

# Numerical Analysis

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences  
Peking University



# 控制变量法

控制变量法的思想是: 利用一个性质 (如均值) 已知且与另一个待处理的随机变量充分“接近”的随机变量来“控制”待处理的随机变量的计算误差. 例如, 考察

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 [f(x) - g(x)]dx + \int_0^1 g(x)dx.$$

由 Monte Carlo 方法, 取  $X_i, i = 1, \dots, N, i.i.d. \sim \mathcal{U}[0, 1]$ , 得:

$$I_N(f) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [f(X_i) - g(X_i)] + I(g),$$

这里  $I(g)$  已知. 若  $\text{Var}(f - g) < \text{Var}(f)$ , 则上式就给出了一种方差更小的方法.



## 控制变量法的例

记  $r(x) = e^{\sigma x}$ ,  $\sigma > 0$  为常数, 考虑积分

$$I(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (1 + r(x))^{-1} e^{-\frac{x^2}{2}} dx.$$

注意到

$$(1 + r(x))^{-1} \approx h(x) \triangleq \begin{cases} 1, & x \leq 0; \\ 0, & x > 0, \end{cases}$$

可将积分改写成

$$I(f) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} ((1 + r(x))^{-1} - h(x)) e^{-\frac{x^2}{2}} dx + \frac{1}{2},$$

再利用标准正态分布做重要性抽样计算第一部分的积分项. 这里  $h(x)$  起到了控制变量的作用.



## 分层抽样法

分层抽样法(也称几何分裂法)的思想是将积分区域剖分成若干子区域,并在每个子区域上分别应用 Monte Carlo 方法. 该方法的最大好处之一在于: 每个子区域上的函数得以简化, 因此更容易使用控制变量法和重要性抽样法. 即便用最简单的剖分和基本的 Monte Carlo 方法, 也可得到较小的方差. 例如, 考虑积分

$$I(f) = \int_0^1 f(x) dx.$$

将区域  $\Omega = [0, 1]$  分为  $M$  等份:  $\Omega_k = [\frac{k-1}{M}, \frac{k}{M}]$ ,  $k = 1, \dots, M$ ; 取 i.i.d.  $X_i^{(k)} \sim \mathcal{U}(\Omega_k)$ ,  $i = 1, \dots, n$ ,  $k = 1, \dots, M$ , 共  $N = nM$  个随机变量; 令

$$I_{nM}(f) = \sum_{k=1}^M \frac{1}{nM} \sum_{i=1}^n f(X_i^{(k)}) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^n f(X_i^{(k)}).$$

注意, 此时算法的唯一变化在于抽样是按子区域分别进行的.



# 最简单分层抽样法 $I_{nM}(f)$ 的均值与方差

记  $\bar{f}_k = M \int_{\Omega_k} f(x) dx = |\Omega_k|^{-1} \int_{\Omega_k} f(x) dx = Ef(X^{(k)})$ , 则有

$$EI_{nM}(f) = \frac{1}{nM} \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^n \bar{f}_k = \sum_{k=1}^M \frac{1}{M} \bar{f}_k = \sum_{k=1}^M \int_{\Omega_k} f(x) dx = I(f),$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(I_{nM}(f)) &= E|I_{nM}(f) - I(f)|^2 \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{k,l=1}^M \sum_{i,j=1}^n E[(f(X_i^{(k)}) - \bar{f}_k)(f(X_j^{(l)}) - \bar{f}_l)] \\ &= \frac{1}{N^2} \sum_{k=1}^M [nM \int_{\Omega_k} (f(x) - \bar{f}_k)^2 dx] = \frac{1}{N} \int_{\Omega} |f(x) - \bar{f}(x)|^2 dx \triangleq \frac{1}{N} \sigma_s^2, \end{aligned}$$

其中  $\bar{f}(x) = \bar{f}_k, \forall x \in \Omega_k, k = 1, \dots, M$ .



# 最简单分层抽样法 $I_{nM}(f)$ 的方差一般总会减小

**命题：** 对最简单分层抽样法  $I_{nM}(f)$ , 有

$$\sigma_s \leq \sigma \triangleq \left\{ \int_{\Omega} |f(x) - I(f)|^2 dx \right\}^{-1/2},$$

且等号当且仅当  $\bar{f}_k = I(f)$ ,  $\forall 1 \leq k \leq M$ , 时成立.

**证明：** 二次函数  $g_k(c) \triangleq \int_{\Omega_k} |f(x) - c|^2 dx$ ,  $k = 1, \dots, M$ , 分别在  $g'_k(c) = 2 \int_{\Omega_k} (f(x) - c) dx = 0$ , 即  $c = \bar{f}_k$  处取到唯一的最小值. 因此,  $g_k(\bar{f}_k) \leq g_k(I(f))$ , 且等号当且仅当  $I(f) = \bar{f}_k$  时成立. 命题得证. ■



## 对偶变量法 (antithetic variables method)

对偶变量法是一种特殊的针对定义域具有一定对称性, 且被积函数具有特殊性质的情形所设计的特殊技巧之一。

设被积函数  $f(x)$  的定义域为  $[0, 1]$ , 则有以下结论:

**命题:** 如果  $f(x)$  是单调的,  $X \sim \mathcal{U}[0, 1]$ , 则相关系数满足

$$\text{Cov}(f(X), f(1 - X)) = \int_0^1 (f(x) - I(f))(f(1 - x) - I(f))dx \leq 0.$$

**证明:**

$$\begin{aligned} \text{Cov}(f(X), f(1 - X)) &= \int_0^1 f(x)f(1 - x)dx - \left[ \int_0^1 f(x)dx \right]^2 \\ &= \int_0^1 \int_0^1 f(x)f(1 - x)dxdy - \int_0^1 \int_0^1 f(x)f(y)dxdy \\ &= \int_0^1 \int_0^1 f(x)f(1 - x)dxdy - \int_0^1 \int_0^1 f(x)f(1 - y)dxdy \end{aligned}$$



## 对偶变量法 (续)

$$\begin{aligned}
 &= \int_0^1 dx \int_0^x f(x)(f(1-x)-f(1-y))dy + \int_0^1 dx \int_x^1 f(x)(f(1-x)-f(1-y))dy \\
 &= \int_0^1 dx \int_0^x f(x)(f(1-x)-f(1-y))dy + \int_0^1 dy \int_0^y f(x)(f(1-x)-f(1-y))dx \\
 &= \int_0^1 dx \int_0^x (f(x) - f(y))(f(1-x) - f(1-y))dy \leq 0.
 \end{aligned}$$

最后的不等式由  $f$  单调和  $(x-y)((1-x)-(1-y)) = -(x-y)^2 \leq 0$ . ■

令  $I_N \triangleq \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N [f(X_i) + f(1-X_i)]$ , 有  $E I_N = I(f)$ . 由以上命题得

$$\begin{aligned}
 \text{Var}(I_N) &= E |I_N - I(f)|^2 = \frac{1}{4N^2} E \left( \sum_{i=1}^N (f(X_i) - I(f)) + (f(1-X_i) - I(f)) \right)^2 \\
 &= \frac{1}{2N} [\text{Var}(f) + \text{Cov}(f(X) - I(f), f(1-X) - I(f))] \leq \frac{1}{2N} \text{Var}(f).
 \end{aligned}$$





## 数值积分的 Monte Carlo 方法的误差与置信度

数值积分的 Monte Carlo 方法的误差  $e_N = |I_N(f) - I(f)|$  仍然是一个随机变量, 我们有均方误差  $E|e_N|^2 = \frac{1}{N} \text{Var}(f(X))$  及误差的期望  $Ee_N \leq \sqrt{E|e_N|^2} = \sqrt{\frac{\text{Var}(f(X))}{N}}$ . 由此可估计  $e_N$  的方差

$$\text{Var}(e_N) = E(e_N - Ee_N)^2 = E(|e_N|^2) - (Ee_N)^2 \leq \frac{1}{N} \text{Var}(f(X)).$$

于是由 Markov 不等式  $P(|X| \geq \varepsilon) \leq \varepsilon^{-\alpha} E|X|^\alpha, \forall \alpha > 0$  得

$$P(|e_N| \geq \varepsilon) \leq \varepsilon^{-2} E|e_N|^2 = \frac{1}{\varepsilon^2 N} \text{Var}(f(X)),$$

$$P(|e_N - Ee_N| \geq \varepsilon) \leq \varepsilon^{-2} E(e_N - Ee_N)^2 = \frac{1}{\varepsilon^2} \text{Var}(e_N) \leq \frac{1}{\varepsilon^2 N} \text{Var}(f(X)).$$

注1: 取  $\varepsilon = C \sqrt{\frac{\text{Var}(f(X))}{N}}$ ,  $C > 1$ , 则有  $P(|e_N| \geq \varepsilon) \leq C^{-2}$ . 特别的,  $P(\cap_{i=1}^m \{|e_N^i| \geq \varepsilon\}) \leq C^{-2m}$ .

注2: Markov 不等式及其证明可参见 p.168, 《概率论》, 何书元编著, 北京大学出版社, 2006年.



# Metropolis 算法 — 一种马氏链 Monte Carlo 方法

我们知道要在计算机上实现 Monte Carlo 方法的首要任务是以较高的效率产生服从指定分布的随机数. 但有些分布, 尤其是维数很高的空间上的分布, 却很难用我们前面讲到的简单方法在计算机上产生服从这些分布的 (伪) 随机数.

Metropolis 等人给出了一种利用马氏链转移概率矩阵产生服从某些特定分布的随机数的方法. Metropolis 算法, 也称为马氏链 Monte Carlo 方法, 在统计物理的系综平均型积分 (或求和) 中有广泛应用.

我们以一维 Ising 模型为例, 简要介绍 Metropolis 算法. 二维和三维 Ising 模型是用电子自旋研究铁磁材料相变性质的模型.



## 铁磁材料相变性质的一维 Ising 模型

设  $M$  个晶格点一字排开, 每个晶格点上有一个电子. 用  $\sigma_i = \pm 1$  表示第  $i$  个格点上电子的自旋态  $\uparrow$  或  $\downarrow$ . 所有  $M$  个电子的自旋态  $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_M)$  给出了该模型系统的一个微观态.

有  $M$  个晶格点的一维 Ising 模型共有  $2^M$  个微观态. 当系统处于微观态  $\sigma$  时, 系统的内能可以用能量函数  $H(\sigma)$  表示为

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad \sigma_k \in \{1, -1\}, \quad k = 1, \dots, M,$$

其中  $\langle i,j \rangle$  表示求和仅限于紧相邻格点对, 即  $|i-j|=1$  时. 铁磁材料  $J > 0$ , 反铁磁材料  $J < 0$ .



# 一维 Ising 模型微观态的概率分布与系综平均

一维 Ising 模型微观态  $\sigma$  在系统中出现的概率服从 Gibbs 分布, 其概率密度可表示为  $\frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma)\}$ , 其中  $\beta = (k_B T)^{-1}$ ,  $k_B$  为 Boltzmann 常数,  $T$  为绝对温度,  $Z_M = \sum_{\sigma} \exp\{-\beta H(\sigma)\}$  为配分函数.

于是, 系统的宏观统计量, 例如“单个粒子的平均内能”可以通过系统微观态的“平均”(系综平均)求得

$$U_M = \frac{1}{M} \sum_{\sigma} \frac{\exp\{-\beta H(\sigma)\}}{Z_M} H(\sigma) \triangleq \frac{1}{M} \langle H(\sigma) \rangle.$$

Monte Carlo 方法的目标: 生成概率密度为  $\frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma)\}$  的 i.i.d. 随机变量序列  $\{\sigma^{(i)}\}_{i=1}^N$ , 计算  $\langle H(\sigma) \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H(\sigma^{(i)})$ .



## Metropolis 算法的基本思想

在没有外场作用的情况下, 系统从任一初始微观状态出发, 经过一段时间的演变, 总会趋于平衡态. 这时, 每个微观态仍会相互转换, 但系统总体处于动态平衡之中, 系统的宏观物理量不随时间变化. 因此, 系综平均可以用时间平均替代. 即

$$\langle H(\sigma) \rangle \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N H(\sigma^{(i)}),$$

其中状态序列  $\{\sigma^{(i)}\}_{i=1}^N$  是从初始状态出发通过适当的“物理规则”（例如分子碰撞规则）产生的时齐马氏链. 统计物理中将系统的这种空间平均等于时间平均的性质称为系统的遍历性.

Metropolis 算法就是基于这一基本思想, 通过构造适当的时齐马氏链的以概率密度  $\frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma)\}$  为唯一平稳分布的转移概率矩阵来产生时间状态序列的.



# 一维 Ising 模型微观态概率空间上的转移概率矩阵

令  $\Omega = \{\sigma \mid \text{一维 } M \text{ 个晶格上所有的微观态}\}$ ,  $\mathcal{F}$  为  $\Omega$  的子集所生成的  $\sigma$  代数, 对  $S \in \mathcal{F}$  定义事件  $S$  发生的概率为

$$\mathcal{P}(S) = \sum_{\sigma \in S} \frac{\exp\{-\beta H(\sigma)\}}{Z_M},$$

则  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$  构成了一个概率空间.  $\Omega$  中所有不同的微观态  $\sigma$  的个数为  $N_t = 2^M$ , 将不同微观态  $\sigma$  的出现概率  $\frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma)\}$  按微观态的某种排序方式  $\{\sigma^{(i)}\}_{i=1}^{N_t}$  排成一  $N_t$  维行向量, 记为  $\pi$ .

定义概率空间  $(\Omega, \mathcal{F}, \mathcal{P})$  上的转移概率矩阵  $\mathbf{P} = (p_{ij})_{N_t \times N_t}$ , 其中  $p_{ij}$  为从微观态  $\sigma^{(i)}$  到  $\sigma^{(j)}$  的转移概率, 满足: (1)  $p_{ij} \geq 0, \forall i, j = 1, \dots, N_t$ ; (2)  $\sum_{j=1}^{N_t} p_{ij} = 1, \forall i = 1, \dots, N_t$ .

**目标:** 选取转移概率矩阵  $\mathbf{P}$ , 使得最终生成的随机变量序列服从 Gibbs 分布.



## 微观态概率空间上转移概率矩阵有和应有的性质

- ① 由随机矩阵的性质 (1)、(2), 和矩阵论中的 Gerschgorin 圆盘定理(见 G.H.Golub & C.F. van Loan, "Matrix Computation") 知  $\mathbf{1}$  为转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  的模最大的特征值, 相应的右特征向量为  $(1, \dots, 1)^T$ .

定义: 如果  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N_t \times N_t}$  满足下述二者之一:

- $N_t = 1$  且  $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ ;
- $N_t \geq 2$ , 且存在置换矩阵  $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{N_t \times N_t}$  及整数  $1 \leq r < N_t$ , 使得

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{A} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D} \end{pmatrix}$$

其中  $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{r \times r}$ ,  $\mathbf{0}$  是零矩阵,

则称  $\mathbf{A}$  为可约矩阵, 否则, 称其为不可约矩阵.



## 微观态概率空间上转移概率矩阵有和应有的性质 (续)

**定义:** 如果存在自然数  $\tau$ , 使得马氏链的转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  满足  $\mathbf{P}^\tau > 0$ , 即  $\mathbf{P}^\tau$  的每个元素都是正数, 则称该马氏链为本原的, 也称转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  为本原的.

**注:** 本原矩阵一定是不可约的, 但不可约的矩阵不一定是本原的. 例如, 二阶方阵  $P$ , 其中  $p_{11} = p_{22} = 0, p_{12} = p_{21} = 1$ .

- ② **本原性:** 转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  应该是本原矩阵. 此时以  $\mathbf{P}$  为转移概率矩阵的马氏链是本原的, 即从任一状态出发在有限步转移之内总会以正概率到达任何其它状态.





## 微观态概率空间上转移概率矩阵有和应有的性质 (续)

**Perron-Frobenius 定理:** 如果  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N_t \times N_t}$  是非负不可约矩阵, 则

- $\mathbf{A}$  的谱半径  $\rho(\mathbf{A}) > 0$  是  $\mathbf{A}$  的单重特征值;
- 相应于  $\rho(\mathbf{A})$  的特征向量的所有分量均非零且同号;
- 不存在相应于其它特征值的非负特征向量 (各分量均非负).

**注:** 由 Perron-Frobenius 定理和 Gerschgorin 圆盘定理知 1 为转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  的模最大的单重特征值, 存在相应于 1 的正的左、右特征向量, 且不存在其它非负特征向量. 已知  $(1, \dots, 1)^T$  是转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  相应于 1 的右特征向量, 而  $\mathbf{P}$  相应于 1 的正的左特征向量则是所谓的转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  的不变分布.

(Perron-Frobenius 定理证明见: 徐树方, "矩阵计算的理论与方法")



## 微观态概率空间上转移概率矩阵有和应有的性质 (续)

**定义:** 对马氏链转移概率矩阵  $\mathbf{P}$ , 如果分布  $\mu = \mu\mathbf{P}$ , 则称  $\mu$  是该马氏链的不变分布 (也称为是转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  的不变分布)。

- ③ 微观态  $\sigma^{(i)}$  的出现概率  $\frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma^{(i)})\}$  排成的  $N_t$  维行向量  $\pi$  应该是转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  的不变分布。

当系统达到动态平衡之后, 两个不同的微观态  $\sigma$  和  $\sigma'$  出现的概率就分别是  $\pi(\sigma) = \frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma)\}$  和  $\pi(\sigma') = \frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma')\}$ ,  $\pi$  是  $\mathbf{P}$  的不变分布意味着  $\pi(\sigma') = \sum_{\sigma} \pi(\sigma) P(\sigma \rightarrow \sigma')$ 。

**定义:** 如果马氏链满足

$$\pi(\sigma)P(\sigma \rightarrow \sigma') = \pi(\sigma')P(\sigma' \rightarrow \sigma)$$

则称该马氏链满足细致平衡条件, 或称该马氏链是可逆的。



## Metropolis 算法转移概率矩阵具有的性质

细致平衡条件意味着马氏链平稳分布的微观态间的相互转换关系的对称性（注意这并非转移概率矩阵的对称性）。在统计物理中这种对称性广泛存在。

综上所述, Metropolis 算法要求转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  具有如下性质:

- ① 转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  满足: (i)  $p_{ij} \geq 0, \forall i, j = 1, \dots, N_t$ ; (ii)  $\sum_{j=1}^{N_t} p_{ij} = 1, \forall i = 1, \dots, N_t$ .
- ② 转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  是本原矩阵. 此时以  $\mathbf{P}$  为转移概率矩阵的马氏链是 (本原的).
- ③ 微观态  $\sigma^{(i)}$  的出现概率  $\frac{1}{Z_M} \exp\{-\beta H(\sigma^{(i)})\}$  排成的  $N_t$  维行向量  $\boldsymbol{\pi}$  是转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  的不变分布.
- ④ 由转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  定义的马氏链满足细致平衡条件.



## 具有性质 (1)-(4) 的马氏链的收敛性

由马氏链的理论, 具有性质 (1)-(4) 的马氏链具有如下收敛性:

**定理:** 设马氏链具有性质 (1)-(4), 设函数  $g(\sigma)$  满足  $E|g(\sigma)| = \sum_{\sigma \in \Omega} \pi(\sigma)|g(\sigma)| < \infty$ . 则对由该马氏链生成的从任一初始状态  $\sigma^{(0)}$  出发的状态序列  $\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \dots, \sigma^{(n)}, \dots$  都有

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(\sigma^{(i)}) \rightarrow \sum_{\sigma \in \Omega} \pi(\sigma)g(\sigma), \text{ 当 } n \rightarrow \infty, \text{ a.s.}$$

这里 *a.s.* (*almost surely*) 收敛是指概率为 1 的收敛.

**注:** 特别地, 具有性质 (1)-(4) 的马氏链有如下收敛性:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n H(\sigma^{(i)}) \rightarrow \langle H(\sigma) \rangle, \text{ 当 } n \rightarrow \infty, \text{ a.s.}$$



## Metropolis 算法的核心 — 实现性质 (1)-(4) 的算法

转移概率矩阵  $\mathbf{P}$  共有  $N_t^2$  个分量, 性质 (1), (3) 和(4) 分别提出  $N_t$ ,  $N_t$  和  $N_t(N_t - 1)/2$  个约束条件. 可见, 还有相当多的自由度来选择转移概率矩阵  $\mathbf{P}$ , 不同的选择方法对应不同的算法.

Metropolis 算法通过数值模拟一个特定的满足细致平衡条件的马氏链的发展过程, 从而产生一个状态序列  $\sigma^{(1)}, \sigma^{(2)}, \dots, \sigma^{(n)}$ . 发展过程的每一次实现分为彼此独立的两步: 第一步, 产生一个预选态  $\sigma'$ ; 第二步, 判断是否接受 (以多大的概率接受) 该新状态, 如果接受, 则  $\sigma^{(n+1)} = \sigma'$ , 否则,  $\sigma^{(n+1)} = \sigma^{(n)}$ .

不同的预选状态的产生方法给出不同的算法, 这些算法计算复杂度可能会大不相同.



习题七：4； 上机习题七：4.

**Thank You!**

