# Monte-Carlo metody



CGG MFF UK Praha

pepca@cgg.mff.cuni.cz

http://cgg.mff.cuni.cz/~pepca/

# Monte Carlo integrace

**Odhadovaný integrál:**

$$\boxed{I = \int_0^1 f(x)\,dx}$$

Předpoklad: $f(x) \in L^2(0,1)$

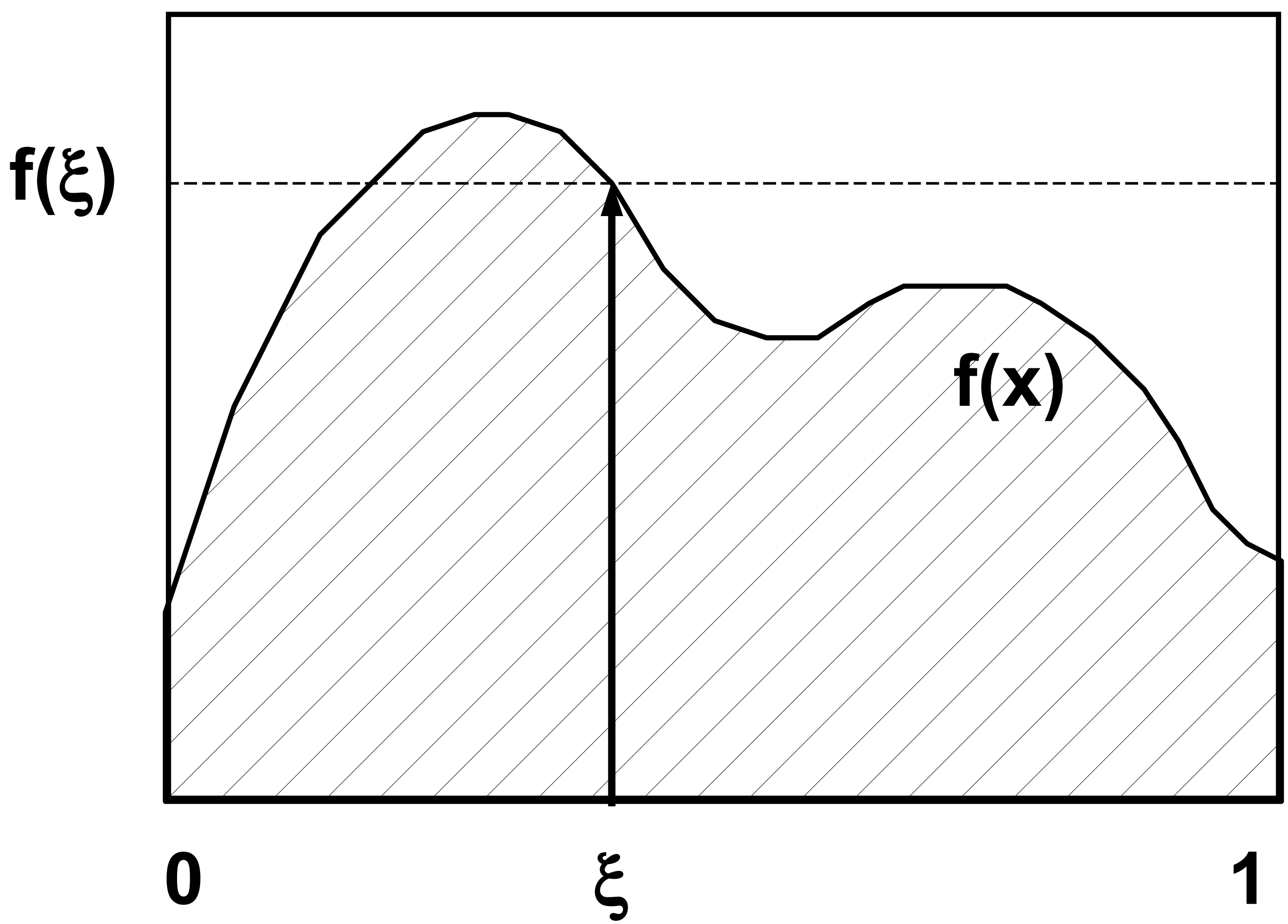
Je-li ξ náhodné číslo s distribucí **R(0,1)**, pak **f(ξ)** je tzv. **primární odhad** integrálu:

$$\langle I \rangle_{prim} = f(\xi)$$

Odhad je **nestranný**, neboť:

$$E\left(\langle I \rangle_{prim}\right) = \int_0^1 f(x)\,dx = I$$

# Primární odhad určitého integrálu



# Rozptyl odhadu

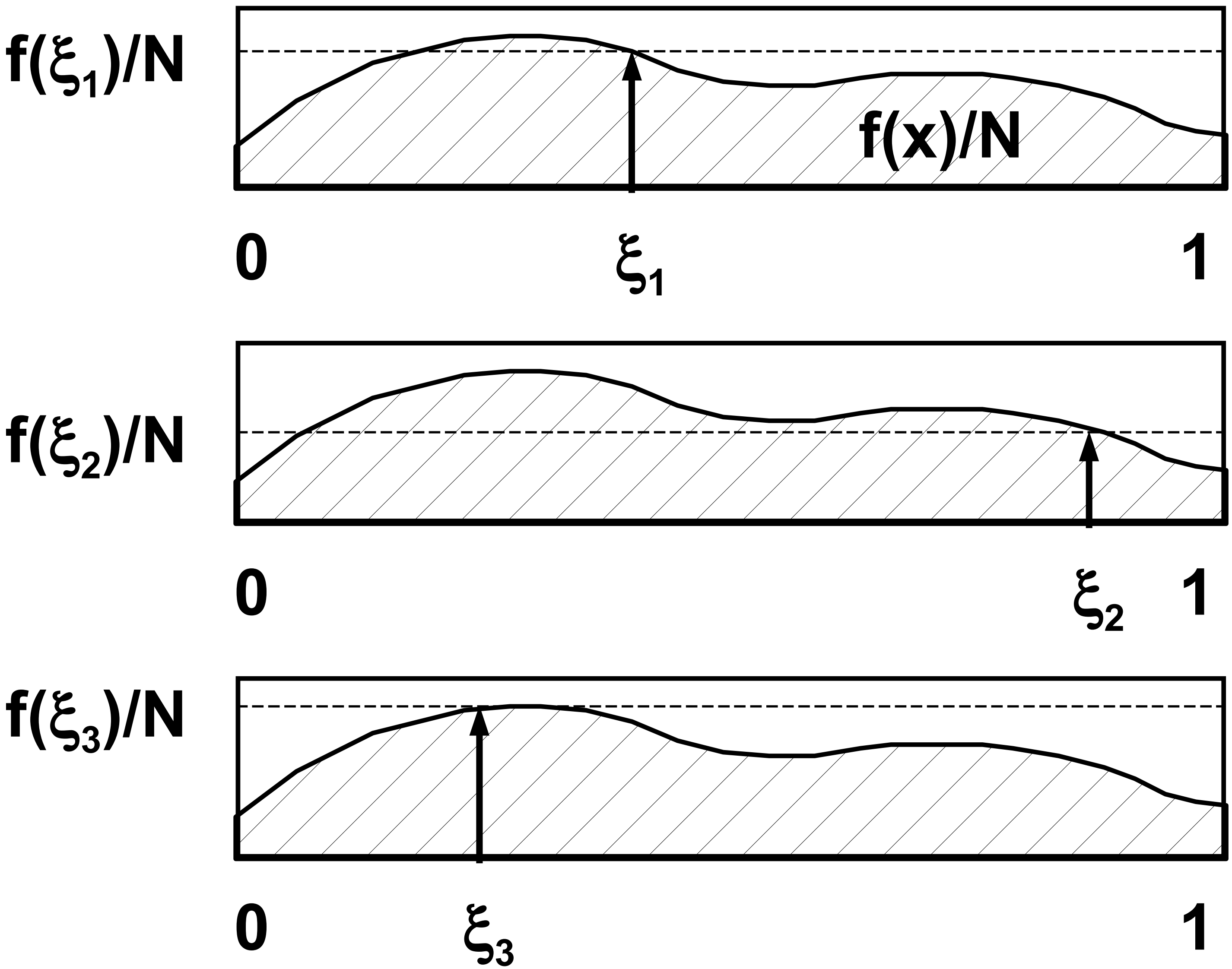
Měřítkem kvality odhadu je jeho **rozptyl** (nebo standardní odchylka):

$$V\left(\langle I \rangle_{prim}\right) = \sigma^2_{prim} = \int_0^1 \left| f(x) - I \right|^2 dx = \int_0^1 f(x)^2 dx - I^2$$

(pro nestranný odhad)

Při výpočtu **jediného vzorku** je rozptyl výsledku příliš velký!

# Sekundární odhad integrálu



# Sekundární odhad

Rozložení integrálu na součet **N členů**:

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{N} \int_0^1 \frac{f(x)}{N}\,dx = \sum_{i=1}^{N} I_i$$

**Sekundární odhad** integrálu:

$$\langle I \rangle_{sec} = \sum_{i=1}^{N} \langle I_i \rangle_{prim} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)$$

Sekundární odhad je také **nestranný**.

# Rozptyl sekundárního odhadu

$$\sigma^2_{sec} = \int_0^1 \cdots \int_0^1 \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i) \right]^2 dx_1 \ldots dx_N - I^2 =$$

$$= \frac{1}{N} \int_0^1 f^2(x)\, dx - \frac{1}{N} I^2 =$$

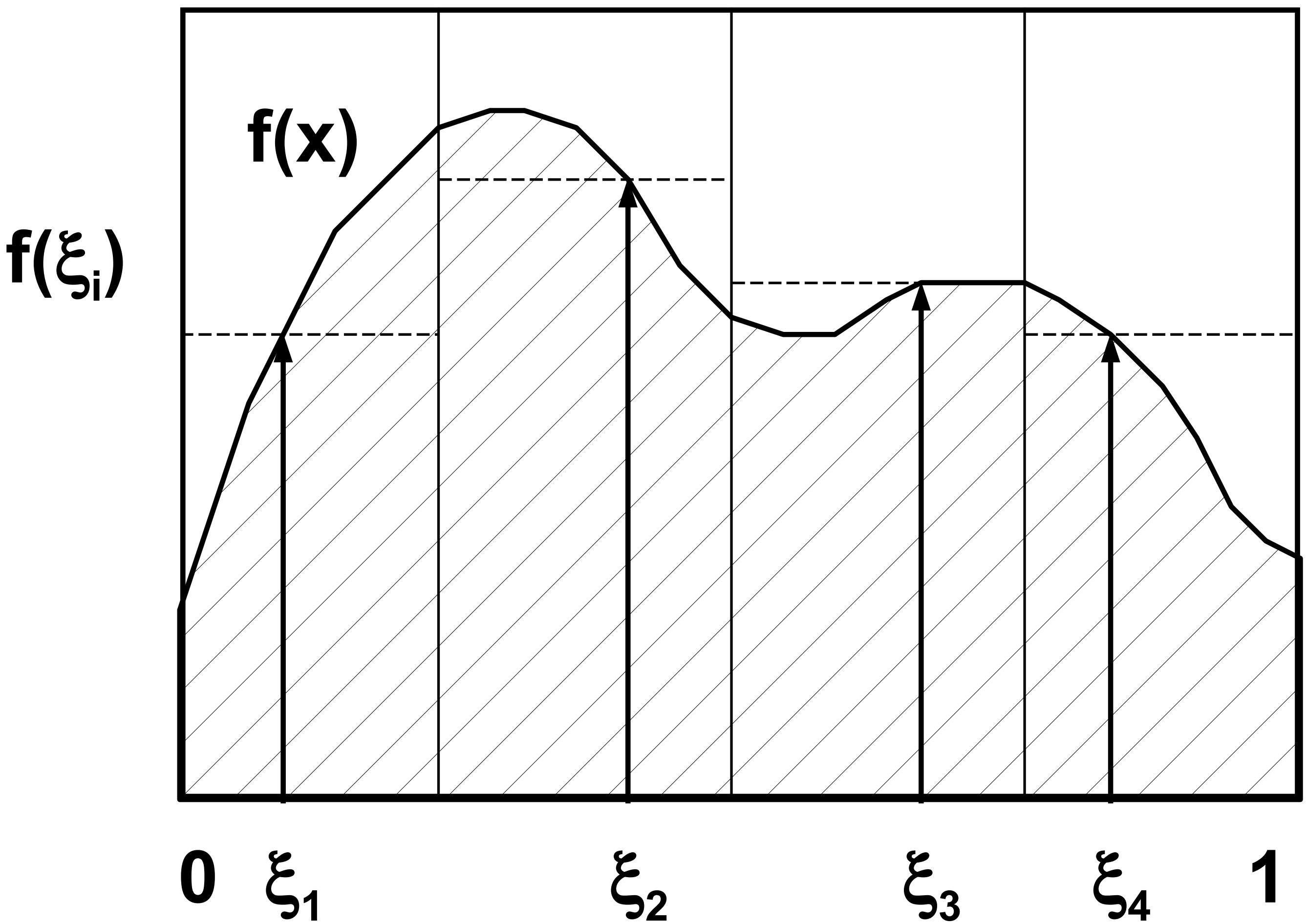
$$= \frac{\sigma^2_{prim}}{N}$$

... std. chyba je √**N-krát menší**!
(konvergence **1/√N**)

# Vzorkování po částech

- při výběru množiny nezávislých vzorků se stejnou hustotou pravděpodobnosti dochází ke **shlukování**
  - zbytečně velký rozptyl odhadu
- **vzorkování po částech** (“stratified sampling”)
  - potlačuje shlukování
  - redukuje rozptyl odhadu
- interval se rozdělí na části, které se odhadují **samostatně**

# Vzorkování po částech



# Vzorkování po částech

Rozdělení intervalu **(0,1)** na **N částí $A_i$**:

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx = \underline{\sum_{i=1}^{N} \int_{A_i} f(x)\,dx} = \sum_{i=1}^{N} I_i$$

Odhad integrálu:

$$\underline{\langle I \rangle_{strat}} = \sum_{i=1}^{N} \langle I_i \rangle_{prim} = \underline{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)}, \qquad f(\xi_i) \in A_i$$

# Rozptyl vzorkování po částech

$$\underline{\sigma^2_{strat}} = \sum_{i=1}^{N}\left[\int_{A_i}\left[\frac{f(x_i)}{N}\right]^2 N\,dx_i - I_i^2\right] =$$

$$= \frac{1}{N}\int_0^1 f^2(x)\,dx - \sum_{i=1}^{N} I_i^2 \le \underline{\sigma^2_{sec}}$$

... rozptyl nemůže být větší než u **sekundárního odhadu**!

# Rozklad intervalu na části

- **uniformní** rozklad intervalu **(0,1)**
  – přirozená metoda pro zcela neznámou funkci **f**
- známe-li alespoň přibližně **průběh funkce f**, snažíme se o takový rozklad, aby byl rozptyl funkce na subintervalech co nejmenší
- rozklad **d-rozměrného intervalu** vede na $\mathbf{N}^{\mathbf{d}}$ výpočtů
  – úspornější metodou je vzorkování **“N věží”**

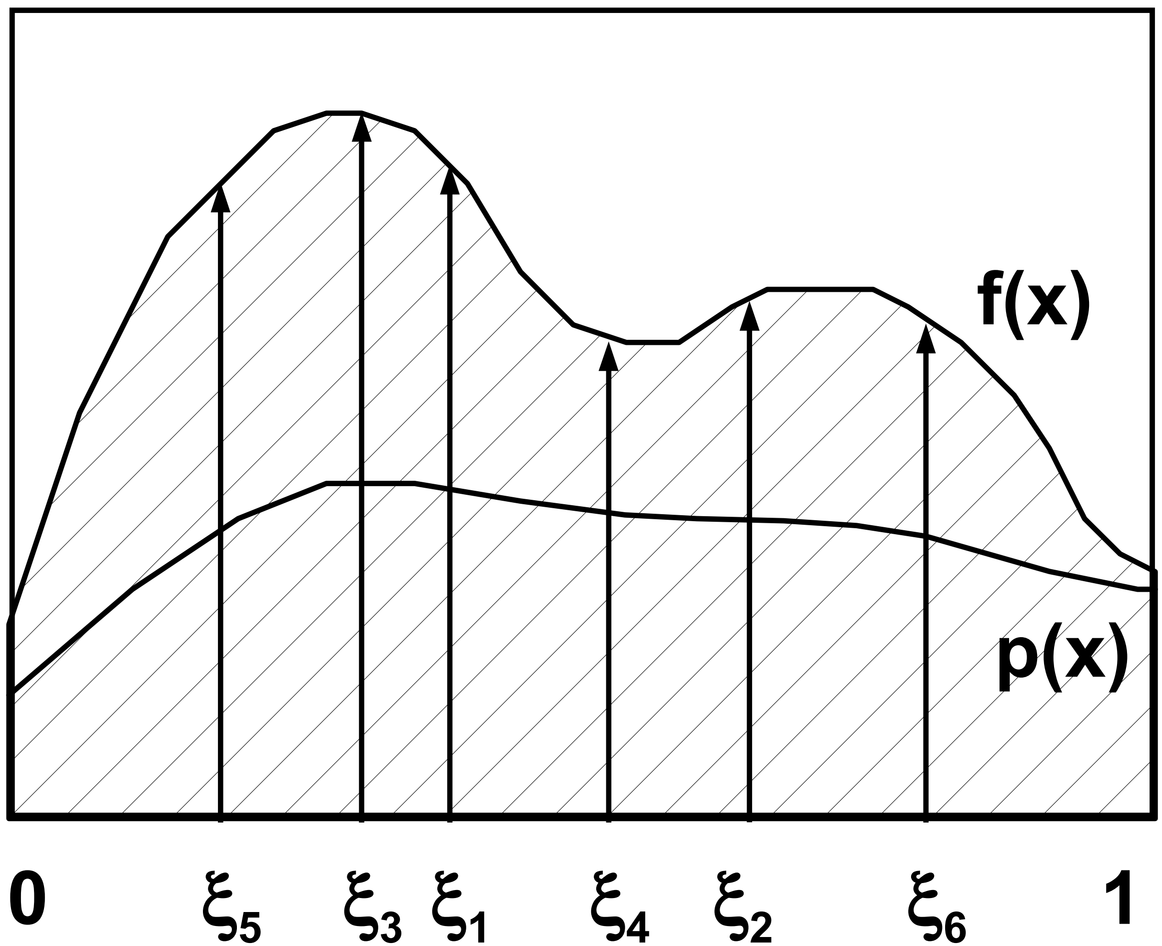
# Vzorkování podle důležitosti

- některé části vzorkovaného intervalu jsou **důležitější**, protože zde má **f** větší hodnotu
  - vzorky z těchto oblastí mají větší vliv na výsledek

➡ **vzorkování podle důležitosti** ("importance sampling") umisťuje vzorky přednostně do takových oblastí
  - vzorkování je formálně řízeno funkcí **p(x)** … **hustotou pravděpodobnosti** na daném intervalu

➡ **menší rozptyl** při zachování nestrannosti

# Vzorkování podle důležitosti



# Vzorkování podle důležitosti

Úprava odhadovaného integrálu:

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx = \int_0^1 \frac{f(x)}{p(x)}\,p(x)\,dx$$

Má-li náhodná proměnná ξ rozdělení s hustotou **p(x)**, odhadujeme integrál **I** výrazem:

$$\langle I \rangle_{imp} = \frac{f(\xi)}{p(\xi)}$$

(tento odhad je **nestranný**)

# Rozptyl vzorkování podle důležitosti

$$\sigma^2_{imp} = \int_0^1 \left[\frac{f(x)}{p(x)}\right]^2 p(x)\,dx - I^2 =$$

$$= \int_0^1 \frac{f^2(x)}{p(x)}\,dx - I^2$$

Pokud se průběh hustoty **p(x)** podobá integrované funkci **f(x)**, odhadujeme integrál funkce, která má **menší rozptyl** než **f(x)**.

# Vlastnosti hustoty p(x)

- $\mathbf{p(x) \geq 0}$ a $\mathbf{p(x) > 0}$ tam, kde $\mathbf{f(x) \neq 0}$
- $\int \mathbf{p(x)\,dx = 1}$
- lze **efektivně generovat** vzorky s danou hustotou pravděpodobnosti
  – lze spočítat příslušnou **distribuční funkci P(x)** a zinvertovat ji ($\mathbf{P^{-1}(x)}$)

$$\underline{P(x)} = \int_0^x p(t)\,dt$$

# Praktická implementace

Místo přímého výběru náhodné proměnné s hustotou pravděpodobnosti **p(x)** bereme $\tau$ s **rovnoměrným rozdělením** pravděpodobnosti a transformujeme ji:

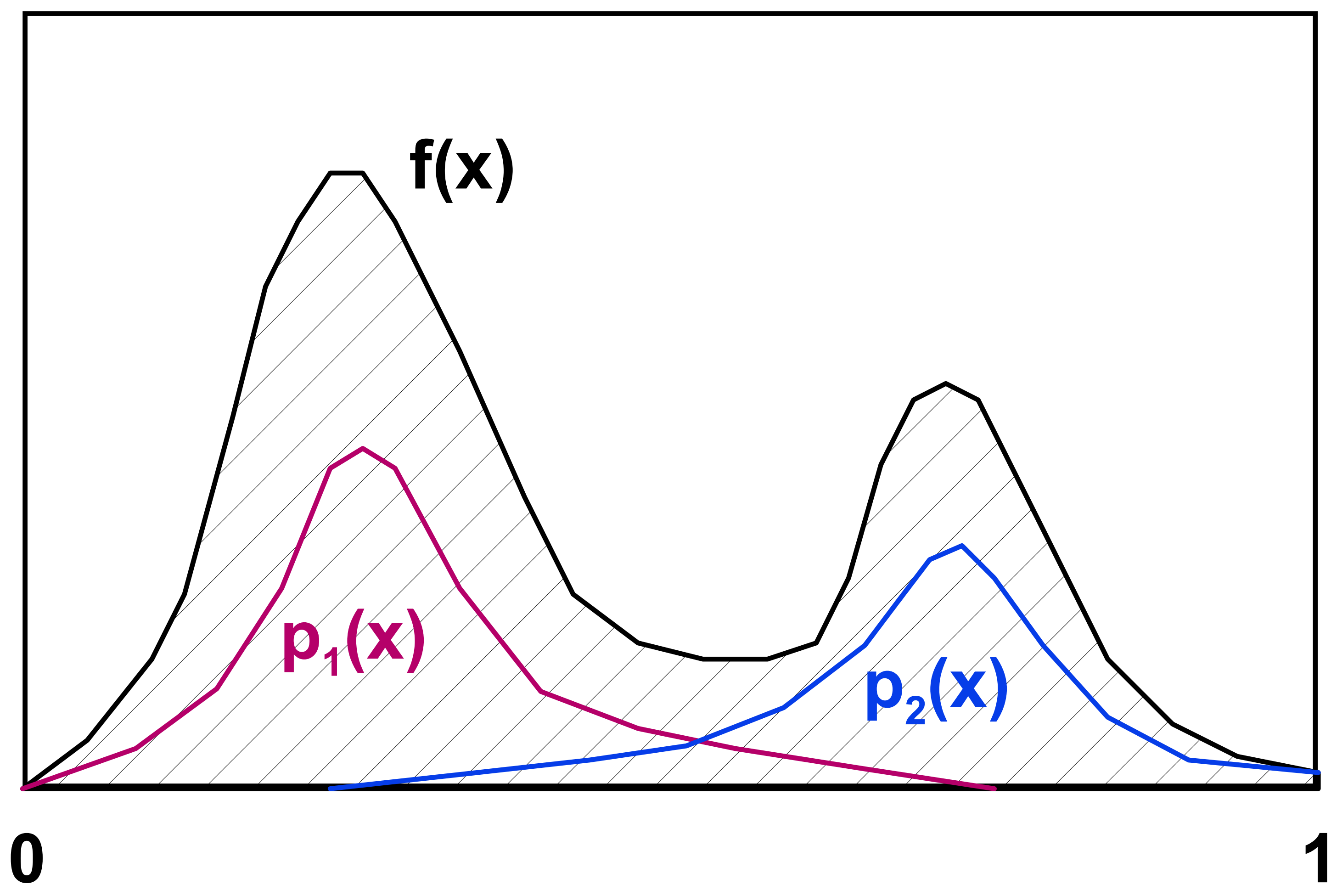
$$\underline{\xi = P^{-1}(\tau)}$$

Odhad má tedy tvar:

$$\boxed{\langle I \rangle_{imp} = \frac{f\left(P^{-1}(\tau)\right)}{p\left(P^{-1}(\tau)\right)}}$$

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx = \int_0^1 f\left(P^{-1}(t)\right) \frac{dP^{-1}(t)}{dt}\,dt = \int_0^1 \frac{f\left(P^{-1}(t)\right)}{p\left(P^{-1}(t)\right)}\,dt$$

# Kombinované odhady



# Kombinace několika odhadů

Předpokládáme **n** náhodných proměnných $\xi_1, .. \xi_n$ s hustotami pravděpodobnosti $\mathbf{p_1(x)}, .. \mathbf{p_n(x)}$.

**Kombinovaný odhad** integrálu bude mít tvar:

$$\boxed{\langle I \rangle_{comb} = \sum_{i=1}^{n} w_i(\xi_i) \frac{f(\xi_i)}{p_i(\xi_i)}}$$

kde $\mathbf{w_i(x)}$ jsou nezáporné **váhové funkce**.

# Nestrannost kombinovaného odhadu

$$\underline{E\left(\langle I\rangle_{comb}\right)} = \sum_{i=1}^{n} \int_0^1 \left[ w_i(x_i)\,\frac{f(x_i)}{p_i(x_i)} \right] p_i(x_i)\,dx_i =$$

$$= \int_0^1 \left[ \underline{\sum_{i=1}^{n} w_i(x)} \right] f(x)\,dx \equiv \underline{\int_0^1 f(x)\,dx}$$

Podmínka pro **váhové funkce**:

$$\boxed{\forall x: \quad \sum_{i=1}^{n} w_i(x) = 1}$$

# Rozptyl kombinovaného odhadu

$$\sigma^2_{comb} = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \begin{array}{l} \displaystyle\int_0^1 \left[ w_i(x_i)\,\frac{f(x_i)}{p_i(x_i)} \right]^2 p_i(x_i)\,dx_i \;- \\ \displaystyle -\left[ \int_0^1 w_i(x_i)\,\frac{f(x_i)}{p_i(x_i)}\,p_i(x_i)\,dx_i \right]^2 \end{array} \right\} =$$

$$= \int_0^1 \left[ \sum_{i=1}^{n} \frac{w_i^2(x)}{p_i(x)} \right] f(x)\,dx - \sum_{i=1}^{n} \left[ \int_0^1 w_i(x)\,f(x)\,dx \right]^2$$

# Aritmetický průměr, maximum

$$w_i(x) = \frac{1}{n}$$

$$\boxed{\langle I \rangle_{average} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{f(\xi_i)}{p_i(\xi_i)}}$$

$$w_i(x) = \begin{cases} 1 & \text{pro } p_i(x) = \max_j\{p_j(x)\} \\ 0 & \text{jinde} \end{cases}$$

$$\boxed{\langle I \rangle_{max} = \sum_{i=1}^{n} \left( p_i(\xi_i) = \max_j\{p_j(\xi_i)\} \right) ? \frac{f(\xi_i)}{p_i(\xi_i)} : 0}$$

# Vyrovnaná heuristika

$$w_i(x) = \frac{p_i(x)}{\sum_{j=1}^{n} p_j(x)}$$

$$\boxed{\langle I \rangle_{bal} = \sum_{i=1}^{n} \frac{f(\xi_i)}{\sum_{j=1}^{n} p_j(\xi_i)}}$$

$$\sigma_{bal}^2 = \int_0^1 \frac{f^2(x)}{\sum_{i=1}^{n} p_i(x)}\,dx - \sum_{i=1}^{n}\left[\int_0^1 \frac{p_i(x)}{\sum_{j=1}^{n} p_j(x)} f(x)\,dx\right]^2$$

$$\underline{\sigma_{comb}^2 \geq \sigma_{bal}^2 - \left(1 - \tfrac{1}{n}\right) \cdot I^2}$$

# Mocninná heuristika

Zobecnění: $$w_i(x) = \frac{p_i^\beta(x)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^\beta(x)}$$

$$\boxed{\langle I \rangle_{power} = \sum_{i=1}^{n} \frac{p_i^{\beta-1}(\xi_i)}{\sum_{j=1}^{n} p_j^\beta(\xi_i)} f(\xi_i)}$$

$\underline{\beta = 1}$ .. vyrovnaná, $\underline{\beta = \infty}$ .. maximální heuristika

# Transformace integrandu

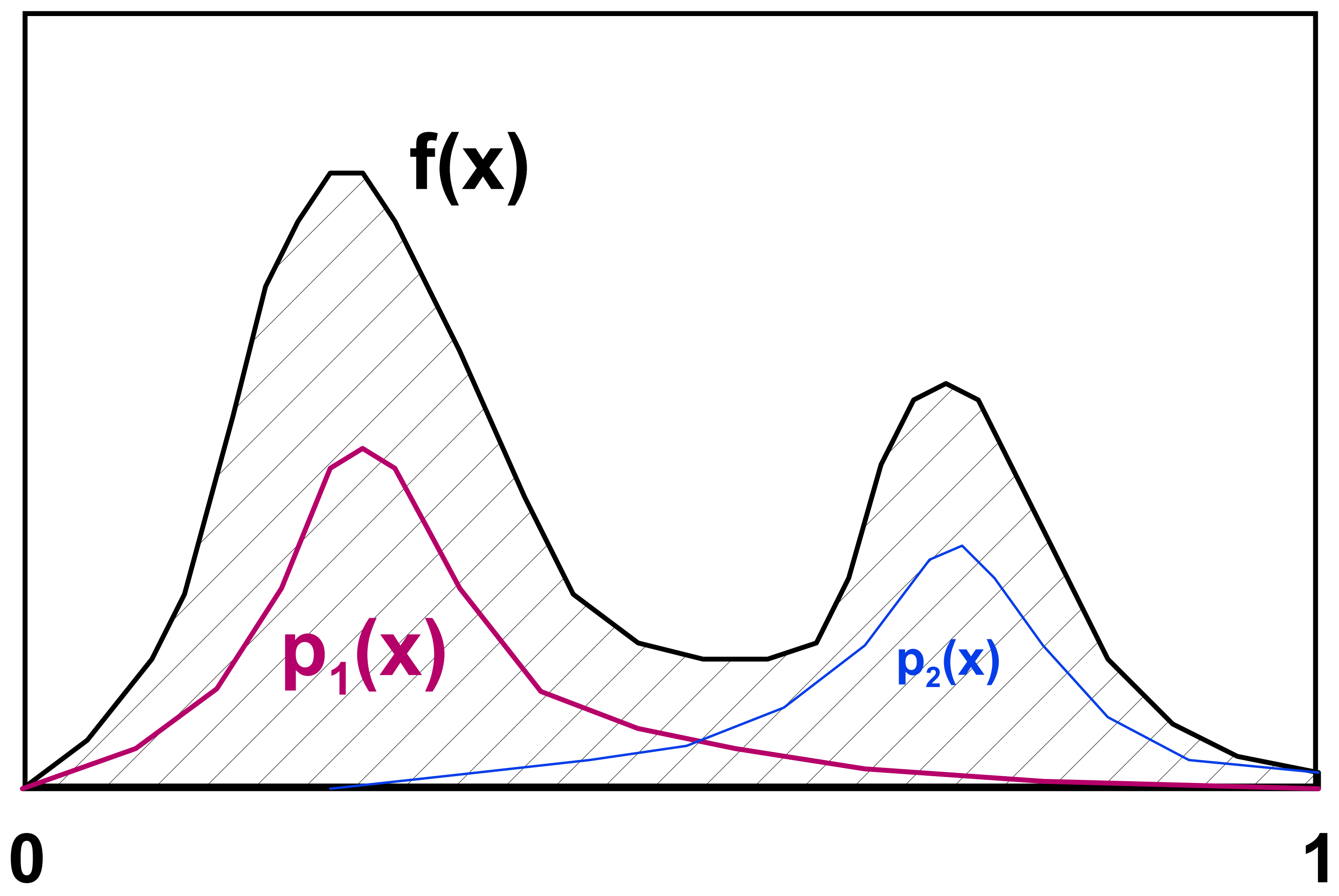
Interpretace kombinačního odhadu jako **transformace integrované funkce**:

$$I = \int_0^1 f(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} \int_0^1 w_i(x) \cdot f(x)\, dx$$

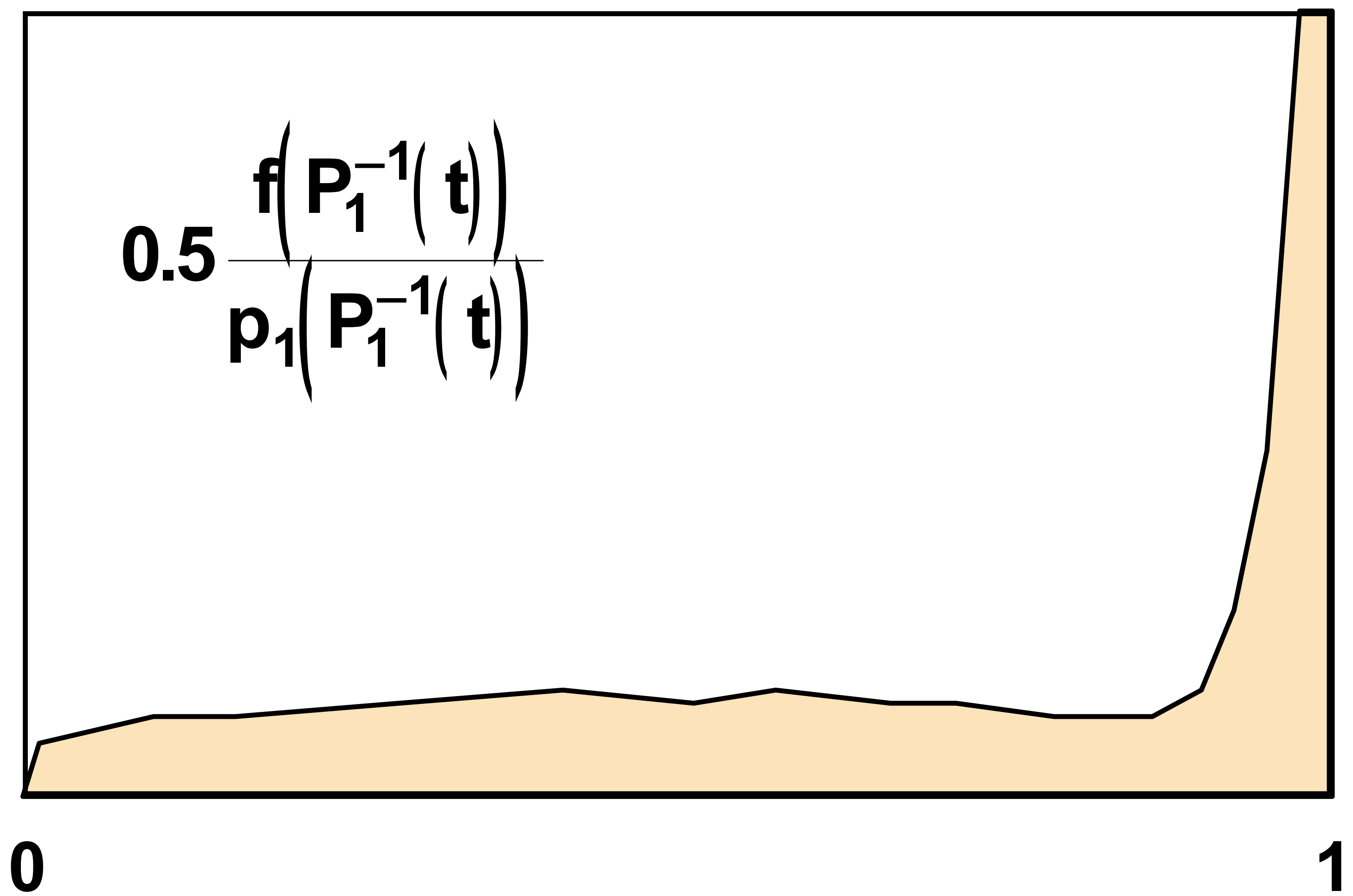
Kombinace odhadů podle důležitosti:

$$I = \sum_{i=1}^{n} \int_0^1 \frac{w_i\left(P_i^{-1}(t)\right)}{p_i\left(P_i^{-1}(t)\right)} f\left(P_i^{-1}(t)\right) dt$$

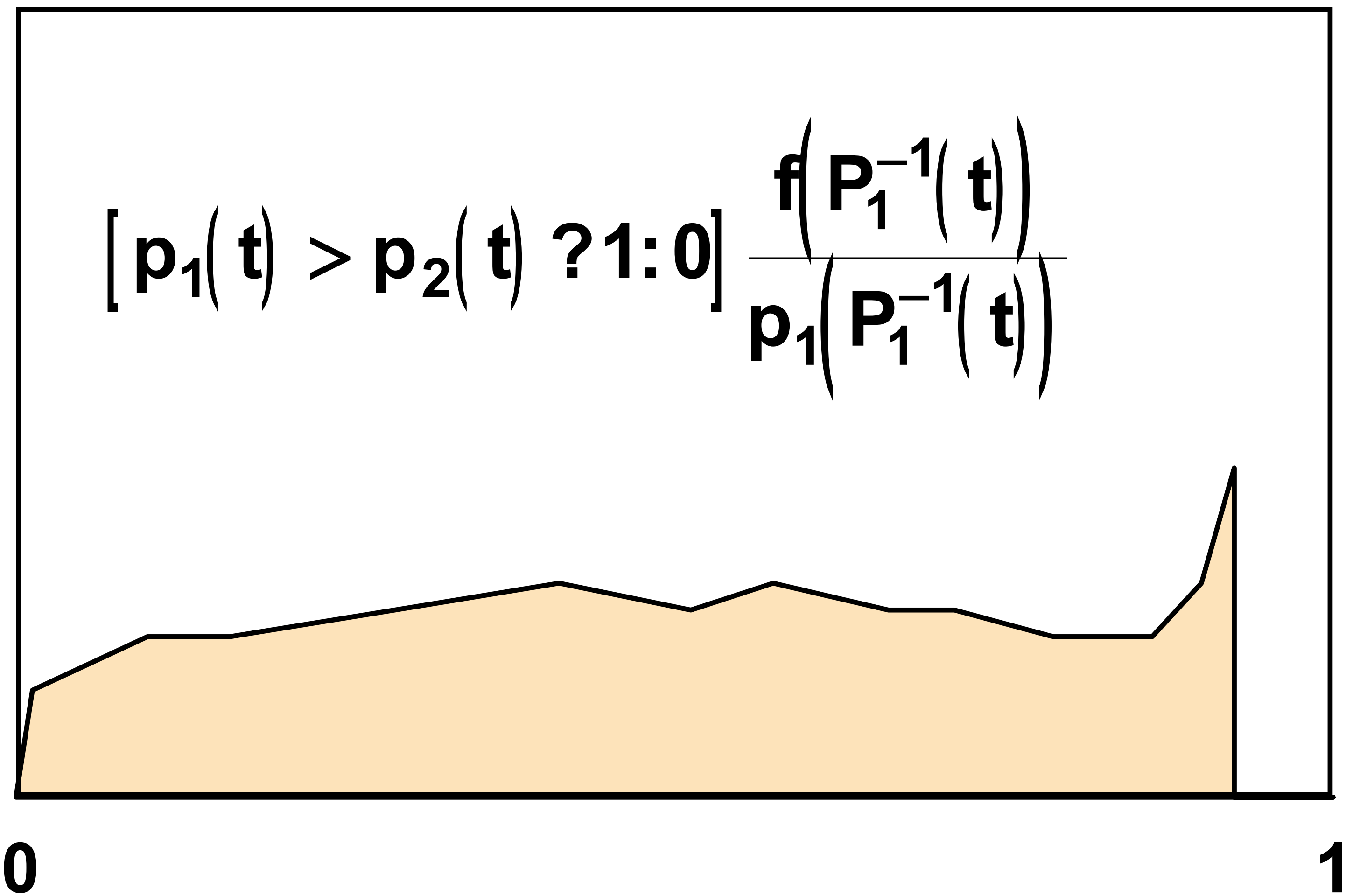
# Jeden člen kombinovaného odhadu



# Aritmetický průměr

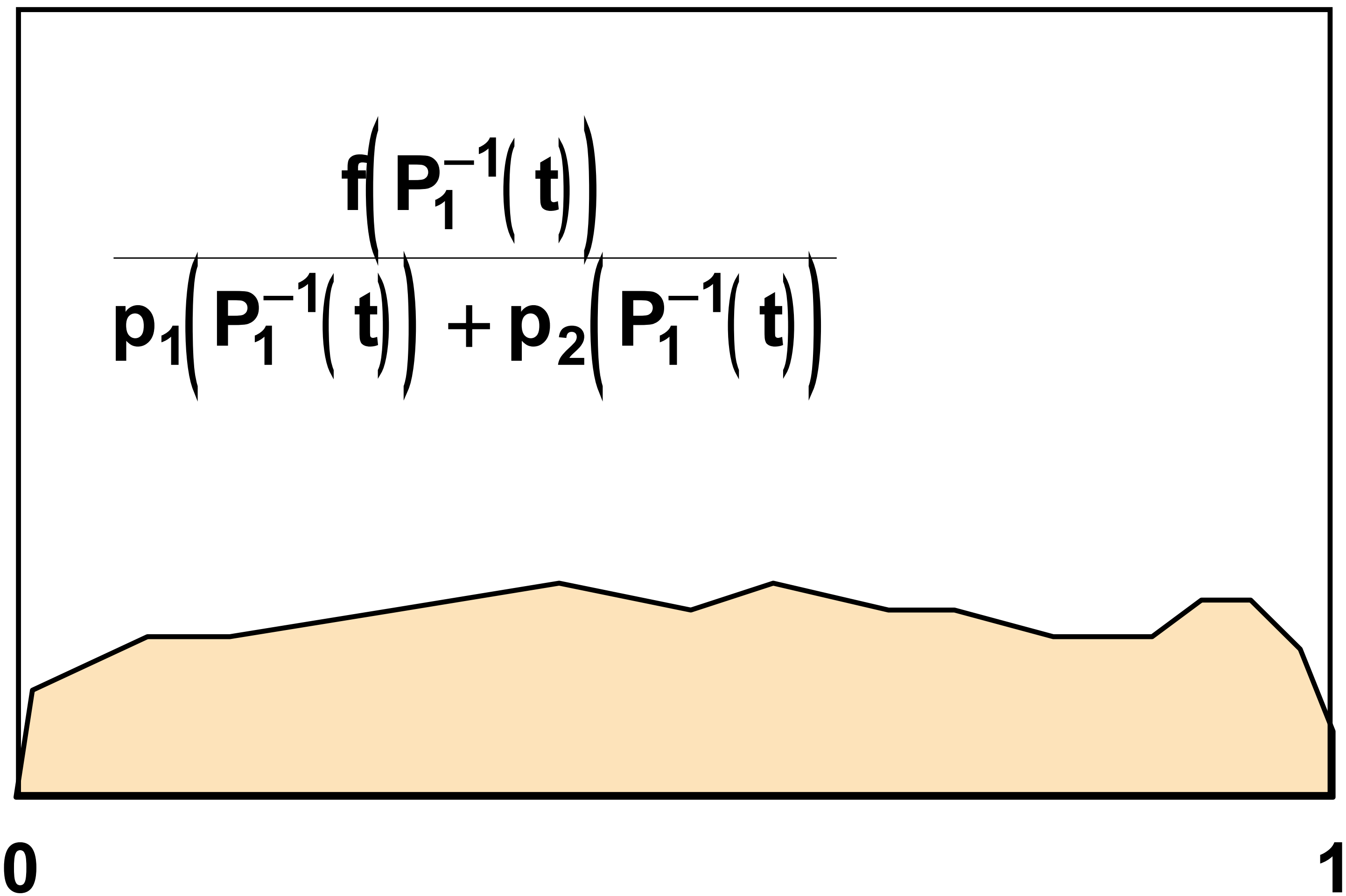


# Maximum



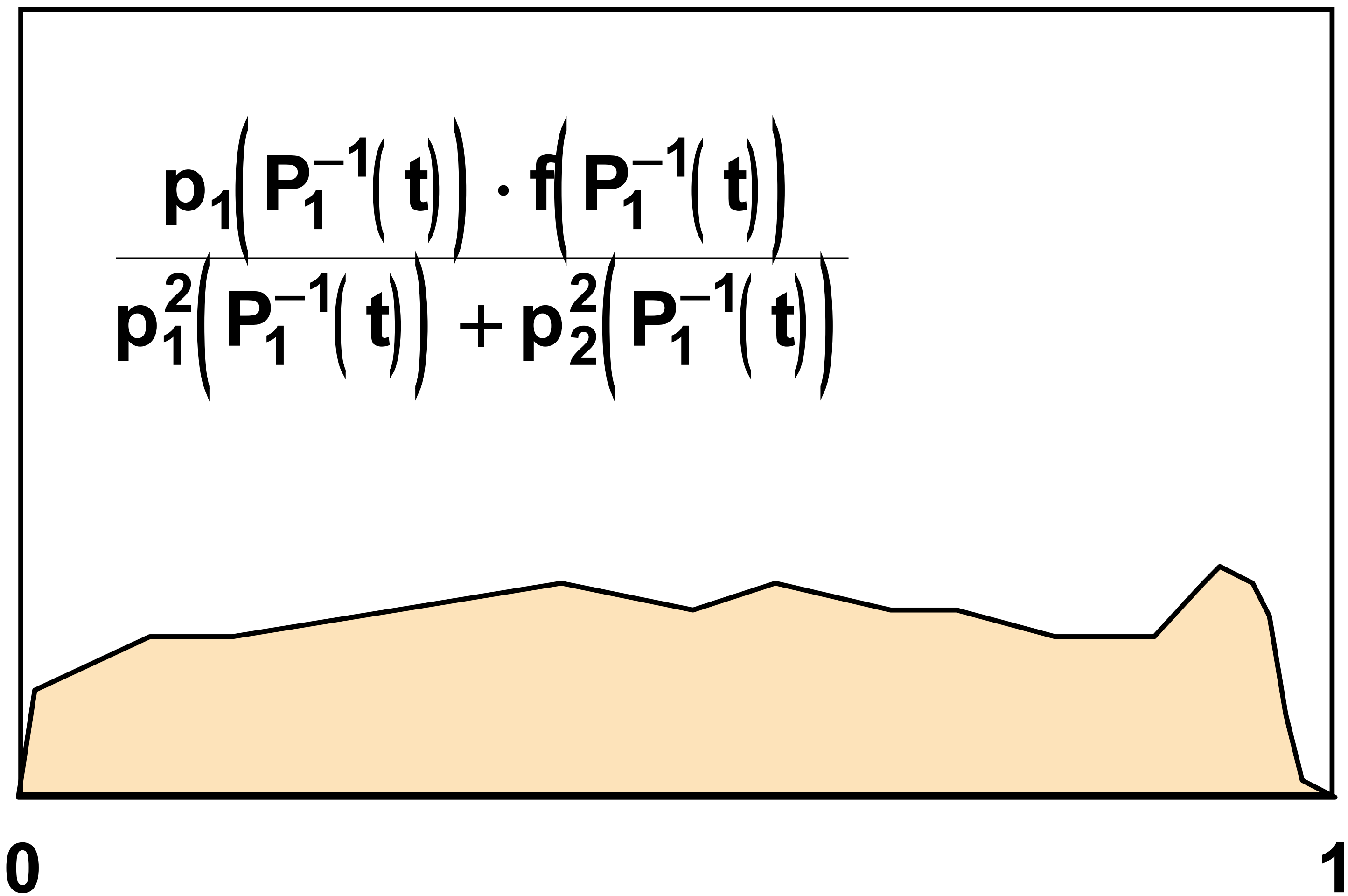
$$\left[p_1(t) > p_2(t)\ ?\ 1 : 0\right] \frac{f\left(P_1^{-1}(t)\right)}{p_1\left(P_1^{-1}(t)\right)}$$
0
1

# Vyrovnaná heuristika



# Mocninná heuristika pro β=2

$$\frac{p_1\left(P_1^{-1}(t)\right)\cdot f\left(P_1^{-1}(t)\right)}{p_1^2\left(P_1^{-1}(t)\right)+p_2^2\left(P_1^{-1}(t)\right)}$$



# Řídící funkce

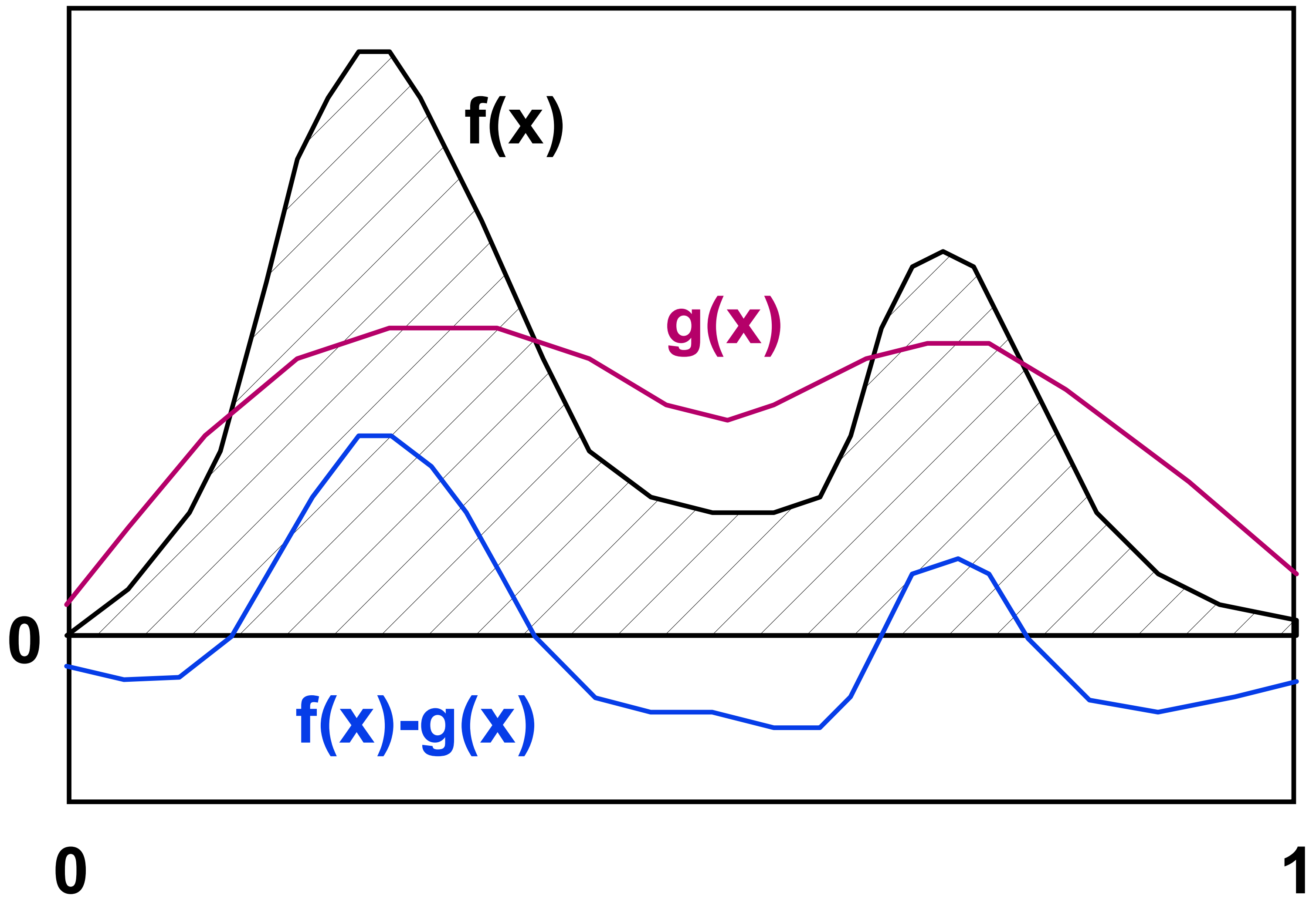
Funkce **g(x)**, která **aproximuje integrand** a dokážeme ji **analyticky zintegrovat**:

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx = \int_0^1 [f(x) - g(x)]\,dx + \underline{\int_0^1 g(x)\,dx} =$$

$$= \int_0^1 [f(x) - g(x)]\,dx + \underline{J} = \int_0^1 [f(x) - g(x) + J]\,dx$$

Nestranný odhad: $\underline{\langle I \rangle_{con} = f(\xi) - g(\xi) + J}$

# Transformace řídící funkcí



# Řešení integrálních rovnic

Fredholmova integrální rovnice druhého typu:

$$\boxed{\underline{f(x)} = g(x) + \int_0^1 K(x,y) \cdot \underline{f(y)}\, dy}$$

**neznámá** **známé funkce**

- metody **konečných prvků** (výpočet celé funkce)
- metody **Monte Carlo** (lokální výpočet)

# Rekurzivní Monte Carlo odhad

**Pravou stranu rovnice** odhaduji **stochasticky** s řídícími hustotami pravděpodobnosti $\mathbf{p_i(x)}$:

$$\langle f(x) \rangle_r = g(x) + \frac{K(x,\xi_1)}{p_1(\xi_1)} \cdot \langle f(\xi_1) \rangle_r =$$

$$= g(x) + \frac{K(x,\xi_1)}{p_1(\xi_1)} \cdot \left[ g(\xi_1) + \frac{K(\xi_1,\xi_2)}{p_2(\xi_2)} \cdot \langle f(\xi_2) \rangle_r \right]$$

$$= g(x) + \frac{K(x,\xi_1)}{p_1(\xi_1)} g(\xi_1) + \frac{K(x,\xi_1)}{p_1(\xi_1)} \frac{K(\xi_1,\xi_2)}{p_2(\xi_2)} g(\xi_2) + \ldots$$

# Rekurzivní Monte Carlo odhad

$$\langle f(x) \rangle_r = \sum_{i=0}^{\infty} \left[ \prod_{j=1}^{i} \frac{K(\xi_{j-1}, \xi_j)}{p_j(\xi_j)} \right] g(\xi_i), \qquad \xi_0 = x$$

$\{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \ldots\}$ se nazývá **Markovovský řetězec**, jestliže pravděpodobnost $p_i(x)$ závisí pouze na $\xi_{i-1}$

Úspornější funkcionální zápis: $f = g + \mathrm{T} f$

**Řešení** (Neumannova řada): $f = g + \mathrm{T} g + \mathrm{T}^2 g + \ldots$

# Ruská ruleta

- při odhadu **nekonečné Neumannovy řady** se může spočítat jen konečný částečný součet
  - pevně daná délka posloupnosti zavádí do odhadu **systematickou chybu**
- vhodnější je metoda náhodného ukončení výpočtu: tzv. **ruská ruleta**
  - odhad zůstává nestranný
- teoreticky se dá tento postup aplikovat i na výpočet jednotlivého integrálu

# Ruská ruleta pro jeden integrál

Transformace integrálu:

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx = \int_0^P \frac{1}{P} f\left(\frac{t}{P}\right) dt \qquad 0 < P \leq 1$$

Nestranný odhad s jedním náhodným vzorkem:

$$\langle I \rangle_{Russ} = \begin{cases} \frac{1}{P} f\left(\frac{\xi}{P}\right) & \text{pro } \xi < P \\ 0 & \text{jinak} \end{cases}$$

# Ruská ruleta pro integrální rovnice

$$\langle f(x) \rangle_{Russ,r} = \sum_{i=0}^{k} \left[ \prod_{j=1}^{i} \frac{K(\xi_{j-1}, \xi_j)}{P_j \cdot p_j(\xi_j)} \right] g(\xi_i), \qquad \xi_0 = x$$

$\{\xi_1, \xi_2, \ldots \xi_k\}$ je **konečná** náhodná procházka, protože odhad $\langle f(\xi_k) \rangle = 0$.

Každý vzorek $\xi_i$ je vybírán s **pravděpodobností** $P_i$ a s hustotou (pdf) $p_i(x)$.

Pokud náhodná proměnná $\tau_{i+1} > P_{i+1}$, celý proces se zastaví; jinak se vygeneruje $\xi_{i+1}$ (a přidá se další člen).

# Volba pravděpodobností

Ve fyzikálních aplikacích je často: $$\int_0^1 K(x,y)\,dy < 1$$

Tehdy lze jádro **K** použít ke kostrukci tzv. **subkritického rozdělení pravděpodobnosti**:

$$P_i = \int_0^1 K(\xi_{i-1}, y)\,dy, \qquad p_i(x) = \frac{K(\xi_{i-1}, x)}{P_i}$$

Odhad pak bude mít tvar: $$\boxed{\langle f(x) \rangle_{subcrit} = \sum_{i=1}^{k} g(\xi_i)}$$

# Odhad příští události

Předchozí odhad mívá **velký rozptyl** (málo sčítanců je nenulových). Lepší výsledky dává metoda odhadující člen **g(x)** o jeden stupeň přesněji:

$$f(x) = g(x) + h(x)$$

$$h(x) = \int_0^1 K(x,y) \cdot f(y)\, dy =$$

$$= \underline{\int_0^1 K(x,y) \cdot g(y)\, dy} + \underline{\int_0^1 K(x,y) \cdot h(y)\, dy}$$

# Odhad příští události

- **první integrál** se odhaduje za pomoci pravdě-podobnosti s hustotou podobnou funkci $\mathbf{g(x)}$
  - náhodná proměnná $\zeta_i$ s hustotou $\mathbf{p_i(x)}$
- **druhý integrál** se odhaduje pomocí subkritické hustoty pravděpodobnosti jádra $\mathbf{K}$
  - náhodná proměnná $\xi_i$ s hustotou $\mathbf{K(\xi_{i-1},x)/P_i}$

$$\langle \mathbf{h}(\mathbf{x}) \rangle_{\mathbf{nextev}} = \frac{\mathbf{K}(\mathbf{x},\zeta_1)\,\mathbf{g}(\zeta_1)}{\mathbf{p_1}(\zeta_1)} + \langle \mathbf{h}(\xi_1) \rangle_{\mathbf{nextev}}$$

# Odhad příští události

Odhad funkce **h**:

$$\left\langle h(x) \right\rangle_{nextev} = \sum_{i=1}^{k} \frac{K(\xi_{i-1}, \zeta_i)\, g(\zeta_i)}{p_i(\zeta_i)}$$

Odhad integrální rovnice:

$$\boxed{\left\langle f(x) \right\rangle_{nextev} = g(x) + \sum_{i=1}^{k} \frac{K(\xi_{i-1}, \zeta_i)\, g(\zeta_i)}{p_i(\zeta_i)}}$$

# Konec

## Další informace:

- **E. Lafortune**: ***Mathematical Models and Monte Carlo Algorithms for Physically Based Rendering***, PhD thesis, KU Leuven, 29-63
- **M. Kalos, P. Whitlock**: ***Monte Carlo Methods***, John Wiley & Sons, 1986, 89-116
- **A. Glassner**: ***Principles of Digital Image Synthesis***, Morgan Kaufmann, 1995, 840-864