马尔可夫蒙特卡洛方法

Markov-Mentcarlo Method
learning note For reading translation

我真的不懂忧郁

Delft University of Technology

马尔可夫蒙特卡洛方法

Markov-Mentcarlo Method
learning note For reading translation

by

我真的不懂忧郁

Student Name	Student Number
First Surname	1234567

Instructor:	I. Surname
Teaching Assistant:	I. Surname
Project Duration:	Month, Year - Month, Year
Faculty:	Faculty of Aerospace Engineering, Delft

TU Delft

Preface

A preface...

我真的不懂忧郁
Delft, June 2024

Summary

A summary...

目录

Nomenclature

If a nomenclature is required, a simple template can be found below for convenience. Feel free to use, adapt or completely remove.

Abbreviations

Abbreviation	Definition
ISA	International Standard Atmosphere
...	

Symbols

Symbol	Definition	Unit
V	Velocity	[m/s]
...		
ρ	Density	[kg/m^3]
...		

Chapter 1

采样方法

在 *Inference Variational* 中，我们的目的是给定数据 X 和隐变量 Z 的先验，根据观测数据推测后验，也就是 $P(Z|X)$。

但是很不幸的是 $P(Z|X)$ 的计算非常复杂，我们大致采用两种思路去解决：*精确推断*和*近似推断*，精确推断无法得到我们想要的结果时，就会采用近似推断，而近似推断又可以分成两大类: *确定性近似*和*随机近似*。

$$\begin{cases} \text{精确推断} \\ \text{近似推断} \begin{cases} \text{确定性近似：Variational Inference} \\ \text{随机近似：MCMC} \end{cases} \end{cases}$$

蒙特卡洛方法 (Monte Carlo Method) 是一种基于采样的随机近似算法，我们的目标是求解后验概率 $P(Z|X)$，知道分布后，通常的目标是求解

$$\mathbb{E}_{Z|X}[f(Z)] = \int_Z P(Z|X)f(Z)dZ = \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(z_i) \tag{1.1}$$

问题就是我们知道了后验分布 $P(Z|X)$，如何通过采样来使得 $z^{(1)}, z^{(2)}, \cdots, z^{(N)} \sim P(Z|X)$?

1.1. 概率分布采样

1.2. 拒绝采样

对目标分布 $P(Z)$ 的采样非常困难，所以我们可以对一个比较简单的分布 $q(Z)$ 进行辅助采样，我们可以设定一个 *proposal distribution*：*q(Z)*。对于所有的 z，保证 $M \cdot q(z^i) \geqslant p(z^i)$，那么我们为什么要引入 M 呢？这是因为

$$\int_Z P(Z)dZ = \int_Z q(Z)dZ = 1 \tag{1.2}$$

要使得 $q(z^i) \geqslant p(z^i)$

1.3. 重要性采样

Chapter 2

马尔可夫链

2.1. 随机过程

随机过程研究的变量就是一个随机变量的序列 $\{x_t|t \in T\}$，这个序列每一个元素都是随机变量，这里的 T 我们称为参数集，我们常常把 t 看作是时间，$x(t)$ 为时刻 t 时的状态，对于所有的 $t \in T$，$x(t)$ 的所有取值称为随机过程的状态空间。

对随机过程 $\{x(t), t \in T\}$ 进行一次试验，其结果时 t 的函数，记为 $X(t)$，称为随机过程的样本函数。

随机过程可以依照在任一时刻时连续型随机变量或者离散型随机变量，可以分为离散随机过程和连续随机过程。

2.2. 马尔可夫链

马尔可夫链是一个特殊的随机过程，它的时间和状态都是离散的，并且马尔可夫链需要满足马尔可夫性质，也就是未来和过去是无关的

$$P(x_{t+1}|x_1, x_2, \cdots, x_t) = P(x_{t+1}|x_t, x_{t-1}, \cdots, x_{t-m}) \tag{2.1}$$

上面式子描述了一个 m 阶马尔可夫性质，当 $m = 0$ 时，就是所谓的齐次马尔可夫。

$$P(x_{t+1}|x_1, x_2, \cdots, x_t) = P(x_{t+1}|x_t) \tag{2.2}$$

表述为概率图模型为

而 $P(x_{t+1}|x_t)$ 这个概率用什么来表达呢？在马尔可夫链中定义**状态转移矩阵**

$$[P_{ij}]_{N\times N}, \quad P_{ij} = P(x_{t+1} = j|x_t = i) \tag{2.3}$$

2.3. 平稳分布

所谓平稳分布，就是对于随机过程序列的每一个元素 x_i，x_i 在任意时刻服从的概率分布都是一样的，即

$$P(x_1, \cdots, x_n) = P(x_{1+t}, \cdots, x_{n+t}) \tag{2.4}$$

假设我们有如下马尔可夫链

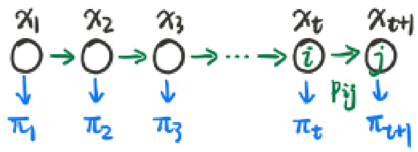

图 2.1: 马尔可夫链

它在 $t+1$ 时刻的概率分布表达为

$$\pi_{t+1}(x^*) = \int \pi_t(x) \cdot P(x \to x^*) dx \tag{2.5}$$

通俗来讲，它实际上就是所有可能转移的状态 x_{t+1} 的概率分布的和，那么什么随机分布呢？

假如这里存在一个 pi，这里的 pi 和前面的 π_t 和 π_{t+1} 一点儿关系没有，假如 π 是一个概率分布，那么就可以被写成无限维向量的形式

$$\pi = [\pi(1), \pi(2), \cdots, \pi(t), \cdots], \quad \sum_{i=1}^{\infty} \pi(i) = 1 \tag{2.6}$$

使得

$$\pi(x^*) = \int \pi(x) \cdot P(x \to x^*) dx \tag{2.7}$$

我们就称 $\{\pi(k)\}$ 是马尔可夫链的平稳分布，即每个时刻都符合同一个概率分布 π。

下一个问题是，什么样的分布可以称为平稳分布，也就是我们怎样才能构建出一个马氏链让他收敛到一个平稳分布当中呢？这里我们引入一个条件，就是 *Detailed Balance*：

$$\pi(x) \cdot P(x \to x^*) = \pi(x^*) \cdot P(x^* \to x) \tag{2.8}$$

这个式子表明任意两个状态之间，使用概率分布作为转移概率的结果都是可逆的，那么这两个状态之间的分布肯定都是一样的。满足 *Detailed Balance* 一定是平稳分布

$$\begin{aligned} \int \pi(x) \cdot P(x \to x^*) dx &= \int \pi(x^*) \cdot P(x^* \to x) dx \\ &= \pi(x^*) \int P(x^* \to x) dx \quad = \pi(x^*) \end{aligned} \tag{2.9}$$

Chapter 3

采样

回到采样问题上来，我们想要求的是后验概率分布 $P(Z)$，主要是为了求 $P(Z)$ 概率分布下的 · 一个相关函数的期望

$$\mathbb{E}_{P(Z)}[f(Z)] \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(z^{(i)}) \tag{3.1}$$

而我们是通过采样来得到 $P(Z) \sim \{z^{(1)}, z^{(2)}, \cdots, z^{(N)}\}$ 样本点，$\pi(z)$ 是最终的平稳分布，可以看成我们这里的 $P(Z)$，下面的问题就是求出概率转移矩阵 P_{ij}。

3.1. 采样的动机

这一小节的目的是我们要知道什么是采样动机。首先第一点很简单，采样本身就是发出常见的任务。

拒绝采样和重要性采样都是借助一个 $Q(z)$ 概率分布区逼近目标分布 $P(z)$，通过 $Q(z)$ 中进行采样来达到对 $P(z)$ 采样的目的，而且在 $Q(z)$ 中采样比较简单，当时如果 $Q(z)$ 和 $P(z)$ 直接的差距太大的话，采样效率会变得很低。

而 MCMC 方法，我们主要介绍 *Metroplis-Hastings* 和 *Gibbs*，我们主要是通过构建一个马尔可夫链逼近目标分布。

3.2. Metroplis-Hastings Sampling

而我们是通过采样来得到 $P(Z) \sim \{z^{(1)}, z^{(2)}, \cdots, z^{(N)}\}$ 样本点，$\pi(z)$ 是最终的平稳分布，可以看成我们这里的 $P(Z)$，下面的问题就是求出概率转移矩阵 P_{ij}。

我们怎么来找这个状态转移矩阵 P_{ij} 呢？首先先任意取一个 Q_{ij}，因为随机选取所以并不满足 *Detialed Balance*

$$P(Z)Q(Z^*|Z) \neq P(Z^*)Q(Z|Z^*) \tag{3.2}$$

那么怎么解决这个问题呢？我们可以在左右两边乘上一个因子来解决这个问题，这个因子使

得 $Q(Z^*|Z)\alpha(Z^*,Z) = P(Z \to Z^*)$，$Q(Z|Z^*)\alpha(Z^*,Z) = P(Z^* \to z)$，那么

$$P(Z)\underbrace{Q(Z^*|Z)\alpha(Z^*,Z)}_{P(z\to z^*)} = P(Z^*)\underbrace{Q(Z|Z^*)\alpha(Z^*,Z)}_{P(z^*\to z)} \tag{3.3}$$

而 $\alpha(z,z^*)$ 定义为接受率，大小为

$$\alpha(z,z^*) = \min\left(1, \frac{P(Z^*)Q(Z|Z^*)}{P(Z)Q(Z|Z^*)}\right) \tag{3.4}$$

所以 $P(Z)$ 在转移矩阵 $Q(Z|Z^*)\alpha(Z^*,Z)$ 是一个平稳分布，也就是一个马尔可夫链。通过这个马尔可夫链中采样就可以得到我们相应的样本数据点了。这就是 *Metroplis Hastings Sampling*。

1. 从均匀分布中采样，$u \sim U(0,1)$;
2. 从 $Q(Z|Z^{(i-1)})$ 中进行采样得到样本点 Z^*;
3. 计算接受率
4. 如果 $u \leqslant \alpha$，$Z^t = Z^*$，否则 $Z^i = Z^{i-1}$

3.3. Gibbs Sampling

Chapter 4

Method of MCMC

4.1. 收敛性

Markov Chain 在状态转移过程中，随着迭代一定会收敛到一个平稳分布。

假设 t 时刻状态概率分布为 $q^{(t)}(x=i)$，状态转移矩阵 Q_{ij}，那么 $t+1$ 时刻概率分布

$$q^{(t+1)}(x=j) = Q_{ij}q^{(t)}(x=i) \tag{4.1}$$

4.2. 存在性问题

References

[1] I. Surname, I. Surname, and I. Surname. "The Title of the Article". In: *The Title of the Journal* 1.2 (2000), pp. 123–456.

Chapter A

Source Code Example

Adding source code to your report/thesis is supported with the package `listings`*. An example can be found below. Files can be added using* `\lstinputlisting[language=<language>]{<filename>}`.

```
"""
ISA Calculator: import the function, specify the height and it will return a
list in the following format: [Temperature,Density,Pressure,Speed of Sound].
Note that there is no check to see if the maximum altitude is reached.
"""

import math
g0 = 9.80665
R = 287.0
layer1 = [0, 288.15, 101325.0]
alt = [0,11000,20000,32000,47000,51000,71000,86000]
a = [-.0065,0,.0010,.0028,0,-.0028,-.0020]

def atmosphere(h):
    for i in range(0,len(alt)-1):
        if h >= alt[i]:
            layer0 = layer1[:]
            layer1[0] = min(h,alt[i+1])
            if a[i] != 0:
                layer1[1] = layer0[1] + a[i]*(layer1[0]-layer0[0])
                layer1[2] = layer0[2] * (layer1[1]/layer0[1])**(-g0/(a[i]*R))
            else:
                layer1[2] = layer0[2]*math.exp((-g0/(R*layer1[1]))*(layer1[0]-layer0[0]))
    return [layer1[1],layer1[2]/(R*layer1[1]),layer1[2],math.sqrt(1.4*R*layer1[1])]
```

Chapter B

Task Division Example

If a task division is required, a simple template can be found below for convenience. Feel free to use, adapt or completely remove.

表 **B.1:** Distribution of the workload

	Task	Student Name(s)
	Summary	
Chapter 1	Introduction	
Chapter 2		
Chapter 3		
Chapter *		
Chapter *	Conclusion	
	Editors	
	CAD and Figures	
	Document Design and Layout	