Monte Carlo metody

KSVI MFF UK Praha

e-mail: Josef.Pelikan@mff.cuni.cz

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

Monte Carlo integrace

Odhadovaný integrál:

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

Předpoklad: $f(x) \in L^2(0,1)$

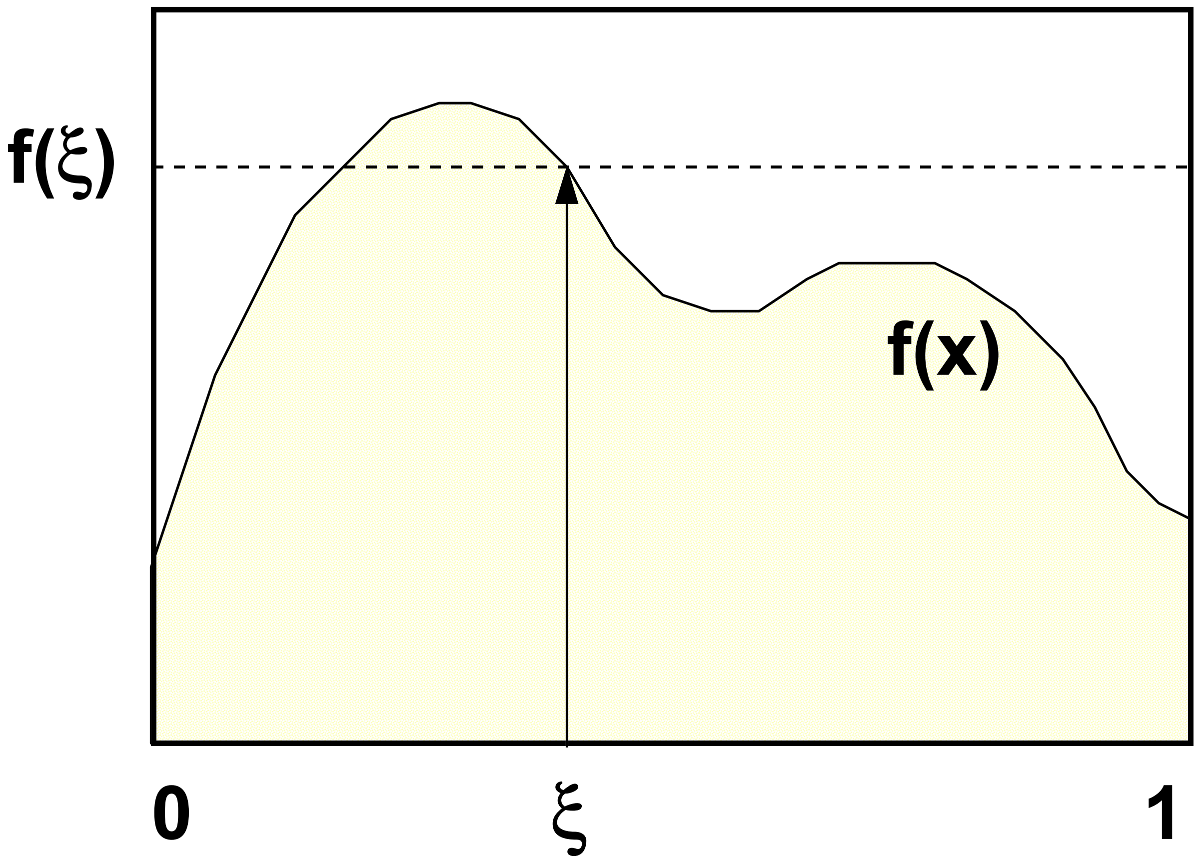
Je-li ξ náhodné číslo s distribucí **R(0,1)**, pak **f(ξ)** je tzv. **primární odhad** integrálu:

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

Odhad je **nestranný**, neboť:

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

Primární odhad urč. integrálu



Rozptyl odhadu

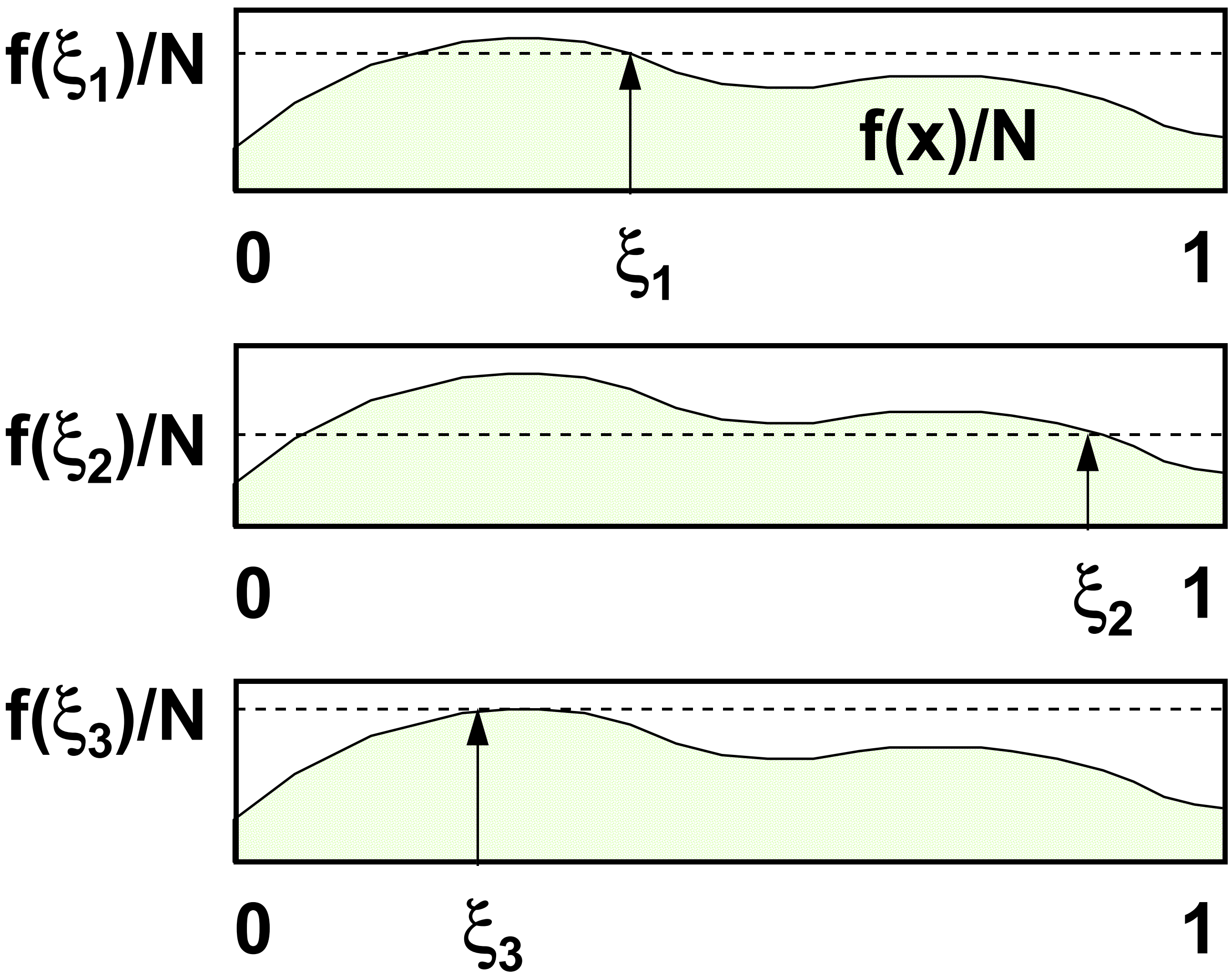
Měřítkem kvality odhadu je jeho **rozptyl** (nebo standardní odchylka):

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

(pro nestranný odhad)

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

Sekundární odhad urč. 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

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

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

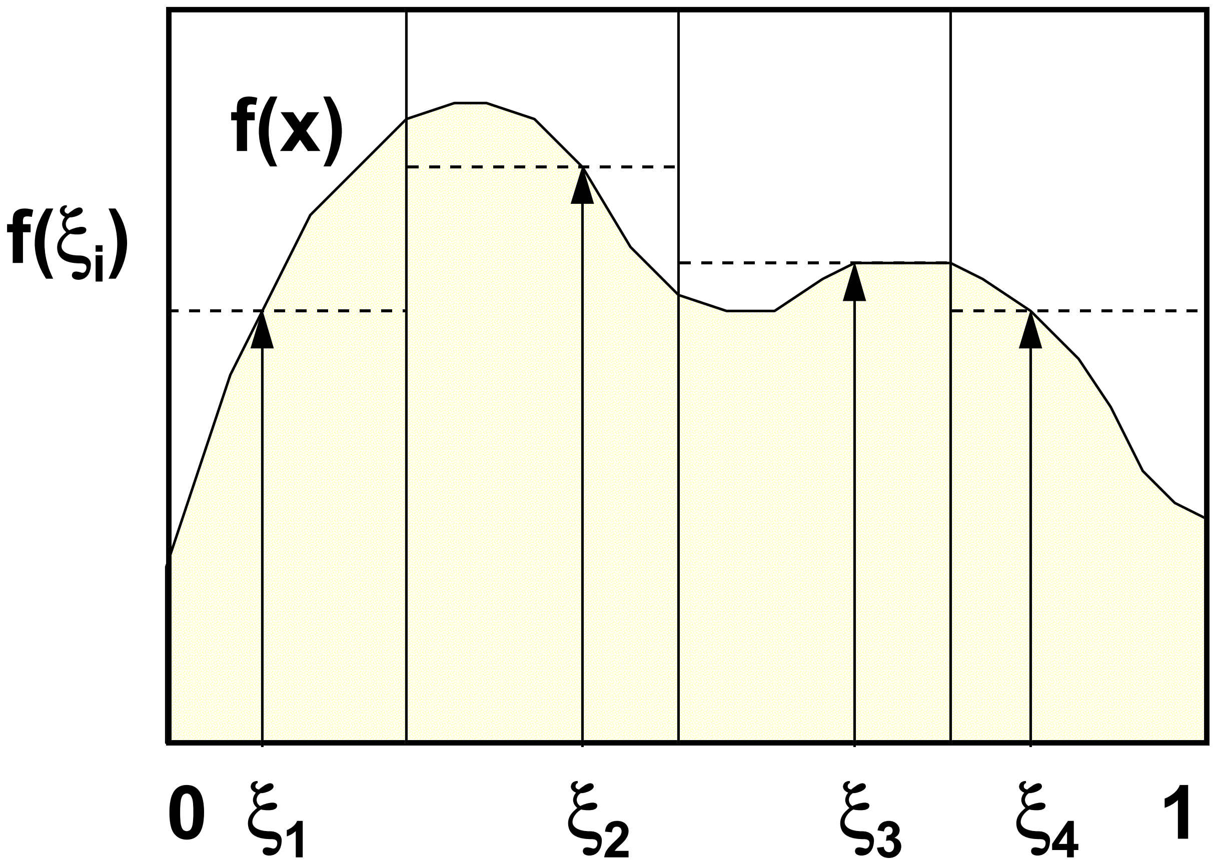
$$= \frac{\sigma^2_{prim}}{N}$$

... 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**!

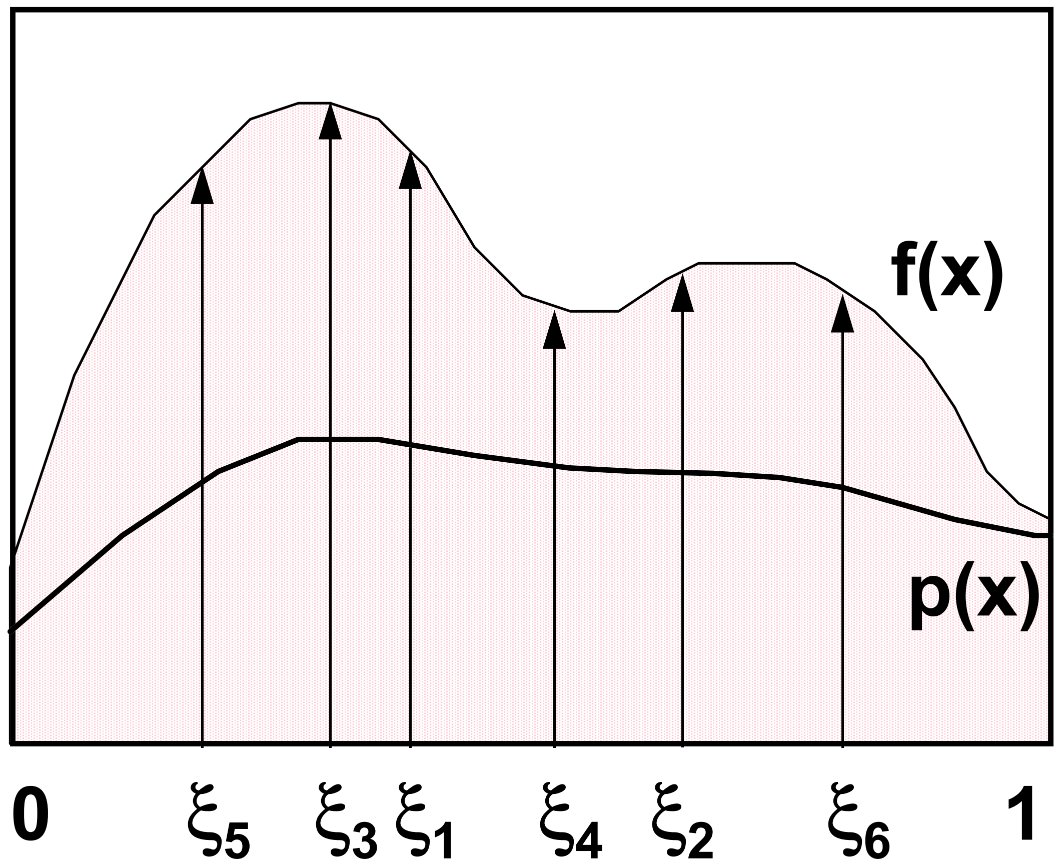
Rozklad intervalu na části

- **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 $\mathbf{N}^d$ 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:

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

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

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

(tento odhad je **nestranný**)

Rozptyl vzorkování podle důlež.

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

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

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 ($\mathbf{P^{-1}(x)}$)

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

Praktická implementace

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

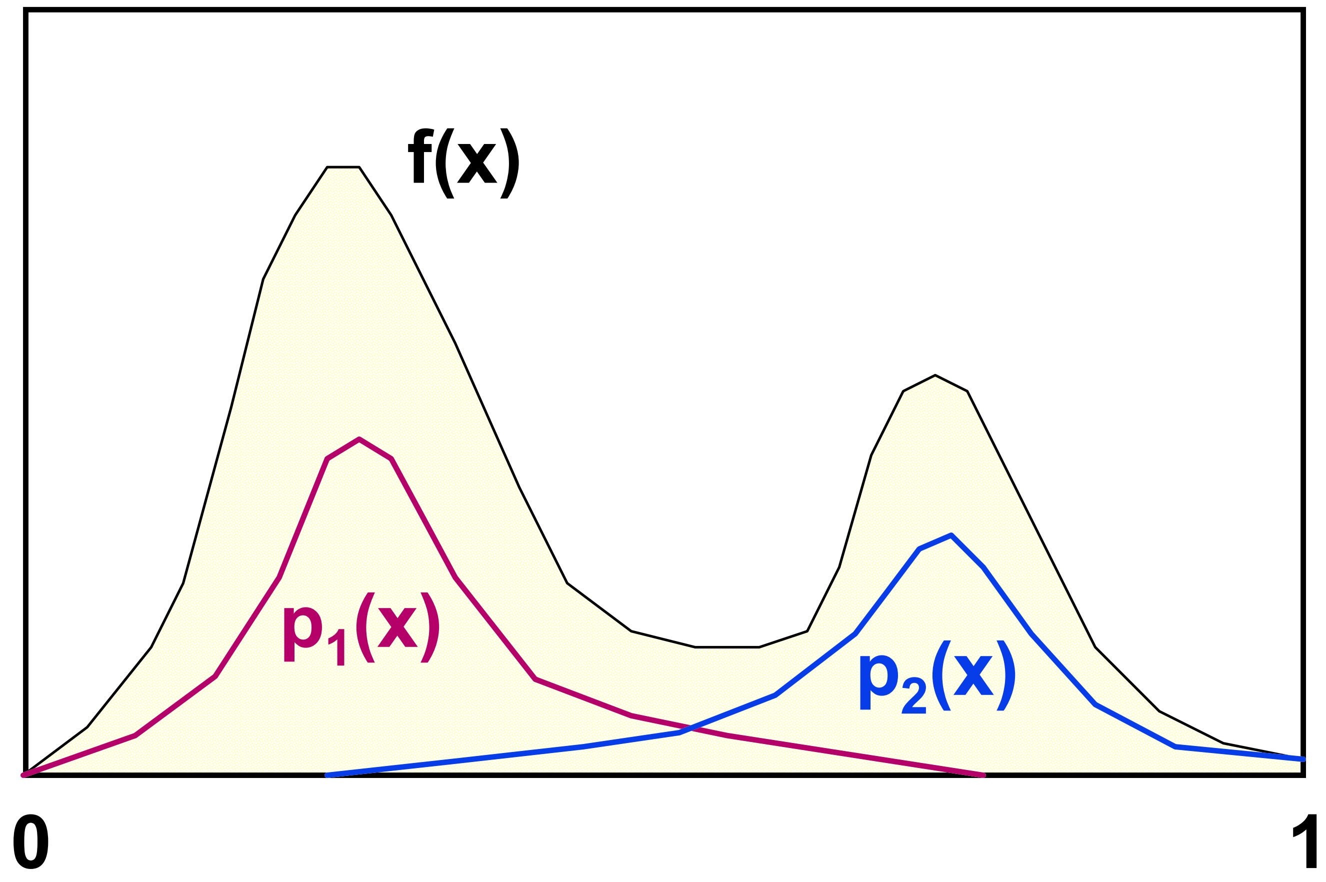
$$\xi = P^{-1}(\tau)$$

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 ξ_1, .. ξ_n s hustotami pravděpodobnosti $\mathbf{p_1(x)}$, .. $\mathbf{p_n(x)}$.

Kombinovaný odhad integrálu bude mít tvar:

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

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

Nestrannost kombin. 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

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

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

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

Mocninná heuristika

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

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

$\beta = 1$ .. vyrovnaná, $\beta = \infty$ .. maximální heuristika

Transformace integrandu

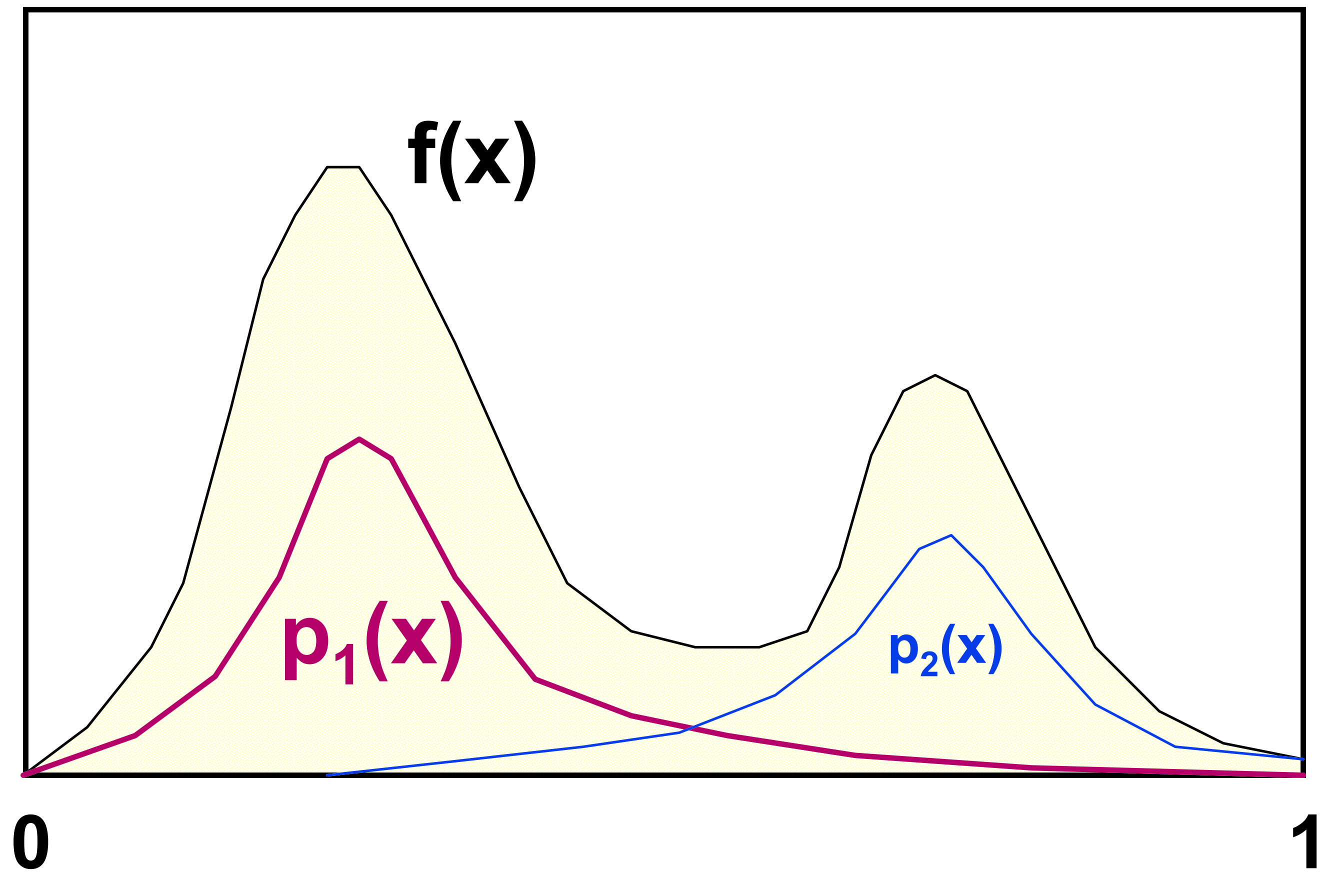
Interpretace kombinačního odhadu jako **transformace integrované funkce**:

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

Kombinace odhadů podle důležitosti:

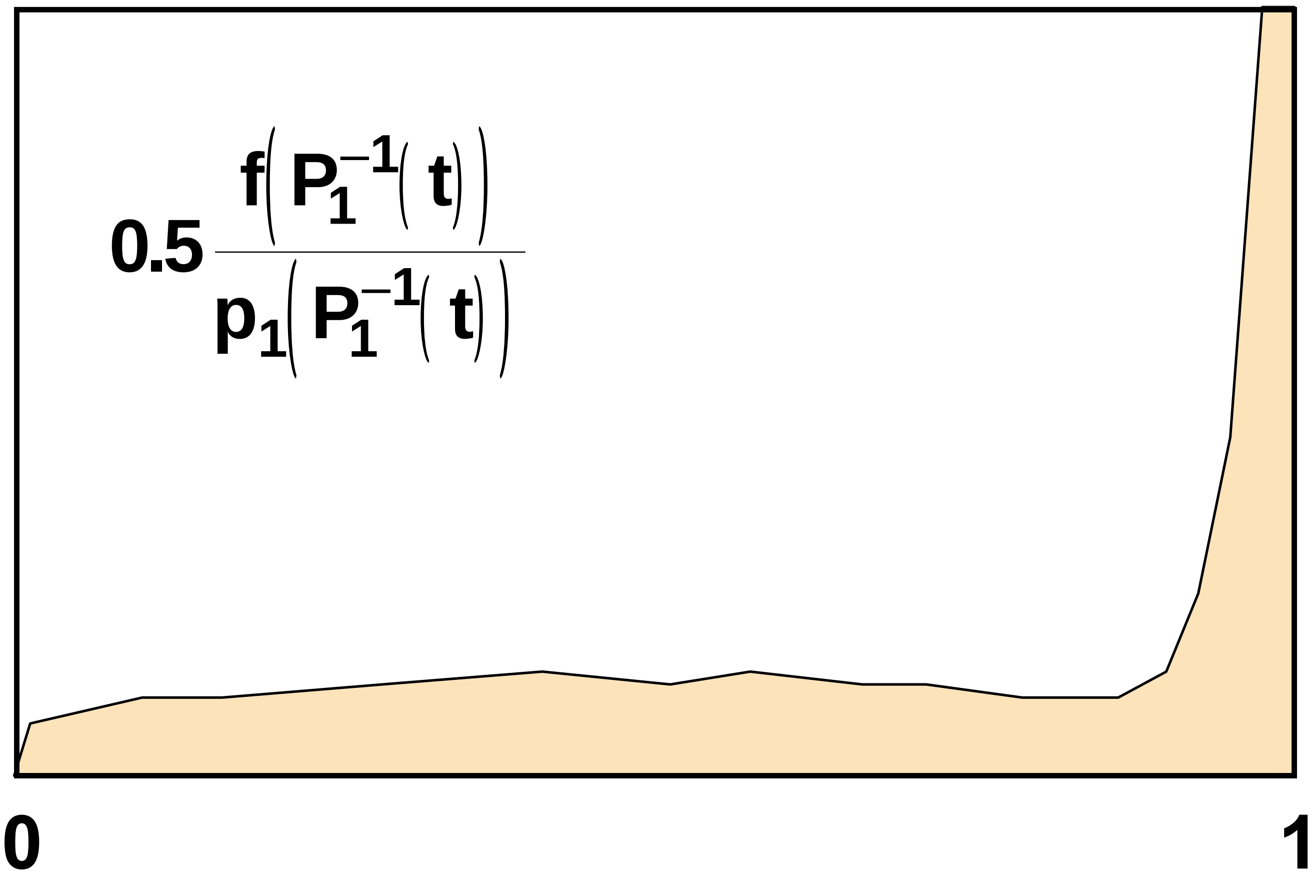
$$I = \sum_{i=1}^{n} \int_0^1 \frac{w_i\left(P_i^{-1}(t)\right)}{p_i\left(P_i^{-1}(t)\right)} f\left(P_i^{-1}(t)\right)\,dt$$

Jeden člen kombin. odhadu



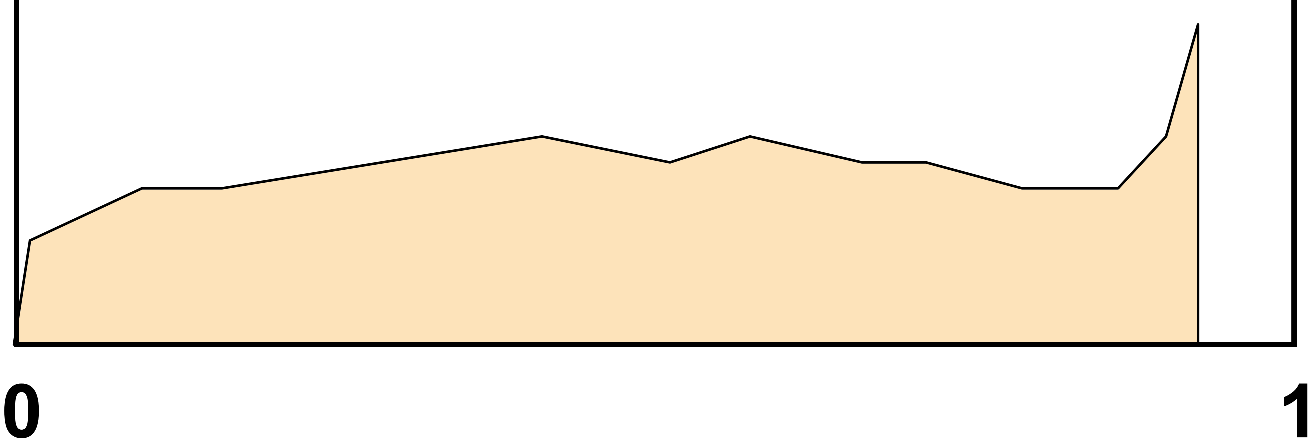
Aritmetický průměr

$$0.5\,\frac{f\left(P_1^{-1}(t)\right)}{p_1\left(P_1^{-1}(t)\right)}$$

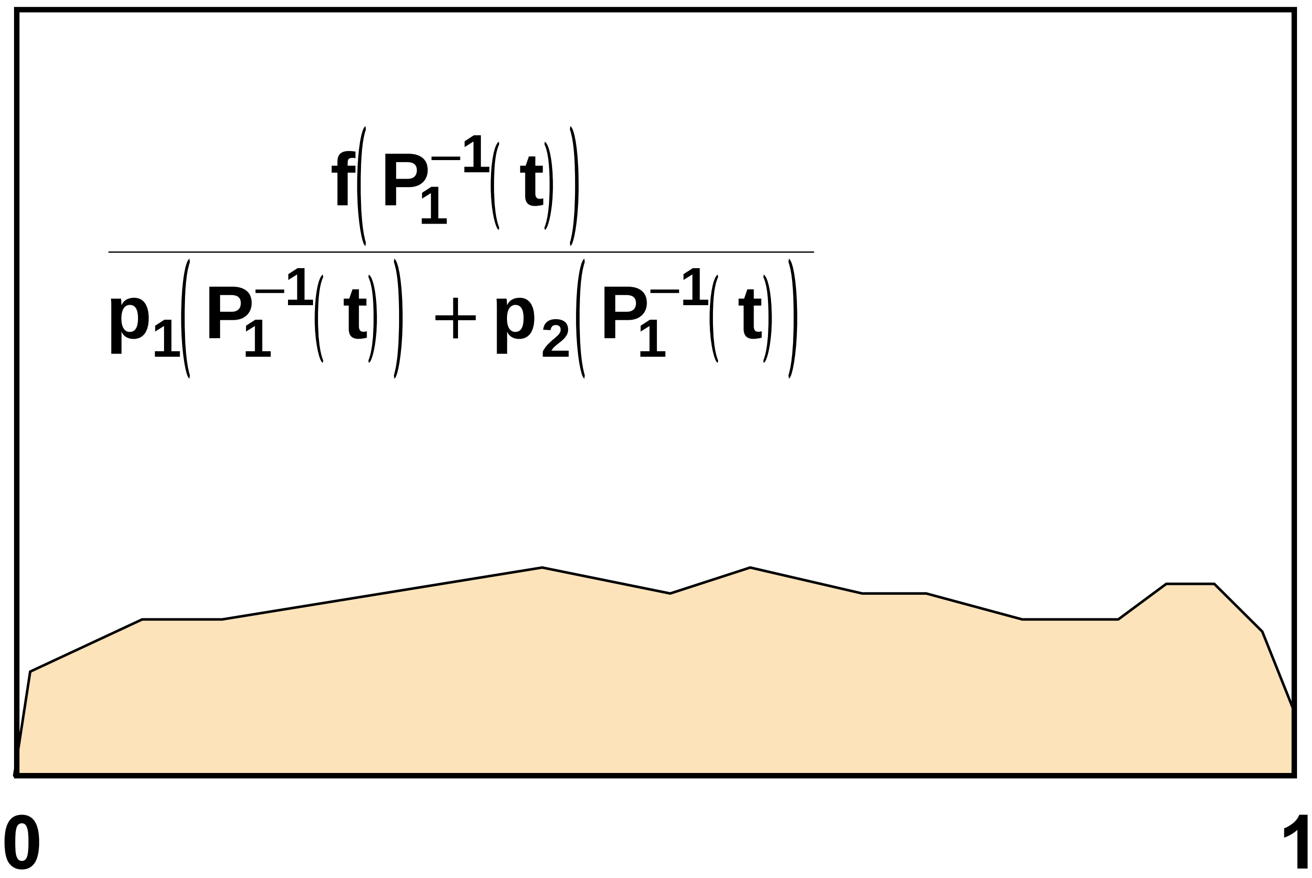


Maximum

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

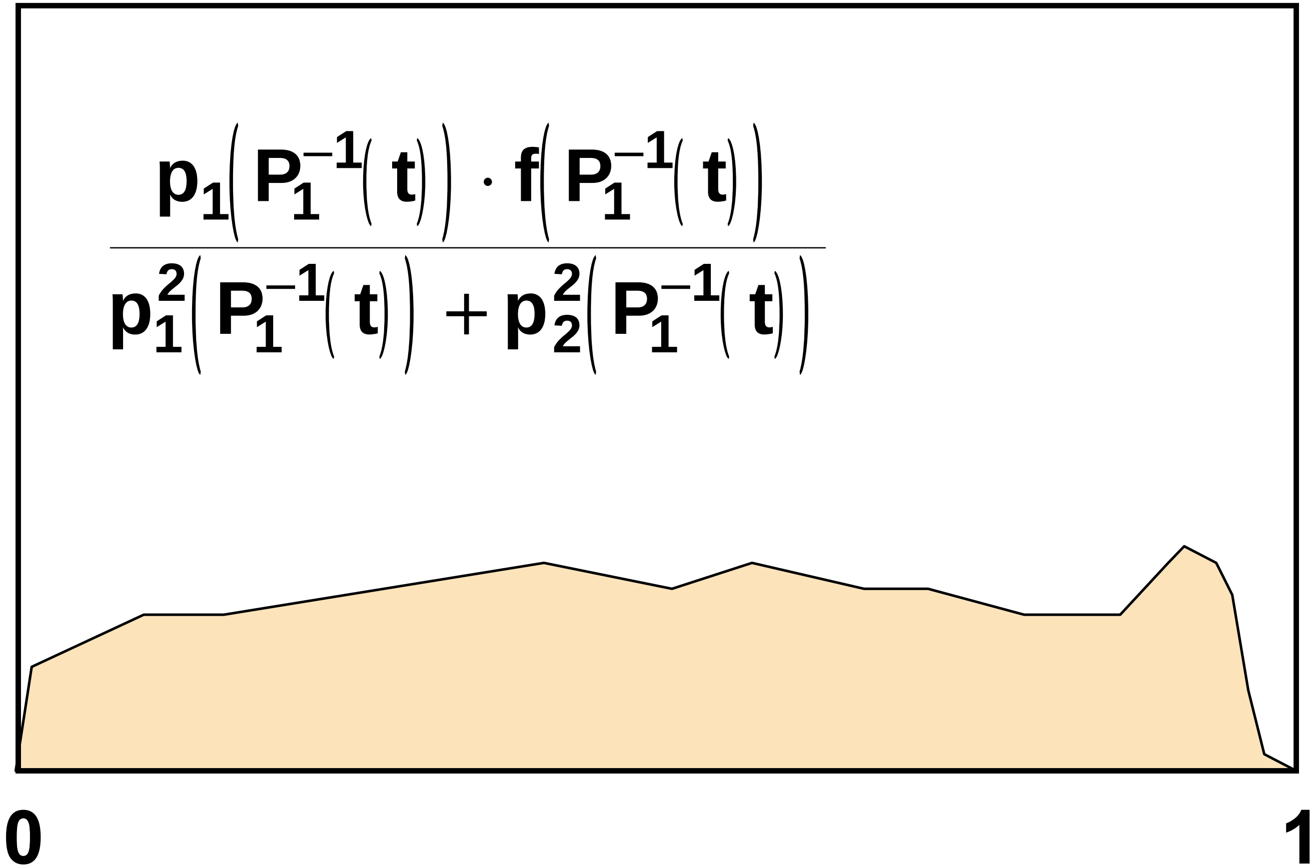


Vyrovnaná heuristika



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

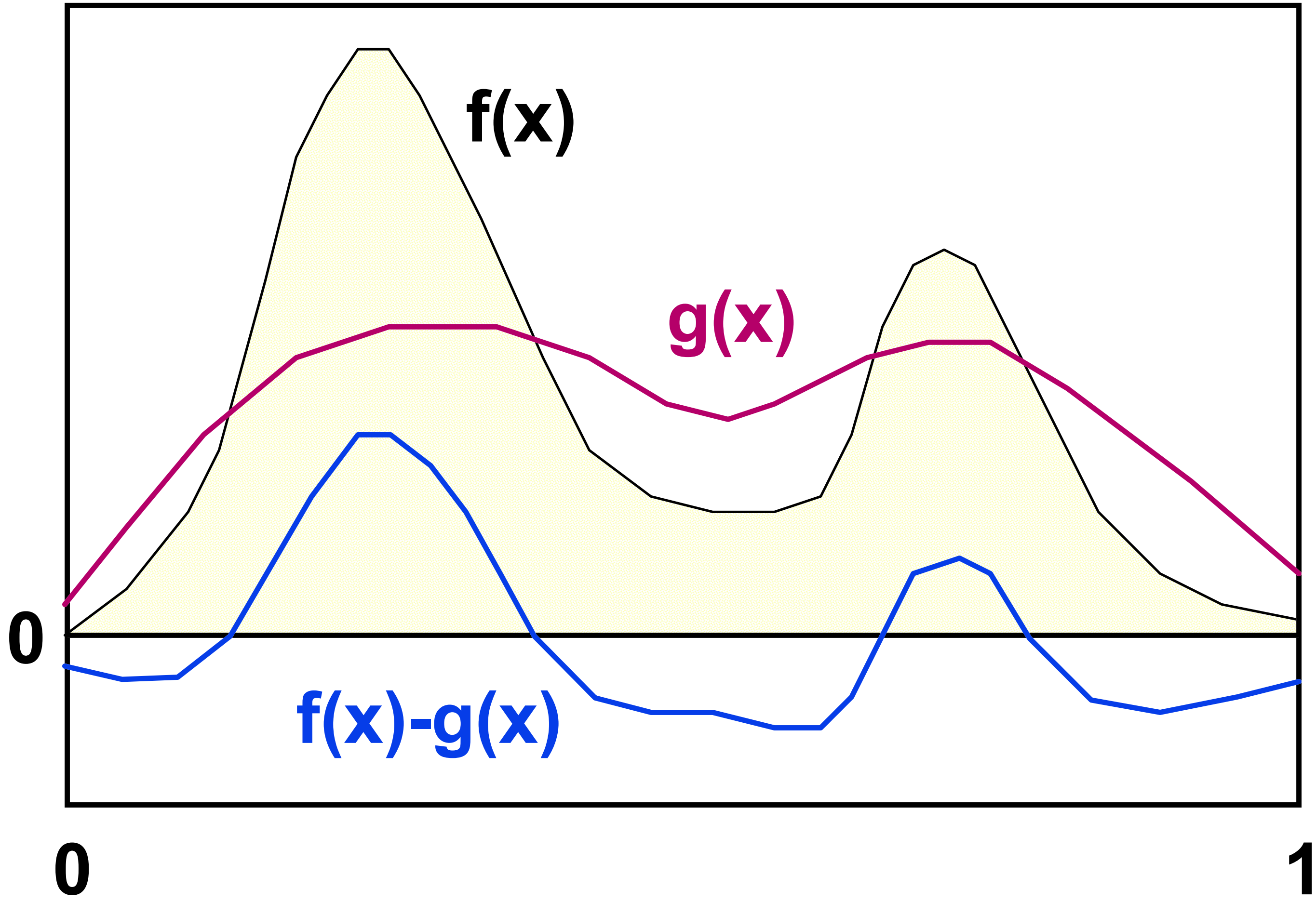
Funkce **g(x)**, která **aproximuje integrand** a dokážeme ji **analyticky zintegrovat**:

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

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

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

Transformace řídicí 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

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

{ξ_1, ξ_2, ξ_3, ... } se nazývá **Markovovský řetězec**, jestliže pravděpodobnost $\mathbf{p_i(x)}$ závisí pouze na ξ_{i-1}

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

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

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:

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

Nestranný odhad s jedním náhodným vzorkem:

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

Ruská ruleta pro integr. rovnice

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

$\{\xi_1, \xi_2, \dots \xi_k\}$ je **konečná** náhodná procházka,
protože odhad $\langle f(\xi_k) \rangle = 0$.
Každý vzorek ξ_i je vybírán s **pravděpodobností** P_i
a s hustotou rozdělení $p_i(x)$.
Pokud náhodná proměnná $\tau_{i+1} > P_{i+1}$, celý proces se
zastaví; jinak se vygeneruje ξ_{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:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x})$$

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

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

Odhad příští události

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

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

Odhad příští události

Odhad funkce **h**:

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

Odhad integrální rovnice:

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

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