

hybrid Monte Carlo (hamiltonian)

の紹介

@プログラマのための数学勉強会 Nov, 2015

... 数学というより計算方法の話です

Kenji Ogawa topazS50@github

総研大 -> ポスドク (素粒子物理学, LQCD) -> AI

New One-Flavor Hybrid Monte Carlo Simulation Method for Lattice Fermions with gamma-five Hermiticity, PLB 2011

楕円曲線、数学オリンピックに興味があります

コード [topazS50@github intro_hmc](https://github.com/topazS50/intro_hmc)

Outline

Hybrid Monte Carloの目的(2)

Base of HMC: Detailed Balance (6)

Realisation: Metropolis Method(3)

Example - Metropolis

Building Block of HMC: Molecular Dynamics(3)

Realisation: LeapFrog

Example - HMC

HybridMonteCarloの目的

あるタイプの積分

xの次元が大きい時
単純なグリッド分割
の積分は不可能

$$I = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x})$$

$$Z = \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})}$$

$$\mathbf{x} = (x_0, x_1, \dots, x_{N-1}) \quad N \gg 1$$

サンプリング

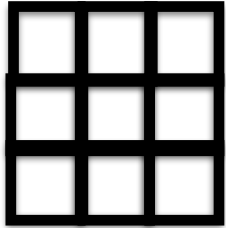
$$I \sim \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_{i=0}^{N_{\text{sample}}-1} g(\mathbf{x}_i)$$

$$P(\mathbf{x}) \propto e^{-f(\mathbf{x})}$$
$$N_{\text{sample}} \rightarrow \infty$$

MonteCarloやMetropolisとはどう違うの？

=>効率がいい(これに関して後の方で)

$$I = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x})$$



の用途

$f(x)$, $g(x)$ とともに複雑

格子場の理論

自発的対称性の破れ, Higgs, QCD(クォーク閉じ込め)

ランダム行列理論

~強相関系の低エネルギー極限

(制約)ボルツマンマシン

Deep-learning

分布が $P(x)$ になるような
 $x_0, x_1, \dots, x_{N\text{sample}}$
を生成するには？

十分条件

detailed balance

実現方法の一つ

Metropolis法

Detailed Balance

$$P_i P(i \rightarrow j) = P_j P(j \rightarrow i)$$

欲しいもの P_i, P_j : 状態 i, j になる確率

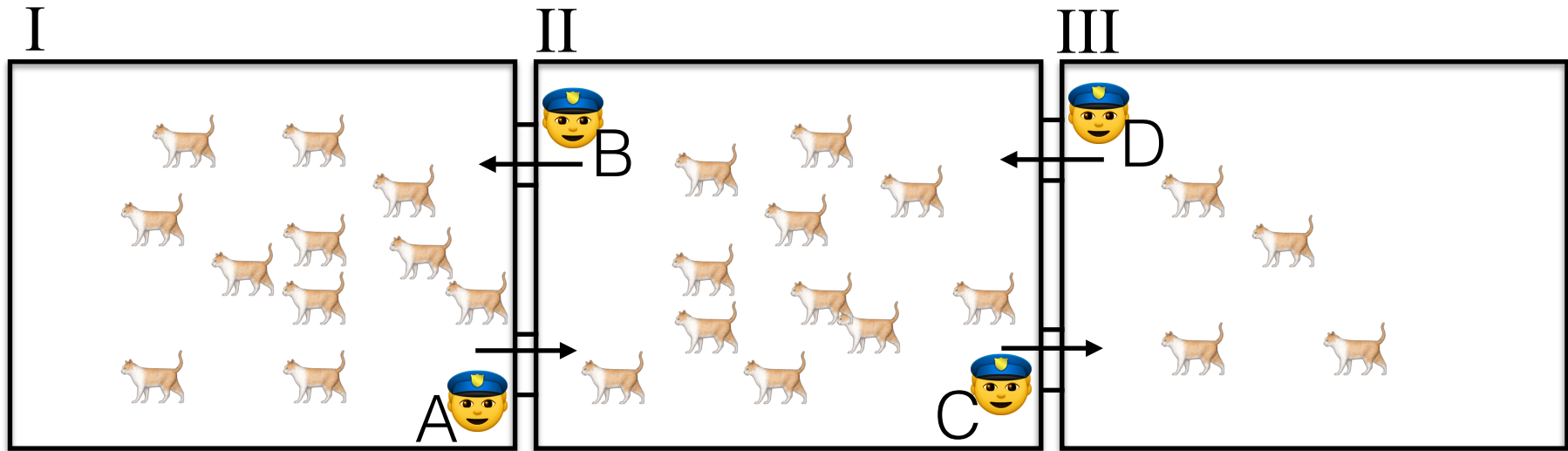
エンジニアリング
で作る $P(i \rightarrow j)$: 状態が i から j に遷移する確率

$P(i \rightarrow j)$ を調節すれば自然と P_i は調節される
(前提条件はあります)

i から j となる粒子の総量と j から i になる粒子の総量が同じ
なら巨視的には状態は同じ

Detailed Balance

$$P_i P(i \rightarrow j) = P_j P(j \rightarrow i)$$



👮はそれぞれ決まった割合で🐈を通過させる。

e.g (A:1, B:1/3, C:1, D:1/2) \rightarrow I:II:III=1:6:6

=> 🐈の分布は👮によってコントロールできる。

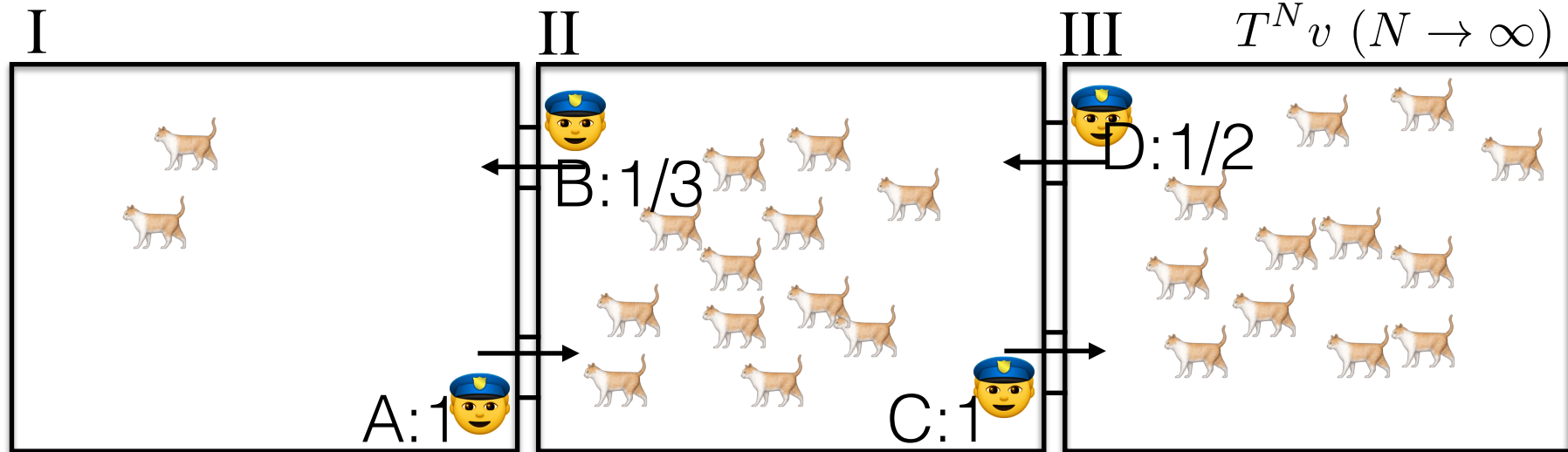
Detailed Balance

遷移行列	I	II	III
I	0	1/6	0
II	1	1/3	1/2
III	0	1/2	1/2

$$P_i P(i \rightarrow j) = P_j P(j \rightarrow i)$$

分布はこの行列の最大固有値
に対応する固有ベクトル

$T^N v (N \rightarrow \infty)$ 冪乗法

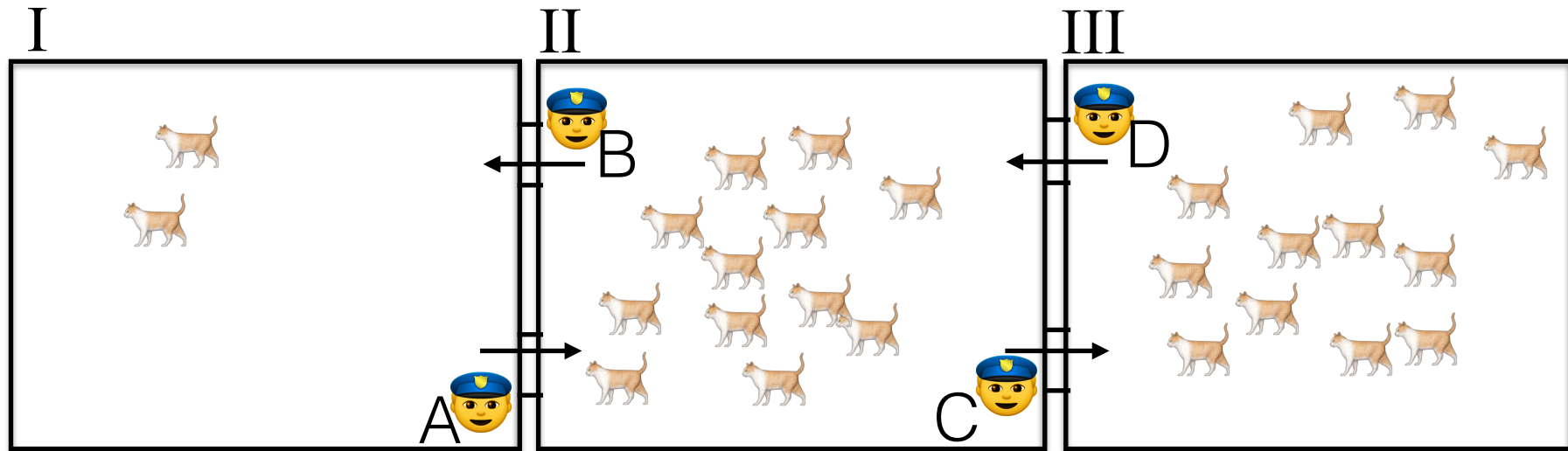


👮はそれぞれ決まった割合で🐈を通過させる。

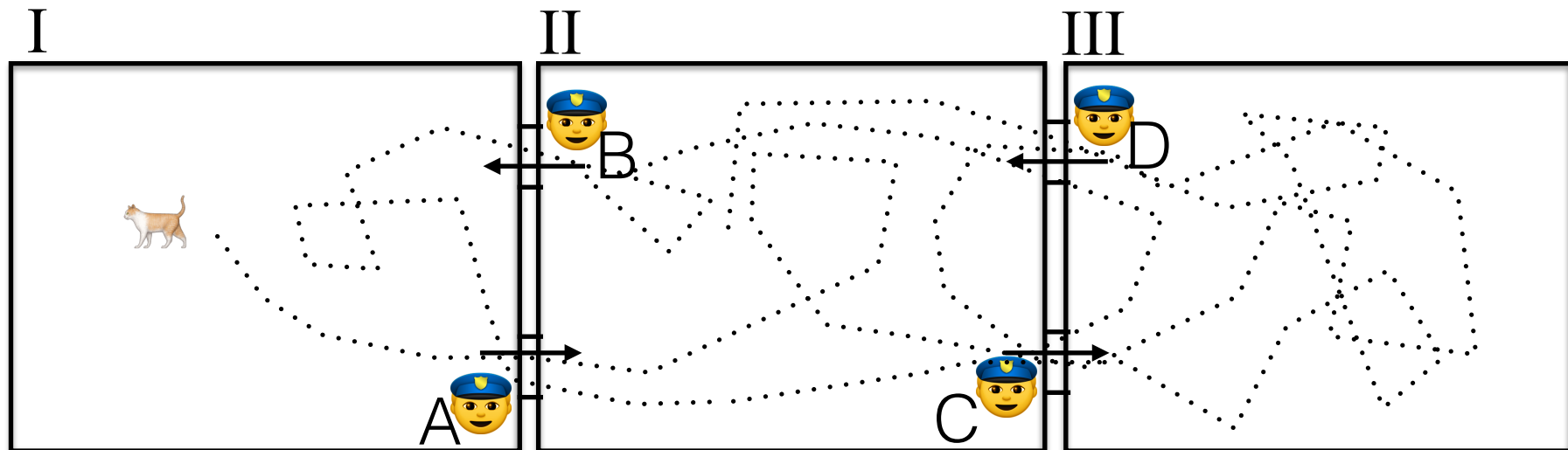
e.g (A:1, B:1/3, C:1, D:1/2) \rightarrow I:II:III=1:6:6

=> 🐈の分布は👮によってコントロールできる。

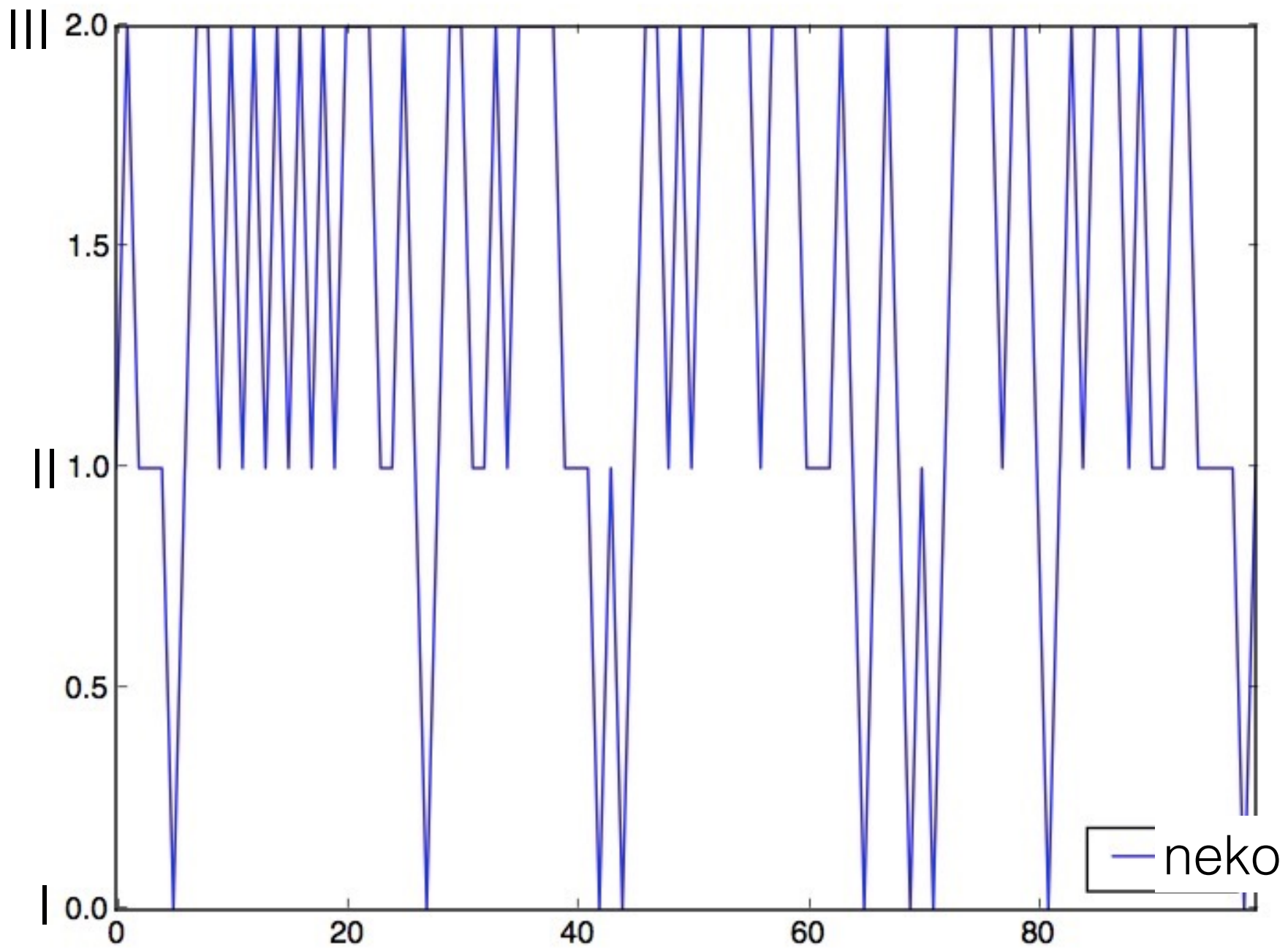
Markov Chain MonteCalro



たくさんいる 猫の分布 = 一匹の猫の長い時間の軌跡*



*エルゴード性が必要です



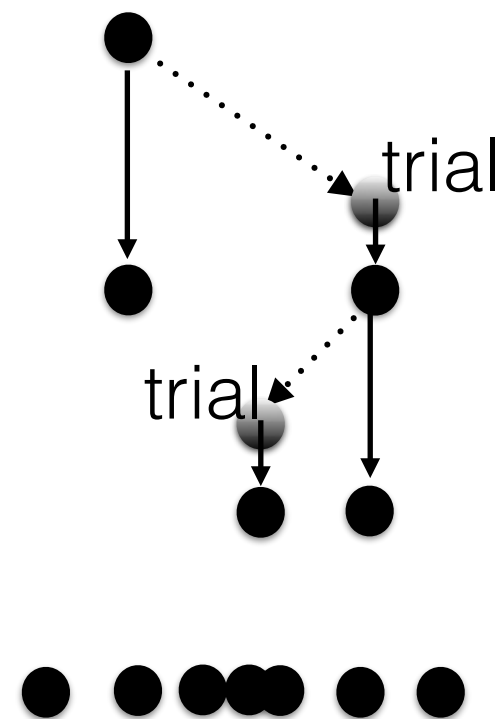
コード topazS50@github intro_hmc

Metropolis Test

$$I = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_{i=0}^{N_{\text{sample}}-1} g(x)$$

MCMCでDetailed Balanceを実現する

0. 初期状態 x を選ぶ
1. Trial State x' を選ぶ*
2. $0 \sim 1$ の一様乱数 r を選ぶ
3. $e^{-f(x')}/e^{-f(x)} > r$ なら $x := x'$, そう
でなければ x はそのまま
4. x の値を記録
5. 1. - 4.を何回もやる
6. 記録した x について $g(x)$ を計算



*ここでは x' は x とは別のものという意味で使います。微分ではありません。

$e^{-f(x')}/e^{-f(x)} > r$ なら $x := x'$, そうでなければ x はそのまま

$f(x) > f(x')$ のとき

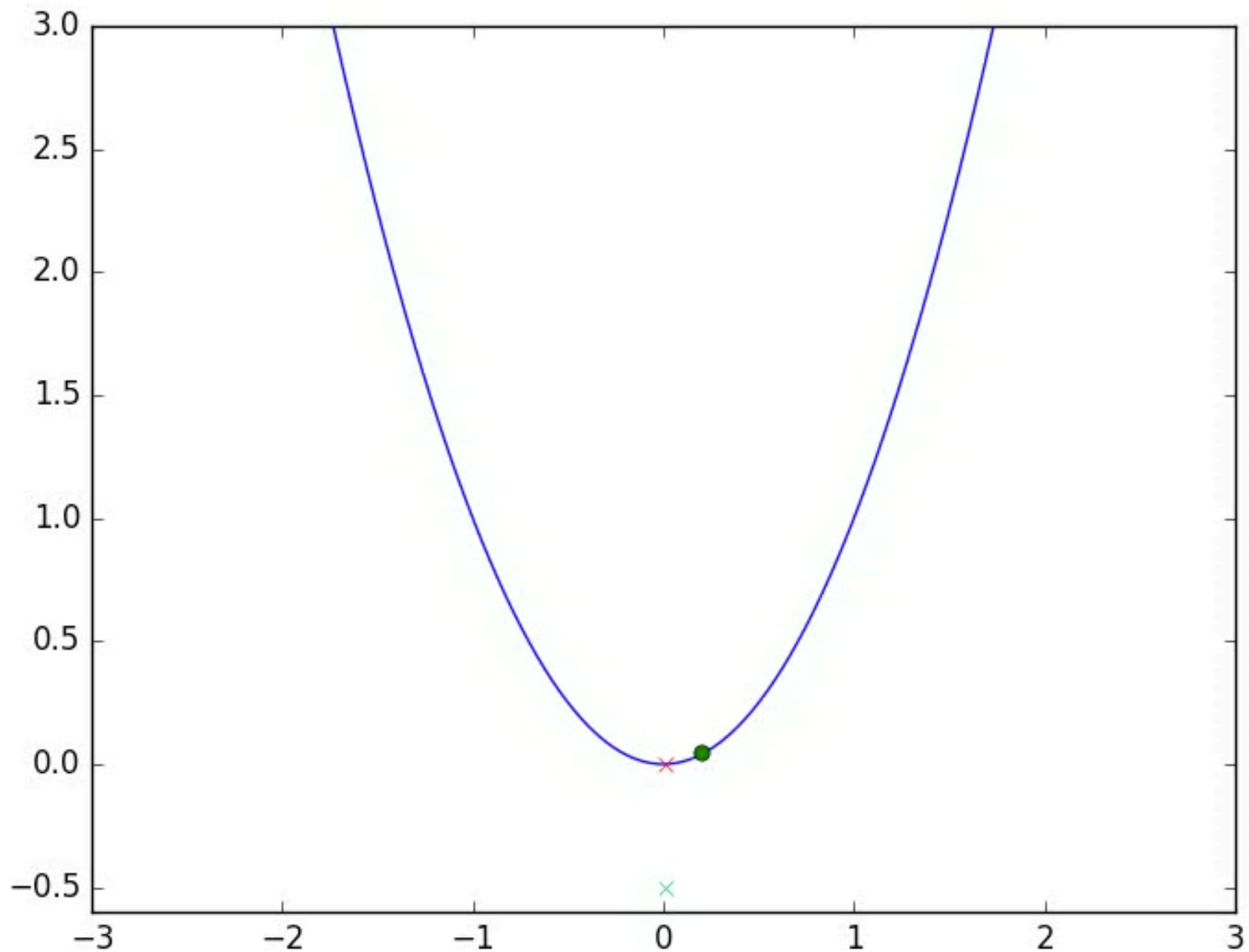
$$P(x \rightarrow x') = 1, P(x' \rightarrow x) = e^{-f(x)}/e^{-f(x')}$$

$f(x) < f(x')$ のとき

$$P(x \rightarrow x') = e^{-f(x')}/e^{-f(x)}, P(x' \rightarrow x) = 1$$

Detailed Balance !

$$e^{-f(x)} P(x \rightarrow x') = e^{-f(x')} P(x' \rightarrow x)$$



demo metropolis
`$python mtpl.py; python anim_mtpl.py`

topazS50@github
intro_hmc

Acceptance Ratio

0. 初期状態 x を選ぶ
1. Trial State x' を選ぶ
2. $0 \sim 1$ の一樣乱数 r を選ぶ
3. $\frac{e^{-f(x')}}{e^{-f(x)}} > r$ なら $x := x'$, そうでなければ x はそのまま
4. x の値を記録
5. 1. - 4.を何回もやる
6. 記録した x について $g(x)$ を計算

Trial State x' はどう選んでもいいが

$e^{-f(x')}/e^{-f(x)}$ が小さいとずっと
 x は同じまま

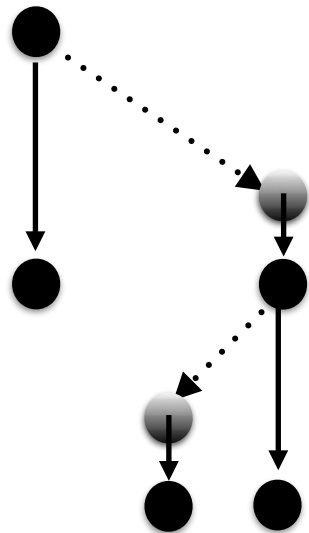
$x' := x + \varepsilon$ とするのが定石

少しずつしか進めない

ε は $+/-$ がありうるので戻ってくる

効率よくできないか

=>HMC



HMC

$$\frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_{\text{HMC}}} \int d\mathbf{p} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{p}^2} \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x})$$

pとxを同時にアップデートして

$\frac{1}{2} p^2 + f(x)$ が変わらないようにする

Molecular Dynamics

Detailed Balanceは保証しないといけない

Metropolis Test

Molecular Dynamics

$$H(x, p) = \frac{1}{2} p^2 + f(x)$$

$$\frac{d}{dt} H(x(t), p(t)) = \frac{dx}{dt} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{dp}{dt} \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{dx}{dt} \frac{df(x)}{dx} + \frac{dp}{dt} p$$

$$\frac{dx}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{df(x)}{dx} \quad \text{ならば} \quad H \text{は変化しない} \quad dH/dt = 0$$

(ハミルトニアンの保存)

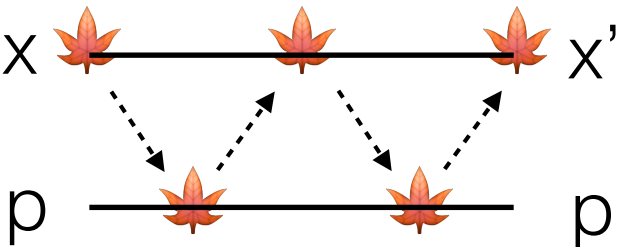
シミュレーションでやるときは

Leap Flogを使う*

reversibilityがDetailed
Balance には必要

$$\mathbf{x} := \mathbf{x} + \epsilon_x \mathbf{p}$$

$$\mathbf{p} := \mathbf{p} - \epsilon_p \partial f(\mathbf{x}) / \partial \mathbf{x}$$



シミュレーションのパラメータ

$$\epsilon_x = \lambda_t \quad \lambda_t \quad N_{\text{step}}$$

$$\epsilon_p = \frac{\lambda_t}{2}, \lambda_t, \dots, \lambda_t, \frac{\lambda_t}{2}$$

*Omelyanなど発展形あり

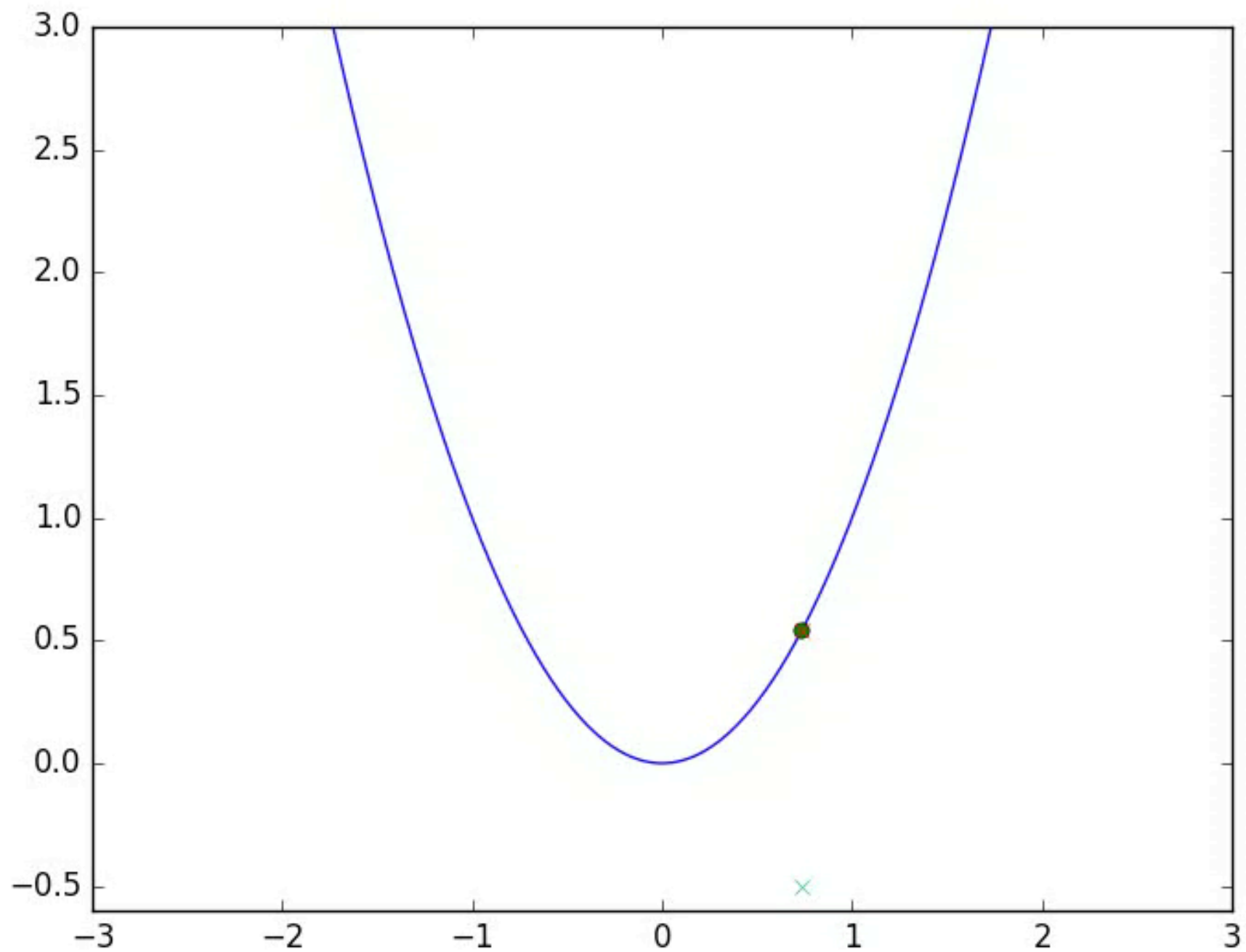
HMC

$$\frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z_{\text{HMC}}} \int d\mathbf{p} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{p}^2} d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x})$$

$$H(x, p) = \frac{1}{2} p^2 + f(x)$$

0. 初期状態 x を選ぶ

1. p を $\exp(-1/2 p^2)$ の確率で生成
2. leap frog を使って $(x, p) \rightarrow (x', p')$ を得る
4. $0 \sim 1$ の一様乱数 r を選ぶ
5. $e^{-H(x', p')} / e^{-H(x, p)} > r$ なら $x := x'$, そうでなければ x はそのまま
6. x の値を記録
7. 1. -7.を何回もやる
8. 記録した x について $g(x)$ を計算



demo hmc

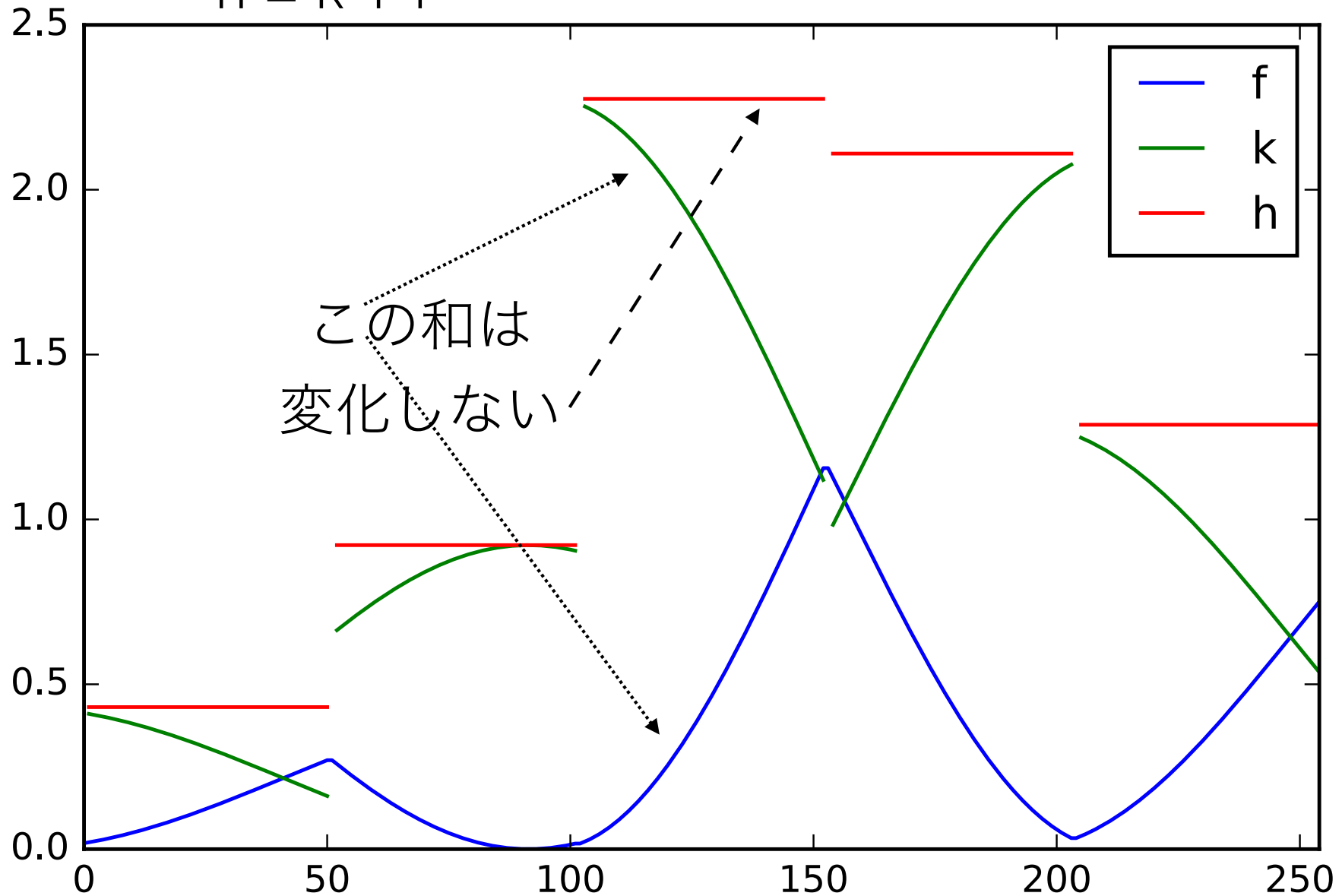
コード topazS50@github intro_hmc

Conservation of Hamiltonian in HMC

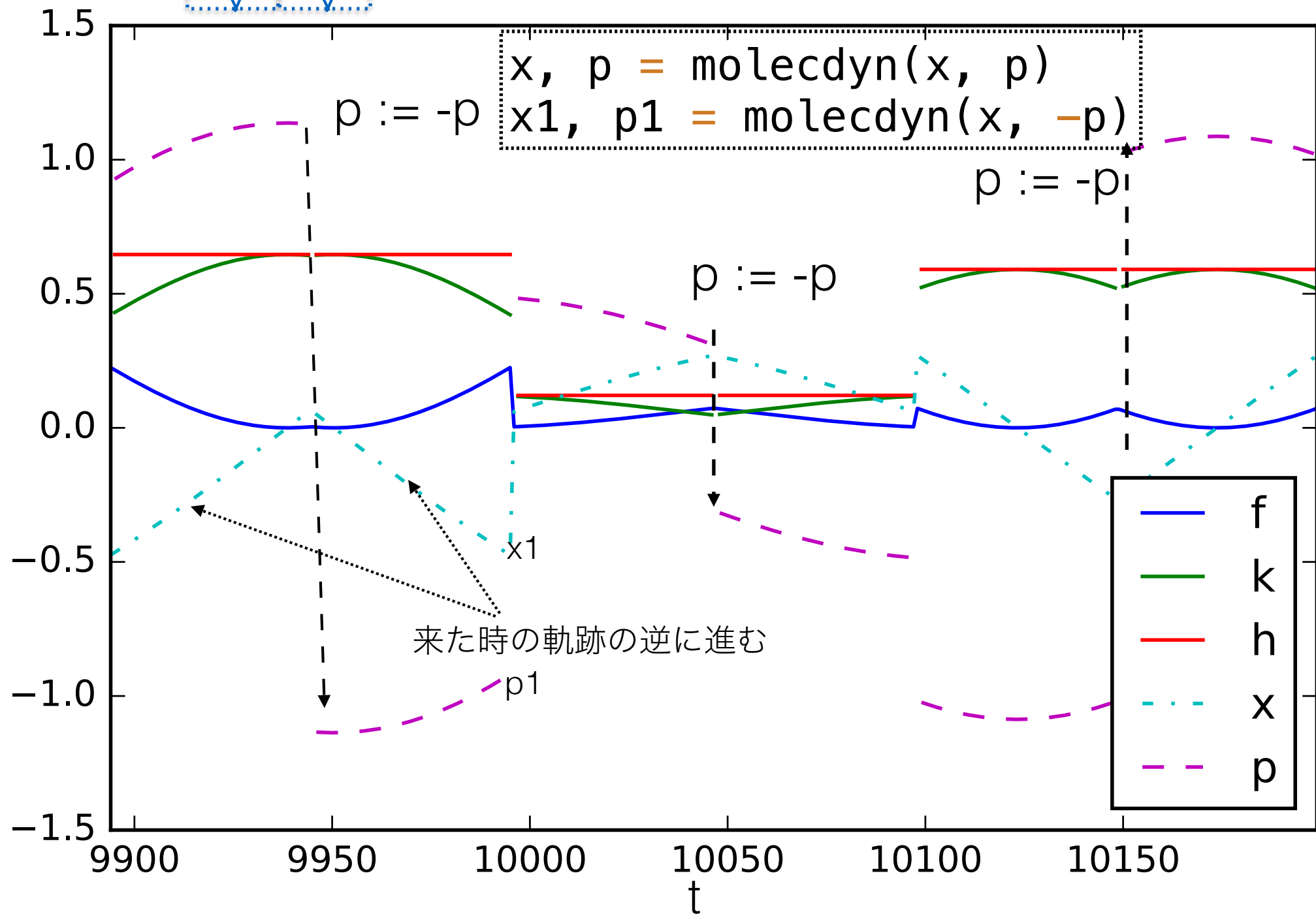
$$k = 0.5 * p^2$$

$$f = f(x)$$

$$h = k + f$$



Leap Frog. Reversibility のデモンストレーション



まとめ

目的
$$I = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x}) \sim \frac{1}{N_{\text{sample}}} \sum_{i=0}^{N_{\text{sample}}-1} g(x)$$

Detailed Balance with $P(\mathbf{x}) = e^{-f(\mathbf{x})}$

$$P(x) P_{\text{transition}}(x \rightarrow x') = P(x') P_{\text{transition}}(x' \rightarrow x)$$

Metropolis Test

$$x_{\text{next}} := x_{\text{trial}} \quad \text{with probability} \quad \min \left(1, \frac{P(x_{\text{trial}})}{P(x)} \right) \quad \text{else} \quad x_{\text{next}} := x$$

HMC
$$\int d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x}) \rightarrow \int d\mathbf{p} d\mathbf{x} e^{-p^2} e^{-f(\mathbf{x})} g(\mathbf{x})$$

Molecular Dynamics
$$\frac{dx}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{df(x)}{dx}, \quad \frac{dH}{dt} = 0$$