확률과 통계

섹션 - 8

강사 : James 쌤

마르코프 연쇄

키포인트

- 확률과정.
- 전이행렬.
- 마르코프 연쇄 (Markov chain).

확률과정

- 시간이 지남에 따라서 변하는 확률변수의 집합을 의미한다.

⇒ 상태가 확률적으로 변하고 이것에 대한 정보를 모아 놓은 집합이다.

⇒ 예를 들어서 “마르코프 연쇄”는 이산 확률과정이다.

$$\{X_t, \ldots, X_1, X_0\}$$

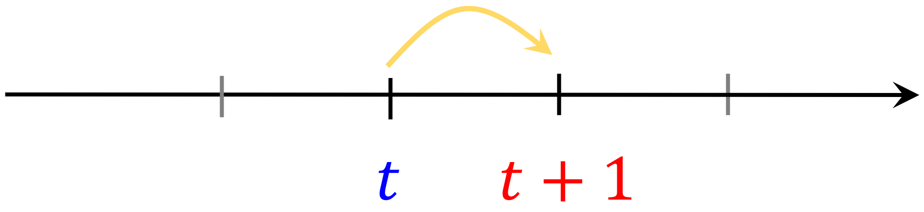
확률과정

- 마르코프 연쇄는 시간이 이산적인 확률과정이다.
- 마르코프 연쇄에서는 미래의 확률이 바로 한 스텝 이전의 상태에 의해서 결정된다.

$$P(x_{t+1}|x_t, x_{t-1}, x_{t-2}, \dots, x_1) = P(x_{t+1}|x_t)$$

예). 오늘 S사의 주가가 상승했으면 내일도 95%의 확률로 주가가 오를것 이다. 또한,

오늘 S사의 주가가 하락했더라도 내일은 20%의 확률로 주가가 오를 것이다.



전이행렬

- 전이행렬을 사용해서 확률과정을 묘사할 수 있다.

예). 오늘 S사의 주가가 상승했으면 내일도 95%의 확률로 주가가 오를것 이다. 또한, 오늘 S사의 주가가 하락했더라도 내일은 20%의 확률로 주가가 오를 것이다.

$$\begin{array}{cccc} & \multicolumn{2}{c}{\text{내일}} & \\ & \text{상승} & \text{하락} & \\ \tilde{T} = & \left[\begin{array}{cc} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{array}\right] & & \begin{array}{c} \text{상승} \\ \text{하락} \end{array} \quad \text{오늘} \end{array}$$

전이행렬

- 전이행렬의 원소는 상태 s_i 에서 s_j로 전이되는 확률을 나타낸다.

$$T_{i,j} = P(x_{t+1} = s_j | x_t = s_i)$$

- 전이행렬의 행방향으로 합은 1이되어야 한다.

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix}$$

전이행렬

- 전이행렬의 원소는 상태 s_i 에서 s_j로 전이되는 확률을 나타낸다.

$$T_{i,j} = P(x_{t+1} = s_j | x_t = s_i)$$

- 전이행렬의 행방향으로 합은 1이되어야 한다.

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} \boxed{0.95 + 0.05} \\ 0.2 \quad\quad 0.8 \end{bmatrix} = 1$$

전이행렬

- 전이행렬의 원소는 상태 s_i 에서 s_j로 전이되는 확률을 나타낸다.

$$T_{i,j} = P(x_{t+1} = s_j | x_t = s_i)$$

- 전이행렬의 행방향으로 합은 1이되어야 한다.

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ \boxed{0.2 \;+\; 0.8} \end{bmatrix} = 1$$

전이행렬

- 전이행렬은 현재 상태를 1 타임스텝 전진시켜 준다.

$$x_{t+1} = x_t \tilde{T}$$

예). $x_t = (1 \quad 0)$ 이고 $\tilde{T} = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix}$ 라면,

$$x_{t+1} = (1 \quad 0) \begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix} = (0.95 \quad 0.05)$$

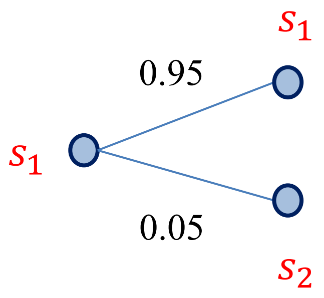
전이행렬과 확률나무

- 다음 전이행렬에 해당하는 확률나무를 만들어 본다.

내일

$$\begin{array}{cccc} & 상승 & 하락 & \\ \tilde{T} = & \left[\begin{array}{c} 0.95 \\ 0.2 \end{array}\right. & \left.\begin{array}{c} 0.05 \\ 0.8 \end{array}\right] & \begin{array}{c} 상승 \\ 하락 \end{array} \end{array}$$

오늘



$\boldsymbol{s_1}$ = 상승상태.

$\boldsymbol{s_2}$ = 하락상태.

전이행렬과 확률나무

- 2 스텝 이후의 확률변화는 전이행렬을 두 번 적용한 것과 같다 (행렬 곱).

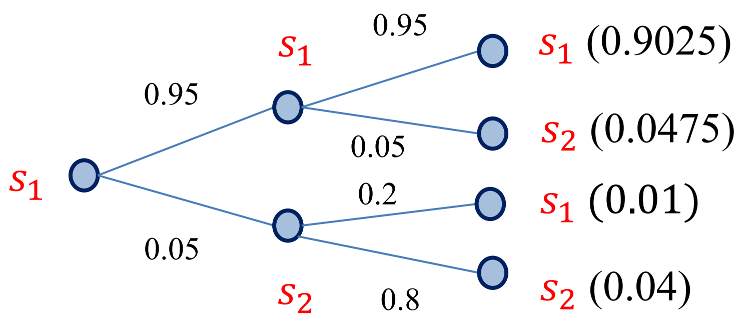
$$x_{t+2} = x_{t+1}\tilde{T} = x_t\tilde{T}\,\tilde{T} = x_t\tilde{T}^2$$

$$\tilde{T}^2 = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9125 & 0.0875 \\ 0.35 & 0.65 \end{bmatrix}$$

전이행렬과 확률나무

- 2 타임 스텝 전이행렬과 확률나무.

$$\tilde{T}^2 = \begin{bmatrix} \boxed{0.9125 \quad 0.0875} \\ 0.35 \quad\quad 0.65 \end{bmatrix}$$



S_1끼리 더하면 확률 = 0.9125

S_2끼리 더하면 확률 = 0.0875

전이행렬의 안정상태

- 전이행렬을 거듭해서 곱해서 적용하다 보면 다음과 같이 변화가 멈춘 상태가 될 수 있다. 이것을 안정상태 (steady state)라 부른다.

$$\tilde{T}^{\,i} = \tilde{T}^{\,i+1} = \tilde{T}^{\,i+2} = \cdots$$

예). $\tilde{T} = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix} \Rightarrow \tilde{T}^{\,100} = \tilde{T}^{\,101} = \tilde{T}^{\,102} = \cdots$

$$= \begin{bmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.8 & 0.2 \end{bmatrix}$$

마르코프 의사결정 과정

키포인트

- 마르코프 의사결정 과정 (Markov Decision Process, MDP).
- 행동, 상태, 보상, 전이확률, 감가율.
- 반환값.
- 격자 세상 (Grid world).

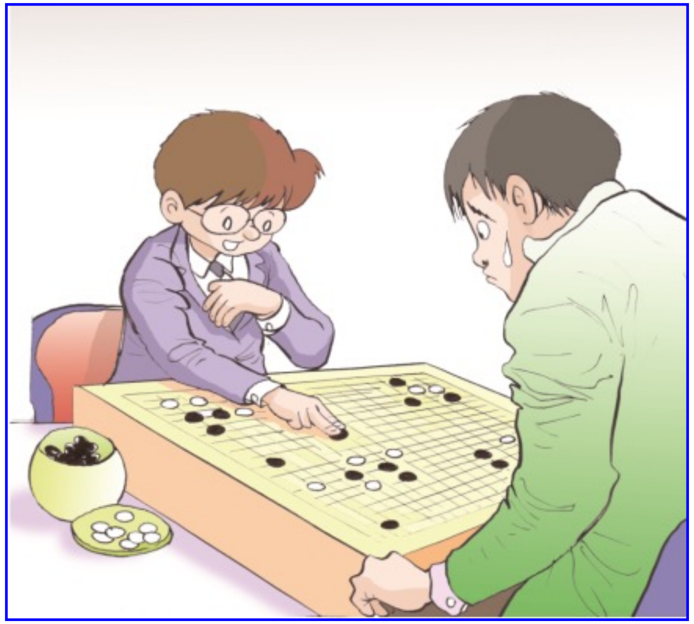
마르코프 의사결정 과정 : 개요

- 순차적 행동결정 문제를 수학적으로 모델링한 것이다. ⇒ 정책의 최적화
- 환경은 전체가 완전히 관찰 가능해야 한다.
- 현재 상태가 과정의 특성을 모두 반영하여야 한다. 미래의 상태는 현재의 상태에 의해서 결정되고 더 이상의 과거는 돌아볼 필요가 없다. ⇐ 마르코프 연쇄를 전제
- 마르코프 의사결정 과정의 해는 다이내믹 프로그래밍 방법 또는 강화학습 방법으로 구할 수 있다.

주의: 실제 구현하기 보다는 개념 위주로 알아본다.

마르코프 의사결정 과정 : 개요

예). 게임에서는 현 상태에서 그 다음의 최적 움직임을 결정해야 한다.



마르코프 의사결정 과정 : 개요

예). 투자에서는 현 상태에서 그 다음의 최적 움직임을 결정해야 한다.

마르코프 의사결정 과정 : 용어

- 에이전트 (agent): 환경과 상호작용하는 알고리즘 또는 시스템.
- 정책 (policy): 정책은 특정 상태에서 에이전트가 취해야 할 행동을 정의한다. 즉, 상태에 행동을 매핑해 놓은 것이다. 정책은 확정적일 수도 있고, 확률적일 수도 있다.

??

Left?? Right??

마르코프 의사결정 과정 : 정의

- 마르코프 의사결정 과정 (MDP)은 다음과 같이 정의된다.

$$MDP \ = \ (S, A, P^a, R^a, \gamma)$$

- MDP 는 조건부 확률에 대한 주장이다. 마르코프 과정을 따른다는 가정하에 상태 S_{t+1}은 바로 이전의 상태 S_t에 대한 조건으로 만들어 진다. 이것을 수식으로 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$P(S_{t+1}|S_t, S_{t-1}, S_{t-2}, \ldots, S_1) = P(S_{t+1}|S_t)$$

마르코프 의사결정 과정 : 상태

- 마르코프 의사결정 과정 (MDP)은 다음과 같이 정의된다.

$$MDP = (\boldsymbol{S}, A, P^a, R^a, \gamma)$$

$\Rightarrow \boldsymbol{S} = \{s_1, s_2, s_3, \dots\}$: 에이전트가 취할 수 있는 상태 (state)의 집합.

마르코프 의사결정 과정 : 행동

- 마르코프 의사결정 과정 (MDP)은 다음과 같이 정의된다.

$$MDP = (S, \boldsymbol{A}, P^a, R^a, \gamma)$$

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{A} = \{a_1, a_2, a_3, \ldots\}$: 에이전트가 취할수 있는 행동 (action)의 집합.

$\Rightarrow$ 특정 시점 t 에서 행동 a를 취하는 경우 $A_t = a$와 같이 표기한다.

$\Rightarrow$ 격자세상 (grid world)에서는 $A = \{$위, 아래, 왼쪽, 오른쪽$\}$과 같다.

마르코프 의사결정 과정 : 전이확률

- 마르코프 의사결정 과정 (MDP)은 다음과 같이 정의된다.

$$MDP = (S, A, \boldsymbol{P^a}, R^a, \gamma)$$

$\Rightarrow \boldsymbol{P^a_{s\,s'}} = P(S_{t+1} = s' | S_t = s, A_t = a)$: 시점 t 에서 행동 a를 취한 경우 상태가 s에서 s'로 전이되는 확률이다.

$\Rightarrow$ 환경과 에이전트의 상호작용 : 에이전트가 행동을 취하면 전이확률을 통해서 다음으로 에이전트가 갈수 있는 상태를 알려준다.

마르코프 의사결정 과정 : 보상

- 마르코프 의사결정 과정 (MDP)은 다음과 같이 정의된다.

$$MDP = (S, A, P^a, \boldsymbol{R^a}, \gamma)$$

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{R_s^a} = E[R_{t+1} | S_t = s, A_t = a]$: 시점 t의 상태 s에서 행동 a를 취한 대가로 에이전트가 받는 보상이다.

$\Rightarrow$ $\boldsymbol{R_s^a}$와 같이 표기함은 기대값의 의미로의 보상이고 R_t, R_{t+1}등과 같이 표기함은 확률 변수의 의미로의 보상이다.

$\Rightarrow$ 시점 t에서의 행동에 따라서 보상이 전달되는 시점은 $t+1$이다.

마르코프 의사결정 과정 : 감가율

- 마르코프 의사결정 과정 (MDP)은 다음과 같이 정의된다.

$$MDP = (S, A, P^a, R^a, \boldsymbol{\gamma})$$

⇒ $\boldsymbol{\gamma}$: 과거 또는 미래의 행동에 대한 보상을 얼마만큼 반영할지 정하는 0과 1사이의 수치. 감마의 소문자 사용.

⇒ 예를 들어서 $\gamma = 0.9$ 라면 $\gamma^2 = 0.81, \gamma^3 = 0.729, \ldots$ 과 같다.

마르코프 의사결정 과정 : 감가율

- 마르코프 의사결정 과정 (MDP)은 다음과 같이 정의된다.

$$MDP = (S, A, P^a, R^a, \boldsymbol{\gamma})$$

⇒ 현재 시점 t에서 k만큼 지난 후에 보상 R_{t+k}을 받는다면 γ^{k-1}만큼의 감가가 적용된다. 미래의 가치를 현재의 가치로 환산하는 것과도 같다.

⇒ 할인된 미래 $t + k$의 보상 = $\gamma^{k-1} R_{t+k}$.

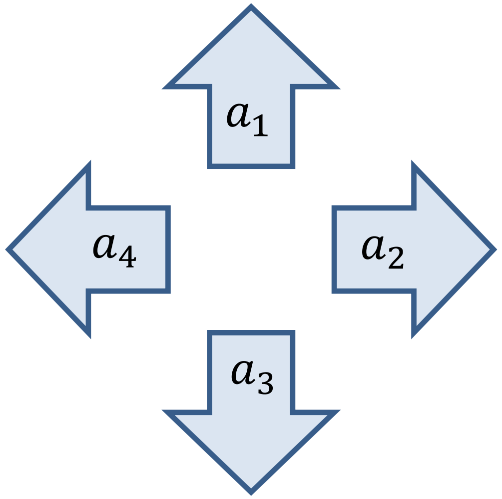
⇒ 다음과 같이 감가된 총 미래 보상 "반환값"을 정의할 수 있다.

$$G_t = R_{t+1} + \gamma R_{t+2} + \gamma^2 R_{t+3} + \cdots$$

격자세상 (Grid World)

- 다음과 같이 상태의 집합 S와 행동의 집합 A가 있다고 가정해 본다.

$\boldsymbol{s_1}$ 출발점	s_2	s_3 함정
s_4	s_5	s_6
s_7 함정	s_8	$\boldsymbol{s_9}$ 목적지

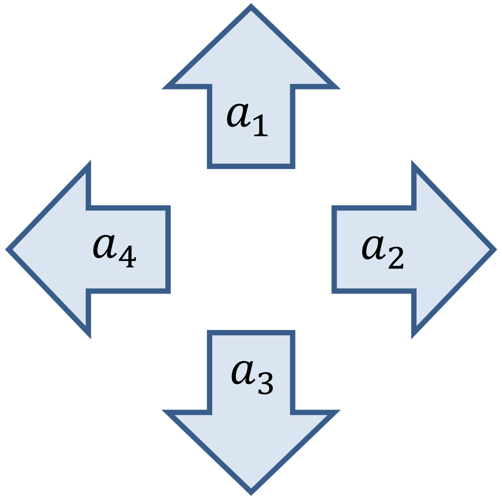


- 감가율 $\gamma = 0.9$임을 전제한다.

격자세상 (Grid World)

- 다음과 같은 보상 구조를 전제한다.

-0.02 출발점	-0.02	-1 함정
-0.02	-0.02	-0.02
-1 함정	-0.02	+1 목적지

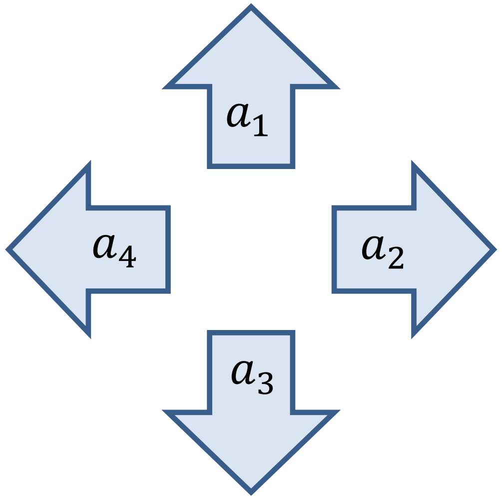


- 예를 들어서 s_1에서 행동 a_2를 연이어서 두번 취해서 상태를 $s_1 \rightarrow s_2 \rightarrow s_3$와 같이 변이하여 함정에 빠졌다면, -0.02, -1 과 같은 순서로 보상을 받는다.

격자세상 (Grid World)

- 다음과 같은 보상 구조를 전제한다.

-0.02 출발점	-0.02	-1 함정
-0.02	-0.02	-0.02
-1 함정	-0.02	+1 목적지



- 이런 경우 감가율을 적용한 반환값은 $-0.02 + 0.9\times(-1) = -0.92$와 같다.

베이즈 통계

키포인트

- 베이즈 정리와 베이즈 통계.
- 사전확률과 사후확률.
- 우도함수.
- 켤레 사전 확률분포 (conjugate prior).

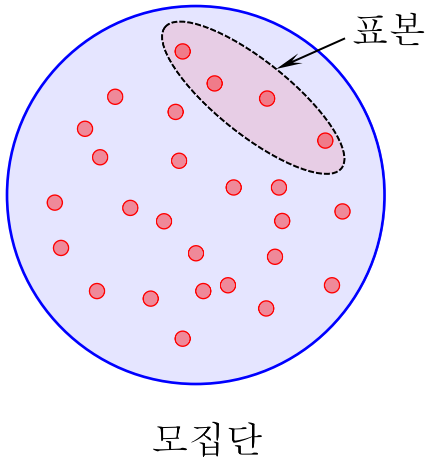
베이즈 통계

- 통계학에서는 크게 두가지 접근 방법이 있다.

⇒ 고전 통계:

✓ **확정적**인 모집단과 모수 (μ, σ^2 등) 전제. 표본으로 추론한다.

✓ 과거 데이터 분석.



베이즈 통계

- 통계학에서는 크게 두가지 접근 방법이 있다.

  ⇒ 고전 통계:

"우리가 지금까지 강의를 통해서 배워온 통계"

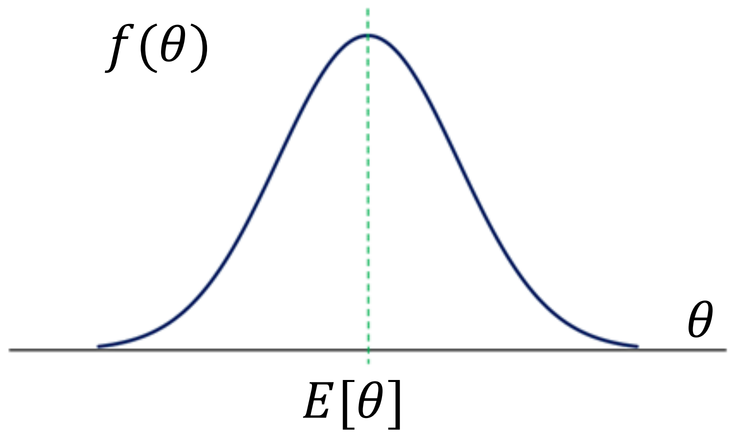
베이즈 통계

- 통계학에서는 크게 두가지 접근 방법이 있다.

  ⇒ 베이즈 통계:

  ✓ 모수 θ를 확률적으로 묘사하며 실증적이며 주관적인 전제를 포함한다.

  ✓ 현재 진행형 데이터 분석.



베이즈 통계

- 통계학에서는 크게 두가지 접근 방법이 있다.

⇒ 베이즈 통계:

“베이즈 통계를 제대로 다루려면 많은 시간이 필요하다”

“이번 강의에서는 간략하게 그 취지와 원리에 대해서 알아본다”

베이즈 통계 원리

- 사전 확률 (prior)를 전제하고 새로운 증거 (data)를 가지고 갱신해서 사후 확률 (posterior)를 얻는다.

사전 확률 (prior) AND 새로운 증거 (data) ⇒ 사후 확률 (posterior)

베이즈 통계 원리

- 베이즈 정리를 다시한번 살펴본다.
- 상기해 보면 확률의 곱셈법칙을 변형하여 베이즈 정리를 도출해 낼 수 있었다.

$$P(A|B)P(B) = P(A \cap B) = P(B|A)P(A)$$

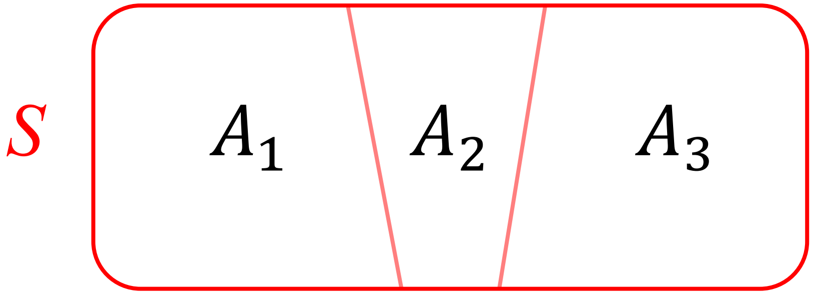
$$\Downarrow$$

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)}$$

베이즈 통계 원리

- "사건"의 표본공간 S는 서로 교차하지 않는 부분집합 $A_1, A_2, \ldots, A_K$로 이루어져 있다고 전제한다. $\Rightarrow$ 한정적 가짓수 K, 즉 "이산적"인 경우.

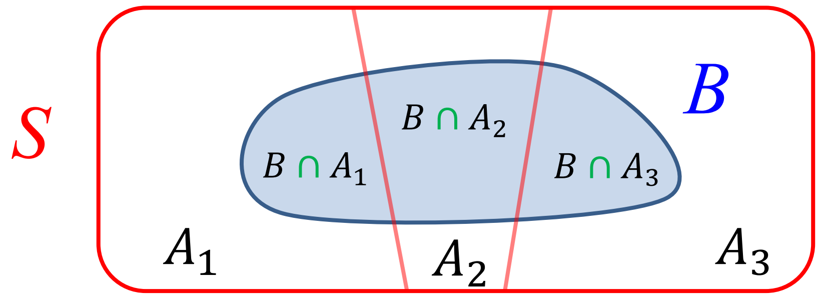
$$S = A_1 \cup A_2 \cup \cdots \cup A_K$$



베이즈 통계 원리

- 그러면 특정 사건 B는 다음과 같은 부분들의 합집합이다.

$$B = (B \cap A_1) \cup (B \cap A_2) \cup \cdots \cup (B \cap A_K)$$



- 곱셈법칙 $P(B \cap A_i) = P(B|A_i)P(A_i)$을 적용해서 $P(B)$를 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$P(B) = P(B|A_1)P(A_1) + P(B|A_2)P(A_2) + \cdots + P(B|A_K)P(A_K) = \sum_{j=1}^{K} P(B|A_j)P(A_j)$$

베이즈 통계 원리

- 그리고, 베이즈 정리를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

$$P(A_i|B) = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{P(B)} = \frac{P(B|A_i)\,P(A_i)}{\sum_{j=1}^{K} P(B|A_j)P(A_j)}$$

베이즈 통계 원리

- 그리고, 베이즈 정리를 다음과 같이 나타낼 수 있다.

우도함수 사전확률

$$\boxed{P(A_i|B)} = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{P(B)} = \frac{\boxed{P(B|A_i)}\,\boxed{P(A_i)}}{\sum_{j=1}^{K} P(B|A_j)P(A_j)}$$

사후확률

$\Rightarrow$ 사전확률은 **주관적인** 사전 지식을 반영한다.

베이즈 통계 원리

- 이산의 경우와 유사하게 연속변수 θ에 대한 조건부 확률도 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\pi(\theta|x) = \frac{f(x|\theta)\,\pi(\theta)}{f(x)}$$

$\Rightarrow f(x) = \int f(x|\theta')\,\pi(\theta')d\theta'$

$\Rightarrow x$는 데이터를 의미한다.

베이즈 통계 원리

- 이산의 경우와 유사하게 연속변수 θ에 대한 조건부 확률도 다음과 같이 구할 수 있다.

$$\underbrace{\boxed{\pi(\theta|x)}}_{\text{사후확률밀도}} = \frac{\underbrace{\boxed{f(x|\theta)}}_{\text{우도함수}}\,\underbrace{\boxed{\pi(\theta)}}_{\text{사전확률밀도}}}{f(x)}$$

$$\propto f(x|\theta)\,\pi(\theta)$$

$\Rightarrow$ 사전확률밀도는 **주관적인** 사전 지식을 반영한다.

$\Rightarrow$ 중요한 것은 등호 오른편 분자와의 비례관계이다.

베이즈 통계 원리

- 연속변수 θ가 모수를 나타낸다면 사후확률밀도 $\pi(\theta|x)$를 사용하여 모수의 기대값 (평균)을 구할 수 있다. → "θ의 모평균"

$$E[\theta|x] = \int \theta' \, \pi(\theta'|x) \, d\theta'$$

⇒ 모수는 더이상 확정적이 아니며 확률적으로 묘사한 것이 된다.

⇒ 사전 지식에 실증적 데이터 x를 가미하여 얻은 결과이다.

켤레 사전 확률분포

- 사전확률분포와 사후확률분포가 동일한 종류의 확률분포에 속하는 경우.

  예). 사전, 사후확률분포 둘 다 **베타확률 분포**가 되는 경우가 있다.

  베타확률 분포로 사전확률을 표현하면 사후확률도 베타확률 분포이다.

- 그런데, 모든 경우에 켤레 사전 확률분포가 존재하는 것은 아니다.

  ⇒ 우도함수가 “적절한” 형태 이어야만 한다.

  ⇒ 적절한 우도함수가 주어지면 켤레 사전 확률분포를 선택해서 쉽게 사후확률분포를 계산할 수 있다.

켤레 사전 확률분포

- 적절한 우도함수가 주어지면 켤레 사전 확률분포를 선택해서 쉽게 사후확률분포를 계산할 수 있다.

우도함수	켤레 사전 확률분포
이항확률분포	베타확률분포
정규확률분포 (모분산 σ^2을 알 때)	정규확률분포
정규확률분포 (모평균 μ을 알 때)	역감마분포
푸아송분포	감마분포
⋮	⋮

켤레 사전 확률분포 예시

- 우도함수가 이항 확률분포로 주어질 수 있는 상황을 전제해 본다.

  ⇒ 이항 확률분포는 이분법적 상황에서 n회 시행하여 “성공”한 횟수 x에 대한 확률을 계산해 준다.

  ⇒ 우도함수를 다음 **이항 확률분포**로 모델링할 수 있는 경우를 전제해 본다.

$$f(x|\theta) = \binom{n}{x}\theta^x(1-\theta)^{n-x} \longleftarrow \theta \in [0,1]$$

$$\propto \theta^x(1-\theta)^{n-x}$$

켤레 사전 확률분포 예시

- 그러면 사전확률분포로 베타확률분포를 선택해서 표현한다. C는 상수이다.

$$\pi(\theta) = C\ \theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}$$

$\Rightarrow$ 베타확률분포 $Beta(\alpha,\beta)$에는 두개의 파라미터 α,β가 있다.

$\Rightarrow$ 베타확률분포 $Beta(\alpha,\beta)$의 평균은 $\frac{\alpha}{\alpha+\beta}$이다.

결레 사전 확률분포 예시

- 우도함수와 사전확률분포를 곱해서 사후확률분포를 구한다.

$\Rightarrow$ C'에는 우도함수의 상수, 사전확률분포의 상수, 분모 등이 흡수되어 있다.

$$\pi(\theta|x) = C' f(x|\theta)\,\pi(\theta)$$

$$= C'\theta^{x}(1-\theta)^{n-x} \times \theta^{\alpha-1}(1-\theta)^{\beta-1}$$

$$= C'\theta^{\alpha+x-1}(1-\theta)^{\beta+n-x-1}$$

$\Rightarrow$ 이 것은 또다른 베타확률분포 $Beta(\alpha+x, \beta+n-x)$이다. 확인!

$\Rightarrow$ 사후확률분포의 평균은 $\frac{\alpha+x}{\alpha+\beta+n}$이다. 즉, θ의 평균이 갱신되었다!

켤레 사전 확률분포 예시

- 정리해 보면,

  1). 모수 θ는 베타확률 $Beta(\alpha, \beta)$로 묘사 할 수 있다는 사전지식이 있었다.

  2). n회 시행해서 x회 성공했다는 데이터가 있다.

  3). 사전지식과 데이터를 "융합"하여 사후지식을 얻었다.

  4). "모수 θ는 $Beta(\alpha', \beta')$로 묘사 가능하다"가 바로 사후지식이다.

  여기서 $\alpha' = \alpha + x$이며 $\beta' = \beta + n - x$ 이다.

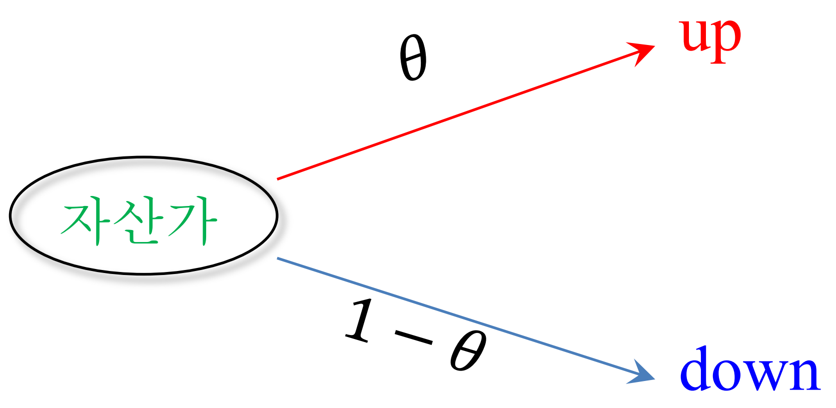
- 사후확률분포를 다음 라운드에서는 사전확률분포로 사용할 수 있다!

켤레 사전 확률분포- 구체적인 예

- 어느 자산의 가격이 상승(up) 또는 하락(down) 두 방향으로 변동할 수 있는 상황.

$\Rightarrow$ θ는 자산의 가격이 상승할 확률이며 관심 대상인 모수이다. $\theta \in [0,1]$ 이다.

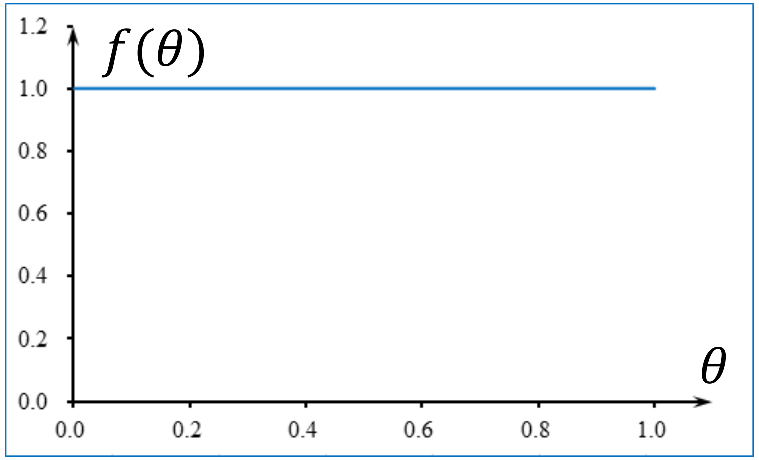
$\Rightarrow$ 이분법적 상황. 그러므로: 우도함수 = 이항확률 & 사전확률 = 베타.



켤레 사전 확률분포- 구체적인 예

- 사전지식이 전무한 경우 사전확률분포는 $Beta(1,1) = 1$이다.

$\Rightarrow \theta$의 기대값 $= \dfrac{\alpha}{\alpha+\beta} = \dfrac{1}{1+1} = 0.5$



- 만약에 θ에대해서 유용한 사전지식이 있다면 α와 β에 반영할 수도 있다!

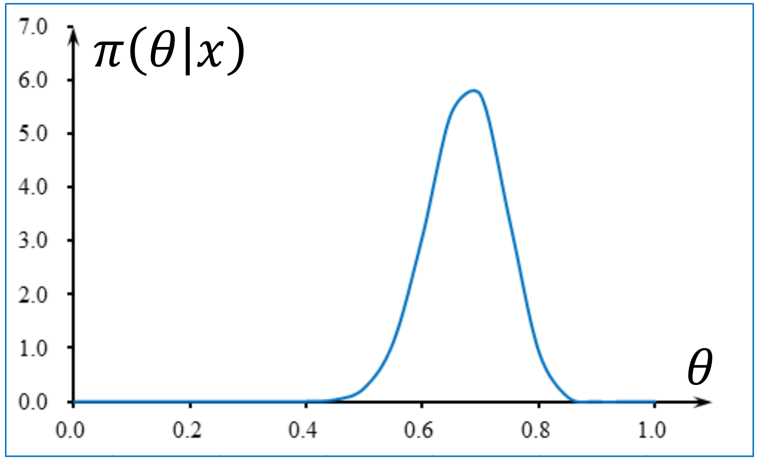
켤레 사전 확률분포- 구체적인 예

- 만약에 47회 관찰 했더니 32회 상승했고 15회 하락했다 한다면,

  ⇒ 사후확률분포는 $Beta(33,16)$이다.

  $\alpha' = 1 + 32 = 33$이며 $\beta' = 1 + 15 = 16$와 같이 갱신된다.

  ⇒ θ의 기대값 $= \frac{\alpha'}{\alpha'+\beta'} = \frac{33}{33+16} \cong 0.67$



켤레 사전 확률분포 : 문제점

- 이전 예시는 정확한 수식으로 계산이 가능한 lucky한 경우에 해당한다.
- 그런데 켤레 사전확률이 없거나 수식으로 "쉽게" 계산할 수 없는 경우에는 어떻게 하는가? 어떻게 일반화 할 수 있는가?

결레 사전 확률분포 : 문제점

- 이전 예시는 정확한 수식으로 계산이 가능한 간단한 경우에 해당한다.
- 그런데 결레 사전확률이 없거나 수식으로 "쉽게" 계산할 수 없는 경우에는 어떻게 하는가? 어떻게 일반화 할 수 있는가?

⇒ 마르코프 연쇄 몬테카를로 방법을 사용할 수 있다!

⇒ 다음 강의에서 자세히 알아보도록 한다.

마르코프 연쇄 몬테카를로

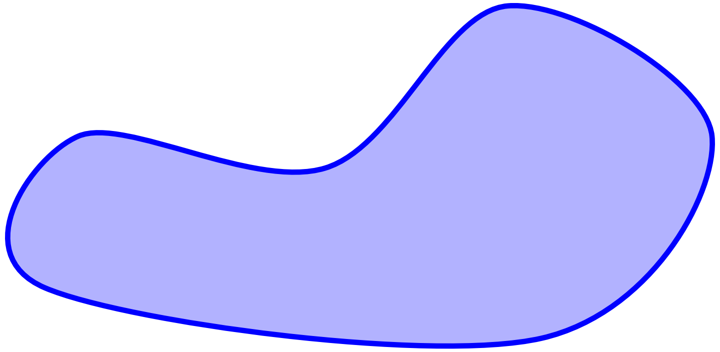
키포인트

- 몬테카를로 적분.
- 베이즈 통계.
- 마르코프 불변 확률분포 (stationary distribution).
- 마르코프 연쇄 몬테카를로 (Markov Chain Monte Carlo, MCMC).

몬테카를로 적분 : 원리

- 다음 음영 부분의 면적을 구하고자 한다.

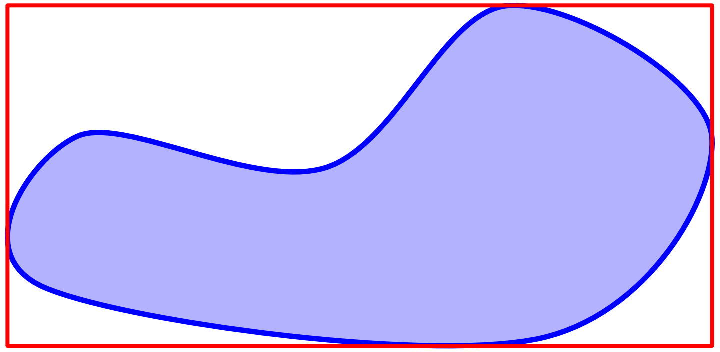
  $\Rightarrow$ 적분? $\Rightarrow$ 하지만 어렵다!



몬테카를로 적분 : 원리

- 다음 음영 부분의 면적을 구하고자 한다.

$\Rightarrow$ 다음과 같이 면적을 구하기 쉬운 직사각형으로 가두어 둔다.

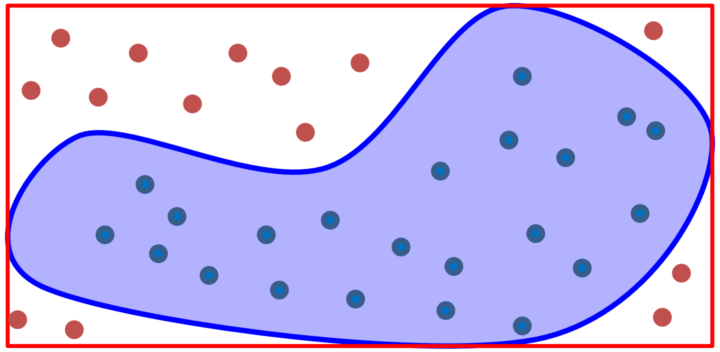


$\Leftarrow$ 직사각형의 면적 $= A_{\square}$

몬테카를로 적분 : 원리

- 다음 음영 부분의 면적을 구하고자 한다.

⇒ 랜덤으로 좌표를 점으로 찍어 본다. “시뮬레이션”

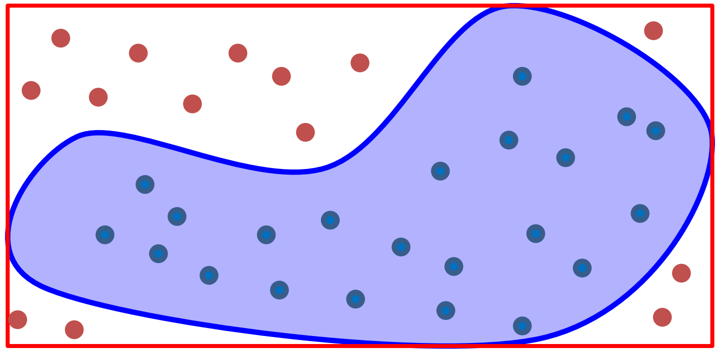


⇒ 어떤 점은 음영 안에 있고 (파란색) 또한 어떤 점은 음영 바깥에 있다 (빨간색).

몬테카를로 적분 : 원리

- 다음 음영 부분의 면적을 구하고자 한다.

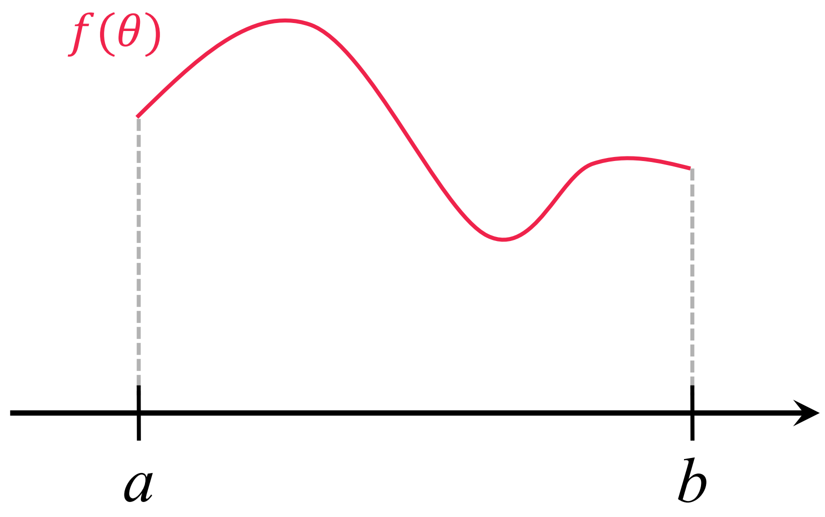
  ⇒ 랜덤으로 좌표를 점으로 찍어 본다. “시뮬레이션”



$$A_{\text{음영}} \cong \frac{N_{in}}{N_{tot}} \times A_{\square} \qquad \begin{cases} N_{in} = \text{음영 안의 점의 개수} \\ N_{tot} = \text{전체 점의 개수} \end{cases}$$

몬테카를로 적분 : 일반화

- 다음과 같이 구간 $[a, b]$ 에서 정의된 확률 분포 $f(\theta)$를 가정한다



몬테카를로 적분 : 일반화

- 마찬가지로 구간 $[a, b]$에서 정의된 함수 $g(\theta)$에 대한 적분을 구하고자 한다.

$$I = \int_a^b g(\theta) f(\theta) d\theta$$

몬테카를로 적분 : 일반화

- 마찬가지로 구간 $[a, b]$에서 정의된 함수 $g(\theta)$에 대한 적분을 구하고자 한다.

$$I = \int_a^b g(\theta) f(\theta) d\theta$$

어렵다?

몬테카를로 적분 : 일반화

- 몬테카를로는 랜덤 넘버를 생성하여 적분의 근사값을 구하는 방법이다.

$$I = \int_a^b g(\theta) f(\theta) d\theta$$

$$\cong \frac{g(\theta^1)+g(\theta^2)+g(\theta^3)+\cdots+g(\theta^M)}{M}$$

$\Rightarrow$ $\theta^1, \theta^2, \theta^3, \ldots, \theta^M$은 확률분포 $f(\theta)$에 의해서 생성된 랜덤 넘버이다.

$\Rightarrow$ 고차원 적분도 쉽게 구할 수 있다는 장점이 있다. $I = \int\int\int \cdots dx_1 dx_2 \cdots$

$\Rightarrow$ 몬테카를로 계산 오차 $\sim 1/\sqrt{M}$

베이즈 통계 기대값과 몬테카를로 적분

- 연속변수 θ가 모수를 나타낸다면 사후 확률밀도 $\pi(\theta|x)$를 사용하여 모수의 기대값 (평균)을 구하려 한다. 수식 만으로 "쉽게" 계산할 수 없는 경우를 가정해 본다.

$$E[\theta|x] = \int \theta\, \pi(\theta|x)\, d\theta$$

$$\cong \frac{\theta^1 + \theta^2 + \theta^3 + \ldots + \theta^M}{M}$$

$\Rightarrow$ $\theta^1, \theta^2, \theta^3, \ldots, \theta^M$은 사후 확률밀도 $\pi(\theta|x)$을 따라서 랜덤으로 생성되었다.

$\Rightarrow$ 결론적으로 사후 확률밀도 $\pi(\theta|x)$의 랜덤 샘플링 방법이 필요하다!

마르코프 연쇄 : 전이행렬

- 전이행렬 $\tilde{T}$ 는 현재 상태를 1 타임스텝 전진시켜 준다.

$$y_{t+1} = y_t \tilde{T}$$

- 전이행렬의 원소는 상태 s_i 에서 s_j로 전이되는 확률을 나타낸다.

$$T_{i,j} = p(y_{t+1} = s_j | y_t = s_i)$$

$\Rightarrow P(y_{t+1} = s_j) = \sum_i p(y_{t+1} = s_j | y_t = s_i)\, P(y_t = s_i)$ "이산 변수"

$\Rightarrow f(\theta_{t+1}) = \int \boxed{f(\theta_{t+1}|\theta_t)}\, f(\theta_t) d\theta_t$ "연속 변수"

전이핵

마르코프 연쇄 : 안정상태와 불변 확률분포

- 전이행렬을 거듭해서 적용 (곱하기)하다 보면 다음과 같이 변화가 멈춘 상태가 될 수 있다. 이것을 안정상태 (steady state)라 부른다.

$$\tilde{T}^{\,i} = \tilde{T}^{\,i+1} = \tilde{T}^{\,i+2} = \cdots$$

예). $\tilde{T} = \begin{bmatrix} 0.95 & 0.05 \\ 0.2 & 0.8 \end{bmatrix} \Rightarrow \tilde{T}^{\,100} = \tilde{T}^{\,101} = \tilde{T}^{\,102} = \cdots = \tilde{T}_{steady}$

$$\tilde{T}_{steady} = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.8 & 0.2 \end{bmatrix}$$

마르코프 연쇄 : 안정상태와 불변 확률분포

- 안정상태에 다다른 후에는 초기 상태가 $s_1 = (1 \quad 0)$이건 $s_2 = (0 \quad 1)$이건 동일한 확률분포를 보인다. → "불변 확률분포"

예). $\tilde{T}_{steady} = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.8 & 0.2 \end{bmatrix}$ 일때,

$$s_1 \tilde{T}_{steady} = (1 \quad 0) \begin{bmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.8 & 0.2 \end{bmatrix} = (0.8 \quad 0.2)$$

$$s_2 \tilde{T}_{steady} = (0 \quad 1) \begin{bmatrix} 0.8 & 0.2 \\ 0.8 & 0.2 \end{bmatrix} = (0.8 \quad 0.2)$$

마르코프 연쇄 : 안정상태와 불변 확률분포

- 연속형 변수 θ의 경우 이어서 여러 번 적분을 해줌으로서 불변확률분포 $f_s(\theta)$를 얻을 수 있다.

$$f(\theta_2) = \int f(\theta_2|\theta_1)\, f(\theta_1) d\theta_1$$

$$f(\theta_3) = \int f(\theta_3|\theta_2)\, f(\theta_2) d\theta_2$$

$$f(\theta_4) = \int f(\theta_4|\theta_3)\, f(\theta_3) d\theta_3$$

$$\vdots$$

$$f_s(\theta)$$

마르코프 연쇄 : 안정상태와 불변 확률분포

- 연속형 변수 θ의 경우 이어서 여러 번 적분을 해줌으로서 불변확률분포 $f_s(\theta)$를 얻을 수 있다.
- 다음과 같이 표현할 수도 있다.

$$f_s(\theta) = \int \cdots \int \cdots f(\theta_4|\theta_3) f(\theta_3|\theta_2) f(\theta_2|\theta_1) f(\theta_1) d\theta_1\, d\theta_2 d\theta_3 \cdots$$

마르코프 연쇄 몬테카를로 : 적분

- 사후 확률밀도 $\pi(\theta|x)$와 같은 "불변확률"을 갖는 "전이핵" $f(\theta_{t+1}|\theta_t)$을 고안해서 몬테카를로 방법을 적용한다.

$$f_s(\theta) = \int \cdots \int \cdots f(\theta_4|\theta_3) f(\theta_3|\theta_2) f(\theta_2|\theta_1) f(\theta_1) d\theta_1 \, d\theta_2 d\theta_3 \cdots$$

$$f_s(\theta) \rightarrow \pi(\theta|x)$$

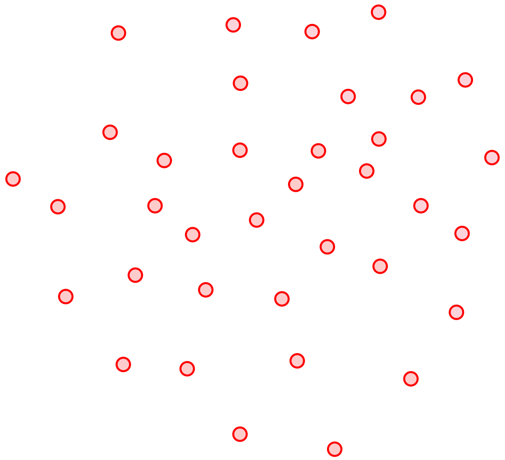
$\Rightarrow$ 사후 확률밀도 $\pi(\theta|x)$를 랜덤 샘플링 한 것과 같다. 결과는 샘플 (표본)이다!

$\Rightarrow$ 베이즈 기대값을 구할 수 있다.

Metropolis-Hastings 알고리즘

1). 불변확률은 초기 상태와는 무관하므로 샘플링하기 편리한 확률분포 $f(\theta)$를 사용하여 첫 스텝에 해당하는 θ_1의 표본을 확보해 둔다.

$\boldsymbol{\theta_1}$



Metropolis-Hastings 알고리즘

2). 샘플링하기 편리한 제안분포 $q(\theta|\theta_t)$를 선택한다.

⇒ 정규분포를 제안분포로 사용할 수 있다. d는 임의의 양수이다.

$$q(\theta|\theta_t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}d} e^{-\frac{(\theta-\theta_t)^2}{2d^2}}$$

⇒ 이 경우 $q(\theta|\theta_t) = q(\theta_t|\theta)$와 같다.

Metropolis-Hastings 알고리즘

3). 스텝 t에 해당하는 샘플이 있을 때 전이핵 $f(\theta_{t+1}|\theta_t)$을 다음 방식으로 샘플링하여 한 스텝 전진시킨다: $t \to t+1$.

$\Rightarrow$ (정규분포) 제안분포를 샘플링하여 θ^*를 얻고 사후확률의 비율 r을 구한다:

$$r = \frac{\pi(\theta^*|x)}{\pi(\theta_t|x)} = \frac{f(x|\theta^*)\,\pi(\theta^*)}{f(x|\theta_t)\,\pi(\theta_t)}$$

분자와 분모에서 베이즈 정리 사용.

Metropolis-Hastings 알고리즘

3). 스텝 t에 해당하는 샘플이 있을 때 전이핵 $f(\theta_{t+1}|\theta_t)$을 다음 방식으로 샘플링하여 한 스텝 전진시킨다: $t \rightarrow t+1$.

$\Rightarrow$ (정규분포) 제안분포를 샘플링하여 θ^*를 얻고 사후확률의 비율 r을 구한다:

$$r = \frac{\pi(\theta^*|x)}{\pi(\theta_t|x)} = \frac{\boxed{f(x|\theta^*)}\,\pi(\theta^*)}{\boxed{f(x|\theta_t)}\,\pi(\theta_t)}$$

우도함수.

“전이핵” 아님!

Metropolis-Hastings 알고리즘

3). 스텝 t에 해당하는 샘플이 있을 때 전이핵 $f(\theta_{t+1}|\theta_t)$을 다음 방식으로 샘플링하여 한 스텝 전진시킨다: $t \to t+1$.

$\Rightarrow$ (정규분포) 제안분포를 샘플링하여 θ^*를 얻고 사후확률의 비율 r을 구한다:

$$r = \frac{\pi(\theta^*|x)}{\pi(\theta_t|x)} = \frac{f(x|\theta^*)\,\pi(\theta^*)}{f(x|\theta_t)\,\pi(\theta_t)}$$

$\Rightarrow$ r이 1보다 크면 $\theta_{t+1} = \theta^*$와 같이 표본을 한스텝 전진시킨다.

$\Rightarrow$ r이 1보다 작으면 $\boxed{U(0,1)}$ 랜덤넘버 r'을 생성해서,

$r \geq r'$이면 $\theta_{t+1} = \theta^*$와 같이 표본을 한 스텝 전진시키고

$r < r'$이면 $\theta_{t+1} = \theta_t$와 같이 한 스텝 전진시킨다.

0과 1 사이의 연속균등분포.

Metropolis-Hastings 알고리즘

4). 샘플을 여러 스텝 전진시키면 불변확률에 해당하는 샘플 (표본)을 얻게되고 이것이 바로 사후확률을 대표하게 된다. 이 샘플을 가지고 베이즈 기대값을 구할 수 있다.

$$E[\theta|x] \cong \frac{\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 + \ldots + \theta_M}{M}$$

은닉 마르코프 모델

키포인트

- 마르코프 연쇄.
- 은닉 마르코프 모델 (Hidden Markov Model, HMM).

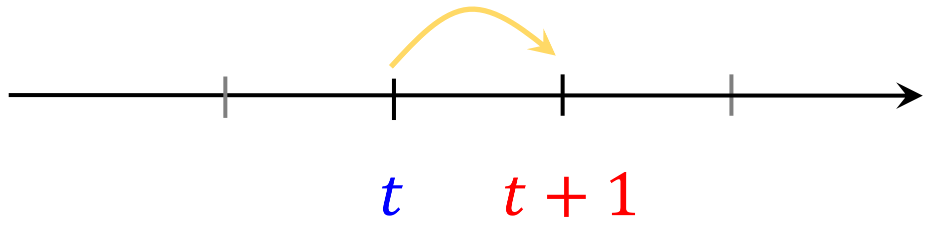
은닉 마르코프 모델의 용도

- 통신에서 많이 사용되는 모형.
- 자연어 분석, 음성인식, 강화학습, 등 AI에서 많이 사용 됨.
- 금융 모델링에도 활용됨.

마르코프 과정

- 미래의 확률이 바로 한 스텝 이전과 연결되며 더 오래된 과거는 필요없다.

$$P(x_{t+1}|x_t, x_{t-1}, x_{t-2}, \dots, x_1) = P(x_{t+1}|x_t)$$

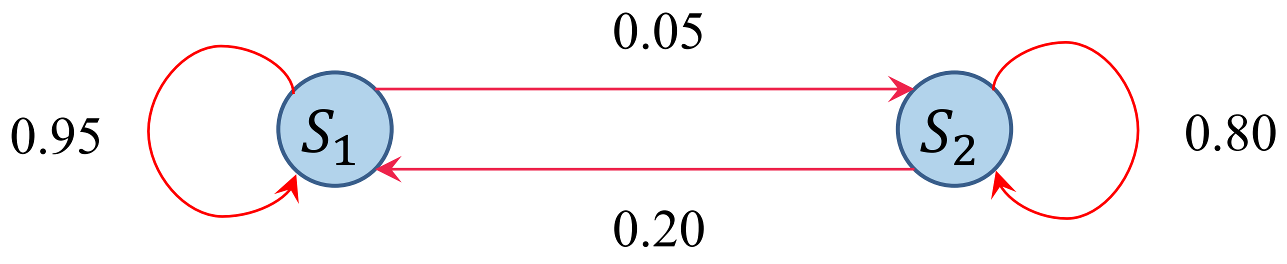


- 마르코프 연쇄는 시간이 이산적인 경우에 해당한다.
- 실제 상태는 직접 관찰 가능하다.

마르코프 과정 예시

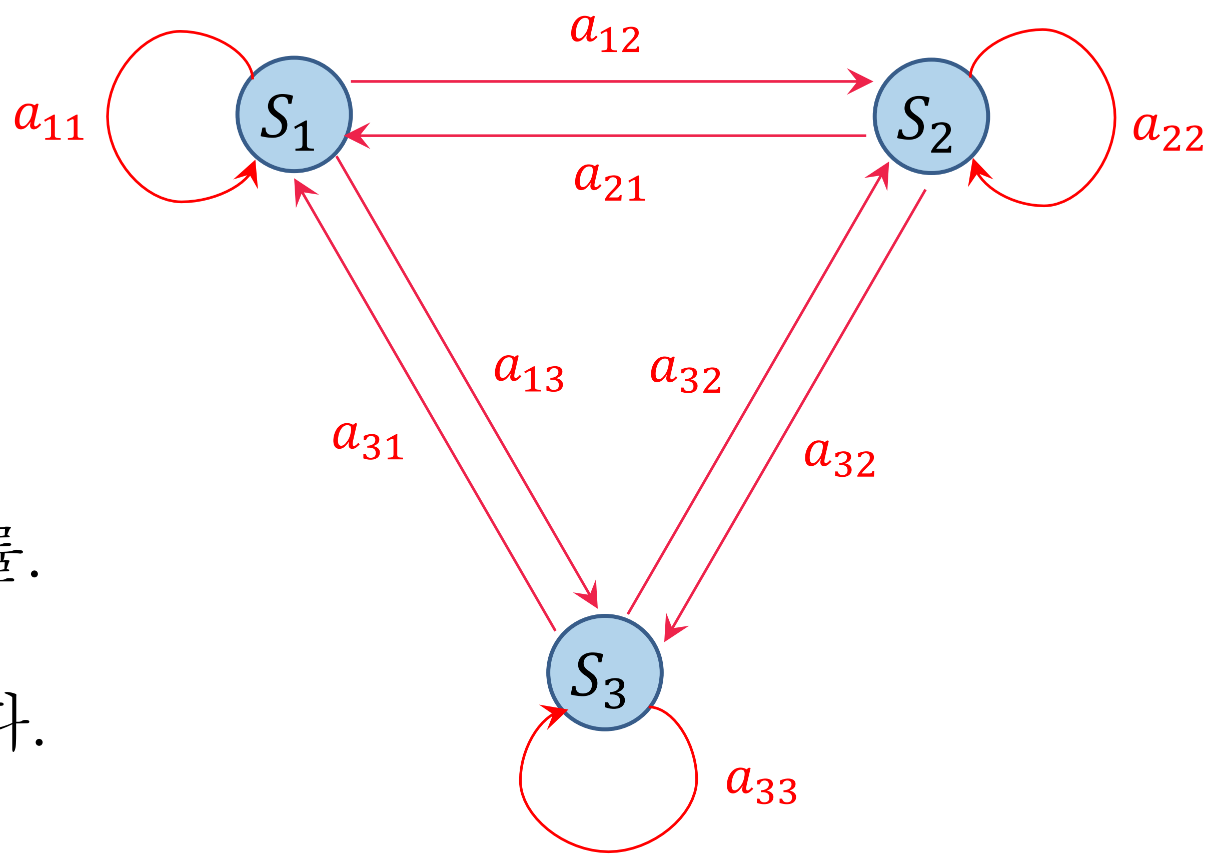
- 다음 예를 그래프로 나타내 본다.

  예). 오늘 S사의 주가가 상승했으면 내일도 95%의 확률로 주가가 오를것 이다. 또한, 오늘 S사의 주가가 하락했더라도 내일은 20%의 확률로 주가가 오를 것이다. 상승 상태는 S_1로 표기하고 하락 상태는 S_2로 표기한다.



마르코프 과정 예시

- 3 개의 **관찰 가능한** 상태 S_1, S_2, S_3이 있는 경우.



$\Rightarrow a_{ij}$ =전이확률.

$\Rightarrow \sum_j a_{ij} = 1$이다.

마르코프 연쇄

- 다음과 같이 전이해 갈 확률은?

$$\begin{array}{cccc} t: & 1 & 2 & 3 \\ \hline & S_1 & \rightarrow S_2 & \rightarrow S_1 \end{array}$$

$\Rightarrow P(x_3 = S_1, x_2 = S_2, x_1 = S_1)$

$$= p(x_3 = S_1 | x_2 = S_2) p(x_2 = S_2 | x_1 = S_1) P(x_1 = S_1)$$

$\Rightarrow$ 한 스텝씩 전진해 나가며 전이확률을 곱해준다.

- 일반화 해서 $x_1, x_2, x_3, \cdots, x_T$와 같은 시퀀스의 확률은 다음과 같다.

$$P(x_T, \cdots, x_3, x_2, x_1) = p(x_T | x_{T-1})\, p(x_{T-1} | x_{T-2}) \cdots p(x_2 | x_1) P(x_1)$$

은닉 마르코프 모델

- 은닉 마르코프 모델은 다음과 같이 정의한다.

  $\Rightarrow$ 직접 관찰이 **불가능한** 상태 $S_1, S_2, \ldots, S_N$가 있다.

  $\Rightarrow$ 직접 관찰이 **가능한** 값 $O_1, O_2, \cdots, O_M$이 있다. $N = M$ 또는 $N \neq M$.

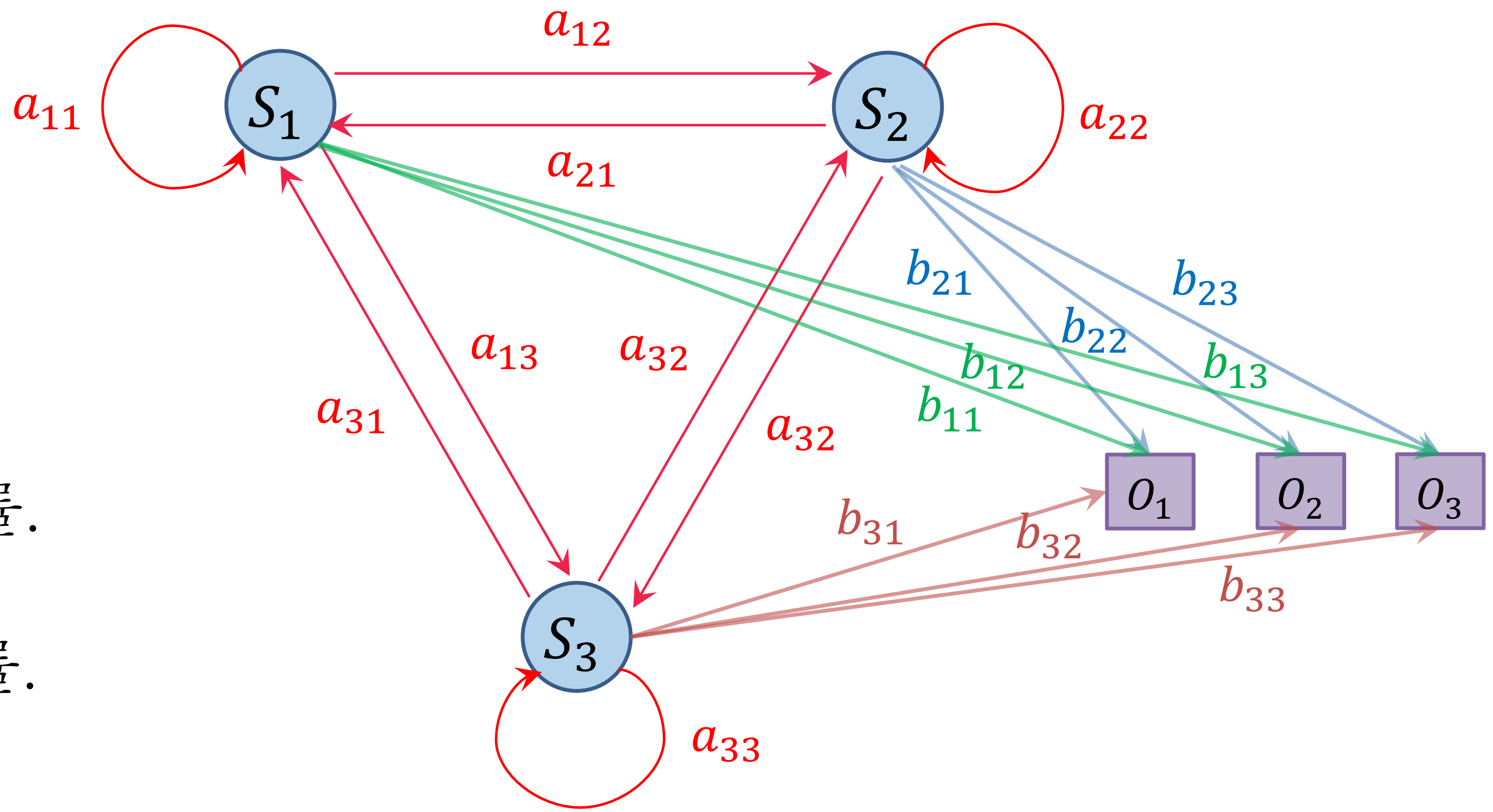
  $\Rightarrow$ $S_i \rightarrow S_j$ 전이에 해당하는 확률은 a_{ij}이다.

  $\Rightarrow$ S_i 가 O_j로 관찰될 확률은 b_{ij}이다.

  $\Rightarrow$ 초기상태를 나타내는 확률분포 $P(x = S_i), 1 \leq i \leq N$가 있다.

은닉 마르코프 모델의 예시

- S_1, S_2, S_3은 은닉된 상태이고 O_1, O_2, O_3는 관찰 가능한 값이다.

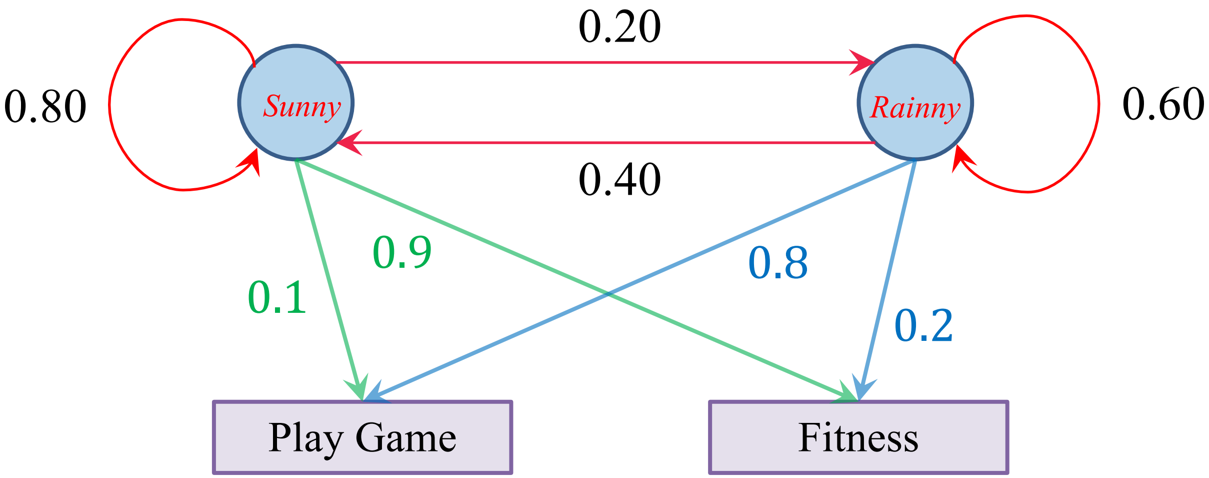


$\Rightarrow a_{ij}$ =전이확률.

$\Rightarrow b_{ij}$ =출력확률.

은닉 마르코프 모델의 예시

- 영희와 철수는 멀리 떨어져서 살고 있고 안부를 전화로 물어볼 수 밖에 없다. 철수의 일과는 크게 “게임” 또는 “피트니스” 두 가지가 있는데, 무엇을 할지는 당일 날씨에 따라 결정된다.
- 영희는 철수가 살고 있는 지역의 날씨에 관해서 정확히는 모르고 “확률적” 성향만을 알고 있을 뿐이다. 영희는 철수와의 통화내용에 기반하여 그 지역의 날씨를 예측해보려고 한다.



은닉 마르코프 모델 : 디코딩 문제

- 은닉 상태의 시퀀스 $s_1, s_2, s_3, \cdots, s_T$와 관찰값의 시퀀스 $o_1, o_2, o_3, \cdots, o_T$를 전제해 본다.

은닉 상태 s_t는 관찰값 o_t를 통해서 나타난다고 생각할 수 있다.

- 그러므로 은닉 상태에 대한 정보는 다음의 조건부 **사후확률**을 통해서 알 수 있다.

$$P(s_1, s_2, s_3, \cdots, s_T | o_1, o_2, o_3, \cdots, o_T)$$

- 이것을 베이즈 정리를 적용하여 다음 비례관계로 표현할 수 있다.

$$P(s_1, s_2, s_3, \cdots, s_T | o_1, o_2, o_3, \cdots, o_T) \propto \boldsymbol{P(o_1, o_2, o_3, \cdots, o_T | s_1, s_2, s_3, \cdots, s_T)}\, P(s_1, s_2, s_3, \cdots, s_T)$$

은닉 마르코프 모델 : 디코딩 문제

- 가장 유력한 은닉 상태 시퀀스를 찾아내고자 한다면 사후확률을 최고화 (maximize) 해야 한다.

⇒ "우도함수" $\boldsymbol{P(o_1, o_2, o_3, \cdots, o_T | s_1, s_2, s_3, \cdots, s_T)}$의 최고화를 통해서 달성!

⇒ 구체적으로는 "Viterbi 알고리즘"을 사용할 수 있다.

끝