

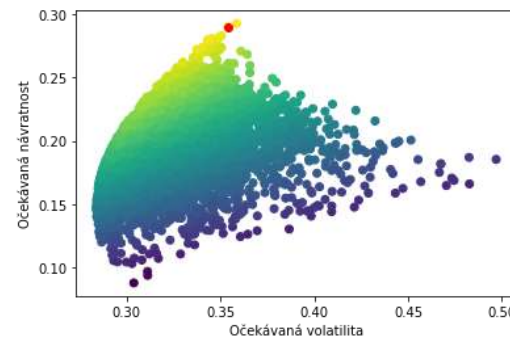
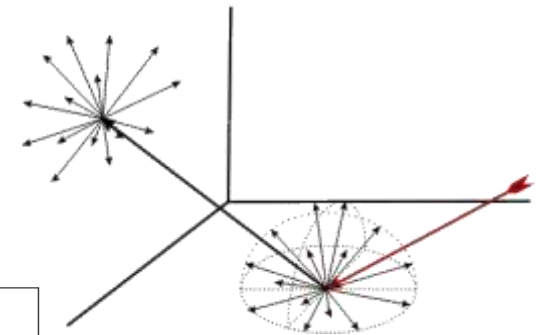
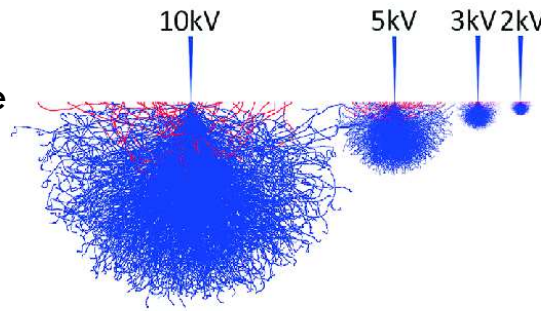
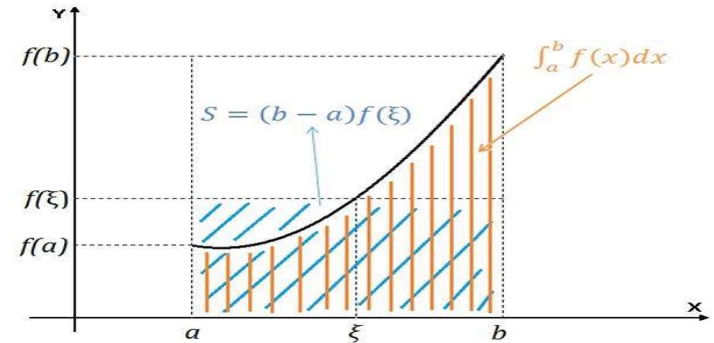
# METODY MONTE CARLO

# Metoda Monte Carlo

- ❑ Simulační metoda založená na užití stochastických procesů a generování náhodných čísel
  - × opakované náhodné vzorkování pro získání numerických výsledků
- ❑ 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

# Využití metody Monte Carlo

- ✗ dnes mnoho oblastí vědy a inženýrství
- ✗ různé typy aplikací
- ❑ obecné úlohy
  - ✗ numerická integrace
  - ✗ geometrické úlohy
- ❑ počítačová fyzika a fyzikální modelování
  - ✗ termodynamika
  - ✗ stochastické molekulární simulace
  - ✗ vývoj na strukturální úrovni
- ❑ počítačová grafika
  - ✗ realistické osvětlení scény
- ❑ finanční inženýrství
  - ✗ optimalizace portfolia akcií
- ❑ mnohé jiné oblasti
  - ✗ výzkum nových léků
  - ✗ ekonofyzika, sociofyzika atd.



# Metoda Monte Carlo

## □ Princip

- × výsledky počítány na základě opakovaného náhodného výběru vzorků a statistické analýzy
- × modelování takové náhodné veličiny  $X$ , že její střední hodnota  $E(X)$  je rovna hledané hodnotě  $a$

$$E(X) = a$$

- × pomocí mnohonásobného opakování **náhodných pokusů** lze získat střední hodnotu hledané veličiny

$$a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$$

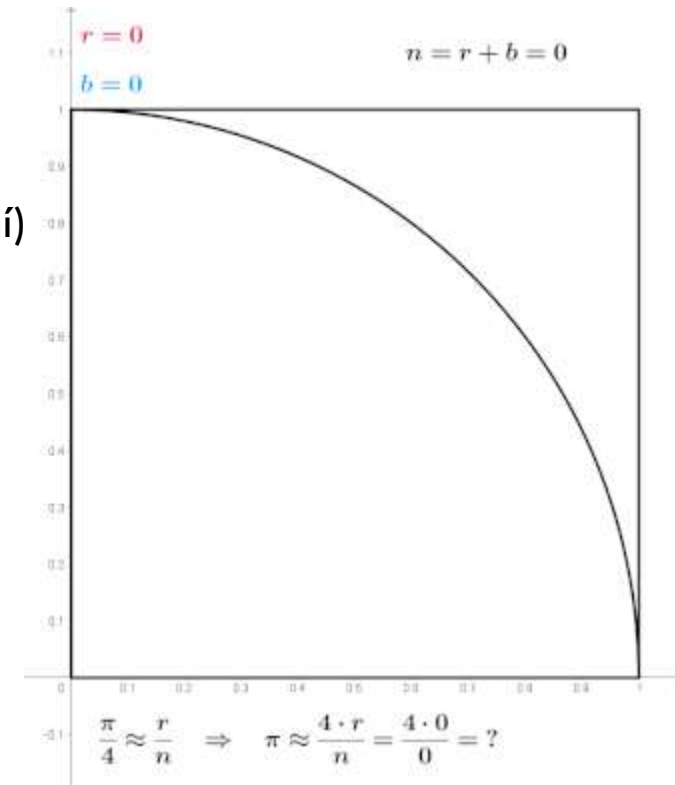
- × známe-li rozdělení pravděpodobností pro dílčí procesy jevu, můžeme modelovat rozdělení pravděpodobnosti určité konfigurace systému
  - simulace pohybu částic v tekutině pomocí modelu tuhých koulí



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

# Monte Carlo – postup

- ❑ Postup:
- ❑ 1. Analýza problému a vytvoření modelu
  - × popis jevu pomocí náhodné veličiny
  - × minimální, maximální hodnoty, omezení, ...
  - × např. budu určovat  $\pi$  z podílu obsahu čtverce a kruhu
- ❑ 2. Generování a transformace náhodné veličiny (rozehrání)
  - × z rozdělení, které jevu odpovídá
  - × Gauss, rovnoměrné, trojúhelníkové, Poissonovo, atd.
  - × např. budu generovat body rozmístěné rovnoměrně
- ❑ 3. Opakování předchozího kroku a zpracování
  - × např. počítání bodů uvnitř kruhu
- ❑ 4. Statistické vyhodnocení výsledků
  - × souhrnné statistiky, histogramy, intervaly spolehlivosti
  - × např. podíl obsahů



# 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?*

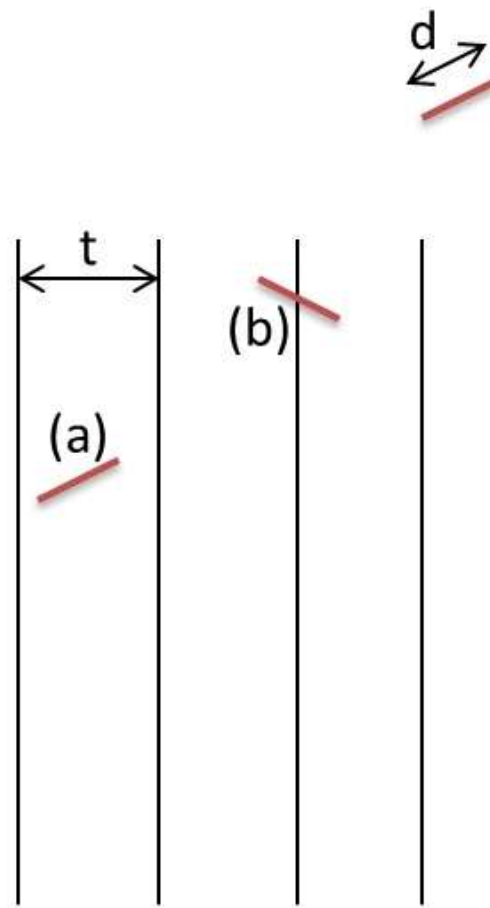
×  $d < t$

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

×  $n$ : 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 proporcčně k převrácené hodnotě odmocniny z počtu kroků

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

## □ Výsledky pro N pokusů

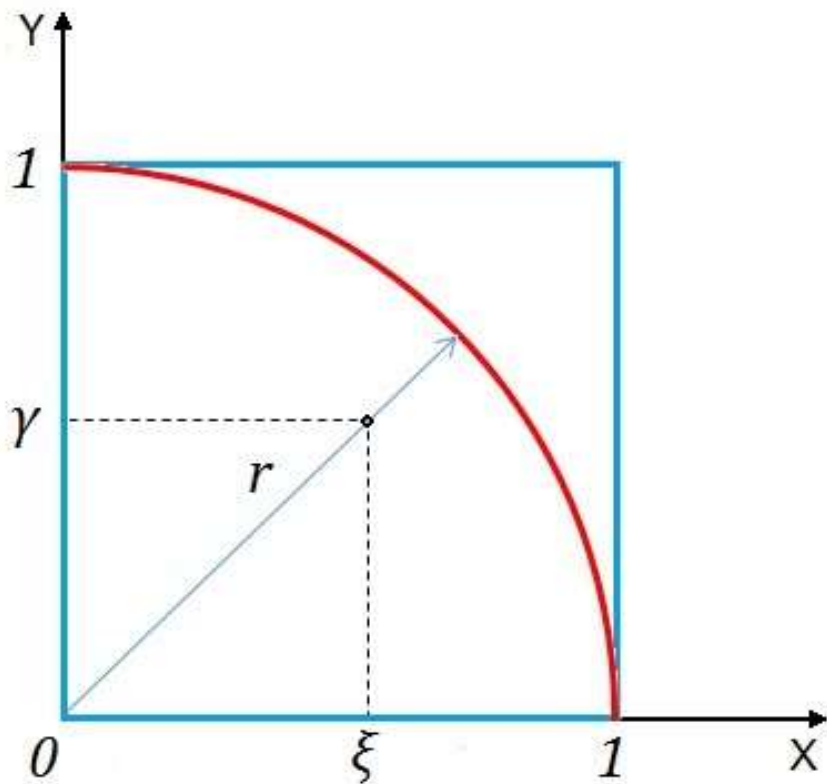
Počet pokusů N	Získané číslo $\pi$
10	3,333333333333334
100	3,030303030303030
1 000	3,129890453834116
10 000	3,106554830692762
100 000	3,139027529271432
1 000 000	3,142583738071931
10 000 000	3,141338395495446
100 000 000	3,141720284443186
1 000 000 000	3,141666595285384

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

# Výpočet čísla $\pi$ – čtvrtkruh

- Mějme jednotkovou kružnici, resp.  $1/4$  jednotkové kružnice
- Obsah čtverce  $S_{\square} = r^2$
- Obsah čtvrtkruhu  $S_0 = \frac{\pi r^2}{4}$
- $S_0 = \frac{\pi r^2}{4} \rightarrow \frac{S_0}{r^2} = \frac{\pi}{4} \Rightarrow \frac{S_0}{S_{\square}} = \frac{\pi}{4}$
- $S_{\square} \cong N$  a  $S_0 \cong n'$

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



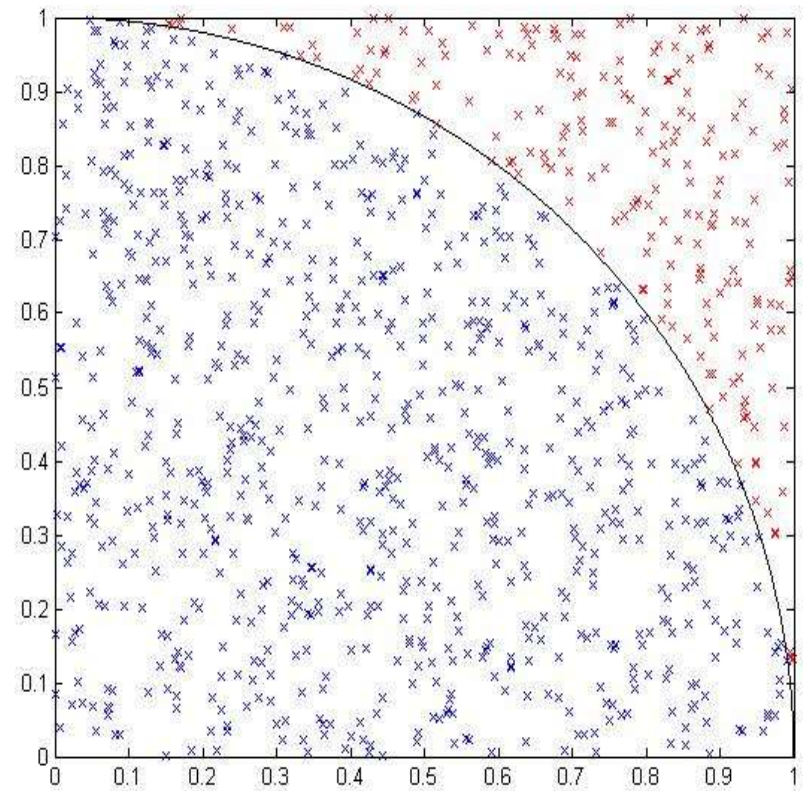


# Výpočet čísla $\pi$ – čtvertkruh

- 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

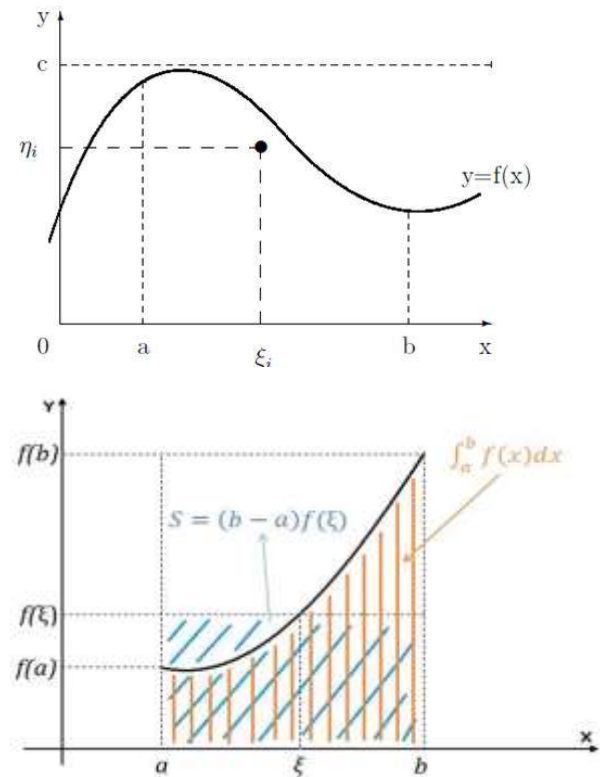
- Metoda Monte Carlo – lze spočítat obsah nebo objem oblasti, tedy i určitý integrál

- Výpočet určitého integrálu

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

- Dvě metody

- × geometrická
- × pomocí střední hodnoty



- Metoda Monte Carlo pracuje obvykle se střední hodnotou sledované veličiny

# Výpočet určitého integrálu – geom. metoda

## □ Výpočet určitého integrálu – geometrická metoda

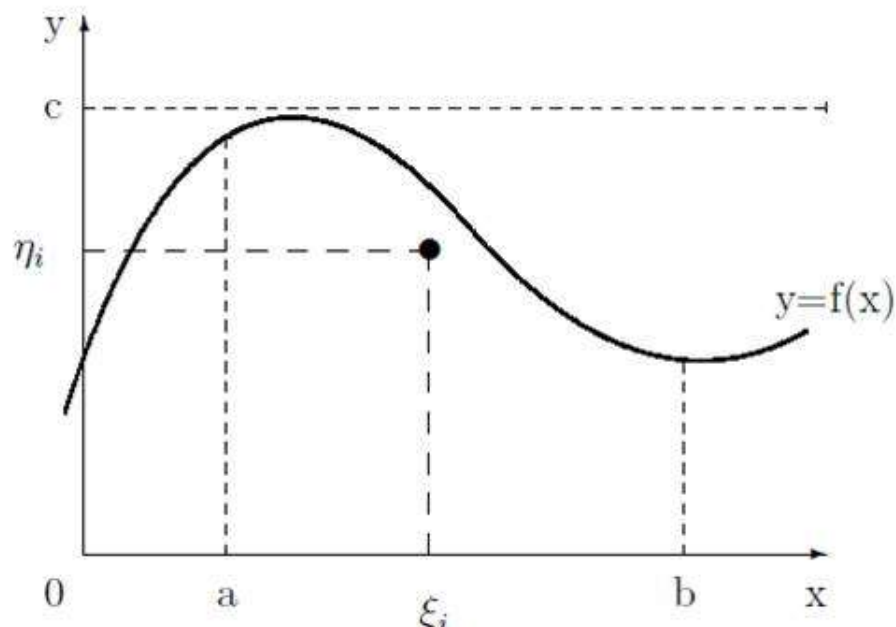
- × integrál – obsah plochy pod křivkou funkce  $f(x)$  na intervalu  $(a, b)$
- × funkce  $f(x)$  je na  $(a, b)$ :
  - omezená
  - spojitá
- × označme  $f_{sup}$  supremum funkce  
 $(\xi, \varphi)$  – náhodná čísla z intervalu  $(a, b)$  a  $(0, f_{sup})$

## □ Postup výpočtu

- × generujeme celkem  $n$  dvojic  $(\xi_i, \varphi_i)$
- × počítáme pokusy pod křivkou ( $n'$ ):  
jestliže platí  $\varphi_i < f(\xi_i)$ , potom  $n' = n' + 1$

## □ Výsledná hodnota integrálu:

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

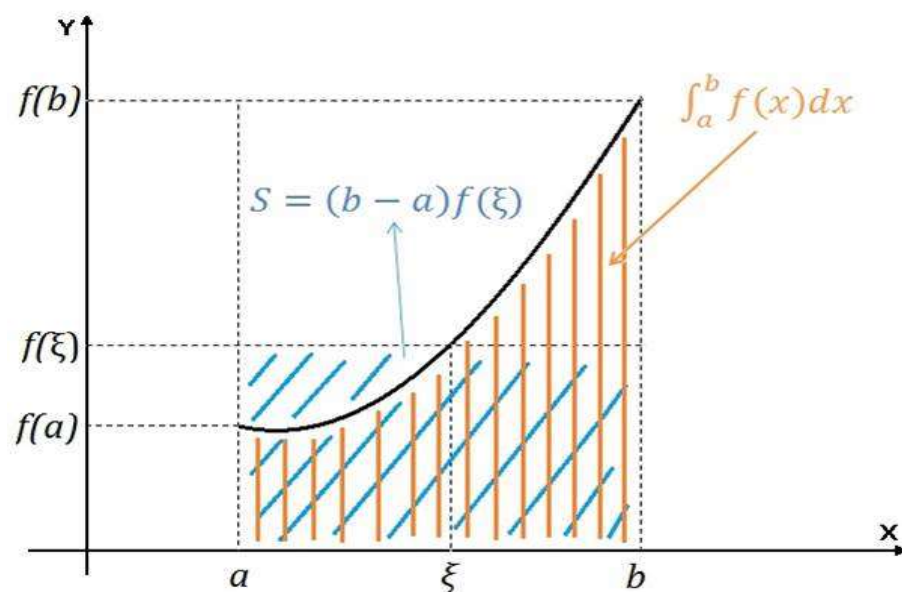


# Určitý integrál – věta o střední hodnotě

- Necht' funkce  $f(x)$  je spojitá a nezáporná na intervalu  $\langle a, b \rangle$

Pak existuje číslo  $\xi \in \langle a, b \rangle$  tak, že platí:

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



- ✗ existuje bod  $\xi$ , kde obsah plochy pod křivkou = obsahu obdélníku daného  $(b - a) f(\xi)$
- Hodnota
$$f(\xi) = \frac{1}{(b - a)} \int_a^b f(x)dx = \langle f \rangle$$
- vyjadřuje střední hodnotu  $\langle f \rangle$  funkce  $f(x)$  na intervalu  $\langle a, b \rangle$

# Výpočet určitého integrálu – stř. hodnota

## □ Výpočet určitého integrálu – střední hodnota

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

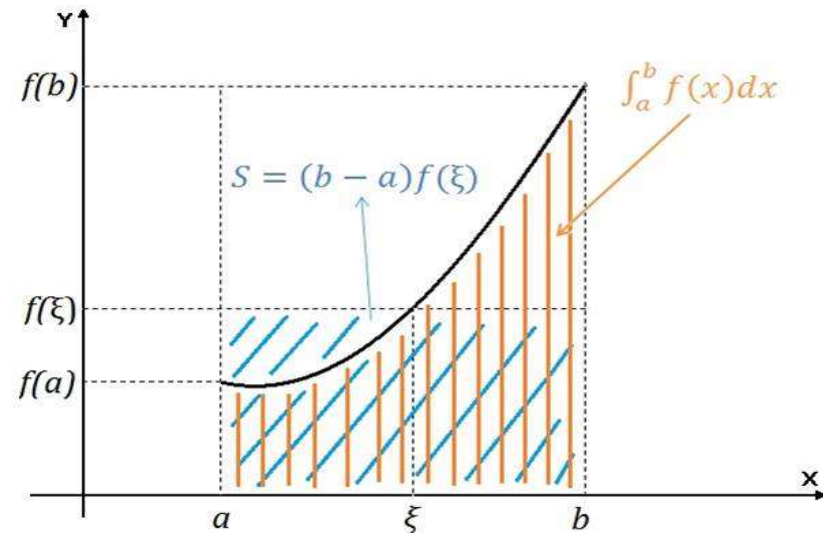
## □ $\langle f \rangle$ : střední hodnota funkce na intervalu $(a, b)$

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

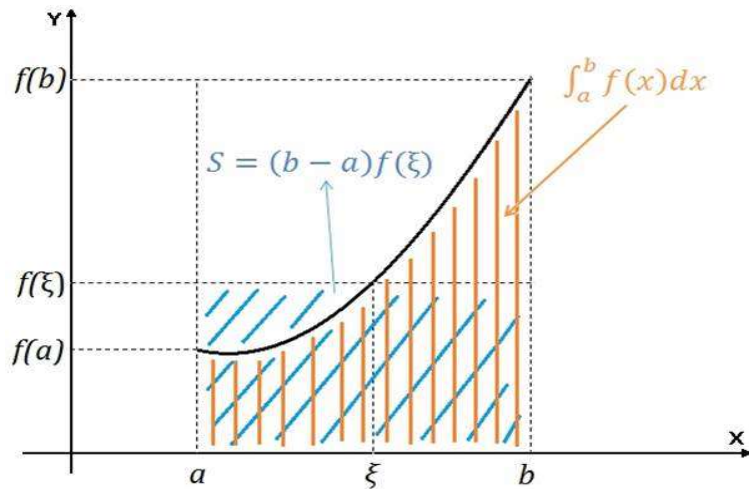
- × hodnoty  $\xi_i$  budeme generovat
- ×  $\xi$  – náhodné číslo z intervalu  $(a, b)$ 
  - rovnoměrně rozdělené

## □ Potom

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

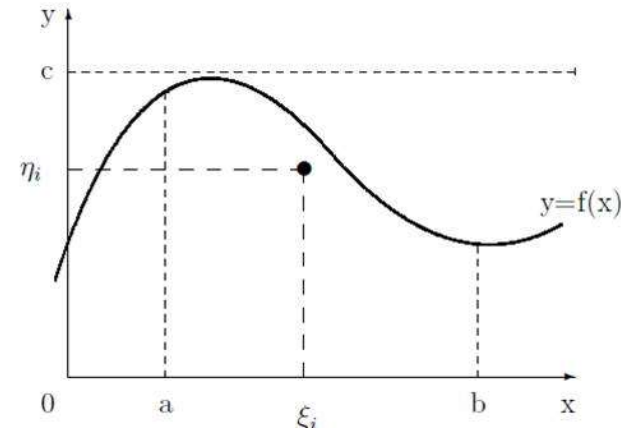


# Výpočet určitého integrálu – srovnání



□ 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

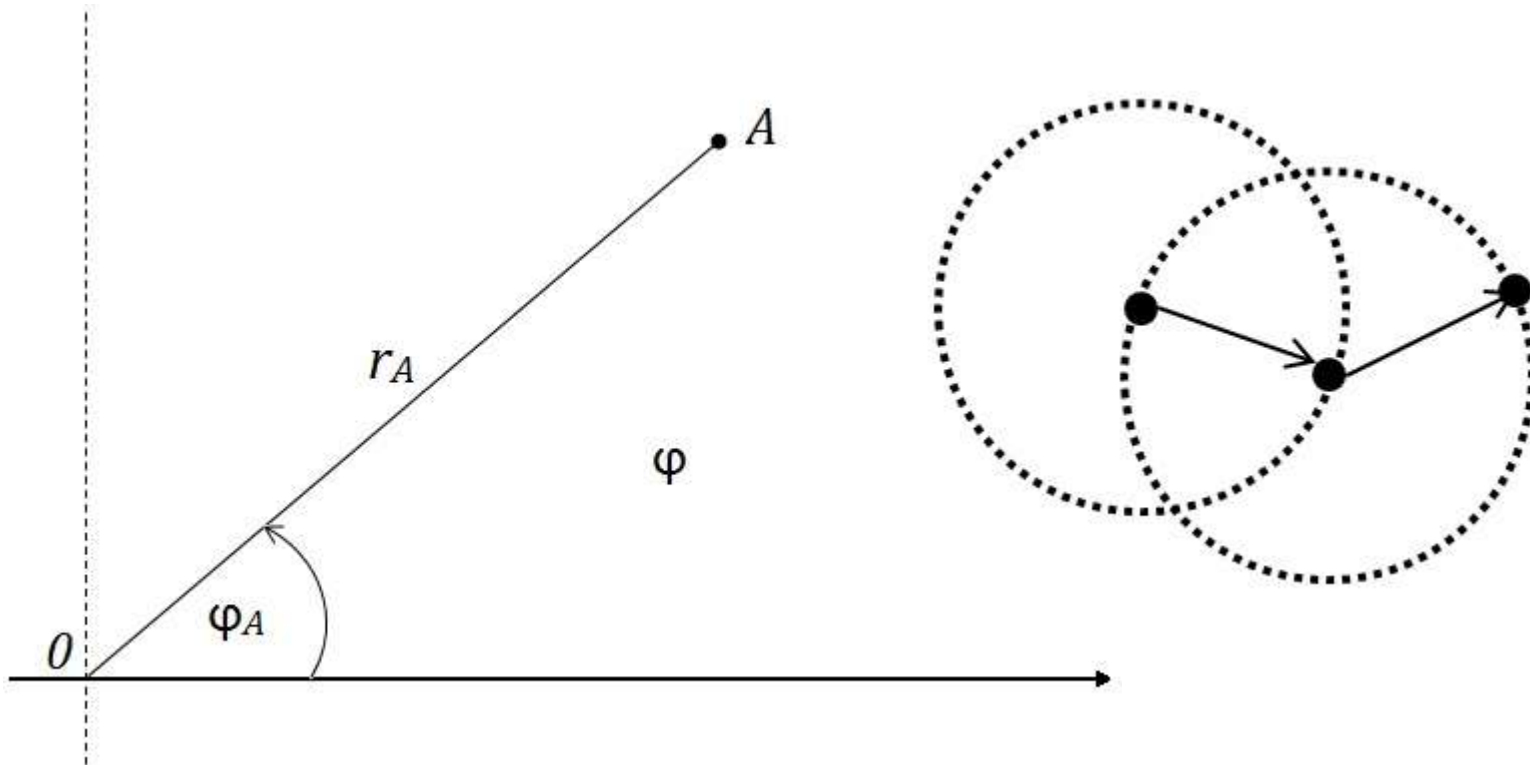
- ✗ je (zpravidla) méně přesná
- ✗ nemusí být méně efektivní (celkový počet pokusů)

# 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

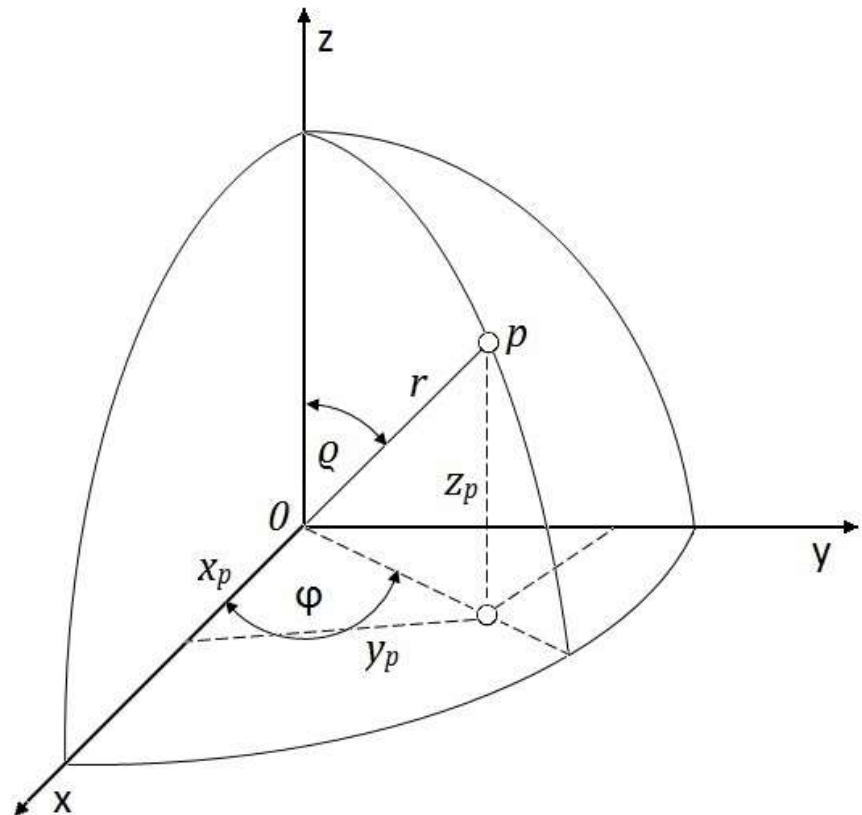
- Generování bodu na kouli (3D): Sférická soustava souřadnic
  - Zobrazení z  $(x, y, z)$  do  $(r, \varphi, \vartheta)$  pomocí transformace

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

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

$$z = r \cos \vartheta$$

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





# Simulace ideálního plynu

## Model ideálního plynu

- × mezičásticový potenciál lze popsat Lennard-Jonesovým vzorcem
- × síla  $F = -\nabla V$

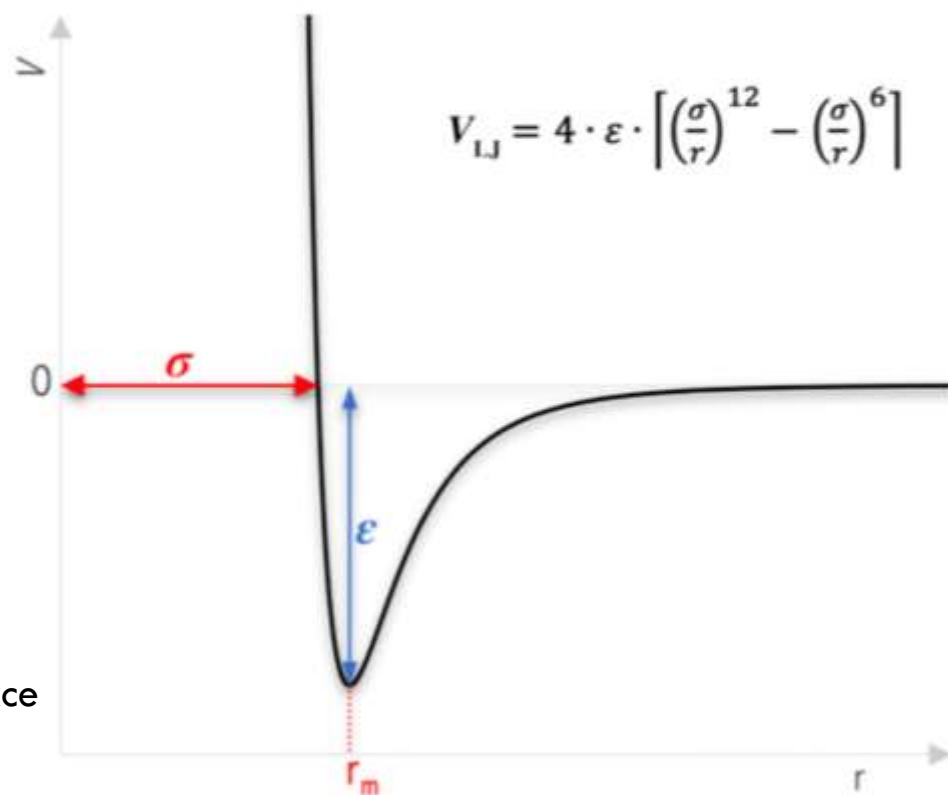
## Způsoby řešení

### Molekulární dynamika

- × řešení pohybových rovnic
- × aktualizují se polohy částic na základě sil působících mezi nimi
- × možnost sledovat časový vývoj systému

### Monte Carlo

- × generování náhodných konfigurací systému
  - přijetí či odmítnutí na základě kritérií
- × pouze posunutí částic bez ohledu na interakce
- × studium rovnovážných termodyn. vlastností



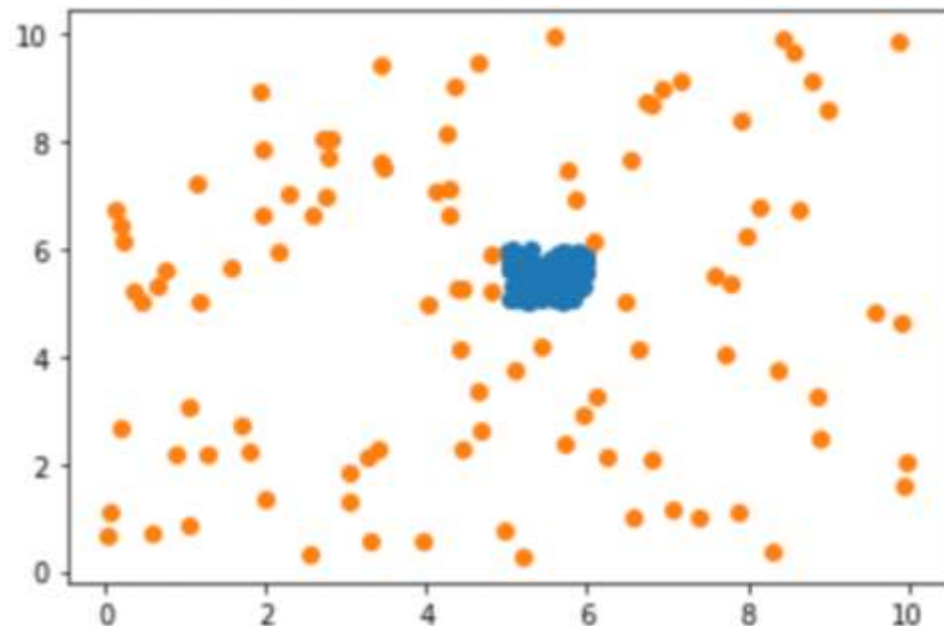
# Simulace ideálního plynu

## □ Postup simulace vývoje polohy ideálního plynu:

- × 1. vygeneruj náhodně částice v simulačním boxu
- × 2. posuň náhodně vybranou částici
- × 3. pokud se energie zmenšila, částici tam ponech
- × 4. pokud se zhoršila, akceptujeme posun s určitou pravděpodobností
  - je určena Metropolisovým algoritmem a závisí na teplotě systému
- × 5. pokračuj do konce iteračního cyklu

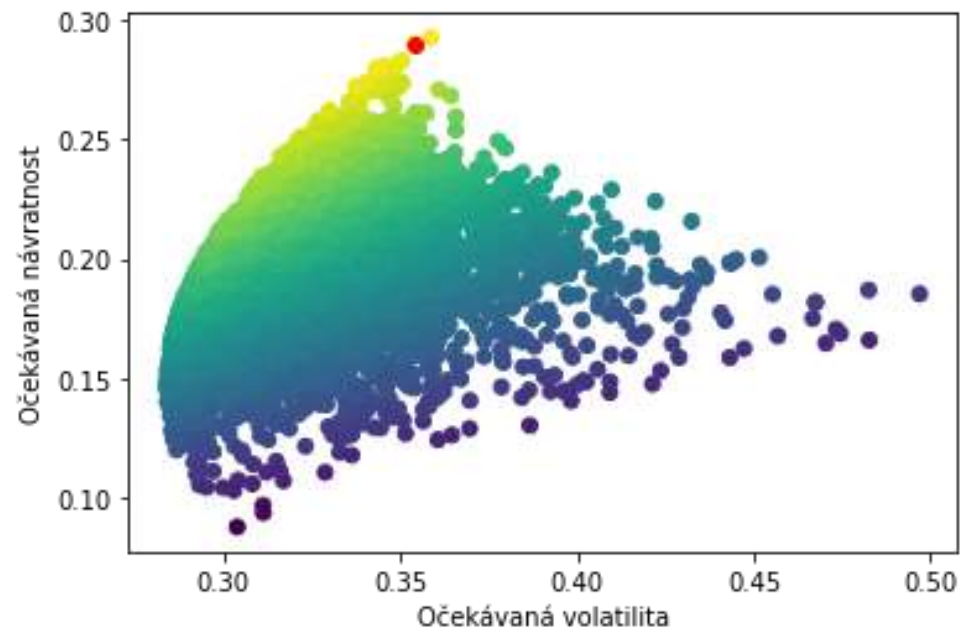
## □ Ověření funkčnosti

- × vykreslení vývoje energie
- × uspořádat molekuly na počátku nevýhodně
  - a porovnat s koncovým stavem (viz obr.)
- × 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 změní 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

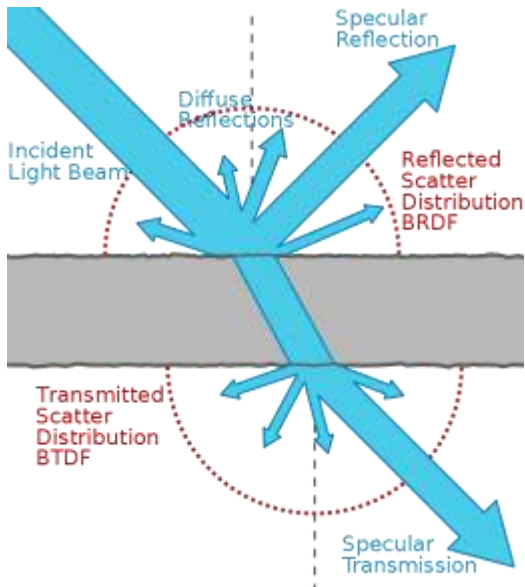
## □ Cíl

- × jak bude vypadat výsledné natočení spinů v daném čase

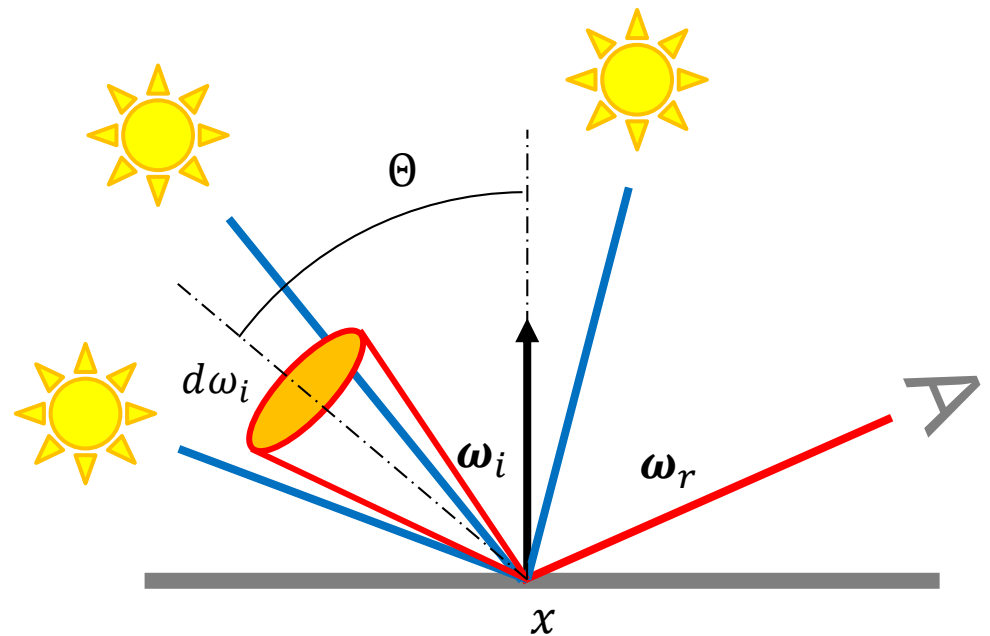


# Metody MC v počítačové grafice

- Aproximace řešení stochastickým vzorkováním
- Vyšetřování trajektorie od pozorovatele nebo od zdroje světla



$f(x, \omega_r, \omega_i)$  dvousměrná  
odrazová distribuční funkce  
(BRDF)



$$L_r(x, \omega_r) = \int_{\Omega} f(x, \omega_r, \omega_i) L_i(x, \omega_i) \cos \Theta d\omega_i$$

odražená radiance

BRDF

vstupní radiance promítnutá na kolmou plochu

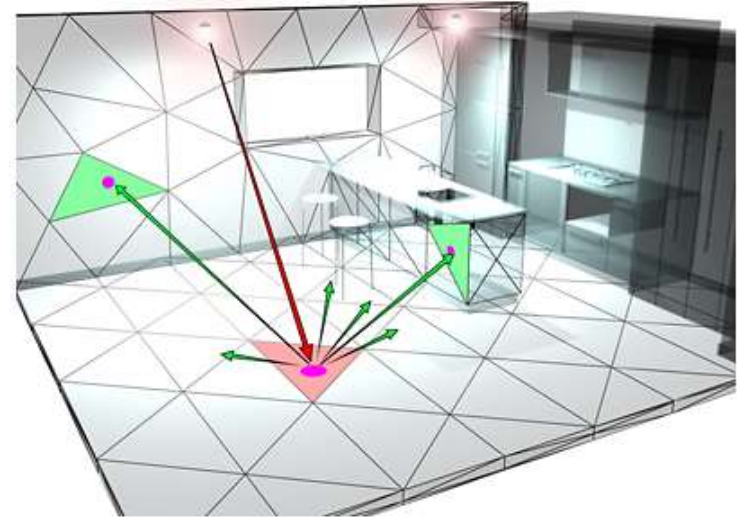
# Metody MC v počítačové grafice

## □ Výhody

- × libovolně definované zobrazované objekty
- × bez předzpracování
- × jakákoliv BRDF
- × nestranné výsledné řešení
- × nízká paměťová náročnost

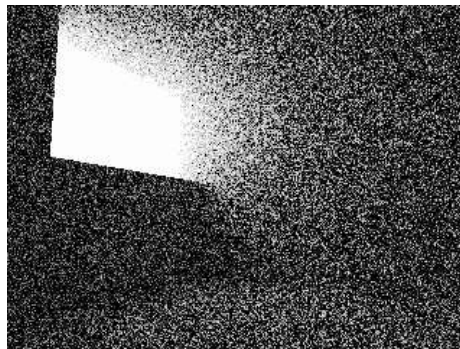
## □ Nevýhody

- × pomalá konvergence
- × přesnost roste s odmocninou – chyba metody klesá s počtem pokusů  $N$  jako  
( $n$  počet objektů)
- × empirická složitost  $O(\log(n))$



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

2 paprsky



8 paprsků

