

# Машинное обучение и нейросетевые модели

## *Лекция 4. Гамильтоновы методы Монте-Карло*

Лектор: Кравченя Павел Дмитриевич

Волгоград 2025

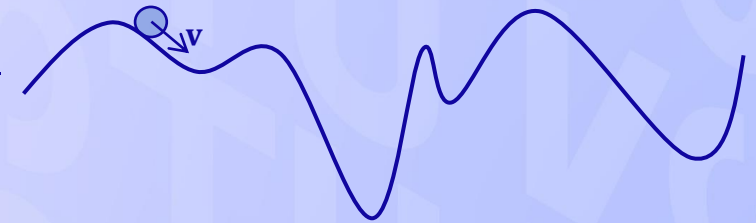
---

## План лекции

1. Подход статистической физики к задаче семплирования.
  2. Термодинамическая система. Основные определения.
  3. Каноническое распределение Гиббса.
  4. Динамика Гамильтона в классической механике. Уравнения Гамильтона.
  5. Функция Гамильтона. Механики Гамильтона и Ньютона, их соответствие.
  6. Свойства механики Гамильтона. Микроканоническое распределение.
  7. Численное решение уравнений Гамильтона. Методы Эйлера и Leapfrog.
  8. Организация семплирования из целевого распределения.
  9. Алгоритм НМС, его недостатки.
  10. Динамические алгоритмы НМС. No-U-Turn Sampler, принципы его работы.
-

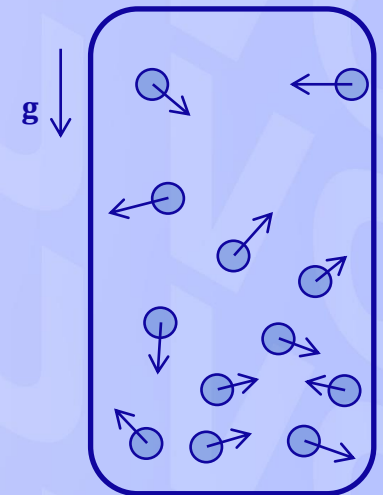
- Механизм случайного блуждания не учитывает особенности целевого распределения, что затрудняет сходимость.
- Алгоритм имеет локальный характер исследования целевой функции с дальнейшим семплированием из ограниченной области.
- Попытка увеличения дисперсии *proposal distribution* увеличивает вероятность попасть в другую локальную область целевой функции, но снижает вероятность принятия состояния.
- Требуется подбор *proposal distribution* для эффективной работы алгоритма Метрополиса-Гастингса. Неверный выбор распределения снижает качество работы алгоритма.
- А можно ли семплировать из сложного распределения *иначе*?

- Рассмотрим некоторую физическую систему: шарик на поверхности сложной формы, движущийся под действием силы тяжести без трения.
- Шарик может двигаться по достаточно сложной траектории, но будет стремиться спуститься вниз, где его потенциальная энергия минимальна.
- Движения шарика не хаотичные, а определяются формой траектории и действием поля потенциальных сил, в которых движется шарик.
- Потенциальная и кинетическая энергии шарика *переходят друг в друга* в процессе движения. *Кинетическая энергия* зависит от скорости шарика на конкретном участке траектории, а *потенциальная энергия* определяется потенциальным полем, в котором движется шарик.





- Рассмотрим теперь *механическую систему*, состоящую из большого количества шариков, движущихся в некотором потенциальном поле.
- Описанием таких систем занимается статистическая физика и ТД, которая вводит несколько понятий для работы с ними:
  - ✓ **Термодинамическая система** – множество некоторых частиц.
  - ✓ **Температура** – макроскопическая величина, связанная с внутренней энергией системы.
  - ✓ **Микросостояние** – состояние системы, определяемое полным набором координат и импульсов всех её частиц. Каждая частица системы обладает потенциальной  $W_p(\mathbf{q})$  и кинетической  $W_k(\mathbf{p})$  энергиями.
  - ✓ **Фазовое пространство** – пространство размерности  $6N$ , задаваемое координатами и импульсами всех частиц, образующих систему. Текущее состояние системы описывается точкой в этом пространстве, называемой фазовой точкой системы. С течением времени фазовая точка перемещается, описывая фазовую траекторию.



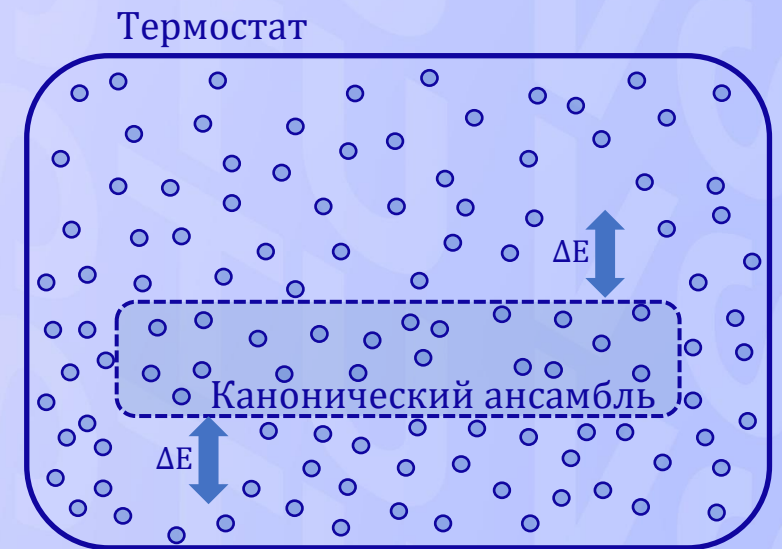


## Основные понятия термодинамической системы

- ✓ **Термостат** – это идеализированная система с бесконечно большой теплоемкостью, которая может обмениваться энергией с изучаемой системой, не изменяя своей температуры. Термостат поддерживает постоянную температуру, и его роль заключается в том, чтобы служить источником или стоком энергии для системы.
- ✓ **Канонический ансамбль** – термодинамическая система, которая обменивается энергией с термостатом, находясь с ним в тепловом равновесии. При этом обмена веществом не происходит!
- ✓ **Каноническое распределение Гиббса** – плотность распределения состояний канонического ансамбля:

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{kT}}, \quad H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = W_p(\mathbf{q}) + W_k(\mathbf{p}), \quad Z = \text{const.}$$

- ✓ **Микроканонический ансамбль** – Изолированная термодинамическая система с постоянным значением энергии.



- Рассмотрим высокий столб воздуха в закрытом сосуде в поле силы тяжести Земли.
- Молекулы воздуха в сосуде можно рассматривать как канонический ансамбль. В этом случае, молекулы подчиняются каноническому распределению с гамильтонианом  $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ :

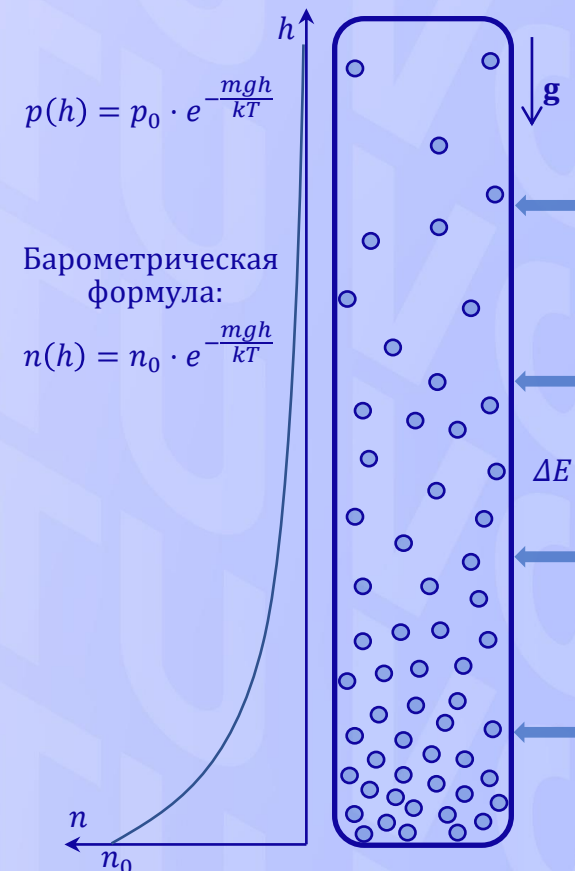
$$p(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = p_0 \cdot e^{-\frac{H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{kT}} = p_0 \cdot e^{-\frac{W_k(\mathbf{p})}{kT}} \cdot e^{-\frac{W_p(\mathbf{q})}{kT}}.$$

- Потенциальная энергия молекулы на высоте  $h$ :

$$W_p(\mathbf{q}) = W_p(h) = mgh.$$

- Маргинализируем по импульсам ( $\mathbf{p} \neq f(\mathbf{q})$ ):

$$p(h) = C \cdot \int e^{-\frac{W_k(\mathbf{p})}{kT}} d\mathbf{p} \cdot e^{-\frac{mgh}{kT}} = C \cdot \underbrace{f(\mathbf{p})}_{\text{const по } h} = p_0 \cdot e^{-\frac{mgh}{kT}}; \quad n \sim p.$$



- Таким образом, если для системы в термостате заданы *потенциальная* и *кинетическая* энергии (гамильтониан), но движение частиц этой системы описывается каноническим распределением. Это означает, что в любой момент времени набор координат и импульсов частиц может рассматриваться как семпл из канонического распределения.
- С другой стороны, движение частиц подчиняется законам классической механики, используя которые, можно описать динамику частиц для любого момента времени.
- **Идея:** будем рассматривать параметры апостериорного распределения как канонический ансамбль частиц, подчиняющийся законам классической механики.



- Теперь нужно определить микросостояние ансамбля параметров, то есть, каким образом будут выражаться координаты и импульсы каждой частицы:
  - ✓ **Координаты  $\mathbf{q}$**  параметра-частицы будут определяться самим значением параметра.
  - ✓ Параметры-частицы в реальности не имеют импульсов. Мы введём их искусственно, чтобы обеспечить моделирование динамики системы. Введём **импульсы  $\mathbf{p}$**  по аналогии с импульсами механической системы, состоящей из  $n$  частиц:  $\mathbf{p}_i = m\mathbf{v}_i \quad \forall i \in [1..n]$ .
- Будем считать, что параметры-частицы между собой не взаимодействуют, поэтому, координаты будут зависеть только от потенциальной энергии и изменяться в соответствии с законами классической механики. Определим потенциальную энергию следующим образом:
$$W_p(\mathbf{q}) = -\log p(\mathbf{w} | \mathcal{D}).$$
- Действительно, максимизация целевого распределения  $\log p(\mathbf{w} | \mathcal{D})$  должна соответствовать минимизации потенциальной энергии  $W_p(\mathbf{q})$ .

- Определим кинетическую энергию следующим образом:

$$W_k(\mathbf{p}) = \frac{1}{2} \mathbf{p}^T \mathbf{M}^{-1} \mathbf{p}.$$

- Если матрица масс  $\mathbf{M}$  диагональна, то:

$$W_k(\mathbf{p}) = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_i}.$$

- И тогда гамильтониан системы:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = W_p(\mathbf{q}) + W_k(\mathbf{p}) = -\log p(\mathbf{w} | \mathcal{D}) + \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_i}.$$

- И ему соответствует каноническое распределение Гиббса:

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = p(\mathbf{w}, \mathbf{p}) = p_0 \cdot e^{\frac{\log p(\mathbf{w} | \mathcal{D})}{kT}} \cdot e^{-\frac{\sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_i}}{kT}}.$$

- В методах НМС параметр  $T$  часто выбирают так, чтобы  $kT = 1$ .
- Теперь посмотрим на *последний множитель*. Пусть:

$$p(\mathbf{p}) \propto e^{-\frac{\sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m_i}}{kT}} = \prod_{i=1}^n e^{-\frac{p_i^2}{2m_i}} \Rightarrow p(\mathbf{p}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{M}).$$

- Чаще всего, *все массы* частиц считаются равными единице, и тогда:

$$p(\mathbf{p}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}).$$

- Тогда каноническое распределение принимает вид:

$$p(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = p(\mathbf{w}, \mathbf{p}) = \log p(\mathbf{w} | \mathcal{D}) \cdot p(\mathbf{p}).$$

- Так как  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{w}$  независимы, то  $(\mathbf{w}', \mathbf{p}') \sim p(\mathbf{w}, \mathbf{p}) \Leftrightarrow \mathbf{w}' \sim p(\mathbf{w} | \mathcal{D})$  и  $\mathbf{p}' \sim p(\mathbf{p})$ .
- Семплирование из **целевого распределения** сводится к семплированию из канонического распределения с дальнейшим отбрасыванием импульсов.

- Изменение энергии в каноническом ансамбле происходит за счёт взаимодействия с термостатом.
- Будем считать, что в некоторые моменты времени система получает от термостата или отдаёт ему некоторое количество энергии, которое приводит к изменению импульсов частиц (и кинетической энергии).
- В НМС термостат как отдельная сущность не используется, а моделируется его влияние на систему путём изменения импульсов частиц:

$$p(\mathbf{p}) = \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbb{I}).$$

- В промежутках между этапами взаимодействия с термостатом энергия системы не изменяется, и она ведёт себя как **микроканонический ансамбль**. Этот ансамбль обладает некоторыми *уникальными* свойствами.



- Поскольку *полная энергия* системы между этапами взаимодействия с термостатом сохраняется, то частицы образуют замкнутую консервативную систему. Данная система частиц находится в движении, которое полностью определяется потенциальной и кинетической энергиями каждой из частиц.
- Каноническое распределение такой системы отлично от нуля только на фазовой траектории, соответствующей динамике частиц.
- Поэтому, чтобы иметь возможность семплирования из канонического распределения, важно уметь определять фазовые траектории системы.
- Для описания динамики такой системы часто используются уравнения Гамильтона. Они задают уравнения движения частиц, интегрирование которых позволяет получить фазовую траекторию системы.

- Согласно положениям Гамильтона, динамика шарика описывается системой уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_j}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial q_j}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \end{cases}$$

где  $\mathbf{q} = [q_x, q_y]$  – обобщенные координаты шарика,  $\mathbf{p} = [p_x, p_y]$  – обобщенные импульсы шарика,  $H = H(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$  – функция Гамильтона (Гамильтониан).

- Для консервативных систем (в которых полная энергия сохраняется во времени) Гамильтониан выражает полную энергию:

$$H = W_p + W_k.$$

- Действительно, для свободного полёта шарика в поле силы тяжести Земли можно записать:  $\mathbf{q} = [x, y]$ ,  $\mathbf{p} = [mv_x, mv_y]$ ,  $W_p = mg\Delta h = mgy$ ,  $W_k = \frac{mv_x^2}{2} + \frac{mv_y^2}{2}$ .

Тогда:

$$\left\{ \begin{array}{l} m \frac{\partial v_x}{\partial t} = \frac{\partial p_x}{\partial t} = -\frac{\partial W_p}{\partial x} - \frac{\partial W_k}{\partial x} = 0, \\ m \frac{\partial v_y}{\partial t} = \frac{\partial p_y}{\partial t} = -\frac{\partial W_p}{\partial y} - \frac{\partial W_k}{\partial y} = mg - 0, \\ mv_x = \frac{\partial x}{\partial t} = -\frac{\partial W_p}{\partial v_x} - \frac{\partial W_k}{\partial v_x} = mv_x, \\ mv_y = \frac{\partial y}{\partial t} = -\frac{\partial W_p}{\partial v_y} - \frac{\partial W_k}{\partial v_y} = mv_y. \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} m \frac{\partial v_x}{\partial t} = F_x = 0, \\ m \frac{\partial v_y}{\partial t} = F_y = mg. \end{array} \right.$$

- Таким образом, на примере задачи можно видеть, что применение уравнений Гамильтона и Ньютона приводит к одинаковым результатам.

- Рассмотрим преобразование точки в *фазовом пространстве во времени*:

$$T_s : (\mathbf{p}^t, \mathbf{q}^t) \rightarrow (\mathbf{p}^{t+s}, \mathbf{q}^{t+s}).$$

- Данное преобразование выражается траекторией движения в фазовом пространстве, которую можно получить, проинтегрировав систему уравнений Гамильтона.
- Оно *биективно*, следовательно, существует обратное преобразование  $T_s^{-1}$ . Его можно получить из уравнений Гамильтона с инверсией времени:

$$\begin{cases} \frac{\partial p_j}{\partial(-t)} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial q_j}{\partial(-t)} = \frac{\partial H}{\partial p_j}. \end{cases}$$



- Данное преобразование изменяет уравнения движения. Однако, заменяя  $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ , и учитывая симметрию кинетической энергии (а, следовательно, и гамильтониана) относительно импульса, можно получить:

$$\begin{cases} \frac{\partial(-p_j)}{\partial(-t)} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial q_j}{\partial(-t)} = \frac{\partial H}{\partial(-p_j)}, \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial p_j}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}, \\ \frac{\partial q_j}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_j}. \end{cases}$$

- Данные преобразования *вновь приводят* к уравнениям Гамильтона.
- Таким образом, для получения  $T_s^{-1}$  нужно инвертировать импульс, рассчитать траекторию движения назад по времени, проинтегрировав уравнения Гамильтона, и вновь обратить импульс.

- *Изменение функции Гамильтона со временем можно записать в виде (в соответствии с выражением для производной сложной функции):*

$$\frac{dH}{dt} = \sum_j \left[ \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial p_j}{\partial t} \right] + \frac{\partial H}{\partial t}.$$

- Подставляя *уравнения Гамильтона* и учитывая, что гамильтониан явно не зависит от времени, получаем:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_j \left[ \frac{\partial H}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right] = 0.$$

- Таким образом, гамильтониан сохраняется во времени:  $\frac{dH(\mathbf{p}, \mathbf{q})}{dt} = 0$ , значит:

$$H(t + \Delta t) = H(t) \quad \forall t.$$

- Эволюция системы частиц в фазовом пространстве  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  описывается функцией распределения  $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ .
- Согласно **теореме Лиувилля**, функция распределения гамильтоновой системы постоянна вдоль любой траектории в фазовом пространстве. Значит, семплирование из  $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  на траектории для микродинамического ансамбля эквивалентно выборке из равномерного распределения.
- Можно показать, что объём фазового пространства системы Гамильтона сохраняется во времени.
- При движении в фазовом пространстве некоторого множества точек оно растягивается по одним координатам (например,  $\mathbf{p}$ ) и сжимается по другим (например,  $\mathbf{q}$ ). При этом произведение  $\prod_j \Delta p_j \cdot \Delta q_j$  остаётся постоянным.

- Для численного решения дифференциальных уравнений выполняют дискретизацию времени:  $t = \{t_0, t_1, t_2, \dots, t_L\}$ , а дифференциальные операторы представляют в виде конечно-разностных соотношений.

- Метод **Эйлера** – предполагает аппроксимацию участка кривой  $y(t)$ :

$$y(t + \Delta t) = y(t) + \frac{\partial y(t)}{\partial t} \cdot \Delta t.$$

- Применяя данный метод к системе уравнений Гамильтона, получим последовательность рекуррентных соотношений для определения **p** и **q**:

$$p_j(t_{i+1}) = p_j(t_i + \Delta t) = p_j(t_i) + \Delta t \cdot \frac{\partial p_j(t)}{\partial t} = p_j(t_i) - \Delta t \cdot \frac{\partial H(p, q)}{\partial q_j} \Bigg|_{q_j(t_i)}$$
$$q_j(t_{i+1}) = q_j(t_i + \Delta t) = q_j(t_i) + \Delta t \cdot \frac{\partial q_j(t)}{\partial t} = q_j(t_i) + \Delta t \cdot \frac{\partial H(p, q)}{\partial p_j} \Bigg|_{p_j(t_i)}$$



- Основная *проблема* метода Эйлера в том, что он быстро расходится, при этом рассчитанная траектория существенно отклоняется от реальной.
- Метод **Leapfrog** для улучшения сходимости предлагает две идеи:
  - ✓ Обновлять  $p$  и  $q$  следует по отдельности. Сначала нужно обновить  $p$ , затем использовать полученное значение для обновления  $q$  и рекуррентно повторить для всех  $p$  и  $q$  на траектории.
  - ✓ Вместо того, чтобы делать «полный шаг» времени для обновления  $p$ , следует вместо него использовать «половинный шаг». Полученный с использованием «половинного шага»  $p$  используется для обновления  $q$  с помощью полного шага, который, в свою очередь, используется для обновления  $p$  с применением еще одного «половинного шага».
- Введенный таким образом метод *работает значительно лучше*.

- Метод **Leapfrog** вычисляет  **$p$**  и  **$q$**  с применением следующих выражений:

$$p_j\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) = p_j(t) - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial H(p, q)}{\partial q_j} \bigg|_{p_j(t_i), q_j(t_i)}$$

$$q_j(t_{i+1}) = q_j(t_i + \Delta t) = q_j(t_i) + \Delta t \cdot \frac{\partial H(p, q)}{\partial p_j} \bigg|_{p_j\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}\right)}$$

$$p_j(t_{i+1}) = p_j(t_i + \Delta t) = p_j\left(t_i + \frac{\Delta t}{2}\right) - \frac{\Delta t}{2} \cdot \frac{\partial H(p, q)}{\partial q_j} \bigg|_{q_j(t_i + \Delta t)}$$

- Данный метод позволяет сохранять объем фазового пространства (с точностью, определяемой степенью дискретизации времени), как этого требует теорема Лиувилля.

## Визуализация численного решения уравнений Гамильтона

Схема метода Leapfrog (один шаг)

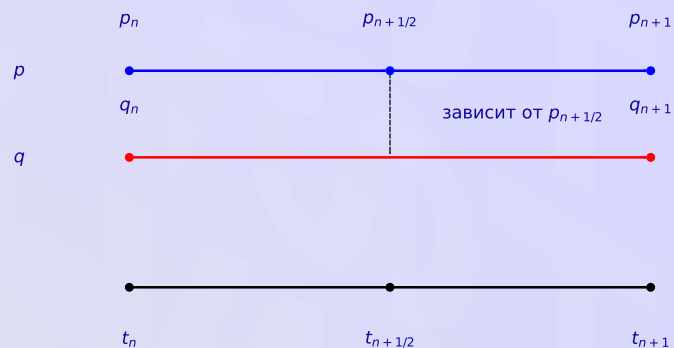
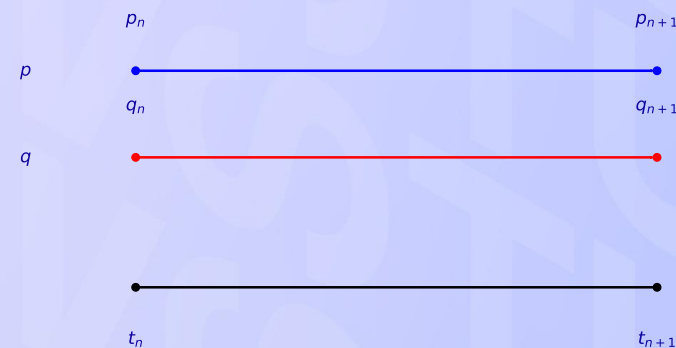
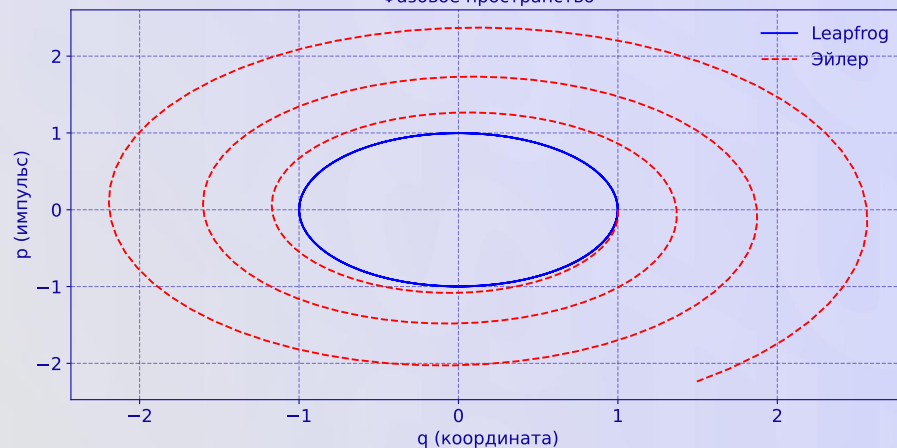


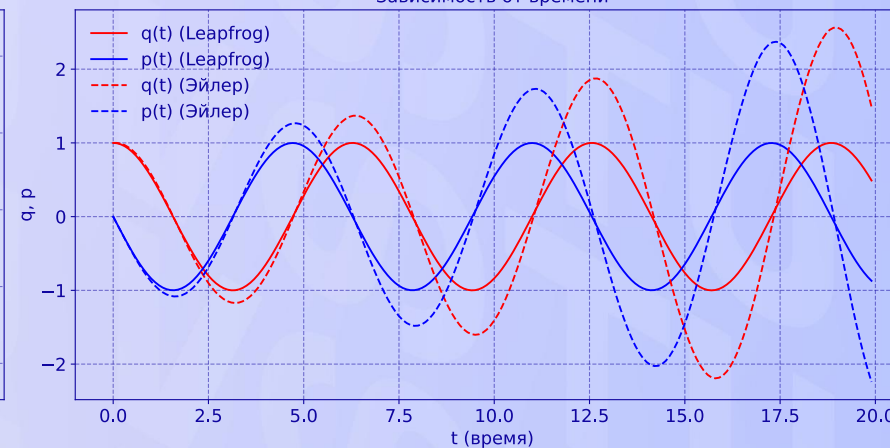
Схема метода Эйлера (один шаг)



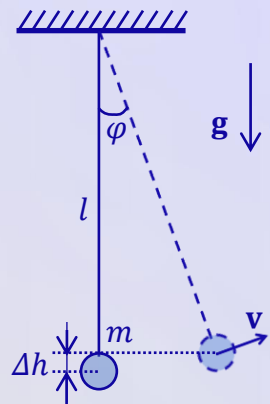
Фазовое пространство



Зависимость от времени



- Рассмотрим математический маятник:



$$W_k(\dot{\varphi}) = \frac{mv^2}{2} = \frac{ml^2\dot{\varphi}^2}{2};$$

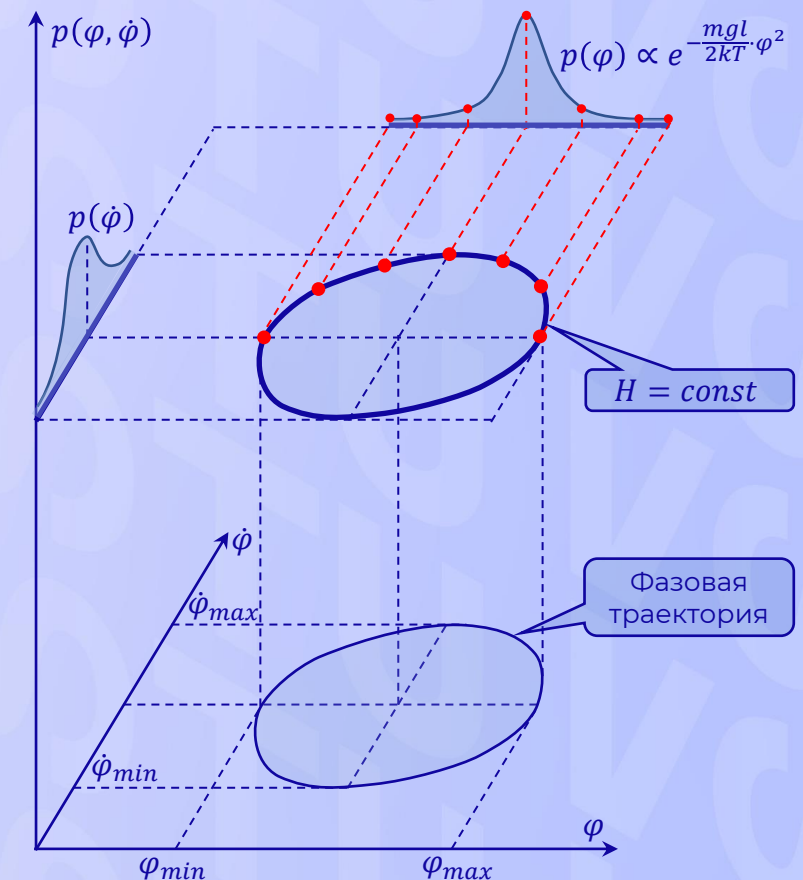
$$W_p(\varphi) = mg\Delta h = mgl(1 - \cos \varphi).$$

$$H(\dot{\varphi}, \varphi) = \frac{ml^2\dot{\varphi}^2}{2} + mgl(1 - \cos \varphi).$$

- В случае малых углов  $\cos \varphi \approx 1 - \frac{\varphi^2}{2}$ , и тогда:

$$H(\dot{\varphi}, \varphi) = \frac{ml^2}{2} \dot{\varphi}^2 + \frac{mgl}{2} \varphi^2; \quad p(\dot{\varphi}, \varphi) \propto e^{-\frac{ml^2\dot{\varphi}^2}{2kT}} \cdot e^{-\frac{mgl}{2kT}\varphi^2};$$

$$p(\varphi) \propto \int e^{-\frac{ml^2\dot{\varphi}^2}{2kT}} \cdot e^{-\frac{mgl}{2kT}\varphi^2} d\dot{\varphi} = \boxed{f(\dot{\varphi}) \cdot e^{-\frac{mgl}{2kT}\varphi^2}}.$$





- Теперь, когда известен способ семплирования из *микроканонического ансамбля*, можно расширить его для случая систем, описываемых каноническим ансамблем (где энергия может флуктуировать).
- После семплирования очередного значения координат частиц, полученных в результате *численного интегрирования* уравнений движения Гамильтона, переназначим частицам новые импульсы, взятые из *нормального распределения*, соответствующего заданной температуре.
- Это приведёт к изменению полной энергии системы. На следующем шаге мы проведём семплирование, стартующее с измененной энергией.
- Повторяя шаги много раз, можно добиться эффективного исследования области параметров.

- Если бы уравнения Гамильтона решались точно, то каждый семпл был бы из *канонического распределения*.
- Однако, *численное интегрирование* приводит к погрешностям. Поэтому, не каждый семпл из канонического распределения корректен.
- Для его проверки можно ввести acceptance-шаг, как в алгоритме МН.
- Таким образом, необходимо промоделировать марковскую цепь, в которой на каждой итерации произвольным образом выбирается импульс частицы (эмулируя взаимодействие с термостатом) и выполняется шаг алгоритма Метрополиса-Гастингса с proposal distribution, соответствующим динамике Гамильтона (для оценки «пригодности» состояния).
- Можно показать, что это действительно работает.

- Инициализируем  $\mathbf{q}_0 = random$ .
- For  $i = 1..S$ :
  - Семплируем  $u \sim \mathcal{U}(0, 1)$ .
  - Семплируем  $\mathbf{p} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbb{I})$ .
  - Вычисляем динамику системы Гамильтона для  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  в течение  $L$  шагов с помощью Leapfrog с параметром  $\epsilon = \Delta t$ .
  - Вычисляем proposal state:  $(\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*) = (-\mathbf{p}, \mathbf{q})$ .
  - Вычисляем  $\mathcal{A}(\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*) = \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*) \cdot q(\mathbf{p}, \mathbf{q} | \mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*)}{p(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \cdot q(\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^* | \mathbf{p}, \mathbf{q})} \right\} = \min \left\{ 1, \frac{p(\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*)}{p(\mathbf{p}, \mathbf{q})} \right\} =$   
$$= \min \left\{ 1, \frac{e^{-H(\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*)}}{e^{-H(\mathbf{p}, \mathbf{q})}} \right\} = \min \{ 1, e^{-W_p(\mathbf{q}^*) + W_p(\mathbf{q}) - W_k(\mathbf{p}^*) + W_k(\mathbf{p})} \}$$
  - Если  $u \leq \mathcal{A}(\mathbf{p}^*, \mathbf{q}^*)$ , то  $\boxed{\mathbf{q}_i = \mathbf{q}^*}$ , иначе:  $\boxed{\mathbf{q}_i = \mathbf{q}_{i-1}}$ .

- Алгоритм НМС может применяться для байесовского вывода только **непрерывных латентных переменных**, поскольку требует вычисления производной от гамильтониана по данным переменным на этапе решения уравнений Гамильтона.
- Правильный подбор шага интегрирования  $\epsilon$  и количества шагов интегрирования  $L$  **очень важен для эффективной работы алгоритма**. При малом шаге моделирование очень длительное, а при большом – решение может разойтись, и многие состояния будут отклонены на этапе их принятия. Малое количество шагов порождает похожие друг на друга, высококоррелированные семплы, тогда как большое – приведет к зацикливанию траектории и бесполезной трате вычислительных ресурсов.

- Современные реализации методов НМС часто включают автоматическую настройку параметров, таких как величины шага интегрирования и количество шагов (длину траектории).
  - Но адаптация этих параметров во время выполнения алгоритма может нарушать условия детального баланса, который является ключевым условием для строгой корректности и сходимости классических НМС.
  - Гарантии сходимости, доказанные для НМС с постоянными параметрами, напрямую не применимы к адаптивным вариантам.
  - Это не означает, что адаптивные методы некорректны. Они требуют другого теоретического обоснования. В рамках курса эти обоснования не приводятся. Желающие могут ознакомиться с ними в оригинальных статьях.
-

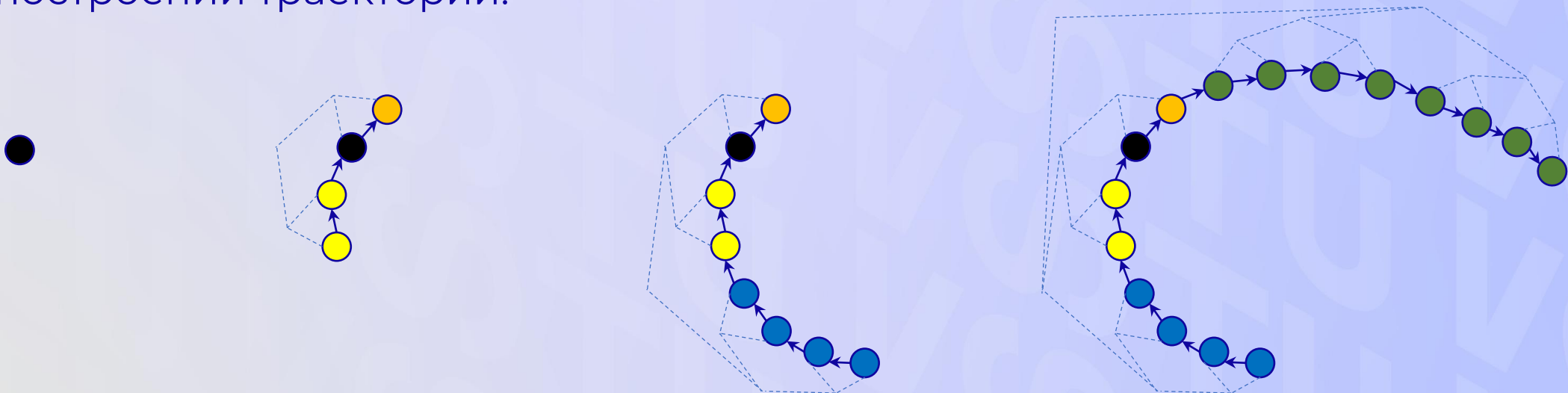


- Одной из современных реализаций алгоритмов НМС с динамическим подбором параметров является **No-U-Turn Sampler** (NUTS).
- NUTS динамически определяет длину траектории, избегая «разворотов» (U-turns) в фазовом пространстве. Это помогает предотвратить неэффективное возвращение траектории к уже исследованным областям.
- Критерием остановки моделирования (т.е., оценки числа шагов) является факт «разворота» траектории в сторону начальной точки:

$$\frac{d}{dt} \frac{(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{q}' - \mathbf{q})}{2} = (\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \frac{d}{dt} (\mathbf{q}' - \mathbf{q}) = (\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{p}'.$$

- NUTS, как правило, более эффективен, чем классический НМС, особенно для сложных многомерных распределений.

- Алгоритм, моделирующий траекторию до начала разворота, не может гарантировать обратимость во времени, а значит, не гарантирует сходимость цепи к целевому распределению. NUTS решает эту проблему с помощью рекурсивного алгоритма, реализующего процедуру удвоения при построении траектории.



- Инициализируем  $\mathbf{q}_0 = \text{random}$ .
- For  $i = 1..S$ :
  - Семплируем  $\mathbf{p}_0 \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbb{I})$ .
  - Семплируем  $u \sim \mathcal{U}(0, e^{-H(\mathbf{q}_{i-1}, \mathbf{p}_0)})$ .
  - $\mathbf{q}^- = \mathbf{q}_{i-1}$ ,  $\mathbf{q}^+ = \mathbf{q}_{i-1}$ ,  $\mathbf{p}^- = \mathbf{p}_0$ ,  $\mathbf{p}^+ = \mathbf{p}_0$ ,  $j = 0$ ,  $\mathcal{C} = \{\mathbf{q}_{i-1}\}$ ,  $s = 1$ .
  - While  $s = 1$  do:
    - ✓ Семплируем направление траектории:  $d_j \sim \mathcal{D}\{-1, 1\}$ .
    - ✓  $\mathbf{q}^-, \mathbf{p}^-, -, -, \mathcal{C}', s' \leftarrow \text{BuildTree}(\mathbf{q}^-, \mathbf{p}^-, u, d_j, j, \varepsilon)$  если  $d_j = -1$ ;  
 $-, -, \mathbf{q}^+, \mathbf{p}^+, \mathcal{C}', s' \leftarrow \text{BuildTree}(\mathbf{q}^+, \mathbf{p}^+, u, d_j, j, \varepsilon)$  если  $d_j = +1$ .
    - ✓ Если  $s' = 1$ , то  $\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{C} \cup \mathcal{C}'$ .
    - ✓  $s \leftarrow s' \cdot \mathbb{I}[(\mathbf{q}^+ - \mathbf{q}^-) \cdot \mathbf{p}^- \geq 0] \cdot \mathbb{I}[(\mathbf{q}^+ - \mathbf{q}^-) \cdot \mathbf{p}^+ \geq 0]$ .
    - ✓  $j \leftarrow j + 1$ .
  - Получаем семпл параметров:  $\mathbf{q}_i \sim \mathcal{D}[\{\mathcal{C}\}]$ .

Высота бинарного дерева,  
представляющего  
фазовую траекторию.

Заканчиваем ли  
траекторию  
(начался U-Turn)?

Кандидаты на семпл.

**function** BuildTree( $\mathbf{q}, \mathbf{p}, u, d, j, \varepsilon$ ):

- **Если**  $j = 0$ :

- $\mathbf{q}', \mathbf{p}' \leftarrow \text{LeapFrog}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, d \cdot \varepsilon)$ .
- $\mathcal{C} \leftarrow \{\mathbf{q}'\}$  if  $u \leq e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}')}$  else  $\emptyset$ .
- $s' \leftarrow \mathbb{I}[u \leq e^{-H(\mathbf{q}', \mathbf{p}') + \Delta_{\max}}]$ .
- **return**  $\mathbf{q}', \mathbf{p}', \mathbf{q}', \mathbf{p}', \mathcal{C}', s'$ .

Базовый случай: только один LeapFrog-шаг в направлении  $d$ .

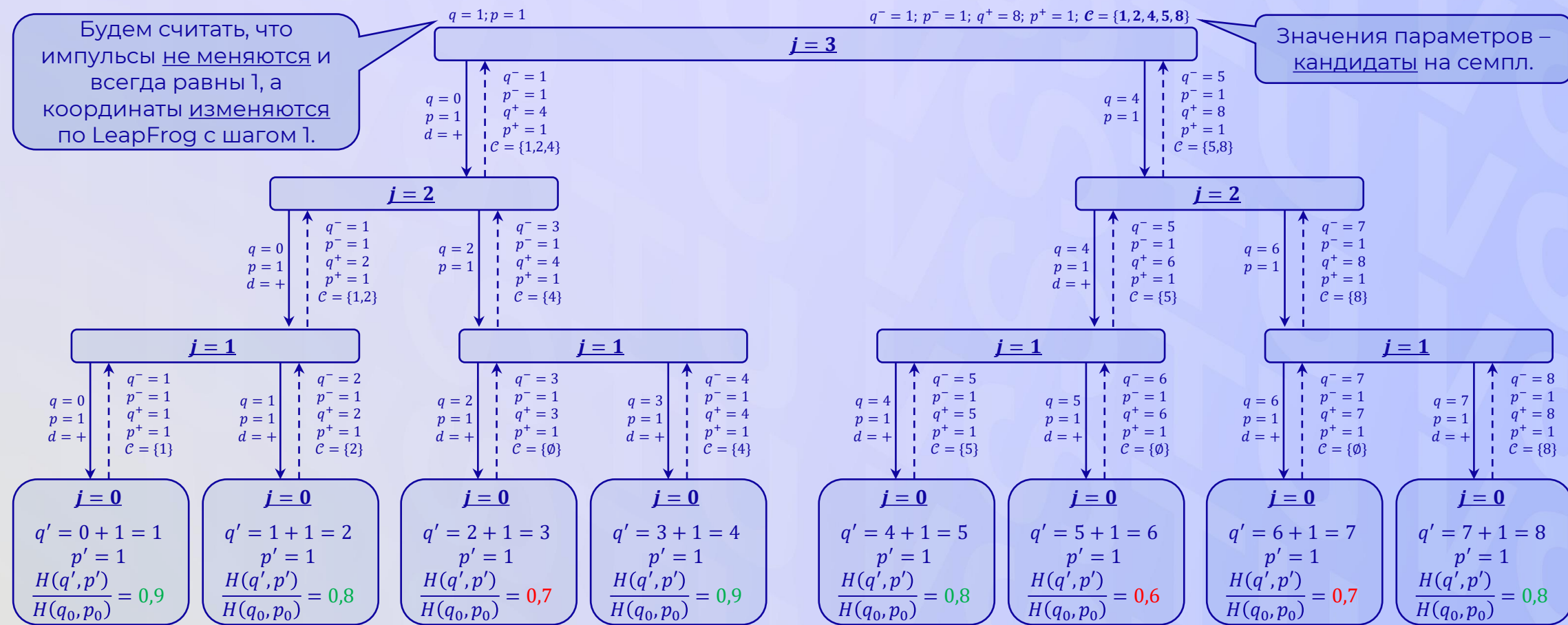
- **Иначе:**

- $\mathbf{q}^-, \mathbf{p}^-, \mathbf{q}^+, \mathbf{p}^+, \mathcal{C}', s' \leftarrow \text{BuildTree}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, u, d, j - 1, \varepsilon)$ ;
- $\mathbf{q}^-, \mathbf{p}^-, -, -, \mathcal{C}'', s'' \leftarrow \text{BuildTree}(\mathbf{q}^-, \mathbf{p}^-, u, d, j - 1, \varepsilon)$  если  $d = -1$ ;  
○  $-, -, \mathbf{q}^+, \mathbf{p}^+, \mathcal{C}'', s'' \leftarrow \text{BuildTree}(\mathbf{q}^+, \mathbf{p}^+, u, d, j - 1, \varepsilon)$  если  $d = +1$ .
- $s \leftarrow s' \cdot s'' \cdot \mathbb{I}[(\mathbf{q}^+ - \mathbf{q}^-) \cdot \mathbf{p}^- \geq 0] \cdot \mathbb{I}[(\mathbf{q}^+ - \mathbf{q}^-) \cdot \mathbf{p}^+ \geq 0]$ .
- $\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}' \cup \mathcal{C}''$ .
- **return**  $\mathbf{q}^-, \mathbf{p}^-, \mathbf{q}^+, \mathbf{p}^+, \mathcal{C}', s'$ .

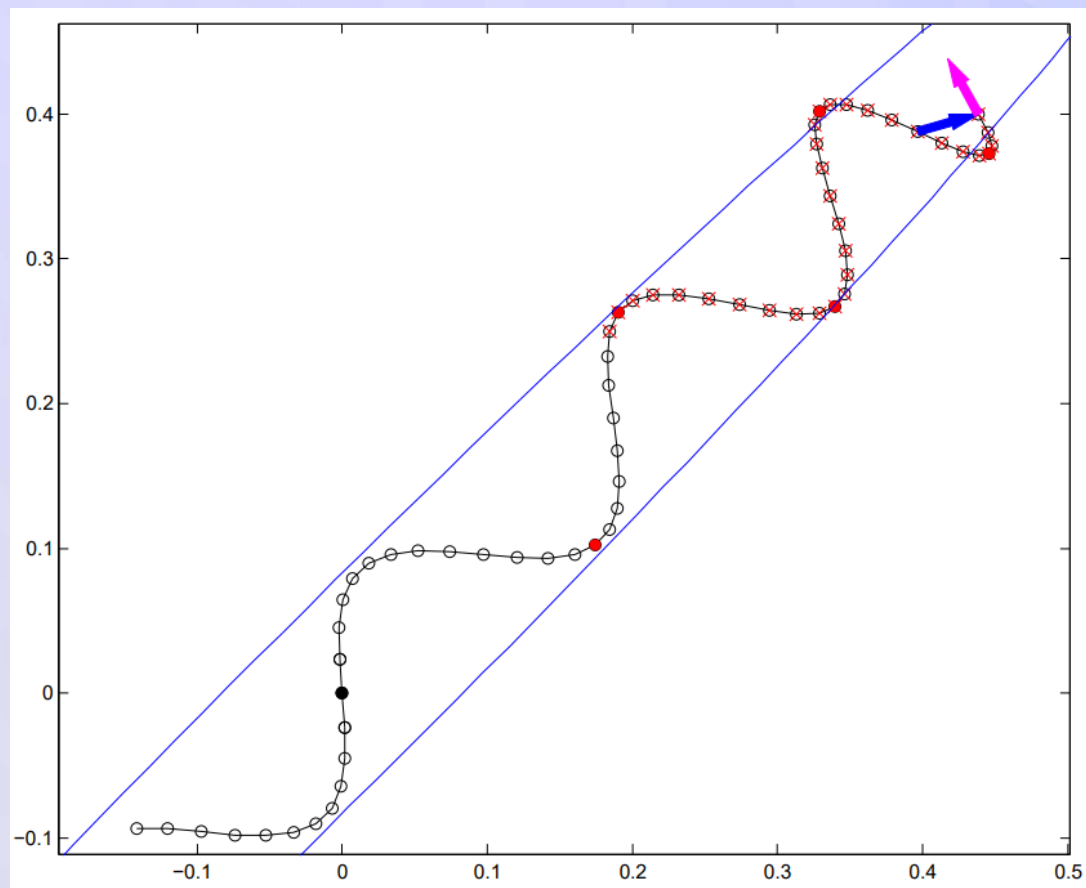
Построение первого поддерева

Построение второго поддерева

## Пример построения бинарного дерева координат и скоростей в NUTS







# Демонстрация практических примеров

---

## Заключение

1. Вспомнили ограничения алгоритма Метрополиса-Гастингса и рассмотрели новый подход к семплированию на основе методов статистической физики.
  2. Познакомились с термодинамической системой в термостате и выяснили, как её применить для семплирования из целевого распределения.
  3. Рассмотрели формализм Гамильтона для описания динамики механических систем и познакомились с его свойствами.
  4. Разобрались, как численно решать уравнения Гамильтона, и какие способы применяются для этого.
  5. Познакомились с алгоритмом НМС, рассмотрели его особенности и отличия от алгоритма Метрополиса-Гастингса.
  6. Познакомились с динамическими алгоритмами НМС и их особенностями.
-

# **Спасибо за внимание!**

Волгоград 2025

---