

# 行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

## 加權蒙地卡羅模擬之研究 研究成果報告(精簡版)

計畫類別：個別型  
計畫編號：NSC 100-2118-M-009-001-  
執行期間：100年08月01日至101年07月31日  
執行單位：國立交通大學統計學研究所

計畫主持人：洪慧念

計畫參與人員：碩士班研究生-兼任助理人員：鄭學鴻  
博士班研究生-兼任助理人員：吳侑峻  
博士班研究生-兼任助理人員：游程盛

公開資訊：本計畫可公開查詢

中華民國 101 年 11 月 02 日

中文摘要： 因為電腦的計算速度愈來愈快，因此有許多科學上的問題愈來愈需要仰賴數值計算。目前工程學家或是生物資訊學家遇到的問題都非常複雜，常常有高達 上百維度的積分或其他問題，傳統的數值方法皆無法解決，在最近三十年內蒙地卡羅方法逐漸受到科學家們的重視。眾所皆知，當我們在使用蒙地卡羅模擬方法時，一定要滿足 detail balance。如果不滿足，馬可夫鏈將不會收斂到要求之分配。因此，Metropolis 演算法扮演非常重要的角色，Metropolis 演算法最大的缺點是常常消耗掉大量的電腦資源。因此統計學家提出各種可能方法，加權蒙地卡羅演算法為其中很重要的一種，此方法很容易跳出局部極值，以最快速度達到 ergodic。但為了達到此目的，我們也必須付出一些代價，必須犧牲 detail balance 的性質，取而代之的是加重此一局部極值的權重。通常此權重含有未知參數得函數，因此無法得知，我們必須估計他或想其他辦法代替。因此，就有所謂的 IWIW 性質產生。本計畫之研究成果主要在於探討加權蒙地卡羅方法的理論基礎。我們的成果主要有。第一：我們探討 Q 與 R-Type 之方法。第二：我們探討為何 Q-Type 不滿足 IWIW 性質，但在模擬上依然有不錯之成果。

中文關鍵詞： 加權馬可夫鍊 蒙地卡羅方法

英文摘要：

英文關鍵詞：

加權蒙地卡羅模擬之研究

計畫類別： 個別型計畫  整合型計畫  
計畫編號：NSC 100-2118-M-009-001  
執行期間：2011 年 8 月 1 日至 2012 年 8 月 1 日

執行機構及系所：國立交通大學統計學研究所

計畫主持人：洪慧念  
共同主持人：  
計畫參與人員：鄭學鴻，吳侑峻，游程盛

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告  完整報告

本計畫除繳交成果報告外，另須繳交以下出國心得報告：

- 赴國外出差或研習心得報告
- 赴大陸地區出差或研習心得報告
- 出席國際學術會議心得報告
- 國際合作研究計畫國外研究報告

處理方式：除列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢

涉及專利或其他智慧財產權， 一年  二年後可公開查詢

中 華 民 國 101 年 10 月 31 日

## 前言：

近十年內，因為電腦的計算速度愈來愈快，有許多科學上的問題愈來愈需要仰賴數值計算，例如最佳化問題、數值積分問題、等等。這些問題在傳統的數值分析方法中都有提到，且已經過各個領域學者的研究。但目前工程學家或是生物資訊學家遇到的問題都非常複雜，常常有高達上百維度的積分或其他問題，因此使用傳統的數值方法皆無法解決。

## 研究目的：

在最近三十年內，蒙地卡羅方法受到各個領域科學家們的重視，尤其是在資訊工程領域。近十多年來由於一些統計學家的研究發展，使得隨機蒙地卡羅方法被廣泛的應用在生物計算、統計物理、以及材料科學上。更進一步，學者發展出馬可夫鏈蒙地卡羅模擬法。眾所皆知，當我們在使用馬可夫鏈蒙地卡羅模擬法時，一定要滿足兩個重要的條件，分別為 ergodic 及 detail balance。如果不滿足，馬可夫鏈蒙地卡羅模擬法將不會收斂到我們所要求之分配。因此在馬可夫鏈蒙地卡羅模擬法的進化方面，Metropolis 演算法扮演非常重要的角色。我們這一年之目的即在於探討 Metropolis 演算法的高階應用。

## 文獻探討：

Metropolis 演算法有兩個非常重要步驟，分別為 perturbation 的選取與選取後接受與否的機率。通常在第一步驟完成後，第二個步驟(即接受與否的機率)是比較容易的。對於第一步驟 perturbation 的選取，則會因為問題的不同而有不同的選取方式，因此有時候會非常困難。在 perturbation 的選取方面，在近幾年學者的研究目標，由於要選取的樣本空間常常具有非常高的維

度，因此如果選取不洽當，很容易讓抽樣的過程掉入局部的極值中。一但馬可夫鏈掉入一些局部極值點，將很難跳出此局部極值點，進往另一個局部極值點前進。因此無法在短時間內達到 ergodic，這也是 Metropolis 演算法最大的缺點。科學家們常常因此消耗掉大量的電腦資源。

為了解決這個問題，許多計算科學家與統計學家提出各種可能方法，其中有一種很重要的方法是加權蒙地卡羅演算法，他結合了 important sampling 以及 Metropolis 演算法。這個方法被廣泛的應用在生物資訊 以及其他需要複雜計算的應用科學上，此方法對於 Metropolis 演算法最大之改進在於此方法不易在局部極值的地方停留太久，很容易跳出局部極值，以最快速度達到 ergodic。

## 研究方法：

我們為了在 Metropolis 演算法中較容易跳出局部極值，以最快速度達到 ergodic。我們深入研究加權蒙地卡羅的方法，此方法雖較容易跳出局部穩定點，但我們也必須付出一些代價，例如有較長的尾部收斂。在 Metropolis 演算法中因為有 detail balance 的性質，因此我們模擬的馬可夫鏈的穩定分配會收斂到我們的預定機率分配，而在加權蒙地卡羅的方法中，因為我們希望加速馬可夫鏈跳脫局部極值的速度，因此無法在局部極值停留太久，造成我們必須犧牲 detail balance 的重要性質，取而代之的是加重此一局部極值的權重。因此我們探討了要放多少權重在一些不容易跳脫的點，通常此權重為一含有未知參數得函數，因此無法得知，我們必須估計他，或想其他辦法代替。因此，就有所謂的 IWIW 性質產生，IWIW 性質定義如下： $w f(x, w)$  對  $w$  的積分會合我們所希望的穩定分布成比例。同時，希望我們的馬可夫鏈也具有 IWIW 不變性。在過去，有一些統計學家提出 Q-Type 與 R-Type 之加權蒙地卡羅的方法，雖然這些方法在實際一些例子的應用上有還不錯之成果，但其背後之理論基礎尚且不完整。因此，本計畫之主要目的在於探討加權蒙地卡羅方法在一些特例上的行為表現，在蒙地卡羅方法只有有限個跳動點(finite state)時，在我們過去的研究中，我們發現其權重的分配似乎

具有期望值無窮大的情形。也因此我們嘗試要探討其尾部的機率分配模式。

## 結果與討論：

在這一年內，我們集中精神在於對 Q-type 的馬可夫鏈作探討。我將探討當無 state 的個數為二時，加權馬可夫鍊蒙地卡羅方法在權重為 Q-type 時的行為模式。特別是其 IWIW 性質之探討。在我們這一年的研究中我們探討 Q-type 的 IWIW 性質。但因為 IWIW 並不是收斂之充分條件。因此，我們對state 的個數為二時加權蒙地卡羅方法做一些研究，特別是權重之分佈。雖然理論部分尚未完全完成，但已有所進展，未來我們應該可以順利完成此目標。同時我們也探討當 IWIW 滿足時，卻因為尾部收斂特別慢而導致取樣須趨近無窮大時，我們要如何對權重做截取。當然也跟上面的研究一樣，我們 state 的個數為二情形下 Q-Type 之馬可夫鏈做特別的探討，希望能找出截取方式，以致能迅速收斂且收斂正確之馬可夫鏈。我們知道 Q-type 之馬可夫鏈雖然不滿足 IWIW 性質，但依然會有不錯的表現，我們去年也更深入的討論一些複雜的例子，看到 Q-type 的表現均有不錯之結果，今年我們又加了一些新例子，發現權重的尾部收斂性也是重要的問題。因此我們嘗試修正 Q-Type 的馬可夫鏈，看看是否可以藉著小幅的修正讓其滿足 IWIW 性質，但尚未完全成功。未來我們也將繼續思考此一問題。對此問題，我們將從 state 的個數為三時之馬可夫鏈探討起，討論其權重的收斂性質，並與state 的個數為二的權重行為做比較，分別從分配函數與加權值的期望值的觀點來比較。由過去的一些經驗，這兩觀點會有不一致的結果，我們已發現即是在離散且有限的馬可夫鏈依然有此現象。因此，延續今年的研究，繼續解決此一問題也會是未來的目標之一。我們來利用 Q-Type 與 R-Type 的精神找出其他可行之馬可夫鏈適當之加權方法，雖然我們找到的馬可夫鏈具有 detail balance 之性質，但我們發現似乎會有一些 ergodic 的問題，我們認為這是因為我們找到的馬可夫鏈會有一些機率往無窮大接近，因此會造成加權值的期望值會滿足我們要求但分配含數卻不滿足之情形。未來我們希望能決此問

題，至少是在state 的個數為二時可以解決。依目前之研究成果，我們認為可以對統計學家與工程學家或生物資訊學家的模擬研究有所幫助。同時目前之研究成果應該可以寫成至少一篇有深度的論文，並在統計或生物資訊方面的重要期刊發表。

#### 參考資料：

1. Asmussen, S. (1987), *Applied Probability and Queues*, New York: Wiley.
2. Berg, B. A., and Neuhaus, T. (1991), "Multicanonical Algorithms for First- Order Phase Transitions," *Physics Letters, Ser. B*, 267, 249. Chung, K. L. (1974), *A Course in Probability Theory*, New York: Academic Press.
3. Fan Y, Brooks SP, Gelman A (2006) "Output assessment for Monte Carlo simulations via the score statistic" *Journal of Computational and Graphical Statistics*, 15, 1,178-206.
4. Gelfand, A. E., and Smith, A. F. M. (1990), "Sampling-Based Approaches to Calculating Marginal Densities," *Journal of the American Statistical Association*, 85, 398-409.
5. Geman, S., and Geman, D. (1984), "Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions and the Bayesian Restoration of Images," *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 6, 721-741.
6. Geyer, C. J., and Thompson, E. A. (1995), "Annealing Markov Chain Monte Carlo With Applications to Ancestral Inference," *Journal of the American Statistical Association*, 90, 909-920.
7. Goodman, J., and Sokal, A. D. (1989), "Multigrid Monte Carlo Method. Conceptual Foundations," *Physical Review D*, 40, 2035-2071.
8. Green, P. J. (1995), "Reversible Jump Markov Chain Monte Carlo Computation and Bayesian Model Determination," *Biometrika*, 82, 711-732.
9. Hastings, W. K. (1970), "Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications," *Biometrika*, 57, 97-109.
10. Kesten, H. (1974) "Renewal Theory for Markov Chains," *The Annals of Probability*, 2, 355-387.
11. Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D. Jr., and Vecchi, M. P. (1983), "Optimization by Simulated Annealing," *Science*, 220, 671-680.

12. Lawrence C. E., Altschul, S. F., Boguski, M. S., Liu, J. S., Neuwald, A. F., and Wootton, J. C. (1993), "Detecting Subtle Sequence Signals: A Gibbs Sampling Strategy for Multiple Alignment," *Science*, 262, 208-214.
13. Li YH, Protopopescu VA, Gorin A (2004) "Accelerated simulated tempering" *Physics Letters A*, 328, 4-5, 274-283.
14. Liang FM, Liu CH, Carroll RJ (2007) "Stochastic approximation in Monte Carlo computation" *Journal of the American Statistical Association* 102 477 305-320
15. Liang FM, Zhang J (2009) "Learning Bayesian networks for discrete data" *Computation Statistics & Data Analysis*, 53, 4, 865-876.
16. Liu, J. S., Liang, F., and Wong, W. H. (2000), "The Multiple-try Method and Local Optimization in Metropolis Sampling," *Journal of the American Statistical Association*, 95, 121-134.
17. Malefaki S, Iliopoulos G (2008) " On convergence of properly weighted samples to the target distribution" *Journal of Statistical Planning and Inference*, 138 4 1210-1225
18. Wong, W. H., and Liang, F. (1997), "Dynamic Weighting in Monte Carlo and Optimization," *Proceedings of the National Academy of Science*, 94, 14220-14224.



## 國科會補助專題研究計畫成果報告自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

達成目標

未達成目標（請說明，以 100 字為限）

實驗失敗

因故實驗中斷

其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形：

論文： 已發表  未發表之文稿  撰寫中  無

專利： 已獲得  申請中  無

技轉： 已技轉  洽談中  無

其他：（以 100 字為限）

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）（以 500 字為限）

本計畫之成果應算是統計學上一個重要問題之深入研究，雖然不算是突破性研究，但也算是很有意義之成果。對於統計計算之領域應該算是有意義之成果，也可以具體幫忙一些需要大量計算之研究學者。

# 國科會補助計畫衍生研發成果推廣資料表

日期:2012/10/31

國科會補助計畫	計畫名稱: 加權蒙地卡羅模擬之研究
	計畫主持人: 洪慧念
	計畫編號: 100-2118-M-009-001- 學門領域: 統計計算(計算法則、數值分析、自助法、重點抽樣法等)
無研發成果推廣資料	

100 年度專題研究計畫研究成果彙整表

計畫主持人：洪慧念		計畫編號：100-2118-M-009-001-					
計畫名稱：加權蒙地卡羅模擬之研究							
成果項目		量化			單位	備註（質化說明：如數個計畫共同成果、成果列為該期刊之封面故事...等）	
		實際已達成數（被接受或已發表）	預期總達成數（含實際已達成數）	本計畫實際貢獻百分比			
國內	論文著作	期刊論文	0	0	50%	篇	
		研究報告/技術報告	0	1	50%		
		研討會論文	0	1	50%		
		專書	0	0	0%		
	專利	申請中件數	0	0	0%	件	
		已獲得件數	0	0	0%		
	技術移轉	件數	0	0	0%	件	
		權利金	0	0	0%	千元	
	參與計畫人力（本國籍）	碩士生	2	0	100%	人次	
		博士生	1	0	100%		
		博士後研究員	0	0	100%		
		專任助理	0	0	100%		
國外	論文著作	期刊論文	0	1	50%	篇	
		研究報告/技術報告	0	1	50%		
		研討會論文	0	1	50%		
		專書	0	0	100%		章/本
	專利	申請中件數	0	0	100%	件	
		已獲得件數	0	0	100%		
	技術移轉	件數	0	0	100%	件	
		權利金	0	0	100%	千元	
	參與計畫人力（外國籍）	碩士生	0	0	100%	人次	
		博士生	0	0	100%		
		博士後研究員	0	0	100%		
		專任助理	0	0	100%		

<p>其他成果 (無法以量化表達之成果如辦理學術活動、獲得獎項、重要國際合作、研究成果國際影響力及其他協助產業技術發展之具體效益事項等，請以文字敘述填列。)</p>	與國外學者討論，有國際交流。
--	----------------

	成果項目	量化	名稱或內容性質簡述
科 教 處 計 畫 加 填 項 目	測驗工具(含質性與量性)	0	
	課程/模組	0	
	電腦及網路系統或工具	0	
	教材	0	
	舉辦之活動/競賽	0	
	研討會/工作坊	0	
	電子報、網站	0	
	計畫成果推廣之參與(閱聽)人數	0	

# 國科會補助專題研究計畫成果報告自評表

請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況、研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）、是否適合在學術期刊發表或申請專利、主要發現或其他有關價值等，作一綜合評估。

1. 請就研究內容與原計畫相符程度、達成預期目標情況作一綜合評估

達成目標

未達成目標（請說明，以 100 字為限）

實驗失敗

因故實驗中斷

其他原因

說明：

2. 研究成果在學術期刊發表或申請專利等情形：

論文： 已發表  未發表之文稿  撰寫中  無

專利： 已獲得  申請中  無

技轉： 已技轉  洽談中  無

其他：（以 100 字為限）

3. 請依學術成就、技術創新、社會影響等方面，評估研究成果之學術或應用價值（簡要敘述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性）（以 500 字為限）

本計畫之成果應算是統計學上一個重要問題之深入研究，雖然不算是突破性研究，但也算是很有意義之成果。對於統計計算之領域應該算是有意義之成果，也可以具體幫忙一些需要大量計算之研究學者。