大学共同利用機関法人 情報・システム研究機構
統計数理研究所
SOKENDAI
The Institute of Statistical Mathematics

メトロポリスを超えた枠組みで我々はどこまで行けるか？

総合研究大学院大学　司馬博文

サンプリング問題

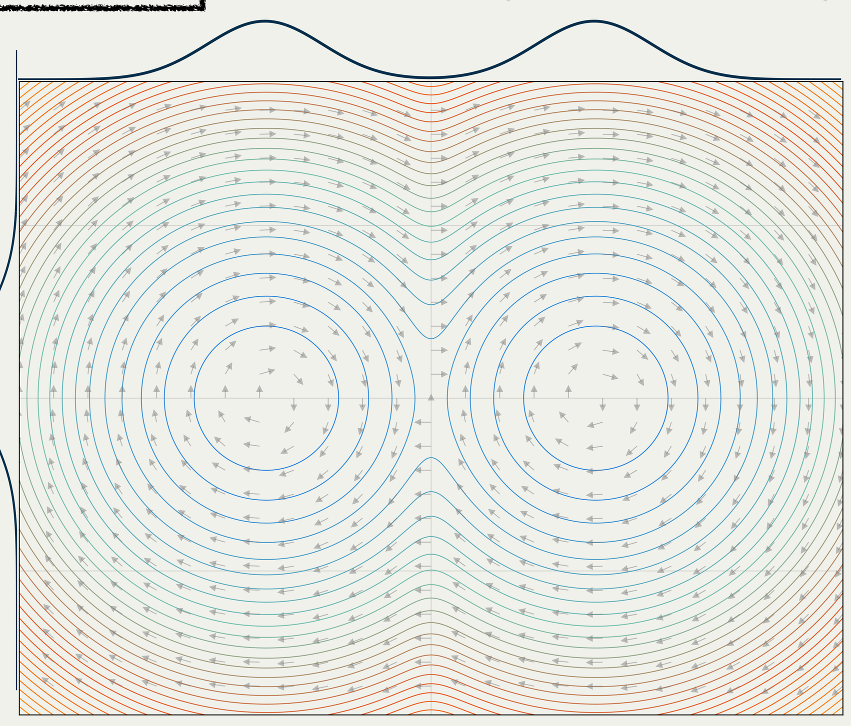
$U, \nabla U$ の情報のみを用い, 確率分布 $\pi(x) \propto e^{-U(x)}$ からのサンプルを構成せよ

(現状)高次元で最も上手くいく方法

cf. Betancourt (2018)

$d=1$ の例

$$\pi(x) = \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x+2)^2}{2}} + \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(x-2)^2}{2}}$$



補助変数法 $\mu(v) \propto e^{-K(v)}$ を導入して問題を拡張 $\widetilde{\pi} = \pi \otimes \mu$

ハミルトン力学系

$$H(x,v) := U(x) + K(v)$$

$$\widetilde{\pi}(x,v) \propto e^{-H(x,v)}$$

$$\begin{cases} \dot{x}_t = \partial_v H(x,v) = \partial_v K(v) \\ \dot{v}_t = -\partial_x H(x,v) = -\partial_x U(x) \end{cases}$$

$$\mu(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{v^2}{2}}$$

H の等高線を周回する軌道を定める

→ **速度 v を定期的にリサンプリングすることで大域的探索が可能**

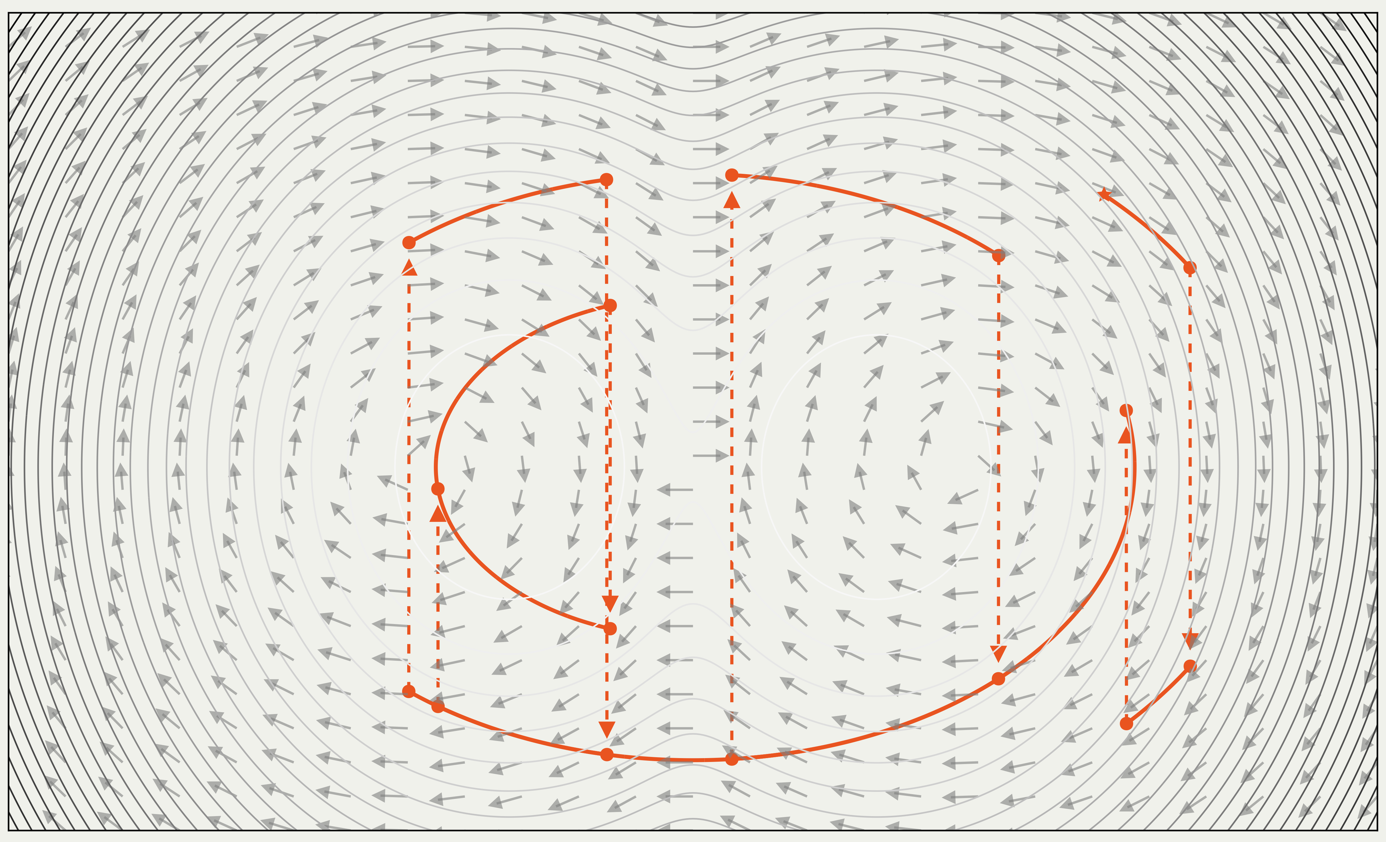
2つの実装法

PDMP	メトロポリス法
* PDMC, イベント連鎖法	
Piecewise Deterministic Markov Process	Metropolis-Hastings Method

PDMP

簡略化した $\widetilde{H}$ を使用

Boomerang Sampler
Bierkens+ (2020)

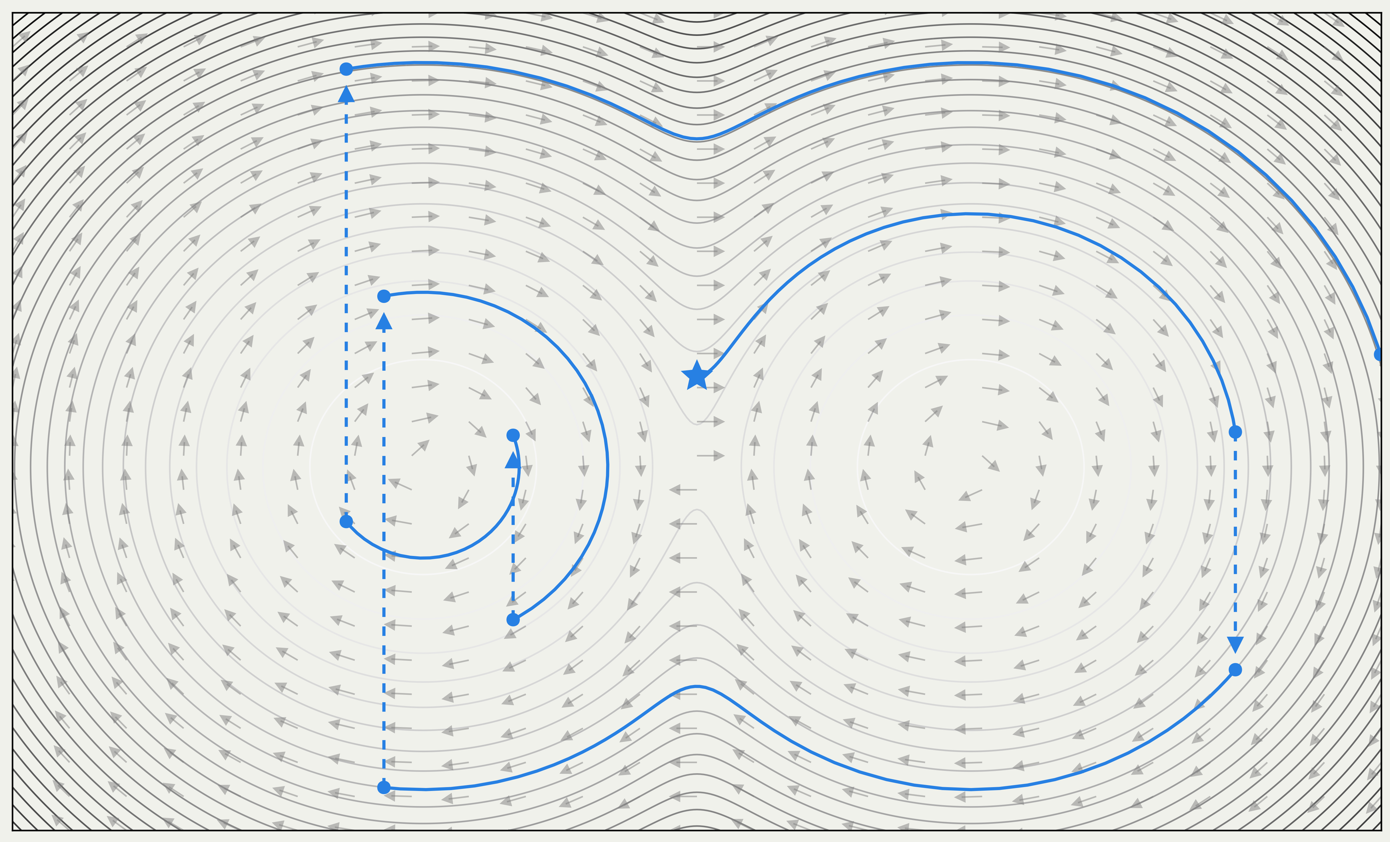


① 軌道の長さをある Poisson 過程からシミュレーション
② 速度 v を反射またはリフレッシュ

メトロポリス法

Hamiltonian Monte Carlo
Duane+ (1987), Neal (1993)

H をそのまま使用



① 軌道を $t=0.2$ だけシミュレーション
② 速度 v をリフレッシュ

手法の特徴

PDMP: tractable proxy $\widetilde{H}$ と H に乖離がある
→ ランダムな方向転換により補正

メトロポリス法: H の計算で離散化誤差が発生
→ 各離散化点 • で採択棄却を実施

問題点

PDMP: でも上手い方向転換って？？
新手法であるため, 効率的な方向転換のアイデア不足

メトロポリス法: 採択棄却の過程が探索を遅くする
「詳細釣り合い条件」が課され, ダイナミクスが変質する

Scaling Analysis: $d \to \infty$ 収束極限を比較することでアルゴリズムの性能を比較

最適スケーリング

Forward Event Chain

$O(d^{1/2})$

$$dY_t = -\frac{\sigma^2}{4}Y_t\,dt + \sigma_0\,dB_t$$

常に $\sigma \geq \widetilde{\sigma}(\rho)$

Shiba+ (2025+) !

BPS

$$dX_t = -\frac{X_t}{\rho}dt + \sqrt{2/\rho}\,dB_t \quad O(d)$$ 周辺サンプラー

$$d\widetilde{Y}_t = -\frac{\widetilde{\sigma}(\rho)^2}{4}\widetilde{Y}_t\,dt + \widetilde{\sigma}(\rho)\,dB_t \quad O(d)$$ ポテンシャルの過程

HMC

$O(d^{1/4})$
cf. Beskos+ (2013)

?

Generalized HMC

?

Shiba+ (2025+) ?

?

対称なダイナミクスの周期をなるべく大きくしていく手法