蒙特卡洛采样之拒绝采样（Reject Sampling）

2018-05-30 · MC · Bayesian 29627

> 我们所说的抽样，其实是指从一个概率分布中生成观察值（observations）的方法。而这个分布通常是由其概率密度函数（PDF）来表示的。而且， 即使在已知PDF的情况下，让计算机自动生成观测值也不是一件容易的事情。从本质上来说，计算机只能实现对均匀分布（Uniform distribution）的采样。 那如何实现计算机很好的采样数据样本呢？今天我们一起来看看实现方法。

在采样问题上我们可能会面对这些问题：

1. 计算机只能实现对均匀分布的采样，但我们仍然可以在此基础上对更为复杂的分布进行采样，那具体该如何操作呢？
2. 随机分布的某些数字特征可能需要通过积分的形式来求解，但是某些积分可能没有（或者很难求得）解析解，彼时我们该如何处理呢？
3. 在贝叶斯推断中，后验概率的分布是正比于先验和似然函数之积的，但是先验和似然函数的乘积形式可能相对复杂，我们又该如何对这种形式复杂的分布进行采样呢？

针对这些问题衍生出一系列求解的方法。

Inverse CDF 方法

这种方法称为逆变换采样（Inverse transform sampling）法，我们一起来回顾一下PDF和CDF。

对于随机变量 X，如下定义的函数 F：

$$F(x) = P\{X \leq x\}, \quad -\infty < x < \infty$$

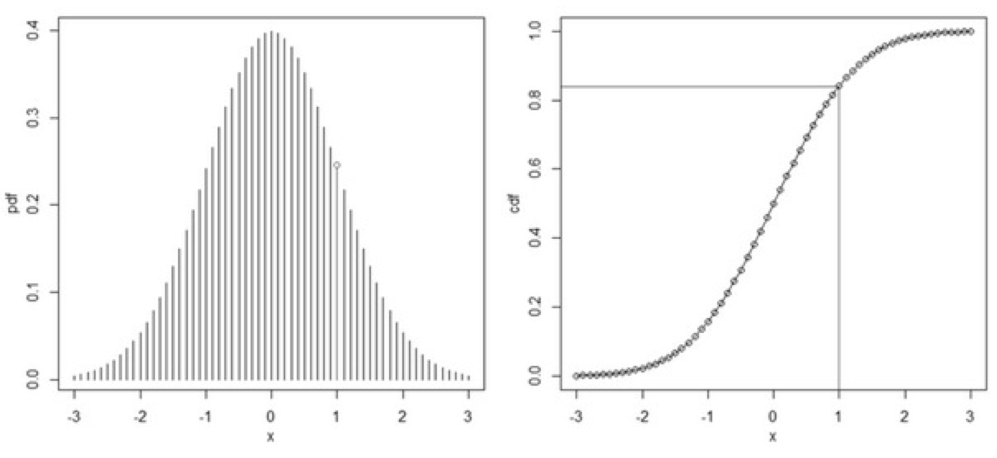
上式称为X的累积分布函数（CDF，Cumulative Distribution Function）。

对于连续型随机变量X的累积分布函数$F(x)$，如果存在一个定义在实数轴上的非负函数$f(x)$，使得对于任意实数x，有下式成立：

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

则称$f(x)$为X的概率密度函数（PDF，Probability Density Function）。显然，当概率密度函数存在的时候，累积分布函数是概率密度函数的积分。

所以，通常我们可以通过对PDF（如下图中的左图所示为正态分布的PDF）进行积分来得到概率分布的CDF（如下图中的右图所示为正态分布的CDF）。



我们可以求得CDF的反函数$F^{-1}(u)$，如果要得到 m 个观察值，则重复下面的步骤 m 次：

1. 从 Uniform(0,1) 中随机生成一个值（前面已经说过，计算机可以实现从均匀分布中采样），用u表示。
2. 计算$F^{-1}(u)$的值x，则x就是从$f(x)$中得出的一个采样点。

在上图中，如果从 Uniform(0,1) 中随机生成的值$u=0.8413$，则可以算得$F^{-1}(u)=1$，则此次从正态分布中生成的随机数就是1。

为了进一步验证Inverse CDF 方法真的有效，我们从定量上算一下。

假设现在我们希望从下面这个PDF中抽样：

$$f(x) = \begin{cases} 8x & ,if\ 0 \leq x < 0.25 \\ \frac{8}{3} - \frac{8}{3}x & ,if\ 0.25 \leq x \leq 1 \\ 0 & ,otherwise \end{cases}$$

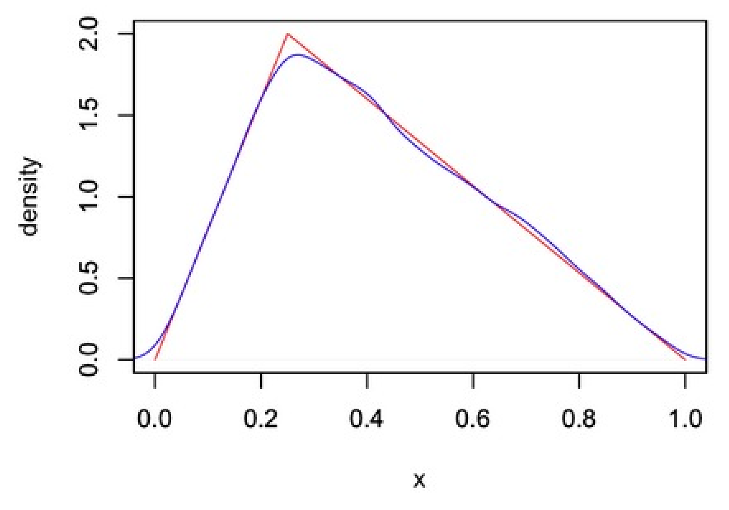
可以算得相应的CDF为：

$$F(x) = \begin{cases} 0 & ,if\ x < 0 \\ 4x^2 & ,if\ 0 \leq x < 0.25 \\ \frac{8}{3}x - \frac{4}{3}x^2 - \frac{1}{3} & ,if\ 0.25 \leq x \leq 1 \\ 1 & ,if\ x > 1 \end{cases}$$

对于$u\in [0,1]$，它的反函数为：

$$F^{-1}(u) = \begin{cases} \frac{\sqrt{u}}{2} & ,if\ 0 \leq u < 0.25 \\ 1 - \frac{\sqrt{3(1-u)}}{2} & ,if 0.25 \leq u \leq 1 \end{cases}$$

通过计算求解（python程序近期上传），我们可以拟合出真实曲线和采样绘制出的曲线：

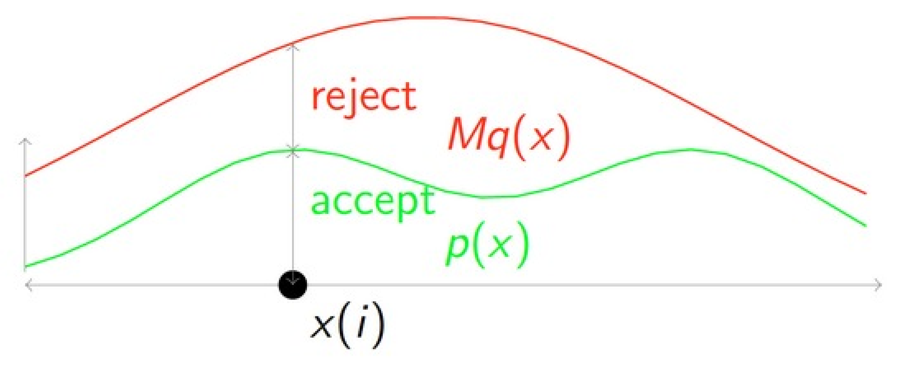


从图中可以看出，采样点与原始分布非常吻合。

拒绝采样（Reject Sampling）

从上述描述中可以知道Inverse CDF 方法确实有效。但其实它的缺点也是很明显的，那就是有些分布的 CDF 可能很难通过对 PDF 的积分得到， 再或者 CDF 的反函数也很不容易求。这时我们可能需要用到另外一种采样方法，这就是我们即将要介绍的拒绝采样。

下图解释了拒绝采样的基本思想，假设我们想对 PDF 为$p(x)$的函数进行采样，但是由于种种原因（例如这个函数很复杂），对其进行采样是相对困难的。 但是另外一个 PDF 为$q(x)$的函数则相对容易采样，例如采用 Inverse CDF 方法可以很容易对对它进行采样，甚至$q(x)$就是一个均匀分布 （别忘了计算机可以直接进行采样的分布就只有均匀分布）。那么，当我们将$q(x)$与一个常数M相乘之后，可以实现下图所示之关系，即 $M\cdot q(x)$将$p(x)$完全"罩住"。

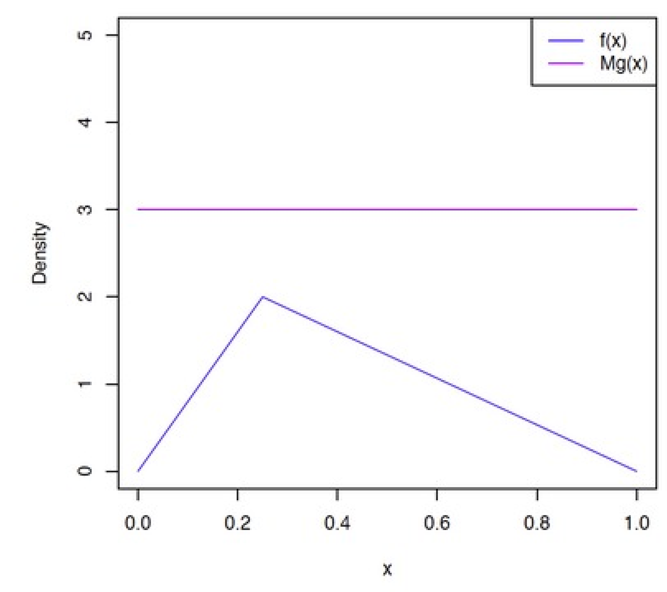


然后重复如下步骤，直到获得m个被接受的采样点：

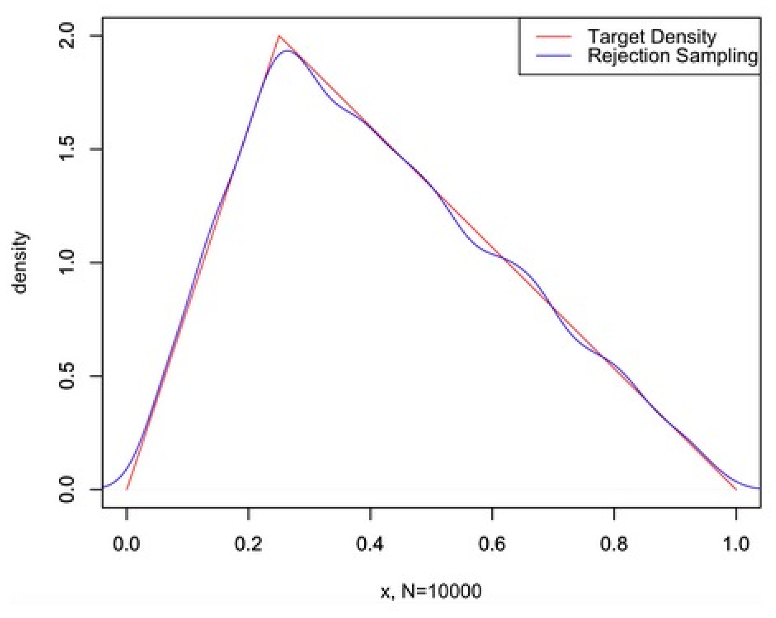
1. 从$q(x)$中获得一个随机采样点$x(i)$
2. 对于x_i计算接受概率（acceptance probability） $\displaystyle \alpha = \frac{p(x_i)}{Mq(x_i)}$
3. 从 Uniform(0,1) 中随机生成一个值，用u表示
4. 如果$\alpha \geq u$，则接受x_i作为一个来自$p(x)$的采样值，否则就拒绝x_i并回到第一步

当然可以采用严密的数学推导来证明Reject Sampling的可行性。但它的原理从直观上来解释也是相当容易理解的。你可以想象一下在上图的例子中， 从哪些位置抽出的点会比较容易被接受。显然，红色曲线和绿色曲线所示之函数更加接近的地方接受概率较高，也即是更容易被接受，所以在这样的地方采到的点就会比较多， 而在接受概率较低（即两个函数差距较大）的地方采到的点就会比较少，这也就保证了这个方法的有效性。

为了验证，我们还是以本文最开始给出的那个分段函数$f(x)$为例来演示 Reject Sampling 方法。如下面图所示，参考分布我们选择的是均匀分布 （你当然可以选择其他的分布，但采用均匀分布显然是此处最简单的处理方式）。而且令常数$M=3$。



得到的结果如下：



从实验结果来看，采样还是很可观的。

总结

拒绝采样对于概率分布函数难以求解的数据进行采样是有效的，现在计算机的计算能力如此发达的情况下，更是有利于蒙特卡罗采样的发展。

谢谢观看，希望对您有所帮助，欢迎指正错误，欢迎一起讨论！！！

打赏

上一篇： 马尔科夫链简析

下一篇： 蒙特卡洛（Monte Carlo）法求定积分

AnHui HeFei, China

坚持学术与身体一起磨练

当时不杂

打赏

标 签

Machine-Learning(19) GAN(60) Math(18) Generative(8) Cross-modal(10) code(10) Fun(3) Linux(2) matplotlib(1) Exercise(1) Objective(15) Blockchain(1) Pycharm(1) dataset(2) conference(1) jekyll(1) Bayesian(9) MC(5) Autoencoder(2) System(1) Attention(1) Glow(1) speech(1) Audio(4) VAE(4) Life(1) Speech(1) Anomaly(1) Temporal(1) nlp(1) Adversarial Training(1) Visual(1)

常用链接

1. 合肥工业大学
2. 浙江师范大学
3. github主页

友情链接

博客日历

网站已运行1188天5小时25分58秒。

公元 2021 年 4 月 农历辛丑年 牛年

一	二	三	四	五	六	日
			1 愚人节	2 廿日	3 廿一	4 清明节
5 廿三	6 廿四	7 廿五	8 廿六	9 廿七	10 廿八	11 廿九
12 卅日	13 初一	14 初二	15 初三	16 初四	17 初五	18 初六
19 初七	20 谷雨	21 初九	22 十日	23 十一	24 十二	25 十三
26 十四	27 十五	28 十六	29 十七	30 十八		