1. 马氏链采样

给定 $f:R^{N_{ heta}} o R$ 满足 $\mathrm{Var}_{
ho}[f]=1$. 我们有

 $egin{aligned} \mathbb{E}_{ heta_0 \sim
ho} \left[
ho_{ ext{MCMC}}^N(f) - \mathbb{E}_
ho(f)
ight] &= 0, \ \mathbb{E}_{ heta_0 \sim
ho} \left[\left(
ho_{ ext{MCMC}}^N(f) - \mathbb{E}_
ho(f)
ight)^2
ight] &= rac{ au_N^2(f)}{N}, \end{aligned}$

其中

$$au_N^2(f) = 1 + 2\sum_{n=1}^{N-1} rac{N-n}{N} \mathrm{Cov}ig(f(heta_0), f(heta_n)ig).$$

证明

由于 $\theta_0 \sim \rho$,是马氏链的不变分布,我们有 $\theta_n \sim \rho$ 对于 $n \geq 1$ 。 因此

$$\mathbb{E}_{ heta_0 \sim
ho} \left[
ho_{ ext{MCMC}}^N(f) - \mathbb{E}_
ho(f)
ight] = 0$$

对于方差,我们有

$$\begin{split} \mathbb{E}_{\theta_0 \sim \rho} \left[\left(\rho_{\text{MCMC}}^N(f) - \mathbb{E}_{\rho}(f) \right)^2 \right] &= \frac{1}{N^2} \mathbb{E}_{\theta_0 \sim \rho} \left[\left(\sum_{n=1}^N (f(\theta_n) - \mathbb{E}_{\rho}(f)) \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{N^2} \left[\sum_{n=1}^N \text{Var} \left[f(\theta_n) \right] + 2 \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m > n} \text{Cov} \left(f(\theta_n), f(\theta_m) \right) \right] \\ &= \frac{1}{N^2} \left[N + 2 \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m > n} \text{Cov} \left(f(\theta_0), f(\theta_{m-n}) \right) \right] \\ &= \frac{1}{N^2} \left[N + 2 \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{k=1}^{N-n} \text{Cov} \left(f(\theta_0), f(\theta_k) \right) \right] \\ &= \frac{1}{N^2} \left[N + 2(N - k) \sum_{k=1}^{N-1} \text{Cov} \left(f(\theta_0), f(\theta_k) \right) \right] \\ &= \frac{1}{N} \left[1 + 2 \frac{N - k}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \text{Cov} \left(f(\theta_0), f(\theta_k) \right) \right] \\ &= \frac{\tau_N^2(f)}{N}. \end{split}$$

 θ_0 和 θ_n 越独立越好。

2. 马氏链收敛性

对于有限状态空间 $S=\{1,2,\cdots d\}$ 上的马氏链,假设马氏核 p 对应的转移概率矩阵 $P\in R^{d imes d}$ 满足

$$\min_{(i,j) \in S imes S} P_{i,j} \geq rac{\epsilon}{d}$$

那么存在唯一不变分布 $ho \in R^d$,满足

$$ho^T P =
ho^T$$

对于马氏链 $\{ heta_n\}$, $heta_n\sim
ho_n$, 我们有

$$\|
ho_n-
ho\|_{L_1}\leq 2(1-\epsilon)^n$$

证明

由于 $P=\epsilon R+(P-\epsilon R)$, 其中 $R_{i,j}=rac{1}{d}$ 。 这意味着在每一步中,总会存在一定的残余概率 ϵR ,使得马氏链可以跳转到任何新状态,与其当前位置无关。随着 n 的增加,每一步的残余概率将减小马氏链对 $heta_0$ 的依赖性。

基于这个观测,我们定义独立同分布的Bernoulli的随机变量 $\{b_n\}$,满足 $P(b_n=1)=\epsilon$, $P(b_n=0)=1-\epsilon$ 。以及转移概率矩阵

$$W_{i,j} = rac{P_{i,j} - \epsilon R_{i,j}}{1 - \epsilon}.$$

我们可以定义对应于转移概率矩阵W 和 R 的 马氏核 w 和 r 以及新的马氏链

$$heta_{n+1}' \sim \left\{ egin{array}{l} w(heta_n',\cdot), \; ext{ if } b_n = 0 \ r(heta_n',\cdot), \; ext{ if } b_n = 1 \end{array}
ight.$$

容易验证 $P(heta'_{n+1}=j| heta'_n=i)=p(i,j)$ 。

对于任意测试函数 $f:S \to R$, 其中 $|f|_{\infty} \leq 1$ 。 我们定义

$$\tau = \min\{n \in N : b_n = 1\}$$

那么

$$egin{aligned} \mathbb{E}_{ heta_0'\sim
ho_0}[f(heta_n')] &= \mathbb{E}_{ heta_0'\sim
ho_0}\left[f\left(heta_n'
ight)| au\geq n
ight]P\left(au\geq n
ight) + \sum_{l=0}^{n-1}\mathbb{E}_{ heta_0'\sim
ho_0}\left[f\left(heta_n'
ight)| au=l
ight]P\left(au=l
ight) \\ &= \underbrace{\mathbb{E}_{ heta_0'\sim
ho_0}\left[f\left(heta_n'
ight)| au\geq n
ight]P\left(au\geq n
ight)}_{|\cdot|\leq \left(1-\epsilon
ight)^n} + \underbrace{\sum_{l=0}^{n-1}\mathbb{E}_{ heta_0'\sim ext{uniform}(S)}\left[f\left(heta_{n-l}'
ight)
ight]P\left(au=l
ight)}_{ ext{independent of original initial distribution} \end{aligned}$$

我们有

$$egin{aligned} \|
ho_n -
ho\|_{L_1} &= \sup_{|f|_\infty \leq 1} \left| \mathbb{E}_{ heta_0' \sim
ho_0}[f(heta_n')] - \mathbb{E}_{ heta_0' \sim
ho}[f(heta_n')]
ight| \ &= \sup_{|f|_\infty \leq 1} \left| \mathbb{E}_{ heta_0' \sim
ho_0}\left[f\left(heta_n'
ight) | au \geq n
ight] P\left(au \geq n
ight) - \mathbb{E}_{ heta_0' \sim
ho}\left[f\left(heta_n'
ight) | au \geq n
ight] P\left(au \geq n
ight)
ight| \ &= \sup_{|f|_\infty \leq 1} \left| \left(\mathbb{E}_{ heta_0' \sim
ho_0}\left[f\left(heta_n'
ight) | au \geq n
ight] - \mathbb{E}_{ heta_0' \sim
ho}\left[f\left(heta_n'
ight) | au \geq n
ight]
ight) P\left(au \geq n
ight)
ight| \ &\leq 2(1-\epsilon)^n \end{aligned}$$