

新時代の MCMC を迎えるために

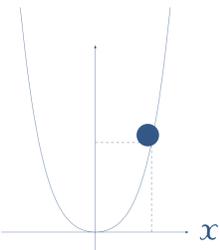
司馬博文 総合研究大学院大学 統計科学専攻 博士課程2年



現状、ハミルトニアンモンテカルロ法 (HMC) が、統計・機械学習における汎用サンプラーとして標準的な立場を占めている。HMC はそろそろ 40 歳の節目を迎えようとしている手法である。しかし近年になって、連続時間ベースの MCMC が、新たな汎用サンプラーの候補として期待されている。本当に HMC などの従来法よりも効率が良いのか、理論的な解明はほとんど進んでいない。そのために、本ポスターでは、現状の理解をまとめ、問題点を整理する。

MCMC とは何か？

$$U(x) = \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{4}$$



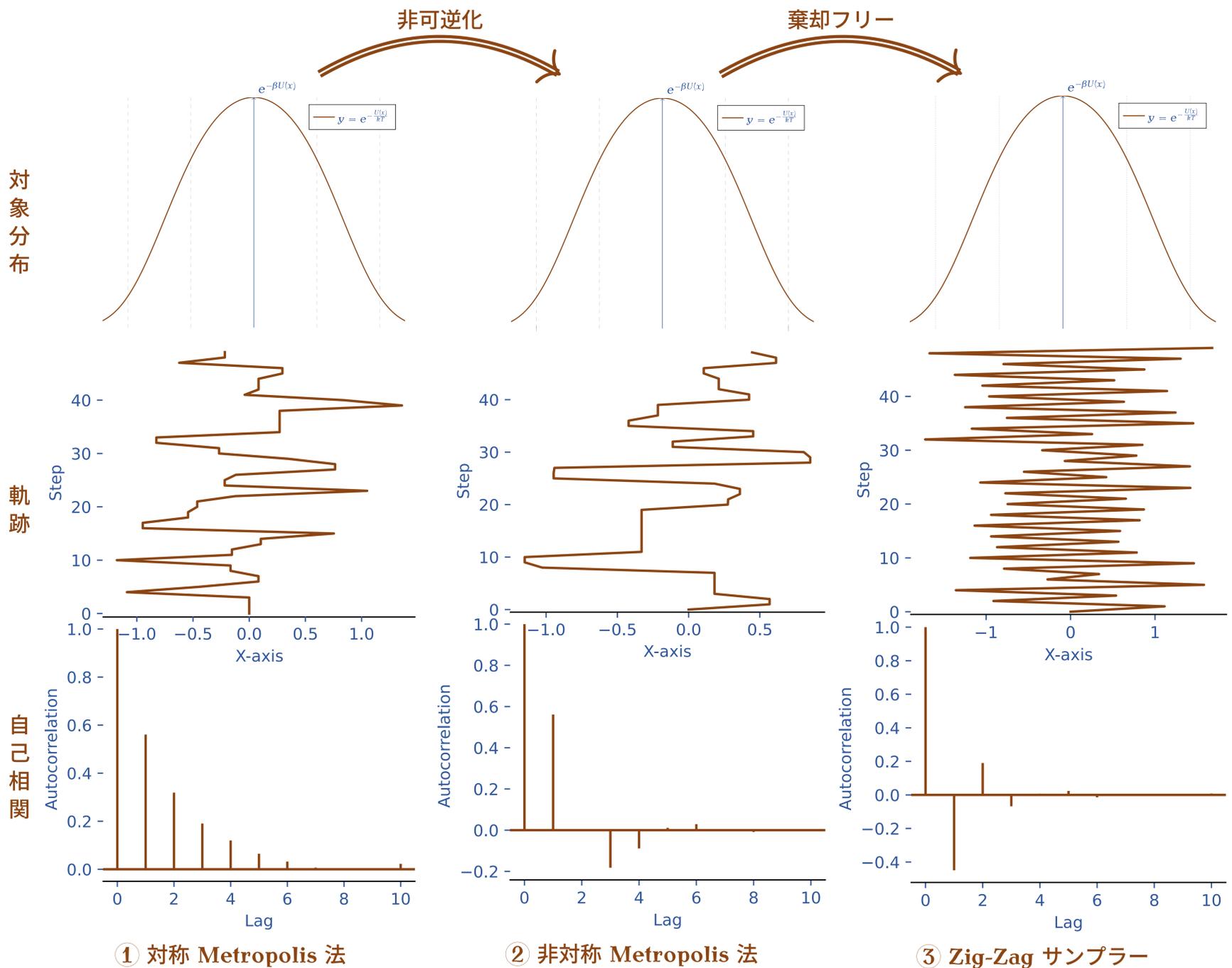
左図のようなポテンシャル U が定める正準分布 $e^{-\beta U}$ からサンプリングするためには、背後の物理過程 (例えば左図の赤球の位置) を長時間シミュレーションすることでサンプリング出来る (分子動力学法)。

しかし、必ずしも背後にある物理過程まで戻ってシミュレーションをする必要はない。そこでシミュレーションには簡単な Markov 連鎖を用いることとし、これを採択-棄却で調整して所望の分布を得るアルゴリズムが考えられた。これが Metropolis 法、さらには HMC の背後にある考え方である。

しかし近年、この枠組みを超えて、棄却を必要とせず、Markov 連鎖ではなく Markov 過程を用いる手法が提案され、実験を通じてその高い効率性が期待されており、理論的解明が待たれている。

MCMC の進化

3つの手法、① 一様分布 $U([0, 1])$ 提案分布とした Metropolis 法、② 提案分布は変えないが、liftingにより詳細釣り合い条件を破った非対称 Metropolis 法、③ その連続時間極限として得られる Zig-Zag サンプラーを 10000 ステップ実行し、その最初の 50 ステップの軌跡と自己相関を下图にまとめた。③ の Zig-Zag サンプラーにおけるステップ数は、イベント発生時間を測る単位と同一にした。



新たな MCMC を迎えるために解決すべき課題

- 今回の実験でも非対称な手法 (右側 2つ) の方が自己相関の点で収束が速いと確認された。しかし一般に、なぜ非対称手法の方が効率が良いかに関する理論的考察は十分には進んでいない。
- Zig-Zag サンプラーに代表される連続時間 MCMC 手法は、高次元においても従来法と比べて明確に速く収束することが同様の実験で確認できる。しかし、この事実の理論的な説明や、従来の離散時間手法との比較が課題となっている。