Gibbs采样

> Written by KaelThas_Infi

1.**高维数据找寻合适的细致平稳条件**

从二维数据分布开始，假设$\pi(x_1,x_2)$是一个二维联合数据分布，观察第一个特征维度相同的两个点$A(x_1^{(1)},x_2^{(1)})B(x_1^{(1)},x_2^{(1)})$容易发现下面两式成立.

$\pi(x_1^{(1)},x_2^{(1)})\pi(x_2^{(2)}|x_1^{(1)})=\pi(x_1^{(1)})\pi(x_2^{(1)}|x_1^{(1)})\pi(x_2^{(2)}|x_1^{(1)})$

$\pi(x_1^{(1)},x_2^{(2)})\pi(x_2^{(1)}|x_1^{(1)})=\pi(x_1^{(1)})\pi(x_2^{(2)}|x_1^{(1)})\pi(x_2^{(1)}|x_1^{(1)})$

由于两式右边相等$\Rightarrow$ $\pi(x_1^{(1)},x_2^{(1)})\pi(x_2^{(2)}|x_1^{(1)})=\pi(x_1^{(1)},x_2^{(2)})\pi(x_2^{(1)}|x_1^{(1)})\Rightarrow$ $\pi(A)\pi(x_2^{(2)}|x_1^{(1)})=\pi(B)\pi(x_2^{(1)}|x_1^{(1)})$

观察上式，再观察细致平稳条件的公式，我们发现在$x_1=x_1^{(1)}$这条直线上，如果用条件概率分布$\pi(x_2|x_1^{(1)})$作为马尔可夫链的状态转移概率，则任意两个点之间满足细致平稳条件。同理在$x_2=x_2^{(1)}$这条直线上，用条件概率分布$\pi(x_1|x_2^{(1)})$作为马尔可夫链的状态转移概率，则任意两个点之间的转移也满足细致平稳条件。有另一点 $C(x_1^{(2)},x_2^{(1)})$我们可以得到$\Rightarrow$

$\pi(A)\pi(x_1^{(2)}|x_2^{(1)})=\pi(C)\pi(x_1^{(1)}|x_2^{(1)})$基于上面的发现，我们可以这样构造分布$\pi(x_1,x_2)$的马尔可夫链对应的状态转移矩阵

$$
\begin{aligned}
P: P(A\rightarrow B)&=\pi(x_2^{(B)}|x_1^{(1)}) \quad if \quad x_1^{(A)}=x_1^{(B)}=x_1^{(1)}\\
P(A\rightarrow C)&=\pi(x_1^{(C)}|x_2^{(1)}) \quad if \quad x_2^{(A)}=x_2^{(C)}=x_2^{(1)}\\
P(A\rightarrow D)&=0 \qquad\qquad\quad else
\end{aligned}
$$

有了上面这个这个状态转移矩阵，我们很容易验证平面上的任意两点E,F满足细致平稳条件：

$\pi(E)P(E\rightarrow F)=\pi(F)P(F\rightarrow E)$

2.**二维Gibbs采样**

具体过程:

$1)$输入平稳分布$\pi(x_1,x_2)$，设定状态转移次数阈值n_1，需要样本个数n_2

$2)$随机初始化初始状态值$x_1^{(0)}x_2^{(0)}$

$3) for\ \ t=0\ \ to\ \ n_1+n_2-1$

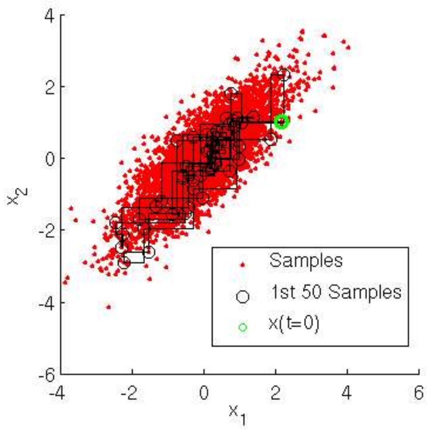
$a)$从条件概率分布$P(x_2|x_1^{(t)})$采样得到样本x_2^{t+1}

$b)$从条件概率分布$P(x_1|x_2^{(t+1)})$采样得到样本x_1^{t+1}

样本集$\{(x_1^{n_1},x_2^{n_1}),(x_1^{n_1+1},x_2^{n_1+1}),\ldots\ldots(x_1^{n_1+n_2-1}，\ x_2^{n_1+n_2-1})\}$即为我们需要的聘问分布对应的样本集。

整个采样过程我们通过轮换坐标轴，采样过程为：

$(x_1^{(1)},x_2^{(2)})\rightarrow(x_1^{(1)},x_2^{(2)})\rightarrow(x_1^{(2)},x_2^{(2)}\ \rightarrow\ldots\ldots\rightarrow(x_1^{(n_1+n_2-1)},x_2^{(n_1+n_2-1)})$



由上图可以直观看出，采样是在两个坐标轴上不停轮换的，当然坐标轴轮换并非必须，也可以随机选择一个坐标轴进行采样。

3.**推广至多维**

例如一个n维的概率分布$\pi(x_1, x_2, \ldots\ldots x_n)$,通过$n$个坐标轴轮换采样来得到新的样本,对于轮换到任意一个坐标轴的x_i上的转移，马尔可夫链的状态转移概率为$P(x_i|x_1, x_2, \ldots\ldots x_{i-1}, x_{i+1}\ldots\ldots x_n)$即固定$n-1$个坐标轴，在某一个坐标轴上移动。

$1)$输入平稳分布$\pi(x_1, x_2, \ldots\ldots x_n)$或者对应的所有特征的条件概率分布，设定状态转移的阈值为n_1，所需要的样本个数为n_2。

$2)$随机初始化状态值 $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}\ \ldots\ldots x_n^{(0)}$

$3) for\ \ t = 0\ \ to\ \ n_1 + n_2 - 1$

$a)$从条件概率分布$P(x_1|x_2^{(t)}, x_3^{(t)}, \ldots\ldots x_n^{(t)})$中采样得到样本$x_1^{t+1}$

$b)$从条件概率分布$P(x_2|x_1^{(t+1)}, x_3^{(t)}, \ldots\ldots x_n^{(t)})$中采样得到样本$x_2^{t+1}$

$c)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$

$d)$从条件概率分布$P(x_j|x_1^{(t+1)}, \ldots\ldots x_{j-1}^{(t+1)}, x_{j+1}^{(t)}, \ldots\ldots x_n^{(t)})$中采样得到样本$x_j^{t+1}$

$e)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$

$f)$从条件概率分布$P(x_n|x_1^{(t+1)}, \ldots\ldots x_{n-1}^{(t+1)})$中采样得到样本$x_n^{t+1}$

样本集$\{(x_1^{(n_1)}, x_2^{(n_1)}, \ldots\ldots x_n^{(n_1)}), \ldots\ldots\ldots\ldots (x_1^{(n_1+n_2-1)}, \ldots\ldots x_n^{(n_1+n_2-1)})\}$

整个采样过程和$Lasso$回归的坐标轴下降算法有点相似，只不过一个是固定$n-1$个特征，求剩下一个的极值，而$Gibbs$是对另一个特征进行采样。当然轮换坐标轴并非必须，可以随机选择某一个坐标轴进行状态转移。

(过采样($over-Sampling$):扩大数据规模，增加了模型训练的复杂度，造成过拟合)

(欠采样($under-Sampling$):会丢弃一些样本，可能损失部分有用信息，造成模型仅学习到整体模式的一部分)