Markov Chain Monte Carlo 01 Sampling Method

Chen Gong

30 December 2019

其实在之前的 Inference Variational 那一节中，我们讲到过一些有关于 Markov Chain Monte Carlo (MCMC) 的知识。也就是我们有一些数据 X，看到这些数据 X，并且有一些隐变量 Z，我们给隐变量一些先验，根据观测数据来推后验知识，也就是 $P(Z|X)$。

但是，很不幸的是 $P(Z|X)$ 的计算非常的复杂，我们大致采用两种思路来解决这个问题，也就是精确推断和近似推断。精确推断无法达到我们想要的结果时，就会采用近似推断的方法。而近似推断中我们又可以分成两大类，即为确定性近似 (VI) 和随机近似 (MCMC)。

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 $P(Z|X)$，其中 Z 为 Latent data，X 为 Observed data。知道分布以后，我们通常的目标是求解：

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

然后，问题马上就来了，我们知道了后验分布 $P(Z|X)$，怎么去采样呢？也就是如何通过采样得到 $z^{(1)}, z^{(2)}, \cdots, z^{(N)} \sim P(Z|X)$。那么，我们这一节将要主要介绍三种采样方法，概率分布采样，拒绝采样和重要性采样。

1 概率分布采样

我第一次看到这个概念是在 Distributional Reinforcement Learning 中的 Wesserstein Metric 中。当时，真的把我看得我一脸懵逼，而且作者并没有提到概率分布采样。还有有的文章中，经常省写 c.d.f (概率分布函数)，p.d.f (概率密度函数)，i.i.d (独立同分布)。我觉得我这里有必要提一下。

为什么要有概率分布采样呢？因为我们直接根据概率分布来进行采样非常的复杂。如果我们知道概率分布的具体形式吗？我们可以直接求得概率累积的概率分布函数。由于概率分布函数的值一定是 $[0,1]$ 之间的。所以，我们可以在均匀概率密度分布 $U(0,1)$ 上采样，得到 $u^{(i)} \sim U(0,1)$。然后求 $x^{(i)} \sim cdf^{-1}(u^{(i)})$ 就可以计算得到我们想要的结果。这样就可以采样得到 $\{x^{(1)}, x^{(2)}, \cdots, x^{(N)}\}$N 个样本点。

虽然，理论上这个方法好像很有效，但是实际上很多情况我们都根本不知道 p.d.f 的具体表现形式。就算知道，很多时候 c.d.f 也并不是那么的好求。所以很多情况下，概率分布采样并没有那么的好求。

2 拒绝采样 (Rejection Sampling)

由于对目标分布 $p(Z)$ 的采样非常的困难，所以我们可以对一个比较简单的分布 $q(Z)$ 进行采样来辅助采样。那么我们具体做法怎么办呢？我们可以设定一个 proposal distribution：$q(Z)$。对于 $\forall z_i$，保

证 $M \cdot q(z^i) \geq p(z^i)$，那么我们为什么要引入 M 呢？这是因为 $\int_Z P(Z)dZ = \int_Z q(Z)dZ = 1$。要使 $q(z^i) \geq p(z^i)$ 是几乎不可能成立的。为了方便描述，我们画图来说明一下：

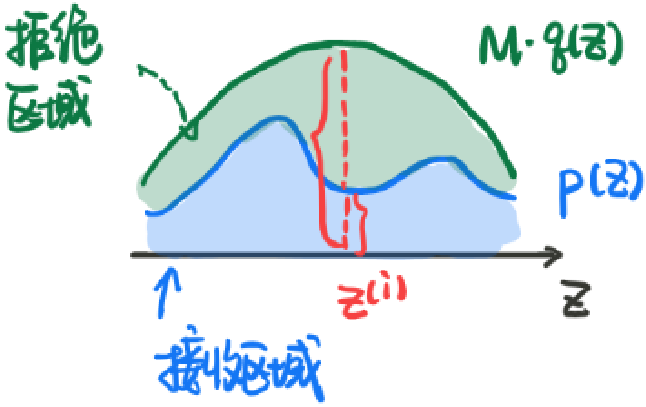

图 1: Rejection Sampling 示意图

在这里我们需要定义一个接受率：$\alpha = \frac{P(z^{(i)})}{M \cdot q(z^{(i)})}$，很显然 $0 \leq \alpha \leq 1$。这个实际就是上图中绿色的部分。

我们来看看具体的步骤：

(1) 首先进行采样 $z^{(i)} \sim q(z)$。

(2)$u \sim U(0,1)$；如果 $u \leq \alpha$，我们就接收 $z^{(i)}$，不然我们就拒绝。

所以，绿色的部分就被我们称为拒绝区域，就是这样来的，所以这个采样方法就是拒绝采样。同样这样的采样方法也有缺点。如果 $M \cdot q(z)$ 比 $p(z)$ 大很多的话，那么我们的采样老是是失败的，这就涉及到一个采样效率低下的问题。而当 $M \cdot q(z) = p(z)$ 的时候，$\alpha = 1$，我们每次采样的结果都是接受的。但是，实际上 $p(z)$ 的分布形式非常的复杂，我们根本就没有办法来得到那么准确的结果，特别是采样 cost 非常高的话，经常性的采样失败带来的损失是很大的。

3 重要性采样 (Importance Sampling)

重要性采样在我们的强化学习 (PPO) 中的应用非常的多。重要性采样并不是直接对概率进行采样，而是对概率分布的期望进行采样。也就是：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}_{p(z)}[f(z)] = \int p(z)f(z)dz &= \int \frac{p(z)}{q(z)}q(z)f(z)dz \\
&= \int f(z)\frac{p(z)}{q(z)}q(z)dz \\
&\approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(z_i)\frac{p(z_i)}{q(z_i)} \\
&\quad z_i \sim q(z),\ i = 1, 2, \cdots, N
\end{aligned} \tag{2}
$$

而这里的 $\frac{p(z_i)}{q(z_i)}$ 也就是 Weight，用来平衡不同的概率密度值之间的差距。同样重要性采样也可能会出现一些问题，就是两个分布之间的差距太大了话，总是采样采不到重要的样本，采的可能都是实

际分布概率值小的部分。也就是采样效率不均匀的问题。在这个基础上，我们进一步提出了 Sampling Importance Resampling。

3.1 重要性重采样 (Sampling Importance Resampling)

经过重要性采样后，我们得到了 N 个样本点，以及对应的权重。那么我用权重来作为采样的概率，重新测采样出 N 个样本。也就是如下图所示：

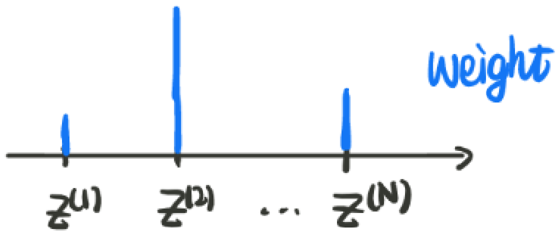

图 2: Sampling Importance Resampling 示意图

通过二次采样可以降低采样不平衡的问题。至于为什么呢？大家想一想，我在这里表达一下自己的看法。$\frac{p(z_i)}{q(z_i)}$ 是 Weight，如果 Weight 比较大的话，说明 $p(z_i)$ 比较大而 $q(z_i)$ 比较的小，也就是我们通过 $q(z_i)$ 采出来的数量比较少。那么我们按权重再来采一次，就可以增加采到重要性样本的概率，成功的弥补了重要性采样带来的缺陷，有效的弥补采样不均衡的问题。