單元 7: 接受-棄絕技巧
(課本 §4.4)

令隨機變數

$$Y \sim P(Y=j) \stackrel{\text{def}}{=} q_j, \ j=0,1,2,\ldots$$

若有一有效率的演算法可模擬 Y, 且給定另一隨機變數

$$X \sim P(X=j) \stackrel{\text{def}}{=} p_j, \ j=0,1,2,\ldots$$

問. 如何根據 Y 的模擬來模擬 X?

答. 可考慮如下的 "接受-棄絕法"
(Acceptance-Rejection Method, 簡稱 A-R 法):
設 c 爲一常數且滿足對所有的 $p_j > 0$,

$$\frac{p_j}{q_j} \le c$$

則隨機變數 X 可由如下的演算法模擬出.

演算法:

(1) 用已知的有效率演算法模擬 Y.

(2) 生成一仿隨機數 U.

(3) 若

$$U < \frac{p_Y}{cq_Y}$$

則令 $X = Y$ 且結束.

(4) 回到 (1).

接受-棄絕法的圖示如下:

$$\underset{\text{(a)}}{\boxed{\begin{array}{c}\text{開始: 生成}\\ Y \sim q_j\end{array}}} \rightarrow \boxed{\begin{array}{c}\text{生成}\\ U\end{array}} \rightarrow \boxed{\begin{array}{c}\text{是否}\\ U < \frac{p_Y}{cq_Y}?\end{array}}$$

$\xrightarrow{\text{是}}$ $X = Y$, 接受 Y

$\xrightarrow{\text{否}}$ 回到 (a), 棄絕 Y

接著, 需證明接受-棄絕法是對的, 亦即, 需證明

定理. 由接受-棄絕法所生成的隨機變數 X 滿足

$$P(X = j) = p_j, \ j = 0, 1, 2, \ldots$$

<證> 考慮執行回數, 由全機率律 (law of total probability), 對於 $j = 0, 1, 2, \ldots$, 得

$$P(X = j) = \sum_{n=1}^{\infty} P(\text{在第 } n \text{ 回接受 } j) \tag{1}$$

其中 "在第 n 回接受 j" 乃表示在第 n 回才接受 j, 前面均爲棄絕.

接著, 根據回與回之間的獨立性與同分布,

$$\begin{aligned} & P(\text{在第 } n \text{ 回接受 } j) \\ = \; & P(\text{前面 } (n-1) \text{ 回均爲棄絕}) \cdot \\ & \quad P(Y = j \text{ 且接受第 } n \text{ 回的結果}) \\ = \; & [P(\text{一回的結果爲棄絕})]^{n-1} \cdot \left(q_j \cdot \frac{p_j}{c q_j} \right) \end{aligned} \tag{2}$$

其中最後一個等號中的小括號成立乃因爲 Y 與判斷是否接受的 U 相互獨立以及各自事件發生的機率所致.

又考慮 Y 的值, 根據全機率律, 得

$$\begin{aligned} P(\text{一回的結果爲接受}) &= \sum_j P(Y = j \text{ 且接受 } j) \\ &= \sum_j q_j \cdot \frac{p_j}{c q_j} \\ &= \frac{1}{c} \sum_j p_j = \frac{1}{c} \end{aligned} \tag{3}$$

故,

$$
\begin{aligned}
P(\text{一回的結果爲棄絕}) &= 1 - P(\text{一回的結果爲接受}) \\
&= 1 - \frac{1}{c} \qquad (4)
\end{aligned}
$$

因此, 合併 (1), (2), 與 (4) 式, 得

$$
\begin{aligned}
P(X = j) &= \sum_{n=1}^{\infty} \left(1 - \frac{1}{c}\right)^{n-1} \cdot \frac{p_j}{c} \\
&= \frac{p_j}{c} \cdot \frac{1}{1 - \left(1 - \frac{1}{c}\right)} = p_j
\end{aligned}
$$

如所求.

註 1. 由 (3) 式知, 對於 $k = 1, 2, \ldots,$

$$
\begin{aligned}
& P(\text{執行回數} = k) \\
&= P(\text{前面 } (k-1) \text{ 回均棄絕且第 } k \text{ 次接受}) \\
&= \left(1 - \frac{1}{c}\right)^{k-1} \cdot \frac{1}{c}
\end{aligned}
$$

所以,

$$
\text{執行回數} \sim \text{geometric}\left(\frac{1}{c}\right)
$$

故,

$$
\text{平均執行回數} = \frac{1}{1/c} = c
$$

因此, c 取成集合

$$\left\{\frac{p_j}{q_j} : j = 0, 1, 2, \ldots\right\}$$

的<u>最小上界</u>會是一理想的選取.

註 2. $c \geq 1$. 爲何如此? 由於對所有的 j,

$$p_j \leq cq_j$$

得

$$\sum_j p_j \leq \sum_j cq_j = c\sum_j q_j$$

由於所有可能値的機率和爲 1, 由上式得

$$1 \leq c$$

得證. 因此, 由註 1 知, 當 $c \downarrow 1$ 時, 亦即, 平均執行回數 $\downarrow 1$ 時, 會愈快地得到 X. 這個結果在直觀上亦合理, 因爲當 $c \downarrow 1$ 時, 表示對所有的 j,

$$p_j \approx q_j$$

因而 Y 差不多就是 X, 故很快就接受了 Y, 而較有效率.

例 1. 令隨機變數

$$X \sim p_i = P(X = i),\ i = 1, 2, \ldots, 10$$

其中

$$
\begin{aligned}
&p_1 = 0.11, \quad && p_2 = 0.12, && p_3 = 0.09, \\
&p_4 = 0.08, && p_5 = 0.12, && p_6 = 0.10, \\
&p_7 = 0.09, && p_8 = 0.09, && p_9 = 0.10, \\
&p_{10} = 0.10.
\end{aligned}
$$

試模擬 X.

<解一> 將 p_i 由大到小排列, 接著用離散反轉換法.

<解二> 根據下述的接受-棄絕 (A-R) 法:

(1) 找一容易模擬的

$$Y \sim q_i$$

其取值爲

$$1, 2, \ldots, 10$$

(2) 求 c 滿足

$$\frac{p_i}{q_i} \leq c, \ i = 1, 2, \ldots, 10$$

(3) 以接受-棄絕的方式模擬 X.

具體的步驟如下:

(i) 令隨機變數

$$Y \sim \text{discrete unif}(10)$$

亦即,

$$Y \sim q_i = P(Y = i) = \frac{1}{10}$$

亦相當於

$$Y = \text{Int}(10U) + 1$$

其中 U 為一仿隨機數.

(ii) 令

$$\begin{aligned} c &= \max\left\{\frac{p_i}{q_i} : i = 1, 2, \ldots, 10\right\} \\ &= 10(0.12) = 1.2 \end{aligned}$$

(iii) 接受-棄絕法所對應的

演算法:

(1) 生成一仿隨機數 U_1, 且令

$$Y = \text{Int}(10U_1) + 1$$

(2) 生成另一仿隨機數 U_2.

(3) 若

$$U_2 < \frac{p_Y}{0.12}$$

則令

$$X = Y$$

且結束. 為何是 0.12? 因為

$$cq_Y = 1.2\left(\frac{1}{10}\right) = 0.12$$

(4) 回到 (1).

練習題. 將演算法寫成程式並分別求 100 個, 1000 個, 10000 個 X 值以及對應的平均執行回數. 根據前述的理論,

$$\text{平均執行回數} = c = 1.2$$

故由模擬所計算出的

$$\text{平均執行次數} \approx 1.2$$