

# 蒙特卡洛方法与 MCMC 采样

## 一、蒙特卡洛方法

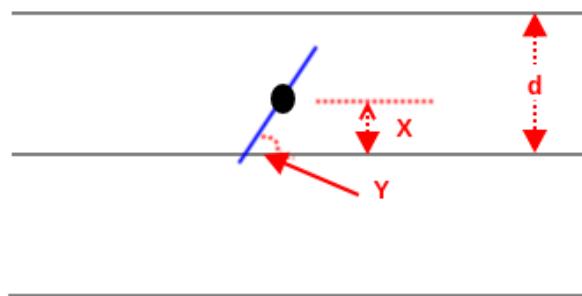
1. 蒙特卡洛方法 Monte Carlo 可以通过采用随机投点法来求解不规则图形的面积。

求解结果并不是一个精确值，而是一个近似值。当投点的数量越来越大时，该近似值也越接近真实值。

2. 蒙特卡洛方法也可以用于根据概率分布来随机采样的任务。

### 1.1 布丰投针问题

1. 布丰投针问题是1777年法国科学家布丰提出的一种计算圆周率的方法：随机投针法。其步骤为：
  - 首先取一张白纸，在上面绘制许多条间距为  $d$  的平行线。
  - 取一根长度为  $l$ ,  $l < d$  的针，随机地向纸上投掷  $n$  次，观测针与直线相交的次数，记做  $m$ 。
  - 计算针与直线相交的概率  $p = \frac{m}{n}$ 。可以证明这个概率  $p = \frac{2l}{\pi \times d}$ 。因此有：
$$\pi = 2 \frac{n \times l}{m \times d}$$
2. 由于向纸上投针是完全随机的，因此用二维随机变量  $(X, Y)$  来确定针在纸上的具体位置。其中：
  - $X$  表示针的中点到平行线的距离，它是  $[0, d/2]$  之间的均匀分布。
  - $Y$  表示针与平行线的夹角，它是  $[0, \frac{\pi}{2}]$  之间的均匀分布。



当  $X < \frac{l}{2} \sin Y$  时，针与直线相交。

由于  $X, Y$  相互独立，因此有概率密度函数：

$$p(X = x, Y = y) = \begin{cases} \frac{4}{\pi d}, & 0 \leq x \leq d/2, 0 \leq y \leq \pi/2 \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

因此，针与直线相交的概率为：

$$P\{X < \frac{l}{2} \sin Y\} = \int \int_{x < \frac{l}{2} \sin y} p(x, y) dx dy = \int_{x=0}^{x=\frac{l}{2} \sin y} \int_{y=0}^{y=\pi/2} \frac{4}{\pi d} dx dy = \frac{2l}{\pi d}$$

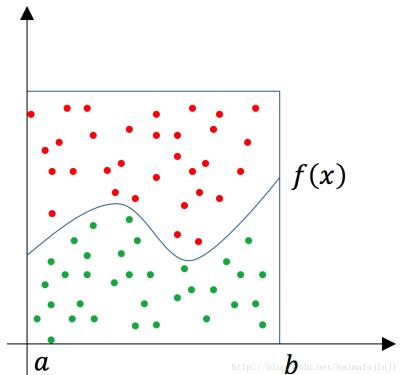
根据  $\frac{2l}{\pi d} = \frac{m}{n}$  即可得证。

3. 布丰投针问题中，蒙特卡洛方法是利用随机投点法来求解面积  $\int \int_{x < \frac{l}{2} \sin y} p(x, y) dx dy$ 。因为曲线的积分就是面积，这里的曲线就是概率密度函数  $p(X, Y)$ 。

## 1.2 蒙特卡洛积分

1. 对于函数  $f(x)$ ，其在区间  $[a, b]$  上的积分  $\int_a^b f(x) dx$  可以采用两种方法来求解：投点法、期望法。
2. 投点法求积分：对函数  $f(x)$ ，对其求积分等价于求它的曲线下方的面积。  
此时定义一个常数  $M$ ，使得  $M > \max_{a \leq x \leq b} f(x)$ ，该常数在区间  $[a, b]$  上的面积就是矩形面积  $M(b - a)$ 。  
随机向矩形框中随机的、均匀的投点，设落在函数  $f(x)$  下方的点为绿色，落在  $f(x)$  和  $M$  之间的点为红色。则有：**落在  $f(x)$  下方的点的概率等于  $f(x)$  的面积比上矩形框的面积。**  
具体做法是：从  $[a, b]$  之间的均匀分布中采样  $x_0$ ，从  $[0, M]$  之见的均匀分布中采样  $y_0$ ， $(x_0, y_0)$  构成一个随机点。
  - 若  $y_0 \leq f(x_0)$ ，则说明该随机点在函数  $f(x)$  下方，染成绿色。
  - 若  $f(x_0) < y_0 \leq M$ ，则说明该随机点在函数  $f(x)$  上方，染成红色。

假设绿色点有  $n_1$  个，红色点有  $n_2$  个，总的点数为  $n_1 + n_2$ ，因此有： $\int_a^b f(x) dx = \frac{n_1}{n_1 + n_2} \times M(b - a)$



3. 期望法求积分：假设需要求解积分  $I = \int_a^b f(x) dx$ ，则任意选择一个概率密度函数  $p(x)$ ，其中  $p(x)$  满足条件：

$$\int_a^b p(x) dx = 1$$

if  $f(x) \neq 0$  then  $p(x) \neq 0$ ,  $a \leq x \leq b$

令：

$$f^*(x) = \begin{cases} \frac{f(x)}{p(x)}, & p(x) \neq 0 \\ 0, & p(x) = 0 \end{cases}$$

则有： $I = \int_a^b f(x) dx = \int_a^b f^*(x)p(x)dx$ ，它刚好是一个期望：设随机变量  $X$  服从分布  $X \sim p(x)$ ，则  $I = \mathbb{E}_{X \sim p}[f^*(X)]$ 。

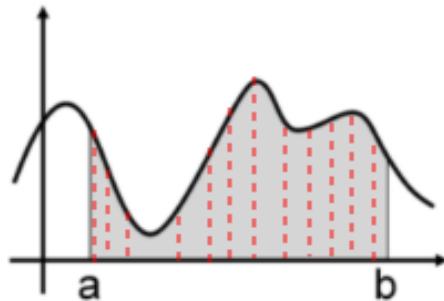
则期望法求积分的步骤是：

- 任选一个满足条件的概率分布  $p(x)$ 。
  - 根据  $p(x)$ ，生成一组服从分布  $p(x)$  的随机数  $x_1, x_2, \dots, x_N$ 。
  - 计算均值  $\bar{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f^*(x_i)$ ，并将  $\bar{I}$  作为  $I$  的近似。
4. 在期望法求积分中，如果  $a, b$  均为有限值，则  $p(x)$  可以取均匀分布的概率密度函数：

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{else} \end{cases}$$

此时  $f^*(x) = (b-a)f(x)$ ,  $\bar{I} = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$ 。

其物理意义为： $\frac{\sum_{i=1}^N f(x_i)}{N}$  为在区间  $[a, b]$  上函数的平均高度，乘以区间宽度  $b - a$  就是平均面积。



5. 对于期望  $\mathbb{E}_p[f(X)]$ ，如果  $p(x)$  或者  $f(x)$  的表达式比较复杂，则也可以转化为另一个期望的计算。

选择一个比较简单的概率密度函数  $q(x)$ ，根据：

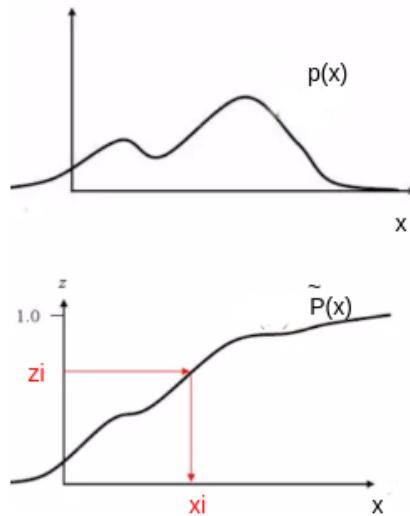
$$\mathbb{E}_p[f(X)] = \int f(x)p(x)dx = \int f(x)\frac{p(x)}{q(x)}q(x)dx$$

令  $f^*(x) = f(x)\frac{p(x)}{q(x)}$ ，则原始期望转换为求另一个期望  $\mathbb{E}_q[f^*(X)]$ 。此时可以使用期望法求积分的策略计算。

### 1.3 蒙特卡洛采样

1. 采样问题的主要任务是：根据概率分布  $p(x)$ ，生成一组服从分布  $p(x)$  的随机数  $x_1, x_2, \dots$ 。

- 如果  $p(x)$  就是均匀分布，则均匀分布的采样非常简单。
  - 如果  $p(x)$  是非均匀分布，则可以通过均匀分布的采样来实现。其步骤是：
    - 首先根据均匀分布  $U(0, 1)$  随机生成一个样本  $z_i$ 。
    - 设  $\tilde{P}(x)$  为概率分布  $p(x)$  的累计分布函数： $\tilde{P}(x) = \int_{-\infty}^x p(z)dz$ 。
- 令  $z_i = \tilde{P}(x_i)$ ，计算得到  $x_i = \tilde{P}^{-1}(z_i)$ ，其中  $\tilde{P}^{-1}$  为反函数，则  $x_i$  为对  $p(x)$  的采样。



2. 通过均匀分布的采样的原理：假设随机变量  $Z, X$  满足  $Z = \tilde{P}(X)$ ，则  $X$  的概率分布为：

$$p_Z(z) \frac{d}{dx} \tilde{P}(x)$$

因为  $Z$  是  $[0, 1]$  上面的均匀分布，因此  $p_Z(z) = 1$ ； $\tilde{P}(x)$  为概率分布  $p(x)$  的累计分布函数，因此  $\frac{d}{dx} \tilde{P}(x) = p_X(x)$ 。因此上式刚好等于  $p(x)$ ，即： $x_i$  服从概率分布  $p(x)$ 。

这其中有两个关键计算：

- 根据  $p(x)$ ，计算累计分布函数  $\tilde{P}(x) = \int_{-\infty}^x p(z)dz$ 。
- 根据  $z = \tilde{P}(x)$  计算反函数  $x = \tilde{P}^{-1}(z)$ 。

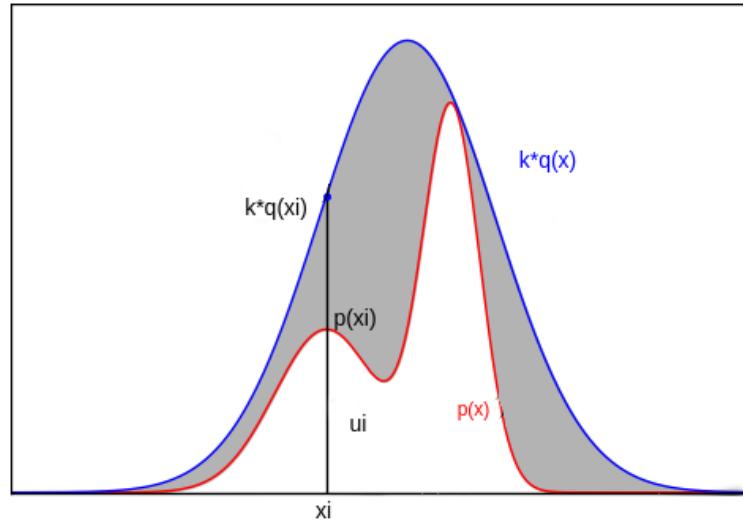
如果累计分布函数无法计算，或者反函数难以求解，则该方法无法进行。

3. 对于复杂的概率分布  $p(x)$ ，难以通过均匀分布来实现采样。此时可以使用 接受-拒绝采样 策略。

- 首先选定一个容易采样的概率分布  $q(x)$ ，选择一个常数  $k$ ，使得在定义域的所有位置都满足  $p(x) \leq k \times q(x)$ 。
- 然后根据概率分布  $q(x)$  随机生成一个样本  $x_i$ 。
- 计算  $\alpha_i = \frac{p(x_i)}{kq(x_i)}$ ，以概率  $\alpha_i$  接受该样本。

具体做法是：根据均匀分布  $U(0, 1)$  随机生成一个点  $u_i$ 。如果  $u_i \leq \alpha_i$ ，则接受该样本；否则拒绝该样本。

或者换一个做法：根据均匀分布  $U(0, kq(x_i))$  生成一个随机点，如果该点落在灰色区间 ( $(p(x_i), kq(x_i))$ ) 则拒绝该样本；如果该点落在白色区间 ( $[0, p(x_i)]$ ) 则接受该样本。



4. 接受-拒绝采样 在高维的情况下会出现两个问题：

- 合适的  $q$  分布比较难以找到。
- 难以确定一个合理的  $k$  值。

这两个问题会导致拒绝率很高，无效计算太多。

## 二、马尔可夫链

1. 马尔可夫链是满足马尔可夫性质的随机过程。

马尔可夫链  $X_1, X_2, \dots$  描述了一个状态序列，其中每个状态值取决于前一个状态。 $X_t$  为随机变量，称为时刻  $t$  的状态，其取值范围称作状态空间。

马尔可夫链的数学定义为： $P(X_{t+1} | X_t, X_{t-1}, \dots, X_1) = P(X_{t+1} | X_t)$ 。

### 2.1 马尔可夫链示例

1. 社会学家把人按照经济状况分成三类：下层、中层、上层。用状态  $1, 2, 3$  代表着三个阶层。社会学家发现：决定一个人的收入阶层的最重要因素就是其父母的收入阶层。

- 如果一个人的收入属于下层，则他的孩子属于下层的概率是 0.65，属于中层的概率是 0.28，属于上层的概率是 0.07。
- 如果一个人的收入属于中层，则他的孩子属于下层的概率是 0.15，属于中层的概率是 0.67，属于上层的概率是 0.18。
- 如果一个人的收入属于上层，则他的孩子属于下层的概率是 0.12，属于中层的概率是 0.36，属于上层的概率是 0.52。

从父代到子代，收入阶层的变化的转移概率如下：

	子代阶层1	子代阶层2	子代阶层3
父代阶层1	0.65	0.28	0.07
父代阶层2	0.15	0.67	0.18
父代阶层3	0.12	0.36	0.52

2. 使用矩阵的表示方式，转移概率矩阵记作：

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0.65 & 0.28 & 0.07 \\ 0.15 & 0.67 & 0.18 \\ 0.12 & 0.36 & 0.52 \end{bmatrix}$$

假设当前这一代人在下层、中层、上层的人的比例是概率分布  $\vec{\pi}_0 = (\pi_0(1), \pi_0(2), \pi_0(3))$ ，则：

- 他们的子女在下层、中层、上层的人的概率分布是  $\vec{\pi}_1 = (\pi_1(1), \pi_1(2), \pi_1(3)) = \vec{\pi}_0 \mathbf{P}$
  - 他们的孙子代的分布比例将是  $\vec{\pi}_2 = (\pi_2(1), \pi_2(2), \pi_2(3)) = \vec{\pi}_1 \mathbf{P} = \vec{\pi}_0 \mathbf{P}^2$
  - ...
  - 第  $n$  代子孙在下层、中层、上层的人的比例是  $\vec{\pi}_n = (\pi_n(1), \pi_n(2), \pi_n(3)) = \vec{\pi}_{n-1} \mathbf{P} = \vec{\pi}_0 \mathbf{P}^n$
3. 假设初始概率分布为  $\pi_0 = (0.72, 0.19, 0.09)$ ，给出前 14 代人的分布状况：

```
0 0.72 0.19 0.09
1 0.5073 0.3613 0.1314
2 0.399708 0.431419 0.168873
3 0.34478781 0.46176325 0.19344894
4 0.3165904368 0.4755635827 0.2078459805
5 0.302059838985 0.482097475693 0.215842685322
6 0.294554638933 0.485285430346 0.220159930721
7 0.290672521545 0.486874112293 0.222453366163
8 0.288662659788 0.487677173087 0.223660167125
9 0.28762152488 0.488086910874 0.224291564246
10 0.287082015513 0.488297220381 0.224620764107
11 0.286802384833 0.488405577077 0.22479203809
12 0.286657431274 0.488461538107 0.224881030619
13 0.286582284718 0.488490482311 0.22492723297
14 0.28654332537 0.488505466739 0.224951207891
```

可以看到从第 9 代开始，阶层分布就趋向于稳定不变。

4. 如果换一个初始概率分布为  $\vec{\pi}_0 = (0.51, 0.34, 0.15)$ ，给出前 14 代人的分布状况：

```
0 0.51 0.34 0.15
1 0.4005 0.4246 0.1749
2 0.345003 0.459586 0.195411
3 0.31663917 0.47487142 0.20848941
4 0.3020649027 0.4818790066 0.2160560907
5 0.294550768629 0.48521729983 0.220231931541
6 0.290668426368 0.486853301457 0.222478272175
7 0.288659865019 0.487671049342 0.223669085639
8 0.28761985994 0.488085236095 0.224294903965
9 0.287081082851 0.488296834394 0.224622082755
10 0.286801878943 0.488405532034 0.224792589023
11 0.286657161801 0.488461564615 0.224881273584
12 0.286582142693 0.488490512087 0.224927345221
13 0.28654325099 0.488505487331 0.224951261679
14 0.286523087645 0.488513240994 0.224963671362
```

可以发现到第 8 代又收敛了。

5. 两次不同的初始概率分布，最终都收敛到概率分布  $\vec{\pi} = (0.286, 0.489, 0.225)$ 。这说明收敛的行为和初始概率分布  $\vec{\pi}_0$  无关，而是由概率转移矩阵  $\mathbf{P}$  决定的。

计算  $\mathbf{P}^n$ ：

```

0 [[ 0.65  0.28  0.07]
 [ 0.15  0.67  0.18]
 [ 0.12  0.36  0.52]]
1 [[ 0.4729  0.3948  0.1323]
 [ 0.2196  0.5557  0.2247]
 [ 0.1944  0.462   0.3436]]
...
18 [[ 0.28650397  0.48852059  0.22497545]
 [ 0.28650052  0.48852191  0.22497757]
 [ 0.28649994  0.48852213  0.22497793]]
19 [[ 0.28650272  0.48852106  0.22497622]
 [ 0.28650093  0.48852175  0.22497732]
 [ 0.28650063  0.48852187  0.22497755]]
20 [[ 0.28650207  0.48852131  0.22497661]
 [ 0.28650115  0.48852167  0.22497719]
 [ 0.28650099  0.48852173  0.22497728]]
21 [[ 0.28650174  0.48852144  0.22497682]
 [ 0.28650126  0.48852163  0.22497712]
 [ 0.28650118  0.48852166  0.22497717]]
...

```

可以看到：

$$\mathbf{P}^{18} = \mathbf{P}^{19} = \dots = \begin{bmatrix} 0.286 & 0.489 & 0.225 \\ 0.286 & 0.489 & 0.225 \\ 0.286 & 0.489 & 0.225 \end{bmatrix}$$

发现当  $n$  足够大的时候，矩阵  $\mathbf{P}^n$  收敛且每一行都稳定收敛到  $\vec{\pi} = (0.286, 0.489, 0.225)$ 。

## 2.2 平稳分布

1. 马尔可夫链定理：如果一个非周期马尔可夫链具有转移概率矩阵  $\mathbf{P}$ ，且它的任何两个状态是联通的，则有：

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbf{P}^n = \begin{bmatrix} \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(j) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \pi(1) & \pi(2) & \cdots & \pi(j) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \end{bmatrix}$$

$$\pi(j) = \sum_{i=0}^{\infty} \pi(i) P_{i,j}$$

其中：

- $1, 2, \dots, j, \dots$  为所有可能的状态。

- $P_{i,j}$  是转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  的第  $i$  行第  $j$  列的元素，表示状态  $i$  转移到状态  $j$  的概率。
- 概率分布  $\vec{\pi}$  是方程  $\vec{\pi}\mathbf{P} = \vec{\pi}$  的唯一解，其中  $\vec{\pi} = (\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(j), \dots)$ ,  $\sum_{j=0}^{\infty} \pi(j) = 1$ 。称概率分布  $\vec{\pi}$  为马尔可夫链的平稳分布。

2. 注意，在马尔可夫链定理中：

- 马尔可夫链的状态不要求有限，可以是无穷多个。
- 非周期性在实际任务中都是满足的。
- 两个状态的连通指的是：状态  $i$  可以通过有限的  $n$  步转移到达  $j$  (并不要求从状态  $i$  可以直接一步转移到状态  $j$ )。

马尔可夫链的任何两个状态是联通的含义是：存在一个  $n$ ，使得矩阵  $\mathbf{P}^n$  中的任何一个元素的数值都大于零。

3. 从初始概率分布  $\vec{\pi}_0$  出发，在马尔可夫链上做状态转移，记时刻  $i$  的状态  $X_i$  服从的概率分布为  $\vec{\pi}_i$ ，记作  $X_i \sim \vec{\pi}_i$ ，则有：

$$\begin{aligned} X_0 &\sim \vec{\pi}_0 \\ X_1 &\sim \vec{\pi}_1 \\ &\dots \\ X_n &\sim \vec{\pi}_n \\ X_{n+1} &\sim \vec{\pi}_{n+1} \\ &\dots \end{aligned}$$

假设到达第  $n$  步时，马尔可夫链收敛，则有：

$$\begin{aligned} X_n &\sim \vec{\pi} \\ X_{n+1} &\sim \vec{\pi} \\ &\dots \end{aligned}$$

所以  $X_n, X_{n+1}, X_{n+2}, \dots$  都是同分布的随机变量（当然它们并不独立）。

如果从一个具体的初始状态  $x_0$  开始，然后沿着马尔可夫链按照概率转移矩阵做调整，则得到一个转移序列  $x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots$ 。

根据马尔可夫链的收敛行为，当  $n$  较大时， $x_n, x_{n+1}, \dots$  将是平稳分布  $\vec{\pi}$  的样本。

4. 定理：如果非周期马尔可夫链的转移矩阵  $\mathbf{P}$  和某个分布  $\vec{\pi}$  满足： $\pi(i)P_{i,j} = \pi(j)P_{j,i}$ ，则  $\vec{\pi}$  是马尔可夫链的平稳分布。

这被称作马尔可夫链的细致平稳条件 `detailed balance condition`，其证明如下：

$$\pi(i)P_{i,j} = \pi(j)P_{j,i} \rightarrow \sum_{i=1}^{\infty} \pi(i)P_{i,j} = \sum_{i=1}^{\infty} \pi(j)P_{j,i} = \pi(j) \sum_{i=1}^{\infty} P_{j,i} = \pi(j) \rightarrow \vec{\pi}\mathbf{P} = \vec{\pi}$$

### 三、MCMC 采样

1. 概率图模型中最常用的采样技术是马尔可夫链蒙特卡罗方法 `Markov Chain Monte Carlo:MCMC`。

给定连续随机变量  $X \in \mathcal{X}$  的概率密度函数  $\tilde{p}(x)$ ，则  $X$  在区间  $\mathbb{A}$  中的概率可以计算为：

$$P(\mathbb{A}) = \int_{\mathbb{A}} \tilde{p}(x)dx$$

如果函数  $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ ，则可以计算  $f(X)$  的期望： $\mathbb{E}_{X \sim \tilde{p}(x)}[f(X)] = \int f(x)\tilde{p}(x)dx$ 。

- 如果  $X$  不是一个单变量，而是一个高维的多元变量  $\vec{X}$ ，且服从一个非常复杂的分布，则对于上式的求积分非常困难。为此，**MCMC** 先构造出服从  $\tilde{p}$  分布的独立同分布随机变量  $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N$ ，再得到  $\mathbb{E}_{\vec{X} \sim \tilde{p}(\vec{x})}[f(\vec{X})]$  的无偏估计：

$$\mathbb{E}_{\vec{X} \sim \tilde{p}(\vec{x})}[f(\vec{X})] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{x}_i)$$

- 如果概率密度函数  $\tilde{p}(\vec{x})$  也很复杂，则构造服从  $\tilde{p}$  分布的独立同分布随机变量也很困难。**MCMC** 方法就是通过构造平稳分布为  $\tilde{p}(\vec{x})$  的马尔可夫链来产生样本。

### 3.1 MCMC 算法

- MCMC** 算法的基本思想是：先设法构造一条马尔可夫链，使其收敛到平稳分布恰好为  $\tilde{p}$ 。然后通过这条马尔可夫链来产生符合  $\tilde{p}$  分布的样本。最后通过这些样本来进行估计。

这里马尔可夫链的构造至关重要，不同的构造方法将产生不同的**MCMC** 算法。**Metropolis-Hastings: MH** 算法是**MCMC** 的重要代表。

- 假设已经提供了一条马尔可夫链，其转移矩阵为  $\mathbf{Q}$ 。目标是另一个马尔科夫链，使转移矩阵为  $\mathbf{P}$ 、平稳分布是  $\tilde{p}$ 。

通常  $\tilde{p}(i)Q_{i,j} \neq \tilde{p}(j)Q_{j,i}$ ，即  $\tilde{p}$  并不满足细致平稳条件不成立。但是可以改造已有的马尔可夫链，使得细致平稳条件成立。

引入一个函数  $\alpha(i, j)$ ，使其满足： $\tilde{p}(i)Q_{i,j}\alpha(i, j) = \tilde{p}(j)Q_{j,i}\alpha(j, i)$ 。如：取  $\alpha(i, j) = \tilde{p}(j)Q_{j,i}$ ，则有：

$$\tilde{p}(i)Q_{i,j}\alpha(i, j) = \tilde{p}(i)Q_{i,j}\tilde{p}(j)Q_{j,i} = \tilde{p}(j)Q_{j,i}\tilde{p}(i)Q_{i,j} = \tilde{p}(j)Q_{j,i}\alpha(j, i)$$

令： $Q'_{i,j} = Q_{i,j}\alpha(i, j)$ ,  $Q'_{j,i} = Q_{j,i}\alpha(j, i)$ ，则有  $\tilde{p}(i)Q'_{i,j} = \tilde{p}(j)Q'_{j,i}$ 。其中  $Q'_{i,j}$  构成了转移矩阵  $\mathbf{Q}'$ 。而  $\mathbf{Q}'$  恰好满足细致平稳条件，因此它对应的马尔可夫链的平稳分布就是  $\tilde{p}$ 。

- 在改造  $\mathbf{Q}$  的过程中引入的  $\alpha(i, j)$  称作接受率。其物理意义为：在原来的马尔可夫链上，从状态  $i$  以  $Q_{i,j}$  的概率跳转到状态  $j$  的时候，以  $\alpha(i, j)$  的概率接受这个转移。

- 如果接受率  $\alpha(i, j)$  太小，则改造马尔可夫链过程中非常容易原地踏步，拒绝大量的跳转。这样使得马尔可夫链遍历所有的状态空间需要花费太长的时间，收敛到平稳分布  $\tilde{p}$  的速度太慢。
- 根据推导  $\alpha(i, j) = \tilde{p}(j)Q_{j,i}$ ，如果将系数从 1 提高到  $K$ ，则有：

$$\begin{aligned}\alpha^*(i, j) &= K\tilde{p}(j)Q_{j,i} = K\alpha(i, j) \\ \alpha^*(j, i) &= K\tilde{p}(i)Q_{i,j} = K\alpha(j, i)\end{aligned}$$

于是： $\tilde{p}(i)Q_{i,j}\alpha^*(i, j) = K\tilde{p}(i)Q_{i,j}\alpha(i, j) = K\tilde{p}(j)Q_{j,i}\alpha(j, i) = \tilde{p}(j)Q_{j,i}\alpha^*(j, i)$ 。因此，即使提高了接受率，细致平稳条件仍然成立。

- 将  $\alpha(i, j), \alpha(j, i)$  同比例放大，取： $\alpha(i, j) = \min\left\{\frac{\tilde{p}(j)Q_{j,i}}{\tilde{p}(i)Q_{i,j}}, 1\right\}$ 。

- 当  $\tilde{p}(j)Q_{j,i} = \tilde{p}(i)Q_{i,j}$  时： $\alpha(i, j) = \alpha(j, i) = 1$ ，此时满足细致平稳条件。
- 当  $\tilde{p}(j)Q_{j,i} > \tilde{p}(i)Q_{i,j}$  时： $\alpha(i, j) = 1, \alpha(j, i) = \frac{\tilde{p}(i)Q_{i,j}}{\tilde{p}(j)Q_{j,i}}$ ，此时满足细致平稳条件。
- 当  $\tilde{p}(j)Q_{j,i} < \tilde{p}(i)Q_{i,j}$  时： $\alpha(i, j) = \frac{\tilde{p}(j)Q_{j,i}}{\tilde{p}(i)Q_{i,j}}, \alpha(j, i) = 1$ ，此时满足细致平稳条件。

- MH** 算法：

- 输入：
  - 先验转移概率矩阵  $\mathbf{Q}$
  - 目标分布  $\tilde{p}$
- 输出：采样出的一个状态序列  $\{x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots\}$
- 算法：
  - 初始化  $x_0$
  - 对  $t = 1, 2, \dots$  执行迭代。迭代步骤如下：
    - 根据  $Q(x^* | x_{t-1})$  采样出候选样本  $x^*$ ，其中  $Q$  为转移概率函数。
    - 计算  $\alpha(x^* | x_{t-1})$ ：
$$\alpha(x^* | x_{t-1}) = \min \left( 1, \frac{\tilde{p}(x^*) Q(x_{t-1} | x^*)}{\tilde{p}(x_{t-1}) Q(x^* | x_{t-1})} \right)$$
  - 根据均匀分布从  $(0, 1)$  内采样出阈值  $u$ ，如果  $u \leq \alpha(x^* | x_{t-1})$ ，则接受  $x^*$ ，即  $x_t = x^*$ 。  
否则拒绝  $x^*$ ，即  $x_t = x_{t-1}$ 。
  - 返回采样得到的序列  $\{x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots\}$

注意：返回的序列中，只有充分大的  $n$  之后的序列  $\{x_n, x_{n+1}, \dots\}$  才是服从  $\tilde{p}$  分布的采样序列。

## 3.2 Gibbs 算法

1. MH 算法不仅可以应用于一维空间的采样，也适合高维空间的采样。

对于高维的情况，由于接受率  $\alpha$  的存在（通常  $\alpha < 1$ ），MH 算法的效率通常不够高，此时一般使用 Gibbs 采样算法。

2. 考虑二维的情形：假设有概率分布  $\tilde{p}(x, y)$ ，考察状态空间上  $x$  坐标相同的两个点  $A(x_1, y_1), B(x_1, y_2)$ ，可以证明有：

$$\begin{aligned}\tilde{p}(x_1, y_1)\tilde{p}(y_2 | x_1) &= \tilde{p}(x_1)\tilde{p}(y_1 | x_1)\tilde{p}(y_2 | x_1) \\ \tilde{p}(x_1, y_2)\tilde{p}(y_1 | x_1) &= \tilde{p}(x_1)\tilde{p}(y_2 | x_1)\tilde{p}(y_1 | x_1)\end{aligned}$$

于是  $\tilde{p}(x_1, y_1)\tilde{p}(y_2 | x_1) = \tilde{p}(x_1, y_2)\tilde{p}(y_1 | x_1)$ 。则在  $x = x_1$  这条平行于  $y$  轴的直线上，如果使用条件分布  $\tilde{p}(y | x_1)$  作为直线上任意两点之间的转移概率，则这两点之间的转移满足细致平稳条件。

同理：考察  $y$  坐标相同的两个点  $A(x_1, y_1), C(x_2, y_1)$ ，有  $\tilde{p}(x_1, y_1)\tilde{p}(x_2 | y_1) = \tilde{p}(x_2, y_1)\tilde{p}(x_1 | y_1)$ 。在  $y = y_1$  这条平行于  $x$  轴的直线上，如果使用条件分布  $\tilde{p}(x | y_1)$  作为直线上任意两点之间的转移概率，则这两点之间的转移满足细致平稳条件。

可以构造状态空间上任意两点之间的转移概率矩阵  $\mathbf{Q}$ ：对于任意两点  $A = (x_A, y_A), B = (x_B, y_B)$ ，令从  $A$  转移到  $B$  的概率为  $Q(A \rightarrow B)$ ：

- 如果  $x_A = x_B = x^*$ ，则  $Q(A \rightarrow B) = \tilde{p}(y_B | x^*)$ 。
- 如果  $y_A = y_B = y^*$ ，则  $Q(A \rightarrow B) = \tilde{p}(x_B | y^*)$ 。
- 否则  $Q(A \rightarrow B) = 0$ 。

采用该转移矩阵  $\mathbf{Q}$ ，可以证明：对于状态空间中任意两点  $A, B$ ，都满足细致平稳条件：

$$\tilde{p}(A)Q(A \rightarrow B) = \tilde{p}(B)Q(B \rightarrow A)$$

于是这个二维状态空间上的马尔可夫链将收敛到平稳分布  $\tilde{p}(x, y)$ ，这就是吉布斯采样的原理。

3. Gibbs 算法：

- 输入：目标分布  $\tilde{p}(\vec{x})$ ，其中  $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$
- 输出：采样出的一个状态序列  $\{\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots\}$
- 算法步骤：
  - 初始化：随机初始化  $\vec{x}_0, t = 0$ 。
  - 执行迭代，迭代步骤如下：
  - 随机或者以一定次序遍历索引  $1, 2, \dots, n$ 。遍历过程为（设当前索引为  $i$ ）：
    - 将  $x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$  保持不变，计算条件概率：  
 $\tilde{p}(x_i | x_1 = x_{t,1}, \dots, x_{i-1} = x_{t,i-1}, x_{i+1} = x_{t,i+1}, \dots, x_n = x_{t,n})$ 。  
 该条件概率就是状态转移概率  $Q(A \rightarrow B)$
    - 根据条件概率  $\tilde{p}(x_i | x_1 = x_{t,1}, \dots, x_{i-1} = x_{t,i-1}, x_{i+1} = x_{t,i+1}, \dots, x_n = x_{t,n})$  对分量  $x_i$  进行采样，假设采样结果为  $x_{t,i}^*$ ，则获得新样本  
 $\vec{x}_{t+1} = (x_{t,1}, \dots, x_{t,i-1}, x_{t,i}^*, x_{t,i+1}, \dots, x_{t,n})^T$ 。
    - 令  $t \leftarrow t + 1$ ，继续遍历。
  - 最终返回一个状态序列  $\{\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots\}$ 。

4. 吉布斯采样 Gibbs sampling 有时被视作 MH 算法的特例，它也使用马尔可夫链获取样本。