arXiv:2601.16696v1 [stat.CO] 23 Jan 2026

更快的并行 el 马尔可夫链蒙特卡罗：Metropolis 校正，趁热效果最佳

Jakob Robnik
加州大学伯克利分校物理系，
美国加利福尼亚州伯克利市 94720

Uroš Seljak
加州大学伯克利分校物理系及劳伦斯伯克利国家实验室，美国加利福尼亚州伯克利市 94720

摘要

尽管哈密顿蒙特卡罗及相关的马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法取得了巨大成功，但在科学应用中，抽样往往仍是计算瓶颈。借助并行资源，同时运行大量链、每条链仅收集一个样本，可以显著加快 MCMC 推断。然而，如果链的初始化位置离目标分布不够近（冷启动），这种并行方法的收敛速度就会很慢。从理论上说，可以先运行不进行 Metropolis-Hastings 调整的 MCMC，使其快速收敛到目标分布附近，然后再启用调整，以实现精细收敛。然而，由于在未校正阶段难以自动选择步长，目前还没有实用方案采用这一策略。本文开发了延迟校正并行采样器（LAPS），这正是这样一种方案，而且开箱即用：所有超参数均可自动选择。LAPS 利用基于集合的超参数自适应，在每次迭代中估计偏差，并将其转换为适当的步长。我们表明，在各种标准基准问题上，LAPS 的表现始终显著优于 MEADS、ChESS 等集合校正方法，以及基于优化的初始化器 Pathfinder。与相应的序贯算法（如 NUTS）相比，LAPS 通常可将实际运行时间降低两个数量级。

1 引言

马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法（Metropolis 等人，1953年）是贝叶斯统计推断中的主力工具，应用范围广泛，从经济学和社会科学（Gelman 等人，1995年），到高能物理（Duane 等人，1987年）和机器学习（Neal，1996年）。它们也被广泛用于量子物理（Gattringer 和 Lang，2010年）、分子化学（Leimkuhler 和 Matthews，2015）、统计力学以及许多其他领域中的高维积分计算。在所有这些应用中，MCMC 的目标都是估计期望值 $\mathbb{E}_p[f] = \int f(\boldsymbol{x})p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}$，其中$p(\boldsymbol{x})$ 是参数 $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^d$ 的概率密度分布。具体做法是从概率密度分布$p(\boldsymbol{x})$ 中生成 M 个样本 $\{\boldsymbol{x}^m\}_{m=1}^M$，并据此估计感兴趣的期望值$\mathbb{E}_p[f(\boldsymbol{x})] \approx \frac{1}{M}\sum_{m=1}^M f(\boldsymbol{x}^m)$。我们关注目标分布$\nabla \log\ p(\boldsymbol{x})$ 的（光滑）梯度可用的情形，无论该梯度是通过解析方法获得，还是借助自动微分获得（Griewank 和 Walther，2008年）。这种情况在贝叶斯统计（Štrumbelj 等人，2024年；Carpenter 等人，2017年）、机器学习（Baydin 等人，2018）、格点量子问题（Gattringer 和 Lang，2010年）以及宇宙学（Campagne 等人，2023年）等领域中十分常见。

传统上，马尔可夫链蒙特卡罗采用顺序模式运行，使用一条（或少数几条）长链生成样本（Margossian 和 Gelman，2024）。链首先经历预热阶段，从初始状态收敛到平稳分布。预热结束后，开始收集样本；期望值误差会随着有效样本量的平方根增大而减小。有效样本量是样本总数经样本相关长度折减后的结果（Gelman 等人，1995）。不过，对于计算开销大的似然函数或复杂的几何结构，采样阶段的实际运行时间可能非常长，因此不适用于典型的科学工作流程，甚至可能难以承受。

并行抽样。 随着计算技术不断进步，GPU、TPU 和 CPU 集群等并行资源日益触手可及，一种新的范式应运而生（Sountsov 等，2024；Hoffman 和 Sountsov，2022；Lao 等，2020）：不再运行少数几条极长的链、让每条链生成大量样本，而是并行运行大量链，使每条链只收集一个样本。这种策略称为系综 MCMC（Hoffman and Sountsov，2022；Goodman and Weare，2010），也称为多短链机制（Margossian等，2024）。在系综方法中，实际上只有预热阶段至关重要；预热结束后，链位置的分布便已是平稳分布，误差则仅由链数量决定。不过，这种方法对链的初始化较为敏感；如果链的初始位置未接近目标分布，收敛速度可能很慢（Durmus 和 Eberle，2023）。

延迟校正。 理论上已经充分理解（Altschuler 和 Chewi，2024年；Durmus 和 Eberle，2023年）：当初始分布接近目标分布（热启动）时，经过 Metropolis-Hastings（MH）校正的马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）表现出色；但若初始分布远离平稳分布（冷启动），其表现则会变差，因为偏离典型集时接受概率会显著降低（Durmus 和 Eberle，2023年）。未校正方法（不含 MH 接受-拒绝步骤）在这方面与之互补：它们能从冷启动快速收敛至平稳分布附近，但难以实现精细收敛，因为它们存在偏差，必须通过较小的步长来控制偏差（Bou-Rabee 和 Schuh，2023年；Bou-Rabee 和 Eberle，2023年；Camrud 等，2024年）。结合两者的优点，一种做法是先用未校正方法从冷启动收敛至热启动状态，再用校正方法实现精细收敛（Durmus 和 Eberle，2023年；Altschuler 和 Chewi，2024年）。迄今为止，该方法从冷启动出发，在高精度下可实现理论上最佳的混合时间。然而，这些进展仍停留在理论层面，并假设掌握实践中无法获得的目标分布全局信息，因此如何实现这一算法，尤其是如何在未校正阶段选择步长，并不明晰。这正是本文的研究重点。

我们的贡献。 我们开发了首个实用的并行算法：先执行未经调整的抽样，再通过 MH 调整实现精细收敛。该算法称为延迟调整并行采样器（LAPS），开箱即用，用户只需提供目标密度和链的初始化。我们证明在标准基准问题上，该算法的表现显著优于其他即用型集成采样器，例如 ChESS-HMC（Hoffman 等，2021）或 MEADS（Hoffman 和 Sountsov，2022），在某些情况下性能提升超过一个数量级。它的收敛速度也比 NUTS（Hoffman 和 Gelman，2014）或 MCLMC（Robnik 等人，2024b）等顺序算法快两个数量级。该算法使用 JAX（Schoenholz 等，2020）实现，具体来说，是在 Blackjax（Cabezas 等，2024）中实现的，并附有使用教程[1][2]。Blackjax 可以轻松搭配使用 NumPyro（Phan 等人，2019）或 TensorFlow Probability（Dillon 等人，2017）等概率编程语言编写的模型。

2 背景与相关工作

并行 MCMC。 该策略是演化由 M 条链组成的系综。设 $(\boldsymbol{x}_t^m, \boldsymbol{u}_t^m)$ 为第 m 条链在第 t 次迭代时的状态，其中 $\boldsymbol{x}_t^m$ 是参数空间中的位置，$\boldsymbol{u}_t^m$ 是速度。此外，设 $\rho_t(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})$ 为底层系综的概率密度分布，也就是说，$(\boldsymbol{x}_t^m, \boldsymbol{u}_t^m)$ 是来自 $\rho_t(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})$ 的精确样本。每条链都是一个独立的马尔可夫过程，

$$(\boldsymbol{x}_{t+1}^m, \boldsymbol{u}_{t+1}^m) = \varphi(\boldsymbol{x}_t^m, \boldsymbol{u}_t^m | \beta_t), \tag{1}$$

其中 φ 是更新核，β_t 是该核的超参数。由于彼此独立，这些更新可以并行执行。

核的选择。 用于从可微分布中抽样的先进核包括哈密顿蒙特卡罗（HMC；Duane 等人（1987年）；Neal（2011年））和欠阻尼朗之万蒙特卡罗（LMC；Leimkuhler 和 Matthews（2015））。在这两种方法中，速度（或等价的动量）都被设定为具有标准高斯边缘分布。近年来，有人提出了微正则朗之万蒙特卡罗（MCLMC；Robnik 等人（2024b）；Robnik 和 Seljak（2024年）），其中速度的范数被固定不变。其优势在于，由于动力学更加确定，对大梯度的稳定性更高，且收敛更快。事实上，在实践中也观察到了相较于现有最佳方法的显著改进（Simon-Onfroy 等人，2025年；Crespi 等人，2025年；Sommer 等人，2024年）。收敛速度是本文特别关注的问题，因此我们将采用 MCLMC，而不是更为标准的哈密顿蒙特卡罗或朗之万蒙特卡罗。我们在附录 D 中进行了消融研究。在理想的连续时间 MCLMC 中，核应当以这样的方式

[1]Blackjax：https://blackjax-devs.github.io/blackjax/examples/quickstart.html。[2]用于复现结果的代码也已公开：https: //github.com/reubenharry/sampler-benchmarks

进行选择，使得 $(\boldsymbol{x}_s, \boldsymbol{u}_s) = \varphi(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{u}_0|s, \eta)$ 恰好满足以下随机微分方程（SDE）：

$$d\boldsymbol{x}_s = \boldsymbol{u}_s ds \tag{2}$$
$$d\boldsymbol{u}_s = (I - \boldsymbol{u}_s\boldsymbol{u}_s^T)(\nabla \log p(\boldsymbol{x}_s)/(d-1)ds + \eta d\boldsymbol{W}),$$

初始条件为 $(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{u}_0)$。随后，系综分布 ρ_t 可证明会收敛至目标分布（Robnik 和 Seljak，2024）。这里，$\boldsymbol{W}$ 是维纳过程（Øksendal，2003），η 是一个决定随机性强度的超参数。在方程（2）的离散化版本中（见公式 (23)），我们将用参数 L 而非 η来参数化随机性强度，使得当步长趋于零时，$\eta = \sqrt{2/Ld}$。这种参数化很方便，因为它使 L 可以直接与哈密顿蒙特卡罗中的轨迹长度进行比较（Robnik 和 Seljak，2024）。

Metropolis 检验。在实践中，我们必须通过分裂格式以数值方式构造一个只能近似求解方程（2）的核（Robnik 和 Seljak，2024），相关内容已在附录 E 中回顾。对于近似误差，有两种处理方法：

- **未校正：** 将此近似解用作核 $\varphi(\cdot|\epsilon, L)$，并确保步长 ϵ 足够小，从而使近似误差处于可接受范围内。

- **已校正：** 使用近似解 $\varphi(\cdot|\epsilon, L)$ 执行 N步来构造核，并通过 Metropolis-Hastings 接受/拒绝步骤将其封装起来，随后从其边缘分布刷新速度（Robnik 等，2025）。附录 F 回顾了这一构造。它保证系综精确收敛到目标分布。

未校正方法从冷启动到热启动的收敛速度更快，而已校正方法实现精细收敛的速度更快。LAPS 通过在未校正抽样不再取得足够进展后启用调整，结合了两者的优点。

超参数自适应。 无论哪种情况，该核都有两个超参数：步长 ϵ 和有效轨迹长度 L。在校正阶段，每次提议的步数 N 是另一个超参数。为了自动调整这些参数，我们将利用集合链自适应（ECA；Gilks et al. (1994)）这一方法，其核心思想是，在迭代 t，

$$\mathbb{E}_{\rho_t}[f] \approx \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} f(\boldsymbol{x}_t^m), \tag{3}$$

可用于为迭代$t+1$中的超参数提供参考。这会破坏链之间的完全独立性，并引入渐近偏差；当链数量较大时，该偏差很小。要消除这一偏差，可以采用（Hoffman 和 Sountsov，2022）中的方案，或者在某个时刻冻结超参数调优，正如我们在本文中所做的那样。针对哈密顿蒙特卡罗或朗之万蒙特卡罗，已经开发出若干 ECA 算法，其中包括 ChEES-HMC（Hoffman 等，2021）、SNAPER（Sountsov 和 Hoffman，2022）、MEADS（Hoffman 和 Sountsov，2022）和 MALT（Riou-Durand 等，2023）。另一种选择是以并行模式运行 NUTS（Hoffman 和 Gelman，2014），其中每条链都独立运行。这些采样器在整个过程中都采用 Metropolis 校正，并且通常使用优化器进行初始化。一种流行的选择是 Pathfinder 算法（Zhang 等，2022），这是一种基于 L-BFGS 的优化器，其设计目标是在优化器开始远离典型集并向分布的众数移动之前终止。我们的主要创新在于使用未校正采样器进行初始化。

3 未校正初始化

我们在此提出一种方案，用于确定算法未校正阶段的超参数。需要强调的是，这一阶段的目的并非保证收敛到目标分布，而只是尽可能快速地接近它。

3.1 步长

未校正核 p_ϵ 的平稳分布$\varphi(\cdot|\epsilon, L)$与目标分布 p不同。这称为渐近偏差。步长越大，我们越快趋近平稳分布，但渐近偏差也越大。我们预计最优步长会随时间变化：当我们离平稳状态较远时，渐近偏差不那么重要，采取更大步长的优势占上风。越接近平稳分布，就越需要使用较小的步长来实现精细收敛。在附录 A 中，我们为这一直觉提供理论依据，并证明最优步长调度应满足：渐近偏差 $D(p, p_\epsilon)$比当前总偏差 $D(p, \rho_t)$小一个与时间无关的因子，$D(p, p_{\epsilon_t}) = CD(p, \rho_t)$。这里，$D$ 是分布空间上的某种度量。实际采用这一方案会面临若干挑战：

总偏差。计算瓦瑟斯坦距离或全变差距离等距离很困难，即使已知精确样本也是如此，更不用说在当前情况下，算法的最终目标正是获得来自 $p(\boldsymbol{x})$的样本。我们将改为构造一个距离的近似指标，它基于某一类汇总统计量；这些统计量的真实值已知，且独立于 $p(\boldsymbol{x})$。我们将考察能量均分条件（Röver 等人，2023）：矩阵

$$V_{ij}(p,\rho_t) = \mathbb{E}_{\rho_t}[-(x_i - \mathbb{E}_{\rho_t}[x_i])\partial_j \log p(\boldsymbol{x})] \quad (4)$$

当 $\rho_t = p$ 时等于恒等映射，这一点可通过分部积分看出：

$$\begin{aligned} V_{ij}(p,p) &= -\int (x_i - \mathbb{E}_p[x_i])\partial_j[\log p(\boldsymbol{x})]p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \\ &= -\int (x_i - \mathbb{E}_p[x_i])\partial_j p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} \\ &= \delta_{ij}\int p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} = \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (5)$$

我们利用这一事实来构造

$$\widetilde{D}(p,\rho_t) = \frac{1}{d}\operatorname{Tr}\{(I - V(p,\rho_t))(I - V(p,\rho_t))^T\}. \quad (6)$$

$\sim D$ 不是分布空间上的度量，因为它仅基于某些汇总统计量，而这些统计量无法唯一确定完整的分布。尽管如此，我们在附录 B 中证明，它是零均值高斯分布空间上的一种散度。至关重要的是，$\sim D(\rho_t, p)$ 可以使用 ECA 形式体系 (3) 计算，且计算开销几乎可以忽略不计，如附录 B 所示。

比例常数。最优常数$0 < C < 1$ 尚不明确，并且可能取决于具体问题。在本研究中，我们将其固定为 $C = 0.025$。我们在附录 D 中进行了消融研究，结果表明，该值适用于本文考虑的问题，并且在其他较大范围的取值下，性能也保持稳定。

渐近偏差。难点在于，如何在不知道真实值、甚至尚未收敛到渐近状态的情况下，估计渐近偏差 $D(p, p_\epsilon)$。哈密顿蒙特卡罗、朗之万蒙特卡罗和 MCLMC 等动力学方法有一个称为能量的量；对于精确解，该量不会随时间变化。然而，采用近似动力学进行一步操作会使能量变化 $\Delta(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}|p, \epsilon)$。$\Delta$ 的精确形式见附录 E。关键在于，它仅取决于 $\log p(\boldsymbol{x})$ 和 $\nabla \log p(\boldsymbol{x})$；这两者都是核更新计算的副产物，因此计算能量变化几乎不会带来额外的计算开销。

我们关注的是系综中能量变化的方差，具体而言，是每维能量误差方差（EEVPD）：

$$\mathrm{EEVPD}(\rho|p,\epsilon) = \mathrm{Var}_{\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u})}[\Delta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}|p,\epsilon)]/d, \quad (7)$$

其中，方差为 $\mathrm{Var}_\rho[f] = \mathbb{E}_\rho[(f - \mathbb{E}_\rho[f])^2]$。EEVPD 是一个有用的量，因为它通过下式为渐近偏差提供了上界（Robnik 等人，2024a）：

$$\widetilde{D}(p,p_\epsilon) \le F^{-1}(\mathrm{EEVPD}(p_\epsilon|p,\epsilon)), \quad (8)$$

其中，$F(\widetilde{D}) = 4\widetilde{D}^{3/2}/(1+\widetilde{D}^{1/2})^2$ 是一个单调递增函数。对于高斯分布，这个上界已得到严格证明；数值结果也表明，它通常适用于非高斯分布。（Robnik 等人，2024a）还表明，EEVPD 大致按 $\mathrm{EEVPD} \propto \epsilon^6$ 缩放。

总之，最优步长调度应使渐近偏差始终小于总偏差的某个固定比例。我们通过均分条件估计总偏差，通过能量误差估计渐近偏差，然后根据最优调度条件选择步长。由此得到以下方案，用于根据第 ρ_t 次迭代时的系综确定步长 ϵ_{t+1}。

1. Calculate $\widetilde{D}(p,\rho_t)$ from Equation (6).

2. 将其转换为所需的渐近偏差：$\sim D(p, p_{\epsilon_t}) = C\widetilde{D}(p,\rho_t)$。3. 将所需的渐近偏差转换为所需的 $\widetilde{\mathrm{EEVPD}} = F(\widetilde{D}(p,p_{\epsilon_t}))$。4. 估计与当前步长相关的 $EEVPD(\rho_t|p,\epsilon_t)$。方程 (3) 用于计算方差。5. 根据 EEVPD 随步长变化的近似比例关系，确定下一次迭代应采用的步长，以确保达到所需的 EEVPD，即 $\epsilon_{t+1} = \epsilon_t\big(\mathrm{EEVPD}/\mathrm{EEVPD}(\rho_t|p,\epsilon_t)\big)^{1/6}$。

图1显示，采用此程序后：(i) EEVPD 成功地追踪其目标值；(ii) 步长逐渐减小，从而使偏差迅速减小。

3.2 动量退相干尺度

在动力学中加入噪声可以确保遍历性，从而加快混合。不过，噪声强度不宜过大，以便动力学能够高效探索后验分布。研究表明，动量方向失去相关性之前的最优时间尺度

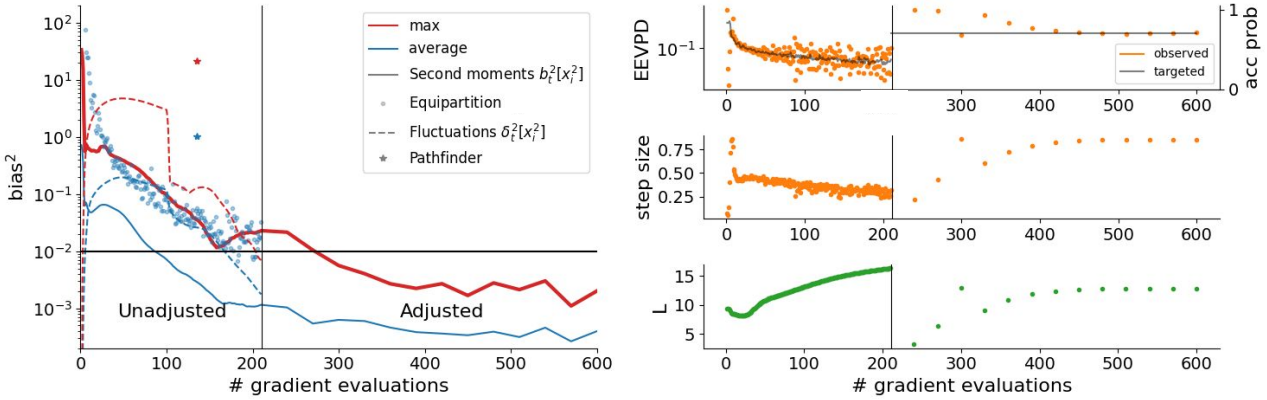

图1：LAPS 在德国信贷问题上的收敛情况。左图：相对于真实值的二阶矩偏差，$b^2_{\max}$（红色）和 b^2_{avg}（蓝色）、均分损失（蓝色圆点）以及二阶矩波动（虚线）随梯度评估次数的变化情况。后两者可在真实值未知时进行估计。在此示例中，它们较好地反映了实际偏差。垂直线表示从未校正阶段切换到校正阶段。此例中，未校正阶段已非常接近所需精度，而校正方法则进一步提升了精度。请注意，最终系综不存在偏差，残余误差是由链数量有限造成的。图中还以星号标出了 Pathfinder 的二阶矩偏差。右图：下方两个面板显示超参数步长和 L 的收敛情况。步长根据能量误差推导出的量进行调整，这些量显示在上方面板中。未校正阶段使用 EEVPD，校正阶段使用接受率。目标 EEVPD 和接受率以灰色显示。接受率固定不变，而目标 EEVPD 则根据均分损失得出的当前偏差估计进行自适应调整。请注意，得益于二分法，校正阶段的步长在几步之内便会收敛。

与后验分布的典型尺度相当（Robnik 等人（2024b）），这提示我们采用如下方案

$$L_t = \alpha \left(\sum_{i=1}^{d} \text{Var}_{\rho_t}[x_i] \right)^{1/2}. \tag{9}$$

在 Robnik 等人（2024b）中，$\alpha = 1$ 被用作默认值，而在这里我们发现，较大的值 $\alpha = 2$ 效果更好，这与更具确定性的动力学相对应。请参阅附录 D 中的消融研究。

4 切换到调整

原则上，步长逐渐衰减的未校正采样器能够收敛到精确的目标分布。然而，在上一节中我们不得不采用若干近似方法，因为在实践中很难控制渐近偏差。但即使与完美的未校正步长调度相比，经过调整的采样器也能更快地实现精细收敛。

我们将采用务实的方法来确定何时启用调整：监测汇总统计量，并判断其数值何时不再显著变化，这表明链已接近平稳性。我们将汇总统计量的相对波动定义为

汇总统计量 $\mathbb{E}[f]$ 的

$$\delta_t[f] = \sigma_t[f]/\mu_t[f], \tag{10}$$

其中，平均值和标准差是在长度为 T 的滑动窗口内计算的：

$$\mu_t[f] = \frac{1}{T} \sum_{s=t-T}^{T} \mathbb{E}_{\rho_s}[f] \tag{11}$$

$$\sigma_t^2[f] = \frac{1}{T-1} \sum_{s=t-T}^{T} (\mathbb{E}_{\rho_s}[f] - \mu_t[f])^2.$$

通过在线平均，可以以节省内存的方式实现这些计算，因此无需在每台设备上存储链的 T 个状态。

如果链处于平稳状态且服从目标分布，我们预期

$$\delta[f] = \quad _p[f]^{1/2} M^{-1/2} / \mathbb{E}_p[f] \sim \text{Var},$$

$M^{-1/2}$

因此当系综较大时，该值应该非常小。因此，δ 值较小表明我们正在接近平衡态。对于可观测量，我们将取$f(\boldsymbol{x})$ $= x_i^2$，并在所有 $\delta_t[x_i^2]$ 都低于某个阈值时终止未校正阶段。我们将阈值设为 0.01，并将滑动窗口大小设为总采样时间的 20%。

对角预条件 有助于降低条件数，前提是指定的目标分布具有

不同的后验分布宽度，因此这是马尔可夫链蒙特卡罗中的常见做法（Sountsov 和 Hoffman，2022）。在未校正阶段结束时，我们通过坐标变换$y_i(\boldsymbol{x}) = x_i / \mathrm{Var}_{\rho_t}[x_i]^{1/2}$进行对角预条件。

5 校正抽样

现在，我们启用 Metropolis 校正，并使用 ECA 将超参数调整到新的状态。

5.1 步长

在校正阶段，我们会调整步长，以达到期望的平均接受率（Neal，2011年）。由于链的数量很多，平均接受率估计值的噪声非常小。因此，无需使用双重平均（Hoffman 和 Gelman，2014）等随机优化方法。相反，接受率作为步长 $a(\epsilon)$ 的函数，实际上是单调递减的，因此我们可以直接用二分法求出 $a(\epsilon) - a_{\mathrm{targeted}}$ 的根。首先，如果初始步长过小（过大），我们就在每次迭代中将步长加倍（减半），直到找到一个夹根区间，即两个能够夹住根的 ϵ 值。然后，我们继续使用二分法，直到接受率达到期望值，误差不超过一定容差（默认为 3%）。此后，超参数保持固定，从而消除 ECA 导致的偏差（这种偏差通常小到难以察觉）。图1表明，该过程只需几步便可收敛。在我们的实验中，二分法比 Hoffman 和 Gelman（2014年）提出的双重平均更快、更稳定。Beskos 等人（2013）和 Neal（2011年）的论证可推广至此；Betancourt 等人（2015）指出，对于采用哈密顿蒙特卡罗的乘积目标分布，二阶积分器的最优接受率范围为 60% $-$ 80%，四阶积分器则为 80% $-$ 87%。同样的论证也适用于 MCLMC（Robnik 等，2025年）。稍高的接受率通常在数值上更稳定（Phan 等人，2019年），因此我们将二阶积分器和四阶积分器的目标接受率分别默认设为 70% 和 90%。附录 D 中的消融研究表明，这些选择对性能的影响很小。

5.2 动量退相干尺度

在此阶段，我们不调整轨迹长度，因为此阶段通常很短。我们将每条轨迹的积分步数固定为 15 步，即两次完全刷新之间的轨迹长度为 $L_{\mathrm{full}} = 15\epsilon$。按照 Riou-Durand 和 Vogrinc（2023年）；Riou-Durand 等人（2023年）的建议，我们将公式 (23) 中部分刷新的 {v2}设为{v3}。

6 实验

我们在若干基准问题上测试 LAPS，这些问题取自 Inference gym（Sountsov 等，2020）：

- 香蕉是一个二维的香蕉形目标分布，如图 3 所示。

- 病态高斯分布是一个 100 维高斯分布，其协方差矩阵的方向随机选取，特征值则从伽马分布中抽取。其条件数约为 10^5。

- 德国信贷稀疏逻辑回归（GC）是一个 51 维贝叶斯分层模型，其中使用逻辑回归，根据申请人的信息对其信贷申请是否获批进行建模。

- 布朗运动（布朗）是一个 32 维层次模型问题，其中根据带噪声且部分缺失的数据，对创新噪声未知的布朗运动进行拟合。

- 项目反应理论（IRT）是一个 501 维层次模型问题，依据考试结果推断学生的能力。

- 随机波动率（SV）是一个 2519 维的层次非高斯随机游走模型，用于拟合标普500收益率数据。

我们沿用 Hoffman and Sountsov（2022）的做法，将期望值 $\mathbb{E}[f]$ 的偏差定义为

$$b_t^2[f] = \frac{(\mathbb{E}_{\rho_t}[f] - \mathbb{E}_p[f])^2}{\mathrm{Var}_p[f]}, \tag{12}$$

其中，病态高斯分布的真实期望值 $\mathbb{E}_p[f]$ 和 $\mathrm{Var}_p[f] = \mathbb{E}_p[(f(\boldsymbol{x}) - \mathbb{E}_p[f])^2]$ 通过解析方法计算得出；其他目标分布则通过运行非常长的 NUTS 序列计算得出。作为收敛的度量，我们将采用参数间二阶矩偏差的最大值或平均值：

$$b^2_{\mathrm{max},t} \equiv \max_{1\le i\le d} b_t^2[x_i^2] \qquad b^2_{\mathrm{avg},t} \equiv \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d} b_t^2[x_i^2]. \tag{13}$$

这两种偏差在实际应用中都值得关注，也都曾被用作后验收敛度量。我们采用最大值定义，以便直接与（Hoffman 和 Sountsov，2022）的集成算法进行比较；采用平均值定义，以便直接与 Robnik 等人（2024b）的序贯算法进行比较。

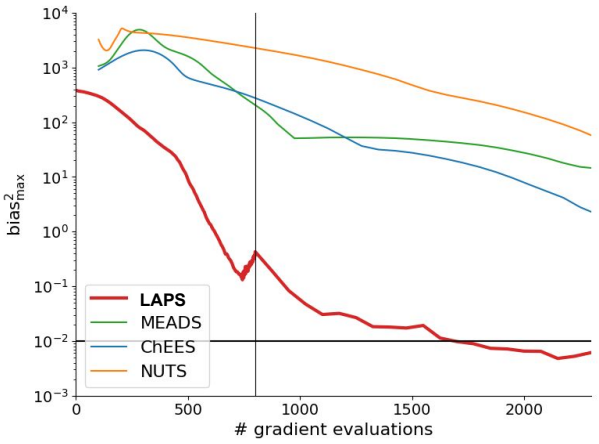

图2：随机波动率问题中，二阶矩偏差随梯度评估次数的变化。LAPS 的收敛速度显著快于作为对比的当前最先进的集成采样器。请注意，在这种情况下，未校正阶段未能完全达到所需的精度要求，因此校正阶段对于实现高效收敛至关重要。

在典型应用中，计算梯度$\nabla \log\, p(\boldsymbol{x})$占据了总采样成本的大部分，因此我们用梯度评估次数作为墙钟时间的替代指标。与（Hoffman 和 Sountsov，2022）一样，我们将采样器的性能衡量为达到低误差 $b^2_{\max} < 0.01$所需的梯度调用次数 n 。

在表 1 中，我们将 LAPS 与 Hoffman 和 Sountsov（2022）所实现的 NUTS、ChEES-HMC 和 MEADS 进行比较。由于这些采样器经 MH 校正，它们初期收敛较慢；为此，它们会先运行 ADAM 100 步（Hoffman 和 Sountsov，2022）。我们将这 100 次梯度调用计入表 1 和图2中的抽样总成本。请注意，对于层次参数，ADAM 初始化结果可能与真实值相差甚远。本测试中的所有采样器均使用$M = 4096$ 条链。在附录 D 中，我们表明，只要链数量大于 $128 - 256$，即使使用较少的链，LAPS 的性能也不会下降。

LAPS 在所有基准问题上的表现都优于其他采样器，某些情况下优势达一个数量级。图1和图2展示了 LAPS 中超参数的收敛情况，同时也展示了其他采样器的结果以供比较。我们还将其与 Pathfinder 的集成版本进行了比较（Zhang 等（2022）中的算法 2）。对于我们的大多数基准问题，Pathfinder 都未能收敛。它只在二维香蕉问题中收敛，在该问题上，它通过 67 次梯度评估达到了 $b^2_{\max} = 0.02$ ；此外，在德国信贷

表 1：达到低最大偏差所需的梯度调用次数（$b^2_{\max} = 0.01$），按链归一化，越低越好。LAPS 与最先进的集成算法进行了比较。在所有情况下，LAPS 都是表现最佳的算法，优势为 2 至 20 倍。

	NUTS	ChEES	MEADS	LAPS
香蕉	320	264	390	**17**
高斯	9846	5138	5520	**308**
GC	2716	1168	610	**300**
布朗	2159	600	410	**206**
IRT	1162	537	790	**185**
SV	4173	3080	2860*	**1325**

* 这是 Hoffman and Sountsov（2022）表2中报告的数字。它与他们的图7不一致；根据图7，该数字应该在4200左右。我们的图2基于他们的图7。

表2：达到较低平均偏差所需的梯度调用次数（$b^2_{\text{avg}} = 0.01$）。将采用256条链的 LAPS 与最先进的序贯算法进行比较。LAPS（总计）统计所有链的梯度调用次数，LAPS 统计每条链的梯度调用次数。如果计算没有在各条链之间并行化，运行时间由梯度调用总次数决定，而序贯算法通常更快。但如果计算采用并行化，每条链的梯度调用次数决定运行时间，此时 LAPS 会快得多。

	NUTS (序列)	MCLMC (序列)	LAPS (总计)	LAPS
香蕉	64,200	5000	4400	17
高斯	113,900	33,500	68,600	270
GC	10,400	4200	28,700	110
布朗	5400	1700	17,900	70
IRT	7300	1600	21,000	80
SV	29,900	10,000	281,600	1100

问题中，它在 135 次梯度评估内达到 $b^2_{\max} = 21.5$ ，如图1所示。因此，即使没有完全失败，LAPS 的未校正阶段也能显著更快地获得对后验分布的更好近似。

我们还将 LAPS 与序贯算法、NUTS 和 MCLMC 进行了比较。两个值得关注的量分别是达到低偏差所需的梯度调用总次数（与 CPU/GPU 小时总数成正比）以及每条链的梯度调用次数（与实际运行时间成正比）。在此设置下，我们为 LAPS 使用 $M = 256$ 条链。结果见表2。就梯度调用总次数而言，序贯算法更快，但在某些情况下差异并不大，这表明在这些

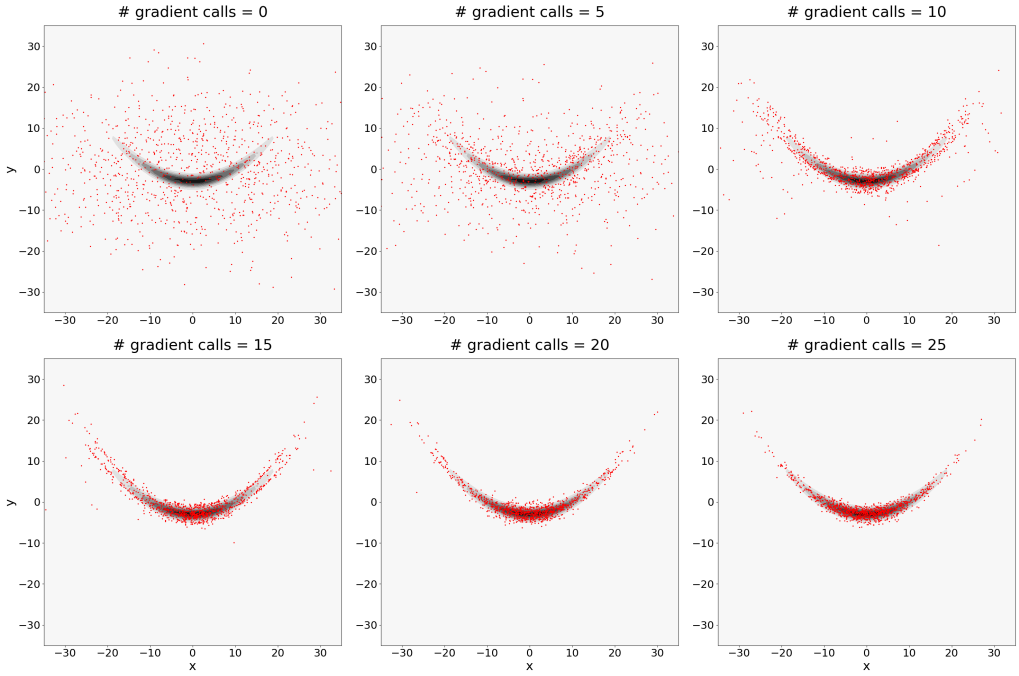

图 3：LAPS 在香蕉目标分布上的后验分布随（每条链的）梯度调用次数变化的情况。链的位置以红色显示，目标密度以黑色显示。如图所示，LAPS 仅需约 20 次梯度调用便收敛到后验分布。

情况下，MCLMC 冷启动的预热成本与从热启动获得一个独立样本的成本相当。然而，就实际运行时间而言，LAPS 通常比序贯 MCLMC 快一到两个数量级，比 NUTS 快两到三个数量级。

7 结论

近年来，随着 CPU 集群、GPU 和 TPU 等并行资源日益普及，并行 MCMC 越来越受欢迎。当似然评估耗时较长时，它尤其具有吸引力，因为它能显著缩短实际运行时间。然而，其成本很容易被冷启动后的收敛速度所主导。

我们提出了延迟校正并行采样器，这是一种以未校正采样器启动抽样的方案。未校正抽样的关键挑战在于确定能确保渐近偏差较小的步长。我们认为，最优步长应随时间变化：初始步长应较大，随着链逐渐接近目标分布、对精度的要求不断提高，步长则应逐渐减小。我们设计了一种方案，通过监测能量均分条件来实现这一点，并将其作为收敛的代理指标，据此适当调整步长。我们已经

通过标准基准问题证明，所得算法的性能优于最先进的并行采样器，最高可达一个数量级。

鲁棒性 算法未校正阶段的构造受到主要基于高斯假设的研究结果启发，而这显然存在局限性。例如，可以构造这样的病态情形：~其中 $D(p,\ \rho_t)$ 为零（或非常小），但分布之间并不接近。这会导致算法采用过短的步长，因而进展缓慢。另一方面，我们观察到，对于长尾分布（例如~香蕉示例），D 是一个过于严格的度量；即使对于精确的独立同分布样本，它也只会随着样本数量增加而缓慢衰减。这会导致步长变得过大，系综受困于离散化偏差的限制。这两种失效模式都会使系综达到一个不等于目标分布的平稳分布。然而，由于在这两种情况下期望值最终都会稳定下来，因此会触发不依赖这些假设的校正阶段。我们发现，这使该方案具有鲁棒性：在最坏的情况下，校正阶段会被触发。

同样，算法运行并不要求 EEVPD $\propto \epsilon^6$ 严格成立，重要的是反馈

环路能够确保：如果 EEVPD 大于预期，就减小步长；如果小于预期，就增大步长。因此，适用范围更广的假设——EEVPD 随步长单调增长——就足够了。图 1左上方的面板显示，这个反馈环路在非高斯分布下也能良好运行，并表明观测到的 EEVPD（橙色）会跟踪其目标值（灰色）。总体而言，我们已在各种非高斯分布上测试了该算法，EEVPD 等量的表现和稳定性表明，该算法对这些假设具有鲁棒性。

未来工作 多种并行方法，如序贯蒙特卡洛、退火和并行退火，旨在解决多峰分布问题。这些方法不依赖于所使用的核，因此与 LAPS 兼容。例如，在退火过程中，可以在每个温度层级运行 LAPS，以尽可能快速地将粒子分布从前一个温度层级转变为新的平稳分布。

LAPS 使用均分作为收敛度量，但这并非唯一选择。一种替代方法是ˆsplit-R 统计量（Margossian等，2024），它也有助于确定何时启用调整。

最后，在各种具有重尾、多峰性或复杂几何结构的实际问题上进行广泛测试，将有助于在更广泛的背景下确立 LAPS 策略。

致谢

我们感谢 Reuben Cohn-Gordon 与我们进行了许多讨论、对稿件提出意见，并帮助我们处理 Blackjax。我们感谢 Nawaf Bou-Rabee、Bob Carpenter 和 Siddharth Mitra 提供的宝贵讨论。本材料所述工作部分得到了 Heising-Simons Foundation 资助（编号 2021-3282）和 NSF CSSI 资助（项目编号 2311559）的支持。

参考文献

Altschuler, J. M. 和 Chewi, S.（2024年）。通过算法热启动实现更快速、高精度的对数凹采样。《*ACM*杂志》，71(3):24:1–24:55。Baydin, A. G.、Pearlmutter, B. A.、Radul, A. A. 和 Siskind, J. M.（2018）。机器学习中的自动微分：综述。《机器学习研究期刊》，18。Beskos, A.、Pillai, N.、Roberts, G.、Sanz-Serna, J.-M. 和 Stuart, A.（2013）。混合蒙特卡罗算法的最优调优。*Bernoulli*, 19(5A):1501–1534。

Betancourt, M. J.、Byrne, S. 和 Girolami, M.（2015）。优化哈密顿蒙特卡罗的积分器步长。arXiv:1411.6669 [统计学]。

Bou-Rabee, N. 和 Eberle, A.（2023年）。未校正哈密顿蒙特卡罗的混合时间保证。*Bernoulli*，29(1)：75–104。

Bou-Rabee, N. 和 Schuh, K.（2023年）。未校正哈密顿蒙特卡罗在平均场模型中的收敛。*Electronic Journal of Probability*，28(none)：1– 40。

Cabezas, A.、Corenflos, A.、Lao, J. 和 Louf, R.（2024年）。Blackjax：JAX 中可组合的贝叶斯推断。

Campagne, J.-E.、Lanusse, F.、Zuntz, J.、Boucaud, A.、Casas, S.、Karamanis, M.、Kirkby, D.、Lanzieri, D.、Li, Y. 和 Peel, A.（2023年）。JAX-COSMO：端到端可微且 GPU加速的宇宙学库。开放天体物理学期刊，6：10.21105/astro.2302.05163。arXiv:2302.05163 [天体物理学]。

Camrud, E., Durmus, A., Monmarché, P., 和 Stoltz, G.（2024年）。未校正广义哈密顿蒙特卡罗的二阶定量界。arXiv:2306.09513 [math]。

Carpenter, B., Gelman, A., Hoffman, M. D., Lee, D., Goodrich, B., Betancourt, M., Brubaker, M., Guo, J., Li, P., 和 Riddell, A.（2017年）。Stan：一种概率编程语言。*Journal of StatisticalSoftware*，76：1–32。

Crespi, A., Bonici, M., Loureiro, A., Ruiz-Zapatero, J., Sladoljev, I., Li, Z., Bayer, A., Millea, M., 和 Seljak, U.（2025年）。Flinch：一个用于从曲面天空数据中推断宇宙学参数的可微场级推断框架。arXiv:2510.26691 [天体物理学]。

Dillon, J. V., Langmore, I., Tran, D., Brevdo, E., Vasudevan, S., Moore, D., Patton, B., Alemi, A., Hoff- man, M., and Saurous, R. A.（2017年）。TensorFlow 分布。*arXiv* 预印本 *arXiv:1711.10604*。也是 TensorFlow Probability 库的一部分。

Duane, S., Kennedy, A. D., Pendleton, B. J., and Roweth, D.（1987年）。混合蒙特卡罗。*PhysicsLetters B*，195(2):216–222。

Durmus, A. O. and Eberle, A.（2023年）。高维非精确马尔可夫链蒙特卡罗方法的渐近偏差。arXiv:2108.00682 [cs, math，stat]。

Gattringer, C. and Lang, C. B.（2010年）。格点上的量子色动力学：入门介绍，《物理学讲义》第788卷。施普林格柏林海德堡，柏林，海德堡。

Gelman, A., Carlin, J. B., Stern, H. S., and Rubin, D. B.（1995年）。贝叶斯数据分析。Chapman and Hall/CRC, 纽约。

Gilks, W. R., Roberts, G. O., and George, E. I.（1994）。自适应方向抽样。皇家统计学会会刊 *D*辑：统计学家，43(1):179–189。Goodman, J. and Weare, J.（2010年）。具有仿射不变性的集成采样器。应用数学与计算科学通讯，5(1):65–80。Griewank, A. and Walther, A.（2008年）。《导数求值：算法微分的原理与技术》，第二版。工业与应用数学学会。版本：第二版。Hernández-Sánchez, M., Kitaura, F.-S., Ata, M., and Vecchia, C. D.（2021）。用于宇宙学大尺度结构分析的高阶哈密顿蒙特卡罗抽样。《皇家天文学会月刊》，502(3):3976–3992。arXiv:1911.02667 [天体物理学，物理学:hep-lat]。Hoffman, M., Radul, A., and Sountsov, P.（2021）。用于设定哈密顿蒙特卡罗轨迹长度的自适应马尔可夫链蒙特卡罗方案。载于第*24*届人工智能与统计国际会议论文集，第3907–3915页。PMLR。Hoffman, M. D. and Gelman, A.（2014）。哈密顿蒙特卡罗中的无 U 形转向采样器：自适应设定路径长度。《机器学习研究期刊》，15(47):1593–1623。Hoffman, M. D. and Sountsov, P.（2022）。免调参广义哈密顿蒙特卡罗。载于第*25*届人工智能与统计国际会议论文集，第7799–7813页。PMLR。Hutchinson, M. F.（1989）。拉普拉斯平滑样条影响矩阵迹的随机估计量。统计学通讯：模拟与计算，18(3):1059–1076。Lao, J., Suter, C., Langmore, I., Chimisov, C., Saxena, A., Sountsov, P., Moore, D., Saurous, R. A., Hoffman, M. D., and Dillon, J. V.（2020）。tfp.mcmc：为现代硬件打造的现代马尔可夫链蒙特卡罗工具。Leimkuhler, B. and Matthews, C.（2015）。《分子动力学：确定性与随机数值方法》，第39卷，收录于跨学科应用数学。Springer International Publishing，查姆。Margossian, C. C. and Gelman, A.（2024年）。马尔可夫链蒙特卡罗应该运行多少次迭代？arXiv:2311.02726 [统计学]。Margossian, C. C., Hoffman, M. D., Sountsov, P., Riou-Durand, L., Vehtari, A., and Gelman, A.（2024年）。嵌套 R^：运行许多短链时评估马尔可夫链蒙特卡罗的收敛性。贝叶斯分析，-1(-1):1–28。Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., and Teller, E.（1953年）。《快速计算机上的状态方程计算》。《化学物理学杂志》，21(6):1087–1092。Neal, R. M.（1996年）。《神经网络的贝叶斯学习》，统计学讲义第118卷。Springer，纽约，纽约州。Neal, R. M.（2011年）。使用哈密顿动力学进行马尔可夫链蒙特卡罗。arXiv:1206.1901 [物理学，统计学]。Omelyan, I. P., Mryglod, I. M., and Folk, R.（2002年）。用于分子动力学模拟的优化类Verlet算法。《物理评论*E*》，65(5):056706。Omelyan, I. P., Mryglod, I. M., and Folk R.（2003年）。辛解析可积分分解算法：分类、推导及其在分子动力学、量子力学和天体力学模拟中的应用。《计算物理学通讯》，151(3):272–314。Phan, D., Pradhan, N., and Jankowiak, M.（2019年）。在NumPyro中实现灵活且加速的概率编程的可组合效应。arXiv:1912.11554 [统计学]。Riou-Durand, L., Sountsov, P., Vogrinc, J., Margossian, C., and Power, S.（2023年）。Metropolis调整的Langevin轨迹的自适应调节。载于第*26*届人工智能与统计学国际会议论文集，第8102–8116页。PMLR。Riou-Durand, L. and Vogrinc, J.（2023年）。Metropolis调整的Langevin轨迹：哈密顿蒙特卡罗的一种稳健替代方法。arXiv:2202.13230 [统计学]。Robnik, J., Cohn-Gordon, R., and Seljak, U.（2024a年）。黑箱未调节哈密顿蒙特卡罗。*arXiv*预印本 *arXiv:2412.08876*。Robnik, J., Cohn-Gordon, R., and Seljak, U.（2025年）。Metropolis调整的微正则哈密顿蒙特卡罗。Robnik, J., De Luca, G. B., Silverstein, E., and Seljak, U.（2024b）。微正则哈密顿蒙特卡罗。《机器学习研究杂志》，24(1):311:14696–311:14729。Robnik, J. and Seljak, U.（2024年）。无耗散涨落：微正则Langevin蒙特卡罗。载于第六届近似贝叶斯推断进展研讨会论文集，第111–126页。PMLR。Röver, L., von Campe, H., Herzog, M. P., Kuntz, R. M., and Schäfer, B. M.（2023年）。非高斯似然的配分函数方法：马尔可夫链的物理动机收敛判据。《皇家天文学会月刊》，526(1):473–482。

Schoenholz, S. S., Cubuk, E. D., 等（2020）。Jax, m.d.：一个用于可微物理的框架。arXiv预印本 arXiv:1912.04232。Simon-Onfroy, H., Lanusse, F., and Mattia, A. d.（2025年）。基于星系红移巡天对场级宇宙学推断进行基准测试。arXiv:2504.20130[天体物理学]。Sommer, E., Robnik, J., Nozadze, G., Seljak, U., and Rügamer, D.（2024年）。微正则Langevin集成：推进贝叶斯神经网络的抽样。Sountsov, P., Carroll, C., and Hoffman, M. D.（2024年）。在现代硬件与软件上运行马尔可夫链蒙特卡罗。arXiv:2411.04260 [统计学]。Sountsov, P. and Hoffman, M. D.（2022年）。聚焦学习哈密顿蒙特卡罗轨迹长度中的困难方向。arXiv:2110.11576 [统计学]。Sountsov, P., Radul, A., and contributors（2020）。推断健身房。Steeg, G. V. and Galstyan, A.（2021年）。采用非牛顿动量的哈密顿动力学，实现快速抽样。arXiv:2111.02434 [物理学]。Takaishi, T. and de Forcrand, P.（2006年）。测试并调节格点量子色动力学中混合蒙特卡罗算法的辛积分器。《物理评论*E*》，73(3):036706。arXiv:hep-lat/0505020。Zhang, L., Carpenter, B., Gelman, A., and Vehtari, A.（2022）。Pathfinder：并行拟牛顿变分推断。《机器学习研究期刊》，23(306):1–49。Øksendal, B.（2003）。随机微分方程。载于Øksendal, B. 编，随机微分方程：应用导论，第65–84页。Springer，柏林，海德堡。Štrumbelj, E., Bouchard-Côté, A., Corander, J., Gelman, A., Rue, H., Murray, L., Pesonen, H., Plummer, M., and Vehtari, A.（2024年）。贝叶斯推断软件的过去、现在与未来。《统计科学》，39(1):46–61。

补充材料

A 最优步长调度方案

本节将为如何确定算法未校正阶段的步长调度方案提供理论指导。这里假设轨迹长度 L 固定，并且只考虑步长 ϵ 的调度方案。记与马尔可夫核 $\varphi(\cdot|\epsilon)$ 对应的转移算子为 K_ϵ。为简洁起见，我们省略了对 L 的依赖。记 K_ϵ 的平稳分布为 p_ϵ，即 $K_\epsilon p_\epsilon = p_\epsilon$。我们在第 t次迭代中应用步长为 ϵ_t 的马尔可夫核来构造马尔可夫链，使链分布按如下方式演变：$\rho_{t+1} = K_{\epsilon_t}\rho_t$。ECA 框架的核心在于，$\epsilon_t$ 可以利用 ρ_t提供的信息。

我们将用链分布与目标分布之间的距离 $D(\rho_t, p)$ 来量化收敛。这里，D 是分布空间上的一种度量，例如 Wasserstein 度量或全变差距离。由于每次应用核 K_{ϵ_t} 都会执行 T/ϵ_t 步，我们将每步的收敛速率定义为

$$R_t = \frac{D(\rho_t, p) - D(\rho_{t+1}, p)}{T/\epsilon_t}. \tag{14}$$

本节将对马尔可夫核及其渐近偏差作出以下假设：

- **假设 1.** 渐近偏差可由以下表达式界定：

$$D(p, p_\epsilon) \le c_{asym}\epsilon^\kappa, \tag{A1}$$

  其中常数 $c_{asym} > 0$ 和阶数 $\kappa > 0$ 均不依赖于步长。

- **假设 2.** 动力学会向有偏极限收缩：

$$D(K_\epsilon\rho, p_\epsilon) \le (1-c)D(\rho, p_\epsilon), \tag{A2}$$

  对于任意分布 ρ 和步长 ϵ均成立。收缩常数 $0 < c < 1$ 不依赖于步长。

例如，对于采用蛙跳积分器、且目标分布为对数凸（$(-\nabla\log p(\boldsymbol{x}) + \nabla\log p(\boldsymbol{y}))\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \ge \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2$）并且二阶和三阶导数有界（$\|\nabla^2\log p(\boldsymbol{x})\| \le M_2$和 $\|\nabla^3\log p(\boldsymbol{x})\| \le M_3$）的未校正哈密顿蒙特卡罗，这些假设在 $\kappa = 2$, $c_{asym} = C(M_2, M_3, L)D/c$, $D = d + \int\|\boldsymbol{x}\|p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x} + \int\|\boldsymbol{x}\|^2 p(\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}$ 和 $c = mL^2/4$ 的条件下成立。

我们有如下结果：

定理 1。 给定假设 *A1* 和 *A2*，以及以递归方式构造、从而满足以下条件的步长调度方案

$$c_{asym}\epsilon_t^\kappa = \frac{c}{(2-c)(\kappa+1)}D(\rho_t, p), \tag{15}$$

可以保证链收敛至目标分布 p：

$$D(\rho_{t+1}, p) \le (1 - c\frac{\kappa}{\kappa+1})D(\rho_t, p). \tag{16}$$

该调度方案在以下意义下是最优的：它使收敛速率的下界最大化 R_t。

证明。利用假设 A2 并两次应用三角不等式，可得

$$\begin{aligned} D(\rho_{t+1}, p) &\le D(\rho_{t+1}, p_\epsilon) + D(p, p_\epsilon) \\ &\le (1-c)D(\rho_t, p_\epsilon) + D(p, p_\epsilon) \\ &\le (1-c)D(\rho_t, p) + (2-c)D(p, p_\epsilon). \end{aligned}$$

我们注意到，收敛链的一个充分条件是 $D(p,\ p_\epsilon) < \frac{c}{2-c} D(\rho_t,\ p)$。应用假设 A1 并代入步长调度方案 (15)，得到

$$\begin{aligned} D(\rho_{t+1}, p) &\le (1-c)D(\rho_t, p) + (2-c)c_{asym}\epsilon_t^\kappa \\ &\le (1 - c\frac{\kappa}{\kappa+1})D(\rho_t, p). \end{aligned}$$

收敛速率的下界为

$$R_t \ge \frac{\epsilon_t}{T}\big(cD(\rho_t, p) - (2-c)c_{asym}\epsilon_t^\kappa\big).$$

当唯一的 ϵ_t 满足以下条件时，下界达到最大值

$$\frac{\partial R_t}{\partial \epsilon_t} = \frac{1}{T}\big(cD(\rho_t, p) + (2-c)(\kappa+1)c_{asym}\epsilon_t^\kappa\big) = 0,$$

由此得到调度方案 (15)。 □

这一结果表明，最优步长调度应将渐近偏差控制在比总偏差小一个常数倍的水平。

数值示例 图 4 对比了在其他条件都相同的情况下，LAPS 中使用的自适应步长与固定步长策略。可以看出，自适应步长调度优于任何给定的固定步长：较大的步长起初速度快，但很快就会达到渐近偏差；而较小的步长则收敛缓慢。

B 均分条件

B.1 计算

满秩。 直接根据方程 (6) 计算 $\widetilde{D}$需要 $\mathcal{O}(d^2M)$ 次运算；通过对求和进行某种重排，则需要 $\mathcal{O}(dM^2)$ 次运算。这种计算开销大得难以承受。不过，利用 Hutchinson 技巧（Hutchinson，1989），可以将其降至 $\mathcal{O}(dM)$（即每条链 $\mathcal{O}(d)$）：引入一个由随机变量构成的向量 $\boldsymbol{z}$，满足 $\mathbb{E}[z_i z_j] = \delta_{ij}$，并将其代入迹中，得到

$$\widetilde{D} = \frac{1}{d}\sum_{i,k,l=1}^{d} \mathbb{E}[(I-E)_{ik} z_k (I-E)_{il} z_l] \approx \mathbb{E}\left[\left|\frac{1}{dM}\sum_{m=1}^{M} \boldsymbol{z} - (\boldsymbol{\nabla}\mathcal{L}(\boldsymbol{x}^m)\cdot\boldsymbol{z})\boldsymbol{x}^m\right|^2\right], \tag{17}$$

第二步使用了 ECA 近似 (3)（该近似无偏，且方差随 $1/M$ 衰减）。 $\boldsymbol{z}$分布的两种常见选择是高斯分布 $\boldsymbol{z} \sim \mathcal{N}$(0，$I$) 和 Rademacher 分布，我们选择后者。我们已验证，使用 100 次 $\boldsymbol{z}$ 变量的采样，可确保 D 计算的误差低于百分之一。

对角项。 对于除最简单问题之外的所有问题，上述计算的运行时开销都可以忽略不计，因为它只需链之间进行极少的交互（计算 100 个期望值）。与梯度计算成本相比，这通常可以忽略不计。不过，它确实会产生存储 100 d维 $\boldsymbol{z}$ 向量的成本。在某些应用中，这种成本难以承受，因为模型计算本身就已占用整块~GPU。因此，我们还考虑对 D 进行简化，仅考虑均分矩阵的对角项：

$$\widetilde{D}_{\text{diag}} = \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}(1-V_{ii})^2. \tag{18}$$

~ ~计算 D_{diag} 不会带来额外的内存开销。因此，我们将 D_{diag} 作为默认选项。在表 4 中，我们展示了与满秩等分矩阵相比，性能并未下降。

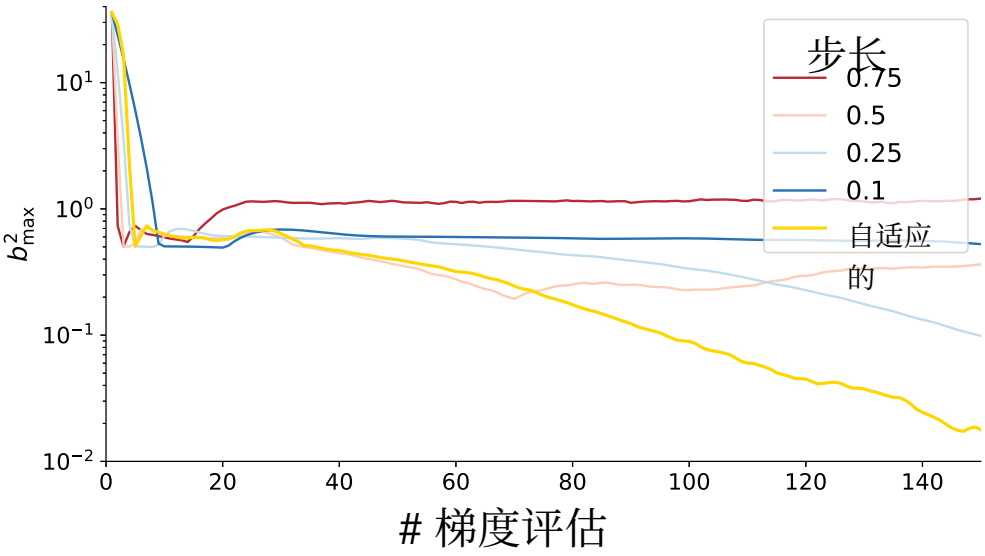

图 4：对于德国信贷问题，未校正的 MCLMC 动力学中，偏差随梯度评估次数的变化。将 LAPS 中采用的自适应步长调整（黄色）与针对不同步长选择的固定步长策略进行比较。大步长策略（红色）起初非常快，但无法实现精细收敛。小步长（蓝色）收敛较慢，但渐近偏差较小。LAPS 会自适应地减小步长，兼顾各方面的优势。

B.2 散度性质

这里我们将证明，$D(p,\ p')$ 是零均值高斯分布空间上的一种散度，也就是说，它是非负的，且当且仅当 $p = p'$ 时为正。同样，D_{diag} 是零均值不相关高斯分布空间上的一种散度。零均值高斯分布完全由其协方差矩阵 Σ确定，我们将其记为 $\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\Sigma)$。在这种情况下，均分矩阵可简化为：

$$V_{ij}(\mathcal{N},\mathcal{N}') = \int x_i \partial_j \big(\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\Sigma^{-1}\boldsymbol{x}\big)\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\Sigma')d\boldsymbol{x} = [\Sigma'\Sigma^{-1}]_{ij},$$

这意味着

$$\widetilde{D}(\mathcal{N},\mathcal{N}') = \frac{1}{d}\operatorname{Tr}\big\{(I-\Sigma'\Sigma^{-1})(I-\Sigma'\Sigma^{-1})^T\big\} = \frac{1}{d}\|I-\Sigma'\Sigma^{-1}\|_F^2 \tag{19}$$

$$\widetilde{D}_{\text{diag}}(\mathcal{N},\mathcal{N}') = \frac{1}{d}\sum_{i=1}^{d}(1-\Sigma'_{ii}/\Sigma_{ii})^2, \tag{20}$$

其中，$\|\cdot\|_F$是 Frobenius 范数。$D(\mathcal{N},\ \mathcal{N}')$ 显然为正（因为范数为正），且当且仅当 $I-\Sigma'\Sigma^{-1}=0$ 时为零，这等价于 $\Sigma=\Sigma'$。协方差矩阵唯一确定零均值高斯分布，因此这表明 D 是该空间上的散度。同理，公式（20）是若干正项之和，因此当且仅当所有项都为零时，其值为零，这等价于对所有 i 都有 $\Sigma'_{ii}=\Sigma_{ii}$。因此，$\widetilde{D}_{\text{diag}}$ 是非相关高斯分布空间上的散度，因为 $\{\Sigma_{ii}\}_{i=1}^d$ 唯一确定了非相关高斯分布。

我们注意到，方程 式 (20) 与（Robnik 等人，2024a 年）中定义的协方差矩阵误差相一致).

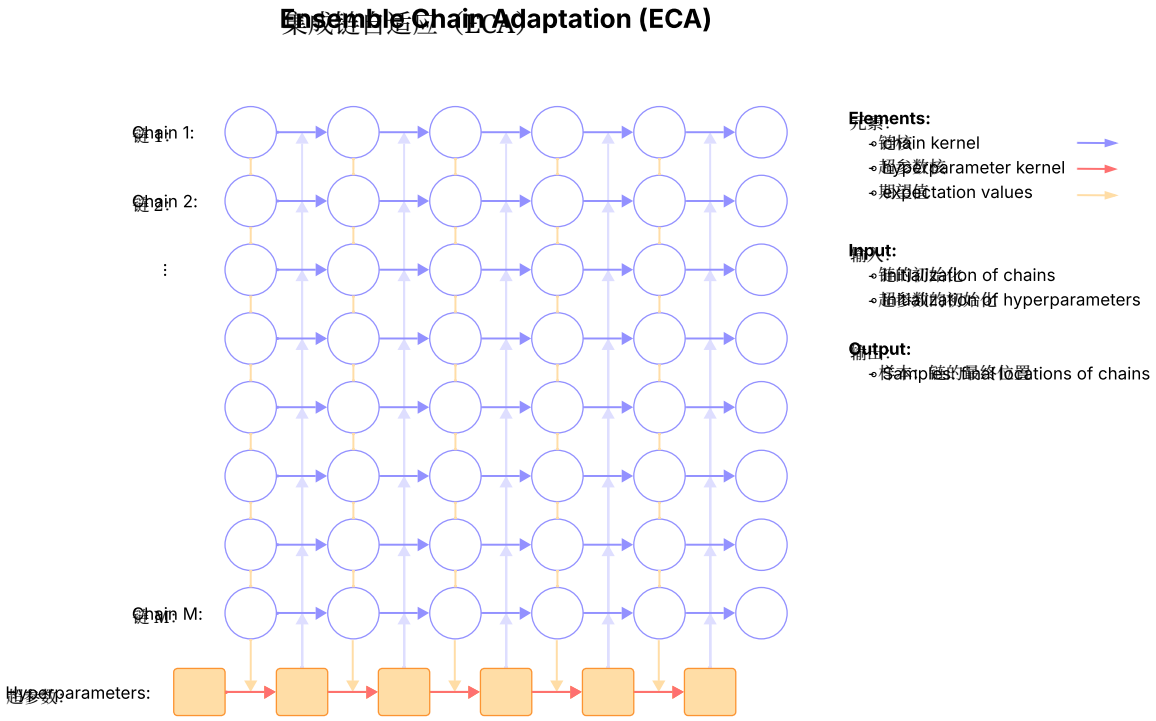

图 5：我们采用的集合链自适应（ECA）算法示意图。 M 条链不断演化，时间沿水平方向推进。在每一步中，利用所有链的位置计算期望值（橙色箭头），并据此更新超参数（红色箭头）。更新后的超参数确定核（浅紫色箭头），由核并行更新各条链（实心紫色箭头）。

C LAPS 细节

我们在此进一步介绍并澄清 LAPS 算法的一些细节。

图示说明。 LAPS 中的超参数通过对各条链取平均值来更新。这一点如图 5 所示。

伪代码 见算法 1。第一个 while 循环对应未校正阶段，第二个则对应校正阶段。不同链的 MCLMC 动力学更新彼此独立，可以并行执行。随后，使用系综上的期望值更新超参数。

内存复杂度 该算法每条链的内存复杂度为 $\mathcal{O}(d)$，其中 d 是执行推断的参数空间的维数。复杂度与步数无关。

架构。 实验在 NVIDIA A100 GPU（40GB）上运行。

初始化 链的初始位置由用户提供。在本文的实验中，我们从先验分布中抽取样本来初始化链，该先验分布由 Inference Gym 模型定义。我们将速度初始化为与梯度方向一致（在 MCLMC 中，其范数为单位范数）。

D 消融研究

我们在此研究算法在不同算法选择下的性能。

输入：
可微的未归一化对数概率密度 $\log p(\boldsymbol{x})$，初始粒子位置 $\{\boldsymbol{x}^m\}_{m=1}^M$，初始粒子速度 $\{\boldsymbol{u}^m\}_{m=1}^M$输出：样本 $\{\boldsymbol{x}^m\}_{m=1}^M$.$\epsilon \leftarrow 0.01\sqrt{d}L \leftarrow$ 方程 (9) $(\{\boldsymbol{x}^m\})t \leftarrow 0$重复$\boldsymbol{x}^m, \boldsymbol{u}^m, \Delta^m \leftarrow$MCLMC 更新 (21)$(\boldsymbol{x}^m, \boldsymbol{u}^m, \epsilon, L)$ EEVPD $= \frac{1}{M}\sum_{i=1}^M (\Delta^m)^2/d \backsim D \leftarrow$ 方程 (6)$(\{\boldsymbol{x}^m\})\tilde{}$EEVPD $_{\text{wanted}} \leftarrow \bar{F}(CD)$，参见方程 (8)。$\epsilon \leftarrow \epsilon(\text{EEVPD}_{\text{wanted}}/\text{EEVPD})^{1/6}$ $L \leftarrow$ 方程 (9) $(\{\boldsymbol{x}^m\})\delta[x_i^2] \leftarrow$ 方程 (10) $(\{\boldsymbol{x}^m\})t \leftarrow t+1$直到 $\max_i \delta[x_i^2] > 0.01$ 且 $t <$ maxiter ADAPT $\leftarrow$ True 当 $t <$ maxiter do$\boldsymbol{x}^m, \boldsymbol{u}^m, a^m \leftarrow$ MAMS 更新 $(\boldsymbol{x}^m, \epsilon)$，参见第 F 节。$a = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^M a^m$—ADAPT $\leftarrow$ ADAPT $\wedge |a - a_{targeted}| > 0.03$若 ADAPT 则$\epsilon \leftarrow$ 二分法 $(\epsilon, a - a_{\text{targeted}})$ 结束 若 结束 while 算法 1：LAPS 伪代码

—

ode

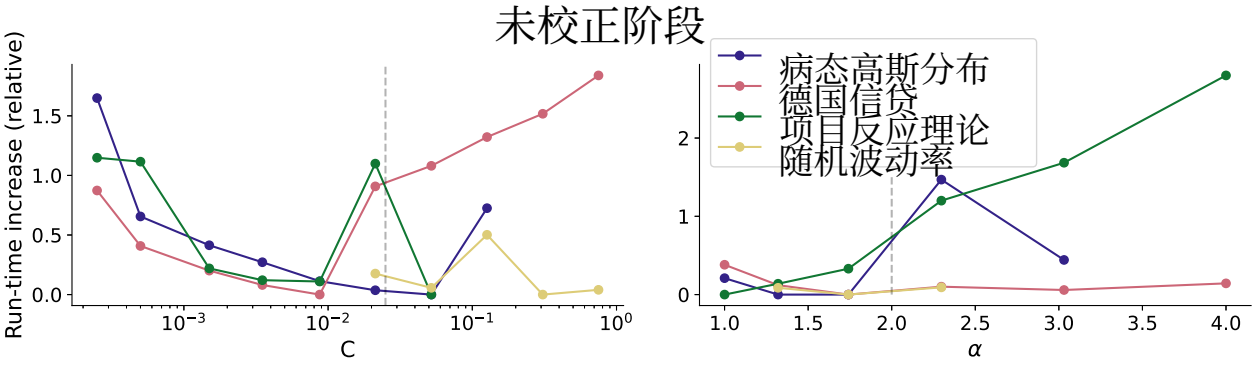

图 6：对未校正阶段超参数 C 和 α 的消融研究。运行时间增加（以达到低偏差所需的梯度调用次数 $b_{\max}^2 < 0.01$ 衡量）是相对于此次网格搜索中的最优性能测量的。默认超参数值以竖直虚线表示。

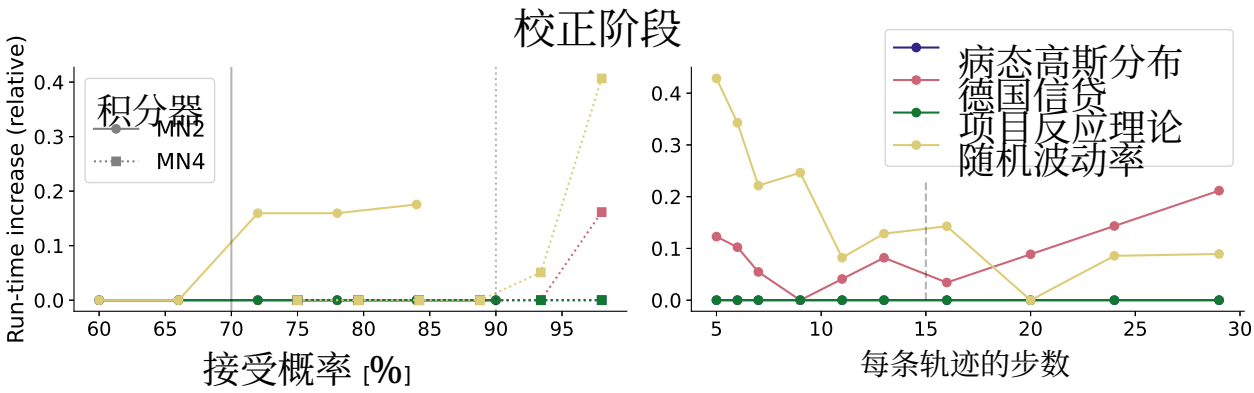

图7：对校正阶段的超参数——接受概率和每条轨迹的步数——进行消融研究。运行时间增加（以达到低偏差所需的梯度调用次数 $b^2_{\max} < 0.01$ 衡量）是相对于此次网格搜索中的最优性能测得的。默认超参数值以竖直虚线标示。还展示了不同积分器（四阶 MN4 与二阶 MN2）对应的接受率结果。

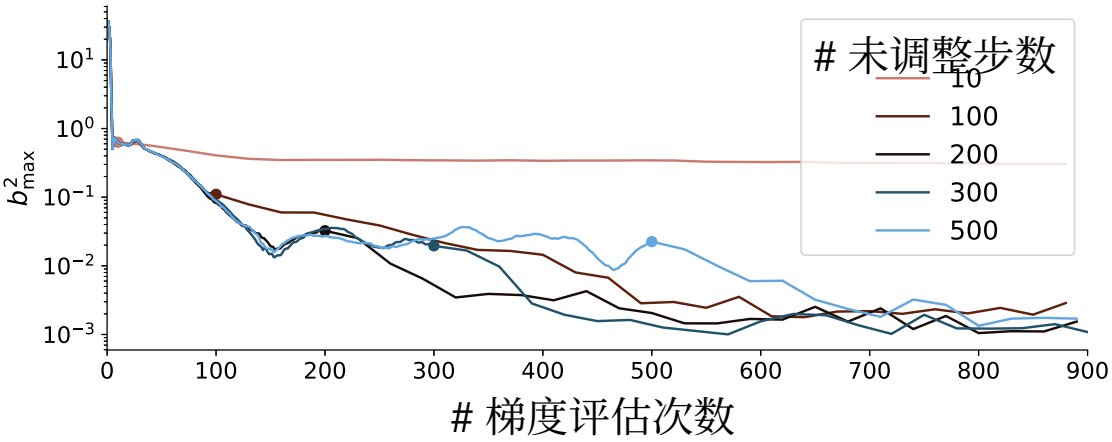

图 8：性能与未调整步数的关系。图中展示了德国信贷问题中偏差随梯度调用总次数的变化。不同颜色对应未校正阶段的不同步数。切换到调整阶段的位置以圆点标示。仅使用校正方法（10 个未调整步数）难以克服冷启动问题，且无法在合理时间内收敛。若采用足够多的未调整步数（100），该方法便能收敛，但校正部分耗时过长。另一方面，仅使用未校正方法无法收敛到极低偏差；只有开启调整后才能达到这一水平，例如采用 500 个未调整步数时（浅蓝色）便是如此。在 LAPS 中，系统通过监测汇总统计量自动确定切换到调整阶段的时机；在此例中，切换发生在 200 次梯度调用后，接近最优。

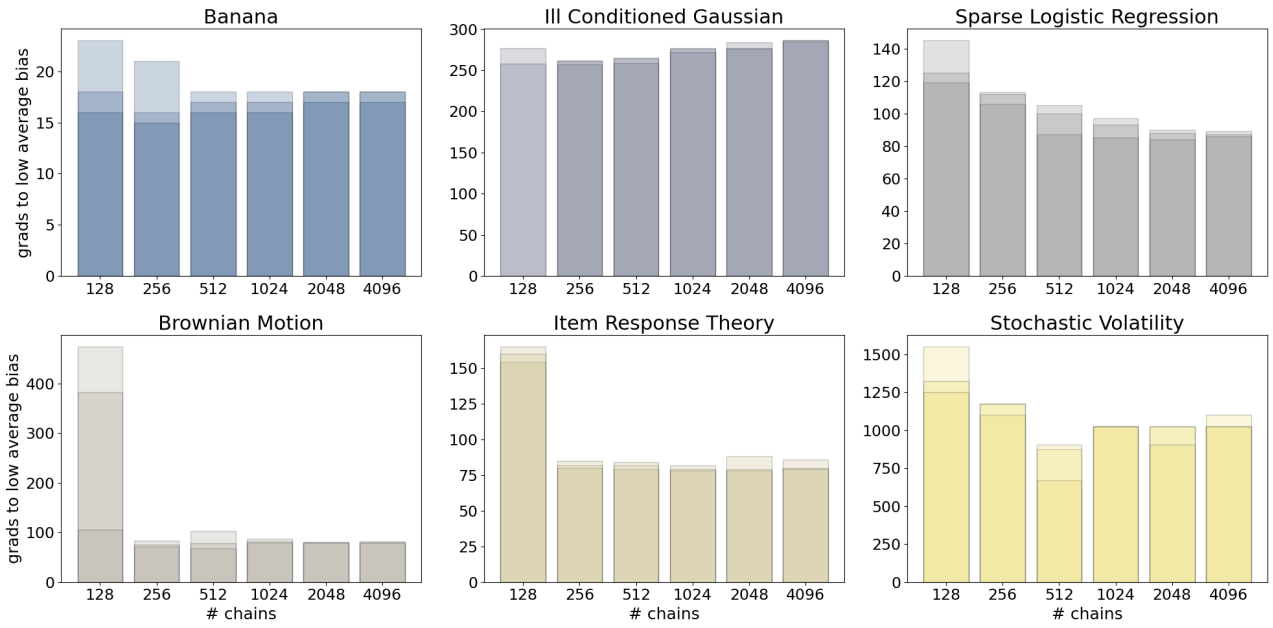

图 9：达到低偏差（$b^2_{\text{avg}} < 0.01$）所需的梯度调用次数，随链数量 M 的变化关系。不同的颜色深浅对应于使用不同随机种子运行的结果。可以看出，只要 $M > 128 - 256$，性能基本保持不变，具体取决于目标分布。

未校正阶段。 我们研究了性能随 C（渐近偏差与总偏差之比）和 α（将典型后验分布规模与动量退相干尺度 L 联系起来的比例常数）变化的情况。结果如图 6 所示。这些结果表明，在很大的超参数范围内，性能都很稳定。对于部分模型，如果使用更小的 C 值，某些模型（德国信贷和项目反应理论）的结果可以提升一倍。

校正阶段。 我们研究了性能随接受概率和每条轨迹的步数变化的情况。结果如图7所示。接受概率消融实验分别针对 MN2 和 MN4 积分器进行，结果表明，积分器的选择并不会发挥很大作用。图7显示，性能相对于校正阶段超参数非常稳定。对于某些模型（病态高斯分布和项目反应理论），未校正阶段已经达到了接近所需的精度，因此这些超参数实际上并不起作用。在所有情况下，在合理的超参数范围内，性能变化约为 10%。

校正阶段是否必要? 我们研究了开启调整的时间对性能的影响。德国信贷问题的结果如图 8 所示。正如预期，过早开启调整会显著减慢收敛速度。另一方面，未校正采样器最终会达到某个平稳状态，之后便不再改善。要将误差最终降低到极低水平（其下限由有限链数导致的方差决定），就需要使用校正方法。对于某些问题，例如随机波动率模型，如果没有校正阶段，采样器便无法达到较低的误差。

未校正阶段是否必要? 我们比较了有未校正阶段和没有未校正阶段的 LAPS。仅包含校正阶段的算法是 Metropolis 校正微正则动力学（MAMS）的并行版本。我们探索了两种方案：先进行 100 步 ADAM 初始化抽样（如 Hoffman and Sountsov，2022），或不进行初始化。在这两种情况下，我们都让 MAMS 占了一个（不公平的）优势：为它提供与 LAPS 在校正阶段所用相同的对角质量矩阵预条件（即根据 LAPS 未校正阶段之后的样本得到的预条件），这样我们就不必开发定制的自适应预条件器。我们已确认，这样做的效果优于省略预条件；并且我们预计它也优于定制预条件器（后者会基于初始步骤中偏差更大的样本）。结果见

表 3：达到低最大偏差（$b^2_{\max} = 0.01$）所需的梯度调用次数，按链归一化，越低越好。- 表示采样器在 2000 次梯度调用后仍未收敛。我们将 LAPS 与仅包含校正阶段的方案进行比较，即 MAMS 的并行版本。结果显示，MAMS 的可靠性较低，而且常常无法在合理时间内收敛。

	MAMS	MAMS withADAM	LAPS
香蕉	390	670	17
病态高斯分布	-	-	308
德国信贷	270	280	300
项目反应理论	-	1000	185
随机波动率	-	-	1325

表 4：满秩均分与对角项均分达到低偏差所需梯度调用次数之比。两者差异很小，说明可以使用内存占用较低的对角版本。

	高斯	德国信贷	IRT	随机波动率
相对运行时间（满秩 / 对角项）	1.003	0.954	1.102	1.000

见表 3。可以看出，未校正初始化（LAPS）的表现稳定得多，而且在许多问题中，它是唯一能够收敛的方法。当所有方法都收敛时，LAPS 通常显著更快；唯一的例外是德国信贷数据集，此时所有方法的表现相近。例如，在 Banana 数据集上，LAPS 的速度是 MAMS 的 18–23 倍。这些结果表明，校正阶段和未校正阶段对于取得良好表现都至关重要。

链数量 我们研究了性能随链数量 M 的变化情况。结果如图 9 所示。只要满足 $M > 128 - 256$，性能大致不受链数量影响，具体取决于目标分布。链数量过少时无法奏效，因为 LAPS 获得的样本数等于 M。即使这些样本完全独立且无偏，其精度仍受方差限制。 $b^2_{\text{avg}} = 0.01$精度大致相当于 100 个有效样本（Hoffman 和 Sountsov，2022），因此链数量通常过少时无法达到这一性能。

~均分估计 在本研究的其余部分中，我们在 ~ 未校正阶段使用 D 的对角版本作为偏差代理。这里我们探讨这种做法相较于满秩 D是否会降低性能。表 4 比较了两种方法达到低偏差（$b^2_{\max} < 0.01$）所需的梯度调用次数。结果表明，在这里考察的问题中，两者差异很小。值得注意的是，这一结论对病态高斯分布也成立；其协方差矩阵的方向是随机的，因此并非偏向于接近对角形式。这表明，没有必要使用满秩偏差代理。

动力学 我们尝试用更常见的欠阻尼朗之万动力学替代微正则动力学。我们发现，未校正的欠阻尼朗之万动力学无法帮助采样器，而且该方案明显慢于采用微正则动力学的 LAPS。例如，在项目反应理论问题上，采用欠阻尼朗之万动力学的 LAPS 方案每条链需调用梯度 650 次才能收敛。仅运行校正后的欠阻尼动力学（即 MALT）则需 610 次梯度调用即可收敛，速度相当。它也与采用 ChESS 的哈密顿蒙特卡罗（537 次梯度调用）以及采用 MEADS 的欠阻尼朗之万动力学（790 次梯度调用）表现相当。另一方面，采用微正则动力学的 LAPS 收敛速度明显更快（185 次梯度调用）。由此得出结论：微正则动力学对于我们方案的成功至关重要。

E 积分器

在本附录中，我们回顾用于近似方程（2）的数值积分器。我们采用在确定性更新和随机更新之间交替进行的算子分裂方案（Leimkuhler 和 Matthews，2015）。由此得到的算法具有时间可逆性和稳定性，适合在 Metropolis–Hastings 封装中使用（Robnik 等，2025）。

表5：本文考察的积分器。积分器由其系数组成，这些系数列于最后一栏。可根据对称结构或归一化推导出的系数未明确列出。

Name	阶数	梯度/步	最适用于	系数
LF	2	1	低精度	$b_1 = 0.5$
MN2	2	2	高精度，低维度	$b_1 = 0.1931833275$ $a_1 = 0.5$
MN4	4	5	高精度，高维度	$b_1 = 0.0839831526$ $b_2 = 0.6822365335$ $a_1 = 0.2539785108$ $a_2 = -0.032302867$

首先，我们将随机微分方程拆分为随机部分和确定性部分，并通过欧拉–丸山组合近似组合解，

$$\varphi(\cdot|\epsilon, L) = \Phi^O_{\epsilon/2,L} \circ \Phi_\epsilon \circ \Phi^O_{\epsilon/2,L}. \tag{21}$$

其中， ϵ 是步长， Φ^O 是随机更新， Φ_ϵ 是确定性更新。

确定性更新是通过进一步将微分方程拆分为更新速度的部分和更新位置的部分得到的。这两个方程的精确解分别称为位置更新 Φ^A_ϵ和速度更新 Φ^B_ϵ。通过交替执行这两种更新来近似组合解：

$$\Phi_\epsilon = \Phi^B_{b_1\epsilon}\, \Phi^A_{a_1\epsilon}\, \Phi^B_{b_2\epsilon}\, \Phi^A_{a_2\epsilon}\, \cdots\, \Phi^B_{b_K\epsilon}. \tag{22}$$

不同的积分器对应不同的系数选择 $\{a_k, b_k\}$。在所有情况下，我们都要求满足归一化$\sum_{k=1}^K b_k = \sum_{k=1}^{K-1} a_k = 1$ 和对称组合 ($a_k = a_{K-k}$, $b_k = b_{K+1-k}$)，因为这能确保时间可逆性，并消去局部误差展开中的奇数阶项，从而提高精度。具体而言，我们考虑了三种方案，汇总于表 E。每种方案都以不同方式权衡精度与计算成本：

- 蛙跳法（LF；Leimkuhler 和 Matthews（2015））每步只需进行 1 次梯度计算。若低精度已足够，例如在算法的未校正阶段，则优先选用该方法。

- 二阶最小范数积分器（MN2；Omelyan 等人（2002年、2003年））针对精度进行了优化，每步需进行两次梯度计算。因此，在算法的校正阶段（此时我们力求实现精细收敛），它是首选方法。

- 四阶最小范数积分器（MN4；Omelyan 等人（2002年、2003年））计算成本更高，因为每步需要进行五次梯度调用。不过，与另外两种积分器不同，它具有四阶精度，这意味着其局部近似误差按 ϵ^4的比例缩放。因此，减小步长对精度的影响远大于对二阶积分器的影响。如果目标分布具有高维度，这一点对校正阶段至关重要（Takaishi 和 de Forcrand，2006；Hernández-Sánchez 等人，2021）。我们在 $d > 200$ 中采用该方法。

为完整起见，我们在下文明确给出 Φ^O、 Φ^A 和 Φ^B 更新。

Stoc随机更新。我们遵循（Robnik 等人，2024a年），并将随机更新写作

$$\Phi^O_{\epsilon,L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) = \left(\boldsymbol{x},\, \frac{c_1\boldsymbol{u} + c_2\boldsymbol{Z}}{\|c_1\boldsymbol{u} + c_2\boldsymbol{Z}\|}\right), \tag{23}$$

其中， $\boldsymbol{Z} \sim \mathcal{N}(0, I/\sqrt{d})$ 是一个 d 维向量， $c_1 = e^{-\epsilon/L}$，且 $c_2 = \sqrt{1 - c_1^2}$。

位置更新。 在速度固定时，方程（2）中的动力学简化为

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{x}_t = \boldsymbol{u},$$

其平凡解为

$$\Phi_\epsilon^A: \quad (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) \mapsto (\boldsymbol{x} + \epsilon \boldsymbol{u}, \boldsymbol{u}). \tag{24}$$

此速度更新引起的能量变化为 $\Delta(\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{u}|p,\ \epsilon) = -\log\ p(\boldsymbol{x}+\epsilon\boldsymbol{u}) + \log\ p(\boldsymbol{x})$

速度更新。 在位置固定时，方程（2）中的动力学的确定性部分可化简为

$$\tfrac{d}{dt}\boldsymbol{u}_t = (I - \boldsymbol{u}_t\boldsymbol{u}_t^T)\,\frac{\nabla \log p(\boldsymbol{x})}{d-1}.$$

这是非线性 Riccati 向量方程。然而，通过引入变量 $\boldsymbol{y}_t$ via $\boldsymbol{u}_t = \frac{d}{dt}\boldsymbol{y}_t/(\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{y}_t)$，可以将其化为二阶线性常微分方程。由此得到（Steeg 和 Galstyan，2021）

$$\tfrac{d^2}{dt^2}\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{g}\boldsymbol{g}^T)\boldsymbol{y},$$

这是一个具有解析解的线性系统。我们将 $\boldsymbol{g} = \nabla \log\ p(\boldsymbol{x})\, d-1$ 和 $\boldsymbol{e} = \frac{\boldsymbol{g}}{\|\boldsymbol{g}\|}$ 分别记为。求解该线性方程并转换回 $\boldsymbol{u}$ 变量后，可得到闭式更新

$$\Phi_\epsilon^B: \quad (\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}) \mapsto (\boldsymbol{x}, \frac{\boldsymbol{u} + \big(\sinh\delta + (\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{u})(\cosh\delta - 1)\big)\boldsymbol{e}}{\cosh\delta + (\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{u})\sinh\delta}), \tag{25}$$

其中 $\delta = \epsilon\|\nabla \log\ p(\boldsymbol{x})\|/(d-1)$。因此，速度在由 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{g}$张成的平面内平滑旋转，同时保持单位范数。该更新引起的能量变化为（Steeg 和 Galstyan，2021）：

$$\Delta(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}|p, \epsilon) = (d-1)\log\Big\{\cosh\delta + (\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{u})\sinh\delta\Big\}. \tag{26}$$

F Metropolis 校正微正则动力学

在本附录中，我们回顾 LAPS 在算法的校正阶段所使用的 Metropolis 校正微正则动力学（MAMS；Robnik 等人（2025年））。MAMS 核通过以下步骤构造：

1. 从（$\boldsymbol{x}$，$\boldsymbol{u}$）开始。
2. 从 $\boldsymbol{u}$ 重新采样 自单位球面上的均匀分布。具体而言 $\boldsymbol{u} = Z/\|Z\|$，其中 $Z \sim \mathcal{N}(0, I)$.
3. 使用步长为 ϵ的分裂积分器执行 N 步，并在每一步进行部分速度刷新，以得到 $(\boldsymbol{x}', \boldsymbol{u}')$。
4. 计算此次积分累积的能量误差 Δ 。每次位置更新 $\boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}'$ 对能量误差的贡献为$-\log\ p(\boldsymbol{x}')/p(\boldsymbol{x})$。每次速度更新的贡献为 $(d-1)\log\Big\{\cosh\ \delta + (\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{u})\sinh\ \delta\Big\}$，其中 $\delta = \epsilon\|\nabla\log\ p(\boldsymbol{x})\|/(d-1)$且 $\boldsymbol{e} = \nabla\log\ p(\boldsymbol{x})/\|\nabla\log\ p(\boldsymbol{x})\|$，见 E 节。
5. 以 $\min(1, e^{-\Delta})$ 的概率接受该提议，否则保持在 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u})$。

该核的平稳分布恰好是目标分布；Metropolis–Hastings (MH) 步消除了积分器近似误差。