



北京大学

PEKING UNIVERSITY

复杂随机过程和数值方法的遍历性和长时间误差

答辩人： 虚空若叶睦

院系： 数学科学学院

2025年5月26日

目录

① 采样问题和采样算法简介

② 路径积分分子动力学

③ 随机分组方法

④ 总结和致谢



Section 1

采样问题和采样算法简介



计算数学中的采样问题

- 计算数学中的采样 (sampling) 问题的出现源于对高维分布的近似.
- 给定目标分布 $\pi(x) \propto e^{-V(x)}$, 其中 $V(x)$ 是 \mathbb{R}^d 上的势能函数. 采样的目标是高效生成一系列样本点 $(X_n)_{n=0}^\infty$, 使得当 n 充分大时, X_n 的分布 $\mu_n \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^d)$ 能快速且准确地收敛到目标分布 $\pi(x)$.
- 采样问题广泛地出现在计算物理, 数据科学和机器学习等领域. 典型的应用场景包括: 自由能的计算, 贝叶斯推断和扩散生成式模型.





采样算法的误差刻画

- 在本报告中, 我们主要研究基于 Langevin 动力学的采样算法. 遍历性是刻画 Langevin 动力学收敛速度的核心概念.
- 设随机过程 $(x_t)_{t \geq 0}$ 的对偶半群为 $(\mathcal{P}_t)_{t \geq 0}$, 即若 $x_0 \sim \nu$, 则 $x_t \sim \nu \mathcal{P}_t$. 若 π 是 $(x_t)_{t \geq 0}$ 的不变分布, 即

$$\pi \mathcal{P}_t = \pi, \quad \forall t \geq 0,$$

且存在常数 $C, \lambda > 0$ 使得以及一个概率度量 $d(\cdot, \cdot)$, 使得

$$d(\nu \mathcal{P}_t, \pi) \leq C e^{-\lambda t} d(\nu, \pi), \quad \forall t \geq 0,$$

则称 $(x_t)_{t \geq 0}$ 具有遍历性.

- 常用的概率度量包括: 全变差, Wasserstein 距离和 KL 散度 (相对熵).



采样算法的误差刻画

- 为 Langevin 动力学 $(x_t)_{t \geq 0}$ 的离散格式指定步长 $h > 0$, 可以得到离散解 $(X_n)_{n=0}^\infty$. 采样误差与 Langevin 动力学的收敛速度和步长均相关.
- 例: \mathbb{R}^d 上的过阻尼 Langevin 动力学形如

$$dx_t = -\nabla U(x_t) + \sqrt{2}dB_t, \quad t \geq 0,$$

其中 $(B_t)_{t \geq 0}$ 为 Brown 运动. 它的 Euler-Maruyama 格式为

$$X_{n+1} = X_n - h\nabla U(X_n) + \sqrt{2h}(B_{(n+1)h} - B_{nh}), \quad n \geq 0.$$

- 上述离散解 $\{X_n\}_{n=0}^\infty$ 的误差可控制为: (定理 5, [BDMS18])

$$\mathcal{W}_2(\nu\tilde{P}_n^h, \pi) \leq Ce^{-\lambda nh} + Ch,$$

其中 C, λ 为常数, \tilde{P}_n^h 为 $(X_n)_{n=0}^\infty$ 的对偶半群.



采样算法的误差刻画

- 一般地, 假设 Langevin 动力学 $(x_t)_{t \geq 0}$ 的离散解为 $(X_n)_{n=0}^\infty$, 且其对偶半群为 \tilde{P}_n^h . 若存在一个满足 $\lim_{h \rightarrow 0} \varepsilon(h) = 0$ 的误差函数 $\varepsilon(h)$, 使得

$$d(\nu \tilde{P}_n^h, \pi) \leq C e^{-\lambda n h} + C \varepsilon(h),$$

则称 $(X_n)_{n=0}^\infty$ 的采样误差具有指数衰减性.

- 本报告的主题对于特定的高维 Langevin 动力学及其离散格式, 证明相应的遍历性和采样误差的指数衰减性.



博士期间的主要工作

主要研究了路径积分分子动力学 (path integral molecular dynamics) 和随机分组方法 (random batch method) 的遍历性和采样误差:

- 1 Efficient sampling of thermal averages of interacting quantum particle systems with random batches (J. Chem. Phys., 2021)
- 2 Ergodicity and long-time behavior of the random batch method for interacting particle systems (M3AS, 2023)
- 3 Error analysis of time-discrete random batch method for interacting particle systems and associated mean-field limits (IMA J. Numer. Anal., 2023)
- 4 Dimension-free ergodicity of path integral molecular dynamics (accepted by CiCP, 2023)



Section 2

路径积分分子动力学



路径积分分子动力学

- 观测算子 $O(\hat{x})$ 在正则系宗 $\hat{\rho}_\beta$ 中的平均定义为

$$\langle O(\hat{x}) \rangle_\beta = \frac{1}{\mathcal{Z}_\beta} \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}} O(\hat{x})] = \frac{1}{\mathcal{Z}_\beta} \int_{\mathbb{R}^d} \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle O(x) dx,$$

其中 $\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | y \rangle$ 是 $e^{-\beta \hat{H}}$ 作为迹类 (trace class) 算子的核函数, 而

$$\mathcal{Z}_\beta = \text{Tr}[e^{-\beta \hat{H}}] = \int_{\mathbb{R}^d} \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle dx$$

是系统的配分函数.

- 计算 $\langle O(\hat{x}) \rangle_\beta$ 的关键, 在于估计并采样密度函数 $\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle$.



正则系综平均的路径积分表示

- 计算 $\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle$ 本质上需要求解 \hat{H} 对应的抛物方程, 若直接使用空间离散或谱方法, 计算复杂度将随 d **指数级增长** (维数灾难).
- 路径积分提供了近似 $\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle$ 的一种方法, 且复杂度随 d **线性增长**.
- 给定 $x_1 \in \mathbb{R}^d$, 利用路径积分中的**时间切片法**, $\langle x_1 | e^{-\beta \hat{H}} | x_1 \rangle$ 可近似为

$$\begin{aligned} & \langle x_1 | e^{-\beta \hat{H}} | x_1 \rangle \\ & \approx \int \prod_{j=1}^N \langle x_j | e^{-\frac{\beta_N}{2} V} e^{\frac{\beta_N}{2} \Delta} e^{-\frac{\beta_N}{2} V} | x_{j+1} \rangle dx_2 \cdots dx_N \quad (\text{使用 Strang 分裂}) \\ & = \frac{1}{(2\pi\beta_N)^{\frac{dN}{2}}} \int \exp \left(-\frac{1}{2\beta_N} \sum_{j=1}^N |x_j - x_{j+1}|^2 - \beta_N \sum_{j=1}^N V(x_j) - \mathcal{E}_N(\mathbf{x}) \right) dx_2 \cdots dx_N, \end{aligned}$$

其中 $\beta_N = \beta/N$, $x_{N+1} = x_1$.

正则系综平均的路径积分表示

- 上述表达式包含 **N 珠-环聚合物** (N -bead ring polymer) 的势能函数:

$$\mathcal{E}_N(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\beta_N} \sum_{j=1}^N |x_j - x_{j+1}|^2 + \beta_N \sum_{j=1}^N V(x_j),$$

其中相邻的珠由弹性势能 $|x_j - x_{j+1}|^2$ 连接.

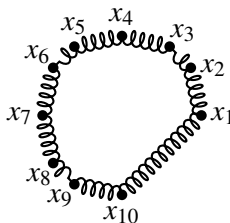


图: 一个 10 珠-环聚合物的图示



正则系综平均的路径积分表示

- 采样 \mathbb{R}^d 中的密度函数 $\langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle$ 可转化为采样 \mathbb{R}^{dN} 中的经典 Gibbs 分布 $\pi_N(\mathbf{x}) \propto \exp(-\mathcal{E}_N(\mathbf{x}))$.
- 由于 Strang 分裂的局部误差是 $O(\beta_N^3)$, 使用

$$\langle \hat{O} \rangle_{\beta, N} := \frac{1}{Z_N} \int_{\mathbb{R}^{dN}} \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N O(x_j) \right) \exp(-\mathcal{E}_N(\mathbf{x})) d\mathbf{x}$$

估计系综平均 $\langle \hat{O} \rangle_\beta$ 时的误差为 $O(N\beta_N^3)$.

- 路径积分表示只有在 N 足够大时才能得到精确的系综平均.



主要贡献

$$\mathcal{E}_N(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\beta_N} \sum_{j=1}^N |x_j - x_{j+1}|^2 + \beta_N \sum_{j=1}^N V(x_j), \quad \pi_N(\mathbf{x}) \propto \exp(-\mathcal{E}_N(\mathbf{x})).$$

- 为采样目标分布 $\pi_N(\mathbf{x})$, 需要构造 \mathbb{R}^{dN} 上的 Langevin 动力学, 使其不变分布恰好为 $\pi_N(\mathbf{x})$, 并且离散该动力学所需的步长 h 不依赖于 N .
- 论文的主要贡献是, 采样分布 $\pi_N(\mathbf{x})$ 的 Langevin 动力学拥有与珠数 N 无关的收敛速率. 收敛速率的值依赖于势能函数 $V(x)$ 的正则性条件.



正则坐标下的 Langevin 动力学

利用正则坐标变换, 可以将 N 珠-环聚合物的势能函数改写为

$$\mathcal{E}_N(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{2\beta_N^2} \sum_{k=0}^{N-1} \omega_k^2 |\boldsymbol{\xi}_k|^2 + \beta_N \sum_{j=1}^N V \left(\underbrace{\sum_{k=0}^{N-1} \xi_k c_{j,k}}_{x_j(\boldsymbol{\xi})} \right),$$

其中 $c_{j,k}$ 为离散 Fourier 系数: $c_{j,0} = \frac{1}{\sqrt{\beta}}$,

$$c_{j,2k-1} = \sqrt{\frac{2}{\beta}} \sin\left(\frac{2\pi kj}{N}\right), \quad c_{j,2k} = \sqrt{\frac{2}{\beta}} \cos\left(\frac{2\pi kj}{N}\right), \quad k = 1, \dots, \frac{N-1}{2},$$

而 ω_k 对应于 N 珠-环聚合物的第 k 个模的特征振荡频率:

$$\omega_0 = 0, \quad \omega_{2k-1} = \omega_{2k} = \frac{2}{\beta_N} \sin\left(\frac{k\pi}{N}\right), \quad k = 0, 1, \dots, \frac{N-1}{2}.$$



正则坐标下的 Langevin 动力学

- 第 k 个模的振荡频率 ω_k 随 k 线性增长. 如果在 Langevin 动力学中直接使用 $-\nabla\mathcal{E}_N(\boldsymbol{\xi})$ 作为下降方向, 则会在时间离散中遇到刚性问题.
- 可以使用预条件方法克服 $\mathcal{E}_N(\boldsymbol{\xi})$ 的刚性. 引入 $a > 0$ 并定义势能函数

$$V^a(x) = V(x) - \frac{a}{2}|x|^2, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

则 N 珠-环聚合物的势能可以改写为

$$\mathcal{E}_N(\xi) = \frac{1}{2\beta_N^2} \sum_{k=0}^{N-1} (\omega_k^2 + a) |\xi_k|^2 + \beta_N \sum_{j=1}^N V^a \left(\underbrace{\sum_{k=0}^{N-1} \xi_k c_{j,k}}_{x_j(\xi)} \right),$$

其中每一个 $|\xi_k|^2$ 的系数 $\omega_k^2 + a > 0$.



正则坐标下的 Langevin 动力学

在第 k 个模上使用 $(\omega_k^2 + a)^{-1}$ 作为预条件系数, 则Langevin动力学形如

$$\dot{\xi}_k = -\frac{1}{\omega_k^2 + a} \nabla \mathcal{E}_N(\xi) + \sqrt{\frac{2}{\omega_k^2 + a}} \dot{B}_k, \quad k = 0, 1, \dots, N-1,$$

其中 $\{B_k\}_{k=0}^{N-1}$ 是 \mathbb{R}^d 上独立的 Brown 运动. 上述动力学可以等价地写为

预条件过阻尼 Langevin 动力学

$$\dot{\xi}_k = -\xi_k - \frac{1}{\omega_k^2 + a} \sum_{j=1}^N \nabla V^a(x_j(\xi)) c_{j,k} + \sqrt{\frac{2}{\omega_k^2 + a}} \dot{B}_k, \quad k = 0, 1, \dots, N-1.$$

该动力学的不变分布是 $\pi_N(\xi) \propto \exp(-\mathcal{E}_N(\xi))$.



正则坐标下的 Langevin 动力学

若在正则坐标 $\{\xi_k\}_{k=0}^{N-1}$ 的基础上再引入正则速度 $\{\eta_k\}_{k=0}^{N-1}$, 则也可得到欠阻尼版本的预条件 Langevin 动力学.

预条件欠阻尼 Langevin 动力学

$$\begin{cases} \dot{\xi}_k = \eta_k, \\ \dot{\eta}_k = -\xi_k - \frac{\beta_N}{\omega_k^2 + a} \sum_{j=1}^N \nabla V^a(x_j(\boldsymbol{\xi})) c_{j,k} - \eta_k + \sqrt{\frac{2}{\omega_k^2 + a}} \dot{B}_k, \end{cases} \quad k = 0, 1, \dots, N-1.$$

该动力学的不变分布是

$$\mu_N(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}) \propto \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} (\omega_k^2 + a) (|\xi_k|^2 + |\eta_k|^2) - \beta_N \sum_{j=1}^N V^a \left(\sum_{k=0}^{N-1} \xi_k c_{j,k} \right) \right).$$

预条件 Langevin 动力学的遍历性

接下来叙述预条件 Langevin 动力学的遍历性结果. 需要如下假设:

基本假设

给定常数 $a > 0$, 势能函数

$$V^a(x) = V(x) - \frac{a}{2}|x|^2, \quad x \in \mathbb{R}^d,$$

在 \mathbb{R}^d 上二阶可微, 且存在常数 $M_1, M_2 \geq 0$ 使得:

- ① $V^a(x)$ 可以被分解为

$$V^a(x) = V^c(x) + V^b(x),$$

其中 $\nabla^2 V^c(x) \succ O_d$ 且 $|V^b(x)| \leq M_1$ 对任意 $x \in \mathbb{R}^d$ 成立.

- ② $V^a(x)$ 的 Hesse 矩阵满足

$$-M_2 I_d \preceq \nabla^2 V^a(x) \preceq M_2 I_d$$

对任意 $x \in \mathbb{R}^d$ 成立.



预条件 Langevin 动力学的遍历性

定理 3.1 (p. 39)

令 $(P_t)_{t \geq 0}$ 是预条件过阻尼 Langevin 动力学的 Markov 半群, 则对 \mathbb{R}^{2dN} 任意恒正的光滑函数 $f(\xi)$, 有

$$\text{Ent}_{\pi_N}(P_t f) \leq e^{-2\lambda_1 t} \text{Ent}_{\pi_N}(f), \quad \forall t \geq 0,$$

其中收敛速率 $\lambda_1 = \exp(-4\beta M_1)$.

这里 $\text{Ent}_{\pi_N}(f)$ 是指密度函数 $f(\xi, \eta)$ 在 π_N 中的相对熵:

$$\text{Ent}_{\pi_N}(f) := \int_{\mathbb{R}^d} f \log f d\pi_N - \left(\int_{\mathbb{R}^d} f d\pi_N \right) \log \left(\int_{\mathbb{R}^d} f d\pi_N \right).$$



预条件 Langevin 动力学的遍历性

定理 3.2 (p. 41)

令 $(P_t)_{t \geq 0}$ 是预条件欠阻尼 Langevin 动力学的 Markov 半群, 则对 \mathbb{R}^{2dN} 中任意恒正的光滑函数 $f(\xi, \eta)$, 有

$$W_{\mu_N}(P_t f) \leq e^{-2\lambda_2 t} W_{\mu_N}(f), \quad \forall t \geq 0,$$

其中收敛速率 $\lambda_2 = \frac{a^2}{3M_2^2 + 5a^2} \exp(-4\beta M_1)$.

这里 $W_{\mu_N}(f)$ 是指密度函数 $f(\xi, \eta)$ 在 π_N 中的类相对熵:

$$W_{\mu_N}(f) = \left(\frac{M_2^2}{a^2} + 1 \right) \text{Ent}_{\mu_N}(f) + \sum_{k=0}^{N-1} \frac{1}{\omega_k^2 + a} \int_{\mathbb{R}^{2dN}} \frac{|\nabla_{\eta_k} f - \nabla_{\xi_k} f|^2 + |\nabla_{\eta_k} f|^2}{f} d\mu_N.$$

预条件 Langevin 动力学的遍历性

定理 3.1 和 3.2 中的收敛速率 λ_1 和 λ_2 均不依赖于珠数 N . 主要证明技术:

- 泛函不等式 (Bakry–Émery 理论, 研究扩散过程的遍历性)

Bakry, Gentil & Ledoux. (2014). Analysis and geometry of Markov diffusion operators (Vol. 103). Cham: Springer.

Wang. (2006). Functional inequalities Markov semigroups and spectral theory. Elsevier.

- 广义 Γ 算子 (研究退化扩散过程的遍历性)

Monmarché, P. (2019). Generalized Γ calculus and application to interacting particles on a graph. Potential Analysis, 50(3), 439–466.



数值算例: 1维势能函数

令势能函数 $V(x)$ 和观测函数 $O(x)$ 定义为:

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + x \cos x, \quad O(x) = \sin\left(\frac{\pi}{2}x\right), \quad x \in \mathbb{R}.$$

采用预条件欠阻尼 Langevin 动力学, 取步长 $h = \frac{1}{16}$ 和演化时间 $T = 5 \times 10^6$.

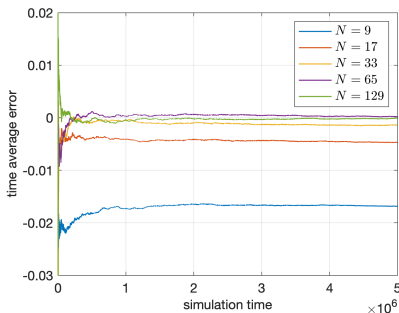
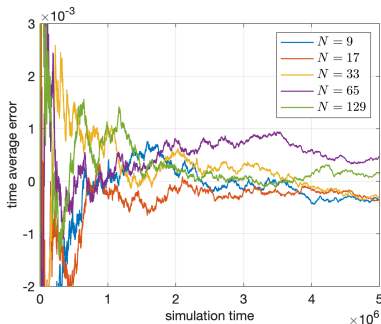


图: 计算正则系宗平均 $\langle O(x) \rangle_\beta$ 的时间平均误差. 左: $\beta = 1$. 右: $\beta = 4$.

可以看出不同的珠数 N 对应的收敛速度大致相同.



Section 3

随机分组方法



北京大学
PEKING UNIVERSITY

相互作用粒子系统

- 可以构造一个 Langevin 动力学采样目标分布 $\pi(x)$.
- 相互作用粒子系统 (IPS):

$$\dot{x}_t^i = b(x_t^i) + \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} K(x_t^i - x_t^j) + \sqrt{2} \dot{B}_t^i, \quad i = 1, \dots, N,$$

其中 $\{B_t^i\}_{i=1}^N$ 为独立的 Brown 运动.

- 在 IPS 的离散格式中, 计算全部的相互作用力 $\{K(x^i - x^j)\}_{i \neq j}$ 需要 $O(N^2)$ 的复杂度, 这在粒子数 N 较大时是非常大的开销.



相互作用粒子系统

- 随机分组方法 (RBM) 是采样 IPS 的一种快速算法, 它的核心思想是类似于随机梯度下降 (SGD) 给出粒子所受合力的无偏估计.
- 给定 \mathbb{R}^d 中的粒子系统 $\{x_i^j\}_{i=1}^N$. 若 C 是 $\{1, \dots, N\}$ 的大小为 p 的随机子集, 则在 $i \in C$ 的条件下, 有

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{p-1} \sum_{j \in C, j \neq i} K(x^i - x^j) : i \in C\right] = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} K(x^i - x^j),$$

因此左式是 x^i 所受合力的无偏估计.



相互作用粒子系统

- 若在每次迭代中, 将 $\{1, \dots, N\}$ 划分为若干大小为 p 的子集, 且只在这些子集内部计算相互作用力, 则可显著降低复杂度.

■ 随机分组相互作用粒子系统 (RB-IPS):

对每个 $n \geq 0$, 将 $\{1, \dots, N\}$ 随机划分为大小为 p 的子集 C_1, \dots, C_q .
当 $t \in [nh, (n+1)h)$ 时, $y_t = \{y_t^i\}_{i=1}^N$ 满足

$$\dot{y}_t^i = b(y_t^i) + \frac{1}{p-1} \sum_{j \neq i, j \in C} K(y_t^i - y_t^j) + \sqrt{2} \dot{B}_t^i, \quad i \in C,$$

其中 $C \in \{C_1, \dots, C_q\}$ 是包含粒子 i 的唯一子集.

- RB-IPS 中相互作用力的复杂度为 $O(Np)$.



随机分组方法

记 RB-IPS 和 discrete RB-IPS 的对偶半群为 Ω_n^h 和 $\tilde{\Omega}_n^h$. 论文证明了:

- RB-IPS 有与 N 无关的收敛速率:

$$\mathcal{W}_1(\nu \mathcal{Q}_n^h, \pi^h) \lesssim e^{-\beta n h} \mathcal{W}_1(\nu, \pi^h),$$

且其不变分布 π^h 满足

$$\mathcal{W}_1(\pi^h, \pi) \lesssim \sqrt{\frac{h}{p-1}} + h^2.$$

- discrete RB-IPS 的采样误差可控制为

$$\mathcal{W}_1(\nu \tilde{\mathcal{Q}}_n^h, \pi) \lesssim e^{-\lambda n h} + \sqrt{h}.$$



遍历性和采样误差

接下来叙述 RB-IPS 的遍历性和 discrete RB-IPS 的采样误差结果.

基本假设 1 (全局 Lipschitz 条件)

对于漂移力 $b(\cdot)$, 存在常数 L_0 使得

$$|b(x)| \leq L_0(|x| + 1), \quad \forall x \in \mathbb{R}^d.$$

对于相互作用力 $K(\cdot)$, 存在常数 L_1 使得

$$\max\{|K(x)|, |\nabla K(x)|, |\nabla^2 K(x)|\} \leq L_1, \quad \forall x \in \mathbb{R}^d.$$

全局 Lipschitz 条件保证了 Euler-Maruyama 离散格式的稳定性.

遍历性和长时间误差

基本假设 2 (漂移力条件)

给定 $r \geq 0$, 函数 $\kappa(r)$ 定义为

$$\kappa(r) = \inf \left\{ - \frac{(x-y) \cdot (b(x) - b(y))}{|x-y|^2} : x, y \in \mathbb{R}^d, |x-y| = r \right\},$$

且满足下列条件:

- ❶ $\kappa(r)$ 在 $(0, +\infty)$ 上连续;
- ❷ $\kappa(r)$ 在 $(0, +\infty)$ 上有一致的下界;
- ❸ $\lim_{r \rightarrow \infty} \kappa(r) > 0$.

充分条件: 在 $\mathbb{R}^d \setminus B(0, R)$ 有 $\nabla^2 U(x) \succeq mI_d$ 对某个 $m > 0$ 成立.

遍历性和长时间误差

定理 4.2 & 4.3 (p. 64 & 69)

令 $(Q_n^h)_{n \geq 0}$ 为 RB-IPS 的对偶半群. 存在常数 $L_1^* > 0$, 使得当

$$0 < L_1 \leq L_1^*$$

时, 有不等式:

$$\mathcal{W}_1(\mu Q_n^h, \nu Q_n^h) \leq C e^{-\beta n h} \mathcal{W}_1(\mu, \nu), \quad \forall n \geq 0$$

对任何概率分布 $\mu, \nu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^{dN})$ 成立. 并且, RB-IPS 的不变分布 π^h 满足

$$\mathcal{W}_1(\pi^h, \pi) \leq C \sqrt{\frac{h}{p-1}} + h^2.$$

常数 C, β, L_1^* 仅依赖于 $d, \kappa(\cdot), \sigma, L_0$.

遍历性和长时间误差

定理 4.5 (p. 78)

令 $(\tilde{Q}_n^h)_{n \geq 0}$ 为 discrete RB-IPS 的对偶半群. 存在常数 $L_1^*, h^* > 0$, 使得当

$$0 < L_1 \leq L_1^*, \quad 0 < h \leq h^*$$

时, 对于给定的初始分布 $\nu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^{dN})$, 有不等式:

$$\mathcal{W}_1(\nu \tilde{Q}_n^h, \pi) \leq C e^{-\lambda n h} + C \sqrt{h}.$$

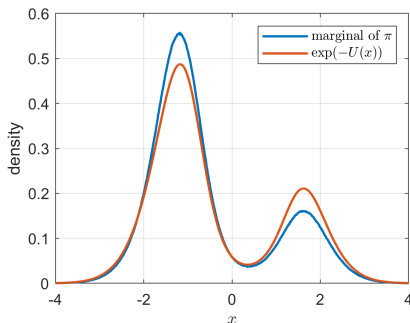
常数 C, λ, L_1^*, h^* 仅依赖于 $d, \kappa(\cdot), \sigma, L_0$ 和初始分布 ν .

特别的, 这些常数都不依赖于粒子数 N , 分组大小 p 和步长 h .

数值算例：相互作用系统

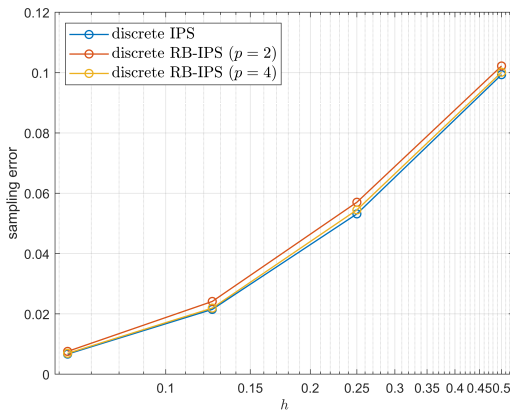
设外部势能 $U(x)$ 和相互作用势能 $V(x)$ 为

$$U(x) = \frac{1}{2}x^2 + 3.5e^{-(x-0.3)^2}, \quad V(x) = -e^{-x^2}.$$



图：目标分布 $\pi(x)$ 在 x^1 上的边缘分布与 $\exp(-U(x))$ 的对比，反映了相互作用项 $V(x)$ 对整体分布的影响。

数值算例：相互作用系统



图：当粒子数 $N = 64$ 时, discrete RB-IPS 在不同步长下的采样误差. 可以看出, 离散误差占主要部分, 而随机分组误差占比很小.



总结和展望

已有的工作:

- 1 验证了路径积分分子动力学 (PIMD) 在欠阻尼 Langevin 方程形式下能够实现与珠数 N 无关的收敛速度, 这一结果提升了该方法的理论适用性.
- 2 研究了随机分组相互作用粒子系统 (RB-IPS) 的遍历性, 并分析了离散版本 (discrete RB-IPS) 的采样误差, 为相关采样算法的理论研究奠定了基础.

未来的研究计划:

- 1 针对随机梯度采样算法进行严格的误差分析, 并进一步完善其理论框架.
- 2 借助机器学习技术和扩散生成模型, 探索设计新型高效的采样算法, 以提高复杂分布采样的适用范围.
- 3 针对更为实际的应用场景 (如高维物理和数据科学问题), 设计专门的采样算法, 提升其在实际问题中的表现.