計算物理学B

第8回

野垣 康介、藤本 悠輝

講義予定

10/07 両名:四則演算
10/14 野垣:制御文(for, if)
10/21 野垣:関数
10/28 藤本:配列(numpy)
11/04 藤本:可視化(matplotlib)
11/11 野垣:数値微分
11/18 藤本:数値積分

〜中間レポート〜

12/09 野垣:モンテカルロ1
12/16 野垣:モンテカルロ2
12/23 藤本:微分方程式1
01/13 藤本:微分方程式2
01/20 藤本:微分方程式3
01/27 野垣:最適化
02/03 藤本:機械学習

〜期末レポート〜

はじめに

授業で用いるリンクをまとめておきます。

Google Colab

https://colab.research.google.com/?hl=ja

GitHub

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B

GitHub（今週の教材）

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week8

はじめに

GitHubからGoogle Colabへのノートブックの取り込みについて

Colabの画面で
[ファイル]→[ノートブックを開く]→タブ[GitHub]をクリック

GitHub上のノートブックのurlを打ち込むと、直接取り込めます。

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week8/week8.ipynb

[注意!]この状態では、GitHub上のファイルを開いただけで、
個人のドライブに保存されていません!
[ファイル]→[ドライブにコピーを保存]を実行すること。

数値積分と高次元の呪い

d次元の積分

$$I = \int dx_1 \cdots dx_d \, f(x_1, \cdots, x_d)$$

を中点公式などで数値積分する。

それぞれの軸をN分割すると、

$$\mathcal{O}(N^d)$$

の計算量!

高次元の呪い!

モンテカルロ積分

一次元積分

$$I = \frac{1}{b-a}\int_a^b dx\, f(x)$$

は区間 $[a,b]$ の一様分布での $f(x)$ の期待値とみなせる。

$$P(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & a \le x \le b \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x) P(x)$$

統計的手法で積分値を求めたい

モンテカルロ積分

区間 $[a, b]$ の一様分布に従う乱数の列 $x_1, x_2, \cdots, x_N$

を用いると、

$$
\begin{aligned}
I &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, f(x) P(x) \\
&= \langle f(x) \rangle \\
&= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f(x_k)
\end{aligned}
$$

$$
P(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & a \le x \le b \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}
$$

積分計算の乱数平均への置き換え

モンテカルロ積分

二次元積分

$$I = \frac{1}{(b-a)(d-c)} \int_a^b dx \int_c^d dy\, f(x, y)$$

区間 $[a, b] \times [c, d]$ の一様分布に従う乱数の列

$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_N, y_N)$ を用いて

$$I = \lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N} f(x_k, y_k)$$

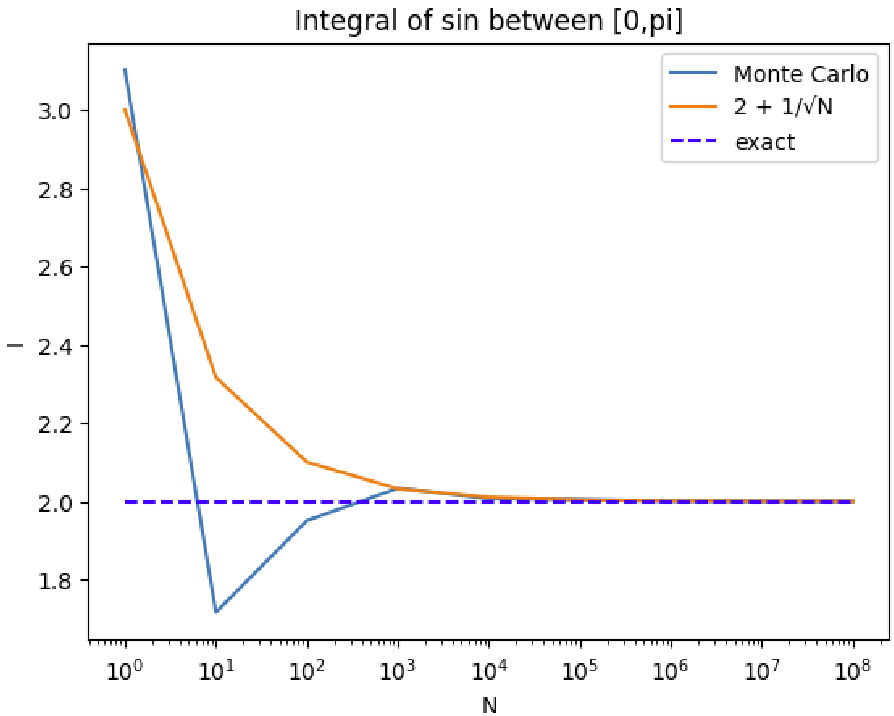
さらに高次元への拡張も容易

モンテカルロ積分

例として、三角関数の積分を考える。

$$I = \int_0^{\pi} dx \ \sin(x)$$

$$= \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} dx \, \pi \sin(x) = 2$$



モンテカルロ積分

モンテカルロ積分の収束性は $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ である。
（中心極限定理）

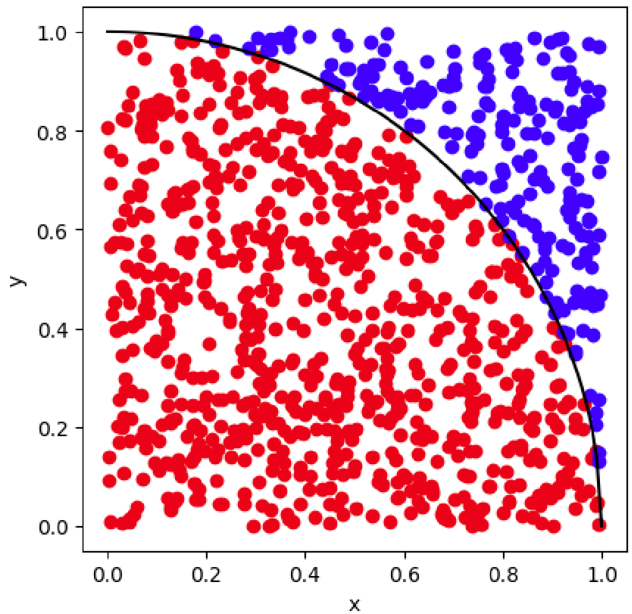
合成中点則の収束性は $\mathcal{O}(N^{-2/d})$ である。

低次元では、台形公式に類する手法、
高次元では、モンテカルロ積分の使い分けが重要

円の面積

$[0,1] \times [0,1]$ の領域の中から、乱数をN個

その内、ノルムが1以下になる数がK個

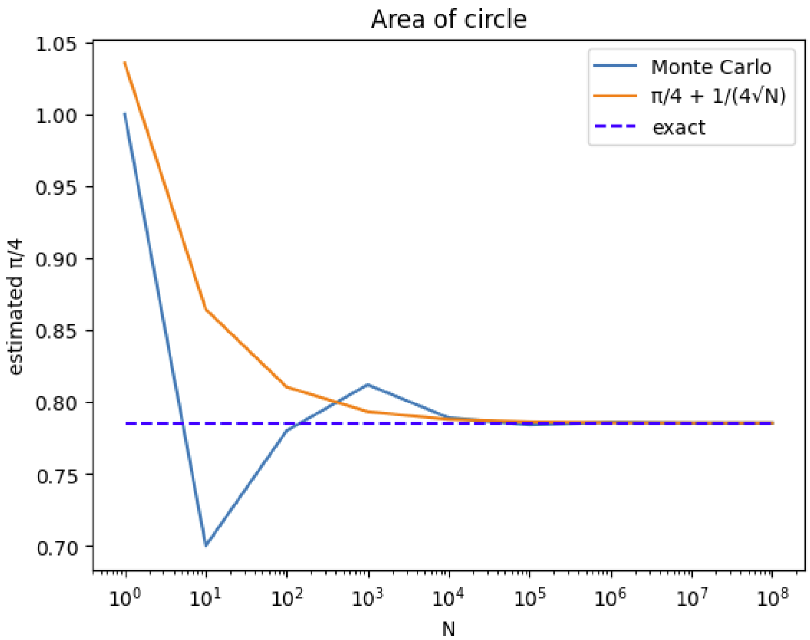


$$\lim_{N\to\infty} \frac{K}{N} = \frac{\pi}{4}$$

円の面積

$[0,1]\times[0,1]$ の領域の中から、乱数をN個

その内、ノルムが1以下になる数がK個

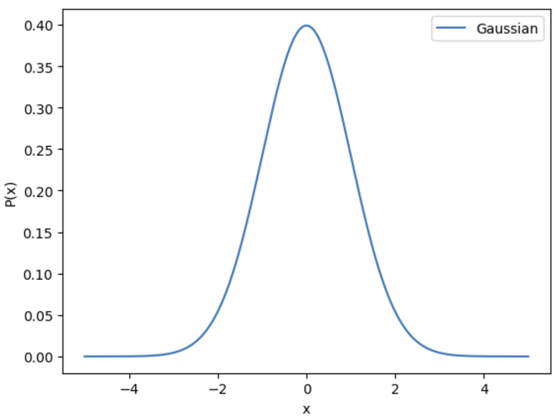


$$\lim_{N\to\infty}\frac{K}{N}=\frac{\pi}{4}$$

一般の分布関数

$f(x)$ が特定の領域で大きな値を取る関数の場合

一様分布に従う乱数（一様乱数）での平均は効率が悪い



$f(x) = g(x)P(x)$ と分解すると、

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)$$
$$= \langle g(x) \rangle_P$$

$P(x)$ に従う乱数が生成できれば、効率の良い計算が可能

マルコフ連鎖モンテカルロ（MCMC）

マルコフ連鎖モンテカルロ

やりたいこと

$x_1 \to x_2 \to \cdots \to x_k$ のようにランダムに数列を生成

N個の「履歴」$\{x_k\}_{k=1}^{N}$ を集めると、$P(x)$ を再現

これらの「履歴」に対する平均は $P(x)$ に対する平均

マルコフ連鎖モンテカルロの満たすべき条件

マルコフ性

既約性

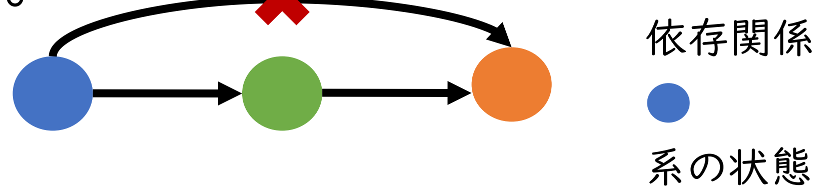
非周期性

詳細釣り合い

マルコフ連鎖モンテカルロ

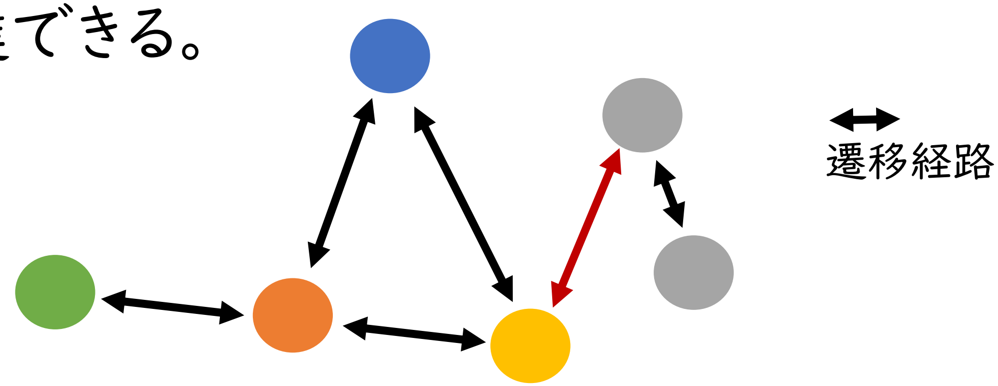
マルコフ性

$x_1 \to x_2 \to \cdots \to x_k$ のように数列を生成する際に、$x_k \to x_{k+1}$ となる確率 $T(x_k \to x_{k+1})$ が、k番目より過去の履歴に依存しない。



既約性

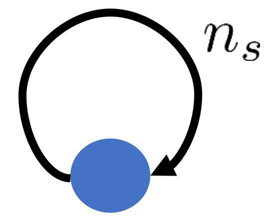
$x_1 \to x_2 \to \cdots \to x_k$ の過程において、どの点も必ず有限回で到達できる。



マルコフ連鎖モンテカルロ

非周期性

$x \to x$ となるステップ数を n_s とすると、
可能な n_s の最大公約数が1である。



詳細釣り合い

$$P(x)T(x \to x') = P(x')T(x' \to x)$$

を満たすこと。

これら4つの条件を満たしていれば、任意の x から更新を
繰り返し、十分ステップ数が経つと、履歴が $P(x)$ を与える。

メトロポリス法

以下、確率分布は以下の形であるとする。

$$P(x) = \frac{e^{-S(x)}}{Z} \qquad Z = \int dx\, e^{-S(x)}$$

実際には、「作用」$S(x)$ だけ知っている場合がほとんど。

メトロポリス法

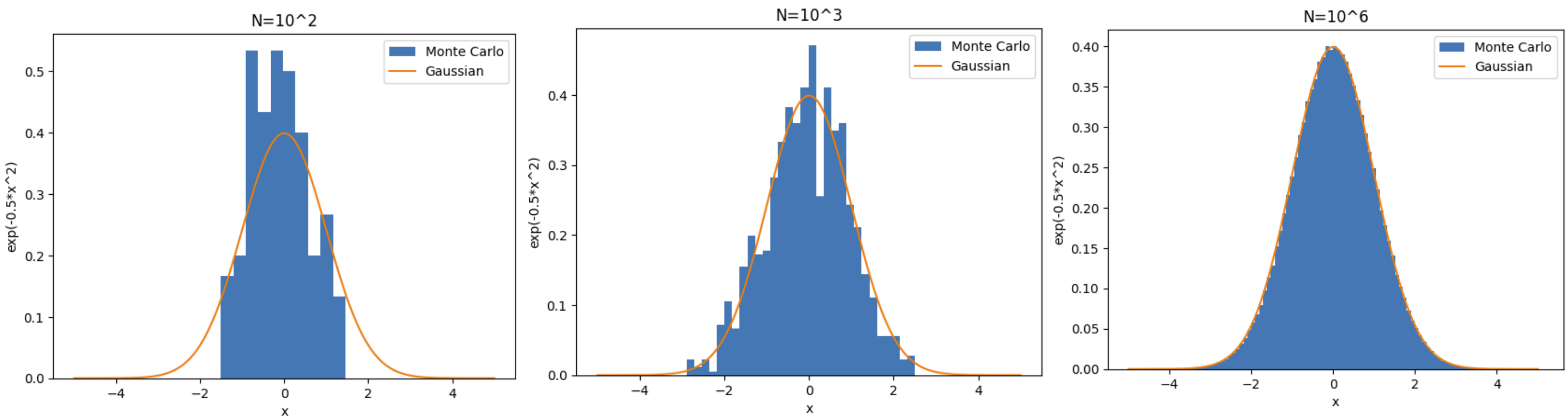
① 乱数 Δx を用いて、$x' = x_k + \Delta x$ を x_{k+1} の候補として提案。

② 確率 $\min(1, e^{S(x_k)-S(x')})$ で採択。

③ 採択されれば、$x_{k+1} = x'$ 採択されなければ、$x_{k+1} = x_k$

メトロポリス法

例として、$S(x) = \dfrac{x^2}{2}$ の場合を考える。

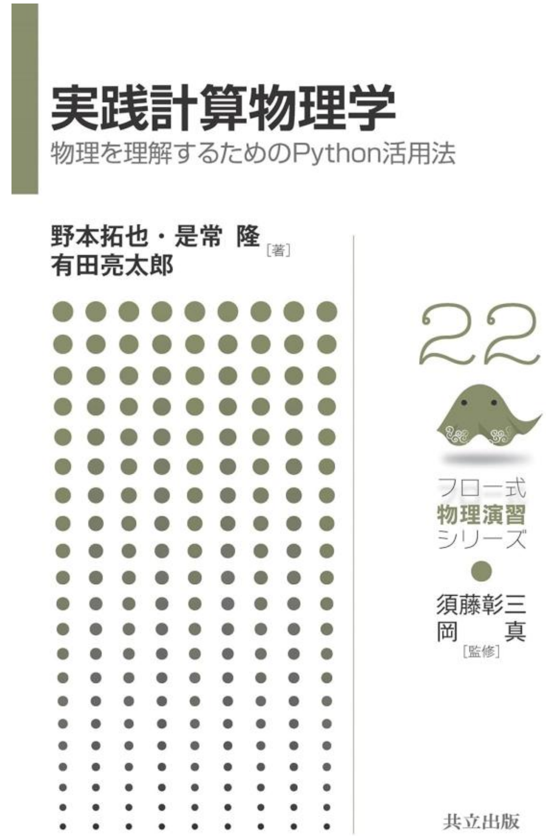


初期値x = 0、更新幅は[-1,1]

Nの増大と共に、ある確率分布に収束

参考書籍


花田政範・松浦 壮
Masanori HANADA So MATSUURA
ゼロからできる
MarkovChainMonteCarlo
MCMC
マルコフ連鎖モンテカルロ法の実践的入門
講談社


実践計算物理学
物理を理解するためのPython活用法
野本拓也・是常 隆 [著]
有田亮太郎
22
フロー式
物理演習
シリーズ
須藤彰三
岡 真
[監修]
共立出版

実習タイム

例題

- d次元単位球の体積をモンテカルロ法により求め、

  解析解 $I = \dfrac{\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2}+1)}$ と比較せよ。

  import mathをすれば、math.gamma( )から
  ガンマ関数の値を知ることができる。

- $S(x) = -\log\left(e^{-\frac{1}{2}(x-3)^2} + e^{-\frac{1}{2}(x+3)^2}\right)$ とした時の

  確率分布をメトロポリス法により求めよ。

- 疑似乱数について検索せよ。