# 蒙特卡洛算法：抽样方法

计算物理b
高阳

# 核心问题

- 给定在 [0,1]上的均匀分布随机数

- 目标：满足某种所需分布的随机数列。

- 离散情形：$\xi \in \{x_i, i = 1,2,\dots,n\}, p_i = p(\xi = x_i)$ 且$\sum_i p_i = 1$

- 连续情形：$p(x)$。

# 离散情形：例子

- 周二早上九点半选择做什么事情，有若干种可能。1. 来上课，概率为$p_1 = 0.35$; 2. 去锻炼，概率为$p_2 = 0.1$; 3. 洗衣服，概率$p_3 = 0.05$；4. 睡觉， 概率$p_4 = 0.25$; 5. 玩游戏，概率为$p_5 = 0.25$.

- 如何用概率算法决定应该做什么？

- 首先需产生满足此分布的随机数。

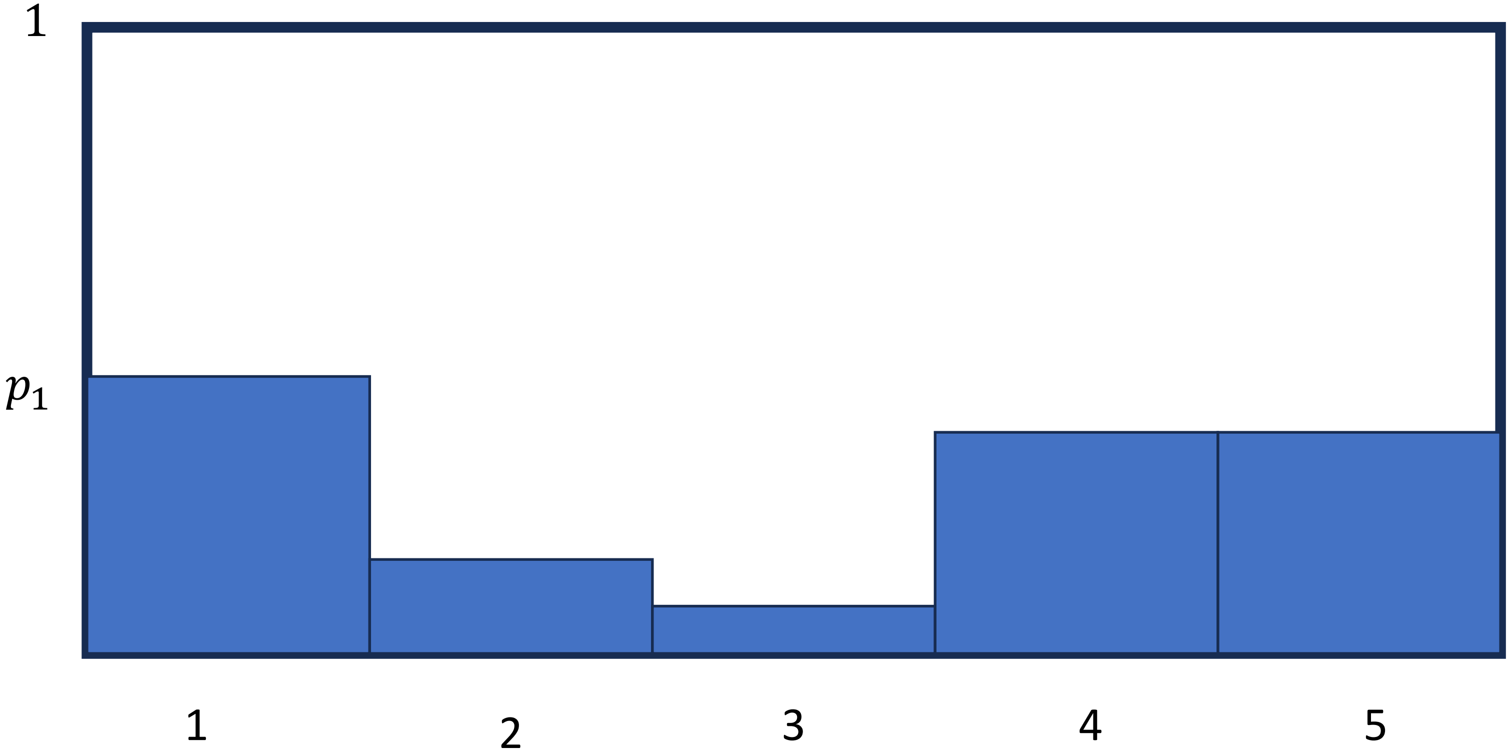
- 直接的方法：舍选法。

# 离散情形：舍选法

- 1. 随机生成从1到5的整数k（方法后面给出）。
- 2.产生(0,1)内的随机数$\xi$
- 3. 如果$\xi < p_k$,则输出k，也即做第k件事。
- 4. 否则回到第1步往下执行，直到生成某件事的标号为止。

# 离散情形：抽样效率

- 抽样效率：产生有效的随机变量的概率




抽中的概率为：阴影面积除以总面积，

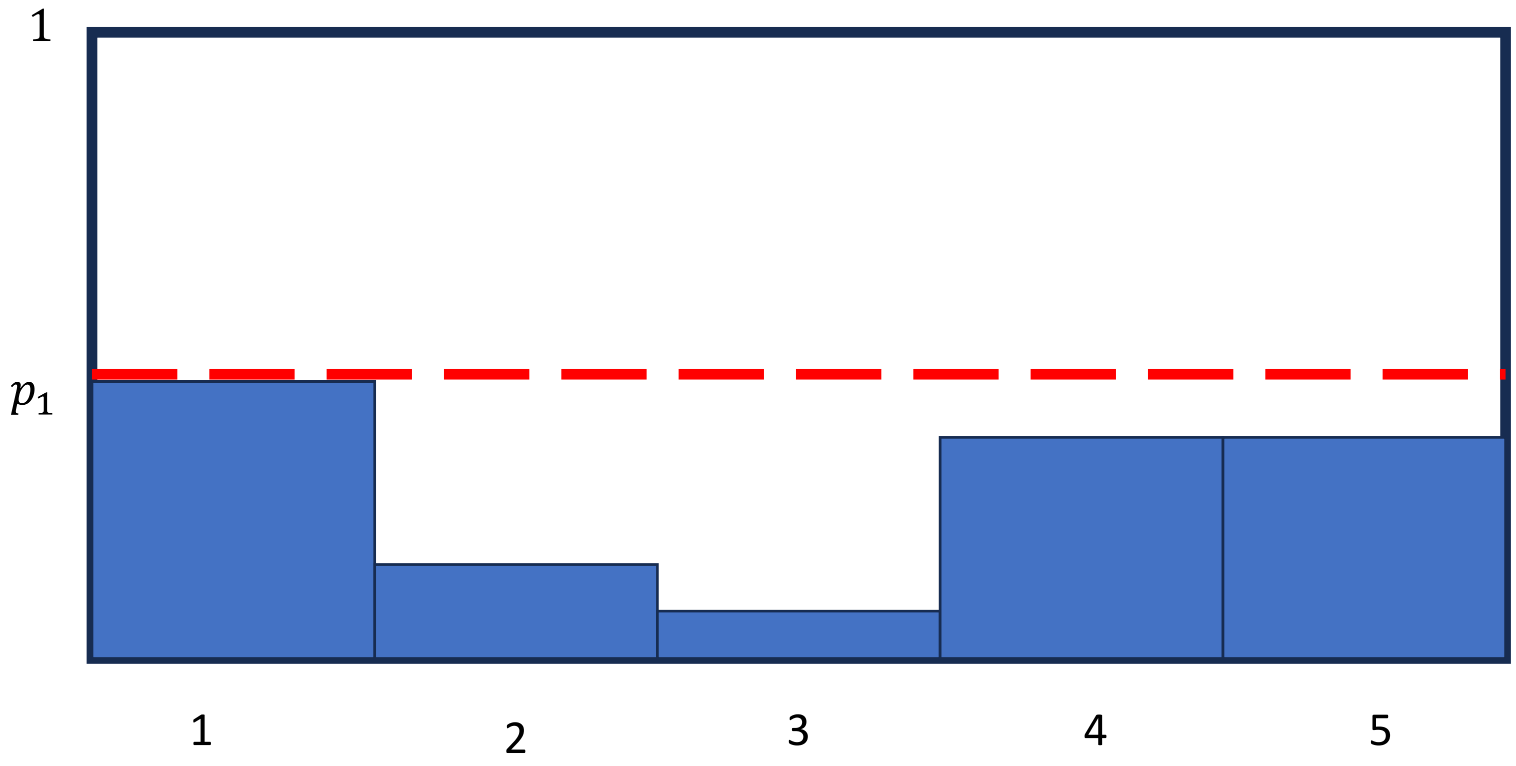
故抽样效率为 $\sum_i \frac{p_i}{5} = \langle p_i \rangle$

# 离散情形：优化算法

- 1. 找到概率最高的事，记其概率为$p_{max}$
- 2. 随机生成从1到5的整数k（方法后面给出）。
- 2.产生$(0,p_{max})$内的随机数$\xi$
- 3. 如果$\xi < p_k$,则输出k，也即做第k件事。
- 4. 否则回到第1步往下执行，直到生成某件事的标号为止。

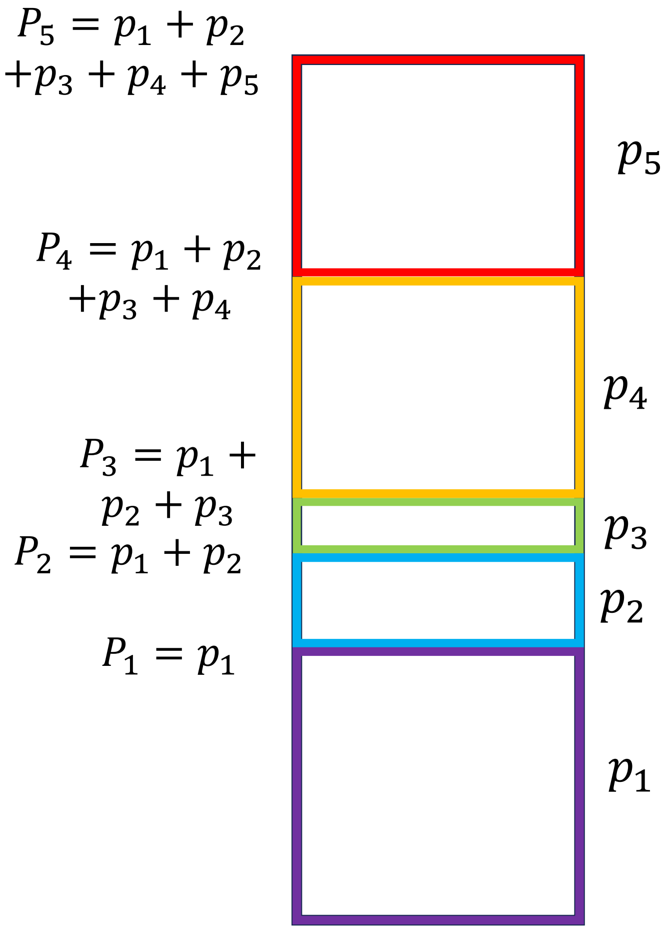
# 离散情形：抽样效率提高

- 抽样效率：产生有效的随机变量的概率




抽中的概率为：阴影面积除以总面积，
故抽样效率为
$\sum_i \frac{p_i}{5p_{max}} = \frac{\langle p_i \rangle}{p_{max}} > \langle p_i \rangle$

# 离散情形：塔式抽样




- 产生(0,1)之间的随机数$\xi$。
- 设置分布概率$P = 0$;
- 设置循环变量$i$, $i$从1到N，其中N为总事件数目;
- 计算$P = P + p_i$;
- 若$\xi < P$,则返回i, 否则重复循环。

注：实际上，可以事先求好节点分布概率P, 从而算法中只需搜索$\xi$在哪个区间即可。可用二分法加速搜索。事件顺序不重要，只需有编号（可数）即可。
这种塔式抽样在连续情形下即为反函数法。

# 连续情形：反函数法

- 变量及概率

$$(k, p_k) \to \left(x, p(x)\right)$$

- 分布概率

$$P_k = P_{k-1} + p_k \quad \to \quad P(x) = \int_{-\infty}^{x} dy\, p(y)$$

- 判断条件（可将连续函数无限分割以离散化）

$$P_{k-1} < \xi < P_k \quad \to \quad P(x) < \xi < P(x + dx)$$

或者，当dx足够小时，$P(x) = \xi$

- 也即$x = P^{-1}(\xi)$

# 例子1

- 产生满足如下概率密度分布的随机变量

  $f(x) = \lambda\, e^{-\lambda\, x}, x > 0\, , \lambda > 0;$

  $f(x) = 0, otherwise.$
- 首先求分布函数 $F(x) = \int_{-\infty}^{x} dt\, \lambda e^{-\lambda\, t} = 1 - e^{-\lambda x}, x > 0$
- 反解：$F^{-1}(y) = -\frac{1}{\lambda}\ln(1 - y)$
- 方法：若y为（0,1）的随机数，则所需的随机变量为

  $x = -\frac{1}{\lambda}\ln(1 - y)$
- 注1：由于1-y也在（0,1）区间，所以上式可改为

  $x = -\frac{1}{\lambda}\ln(y)$
- 注2：对于y，应加语句排除左右端点。

# 反函数法：样本变换

- 反函数法的实质是积分与采样的统一性
- 上述函数变化可认为是两种不同的样本之间的变化：
  一种是所需样本，一种是（0,1）之间均匀分布的样本。
- 一般原则

$$\int_0^1 d\xi \xrightarrow{\text{积分变换}} const \int_a^b dx\, p(x)$$

$$(\xi: (0,1)\text{均匀分布} \xrightarrow{\text{样本变换}} (x: p(x))$$

# 示例

- 重看例子1

$$d\xi = const\, dx\, e^{-\lambda x}$$

- 从而有

$$\xi = const\, e^{-\lambda x} + const'$$

- 看边界 $0 = const + const'$

$$1 = const'$$ 注：也可换边界$1 = const + const'$， $0 = const'$

- 从而有 $const = -const' = -1$

故 $x = -\frac{1}{\lambda}\ln(1-y)$

# 反函数法推广：变换抽样

- 为保证收敛性，直接反函数抽样不一定是最合适的；若分布密度比较复杂，直接抽样也会比较困难
- 变换抽样的思路：

$$p(x)dx = \phi(y)dy = \phi(y)\, h'(x)dx$$

- 其中：$y = h(x)$, $\qquad p(x) = \phi\big(h(x)\big)h'(x)$

- 也即满足$p(x)$的随机变量x，可用满足$\phi(y)$的随机变量y来抽样，在获得y后，$x = h^{-1}(x)$

# 示例

- 产生满足如下概率密度分布的随机变量

$$f(x) = \frac{1}{2}\left(3e^{-2x} + 1\right)e^{-x}, x > 0;$$

$$f(x) = 0, otherwise$$

- 取$y = h(x) = e^{-x}$;  $\phi(y) = \frac{1}{2}(3y^2 + 1)$

- 我们有  $f(x)dx = \phi(y)dy$
- 从而我们只需产生满足$\phi(y) = \frac{1}{2}(3y^2 + 1)$分布的随机变量y即可，而$x = -\ln y$

# 与反函数法的关联

- 若$\phi(y)$为$(0,1)$内的均匀分布，则变换抽样退化为反函数法。
- 实际上，在变换抽样中，按照$\phi(y)$分布的随机变量原则上也可以由（0,1)内的均匀分布获得
- 一般的变换抽样: (0,1)内的均匀分布按照$\phi(y)$产生y，y按照h(x)产生x。
- 反函数法: (0,1)内的均匀分布直接按照h(x)产生x。

# 作业（9月24号）

1. 正方体色子，每面有一个不同的数字，分别为1到6。用舍选法和塔式抽样给出掷色子的结果这一随机变量的抽样。请写出算法步骤。