의 measurable function $f_n : X \to \mathbb{R}$들이 $0 \leq f_1 \leq f_2 \leq ...$을 만족하고 $lim_{n\to\infty} f_n(x) = f(x)$라면, f는 measurable function이고

$$\int f d\mu = \lim_{n\to\infty} \int f_n d\mu \tag{5.6}$$

이 성립한다.

즉, 양수 값을 지니는 measurable함수의 적분값은 아래에서 함수들을 올려가며 적분함으로써 근사적으로 얻어낼 수 있습니다. 한편 양수가 아닌 함수의 경우 다른 제약이 요구되어야만 근사 가능합니다.

Theorem 5.2.2. Lebesgue dominated convergence thm (DCT). Measure space (X, Ω, μ)의 measurable function $f_n : X \to \mathbb{R}$들이 어떤 integrable function $g \geq 0$에 대해 $|f_n| \leq g$를 만족하고 $lim_{n\to\infty} f_n(x) = f(x)$라면,

$$\int f d\mu = \lim_{n\to\infty} \int f_n d\mu \tag{5.7}$$

이 성립한다.

위 정리들의 증명은 제가 개요에 적어 놓은 교재에서 발견하실 수 있습니다. 이렇게 함수들의 적분값으로 어떤 함수의 적분값을 근사하는 것을 이용하면

$$\frac{d}{d\theta} \int f(x, \theta) dx = \int \frac{d}{d\theta} f(x, \theta) dx \tag{5.8}$$

을 보이는 것이 가능합니다.[4] 물론 위의 정리들을 이용해야 하므로 주어진 조건들을 만족할 때만 식이

[4]저 dx는 다음 절에서 살펴봅니다.

성립합니다. 이에 대해 개략적인 설명을 덧붙이면,

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta}\int f(x,\theta)dx\Big|_{\theta_0} &= \lim_{n\to\infty}\frac{\int f(x,\theta_0+1/n)dx - \int f(x,\theta_0)dx}{1/n} \\ &= \lim_{n\to\infty}\int\frac{f(x,\theta_0+1/n)-f(x,\theta_0)}{1/n}dx = \lim_{n\to\infty}\int h_n dx \end{aligned} \tag{5.9}$$

이 성립하고 h_n을 이용해 간략히 표기하도록 하겠습니다. 이때 미분의 정의에 의해

$$\lim_{n\to\infty} h_n(x) = \frac{d}{d\theta}f(x,\theta)\Big|_{\theta_0} \tag{5.10}$$

가 성립합니다. 따라서

$$\lim_{n\to\infty}\int h_n dx = \int \lim_{n\to\infty} h_n dx \tag{5.11}$$

이 성립한다면 θ_0에서 식 (8)이 성립하게 됩니다. 식 (11)은 일반적으로 DCT를 이용해 입증하며 이를 위해선 h_n들을 bound하는 integrable 함수가 있음을 보이면 됩니다. 이는 도함수가 과격하게 변하지 않고 정의역의 무한히 넓지 않으면 일반적으로 성립합니다.

끝으로 DCT의 조건이 만족되지 않는 경우 lim이 적분을 통과하지 않는 예를 소개합니다. $f_n(x) = 1$ for $x \in [n, n+1]$ else 0인 함수열 $\{f_n\}$을 생각합시다. 이때 $\lim_{n\to\infty} f_n = 0$임을 바로 확인할 수 있습니다. 하지만 모든 n에 대해 $\int f_n d\mu = 1$이므로 식 (7)이 성립하지 않습니다.

5.3 Lebesgue Measure (*)

앞의 절들에서는 일반적인 측도를 다루었습니다. 우리에게 가장 친근한 측도는 유클리드 공간에서 1차원-길이, 2차원-넓이 ...를 재는 측도들일 것입니다. 이러한 측도를 르벡 측도라 합니다. 구체적으로 르벡 측도는 단위 큐브의 크기를 1로 측정하며 평행에 불변합니다. 문제는 맨 처음에 설명하였듯 모든 유클리드 공간에서 모든 부분집합의 크기를 재는 르벡 측도는 없습니다. 따라서 르벡 측도가 측정가능한 σ-algebra를 최대한 밝혀내는 것이 중요합니다.

다행이도 르벡 측도는 열린 집합들을 측정 가능합니다. 즉, 르벡 측도의 measurable set들의 집합을 Ω라 하였을 때, Ω는 열린 집합들을 포함합니다. 이것을 정확히 서술하는 것은 책을 통해 찬찬히 개념들을 정리한 뒤에 하는 것이 좋다고 생각합니다. 여기서는 개략적으로만 부연 설명을 하면, 크게 두 가지 접근이 가능합니다.

첫째로는 실수를 예로 들면 열린 구간 (a,b)의 길이를 b-a로 정의하고 이를 이용해 보다 일반적인 집합의 길이를 정의하는 방식이 있습니다. 이는 논리적으로는 쉬우나 구체적인 공간들에서 시작하므로 일반적인 공간에 적용하기에 어려움이 있을 수 있습니다. 둘째로는 *Rietz representation*라는 해석학의 cornerstone과 같은 정리를 이용하는 것입니다. 이는 X안에서 compact support를[5] 가지는 연속함수들의 집합을 $C_c(X)$라 할때, $C_c(X)$에서 $\mathbb{R}$로 가는 임의의 선형함수는 X에서 정의되는 어떤 측도와 대응된다는 것을 말합니다. 이때 이렇게 공간에서 실수값을 가지는 선형함수를 linear functional이라고 부르기도 합니다.

Theorem 5.3.1. Reitz representation thm. 보다 엄밀한 조건이 요구되지만 생략하고 결과만 서술하면 다음과 같습니다. 선형함수 $\phi : C_c(X) \to \mathbb{R}$가 주어졌을때, X의 모든 열린집합을 포함하는 σ-algebra

[5]support는 함수$f : X \to \mathbb{R}$의 값이 0이 아닌 영역(X의 부분집합)을 포함하는 가장 작은 닫힌집합을 의미합니다.

Ω와 여기서 정의되는 측도 μ가 있어서 다음이 성립합니다.

$$\phi(f) = \int f d\mu. \tag{5.12}$$

$C_c(\mathbb{R}^n)$에서 $\mathbb{R}$로 가는 함수의 대표적인 예는 리만 적분이 있습니다. 즉, 리만 적분은 support가 compact한 연속함수를 어떤 실수값으로 대응시키는 선형함수로 해석가능합니다. Rietz representation에 의하면 이 리만적분 선형함수(functional)에 대응되는 측도와 σ-algebra 있고 이를 르벡 측도로 정의함으로써 원하는 것을 얻어낼 수 있습니다. 이때, Reitz representation theorem은 열린 집합이 measurable set임을 보장하여 르벡 측도는 충분히 많은 부분 집합들을 측도하도록 정의됩니다. 또한 이 르벡 측도는 리만 적분으로 정의되는 ϕ에 대해 식 (12)를 만족합니다. 따라서 이렇게 얻어지는 르벡 측도로 정의되는 적분은 리만 적분과 일치합니다.

이렇게 얻어지는 르벡 측도를 보통은 m으로 표기하며 적분 기호 안의 dm은 관습적으로 dx로 표기합니다.

$$\int f dm = \int f dx \tag{5.13}$$

5.4 Application

5.4.1 Probability Measure

$\mathbb{R}^n$에서 확률 변수 X가 주어졌다고 합시다. 이때, 전체 확률 $P(X \in \mathbb{R}^n)$의 값은 1입니다. 우리가 직관적으로 가지고 있는 확률은 $\mathbb{R}^n$의 부분집합의 크기를 재는 측도로 생각할 수 있습니다. 즉, $P(X \in A) = \mu(A)$와 같이 측도로 생각가능합니다. 이러한 관찰에 힘입어 체계적인 측도에 관한 이론을 확률에 가져와 사용합니다. 그리고 때론 '확률 측도'라는 표현을 사용하면서 확률을 측도로서 정의하기도 합니다.

$\mathbb{R}^n$은 $\mathbb{R}$의 단순 확장이므로 $\mathbb{R}$에 대해서 몇가지 더 알아봅니다. $\mathbb{R}$에서의 확률 변수 X로부터 얻어지는 측도를 μ라 하면 기댓값은 다음과 같이 정의됩니다.

Definition 40. Expectation. $\mathbb{R}$에서의 확률 변수 X의 측도 μ가 주어졌을때, X의 기댓값은

$$EX = \int x d\mu \tag{5.14}$$

로 정의한다.[6] 그리고 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$에 대해,

$$Ef(X) = \int f d\mu \tag{5.15}$$

로 정의한다.[7]

[6](14)에서 x는 I(x)=x인 항등함수 I로 생각하시면 됩니다.
[7]사실 (14)는 (15)의 일부이긴합니다.

만약 $\mathbb{R}^n$의 르벡 측도 m에 대해, 어떤 연속함수 $pdf_X : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$가 있어서

$$\int x d\mu = \int x \cdot pdf_X dm \tag{5.16}$$

가 성립하면 X를 연속 확률변수라 합니다. 위에서 x는 '항등함수'를 의미하는데, (15)는 좀더 친숙하고 구제적인 표기로 $\int_{\mathbb{R}} x \cdot pdf_X(x)dx$와 동일합니다.

그렇다면 이산 확률분포의 경우는 어떨까요? 예를 들어, $P(X=0)=0.5,\ P(X=1)=0.5$인 이항분포를 생각해봅시다. 이때 $P(X \in A) = \mu(A)$에 의해 $\mu(\{0\}) = 0.5$, $\mu(\{1\}) = 0.5$이고 $0, 1 \notin A$에 대하여는 $\mu(A) = 0$으로 μ가 주어집니다. 이때 def. 7과 6에서 항등함수 x를 적용하여 계산하면,

$$\int x d\mu = 0\mu(\{0\}) + 1\mu(\{1\}) = 0.5 \tag{5.17}$$

으로 계산됩니다. 측도를 이용하면 이산, 연속을 따지지 않고 포괄적인 표현이 가능합니다.

1-1 함수 $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$에 대해 $Y = f(X)$로 정의되는 확률 변수 Y는 다음과 같은 확률 측도를 지닙니다.

$$\mu_Y(B) = P(Y \in B) = P(X \in f^{-1}(B)) = \mu_X(f^{-1}(B)) \tag{5.18}$$

이때, μ_X는 혼란을 방지하기 위해 첨자가 추가된 X의 측도입니다. 직관적으로는 Y라는 확률 변수는 X가 정해지면 값이 정해지므로 Y의 기댓값은 f(X)의 기댓값과 같아야 합니다. 다행이도 def. 8의 (14)에 의한 기댓값의 정의는 이 직관적 사실과 일치합니다. 간단히 설명하자면 기계적인 확인 절차를 통해

$$\int x \ d\mu_Y = \int f \circ x \ d\mu_X \tag{5.19}$$

와 같음이 확인 가능합니다. 이때, x는 항등함수를 의미하고 $f \circ x = f$입니다. 이 사실에 관한 증명은 수식에 좀더 익숙해지면 기계적으로 확인가능합니다. 아직은 간략히만 확인하면 (19)의 좌변은 $\sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{n}{m} \mu_Y([\frac{n}{m}, \frac{n+1}{m}))$과 비슷하다면 우변은 $\sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{n}{m} \mu_X(f^{-1}[\frac{n}{m}, \frac{n+1}{m}))$과 유사합니다.[8] 이때 (18)에 의해 이 두값이 같음을 알 수 있습니다.

즉, def. 8에 의한 기댓값의 정의와 확률 측도의 정의는 1-1함수 f에 대해

$$E_Y Y = E_X f(X) \tag{5.20}$$

가 성립합니다. 이는 reparameterization을 할 때, 기댓값이라면 당연히 만족해야한 성질을 체계적으로 입증한 셈입니다.

이렇게 적분으로 기댓값을 표현함으로서 얻는 이는 중 하나는 측도론의 이론들을 사용할 수 있다는 것입니다. 예로 연속 확률변수 X는

$$Ef(X) = \int f(x) \cdot pdf_X(x) dx \tag{5.21}$$

가 성립합니다. 만약 X의 pdf가 θ로 parameterize 되어있을때, X의 기댓값의 θ에 대한 미분값은 식

[8] page 3 참고

(8)이 성립한다면

$$\frac{d}{d\theta}E_{X\sim pdf_\theta}f(X) = \frac{d}{d\theta}\int f(x)\cdot pdf_\theta(x)dx = \int f(x)\cdot\frac{d}{d\theta}pdf_\theta(x)dx \tag{5.22}$$

가 성립합니다. 이를 log를 이용해 살짝 바꾸면,

$$\int f(x)\cdot\frac{d}{d\theta}pdf_\theta(x)dx = \int f(x)\cdot\frac{d}{d\theta}log(pdf_\theta(x))\cdot pdf_\theta(x)dx = E_{X\sim pdf_\theta}(f(X)\frac{d}{d\theta}log(pdf_\theta(X))) \tag{5.23}$$

가 되고 이는 유용한 계산 과정 중 하나입니다.

5.4.2 Jensen's inequality

끝으로 $\mathbb{R}$에서의 확률변수 X와 볼록함수 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$에 대해 다음의 부등식이 성립합니다.

Theorem 5.4.1. Jensen's inequality.

$$Ef(X) \geq f(EX) \tag{5.24}$$

이때 볼록 함수란 $a\in[0,1]$, $x,y\in\mathbb{R}$에 대해, $f(ax+(1-a)y)\leq af(x)+(1-a)f(y)$이 성립하는 함수를 말합니다. 대표적으로 exp나 -log, x^2과 같은 함수들이 볼록함수 입니다.

이 부등식은 X가 연속 확률변수가 아니어도 상관없으며, 이는 기댓값을 측도를 이용해 르벡 적분으로 표현하였을때 일괄적으로 입증이 가능합니다. 이를 위해서는 볼록함수의 한가지 성질을 확인하여야 합니다. 다음은 볼록함수에서 두 점을 이은 기울기가 두 점중 하나라도 오른쪽으로 갈수록 증가함을 이용하여 보일 수 있습니다.

Proposition 5.4.2. *subgradient of convex function.* 볼록함수 $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$는 임의의 $x_0\in\mathbb{R}$에 대해 어떤 기울기 β가 있어서,

$$\beta(x-x_0)+f(x_0)\leq f(x) \tag{5.25}$$

가 성립한다.

이는 단지 볼록함수는 그래프를 아래서 떠 받치며 $(x_0,f(x_0))$에서 접하는 직선이 있음을 의미합니다.

proof of thm. 4.1. EX는 실수값이므로 이를 x_0라 표기하면, 이 값에 대해 (25)가 성립하는 β가 존재합니다. (25) 양변에 X의 측도 μ로 르벡 적분을 하면,

$$\int \beta(x-x_0)+f(x_0)\ d\mu(x) \leq \int f(x)d\mu(x) \tag{5.26}$$

이고 정의에 의해 우변은 $Ef(X)$와 같습니다. 이때 $\mu(\mathbb{R})=1$이므로 상수 c에 대해

$$\int c\ d\mu = c \tag{5.27}$$

입니다. 그리고 x_0의 정의에 의해

$$\int x - x_0 \; d\mu(x) = \int x \; d\mu(x) - x_0 = EX - x_0 = 0 \tag{5.28}$$

이므로 식 (26)의 좌변은 $f(x_0)$와 같습니다. 그리고 이 값은 $f(EX)$이므로 Jensen 부등식이 성립함을 알 수 있습니다.[9]

[9]위 증명에서 측도의 전체 크기가 1임이 중요하게 작용하였음을 염두하여야 합니다. 즉, 확률 측도에 대해서 성립하는 식이고 전체 크기가 1이 아닌 경우 약간의 보정이 필요합니다.

Chapter 6

힐베르트 공간

이번 장에서는 힐베르트 공간의 기초적인 성질들과 예시들을 다룹니다. 특히 kernel을 이용해 만들어지는 reproducing kernel hilbert space를(RKHS) 다루며 장을 마무리합니다. 힐베르트 공간은 완비 내적공간(complete inner-product space)을 의미합니다. 즉, 기초 선형대수때 다루는 유한차원 내적공간의 일반적인 경우라 보시면 됩니다. 모든 유한차원 내적공간은 직교 좌표계를 지니고[1] 이를 이용해 원소를 표현하면 유클리드 공간 $\mathbb{R}^n$과 같음을 알 수 있습니다. 실수의 완비성 공리(completeness)에 의해 $\mathbb{R}^n$의 완비성이 따라옵니다. 따라서 모든 유한차원 내적공간은 complete합니다. 이러한 점에서 힐베르트 공간의 완비성이라는 조건은 자연스러운 것으로 여길 수 있고 이후 전개될 내용에서 핵심적인 역할을 합니다.

힐베르트 공간 signal process와 statistical learning에서 자주 등장합니다. Signal process에서는 힐베르트 공간이 함수에 대한 푸리에 전개가 가능한 공간이어서 주 분석 대상이 됩니다. Statistical learning에서는 주로 주어진 관찰값에 대해 loss(혹은 risk)를 최소화하는 함수를 찾고자 하는데, 모든 함수들 중에서 찾는건 불가능이므로 RKHS라는 좋은 성질을 지니는 공간안에서 해를 찾고자 합니다.

6.1 Basics of Hilbert Space

6.1.1 Orthonormal basis

힐베르트 공간의 대표적인 특징은 정규직교 좌표계(orthonormal basis)의 존재성입니다. 우선 '직교'는 내적에 따라오는 개념입니다. 내적은 3장에서 살펴보았지만 다시 정의를 살펴보면 다음과 같습니다.

Definition 41. 내적의 정의. 백터공간 (H, F)의 내적 $< \cdot, \cdot >: H \times H \to F$는 다음을 만족한다.

1) linearity : $< af + bg, h >= a < f, h > +b < g, h >$
2) conjugate symmetry : $< f, g >= \overline{< g, f >}$
3) positive definiteness : a)$< f, f > \geq 0$ b) $< f, f >= 0 \Leftrightarrow f = 0$

[1] 아무 기저를 잡고 Gram-Schmidt process를 통해 얻을 수 있습니다.

벡터공간에 내적이 주어진 경우 내적공간이라 부릅니다. 그리고 완비성을 지닌 내적공간을 힐베르트 공간이라 합니다. 조건 2)에 의해 F가 복소수여도 $< f, f >$의 값은 실수임을 알 수 있습니다. 이때 내적은 다음과 같이 자연스럽게 크기(norm)를 정의합니다.

$$||f|| = \sqrt{< f, f >} \tag{6.1}$$

힐베르트 공간 H의 두 원소의 내적값이 0이면 두 원소가 서로 직교한다고 합니다. H의 부분집합 S의 원소가 서로서로 직교한다면 S를 직교집합(orthogonal set)이라 합니다. 모든 원소가 식 (1)에 의해 정의되는 크기가 1이라면 정규직교집합(orthonormal set)이라 합니다. H의 정규직교집합 S에 대해 S를 포함하는 어떠한 정규직교집합도 없다면, S를 최대 정규직교집합(maximal orthonormal set)이라고 합니다.

최대 정규직교집합의 존재성은 선택공리와 동치 명제인 zorn's lemma에 의해 보장됩니다. 간략히 부연설명하면, 임의의 두 원소 간 포함관계가 성립하는 orthonormal set들의 집합 $\{S_i\}$가 주어졌을때,[2] $\cup_i S_i$ 또한 orthonormal set이 됩니다. Zorn's lemma는 이러한 경우에 대해 최대의 orthonormal set이 존재함을 알려줍니다. 이는 수학자들이 효율적으로 설정한 약속의 결과라 여길 수 있습니다.

힐베르트 공간 H 최대 정규직교집합의 존재를 받아들이고 이를 $\{u_i\}_{i \in I}$라 합시다. 이것이 좌표계로서 역할을 하기 위해서는 H의 임의의 원소 f를 $\sum_{i \in I} \hat{f}(i) u_i$로 표현할 수 있어야 합니다. 이때 f를 좌표 $(\hat{f}(i))_{i \in I}$로 표현할 수 있고

$$||f||^2 = \sum_{i \in I} |\hat{f}(i)|^2 \tag{6.2}$$

가 되어야 합니다. 만약 H가 실수 벡터공간이라면 $\hat{f}(i)$는 실수가 되고 복소 벡터공간이라면 $\hat{f}(i)$는 복소수가 될 것입니다. 문제는 최대 정규집합의 크기가 무한임에 따라 위의 표현과 성질들이 성립함을 보이는 것이 간단하지 않다는 것입니다. 이를 엄밀하게 서술하는 과정에서 완비성이라는 코시수열이 수렴한다는 성질이 요구됩니다. 따라서 힐베르드 공간의 경우 최대 정규직교집합을 정규직교기저(orthonormal basis)라 부를 수 있게 됩니다.

6.1.2 L_2 space

힐베르트 공간의 대표적인 예는 L_2 space입니다. 이는 measure space (X, Ω, μ)에서 실수 혹은 복소수로 가는 함수들 중에 다음의 성질을 만족하는 함수들의 집합입니다. 본 노트에서 푸리에 급수를 위해서는 복소수를 다루어야만 하므로 복소수를 가정합니다.

Definition 42. L_2 space. measure space (X, Ω, μ)에 대해

$$L_2(\mu) = \{f | f : X \to \mathbb{C}, \int |f|^2 d\mu < \infty\}. \tag{6.3}$$

위에서 f는 측도 μ로 적분가능한 measruable function들만 고려됩니다. 풀어 설명하면 $L_2(\mu)$는 함수값의 크기의 제곱의 적분값이 유한한 함수들의 모임입니다. 이때, $L_2(\mu)$는 벡터공간이 됩니다. 즉, $f, g \in L_2(\mu)$이면 복소수 a에 대해 af, $f + g \in L_2(\mu)$입니다. af의 경우 $L_2(\mu)$에 속함은 자명한 반면, $f + g$가 $L_2(\mu)$에 속함을 보이기 위해선 코시-슈와르츠 정리를 이용해야 합니다.[3]

[2] 즉, $S_i \subset S_j$ 거나 $S_j \subset S_i$

[3] 보다 일반적으로는 휠더 부등식이라고 합니다. 이에 대한 보다 자세한 내용은 Rudin-real complex analysis 3장-Lp

Theorem 6.1.1. Cauchy-Shwartz Theorem. Measurable function $f, g : X \to \mathbb{C}$에 대해,

$$\int |fg| d\mu \le \sqrt{\int |f|^2 d\mu \cdot \int |g|^2 d\mu} \tag{6.4}$$

이는 n개의 수들에 대한 코시-슈와르츠 부등식의 일반적인 경우입니다. 이를 이용하여 $L_2(\mu)$가 벡터 공간이 됨을 확인한 후에 $L_2(\mu)$에는 다음과 같이 자연스럽게 내적이 정의됩니다.

Definition 43. $f, g \in L_2(\mu)$에 대해

$$< f, g >= \int f\overline{g}\ d\mu. \tag{6.5}$$

식 (5)의 값이 유한함은 코시-슈와르츠 부등식에 의해 성립하고, 내적의 정의를 만족하는 것은 쉽게 확인가능합니다. 그리고 $L_2(\mu)$ space의 norm은 다음과 같습니다.

Definition 44. $f \in L_2(\mu)$에 대해

$$||f||^2 = \int |f|^2\ d\mu. \tag{6.6}$$

여기서 한가지 기술적인 문제점이 존재합니다. norm이 0인 원소는 0뿐이어야 하는데, 식 (6)의 적분값이 0인 함수들은 항등 0함수 뿐만 있는 것이 아닙니다.[4] 위의 정의들이 내적과 norm에 대한 정의를 만족하기 위해서 $L_2(\mu)$ space를 partition으로 묶어 생각합니다. 보다 엄밀하게 설명하면, $L_2(\mu)$ space에서 0에 해당하는 원소는 식 (6)의 값이 0인 함수들의 집합을 의미합니다. 즉, $L_2(\mu)$ space는 식 (6)에서 $||f - g||^2 = 0$이라면 f, g를 같은 원소로 취급을 함으로써 [5] def. 3과 def. 4이 내적과 norm의 정의를 만족하게 만듭니다.

다소 논리적으로 복잡하지만 이렇게 정의된 $L_2(\mu)$ space는 완비성을 지닙니다. 즉, 위의 $L_2(\mu)$ space의 코시 수열은 measurable하고 함수값의 크기의 제곱의 적분값이 유한한 어떤 함수로 수렴합니다. 이를 보이는 것은 새로운 개념을 요구하지는 않지만 다소 기교적입니다. [6] 결론으로 완비성을 지니는 내적공간을 힐베르트 공간이라 부르므로 $L_2(\mu)$ space는 힐베르트 공간이 됩니다.

6.1.3 Counting measure

집합 A에서 정의되는 측도 중에는 단순히 부분집합의 원소의 개수를 새는 측도도 존재합니다. 이를 counting measure라 부릅니다.

Definition 45. Counting measure. 집합 A의 counting measure μ는 A의 임의의 부분집합 S에 대해 [7]

$$\mu(S) = |S|. \tag{6.7}$$

이렇게 정의된 set function이 측도의 조건을 만족하는지는 추가적으로 보여야합니다. 본 노트에

space에 있습니다.

[4]측도 μ에 따라 다르지만 르벡 측도를 예로 들때, 하나의 점에서만 함수 값이 0이 아니어도 적분값은 0입니다.

[5]즉, $L_2(\mu)$의 원소는 $[f] = \{g \mid ||f - g|| = 0,\ g : X \to \mathbb{C}\}$꼴로 정의됩니다.

[6]이에 대한 증명은 real analysis 책이나 인터넷에서 쉽게 찾을 수 있습니다.

[7]|S|는 S의 원소의 갯수를 의미.

서는 이를 생략한 채 예를 들며 진행하겠습니다. 예를 들어 $f : A \to \mathbb{R}$가 $S \subset \mathbb{Z}$에서만 값이 c이고 나머지에선 0이라 합시다. Counting measure는 모든 부분집합을 측도할 수 있습니다. 따라서 f는 simple function이 됩니다. 적분에 정의에 따라 f의 적분값은 c|S|가 됩니다. 이를 이용하면 임의의 $f : A \to \mathbb{R}$의 적분값이 $\sum_{a\in A} f(a)$가 됨을 알 수 있습니다.

A에서의 counting measure를 μ라 할때 얻어지는 L_2 space를 $l_2(A)$라 표기합니다. 이때, $f, g \in l_2(A)$에 대해

$$\int f\overline{g}\ d\mu = \sum_{a\in A} f(a)\overline{g(a)} \tag{6.8}$$

이므로,

$$||f||^2 = \sum_{a\in A} |f(a)|^2 \tag{6.9}$$

입니다.

따라서 정규직교기저를 이용한 좌표 표현과 식 (2)는 주어진 힐베르트 공간을 $l_2(I)$에서 해석하는 것을 의미합니다.

6.1.4 푸리에 급수 (Fourier series)

푸리에 급수는 $[0, 2\pi]$에서 복소수 값을 가지는 주기함수를 $\{e^{inx}\}_{n\in\mathbb{Z}}$라는 간단한 주기함수들로 근사하는 것입니다. 여기서 좋은 근사란 두 함수의 차이의 L2 norm이 작음을 의미합니다. 즉, 푸리에 근사는 두 근사 함수와 대상 함수 사이 영역의 넓이가 작음을 의미합니다. 한편 르벡 측도를 사용한 적분의 경우 하나의 점에서 함수 값이 다르다고 적분값이 변하지 않습니다. 따라서 푸리에 근사는 실제로 함수값이 얼마나 같은지를 알려주지는 않습니다. 개략적으로 생각해보면, 연속함수가 아닌 일반적인 주기함수를 $[0, 2\pi]$의 모든 점에서 근사하는 것은 불가능해 보입니다.
특별한 경우에는 모든 점에서 근사가 성립하며 이때 푸리에 급수가 pointwise 수렴한다고 합니다. 놀랍게도 주어진 함수가 연속함수여도 푸리에 급수가 주어진 함수로 pointwise 수렴하지 않습니다. 이 성질이 성립하기 위해서는 보다 강력한 조건이 필요하게 됩니다. [8]

본격적으로 푸리에 급수에 대해 알아봅시다. 우선 $[0, 2\pi]$와 르벡 측도가 주어졌을때, 주어지는 L_2 space를 $L_2([0, 2\pi])$라 표기합니다. $L_2([0, 2\pi])$에서는 한 점이 다른 것은 같은 원소로 취급하므로 어떠한 $f : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}$가 $L_2([0, 2\pi])$의 원소라면 $f(a) = f(b)$로 생각해도 무방합니다. 즉, $[0, 2\pi]$에서의 주기함수를 넓이의 관점에서 근사하는 것은 $L_2([0, 2\pi])$의 원소를 근사하는 문제와 동일합니다.

앞에서 L_2 space는 힐베르트 공간이 됨을 말하였습니다. $\{e^{inx}\}_{n\in\mathbb{Z}}$의 정의역을 $[0, 2\pi]$로 국한하였을 때, 이들이 $L_2([0, 2\pi])$의 원소가 됨을 알 수 있습니다. 이때,

$$\int_0^{2\pi} e^{inx}\overline{e^{imx}}dx = \begin{cases} 0, & if\ n \neq m \\ 2\pi & otherwise \end{cases} \tag{6.10}$$

가 됩니다. 따라서 정규화를 하면 $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{inx}\}_{n\in\mathbb{Z}}$가 $L_2[0, 2\pi]$의 orthonormal set이 됨을 알 수 있습니다. 따라서 모든 L_2의 원소는 이 basis를 이용해 좌표를 얻을 수 있고 식 (2)가 성립합니다. 즉, $L_2[0, 2\pi]$는

[8] https://en.wikipedia.org/wiki/Convergence_of_Fourier_series

countable한 축들로 '해석'이 가능합니다.

이들이 정규직교기저가 됨을 살펴보기에 앞서 우선 왜 이 결과가 '근사'를 의미하는 것인지 알아보겠습니다. $L_2[0,2\pi]$의 두 원소 f, g를 $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{inx}\}_{n\in\mathbb{Z}}$ 좌표계에서 해석을 할때, 식 (2)로부터 다음을 얻을 수 있습니다.

$$||f-g||^2 = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |\hat{f}(n) - \hat{g}(n)|^2 \tag{6.11}$$

이때, $\hat{f}(n)$는 f의 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{inx}$ 성분을 의미합니다. 즉, 좌표값들이 비슷하면 두 함수 사이의 넓이가 작아집니다. 이때,

$$g_N = \sum_{n=-N}^{N} f(n)\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{inx} \tag{6.12}$$

에 대해

$$||f-g_N||^2 = \sum_{n=-\infty}^{-N-1} |\hat{f}(n)|^2 + \sum_{n=N+1}^{\infty} |\hat{f}(n)|^2 \tag{6.13}$$

임을 알 수 있습니다. 한편 f는 $L_2[0,2\pi]$의 원소이므로, L_2 space 정의에 의해

$$\int |f|^2 d\mu = ||f||^2 = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |\hat{f}(n)|^2 \tag{6.14}$$

가 유한합니다. 따라서 N이 커짐에 따라 식 (13)은 0으로 수렴하고 g_N은 f와 L_2 distance가 작아집니다. 이때 $\{g_N\}_{N\in\mathbb{N}}$를 푸리에 급수라 합니다.

$\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{inx}\}_{n\in\mathbb{Z}}$이 정규직교집합이 되는 사실은 놀라운 것이지만 많은 단계를 요구합니다. 이를 간략히만 설명하면, 우선 $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{inx}\}_{n\in\mathbb{Z}}$의 선형결합(유한개들의)으로 표현되는 함수들의 집합을 trigonometry system이라 합니다. 놀랍게도 이러한 trigonometry로 $[0,2\pi]$의 연속함수들을 supremum norm으로 근사가 가능합니다. 정의역이 작은 경우 함수의 supremum norm이 작다는 것은 넓이가 작다는 것을 의미하여 이는 L2 norm으로 근사가 됨을 의미합니다. 그리고 이러한 연속함수들로 $L_2[0,2\pi]$를 L2 norm으로 근사할 수 있습니다. 이를 종합하여 trigonometry system으로 $L_2[0,2\pi]$를 L2 norm으로 근사할 수 있고 이는 곧 $\{\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{inx}\}_{n\in\mathbb{Z}}$이 '최대' 정규직교집합임을 의미합니다. 한가지 놀라운 사실은 연속함수는 사실 삼각급수로 supremum norm 관점에서 근사할 수 있다는 것입니다. 즉, 모든 점에서 가까워지는 삼각급수를 찾을 수 있는데, 푸리에 급수는 이런 삼각급수와 일치않고 supremum norm 관점에서 주어진 연속함수로 수렴하지 않습니다. 푸리에 급수는 넓이의 관점에서 서술되는 공간 L_2의 정규직교기저에서 해석함으로서 얻어지는 것이고 이것이 supremum norm의 관점에선 정규직교기저로 더 이상 받아들여지지 않아 일반적으로 원하는 supremum norm에서의 근사는 전혀 다른 문제가 됩니다.

6.2 Kernel induced Hilbert Space

이를 보통 Reproducing Kernel Hilbert Space (RKHS)라 합니다. 이 이름은 우선적으로 좋은 성질을 만족하는 힐베르트 공간이 주어져 있고 이로부터 이 힐베르트 공간의 원소를 생산하는 kernel이 있기 때문에 붙여졌습니다. 이러한 순서보다는 kernel이 주어진 상황에서 힐베르트 공간을 정의하는 것이 보다 직관적이라 여겨 순서를 바꾸어 진행합니다.

앞에서의 L_2 space와 푸리에 급수가 힐베르트 공간의 정수였다면, RKHS는 이들을 비롯한 힐베르트 공간의 성질들에 기반한 응용입니다. 따라서 힐베르트 공간에 익숙하지 않다면 본 내용이 어렵게 느껴질 것 같습니다.

이 절에서는 임의의 집합 X를 다룹니다. 우리의 관심사에 빗대면 이는 데이터 공간이라 해석할 수 있습니다. 여기서는 지나치게 추상화된 경우를 다루기 보다는 현실적인 경우들로 구체화 하여 다루겠습니다.

6.2.1 Kernel to Hilbert space

우선 kernel부터 알아야 합니다. Kernel은 $X \times X \to R$인 함수를 의미합니다. 사실 우리가 다루는 대부분의 kernel은 symmetric하고 이를 *symmetric kernel*이라 합니다.

$$K(x, y) = K(y, x) \tag{6.15}$$

우리가 하고자 하는 것은 이 symmetric kernel을 이용해 함수 공간을 만드는 것입니다. 이때, symmetric kernel이 주어지면 고정된 x마다 $K_x(\cdot) = K(x, \cdot) = K(\cdot, x)$로 X에서의 함수 K_x가 얻어집니다. 이때, 이들의 선형 결합의 집합

$$\{\sum_{i=1}^{n} a_i K_{x_i} |\ a_i \in \mathbb{R},\ x_i \in X\} \tag{6.16}$$

으로 구성된 벡터 공간을 생각할 수 있습니다. 우리의 목표는 이 벡터공간을 조금만 확장하여 힐베르트 공간을 만드는 것입니다. 우선 내적이 필요한데, 다행히도 자연스럽게 내적을 정의할 수 있습니다.

$$< \sum_{i=1}^{n} a_i K_{x_i}, \sum_{j=1}^{m} b_j K_{y_j} > = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_i b_j K(x_i, y_j) \tag{6.17}$$

문제는 이것이 내적이 되려면 $< \sum_{i=1}^{n} a_i K_{x_i}, \sum_{i=1}^{n} a_i K_{x_i} > = \sum_{i,j=1}^{n} a_i a_j K(x_i, x_j)$이 양수가 되어야 합니다. 따라서

$$\sum_{i,j=1}^{n} a_i a_j K(x_i, x_j) \geq 0 \tag{6.18}$$

이 필요하고 이러한 조건을 만족하는 kernel을 *semi-positive definite kernel*이라 합니다. 앞으로 kernel이라는 용어는 semi-positive definite symmetric kernel을 의미합니다.

다음으로는 완비성이 필요합니다. 이는 completion이라는 방법에 의해 가장 적은 확장으로 가능하며, 함수의 극한에 대한 엄밀한 정의가 요구되지만 생략한채 결과를 표현하면 다음과 같은 힐베르트 공간 H_K가 얻어집니다.

$$H_K = \{\sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i} |\ a_i \in \mathbb{R},\ x_i \in X\} \tag{6.19}$$

$$< \sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i}, \sum_{j=1}^{\infty} b_j K_{y_j} > = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} a_i b_j K(x_i, y_j) \tag{6.20}$$

K_x의 정의에 의해 다음의 성질이 성립하고 이러한 성질을 만족하는 힐베르트 공간을 RKHS라 합니다.

$$< \sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i}, K_x > = \sum_{i=1}^{\infty} a_i K(x_i, x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i}(x) \tag{6.21}$$

즉, 임의의 H_K의 원소 $\sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i}$의 x에서의 함수값은 K_x와의 내적을 통해 얻어집니다. 이를 모든 x에서 하면 결국 자기자신이 얻어지므로 reproducing이라는 표기를 얻게 되었습니다.

6.2.2 reproducing kernel hilbert space

한편 X에서 $\mathbb{R}$로 가는 함수들로 이루어진[9] 힐베르트 공간 H는 다음의 조건을 만족할 때 RKHS라 불립니다.

Definition 46. *RKHS.* H가 X의 RKHS라면 임의의 $x \in X$에서 evaluation function L_x $s.t$

$$L_x(f) = f(x) \ \ \forall f \in H \tag{6.22}$$

가 연속이다.

이때, L_x는 $H \to \mathbb{R}$인 선형 함수입니다. 이러한 공간에서 체로 가는 함수를 linear functional이라 하는데 힐베르트 공간의 linear functional 중 연속인 것들은 항상 다음과 같이 표현됩니다.[10]

Theorem 6.2.1. 힐베르트 공간 H의 임의의 continuous linear functional L에 대해 어떤 $g \in H$가 유일하게 존재하여

$$L(f) =< f, g > . \tag{6.23}$$

즉, 모든 continuous linear functional은 어떤 원소 g와의 내적 연산과 일치합니다. 이는 선형대수학의 기본정리에 따라, n 차원 벡터공간에서 모든 linear functional은 $1 \times n$ 행렬로 표현된다는 사실의 일반화입니다.

이 정리에 의해 X의 RKHS H에서 L_x마다 어떤 H의 원소 K_x가 있어

$$L_x(f) =< f, K_x > \tag{6.24}$$

임을 알 수 있습니다. 이렇게 얻어지는 K_x들을 이용하여 다음과 같이 kernel K를 정의할 수 있습니다.

$$K(x, y) =< K_x, K_y > \tag{6.25}$$

이는 마치 2.1의 역과정처럼 여겨집니다. 이렇게 정의된 kernel은 semi-positive definite symmtric이 됨을 내적의 정의로부터 쉽게 확인가능합니다. 이때, K_x는 evaluation L_x에 대응되는 RKHS의 원소였으므로

$$K(x, y) =< K_x, K_y >= K_x(y) \tag{6.26}$$

[9] 이러한 함수들의 일부.
[10] 이를 유한차원 벡터공간에서 생각해보면 어떻게 될까요?

가 성립합니다. 따라서 $K(x, \cdot) = K_x(\cdot)$가 됩니다.

여지껏 RKHS의 정의와 그로부터 얻어지는 kernel에 대해 알아보았습니다. 이때, 2.1절의 과정에 약간을 보태면 임의의 semi-positive definite symmetric kernel마다 유일하게 RKHS가 대응됨을 알 수 있습니다. 이를 $Moore - Aronszajn$ theorem이라 합니다. 2.1에서 kernel K가 주어졌을때,

$$H_K = \{\sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i} |\ a_i \in \mathbb{R},\ x_i \in X\} \tag{6.27}$$

이 K에 대응되는 RKHS라 하였으므로, $Moore - Aronszajn$ theorem에 의해 이 절의 처음에 주어진 H는 (27)의 H_K와 일치해야 합니다. 따라서 H의 모든 원소는 $\sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i}$꼴로 표현됩니다.

6.2.3 Examples

$\mathbb{R}^n$에서의 kernel들의 예를 다루어 RKHS들이 어떻게 생겼는지 알아봅시다. 가장 간단하게는 $k(x, y) = x^t y$를 생각할 수 있습니다. 이를 bilinear kernel이라 하며 이 kernel로 얻어지는 $RKHS$는 $\sum_{i=1}^{\infty} a_i K_{x_i} = (\sum_{i=1}^{\infty} a_i x_i^t)x$꼴로 즉, 선형함수들의 집합이 됩니다.
많이 등장하는 kernel중의 하나는 Gaussian kernel이고 이는 다음과 같이 정의됩니다.

$$K(x, y) = \exp - \frac{||x - y||^2}{\sigma^2} \tag{6.28}$$

6.2.4 Applications

RKHS에 대해 알아봤으니 이제 응용할 차례입니다. 본 노트에서는 statistical learning에서 loss(risk) minimizer에 관한 내용과 kernel trick을 담았습니다.

representer theorem

현재는 우수한 computing power에 힘입어 gradient descent라는 간단한 optimization기법과 거대한 network function을 이용해 다양한 문제들을 해결하지만, 이것이 불가능한 경우에는 주어진 문제에 적절한 제약을 가해 풀 수 있게 표현해야 합니다. 수식적으로 간단한 regression 문제를 설정합시다. Data set $\{x_i\}_{i=1,\dots,N}$와 label $\{y\}_{i=1,..,N}$이 주어졌을때 주어진 함수 class H_K에서 가장 잘 fitting을 하는 함수를 찾고자 합니다.

이는 H_K가 kernel K에 대한 RKHS라면 일반적으로 무한차원인 힐베르트 공간임에도 불구하고 보다 쉬운 유한차원 문제로 바꾸어 풀 수 있게 됩니다.

Theorem 6.2.2. *representer theorem.* 주어진 training dataset $X = \{x_i\}_{i=1,\dots,N},\ x_i \in X$ 와 label $y = \{y\}_{i=1,..,N},\ y_i \in \mathbb{R}$이 주어지고 Loss function $L : (X \times \mathbb{R} \times \mathbb{R})^N \to \mathbb{R}$이 주어졌다하자. 그리고 함수 f의 norm에 대한 regularizer인 increasing function $g : [0, \infty] \to \mathbb{R}$이 주어졌을때, RKHS H_K안에서 loss minimizer

$$f^* = argmin_{f \in H_K} L((x_1, y_1, f(y_1)), ..., (x_N, y_N, f(y_N))) + g(||f||) \tag{6.29}$$

는 다음의 꼴을 지닌다.

$$f^* = \sum_{i=1}^{N} a_i K_{x_i} \tag{6.30}$$

매우 긴 정리이지만 증명은 RKHS의 기초적인 성질만 이용하며 간단합니다.[11] 이 정리에 따르면 우리는 원하는 flexibity를 지니는 RKHS를 설정한 후에 주어진 training set에 대한 K_{x_i}들을 얻은 뒤 N개의 a_i만 찾으면 됩니다. 즉, 무한 차원 RKHS의 모든 원소를 탐색할 필요없이 training set의 크기의 차원에서 최적화를 하면 됩니다.

kernel trick

Kernel trick이란 집합 X에서 kernel K가 주어졌을때, k(x,y)가 어떤 고차원 공간에서의 내적값과 일치함을 의미합니다. 즉, 어떤 map $\varphi : X \to H$가 있어서, H의 내적 $<,>$에 대해,

$$k(x, y) = < \varphi(x), \varphi(y) > \tag{6.31}$$

가 됨을 의미합니다. 여기서 H를 kernel K에 의해 얻이지는 RKHS H_K라 하고 $\varphi(x) = K_x$라 하면 식 (31)을 만족하게 됩니다. 한편, 다음의 mercer theorem을 이용하면 더 직관적인 φ와 H를 얻을 수 있게 됩니다. 보통 이들을 feature map과 feature space라 합니다.

보다 일반적으로 mercer theorem이 서술 될 수 있지만 여기서는 간단한 X=[a,b]를 예로 듭니다. 이경우 mercer theorem은 kernel K: $[a, b] \times [a, b] \to \mathbb{R}$을 $L_2([a, b])$의 원소들을 이용해 표현해줍니다.

Theorem 6.2.3. *Mercer theorem.* $K : [a, b] \times [a, b] \to \mathbb{R}$이 continuous semi-positive definite symmetric kernel이라면 $L_2([a, b])$의 정규직교기저 $\{e_n\}_{n=1,\ldots}$가 존재하여,

$$K(s, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n e_n(s) e_n(t) \tag{6.32}$$

가 성립한다.

sketch of proof. 위 정리에서 $L_2([a, b])$가 countable한 정규직교기저를 지님은 푸리에 급수를 통해 확인할 수 있습니다. Mercer Theorem은 kernel을 다르게 해석함으로써 증명됩니다. Kernel이 연속이라면

$$T_K(f)(s) = \int_a^b K(s, t) f(t) dt \tag{6.33}$$

를 통해 $L_2([a, b])$의 원소 f를 $L_2([a, b])$의 원소 $T_K(f)$로 바꾸는 변환 T_K를 생각할 수 있습니다. 보통 이를 integral operator라 하는데 $L_2([a, b])$가 지니는 성질로 인해 이 변환에 spectral theorem을 적용할 수 있습니다. 즉, 마치 유한차원 벡터공간에서 처럼 $T_K : L_2([a, b]) \to L_2([a, b])$에 대해, eigenvector로 이루어진 $L_2([a, b])$의 정규직교기저 $\{e_n\}_{n=1,\ldots}$가 존재합니다.

$$T_K(e_i) = \lambda_i e_i \tag{6.34}$$

[11] https://en.wikipedia.org/wiki/Representer_theorem

이렇게 λ_i와 e_i들을 얻을 수 있습니다. 이들을 이용해 $\overline{K}$를

$$\overline{K}(s,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n e_n(s) e_n(t) \tag{6.35}$$

으로 설정하면 주어진 식 (33)에 K대신 $\overline{K}$을 넣어도 성립함을 $L_2([a,b])$의 내적의 정의와 직교성을 이용하면 확인할 수 있습니다.[12] 그리고 식 (33)을 만족하는 K가 유일함을 보이면 mercer theorem이 증명됩니다.

이제 Mercer theorem을 이용해 feature map과 feature space를 얻을 수 있습니다. 식 (32)를 보면

$$K(s,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n e_n(s) e_n(t) = (\sqrt{\lambda}_n e_n(s))_{n\in\mathbb{N}} \cdot (\sqrt{\lambda}_n e_n(t))_{n\in\mathbb{N}} \tag{6.36}$$

가 되고 $(\sqrt{\lambda}_n e_n(s))_{n\in\mathbb{N}}$를 $l_2(\mathbb{N})$의 원소로 해석하면

$$K(s,t) = < (\sqrt{\lambda}_n e_n(s))_{n\in\mathbb{N}},\ (\sqrt{\lambda}_n e_n(t))_{n\in\mathbb{N}} >_{l_2(\mathbb{N})} \tag{6.37}$$

가 됩니다.

정리하면 feature map $\varphi : X \to l_2(\mathbb{N})$를

$$\varphi(s) = (\sqrt{\lambda}_n e_n(s))_{n\in\mathbb{N}} \tag{6.38}$$

와 같이 정의한다면, 식(31)이 성립합니다.

마지막으로 이런 것들을 하는 이유는 주어진 데이터를 더 고차원으로 embedding을 할 경우에 classification이나 clustering과 같은 문제들을 더 쉽게 풀 수 있기 때문입니다. 물론 case by case이지만, kernel PCA 같은 경우에 이러한 방법을 사용하며 SVM에서도 요구됩니다. 이때 어떤 경우에 구체적으로 embedding을 알지 않더라도 feature space에서의 내적값만 알아도 주어진 task를 해결할 수 있게 됩니다. 따라서 간단한 kernel과 training set에서의 kernel값을 통해 얻어지는 matrix만 얻어도 어려운 문제를 간단하게 해결할 수가 있어서 한 때 각광을 받았던 기법입니다. 성분간 곱의 합을 의미하는 dot product로 주어지는 내적 값들로 구성되는 matrix랔 gram matrix라 하는데, 이는 분산행렬과 유사한 역할을 할 수 있습니다. 특히 PCA같은 기법들이 이런 분산에 관한 정보만으로 작동합니다.

References

Michael Spivak (1971). Calculus On Manifolds: A Modern Approach To Classical Theorems Of Advanced Calculus. Avalon Publishing.

Donald W. Kahn (1995). Topology: An Introduction to the Point-Set and Algebraic Areas. Dover Publications.

Walter Rudin (1987). Real and complex analysis. McGraw-Hill, Inc.

John B. Conway (1994). A Course in Functional Analysis. Springer Science & Business Media.

[12] 다만 극한을 다루기 위해선 함수의 극한에 대해 엄밀한 정의가 요구됩니다.