

# METODY MONTE CARLO

# Metoda Monte Carlo

- ❑ Simulační metoda založená na užití stochastických procesů a generování náhodných čísel
- ❑ Historie
  - ✗ poprvé v projektu Manhattan (Los Alamos 1944, E. Fermi)
  - ✗ výzkum dynamiky řetězových reakcí vysoce obohaceného uranu
  - ✗ John von Neumann, Stanislaw Ulam a Nicholas Metropolis
    - nedokázali vyřešit metodami teoretické fyziky
    - navrhli výpočet pomocí metody Monte Carlo
  - ✗ ENIAC, MANIAC
- ❑ Vlastnosti
  - ✗ numerická metoda
    - nelze řešit analyticky
  - ✗ možné řešit libovolné matematické úlohy
    - nejen úlohy pravděpodobnostního charakteru
- ❑ K realizaci náhodného pokusu na počítači potřebujeme mít k dispozici nějakou náhodnou veličinu

# Metoda Monte Carlo

- Dnes mnoho oblastí vědy a inženýrství, různé typy aplikací
  - × počítačová fyzika a fyzikální modelování (numerická integrace)
  - × počítačová grafika (realistické osvětlení scény)
  - × finanční inženýrství (optimalizace portfolia akcií)
  - × výzkum nových léků (stochastické molekulární simulace)
  - × mnohé jiné oblasti (ekonofyzika, sociofyzika atd.)
  
- Typy MC simulací
  - × MC integrace
  - × Geometrické MC
  - × Termodynamické MC
  - × Modelování vývoje na strukturální úrovni
  - × Výpočet kinetických koeficientů (KMC)

# Metoda Monte Carlo

## □ Princip

- × pomocí mnohonásobného opakování **náhodných pokusů** lze získat střední hodnotu hledané veličiny
- × známe-li rozdělení pravděpodobností pro dílčí procesy jevu, můžeme modelovat rozdělení pravděpodobnosti určité konfigurace systému
  - simulace pohybu částic v tekutině pomocí modelu tuhých koulí



opakuje experiment s náhodně zvolenými daty s velkým počtem opakování za účelem získání souhrnné statistiky z výsledků experimentu

## □ Postup:

- × 1. Analýza problému a vytvoření modelu
  - popis jevu pomocí náhodné veličiny
  - minimální, maximální hodnoty, omezení, atd.
- × 2. Generování a transformace náhodné veličiny (rozehrání)
  - z rozdělení, které jevu odpovídá
  - Gauss, rovnoměrné, trojúhelníkové, Poissonovo, atd.
- × 3. Opakování předchozího kroku
- × 4. Statistické vyhodnocení výsledků
  - souhrnné statistiky, histogramy, intervaly spolehlivosti

# Buffonova úloha o jehle

## □ Buffonova úloha o jehle

× George-Louis Leclerc, Comte de Buffon, 1777

*Jaká je pravděpodobnost  $P$ , že jehla protne jednu z čar?*

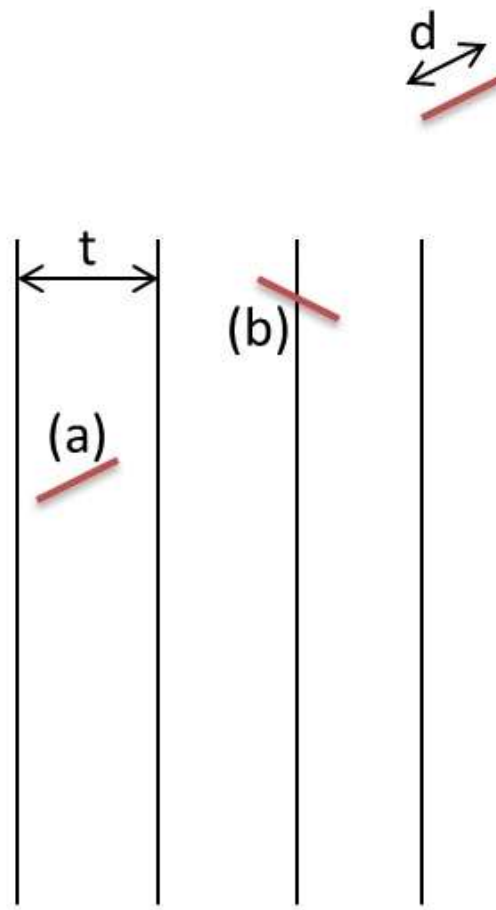
×  $d < t$

×  $P = \frac{2d}{t\pi}$ ,  $P \approx \frac{n}{n_0} \rightarrow \pi \approx 2d \frac{n_0}{n}$

×  $n$ : celkový počet hodů jehly

×  $n_0$ : kolikrát jehla protne jednu z čar

*Pomocí mnohonásobných náhodných pokusů lze spočítat číslo  $\pi$  s libovolnou přesností*



# Buffonova úloha o jehle

## □ Buffonova úloha o jehle

- ✗ Chyba metody Monte Carlo by měla klesat proporčně k převrácené hodnotě odmocniny z počtu kroků

$$\epsilon \sim \frac{1}{\sqrt{n_0}}$$

## □ Výsledky pro N pokusů

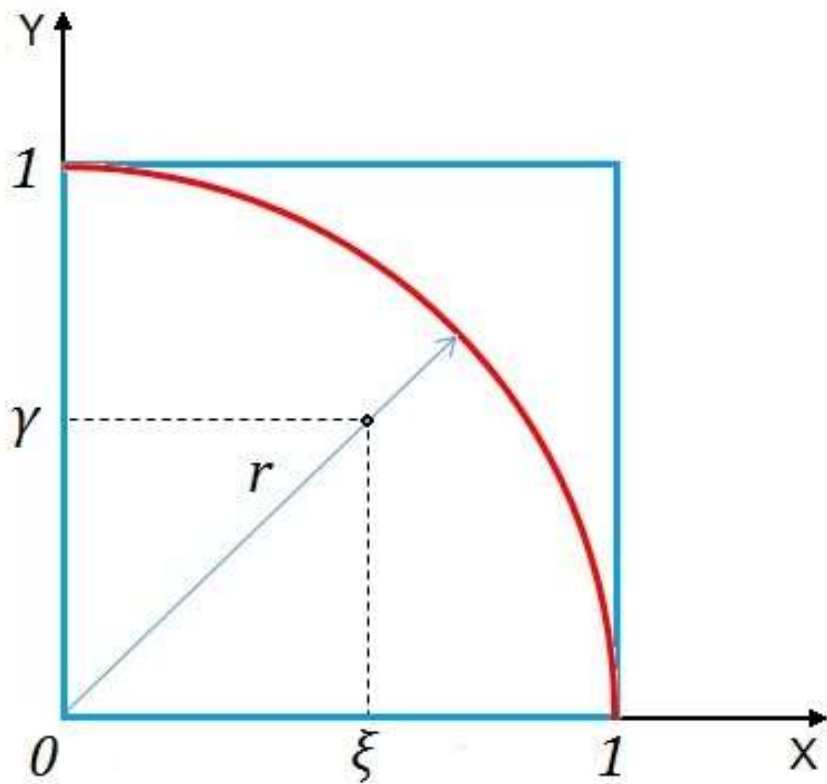
Počet pokusů N	Získané číslo $\pi$
10	3,3333333333333334
100	3,030303030303030
1 000	3,129890453834116
10 000	3,106554830692762
100 000	3,139027529271432
1 000 000	3,142583738071931
10 000 000	3,141338395495446
100 000 000	3,141720284443186
1 000 000 000	3,141666595285384

$\pi = 3,14159\ 26535\ 89793\ 23846\ 26433\ 83279\ 50288\ 41971\ 69399\ 37510\dots$

# Výpočet čísla $\pi$ – čtvrtkruh

- Mějme jednotkovou kružnici, resp.  $1/4$  jednotkové kružnice
- Obsah čtverce  $S_{\square} = r^2$
- Obsah čtvrtkruhu  $S_o = \frac{\pi r^2}{4}$
- $S_o = \frac{\pi r^2}{4} \rightarrow \frac{S_o}{r^2} = \frac{\pi}{4} \Rightarrow \frac{S_o}{S_{\square}} = \frac{\pi}{4}$
- $S_{\square} \cong N$  a  $S_o \cong n'$

$$\pi \cong \frac{4n'}{N}$$

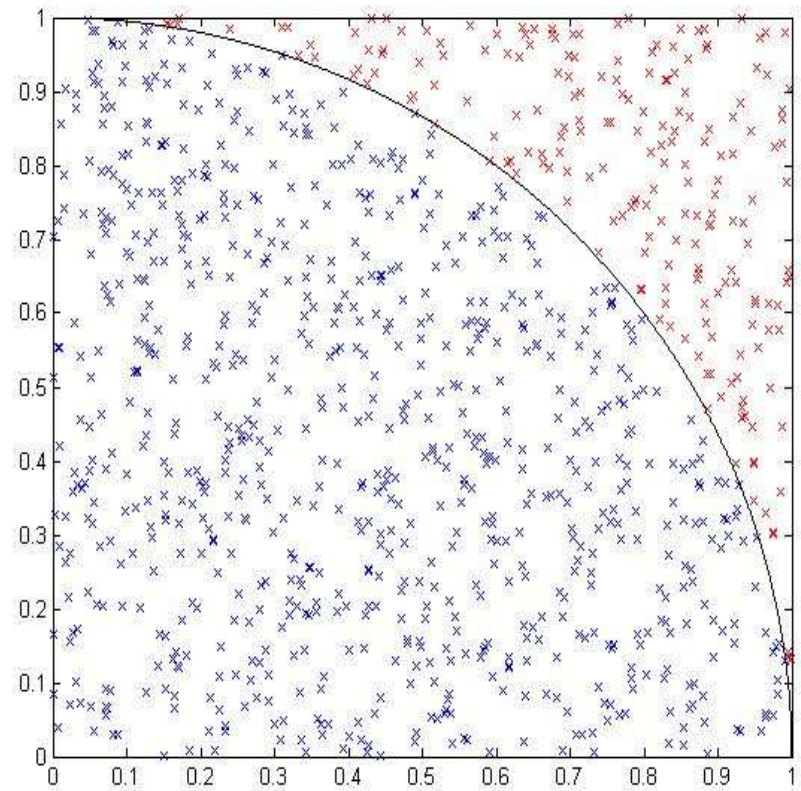


# Výpočet čísla $\pi$ – čtvertkruh

- Generujeme bod  $P = P(\xi, \gamma)$
- $(\xi, \gamma)$  jsou náhodná čísla z intervalu  $(0,1)$
- Úspěšný pokus
  - $|r_{0P}| < 1 \Rightarrow n' = n' + 1$

Počet pokusů N	Získané číslo $\pi$
10	3,2000
100	3,1600
1000	3,1000
10000	3,1444

$$\pi \cong \frac{4n'}{N}$$



výsledek pro 1000 pokusů



# Výpočet určitého integrálu

- Jelikož Metodou Monte Carlo lze spočítat obsah nebo objem nějaké oblasti, lze s ní spočítat i určitý integrál
- Výpočet určitého integrálu – střední hodnota

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

- *Metoda Monte Carlo pracuje se střední hodnotou sledované veličiny*

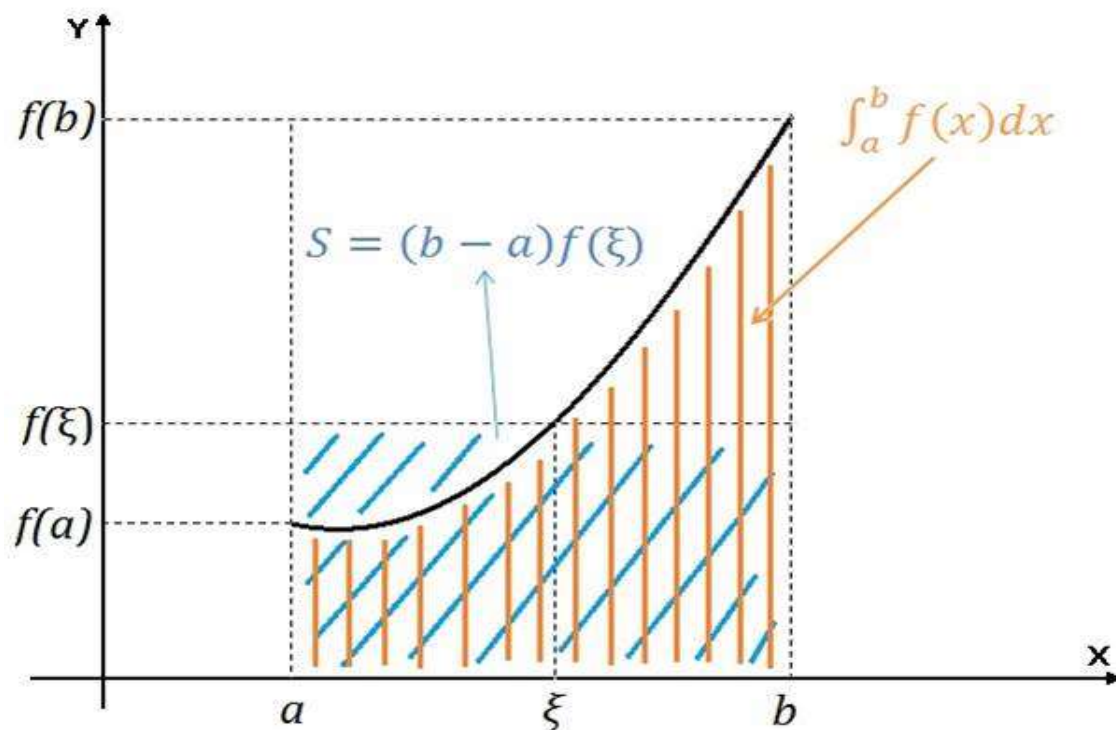
# Určitý integrál – věta o střední hodnotě

- Necht' je funkce  $f(x)$  spojitá na intervalu  $\langle a, b \rangle$  a  $m$ , resp.  $M$  je minimum, resp. maximum funkce na  $\langle a, b \rangle$ , pak existuje číslo  $\xi \in \langle a, b \rangle$  tak, že platí:

$$\int_a^b f(x)dx = f(\xi)(b - a)$$

- Funkce  $f(x)$  je nezáporná na  $\langle a, b \rangle$

# Určitý integrál – věta o střední hodnotě



- Existuje bod  $\xi$ , kde se obsah plochy pod křivkou rovná obsahu obdélníku daného  $(b-a)f(\xi)$

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

- vyjadřuje střední hodnotu funkce  $f(x)$  na intervalu  $\langle a, b \rangle$

# Výpočet určitého integrálu

- ❑ Metoda Monte Carlo
- ❑ Výpočet určitého integrálu - střední hodnota

$$\int_b^a f(x)dx = (b - a)\langle f \rangle$$

- ❑  $\langle f \rangle$ : střední hodnota funkce na intervalu  $(a, b)$

$$\langle f \rangle = \sum_{i=1}^N f(\xi_i)$$

$$I \approx (b - a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\xi_i)$$

- ❑  $\xi$  - náhodné číslo z intervalu  $(a, b)$

# Výpočet určitého integrálu

## ❑ Výpočet určitého integrálu – geometrická metoda

× Integrál - obsah plochy pod křivkou funkce  $f(x)$  na intervalu  $(a, b)$

× Funkce  $f(x)$  je na  $(a, b)$ :

- omezená (supremum funkce označme jako  $f_{sup}$ )
- spojitá

×  $(\xi, \varphi)$  – náhodná čísla z intervalu  $(a, b)$  a  $(0, f_{sup})$

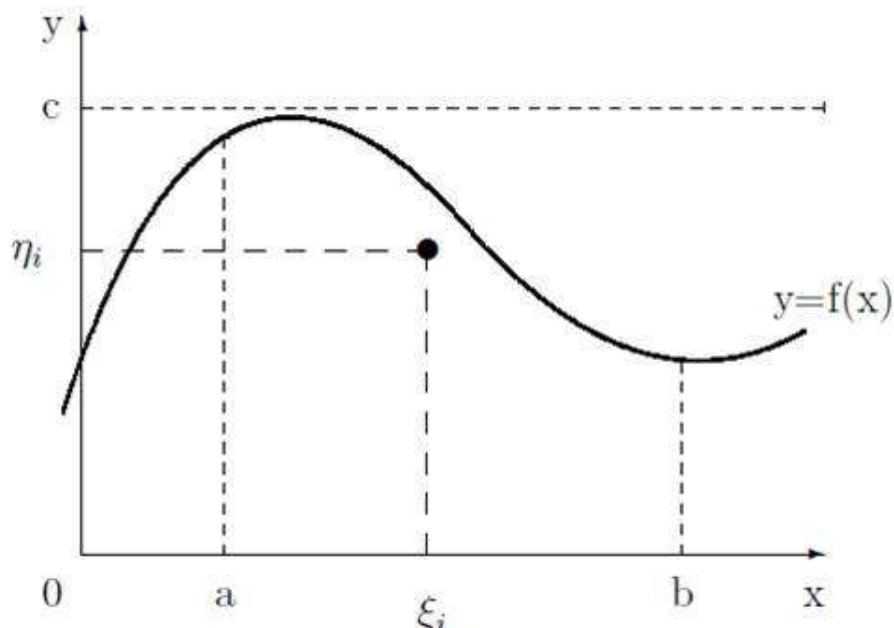
## ❑ Postup výpočtu

× Nagenerujeme celkem  $n$  dvojic  $(\xi_i, \varphi_i)$

× Jestliže platí  $\varphi_i < f(\xi_i)$ , potom  $n' = n' + 1$

## ❑ Výsledná hodnota integrálu:

$$I \approx f_{sup}(b - a) \frac{n'}{n}$$



# Výpočet určitého integrálu

- Střední hodnota

$$I \approx (b - a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\xi_i)$$

## Geometrická metoda

$$I \approx f_{sup}(b - a) \frac{n'}{n}$$

- Geometrická metoda má větší rozptyl

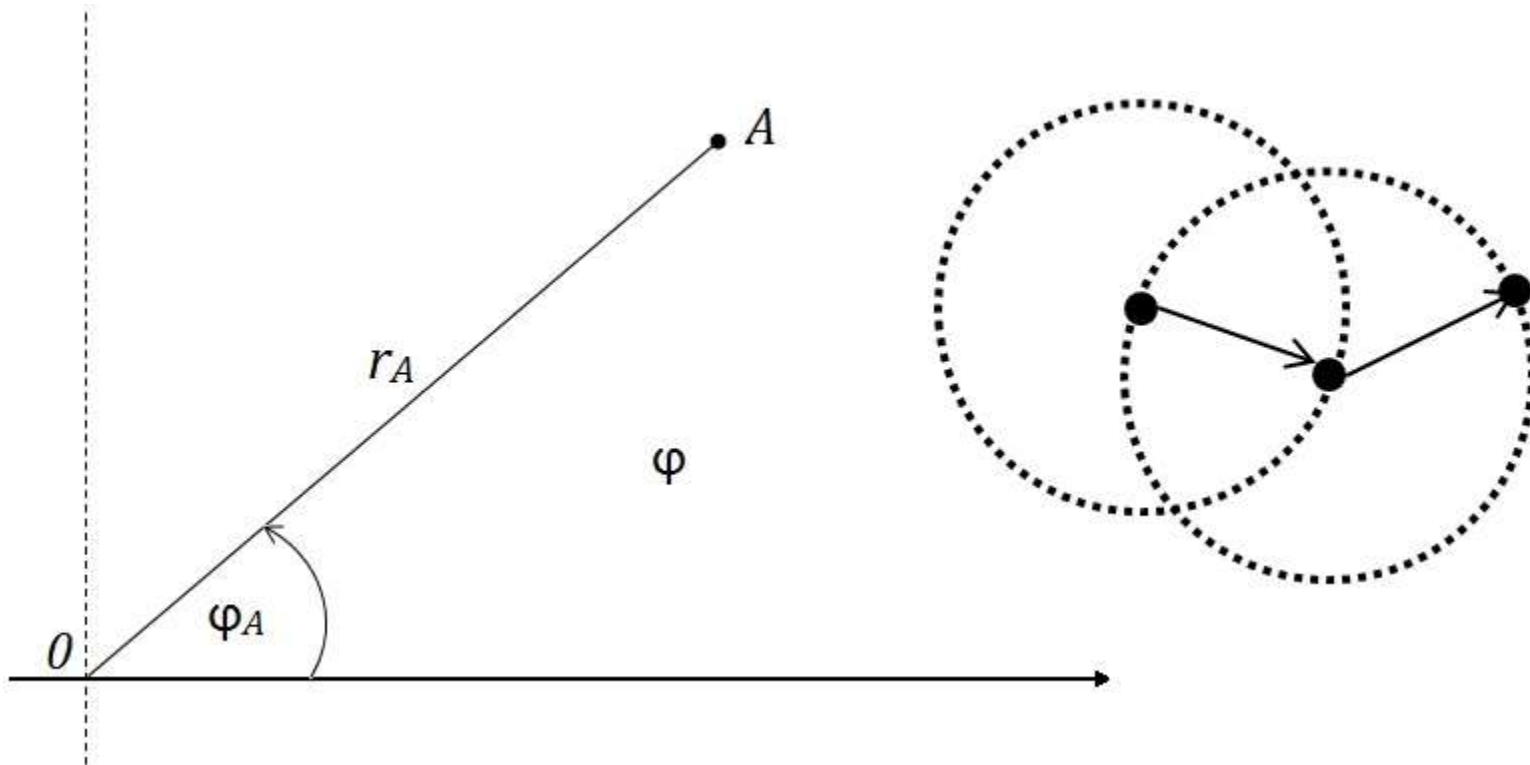
- ✗ Je (zpravidla) méně přesná
- ✗ Nemusí být méně efektivní (celkový počet pokusů)

# Náhodný posun částice

## □ Generování bodu na kružnici (2D): Polární soustava souřadnic

✗ Zobrazení z  $(x, y)$  do  $(r, \varphi)$  pomocí transformace

✗  $x = r \cos \varphi, \quad y = r \sin \varphi, \quad \varphi \in (0, 2\pi)$



# Náhodný posun částice

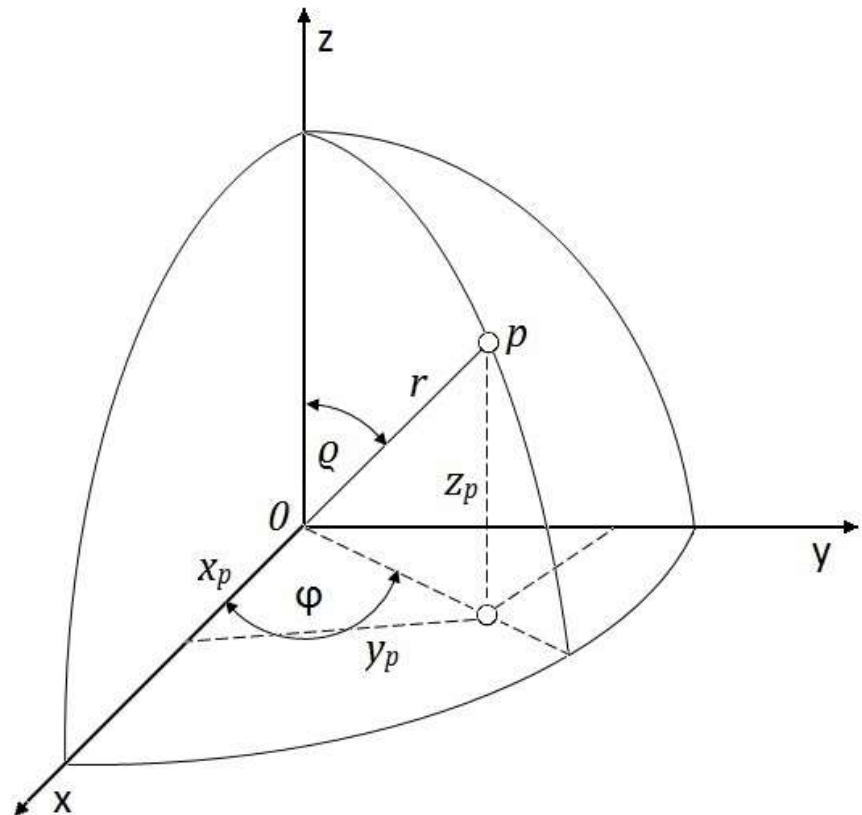
- Generování bodu na kouli (3D): Sférická soustava souřadnic
  - Zobrazení z  $(x, y, z)$  do  $(r, \varphi, \vartheta)$  pomocí transformace

$$x = r \cos \vartheta \sin \varphi$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

$$z = r \cos \vartheta$$

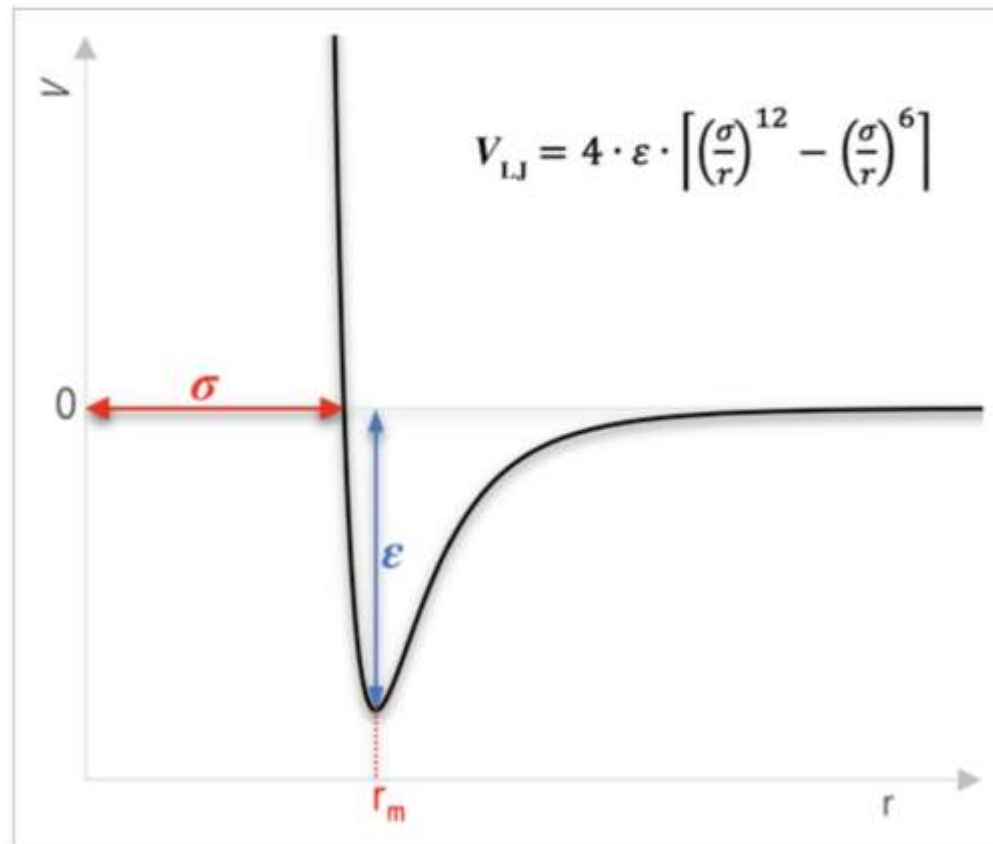
$$\varphi \in (0, 2\pi), \quad \vartheta \in (0, \pi)$$





# Simulace ideálního plynu

- Model ideálního plynu
  - mezičásticový potenciál lze popsat Lennard-Jonesovým vzorcem



# Simulace ideálního plynu

## □ Postup simulace vývoje polohy ideálního plynu:

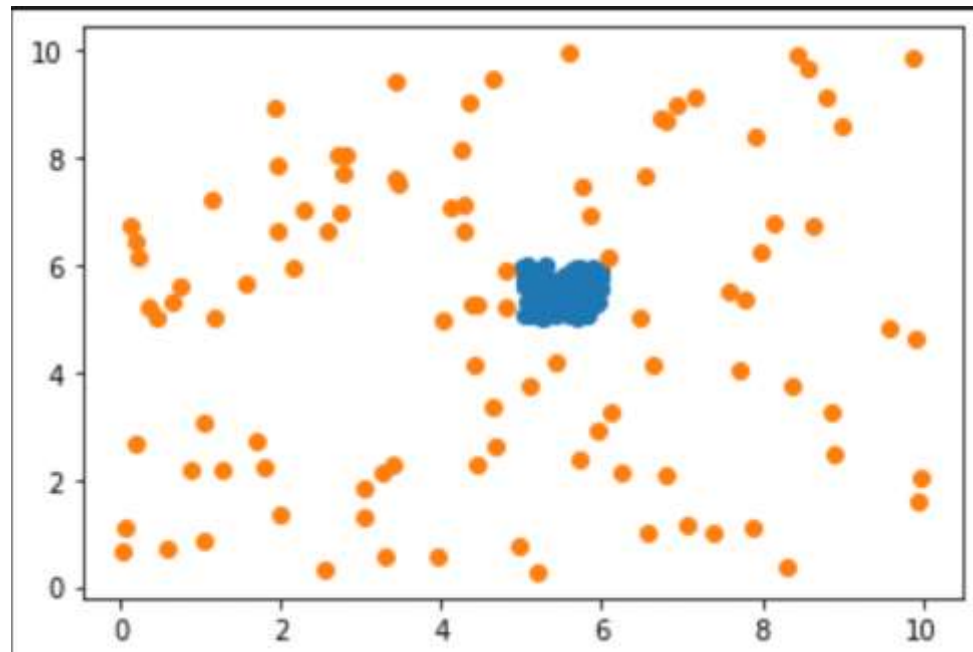
- × 1. vygeneruj náhodně částice ve 2D simulačním čtverci
- × 2. pohni s náhodně vybranou částicí
- × 3. pokud se energie po posunu zmenšila, tak tam částici ponech
- × 4. pokud se zhoršila, losuj Metropolisovým algoritmem pravděpodobnost, která je podmíněna teplotou
- × 5. pokračuj do konce iteračního cyklu

## □ Ověření funkčnosti

- × můžeme vykreslovat vývoj energie
- × nebo uspořádat molekuly na počátku nevýhodně a porovnat s koncovým stavem

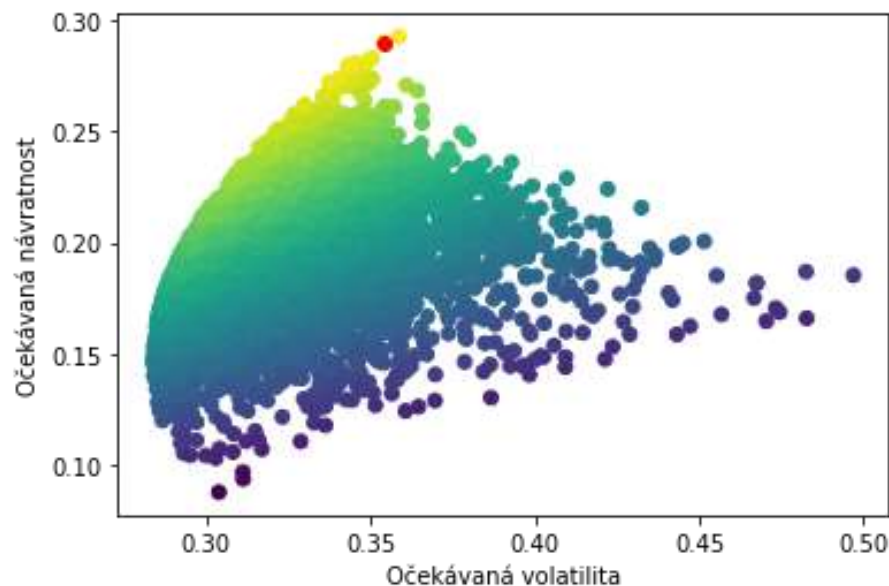
## □ Možný výstup

- × např. na následujícím obrázku
- × molekuly v nevýhodné původní poloze (modrá) a v koncové (oranžová)



# Optimalizace portfolia akcií

- ❑ Chceme rozložit finance do vybraných akcií, ale nevíme, kolik do jakých akcií investovat
- ❑ Můžeme spočítat určité příznaky
  - ✗ na základě analýzy časového vývoje historických dat o akciích
  - ✗ dají informaci o volatilitě (rozptylu) ceny akcie a riziku, které z investice plyne
- ❑ Postup
  - ✗ vygenerujeme náhodné rozložení portfolia
  - ✗ zkoumáme, které z mnoha pokusů o rozložení dopadly nejlépe
    - z pohledu očekávané návratnosti a míře očekávaného rizika
  - ✗ o tom vypovídá tzv. Sharpeho poměr



# Isingův model magnetismu

## □ Model interakce mezi magnetickými momenty ve feromagnetické látce

- × spiny se mohou nacházet ve dvou hodnotách (up  $\sigma_i = 1$ , down  $\sigma_i = -1$ )
- × spiny se nacházejí ve mřížce a mohou interagovat se svými sousedy
- × stejně natočené spiny mají v páru nižší energii než při opačném natočení
- × systém se snaží dostat do stavu s minimální energií

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j$$

## □ Závislost na teplotě

1. při vysoké teplotě spin snadno změni orientaci a systém je málo organizovaný
2. při nízké teplotě jsou upřednostňovány stavy s nižší energií
  1. vytvoří se malé zarovnané domény
3. pokud se velikost domén zvětší, jednotlivé momenty se přidají k celkovému magnetickému poli

## □ Cíl

- × jak bude vypadat výsledné natočení spinů v daném čase



# Metody MC v počítačové grafice

- Aproximace řešení stochastickým vzorkováním
- Vyšetřování trajektorie od pozorovatele nebo od zdroje světla
- Výhody
  - × libovolně definované zobrazované objekty
  - × bez předzpracování
  - × jakákoliv BRDF
  - × nestranné výsledné řešení
  - × nízká paměťová náročnost
- Nevýhody
  - × pomalá konvergence
  - × přesnost roste s odmocninou – chyba metody klesá s počtem pokusů  $N$  jako

$$\vartheta \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

- × empirická složitost  $O(\log(n))$  ( $n$  počet objektů)