

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

hybrid Monte Carlo法

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

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

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

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

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(2)

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

metropolis_gaussian.py

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

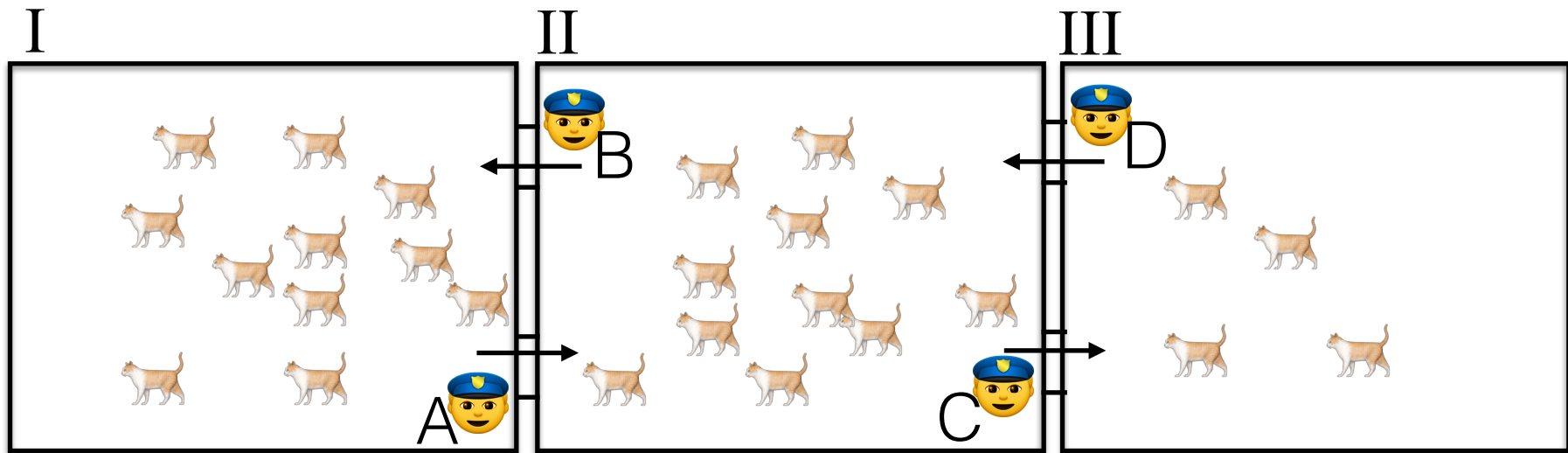
エンジニアリング
で作る $P(i \rightarrow j)$: 状態が i から j に遷移する確率

$P(i \rightarrow j)$ 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。

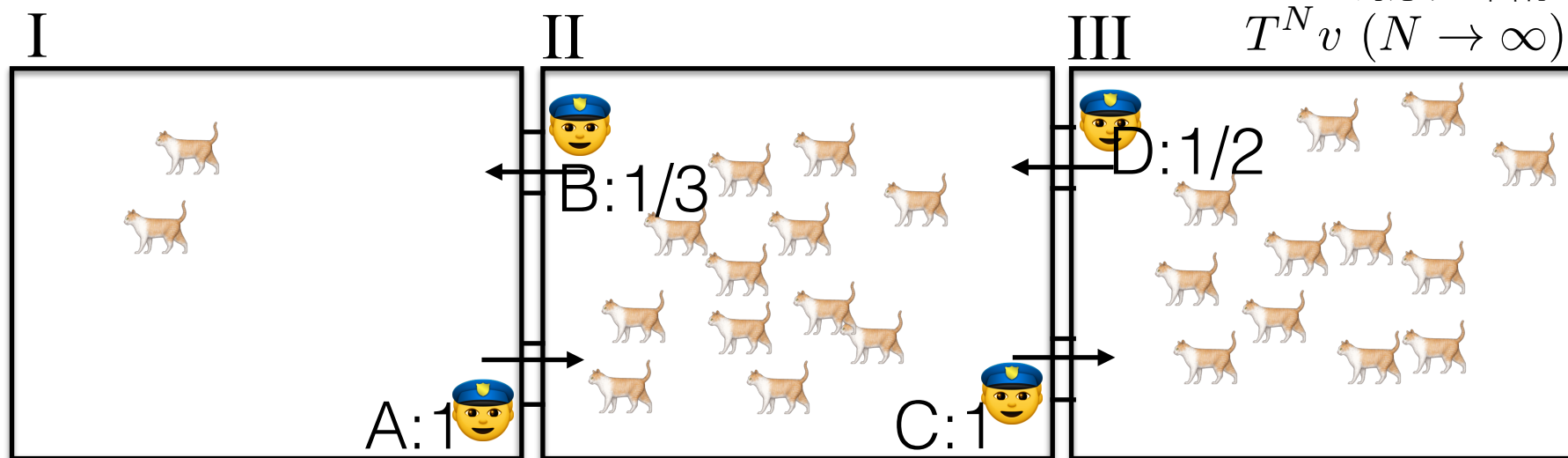
Detailed Balance

| | 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

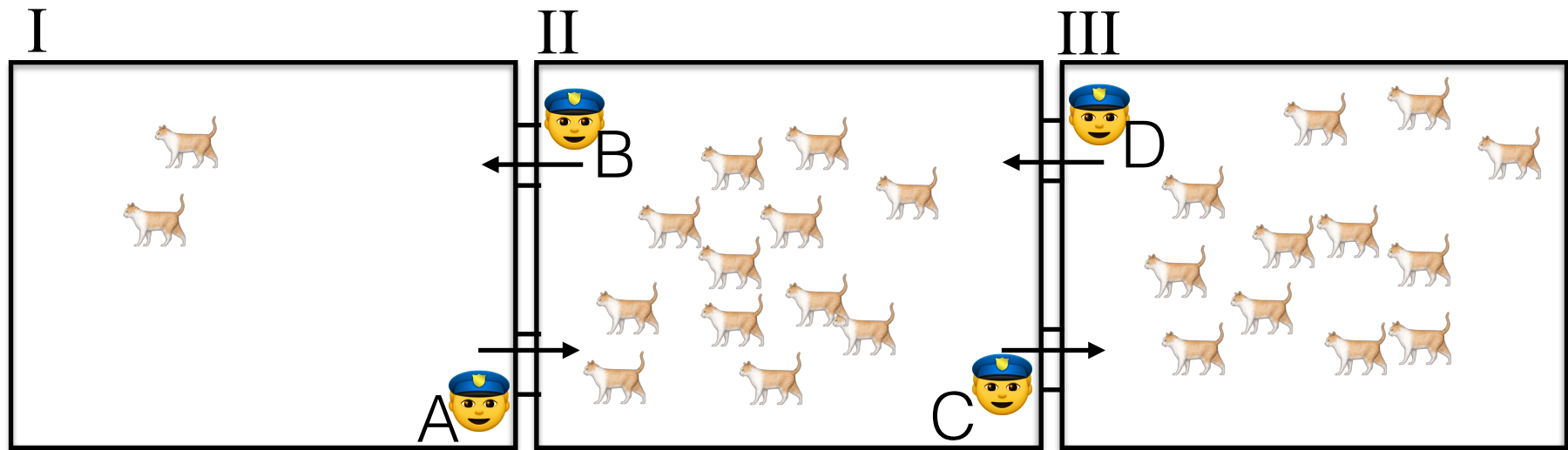




👮はそれぞれ決まった割合で🐈を通過させる。

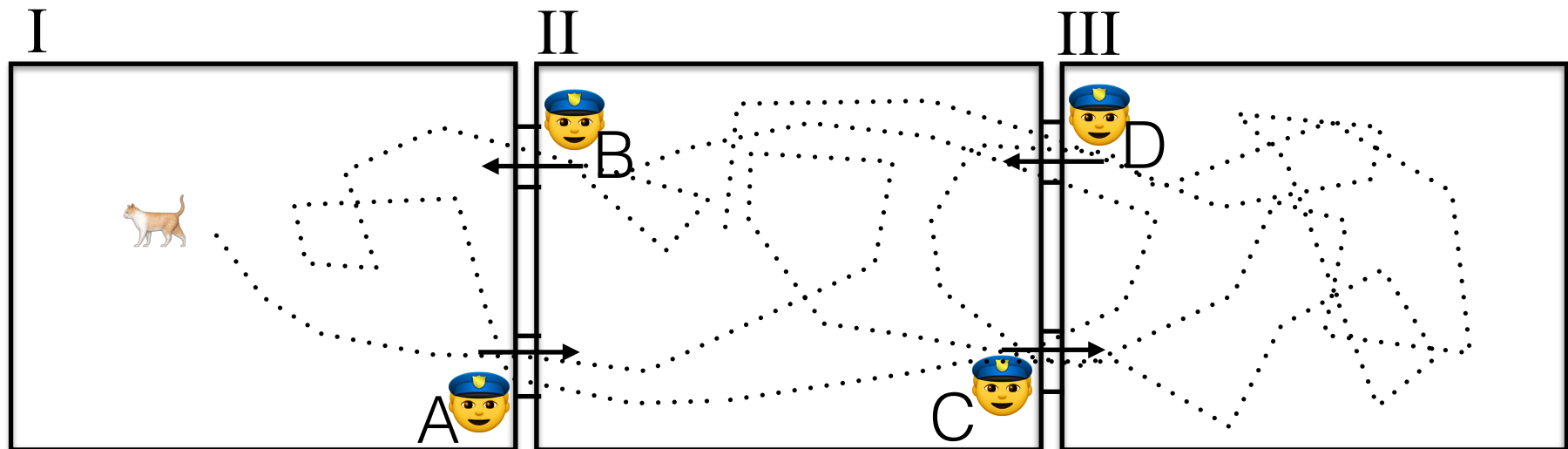
e.g (A:1, B:1/3, C:1, D:1/2) \rightarrow I:II:III=1:6:6

=> 🐈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  の分布 = 一匹の  の長い時間の軌跡*



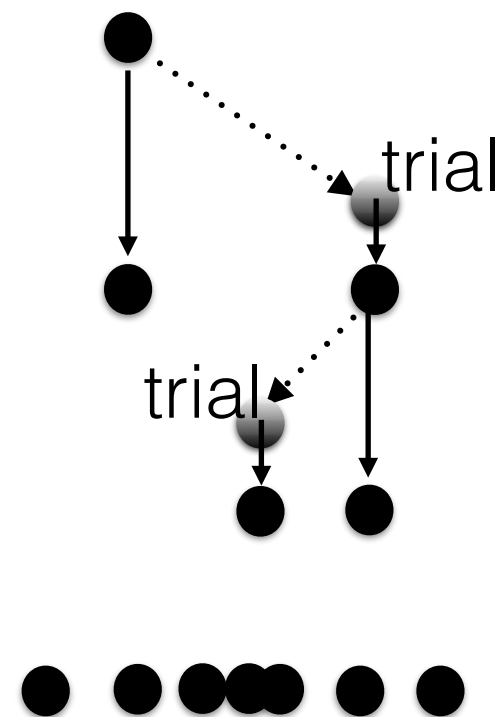
*エルゴード性が必要です

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

Acceptance Ratio

0. 初期状態 x を選ぶ
1. Trial State x' を選ぶ
2. 0~1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

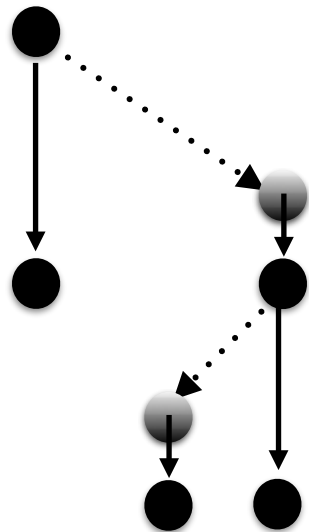
$x' := x + \varepsilon$ とするのが定石

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

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

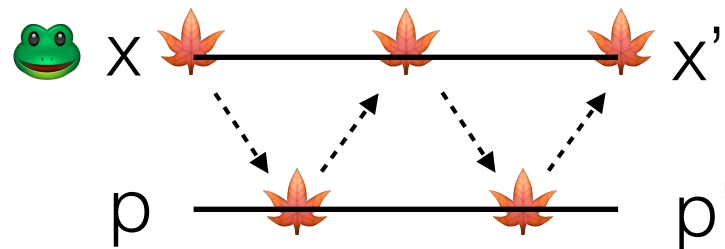
$$\frac{d}{dt} H(x(t), p(t)) = \frac{dx}{dt} \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{dp}{dt} \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{dx}{dt} \frac{df(x)}{dx} + \frac{dp}{dt} p$$

$$\frac{dx}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{f'(x)}{1} \quad \text{ならば } H \text{ は変化しない}$$

(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



demo hmc

まとめ

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

Detailed Balance

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

Metropolis Test

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

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

$$\text{Molecular Dynamics} \quad \frac{dx}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{f(x)}{dx}$$