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。

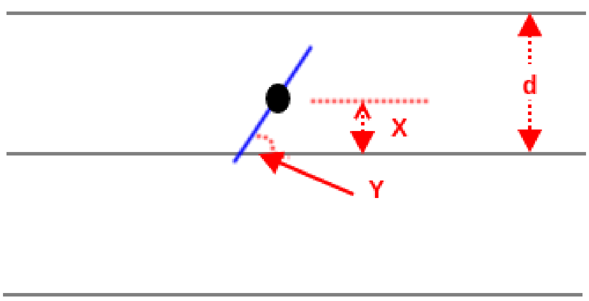
2. 蒙特卡洛方法也可以用于根据概率分布来随机采样的任务。

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：

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

   因此，针与直线相交的概率为：

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

   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 $\int\int_{x<\frac{l}{2}\sin y} p(x,y)dxdy$ 。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。

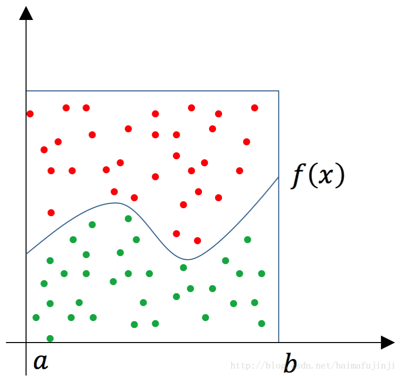
   此时定义一个常数 M ，使得 $M > \max_{a\le x\le b} f(x)$ ，该常数在区间 $[a,b]$ 上的面积就是矩形面积 $M(b-a)$ 。

   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 $y_0 \le f(x_0)$ ，则说明该随机点在函数 $f(x)$ 下方，染成绿色。
   - 若 $f(x_0) < y_0 \le M$ ，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：

$$\int_a^b p(x)dx = 1$$
$$\text{if } f(x)\ne 0 \text{ then } p(x)\ne 0,\quad a\le x\le b$$

   令：

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

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

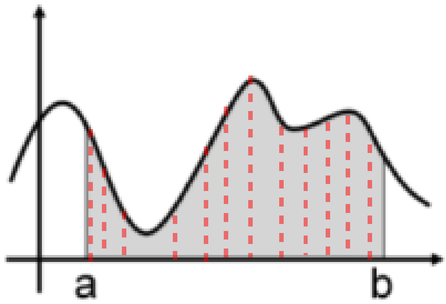
   则期望法求积分的步骤是：

   - 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 $x_1,x_2,\cdots,x_N$ 。
   - 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：

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

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：

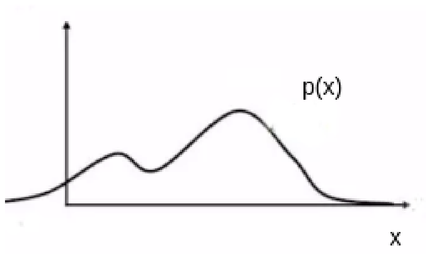
   $$\mathbb{E}_p[f(X)]=\int f(x)p(x)dx=\int f(x)\frac{p(x)}{q(x)}q(x)dx$$

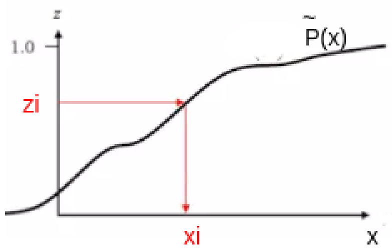
   令 $f^*(x)=f(x)\frac{p(x)}{q(x)}$，则原始期望转换为求另一个期望 $\mathbb{E}_q[f^*(X)]$ 。此时可以使用期望法求积分的策略计算。

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 $x_1,x_2,\cdots$ 。
   - 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 $x = \tilde{P}^{-1}(z)$ 。

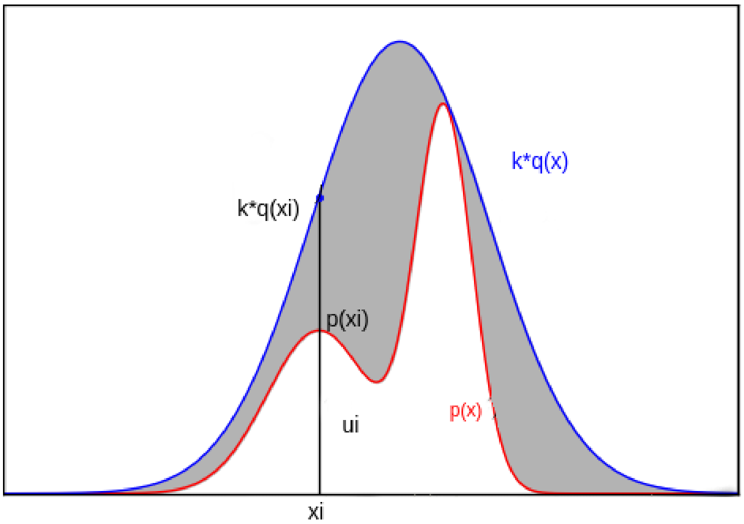
   如果累计分布函数无法计算，或者反函数难以求解，则该方法无法进行。

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 $p(x) \le k \times q(x)$ 。
   - 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 α_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 $u_i \le \alpha_i$ ，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 $X_1, X_2, \cdots$ 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：$P(X_{t+1} \mid X_t, X_{t-1}, \cdots, X_1) = P(X_{t+1} \mid X_t)$ 。

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  0.2249775 ]]
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 ：

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

   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：

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

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

   其中：

   - $1, 2, \cdots, j, \cdots$ 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 $\vec{\pi}=(\pi(1),\pi(2),\cdots,\pi(j),\cdots),\sum_{j=0}^{\infty}\pi(j)=1$ 。

  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：

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

   假设到达第 n 步时，马尔可夫链收敛，则有：

$$
\begin{gathered}
X_n\sim\vec{\pi}\\
X_{n+1}\sim\vec{\pi}\\
\cdots
\end{gathered}
$$

   所以 $X_n,X_{n+1},X_{n+2},\cdots$ 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 $x_0,x_1,\cdots,x_n,x_{n+1},\cdots$ 。

   根据马尔可夫链的收敛行为，当 n 较大时， $x_n,x_{n+1},\cdots$ 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 $f:\mathcal{X}\longmapsto\mathbb{R}$ ，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 $\vec{\mathbf{x}}_1,\vec{\mathbf{x}}_2,\cdots,\vec{\mathbf{x}}_N$ ，再得到 $\mathbb{E}_{\vec{X}\sim\tilde{p}(\vec{\mathbf{x}})}[f(\vec{X})]$ 的无偏估计：

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

- 如果概率密度函数 $\tilde{p}(\vec{\mathbf{x}})$ 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 $\tilde{p}(\vec{\mathbf{x}})$ 的马尔可夫链来产生样本。

3.1 MCMC 算法

1. `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。

2. 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 $\tilde{p}$ 。

3. 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：

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

     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。

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

   - 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。

5. `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 $\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1}, \cdots\}$
- 算法：
  - 初始化 x_0
  - 对 $t = 1, 2, \cdots$ 执行迭代。迭代步骤如下：
    - 根据 $Q(x^* \mid x_{t-1})$ 采样出候选样本 x^* ，其中 Q 为转移概率函数。
    - 计算 $\alpha(x^* \mid x_{t-1})$ ：

$$\alpha(x^* \mid x_{t-1}) = \min\left(1, \frac{\tilde{p}(x^*)Q(x_{t-1} \mid x^*)}{\tilde{p}(x_{t-1})Q(x^* \mid x_{t-1})}\right)$$

    - 根据均匀分布从 $(0,1)$ 内采样出阈值 u，如果 $u \le \alpha(x^* \mid x_{t-1})$ ，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 $\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x_{n+1}, \cdots\}$

> 注意：返回的序列中，只有充分大的 n 之后的序列 $\{x_n, x_{n+1}, \cdots\}$ 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 α 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：

$$\tilde{p}(x_1,y_1)\tilde{p}(y_2 \mid x_1) = \tilde{p}(x_1)\tilde{p}(y_1 \mid x_1)\tilde{p}(y_2 \mid x_1)$$
$$\tilde{p}(x_1,y_2)\tilde{p}(y_1 \mid x_1) = \tilde{p}(x_1)\tilde{p}(y_2 \mid x_1)\tilde{p}(y_1 \mid x_1)$$

   于是 $\tilde{p}(x_1,y_1)\tilde{p}(y_2 \mid x_1) = \tilde{p}(x_1,y_2)\tilde{p}(y_1 \mid x_1)$。则在 $x = x_1$ 这条平行于 y 轴的直线上，如果使用条件分布 $\tilde{p}(y \mid x_1)$ 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 $\tilde{p}(x_1,y_1)\tilde{p}(x_2 \mid y_1) = \tilde{p}(x_2,y_1)\tilde{p}(x_1 \mid y_1)$。在 $y = y_1$ 这条平行于 x 轴的直线上，如果使用条件分布 $\tilde{p}(x \mid y_1)$ 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 $Q(A \to B)$：

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

   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：

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

   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 $\tilde{p}(\vec{\mathbf{x}})$ ，其中 $\vec{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$
- 输出： 采样出的一个状态序列 $\{\vec{\mathbf{x}}_0, \vec{\mathbf{x}}_1, \cdots\}$
- 算法步骤：
  - 初始化：随机初始化 $\vec{\mathbf{x}}_0, t=0$ 。
  - 执行迭代，迭代步骤如下：
    - 随机或者以一定次序遍历索引 $1,2,\cdots,n$ 。遍历过程为（设当前索引为 i ）：
      - 将 $x_1,\cdots,x_{i-1},x_{i+1},\cdots,x_n$ 保持不变，计算条件概率：$\tilde{p}(x_i \mid x_1 = x_{t,1},\cdots,x_{i-1}=x_{t,i-1},x_{i+1}=x_{t,i+1},\cdots,x_n=x_{t,n})$。

        > 该条件概率就是状态转移概率 $Q(A\rightarrow B)$

      - 根据条件概率 $\tilde{p}(x_i \mid x_1 = x_{t,1},\cdots,x_{i-1}=x_{t,i-1},x_{i+1}=x_{t,i+1},\cdots,x_n=x_{t,n})$ 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 $\vec{\mathbf{x}}_{t+1} = (x_{t,1},\cdots,x_{t,i-1},x_{t,i}^*,x_{t,i+1},\cdots,x_{t,n})^T$ 。
      - 令 $t \leftarrow t+1$，继续遍历。
  - 最终返回一个状态序列 $\{\vec{\mathbf{x}}_0, \vec{\mathbf{x}}_1, \cdots\}$ 。

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。