

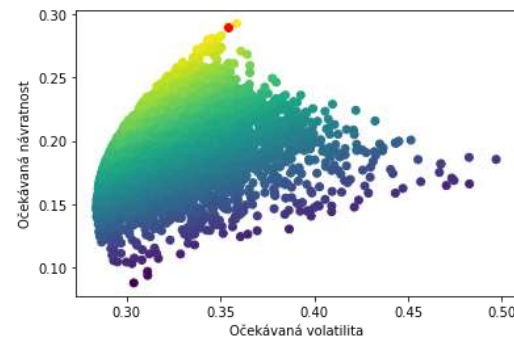
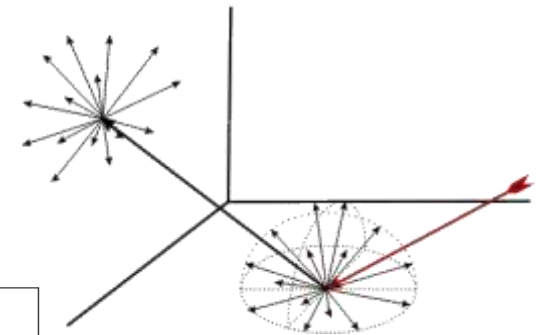
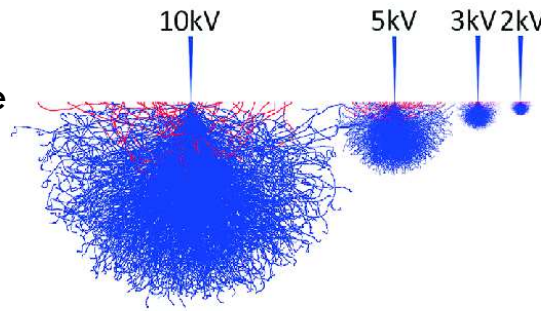
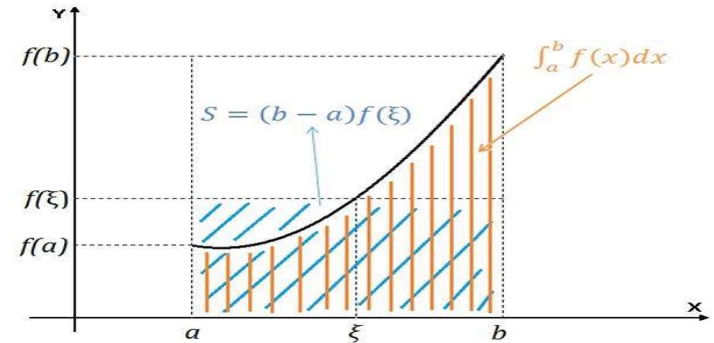
METODY MONTE CARLO

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

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

- × 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, 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?

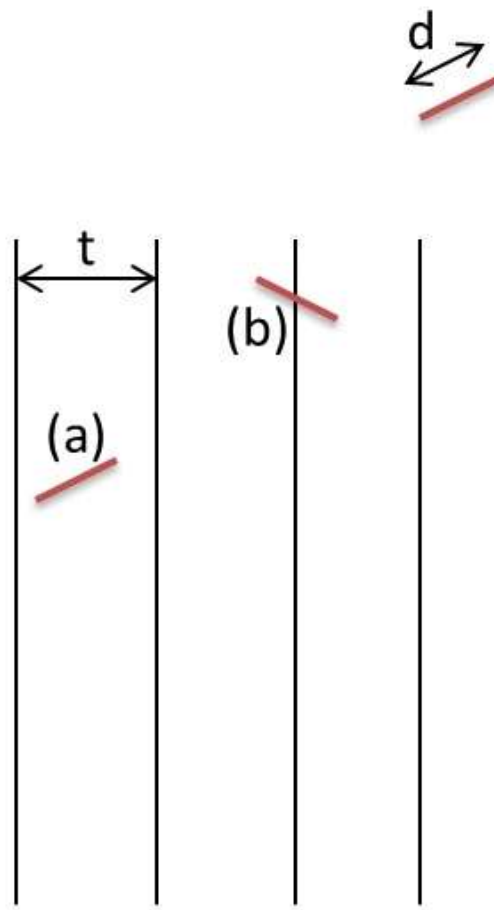
× $d < t$

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

× n : celkový počet hodů jehly

× n_0 : kolikrát jehla protne jednu z čar

Pomocí mnohonásobných náhodných pokusů lze spočítat číslo π 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

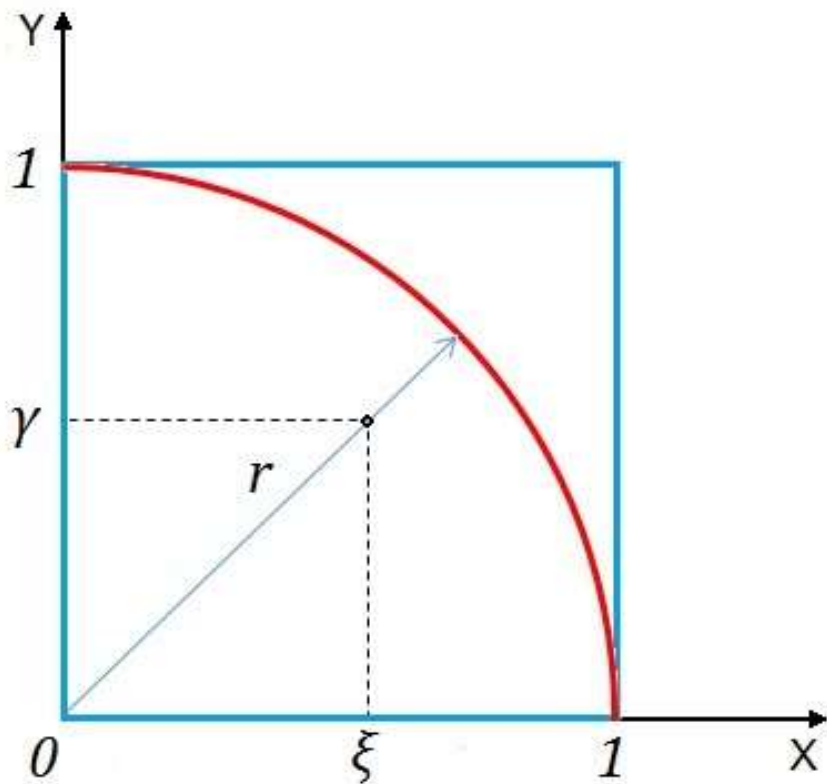
Počet pokusů N	Získané číslo π
10	3,3333333333333334
100	3,030303030303030
1 000	3,129890453834116
10 000	3,106554830692762
100 000	3,139027529271432
1 000 000	3,142583738071931
10 000 000	3,141338395495446
100 000 000	3,141720284443186
1 000 000 000	3,141666595285384

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

Výpočet čísla π – 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 $S_0 \cong n'$

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

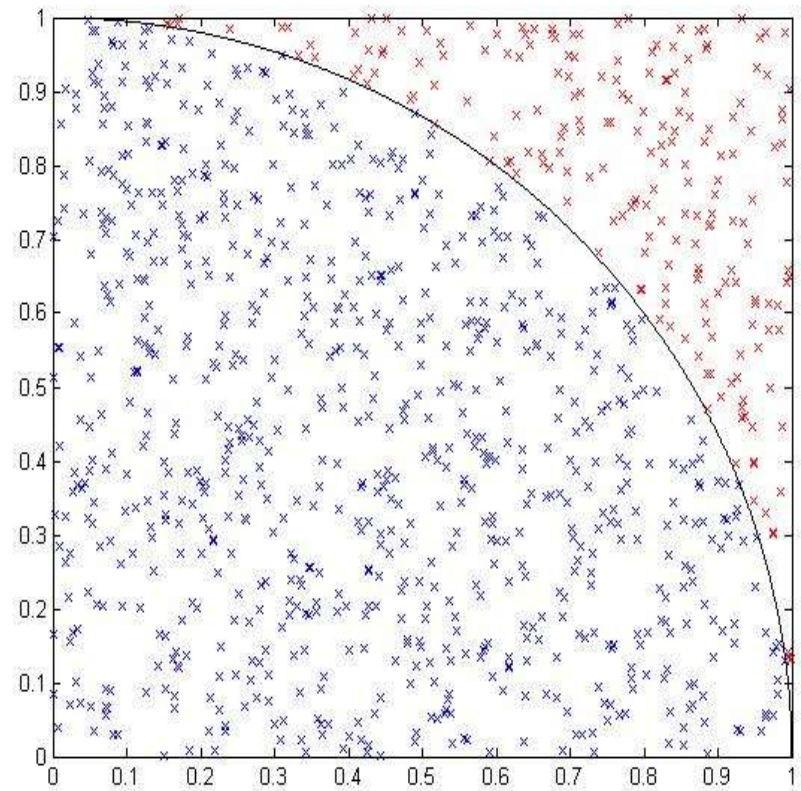


Výpočet čísla π – čtvertkruh

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

Počet pokusů N	Získané číslo π
10	3,2000
100	3,1600
1000	3,1000
10000	3,1444

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



výsledek pro 1000 pokusů

Výpočet určitého integrálu

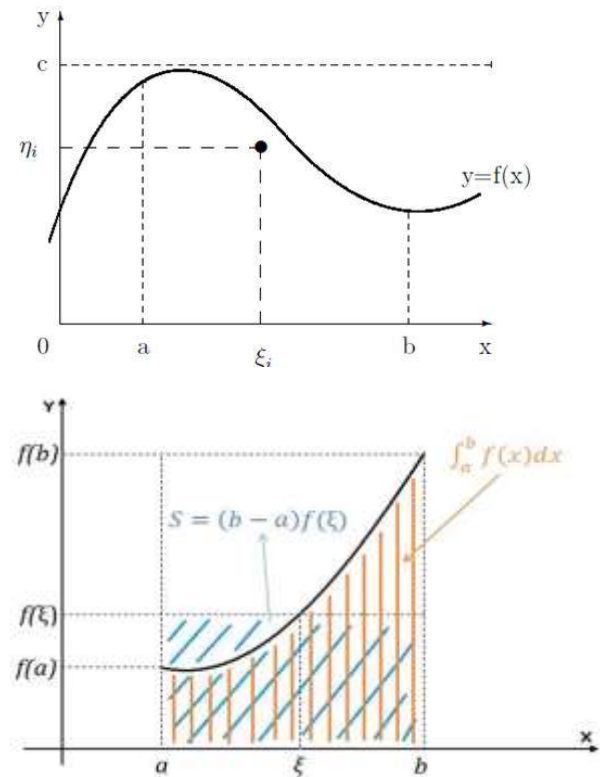
- Metoda Monte Carlo – lze spočítat obsah nebo objem oblasti, tedy i určitý integrál

- 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

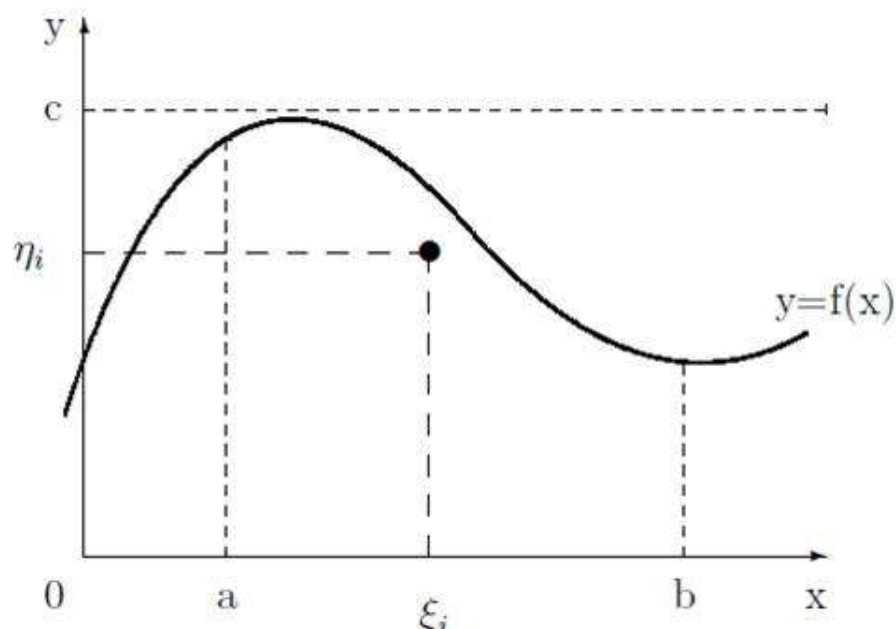
- × integrál – obsah plochy pod křivkou funkce $f(x)$ na intervalu (a, b)
- × funkce $f(x)$ je na (a, b) :
 - omezená
 - spojitá
- × označme f_{sup} supremum funkce
 (ξ, φ) – náhodná čísla z intervalu (a, b) a $(0, f_{sup})$

□ Postup výpočtu

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

□ Výsledná hodnota integrálu:

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

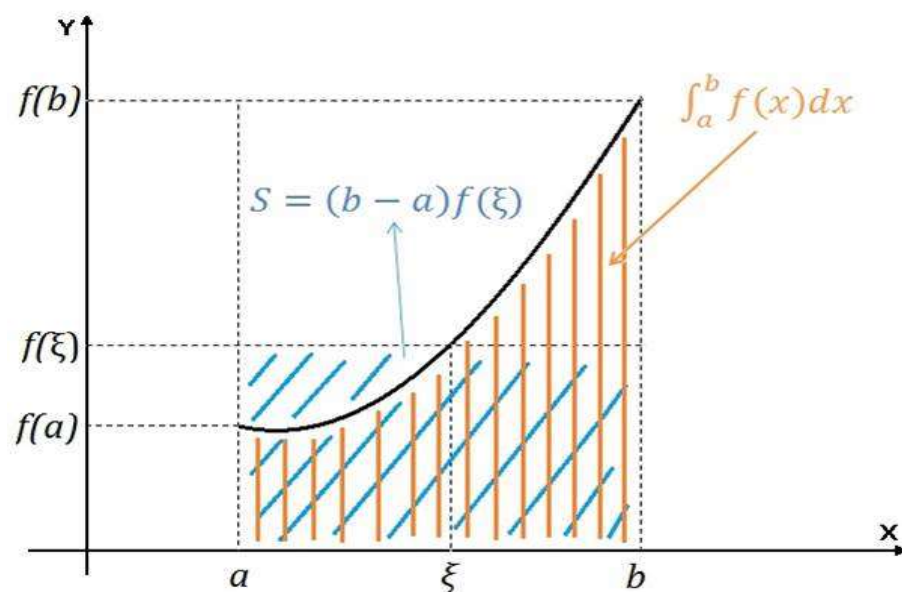


Určitý integrál – věta o střední hodnotě

- 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 ξ , 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

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

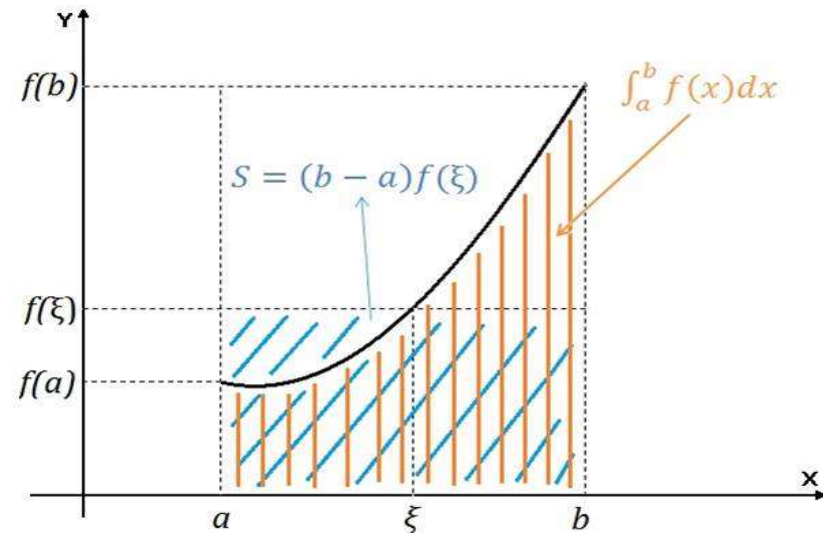
□ $\langle f \rangle$: střední hodnota funkce na intervalu (a, b)

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

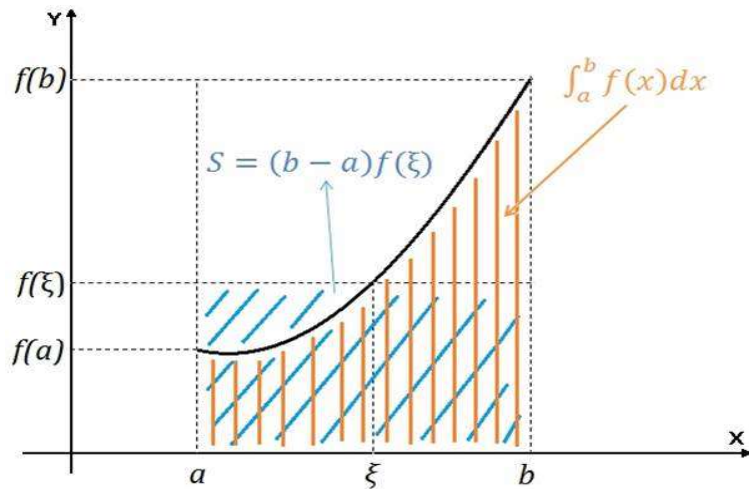
- × hodnoty ξ_i budeme generovat
- × ξ – náhodné číslo z intervalu (a, b)
 - rovnoměrně rozdělené

□ Potom

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

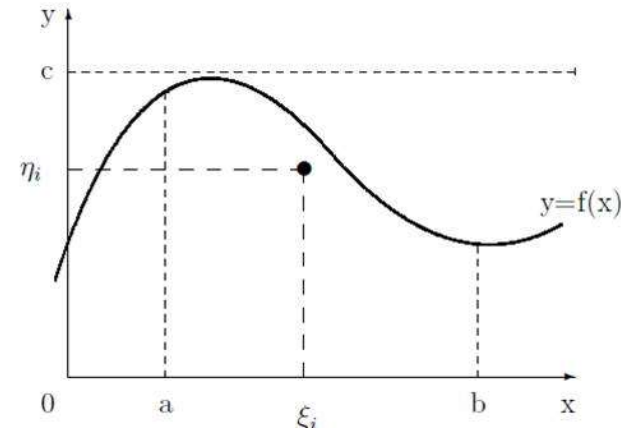


Výpočet určitého integrálu – srovnání



□ 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

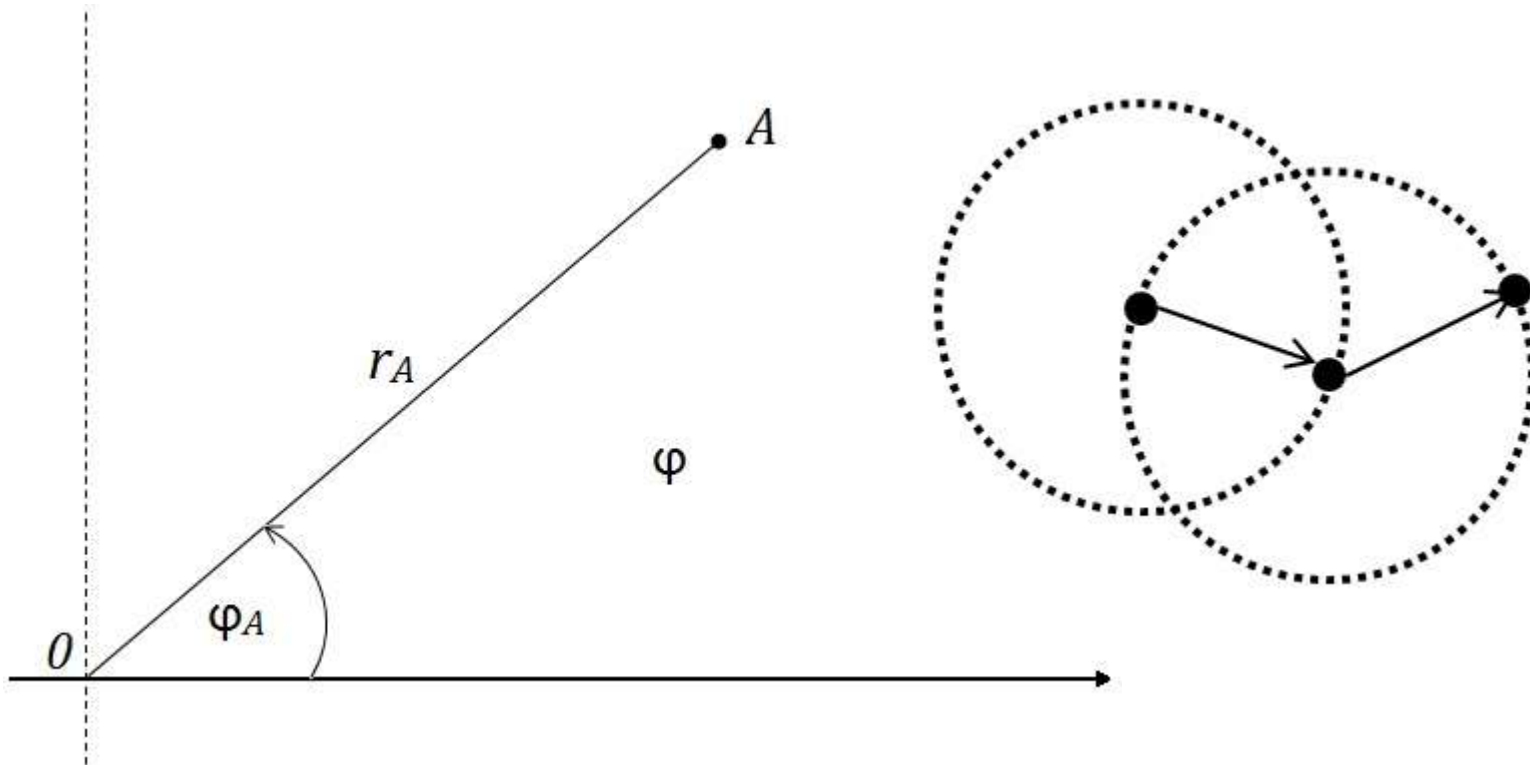
- ✗ je (zpravidla) méně přesná
- ✗ nemusí být méně efektivní (celkový počet pokusů)

Náhodný posun částice

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

× Zobrazení z (x, y) do (r, φ) pomocí transformace

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



Náhodný posun částice

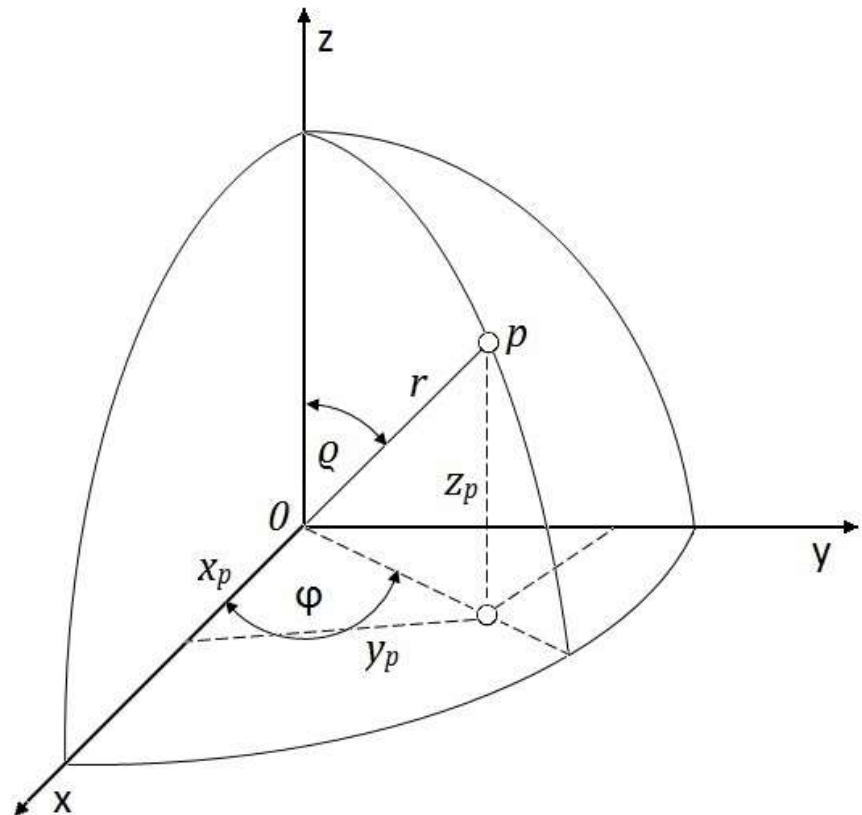
- Generování bodu na kouli (3D): Sférická soustava souřadnic
 - Zobrazení z (x, y, z) do (r, φ, ϑ) pomocí transformace

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

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

$$z = r \cos \vartheta$$

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



Simulace ideálního plynu

Model ideálního plynu

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

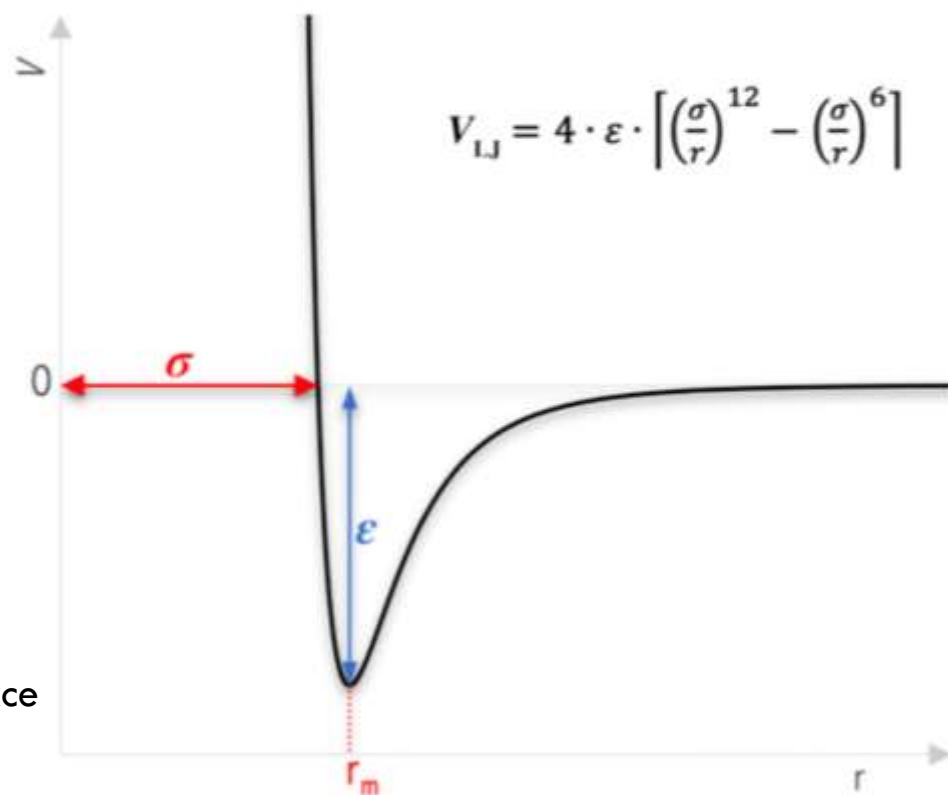
Způsoby řešení

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



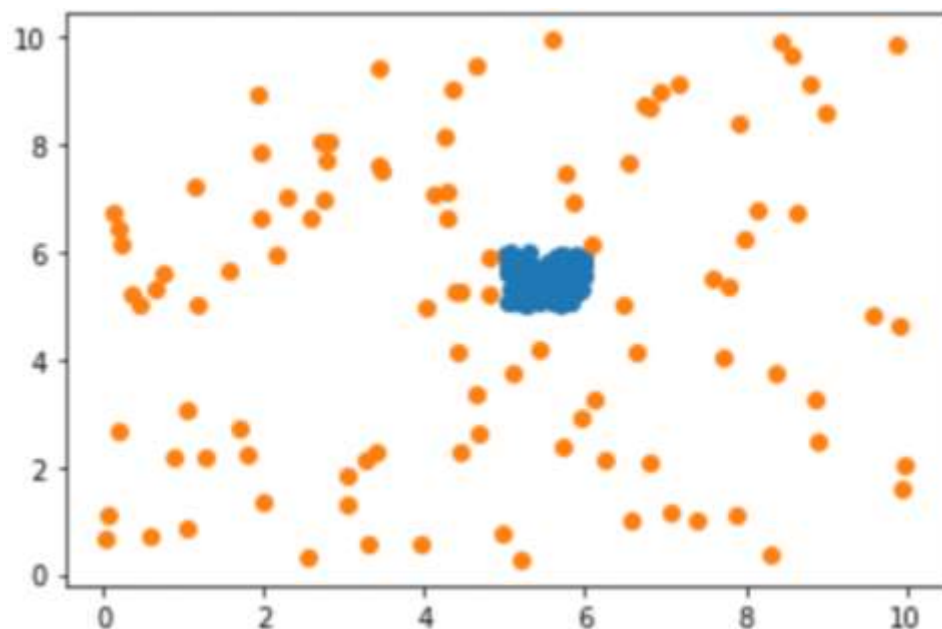
Simulace ideálního plynu

□ 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

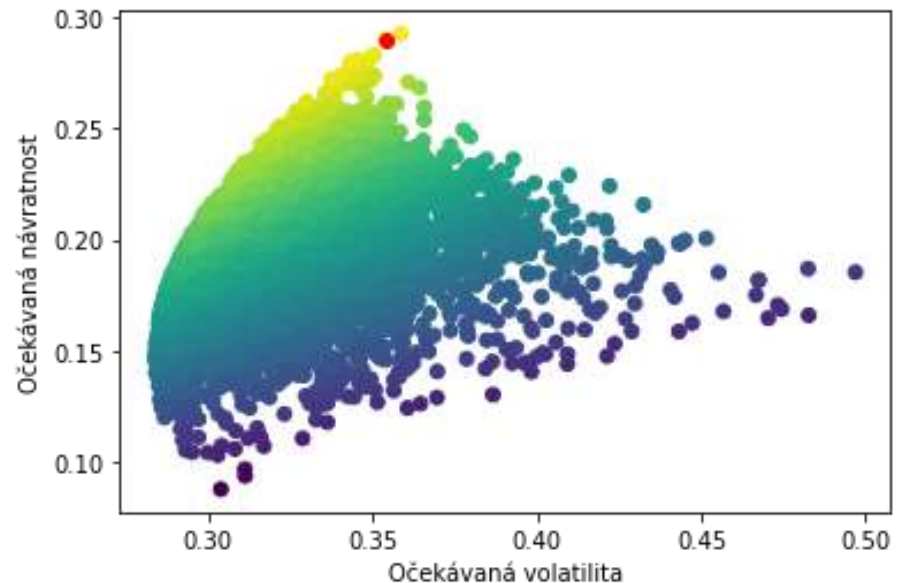
□ Ověření funkčnosti

- × 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

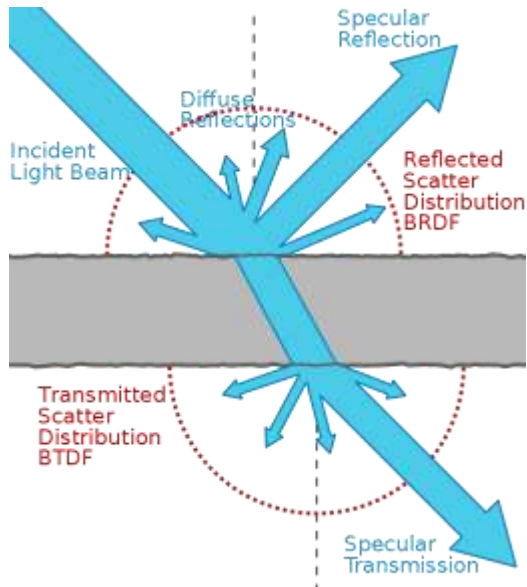
□ Cíl

- × jak bude vypadat výsledné natočení spinů v daném čase

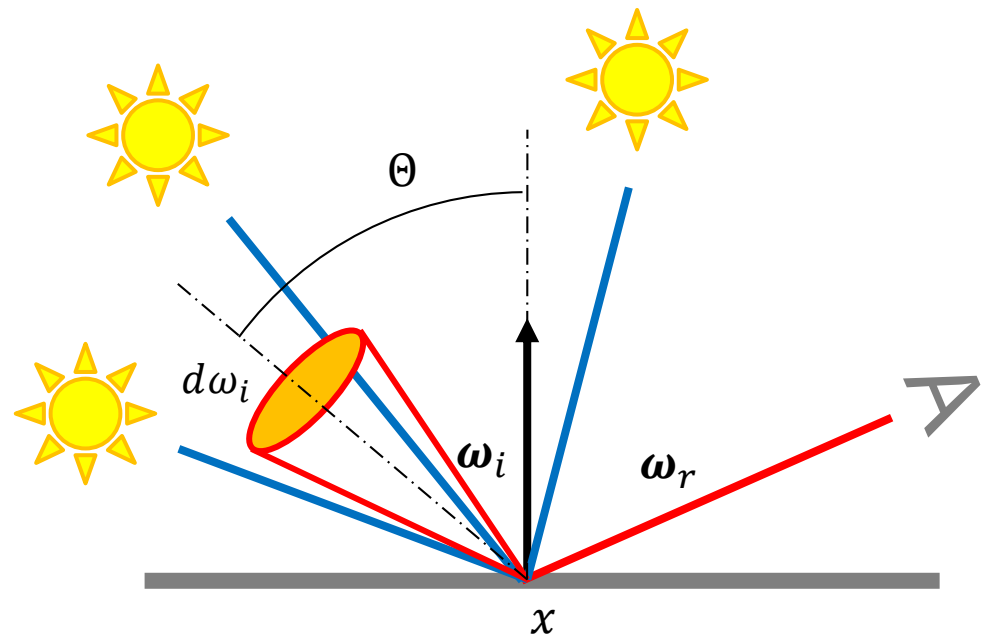


Metody MC v počítačové grafice

- 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

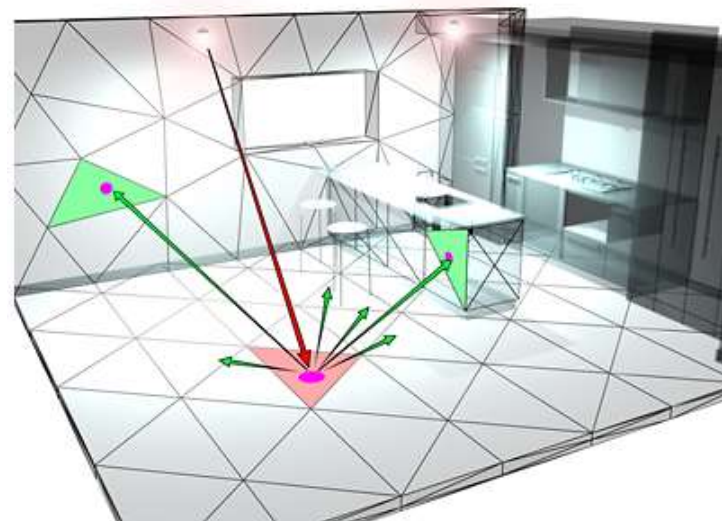
Metody MC v počítačové grafice

□ Výhody

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

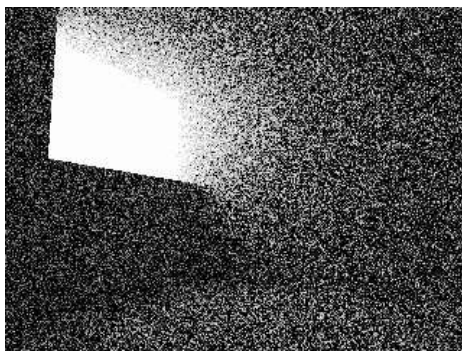
□ Nevýhody

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



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

2 paprsky



8 paprsků

