

陳冠宇教授 / 應用數學系

隨機過程、蒙地卡羅方法、相變現象

馬可夫鏈蒙地卡羅方法(簡稱為**MCMC**)是一個被廣泛運用的隨機演算法，其目的是要針對某一特定集合上的機率分布進行取樣模擬。一般而言，被取樣的機率分布其常態化係數是無法直接計算。因此，機率統計學家透過**Metropolis-Hasting方法**模擬一個馬可夫鏈，並設定其極限分布為被取樣分布。如此一來便可透過馬可夫鏈的收斂性來逼近該機率分布。然而在時間是有限的的前提下，MCMC的定性結果並不適用於實際模擬。針對這個問題，我們可以設定一個量測收斂性的標準，讓使用者可以根據該標準訂出不同的收斂需求，該需求反映在MCMC上即為一個演算法的停止時間。停止時間可以是確定的，也可以是隨機的，但時至今日沒有一個方法可以有效且準確地推算出演算法的停止時間。

馬可夫鏈的**cutoff現象**是該隨機過程在演化時的**相變現象**。這個觀念是由Aldous和Diaconis在八零年代初期所提出，目的是要刻劃馬可夫鏈的機率分布在演化過程中的劇烈變化。簡而言之，在某個時間(**相變時間**)以前，馬可夫鏈的機率分布與極限分布的距離會處於最大值的狀態。接著在一段極短(相較於相變時間)的時間(**相變區間**)內，該距離函數會快速遞減，然後以指數速率收斂至零。當MCMC具有相變現象時，相變時間和相變區間提供了有效的演算停止時間。

MCMC演算法在其他領域的研究中也扮演了相當重要的角色，其中包含了統計物理學、資訊科學、分子生物學和金融數學等等。從跨領域研究來看，MCMC演算法的模型可以非常複雜，例如不完整隨機媒體上的隨機漫步，或是緊緻黎曼流形上的馬氏過程。針對這類的問題，演算停止時間的計算將是很有挑戰性且受到高度期待的應用問題。

以下是我們展望未來的幾個前瞻性研究主題。

- 1) **GCL(Graph connection Laplacian)算子的譜分析**
- 2) **隨機媒體上的隨機漫步**
- 3) **非同質性的馬可夫過程**

圖片:由左而右分別為(1)無相變距離函數；(2)有相變距離函數；(3)單一瓶頸效應距離函數；(4)雙瓶頸效應距離函數。

