对于高维的情形,由于接受率 $\alpha$ 的存在(通常 $\alpha$  < 1),以上Metropolis-Hastings 算法的效率不够高。能否找到一个转移矩阵Q使得接受率 $\alpha=1$  呢?我们先看看二维的情形,假设有一个概率分布p(x,y),考察x坐标相同的两个点 $A(x_1,y_1)$ , $B(x_1,y_2)$ ,我们发现

$$p(x_1, y_1)p(y_2|x_1) = p(x_1)p(y_1|x_1)p(y_2|x_1)$$
  
$$p(x_1, y_2)p(y_1|x_1) = p(x_1)p(y_2|x_1)p(y_1|x_1)$$

所以得到

$$p(x_1, y_1)p(y_2|x_1) = p(x_1, y_2)p(y_1|x_1)$$
(21)

III

$$p(A)p(y_2|x_1) = p(B)p(y_1|x_1)$$

基于以上等式,我们发现,在 $x=x_1$  这条平行于y轴的直线上,如果使用条件分布 $p(y|x_1)$ 做为任何两个点之间的转移概率,那么任何两个点之间的转移满足细致平稳条件。同样的,如果我们在 $y=y_1$  这条直线上任意取两个点 $A(x_1,y_1),C(x_2,y_1)$ ,也有如下等式

$$p(A)p(x_2|y_1) = p(C)p(x_1|y_1).$$

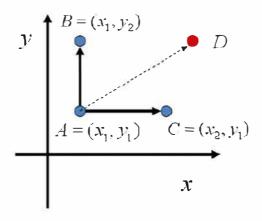


Figure 20: 平面上马氏链转移矩阵的构造

于是我们可以如下构造平面上任意两点之间的转移概率矩阵Q

$$Q(A \to B) = p(y_B|x_1)$$
 如果  $x_A = x_B = x_1$    
  $Q(A \to C) = p(x_C|y_1)$  如果  $y_A = y_C = y_1$    
  $Q(A \to D) = 0$ 

有了如上的转移矩阵Q,我们很容易验证对平面上任意两点X,Y,满足细致平稳条件

$$p(X)Q(X \to Y) = p(Y)Q(Y \to X)$$

于是这个二维空间上的马氏链将收敛到平稳分布p(x,y)。而这个算法就称为Gibbs Sampling 算法,由物理学家Gibbs 首先给出的。