arXiv:2601.06745v1 [stat.CO] 11 Jan 2026

吉布斯采样器谱隙团结原理向其分块与边缘化变体的推广

Xavier Mak[1] **和 James P. Hobert**[1]

[1] *Department of Statistics, University of Florida, e-mail:* xaviermak@ufl.edu; jhobert@stat.ufl.edu

摘要： 吉布斯采样器与其分块和边缘化变体之间存在谱方面的联系。本文将完整吉布斯采样器的谱隙团结原理推广至不同的循环和吉布斯步骤混合。利用这一广义团结原理，本文证明了每种循环和吉布斯步骤混合（包括分块吉布斯采样器和折叠吉布斯采样器）都能从完整吉布斯采样器继承谱隙。本文还确立了吉布斯采样器的分块与边缘化变体所对应谱之间的精确关系。通过一个例子说明，分块或折叠吉布斯采样器通常无法从另一个分块或折叠吉布斯采样器继承几何遍历性或谱隙。

关键词与短语： 交替投影、确定性扫描、几何遍历性、马尔可夫链蒙特卡罗、随机扫描、同步投影。

1. 引言

吉布斯采样器（Geman 和 Geman (1984)、Gelfand 和 Smith(1990)）是常用于从难以处理的多维概率分布中进行采样的马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）算法。吉布斯采样器采用的基本策略是，每次通过从与目标分布相关的低维条件分布中抽样，更新给定向量中的一个变量或一组变量。将吉布斯采样器的马尔可夫核视为若干较简单马尔可夫核的组合，可以看出这类逐分量采样算法的本质；这些较简单的马尔可夫核分别对应一个吉布斯步骤或更新。从这一角度看，吉布斯采样器属于一个更大的逐分量算法家族：该家族包含所有由足够多个吉布斯步骤组合而成、从而使每个坐标都得到更新的算法。通过改变吉布斯步骤的选择及其组合方式，可以构造出多种算法；其中一些在计算上可能更可行，而另一些在理论上可能更易处理。

为了更好地描述不同的算法，我们先非正式地定义一下观察这些算法时所采用的设定。（正式说明见第2节。）令$\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \times \cdots \times \mathcal{X}_K$，其中 $K \geq 2$，表示定义了我们感兴趣的概率测度 π 的状态空间。在 $L^2(\pi)$ 上，平方可积

关于 π 的函数中，每个吉布斯步骤都定义了一个正交投影P_F，投影到某个交集 F上；该交集由闭子空间 E_i 构成，其中 $i = 1$、...、 K 是关于第 i 个坐标为常数的函数子空间。这些吉布斯步骤通过循环 或混合组合：分别取吉布斯步骤的乘积或凸组合，使得所得抽样算法以正概率更新每个坐标。下面来看几个例子。

两种得到广泛实现的吉布斯采样器是确定性扫描吉布斯采样器 和随机扫描吉布斯采样器。确定性扫描吉布斯采样器每次更新一个坐标，其算子为

$$P_{E_{\rho(1)}} \cdots P_{E_{\rho(K)}},$$

其中， ρ是 $\{1, \ldots, K\}$的一个排列。随机扫描吉布斯采样器在每次迭代中随机选择一个坐标进行更新，其算子为

$$\sum_{i=1}^{K} w_i P_{E_i},$$

其中， w_1，.....， w_K是满足以下条件的正权重：$\sum_{i=1}^{K} w_i = 1$。这两种采样器的采样算法分别见算法1 和2。这两类吉布斯采样器有时统称为全量吉布斯采样器。

算法 1 对应于排列 ρ（来自 $\{1, \ldots, K\}$）的确定性扫描吉布斯采样器

0: *Input:* 当前值 $X^{(n)} = (x_{\rho 1}^{(n)}(), \ldots, x_{\rho K}^{(n)}())$。1: 抽取 $X_{\rho 1}^{(n+1)}() \sim \pi(\cdot | x_{\rho 2}^{(n)}(), \ldots, x_{\rho K}^{(n)}())$，并将观测值记为 $x_{\rho 1}^{(n+1)}()$。2: 抽取 $X_{\rho 2}^{(n+1)}() \sim \pi(\cdot | x_{\rho 1}^{(n+1)}(), x_{\rho 3}^{(n)}(), \ldots, x_{\rho K}^{(n)}())$，并将观测值记为 $x_{\rho 2}^{(n+1)}()$。...K: 抽取 $X_{\rho K}^{(n+1)}() \sim \pi(\cdot | x_{\rho 1}^{(n+1)}(), \ldots, x_{\rho K-1}^{(n+1)}())$，并将观测值记为 $x_{\rho K}^{(n+1)}()$。$K+1$: 设 $n = n + 1$。

算法 2 权重为 $w = (w_1, \ldots, w_K)$ 的随机扫描吉布斯采样器

0: *Input:* 当前值 $X^{(n)} = (x_1^{(n)}, \ldots, x_K^{(n)})$。1: 抽取一个随机变量 $\mathscr{I}$，使得 $\Pr(\mathscr{I} = k) = w_k$，其中 $k = 1, \ldots, K$，并将观测到的值记为 i。2: 抽取 $X_i^{(n+1)} \sim \pi(\cdot | x_1^{(n)}, \ldots, x_{i-1}^{(n)}, x_{i+1}^{(n)}, \ldots x_K^{(n)})$，并将观测到的值记为 $x_i^{(n+1)}$。3: 令 $X^{(n+1)} = (x_1^{(n)}, \ldots, x_{i-1}^{(n)}, x_i^{(n+1)}, x_{i+1}^{(n)}, \ldots, x_K^{(n)})$。4: 令 $n = n + 1$。

与完整吉布斯采样器不同，分块吉布斯采样器会联合更新两个或更多坐标。例如，算子为 $P_{E_1 \cap E_2} P_{E_3} \cdots P_{E_K}$的分块吉布斯采样器，其采样算法由算法3给出。吉布斯

步骤也可以组合起来，使某个坐标在所得算法的一次遍历中被更新多次；例如，若 $K = 3$，则循环$P_{E_1}P_{E_2}P_{E_1}P_{E_2}P_{E_3}$ 会在其算法的每次迭代中将前两个坐标各更新两次。此外，我们还考虑通过循环和混合坍缩吉布斯步骤构造的、以 π 边缘分布为目标的采样器。

算法3分块确定性扫描吉布斯采样器

0: *Input:* 当前值 $X^{(n)} = (x_1^{(n)}, \ldots\ldots, x_K^{(n)})$。

1: 抽取 $(X_1^{(n+1)}, X_2^{(n+1)}) \sim \pi(\cdot|x_3^{(n)}, \ldots\ldots, x_K^{(n)})$，and call the 观测值 值 $(x_1^{(n+1)}, x_2^{(n+1)})$。

2: 抽取 $X_3^{(n+1)} \sim \pi(\cdot|x_1^{(n+1)}, x_2^{(n+1)}, x_4^{(n)}, \ldots\ldots, x_K^{(n)})$，并将观测值记为 $x_3^{(n+1)}$。

$\vdots$

$K-1$: 抽取 $X_K^{(n+1)} \sim \pi(\cdot|x_1^{(n+1)}, \ldots\ldots, x_{K-1}^{(n+1)})$，并将观测值记为 $x_K^{(n+1)}$。

K: 设置 $n = n + 1$。

虽然按分块更新或边缘化变量在实践中未必总是可行，但普遍认为，分块和边缘化有助于消除马尔可夫链中不必要的自相关并加快混合（Liu (1994)、Liu、Wong 和 Kong (1994)）。不过请注意，这种策略并非万无一失：有关以高斯分布为目标分布的吉布斯采样器的例子表明，分块会导致平稳性收敛变慢，见 Liu、Wong 和 Kong (1994) 以及 Roberts 和 Sahu(1997)。

本文建立了不同循环与吉布斯步骤混合之间的谱性质关系。我们将 Chlebicka、Łatuszyński 和 Miasojedow(2025) 关于完整吉布斯采样器的一致性结果加以推广，证明对应于同一组吉布斯步骤的每个循环和混合都具有谱隙，或者都不具有谱隙。Chlebicka、Łatuszyński 和 Miasojedow (2025) 的一致性结果是循环与由 P_{E_1}、……、P_{E_K}构成的混合之间关系的一个特例：对于所有采用任意排列的确定性扫描吉布斯采样器，以及所有采用任意权重的随机扫描吉布斯采样器，是否存在谱隙的结论均一致。我们推广后的一致性原理使我们能够确立完整吉布斯采样器与吉布斯步骤的循环及混合之间如下的定性层级关系。

定理 1.1。 只要完整吉布斯采样器具有谱隙，则每个循环以及吉布斯步骤的混合（无论是否经过折叠）都具有谱隙。

证明。 该定理由定理 4.1 和推论 4.11得出。 □

定理1.1以如下方式拓展了完整吉布斯采样器所具有的谱隙团结性：只要某个分块或折叠变体没有谱隙，所有完整吉布斯采样器都没有谱隙。此外，就是否具有谱隙而言，定理1.1 表明，分块和折叠吉布斯采样器在性质上绝不会比其完整对应版本更差。此前，Liu(1994) 以及 Liu、Wong 和 Kong(1994对确定性扫描吉布斯采样器与两个相应的分块及折叠吉布斯采样器的算子范数进行了比较，从而为这一观点提供了理论依据。

我们的研究采用不同的技术，处理了范围更广的一类马尔可夫算子，并对其谱隙给出了更直接的结果。具有谱隙很有价值，因为在非常宽松的正则性条件下，谱隙的存在意味着几何遍历性。

我们还确立了吉布斯采样器的分块和边缘化变体所对应谱之间的精确关系。特别是，在存在条件独立性时，我们证明某些分块吉布斯采样器与相应的折叠吉布斯采样器具有相同的谱隙。我们通过考察这样一种情形，说明这些结果如何简化对分块吉布斯采样器的分析：其中一个分块吉布斯采样器具有谱隙，而另一个分块吉布斯采样器则没有。尽管这一点在直觉上颇具吸引力，但因此并不存在定理 1.1 在分块或折叠吉布斯采样器之间的类似结论：一个分块（相应地，折叠）吉布斯采样器通常不会从另一个分块（相应地，折叠）吉布斯采样器那里继承谱隙。事实上，我们的例子表明，以不同方式进行分块或边缘化时，几何遍历性不一定得以保持。

Amit Amit (1991), Diaconis、Khare 和 Saloff-Coste (2010年),Rosenthal 和 Rosenthal (2015)，以及 Chlebicka, Łatuszyński 和 Miasojedow(2025) 也采用了这种方法，将 L^2-设置中的吉布斯采样器作为由正交投影组成的算子进行研究。然而，其中的吉布斯采样器并未与其分块或折叠变体结合起来考察。

对于双分量吉布斯采样器这一特殊情形，Qin 和 Jones (2022) 建立了确定性扫描吉布斯采样器与随机扫描吉布斯采样器的 L^2-收敛速率之间精确的定量关系：作者证明，确定性扫描吉布斯采样器始终更快。他们的结果利用了双分量确定性扫描吉布斯采样器与其可逆边缘链之间的联系。当分量数超过两个时，确定性扫描吉布斯采样器的边缘链不一定可逆，因此要建立类似的定量结果仍颇具挑战。此外，当分量数超过两个时，确定性扫描吉布斯采样器与随机扫描吉布斯采样器在收敛时间方面也不存在普遍最优的选择：Roberts 和 Rosenthal(2015) 和He 等人(2016) 给出了相关示例，并提供了一些启发性指导，说明在何种情况下其中一种可能优于另一种。

本文其余部分安排如下。第2 节介绍由吉布斯步骤及其组合所定义的马尔可夫算子的理论背景。第3 节建立关于吉布斯步骤的循环与混合的广义团结原理。第 4 节探讨完整吉布斯采样器及其分块和边缘化变体所对应的谱之间的不同联系。特别是，证明定理 1.1 所需的结果将在本节中建立。第 5 节给出一个例子，表明一般而言，分块吉布斯采样器和折叠吉布斯采样器均不具有谱隙的协同性性质。一些技术细节放在附录中。

2. 预备知识

2.1. 马尔可夫算子

固定一个整数 $K \geq 2$，对于任意正整数 n，令 $[n] = \{1, \ldots, n\}$。对于$k \in [K]$，设 $\mathcal{X}_k$ 是一个完备可分度量空间，并配备其博雷尔σ-代数 $\mathscr{B}(\mathcal{X}_k)$。此外，令 $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \times \cdots \times \mathcal{X}_K$表示相应的$K$重乘积空间，并配备其博雷尔 σ-代数 $\mathscr{B}(\mathcal{X})$。注意， $\mathcal{X}$ 本身也是一个完备可分度量空间。固定一个定义在 $(\mathcal{X}, \mathscr{B}(\mathcal{X}))$ 上的博雷尔概率测度 π，并令 $L^2(\pi)$ 表示由可测函数 $f\colon \mathcal{X} \to \mathbb{C}$ 满足 $\int_{\mathcal{X}} |f(x)|^2 \, \pi(dx) < \infty$ 所构成的希尔伯特空间。通常，将彼此 π-几乎处处相等的函数视为同一函数，而 $L^2(\pi)$ 上的内积定义为 $\langle f, g \rangle = \int_{\mathcal{X}} f(x) g(x) \, \pi(dx)$。

从 $L^2(\pi)$到自身的有界线性算子空间记为 $B(L^2(\pi))$。定义 $\Pi \in B(L^2(\pi))$如下：对 $f \in L^2(\pi)$，有 $\Pi f \equiv \pi f := \int_{\mathcal{X}} f(x) \, \pi(dx)$。算子$\Pi$将每个 $f \in L^2(\pi)$映射为值恒等于 πf的常值函数。注意， Π是一个正交投影；也就是说， Π 是幂等且自伴的。幂等性显而易见；由于对所有f， $g \in L^2(\pi)$， $\langle \Pi f, \, g \rangle = (\pi f)(\pi g) = \langle f, \, \Pi g \rangle$ 成立，因此自伴性也成立。

当对所有$A \in \mathscr{B}(\mathcal{X})$，都有 $\pi(A) = \int_{\mathcal{X}} Q(x, A) \, \pi(dx)$时，定义在 $\mathcal{X} \times \mathscr{B}(\mathcal{X})$上的马尔可夫核 $Q(x, dy)$称概率测度 π 为其不变（或平稳）概率测度。（直到第5节才需要引入不可约性或非周期性等其他标准性质。）具有不变概率测度 π 的马尔可夫核 $Q(x, dy)$定义了相应的马尔可夫算子$Q \in B(L^2(\pi))$，其定义为

$$[Qf](x) = \int_{\mathcal{X}} f(y) \, Q(x, dy), \quad x \in \mathcal{X},$$

对于 $f \in L^2(\pi)$。由 π 对 $Q(x, \, dy)$ 的不变性可知，算子 Q 满足 $\Pi Q = \Pi$。若两个马尔可夫核 $Q_1(x, \, dy)$ 和 $Q_2(x, \, dy)$ 对所有 $A \in \mathscr{B}(\mathcal{X})$，其对应函数 $x \mapsto Q_1(x, A)$ 和 $x \mapsto Q_2(x, \, A)$ 均在 π-几乎处处相等，则将这两个核视为相同。

算子 $Q \in B(L^2(\pi))$ 是马尔可夫算子，当且仅当 $Q\mathbf{1} = \mathbf{1}$（其中 $\mathbf{1}$ 是取值恒为 1 的常值函数），并且只要 $f \geq 0$，就有 $Qf \geq 0$。任何满足 $\Pi Q = \Pi$ 的马尔可夫算子 Q 都定义了相应的马尔可夫核，其定义为：对所有 $(x, A) \in \mathcal{X} \times \mathscr{B}(\mathcal{X})$，$Q(x, A) = (Q\mathbf{1}_A)(x)$，其中 $\mathbf{1}_A$ 表示满足以下条件的示性函数：若 $x \in A$，则 $\mathbf{1}_A(x) = 1$，否则为 0。由于 $\Pi Q = \Pi$，相应的核 $Q(x, dy)$ 具有不变概率测度 π。（例如，关于马尔可夫算子的详细介绍及更一般的处理方法，请参阅 Bakry、Gentil 和 Ledoux（2014）。）

鉴于不变概率测度为 π 的马尔可夫核 $Q(x, \, dy)$ 与满足 $\Pi Q = \Pi$ 的马尔可夫算子 Q 之间存在这种一一对应关系，为简洁起见，我们有时会用同一个名称指代核及其对应的算子。遇到这种情况时，根据上下文即可清楚地判断所指的是哪个对象。

2.2. 吉布斯步骤

任取 $[K]$ 的一个非空真子集 I，并记 $I=\{i_1,\dots i_n\}$ 和 $[K]\backslash I=\{j_1,\dots,j_{K-n}\}$，其中 $i_1\le\cdots\le i_n$ 和 $j_1\le\cdots\le j_{K-n}$。定义 $\mathcal{X}_I=\bigtimes_{\ell=1}^{n}\mathcal{X}_{i_\ell}$ 和 $\mathcal{X}_{-I}=\bigtimes_{\ell=1}^{K-n}\mathcal{X}_{j_\ell}$。对于任意 $x=(x_1,\dots,x_K)\in\mathcal{X}$，令 $x_I=(x_{i_1},\dots,x_{i_n})$ 和 $x_{-I}=(x_{j_1},\dots,x_{j_{K-n}})$ 分别表示 x 在坐标 $\mathcal{X}_I$ 和 $\mathcal{X}_{-I}$ 上的投影。作为简写，有时将点 x 记作 (x_I,x_{-I})。当 $I=\{i\}$ 对某个 $i\in[K]$ 成立时，分别用 $\mathcal{X}_i$ 和 $\mathcal{X}_{-i}$ 代替 $\mathcal{X}_{\{i\}}$ 和 $\mathcal{X}_{-\{i\}}$，并分别用 x_i 和 x_{-i} 代替 $x_{\{i\}}$ 和 $x_{-\{i\}}$。概率测度 $\pi(\cdot|x_{-I})$ 是 $X_I|X_{-I}=x_{-I}$ 的分布，其中 $(X_1,\dots,X_K)$ 是一个取值于 $\mathcal{X}$、分布为 π 的随机元素。

对于每个 $i\in[K]$，定义 E_i 为 $L^2(\pi)$ 中关于第 i 个坐标保持不变的函数所构成的闭（线性）子空间；即，当且仅当 $f\in E_i$

$$f(x_1,\dots,x_{i-1},x_i,x_{i+1},\dots,x_K)=f(x_1,\dots,x_{i-1},x_i',x_{i+1},\dots,x_K)$$

对于所有 $x_i,\ x_i'\in\mathcal{X}_i$ 和 $x_{-i}\in\mathcal{X}_{-i}$。常值函数构成的闭子空间记为 $E:=\bigcap_{i=1}^{K}E_i$。由于正交投影由其值域唯一确定，因此投影到 E 上的投影恰好是算子 Π。

我们将投影到 $F=\bigcap_{i\in I}E_i$ 上的正交投影 $P_F\in B(L^2(\pi))$ 称为 吉布斯步骤。其规则可写为

$$(P_Ff)(x)=\int_{\mathcal{X}_I}f(x_I',x_{-I})\,\pi(dx_I'|x_{-I}),\quad x\in\mathcal{X},\tag{1}$$

对于 $f\in L^2(\pi)$。事实上，鉴于（1），P_F 的幂等性显而易见，而自伴性成立，因为

$$\begin{aligned}
&\langle P_Ff,g\rangle\\
&=\int_{\mathcal{X}_I\times\mathcal{X}_{-I}}(P_Ff)(x_I,x_{-I})\,\overline{g(x_I,x_{-I})}\,\pi(dx_I,dx_{-I})\\
&\quad=\int_{\mathcal{X}_I\times\mathcal{X}_{-I}}\left(\int_{\mathcal{X}_I}f(x_I',x_{-I})\,\pi(dx_I'|x_{-I})\right)\overline{g(x_I,x_{-I})}\,\pi(dx_I,dx_{-I})\\
&\quad=\int_{\mathcal{X}_{-I}}\left[\int_{\mathcal{X}_I}\left(\int_{\mathcal{X}_I}f(x_I',x_{-I})\,\pi(dx_I'|x_{-I})\right)\overline{g(x_I,x_{-I})}\,\pi(dx_I|x_{-I})\right]\pi(dx_{-I})\\
&\quad=\int_{\mathcal{X}_{-I}}\left[\int_{\mathcal{X}_I}f(x_I',x_{-I})\left(\int_{\mathcal{X}_I}\overline{g(x_I,x_{-I})}\,\pi(dx_I|x_{-I})\right)\pi(dx_I'|x_{-I})\right]\pi(dx_{-I})\\
&\quad=\int_{\mathcal{X}_{-I}}\left[\int_{\mathcal{X}_I}f(x_I',x_{-I})\overline{(P_Fg)(x_I',x_{-I})}\,\pi(dx_I'|x_{-I})\right]\pi(dx_{-I})\\
&\quad=\int_{\mathcal{X}_I\times\mathcal{X}_{-I}}f(x_I',x_{-I})\overline{(P_Fg)(x_I',x_{-I})}\,\pi(dx_I',dx_{-I})\\
&\quad=\langle f,P_Fg\rangle
\end{aligned}$$

对于所有 f, $g \in L^2(\pi)$。此外, $\Pi P_F = \Pi$ 因为

$$\begin{aligned}(\Pi P_F)(f) &\equiv \int_{\mathcal{X}_I \times \mathcal{X}_{-I}} (P_F f)(x_I, x_{-I})\, \pi(dx_I, dx_{-I}) \\ &= \int_{\mathcal{X}_I \times \mathcal{X}_{-I}} \left[\int_{\mathcal{X}_I} f(x'_I, x_{-I})\, \pi(dx'_I | x_{-I}) \right] \pi(dx_I, dx_{-I}) \\ &= \int_{\mathcal{X}_{-I}} \left[\int_{\mathcal{X}_I} f(x'_I, x_{-I})\, \pi(dx'_I | x_{-I}) \right] \pi(dx_{-I}) \\ &= \int_{\mathcal{X}_I \times \mathcal{X}_{-I}} f(x'_I, x_{-I}) \pi(dx'_I, x_{-I}) \\ &\equiv \Pi f\end{aligned}$$

对于所有 $f \in L^2(\pi)$。

由于 P_F 是满足 $\Pi P_F = \Pi$的马尔可夫算子，它定义了一个马尔可夫核，由 $P_F(x, A) = (P_F \mathbf{1}_A)(x)$ 给出，其不变概率测度为 π。由此得到的采样算法从给定点 $x = (x_1, \ldots\ldots, x_K)$ 出发，通过使用条件分布$\pi(\cdot | x_{-I})$更新索引属于 I 的坐标。由于单个吉布斯步骤不可能更新所有坐标（因为 I 是 $[K]$的真子集），因此必须将多个吉布斯步骤组合起来，才能形成实用的采样算法。下面讨论如何构造这些组合。

2.3. 吉布斯步骤的循环与混合

吉布斯步骤是我们构造采样器时所使用的基本构件，目标分布为π。由于每个吉布斯步骤都定义了一个不变概率测度为 π的核，因此吉布斯步骤的乘积和凸组合也具有这一性质。受Tierney (1994) 中用语的启发，只要相应的采样算法更新每个坐标的概率都大于零，我们就分别称这些乘积和凸组合为吉布斯步骤的循环和混合。

准确地说，对于任意整数 $g \geq 2$, 令

$$\mathscr{S}_g = \left\{ (w_1, \ldots, w_g) \in (0,1)^g : \sum_{d=1}^{g} w_d = 1 \right\}. \tag{2}$$

取 $[K]$ 的任意非空真子集 I_1、……、I_g，使其满足 $\bigcup_{d=1}^{g} I_d = [K]$，并令 $F_d = \bigcap_{i \in I_d} E_i$（$d \in [g]$），若某个算子具有形式 $P_{F_1} \cdots P_{F_g}$，则称其为吉布斯步骤的循环；若某个算子具有形式 $\sum_{d=1}^{g} w_d P_{F_d}$（其中权重 $(w_1$、……、$w_g) \in \mathscr{S}_g$ 任取），则称其为吉布斯步骤的混合。

以下四类吉布斯采样器通常会被采用和研究，因此我们特别提及它们的马尔可夫算子。

1. 一个确定性扫描吉布斯采样器的马尔可夫算子为

$$P_{E_{\rho(1)}} \cdots P_{E_{\rho(K)}}, \tag{3}$$

其中 ρ 是 $[K]$的任意划分。

2. A分块确定性扫描吉布斯采样器 的马尔可夫算子为

$$P_{F_1} \cdots P_{F_g}, \tag{4}$$

其中，$\{I_1, \ldots, I_g\}$ 构成 $[K]$ 的一个划分，具有 $2 \leq g < K$ 和 $F_d = \bigcap_{i \in I_d} E_i$，适用于 $d \in [g]$。

3. 一个随机扫描吉布斯采样器的马尔可夫算子为

$$\sum_{i=1}^{K} w_i P_{E_i}, \tag{5}$$

其中（w_1、……、w_K）$\in \mathscr{S}_K$。

4. 一个分块随机扫描吉布斯采样器的马尔可夫算子为

$$\sum_{d=1}^{g} v_d P_{F_d}, \tag{6}$$

其中（v_1、……、v_g）$\in \mathscr{S}_g$，并且 $\{I_1, \ldots, I_g\}$ 构成 $[K]$的一个划分，具有 $2 \leq g < K$ 和$F_d = \bigcap_{i \in I_d} E_i$，适用于 $d \in [g]$。

如引言中所述，吉布斯采样器有时称为全，当其算子由（3）或（5）给出时。

简言之，吉布斯采样器是吉布斯步骤循环和混合的特殊情形，其中集合 I_1、…、I_g的选择使其构成$[K]$的一个划分。一般而言，无须作此限制。例如，如果存在某个坐标 i，使得对于 $x_{-i} \in \mathcal{X}_{-i}$，从 $\pi(\cdot|x_{-i})$中抽样的计算成本低于从其他条件分布中抽样的成本，那么在算法的一次遍历中多次更新坐标 i 的吉布斯步骤混合可能颇具吸引力。

吉布斯步骤循环也与部分塌缩吉布斯采样器密切相关，该采样器由van Dyk 和 Park（2008年）提出。某些吉布斯步骤循环会产生这样一种算法，其中某些中间量不作为条件。删去这些量后，便得到部分塌缩吉布斯采样器的采样算法。本文不再进一步探讨这种特定联系。

3. 谱隙的广义团结原理

设 H 是任意非零复希尔伯特空间。记 $B(H)$ 为有界线性算子 $T\colon H \to H$ 的代数，其范数定义为 $\|T\| = \inf\{C \geq 0\colon \|Th\| \leq C\|h\| \text{ 对所有 } h \in H\}$。对于任意 $T \in B(H)$，记 $\sigma(T) = \{\lambda \in \mathbb{C}\colon T - \lambda \mathrm{Id} \text{ 不可逆}\}$ 为 T 的谱，其中 Id 表示恒等算子；记 $r(T) = \sup\{|\lambda|\colon \lambda \in \sigma(T)\}$ 为 T 的谱半径。对于任意闭子空间 S，记 H 到 S 的正交投影为 P_S，记 S 的正交补为 $S^{\perp}$。回顾一下，对于任意自伴算子 $T \in B(H)$，有 $r(T) = \|T\|$。

若马尔可夫算子 Q 满足 $\Pi Q = \Pi$，且 $r(Q - \Pi) < 1$，则称其具有谱隙，此时谱隙为 $1 - r(Q - \Pi)$。（等价定义见备注 4.10。）注意，对所有 $n \geq 1$，都有 $Q^n - \Pi = (Q - \Pi)^n$，因为 $\Pi Q = \Pi = Q\Pi$ 且 $\Pi^2 = \Pi$。粗略地说，Q 的谱隙越大，序列 $(Q^n)_{n\geq 1}$ 在范数意义下收敛到 Π 的速度就越快。当 Q 为自伴算子，因此对所有 $n \geq 1$ 都有 $\|(Q - \Pi)^n\| = \|Q - \Pi\|^n$ 时，这种关系精确成立，因为

$$\|Q^n - \Pi\| = \|(Q - \Pi)^n\| = \|Q - \Pi\|^n = r(Q - \Pi)^n, \quad n \geq 1.$$

即使 Q 不一定是自伴的，这种关系仍在渐近意义下成立，因为

$$\lim_{n\to\infty} \|Q^n - \Pi\|^{1/n} = r(Q - \Pi)$$

根据谱半径公式（例如参见 Murphy (1990)，定理 1.2.7）。在温和的正则性条件下，谱隙也意味着几何遍历性：以指数快速的速度收敛到平稳分布（以全变差距离衡量）。（第5.1节将更详细地回顾几何遍历性。）

根据谱半径公式，Q 有谱隙，当且仅当序列 $(Q^n)_{n\geq 1}$ 在范数下收敛到 Π。因此，要理解循环和吉布斯步骤混合何时具有谱隙，可以等价地提出范数收敛何时发生这一问题。对此问题已有以下更一般框架下的研究：给定闭真子空间 M_1、……、M_N，且 $M := \bigcap_{i=1}^N M_i$，可以考察序列 $((P_{M_1} \cdots P_{M_N})^n)_{n\geq 1}$ 和 $((\sum_{i=1}^N w_i P_{M_i})^n)_{n\geq 1}$（其中 $(w_1, \ldots, w_N) \in \mathscr{S}_N$）何时在范数下收敛到 P_M。对于由投影的乘积的幂生成的序列，Badea、Grivaux 和 M¨uller（2011年）建立了一系列范数收敛的等价条件。以下引理仅陈述 Badea、Grivaux 和 M¨uller（2011年）的定理 4.1 中与我们的目的相关的部分。

引理 3.1。设 $N \geq 2$。设 $M_1, \ldots, M_N$ 是 H 的闭真子空间，其交集为 $M = \bigcap_{i=1}^N M_i$。以下断言等价：

1. $1 \notin \sigma(P_{M_1} \cdots P_{M_N} - P_M)$；
2. $\|P_{M_1} \cdots P_{M_N} - P_M\| < 1$；
3. $\|N^{-1} \sum_{i=1}^N P_{M_i} - P_M\| < 1$。

对于任意整数 $g \geq 2$，令 $\mathscr{P}_g$ 表示 $[g]$ 的所有置换构成的集合。由于 $N^{-1} \sum_{i=1}^N P_{M_i} = N^{-1} \sum_{i=1}^N P_{M_{\rho(i)}}$ 对所有 $\rho \in \mathscr{P}_N$ 均成立，引理 3.1 立即推出：对某个置换 $\|P_{M_{\rho(1)}} \cdots P_{M_{\rho(N)}} - P_M\| < 1$，当且仅当 $\rho \in \mathscr{P}_N$ 对每个置换 $\|P_{M_{\rho'(1)}} \cdots P_{M_{\rho'(N)}} - P_M\| < 1$ 均成立。以下引理表明，对于 $\rho' \in \mathscr{P}_N$，…，P_{M_1} 的凸组合，也有类似结论。证明思路基本沿用了 *Chlebicka*、*Latuszyński* 和 *Miasojedow*（*2025*）证明引理 *3.3* 的方法（以及 *Jones*、*Roberts* 和 *Rosenthal*（*2014*）的命题 *2*），为完整起见，证明见附录 A 。

引理 3.2。设 $N \geq 2$。设 M_1、…、M_N 是 H 的闭真子空间，其交集为 $M = \bigcap_{i=1}^N M_i$。以下命题等价：

1. $\left\|\sum_{i=1}^N w_i P_{M_i} - P_M\right\| < 1$ *for some* $(w_1, \ldots, w_N) \in \mathscr{S}_N$;
2. $\left\|\sum_{i=1}^N w_i' P_{M_i} - P_M\right\| < 1$ *for all* $(w_1', \ldots, w_N') \in \mathscr{S}_N$.

作为引理 3.1 和 3.2的直接推论，以下定理表明，由 P_{M_1}、...、 P_{M_N}的乘积或凸组合的幂生成的每个序列都收敛到 P_M，当且仅当其中一个这样的序列收敛到 P_M。

定理 3.3。 设 $N \geq 2$。设 M_1、.....、 M_N 是 H 的闭真子空间，其交集为 $M = \bigcap_{i=1}^N M_i$。以下断言等价:

1. 存在一个排列 $\rho \in \mathscr{P}_N$ 或一组权重 $(w_1$、.....、 $w_N) \in \mathscr{S}_N$ ，使得

$$1 \notin \sigma(P_{M_{\rho(1)}} \cdots P_{M_{\rho(N)}} - P_M) \text{ or } \|P_{M_{\rho(1)}} \cdots P_{M_{\rho(N)}} - P_M\| < 1 \text{ or } \left\|\sum_{i=1}^N w_i P_{M_i} - P_M\right\| < 1.$$

2. 每一个排列 $\rho' \in \mathscr{P}_N$ 以及每一组权重 $(w_1'$、.....、 $w_N') \in \mathscr{S}_N$ 都满足

$$1 \notin \sigma(P_{M_{\rho'(1)}} \cdots P_{M_{\rho'(N)}} - P_M) \text{ and } \|P_{M_{\rho'(1)}} \cdots P_{M_{\rho'(N)}} - P_M\| < 1 \text{ and } \left\|\sum_{i=1}^N w_i' P_{M_i} - P_M\right\| < 1.$$

备注 3.4。 定理 3.3 对任意复希尔伯特空间均成立（不仅限于$L^2(\pi)$）。此外，正如我们现在将要说明的，它给出了一个关于一类（序列）算子收敛速率的一般一致性结果，这些算子都逐点收敛于 P_M。

对于任意 $\rho \in \mathscr{P}_N$ 和任意 $w =$（w_1、.....、 w_N） $\in \mathscr{S}_N$，令 $T_\rho = P_{M_{\rho(1)}} \cdots P_{M_{\rho(n)}}$和 $T_w = \sum_{i=1}^N w_i P_{M_i}$。对于所有 $h \in H$，众所周知，lim $_{n\to\infty} T_\rho^n h = P_M h$（von Neumann（1949年）、Halperin（1962年））以及 li m$_{n\to\infty} T_w^n h = P_M h$（Lapidus（1981年）、Reich（1983年））。由此得到的算法分别称为“交替投影法”和“同步投影法”，它们提供了一种在 H 中从 M 找到某一点的最佳逼近的方法。关于前一种算法在数学不同领域中的诸多应用（不限于马尔可夫链蒙特卡罗领域），请参见 Deutsch（1992年）的综述。

令 T 表示 T_ρ 或 T_w。上述两种算法的收敛速度存在二分法（Deutsch 和 Hundal (2010年)）：要么（T^n）$_{n\geq 1}$ 收敛到 P_M 的速度是指数快速的，也就是说，存在一个常数 $\rho \in [0, 1)$ 和一个函数 C： $H \to (0, \infty)$，使得

$$\|T^n h - P_M h\| \leq C(h)\rho^n, \quad n \geq 1,$$

对于所有 $h \in H$，或者收敛任意缓慢。Badea、Grivaux 和 M¨uller （2011年）给出了任意慢收敛的多种刻画。

定理 3.3 表明，这种二分法实际上属于一个更大的二分法，涉及 $\mathscr{T}$ 中的所有算子$= \{T_\rho : \ \rho \in \mathscr{P}_N\} \cup \{T_w : \ w \in \mathscr{S}_N\}$：要么，$\mathscr{T}$ 中算子的幂所生成的每个序列都指数快速收敛，要么， $\mathscr{T}$ 中算子的幂所生成的每个序列都任意缓慢收敛。

现在我们回到这样一个问题：吉布斯步骤的循环和混合何时具有谱隙。回顾一下，由于任意吉布斯步骤混合 Q_{mix} 都是自伴的， Q_{mix} 具有谱隙当且仅当 $\|Q_{\text{mix}} - \Pi\| < 1$。定理3.3 表明，对于吉布斯步骤循环也有这样的等价关系；此外，对于对应于同一组吉布斯步骤的所有循环和混合，这些条件必须同时成立。

推论 3.5。 设 $I_1, \ldots, I_g$ 是 $[K]$ 的非空真子集，且满足$\bigcup_{d=1}^g I_d = [K]$，并令 $F_d = \bigcap_{i \in I_d} E_i$ 对于 $d \in [g]$。那么以下断言等价：

1. 存在一个排列 $\rho \in \mathscr{P}_g$，使得 $P_{F_{\rho(1)}} \cdots P_{F_{\rho(g)}}$ 具有谱隙。 *2.* 存在一组权重 $(w_1, \ldots, w_g) \in \mathscr{S}_g$，使得 $\sum_{d=1}^g w_d P_{F_d}$ 具有谱隙。 *3.* 存在一个排列 $\rho \in \mathscr{P}_g$，使得$\|P_{F_{\rho(1)}} \cdots P_{F_{\rho(g)}} - \Pi\| < 1$。 *4.* 对每个排列 $\rho' \in \mathscr{P}_g$，循环 $P_{F_{\rho'(1)}} \cdots P_{F_{\rho'(g)}}$ 都具有谱隙。 *5.* 对每组权重 $(w'_1, \ldots, w'_N) \in \mathscr{S}_g$，混合 $\sum_{d=1}^g w'_d P_{F_d}$ 都具有谱隙。 *6.* 对每个排列 $\rho' \in \mathscr{P}_g$，都有 $\|P_{F_{\rho'(1)}} \cdots P_{F_{\rho'(g)}} - \Pi\| < 1$。

证明。根据定义，$\bigcap_{d=1}^g F_d = E$ 和 $P_E = \Pi$。若存在一个置换 $\rho \in \mathscr{P}_g$，使得 $r(P_{F_{\rho(1)}} \cdots P_{F_{\rho(g)}} - \Pi) < 1$，则有 $1 \notin \sigma(P_{F_{\rho(1)}} \cdots P_{F_{\rho(g)}} - \Pi)$，而根据定理 3.3，这当且仅当 $\|P_{F_{\rho(1)}} \cdots P_{F_{\rho(g)}} - \Pi\| < 1$ 成立。反向结论显然，因为对于任意 $T \in B(H)$，都有 $r(T) \leq \|T\|$。因此，断言 1 和 3 等价。由于根据自伴性，对于任意 $(w_1, \ldots, w_g) \in \mathscr{S}_g$，都有 $r(\sum_{d=1}^g w_d P_{F_d} - \Pi) = \|\sum_{d=1}^g w_d P_{F_d} - \Pi\|$，由定理 3.3 可知，断言 2 和 3 等价。

这就证明了断言1、2和3等价。类似的论证可证明断言4、5和6等价。最后应用定理3.3 可得断言3 与6等价。证毕。

□

推论 3.5 推广了 定理 1.1 中提出的谱隙团结原理，该定理见 Chlebicka, Łatuszyński 和 Miasojedow(2025)。事实上，Chlebicka, Łatuszyński 和 Miasojedow(2025) 的一致性结果是推论 3.5 在 $g = K$ 且 $F_d = E_d$ 对 $d \in [g]$时的特例。此外，推论 3.5 的证明比他们给出的证明更简单：无需使用 Badea、Grivaux 和 Müller 研究的 Friedrichs 角或倾斜角等几何量（(2011年）。

4. 从完整吉布斯采样器继承谱隙

4.1. 循环与吉布斯步骤混合的继承

除了推论 3.5所确立的循环和吉布斯步骤混合的谱隙广义团结原理之外，我们还考虑这样一种情形：对应于某种吉布斯步骤选择的一族循环和混合是否存在谱隙，会影响对应于另一种吉布斯步骤选择的另一族循环和混合是否存在谱隙。这一问题源于以下已知现象：当完整吉布斯采样器（其算子由（3）或（5）给出）具有谱隙时，分块吉布斯采样器的谱隙未必更大。例如，若 $K = 3$，则可能出现 $r(P_{E_1}P_{E_2}P_{E_3} - \Pi) < r(P_{E_1}P_{E_2\cap E_3} - \Pi)$。关于以三元正态分布为目标分布的吉布斯采样器中这一情形的例子，参见 Liu、Wong 和 Kong (1994)，示例 3。这一现象令人担忧，极端情形或许会发生：完整吉布斯采样器具有谱隙，而某个分块版本却没有。正如下文定理所证明的，这种情形绝不会发生。每个循环和吉布斯步骤混合都能从完整吉布斯采样器继承谱隙。

定理 4.1. 如果完整吉布斯采样器具有谱隙（或者等价地，如果每个完整吉布斯采样器都具有谱隙），那么每个循环和吉布斯步骤混合都具有谱隙。

证明定理 4.1 时会用到以下引理。

引理 4.2. 设 $N \geq 2$。设 $M_1, \ldots, M_N$ 是复希尔伯特空间 H 的闭子空间，其交集为 $M = \bigcap_{i=1}^{N} M_i$。对于所有 $T \in B(H)$，

$$\|P_M T\| \leq \|P_{M_1} \cdots P_{M_N} T\|.$$

证明. </style}当 $M = \{0\}$ 时，结论显然成立，因此设 $M \neq \{0\}$，此时 $\|P_M\| = 1$。注意到 $P_M = P_{M_N} \cdots P_{M_1} P_M$，故通过取伴随算子可得 $P_M = P_M P_{M_1} \cdots P_{M_N}$。对于所有 $h \in H$，

$$\begin{aligned}\|P_M T h\| &= \|P_M P_{M_1} \cdots P_{M_N} T h\| \\ &\leq \|P_M P_{M_1} \cdots P_{M_N} T\| \|h\| \\ &\leq \|P_{M_1} \cdots P_{M_N} T\| \|h\|,\end{aligned}$$

其中第二个不等式由算子范数的次乘性得出。证毕。

□

定理 *4.1* 的证明。 任取非空真子集 $I_1, \ldots, I_g$属于 $[K]$ $\bigcup_{d=1}^{g} I_d = [K]$ $d \in [g]$ $F_d = \bigcap_{i\in I_d} E_i$ $T_d =$ 且满足 $\prod_{i\in I_d} P_{E_i}$ 3 5, $\|P_{F_1} \cdots P_{F_g} - \Pi\| < 1$ 条件。对于 ，令 ，并令 。根据推论 。只需证明 。由引理 4.2，

$$\begin{aligned}\left\|P_{F_1} \cdots P_{F_g} - \Pi\right\| &= \left\|P_{F_1}\left(P_{F_2} \cdots P_{F_g} - \Pi\right)\right\| \\ &\leq \left\|T_1\left(P_{F_2} \cdots P_{F_g} - \Pi\right)\right\| \\ &= \left\|T_1 P_{F_2} \cdots P_{F_g} - \Pi\right\|.\end{aligned}$$

因此，$\|P_{F_1}\cdots P_{F_g}-\Pi\|<1$若 $\|T_1P_{F_2}\cdots P_{F_g}-\Pi\|<1$。定理 3.3 表明 $\|T_1P_{F_2}\cdots P_{F_g}-\Pi\|<1$当且仅当 $\|P_{F_2}T_1P_{F_3}\cdots P_{F_g}-\Pi\|<1$。再次应用引理 4.2 可得

$$\begin{aligned}\|P_{F_2}T_1P_{F_3}\cdots P_{F_g}-\Pi\| &= \|P_{F_2}(T_1P_{F_3}\cdots P_{F_g}-\Pi)\|\\ &\le \|T_2(T_1P_{F_3}\cdots P_{F_g}-\Pi)\|\\ &= \|T_2T_1P_{F_3}\cdots P_{F_g}-\Pi\|.\end{aligned}$$

因此，$\|P_{F_1}\cdots P_{F_g}-\Pi\|<1$如果 $\|T_2T_1P_{F_3}\cdots P_{F_g}-\Pi\|<1$。以此类推，可得 $\|P_{F_1}\cdots P_{F_g}-\Pi\|<1$如果 $\|T_g\cdots T_1-\Pi\|<1$。注意到 $T_g\cdots T_1$是由 P_{E_1}、.....、P_{E_K}构成的乘积，其中某些投影可能会重复出现。因此，通过一个将相同投影排列在一起的排列，根据定理3.3可得 $\|T_g\cdots T_1-\Pi\|<1$当且仅当 $\|P_{E_1}\cdots P_{E_K}-\Pi\|<1$，而这由假设成立。定理得证。

□

在第 4 章开头的讨论中，我们观察到 $P_{F_1}\cdots P_{F_g}$和 $P_{F'_1}\cdots P_{F'_g}$这两个吉布斯步骤循环通常可能不满足

$$r(P_{F_1}\cdots P_{F_g}-\Pi)\le r(P_{F'_1}\cdots P_{F'_g}-\Pi)$$

即使 $F_d\subseteq F'_d$对所有 $d\in[g]$都成立。（回想一下 Liu、Wong 和 Kong (1994) 中关于 $P_{E_1}P_{E_2\cap E_3}=P_{E_1}P_{E_2\cap E_3}P_{E_2\cap E_3}$ 和 $P_{E_1}P_{E_2}P_{E_3}$的例子。）然而，我们将在下述结果中证明，只要 $F_d\subseteq F'_d$对所有 $d\in[g]$都成立，$\sum_{d=1}^g w_dP_{F_d}$和$\sum_{d=1}^g w_dP_{F'_d}$这两个吉布斯步骤混合的谱隙之间就存在这样的大小关系。这为选择权重提供了一种方法，可用于构造谱隙至少与原混合相同的吉布斯步骤混合分块版本。例如，当

$$r\ \ 1/4\ P_{E_1}+\ 1/2\ P_{E_2\cap E_3}+\ 1/4\ P_{E_4}-\Pi\ \le(()()())$$

$K=4$

$r(\sum_{i=1}^4(1/4)P_{E_i}-\Pi$时。

命题 4.3。设 $\sum_{d=1}^g w_dP_{F_d}$和 $\sum_{d=1}^g w_dP_{F'_d}$是两个吉布斯步骤混合，且对每个 $d\in[g]$都有 $F_d\subseteq F'_d$。那么，

$$r\left(\sum_{d=1}^g w_dP_{F_d}-\Pi\right)\le r\left(\sum_{d=1}^g w_dP_{F'_d}-\Pi\right). \tag{7}$$

证明。回顾复希尔伯特空间 H 上正算子的以下事实。对于任意两个自伴算子 T_1、$T_2\in B(H)$，其中 H是复希尔伯特空间，若 T_2-T_1 满足 $\langle(T_2-T_1)x$，且对所有 $x\in H$ 都有 $x\rangle\ge0$，则 T_2-T_1 为正算子，此时记作 $T_1\le T_2$。正算子的正系数线性组合仍为正算子。若 $0\le T_1\le T_2$，则 $\|T_1\|\le\|T_2\|$。对于 H 的任意两个闭子空间 S_1 和 S_2，当且仅当 $S_1\subseteq S_2$时，$P_{S_1}\le P_{S_2}$。（更多细节参见 Murphy (1990)，第 2 章。）

由于对于每个 $d\in[g]$，$E\subseteq F_d$ 和 $E\subseteq F'_d$，算子 $\sum_{d=1}^g w_dP_{F_d}-\Pi=\sum_{d=1}^g w_d($ $P_{F_d}-\Pi)$ 和 $\sum_{d=1}^g w_dP_{F'_d}-\Pi=\sum_{d=1}^g w_d(P_{F'_d}-\Pi)$ 都是正的。此外，由于对于每个 $d\in[g]$，$F_d\subseteq F'_d$，因此

$$0\le\sum_{d=1}^g w_dP_{F_d}-\Pi\le\sum_{d=1}^g w_dP_{F'_d}-\Pi,$$

因此，相应的谱半径由于自伴性而等于相应的范数，故其排序方向相同。这就得到了 (7)。 □

注 4.4。 在命题 4.3的条件下，算子为 $\sum_{d=1}^{g} w_d P_{F_d}$ 的马尔可夫链，在以下意义上“至少同样高效”：对于任意 $f \in L^2(\pi)$，前一条链每次迭代所产生的 πf 估计，在渐近意义上比后一条链产生的估计更高效。关于这种效率排序，详见 Mira 和 Geyer (1999)。

由于循环和吉布斯步骤混合是我们关注的核心，我们将注意力集中在 $L^2(\pi)$，但请注意，定理 4.1 (以及命题 4.3) 对任意复希尔伯特空间上的投影及其分块变体的乘积和凸组合也成立。在下一节中，我们将探讨吉布斯步骤的性质，以更充分地利用 $L^2(\pi)$的结构。

4.2. 与折叠吉布斯步骤的联系

在第 4 节的其余部分中，将讨论各种 L^2 空间以及 $L^2(\pi)$。对于任意完备可分度量空间 Ω 和 Ω 上的任意概率测度ξ （Ω $\mathscr{B}(\Omega)$），令 $L^2(\xi)$ 表示由满足 $\int_\Omega |f(\omega)|^2 \, \xi(d\omega) < \infty$ 的可测函数 $f : \Omega \to \mathbb{C}$ 所组成的希尔伯特空间。彼此在 ξ-a.e. 意义下相等的函数视为同一个函数，且 $L^2(\xi)$ 上的内积定义为 $\langle f, g \rangle = \int_\Omega f(\omega) g(\omega) \, \xi(d\omega)$。如果 $Q \in B(L^2(\xi))$ 是满足 $\Xi Q = \Xi$ 的马尔可夫算子，其中 $\Xi \in B(L^2(\xi))$ 由 $\Xi f \equiv \xi f$ 给出，那么当 $r(Q - \Xi) < 1$ 时，称 Q 具有谱隙。

在本节中，假设 $K \geq 3$，并固定 $[K]$ 的任意非空真子集 $I = \{i_1, \ldots, i_n\}$，使得 $n \geq 2$。令 π_I 表示 π 在 $\mathcal{X}_I$ 上的边缘分布；也就是说，对于所有 $A_I \in \mathscr{B}(\mathcal{X}_I)$，$\pi_I(A_I) = \pi(A_I \times \mathcal{X}_{-I})$。令 $\Pi_I \in B(L^2(\pi_I))$ 由 $\Pi_I f_I \equiv \pi_I f_I$ 给出，其中 $f_I \in L^2(\pi_I)$。此外，对于 $\ell \in [n]$，将 $E_{i_\ell}^{(I)}$ 定义为 $L^2(\pi_I)$ 中关于第 i_ℓ 个坐标为常数的函数所构成的闭子空间。对于 I 的任意非空真子集 J，我们称将 P_{F_J} ($I \in B$) ($L^2(\pi_I)$) 投影到 $F(I_J = \bigcap_{i \in J} E_i^{(I)})$ 上的正交投影为一个折叠吉布斯步骤。折叠吉布斯步骤的循环和混合按照第2.3节中的方式类似构造，并得到以 π_I 为目标分布的采样器。任何由与 (3)、(4)、(5) 或 (6) 类似的形式给出的折叠吉布斯步骤循环或混合，都称为折叠吉布斯采样器。

只需将底层空间设为 $L^2(\pi_I)$，而非 $L^2(\pi$，即可观察到，对应于相同折叠吉布斯步骤选择的循环和混合遵循谱隙团结原理（推论 3.5），并且折叠吉布斯步骤的循环和混合继承了由折叠吉布斯采样器给出的谱隙，其形式类似于（3）或（5）（定理 4.1）。自然地，当空间 $L^2(\pi$及其上的算子不再被完全忽略时，我们可以得到更深入的观察。下面将阐释折叠吉布斯步骤的循环和混合之间的一些关联

与吉布斯步骤的循环和混合之间的关联。我们利用这些关联，扩展定理 4.1：折叠吉布斯步骤的循环和混合继承了完整吉布斯采样器的谱隙。

我们引入 $L^2(\pi_I)$ 与 $\bigcap_{i\in[K]\setminus I} E_i$ 之间的如下对应关系。

命题 4.5。由下式给出的线性映射 $\Phi\colon\ L^2(\pi_I) \to \bigcap_{i\in[K]\setminus I} E_i$

$$(\Phi f_I)(x_I, x_{-I}) = f_I(x_I), \quad (x_I, x_{-I}) \in \mathcal{X},$$

对于 $f_I \in L^2(\pi_I)$，是一个等距同构。

证明。任取 $x^*_{-I} \in \mathcal{X}_{-I}$。$\Phi$ 的满射性是显然的，而通过注意到两个函数 f，$g \in \bigcap_{i\in[K]\setminus I} E_i$ 一致，当且仅当 $f(x_I,\ x^*_{-I}) = g(x_I,\ x^*_{-I})$ 几乎处处一致，可得其单射性。因此，Φ 是一个同构，其逆映射由下式给出

$$(\Phi^{-1} f)(x_I) = f(x_I, x^*_{-I}), \quad x_I \in \mathcal{X}_I,$$

对于 $f \in \bigcap_{i\in[K]\setminus I} E_i$。最后，对于所有 $f_I \in L^2(\pi_I)$，注意到

$$\begin{aligned}
\|\Phi f_I\|^2 &= \int_{\mathcal{X}_I \times \mathcal{X}_{-I}} |(\Phi f_I)(x_I, x_{-I})|^2 \, \pi(dx_I, dx_{-I}) \\
&= \int_{\mathcal{X}_I} |(\Phi f_I)(x_I, x^*_{-I})|^2 \, \pi(dx_I) \\
&= \int_{\mathcal{X}_I} |f_I(x_I)|^2 \, \pi_I(dx_I) \\
&= \|f_I\|^2,
\end{aligned}$$

因此 Φ 是等距的。证明至此完成。 □

下面的命题表明，$L^2(\pi_I)$上的折叠吉布斯步骤与限制在$\bigcap_{i\in[K]\setminus I} E_i$上的某些吉布斯步骤相似。（如果存在一个可逆的有界线性算子 $\Psi\colon\ H_1 \to H_2$，使得$T_2 = \Psi T_1 \Psi^{-1}$，那么希尔伯特空间 H_1 和 H_2上的两个有界线性算子 T_1 和 T_2 相似。）

命题 4.6。设 J 是 I的非空子集。设$F = \bigcap_{i\in[K]\setminus I} E_i$，设$F_J = \bigcap_{j\in J} E_j$，并设 $F_J^{(I)} = \bigcap_{j\in J} E_j^{(I)}$。那么，

$$(P_{F_J \cap F})|_F = \Phi P_{F_J^{(I)}} \Phi^{-1},$$

其中 $\Phi\colon\ L^2(\pi_I) \to F$是命题 4.5中给出的等距同构。

证明。首先，假设 $J \neq I$。将 $\mathcal{X}$视为三重乘积 $\mathcal{X}_J \times \mathcal{X}_{I\setminus J} \times \mathcal{X}_{-I}$，并使用简写记号（$x_J$，$x_{I-J}$，$x_{-I}$）表示$\mathcal{X}_J \times \mathcal{X}_{I\setminus J} \times \mathcal{X}_{-I}$中的元素。固定任意一点 $x^*_{-I} \in \mathcal{X}_{-I}$。对于所有 $f \in F$和（x_J，x_{I-J}，x_{-I}）$\in$

$\mathcal{X}_J \times \mathcal{X}_{I\setminus J} \times \mathcal{X}_{-I}$,

$$\begin{aligned}(P_{F_J\cap F}f)(x_J, x_{I-J}, x_{-I}) &= \int_{\mathcal{X}_J\times\mathcal{X}_{-I}} f(x'_J, x_{I-J}, x'_{-I})\,\pi(dx'_J, dx'_{-I}|x_{I-J}) \\ &= \int_{\mathcal{X}_J} f(x'_J, x_{I-J}, x^*_{-I})\,\pi(dx'_J|x_{I-J}) \\ &= \int_{\mathcal{X}_J} (\Phi^{-1}f)(x'_J, x_{I-J})\,\pi(dx'_J|x_{I-J}) \\ &= (P_{F_J^{(I)}}\Phi^{-1}f)(x_J, x_{I-J}) \\ &= (\Phi P_{F_J^{(I)}}\Phi^{-1}f)(x_J, x_{I-J}, x_{-I}).\end{aligned}$$

现在，假设 $J = I$。那么， $P_{F_J\cap F} = \Pi$和 $P_{F_J^{(I}} = \Pi_{I)}$，对 $\mathcal{X}_I \times \mathcal{X}_{-I}$ 作类似论证可得

$$\Pi f \equiv \int_{\mathcal{X}_I} f(x_I, x^*_{-I})\,\pi(dx_I) = \int_{\mathcal{X}_I} (\Phi^{-1}f)(x_I)\,\pi(dx_I) \equiv \Phi\Pi_I\Phi^{-1}f$$

对所有 $f \in F$ 均成立。证毕。 □

具体而言，暂且假设 $K = 4$和 $I = \{1, 2, 3\}$，并考虑循环 $P_{E_1\cap E_4}P_{E_2\cap E_4}P_{E_3\cap E_4}$。从采样的角度来看，这个吉布斯步骤循环对应的采样算法如算法4 所示，其中第四个坐标的值从未用于更新任何坐标。因此，前三个坐标可以视为由折叠吉布斯采样器 $P_{(I)}{}_{E_1}{}^{P}{}_{\substack{(I\\E_2}}{}^{P^{(I)}_{E_3})}$更新，其采样算法如算法 5所示。

算法 4每一步都更新第四个坐标的采样器

0: *Input:* 当前值 $X^{(n)} = (x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, x_3^{(n)}, x_4^{(n)})$。1: 抽取 $(X_1^{(n+1)}, X_4^{(n+1)}) \sim \pi(\cdot, \cdot|x_2^{(n)}, x_3^{(n)})$，并将观测值记为 $(x_1^{(n+1)}, x_4^{(n+1)})$。2: 抽取 $(X_2^{(n+1)}, X_4^{(n+1)}) \sim \pi(\cdot, \cdot|x_1^{(n+1)}, x_3^{(n)})$，并将观测值记为 $(x_2^{(n+1)}, x_4^{(n+1)})$。3: 抽取 $(X_3^{(n+1)}, X_4^{(n+1)}) \sim \pi(\cdot, \cdot|x_1^{(n+1)}, x_2^{(n+1)})$，并将观测值记为 $(x_3^{(n+1)}, x_4^{(n+1)})$。4: 令 $n = n + 1$。

算法5以$\pi_{\{1,2,3\}}$为目标的折叠吉布斯采样器

0: *Input:* 当前值 $X^{(n)} = (x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, x_3^{(n)})$。1: 抽取 $X_1^{(n+1)} \sim \pi(\cdot|x_2^{(n)}, x_3^{(n)})$，并将观测值记为 $x_1^{(n+1)}$。2: 抽取 $X_2^{(n+1)} \sim \pi(\cdot|x_1^{(n+1)}, x_3^{(n)})$，并将观测值记为 $x_2^{(n+1)}$。3: 抽取 $X_3^{(n+1)} \sim \pi(\cdot|x_1^{(n+1)}, x_2^{(n+1)})$，并将观测值记为 $x_3^{(n+1)}$。4: 设置 $n = n + 1$。

从谱视角来看，这两个采样器确实相同，下面我们将予以证明。对于每个由折叠吉布斯步骤构成的循环和混合，都存在一个

相应的吉布斯步骤循环和混合，在以下意义上与之谱等价。

命题 4.7。 设 $J_1, \ldots, J_g$ 是 I 的非空真子集，且满足 $\bigcup_{d=1}^{g} J_d = I$。设 $F = \bigcap_{i \in [K] \setminus I} E_i$。对于 $d \in [g]$，令 $F_d = \bigcap_{j \in J_d} E_j$ 和 $F_d^{(I)} = \bigcap_{j \in J_d} E_j^{(I)}$。那么，

$$\sigma\left(P_{F_1 \cap F} \cdots P_{F_g \cap F} - \Pi\right) = \sigma\left(P_{F_1^{(I)}} \cdots P_{F_g^{(I)}} - \Pi_I\right), \tag{8}$$

并且，对于所有 $(v_1, \ldots, v_g) \in \mathscr{S}_g$，

$$\sigma\left(\sum_{d=1}^{g} v_d P_{F_d \cap F} - \Pi\right) = \sigma\left(\sum_{d=1}^{g} v_d P_{F_d^{(I)}} - \Pi_I\right). \tag{9}$$

备注 4.8。设 $(X^{(n)})_{n \geq 0}$，其中 $X^{(n)} = (X_I^{(n)}, X_{-I}^{(n)})$ 对于 $n \geq 0$，表示算子为 $P_{F_1 \cap F} \cdots P_{F_g \cap F}$（分别为 $\sum_{d=1}^{g} v_d P_{F_d \cap F}$）的马尔可夫链，如命题 4.7 所述。过程 $(X_I^{(n)})_{n \geq 0}$ 是算子为 $P_{F_1^{(I)}} \cdots P_{F_g^{(I)}}$（分别为 $\sum_{d=1}^{g} v_d P_{(I) F_d}$）的马尔可夫链。除了具有命题 4.7 意义下相同的谱之外，这两条链还具有相同的收敛行为。根据 Roberts 和 Rosenthal（2001）的推论 2，由于链 $(X_I^{(n)})_{n \geq 0}$ 是 $(X^{(n)})_{n \geq 0}$ 的“齐次函数式去初始化链”，因此两条链都以相同的速率在全变差距离下收敛到平稳分布。

为了证明命题 4.7，我们使用 Rosenthal 和 Rosenthal (2015) 中的以下结果，将某些吉布斯步骤与它们在 $F = \bigcap_{i \in [K] \setminus I} E_i$ 上的限制联系起来。命题 4.6 随后建立了这些限制与折叠吉布斯步骤之间的联系。

引理 4.9 (Rosenthal 和 Rosenthal (2015), 命题 5.2)。 设 T 是复希尔伯特空间 H 上的有界线性算子。假设 M 是 H 的真闭子空间，且包含 T 的值域。那么，

$$\sigma(T) = \sigma(T|_M) \cup \{0\}.$$

备注 4.10. 对于满足 $\Pi Q = \Pi$ 的马尔可夫算子 $Q \in B(L^2(\pi))$，有些作者在 $r(Q|_{E^\perp}) < 1$ 时便称 Q 具有谱隙，而不要求 $r(Q - \Pi) < 1$。例如，参见 Roberts 和 Rosenthal（1997）以及 Qin、Hobert 和 Khare（2019）。引理 4.9 提供了一种直接的方法来说明这两种定义是等价的。由于 $P_{E^\perp}(Q - \Pi) = (\mathrm{Id} - \Pi)(Q - \Pi) = Q - \Pi$，$Q - \Pi$ 的值域包含于 $E^\perp$，因此 $\sigma(Q - \Pi) = \sigma(Q|_{E^\perp}) \cup \{0\}$。所以，$r(Q - \Pi) = r(Q|_{E^\perp})$。

命题 4.7 的证明。 设 $\Phi: L^2(\pi_I) \to F$ 是命题 4.5 中给出的等距同构。由引理 4.9，

$$\sigma(P_{F_1 \cap F} \cdots P_{F_g \cap F} - \Pi) = \sigma\left((P_{F_1 \cap F} \cdots P_{F_g \cap F} - \Pi)|_F\right) \cup \{0\},$$

并且，根据命题 4.6，

$$\begin{aligned}(P_{F_1\cap F}\cdots P_{F_g\cap F}-\Pi)|_F &= (\Phi P_{F_1^{(I)}}\Phi^{-1})\cdots(\Phi P_{F_g^{(I)}}\Phi^{-1})-\Phi\Pi_I\Phi^{-1}\\ &= \Phi(P_{F_1^{(I)}}\cdots P_{F_g^{(I)}}-\Pi_I)\Phi^{-1}.\end{aligned}$$

对于任意 $\lambda\in\mathbb{C}$，算子 $Q_\lambda := (P_{F_1\cap F}\cdots P_{F_g\cap F}-\Pi)|_F-\lambda\mathrm{Id}_F$ 可逆，当且仅当 $(P_{F_1^{(I}}\cdots P_{F)_g^{I}}-\Pi_{I)})-\lambda\mathrm{Id}_{L^2(\pi_I)}=\Phi^{-1}Q_\lambda\Phi$ 可逆。因此，

$$\sigma\big((P_{F_1\cap F}\cdots P_{F_g\cap F}-\Pi)|_F\big)=\sigma\Big(P_{F_1^{(I)}}\cdots P_{F_g^{(I)}}-\Pi_I\Big).$$

由于算子 $P_{F_1^{(I}}\cdots P_{F)_g^{I}}-\Pi_{I)}$ 将 $L^2(\pi_I)$ 中的每个常值函数映射为 0，因此它不是单射，所以 0 属于 $\sigma(P_{F_1^{(I}}\cdots P_{F)_g^{I}}-\Pi_{I)}$。这证明了（8）。类似的论证可得（9），因为

$$\left(\sum_{d=1}^g v_d P_{F_d\cap F}-\Pi\right)\Bigg|_F=\Phi\left(\sum_{d=1}^g v_d P_{F_d^{(I)}}-\Pi_I\right)\Phi^{-1}$$

并且由于 $\sum_{d=1}^g v_d P_{F_d^{(I)}}-\Pi_I$ 不是单射。 □

命题 4.7 表明，折叠吉布斯步骤的循环（分别为混合）具有谱隙，当且仅当相应的吉布斯步骤循环（分别为混合）具有谱隙；在这种情况下，两者的谱隙相等。由定理 4.1 可知，吉布斯步骤的循环和混合从完整吉布斯采样器继承谱隙；因此，这种继承性也扩展到了折叠吉布斯步骤的循环和混合。

推论 4.11. 如果完整吉布斯采样器具有谱隙，那么每个折叠吉布斯步骤的循环和混合都具有谱隙。

如果与某个边缘分布相关的条件分布更容易处理，那么可以选择分析折叠吉布斯步骤的循环或混合，而不是吉布斯步骤的循环或混合。命题 4.7 表明，对目标为某个边缘分布的折叠采样器进行分析，可以获得有关一个相关采样器的信息；该采样器以完整分布为目标 π。尽管后者采样器在证明推论 4.11时展现了理论上的用处，但由于其实现往往不可行，这种采样器在实践中并不常见。在类似算法 4的算法中，从计算角度来看，几乎不可能在算法的每一步都联合更新某个特定坐标。鉴于这一问题，我们在章节 4.3 中确定了一种情形，在该情形下，折叠确定性扫描吉布斯采样器与分块确定性扫描吉布斯采样器密切相关。

4.3. 吉布斯步骤的可交换对

在本小节中，将 $\mathcal{X}$ 视为任意固定的三重乘积 $\mathcal{U}\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}$。（确切地说，取 $\mathcal{U}=\mathcal{X}_{I_1}$，取 $\mathcal{V}=\mathcal{X}_{I_2}$，并取 $\mathcal{W}=\mathcal{X}_{I_3}$，其中 $\{I_1,I_2,I_3\}$

是 $[K]$的某个固定划分，然后只在 $\mathcal{U}\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}$上进行讨论。）设 $(U,\ V,\ W)$ 是一个取值于 $\mathcal{U}\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}$、分布为 π的随机元素。定义 E_U、 E_V和 E_W为 $L^2(\pi)$中分别关于第 u、第 v和第 w个坐标保持常数的函数所构成的闭子空间。

回顾一下，值域为 M_1 和 M_2的两个正交投影当且仅当 $P_{M_1}P_{M_2}=P_{M_1\cap M_2}$时对易。（例如参见 Halmos (1951)，第29节。）对于一对吉布斯步骤，对易性具有如下概率解释。

命题 4.12。 吉布斯步骤 P_{E_U} 和 P_{E_V} 对易，当且仅当 U和 V 在给定 W的条件下条件独立。

证明。 首先，假设 U和 V在给定 W的条件下条件独立。对于所有 $f\in L^2(\pi)$以及所有 $(u,v,w)\in\mathcal{U}\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}$， U 和V 在给定 W 的条件独立性意味着

$$\begin{aligned}[P_{E_U}P_{E_V}f](u,v,w)&=\int_{\mathcal{U}}\left[\int_{\mathcal{V}}f(u',v',w)\,\pi(dv'|u',w)\right]\pi(du'|v,w)\\&=\int_{\mathcal{U}}\left[\int_{\mathcal{V}}f(u',v',w)\,\pi(dv'|w)\right]\pi(du'|w)\\&=\int_{\mathcal{U}\times\mathcal{V}}f(u',v',w)\pi(du',dv'|w)\\&=[P_{E_U\cap E_V}f](u,v,w).\end{aligned}$$

因此， $P_{E_U}P_{E_V}=P_{E_U\cap E_V}$，所以 P_{E_U}与 P_{E_V}对易。

反之，假设 P_{E_U}和 P_{E_V}对易，因此 $P_{E_U}P_{E_V}=P_{E_U\cap E_V}$。固定任意 $A_U\in\mathscr{B}(\mathcal{U})$以及任意 $(u,v,w)\in\mathcal{U}\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}$。注意到

$$\begin{aligned}&[P_{E_U}P_{E_V}\mathbf{1}_{A_U\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}}](u,v,w)\\&\quad=\int_{\mathcal{U}}\left[\int_{\mathcal{V}}\mathbf{1}_{A_U\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}}(u',v',w)\,\pi(dv'|u',w)\right]\pi(du'|v,w)\\&\quad=\int_{A_U}\pi(du'|v,w)\\&\quad=\Pr(U\in A_U|V=v,W=w)\end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned}[P_{E_U\cap E_V}\mathbf{1}_{A_U\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}}](u,v,w)&=\int_{\mathcal{U}\times\mathcal{V}}\mathbf{1}_{A_U\times\mathcal{V}\times\mathcal{W}}(u',v',w)\,\pi(du',dv'|w)\\&=\int_{A_U}\pi(du'|w)\\&=\Pr(U\in A_U|W=w).\end{aligned}$$

由于 $P_{E_U}P_{E_V}=P_{E_U\cap E_V}$，因此

$$\Pr(U\in A_U|V=v,W=w)=\Pr(U\in A_U|W=w)$$

对于所有的 $A_U\in\mathscr{B}(\mathcal{U})$ 以及所有的 $(v,\ w)\in\mathcal{V}\times\mathcal{W}$。至此，证明完成。 □

令 π_{UW} 和 π_{VW} 分别表示 π 在 $\mathcal{U}\times\mathcal{W}$ 和 $\mathcal{V}\times\mathcal{W}$ 上的边缘分布。此外，令 $\Pi_{UW} \in B(L^2(\pi_{UW}))$ 和 $\Pi_{VW} \in B(L^2(\pi_{VW}))$ 分别由 $\Pi_{UW} f_{UW} \equiv \pi_{UW} f_{UW}$（对 $f_{UW} \in L^2(\pi_{UW})$）和 $\Pi_{VW} f_{VW} \equiv \pi_{VW} f_{VW}$（对 $f_{VW} \in L^2(\pi_{VW})$）给出。定义 $E_U^{(UW)}$ 和 $E_W^{(UW)}$ 为 $L^2(\pi_{UW})$ 中关于第 u 和第 w 个坐标为常数的函数所构成的闭子空间，并类似地定义 $L^2(\pi_{VW})$ 的闭子空间 $E^{(VW)}{}_V$ 和 $E^{(VW)}{}_W$。

推论 4.13。 如果在给定 W 的条件下， U 和 V 条件独立，则

$$\sigma(P_{E_U} P_{E_V \cap E_W} - \Pi) = \sigma\Big(P_{E_U}^{(UW)} P_{E_W}^{(UW)} - \Pi_{UW}\Big)$$

and

$$\sigma(P_{E_V} P_{E_U \cap E_W} - \Pi) = \sigma\Big(P_{E_V}^{(VW)} P_{E_W}^{(VW)} - \Pi_{VW}\Big).$$

证明。 根据命题 4.12，算子 P_{E_U} 和 P_{E_V} 可交换，因此 $P_{E_U} P_{E_V} = P_{E_U \cap E_V}$。于是，

$$P_{E_U} P_{E_V \cap E_W} = P_{E_U} P_{E_V} P_{E_V \cap E_W} = P_{E_U \cap E_V} P_{E_V \cap E_W},$$

同样地， $P_{E_V} P_{E_U \cap E_W} = P_{E_V \cap E_U} P_{E_U \cap E_W}$。根据命题 4.7，即可得到该结论。 □

假设在给定 W 的条件下， U 和 V 条件独立。回顾一下，具有算子 $P_{E_U} P_{E_V \cap E_W}$ 的分块吉布斯采样器的算法通过首先从 $\pi(\cdot|w_n)$ 中抽取 u_{n+1} 来更新 u_n，然后从 $\pi(\cdot, \cdot|u_{n+1})$ 中抽取 (v_{n+1}, w_{n+1}) 来更新 (v_n, w_n)，从而将当前迭代 $(U_n, V_n, W_n) = (u_n, v_n, w_n)$。推论 4.13 的一个实际结果是，在确定分块吉布斯采样器是否具有谱隙时，忽略第 v 个坐标不会损失任何信息。只需关注折叠采样器即可：它通过首先从 $\pi(\cdot|w_n)$ 中抽取 u_{n+1} 来更新 u_n，然后从 $\pi(\cdot|u_{n+1})$ 中抽取 w_{n+1} 来更新 w_n，从而将当前迭代 $(U_n, W_n) = (u_n, w_n)$。类似地，在分析具有算子 $P_{E_V} P_{E_U \cap E_W}$ 的分块吉布斯采样器时，可以放心地忽略第 u 个坐标。我们在第 5.2 节中提供了一个示例，说明（除其他事项外）将注意力限制在折叠链上如何简化分析。

4.4. 双分量确定性扫描吉布斯采样器的边缘链

一个广为人知的结果是，Liu、Wong 和 Kong (1994) 指出，双分量确定性扫描吉布斯采样器存在谱隙，当且仅当其边缘链存在谱隙；在这种情况下，两者的谱隙相等。通过不同的方法，Rosenthal 和 Rosenthal (2015) 证明，双分量确定性扫描吉布斯采样器的谱与

其边缘链的算子的谱相同，但零点处可能例外。然而，关于吉布斯采样器谱的这一联系并不能直接推出Liu、Wong 和 Kong (1994) 的上述结果：谱隙涉及马尔可夫算子减去 Π的谱，而不仅仅是马尔可夫算子的谱。为了以Rosenthal 和 Rosenthal (2015) 的算子理论方法补全这一细节，我们建立了类似于命题 4.7 的谱描述，从而以统一的方式证明：只要存在谱隙，双分量确定性扫描吉布斯采样器及其伴随算子，以及它们各自的边缘链，谱隙都相等。

将 $\mathcal{X}$ 视为任意固定的二重乘积 $\mathcal{Y} \times \mathcal{Z}$。（准确地说，取 $\mathcal{Y} = \mathcal{X}_I$和 $\mathcal{Z} = \mathcal{X}_{-I}$，其中 I 是 $[K]$的某个固定非空真子集。）定义E_Y 和 E_Z 为 $L^2(\pi)$中分别关于第 y个和第 z个坐标为常数的函数所构成的闭子空间。此外，令 π_Y 和 π_Z 分别表示 π 在 $\mathcal{Y}$ 和 $\mathcal{Z}$上的边缘分布。定义$\Pi_Y \in B(L^2(\pi_Y))$和 $\Pi_Z \in B(L^2(\pi_Z))$如下：对于 $f_Y \in L^2(\pi_Y)$，令 $\Pi_Y f_Y \equiv \pi_Y f_Y$；对于 $f_Z \in L^2(\pi_Z)$，令 $\Pi_Z f_Z \equiv \pi_Z f_Z$。

算子为 $P_{E_Y} P_{E_Z}$的双分量确定性扫描吉布斯采样器定义了一个仅取决于当前迭代的第 z个坐标的核。因此，在 $\mathcal{Z}$ 上存在相应的边缘马尔可夫链，其转移核为

$$Q_Z(z, A_Z) = (P_{E_Y} P_{E_Z} \mathbf{1}_{\mathcal{Y} \times A_Z})(y^*, z) = \int_{\mathcal{Y}} \left[\int_{A_Z} \pi(dz'|y') \right] \pi(dy'|z) \tag{10}$$

对所有（z， A_Z）$\in \mathcal{Z} \times \mathscr{B}$（$\mathcal{Z}$），其中 $y^* \in \mathcal{Y}$是一个无关紧要的固定元素。由（10）给出的核关于 π_Z（Liu、Wong 和 Kong（1994），引理 3.1）可逆；因此，其对应的马尔可夫算子 Q_Z $\in B$（L^2（π_Z））是自伴的。在与算子 $\mathcal{Y}$ 相关的吉布斯采样器中，$P_{E_Z} P_{E_Y}$上还存在一个类似的边缘链。其转移核为

$$Q_Y(y, A_Y) = (P_{E_Z} P_{E_Y} \mathbf{1}_{A_Y \times \mathcal{Z}})(y, z^*) = \int_{\mathcal{Z}} \left[\int_{A_Y} \pi(dy'|z') \right] \pi(dz'|y) \tag{11}$$

对所有（y， A_Y）$\in \mathcal{Y} \times \mathscr{B}$（$\mathcal{Y}$），其中 $z^* \in \mathcal{Z}$是一个无关紧要的固定元素。与 Q_Z一样，对应的马尔可夫算子 $Q_Y \in B$（L^2（π_Y））是自伴的，因为由（11）给出的核关于 π_Y可逆。

双分量确定性扫描吉布斯采样器与其边缘链之间的谱关系如下述结果所示。

命题 4.14。 设 $Q_Y \in B(L^2(\pi_Y))$ 和 $Q_Z \in B(L^2(\pi_Z))$ 分别是由 (11)和 (10)给出的核所对应的马尔可夫算子。那么，

$$\sigma(P_{E_Y} P_{E_Z} - \Pi) = \sigma(P_{E_Z} P_{E_Y} - \Pi) = \sigma(Q_Y - \Pi_Y) = \sigma(Q_Z - \Pi_Z).$$

证明。 我们首先证明

$$\sigma(P_{E_Z} P_{E_Y} - \Pi) = \sigma(Q_Y - \Pi_Y). \tag{12}$$

论证与命题 4.7 的证明中给出的论证类似。令Φ: $L^2(\pi_Y) \to E_Z$ 为命题 4.5 中给出的等距同构，注意到

$$(P_{E_Z}P_{E_Y} - \Pi)|_{E_Z} = \Phi(Q_Y - \Pi_Y)\Phi^{-1}.$$

因此，根据引理 4.9 以及算子的相似性，

$$\sigma(P_{E_Z}P_{E_Y} - \Pi) = \sigma((P_{E_Z}P_{E_Y} - \Pi)|_{E_Z}) \cup \{0\} = \sigma(Q_Y - \Pi_Y) \cup \{0\}.$$

注意到 $Q_Y - \Pi_Y$ 不是单射可得（12）。通过对称论证，

$$\sigma(P_{E_Y}P_{E_Z} - \Pi) = \sigma(Q_Z - \Pi_Z).$$

现在，对于复希尔伯特空间上的任意有界线性算子 T，回顾 $\sigma(T^*) = \{\lambda : \lambda \in T\}$ 并且当 σ 是自伴算子时，T （ $\subset \mathbb{R}$ ）。因此， T 的谱和 $Q_Y - \Pi_Y$ 以及 $Q_Z - \Pi_Z$ 的谱都包含于 $\mathbb{R}$中。此外，结合这些事实与（12），可推出

$$\begin{aligned}\sigma(P_{E_Y}P_{E_Z} - \Pi) &= \{\overline{\lambda} : \lambda \in \sigma(P_{E_Z}P_{E_Y} - \Pi)\} \\ &= \{\overline{\lambda} : \lambda \in \sigma(Q_Y - \Pi_Y)\} \\ &= \sigma(Q_Y - \Pi_Y);\end{aligned}$$

类似地可得 $\sigma(P_{E_Z}P_{E_Y} - \Pi) = \sigma(Q_Z - \Pi_Z)$。证明完成。

□

注 4.15。再次考虑推论 4.13 中的情形，其中随机元素 U 和 V 在给定 W的条件下条件独立。回顾可知，$P_{E_U}P_{E_V \cap E_W}$具有谱隙，当且仅当 $P_{(UW)E_U}P_{(UW)E_W}$具有谱隙；在这种情况下，这两个确定性扫描吉布斯采样器的谱隙相等。Qin 和 Jones（2022）表明，二分量确定性扫描吉布斯采样器的 L^2-收敛速度等于其边缘链的谱隙。因此，除了在全变差距离下以相同的速度收敛到平稳性（如备注 4.8 中所述）之外，马尔可夫链 $((U^{(n)}, V_{(n)}W_{(n)}))_{n\geq 0}$（其算子为 $P_{E_U}P_{E_V \cap E_W}$）与马尔可夫链 $((U_{(n)}W_{(n)}))_{n\geq 0}$（其算子为 $P_{(UW)E_U}P_{(UW)E_W}$）还具有相同的 L^2-收敛速度。类似地，链 $((U_{(n)}V_{(n)}W_{(n)}))_{n\geq 0}$（其算子为 $P_{E_V}P_{E_U \cap E_W}$）和链 $((V_{(n)}W_{(n)}))_{n\geq 0}$（其算子为 $P_{(VW)E_V}P_{(VW)E_W}$）也具有相同的 L^2-收敛速度。

由于每个双分量确定性扫描吉布斯采样器都从完整吉布斯采样器继承谱隙（定理 1.1），以下结果可直接由命题 4.14 推得。双分量确定性扫描吉布斯采样器是由吉布斯步骤还是折叠吉布斯步骤构成，并不影响这一点。

推论 4.16。如果完整吉布斯采样器具有谱隙，那么无论是由吉布斯步骤还是折叠吉布斯步骤构成的双分量确定性扫描吉布斯采样器所对应的每条边缘链，都具有谱隙。

与 Chlebicka, Łatuszyński 和 Miasojedow (2025) 的引言中所述相反，双分量确定性扫描吉布斯采样器的马尔可夫核不一定可逆。事实上，按照命题 4.12证明中的类似论证，算子 $P_{E_Y}P_{E_Z}$ 当且仅当 Y 与 Z 相互独立时才是自伴算子，其中 (Y,Z) 是一个取值于 $\mathcal{Y}\times\mathcal{Z}$、分布为 π的随机元素。只要 Y与 Z 不独立（这在大多数情况下都是如此），$P_{E_Y}P_{E_Z}$ 和 $P_{E_Z}P_{E_Y}$所定义的核就不关于 π可逆。当然，值得庆幸的是，双分量确定性扫描吉布斯采样器与其始终可逆的边缘链共享许多性质。

5. 谱断连

尽管分块吉布斯采样器会从完整吉布斯采样器继承谱隙（定理 4.1），但本章节给出了一个示例，说明两个不同的分块吉布斯采样器之间未必存在这种联系：即使分块大小相同，一个分块吉布斯采样器可能具有谱隙，而另一个分块吉布斯采样器却不具有谱隙。我们的示例还表明，一个折叠吉布斯采样器可能无法从另一个折叠吉布斯采样器继承谱隙。事实上，我们证明了一个分块（分别为折叠）吉布斯采样器可以具有几何遍历性，而另一个分块（分别为折叠）吉布斯采样器则不具有几何遍历性。

5.1. 几何遍历性背景

回顾一下（见章节 3），马尔可夫算子存在谱隙，可确保由该算子的幂生成的序列在范数意义下收敛于 Π。在概率层面上，马尔可夫算子存在谱隙，也可确保相应的 n步转移核序列以指数快速的速度在全变差距离下收敛于 π。更准确地说，下面回顾一些定义。

对于定义在 $\mathcal{X}\times\mathscr{B}(\mathcal{X})$ 上的任意马尔可夫核 $Q(x,dy)$，记 n 步转移核为 $Q^n(x,dy)$（其中 $Q^1(x,dy)=Q(x,dy)$）。若存在某个非零的 σ-有限测度 φ，定义在 $\mathscr{B}(\mathcal{X})$ 上，并满足以下性质：对于所有 $x\in\mathcal{X}$，以及所有满足 $\varphi(A)>0$ 的 $A\in\mathscr{B}(\mathcal{X})$，都存在一个整数 $n\geq 1$，使得 $Q^n(x,A)>0$，则称核 $Q(x,dy)$ 为 φ-不可约。任何 φ-不可约核 $Q(x,dy)$ 都存在定义在 $\mathcal{X}$ 上的 σ-有限测度 ψ，称为最大不可约测度，使得 $Q(x,dy)$ 是 ψ-不可约的。最大不可约测度 ψ 在如下意义下是唯一的：任何满足 $Q(x,dy)$ 为 φ'-不可约的 σ-有限测度 φ'，都相对于 ψ 绝对连续（Meyn 和 Tweedie（2009），命题 4.2.2）。若存在一组非空且两两不相交的集合 $A_0,\ldots,A_{m-1}\in\mathscr{B}(\mathcal{X})$，满足 $m>1$，使得$\psi((\bigcup_{j=0}^{m-1}A_j)^c)=0$，并且对于所有 $x\in A_j$ 及所有 $j=0,\ldots,m-1$（模 m），均有 $Q(x,A_{j+1})=1$，则称 ψ-不可约核 $Q(x,dy)$ 为周期的。不是周期的 ψ-不可约核 $Q(x,dy)$ 称为非周期核。

以下结果汇集于 Tierney（1994）的补篇中的定理 1。设 $Q(x, dy)$ 是一个具有平稳分布 π 的马尔可夫核。若$Q(x, dy)$ 是 φ-不可约的，则 $Q(x, dy)$ 是 π-不可约的， φ 相对于 π 绝对连续，且 π 是$Q(x, dy)$ 唯一的不变概率测度。若 $Q(x, dy)$ 也为非周期的，则

$$\lim_{n\to\infty} \|Q^n(x, \cdot) - \pi(\cdot)\|_{\mathrm{TV}} = 0$$

对 π-几乎处处的 $x \in \mathcal{X}$，其中 $\|Q^n(x, \cdot) - \pi(\cdot)\|_{\mathrm{TV}} := \sup_{A\in\mathscr{B}(\mathcal{X})} |Q^n(x, A) - \pi(A)|$ 是概率测度 $Q^n(x, \cdot)$ 与 π 之间的全变差距离。

鉴于Tierney (1994中的上述事实，最大不可约性测度 π （在测度等价意义下）适用于任何具有不变概率测度 φ的 -不可约马尔可夫核 π。以下结果的证明将利用这一性质，说明 φ-不可约性可确保任何对应于循环或吉布斯步骤混合的马尔可夫核均为非周期。论证基本上采用了Geyer (2005)证明定理 4.6 时所用的方法，并在附录B中给出，以求完整。

命题 5.1。 设 Q 是吉布斯步骤的循环或混合。若 $Q(x, dy)$ 是φ-不可约的，则 $Q(x, dy)$ 是非周期的。

若存在常数 $\rho \in [0, 1)$ 和函数C： $\mathcal{X} \to$ （0， ∞），使得核 $Q(x, dy)$（其不变概率测度为 π ）是 φ-不可约且非周期的，并且几何遍历，则称其为几何遍历。

$$\|Q^n(x, \cdot) - \pi(\cdot)\|_{\mathrm{TV}} \le C(x)\rho^n, \quad n \ge 1,$$

对 π-几乎处处的 $x \in \mathcal{X}$ 成立。回顾一下，对于任何具有不变概率测度 π 的 φ-不可约、非周期核 $Q(x, dy)$，相应马尔可夫算子 $Q \in B(L^2(\pi))$ 存在谱隙意味着$Q(x, dy)$具有几何遍历性（Kontoyiannis 和 Meyn（2012））。当 $Q(x, dy)$ 还具有可逆性时，或者等价地，当 Q 还具有自伴性时，逆命题也成立： $Q(x, dy)$具有几何遍历性意味着 Q 存在谱隙（Roberts 和 Rosenthal（1997），Roberts 和 Tweedie（2001））。

5.2. 示例

下面介绍一种情形：以不同方式对吉布斯采样器进行分块或边缘化，会影响所得算子是否具有谱隙。对于任意随机变量 R，令 $\mathcal{L}(R)$ 表示 R 的分布。考虑以下贝叶斯线性层次模型：

$$\begin{aligned} Y &= W + \frac{N_1}{\sqrt{U}}, \\ W &= V + N_2, \end{aligned}$$

其中，$\mathcal{L}(N_1) = \mathcal{L}(N_2) = N(0, 1)$，其中 $\mathcal{L}(U) = \Gamma(1/2, 1/2)$，并且在 V 上赋予平坦先验。（若对于某些 $\alpha, \beta > 0$，U 的密度与 $u^{\alpha-1}\exp[-\beta u]$ 成正比（其中 $u > 0$），则称 $\mathcal{L}(U) = \Gamma(\alpha, \beta)$。）假设变量 N_1、N_2、U 和 V 相互独立。特别地，这意味着 U 和 W 也相互独立。

在本节中固定 $y \in \mathbb{R}$。我们感兴趣的分布为 $\pi = \mathcal{L}((U, V, W)|Y = y)$。稍微滥用一下记号，将 $(U, V, W)|Y = y$ 的后验密度记为 $\pi(u, v, w|y)$，并暂且令 $f(\cdot)$ 表示一个一般的密度，注意到

$$\begin{aligned}\pi(u,v,w|y) &\propto f(y|u,w)f(u)f(w|v)f(v)\\ &\propto \left(\sqrt{u}\exp\left[-\frac{u}{2}(y-w)^2\right]\right)\left(\frac{1}{\sqrt{u}}\exp\left[-\frac{1}{2}u\right]\right)\left(\exp\left[-\frac{1}{2}(w-v)^2\right]\right)\\ &= \left(\exp\left[-\frac{1}{2}\big(1+(y-w)^2\big)u\right]\right)\left(\exp\left[-\frac{1}{2}(w-v)^2\right]\right)\end{aligned} \tag{13}$$

对于所有 $u \in \mathbb{R}_+ := (0, \infty)$ 和 $v, w \in \mathbb{R}$，均有此性质。容易看出

$$\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}_+}\int_{\mathbb{R}}\left(\exp\left[-\frac{1}{2}\big(1+(y-w)^2\big)u\right]\right)\left(\exp\left[-\frac{1}{2}(w-v)^2\right]\right)dv\,du\,dw < \infty,$$

因此，$\pi(u, v, w|y)$ 确实是一个正规密度。由于 $\pi(u, v, w|y)$ 处处严格为正，任何吉布斯步骤的循环或混合所对应的核都是 π-不可约的。折叠吉布斯步骤的循环和混合也同样具有不可约性。（例如，参见 Tan 和 Hobert(2009)，引理 1。）

令 $\mathcal{U} = \mathbb{R}_+$，并令 $\mathcal{V} = \mathcal{W} = \mathbb{R}$。与第 4.3 节中一样，令 (U, V, W) 为一个取值于 $\mathcal{U} \times \mathcal{V} \times \mathcal{W}$、分布为 π 的随机元素，并令 E_U、E_V 和 E_W 为 $L^2(\pi)$ 中分别关于第 u、v 和 w 个坐标为常数的函数所构成的闭子空间。我们考察算子为 $P_{E_U}P_{E_V\cap E_W}$ 和 $P_{E_V}P_{E_U\cap E_W}$ 的两个分块吉布斯采样器是否具有谱隙。由 (13) 可知，给定 W 时，U 与 V 条件独立。因此，根据推论 4.13，只需分析算子为 $P_{(UW)}{}_{E_U}$ $P_{(UW)}{}_{E_W}$ 和 $P_{(VW)}{}_{E_V}$ $P_{(VW)}{}_{E_W}$ 的折叠吉布斯采样器。

鉴于（13），

$$\pi(v, w|y) \propto \left(\frac{1}{1+(y-w)^2}\right)\left(\exp\left[-\frac{1}{2}(w-v)^2\right]\right), \quad (v, w) \in \mathcal{V} \times \mathcal{W}.$$

因此，$\pi(v, w|y)$ 是 $(V, W)|Y = y$ 的后验密度，由以下层次模型给出：

$$\begin{aligned}Y &= W + Z_1\\ W &= V + Z_2,\end{aligned}$$

其中 $\mathcal{L}(Z_1) =$ 服从柯西分布$(0, 1)$，$\mathcal{L}(Z_2) = N$服从$(0, 1)$，并且对 V采用平坦先验。假设变量 V、Z_1 和 Z_2 相互独立。

Papaspiliopoulos 和 Roberts（2008）研究了这一层次模型，其中的定理3.6证明，算子为 $P_{(VW)E_V}P_{(VW)E_W}$ 的折叠吉布斯采样器不是几何遍历的。众所周知，二分量吉布斯采样器及其边缘链以相同的速率在全变差距离下收敛至平稳状态（Roberts 和 Rosenthal（2001），Diaconis、Khare 和 Saloff-Coste（2008）），因此该边缘链也不是几何遍历的。由于边缘链可逆，由此可知，其马尔可夫算子没有谱隙（Roberts 和 Tweedie（2001））。因此，根据命题 4.14，$P_{(VW)E_V}P_{(VW)E_W}$ 没有谱隙，所以 $P_{E_V}P_{E_U\cap E_W}$ 也没有谱隙。

与算子为 $P_{E_V}P_{E_U\cap E_W}$ 的分块吉布斯采样器不同，以下结果证明，采用不同的分块方式会得到具有谱隙的算子。

命题 5.2. 算子为 $P_{E_U}P_{E_V\cap E_W}$ 的分块吉布斯采样器具有谱隙。

证明。只需证明折叠吉布斯采样器的边缘链$P_{(UW)E_U}P_{(UW)E_W}$是几何遍历的。由 (13)，

$$\pi(u,w|y)\propto\exp\left[-\frac{1}{2}(1+(y-w)^2)u\right],$$

因此，$\mathcal{L}(U|W=w,\ Y=y)=\Gamma(1,\ (1+(y-w)^2)/2)$，并且 $\mathcal{L}(W|U=u,\ Y=y)=N(y,\ 1/u)$。令 $\tau_w=\sqrt{(1+(y-w)^2)/2}$，注意到，具有算子 $P_{(UW)E_U}P_{(UW)E_W}$ 的吉布斯采样器的边缘链，其转移密度为

$$\begin{aligned}
k(w,w') &= \int_0^\infty \pi(w'|u,y)\pi(u|w,y)\,du \\
&= \int_0^\infty \left(\sqrt{\frac{u}{2\pi}}\exp\left[-\frac{u}{2}(w'-y)^2\right]\right)\left(\tau_w^2\exp\left[-\frac{1}{2}(1+(y-w)^2)u\right]\right)du \\
&= \frac{\tau_w^2}{\sqrt{2\pi}}\int_0^\infty \sqrt{u}\exp\left[-\frac{1}{2}(1+(y-w)^2+(y-w')^2)u\right]du \\
&= \frac{\tau_w^2}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{2}{1+(y-w)^2+(y-w')^2}\right)^{3/2}\frac{\sqrt{\pi}}{2} \\
&= \frac{\tau_w^2}{(1+(y-w)^2+(y-w')^2)^{3/2}}.
\end{aligned}$$

由于

$$\begin{aligned}
&(1+(y-w)^2+(y-w')^2)^{-3/2} \\
&\quad = 2^{-3/2}\left(\frac{1+(y-w)^2}{2}+\frac{(y-w')^2}{2}\right)^{-3/2} \\
&\quad = 2^{-3/2}\left[\left(\frac{1+(y-w)^2}{2}\right)\left(1+\frac{(y-w')^2}{2}\left(\frac{2}{1+(y-w)^2}\right)\right)\right]^{-3/2} \\
&\quad = 2^{-3/2}\tau_w^{-3}\left[1+\frac{(y-w')^2}{2\tau_w^2}\right]^{-3/2}
\end{aligned}$$

对于所有 w, $w' \in \mathbb{R}$, 可得

$$k(w,w') = \tau_w^2\left(2^{-3/2}\tau_w^{-3}\left[1+\frac{(y-w')^2}{2\tau_w^2}\right]^{-3/2}\right) = \frac{1}{\sqrt{8}\tau_w}\left[1+\frac{(y-w')^2}{2\tau_w^2}\right]^{-3/2}. \tag{14}$$

回顾一下，具有 2 个自由度、位置参数为 $\mu \in \mathbb{R}$、尺度参数为 $\delta > 0$ 的位置-尺度 Student t 分布，其密度为

$$g(w') = \frac{1}{\sqrt{8}\delta}\left[1+\frac{(\mu-w')^2}{2\delta^2}\right]^{-3/2}, \quad w' \in \mathbb{R}. \tag{15}$$

因此，对于固定的 $w \in \mathbb{R}$，由（$w' \mapsto k(w, w')$）给出的函数（14）恰好是具有 2 个自由度、位置参数为 t、尺度参数为 y的 $\tau_w = \sqrt{(1+(y-w)^2)/2}$位置-尺度分布。等价地，如果$W_0$, W_1.....表示转移密度为 $k(w, w')$ 的马尔可夫链，那么

$$\mathcal{L}(W_{n+1}|W_n = w_n) = \mathcal{L}\left(y + \sqrt{\frac{1+(y-w_n)^2}{2}}\, t_2\right), \quad n \geq 0, \tag{16}$$

其中, $\mathcal{L}(t_2)$ 是具有 2 个自由度的 Student t 分布。

现在，我们建立一组标准的漂移与小集条件（Rosen-thal (1995)，定理 12），由此可知链 W_0, W_1, ...是几何遍历的。定义 $V(w) = \sqrt{|y-w|}$ 对 $w \in \mathbb{R}$成立，并令 $\lambda = \mathbb{E}[\sqrt{|t_2|}]$。由于 $\mathbb{E}[|t_2|] = \sqrt{2}$ （例如参见 Psarakis 和 Panaretos (1990)，定理 3.1），且函数 $w \mapsto \sqrt{w}$ 在 $\mathbb{R}_+$ 上严格凹，根据詹森不等式可得

$$\lambda < \sqrt{\mathbb{E}[|t_2|]} = 2^{1/4} \qquad a+b^{1/4} \leq \text{。此外，}$$

$a^{1/4}+b^{1/4}$ a $b \geq 0$ 16

回顾一下，对于所有实数 ， （） 。结合这些事实与（），可推出

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}} V(w')k(w,w')\,dw' &= \mathbb{E}\left(\sqrt{|t_2|}\left(\frac{1+(y-w)^2}{2}\right)^{1/4}\right) \\
&= \frac{\lambda}{2^{1/4}}\left(1+(y-w)^2\right)^{1/4} \\
&\leq \frac{\lambda}{2^{1/4}} + \frac{\lambda}{2^{1/4}}V(w)
\end{aligned}$$

对所有 $w \in \mathbb{R}$ 均成立。由此得到漂移条件。

对于小化条件，任取 $d > (2^{3/4}\lambda)/(1-\lambda/2^{1/4})$，并任取满足 $V(w) = \sqrt{|y-w|} \leq d$ 的 $w \in \mathbb{R}$。那么，对所有 $w' \in \mathbb{R}$，

$$\begin{aligned} k(w,w') &= \frac{1}{\sqrt{8}}\sqrt{\frac{2}{1+(y-w)^2}}\left[1+\frac{(y-w')^2}{2}\left(\frac{2}{1+(y-w)^2}\right)\right]^{-3/2} \\ &\geq \frac{1}{\sqrt{8}}\sqrt{\frac{2}{1+d^2}}\left[1+\frac{(y-w')^2}{2}(2)\right]^{-3/2} \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+d^2}}\left(\frac{1}{\sqrt{8}}\sqrt{2}\left[1+\frac{(y-w')^2}{2}(2)\right]^{-3/2}\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{1+d^2}}g(w'), \end{aligned}$$

其中 $g(\cdot)$ 是由 (15) 给出的密度，其中 $\mu = y$ 且 $\delta = \sqrt{1/2}$。证明至此完成。 □

本例还有一个用途：它表明，完整吉布斯采样器通常未必能从分块或折叠吉布斯采样器继承几何遍历性或谱隙。虽然算子 $P_{E_U}P_{E_V\cap E_W}$ 对应的分块吉布斯采样器具有谱隙，但定理 4.1 意味着所有完整吉布斯采样器都没有谱隙，因为存在一个没有谱隙的吉布斯步骤循环，即算子 $P_{E_V}P_{E_U\cap E_W}$ 对应的分块吉布斯采样器。此外，根据命题 4.12，注意到 $P_{E_U}P_{E_V}P_{E_W} = P_{E_U\cap E_V}P_{E_W}$ 当 U 且 V 在给定 W 的条件下条件独立，因此算子 $P_{E_U}P_{E_V}P_{E_W} = P_{E_U\cap E_V}P_{E_W}$ 对应的完整吉布斯采样器可视为一个不具有谱隙的双分量吉布斯采样器。因此，其边缘链的自伴算子也不具有谱隙（命题 4.14），所以该边缘链不是几何遍历的（Roberts 和 Tweedie (2001)）。因此，算子 $P_{E_U}P_{E_V}P_{E_W} = P_{E_U\cap E_V}P_{E_W}$ 对应的完整吉布斯采样器不是几何遍历的（Roberts 和 Rosenthal (2001)，Diaconis、Khare 和 Saloff-Coste (2008)），而算子 $P_{E_U}P_{E_V\cap E_W}$ 对应的分块吉布斯采样器则是几何遍历的。

附录 A：引理 3.2

任取 $(w'_1,\ldots,w'_N) \in \mathscr{S}_N$，使得 $(w_1,\ldots,w_N) \neq (w'_1,\ldots,w'_N)$，并令 $\gamma = \min_{i\in[N]} w'_i/w_i \in (0,1)$。此外，对于 $i \in [N]$，定义 $a_i = (w'_i - \gamma w_i)/(1-\gamma)$，使得 $w'_i = (1-\gamma)a_i + \gamma w_i$。注意，$(a_1,\ldots,a_N) \in \mathscr{S}_N$。根据三角不等式，可得

$$\begin{aligned} \left\|\sum_{d=1}^{g} w'_i P_{M_i} - P_M\right\| &= \left\|(1-\gamma)\left[\sum_{d=1}^{g} a_i P_{M_i} - P_M\right] + \gamma\left[\sum_{d=1}^{g} w_i P_{M_i} - P_M\right]\right\| \\ &\leq (1-\gamma)\left\|\sum_{d=1}^{g} a_i P_{M_i} - P_M\right\| + \gamma\left\|\sum_{d=1}^{g} w_i P_{M_i} - P_M\right\|. \end{aligned}$$

由于

$$\left\|\sum_{d=1}^{g} a_i P_{M_i} - P_M\right\| = \left\|\left(\sum_{d=1}^{g} a_i P_{M_i}\right)(\mathrm{Id} - P_M)\right\| \leq \left\|\sum_{d=1}^{g} a_i P_{M_i}\right\| \|\mathrm{Id} - P_M\| \leq 1,$$

并且由于根据假设 $\|\sum_{d=1}^{g} w_i P_{M_i} - P_M\| < 1$，

$$\left\|\sum_{d=1}^{g} w_i' P_{M_i} - P_M\right\| \leq (1-\gamma)\left\|\sum_{d=1}^{g} a_i P_{M_i} - P_M\right\| + \gamma\left\|\sum_{d=1}^{g} w_i P_{M_i} - P_M\right\| < 1,$$

如所需。

附录 B：命题5.1的证明

假设 $Q(x, dy)$ 是周期的；那么，对某个整数 $m > 1$，存在集合 $A_0, \ldots, A_{m-1} \in \mathscr{B}(\mathcal{X})$，使得 $\pi(\bigcup_{j=0}^{m-1} A_j) = 1$，并且对于所有 $x \in A_j$ 以及所有 $j = 0, \ldots, m-1$（模 m），$Q(x, A_{j+1}) = 1$。定义 $f \in L^2(\pi)$ 为 $f(x) = \sum_{j=0}^{m-1} (e^{2\pi i/m})^j \mathbf{1}_{A_j}(x)$，其中 i 表示虚数单位，并注意到

$$\|f\|^2 = \sum_{j=0}^{m-1} |(e^{2\pi i/m})^j|^2 \pi(A_j) = \sum_{j=0}^{m-1} \pi(A_j) = 1,$$

其中，最后一个等式由以下假设得出：集合 $A_1, \ldots, A_m$ 两两不相交，且 $\pi(\bigcup_{j=0}^{m-1} A_j) = 1$。此外，注意到

$$\begin{aligned}
[Qf](x) &= \sum_{j=0}^{m-1} (e^{2\pi i/m})^j Q(x, A_j) \\
&= \mathbf{1}_{A_{m-1}}(x) + \sum_{j=1}^{m-1} (e^{2\pi i/m})^j \mathbf{1}_{A_{j-1}}(x) \\
&= (e^{2\pi i/m}) f(x)
\end{aligned}$$

对所有 $x \in \mathcal{X}$ 均成立。因此，f 是 Q 的特征函数，其 $Qf = e^{2\pi i/m} f$。

首先考虑 $Q = P_{F_1} \cdots P_{F_g}$ 是一个吉布斯步骤循环的情况。回顾一下，交集 $\bigcap_{d=1}^{g} F_d = E$ 是由常值函数构成的闭子空间。此外，对于每个 $d \in [g]$,

$$1 = \|f\|^2 = \|P_{F_d} f\|^2 + \|(\mathrm{Id} - P_{F_d}) f\|^2$$

根据勾股定理。如果对于每个 $d \in [g]$，都有 $\|(\mathrm{Id} - P_{F_d}) f\| = 0$，那么这意味着 $f \in \bigcap_{d=1}^{g} F_d = E$，这显然不合理，因为 f 不是常值函数。因此，必定存在某个 $d' \in [g]$，使得 $\|P_{F_{d'}} f\| < \|f\| = 1$，我们可以取 d' 为满足这一条件的最大整数，从而对于任意 $d > d'$，都有 $(\mathrm{Id} - P_{F_d}) f = 0$。一方面，这意味着

$$\|Qf\| = \left\|P_{F_1} \cdots P_{F_g} f\right\| = \|P_{F_1} \cdots P_{F_{d'}} f\| \leq \|P_{F_1} \cdots P_{F_{d'-1}}\| \|P_{F_{d'}} f\| < 1,$$

另一方面， $\|Qf\| = \|e^{2\pi i/m} f\| = |e^{2\pi i/m}| \|f\| = 1$——这就产生了矛盾。当 $Q = \sum_{d=1}^{g} w_d F_d$ 是吉布斯步骤的混合时，情况也可类似处理：此时，

$$\|Qf\| = \left\| \sum_{d=1}^{g} w_d P_{F_d} f \right\| \leq \sum_{d=1}^{g} w_d \|P_{F_d} f\| \leq w_{d'} \|P_{F_{d'}} f\| + \sum_{d \neq d'} w_d < 1,$$

这再次构成矛盾。因此， $Q(x, \ dy)$ 必须是非周期的。

参考文献

Amit, Y.(1991)。关于高斯与非高斯分布的随机松弛收敛速率。《多元分析杂志》38 82–99。MR1128938Badea, C., Grivaux, S. 和 Müller, V. (2011)。交替投影法的收敛速度。《代数与分析》23 1–30。MR2896163Bakry, D., Gentil, I. 和 Ledoux, M. (2014)。马尔可夫扩散算子的分析与几何。数学科学基础丛书[数学科学基本原理] **348**。施普林格，查姆。MR3155209
Chlebicka, I., Łatuszyński, K. 和 Miasojedow, B.(2025)。吉布斯采样器的相互关联性：谱隙。《应用概率年刊》35 142–157。MR4871706
Deutsch, F. (1992)。交替正交投影法。载于《逼近理论、样条函数及其应用》（马拉泰亚，1991）。北约高级科学研究所丛书 C 辑：数学与物理科学 356 105–121。克鲁维尔学术出版社，多德雷赫特。MR1165964Deutsch, F. 和 Hundal, H.(2010)。线性算子序列的慢收敛 II：任意慢收敛。《逼近理论杂志》162 1717–1738。MR2718893Diaconis, P., Khare, K. 和 Saloff-Coste, L. (2008)。吉布斯抽样、指数族与正交多项式。《统计科学》23 151–178。附作者评论及回应。MR2446500Diaconis, P., Khare, K. 和 Saloff-Coste, L.(2010)。随机交替投影。《伊利诺伊数学杂志》54 963–979。MR2928343Gelfand, A. E. 和 Smith, A. F. M. (1990)。基于抽样的边缘密度计算方法。《美国统计学会杂志》85 398–409。MR1141740Geman, S.和 Geman, D.(1984)。随机松弛、吉布斯分布与图像的贝叶斯复原。《IEEE 模式分析与机器智能汇刊》PAMI-6 721-741。Geyer, C. J. (2005)。马尔可夫链蒙特卡罗讲义。https:// www.stat.umn.edu/geyer/f05/8931/n1998.pdf。讲义，明尼苏达大学。Halmos, P. R.(1951)。希尔伯特空间与谱重数理论导论。切尔西出版公司，纽约。MR45309

Halperin, I. (1962)。投影算子的乘积。Acta Sci. Math. (塞格德) 23 96–99。MR141978He, B. D., De Sa, C. M., Mitliagkas, I. 和 Ré, C. (2016)。吉布斯抽样中的扫描顺序：哪些模型受其影响以及影响程度的界。载于《神经信息处理系统进展》（D. Lee, M. Sugiyama,U. Luxburg, I. Guyon和 R. Garnett编）29。Curran Associates, Inc.Jones, G. L., Roberts, G. O. 和 Rosenthal, J. S. (2014)。条件 Metropolis-Hastings 抽样器的收敛性。《应用概率进展》46 422–445。MR3215540Kontoyiannis, I.和 Meyn, S. P. (2012)。非可逆马尔可夫链的几何遍历性与谱隙。《概率论及相关领域》154 327–339。MR2981426Lapidus, M. L. (1981)。Trotter-Lie 公式的推广。《积分方程与算子理论》4 366–415。MR623544Liu, J. S. (1994)。贝叶斯计算中折叠吉布斯采样器及其在基因调控问题中的应用。《美国统计学会杂志》89 958–966。MR1294740Liu, J. S., Wong, W. H.和 Kong, A. (1994)。吉布斯采样器的协方差结构及其在估计量比较和增广方案中的应用。《生物计量学》81 27–40。MR1279653Meyn, S. 和 Tweedie, R. L.(2009)。马尔可夫链与随机稳定性，第 2 版。剑桥大学出版社，剑桥。MR2509253 Mira, A.和 Geyer, C. J. (1999)。蒙特卡罗马尔可夫链的排序。技术报告第 632 号，明尼苏达大学统计学院。Murphy, G. J.(1990)。 C^* 代数与算子理论。Academic Press, Inc.，波士顿，马萨诸塞州。MR1074574 Papaspiliopoulos, O. 和 Roberts, G. O.(2008)。贝叶斯层次模型中吉布斯采样器的稳定性。《统计年刊》36 95–117。MR2387965Psarakis, S.和 Panaretos, J.(1990)。折叠 t 分布。《统计学：理论与方法通讯》19 2717–2734。MR1086030Qin, Q., Hobert, J. P. 和 Khare, K. (2019)。迹类马尔可夫算子的谱隙估计。《电子统计学杂志》13 1790–1822。MR3959873Qin, Q. 和 Jones, G. L. (2022)。双分量马尔可夫链蒙特卡罗抽样器的收敛速率。伯努利 28 859–885。MR4388922Reich, S. (1983)。投影的极限定理。《线性与多重线性代数》13 281–290。MR700890Roberts, G. O. 和 Rosenthal, J. S. (1997)。混合马尔可夫链的几何遍历性。《电子概率通讯》2 13–25。MR1448322Roberts, G. O. 和 Rosenthal, J. S. (2001)。马尔可夫链与去初始化过程。《斯堪的纳维亚统计学杂志》28 489–504。MR1858413Roberts, G. O.和 Rosenthal, J. S.(2015)。在不同扫描方式下，某些简单吉布斯采样器令人意外的收敛性质。《国际统计与概率杂志》5 51–60。Roberts, G. O. 和 Sahu, S. K. (1997)。吉布斯采样器的更新方案、相关结构、分块与参数化。《皇家统计学会杂志》

《社会科学系列B》59 291–317。MR1440584Roberts, G. O. 和 Tweedie, R. L. （2001）。对于可逆马尔可夫链，几何 L^2 与 L^1 收敛等价。《应用概率杂志》38 37–41。MR1915532Rosenthal, J. S. （1995）。马尔可夫链蒙特卡罗的小化条件与收敛速率。《美国统计学会杂志》90 558–566。MR1340509Rosenthal, J. S. 和 Rosenthal, P. （2015）。某些双因子非可逆 MCMC 算法的谱界。《电子概率通讯》20 1–10。MR3434208Tan, A. 和 Hobert, J. P. （2009）。用于贝叶斯随机效应模型的分块吉布斯抽样（采用非正规先验）：收敛与再生。《计算与图形统计学杂志》18 861–878。MR2598033Tierney, L. （1994）。用于探索后验分布的马尔可夫链。《统计年鉴》22 1701–1762。附有讨论及作者的回应。MR1329166van Dyk, D. A. 和 Park, T. （2008）。部分塌缩吉布斯采样器：理论与方法。《美国统计学会杂志》103 790–796。MR2524010von Neumann, J. （1949）。论算子环。约化理论。《数学年鉴》（第2辑）50 401–485。MR29101