arXiv:2602.02771v1 [stat.ME] 2 Feb 2026

马尔可夫随机场：结构性质、相变与响应函数分析

J. Brandon Carter*
杜克大学统计科学系

and

Catherine A. Calder†
德克萨斯大学奥斯汀分校统计与数据科学系

2026年2月4日

摘要

本文聚焦综述了马尔可夫随机场（MRF）——一种常用于表示离散空间域中空间依赖的概率模型——在分类数据中的应用，重点讨论针对二值观测或潜变量的模型。我们考察了这些模型的核心结构性质，包括团分解、条件独立性以及邻域结构的作用。我们还讨论了相变现象及其对统计模型设定与推断的影响。本文的一项核心贡献是采用响应函数这一统一工具，并将其用于先验分析，以深入了解马尔可夫随机场的不同形式化设定如何影响其隐含的边缘分布和联合分布。我们通过一个包含协变量的直接数据马尔可夫随机场模型案例研究来阐释这些概念，并重点说明不同形式化设定如何编码依赖关系。虽然本文聚焦于二值场，但此处阐述的原理可自然推广至更复杂的类别马尔可夫随机场，我们也探讨了与这些高维建模情形的联系。本文既为理解马尔可夫随机场模型提供了理论基础，也提供了阐释和拓展基于马尔可夫随机场的模型的实用工具。

关键词：自逻辑斯蒂模型、条件随机场、隐马尔可夫随机场、伊辛模型、波茨模型、空间统计学、统计力学

*作者衷心感谢尤尼斯·肯尼迪·施莱佛国家儿童健康与人类发展研究所（R01HD088545、R01HD113259 和 P2CHD042849）以及国家科学基金会（2502935）的资助。

†calder@austin.utexas.edu

1 引言

马尔可夫随机场（MRF）是一类常用的概率分布，用于对与有限个分析单元相关联的离散值变量之间的依赖关系进行建模。由于马尔可夫随机场通常应用于明确的空间情境中，故在不失一般性的前提下，我们将分析单元称为区域单元。区域单元可以是行政区，也可以是研究域的规则网格划分（例如格点）。本文主要关注二元马尔可夫随机场，并探讨其与类别型离散观测所对应的马尔可夫随机场之间的联系；后者是二元数据模型的自然扩展。离散值相关变量的马尔可夫随机场已被用于解决各种推断和预测任务，包括图像分割 [Zhang 等人， 2001]，组织分类 [Feng 等人， 2012]，遥感[Moores 等人， 2020]，物种分布制图 [Hogmanderand Moller、 1995]，疾病制图 [Green andRichardson， 2002]。在所有这些应用中，统计分析的共同假设是，空间上彼此较近的区域单元具有相似的取值；也就是说，我们预期分析中的离散值变量存在一定程度的空间聚类。由于这些区域单元构成空间域（即一组离散位置）的划分，区域单元之间的“接近程度”并非由传统距离度量定义，而是通过一个自然无向图（NUG）来表示区域单元之间的依赖关系。该图由顶点（对应区域单元）以及顶点对之间的无向边构成，这些边表示顶点之间的相互依赖。我们沿用Carter 和 Calder [2025] 的术语，将无向图称为“自然”图，因为它不是推断对象，而是依据区域单元之间两种常见依赖定义之一先验地确定的（见第2节）。相互依赖的顶点及其对应的区域单元称为邻居，而该无向图有时也称为邻域或邻域结构，这是沿用已久的术语，也是缩写 NUG 中“N”所指的含义。成对依赖关系，

被先验定义，最常见的是由区域单元的空间邻接性决定（例如，在二维情形中共享边界的区域单元被指定为邻居）。马尔可夫随机场的吸引力在于，自然无向图中所表示的依赖关系可以由马尔可夫随机场概率分布完美表示。事实上，马尔可夫随机场可以定义为一种概率分布，其条件独立关系定义一个自然无向图 [Cressie， 1993]。

由于马尔可夫随机场模型在统计力学中的历史发展，以及后来被统计学采纳为建模工具，在定义不同的马尔可夫随机场表述时，术语的使用并不一致。在本文中，我们用形式化设定来指马尔可夫随机场概率分布本身的数学规定，并依据概率模型的整体结构来区分建模类别或情形，其中马尔可夫随机场可以是关键组成部分或唯一组成部分。我们旨在全面比较常用于为空间相依的二元数据指定模型的不同马尔可夫随机场表述，并建立其与分类数据模型之间的联系。此外，我们还讨论某些马尔可夫随机场表述中出现的、被称为相变的现象所存在的认识不清问题，以及由相变导致的相应建模选择。为了更好地理解上述各类分析任务中所使用的、基于马尔可夫随机场的统计模型的常见形式化设定，我们引入一种新的先验分析工具，即响应函数，并用它来凸显不同马尔可夫随机场表述的不同性质，包括相变。如第3节所详细讨论的，响应函数的概念源自统计力学中用于理解物理模型真实相变现象的方法；我们对此方法进行拓展，将响应函数形式化为一种先验分析方法，以帮助刻画复杂概率分布。利用响应函数，我们展示马尔可夫随机场模型既可取又不可取的性质。

为了开始我们的 不同马尔可夫随机场形式化设定的分类及其在不同

建模场景中的应用。我们先介绍一些符号，以便对这些设定进行分类。首先，用 q 表示二元或分类变量的马尔可夫随机场概率分布，用 p 表示任意其他概率分布。令 y 表示观测变量向量，z 表示潜变量向量，X 表示协变量矩阵。广义而言，我们可以将基于马尔可夫随机场的统计模型分为三类。第一类是直接数据模型， q(y)，其中观测变量是离散的，空间依赖直接建模在观测变量上。这类直接数据模型，例如 Besag 的自逻辑斯蒂模型 [1974], ，常用于物种分布建模[Heikkinen and Hogmander，1994年，Hogmander 和 Moller，1995年，Hughes 等， 2011] ，并且通常会纳入对观测协变量的依赖。隐马尔可夫随机场（HM-RFs）模型是第二类。隐马尔可夫随机场可以视为生成模型的一种，即描述数据生成过程的模型。在隐马尔可夫随机场中，我们对潜在离散变量的空间依赖进行建模， q(z)，然后在给定潜变量的条件下，将观测变量建模为条件独立， p(y|z) $= \prod_{i=1}^{n} p(y_i|z_i)$，从而得到联合模型 p(y, z) $= p$(y|z)q(z)。这类模型常用于图像分割场景 [Li，2009年，Winkler， 2006] 。最后，我们讨论条件随机场（CRF）——一种判别模型——它将潜在状态 z 的条件分布建模为马尔可夫随机场， q(z|y)，给定观测变量 y，而 y 的分布无需已知[Lafferty 等， 2001]。这里将 z 描述为潜变量并不十分严谨，因为在模型训练期间 z 是可观测的，而在预测任务中则不可观测。条件随机场已应用于广泛的机器学习任务，从自然语言处理、图像分割到识别与标注 [Yu and Fan， 2020]。对条件分布进行显式建模有助于将条件随机场与隐马尔可夫随机场设定区分开来；不过，正如我们将看到的，从公式形式上看，条件随机场与带有协变量的直接数据模型相似。

尽管这三类采用马尔可夫随机场来表示空间依赖的模型看起来大不相同，但每一类模型的形式化设定和数学性质都与一般的马尔可夫随机场框架相契合。在第2节中，我们重点介绍最

一般形式化设定，它涵盖了上述三类马尔可夫随机场模型中使用的所有模型设定。基于这一马尔可夫随机场的一般形式化设定，我们着重介绍二元数据最常见的三种形式化设定；在上述模型类别中，这些设定在马尔可夫随机场的具体设定中受到的青睐程度各不相同。我们还介绍一种分类数据的通用形式化设定，它是二元形式的自然扩展。为了更好地理解这些不同马尔可夫随机场表述的性质——这是马尔可夫随机场行为的关键区别特征——我们在第3节介绍一种新的先验分析工具：响应函数。我们在第4 节明确定义相变，并重点介绍可由不同响应函数刻画的相变关键统计性质。在理解相变这一性质后，我们阐释其对模型构建的影响并提出建议。在第5 节和6节中，我们说明包含马尔可夫随机场成分的三类模型都与一般马尔可夫随机场形式化设定相关，并将分类数据的形式化设定加以扩展。此外，作为一个特殊案例研究，我们在第5.1节展示中心化自逻辑模型的一项不理想性质。我们在第7 节简要回顾模型拟合方法，并在第8节给出总结性评论。

2 离散马尔可夫随机场

在本节中，我们明确马尔可夫随机场概率分布的最一般形式，将该设定收窄为一般的指数族参数化，并回顾指数族的关键统计性质。这些指数族性质是理解空间依赖如何编码在马尔可夫随机场中的关键。基于一般的指数族设定，我们随后列举马尔可夫随机场针对二元数据和分类数据最常用的形式化设定。

我们通过定义一个马尔可夫随机场（MRF）， $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$来展开，其中 $\boldsymbol{\xi}$ 是控制该马尔可夫随机场的参数集合。无论区域单元是地理区域，还是代表不同的空间

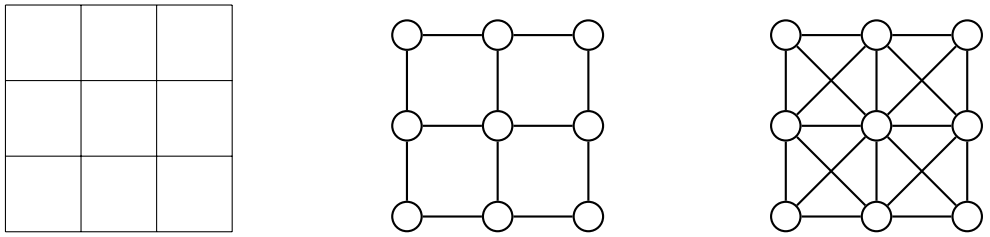
系统，马尔可夫随机场的一个定义性特征是，其空间依赖关系也可以用自然无向图（NUG）表示。对于 n 区域单元，令$\mathbf{N} = \{\mathbf{V},\mathbf{E}\}$ 为一个定义区域单元间依赖关系的自然无向图。定义$\mathbf{V} = \{1,\ldots,n\}$ 为与区域单元相对应的顶点集合，$\mathbf{E}$ 为无向边集合 $\{i,j\}$，用于定义区域单元之间的相互依赖。仅当两个顶点之间存在一条无向边时，顶点 i和 j 才称为邻居。我们还定义

$$\partial(i) = \{j : \{i,j\} \in \mathbf{E}\}$$

是 i 的所有邻居构成的集合。与图的顶点相关联的离散值的特定赋值 $\mathbf{y}$，称为该图的构型 。因此，从马尔可夫随机场概率分布中抽取的一个实现会给出该图的一个构型。令 $\mathcal{Y}$ 为 $\mathbf{y}$ 的样本空间，即所有可能构型的集合。

离散空间设定下的自然无向图通常有两种形式，分别对应于 一阶 或 二阶 依赖结构，其中邻居关系由区域单元的邻接关系定义。我们再次强调，这正是“自然无向图”中 自 然一词所蕴含的含义——自然无向图的默认设定是采用这两种结构之一来刻画区域单元之间的空间依赖。基于一阶 依赖的自然无向图定义如下：区域单元 i的邻居是那些边界相接且接触长度大于一个点的单元。在规则格点上，这对应于 i正上方、正下方、正左侧和正右侧的区域单元。图 1a展示了一个三乘三的规则格点；图 1b则展示了由一阶依赖定义的相应自然无向图。基于二阶 依赖的自然无向图将邻居定义为边界相邻或角点相接的区域单元。因此，在规则格点上，任何不位于边界上的区域单元都有八个邻居。图1c展示了三乘三网格中二阶依赖所对应的自然无向图。

现在，我们形式化地定义与自然无向图$\mathbf{N}$相关的马尔可夫随机场。对于由顶点集 A、B和 C索引的变量集$\mathbf{y}_A$、$\mathbf{y}_B$和$\mathbf{y}_C$，令 $I(\mathbf{N})$为如下集合



(a) (b) (c)

图1：规则格点示例，以及可用于表示格点区域单元之间依赖关系的邻域无向图。

其中包含由$\mathbf{N}$ 断言的条件依赖关系 $A \perp B|C$ ，而 $I(q)$为由 q断言的条件独立关系集合。也就是说，如果我们能将q分解为 $q(\mathbf{y}_A, \mathbf{y}_B|\mathbf{y}_C) = q(\mathbf{y}_A|\mathbf{y}_C)q(\mathbf{y}_B|\mathbf{y}_C)$，那么 $A \perp B|C \in I(q)$。关于$\mathbf{N}$ 的概率分布$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$称为马尔可夫随机场，若对于所有 $\boldsymbol{\xi}$， $I(q) = I(\mathbf{N})$。换言之，定义 q 所依据的自然无向图能够完美表示马尔可夫随机场中变量之间的条件独立关系。[1]

自然无向图，以及由此得到的马尔可夫随机场，满足三种马尔可夫性质：全局性质、成对马尔可夫性质和局部马尔可夫性质。全局性质依赖于路径的概念；路径是由一系列相连的边构成的序列，其中相连顶点的序列不重复。全局马尔可夫性质指出，任意两个顶点集合， A 和 B，在给定 C 的条件下相互独立， A 当且仅当从 B 中的任一顶点到 C 中的任一顶点的每条路径都经过 i 。根据成对马尔可夫性质，任意两个不相邻（不是邻居）的顶点，在给定所有其他顶点的条件下相互独立。局部马尔可夫性质尤为重要，它指出，顶点 i 在给定其邻居 $\partial(i)$的条件下，与所有其他顶点相互独立。这三种性质都可以作为证明另外两种性质的起点 [Koller 和 Friedman，2009年，第 119]页。根据局部马尔可夫性质，马尔可夫随机场的全条件分布可简化为[1]有些文献给出了较弱的定义：若 $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$的全条件分布蕴含与自然无向图相同的条件独立关系，则称 $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$为马尔可夫随机场 [Rue 和 Held

，

2010，第 194]。

给定 y_i的邻居时， y_i 的条件分布，即 $\mathbf{y}_{\partial(i)}$。

尽管上述定义直观地刻画了空间依赖，但 Hammersley-Clifford 定理（未发表，证明见Besag [1974]）给出了分布 $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$ 相对于 N 必须采取何种形式才能忠实于该图。该定理依赖于 团的概念。对于 NUGN，团记作 c，定义为任意单个顶点或一组彼此均为邻居的顶点。令$C = \{c_1, \ldots, c_m\}$ 表示图 N中所有团的集合。在规则格点的一阶无向邻域图中， C 包含由单点顶点和相邻顶点对构成的团，而二阶及其他 NUG 中则允许存在高阶团。

Hammersley-Clifford 定理指出，相对于 NUG N 及其对应的团 C，满足 $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) > 0$（对于 $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}$）的马尔可夫随机场 $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$ 可以分解为

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \prod_{c \in C} \phi_c(\mathbf{y}_c|\boldsymbol{\xi}_c), \tag{1}$$

其中， ϕ_c 是为每个团 $c \in C$ 任意选取的严格正函数，而 $\boldsymbol{\xi}_c$ 是与第 c个团函数相关的参数。在统计力学中，这称为配分函数，

$$Z(\boldsymbol{\xi}) = \sum_{\mathbf{y} \in \mathcal{Y}} \prod_{c \in C} \phi_c(\mathbf{y}_c|\boldsymbol{\xi}_c),$$

是归一化常数（即对所有可能的构型求和），而 $\boldsymbol{\xi}$ 是团函数中所有参数的集合。[2] 该定理的强大之处在于，可以直接通过团函数，或通过图所蕴含的全条件分布来指定马尔可夫随机场。方程1 通过任意指定团函数，给出了马尔可夫随机场所能采取的最一般形式，$\phi_c(\mathbf{y}_c|\boldsymbol{\xi}_c)$。基于历史惯例和解释上的便利，马尔可夫随机场更常通过$f_c = \log \phi_c$来指定，其中 f_c称为团势。文献中的术语用法略有分歧，因为“团势”一词既用于指代

[2]配分函数的传统 Z 记法源自德语状态和，

意为对状态求和。

f_c 和 ϕ_c。Cressie [1993]或许是最严谨的，他更倾向于使用“负势”这一术语，因为 $-\sum_{c\in C} f_c(\mathbf{y}_c|\boldsymbol{\xi})$可直接解释为统计力学中的势能函数（即哈密顿量）。遵循统计学／机器学习文献中的主流惯例，我们将 f_c 称为团势，将 ϕ_c 称为团函数。下文将展示，团势的某种特定形式会使马尔可夫随机场呈现指数族形式。相比之下，第2.2.2节回顾马尔可夫随机场的自回归逻辑斯蒂形式化设定。这是自回归模型的一种特殊情形，其假设马尔可夫随机场的全条件分布采用指数族参数化形式 [Besag, 1974]。

2.1 指数族形式

我们将说明，为使马尔可夫随机场成为具有自然参数 $\boldsymbol{\xi}$ 的指数族，团势必须采取何种形式。当团势函数 $f_c(\mathbf{y}_c|\xi_c)$ 可以因子分解为 $\xi_c g_c(\mathbf{y}_c)$ 时，也就是数据（即观测构型）的函数乘以与该团相关的参数，马尔可夫随机场便属于指数族，其中

$$
\begin{aligned}
q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) &= \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \exp\left(\sum_{c\in C} \xi_c g_c(\mathbf{y}_c)\right) \\
&= \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \exp\left(\sum_{i=1}^{n} \xi_i g_i(y_i) + \sum_{\{i,j\}\in C} \xi_{ij} g_{ij}(y_i, y_j) + \sum_{\{i,j,k\}\in C} \xi_{ijk} g_{ijk}(y_i, y_j, y_k) + \dots\right).
\end{aligned}
$$

虽然允许自然参数成为另一组参数的函数，可以得到更一般的指数族形式，但这种对团势函数进行的特定因子分解涵盖了常用的情形，我们将在本节后文着重介绍这些情形。

上述方程指定了一个唯一的分布；然而，显然每个单独的团势都是一个充分统计量，并且在缺乏数据重复的情况下（空间应用中常常如此），各个 ξ_c 是不可识别的。一个合理的解决方案是，对图所允许的每个团大小 $c = 1,2,\dots$ 假设一个共同的参数 ξ_c和 g_c 函数（例如，单点、成对团等），或者可能是一个共-

同参数和 g 函数，用于每个团取向（例如，在具有一阶依赖的规则格点中，对垂直相邻的区域单元假设 $\xi_{ij} = \psi_1$ ，对水平相邻的区域单元假设 $\xi_{ij} = \psi_2$ ，且 $g_{ij}(y_i, y_j) = g(y_i, y_j)$。）不失一般性，令 $\xi_i = \xi_1$、 $\xi_{ij} = \xi_2$ ，并对图所允许的高阶团以此类推，同时对每个团大小假设共同的 g 函数（例如，对所有 $i \in \mathrm{V}$， $g_i(y_i) = g(y_i)$；对所有 $\{i, j\} \in \mathrm{E}$， $g_{ij}(y_i, y_j) = g(y_i, y_j)$）。为便于表述，我们采用这些假设，但如上所述，以下结果可以很容易地扩展到团势函数中更细的粒度 [例如，Arnesen and Tjelmeland， 2015]。我们现在给出简化指数族马尔可夫随机场的定义。

定义2.1。 假设对于关于N的马尔可夫随机场，每种团大小都具有相同的参数和 g 函数。此时，我们称概率分布为形式如下的简化指数族（*SEF*）马尔可夫随机场：

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \exp\left(\boldsymbol{\xi}'\mathbf{T}(\mathbf{y})\right). \tag{2}$$

在方程 2中， $\boldsymbol{\xi} = [\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_K]'$ 是自然参数向量，

$$\mathbf{T}(\mathbf{y}) = [T_1(\mathbf{y}), T_2(\mathbf{y}), \ldots, T_K(\mathbf{y})]'$$

是图所允许的每种团大小对应的充分统计量向量，且 K 是图中最大的团大小。我们定义

$$T_k(\mathbf{y}) = \sum_{c \in C, |c|=k} g(\mathbf{y}_c),$$

其中 $|c|$ 表示集合 c的基数。

根据定义 2.1， $T_k(\mathbf{y})$ 是大小/阶数为 k的团的团势函数之和，且仅当图允许阶数为 k 的团时才存在。我们将与阶数为 $k > 1$ 的团相关的所有参数称为空间依赖参数，因为它们会影响变量之间的相互依赖。值得注意的是，对于一阶的规则格点，

图所允许的最高阶团是成对团。即使图允许更高阶的团，指定仅具有成对依赖的模型也相当常见，下面介绍的所有常见形式都是如此。

对于指数族，对数配分函数与充分统计量的累积量之间存在一种特殊关系。令 $A(\boldsymbol{\xi}) = \log Z(\boldsymbol{\xi})$ 表示对数配分函数，则有

$$A(\boldsymbol{\xi}) = \log \left(\sum_{y \in \mathcal{Y}} \exp(\boldsymbol{\xi}' \mathbf{T}(\mathbf{y})) \right).$$

首先对 $A(\boldsymbol{\xi})$ 关于 $\boldsymbol{\xi}$ 求导（即 $\nabla A(\boldsymbol{\xi}) = [\frac{\partial r(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_1}, {}^{\partial r}{}_{(\boldsymbol{\xi})\,\partial \xi_2}, \ldots]'$），可得 $\nabla A(\boldsymbol{\xi}) = \mathrm{E}(\mathbf{T}(\mathbf{y}))$。因此，对数配分函数的一阶导数是充分统计量向量的期望值（即第一累积量）。求二阶导数可得 $\nabla^2 A(\boldsymbol{\xi}) = \mathrm{cov}(\mathbf{T}(\mathbf{y}))$，其中 $\nabla^2 A(\boldsymbol{\xi})$ 是二阶偏导数矩阵。具体而言，有

$$\nabla^2_{ij} A(\boldsymbol{\xi}) = \mathrm{cov}(T_i(\mathbf{y}), T_j(\mathbf{y})) = \frac{\partial^2 A(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_i \partial \xi_j}.$$

这些数学结果对于刻画马尔可夫随机场在 $\boldsymbol{\xi}$的不同取值下的行为尤其有用。结合统计力学文献与这些结果，我们在第 3 节介绍了一种新的先验分析工具——响应函数，它非常适合用于分析不同的马尔可夫随机场表述如何编码空间依赖。例如，在第 4 节中，我们展示了伊辛模型中广为研究的相变现象如何体现在 $\mathrm{var}(T_2(\mathbf{y}))$ 随 ξ_2 变化 [Stoehr, 2017]。

2.2 简化指数族马尔可夫随机场的形式化设定

下面介绍文献中最常见的简化指数族马尔可夫随机场（SEF-MRF）形式。对于二元数据，常见的形式包括物理学伊辛表述、伊辛表述和自逻辑斯蒂表述。对于分类数据，通常使用*Potts* 表述；这里我们介绍标准的 Potts 表述，并在

第6节。按照我们的术语，并与“伊辛模型”在统计学文献中的用法保持一致，伊辛表述与二态波茨形式相同，而不同于物理伊辛模型。事实上，伊辛表述与物理学伊辛表述可通过变量变换相互关联。尽管这些形式各自在特定建模场景中已有先例（例如，自逻辑斯蒂表述主要用作直接数据模型），但我们强调，每种形式都可用作直接数据模型、层次框架中的一个组成部分（例如，作为潜在离散变量的先验分布），或用于更灵活的建模场景（例如，条件随机场）。接下来，我们首先将这些形式作为$\mathbf{y}$ 的直接数据模型进行介绍，并将称 $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$ 为数据模型。

对于所有形式化设定，我们仅假设存在成对依赖，令 $\xi_k = 0 \text{for} k > 2$，并设 $\xi_2 = \psi$。对于二元形式，令 $\xi_1 = \alpha$ and $g(y_i) = y_i$；一般波茨模型则需要稍作修改，具体如下文所述。仅假设存在成对依赖时，作为直接数据模型的 SEF-MRF 具有如下的一般形式

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \exp\left(\alpha \sum_i g(y_i) + \psi \sum_{i\sim j} g(y_i, y_j)\right),$$

其中 $\boldsymbol{\xi} = [\alpha, \psi]'$， $\sum_i \equiv \sum_{i=1}^n$，且 $i \sim j$ 表示图中所有邻居的集合（即集合 $\mathbf{E}$）。各模型的主要区别在于函数 $g(y_i, y_j)$，而物理伊辛模型的区别在于 y_i 所取的值。令 $I(\cdot)$ 为指示函数；当括号内的命题为真时取值为一，否则取值为零。表 1 总结了所有模型所对应的 g 函数以及 y_i的取值。

参数 α 和 ψ 分别可通过充分统计量$T_1(\mathbf{y}) = \sum_i g(y_i)$ 和 $T_2(\mathbf{y}) = \sum_{i\sim j} g(y_i, y_j)$来解释：令$\mathbf{y}^*$ 为另一种构型，那么我们可以将构型$\mathbf{y}^*$ 相对于构型$\mathbf{y}$ 的对数优势写作

$$\log\left(\frac{q(\mathbf{y}^*|\boldsymbol{\xi})}{q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})}\right) = \alpha(T_1(\mathbf{y}^*) - T_1(\mathbf{y})) + \psi(T_2(\mathbf{y}^*) - T_2(\mathbf{y})), \tag{3}$$

模型	y_i	$g(y_i,\ y_j)$
物理伊辛模型	$\{-1, 1\}$	$y_i y_j$
自逻辑	$\{0, 1\}$	$y_i y_j$
伊辛模型	$\{0, 1\}$	$I(y_i = y_j)$
Potts	$\{0, 1, \ldots, k-1\}$	$I(y_i = y_j)$

表1：二元数据和分类数据马尔可夫随机场常见形式化设定汇总表。

这提供了一种有用的模式，可用于解释 α 和 ψ 对自然无向图中各构型的影响。例如，我们可以比较两种不同的构型，使得 $T_1(\mathbf{y}) = T_1(\mathbf{y}^*)$，但在 T_2 上有所不同，从而解释 ψ 的边际效应；反之亦然，以解释 α的边际效应。下面将通过阐述不同的马尔可夫随机场表述，并解释每种表述中的参数，给出具体示例。

2.2.1 物理伊辛模型表述

我们首先介绍物理伊辛模型 [伊辛模型， 1925] 这是因为它在历史上具有开创性地位，并对物理学和统计学领域产生了深远影响 [Duminil-Copin， 2022]。马尔可夫随机场的许多术语（包括相变）都源自统计力学中的模型，其中最著名的便是物理伊辛模型。物理伊辛模型最初是作为铁磁金属行为的模型提出的，这类金属中的原子排列在格点上。因此， y_i 取值为 -1 和 1，分别表示每个原子的自旋向下或自旋向上。物理伊辛模型定义如下。

定义 2.2。 当 $g(y_i, y_j) = y_i y_j$ 且 $g(y_i) = y_i$时，该 *MRF* 具有如下物理学伊辛表述：

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \exp\left(\alpha \sum_i y_i + \psi \sum_{i \sim j} y_i y_j\right),$$

其中 $\mathbf{y} \in \{-1, 1\}^n$。

当马尔可夫随机场采用物理学伊辛表述时，其全条件分布为

$$q(y_i|\mathbf{y}_{\partial(i)}) = \frac{\exp\left(y_i\left(\alpha + \psi\sum_{j\in\partial(i)} y_j\right)\right)}{\exp\left(-\alpha - \psi\sum_{j\in\partial(i)} y_j\right) + \exp\left(\alpha + \psi\sum_{j\in\partial(i)} y_j\right)}, \tag{4}$$

对于 $y_i \in \{-1, 1\}$。虽然统计力学倾向于采用与上述形式略有不同的参数化方式，但统计力学中的概念与之类似，因为充分统计量相同。成对充分统计量 $T_2(\mathbf{y})$ 是构型 $\mathbf{y}$ 中匹配数 $\sum_{i\sim j} I(y_i = y_j)$ 减去不匹配数 $\sum_{i\sim j} I(y_i \neq y_j)$。由此可得，$T_2(\mathbf{y}) \in \{t : t = -|\mathbf{E}| + 2u,\ u \in \mathbb{N},\ u \leq |\mathbf{E}|\}$，其中 $\mathbb{N}$ 是自然数集，$|\mathbf{E}|$ 是自然无向图中的边数。换言之，构型的匹配数每增加一，成对充分统计量便增加二。请注意，对于不同的图结构，成对充分统计量的样本空间可能只是上述集合中针对 $T_2(\mathbf{y})$ 的一个子集。同样，$T_1(\mathbf{y}) \in \{t : t = -|\mathbf{V}| + 2u,\ u \in \mathbb{N},\ u \leq |\mathbf{V}|\}$，该集合也描述了 T_1 的样本空间。

空间依赖参数 ψ （与统计力学中的逆温度直接相关）决定了系统对相邻原子自旋相互匹配（即同为1或同为-1）的偏好。当 $\psi > 0$时，系统被称为协同、吸引或铁磁的，相邻区域单元上的变量更可能匹配；对于 $\psi = 0$，自旋是独立的。当 $\psi < 0$时，系统被称为竞争、排斥或反铁磁的，从而更偏好相邻变量之间的不匹配；这种模式在空间统计学的大多数应用中并不常见，但也并非不可想象。考虑两个构型$\mathbf{y}^*$ 和$\mathbf{y}$，其中$\mathbf{y}^*$ 比$\mathbf{y}$多一对匹配的区域单元，但 $T_1(\mathbf{y}^*) - T_1(\mathbf{y}) = 0$。其差值为 $T_2(\mathbf{y}^*) - T_2(\mathbf{y}) = 2$，因此由方程3可知，构型$\mathbf{y}^*$ 相对于$\mathbf{y}$的对数优势等于 2ψ。同样的逻辑也适用于解释ψ 在全条件分布中的效应，即当将单个相邻区域单元从负一变为一时。

参数 α 被称为外场：当 α取正值时，系统赋予具有净向上自旋（即1多于-1）的构型更高的概率，因此当 $\alpha > 0$时 $E(T_1(\mathbf{y})) > 0$，而负值则偏好具有净向下自旋的构型。按照与前面类似的步骤，假设两个构型$\mathbf{y}^*$ 和$\mathbf{y}$的匹配数相同（$T_2(\mathbf{y}^*) = T_2(\mathbf{y})$），但$\mathbf{y}^*$ 多一个取值为1的区域单元。于是，构型$\mathbf{y}^*$ 相对于$\mathbf{y}$ 的对数优势为 2α。

需要注意的是，配置空间 $\mathcal{Y}$ 并不能通过上述两种情形得到简洁的探索，即固定 T_1 并递增T_2，或固定 T_2 并递增 T_1。考虑规则一阶格点上所有取负一值的构型，将一个内部区域单元改为正一值会使 T_1 增加二，但使 T_2 减少四。

2.2.2 自逻辑斯蒂表述

自逻辑斯蒂模型的提出采用了不同的视角：马尔可夫随机场条件分布必须采用何种形式，才能属于指数族，同时仍忠实于自然无向图 $\mathbf{N}$？Besag [1974]为一般指数族给出了证明，并进一步得出了二元数据的结果：

$$q(y_i|\mathbf{y}_{\partial(i)}) = \frac{\exp\left(y_i\left(\alpha + \psi\sum_{j\in\partial(i)} y_j\right)\right)}{1+\exp\left(\alpha + \psi\sum_{j\in\partial(i)} y_j\right)}, \tag{5}$$

对于 $y_i \in \{0,1\}$。这种形式化设定得出的成对团势解析形式与物理学伊辛表述相同，关键区别在于二元观测的编码方式，因此模型对空间依赖采用了不同的编码。下面给出自逻辑斯蒂表述的定义。

定义 2.3。对于 $\mathbf{y} \in \{0,1\}^n$，$g(y_i) = y_i$和 $g(y_i, y_j) = y_i y_j$，若一个马尔可夫随机场具有自逻辑斯蒂表述，则

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})}\exp\left(\alpha\sum_i y_i + \psi\sum_{i\sim j} y_i y_j\right).$$

在物理学伊辛表述中，自然会谈到向上和向下的自旋；而在这里，零一编码很适合用黑白图像来类比。本文其余部分将始终沿用这种黑白图像的说法，其中“黑色”区域单元对应于 $y_i = 1$，“白色”对应于 $y_i = 0$。在自逻辑斯蒂表述中，$T_1(\mathbf{y}) \in \{t\colon t \in \mathbb{N}, t \leq |V|\}$，且 $T_2(\mathbf{y}) \in \{t\colon t \in \mathbb{N}, t \leq |E|\}$。统计量 T_1 计算黑色区域单元的数量，而 T_2 只计算黑黑匹配数。对称的物理学伊辛表述与非对称的自逻辑斯蒂模型在充分统计量上的差异会产生重要影响。在自逻辑斯蒂表述中，对于两个构型，若 $\mathbf{y}^*$ 比 $\mathbf{y}$ 多一个黑色区域单元，但 $T_2(\mathbf{y}^*) = T_2(\mathbf{y})$，则 $\mathbf{y}^*$ 相对于 $\mathbf{y}$ 的对数优势等于 α。同样，假设 $T_1(\mathbf{y}^*) = T_1(\mathbf{y})$，但将 $\mathbf{y}^*$ 中的黑黑匹配数增加一，则 $\mathbf{y}^*$ 相对于 $\mathbf{y}$ 的对数优势为 ψ。相比之下，当白白匹配数增加一且 $T_1(\mathbf{y}^*) = T_1(\mathbf{y})$ 时，对数优势不会发生变化。就变量 y_i的全条件分布的对数优势而言，ψ 的非对称性也显而易见。区域单元 i 的每个邻居若取值为 1，都会使给定其邻居时 y_i 取值为 1 的对数优势增加 ψ。Caragea 和 Kaiser [2009] 提出了中心化自逻辑斯蒂模型，以解决这种非对称性。在第 Section 5.1节中，我们使用响应函数指出，对自逻辑斯蒂表述进行这一修改会带来一种不理想的性质。我们还在第4节指出，与所介绍的其他三种模型不同，自逻辑斯蒂模型不会出现相变，并讨论其影响。

2.2.3 伊辛表述

Potts [1952] 将物理学伊辛表述扩展到了分类情形。对于二元数据，Potts表述的二状态版本中，y_i 采用零-一编码，通常在统计学文献中称为“伊辛模型”。本文沿用这一惯例，并给出以下定义。

定义 2.4。 对于$\mathbf{y} \in \{0,1\}^n$，$g(y_i) = y_i$ 以及 $g(y_i, y_j) = I(y_i = y_j)$，一个马尔可夫随机场具有伊辛表述

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \exp\left(\alpha \sum_i y_i + \psi \sum_{i\sim j} I(y_i = y_j)\right).$$

这是统计学家在层次模型中指定伊辛先验时最常使用的形式化设定。实际上，物理学伊辛表述与伊辛表述之间相差一个 2 倍因子。对于伊辛模型，我们有 $T_1(\mathbf{y}) \in \{t : t \in \mathbb{N},\ t \leq |V|\}$ 且$T_2(\mathbf{y}) \in \{t : t \in \mathbb{N},\ t \leq |E|\}$，其中，同样地，$T_2$ 的样本空间可能只是所给集合的一个子集。在保持 T_2 不变的情况下，将一个区域单元从$\mathbf{y}$ 中的白色改为$\mathbf{y}$中的黑色*，所得对数优势为 α。因此，$\alpha^{(I)} = 2\alpha^{(PI)}$，其中上标 (I) 表示伊辛表述，而 (PI) 表示物理学伊辛表述。由于 T_2 统计匹配数（包括黑-黑匹配和白-白匹配），我们还可以得到 $\psi^{(I)} = 2\psi^{(PI)}$。同理，在保持 T_1 不变的情况下，将$\mathbf{y}^*$ 中从$\mathbf{y}$ 起的匹配数增加 1，所得对数优势为 ψ。这也可以根据以下事实得到验证：$T_{(PI)2} = 2T_{(I)2} - |\mathbf{E}|$。伊辛模型的全条件分布为

$$q(y_i|\mathbf{y}_{\partial(i)}) = \frac{\exp\left(\alpha y_i + \psi \sum_{j\in\partial(i)} I(y_j = y_i)\right)}{\exp\left(\psi \sum_{j\in\partial(i)} I(y_j = 0)\right) + \exp\left(\alpha + \psi \sum_{j\in\partial(i)} I(y_j = 1)\right)}, \tag{6}$$

对于 $y_i \in \{0,1\}$。

2.2.4 Potts表述

现在给出标准的 Potts表述，其中 y_i 可以取 k 个不同的分类$\{0,1,\ldots,k-1\}$。第 6.1 节给出了适用于分类数据的更灵活的 Potts表述，并在第 6.2 节中说明了针对有序数据的扩展。延续图像类比，k 这些分类通常称为颜色。Potts表述的定义如下。

定义 2.5。对于 $\mathbf{y} \in \{0,1,\ldots,k-1\}^n$，$g_l(y_i) = I(y_i = l)$ 对于 $l \in \{0,1,\ldots,k-1\}$ 和

$g(y_i, y_j) = I(y_i = y_j)$，马尔可夫随机场具有 *Potts*表述

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\xi})} \exp\left(\sum_{l=0}^{k-1} \alpha_l \sum_i I(y_i = l) + \psi \sum_{i\sim j} I(y_i = y_j)\right).$$

为保证可识别性，我们设定 $\alpha_l = 0$。或者，也可以施加约束 $\sum_{l=0}^{k-1} \alpha_l$ =0。向量 $[\alpha_0, \ldots, \alpha_{k-1}]'$的充分统计量是每种颜色 l的总和，我们定义 $T_{1l}(\mathbf{y}) = \sum_i I(y_i = l)$。与之前一样，在固定 T_2 的情况下，我们有： α_l 等于将一个区域单元从颜色 l 改为颜色 l 的对数优势。 ψ 的解释与伊辛表述中的相同。

3 响应函数

本节介绍一种新的先验分析工具——响应函数，它特别适合用于刻画马尔可夫随机场（MRF）的不同形式化设定如何编码空间依赖。作为一种先验分析技术，响应函数与 Gelman 等人 [2020]提出的贝叶斯工作流十分契合。定义 $\mathbb{R}$ 为实数集合。令 $\mathcal{F} : p \to \mathbb{R}$ 为由抽样模型 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$诱导的 $T(\mathbf{y})$ 抽样分布到实数的泛函映射，我们将其记为 $\mathcal{F}_{\boldsymbol{\theta}}(T(\mathbf{y}))$。响应函数的核心思想是，在固定 $\boldsymbol{\theta}_{-i}$的情况下，考察单个参数 θ_i对抽样模型 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$下 $T(\mathbf{y})$ 抽样分布的泛函 $\mathcal{F}$所产生的影响。这里我们用 $\boldsymbol{\theta}_{-i}$ 表示移除第 i个参数后的参数集合／向量。通常，我们会考察期望值和方差，将它们作为相对于 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$的摘要统计量抽样分布的泛函。针对一组摘要统计量的响应函数能够为了解抽样模型的行为提供有用见解。响应函数的定义如下。

定义 3.1. 对于统计量 $T(\mathbf{y})$、抽样模型 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$、参数 $\boldsymbol{\theta}$ 和泛函 $\mathcal{F}$， $\mathcal{F}$-响应函数对于 θ_i 是由抽样分布定义的

汇总统计量的泛函，受 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$诱导，

$$h^{\mathcal{F}}_{T(\mathbf{y})}(\theta_i|\boldsymbol{\theta}_{-i}) = \mathcal{F}_{\boldsymbol{\theta}}(T(\mathbf{y})),$$

作为 θ_i 的函数。

稍后在第4 节，我们将考察 $T_1(\mathbf{y})$ 和 $T_2(\mathbf{y})$ 的均值与方差响应函数，以理解马尔可夫随机场（MRF）某些形式化设定中呈现的相变现象。我们不再将 $\boldsymbol{\theta}_{-i}$ 固定不变，而是可以为 $\boldsymbol{\theta}$ 设置先验分布，并在条件先验$\boldsymbol{\theta}_{-i}$ 下对 $p(\boldsymbol{\theta}_{-i}|\theta_i)$ 积分消去。这将得到一个先验预测响应函数，其定义如下。

定义3.2. 对于统计量 $T(\mathbf{y})$、抽样模型 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ （其参数为 $\boldsymbol{\theta}$）、条件先验 $p(\boldsymbol{\theta}_{-i}|\theta_i)$以及泛函 $\mathcal{F}$，参数 θ_i 的先验预测响应函数是汇总统计量分布的泛函，

$$h^{\mathcal{F}}_{T(\mathbf{y})}(\theta_i) = \mathcal{F}_{\theta_i}(T(\mathbf{y})),$$

相对于边际抽样模型 $p(\mathbf{y}|\theta_i) = \int p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})p(\boldsymbol{\theta}_{-i}|\theta_i)d\boldsymbol{\theta}_{-i}$。

当未知 $T(\mathbf{y})$ 的抽样分布泛函时，我们可以通过模拟来估计响应函数和先验预测响应函数。

3.1 蒙特卡罗估计

只要我们能够从 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ 中获取样本，响应函数和先验预测响应函数的估计就很直接。有关马尔可夫随机场抽样算法的综述，请参见 Izenman [2021]。要获得 $h^{\mathcal{F}}_{T(\mathbf{y})}(\theta_i|\boldsymbol{\theta}_{-i})$ 的估计，固定 $\boldsymbol{\theta}_{-i} = \boldsymbol{\theta}^*_{-i}$，并令 $\mathbf{w} = [w_1, \ldots, w_J]$ 为覆盖 θ_i取值范围的一系列点。对于每个 $j = 1 \ldots, J$，从 B中获取 $p(\mathbf{y}|\theta_i = w_j, \boldsymbol{\theta}^*_{-i})$ 的样本，然后将每个 w_j 处的响应函数估计为

$$\hat{h}^{\mathcal{F}}_{T(y)}(\theta_i = w_j|\boldsymbol{\theta}^*_{-i}) = f(\{T(\mathbf{y}_{jb})\}_{b=1}^{B}),$$

其中，$\mathbf{y}^{jb}$ 表示当 $\theta_i = w_j$ 时的第 b 个样本，而 f 是一个可作用于经验分布的函数（即与泛函 $\mathcal{F}$相对应的抽样集合 $\{T(\mathbf{y}^{jb})\}_{b=1}^{B}$）。例如，当 $\mathcal{F}$ 为期望算子时，我们有

$$f(\{T(\mathbf{y}_{jb})\}_{b=1}^{B}) = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T(\mathbf{y}_{jb})$$

方差则为

$$f(\{T(\mathbf{y}_{jb})\}_{b=1}^{B}) = \frac{1}{B-1}\sum_{b=1}^{B}\left(T(\mathbf{y}_{jb}) - \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T(\mathbf{y}_{jb})\right)^2.$$

同一组 $J \times B$ 样本可用于估计其他汇总统计量 $T(\mathbf{y})$和感兴趣的泛函。

先验预测响应函数的蒙特卡洛估计可以用类似的方式获得。对于每个 $j = 1, \ldots, J$，我们首先从 $p(\boldsymbol{\theta}_{-i}|\theta_i)$中获得 B 个 $\boldsymbol{\theta}_{-i}$ 抽样；当 $\boldsymbol{\theta}_{-i}$ 和 θ_i 在先验上独立时，该过程可简化为 $p(\boldsymbol{\theta}_{-i})$。然后，对于 $b = 1, \ldots, B$，我们从 $p(\mathbf{y}|\theta_i = w_j, \boldsymbol{\theta}_{-i,b})$中获得一个抽样，并估计

$$\hat{h}^{\mathcal{F}}_{T(y)}(\theta_i = w_j) = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} f(T(\mathbf{y}_{jb})),$$

其中，$\mathbf{y}^{jb}$ 是从分布 $p(\mathbf{y}|\theta_i = w_j)$中抽取的样本。如果$\mathbf{w}$ 是足够精细的网格，且 B 足够大，使得该估计的蒙特卡罗误差可以忽略不计，则对于 $j = 1, \ldots, J-1$，可以用连接$(w_j, \hat{h}^{\mathcal{F}}_{T(y)}(\theta_i = w_j|\boldsymbol{\theta}^*_{-i}))$和$(w_{j+1}, \hat{h}^{\mathcal{F}}_{T(y)}(\theta_i = w_{j+1}|\boldsymbol{\theta}^*_{-i}))$的线段来近似响应函数。否则，可以使用平滑技术来估计 $\hat{h}$。也可以采用类似的方法生成先验预测响应函数的蒙特卡洛估计。

3.2 与热力学量的联系

响应函数的先验分析工具直接受到物理伊辛模型中广为研究的热力学量的启发。此前我们提到，

$-\sum_{c\in C} f_c(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$ 在统计力学中被解释为势函数，或称哈密顿量。在马尔可夫随机场中，图的势能较低的构型会被赋予较高的概率。在这种设定下，物理伊辛模型是铁磁性的数学模型。在第 2.2.1 节中，我们介绍了一种物理伊辛模型的参数化形式，这种形式对于统计学家而言更为熟悉，也与第 2 节介绍的其他马尔可夫随机场表述类似。关于物理学家使用的、更传统的参数化形式，可参阅 Cipra [1987]。

在描述格点上原子的行为时，物理学家试图了解如何ψ （在我们的形式化设定中，它是逆温度的线性重新参数化）影响原子的磁性行为。系统的行为通过热力学量来概括，而这些量通常可以表示为对数配分函数的函数。例如，$\mathbf{E}_{\boldsymbol{\xi}}(\mathbf{T}_1(\mathbf{y})) = {}^{\partial A}(\boldsymbol{\xi})\ {}_{\partial\alpha}$ 是物理伊辛模型中系统的磁化强度。重要的是，这些热力学量对格点中原子的铁磁行为具有现实世界中的解释。因此，物理学家会研究热力学量随逆温度和/或外场变化的函数关系。有时，这种函数具有解析形式；另一些情况下，则通过模拟来研究。研究概率分布的泛函概括这一思路最初用于描述物理系统，而这与我们的响应函数采用的做法完全相同；我们将其推广为一种先验分析工具，以帮助理解抽样模型。在下一节中，我们将展示响应函数如何凸显马尔可夫随机场某些形式化设定中的相变行为。

4 相变

如本文前文所述，伊辛模型和波茨模型的一个关键性质是相变现象。物理学家通过热力学量研究这一现象；在统计建模中，响应函数有助于理解其中编码的

马尔可夫随机场中的空间依赖，并为其空间依赖参数设定先验分布。我们将在第4.3节探讨相变对从马尔可夫随机场模拟构型的影响。由于相变在物理学中十分重要，统计学文献中也经常提及这一术语，但其定义有时仍不够明确。一个简单的定义看似同义反复：相变就是从一种状态转变为另一种状态。物质从液态转变为固态就是一种相变。在这个凝固的例子中，存在一个临界温度，物质在该温度下会发生系统有序程度的转变。高于临界温度时，分子以某种方式相互作用，使物质呈现液态特征；低于临界温度时，物质则变为固态。在临界温度处，系统的有序程度存在明显的二分。对于马尔可夫随机场的波茨模型和伊辛表述（以及物理伊辛模型），存在一个明确的临界值 ψ^*，低于和高于该值时，马尔可夫随机场的实现明显不同。下面我们将给出离散马尔可夫随机场相变的两种统计学解释。

4.1 统计解释

在相变过程中，系统的变化表现为系统有序程度的不连续性。物理学家提出并随后证明，这种不连续性会出现在描述铁磁系统行为的热力学量中。遵循 Stoehr [2017], 的做法，我们用充分统计量对相变作出明确的统计学解释，并由此推导出热力学量。在解释这种不连续性之前，我们先给出定义：若采用零一编码的两个构型 $\mathbf{y}^*$ 和 $\mathbf{y}$ 满足互补关系，则称它们为互补构型。现在，为了说明这一点，假设 $\alpha = 0$。显然，对于伊辛表述， $q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi}) = q(1-\mathbf{y}|\boldsymbol{\xi})$，因为 $g(y_i, y_j) = I(y_i = y_j)$是对称的。因此， $T_1(\mathbf{y})/n$ 的分布是对称的，并以 $1/2$ 为中心，因为互补构型具有相同的概率，而且

$T_1(\mathbf{y})/n = 1 - T_1(\mathbf{y}^*)/n$。由此可知，$T_1(\mathbf{y})/n$ 的期望值等于 $1/2$。回顾第 2.1 节，$\mathbf{E}(T_1(\mathbf{y})) = {}^{\partial A}(\boldsymbol{\xi})\ {}_{\partial\alpha}$。对于伊辛表述中所有有限格点以及 ψ 的所有取值，只要满足 $\alpha = 0$，这一结果都成立。有趣的是，当我们允许 $n \to \infty$和 $\alpha \to 0$时，对于 ψ的所有取值，这一结果并不成立。当空间依赖参数低于临界值 $\psi < \psi^*$时，我们有

$$\lim_{\alpha\to 0}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\frac{\partial A(\boldsymbol{\xi})}{\partial\alpha} = \frac{1}{2}.$$

当外场被撤去（$\alpha \to 0$）时，在 n 趋于无穷的极限下，概率分布将再次对互补构型赋予相等的概率。而对于$\psi > \psi^*$，我们则有

$$\lim_{\alpha\to 0^+}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\frac{\partial A(\boldsymbol{\xi})}{\partial\alpha} > \frac{1}{2} \quad \text{and} \quad \lim_{\alpha\to 0^-}\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\frac{\partial A(\boldsymbol{\xi})}{\partial\alpha} < \frac{1}{2},$$

其中 $\to 0^+$ 表示从上侧的单侧极限，而 $\to 0^-$ 表示从下侧的极限。外场的残余效应会在无限系统中持续存在，当 ψ 高于临界值时。（参见图5，载于Cipra [1987]对物理学伊辛表述的综述。）也就是说，$T_1(\mathbf{y})/n$ 的期望值即使在 $\alpha \to 0$时，仍会偏向外场原先的牵引。如上所述，对于物理学伊辛表述，$\frac{1}{n}{}^{\partial A}(\boldsymbol{\xi})\ {}_{\partial\alpha}$ 可被理解为系统的磁化强度。Peierls [1936] 最先证明，通过“自发”磁化强度表现出来的相变确实存在于二维格子上。（参见Duminil-Copin [2022] 对物理学伊辛表述及关键进展的历史概述。）

后来，Kramers 和 Wannier [1941] 推测，比热是 ${}^{\partial^2 A(\boldsymbol{\xi})}\ {}_{\partial\psi^2}$ 的函数，会在 ψ^* 当 $\alpha = 0$时出现不连续性。Stoehr [2017] 简洁地用成对充分统计量的方差来表达这种不连续性

$$\lim_{\psi\to\psi^*}\lim_{n\to\infty}\operatorname{var}(T_2(\mathbf{y})) = \infty.$$

需要记住的是，相变只存在于无限晶格中，而上述方程所表示的不连续性在有限格点中会变得平滑，

也就是说，极限存在（即极限是有限的）。尽管严格来说，相变只存在于无限晶格中，但这一现象及其影响在有限格点中仍然显而易见。在有限格点中，当 ψ 接近临界值时，我们会看到 $T_2(\mathbf{y})$ 的方差急剧上升。对于一阶晶格，伊辛模型和 Potts 模型的临界值已知为 $\psi^* = \log(1+\sqrt{k})$，其中 k 是状态数。

–

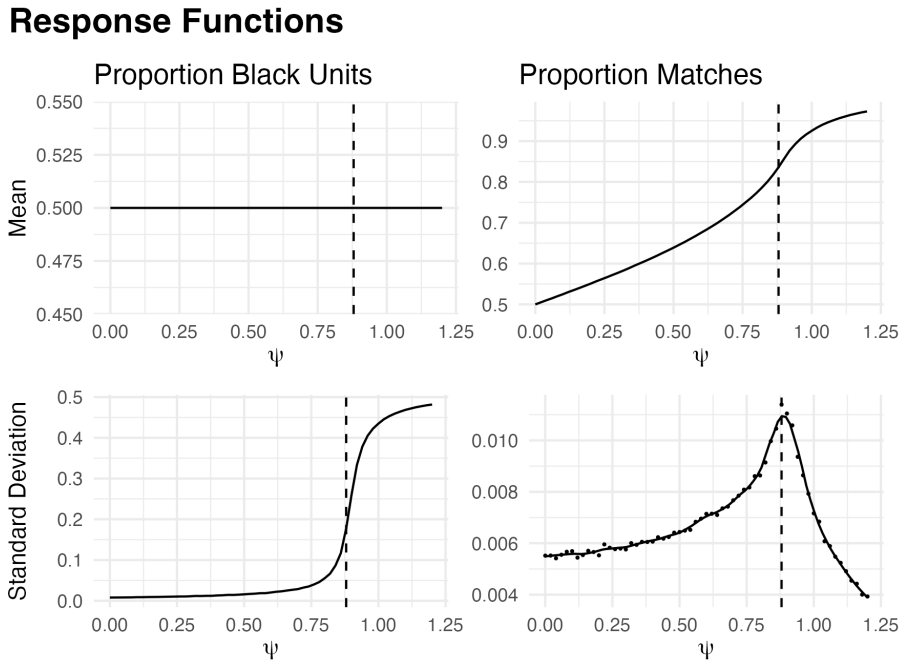


图 2：采用伊辛模型表述且无外场的马尔可夫随机场的响应函数的蒙特卡罗估计：黑色单元比例（左列）和匹配比例（右列）分布的均值与方差。虚线标示已知的临界值 $\psi \approx 0.88$。

我们可以利用响应函数观察有限晶格中的这一现象。图2展示了一阶晶格中黑色单元比例和匹配比例的均值与标准差响应函数 64×64。为了估计响应函数，我们从 $\psi = 0.0$的马尔可夫随机场中抽取了 *2,000* 个样本，参数取值为$0.02, \ldots, 1.2$。每个样本通过执行 400 次 Swendsen-Wang 算法迭代获得 [Swendsen和Wang, 1987], 当 ψ 接近临界值时，该算法比单个顶点更新收敛得更快

（见第4.3节）。对于未呈现平滑趋势的响应函数蒙特卡洛估计，我们使用了 `geom smooth` 中的 `ggplot2` 函数对蒙特卡罗误差进行平滑处理，该函数执行 LOESS 回归 [Wickham 等人, 2019]。图2同时展示了各个蒙特卡洛估计值，以及在必要时拟合的平滑曲线。竖直虚线标示出 $\psi^* \approx .88$的临界值。正如预期，匹配比例的标准差在临界值附近急剧上升。这一边界标志着黑色单元比例的分布从单峰转变为双峰。超过临界值后，我们还会看到黑色单元比例的标准差急剧上升，这与几乎全黑或几乎全白构型所形成的双峰分布相对应。

4.2 空间依赖参数的先验分布选择

在包含马尔可夫随机场组件的贝叶斯模型中，常在区间 $[0, \psi_{max})$ 上为 ψ 采用均匀先验。Moores 等人 [2020] 建议选择高于 ψ^* 的 ψ_{max}，以便在马尔可夫随机场的先验空间中允许出现“有序”构型。在空间统计学的语境下，人们很容易将“有序”理解为具有空间聚类的构型，但马尔可夫随机场的实现对于 $\psi < \psi^*$ 都会呈现空间聚类。由于有限图上的相变并非明显的不连续性，当伊辛模型或 Potts 马尔可夫随机场的 ψ 略高于 ψ^* 时，其实现并不会全是单一颜色的构型；但随着 ψ 高于 ψ^*，很快就会完全由单一颜色主导。在其他情况下，文献并未提供采用特定 ψ_{max} 的理由 [Møller 等，2006；Everitt, 2012；Lyne 等人， 2015]。秉持响应函数的思路，另一些研究则通过模拟研究考察伊辛模型或 Potts 先验中的匹配比例，以确定相变发生的位置，从而设定 $\psi_{max} = \psi^*$ [Green 和 Richardson，2002；Cucala 等人， 2009]。作者认为，这种做法是合理的，因为实际应用中的随机场并不会由单一颜色主导。鉴于观测数据所提供的信息，Møller 等人 [2006] 指出，

均匀先验的最大值可能无关紧要（只要 $\psi_{max} > \psi^*$），因此可以改用具有非负支撑的先验（即 $\psi \in [0, \infty)$。

4.3 临界减速

相变对马尔可夫随机场推断影响最大之处在于，马尔可夫随机场采样器会出现临界减速，因为 $\psi \to \psi^*$。我们确实对马尔可夫随机场的采样方法进行了详细综述；有关这方面的综述，请参阅 Izenman [2021]。许多推断技术都依赖于从马尔可夫随机场中采样构型（见第7节），响应函数也通过蒙特卡洛模拟进行估计。

依赖单个区域单元更新的采样器，例如吉布斯采样器 [GemanandGeman、 1984] 以及过去耦合 [Propp andWilson， 1996] 都依赖对整个构型进行足够多轮的 M单个顶点更新，使得采样得到的构型可以视为来自一个马尔可夫随机场的样本。这里，算法的一轮迭代是对构型中的每个顶点进行一次更新。对于过去耦合，算法保证能够从马尔可夫随机场中精确抽样，因为 M会自适应地增大，直至达到收敛。吉布斯采样器可用于所有形式化设定（“吉布斯”一词源自吉布斯分布；在统计力学中，马尔可夫随机场也称为吉布斯分布，它通过成对相互作用描述系统的能量），而过去耦合要求构型具有偏序，因此只能用于二状态模型和具有 $k \leq 3$的波茨模型。对于呈现相变的马尔可夫随机场，这两种采用单个区域单元更新的算法都会遭遇临界减速，正如 $\psi \to \psi^{*-}$ [Izenman， 2021]。具体而言，随着 $\psi \to \psi^{*-}$的增大，这两种算法收敛所需的迭代次数 M也会增加；也就是说，当 ψ 接近临界值及高于临界值时，收敛速度会慢得多。这是相变在有限晶格上造成的持续影响：随着$\psi \to \psi^{*-}$的变化， $T_1(\mathbf{y})$ 的分布会越来越平坦，直至在伊辛表述中变为双峰，条件是 $\psi > \psi^*$。因此

依此，依赖单个区域单元更新的算法需要更多步骤才能有效探索整个状态空间。换言之，尽管在没有外场的先验分布中，两组构型出现的概率相同，但采用单个区域单元更新时，要从几乎全为一种颜色的构型转移到几乎全为另一种颜色的构型相当困难。由于自逻辑斯蒂表述不具有对称成对团势，因此不会发生相变，使用的采样器也不会出现这种临界减速。

针对这种临界减速现象，人们提出了两种专门的采样器：Swendsen-Wang 算法可用于从具有任意状态数的离散马尔可夫随机场中采样 [Swendsen和Wang， 1987]而 Wolff 算法则能高效地为二元马尔可夫随机场采样构型 [Wolff， 1989]。众所周知，Swendsen-Wang 算法在存在外场时表现不佳，因此Barbu 和 Zhu [2003] 提出了一种改进的 Swendsen-Wang cuts 算法，将外场信息纳入其中。

5 外场参数化

在上述马尔可夫随机场形式化设定的最简单版本中，我们将外场参数 α 设定为在所有区域单元中均为常数。当我们为 α_i 提供一个依赖于观测变量（即协变量）的参数化形式时，便可构建更丰富的马尔可夫随机场类别。以下讨论的情形中，外场是协变量向量 $\mathbf{x}_i$（与每个区域单元相关联）、结果变量 $\mathbf{y}_i$，或协变量与结果变量组合的参数函数。

5.1 通过协变量施加外场

考虑将 MRF 中的外场参数化为协变量的线性组合，并赋予未知系数，这与多元回归的设定类似。也就是说，我们设定 $\alpha_i = \mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta}$，其中 $\boldsymbol{\beta}$ 是一个系数向量，而 $\mathbf{x}_i$ 是一个向量

，对应于协变量矩阵 $\mathbf{X}$ 的第 i 行。对于二元结果的直接数据模型，我们可以将不依赖于形式化设定的概率模型写为

$$q(\mathbf{y}|\boldsymbol{\beta},\psi)=\frac{1}{Z(\boldsymbol{\beta},\psi)}\exp\left(\sum_i y_i\left(\mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta}\right)+\psi\sum_{i\sim j}g(y_i,y_j)\right).$$

在包含 k 个类别的波茨模型中，我们将外场修改为包含类别特异性协变量 $\boldsymbol{\beta}_l$，适用于 $l=0$、.....、$k-1$，从而得到模型

$$q(\mathbf{y}|\{\boldsymbol{\beta}_l\}_{l=0}^{k-1},\psi)=\frac{1}{Z(\{\boldsymbol{\beta}_l\}_{l=0}^{k-1},\psi)}\exp\left(\sum_i\left(\sum_{l=0}^{k-1}I(y_i=l)\mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta}_l\right)+\psi\sum_{i\sim j}I(y_i=y_j)\right),$$

其中，为了保证可识别性，将 $\boldsymbol{\beta}_0=\mathbf{0}$ 设为零向量。当空间依赖参数为零时，二元形式的全条件分布具有逻辑回归似然的形式（采用物理学伊辛表述时，参数化方式并不标准），而 Potts 表述的全条件分布则具有多项回归似然的形式。正如下文将要探讨的，当自逻辑、伊辛模型和波茨模型表述中的空间依赖参数不为零时，在其他条件不变的情况下，协变量对区域单元属于类别 l 的概率所产生的边际效应，其解释仍与逻辑回归和多项回归中的解释相同。也就是说，在其他条件（邻居变量和其他协变量）不变时，协变量 x_j 每增加一个单位，我们预期 $y_i=l$ 的对数优势比相对于 $y_i\neq l$ 增加 β_j。尽管边际效应的解释相同，但空间依赖所采用的团函数会导致其对完整模型中不同构型概率的参数效应各不相同（进而产生不同的参数解释）。

虽然任何一种马尔可夫随机场表述都可以将协变量的线性组合用于外场，但从历史上看，自逻辑斯蒂表述一直是二元观测的默认直接数据模型。如前所述，自逻辑斯蒂表述只将正邻居匹配计入空间依赖，这会使配置偏向全为 1。Caragea 和 Kaiser提出的解决方案——中心化自逻辑斯蒂模型——针对这一可能不理想的特征引入了一种相变，并会对参数解释产生不利影响，正如我们将在下一节所展示的那样。

5.1.1 带协变量的二元直接数据模型的选择

本节中，我们比较自逻辑斯蒂、中心化自逻辑斯蒂和伊辛表述作为直接数据模型时的情况，通过先验预测响应函数探究模型性质，并通过全条件分布探讨参数解释。我们从历史上默认的直接数据模型——与区域单元相关的相依二元结果的自逻辑斯蒂模型——开始。自逻辑斯蒂模型的全条件分布为

$$q(y_i|\mathbf{y}_{\partial(i)}, \boldsymbol{\beta}, \psi) = \frac{\exp\left(y_i\left(\mathbf{x}_i'\beta + \psi\sum_{j\in\partial(i)} y_j\right)\right)}{1+\exp\left(\mathbf{x}_i'\beta + \psi\sum_{j\in\partial(i)} y_j\right)}.$$

从全条件分布可以看出，任何取值为 1 的邻居都会增大 $y_i = 1$ 的条件概率，而取值为 0 的邻居不会影响条件概率。尽管自逻辑斯蒂模型中的自协变量是邻近单元取值的函数（在本例中为 $\sum_{j\in\partial(i)} y_j$），会使条件概率偏向 1，而非独立模型给出的概率，但在其他条件不变时，增加单个协变量所产生的边际效应，其数学解释仍与逻辑回归相同。正如 Caragea 和 Kaiser [2009], 所指出的，这种偏差意味着，只要存在一个取值为 1 的邻居（且 $\psi > 0$），自逻辑斯蒂模型中的条件期望 $y_i = 1$ 总会大于独立模型下的条件期望（$\psi = 0$）。中心化自回归逻辑模型通过从自协变量中减去独立模型下的期望值来处理这种条件期望差异，这相当于对二元数据进行中心化，并将全条件分布写为

$$q(y_i|\mathbf{y}_{\partial(i)}, \boldsymbol{\beta}, \psi) \propto \exp\left(y_i\left(\mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta} + \psi\sum_{j\in\partial(i)}\left(y_j - \frac{\exp(\mathbf{x}_j'\boldsymbol{\beta})}{1+\exp(\mathbf{x}_j'\beta)}\right)\right)\right).$$

这种中心化的依据是：当取值为 1 的邻居数多于其期望值时，自协变量会提高 $y_i = 1$ 的概率。不过，换个角度来看，当邻居与期望值不一致时，自协变量会影响 y_i 的概率。

在独立模型下。具体而言，当独立模型下的 $E\left(y_j\right)$ 接近 1，但 y_j 为 0 时，$y_i=1$ 的概率会降低；反之，当独立模型下的 $E\left(y_j\right)$ 接近 0，但 y_j 为 1 时，$y_i=1$ 的概率会提高。

回想一下，只要验证其能够等价地表示为团势函数的形式，就可以通过全条件分布来指定马尔可夫随机场。有趣的是，为了得到上述全条件分布，单点团势函数需要作如下调整

$$f(y_i|\boldsymbol{\beta},\psi)=y_i\left(\mathbf{x}_i'\boldsymbol{\beta}-\psi\sum_{j\in\partial(i)}\frac{\exp(\mathbf{x}_j'\boldsymbol{\beta})}{1+\exp(\mathbf{x}_j'\boldsymbol{\beta})}\right),$$

而成对团函数，$f(\mathbf{y}_i,\ \mathbf{y}_j|\psi)=\psi y_i y_j$，与自逻辑斯蒂形式化设定 [Hughes 等， 2011]保持不变。该模型的目标是构造“可解释”的模型参数，即通过 $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ 解释外场，并通过参数 ψ解释局部空间依赖。这种形式化设定似乎并没有更具可解释性；事实上，空间依赖参数的效应现在变得更加复杂，因为它必须出现在单点团势函数中。尽管Caragea 和 Kaiser [2009] 进行了模拟研究，表明其中心化自逻辑斯蒂模型下的条件期望近似等于独立模型下的条件期望，但中心化自逻辑斯蒂模型的单点团势函数和全条件分布似乎都显示出与外场不一致，尤其是当ψ 增大时。我们将在下面的模拟中通过先验预测响应函数展示这种不一致。

作为解决自逻辑斯蒂模型偏差的一种方案，无需采用具有不直观团势函数的中心化自回归逻辑模型，只需像伊辛表述那样选择对称成对团势。利用对称成对团函数，我们得到全条件分布

$$q(y_i|\mathbf{y}_{\partial(i)},\boldsymbol{\beta},\psi)=\frac{\exp\left(y_i(\mathbf{x}_i'\beta)+\psi\sum_{j\in\partial(i)}I(y_i=y_j)\right)}{\exp\left(\psi\sum_{j\in\partial(i)}I(y_j=0)\right)+\exp\left(\mathbf{x}_i'\beta+\psi\sum_{j\in\partial(i)}I(y_j=1)\right)},$$

当邻居中取值为 1 的占多数时，该模型会提高 $y_i = 1$ 的概率；同样，当邻居中取值为 0 的占多数时，也会提高 $y_i = 0$ 的概率。除非邻居取值中 1 和 0 的分布相同，否则该模型的条件期望与独立模型不同；但这实际上是一个理想特性，也是纳入空间自协变量的目的。下面我们将在模拟研究中比较自逻辑斯蒂模型、中心化自逻辑斯蒂模型和伊辛表述。

5.1.2 通过先验预测响应函数比较二元直接数据模型

为了比较马尔可夫随机场（MRF）中空间依赖参数 ψ 对自逻辑、中心化自逻辑斯蒂模型和伊辛表述的影响（这些模型包含由协变量构成的外场），我们估计一组关于空间依赖参数 ψ的响应函数。对于这些响应函数，我们考察黑色单元比例的期望值和标准差、匹配比例的期望值和标准差、主导颜色的期望比例、 $T^{DC}(\mathbf{y}) = \max\left(\sum_i I(y_i = 0)\ \sum_i I(y_i = 1)\right)/n$，以及期望误分类率。对于误分类率，我们基于独立模型中的外场，对每个区域单元的期望值应用一个简单的决策规则，并将模拟得到的马尔可夫随机场构型与外场分类进行比较。对于每个区域单元，外场分类为

$$a_i = I\left(\frac{\exp(\mathbf{x}'\boldsymbol{\beta})}{1+\exp(\mathbf{x}'\boldsymbol{\beta})} > 0.5\right).$$

构型$\mathbf{y}$ 的误分类率为

$$T^{\mathrm{MR}}(\mathbf{y}) = 1 - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} I(y_i = a_i),$$

一减去平均　构型与外场分类之间的一致率　　.

在我们的模拟研究中，按照 Caragea 和 Kaiser [2009] 的设置，我们在一个 64×64 格点上构造一个协变量，令 $x_i = (r(i)\ + c(i)\ - n_r - 1)/(n_r - 1)$，其中

$r(i)$ 返回区域单元 i 的行， $c(i)$ 返回列，且 $n_r = 64$ 表示行数/列数。可参见图 3 中的可视化结果。我们将外场指定为 $\alpha_i = \beta_0 +$

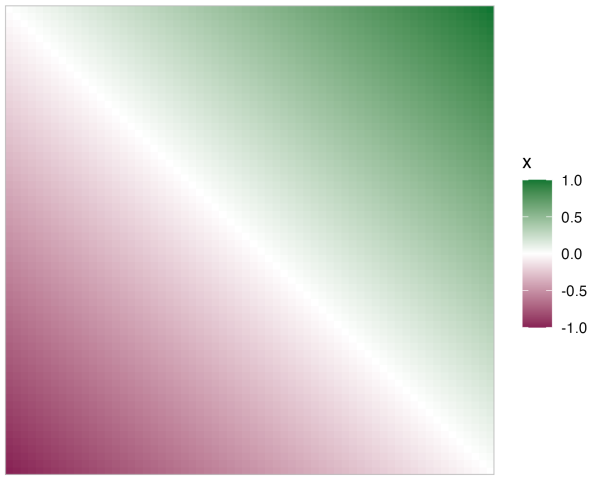


图3：用于二元马尔可夫随机场形式化设定的响应函数和先验预测响应函数模拟研究中的协变量图，其中外场参数被设定为协变量的线性函数。

$x_i\beta_1$ 并考察在 β_0 和 β_1上采用独立标准正态先验分布时， ψ 的先验预测响应函数。

为了生成先验预测响应函数，我们首先从 β_0 和 β_1 的 N(0，1) 分布中抽样，然后在给定 β_0 和 β_1的条件下，获得马尔可夫随机场的一个构型。对于伊辛模型，我们执行 400 次 Swendsen-Wang 算法迭代 [Swendsen和Wang， 1987]以获得一个构型；对于自逻辑斯蒂模型和中心化自逻辑斯蒂模型，则使用过去耦合法算法 [ProppandWilson， 1996]获得精确样本。对于 $\psi = 0.0，0。03，\ldots\ldots，1。7$ 的每个取值，我们重复这一过程 2,000 次，以估计黑色单元比例、匹配比例、主导颜色和误分类率的分布。

在图4中，我们展示了在外场和系数采用标准正态先验分布的条件下模拟得到的马尔可夫随机场的先验预测响应函数。在左上图中可以看到，对于 ψ 中心化

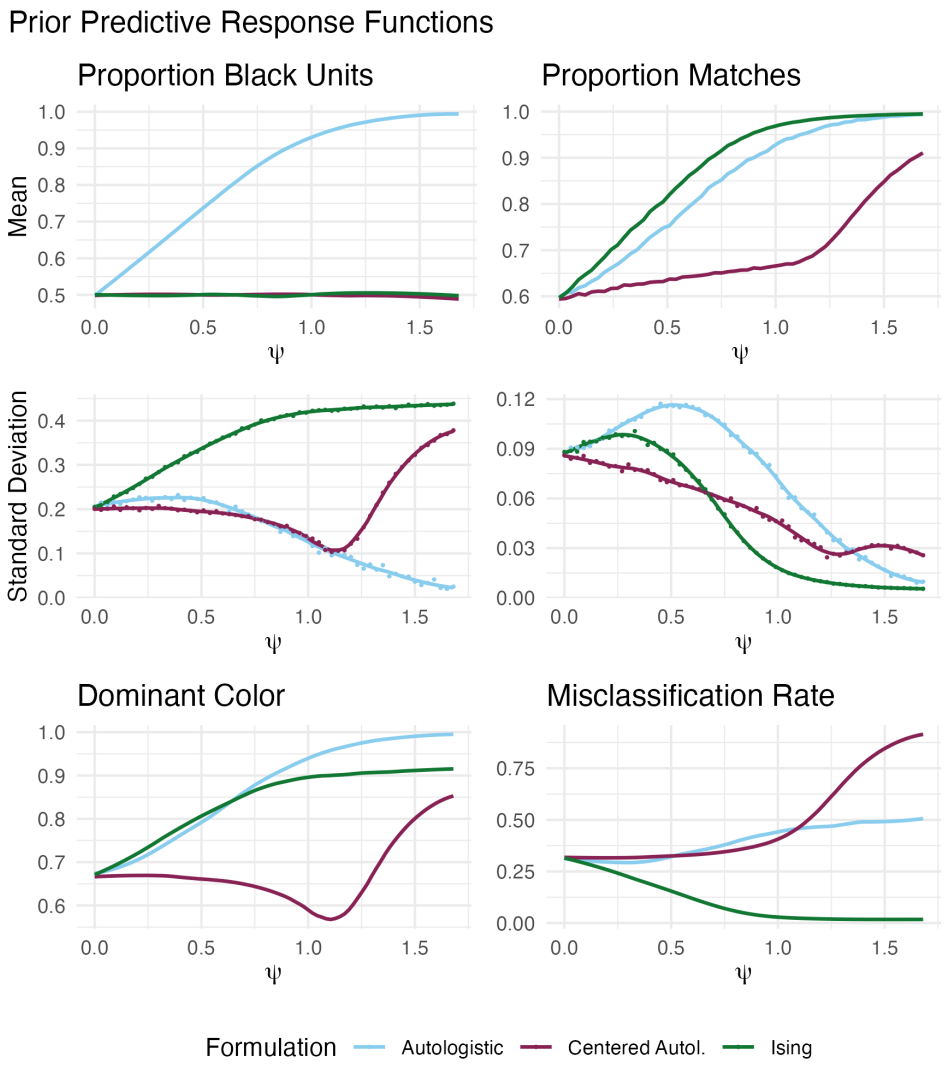


图4：图中绘出了自逻辑模型、中心化自逻辑斯蒂模型和伊辛模型的估计先验预测响应函数，其中 β_1 和 β_0 已按照先验分布 N(0，1) 积分消去。协变量为一个平面梯度，使得 $x_i = (r(i) + c(i) - n_r - 1)/(n_r - 1)$。上方四幅图展示了对应于黑色单元比例均值和标准差，以及相同邻居比例的估计响应函数。下排展示了期望主导颜色和期望误分类率。

自逻辑斯蒂模型和伊辛模型中，自逻辑斯蒂模型会随着 ψ 增大而偏向于全为 1 的构型。右下图展示了中心化

自逻辑斯蒂模型与外场分类之间的不一致。在边缘化先验下，中心化自逻辑斯蒂模型的误分类率从未优于独立模型（$\psi = 0$）下的误分类率；事实上，在超过某个临界值 ψ^*后，误分类率开始急剧上升，表明当 $\psi > \psi^*$时，它与外场更加不一致，这是一种相变。主导颜色汇总统计量也有助于理解中心化自逻辑斯蒂模型如何编码空间依赖；当 ψ 约小于.75时，它保持与独立模型相同的期望主导颜色。这正是中心化自逻辑斯蒂模型的既定目标——与独立模型相比，使条件期望近似等价。然而，这是通过削弱外场的影响实现的；当 ψ 足够大时，便会导致其与外场不一致。另一方面，伊辛模型表述并不保持与独立模型相同的期望主导颜色。外场与成对团势共同作用，使构型趋向外场所指示的方向。随着 ψ 增大，我们得到与外场分类更加一致的构型，因为空间依赖参数会促使外场信号较弱的区域单元与邻近单元的取值保持一致。还值得注意的是，中心化自逻辑斯蒂模型的匹配期望比例直到发生相变（即与外场不一致）时才会变得很高。这意味着，与伊辛模型相比，中心化自逻辑斯蒂表述对构型中聚类程度的先验限制更强。总之，对于二元模型，我们推荐采用伊辛表述，除非自逻辑斯蒂模型的偏差是所需特性，并且对具体应用具有实际意义。

5.2 通过层次建模引入外场

也许马尔可夫随机场最常见的应用是隐马尔可夫随机场（HMRF），其中在给定一个

空间依赖分类变量的条件下，对观测值进行条件独立建模。我们不对 HMRF 的不同建模选择作完整综述，而是将其与离散值变量的一般马尔可夫随机场框架联系起来：首先说明观测变量分布的选择如何充当隐式外场。然后在第 6节中，我们针对成对团函数的不同形式化设定，介绍标准波茨模型的一些扩展。

设观测变量在潜在离散变量条件下的分布（有时称为发射分布）遵循指数族

$$p(y_i|z_i = l, \boldsymbol{\theta}) = h(y_i) \exp(\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{\theta}_l)'\mathbf{T}(y_i) - A(\boldsymbol{\theta}_l)),$$

其中，完整的参数集合 $\boldsymbol{\theta} = \{\boldsymbol{\theta}_l\}_{l=0}^{k-1}$ 由 z_i 索引；向量值的 $\boldsymbol{\eta}$ 和 $\mathbf{T}$，以及标量值的 h 和 A 都是已知函数。在给定观测 $\mathbf{y}$ 的条件下，对于 $\mathbf{z}$，我们再次得到一个马尔可夫随机场分布，

$$p(\mathbf{z}|\mathbf{y}, \boldsymbol{\theta}, \psi) \propto \exp\left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{l=0}^{k-1} I(z_i = l)\left(\boldsymbol{\eta}(\boldsymbol{\theta}_l)'\mathbf{T}(y_i) - A(\boldsymbol{\theta}_l)\right) + \sum_{i\sim j} f(z_i, z_j|\psi)\right),$$

它是一个指数族马尔可夫随机场分布，其外场由指定的结果分布给出。例如，对于 Potts表述和高斯结果分布，我们有单点团势函数

$$f(z_i|y_i, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\sigma}) = I(z_i = l)\left(\frac{-(y_i - \mu_l)^2}{2\sigma_l^2} - \log \sigma_l\right),$$

对于 $l = 0, \ldots, k-1$，以及成对团势 $f(z_i, z_j|\psi) = \psi I(z_i = z_j)$。

6 成对团势的扩展 S

本节介绍对第2.2.4 节所述标准 Potts表述的两种可能扩展，并引入条件随机场的建模框架。

6.1 更灵活的 Potts 形式化设定

波茨模型是 HMRF 中分类潜变量先验分布的默认设定，不过在某些情形下，单一的空间依赖参数可能不足以充分表达。HMRF 是隐马尔可夫模型自然的高维扩展，通常对不依赖邻近变量取值的成对团使用单一空间依赖参数 ψ。相比之下，隐马尔可夫模型具有从类别 l 转移到类别 l' 的不同转移概率，适用于 l，$l' \in \{0, 1, \ldots, k-1\}$。对标准 Potts表述进行类似扩展的方法是，指定一个成对团函数，将所有分类变量对之间的一致性纳入考虑，而不仅仅是匹配邻居。通过以下成对团势即可实现这种设定

$$f(z_i, z_j|\boldsymbol{\psi}) = \sum_{r=0}^{k-1}\sum_{s=0}^{k-1} \psi_{rs} I(z_i = r) I(z_j = s), \tag{7}$$

并满足约束 $\psi_{rs} = \psi_{sr}$。每个 ψ_{rs} 的充分统计量就是相邻变量对的总和，其中一个变量等于 r，另一个变量等于 s。

6.2 序数 Potts 公式

如果类别的顺序有意义，可以修改成对团函数，使其倾向于选择在序数排序中数值更接近的相邻值。Feng 等人[2012] 为序数 Potts 模型的成对团势提出了一种通用形式化设定，其中

$$f(z_i, z_j|\boldsymbol{\psi}) = \begin{cases} \psi_1 & \text{if } z_i = z_j, \\ \psi_2 & \text{if } |z_i - z_j| = 1, \\ \psi_3 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

以及 $\psi_1 \geq \psi_2 \geq \psi_3$。在 MRI 组织分类的应用中，他们令 $\psi_1 > 0$、$\psi_2 = 0$ 和 $\psi_3 < 0$，这会鼓励相邻的匹配对，并惩罚那些

相差超过一个序数类别的邻居。这种设定被称为排斥 Potts 模型。

6.3 条件随机场

在上述各节中，我们展示了：在 HMRF 模型中，当结果分布属于指数族时，MRF 是潜变量的共轭先验分布。换言之，完全条件后验分布 $q(\mathbf{z}|\mathbf{y}\ \boldsymbol{\theta}, \psi)$ 是一个马尔可夫随机场，只要 $q(\mathbf{z}|\psi)$ 是 MRF，且 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ 服从指数族分布。在 HMRF 中，我们假设 $p(\mathbf{y}|\boldsymbol{\theta})$ 服从某种参数分布。另一方面，条件随机场明确跳过对结果分布的设定，直接为 $q(\mathbf{z}|\mathbf{y}\ \boldsymbol{\xi})$ 定义一个 MRF，从而在形式化设定观测变量 y 与潜变量 z 之间的依赖关系时具有更大的灵活性。这里，y 的数据生成过程未作指定。相反，唯一的假设是潜变量与观测变量彼此依赖。条件随机场通常用于根据输入 y 预测 z。这要求模型针对已知的 z 和 y 进行训练（学习模型参数 $\boldsymbol{\xi}$）。随后，在拟合条件随机场并获得新数据 $\mathbf{y}^*$ 后，模型便可用于预测新输入对应的标签 $\mathbf{z}^*$。Lafferty 等 [2001]最初提出条件随机场，用于标注序列，例如词性标注和文本处理；此后，条件随机场已应用于许多不同领域 [Yu and Fan, 2020]。由于我们明确以 y 为条件，因此无需像 HMRF 那样限制单点团函数必须属于某个参数族形式，这使得我们在指定马尔可夫随机场时更加灵活。由于团势中显式地以 y 为条件，我们得到

$$q(\mathbf{z}|\mathbf{y}, \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\psi}) = \frac{1}{Z(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\psi})} \exp\left(\sum_i f(z_i|y_i, \boldsymbol{\alpha}) + \sum_{i\sim j} f(z_i, z_j|y_i, y_j, \boldsymbol{\psi})\right),$$

作为 MRF 的另一种形式化设定。与 MRF 的标准形式化设定一样，典型的条件随机场将团势分解为

$$f(z_i|y_i, \boldsymbol{\alpha}) = \sum_u \alpha_u g_u(z_i, y_i),$$

and

$$f(z_i, z_j|y_i, y_j, \boldsymbol{\psi}) = \sum_v \psi_v g_v(z_i, z_j, y_i, y_j),$$

其中，每个 g_u 和 g_v 都会针对 $\mathbf{z}$ 和 $\mathbf{y}$ 的不同输入返回一个布尔值，以表示变量/顶点和边的不同特征。通过将 $z_i \in \{0, \ldots, k-1\}$ 和 $y_i \in \{0, \ldots, l-1\}$ 构造成如下布尔特征函数： $g_{rs}(z_i, y_i) = I(z_i = r)I(y_i = s)$，对于单点团势函数，我们有

$$f(z_i|y_i, \boldsymbol{\alpha}) = \sum_{r=0}^{k-1} \sum_{s=0}^{l-1} \alpha_{rs} I(z_i = r) I(y_i = s).$$

上述形式化设定可以等价地写成一个协变量矩阵，其中包含表示 y_i 等于类别 s 的指示变量，以及潜变量类别 r 的不同系数向量。请注意，将布尔特征写成协变量矩阵中的指示变量，等价于通过协变量的线性组合来指定外场。关键差异不在于模型的形式化设定，而在于建模场景：条件随机场可被视为一种判别模型，用于在给定新的离散输入时预测潜变量，而直接数据模型则旨在学习协变量与观测结果之间的关系。直接数据模型使用协变量来表示外场，而条件随机场还允许通过同时考虑潜变量与观测变量的配对来为图的边构造布尔特征，从而进一步扩展建模灵活性，具体通过 g_v（z_i， z_j， y_i， y_j）。该设定引入了 z_i 与$\mathbf{y}^{\partial(i)}$ 之间的依赖，并且通常将成对团指定为上文所述的灵活Potts表述，如方程7。在这种设定下，每个 z_i 仅与 y_i相互依赖。

7 模型拟合

难以处理的归一化常数是拟合马尔可夫随机场模型的主要计算挑战。无论分析目标是对空间依赖参数进行推断，还是仅获得潜在空间场的点估计，这都是一个问题。相变性质仍然重要，因为不同算法的性能在空间依赖参数的临界值附近会下降。在本节中，我们简要概述用于拟合基于马尔可夫随机场的模型的不同技术。

伪似然定义为全条件分布的乘积，最初被提出作为马尔可夫随机场似然的近似，以便进行最大似然估计 [Besag， 1975]。已知伪似然在临界值附近表现较差，而作为其推广的复合似然定义为边缘似然分量与条件似然分量的乘积，可以改进此类推断 [Varin 等人， 2011]。伪似然有时被用于在贝叶斯推断中替代似然，但由于伪似然并非有效的概率分布 [Friel 等人，2009年，Cucala 等人， 2009], 贝叶斯定理的概率保证并不成立 [Carter 和 Calder， 2025]。Matsubara 等人 [2024] 提出了一种针对难处理分布的广义贝叶斯框架，该框架明确考虑了用通用损失函数替代似然，并以马尔可夫随机场作为启发性示例。

近似贝叶斯计算是另一种无需似然的方法，它比较模拟数据与观测数据的摘要统计量，已被应用于马尔可夫随机场，以避免计算繁琐的归一化常数 [Grelaud 等人， 2009]。主要的计算难题在于从马尔可夫随机场分布中获取样本，以计算模拟数据的摘要统计量。为克服这一计算难题，Moores 等人 [2020] 提出了一种代理建模方法，该方法结合预先计算的响应函数，以促进可扩展的推断。其他贝叶斯技术避免计算归一化常数，但通过采用纳入辅助数据的巧妙 Metropolis–Hastings 比率，实现精确推断。

辅助变量方法 [Møller 等人、 2006] 和交换算法 [Murray 等人，2006] 要求从马尔可夫随机场分布中获得精确样本，而利用过去耦合可以获取这种样本 [Proppand Wilson，1996]。虽然精确样本有助于实现精确的马尔可夫链蒙特卡罗算法，但过去耦合无法扩展到大型格点（大于 256×256），并且还会受到临界减速的影响。

其他方法试图直接估计归一化常数本身，这可以通过路径抽样或热力学积分实现 [Gelman 和 Meng， 1998]。为了降低蒙特卡罗估计归一化常数的计算成本，[Green 和 Richardson， 2002] 将空间依赖参数的先验分布离散化，并在执行完整的马尔可夫链蒙特卡罗之前预先计算估计值。对于较小的格点，可以使用递归算法精确计算归一化常数 [Reeves 和 Pettitt， 2004]。在此技术基础上，利用较大格点中较小顶点子集的精确解，并将结果结合起来，以获得整个格点归一化常数的近似值 [Friel 等人，2009年，Tjelmeland 和 Austad， 2012]。偏序马尔可夫模型 [Cressie 和 Davidson， 1998] 也被用于构建归一化常数的近似值 [Austad 和 Tjelmeland，2017，Chakraborty 等人，2022]。

除了对控制 MRF 的参数进行推断之外，另一个常见的主要推断目标是在空间场未被直接观测时对其进行估计。通常会使用期望最大化（EM）类算法，但仍需选择似然近似方法，以便在最大化步骤中更新空间依赖参数。人们通常使用似然的变分技术近似，以促进对潜在场的最大后验（MAP）估计 [Jordan 等人，1999年，Chatzis 和 Tsechpenakis， 2010]。迭代条件众数算法利用全条件分布进行贪婪的坐标更新，容易收敛到较差的局部极小值 [Besag， 1986]。模拟退火引入基于温度的探索

，以更高的计算成本逃离局部陷阱 [Geman andGeman， 1984]。图割算法，例如 α-扩展和 $\alpha\beta$-交换过程，可以得到全局最优的（二元）或近似最优的（分类）最大后验解 [Boykov 和 Jolly，2001年，Zabih 和 Kolmogorov， 2004]。

8 讨论

本文综述重点介绍了马尔可夫随机场（MRF），主要聚焦于二元数据，同时也探讨了与更复杂的类别建模场景之间的联系。我们考察了因子分解、邻域依赖和相变等核心结构性质，并介绍了响应函数这一先验分析工具，用于阐释模型参数如何影响边缘行为和联合行为。为展示这些思想在实践中的应用，我们介绍了一个包含协变量的二元马尔可夫随机场形式案例研究，说明不同的直接数据模型参数化方式如何编码依赖关系。

我们之所以着重讨论二元马尔可夫随机场，是因为它们在空间统计学和概率建模中具有奠基性作用。尽管二元马尔可夫随机场的形式简洁明了，但其中的关键原理往往仍不够清晰；本文综述旨在阐明这些原理。二元模型和简单的 Potts 模型虽能涵盖广泛的建模场景，但许多现实应用依赖更复杂或更高维的扩展。值得注意的是，关于马尔可夫随机场的文献范围广泛，其中图像分析领域已有大量进展；离散值马尔可夫随机场被用于纹理建模、去噪和分割任务 [Li， 2009]。尤其是条件随机场（CRF），已成为计算机视觉和自然语言处理中判别式建模的一种灵活替代方案[Sutton 和 McCallum， 2012]。本文重点介绍的原理和先验分析工具，为理解更复杂的马尔可夫随机场分布奠定了基础。

虽然本文并不侧重于此，但图模型选择和网络学习与离散马尔可夫随机场有许多共同原理，其目标是推断潜在的依赖关系

结构。 [Meinshausen 和 B¨uhlmann，2006，Ravikumar 等人，2010，Drton 和 Maathuis，2017]。结构学习与基于马尔可夫随机场的建模之间的相互作用，凸显了图模型在揭示多变量系统隐藏结构方面的广泛用途。

补充材料

补充材料 1　　： 用于复现模拟研究的代码可在 zip 文件夹中获取　　.

参考文献

P. Arnesen 和 H. Tjelmeland。《完全贝叶斯二元马尔可夫随机场模型：先验设定与后验模拟》。《斯堪的纳维亚统计学杂志》，42(4):967–987，2015 年 12 月。

H. M. Austad 和 H. Tjelmeland。二元马尔可夫随机场的近似计算及其在贝叶斯模型中的应用。《统计与计算》，27(5):1271–1292，2017 年 9 月。

A. Barbu 和 S.-C. Zhu。通过 Swendsen-Wang 切割进行图划分。载于第九届 *IEEE* 国际计算机视觉会议论文集，第 1 卷，页码 320–327，2003 年。doi: 10.1109/ICCV.2003.1238362。

J. Besag。格点系统的空间相互作用与统计分析。《皇家统计学会杂志：*B*辑（方法论）》，36(2)：192–225，1974 年 1 月。

J. Besag。《非格点数据的统计分析》。《统计学家》，24(3):179，1975年9月。J. Besag。《脏图像的统计分析》。《皇家统计学会会刊：*B*辑（方法论）》，48(3):259–302，1986年。Y. Y. Boykov 和 M.-P. Jolly。用于对象最优边界与区域分割的交互式图割——

在第八届*IEEE*国际计算机视觉会议论文集。*ICCV 2001*，第1卷，第105–112页。IEEE，2001年。P. C. Caragea 和 M. S. Kaiser。具有可解释参数的自回归逻辑模型。《农业、生物与环境统计学杂志》，14(3):281–300，2009年9月。J. B. Carter 和 C. A. Calder。离散空间随机场的有向图模型混合，2025年。URL https://arxiv.org/abs/2406.15700。A. Chakraborty、M. Katzfuss 和 J. Guinness。波茨模型的有序条件近似。《空间统计学》，52，2022年。S. P. Chatzis 和 G. Tsechpenakis。无限隐马尔可夫随机场模型。《*IEEE*神经网络汇刊》，21(6):1004–1014，2010年6月。B. A. Cipra。伊辛模型简介。《美国数学月刊》，94(10):937–959，1987年12月。N. Cressie。《空间数据统计学》。约翰·威立父子公司，纽约，修订版，1993年。N. Cressie 和 J. L. Davidson。使用部分有序马尔可夫模型进行图像分析。《计算统计学与数据分析》，29(1):1–26，1998年11月。L. Cucala、J.-M. Marin、C. P. Robert 和 D. M. Titterington。最近邻分类的贝叶斯重新评估。《美国统计学会会刊》，104 (485):263–273，2009年。M. Drton 和 M. H. Maathuis。图模型中的结构学习。《统计学及其应用年度评论》，4(1):365–393，2017年。H. Duminil-Copin。超立方晶格上（临界）伊辛模型的100年。第164–210页。国际数学家大会，2022年12月。R. G. Everitt。潜在马尔可夫随机场和社交网络的贝叶斯参数估计。《计算与图形统计学杂志》，21(4):940–960，2012年10月。D. Feng、L. Tierney 和 V. Magnotta。使用高分辨率MRI组织分类

贝叶斯隐马尔可夫正态混合模型。美国统计学会会刊，107(497):102–119，2012年3月。N. Friel、A. N. Pettitt、R. Reeves 和 E. Wit。针对大型格点上二元数据的隐马尔可夫随机场贝叶斯推断。计算与图形统计学杂志，18(2):243–261，2009年1月。A. Gelman 和 X.-L. Meng。模拟归一化常数：从重要性抽样到桥接抽样，再到路径抽样。《统计科学》，13(2):163–185，1998年。A. Gelman、A. Vehtari、D. Simpson、C. C. Margossian、B. Carpenter、Y. Yao、L. Kennedy、J. Gabry、P.-C. B¨urkner 和 M. Modr´ak。贝叶斯工作流，2020年。S. Geman 和 D. Geman。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(6):721–741，1984年。P. J. Green 和 S. Richardson。隐马尔可夫模型与疾病制图。美国统计学会会刊，97(460):1055–1070，2002年12月。A. Grelaud、J.-M. Marin、C. P. Robert、F. Rodolphe 和 J.-F. Taly。用于吉布斯随机场模型选择的 ABC 无似然方法。贝叶斯分析，4(2):317—336，2009年。J. Heikkinen 和 H. Hogmander。图像复原的完全贝叶斯方法及其在生物地理学中的应用。应用统计，43(4):569，1994年。H. Hogmander 和 J. Moller。使用统计图像分析方法，根据图谱数据估计分布图。生物计量学，51(2):393，1995年6月。J. Hughes、M. Haran 和 P. C. Caragea。格点上二元数据的自回归逻辑模型。环境计量学，22(7):857–871，2011年11月。E. Ising。关于铁磁性理论的贡献。物理学杂志 ¨*ur Physik*，31:253–258，1925年。A. J. Izenman。离散马尔可夫随机场及相关图模型的抽样算法

模型。美国统计学会会刊，116(536):2065–2086，2021年10月。M. I. Jordan、Z. Ghahramani、T. S. Jaakkola 和 L. K. Saul。图模型变分方法导论。机器学习，37:183—233，1999年11月。D. Koller 和 N. Friedman。概率图模型：原理与技术。麻省理工学院出版社，2009年。H. A. Kramers 和 G. H. Wannier。二维铁磁体的统计性质。第一部分。《物理评论》，60:252–262，1941年8月。J. D. Lafferty、A. McCallum 和 F. C. N. Pereira。条件随机场：用于序列数据分割与标注的概率模型。载于第十八届国际机器学习会议论文集，ICML ’01，第282–289页，旧金山，佛罗里达州，美国，2001年。Morgan Kaufmann 出版公司。ISBN 1558607781。S. Z. Li。图像分析中的马尔可夫随机场建模。施普林格出版社，伦敦，第3版，2009年。ISBN 978-1-84800-278-4。A.-M. Lyne、M. Girolami、Y. Atchad´e、H. Strathmann 和 D. Simpson。关于用于双重难处理似然贝叶斯推断的俄罗斯轮盘估计。《统计科学》，30(4):443–467，2015年11月。ISSN 0883-4237，2168-8745。出版方：数理统计学会。T. Matsubara、J. Knoblauch、F.-X. Briol 和 C. J. Oates。针对离散难处理似然的广义贝叶斯推断。美国统计学会会刊，119 (547):2345–2355，2024年。N. Meinshausen 和 P. B¨uhlmann。使用 LASSO 进行高维图建模与变量选择。《统计年鉴》，34(3):1436–1462，2006。J. Møller、A. N. Pettitt、R. Reeves 和 K. K. Berthelsen。适用于具有难处理归一化常数的分布的高效马尔可夫链蒙特卡罗方法。《生物统计学》，93 (2):451–458，2006年6月。M. Moores、G. Nicholls、A. Pettitt 和 K. Mengersen。面向……的可扩展贝叶斯推断

隐Potts模型的逆温度。《贝叶斯分析》，15(1)，2020年3月。I. Murray、Z. Ghahramani 和 D. J. C. MacKay。用于双重难处理分布的马尔可夫链蒙特卡罗。载于《第二十二届人工智能不确定性会议论文集》，UAI'06，第359–366页，美国弗吉尼亚州阿灵顿，2006年。AUAI出版社。ISBN 0974903922。R. Peierls。论伊辛的铁磁性模型。《剑桥哲学学会数学学报》，32(3):477–481，1936年。R. B. Potts。若干广义有序-无序转变。《剑桥哲学学会数学学报》，48(1):106–109，1952年。J. G. Propp 和 D. B. Wilson。耦合马尔可夫链的精确抽样及其在统计力学中的应用。《随机结构与算法》，9(1-2):223–252，1996。P. Ravikumar、M. J. Wainwright 和 J. D. Lafferty。使用 ℓ_1 正则化逻辑回归进行高维伊辛模型选择。《统计年鉴》，38(3):1287–1319，2010。R. Reeves 和 A. N. Pettitt。一般可因子分解模型的高效递归。《生物统计学》，91(3):751–757，2004。H. Rue 和 L. Held。《空间统计学手册》，第12章，第171–200页。CRC出版社，博卡拉顿，佛罗里达州，2010年。J. Stoehr。离散马尔可夫随机场统计推断方法综述，2017年。C. Sutton 和 A. McCallum。条件随机场简介。机器学习前沿与趋势Ⓡ 机器学习，4(4):267–373，2012年。R. H. Swendsen 和 J.-S. Wang。蒙特卡罗模拟中的非普适临界动力学。《物理评论快报》，58:86–88，1987年1月。H. Tjelmeland 和 H. M. Austad。图上定义的二元马尔可夫随机场的精确与近似递归计算。计算与图形统计学杂志，21(3):758–780，2012年7月。

C. Varin、N. Reid 和 D. Firth。复合似然方法概述。《统计学报》，21(1):5–42，2011年。H. Wickham、M. Averick、J. Bryan、W. Chang、L. D. McGowan、R. Fran¸cois、G. Grole-mund、A. Hayes、L. Henry、J. Hester、M. Kuhn、T. L. Pedersen、E. Miller、S. M. Bache、K. M¨uller、J. Ooms、D. Robinson、D. P. Seidel、V. Spinu、K. Takahashi、D. Vaughan、C. Wilke、K. Woo 和 H. Yutani。欢迎使用 tidyverse。《开放源代码软件期刊》，4(43):1686，2019年。G. Winkler。《图像分析、随机场与马尔可夫链蒙特卡罗方法：数学导论（随机建模与应用概率）》。Springer-Verlag，柏林、海德堡，2006年。ISBN 3540442138。U. Wolff。自旋系统的集体蒙特卡罗更新。《物理评论快报》，62:361–364，1989年1月。B. Yu 和 Z. Fan。条件随机场的全面综述：变体、混合模型与应用。《人工智能评论》，53(6):4289–4333，2020年8月。ISSN 0269-2821。doi: 10.1007/s10462-019-09793-6。R. Zabih 和 V. Kolmogorov。使用图割进行空间相干聚类。载于《*2004*年*IEEE*计算机学会计算机视觉与模式识别会议论文集，*2004*。*CVPR 2004*》，第2卷，第II–II页。IEEE，2004年。Y. Zhang、M. Brady 和 S. Smith。通过隐马尔可夫随机场模型和期望最大化算法分割脑部磁共振图像。《*IEEE*医学影像汇刊》，20(1):45–57，2001年1月。