4주차 - Sampling Based inference

서론

- 모델 추론에 있어서 대부분의 방법은 계산량 때문에 Infeasible 하다

> Why? 계산량이 얼마나 많길래?
>
> - 파라미터 갱신 및 Posterior 값을 구하는 과정에서 많은 양의 계산 양을 필요로 한다.
> - 1). 파라미터 갱신에는 미분값을 활용한다. 미분값 자체가 상수가 아닌 복잡한 형태로 나오는 함수의 경우, 조치가 필요하다.
> - 2). Bayesian inference Algorithm에서 Evidence form을 계산하기가 매우 어렵다.
>
> > Evidence term : $\int_H P(D|H')P(H')dH'$
> >
> > Posterior = $\frac{Likelihood * Prior}{Evidence form}$

- 그나마 ELBO method가 Feasible 하나 단점이 있다.
  1. 직접적으로 Optimizing을 못한다.
  2. Jensen's equaility & Mean-field assumption로 Optimal Solution과 차이가 생긴다
  3. Local Optima에서 못 빠져나온다.(- 모든 Gradient based method에게 해당)

→ Gradient-based 외의 방법이 필요하다.

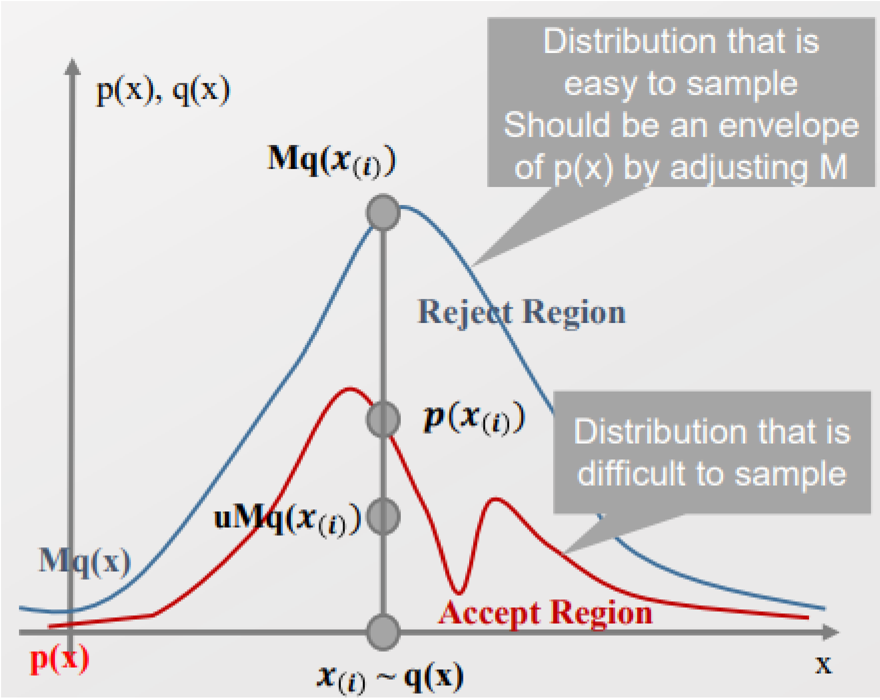
- Sampling-method은 이 문제를 해결할 수 있다.

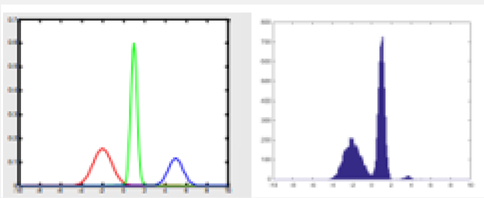
> 특히 Posterior이 High-dimension일 경우 Directly sampling은 어렵다. 따라서 근사할 수 있는 알고리즘(MCMC, VI)을 사용한다.

Sampling-based 방법의 종류

- Forward sampling : 모든 경우가 나올 때까지 경우의 수를 확인한다. 느려서 안쓴다.
- Rejection Sampling : 조건을 충족하지 않는다 싶으면 계산 중간에 그만둔다.

> Rejection Sampling 은 요즘에 잘 사용되고 있지 않음. 역사적인 관점에서 다룸



> p(x) : Rejection Sampling 을 적용했을 때의 분포
>
> q(x) : 임의의 확률분포. 충분히 큰 값 M을 곱하여 p(x)를 전부 포괄하도록 한다.
>
> - M이 작다면 중간에 p(x)와 Mq(x)가 겹치는 부분 이후는 고려하지 못한다.
> - 왜냐하면, q를 nomal distribution으로 고려하며, accept 조건을 $u < \frac{p(x_{(i)})}{Mq(x_{(i)})}$ 로 두었기에 때문에, M이 충분히 크지 않다면 고려해야 하는 상황인데도 잘라 버릴 수 있다.
>
>   [좌 : p(x), 우 : p(x)를 덮지 못한 m(qx)]

- 단점 : P(x)의 값을 모르기 때문에 일단 M을 크게 잡아야 한다. 하지만 적절하게 Rejection을 못하기 때문에 효율이 떨어진다.

Importance Sampling

- VAE 등과 같이 현재에도 쓰이는 방법
- <u>Rejection 방법은 필요할 수도 있는 데이터를 버려 데이터 비효율성이 발생할 수 있다.</u>
  - 즉, 데이터를 버리지 않으면서 각각의 중요도를 고려할 수 있는 방법이 필요
  - Importance Sampling은 최대한 자료의 정보를 반영함과 동시에, 모든 데이터를 활용한다는 비효율성을 고른 만큼 그 외 부분에서 효율성을 얻고자 한다.
- 과거에는 <u>확률의 분포(PDF)을 알아내어 데이터의 분포를 확인하는 것</u>을 목표로 했다.

- 그러나 최종적으로 우리의 목적은 Query에 대해서 Most Probable Answer을 하는 것을 목표로 하며, 따라서 중간 단계로 **Expectation을 구하는 것을 목표로 한다.**
- 즉, PDF를 굳이 만들기 위해 샘플링을 많이 하지 말고, **"샘플링 한 것을 버리지 않고서 Expectation을 구해볼 수는 없을까"** 는 관점에서 접근한다.

- Expectation을 확장하여 고민해보자!

> $E_p(f(z)) = \int f(z)p(z)dz $
>
> $= \int f(z) \frac{p(z)}{q(z)} q(z) dz$ (= $E_{q(z)} (f(z)\frac{p(z)}{q(z)})$)[like ratio trick]
>
> $\sim \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \frac{p(z^l)}{q(z^l)}f(z^l)$

>> L : num of samples
>>
>> z^l : sample of Z

- q는 P의 Long Tail에서도 0이 되면 안된다는 강력한 전제를 필요로 한다
  - 이는 모든 상황에 성립하는 것은 아니기에 Like ratio trick이 깨질 Risk가 있다

> let $r^l = \frac{p(z^l)}{q(z^l)}$
>
> - 이때 **r^l 은 계산 가능**하다! q는 임의의 Distribution이니 정할 수 있다.
> - P(z)의 값은 "like ratio trick" 을 통해 q-sampling으로 변환시 계산가능하다.

> $P(z>1) = E_{p(z)}[1_{z>1}] $
>
> $= \int^\infin_1 1_{z>1} p(z) dz$
>
> $= \int^\infin_1 1_{z>1} \frac{p(z)}{q(z)} q(z) dz$
>
> $= E_{q(z)} [1_{z>1} \frac{p(z)}{q(z)}] $
>
> $\sim \frac{1}{L} \sum^L_{l=1} \frac{p(z^l)}{q(z^l)} 1_{z^l>1}$
>
> - P는 모르니 Sampling 할 수 없다. 그러니 알고 있는 Q에 대해서 Sampling 하여 r^l 을 계산하겠다.
>
> -> $ r^l = \frac{p(z^l)}{q(z^l)}$ 을 구할 수 있다.
>
> -> 즉, $E_p(f(z))$ 은 p(z)을 모름에도 구할 수 있게 된다.

- 이를 통해서 **q-분포를 통해서 나온 모든 값을 버리지 않고 반영한다.**
  - 단, 매우 작은 weight를 부여!
  - => IID 조건에서는 데이터 활용 측면에서 가장 효율적으로 정보를 사용하는 것일 것.
- 값이 이산인 경우에는 Likely load trick으로도 부르기도 한다.
  - 각 Likelyhood를 가중치로 부여하여 계산한다.

Markov Chain

- **더 정보를 효율적으로 쓸 수 없을까? [문제]**
  - I.I.D 조건은 과거/현재와의 관련이 없다 가정한다.**(=IID 조건은 현실과 맞지 않다)**
  - **=> 과거와 현재의 연관성을 받아들인 방법을 채택하자! - Markov Chain**

편의를 위해 이산 상황만 고려하겠음

- Continuous 상황에서 Chaining하는 것이 Diffusion 모델이다.

Markov Chain의 특성

- 용어 정리

> **Accessible**
>
> - i → j : State j is accessible from i if \$T_{i,k}^k\$ > 0 and k >=0
>
> > k번 Transition 이후에도 j로 넘어갈 확률이 0보다 커야 한다.
>
> - i ↔ j : State i and j communicate if i → j and j → i
>
> > i와 j가 서로 왔다 갔다 할 수 있다.

> **Reducibility**
>
> - A Markov chain is irreducible if i ↔ j, \$\forall i \in S, \forall j \in S\$
>
> > 한번 있었던 노드간의 연결성(Communicate)은 사라지지 않는다.

> **Periodicity**
>
> - State i has period d if d = gcd{n: \$T_{i,i}^n >0 \$}
>
> > i에서 다시 i로 주기성을 가지고 돌아온다.
>
> - if d=1, State i is aperiodic
>
> > 주기성이 없다. 언제 돌아올지 모른다.

> **Transience**
>
> - State j is recurrent if \$P(inf(t>=1 : X_t = j) < \infin|X_0 =j) =1\$
>
> > 최초 상태로 언젠가 돌아온다.
>
> - State which are not recurrent are transient
>
> > 최초 상태로 돌아오지 않는다.

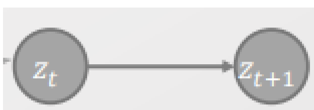
> **Ergodicity**
>
> - A tate is ergodic if the state is (positive) recurrent and aperiodic
>
> > 언제 돌아올지 확답할 수 없지만 언젠가 오긴 온다.
>
> **→ Markov chain은 모든 State가 Ergodic 하면 Ergodic 하다고 할 수 있다.**

- **Graph Structure 구조를 통해 Markov Chain을 설명해보자**
  - Graph Structure 에는 Node와 Link를 가지고 있다.

    > Node : 특정 Distribution의 State(- PDF)를 의미
    >
    > Ex)- $z_t = [0.5 \quad 0.2 \quad 0.3]$. $P(z_t)$ 로도 표현함.
    >
    > - 이때 Distribution으로 Multinomial distribution으로 보통 가정하나, 다른 분포도 가용함

    > Link : 각 State 사이에서 Transition이 일어나는 과정을 표현
    >
    > $$P(z_{t+1}) = P(z_t)P(z_{t+1}|z_t) = z_t T_{i,j}$$
    > $$= [0.5 \quad 0.2 \quad 0.3] \begin{bmatrix} 0.7 & 0.2 & 0.1 \\ 0.2 & 0.3 & 0.5 \\ 0.4 & 0.2 & 0.4 \end{bmatrix}$$
    > $$= [0.51 \quad 0.22 \quad 0.27]$$
    >
    > > $P(z_{t+1}|z_t)$: Transition function(또는 Matrix)
    >
    > - 이때 Transition function의 Diagonal 부분은 각 항목들에 대해 얼마나 가중치를 매길건지를 의미함.

  - 위의 내용을 확률 관점으로 바라보면 다음과 같다.
    - 먼저 Random Variable의 특성을 돌아보자
      - 모든 Random Variable은 Distribution을 따른다.
      - Sampling 될 때에는 특정 경우로 Fix 되어 버린다. 즉, Distribution에서 벗어난다.
      - 이는 Most probable Assignment 될 때에도 동일하다.

    - $z_t → z_{t+1}$ 과정도 Bayesian Network을 따른다.

    > Bayesian Network 에서 원 형태의 Node는 Random variable을 의미한다.
    >
    > 즉, z_t 또한 특정 Distribtution(-[0.5, 0.2, 0.3])을 따르고 있음을 의미한다.

- 각 Expectation을 구할 때 각 Value에 확률 값을 곱한 것을 합한다. 이는 확률에 맞춰 Sampling 하며, 모든 경우의 결과를 평균내는 것과 동일한 의미를 가진다.
  - 즉, 각 Value에 확률 값을 곱하는 것은, 확률 값에 맞춰 Sampling 하는 것과 동일하게 볼 수 있다.

- **우리는 그럼 어떻게 Markov Chain을 Sampling에 사용할 수 있을까?**
  - 현재 Graph의 Node 값은 시간이 흐름에 따라 달라지는 분포를 가지고 있다.
  - 우리는 이 변하는 distribution을 Stationary Distribution을 바꾸고 싶다.
    - 어떤 Travel을 통해서 Stationary Distribution으로 바꿀 수 있을까?
    - 또한 Stationary Distribution 상황에서는 어떤 특성을 가지나?

  → Travel을 모델링 하는 것은 어려우니, **목표인 Stationary 상황에서 역순으로 고려해보자!**

- **Limit Theorem of Markov Chain**

> Q. 애가 무슨 문제를 해결한 거지? π_i 가 Stationary 한 속성을 띄도록 모델링!

  - 만약 Markov Chain 이 irreducible 하고 Ergodic 하다면, **Stationary distribution π을 모델링 함으로써 문제를 해결하자!**

> π_i : $\lim_{n → \infin} T_{i,j}^{(n)} = \frac{1}{E[RT_i]}$. i node가 Stationary 상황 아래에서 존재할 확률
>
> > RT_i : 다시 원점으로 돌아오는 데 걸리는 시간
>
> - Irreducible 하기 때문에 RT의 존재는 보장된다. 또한 T가 주어지는 RT의 Expectation을 할 수 있다.
>
> > *How? 무수히 많은 양의 샘플링을 통해서? 어떻게 Expectation을 한다는 거지?
> >
> > 원점으로 돌아올때까지($T_{ii} =! 0$) 계속 Transition matrix를 적용함.

> - 위의 Expectation을 기반으로 π_i 를 정의한다.
>
> > RT_i : min{$n>0 : X_n =i | X_0 =i$}

> - π_i 는 아래 식에 의해서만 Uniquely determined 된다.
>
> > $\pi_i >=0, \sum_{i \in S} \pi_i =1, \pi_j = \sum_{i \in S} \pi_i T_{i,j}$ **[Stationary 속성]**
> >
> > T : Transition Matrix
> >
> > - $\sum_{i\in S} \pi_i T_{i,j} $ 은 Node i가 모든 스테이트에서 Transition을 거쳐 j 로 이동하는 모든 경우를 고려한 것임. 즉, Transition을 1번, 2번, ... 무수히 거쳐서라도 j에 오는 경우까지 다 고려한 것

> > → 이때 위의 첨자 (n) 이 사라져 있음. **즉, 아무리 Transition을 거쳐도 이 분포에서 벗어날 수 없음을 의미한다.**

> Station distribution인 π_i 의 Support 영역은 sigma algebra를 따른다
>
> > support : 확률 분포의 공간. $\Omega = {x|\pi_i(s)=x, s \in S}$. S는 표본 공간
> >
> > ## Sigma-Algebra
> >
> > Let X be a set. Then a σ-algebra F is a nonempty collection of subsets of X such that the following hold:
> >
> > 1. X is in F.
> > 2. If A is in F, then so is the complement of A.
> > 3. If A_n is a sequence of elements of F, then the union of the A_ns is in F.
> >
> > If S is any collection of subsets of X, then we can always find a σ-algebra containing S, namely the power set of X. By taking the intersection of all σ-algebras containing S, we obtain the smallest such σ-algebra. We call the smallest σ-algebra containing S the σ-algebra generated by S.
>
> 이걸 설명하려면 르벡 적분에 대해서 설명해야하니 Skip

- **남은 문제는 아래 2가지다.**

    1. 어떻게 Stationary distribution π 까지 가느냐

        → Balance한 조건을 충족시키도록 제한조건을 둔다.

    2. π 를 샘플링 할 수 있는 distribution의 형태로 만들 수 있을 것인가?

        → Metropolis-Hastings Algorithm을 적용한다.

- 주어진 Transition Matrix T를 통해 π_i 계산하는 방법
    - π 의 Stationary 특성을 활용하여 아래 식을 만든다.

> (1) $\pi_i = \sum_{i \in S} \pi_i T_{i,j}$ ↔ $\pi_i - \sum_{i \in S} \pi_i T_{i,j} =0$ → $\pi(I_{|S|, |S|} -T)) =0$
>
> - π 는 Stationary 해서 한번 더 Transition한다 해도 동일한 값을 가진다.
>
> (2) $\sum_{i \in S} \pi_i =1$ → $\pi 1_{|S|, |S|} = 1_{1, |S|}$
>
> > $1_{1, |S|}$ 는 크기 |S|의 [1,1,1,.... 1] 행렬을 의미함.
>
> By (1), (2),
>
> $\pi(I_{|S|, |S|} - T) + 1_{1, |S|} = 0 + 1_{1, |S|}$
>
> → $\pi(I_{|S|, |S|} - T- 1_{|S|, |S|}) = 1_{1, |S|}$

-
    - 이후에 π 좌측에 곱해진 Matrix의 Inverse를 양쪽에 곱하는 것으로 π 를 구한다.

> Q. Inverse가 항상 존재하는 건가? 교수님께 질문 드려 보자!
>
> - 항상 Inverse가 존재하는 것이 아님! 1 to 1 관계가 보장되어야 함
> - 하지만 Closed 형태로, 이전 단계로 돌아갈 수 있음이 보장된다면 존재!
>
> → Markov chain이 irreducible하고 Ergodic하면 inverse가 보장됨!

- 이때 두 가지 경우로 나눠짐.
  1. Stationary를 만족하지만 Balance되어 있지 않다($\pi_iT_{i,j} \neq \pi_iT_{j,i}$)
     - $\pi_j = \sum_{i \in S} \pi_i T_{i,j}$ 은 만족하나, Sum은 상태의 순서를 고려하지 않기 때문에 Balance가 안되어 있을 수 있다.

     → 기존의 Stationary 만으로는 충분한 제한 조건이 되지 못한다. 또는 Stationary 자체만을 제한 조건을 수식화하기 어렵다.
  2. **Stationary 하며, Balance 되어 있다.**
     - 단, Balance 할 경우 반드시 Stationary를 보장한다.
     - → Balance는 Stationary보다 강한 조건으로, Balance 한 조건을 달성하면 목표로 하는 Stationary는 자동으로 달성한다.

Markov chain theory vs Markov Chain Monte Carlo

- Markov chain theory
  - 조건 : Transition rule을 알 때,
  - 목표 : Stationary distribution $\pi(z)$ 을 찾는 것
- MCMC(Markoc Chain Monte Carlo) : Markov Chain을 통해서 Sampling 하는 것
  - 조건 : 목표인 target stationary distribution $\pi(z)$ 을 알 때,
  - 목표 : Stationary distribution에 도달하기 위한 효율적인 Transition rule을 찾는 것

→ 둘의 방향이 다르다.

Metropolis-Hastings Algorithms

- MCMC의 매우 Generalization version의 알고리즘.
  - MCMC 방법론의 근간이라 할 수 있음
  - 최근 방법들은 Metropolis-Hastings Algorithms의 특수한 Case임
- 상황 : 초기값(z_t) 를 알 수 없다.

> 반대로, 초기값을 알면 충분히 Transition matrix를 통해 Travel 시켜 Stationary 하게 된다.

- z_t 의 다음 candidate 상태를 z^* 라고 하자

> $z^* \sim q(z^*|z^t)$.
>
> > q_t 는 Proposal distribution로, Transition 역할을 함.
> >
> > q_t 에 따른 Transition을 Accept할 수도, Reject 할 수도 있음.
>
> z^* 을 z_{t+1} 로 표현하지 않는 것은 q_t 의 수락 유무에 따라 달라지기 때문
>
> > Accept $q_t : z^{t+1} = z^*$
> >
> > Reject $q_t : z^{t+1} = z^t$ [그대로 유지]

> q_t 를 수락하는가 Acceptance probability α 를 통해 결정한다.

- → 우리가 알아야 하는 것은 1) q-distribution, 2) α 를 알아야 함

> 이때의 q-distribution은 앞서 Important Weight의 q-distirubution과는 다름

- **Metropolis-Hastings Algorithm**
    - 새로운 ratio $r(z^*|z_t)$ 를 고려하자

> $r(z^|z^t) = \frac{q(z^t|z^)P(z^)}{q(z^|z^t)P(z^t)} =$ q 분포에 따라 $\frac{z^* -> z^t}{z^t -> z^*}$ 될 확률. [제한조건]
>
> → $r(z^*|z_t)$을 1로 보냄으로써 Balance 조건을 충족하겠다.

1. $r(z^|z^t) > 1 $ 일 때, $q(z^t|z^)P(z^) < q(z^|z^t)P(z^t) $
    - $r(z^|z^t)$ 의 값을 1로 보내기 위해서 $q(z^|z^t)$ 을 줄인다.

> $q(z^t|z^), q(z^|z^t)$ 두 값 중에서 우리는 후자만을 조정할 수 있다.
>
> 왜냐하면 우리가 조정 가능한 q-distribution은 과거(z^t)에서 미래($z^$)로 보낼 걸 제안하는 Proposal Transition으로, 수락 여부를 모르는 상태로 미래($z^$) 에서 과거(z^t)로 보내는 확률값을 건드릴 수 없다.

2. $r(z^|z^t) < 1$ 일 때, $q(z^t|z^)P(z^) > q(z^|z^t)P(z^t)$
    - $r(z^|z^t)$ 의 값을 1로 보내기 위해서 $q(z^|z^t)$ 을 키운다.

→ 위의 조건을 만족할 수 있는 Q-distribution을 정의해야 한다.

- 일반적으로 Gausian distibution을 가정한다.
- 단, 과거의 정보로 현재의 정보를 업데이트 할 수 있도록 설정한다[Markov Chain].

> ex- 과거의 평균값, 분산값을 현재, 다음 단계에 반영해준다.

- **위의 q-distribution의 조건은 $\alpha(z^*|z^t) $의 값을 조정함으로써 달성한다.**
    - $r(z^|z^t) >1$ 상황이 의미하는 것은 $z^t → z^$로 보내는 확률 값이 반대보다 더 크다는 의미이다.
        - 즉, 밸런스를 맞추기 위해 z^t → z^* 의 모든 경우를 100% 확률로 보내줘여 한다.
    - $r(z^|z^t) < 1$ 상황에선 반대로 $z^t → z^$ 로 가는 경우를 줄여 밸런스를 맞춰준다.

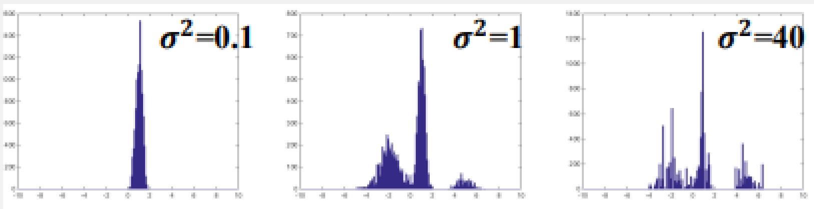
  → 이 두 경우를 같이 고려하기 위해 $\alpha(z^|z^t)$ = min{1, $r(z^|z^t)$} 로 정의한다.

Random Walk M-H Algorithm

- Random walk은 q-distribution의 Special Case이다.

    > $z^* \sim N(z^t, \sigma^2)$
    >
    > $q(z^|z^t) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} exp(-\frac{(z^-z^t)^2}{2\sigma^2})$
    >
    > - 이때 μ 대신 z^* 가 나타남!

> Transition probability : $T_{t, }^{MH} = q(z^|z^t)\alpha(z^*|z^t)$
>
> 이 때, q는 임의의 Function이니 구할 수 있고, z를 Random walk로 정의하면 Transition probability를 계산할 수 있다!

> σ 는 Hyperparameter임.
>
> - 따라서 Sensitive analysis를 진행하여 최적화시킴
>   - 큰 분산을 잡아 형태를 확인한 후에 줄여나갈 것
>   - 단, 최소한 Likelihood(pdf)는 있어야 분석이 가능함.
>
> 
>
>
> - σ의 값이 너무 작으면 특정 모드에 Collapse 됨 (특정 Density만은 반환함)
> - Model Collapse은 Gan 에서 자주 발생함. Gan에선 이를 벗어나기 위해서 MCT(?)를 적용함.

Gibbs Sampling

- 앞서 M-H Algorithm에서는 α 를 도입하여 샘플을 Accept/reject 하였다.
- 하지만 **Efficient Sampler를 추구하고자, α를 없앨 순 없을까? [문제]**

- 우리가 마음대로 다룰 수 있는 q-distiribution 잘 조정해보자.
- 또한 우리가 진정으로 구하고자 하는 건 unobserved data의 분포인 p이다.

→ Gibbs Sampling을 통해서 α 를 없애면서도 p 자체에 대해 Directly 구해보자

- z^t 다음과 같이 정의해보자

> $z^t = (z^t_k, z^t_{-k}) → z^* = (z^*k, z^t{-k})$
>
> > $z_{-k} : z_k$ 외에 다른 모든 것. k dim, 그리고 아닌 것들 둘로만 고려하자!
> >
> > k-dim의 값만을 업데이트 해줄 것이다.
>
> - z^t 모두를 표현하기는 어려우니까, 하나의 Latent variable만 표현하자!
>
> → $q(z^|z^t) = P(z^k, z^t{-k}|z^t_k, z_{-k}^t) = P(z^k, z^t{-k}|z^t_k) = P(z^k|z{-k}^*)$

- 위의 z^t 정의를 기반으로 MH 알고리즘의 목표인 Balance 조건을 성립하는지 확인!

> Balance : $P(z^t)q(z^|z^t) = P(z^)q(z^t|z^*)$ 성립
>
> $$\begin{aligned} P(z^t)q(z^*|z^t) &= P(z^t_k, z^t_{-k})P(z^*_k|z^t_{-k}) = P(z^t_k|z^t_{-k})P(z^t_{-k})P(z^*_k|z^t_{-k}) \\ &= P(z^t_k|z^t_{-k})P(z^*_k, z^t_{-k}) = q(z^t|z^*)P(z^*) \end{aligned}$$
>
> → α 도입 없이도 항상 Balance 조건을 성립한다!

- **즉, 한 dim만 업데이트를 한다면 Balance 조건은 언제나 성립한다.**
  - 이를 Markov Blanket과 활용하여, 업데이트 하고자 대상과 관련된 것만 Sampling함으로써 값을 업데이트 할 수 있다.

    > ex)- P(E,JC,M|A=F, MC=T) =?
    >
    > Consider a conditional distribution $p(z_i|z_{-i}, e)$
    > - P(E|B,A,JC,MC)=P(E|A)
    > - P(JC|B,E,A,MC)=P(JC|A)
    > - P(B|E,A,JC,MC)=P(B|A,E)

> - Full joint distribution, $p(\mathbf{z}) = p(z_1, \dots, z_M)$
> - State = $\{z_i : i = 1, \dots, M\}$
> - Algorithm
>   1. Initialize $\{z_i : i = 1, \dots, M\}$
>   2. For step $\tau = 1, \dots, T$:
>   - Sample $z_1^{(\tau+1)} \sim p\left(z_1 \mid z_2^{(\tau)}, z_3^{(\tau)}, \dots, z_M^{(\tau)}\right)$
>   - Sample $z_2^{(\tau+1)} \sim p\left(z_2 \mid z_1^{(\tau+1)}, z_3^{(\tau)}, \dots, z_M^{(\tau)}\right)$
>
> $\vdots$
>   - Sample $z_j^{(\tau+1)} \sim p\left(z_j \mid z_1^{(\tau+1)}, \dots, z_{j-1}^{(\tau+1)}, z_{j+1}^{(\tau)}, \dots, z_M^{(\tau)}\right)$
>
> $\vdots$
>   - Sample $z_M^{(\tau+1)} \sim p\left(z_M \mid z_1^{(\tau+1)}, z_2^{(\tau+1)}, \dots, z_{M-1}^{(\tau+1)}\right)$
>
> → 관련있는 것에 대해서 Sampling 해서 업데이트 한다. 그 결과는 Posterior distribution과 동일해진다.

- GMM에도 적용가능하다.
  - GMM의 Latent variable은 z 하나임.
  - 예전에는 z의 값은 deterministic 하게 정했다(most assignment value).
  - 하지만 Stocastic하게 했을 때 다른 값을 가질 경우가 생김. 그 결과 학습 속도는 느려질 순 있지만, 여러 가능성을 고려하여 잠재성이 더 있다.

Q. Gibbs와 VI 의 주요 차이점 중 하나는 Exact 하냐 아니냐였다.

- 그런데 Gibbs로 Sampling을 하기 때문에 실제 분포에 근사하는 것이다.
- 이때 Sampling 과정에서 생기는 오차 값은 허용해주는 건가? Bias가 0이니까?

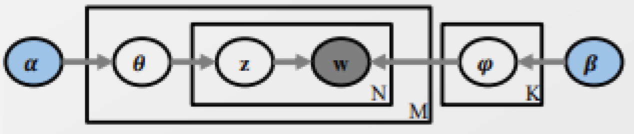
Gibbs sampling 예시 - Latent Dirichlet Allocation

- Topic Modeling : 사람들이 어떤 토픽으로 이야기하는지 알아내보자.
  - 각 단어들이 어떤 Topic으로 부터 유래한 것인가를 찾기
  - Likelihood를 통해서 어떤 단어가 많이 쓰이고 있는지 확인가능
- Dirichlet 은 Multinomial distribution의 확률을 모델링하는 분포이다. [Conjugate 관계]

> $$f(x_1, \cdots, x_k; \alpha_1, \cdots, \alpha_k) = \frac{1}{\mathrm{B}(\alpha)} \prod_{i=1}^{k} x_i^{\alpha_i - 1}$$
> $$\mathrm{B}(\alpha) = \frac{\prod_{i=1}^{k} \Gamma(\alpha_i)}{\Gamma\left(\sum_{i=1}^{k} \alpha_i\right)} \quad (\Gamma \text{is gamma function})$$
> [Dirichlet 분포]

> - Dirichlet 분포에서 k개의 Conti random variables를 샘플링할 수 있다.
> - Dirichlet 특성(probabilistic k-simplex)에 따라, 이 Continuous random variable은 0보다 크거나 같으며, 합은 1이 된다. (확률의 정의를 따름)
> - 따라서 이 k차원 벡터는 합이 1을 만족하기 때문에, multinomial 분포의 모수인 $p_k(\sum p_k =1)$ 에 사용될 수도 있다.
>   - 즉, Dirichlet분포에서 샘플링하면 Multinomial 분포가 나온다.

- Generative Process에서는 각각 다음과 같은 분포를 따른다.

> 
>
>
> - $\theta_i \sim Dir(\alpha), i \in \{1, \dots, M\}$
> - $\varphi_k \sim Dir(\beta), k \in \{1, \dots, K\}$
> - $z_{i,l} \sim Mult(\theta_i), i \in \{1, \dots, M\}, l \in \{1, \dots, N\}$
> - $w_{i,l} \sim Mult(\varphi_{z_{i,l}}), i \in \{1, \dots, M\}, l \in \{1, \dots, N\}$
>
> > w : 단어
> >
> > z : 단어의 Latent variable
> >
> > ψ : 주제 내에서의 단어 분포
> >
> > θ : 문서 내에서의 주제 분포
> >
> > M : Document 별 Plate
> >
> > N : Document 별 Word Plate

> > 단어 $w_{i,j}$ 는 word-topic 분포인 ψ_z 로부터 생성된다.
> >
> > Topic z는 문서-주제 분포인 θ 분포로부터 생성된다.
> >
> > 문서-주제 분포인 θ 는 α 분포로부터 생성된다.
> >
> > 단어-주제 분포인 ψ는 β 분포로부터 생성된다.
>
> - 만약 z 분포를 알고 있다면, 우린 most likely θ, ψ 값을 찾을 수 있다.

- Generative 모델에 Gibbs Sampling을 적용하자

> 항상 시작은 Full-joint distribution을 Factorize하는 것에서 시작
>
> $P(W,Z,\theta, \psi, \alpha, \beta) = $
>
> $$\prod_{i=1}^{K} P(\varphi_i;\beta)\prod_{j=1}^{M} P(\theta_j;\alpha)\prod_{l=1}^{N} P(Z_{j,l}|\theta_j)P(W_{j,l}|\varphi_{Z_{j,l}})$$

> - 이때 V-structure 구조로, z 와 ψ 는 Dependece 하다.

- 이제 θ, ψ를 Collapse(Marginalize) 시켜서 W,Z, α, β 만 남기겠다. [Collapsed Gibbs Sampling]
  - 왜냐면 z만 제대로 알고 있다고 하면,
  - β, z를 이용하여 ψ 를 구할 수 있고, α, z를 활용하여 $\theta $ 를 구할 수 있다.
  - → 따라서, 우리가 직접 계산할 수 있는 W,Z, α, β 만을 남겨 Z를 구한다.

$$P(W,Z;\alpha,\beta) = \int_\theta \int_\varphi P(W,Z,\theta,\varphi;\alpha,\beta)d\varphi d\theta = \int_\varphi \prod_{i=1}^{K} P(\varphi_i;\beta) \prod_{j=1}^{M} \prod_{l=1}^{N} P(W_{j,l}|\varphi_{Z_{j,l}})\, d\varphi \times \int_\theta \prod_{j=1}^{M} P(\theta_j;\alpha) \prod_{l=1}^{N} P(Z_{j,l}|\theta_j)\, d\theta$$

- $P(W,Z;\alpha, \beta)$를 계산하자!

> 두 부분으로 나눠 계산한다.
>
> $$(1) = \int_\varphi \prod_{i=1}^{K} P(\varphi_i;\beta) \prod_{j=1}^{M} \prod_{l=1}^{N} P(W_{j,l}|\varphi_{Z_{j,l}})\, d\varphi = \prod_{i=1}^{K} \int_{\varphi_i} P(\varphi_i;\beta) \prod_{j=1}^{M} \prod_{l=1}^{N} P(W_{j,l}|\varphi_{Z_{j,l}})\, d\varphi_i$$
>
> - 이때 좌우 식에서 $\int$ 와 $\prod$ 의 위치를 바꿀 수 있었던 것은 Finite 개수만 다루기 때문임.
> - Infinite 경우에선 Limit가 각각 들어가는데, 하나의 Limit의 조건이 다른 limit 조건을 성립시키지 않을 수 있어 성립하지 않는다.
> - 여기선 분배법칙을 통해서 공통된 곱의 부분은 앞으로 빼내는 것임.
>
> > Dirichlet 분포 대입
> >
> > $P(\psi_i; \beta) = \frac{\gamma(\sum^V_{v=1} \beta_v)}{\prod^V_{v=1}\gamma(\beta_v)}$
>
> > $\prod^M_{j=1}\prod^N_{l=1} p(W_{j,l}| \psi_{z_j,l})$ = $\prod^V_{v=1}\psi_{i,v}^{n^i_{(.), v}}$
> >
> > $n^i_{j, r}$: i번째 주제의 j번째 문서의 r번째 unique 단어의 개수
>
> > $\prod^V_{v=1} \psi_{i,v}^{\beta_v -1}$ $\prod^V_{v=1}\psi_{i,v}^{n^i_{(.), v}}$ = $\prod^V_{v=1}\psi_{i,v}^{n^i_{(.), v +\beta_v -1}}$
>
> (1) = $$=\prod_{i=1}^{K} \frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V}n_{(.),v}^{i}+\beta_v)} \int_{\varphi_i} \frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}n_{(.),v}^{i}+\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)} \prod_{v=1}^{V} {\varphi_{i,v}}^{n_{(.),v}^{i}+\beta_v-1}\, d\varphi_i$$
>
> = $$=\prod_{i=1}^{K} \frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V}n_{(.),v}^{i}+\beta_v)}$$

> (2) 부분도 1번과 유사한 과정을 통해 계산한다.

> $(2) = \int_\theta \prod_{j=1}^{M} P(\theta_j;\alpha) \prod_{l=1}^{N} P(Z_{j,l}|\theta_j)\, d\theta = \prod_{j=1}^{M} \int_{\theta_j} P(\theta_j;\alpha) \prod_{l=1}^{N} P(Z_{j,l}|\theta_j)\, d\theta_j =$
> $\prod_{j=1}^{M} \int_{\theta_j} \frac{\Gamma(\sum_{k=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{k=1}^{K}\Gamma(\alpha_k)} \prod_{k=1}^{K} \theta_{j,k}^{\alpha_k-1} \prod_{l=1}^{N} P(Z_{j,l}|\theta_j)\, d\theta_j$
>
> - We introduce a new count of $n_{j,r}^{i}$: number of words assigned to i-th topic in j-th document with r-th unique word
>
> $= \prod_{j=1}^{M} \int_{\theta_j} \frac{\Gamma(\sum_{i=1}^{K}\alpha_i)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^{K} \theta_{j,i}^{\alpha_i-1} \prod_{k=1}^{K} \theta_{j,k}^{n_{j,(.)}^{k}}\, d\theta_j$
>
> $= \prod_{j=1}^{M} \int_{\theta_j} \frac{\Gamma(\sum_{i=1}^{K}\alpha_i)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^{K} \theta_{j,k}^{n_{j,(.)}^{i}+\alpha_k-1}\, d\theta_j$
>
> $= \prod_{j=1}^{M} \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{j,(.)}^{i}+\alpha_k)\Gamma(\sum_{i=1}^{K}\alpha_k)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(\alpha_i)\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{j,(.)}^{i}+\alpha_k)} \int_{\theta_j} \frac{\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{j,(.)}^{i}+\alpha_k)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{j,(.)}^{i}+\alpha_k)} \prod_{i=1}^{K} \theta_{j,i}^{n_{j,(.)}^{i}+\alpha_k-1}\, d\theta_j$
>
> $= \prod_{j=1}^{M} \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)\Gamma(\sum_{i=1}^{K}\alpha_i)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(\alpha_i)\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)}$

> (1), (2)을 곱하여 목표했던 바를 구한다.
>
> $$P(W,Z;\alpha,\beta) = \prod_{i=1}^{K} \frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V} n_{(.),v}^{i}+\beta_v)} \prod_{j=1}^{M} \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)\Gamma(\sum_{i=1}^{K}\alpha_i)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(\alpha_i)\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)}$$

> 이제 Z를 구할 수 있는 Joint Distribution을 구했다. 그러니 이젠 z 1개 원소에 대한 확률로 바꿔낸다.
>
> $$P(Z_{(m,l)} = k | Z_{-(m,l)}, W; \alpha, \beta) = \frac{P(Z_{(m,l)}=k, Z_{-(m,l)}, W;\alpha,\beta)}{P(Z_{-(m,l)}, W;\alpha,\beta)} \propto P(Z_{(m,l)} = k, Z_{-(m,l)}, W; \alpha, \beta)$$
>
> - Normalize 부분은 α 상수로 둬 계산에서 제거해줄 수 있다.(Variable Elimination)
>
> > 다 관찰된 값이라 상수로 둬도 되는 건가? oo

- 지금까지 구한 $P(W,Z; \alpha, \beta)$ 와 $P(Z_{(m,l)} = k, Z_{-(m,l)}, W; \alpha, \beta) $ 를 Gibbs Sampling에 맞게 조정해준다.

> - $P(W,Z;\alpha,\beta) = \prod_{i=1}^{K} \frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)\Gamma(\sum_{v=1}^{V} n_{(.),v}^{i}+\beta_v)} \prod_{j=1}^{M} \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)\Gamma(\sum_{i=1}^{K}\alpha_i)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(\alpha_i)\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{j,(.)}^{k}+\alpha_i)}$
>   - $= \left(\frac{\Gamma(\sum_{v=1}^{V}\beta_v)}{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(\beta_v)}\right)^K \left(\frac{\Gamma(\sum_{i=1}^{K}\alpha_i)}{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(\alpha_i)}\right)^M \prod_{i=1}^{K} \frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} n_{(.),v}^{i}+\beta_v)} \prod_{j=1}^{M} \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)}{\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)}$
>   - $\propto \prod_{i=1}^{K} \frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} n_{(.),v}^{i}+\beta_v)} \prod_{j=1}^{M} \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)}{\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{j,(.)}^{i}+\alpha_i)}$
>
> > $\prod$ 에 걸리지 않는 것들은 다 앞으로 빼주기.
> >
> > 그리고 변하지 않는 값들은 상수 처리하기

> P(W,Z';α, β)를 활용하여 k dim에 관련된 것들만 남기기

> - Now, apply that $P\left(Z_{(m,l)} = k, Z_{-(m,l)}, W; \alpha, \beta\right)$
>   - $\propto \prod_{i=1}^{K} \frac{\prod_{v=1}^{V}\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)}{\Gamma(\sum_{v=1}^{V} n_{(.),v}^{i}+\beta_v)} \times \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{m,(.)}^{i}+\alpha_i)}{\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{m,(.)}^{i}+\alpha_i)}$: Fixing document by **m**
>   - $\propto \prod_{i=1}^{K} \frac{\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)}{\Gamma(\sum_{r=1}^{V} n_{(.),r}^{i}+\beta_r)} \times \frac{\prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{m,(.)}^{i}+\alpha_i)}{\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{m,(.)}^{i}+\alpha_i)}$: Fixing word by **l**
>   - $\propto \prod_{i=1}^{K} \frac{\Gamma(n_{(.),v}^{i}+\beta_v)}{\Gamma(\sum_{r=1}^{V} n_{(.),r}^{i}+\beta_r)} \times \prod_{i=1}^{K}\Gamma(n_{m,(.)}^{i}+\alpha_i)$: Remove a constant $\Gamma(\sum_{i=1}^{K} n_{m,(.)}^{i}+\alpha_i)$
>
> > k -dim에 맞게 Document를 m으로, Word를 l로 고정하기
> >
> > 분모에 Normalization 역할하는 것은 상수 취급하기
>
> → 이걸 계산하여 Normalization을 하면 Gibbs의 Prop distribution을 구하게 된다.
>
> $$P\left(Z_{(m,l)} = k \middle| Z_{-(m,l)}, W; \alpha, \beta\right) \propto \frac{n_{(.),v}^{k,-(m,n)}+\beta_v}{(\sum_{r=1}^{V} n_{(.),r}^{k,-(m,n)}+\beta_r)} \times (n_{m,(.)}^{k,-(m,n)}+\alpha_k)$$
>
> - 계산 과정은 각각의 상황에서 Counting 하는 형태로 구할 수 있음.
>
> → 이후에는 Gibbs Sampling을 여럿 적용하여 Statinary distribution을 구할 것이다.

- **위의 과정으로 우리는 2가지 특성을 확인할 수 있다.**
  1. 새로운 데이터를 받아들이며 Bayesian Frame을 활용하여 Posterior distribution을 업데이트하는 Mechanism이다.
  2. 이전 데이터를 활용한다는 점에서 MCMC임을 확인할 수 있다.

     > MCMC가 맞나? MC 아닌가?

- LDA(TextCorpus T, α, β)
  - Randomly, initialize Z assignment on T
  - Count $n_{j,r}^{i}$ with the initial Z assignment
  - While performance measure (i.e. perplexity) converges
    - For **m** = 1 to T's document number
      - For **l** = 1 to T_m's document word length
        - Sampling **k** from $P\left(Z_{(m,l)} = k \middle| Z_{-(m,l)}, W; \alpha, \beta\right) \propto \frac{n_{(.),v}^{k,-(m,n)}+\beta_v}{(\sum_{r=1}^{V} n_{(.),r}^{k,-(m,n)}+\beta_r)} \times (n_{m,(.)}^{k,-(m,n)}+\alpha_k)$
        - Adjust $n_{j,r}^{i}$ by assigning $Z_{(m,l)} = k$
  - Calculate the most likely estimation on θ and φ
  - Return θ and φ

Sampling 방식의 의의

1. Smapling 방식은 Black box를 다룰 수 있다.

- V.I는 Likelihood를 필요로 한다.

2. Diffusion problem에선 Sample efficiency가 낮다.

- 즉, Efficient sampler design을 위해서 Sampling method를 이용할 수 있다.