HW8 第 13 题 Metropolis-Hasting 算法

王启骅 PB20020580

2022 年 11 月 26 日

1 题目

用 Metropolis-Hasting 抽样方法计算积分：

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

其中 $f(x) = \frac{1}{\beta\Gamma(x)}(\frac{x}{\beta})^{\alpha-1}\exp(-x/\beta)$, 设积分权重函数为 p(x)=f(x) 和 $p(x) = (x-\alpha\beta)^2 f(x)$

给定参数 α,β ，并用不同的 γ 值，分别计算积分，讨论计算精度和效率。

2 算法原理

首先对于 p(x)=f(x) 的情况，取

$$T(x\to x') = \frac{1}{\gamma}\exp(x'/\gamma) \tag{1}$$

可以产生抽样 $x' = -\gamma\ln(R)$, 其中 R 为 [0,1] 的均匀分布。

$$r = (\frac{x'}{x_i})^{\alpha-1}\exp(-(x'-x_i)/\beta)\exp((x'-x_i)/\gamma) \tag{2}$$

对于试探步的取舍情况为

$$x_{i+1} = \begin{cases} x' & \text{if R<min(1,r)} \\ x_i & \text{if R>min(1,r)} \end{cases} \tag{3}$$

最后可计算积分值为

$$I = \frac{1}{N-m}\sum_{i=m+1}^{N}(x_i-\alpha\beta)^2 \tag{4}$$

对于取 $p(x) = (x-\alpha\beta)^2 f(x)$ 的情况，相类似以同样的抽样方式

$$T(x\to x') = \frac{1}{\gamma}\exp(x'/\gamma) \tag{5}$$

可以产生抽样 $x' = -\gamma\ln(R)$, 其中 R 为 [0,1] 的均匀分布。

$$r = (\frac{x'-\alpha\beta}{x_i-\alpha\beta})^2(\frac{x'}{x_i})^{\alpha-1}\exp(-(x'-x_i)/\beta)\exp((x'-x_i)/\gamma) \tag{6}$$

对于试探步的取舍情况为

$$x_{i+1} = \begin{cases} x' & \text{if R<min(1,r)} \\ x_i & \text{if R>min(1,r)} \end{cases} \tag{7}$$

由于初始 $p(x) = (x-\alpha\beta)^2 f(x)$ 未进行归一化，需要乘以归一化因子 $\alpha\beta^2$ 可计算积分值为

$$I = \frac{1}{N-m} \sum_{i=m+1}^{N} \alpha\beta^2 \tag{8}$$

其实由此可以见到，该积分对于每次抽样后所取的函数值均为 1，实际上积分得到的是精确结果。对于模拟该抽样方法时，由于需要提前将函数归一化，需要已知该积分的准确值，归一化后才能进行计算，所以可见该抽样方法对于分析积分的误差及效率没有太大意义。

3 结果

3.1 计算结果精度

这部分对应程序 HW8_13_Metropolis.f90

这里讨论 α=2,β=1 的情况。首先产生 $n = 10^6$ 个点的 Markov 链，并且取前 $m = \frac{n}{10}$ 的点舍弃作为热化阶段，取了 $\gamma = 0.1 - 50$, 以 0.1 为步长，计算结果的绝对误差

$$|I - \alpha\beta^2| \tag{9}$$

与抽样效率 由图1分析大致趋势可以得到在 $\gamma = 0 - 1$ 的区间绝对误差处在剧烈的振荡，之后 γ=1 处迅速趋近于 0，并

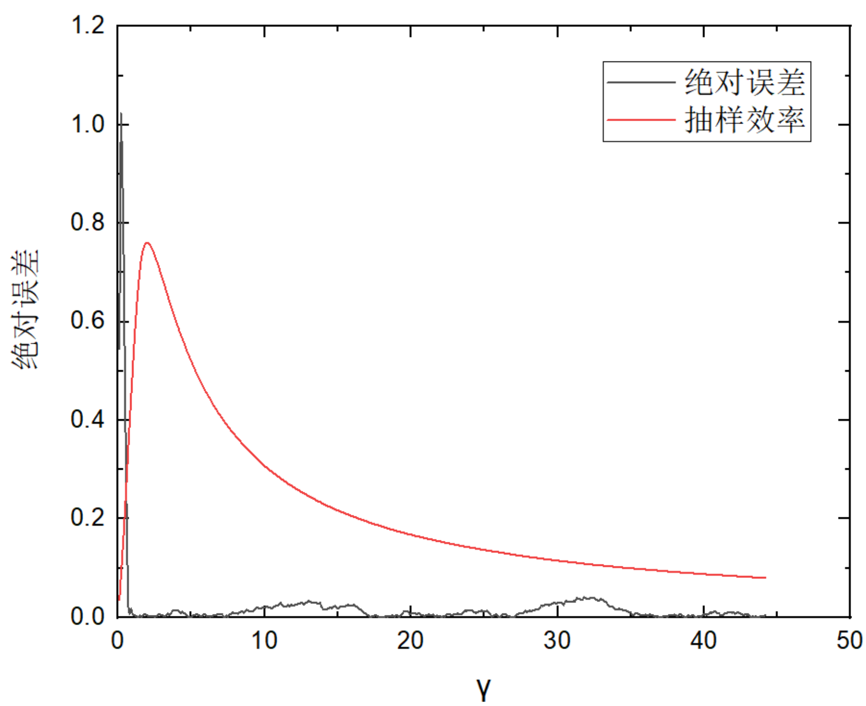

图 1: 计算结果

在之后的区间中在 0 附近上下振荡，但误差不超过 10^{-1}。并且抽样效率先上升，再下降，在 γ=2 时取到最大值 0.75 。

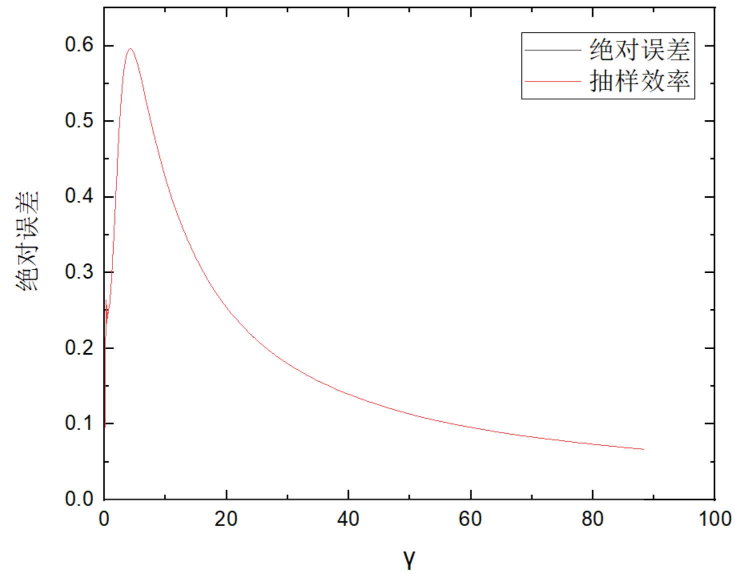

图 2: $p(x) = (x - \alpha\beta)^2 f(x)$ **下计算结果**

对于 p(x)=$(x - \alpha\beta)^2 f(x)$ 的情况，相似的方法作图如图2，根据图可见其绝对误差恒等于 0，txt 文件中得到的绝对误差数据在 10^{-12}，来源于计算机本身误差。同样抽样效率也先上升，然后趋于 0 。由此可见对于该抽样方法的讨论没有太大意义。

3.2 计算效率

这部分对应程序 HW8_13_Metro_eff.f90

接下来讨论计算效率，分析计算结果的绝对误差随 Metropolis-Hasting 方法取点数的关系。由于第二种抽样函数下不存在误差，这里只分析第一种抽样函数进行分析。这里取了从 $n = 10 - 10^7$ 个点，取前 $m = \frac{n}{10}$ 的点舍弃作为热化阶段。并根据以上实验的结果图1，再 $\gamma = 3$，18，27 附近的较大区间内绝对误差始终处于较小的趋近于 0 的范围，所以这里设定 $\gamma = 3$，18，27，绘制出绝对误差随取点数的变化图3，分析图可以得到随着 Markov 链随机行走的步数量级增加，绝对误差首先在 $10 - 10^2$ 区间先上升，之后在 $n < 10^4$ 阶段迅速下降，最后逐渐趋近于 0，再进一步提高行走步数时误差基本不再变化。

4 结论

本次模拟通过 Metropolis-Hasting 方法模拟积分，讨论了积分精确度和抽样效率，计算效率的关系，寻找到了使积分精度达到最高的 γ 值。根据计算效率的测试结果，可以得到在所取步数量级大于 10^4 后，计算精度基本不变，因此为了计算时间和内存的考虑不需要将计算步数取到非常大。

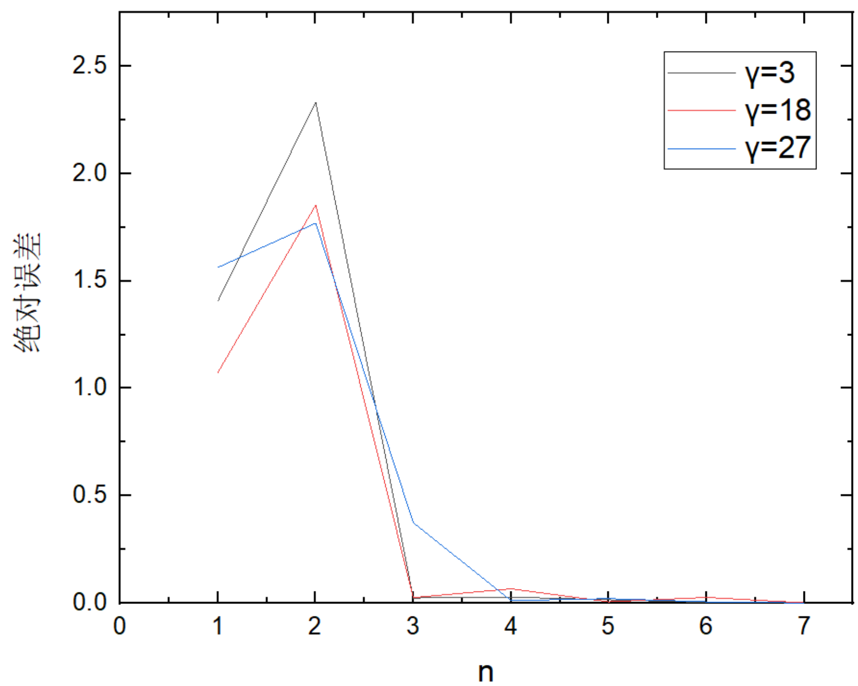

图 3: 计算效率