HMC のモニター指標

竹田航太

2021 年 8 月 16 日

目次

概要

HMC のサンプリングをモニタリングする指標についてまとめる．効率と精度を検証する．

1 効率

1.1 方法

(1) エネルギーのヒストグラムを比べる → Bayesian Fraction of Missing Information(BFMI)
(2) ESS/T
(3) autocorrelation

1.1.1 Stan doc

収束のモニタリングと有効サンプルサイズマルコフ連鎖から得られるサンプルは，その連鎖が定常分布に収束したあとに，周辺分布 $p(\theta; y, x)$ から抽出されます．*MCMC* が収束したかどうかを判定する方法は複数ありますが，残念ながら，そうしたテストをパスしたからといって収束が保証されるものではありません．*Stan* においておすすめの方法は，いくつか異なるパラメータの初期値を用いてランダムに初期化した複数のマルコフ連鎖を走らせ，*warmup/adaptation* の

期間のサンプルを捨て, 各チェーンの残りのサンプルを半分に分割することで, 潜在的なスケールの逓減に関する統計量 $\hat{R}$ *(Gelman and Rubin, 1992)* を計算することです．もしその結果, 十分なサイズの有効サンプルが得られなければ, *iteration* の数を *2* 倍にして再びやり直します．*warmup* など全て含めてやり直しです．M 個の独立に抽出されたサンプルに基づいて母平均を推定する場合, その推定誤差は $1/\sqrt{M}$ に比例します．もし *MCMC* を使って抽出されたサンプルのように典型的にサンプル間に正の相関があれば, その推定誤差は $1/\sqrt{N_{ess}}$ に比例します．ここで $\sqrt{N_{ess}}$ は有効サンプルサイズです．したがって, 目下の推定や推論のタスクに対し十分な大きさになるまで, 有効サンプルサイズ（やその推定値）をモニターするのは標準的な習慣です．

1.2　エネルギーヒストグラムと BFMI

HMC のサンプリングの効率に影響する要因の一つが運動量サンプリングの分布の選び方である．π_E と $\pi_{E|q}$ が近いことが望ましい．

メモ:2021/07/26 gaussian target には gaussian の運動量サンプリングでうまくいく．BFMI．ただし，次元が小さい場合は π_E の分布（χ^2 分布）と Gaussian は大きく異なっているのでうまくいかない．

2　収束

2.1　R stats.

m 組の n 回反復列から収束に近づいているかどうかを判定する．[1] による．

2.1.1　流れ

7step で評価する．

step1: $m \geq 2$ に対して，m 組の独立な $2n$ 回反復を行う．各列の初期値は何らかの分布からサンプルするがこの影響をなくすためにはじめの n 点を捨てる．

step2: 2 つの重要な量を計算．m 列間の分散 B と各列内の分散の平均 W

$$
\begin{aligned}
\frac{B}{n} &\coloneqq \frac{1}{m-1}\sum_{i=1}^{m}(\bar{x}_i - \bar{x})^2 \\
W &\coloneqq \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} s_i^2
\end{aligned}
$$

ただし，

$$\bar{x}_i \coloneqq \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} x_{it}$$
$$\bar{x} \coloneqq \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \bar{x}_i$$
$$s_i^2 \coloneqq \frac{1}{n-1}\sum_{t=1}^{n}(x_{it}-\bar{x}_i)^2$$

step3: 目的分布の平均 μ を $\hat{\mu}$ 推定する．

$$\hat{\mu} \coloneqq \bar{x}$$

step4: 目的分布の分散 σ^2 を $\hat{\sigma}^2$ で推定する．

$$\hat{\sigma}^2 \coloneqq \frac{n-1}{n}W + \frac{1}{n}B$$

step5: パラメータ x についての情報を推定する．$\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2$ から t-分布を導く．

$$x \sim t_{df}(x|\hat{\mu}, \hat{V})$$

ただし，自由度 df と $\hat{V}, v\hat{a}r(\hat{V})$ 以下で定める．

$$\sqrt{\hat{V}} \coloneqq \sqrt{\sigma^2 + \frac{B}{nm}}$$
$$v\hat{a}r(\hat{V}) \coloneqq \left(\frac{n-1}{n}\right)^2 \frac{1}{m} v\hat{a}r(s_i)^2 + \left(\frac{m+1}{mn}\right)^2 \frac{2}{m-1}B^2 + \frac{2(m+1)(n-1)}{mn^2}\frac{n}{m}\left[c\hat{o}v(s_i^2, \bar{x}_i^2) - 2\bar{x}c\hat{o}v(s_i^2, \bar{x}_i)\right]$$

step6: 収束をモニター．$\hat{R}$ を計算する．

$$\hat{R} \coloneqq \frac{\hat{V}}{W}\frac{df}{df-2}$$

step7: 全てのパラメータで $\hat{R}$ が 1 に近ければサンプリングを終了する．

参考文献

[1] Andrew Gelman and Donald B. Rubin. Inference from Iterative Simulation Using Multiple Sequences. *Statistical Science*, 7(4):457 – 472, 1992.