

姓名： 李直

导师： 马连良

所在单位： 山东大学

专业： 粒子物理与原子核物理

email: li.zhi@cern.ch

随机游走与 Metropolis 方法

在今年8月的威海暑期学校（WHEPS）中，Dorigo 教授在统计与数据分析的系列报告中涉及了有关抽样方法的内容，在随后的小组展示中，胡继峰小组对随机游走的抽样方法进行了展示，其思想方法与 Metropolis 方法类似。本人对此较有兴趣，遂进行调研，并进行了简单操作，汇总于此。

Metropolis 算法

Metropolis算法是蒙特卡洛方法中最著名的算法，它的应用疆域包括统计物理、QCD、天体物理、物理化学、数学、计算生物等等，甚至是社会科学。1953年，Nicolas Metropolis连同Arianna W. Rosenbluth、Marshall N. Rosenbluth、Augusta H. Teller、Edward Teller在《The Journal of Chemical Physics》上发表了一篇题为“Equations of State Calculations by Fast Computing Machines”的文章，提出了后来以Nicolas Metropolis的名字命名的算法。这篇文章至今已被引用了17 000多次。

Metropolis算法是动态 Monte Carlo 方法的一种，其思想是构造一个以目标分布为不变分布的 Markov 链。为了实现这一目标，Metropolis算法借助于一个辅助的概率密度函数，通常被称为“提议函数”。在当前状态下，通过提议函数产生一个新的状态，利用目标分布来选取每一步行走的步长和方向，并计算接受概率，构造目标不变分布。

具体抽样方法

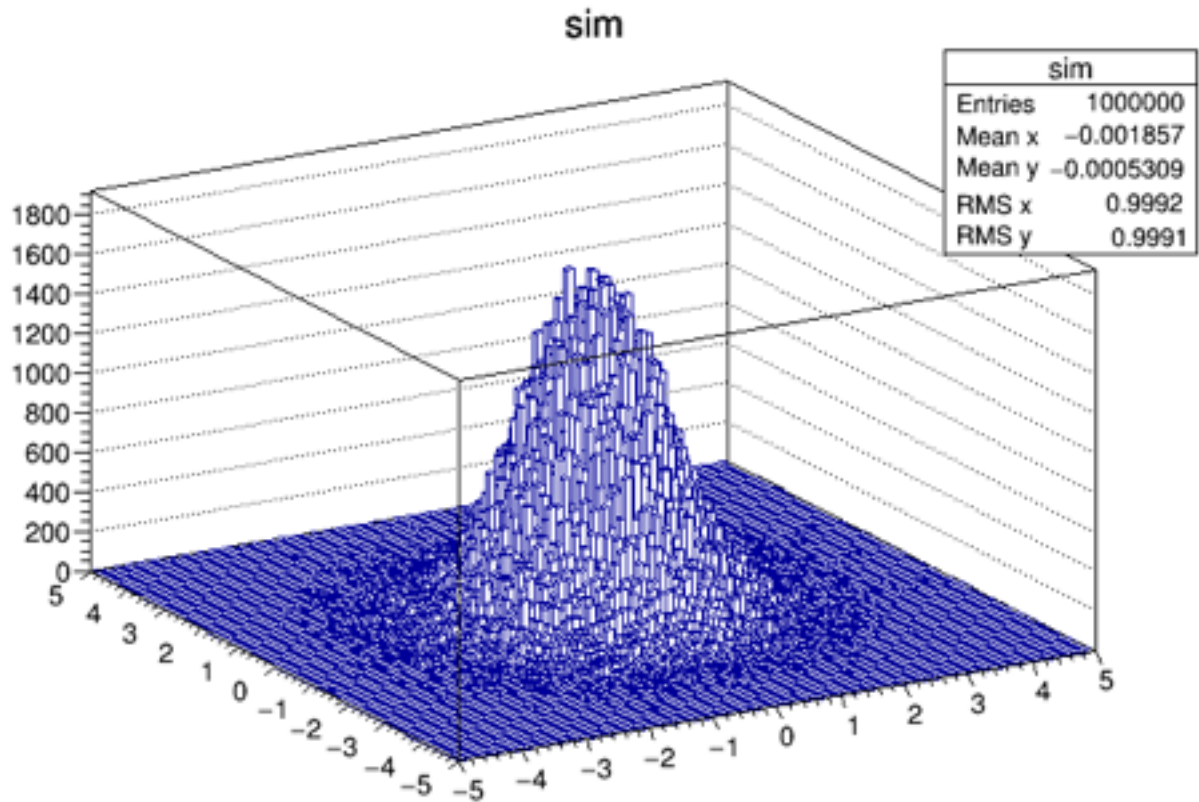
在抽取一个 d 维目标分布 $w(X)$ 时，可以先产生一个 d 维的随机向量 X_1 ，作为初始状态，通过在 d 维空间中的随机游走来产生 X 的随机取样。在当前状态为 X_i 时， X_{i+1} 由 X_i 代入步长迭代得到。是否接受 X_{i+1} 则由目标函数 $w(X)$ 在新状态与当前状态两点处的数值比 $r(r=w(X_{i+1}) / w(X_i))$ 与 $(0,1)$ 之间的随机数 r' 比较得到，如果 $r > r'$ ，则接受 X_{i+1} ，否则接受 X_i 。可以证明当随机游走达到平衡状态时，不变分布即为目标分布。

具体操作中，步长应选取为约有一半的试验行走被接受的值，初始状态可选取为与目标分布较为近似的简单分布。

实际应用

使用Metropolis抽样方法抽取二维标准正态分布。

维数 $d=2$ ，步长 $\delta=3$ ，步数 $i=1 \times 10^7$ ，初始状态 $(0,1)$ 随机分布。抽样结果如图所示：



总结与致谢

欢乐的时光总是匆匆流逝，近10天的暑期学校转瞬即逝。感谢主办方能够举办此次暑期学校，让我们享受了美好的暑期学校生活。同时非常感谢各位主讲的教授给我们带来如此多的知识和技能，让我们每个人都有满意的收获。最后尤其感谢阮曼奇和李强两位老师以及四位秘书，在这10天中一直为我们的学习、生活操劳，应对一切突发事件，让我们每一名学员都对这次暑期学校十分满意！