

Adaptive Tuning Parameters on HMC

竹田航太

2021 年 8 月 16 日

目次

1	Number of steps	1
1.1	基本的発想	1
1.2	Binary Tree の構成	2
1.3	停止時刻の決定	2
2	Step size	2
2.1	基本的発想	2

概要

HMC のサンプリング効率はハミルトンフローを近似する際のパラメータ L, ϵ に大きく依存する。このパラメータを動的に決定するアルゴリズムについて考える。数式は用いず概要のみまとめる。

1 Number of steps

leapfrog 法のパラメータ L を動的に決定する。各時刻で最適な回数で反復を止める。

1.1 基本的発想

HMC における候補点を leapfrog 法により計算する過程でその軌道から停止時刻を決定する。停止時刻に達した後、軌道から位置用サンプリングすることで候補点を決定する。このとき詳細釣り合い条件を満たすように軌道を構成する必要がある。

1.2 Binary Tree の構成

詳細釣り合い条件を満たすような軌道を構成するために Binary Tree の形で軌道点を増やしていく。停止時刻と判断されるまで $1, 2, 4, \dots, 2^j$ 回の leapfrog 反復により前方または後方に順次軌道に点を追加していく。このとき、追加する点に対しては MH-check を行う。停止時刻で止まった後には詳細釣り合い条件を満たす軌道内の点群が構成され、その中から一様サンプリングにより候補点を与える。

1.3 停止時刻の決定

2つの方法で停止時刻を決める。

1.3.1 数値発散

軌道計算時に反復の前後でエネルギーの差が大きくなりすぎた場合に計算を停止する。

1.3.2 "U-turn"

現在から次の点へのベクトルと現在の運動量の内積を使う。(これは現在と次の点の差のノルムの2乗の1/2の微分に相当する。) 計算済み軌道の最前点と最後点が近づきつつあることを上記の量により判断する。

2 Step size

2.1 基本的発想

Dual average optimization を HMC に対して行う。目標の採択確率を達成する ϵ を最適化により決定する。各ステップで採択率を計算し目標の採択率 δ との差と学習率の積だけ現在の step size を更新する。これを改良したアルゴリズムである Nesterov(2009) の dutal averaging scheme はパラメータ更新の際に過去の更新情報の平均を用いる。

参考文献

- [1] Matthew D. Homan and Andrew Gelman. The no-u-turn sampler: Adaptively setting path lengths in hamiltonian monte carlo. *J. Mach. Learn. Res.*, 15(1):1593–1623, January 2014.