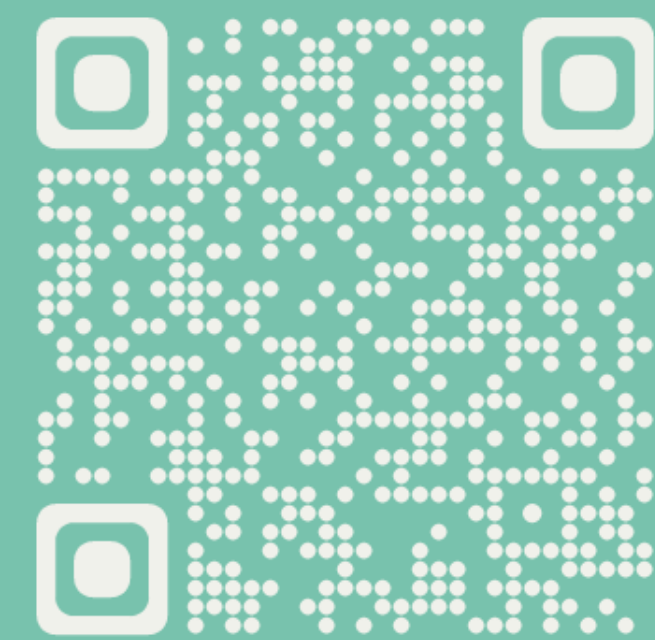


サンプリングにおける加速と安定性



S O K E N D A I

総合研究大学院大学 司馬博文

サンプリングと最適化の関係

加速は非可逆化に対応する

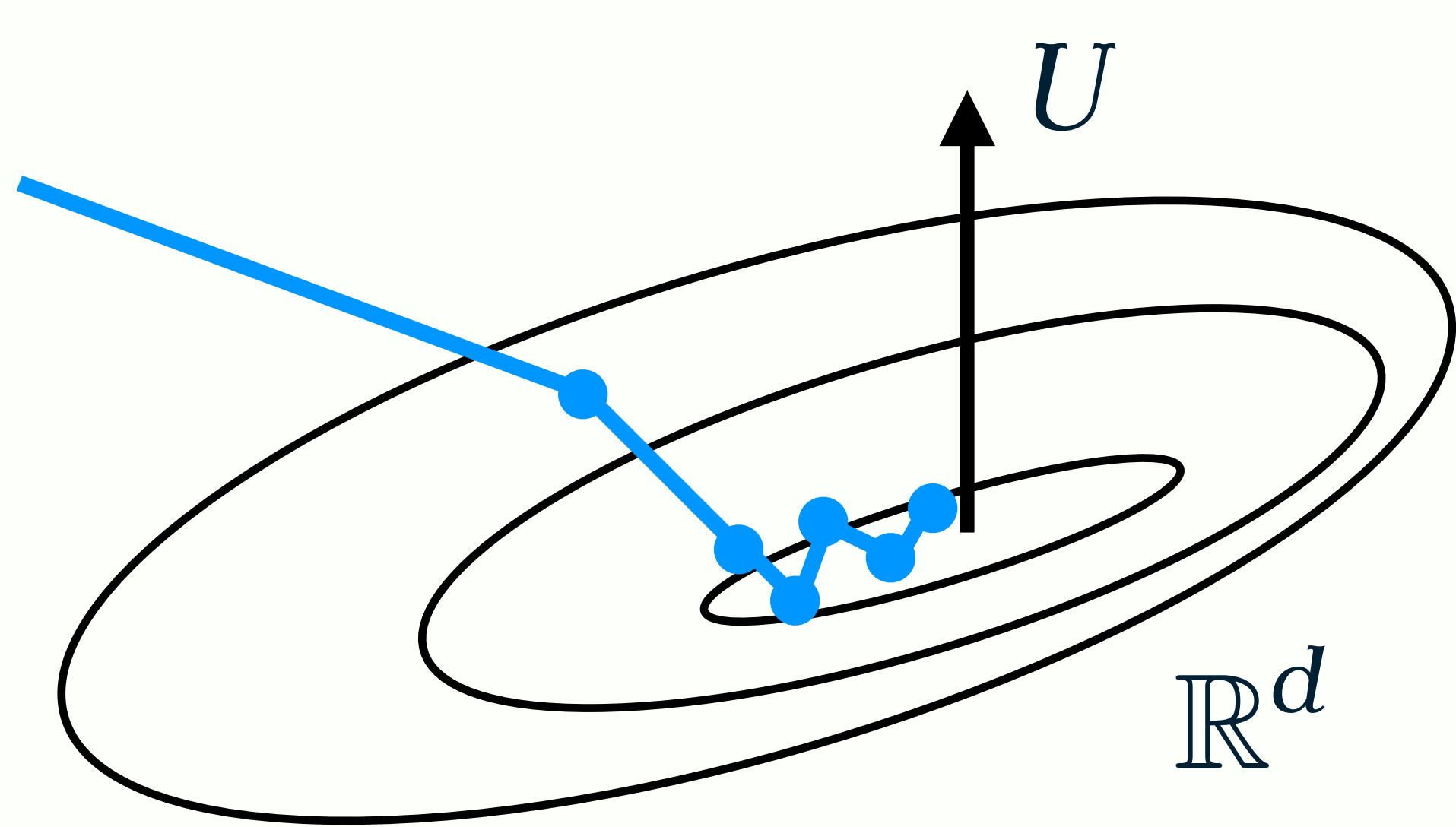
Ma, Chatterji, Cheng, Flammarion, Bartlett & Jordan (2021) Is There an Analog of Nesterov Acceleration for Gradient-Based MCMC?

Heavy-Ball による加速勾配法を $\mathcal{P}(\mathbb{R}^d)$ で実行

= Underdamped Langevin 拡散 によるサンプリング

運動量が拡散的な
非可逆過程サンプリングとは
 $\mathcal{P}(\mathbb{R}^d)$ 上の最適化 U 勾配流

$$dX_t = -\nabla U(X_t) dt$$

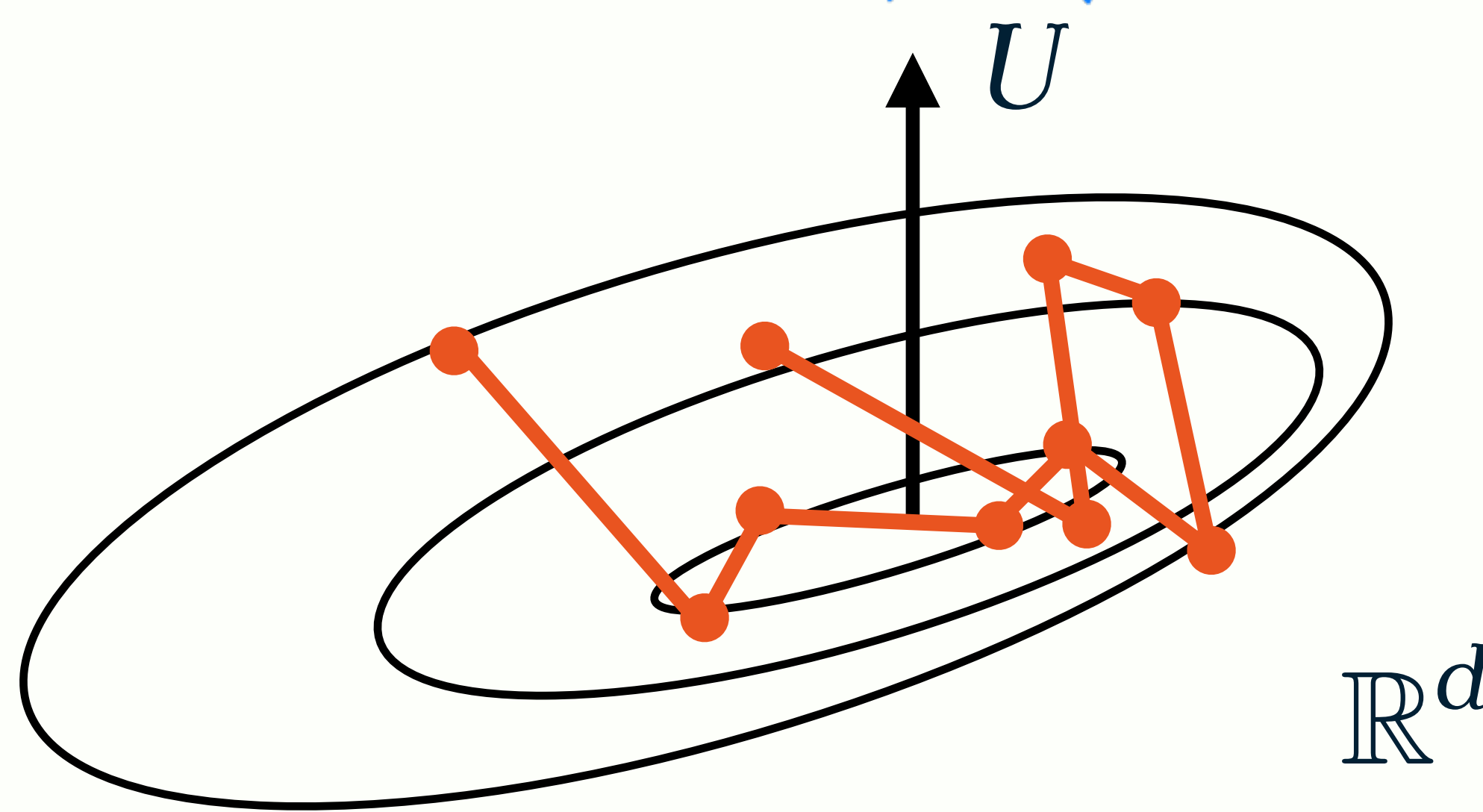
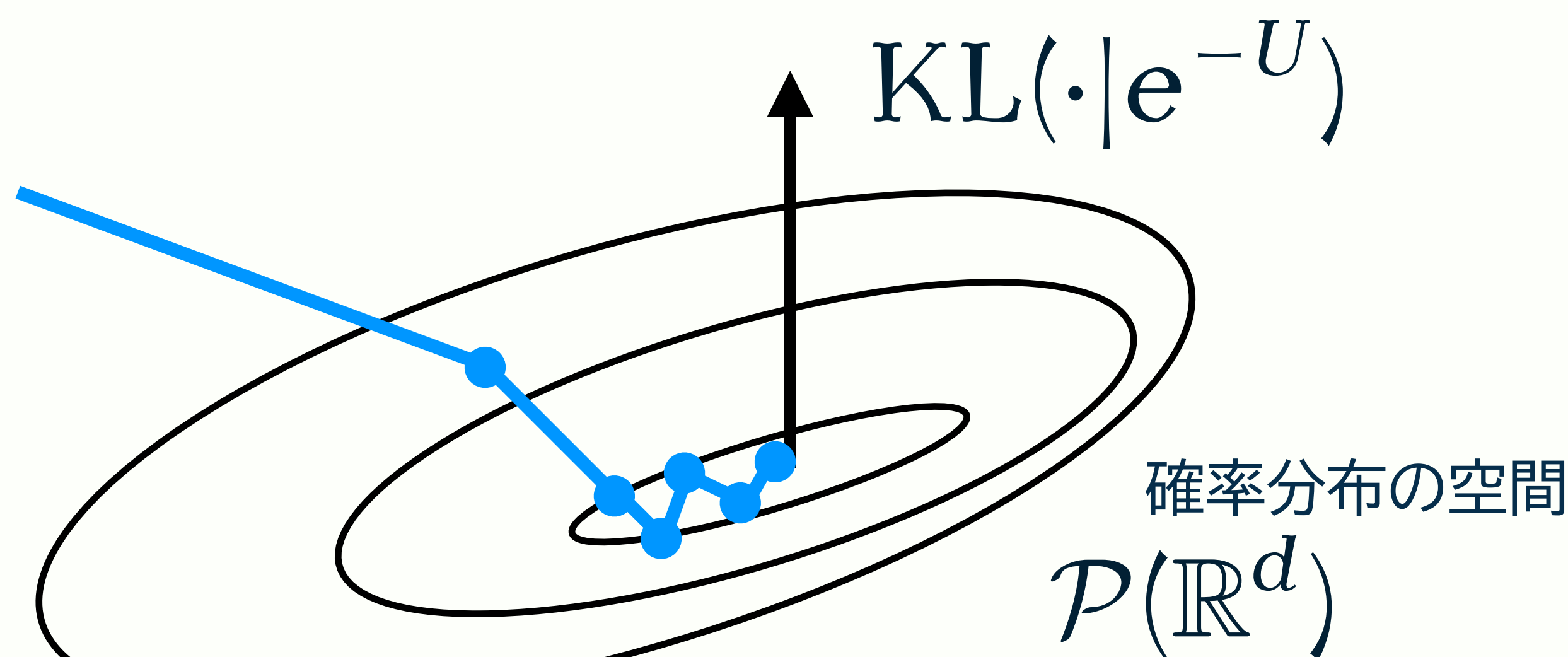
 U の最適化

Langevin 拡散

$$dX_t = -\nabla U(X_t) dt + \sqrt{2} dB_t$$

ノイズ付加

サンプラー化

 e^{-U} からのサンプリング

Wasserstein 勾配流

モンテカルロ法に使う確率過程の進化: 更なる加速と安定性

拡散過程

MCMC

PDMP

区分確定的マルコフ過程

$$dX_t = a(X_t) dt + b(X_t) dB_t$$

ジャンプ過程へ

$$dX_t = a(X_t) dt + \int_{u \in \mathbb{R}^d} c(X_{t-}, u) \eta(dt du)$$

Zig-Zag Sampler

Langevin Diffusion

MCMC の枠組み

- ① 離散化
Euler-丸山など
- ② 棄却法
Metropolis-Hastings など

→ 元は連続時間だが、**離散時間**
に帰着してしまう。

PDMP の枠組み

- ① 棄却法
Poisson 剪定など
- ② 離散化(必要に応じて)
ほとんどの場合すごく簡単

→ 本質的には連続時間のまま
→ **連続時間 MCMC** と呼ばれる

Langevin Diffusion

$$\pi_c(\beta) = \left(\omega \pi(\beta) + (1 - \omega) \frac{1}{\epsilon} \pi\left(\frac{\beta}{\epsilon}\right) \right)$$

非可逆化

Zig-Zag Sampler

(Bierkens, Fearnhead & Roberts, 2019)

 $\epsilon \rightarrow 0$ 計算量 $O_p(\epsilon)$ 削減

Sticky Zig-Zag Sampler

(Bierkens, Grazzi, & van der Meulen & Schauer, 2023)

$$\pi_d(d\beta) = \left(\omega \pi(\beta) d\beta + (1 - \omega) \delta_0(d\beta) \right)$$

