확률통계 및 공통 알고리즘

6. 공통 알고리즘 -I

임채영

서울대학교

이번 강의에서 다룰 내용

- 함수의 해 찾기
- 기초적인 최적화 알고리즘
- MM 알고리즘
- EM 알고리즘
- 몬테카를로 방법 (Monte Carlo method)
- 변분추론 (Variational inference) -ELBO 최적화

최적화 (optimization) 방법들

- 통계분석 방법이나 기계학습 방법등 많은 데이터 분석 방법에서는 목적함수(objective function)가 최소 또는 최대가 되도록 하는 모수를 찾는것이 필요하다.
- 손실함수인 경우 최소가 되도록 하고 가능도 함수인 경우는 최대가 되게 한다.

  예: 최소제곱법, 최대가능도법 등
- 함수의 최대 또는 최소가 되는 해를 찾는 알고리즘들을 최적화 알고리즘 (optimization algorithm)이라고 한다.

함수의 해 찾기 (Finding a root)

- 목적함수가 미분가능한 경우 목적함수의 최대(최소)를 찾는것은 미분한 함수의 해를 찾는 문제와 같다.
- 즉, $f(x) = 0$을 만족시키는 x를 찾는 문제
- 함수의 해를 찾는 알고리즘들: 이분법(Bisection method),고정점 반복법 (Fixed point method), 뉴튼-랩슨 알고리즘 (Newton-Raphson method), 할선법 (Secant method)등

뉴튼-랩슨 방법 (Newton-Raphson Method)

- x^*를 $f(x)$의 해 (root)라고 하자. 즉, $f(x^*) = 0$
- N-R 알고리즘은 테일러 전개를 통해 유도할수 있다.

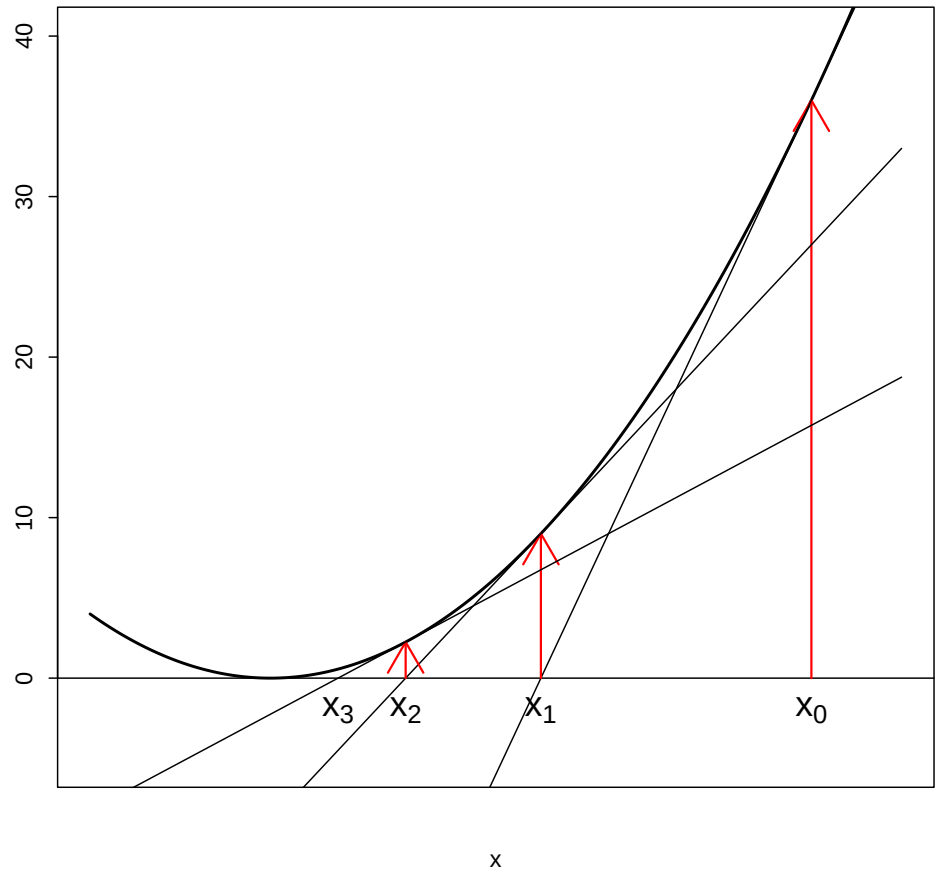
$$0 = f(x^*) \approx f(x_n) + f'(x_n)(x^* - x_n)$$

- $x^* \approx x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
- 따라서,

$$x_{new} = x_{old} - \frac{f(x_{old})}{f'(x_{old})}$$

기하학적 의미:

$0 = f'(x_{old})(x_{new} - x_{old}) + f(x_{old})$



할선법 (Secant Method)

- N-R 방법의 변형
- $f'(x)$를 수치적으로 근사하여 대입.
- 즉, $f'(x_r) \approx \frac{f(x_r)-f(x_{r-1})}{x_r-x_{r-1}}$을 이용.
- $x_{r+1} = x_r - \frac{x_r-x_{r-1}}{f(x_r)-f(x_{r-1})} f(x_r)$
- cf. N-R: $x_{r+1} = x_r - f(x_r)/f'(x_r)$
- 할선법은 다음의 경우 유용하다.
  - $f'(x)$를 구하기 어려울때,
  - f'를 계산하는것이 f를 계산하는것 보다 계산의 복잡도가 더 클때

최적화(Optimization)

- $\boldsymbol{x}_{opt} = \arg\min_{\boldsymbol{x}}(\text{or } \arg\max) F(\boldsymbol{x}), \ \ \boldsymbol{x} \in R^p$.
- 최대를 찾는 문제와 최소를 찾는 문제는 같은 방식으로 해결 가능 ($F(\boldsymbol{x})$를 $-F(\boldsymbol{x})$로 바꾸기)
- F'을 쉽게 구할 수 있으면 함수의 해를 찾는 문제, 즉 $F'(x) = 0$을 찾는 알고리즘들을 사용할 수 있음.
- 아니면 다른 최적화 알고리즘 사용: 경사하강법 (Gradient descent method)등

다변량 뉴튼-랩슨 방법

- gradient vector (기울기 벡터)
  $\nabla F(\boldsymbol{x}) = (dF(\boldsymbol{x})/dx_1, \cdots, dF(\boldsymbol{x})/dx_p)$를 구하기 쉬우면,
  최적화 문제를 $\nabla F(\boldsymbol{x}) = 0$의 해를 찾는 문제로 본다.
- 다변량 함수의 테일러 전개를 이용 다변량 뉴튼-랩슨 방법을 유도할 수 있다.

$$\boldsymbol{x}_{new} = \boldsymbol{x}_{old} - \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_{old})^{-1} \nabla F(\boldsymbol{x}_{old}),$$

  $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}) = \nabla^2 F(\boldsymbol{x})$는 두번 미분한 함수들로 이루어진
  헤시안행렬 (Hessian matrix). $\boldsymbol{H}_{ij} = d^2 F(\boldsymbol{x})/dx_i dx_j$.
- $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x})$이 $\nabla F(\boldsymbol{x}) = 0$의 해 (stationary point)에서 양의 정부호 (positive definite) 일때, 국소 최소값(local minimum)을 찾을 수 있다.

경사하강법 (Gradient descent method)

- gradient vector $\nabla F(\boldsymbol{x}) = (dF(\boldsymbol{x})/dx_1, \cdots, dF(\boldsymbol{x})/dx_p)$는 목적함수 $y = F(\boldsymbol{x})$의 기울기벡터로 F값이 $\boldsymbol{x}$에서 가장 가파르게 증가하는 방향을 나타낸다.
- 따라서, 기존 위치 $\boldsymbol{x}_{old}$에서 가장 가파르게 감소하는 방향 $(-\nabla F(\boldsymbol{x}_{old}))$으로 α 만큼 업데이트 하도록 하는 알고리즘을 경사하강법 (Gradient Descent method, GD method)이라고 한다 (최소가 되는 $\boldsymbol{x}_*$를 찾는경우). 즉,

$$\boldsymbol{x}_{new} = \boldsymbol{x}_{old} - \alpha \nabla F(\boldsymbol{x}_{old}),$$

경사하강법의 이해

- 테일러 전개를 통한 2차함수 근사값을 최소화 하는 해를 찾는 문제로 볼 수 있다.

$$\begin{aligned} F(\boldsymbol{x}_{new}) \quad \approx \quad & F(\boldsymbol{x}_{old}) + \nabla F(\boldsymbol{x}_{old})^T(\boldsymbol{x}_{new} - \boldsymbol{x}_{old}) \\ & + \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_{new} - \boldsymbol{x}_{old})^T \nabla^2 F(\boldsymbol{x}_{old})(\boldsymbol{x}_{new} - \boldsymbol{x}_{old}) \end{aligned}$$

- 여기서 $\nabla^2 F(\boldsymbol{x}_{old}) = \frac{1}{\alpha}$로 바꾸고, 근사된 2차함수식을 최소가 되게하는 위치 $\boldsymbol{x}_{new}$를 찾으면 $\boldsymbol{x}_{new} = \boldsymbol{x}_{old} - \alpha \nabla F(\boldsymbol{x}_{old})$, 이 나온다.

최적화 문제에서 N-R 방법과 GD 방법의 차이

- $\text{argmin}_{\boldsymbol{x}} F(\boldsymbol{x})$ 에서
  - N-R은 $\nabla F(\boldsymbol{x}) = 0$의 해를 찾는 방법으로 접근
  - GD는 목적함수가 가장 가파르게 감소하는 방향으로 업데이트 하는 방법

경사하강법의 변형

- 스텝사이즈 (step size) α와 하강 방향을 조정함에 따라 다양한 변형된 방법이 존재한다.
- 주어진 목적함수의 형태에 따라 다양한 변형된 방법이 존재한다.

Stochastic GD method

- 목적함수가 $F(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} F_i(\boldsymbol{x})$의 형태인 경우 (예: Likleihood, n은 데이터 사이즈)
- $\nabla F(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} \nabla F_i(\boldsymbol{x})$이므로

$$\boldsymbol{x}_{new} = \boldsymbol{x}_{old} - \alpha \sum_{i=1}^{n} \nabla F_i(\boldsymbol{x}_{old})$$

- n이 클 경우 $\nabla F_i(\boldsymbol{x})$의 계산에 시간이 오래 걸릴 수 있다.
- SGD는 전체 gradient를 계산하지 않고 하나만 계산을 하여 업데이트 한다.

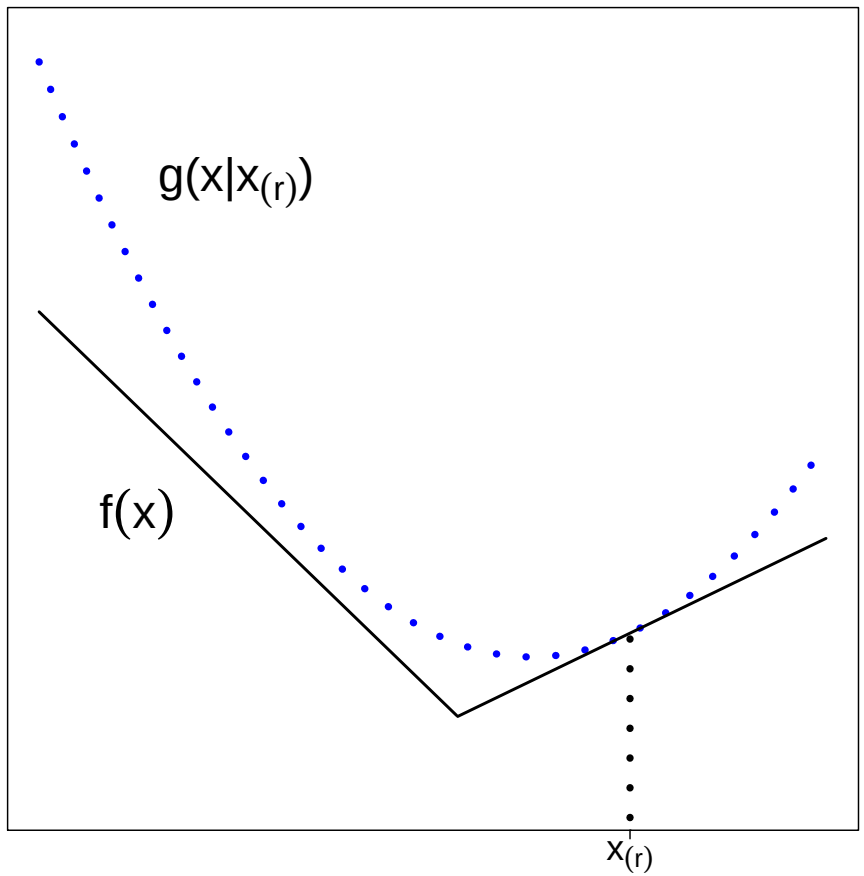
$$\boldsymbol{x}_{new} = \boldsymbol{x}_{old} - \alpha \nabla F_i(\boldsymbol{x}_{old})$$

- i는 $i = 1, \cdots, n$으로 차례로 선택하거나 랜덤하게 선택한다.

MM 알고리즘

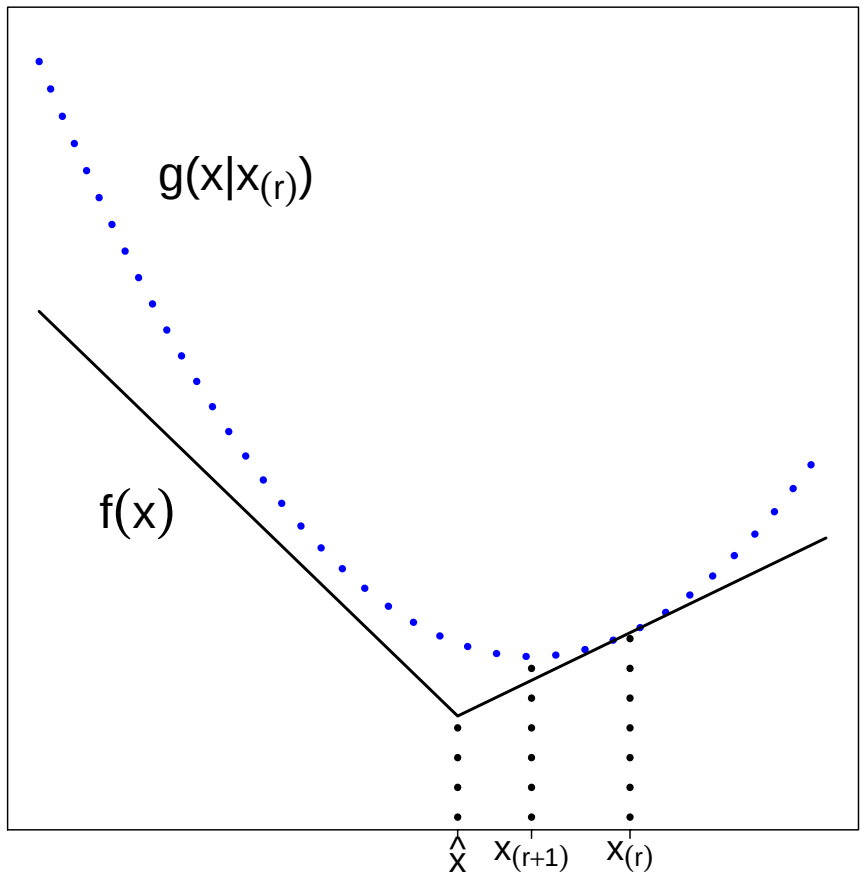
- MM 알고리즘은 볼록함수(Convex function)의 최소화 문제에서 대체 함수를 이용한 방법이다.
- EM 알고리즘은 MM 알고리즘의 특별 케이스로 볼 수 있다.
- MM은 최소화 문제에서는 Majorize-Minimize를 뜻하고, 최대화 문제에서는 Minorize-Maximize를 뜻한다.

- 최소화 문제 $\text{argmin}_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$로 생각해보자.
- Majorizing 함수, $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$는 다음과 같은 성질을 만족하는 함수이다.
  - $\boldsymbol{x}_{(r)}$에서 f와 같고 다른 $\boldsymbol{x}$에서는 f 보다 큰 함수, 즉, (1) $g(\boldsymbol{x}_{(r)}|\boldsymbol{x}_{(r)}) = f(\boldsymbol{x}_{(r)})$, (2) $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)}) \geq f(\boldsymbol{x})$, for $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}_{(r)}$.



- MM알고리즘은 $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$를 최소화하는 $\boldsymbol{x}$값으로 업데이트 한다. 즉,

  $\boldsymbol{x}_{(r+1)} = \arg\min_{\boldsymbol{x}} g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$.



- MM 알고리즘의 단조감소
- MM 알고리즘으로 업데이트 한 $\boldsymbol{x}_{(r+1)}$는 $f(\boldsymbol{x})$값을 감소시킨다.

$$f(\boldsymbol{x}_{(r)}) \quad = \quad g(\boldsymbol{x}_{(r)}|\boldsymbol{x}_{(r)}) \geq g(\boldsymbol{x}_{(r+1)}|\boldsymbol{x}_{(r)}) \geq f(\boldsymbol{x}_{(r+1)})$$

- 참고로 $\boldsymbol{x}_{(r+1)}$는 $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$를 최소화 시키지 않아도 $g(\boldsymbol{x}_{(r)}|\boldsymbol{x}_{(r)}) \geq g(\boldsymbol{x}_{(r+1)}|\boldsymbol{x}_{(r)})$를 만족하기만 하면 $f(\boldsymbol{x}_{(r)}) \geq f(\boldsymbol{x}_{(r+1)})$이 된다.

- $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$를 도입하는 이유

(1) 실제 함수 ($f(\boldsymbol{x})$)가 계산이 어려운 경우, 최소화시키기 쉬운 $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$를 찾는다.

(2) 볼록함수중에서 미분가능하지 않은 함수의 경우 미분가능한 $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$를 찾는다.

- 그럼 어떻게 $g(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}_{(r)})$을 찾을까?
- 각 최적화 문제 마다 몇가지 방법들을 이용하여 찾는다.

MM 알고리즘의 예: LASSO 회귀분석

- LASSO (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) 회귀분석은 ℓ_1 페널티 함수를 도입하여 변수선택을 같이하는 방법이다.
- $y_i = \boldsymbol{x}_i^T \beta + \epsilon_i$에서 아래의 목적함수를 최소화 하는 β를 추정한다.
- $S_\lambda(\beta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \boldsymbol{x}_i^T \beta)^2 + \lambda \sum_{j=1}^p |\beta_j|$

- Majorize 함수를 찾기위해 다음의 성질을 이용한다.
  $|\beta_j| \leq \frac{\beta_j^2}{2|\beta_{(r)j}|} + \frac{|\beta_{(r)j}|}{2}$
- 이를 이용하면, 다음과 같은 미분가능한 majorize함수를 찾을수 있다.
  $S_\lambda(\beta) \leq \sum_{i=1}^{n}(y_i - \boldsymbol{x}_i^T\beta)^2 + \lambda\frac{\beta_j^2}{2|\beta_{(r)j}|} + \frac{|\beta_{(r)j}|}{2} = g(\beta|\beta_{(r)})$

EM 알고리즘

- EM (Expectation-Maximization)알고리즘은 잠재변수 (latent variable)나 결측치 (missing variable)가 있는 경우의 가능도 함수 (likelihood function)를 최대화 할때 (MLE를 구할때) 사용하는 알고리즘이다.
- MM 알고리즘의 특별한 경우로 볼 수 있다.
- 다양한 통계분석방법 - 혼합분포 모형(mixture model), 군집분석 (cluster analysis), 임의효과 모형 (random effects model), 인과모형 (casual inference)등에서 사용된다.

EM 알고리즘을 설명하기 위해 필요한 데이터, 확률밀도함수들

- $\boldsymbol{Y}_o$:관측한 데이터
- $\boldsymbol{Y}_m$:결측치 또는 잠재변수
- $f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})$: $(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m)$의 확률밀도함수
- $f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta})$: $\boldsymbol{Y}_o$의 확률밀도함수.
- $f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}) = \frac{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta})}$: $\boldsymbol{Y}_m$의 조건부 확률밀도함수.

EM알고리즘을 통한 MLE 찾기

- MLE는 관측한 데이터로 구한 가능도 함수(likelihood)를 최대화 하는 모수를 찾는것이다. 즉,

$$\arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \ell(\boldsymbol{\theta}) = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} \log f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta})$$

- $\ell(\boldsymbol{\theta}) = f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta})$의 계산이 복잡한 경우, $\ell(\boldsymbol{\theta}) \geq Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$이고, $\ell(\boldsymbol{\theta}_{(r)}) = Q(\boldsymbol{\theta}_{(r)}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$이면서 최대화를 하기 쉬운 Q를 찾아 Q(minorize함수)를 최대화하는 $\boldsymbol{\theta}$로 업데이트 하는 방법을 생각해볼수 있다 (MM알고리즘).

E-Step and M-step

$\ell(\boldsymbol{\theta}) = \log f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta})$를 최대화하는 EM알고리즘은 반복알고리즘 (iterative algorithm)으로 (r)번째 스텝에서 $(r+1)$번째 스텝으로의 업데이트는 다음의 두 과정을 통해 진행된다.

(1) **E**xpectation step: $Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$ 찾기

$$\begin{aligned} Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)}) &= \int \log\left(f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})\right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \\ &= E\left(\log\left(f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})\right)\right) \end{aligned}$$

- $Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$이 기댓값 $(E())$로 표현되기 때문에 Expectation step이라고 부름

(2) **M**aximization step: $\boldsymbol{\theta}_{(r+1)} = \arg\max_{\boldsymbol{\theta}} Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$

- 문제에따라 위 두 스텝을 정리하여 한번에 표시할수 있다. (혼합분포를 이용한 군집분석의 예)

E- step

$\ell(\boldsymbol{\theta}) \geq Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$이고, $\ell(\boldsymbol{\theta}_{(r)}) = Q(\boldsymbol{\theta}_{(r)}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$인 $Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$ 찾기

$$(1)\ \ell(\boldsymbol{\theta}) = \log f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta}) = \log \int f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{Y}_m$$

$$(2)\ \ell(\boldsymbol{\theta}_{(r)}) = \log f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta}_{(r)}) = \int \log f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta}_{(r)}) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m$$

(1) 과 (2)를 이용하여 다음의 관계를 찾을수 있다.

$$\ell(\boldsymbol{\theta}) \geq \ell(\boldsymbol{\theta}_{(r)}) + \int \log \left(\frac{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta}_{(r)})} \right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \tag{1}$$

$$=: Q_0\left(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)}\right)$$

$$\ell(\boldsymbol{\theta}_{(r)}) = Q_0\left(\boldsymbol{\theta}_{(r)}|\boldsymbol{\theta}_{(r)}\right)$$

[참고사항]

이전 페이지의 식 (1) 보이기

$$
\begin{aligned}
\ell(\boldsymbol{\theta}) &= \log f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta}) = \log \int f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta}) d\boldsymbol{Y}_m \\
&= \log \int \frac{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)})} f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \\
&\geq \int \log \left(\frac{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)})} \right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \\
&\qquad \text{by Jensen's inequality}
\end{aligned}
$$

위의 부등식 관계를 이용하면

[참고사항]

$$
\begin{aligned}
&\ell(\boldsymbol{\theta}) - \ell(\boldsymbol{\theta}_{(r)}) \\
&\quad \geq \int \log \left(\frac{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)})} \right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \\
&\qquad - \int \log f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta}_{(r)}) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \\
&\quad \geq \int \log \left(\frac{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) f(\boldsymbol{Y}_o|\boldsymbol{\theta}_{(r)})} \right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \\
&\quad = \int \log \left(\frac{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})}{f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta}_{(r)})} \right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m
\end{aligned}
$$

M-step

$Q_0(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$에서 $\boldsymbol{\theta}$에 관련된 부분은

$$\int \log\left(f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})\right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m =: Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)})$$

따라서

$$\text{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} Q_0\left(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)}\right) = \text{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} Q\left(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)}\right)$$

EM 알고리즘의 예- 혼합분포를 이용한 군집분석

EM알고리즘을 적용하는 예로 4장에서 다루었던 가우시안 혼합분포를 이용한 군집분석를 다시 소개한다.

- 두개의 군집으로 이루어져있는 데이터를 두 개의 구성원을 갖는 가우시안 혼합분포를 따른다고 가정하자.
- 즉, $X_1, \cdots, X_n \overset{i.i.d.}{\sim} f(x|\theta)$,

$$
\begin{aligned}
& f(x|\theta) \\
&= w_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(X_i-\mu_0)^2} + (1-w_0)\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_1^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_1^2}(X_i-\mu_1)^2}
\end{aligned}
$$

$$
\theta = (\mu_0, \sigma_0^2, \mu_1, \sigma_1^2, w_0).
$$

- 로그 가능도함수는 다음과 같다.

$$\begin{aligned}\ell(\boldsymbol{\theta}) &= \sum_{i=1}^{n} \log f(X_i|\boldsymbol{\theta}) \\ &= \sum_{i=1}^{n} \log \left(w_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(X_i-\mu_0)^2} \right. \\ &\qquad \left. +(1-w_0) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_1^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_1^2}(X_i-\mu_1)^2} \right)\end{aligned}$$

- 로그함수 내부에 복잡한 함수형태가 또 들어있어서 가능도함수를 최대가 되게 하는 $\boldsymbol{\theta}$를 찾기가 쉽지 않다.

$i-$번째 데이터 X_i가 어느 구성원으로부터 왔는지를 잠재 변수 (latent variable) K_i를 도입하여 표현할수 있다.

- $K_i = 0$이면 $X_i \sim N(\mu_0, \sigma_0^2)$
- $K_i = 1$이면 $X_i \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$
- 즉, K_i는 $i-$번째 데이터가 어느 군집에 속하는지 알려주는 label로 생각할 수 있다.
- 잠재변수 K_i는 $P(K_i = 0) = w_0$, $P(K_i = 1) = 1 - w_0$인 확률변수이다.
- EM알고리즘을 사용하여 $f(X_i|\theta)$보다 간단한 형태인 $f(X_i, K_i|\theta)$를 이용한 최대화 문제로 바꾸게 된다.

데이터가 가우시안 혼합분포로 부터 관측되었다고 할때의 모형가정들

- $X_1, \cdots, X_n \overset{i.i.d.}{\sim} f(x|\theta)$, $f(x|\theta) = w_0 \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_0^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_0^2}(X_i-\mu_0)^2} + (1-w_0)\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_1^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma_1^2}(X_i-\mu_1)^2}$, $\theta = (\mu_0, \sigma_0^2, \mu_1, \sigma_1^2, w_0)$.
- $X_i|K_i = 0 \sim N(\mu_0, \sigma_0^2)$
- $X_i|K_i = 1 \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$
- K_i는 $i-$번째 데이터가 어느 군집에 속하는지 알려주는 label
- $P(K_i = 0) = w_0$, $P(K_i = 1) = 1 - w_0$

- $\boldsymbol{Y}_o = \boldsymbol{X} = (X_1, \cdots, X_n)$, $\boldsymbol{Y}_m = \boldsymbol{K} = (K_1, \cdots, K_n)$
- $f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta}) = f(\boldsymbol{X}, \boldsymbol{K}|\boldsymbol{\theta}) = \prod_{i=1}^{n} f(X_i, K_i|\boldsymbol{\theta})$

$$\log f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^{n} \log f(X_i, K_i|\boldsymbol{\theta})$$

$$= -\frac{n}{2}\log(2\pi) - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\log(\sigma^2_{K_i}) - \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{2\sigma^2_{K_i}}(X_i - \mu_{K_i})^2\right)$$

$$+ \left(n - \sum_{i=1}^{n} K_i\right)\log(w_0) + \left(\sum_{i=1}^{n} K_i\right)\log(1 - w_0)$$

가우시안 혼합분포에서의 E-step을 위한 Q

$$
\begin{aligned}
Q(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}_{(r)}) &= \int \log\left(f(\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{\theta})\right) f(\boldsymbol{Y}_m|\boldsymbol{Y}_o, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{Y}_m \\
&= \int \left(\sum_{i=1}^{n} \log f(X_i, K_i|\boldsymbol{\theta})\right) f(\boldsymbol{K}|\boldsymbol{X}, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) d\boldsymbol{K} \\
&= \sum_{i=1}^{n} \Bigg(\log f(X_i, K_i = 0|\boldsymbol{\theta}) P(K_i = 0|X_i, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) \\
&\qquad + \log f(X_i, K_i = 1|\boldsymbol{\theta}) P(K_i = 1|X_i, \boldsymbol{\theta}_{(r)}) \Bigg)
\end{aligned}
$$

가우시안 혼합분포에서의 M-step을 위해
$\frac{\partial Q}{\partial \mu_0} = 0, \frac{\partial Q}{\partial \mu_1} = 0, \frac{\partial Q}{\partial \sigma_0^2} = 0, \frac{\partial Q}{\partial \sigma_1^2} = 0, \frac{\partial Q}{\partial w_0} = 0$을 풀면 다음과 같은 업데이트식이 구해진다.

아래 업데이트 식이 가우시안 혼합분포에서의 θ를 추정하기위한 최종 EM알고리즘 이 된다.

$$\begin{aligned}
\mu_{j(r+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^n X_i \lambda_j(X_i, \theta_{(r)})}{\sum_{i=1}^n \lambda_j(X_i, \theta_{(r)})}, \ j = 0, 1. \\
\sigma^2_{j(r+1)} &= \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu_{j(r+1)})^2 \lambda_j(X_i, \theta_{(r)})}{\sum_{i=1}^n \lambda_j(X_i, \theta_{(r)})}, \ j = 0, 1 \\
w_{0(r+1)} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \lambda_0(X_i, \theta_{(r)}).
\end{aligned}$$

여기서 $\lambda_j(X_i, \theta_{(r)}) = P(K_i = j | X_i, \theta_{(r)}), \ j = 0, 1.$

몬테카를로 방법 (Monte Carlo method)

- 어떤 값 (또는 함수값)을 근사적으로 계산하는데 있어 확률분포로부터 생성한 무작위 샘플(표본)들을 이용하는 방법이다.
- 이를 위해 큰수의 법칙 (Law of large number, LLN)를 이용한다.
- LLN: $X_1, \cdots X_n \overset{i.i.d.}{\sim} f$에 대하여

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \xrightarrow{p} E(X_1)$$

- 구하고자 하는 값을 θ라고 하자.
- θ를 어떤 확률변수의 기대값으로 표현할수 있다고 하자. 즉, $\theta = E(h(X)), X \sim f$.
- 만약 $X_1, \cdots, X_n$가 f로 부터 생성한 무작위 샘플(표본)이라면, LLN에 의해 다음이 성립한다.

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(X_i) \xrightarrow{p} E(h(X)) = \theta$$

- 따라서 몬테카를로 방법을 쓰기 위해서는 주어진 확률분포로부터 무작위 샘플을 생성하는 (난수생성) 알고리즘이 필요하다.
- 대부분의 알려진 확률분포들은 무작위 샘플을 생성하는 알고리즘들이 연구되어, R, Python등에서 쉽게 사용할수 있다.

Inverse CDF 방법

- Probability integral transform이용: $F_X(X) \sim U$, U는 $(0,1)$에서의 균일분포 ($Uniform(0,1)$).
  $X \sim F_X^{-1}(U) = \inf\{x : F(x) \geq U\}$
- Inverse CDF 방법

(1) $f(x)$의 support내의 숫자열 $x_1, \cdots, x_m$을 적당히 찾아 $u_i = F(x_i)$를 구한다.

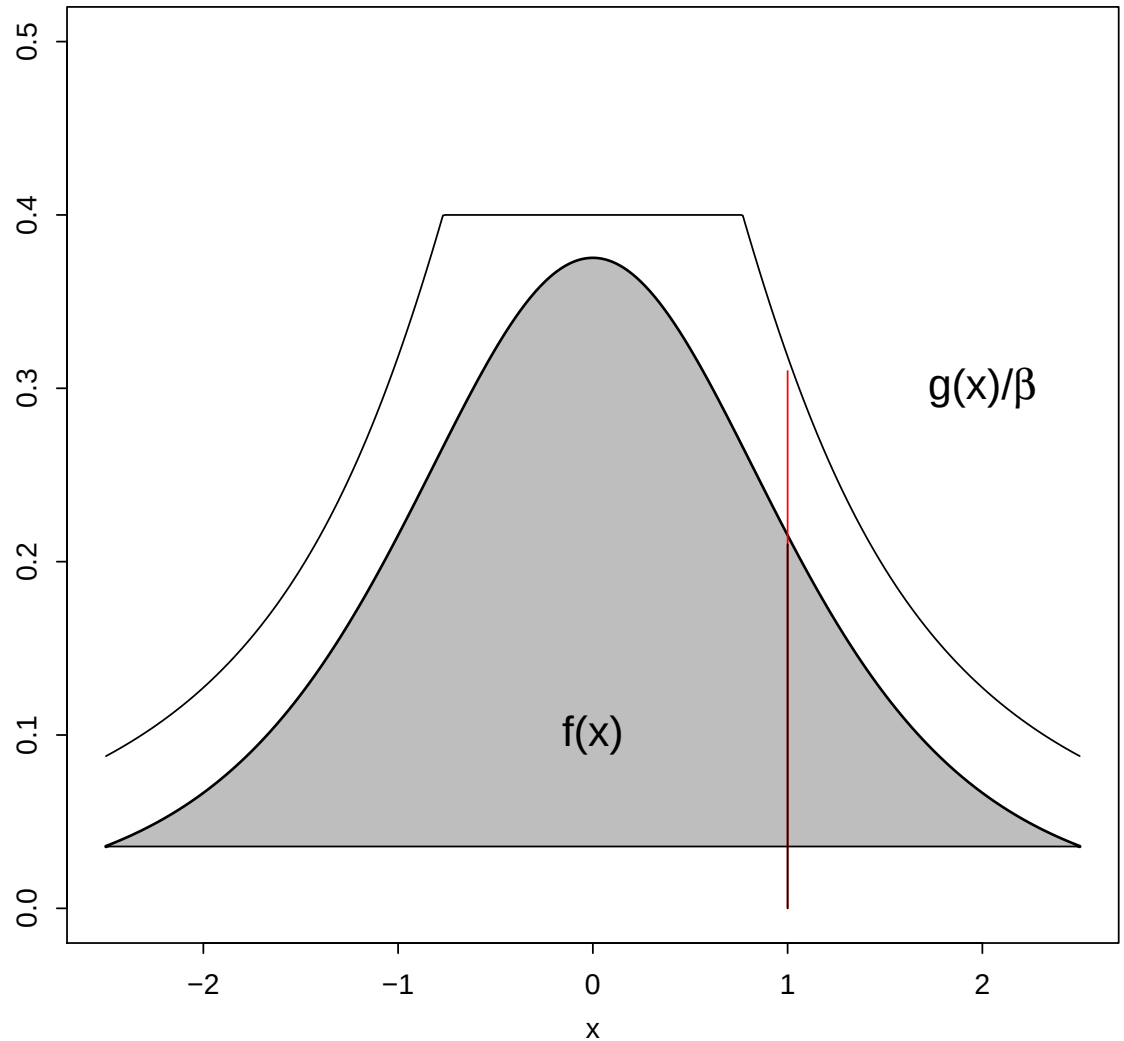
(2) $U \sim Uniform(0,1)$인 U를 생성하여 $u_i \leq U \leq u_j$를 만족하는 가장 가까운 u_i, u_j에 대하여 다음의 X를 구한다.

$$X = \frac{u_j - U}{u_j - u_i} x_i + \frac{U - u_i}{u_j - u_i} x_j$$

- $(x_i, F(x_i)), (x_j, F(x_j))$를 linear interpolation 한 값이다.

Rejection sampling

- 확률분포 f를 따르는 X를 생성하고자 한다. $X \sim f$
- f보다 난수생성이 쉽고 다음을 만족하는 확률분포 g를 찾자.
  - $\beta f(x) \leq g(x)$, $0 < \beta < 1$.
- $g(x)/\beta = e(x)$를 $f(x)$의 upper envelop이라고 한다.


0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
0.0
g(x)/β
f(x)
−2
−1
0
1
2
x

Rejection sampling 알고리즘

(1) g로부터 X생성한다.

(2) $Uniform(0,1)$으로부터 U를 생성한다.

(3) 만약 $Ug(X) \leq \beta f(X)$ (또는 $U \leq f(X)/e(X)$)를 만족하면 X를 f로부터 생성된 난수로 받아들인다(accept).

아니라면(reject), (1)으로 돌아간다.

[참고사항]

X가 f로부터의 난수인지 확인해보자.

- $P(accept\ X)$ 인 경우

  $P(accept\ X) = P(U \leq \beta f(X)/g(X)) =$
  $\int (\beta f(X)/g(X))g(x)dx = \beta$ 이므로

$$
\begin{aligned}
P(X \leq x | accept) &= \frac{P(X \leq x \text{ and } U \leq \beta f(X)/g(X))}{P(accept)} \\
&= \int_{-\infty}^{x} \frac{(\beta f(w)/g(w))g(w)}{\beta} dw \\
&= \int_{-\infty}^{x} f(w)dw = F(x)
\end{aligned}
$$

Importance sampling

- $\theta = E(h(X))$인 θ를 구하는 문제로 다시 돌아가보자. 여기서 $X \sim f$로 가정한다.
- f보다 난수생성이 쉽고 support가 f의 support를 포함하는 확률분포 g가 있다고 하자.
- θ를 g를 이용하여 다음과 같이 표현할 수 있다.

$$\begin{aligned} \theta &= E_f(h(X)) = \int h(x)f(x)dx \\ &= \int h(x)\frac{f(x)}{g(x)}g(x)dx = E_g\left(h(X)\frac{f(X)}{g(X)}\right) \end{aligned}$$

- $X_1, \cdots, X_n$이 g로부터 생성된 난수라고 하자.
  $w^*(x) = f(x)/g(x)$라고 하면,

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_i h(X_i) w^*(X_i),$$

  는 θ를 근사(approximate)하는 값이 된다.
- g를 importance sampling 함수라고 부른다.

변분 추론 (Variational inference)

- 근사 베이지안 방법 (Approximate Bayesian Method)의 일종이다.
- 베이지안추론을 요약하면
  - 데이터의 분포에 관한 모형 (Likelihood, $L(\theta|X)$)과 모형을 정하는 모수 (parameter)의 사전분포 (prior distribution, , $\pi(\theta)$)를 이용하여 모수의 사후확률 (Posterior probability, $\pi(\theta|X)$)을 구하고 이를 이용하여 모수에 관한 추론을 하는 방법이다.
- 이때, Likelihood가 복잡하거나, 데이터가 아주 큰 경우, 일반적으로 사후확률을 (이론적/계산적) 구하기 어렵다.
- 여러 근사 베이지안 방법(Approximate Bayesian method)이 제안되었다.

- Markov Chain Monte Carlo (MCMC)방법: 근사 베이지안 방법(Approximate Bayesian method)의 일종으로 사후분포를 이론적으로 구하는 대신 마코프 체인을 만들어 생성한 샘플이 사후분포의 샘플이 되도록 하여 샘플을 이용하여 추론하는방법이다
- 사후분포의 형태에 따라 깁스 샘플링 (Gibbs sampling) 또는 메트로폴리스-헤이스팅 샘플링 (Metropolis-Hastings sampling)등이 있다.
- MCMC방법은 복잡한 모형인 경우 또는 데이터가 큰 경우 계산속도가 느리다.

- 변분추론은 또다른 근사 베이지안 방법(Approximate Bayesian method)으로 사후분포에 가까우면서, 샘플링이 쉬운 분포를 찾아 추론을 하는것이며, 일반적으로 MCMC보다 속도가 빠르다.
- 베이지안분석에서 시작되었지만, 베이지안방법이 아니더라도 MCMC의 경우는 분포로부터 표본을 샘플링하는 기법으로, 변분추론의 경우는분포를 근사시키는 기법으로 사용되고 있다.
- 본 강의는 "Variational inference: A review for statisticians" by Blei et al. (2017)을 참고하였음.

사후분포가 복잡한 모형인 경우의 예

- 가우시안 혼합분포 모형

  데이터모형: $X_i \sim \pi_1 N(\mu_1, \sigma^2) + \cdots, + \pi_K N(\mu_K, \sigma^2)$,
  $i = 1, \cdots, n$.

  사전분포: $\mu_i \sim N(0, \tau^2)$

- 혼합분포의 어느 구성원으로부터 왔는지를 나타내는 Z_i (label)을 도입하면 가우시안 혼합분포 모형은 다음과 같이 계층적으로 표현할수 있다.

  $X_i | Z_i \sim N(\mu_{Z_i}, \sigma^2)$

  $Z_i \sim \text{multi}(\boldsymbol{\pi})$, $\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \cdots, \pi_K)$

  $\mu_i \sim N(0, \tau^2)$

- 위 예제의 관심 사후분포는 $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \cdots, \mu_K)$, $\boldsymbol{Z} = (Z_1, \cdots, Z_n)$의 사후분포이다.
- σ^2, τ^2는 고정되어 있다고 가정하는 경우 (편의상)

$$p(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}) = \frac{p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\mu})p(\boldsymbol{Z})p(\boldsymbol{\mu})}{\int_{\boldsymbol{\mu}} \sum_{\boldsymbol{Z}} p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{\mu})p(\boldsymbol{Z})p(\boldsymbol{\mu})d\boldsymbol{\mu}}$$

- 분자: $\prod_{i=1}^{n} p(X_i|Z_i)p(Z_i) \prod_{k=1}^{K} p(\mu_k)$
- 분모:

$$\int_{\mu_K} \cdots \int_{\mu_1} \sum_{Z_1=1}^{K} \cdots \sum_{Z_n=1}^{K} \prod_{i=1}^{n} p(X_i|Z_i)p(Z_i) \times \prod_{k=1}^{K} p(\mu_k) d\mu_1 \cdots d\mu_K$$

- 분모에서 K^n 합 계산은 데이터가 아주 큰 경우 오래 걸린다.

모형 가정

- 변분추론 설명을 위해서 다음과 같은 가정을 한다.
  - 데이터: $\boldsymbol{X} = (X_1, \cdots, X_n)$
  - 은닉변수(잠재변수): $\boldsymbol{Z} = (Z_1, \cdots, Z_m)$
  - 추가 모수: α
  - 목적: 사후분포 $p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}, \alpha)$와 가까우면서 다루기 쉬운 분포(근사분포)를 찾아서 $\boldsymbol{Z}$를 생성하거나 사후분포의 특성값들을 근사적으로 구한다.

근사분포 찾기

- $p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}, \alpha)$와 가까운 $q(\boldsymbol{Z}|\nu)$를 찾는다고 하자.
- 이때, $q(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{\nu})$를 ν에 따라 움직이는 분포들의 모임 (클래스 $\mathcal{Q}$라고 하자)이라고 보면, 이러한 분포들 중 $p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}, \alpha)$에 가장 가깝도록 하는 ν를 찾는 문제로 볼수도 있다.
- 여기서 ν는 변분 모수 (variational parameter)라 부른다.
- 두 분포가 가깝다는 기준, 즉 분포사이의 "가까움"을 나타내는 기준이 필요하다. 이를 위해 KL divergence를 소개한다.

쿨백-라이블러 발산 (Kullback-Leibler Divergence)

- 정보이론 (Information theory)에서 온 개념
- 두 분포사이의 "가까움"을 나타내는 값

$$
\begin{aligned}
KL(q \,\|\, p) &= E_q \left(\log \frac{q(\boldsymbol{Z})}{p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})} \right) \\
&= E_q \left(\log q(\boldsymbol{Z}) - \log p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}) \right) \\
&= \sum_{\boldsymbol{z}} \log \left(\frac{q(\boldsymbol{z})}{p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{X})} \right) q(\boldsymbol{z}) \quad \text{(discrete)} \\
&= \int log \left(\frac{q(\boldsymbol{z})}{p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{X})} \right) q(\boldsymbol{z}) d\boldsymbol{z} \quad \text{(continuous)}
\end{aligned}
$$

- 만약 $q(\boldsymbol{Z}) = p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})$라면 $KL(q \,\|\, p) = 0$.
- $KL(q \,\|\, p) \geq 0$.
- 증명[참고사항]:

$$
\begin{aligned}
KL(q \,\|\, p) &= E_q\left(\log \frac{q(\boldsymbol{Z})}{p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})}\right) \\
&= E_q\left(-\log \frac{p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})}{q(\boldsymbol{Z})}\right) \\
&\geq -\log E_q\left(\frac{p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})}{q(\boldsymbol{Z})}\right) \quad \text{(Jensen's inequality)} \\
&= -\log \int \frac{p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{X})}{q(\boldsymbol{z})} q(\boldsymbol{z}) d\boldsymbol{z} \\
&= -\log \int p(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{X}) d\boldsymbol{z} = -\log(1) = 0.
\end{aligned}
$$

- $KL(q \,\|\, p) \neq KL(p \,\|\, q)$. 비대칭이므로 "거리(distance)"로 볼 수 없다.

근사분포 찾는 문제는 분포들 사이의 가까움을 나타내는 K-L Divergence가 가장 작은 q를 찾는 문제로 생각한다. 즉,

$$q^* = \text{argmin}_{q \in \mathcal{Q}} KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}))$$

- $KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}))$ 계산을 위해서는 $\log(p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})) = \log(p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})/p(\boldsymbol{X}))$를 계산해야 하는데, 일반적으로 $\log(p(\boldsymbol{X}))$의 계산이 복잡하다.
- 따라서 $KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X}))$대신 좀 더 계산이 쉬운 다른 값 (ELBO)을 이용한다.

Evidence Lower Bound (ELBO)

- $KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})) = -ELBO(q) + \log p(\boldsymbol{X})$,
- $ELBO(q) = E_q\left(\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})\right) - E_q\left(\log q(\boldsymbol{Z})\right)$ 임을 보일수 있다.
- $\log p(\boldsymbol{X})$는 q에 대해서 상수이므로 KL을 최소화 시키는 q를 찾는데 필요가 없다.
- 따라서

$$q^* = \text{argmin}_{q \in \mathcal{Q}} KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})) = \text{argmax}_{q \in \mathcal{Q}} ELBO(q(\boldsymbol{Z}))$$

[참고사항]

$ELBO(q) = E_q(\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})) - E_q(\log q(\boldsymbol{Z}))$ 보이기

$$
\begin{aligned}
KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})) &= E_q\left(\log \frac{q(\boldsymbol{Z})}{p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})}\right) \\
&= E_q(\log q(\boldsymbol{Z})) - E_q(\log p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})) \\
&= E_q(\log q(\boldsymbol{Z})) - E_q(\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})) + E_q(\log p(\boldsymbol{X})) \\
&= E_q(\log q(\boldsymbol{Z})) - E_q(\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})) + \log p(\boldsymbol{X}) \\
&= -ELBO(q) + \log p(\boldsymbol{X})
\end{aligned}
$$

Evidence Lower Bound 이름의 유래

- $KL(q(\boldsymbol{Z}) \| p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})) \geq 0$으로부터
- $\log p(\boldsymbol{X}) \geq ELBO(q(\boldsymbol{Z}))$
- $\log p(\boldsymbol{X})$는 관측값의 Likelihood로 evidence라고도 부름.
- 따라서, $ELBO(q(\boldsymbol{Z})) = E_q(\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})) - E_q(\log q(\boldsymbol{Z}))$는 evidence의 lower bound가 된다.

ELBO의 이해

$$
\begin{aligned}
ELBO(q) &= E_q\left(\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})\right) - E_q\left(\log q(\boldsymbol{Z})\right) \\
&= E_q\left(\log p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z})\right) + E_q(\log p(\boldsymbol{Z})) - E_q\left(\log q(\boldsymbol{Z})\right) \\
&= E_q\left(\log p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z})\right) - E_q\left(\log(q(\boldsymbol{Z})/p(\boldsymbol{Z}))\right) \\
&= E_q\left(\log p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z})\right) - KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}))
\end{aligned}
$$

- 마지막 식의 첫번째 항은 잠재변수 $\boldsymbol{Z}$가 주어졌을때의 관측값 $\boldsymbol{X}$의 log-likelihood의 기대값으로 볼수 있다.
- 따라서 ELBO를 최대화 하는것은 $\boldsymbol{Z}$값이 $p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z})$를 크게 하도록 하는 (Likelihood를 증가시키는 또는 데이터 $\boldsymbol{X}$를 더 잘 설명하는)는 $q(\boldsymbol{Z})$를 찾으려 하는것으로 볼 수 있다.

$$
\begin{aligned}
ELBO(q) &= E_q\left(\log p(\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{X})\right) - E_q\left(\log q(\boldsymbol{Z})\right) \\
&= E_q\left(\log p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z})\right) + E_q(\log p(\boldsymbol{Z})) - E_q\left(\log q(\boldsymbol{Z})\right) \\
&= E_q\left(\log p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z})\right) - E_q\left(\log(q(\boldsymbol{Z})/p(\boldsymbol{Z}))\right) \\
&= E_q\left(\log p(\boldsymbol{X}|\boldsymbol{Z})\right) - KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}))
\end{aligned}
$$

- 마지막 식의 두번째 항은 $\boldsymbol{Z}$의 사전분포 $p(\boldsymbol{Z})$와 $q(\boldsymbol{Z})$사이의 KL 발산이다.
- 따라서, ELBO를 최대화 하는것은 사전분포 $p(\boldsymbol{Z})$와 가까운 $q(\boldsymbol{Z})$를 찾으려 하는것으로 볼 수 있다.
- $ELBO(q)$를 최대화 하는것은 likeihood와 prior사이에서 적절한 q를 찾게되는것이다.

ELBO 최대화를 위한 $\mathcal{Q}$

$$q^* = \text{argmin}_{q \in \mathcal{Q}} KL(q(\boldsymbol{Z}) \,\|\, p(\boldsymbol{Z}|\boldsymbol{X})) = \text{argmax}_{q \in \mathcal{Q}} ELBO(q(\boldsymbol{Z}))$$

- ELBO 최대화 문제에서 $q \in \mathcal{Q}$를 찾는것은 $\mathcal{Q}$를 어떤분포 집합 (probability distribution family)으로 놓느냐에 따라 계산 복잡도가 달라진다.
- mean-field variational family는 잠재변수가 서로 독립이면서 각기 다른 변분인자 (variational factor)에 의존하는것으로 가정한다. 즉, $q(\boldsymbol{Z}) = \prod_{j=1}^{m} q_j(Z_j)$.
- 따라서 $ELBO(q)$를 최대화하는 $\{q_j^*\}$를 찾는 문제로 생각한다.

- variational family는 데이터 $\boldsymbol{X}$에 의존하지 않는다.
- mean-field variational family보다 복잡한 family를 고려할수도 있으나 계산상의 복잡도가 커진다.
- 구제적으로 어떤 variational family (확률분포)를 고려할지는 문제에 따라 다르다.
- variational family가 정해지면 최대화 시키는 최적화 알고리즘을 상황에 맞게 적용한다.
- 주어진 데이터 $\boldsymbol{X}$와, variational family $\mathcal{Q}$가 정해져서 $\{q_j^*\}$를 찾으면 필요에 따라 $\{q_j^*\}$를 이용하여 Z_i를 생성할수 있다.
- 생성된 $\{Z_i\}$를 이용하여 데이터 $\boldsymbol{X}$와 유사한 $\boldsymbol{X}^*$를 생성할수도 있다 (generative model).