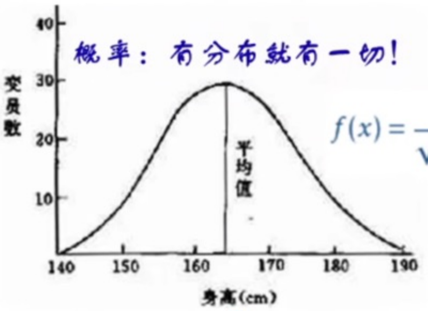
• 蒙特卡洛的实质：随机抽样

MC实质：随机抽样

➢ 为什么要抽样？

概率：有分布就有一切！



$$E(g(X))=\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)g(x)\,dx$$

这积分一定可求解吗？

求解定积分

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$ ⟸ 现实抽样&统计推断

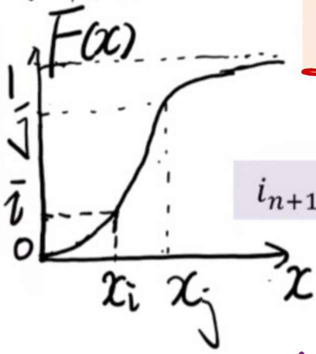
不妨抽取样本**X**，然后计算***g*(X)**，进而算术平均

如何抽取服从特定分布的样本呢？ ⟸ $$E(g(X))=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} g(x_i)$$

➢ 随机抽样

累积分布函数

$$F(x)=\int_{-\infty}^{x} f(t)\,dt$$ ⇒ 但对该分布却不一定积得出来



取 $i\sim U(0,1)$ ⟹ $x_i=F^{-1}(i)$

$$i_{n+1}=(ai_{n-1}+c)(mod\ M)$$

rand()/(RAND_MAX+1.) 随机数

$$e^x=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots,\quad x\in(-\infty,+\infty)$$

思路：想要抽取服从 f(x) 概率分布的样本，

(随机抽样) Step1：对 f(x) 求积分得到其累积分布函数 F(x)，

Step2：然后在 F(x) 的 [0,1] 区间中随机抽取一个样本 i，取 $i\sim U(0,1)$，（服从均匀分布）

再由 $x_i=F^{-1}(i)$ 便可得到样本 x_i.

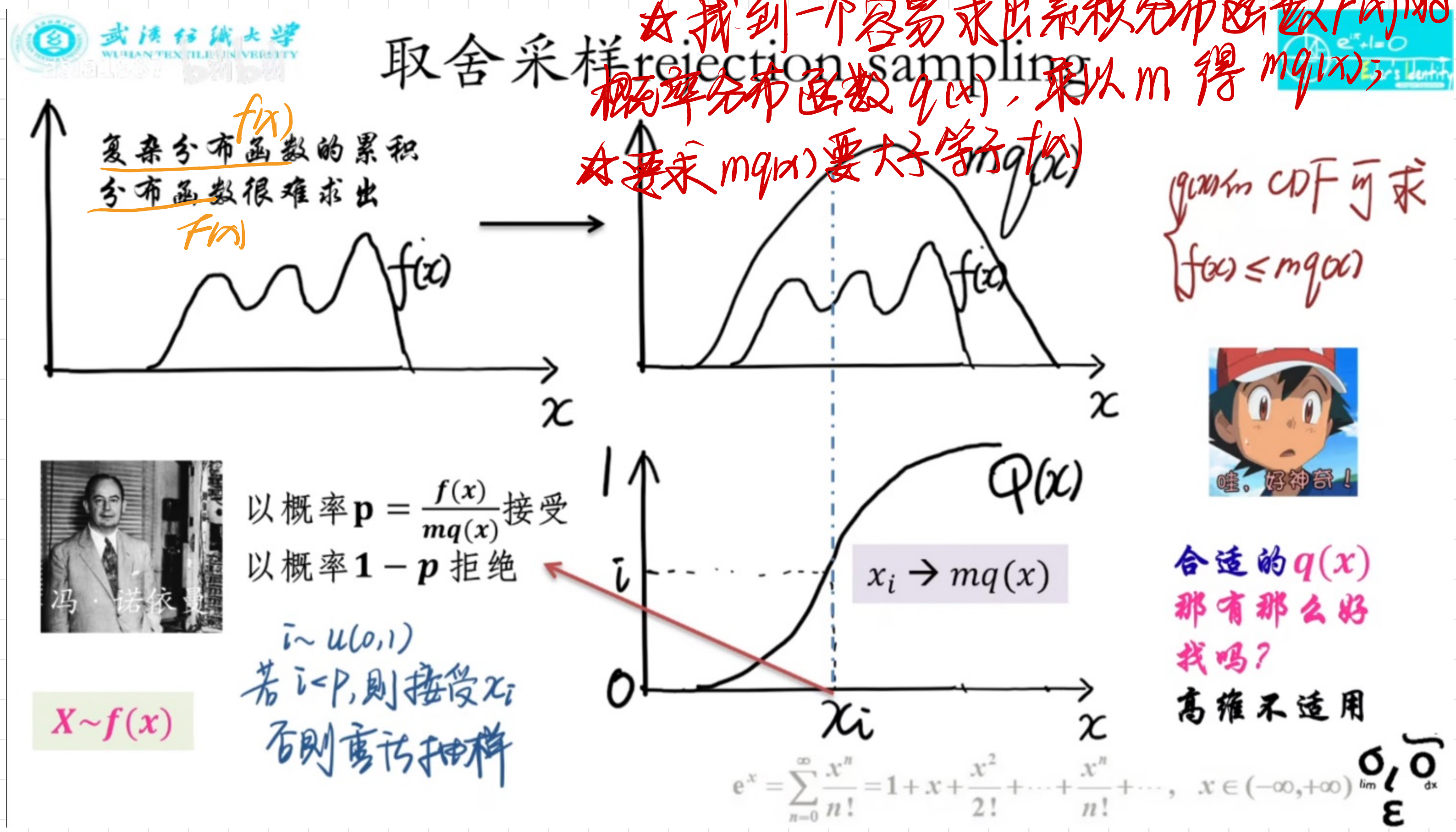
Bug： 对于一些比较复杂的分布函数 f(x)，其累积分布函数 F(x) 不好求；

⇓

于是就有了下面的取舍采样

取舍采样(接受—拒绝采样)：

应对上一页中出现的因为概率分布函数 $f(x)$ 太复杂而导致累积分布函数 $F(x)$ 难以求解的 Bug，有了如下的取舍采样方法。

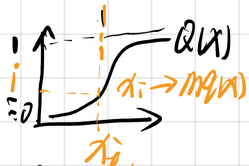


★找到一个容易求出累积分布函数 $F(x)$ 的概率分布函数 $q(x)$，乘以 m 得 $mq(x)$；

★要求 $mq(x)$ 要大于等于 $f(x)$

$$\begin{cases} q(x)\text{的}F(x)\text{可求}; \\ f(x)\le mq(x). \end{cases}$$

① 对找出的 $mq(x)$ 做积分得到其累积分布函数 $Q(x)$



② 然后在 $[0,1]$ 中随机抽样 i，$i\sim U[0,1]$，$x_i \to mq(x)$.

③ 但对 $mq(x)$ 的抽样并不完全符合原 $f(x)$，因此需要做取舍采样(接受—拒绝采样)；

Bug：合适的 $q(x)$ 其实不好找，而且在高维的情况下，$q(x)$ 更不好找

✔ 由此便产生了马尔科夫链MC采样

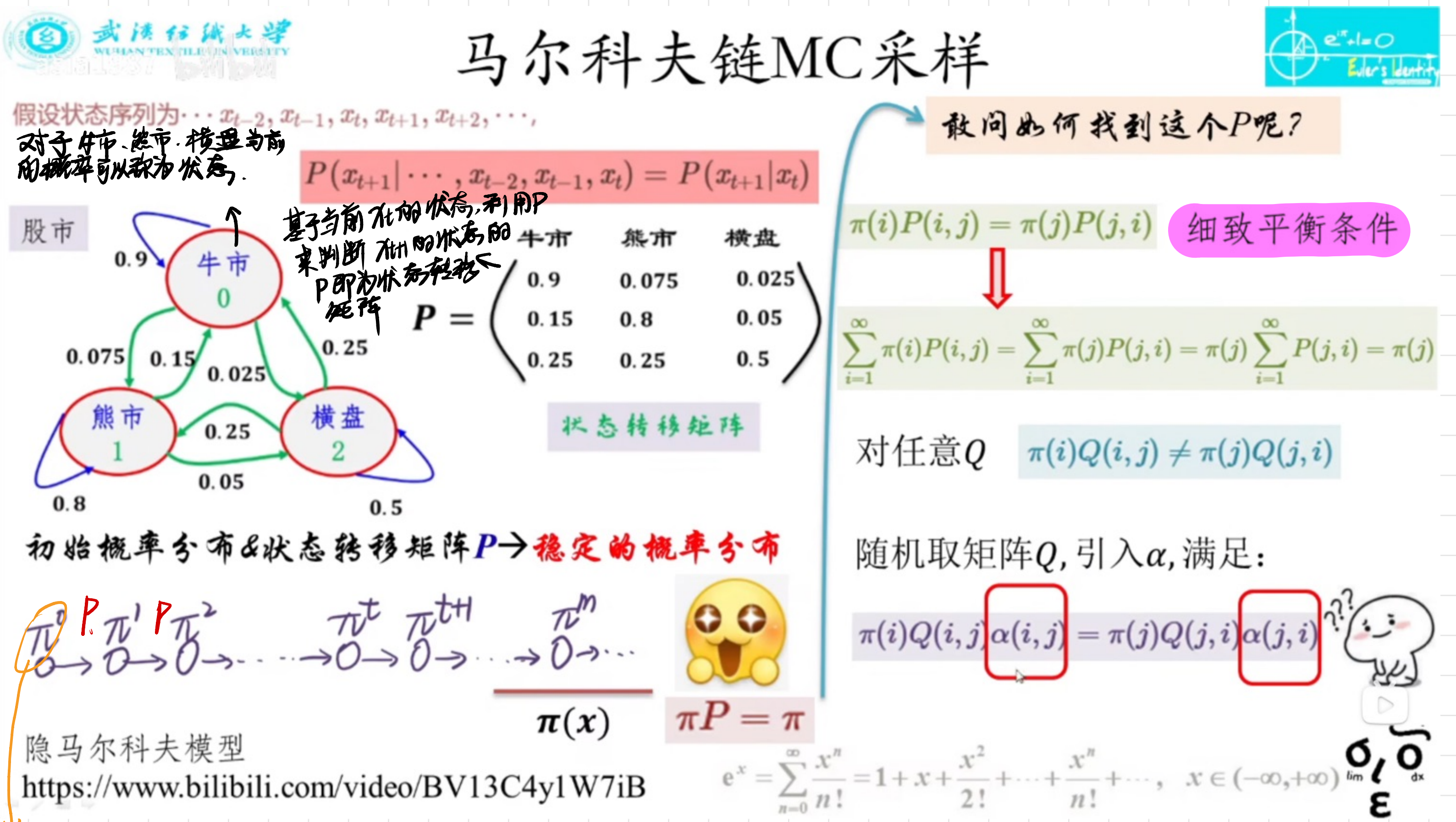
• 马尔科夫链MC采样：（前序可以熟悉一下隐马尔科夫模型）

马尔科夫链的性质：

① 对于任意状态序列 $\cdots x_{t-2}, x_{t-1}, x_t, x_{t+1}, x_{t+2}, \cdots$

x_{t+1} 的上一时刻

有 $P(x_{t+1}|\cdots, x_{t-1}, x_t) = P(x_{t+1}|x_t)$ （即 x_{t+1} 时的概率只与 x_t 有关）



给定初始状态 π^0，通过状态转移矩阵P，便可求得下一状态，π^1。
依此类推就能得到 $\pi^2, \pi^3 \cdots \pi^m \cdots$，即马尔科夫链。

因此，对于马尔科夫链，重要的是要找到状态转移矩阵P。

⇓ 引出细致平衡条件 （满足细致平衡条件的P都可行）

$\pi(i)P(i,j) = \pi(j)P(j,i)$

⇓ 对随机矩阵Q，引入α，有

$\pi(i)Q(i,j)\underline{\alpha(i,j)} = \pi(j)Q(j,i)\underline{\alpha(j,i)}$

问题转为找α。

• Metropolis 算法：(ME采样)

Metropolis 算法

平稳分布：$\pi P = \pi$

α需满足的条件

随机矩阵Q, 引入α, 满足：

表示j状态的概率 · 表示从j状态到i状态的状态转移矩阵

$$\alpha(i,j) = \pi(j)Q(j,i)$$
$$\alpha(j,i) = \pi(i)Q(i,j)$$

$$\pi(i)Q(i,j)\alpha(i,j) = \pi(j)Q(j,i)\alpha(j,i)$$

$$P(i,j) = Q(i,j)\alpha(i,j)$$

随意给的，相当于$mq(x)$ 而$mq(x)$的抽样不一定就是$f(x)$的，其需满足一定的概率(接受-拒绝抽样)

$\alpha(i,j)$就起到了(接受-拒绝抽样)的作用

接受概率

概率 [0, 1]


梅特罗波利斯

通过随机转移矩阵Q进行采样，但是样本被保留下来继续抽样的概率为α

$$\alpha(i,j) = min\{\frac{\pi(j)Q(j,i)}{\pi(i)Q(i,j)}, 1\}$$

$$\pi(i)Q(i,j)\cdot min\left(\frac{\pi(j)Q(j,i)}{\pi(i)Q(i,j)}, 1\right) = min\left(\pi(j)Q(j,i), \pi(i)Q(i,j)\right)$$
$$= \pi(j)Q(j,i)\cdot min\left(1, \frac{\pi(i)Q(i,j)}{\pi(j)Q(j,i)}\right) = \pi(j)Q(j,i)\alpha(j,i)$$

$\alpha(i,j)$的获得方法

⇓

在由状态转移矩阵Q进行采样时，按照概率$\alpha(i,j)$对采样点进行接收。

NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA ... Los Ala...

EDWARD TELLER,* Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots, \quad x \in (-\infty, +\infty)$$

Metropolis MC

步骤：

- 给定任意的转移矩阵**Q**、平稳分布$\pi(x)$ → 这是我们想到得到的某个状态x_{t+1}下的具体概率分布，称平稳分布。
- t=0随机产生一个初始状态x_0 → 自定义一个初始状态(当前状态x_0)
- 从条件概率分布$Q(x|x_0)$中采样x^* → x_0由状态转移矩阵Q，求x_0的下一状态x^* 此x^*相当于是由$mq(x)$随机抽样得到，不一定满足$f(x)$。
- 从均匀分布产生$u \sim U(0,1)$ ①
- 若$u < \alpha(x_0, x^*) = min(\frac{\pi(j)Q(j,i)}{\pi(i)Q(i,j)}, 1)$，接受$x^*$ → t=1, $x_1 = x^*$ ②
- 否则拒绝该次采样，t = 1, $x_1 = x_0$ ③
- 继续以上步骤，直到t>T时，达到平衡 ④
- t>T之后的所有接受样本即需要的平稳分布样本 ⑤

⇓

然后按①~⑤即Metropolis算法得出满足$f(x)$的x^*。

最后得到平稳分布$\pi(x)$。

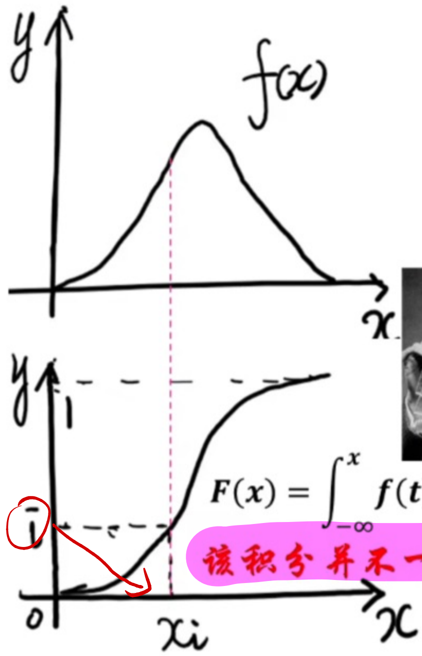
$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots, \quad x \in (-\infty, +\infty)$$

总结：

武汉纺织大学 WUHAN TEXTILE UNIVERSITY

上期回顾-MC采样

①



常规采样

$$F(x)=\int_{-\infty}^{x} f(t)\,dt$$

该积分并不一定好求！

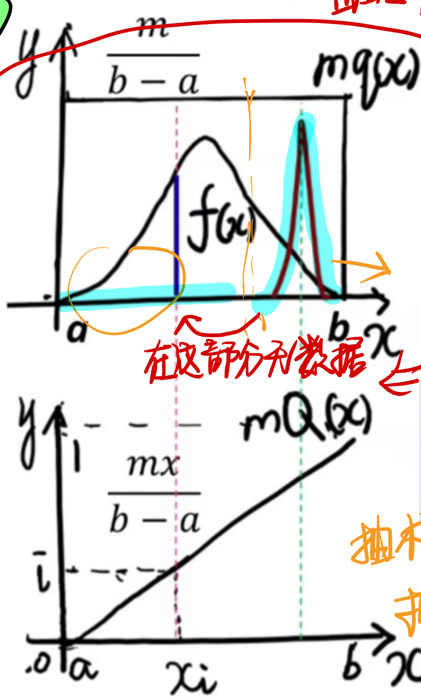
取 $i\sim U(0,1)$ ⇨ $x_i = F^{-1}(i)$

① 通过对 i 采样（从[0,1]中取任意一个i，所以对i是均匀采样）

② 然后由 $x_i = F^{-1}(i)$ 求得 x_i

②

由此产生了



在这部分的数据

拒绝采样

对于这种情况的f(x)，虽然凭借构造的mq(x)

以概率 $p=\frac{f(x)}{mq(x)}$ 接受

$u\sim U(0,1),\ u<p$ √

抽样的大量样本都会被拒绝。

$$e^x=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots,\quad x\in(-\infty,+\infty)$$

武汉纺织大学 WUHAN TEXTILE UNIVERSITY

上期回顾-MCMC采样-MH算法

马尔科夫链MC采样

$\pi^0\to\pi^1\to\pi^2\to\cdots\to\pi^t\to\pi^{t+1}\to\cdots\to\pi^m\to\cdots$

$\pi(x)$ ⇐ $\pi P=\pi$

⇑

细致平衡 $\pi(i)P(i,j)=\pi(j)P(j,i)$

（满足细致平衡条件，则可以按马尔科夫链进行采样。

⇓

$$\pi(i)Q(i,j)\alpha(i,j)=\pi(j)Q(j,i)\alpha(j,i)$$

⇓

$$P(i,j)=Q(i,j)\alpha(i,j)$$

$$\alpha(i,j)=\min\left\{\frac{\pi(j)Q(j,i)}{\pi(i)Q(i,j)},1\right\}$$

以随机转移矩阵Q采样，以概率α接受，$u\sim U(0,1),\ u<\alpha$ √

高维变量

$\pi(x,y,z)$

若$\alpha(i,j)$太小怎么办？

Stuart Geman

Donald Geman

吉布斯采样

IEEE TRANSACTIONS ON PATTERN ANALYSIS AND MACHINE INTELLIGENCE, VOL. PAMI-6, NO. 6, NOVEMBER 1984

Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images

STUART GEMAN AND DONALD GEMAN

$$e^x=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!}=1+x+\frac{x^2}{2!}+\cdots+\frac{x^n}{n!}+\cdots,\quad x\in(-\infty,+\infty)$$

对于马尔科夫链的MC采样，我们对随机转移矩阵Q采样的样本按$\alpha(i,j)$概率接收；由于$\alpha(i,j)$是取min得到的，则对$\alpha(i,j)$在高维时会变得很小，就导致Q的采样点几乎都被拒绝，导致难以采到适合的样本。为此，诞生了吉布斯采样（Gibbs采样

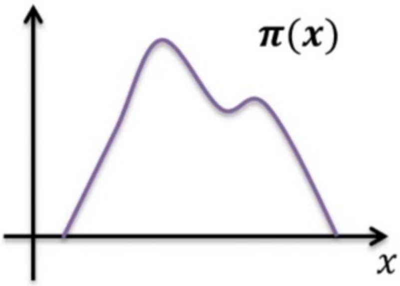
吉布斯(Gibbs)采样：

Gibbs 采样

MH采样

$$\pi(i)Q(i,j)\alpha(i,j) = \pi(j)Q(j,i)\alpha(j,i)$$

$$\alpha(i,j) = min\{\frac{\pi(j)Q(j,i)}{\pi(i)Q(i,j)}, 1\}$$

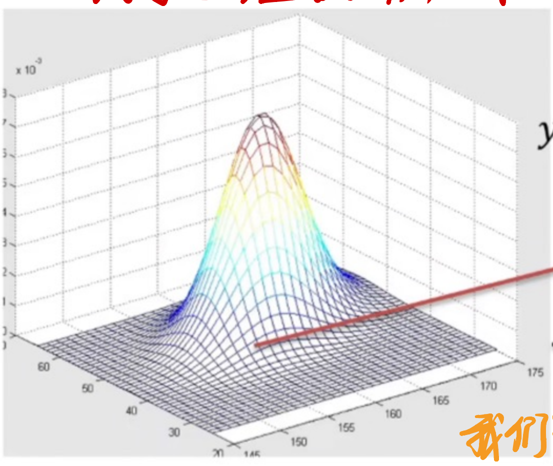


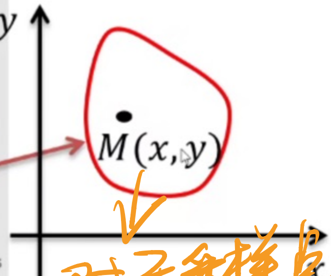
$\alpha(i,j)$往往太小

$\pi(x,y)$ 二维联合概率分布

对于二维数据的联合概率分布。

$$\pi(x,y) = P(X=x, Y=y)$$

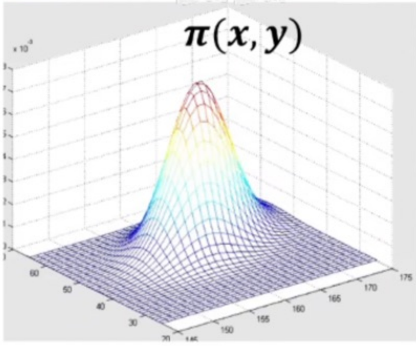


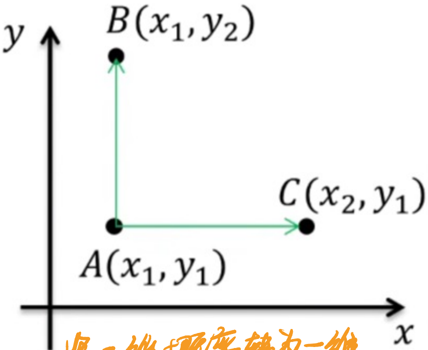


对于采样点M，我们需要找到其联合概率分布函数。

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots, \quad x \in (-\infty, +\infty)$$

Gibbs 采样





将二维概率转为一维

$$\pi(A) = \pi(x_1, y_1) = \pi(x_1)\pi(y_1|x_1)$$

$$\pi(B) = \pi(x_1, y_2) = \pi(x_1)\pi(y_2|x_1)$$

变化一下

$$\pi(A)\pi(y_2|x_1) = \pi(x_1)\pi(y_1|x_1)\pi(y_2|x_1)$$

$$\pi(B)\pi(y_1|x_1) = \pi(x_1)\pi(y_2|x_1)\pi(y_1|x_1)$$

满足细致平衡，可按马尔科夫链进行采样。

细致平衡

$$\pi(i)P(i,j) = \pi(j)P(j,i)$$

还是原来的配方
还是熟悉的味道

在x_1条件(A点)下 y_2(B点)发生的概率，所以是A→B

$$\pi(A)\pi(y_2|x_1) = \pi(B)\pi(y_1|x_1)$$

状态转移概率 $P(A \to B)$

$$\pi(A)P(A \to B) = \pi(B)P(B \to A)$$

$$\pi(A)\pi(y_1|x_2) = \pi(C)\pi(y_1|x_1)$$

$$\pi(A)P(A \to C) = \pi(C)P(C \to A)$$

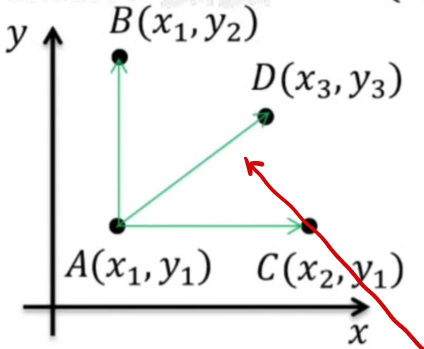
$$\pi(A)P(A \to A') = \pi(A')P(A' \to A)$$

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots, \quad x \in (-\infty, +\infty)$$

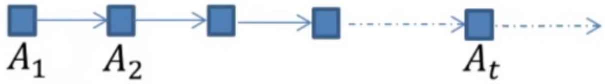
由如上分析，可知对于二维的点(x,y)，我们也可用马尔科夫链进行采样。

$\pi(x,y)$

Gibbs 采样



$\pi(A)P(A\to A') = \pi(A')P(A'\to A)$



$P(A\to B) = \pi(y_2|x_1)$ ← 已知

A→D则不行

只允许在平行坐标轴方向上采样

$P(A\to B) = \pi(y_2|x_1)$

$P(A\to C) = \pi(y_1|x_2)$

$P(A\to D) = 0$

状态转移矩阵

$\pi(A_t) = \pi(A_{t-1})P$ 不存在拒绝

多维

$\pi(x_1, x_2, \ldots, x_n)$

$A(x_1{}^t, x_2{}^t, \ldots, x_n{}^t)$、$B(x_1{}^{t+1}, x_2{}^t, \ldots, x_n{}^t)$

$P(A\to B) = \pi(x_1|x_2{}^t, \ldots, x_n{}^t)$

从A→B，由于是沿x_1^t的方向进行采样，所以$x_2^t\cdots x_n^t$不变，变的只有$x_1^t\to x_1^{t+1}$。

$\pi(i)P(i,j) = \pi(j)P(j,i)$

$\pi P = \pi$

$P(i,j) = Q(i,j)\alpha(i,j)$

$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots,\quad x\in(-\infty,+\infty)$

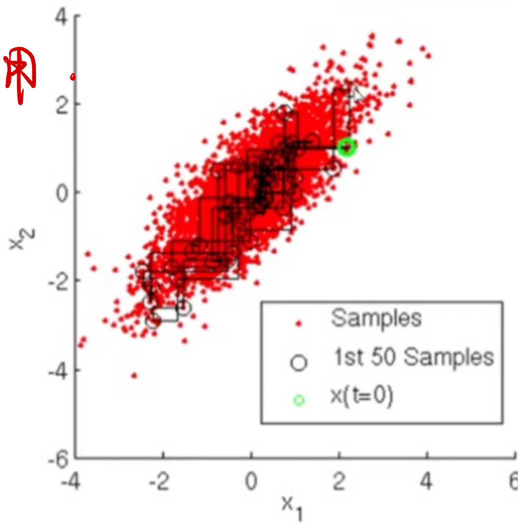
Gibbs 采样步骤

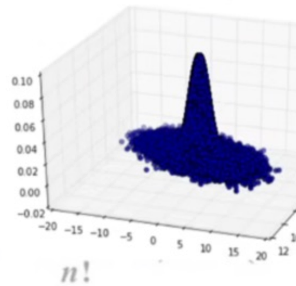
特点：①不需要拒绝。
②只有对$A(x_1,y_1)$做水平采样才有用。

步骤：

- 给定平稳分布$\pi(x_1,x_2)$
- t=0随机产生一个初始状态$(x_1{}^{(0)}, x_2{}^{(0)})$
- 从条件概率分布$P(x_2|x_1{}^{(0)})$中采样$(x_1{}^{(0)}, x_2{}^{(1)})$
- 从条件概率分布$P(x_1|x_2{}^{(1)})$中采样$(x_1{}^{(1)}, x_2{}^{(1)})$
- 不停轮换坐标轴，采取指定数量样本为止

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





https://www.cnblogs.com/pinard/p/6645766.html

$e^x = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} +$