# PDMP によりスパイク付きの非絶対連続分布からもサンプリングが可能になる

司馬博文 *

2025 年 2 月 24 日

## 1　導入：モンテカルロ法の歴史と新手法の出現

マルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC: Markov Chain Monte Carlo) や逐次モンテカルロ法 (SMC: Sequential Monte Carlo) などのモンテカルロ法は，21 世紀に入って計算機が普及してのち，ベイズ統計の応用範囲を爆発的に拡大する立役者となった ??．近年提案された**区分確定的マルコフ過程** (PDMP: Piecewise Deterministic Markov Process) を利用した新たなモンテカルロ法も，この系列に続くものと理解できる．

MCMC と SMC はいずれも離散時間のマルコフ過程 $(X_n)_{n=1}^{\infty}$ のシミュレーションに基づく．ここでは特に MCMC に焦点を当てる．ベイズ統計では事後分布 $\pi$ を導くことで推論を実行するが，事前分布や尤度の選択範囲を大きく制限しない限り，$\pi$ は既知の分布とはならない．たとえ $\pi$ の関数形がわかっていても，事後分布 $\pi$ の平均を求めるなど，これを後続の統計解析に供することは必ずしも簡単ではない．そんな中でも，事後分布 $\pi$ を平衡分布にもつエルゴード的なマルコフ連鎖 $(X_n)$ を設計することができれば，大数の強法則

$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} f(X_n) \xrightarrow{N\to\infty} \int f(x)\pi(dx) \ \text{ a.s.} \qquad f \in \mathcal{L}^1(\pi)$$

が成り立つ (?, pp.175-176)．この事実を用いて事後分布 $\pi$ を近似する枠組みが MCMC であり，条件を満たす $(X_n)$ の構成法に Gibbs サンプラー ? やランダムウォーク Metropolis-Hastings 法 ? などがある．

多くの MCMC 法は物理学に由来する．例えば Gibbs サンプラーは Ising モデル?，Metropolis-Hastings 法は状態方程式?のシミュレーションにおいて最初に提案された．MCMC という名前は ?? で統計学における確率分布からのサンプリングの問題に応用されて初めて付いたものである．連続時間のマルコフ過程である PDMP を用いた新しいモンテカルロ法も，やはり物理学における研究??で最初に使われ始め，初の氷の液相転移の全原子シミュレーションも成功させている ?．これに倣い統計でも Bouncy Particle Sampler (BPS) ?や Zig-Zag Sampler ?，Forward PDMC ?などの汎用アルゴリズムが提案され，この手法群に PDMP に由来する**区分確定的モンテカルロ法** (PDMC: Piecewise Deterministic Monte Carlo) の名前がついた．

本ポスターでは紙面を 3 つにわける．本稿もこれに対応する 3 つの節を用意し，それぞれを詳説する．初めに PDMC と MCMC（従来法）の違いを，シミュレートされるマルコフ過程の違いとアルゴリズムの違いの両面からみる（第??節）．続いて Poisson 剪定をはじめとする PDMP のシミュレーションの自動化法を解説し，筆者が開発したパッケージ `PDMPFlux.jl` ?ではどのようなアプローチを取っているかを解説する（第??節）．最後に MCMC では不

* 総合研究大学院大学先端学術院統計科学コース 5 年一貫博士課程 2 年（E-mail: shiba.hirofumi@ism.ac.jp）

可能であったが PDMC で可能になることとして，デルタ部分を持つ非絶対連続分布

$$p(dx) = \prod_{i=1}^d \biggl( \omega_i p_i(x_i)\,dx_i + (1-\omega_i)\delta_0(dx_i) \biggr)$$

からのサンプリング法を紹介し，ベイズ変数選択への応用に触れる（第??節）．

## 2　PDMP と従来法の違いと新しいシミュレーション法

既存の PDMC はいずれも，

$$\pi(x) \propto e^{-U(x)}, \qquad U \in C^1(\mathbb{R}^d),$$

という表示を持つ確率分布を対象に扱う．定数の差を除いて負の対数尤度にあたる $U$ をポテンシャルとも呼び，アルゴリズムはその勾配 $\nabla U$ のみを入力に取る．

## 3　開発パッケージの紹介と自動 Poisson 剪定

## 4　スパイク付きの非絶対連続分布からのサンプリング

## 参考文献


Alexandre Bouchard-Côté, Sebastian J. Vollmer, and Arnaud Doucet. The bouncy particle sampler: A non-reversible rejection-free markov chain monte carlo method. Journal of the American Statistical Association, 113(522):855–867, 2018.

Joris Bierkens, Paul Fearnhead, and Gareth Roberts. The Zig-Zag Process and Super-Efficient Sampling for Bayesian Analysis of Big Data. The Annals of Statistics, 47(3):1288–1320, 2019.

Etienne P. Bernard, Werner Krauth, and David B. Wilson. Event-chain monte carlo algorithms for hard-sphere systems. Phys. Rev. E, 80:056704, Nov 2009.

Arnaud Doucet, Nando Freitas, and Neil Gordon, editors. Sequential Monte Carlo Methods in Practice. Information Science and Statistics. Springer New York, 2001.

Michael F. Faulkner, Liang Qin, A. C. Maggs, and Werner Krauth. All-atom computations with irreversible markov chains. The Journal of Chemical Physics, 149(6):064113, 08 2018.

Stuart Geman and Donald Geman. Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, PAMI-6(6):721–741, 1984.

Roy J. Glauber. Time-Dependent Statistics of the Ising Model. Journal of Mathematical Physics, 4(2):294–307, 02 1963.

W. R. Gilks, S. Richardson, and David Spiegelhalter, editors. Markov Chain Monte Carlo in Practice. Chapman & Hall, 1996.

W. K. Hastings. Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications. Biometrika, 57(1):97–109, 1970.

Alexei Kulik. Ergodic Behavior of Markov Processes: with Applications to Limit Theorems, volume 67 of De Gruyter studies in mathematics. De Gruyter: Berlin, Boston, 2018.

Manon Michel, Alain Durmus, and Stéphane Sénécal. Forward event-chain monte carlo: Fast sampling by randomness control in irreversible markov chains. Journal of Computational and Graphical Statistics, 29(4):689–702, 2020.

N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. The Journal of Chemical Physics, 21(6):1087–1092, 1953.

E. A. J. F. Peters and G. de With. Rejection-free monte carlo sampling for general potentials. Physical Review E, 85(2), 2012.

Hirofumi Shiba. Pdmpflux v0.3.3, 2025.