蒙特卡洛方法：重要性采样

何彦衡

2023 年 7 月 23 日

1 引言

蒙特卡洛方法（Monte Carlo method），也称统计模拟方法，是二十世纪 40 年代由于科学技术的发展和电子计算机的发明，而提出的一种以概率统计理论为指导的数值计算方法。简单来说就是指使用（伪）随机数来解决很多计算问题的方法，与它相对的则是确定性算法。

在传统的蒙特卡洛方法中，我们通过对目标函数进行大量的随机抽样来估计某个问题的解或者期望值。这个估计会随着采样次数的增加而越来越趋于准确。其基本特征是程序简单，但伴随着不小的噪声，很适合不需要高精确度的图形等应用程序。然而，对于比较复杂的概率分布函数，这种全随机抽样的方法可能会导致采样点集中于低效的区域，使得（在采样次数有限的情况下）估计结果不准确。

为了解决这个问题，重要性采样应运而生：通过选择适当的采样权重，使采样点更加集中在目标函数的高效区域，可以让估计以更快的速度收敛。具体来说，重要性采样引入了一个额外的概率密度函数（Probability Density Function, PDF），根据该函数对采样点进行加权，使得采样点更多地位于目标函数的主要贡献区域。

2 数学原理

传统的蒙特卡洛方法基于这样的数学原理：（假设 $x \in [0,1)$）

$$lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{N} f(x) = \int_0^1 f(x)dx \tag{1}$$

但正如前文所述，在实际的程序中，N 不可能真的趋于无穷，有时甚至是比较小的，那这时全随机抽样的效果可能就会比较差（比如 $|f(x)|$ 的最大值点可能就没有被抽到）。因此我们会想要重要性采样，让这些贡献较大的点以更大的概率被抽到，最后计算的时候再消去密度概率不均的影响。这就是 PDF 函数（$p(x)$），通俗的说也可以认为就是被采样到的概率。重要性采样的具体数学原理如下：

$$lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\sum_{N}\frac{f(x)}{p(x)}=\int_0^1 f(x)dx \tag{2}$$

这里公式 (2) 中 x 的含义和 (1) 略有不同，(1) 中的 x 是“平均地”随机产生的，而 (2) 中的 x 则是以 $p(x)$ 的概率密度随机产生。自然，所有可能的 x 的产生概率总和应当为 1，即

$$\int_0^1 p(x)dx=1 \tag{3}$$

但这可以通过对 $p(x)$ 乘以一个常数很容易地满足，所以有时候为了方便讨论我们可能也会忽略这个限制。

现在还有一个问题，如何以 $p(x)$ 的概率密度随机产生 x 呢？在计算机中，产生一个均匀的（伪）随机数是容易的。我们希望有一个函数 $g(x)$，以一个 [0,1) 的随机变量 $random()$ 作为函数输入，获得一个概率密度函数为 $p(x)$ 的随机变量作为返回值。设

$$P(t)=\int_0^t p(x)dx \tag{4}$$

即要求 $g(random())$ 小于 t 的概率为 $P(t)$。而作为最简单的例子，我们不妨假设 g 递增，则知应有 $g(P(t))=t$。故 $g=P^{-1}$ 就是一个自然又满足要求的函数，只要调用 $g(random())$ 就可以生成概率密度为 $p(x)$ 的随机数了。

最后，值得指出的是，PDF 的任何选择 $p(x)$ 总是会收敛到正确的答案，但越接近 x 的贡献值 $f(x)$，收敛速度越快。如果恰好有 $p(x)=Cf(x)$，那理论上只需采样一次就可以了。传统的蒙特卡洛方法其实也是一种特殊的重要性采样，只不过所有点都被认为是“同样重要的”（$p(x)=C$）。

3 应用

下面来介绍一下重要性采样方法在光线追踪中的应用。在我们的简单光线追踪器的实现（参见 [1]）里，我们主要需要多次采样来处理 Lambertian 材质的光线漫反射问题。

根据书中的说法，物体表面的颜色可以表述为

$$Color = \int A \cdot s(direction) \cdot color(direction) \tag{5}$$

其中 $color(direction)$ 指的是不同角度的入射光，$A \cdot s(direction)$ 可以等价为渲染方程中的 BRDF 项。

应用蒙特卡洛方法，我们可以得到以下蒙特卡洛估计：

$$Color = \frac{1}{N} \sum \frac{A \cdot s(direction) \cdot color(direction)}{p(direction)} \tag{6}$$

其中 $p(direction)$ 是我们采样光线的 PDF。

关键的问题在于我们如何选取合适的 PDF。传统的方法是选取光线与法线的夹角的 cos 值作为密度，当 $cos\theta < 0$ 时我们就认为密度为 0。这样正好也有 $\int_0^{\frac{\pi}{2}} cos\theta d\theta = 1$。我们称这样的 PDF 为余弦 PDF。

如前所述，所有的 PDF 都能收敛到正确答案，只是收敛速度快慢而已。余弦 PDF 当然也不例外。但现在我们想用重要性采样加速收敛、减少噪音，我们需要为“高效区域”选择更大的 PDF。在这个具体的例子中，直接来自光源的入射光会有更大的 $color(direction)$，因此我们希望给这些入射光更大的 PDF。一个最简单的方法是直接忽视其他（经过一次或多次反射、折射或散射）的入射光，而给所有来自光源的入射光相同的 PDF。这样的 PDF 其实是有问题的，因为虽然我们说 PDF 可以任取，但有个隐含的限制是 $p(x)$ 不能为 0（注意 $p(x)$ 在分母的位置出现）。我们马上就会来解决这个问题，现在先让我们暂时忽略它。我们称现在这种 PDF 为灯光 PDF，让我们来看看两种不同 PDF 的实际效果对比：

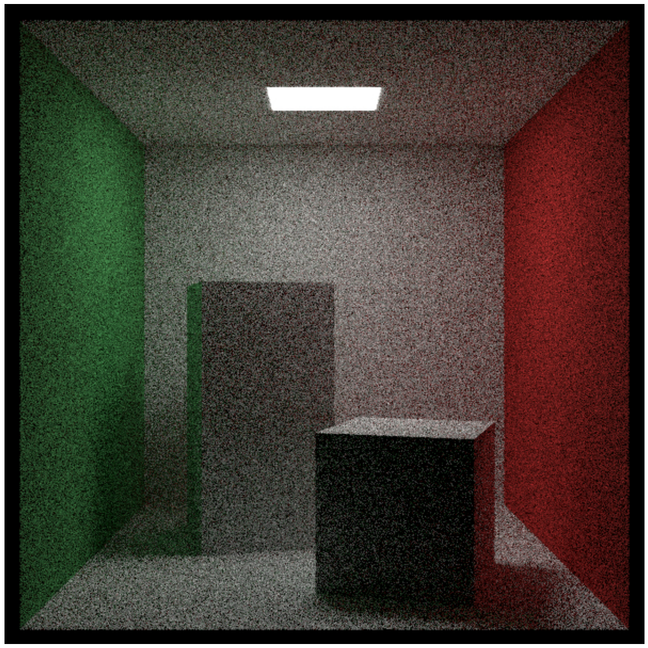

图 1: 余弦 PDF example

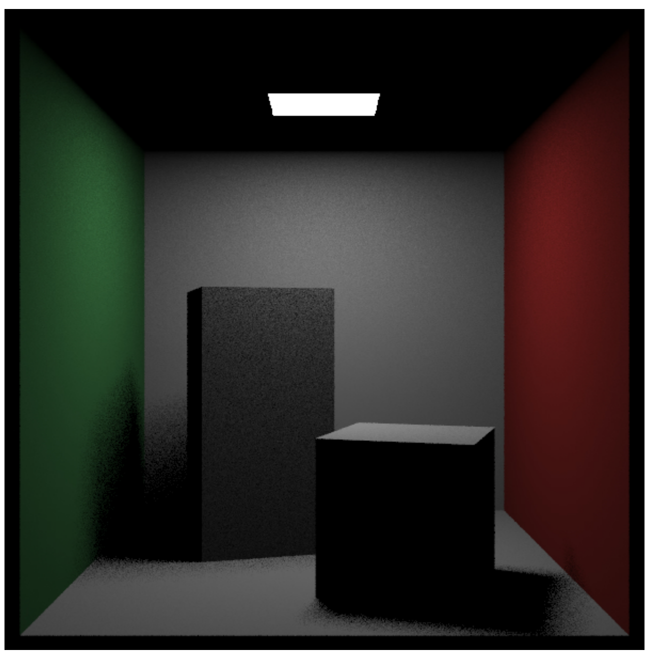

图 2: 灯光 PDF example

容易看出，灯光 PDF 的效果图的噪声明显要小的多。虽然这个 PDF 是不正确的（导致图片实际上是失真的），但我们从中也足以窥见一个合适的 PDF 的强大威力。

下面我们来解决前面提到的灯光 PDF 有些点处值为 0 的这个问题。概率论中一个常用的工具是将密度混合，形成一个混合密度。任何 PDF 的加权平均值都是 PDF，比如我们可以取余弦 PDF 和灯光 PDF 的平均值获得一个新的 PDF，称之为混合 PDF。混合 PDF 融合了两种 PDF 的优点，既充分采样到了实际所有可能的光线，又赋予了那些直接来自光源的光线更大的密度，很好地满足了重要性采样的要求。以下是采用混合 PDF 的一个实际渲染样例：

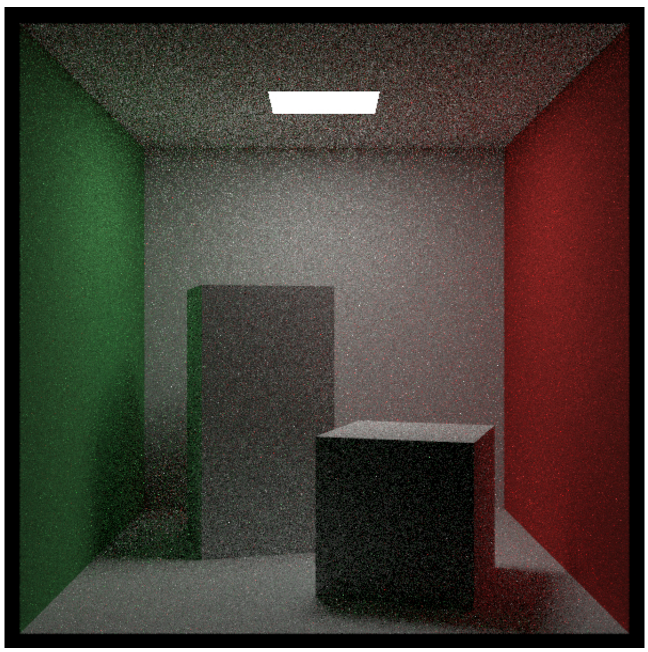

图 3: 混合 PDF example-1

虽然噪声还是很明显，但在相同的采样次数下，对比图 1 其实已经有了一点小的进步。如果我们加大采样次数，图片就能更准确地趋于真实，1000 次采样的效果如下：

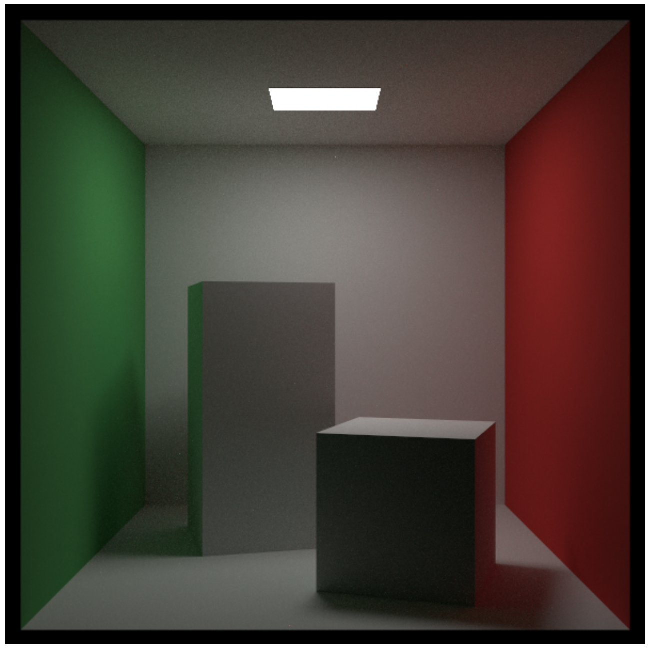

图 4: 混合 PDF example-2

至此，我们就对我们的光线追踪器实现了一个简单的重要性采样的改进。当然，我们选择的 PDF 还远非完美，（比例）越接近 $A \cdot s(direction) \cdot color(direction)$ 的 PDF 将在相同的采样次数下产生越好的效果。但至少，我们已经初通门径，不是么？

参考文献

[1] Peter Shirley. Ray tracing: The rest of your life, December 2020.