

Report 13

PB20020480 王润泽

1 Question

用 Metropolis-Hasting 抽样方法计算积分：

$$I = \int_0^{\infty} (x - \alpha\beta)^2 f(x) dx = \alpha\beta^2 \quad (1)$$

其中 $f(x) = \frac{1}{\beta\Gamma(\alpha)} \left(\frac{x}{\beta}\right)^{\alpha-1} \exp(-x/\beta)$ 。设权重函数为： $p(x) = f(x)$ 和 $p(x) = (x - \alpha\beta)^2 f(x)$ 。给定参数 α, β 用不同的 γ 值计算积分，讨论计算精度和效率。

2 Analysis

2.1 $p(x) = f(x)$

2.1.1 抽样算法

根据 Metropolis-Hasting 抽样规则，考虑到待抽样 $f(x)$ 的分布形式，取 $T(x \rightarrow x') = T(x') = \frac{1}{\gamma} \exp(-x'/\gamma)$ 为建议分布函数，与 $f(x)$ 形状比较接近

根据简单抽样方法， $T(x')$ 的累积分布函数为

$$F(x') = \int_0^{x'} T(t) dt = 1 - \exp(-x/\gamma)$$

所以，对于符合均匀分布 $[0, 1]$ 的随机数 R 来说，其可以对符合分布 $T(x') = \frac{1}{\gamma} \exp(-x'/\gamma)$ 的 x' 抽样

$$x' = -\gamma \ln(1 - R) \Leftrightarrow -\gamma \ln R$$

于是 Metropolis-Hasting 抽样 $f(x)$ 的算法为：

设起始点 $x_0 = 1$

1. 设 X 为 Markov 链集合 $\{x_k\}$ ，取最后一个点为 x_n
2. 在 $[0, 1]$ 均匀分布中抽样出随机点 R ，根据简单抽样法，抽样得到 $x' = -\gamma \ln R$
3. 根据 Metropolis-Hasting 方法，令

$$r_1 = \frac{p_j T_{ji}}{p_i T_{ij}} = \frac{p(x') T(x)}{p(x) T(x')} = \left(\frac{x'}{x_n}\right)^{\alpha-1} \exp\left[-\frac{x' - x_n}{\beta}\right] \exp\left[\frac{x' - x_n}{\gamma}\right]$$

4. 在 $[0, 1]$ 均匀分布中抽样出随机点 ξ ，若 $\xi < \min(1, r)$ ，取 $x_{n+1} = x'$ ；若 $\xi > \min(1, r)$ ，取 $x_{n+1} = x_n$ 。
5. 将 x_{n+1} 加入到 X 集合，循环到 步骤1，直到集合总数大于 N

2.1.2 重要抽样法求积分

当得到有N个点的Markov链集合后，将序列中热化过程的前M个构型舍去，那么通过重要抽样方法可以得到积分数值表达式为

$$I_1 = \frac{1}{N-M} \sum_{i=M+1}^N (x_i - \alpha\beta)^2 \quad (2)$$

$$2.2 \quad p(x) = (x - \alpha\beta)^2 f(x)$$

2.2.1 抽样算法

若令 $p(x)$ 为被积函数本身，则积分的结果为 $p(x)$ 的归一化因子 C ，那么把 x 满足的概率分布函数令为 $g(x) = \frac{p(x)}{C}$

而Metropolis-Hasting 抽样规则不依赖于归一的概率分布，依然可以对 x 进行抽样，得到的 x 符合 $g(x)$ 的概率分布。

具体抽样步骤只要将 2.1 中 步骤4 里的 r 改变，即

$$r_2 = \frac{p_i T_{ji}}{p_i T_{ij}} = \left(\frac{x' - \alpha\beta}{x_n - \alpha\beta} \right)^2 \left(\frac{x'}{x_n} \right)^{\alpha-1} \exp\left[-\frac{x' - x_n}{\beta}\right] \exp\left[\frac{x' - x_n}{\gamma}\right]$$

其他步骤不变，即可得到满足 $g(x)$ 概率分布的抽样。

2.2.2 比值法求积分

为了得到数值积分结果，即得到归一化系数 C ，对集合 X 中的点进行统计，则可以得到 x 的近似概率分布函数 $g^*(x)$ ，那么数值积分为

$$I_2 = C = \frac{p(x)}{g^*(x)}$$

那么这样的点在实数域有无穷多，但考虑到对抽样结果统计时，总是离散化定义域的点 $\{x_i\}$ 取频率分布来计算，那么计算 I_2 时也可以这样做，即对这些离散点 $\{x_i\}$ 处的值求平均

$$I_2 = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^n \frac{p(x_i)}{g^*(x_i)}$$

为了尽量使得结果准确可靠性，应当选择 $g(x)$ 的值较大的点 x_m ，即概率出现较大的点，防止出现统计上的偏差，故设概率截断阈值为 $\epsilon = 0.001$ ，当 $g^*(x_i) < \epsilon$ 时舍去该点，剩下的 n' 个点 $\{x_j\}$ ，故得到积分表达式为

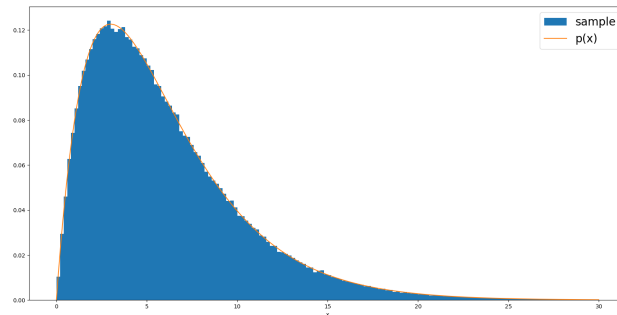
$$I_2 = \frac{1}{n'} \sum_{j=0}^{n'} \frac{p(x_j)}{g^*(x_j)} \quad (3)$$

3 Experiment

3.1 $p(x) = f(x)$

3.1.1 实验结果

利用Metropolis方法对 $p(x)$ 抽样结果如下所示



Metropolis方法抽样结果不错

根据公式 (1) (2), 定义相对误差为: $error = \frac{|I_0 - I_1|}{I_1}$

根据抽样时第4步, $\xi < \min(1, r)$ 是否成立, 决定Markov链下一步 x_{i+1} 是否更新。定义效率为: $rate = \frac{n}{N}$, 其中 n 为 $x_i \neq x_{i+1}$ 的个数, N 为 X 集合总数

选择 $\alpha = 2, \beta = 3, \gamma = 6$, hw13.py 输出结果如下

```
I=18 , I1 = 17.976104210004017
relative error = 0.001327543888665714
sample rate = 0.7629607843137255
```

结论1: 由程序输出可见, 相对误差较低, 至少有3位有效数字, 效率为0.7, 较为不错

3.1.2 改变 γ , 观察曲线变化

实验中, 尝试了 $\alpha = 2, \beta = 3$ 的取值情况, 改变 γ 取值, 修改建议分布参数, 得到以下曲线

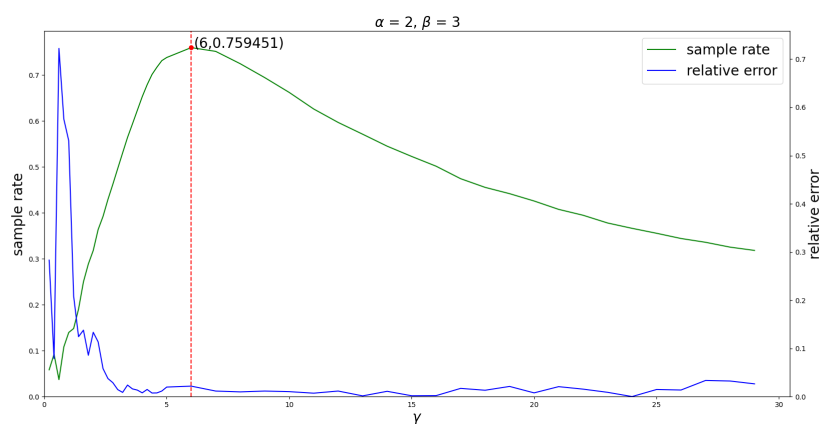


图1: γ 与相对误差和接受效率关系

从图像上可以很明显的看出, 其接受效率 (舍选效率) 先上升后下降, 在 $\gamma = 6$ 时取最大。

而其相对误差在 γ 较小时由较大的波动，且相对误差较大；在 γ 很大时，其相对误差较小，但也会有增长的趋势；只有在 $\gamma = 6$ 附近处，相对误差保持在较小的水平。

那么有理由认为 $\gamma = 6$ ，建议分布 $T(x') = \frac{1}{\gamma} \exp(-x'/\gamma)$ 抽样的结果较好。

如图2所示

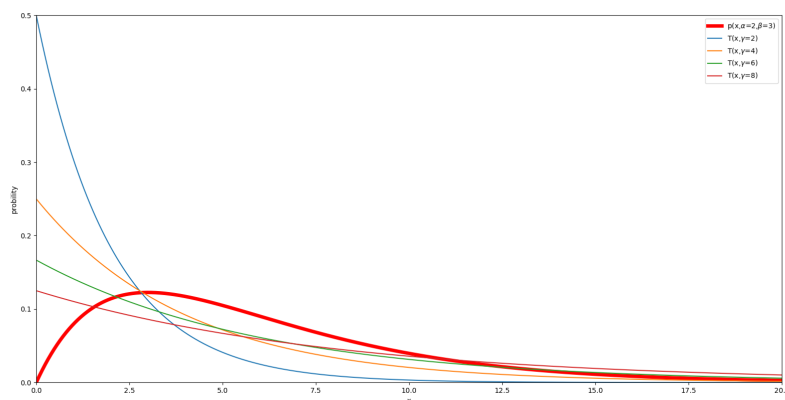


图2: α, β 与不同 γ 取值下待抽样分布与建议分布图像

由图2可以解释图1中效率先上升后下降，而误差随着 γ 增大而减小的原因。

对于指数分布来说， γ 越小，概率密度衰减越快。即 γ 较小时指数分布主要集中于 x 较小的地方； γ 增大时 x 取大值的可能性也会增高。而我们待求的分布 $f(x)$ 是一个有极值点的函数，它在 x 轴上某一段区间上分布较为集中。

一开始 γ 较小时，指数分布使得抽样点集中在 x 较小的区间，和 $p(x)$ 所集中的区间不重合，使得采样率较低，并且导致试探点 x' 不能在整个区间内分布，会使得抽样的结果并不接近 $p(x)$ ，导致误差偏大

随着 γ 的增大指数分布所集中的区间和 $p(x)$ 开始重合，这时候采样率有所上升，误差有所下降。

而当 γ 太大时指数分布几乎成为很大一段区间上的均匀分布，和 $f(x)$ 所集中的区间相差太远，使得采样率有所下降，但误差保持在较低的水平

结论2: 随着 γ 增大，接受效率（舍选效率）先上升后下降；相对误差先剧烈波动，后逐渐下降并趋于稳定

3.1.3 最优 γ^* 取值

为了寻找 γ 取最优时的表达式，故改变 α, β 的取值，定义最优 γ^* 为接受效率最高处，得到下表

$\alpha \backslash \beta$	3	4	5	6	7
3	9	11.5	15	19.5	20.5
4	12.5	15.5	21	26.5	29.5
5	14.5	17.5	24	32.5	33
6	19.5	22.5	30	35	43
7	22	28	39	48	49

表1: γ^* 与 α 和 β 关系（步长为0.5）

由表中数据可以看到最优 γ^* 大致都在 $\alpha * \beta$ 附近，大部分误差不超过 ± 4 ，故猜测 $\gamma^* = \alpha\beta$

考虑到表1数据，采样时步长为0.5，选取可能较大，且搜索范围较宽，选择出 γ^* 精度较低

故为了进一步验证 γ^* 表达式，重新选择更小的步长0.1，在 $\alpha\beta$ 范围附近 (± 4)，重新采样，得到下表

a\b	3	4	5	6	7
3	9	11	14.9	19.4	21.7
4	11.3	16.8	22.3	24.1	26.9
5	14.1	20.9	25.1	27.9	36.6
6	16.8	24.8	30.9	34.2	38.1
7	18.7	28.4	35.6	44.7	49

表2: γ^* 与 α 和 β 关系 (步长为0.1)

可以更加具体的看到 γ^* 取值在 $\alpha\beta$ 范围附近，可以得到以下结论

结论3: 建议分布 $T(x)$ 其参数 γ 选择在 $\alpha\beta$ 附近有较好的结果

3.2 $p(x) = (x - \alpha\beta)^2 f(x)$

3.2.1 实验结果

依然取 $\alpha = 2, \beta = 3$ ，则 $p(x)$ 图像如下

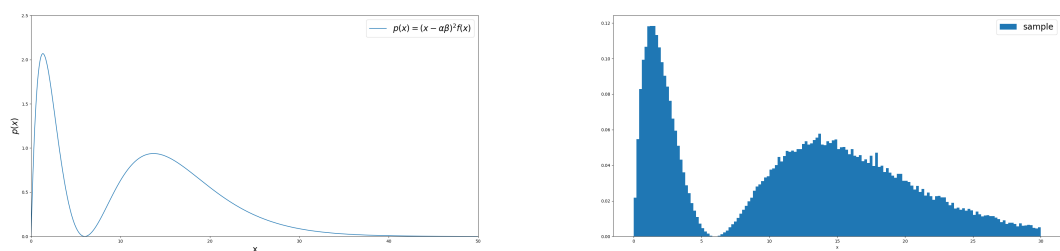


图3: $p(x)$ 与抽样图像

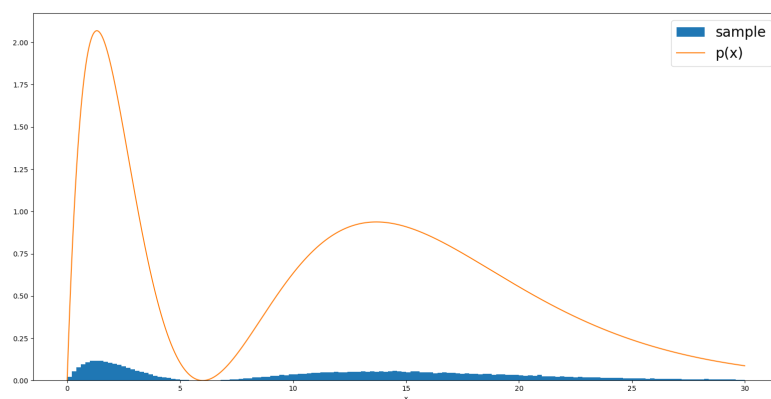


图4: $p(x)$ 与抽样图像对比

由图3，图4可见抽样的形状是一致的，但放在一起，可以看出 $p(x)$ 未归一化

根据公式 (3) ， 程序得到以下输出

```
I=18 ,I2 = 17.95174627809675
relative error = 0.00268076232795838
sample rate = 0.5950916334661355
```

由程序输出可见，相对误差较低，至少有3位有效数字，效率为0.7，较为不错

3.2.2 改变 γ ，观察曲线变化

实验中，尝试了 $\alpha = 2, \beta = 3$ 的取值情况，改变 γ 取值，修改建议分布参数，得到以下曲线

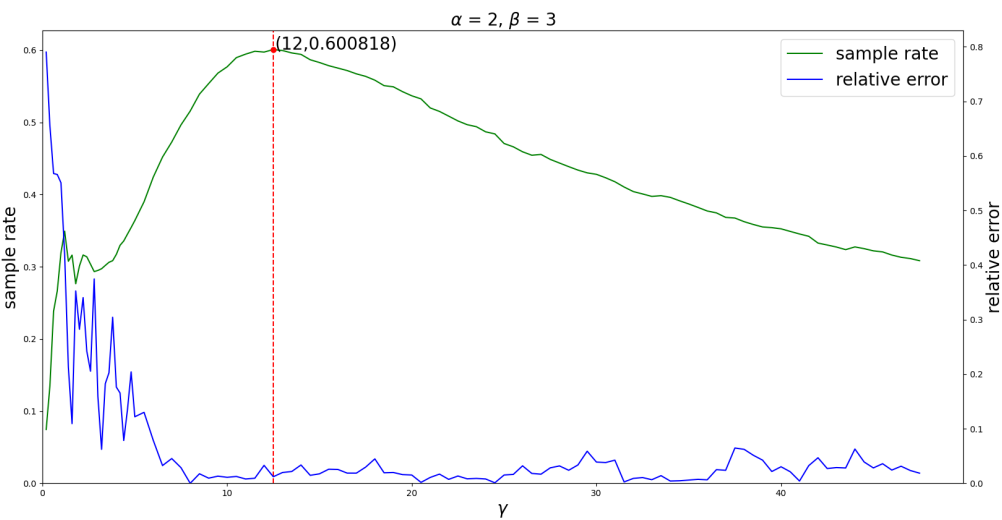


图5: γ 与相对误差和接受效率关系

与 3.1.2 类似，随着 γ 增大，接受效率（舍选效率）先上升后下降；相对误差先剧烈波动，后逐渐下降并趋于稳定

3.2.3 最优 γ^* 取值

为了寻找 γ 取最优时的表达式，故改变 α, β 的取值，定义最优 γ^* 为接受效率最高处，得到下表

a\b	3	4	5	6	7
3	15.5	21.5	29	32.5	34.5
4	19.5	23	31	36	43.5
5	21.5	33.5	41.5	39.5	41.5
6	25	34.5	46	47	47
7	25	34.5	44	47.5	46

表3: γ^* 与 α 和 β 关系（步长为0.5）

由表中数据可以看到最优 γ^* 大致都在 $(\alpha + 2)\beta$ 或 $\alpha(\beta + 2)$ 附近，大部分误差不超过 ± 5 ，在 α, β 值较大时，与预期有较大偏差（标粗值），故可以猜测当 α, β 不大时，最优 $\gamma^* = (\alpha + 2)\beta$ 或 $\alpha(\beta + 2)$

4 Summary

本次实验利用 Metropolis-Hasting 方法，分别以 $p(x)=f(x)$ 和 $p(x)=(x-\alpha\beta)^2 f(x)$ 计算积分。

当 $p(x) = f(x)$ 时，存在一个最优的 $\gamma = \alpha\beta$ 使得整体抽样率最高，误差较小；熟悉了重要抽样方法求积分的过程。

当 $p(x) = (x - \alpha\beta)^2 f(x)$ 时，当 α, β 不大时，存在一个最优的 $\gamma = (\alpha + 2)\beta$ 或 $\alpha(\beta + 2)$ 使得整体抽样率最高，误差较小；同时掌握了求解归一化系数的方法（比值法）

在两个实验中，固定 α, β 改变 γ 的值，都会出现类似的曲线，即随着 γ 增大，接受效率（舍选效率）先上升后下降；相对误差先剧烈波动，后逐渐下降并趋于稳定。故在数值积分时，选择恰当的建议分布 $T(x)$ 对积分精度与效率会有明显的改善。