matfyz

Computer Graphics Charles University

Monte Carlo metody

CGG MFF UK Praha

pepca@cgg.mff.cuni.cz

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

Monte Carlo integrace

Odhadovaný integrál:

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

Předpoklad: $f(x) \in L^2(0,1)$

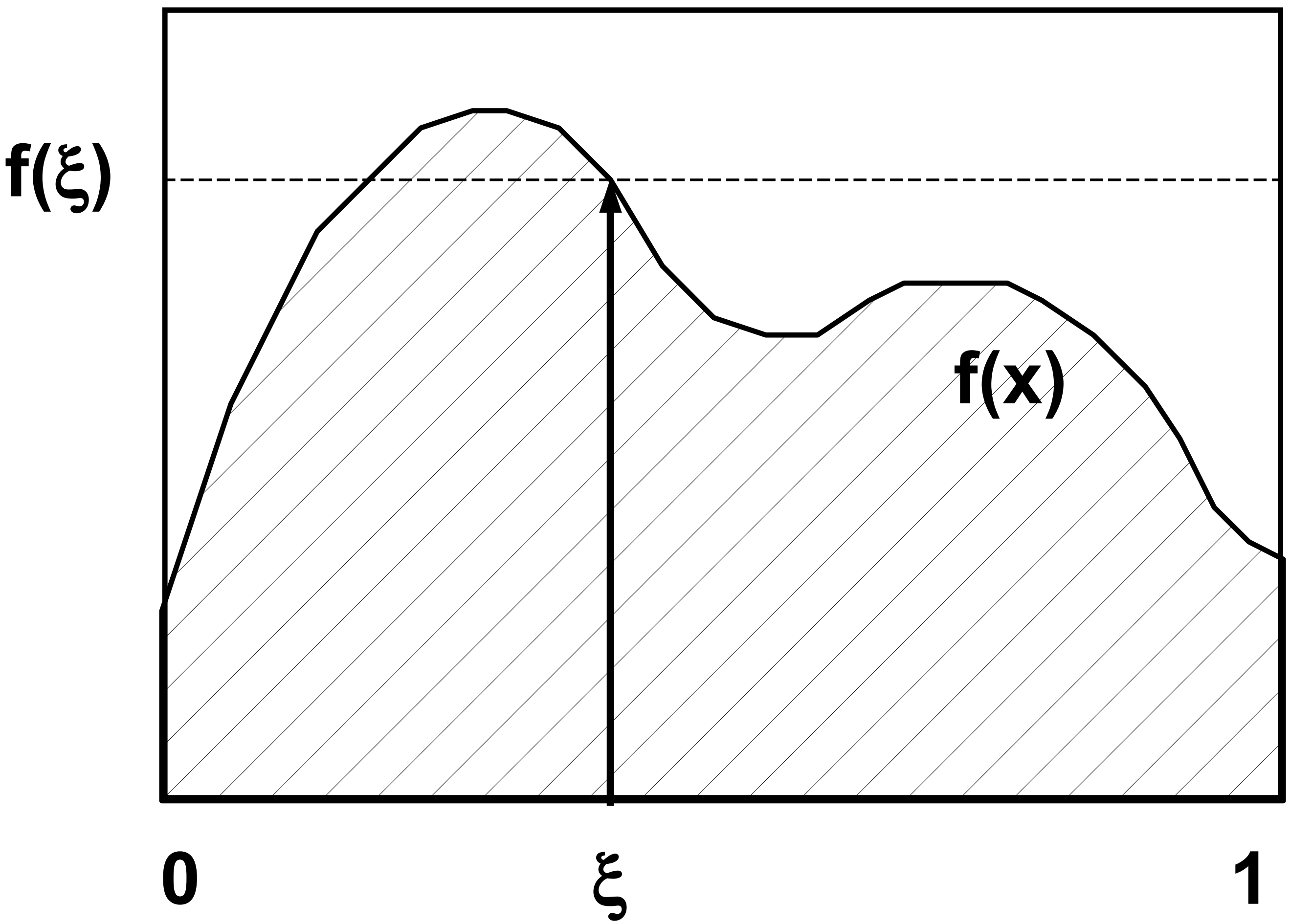
Je-li ξ náhodné číslo s distribucí $\mathbf{R(0,1)}$, pak $\mathbf{f(\xi)}$ je tzv. **primární odhad** integrálu:

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

Odhad je **nestranný**, neboť:

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

Primární odhad určitého integrálu



Rozptyl odhadu

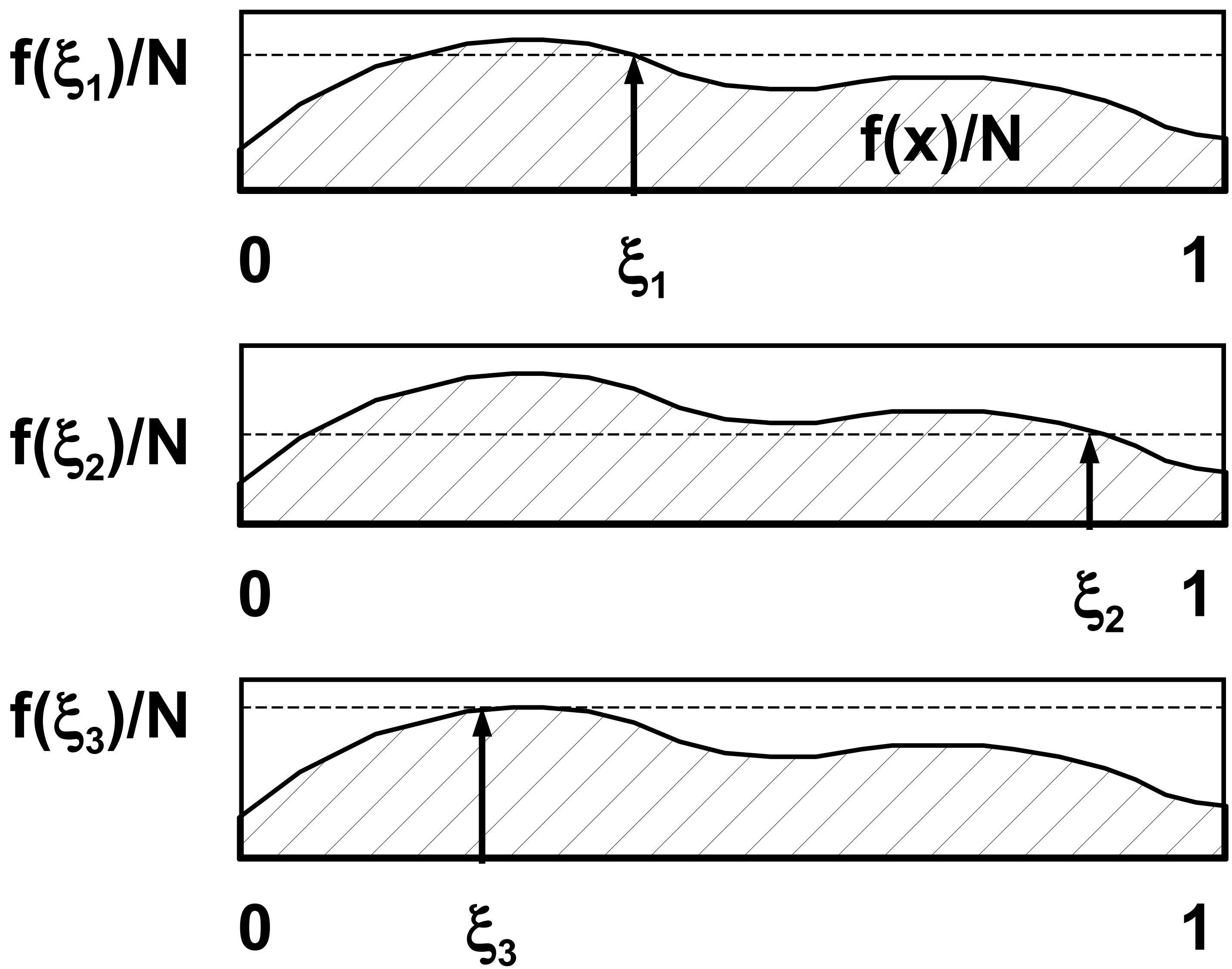
Měřítkem kvality odhadu je jeho **rozptyl** (nebo standardní odchylka):

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

(pro nestranný odhad)

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

Sekundární odhad integrálu



Sekundární odhad

Rozložení integrálu na součet **N členů**:

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx = \underline{\sum_{i=1}^{N} \int_0^1 \frac{f(x)}{N}\,dx} = \sum_{i=1}^{N} I_i$$

Sekundární odhad integrálu:

$$\underline{\langle I \rangle_{sec}} = \sum_{i=1}^{N} \langle I_i \rangle_{prim} = \underline{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)}$$

Sekundární odhad je také **nestranný**.

Rozptyl sekundárního odhadu

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

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

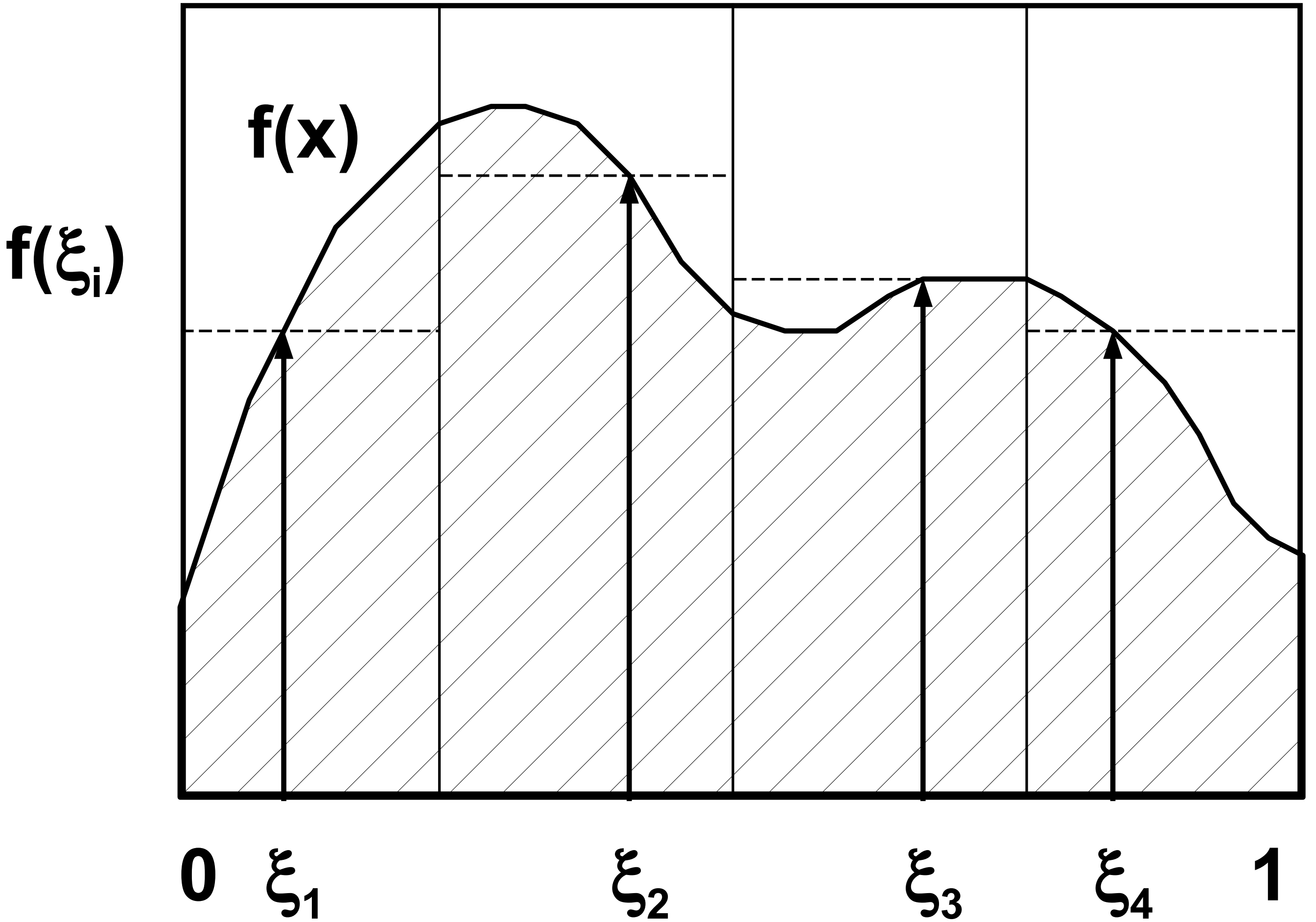
$$= \frac{\sigma^2_{prim}}{N}$$

... 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

$$\underline{\sigma^2_{strat}} = \sum_{i=1}^{N} \left[\int_{A_i} \left[\frac{f(x_i)}{N} \right]^2 N \, dx_i - I_i^2 \right] =$$

$$= \frac{1}{N} \int_0^1 f^2(x) \, dx - \sum_{i=1}^{N} I_i^2 \leq \underline{\sigma^2_{sec}}$$

... rozptyl nemůže být větší než u **sekundárního odhadu**!

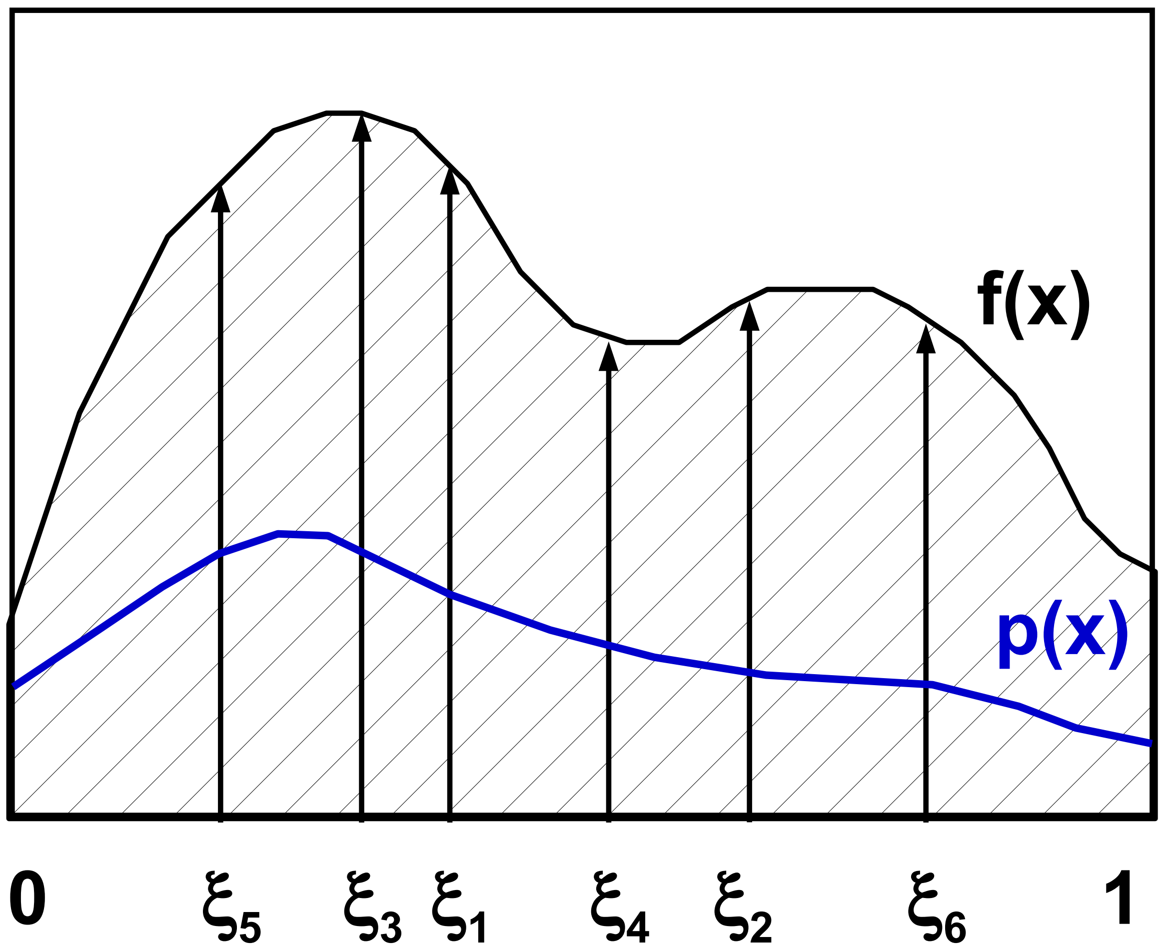
Rozklad intervalu na části

- **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:

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

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

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

(tento odhad je **nestranný**)

Rozptyl vzorkování podle důležitosti

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

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

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

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

Praktická implementace

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

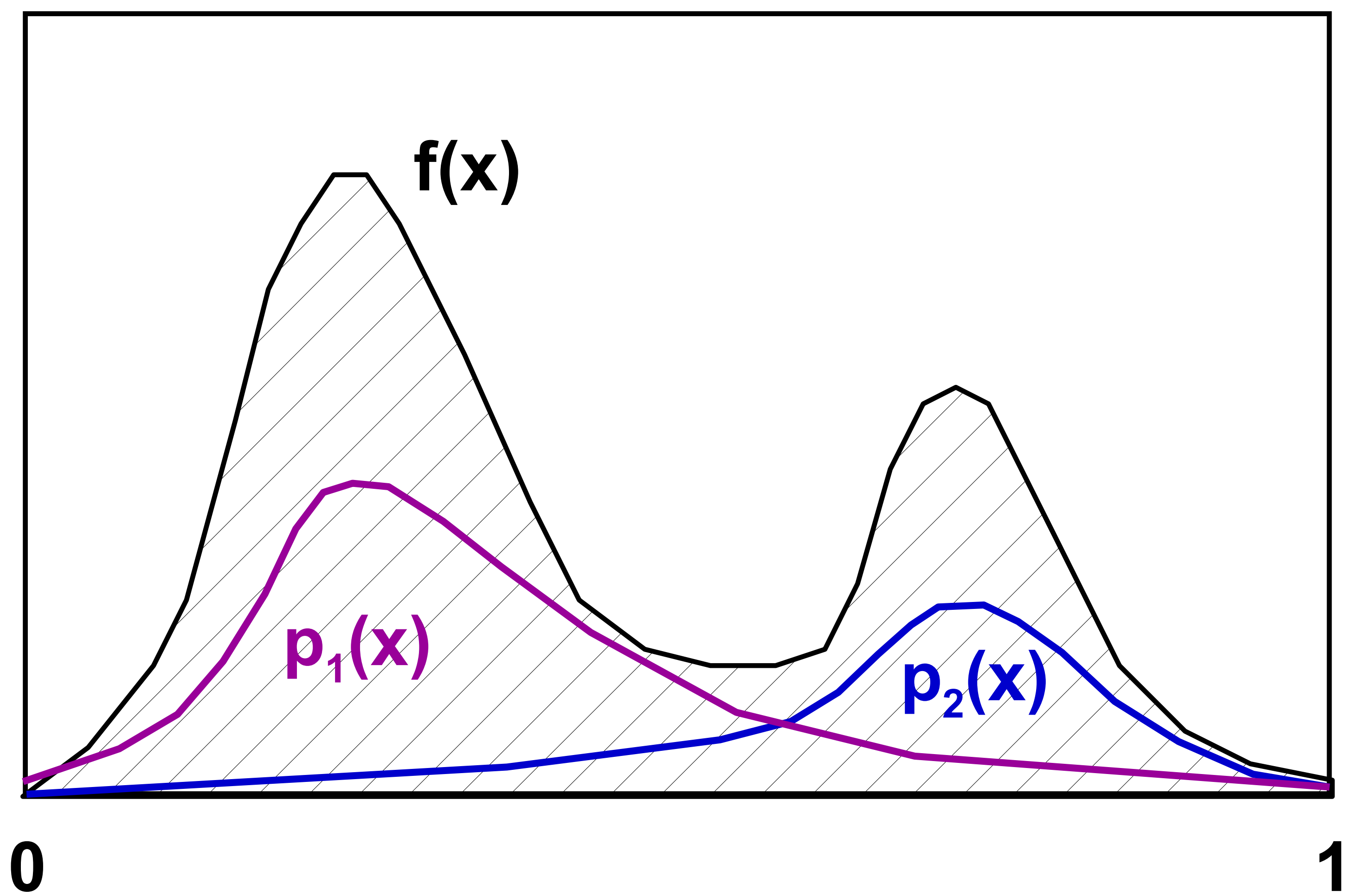
$$\xi = P^{-1}(\tau)$$

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 $\xi_1, .. \xi_n$ s hustotami pravděpodobnosti $\mathbf{p_1(x)}$, .. $\mathbf{p_n(x)}$.

Kombinovaný odhad integrálu bude mít tvar:

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

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

Nestrannost kombinovaného 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

$$\sigma^2_{comb} = \sum_{i=1}^{n} \left\{ \int_0^1 \left[w_i(x_i)\,\frac{f(x_i)}{p_i(x_i)} \right]^2 p_i(x_i)\,dx_i - \left[\int_0^1 w_i(x_i)\,\frac{f(x_i)}{p_i(x_i)}\,p_i(x_i)\,dx_i \right]^2 \right\} =$$

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

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

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

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

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

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

Mocninná heuristika

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

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

$\underline{\beta = 1}$ .. vyrovnaná, $\underline{\beta = \infty}$ .. maximální heuristika

Transformace integrandu

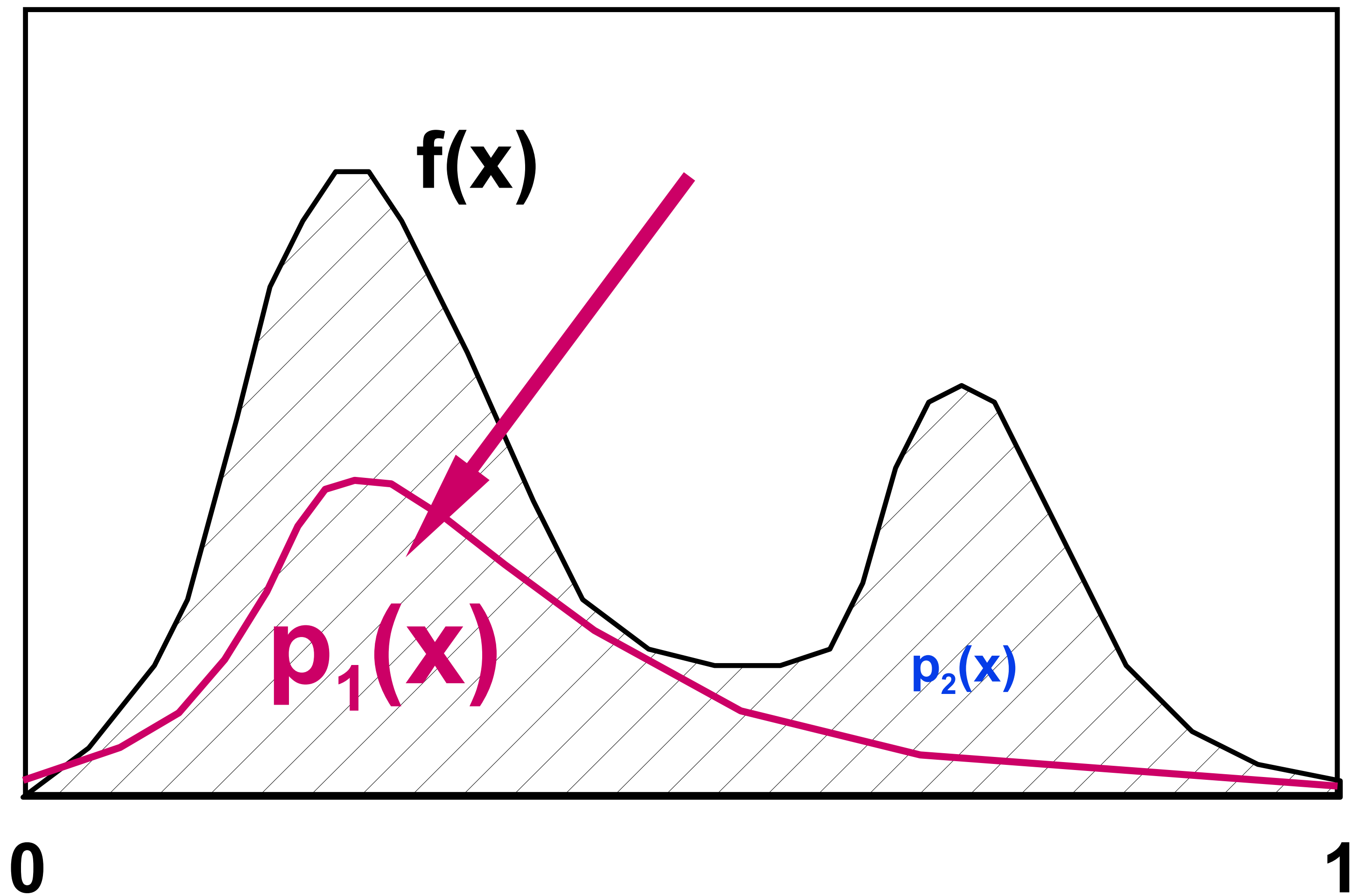
Interpretace kombinačního odhadu jako **transformace integrované funkce**:

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

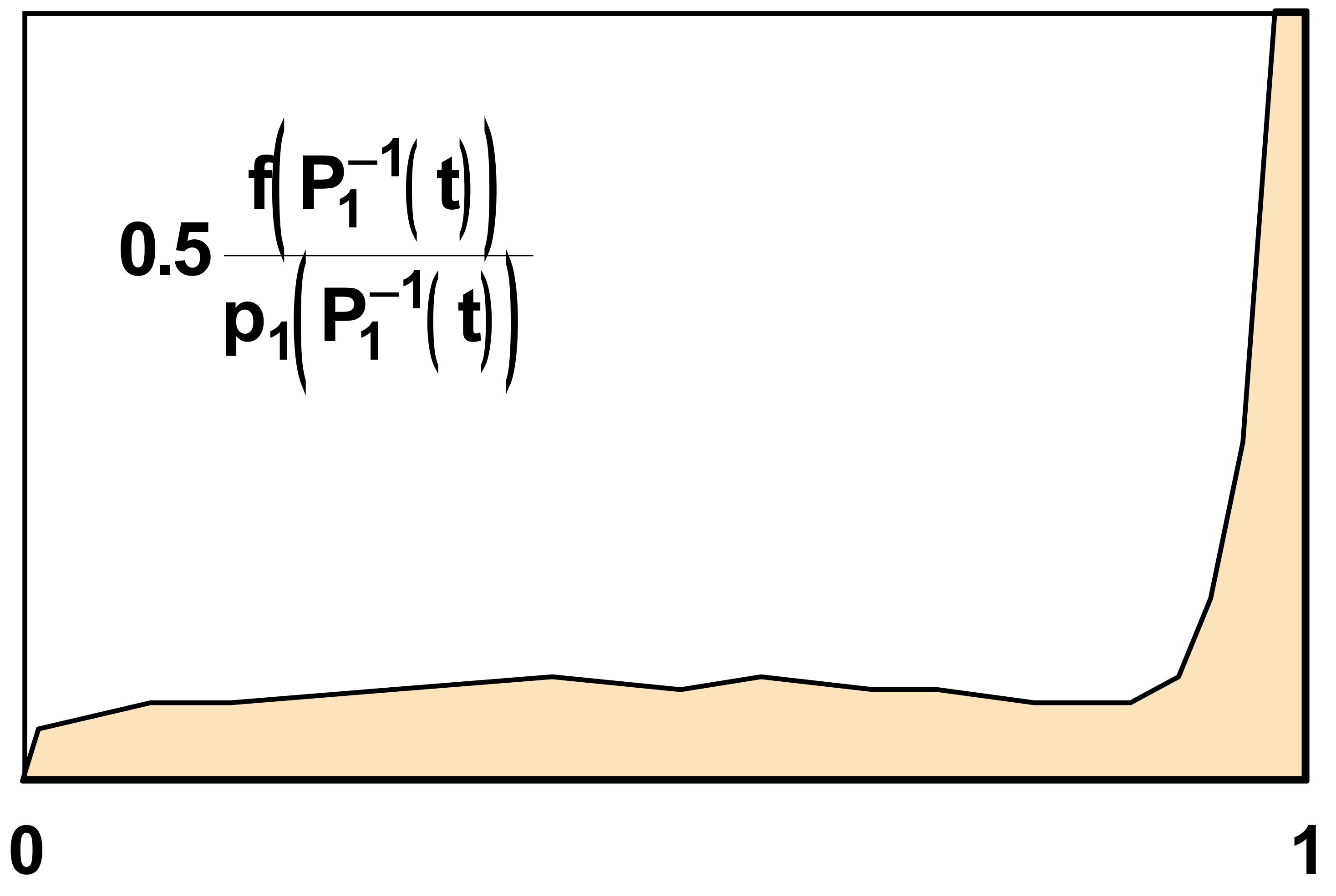
Kombinace odhadů podle důležitosti:

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

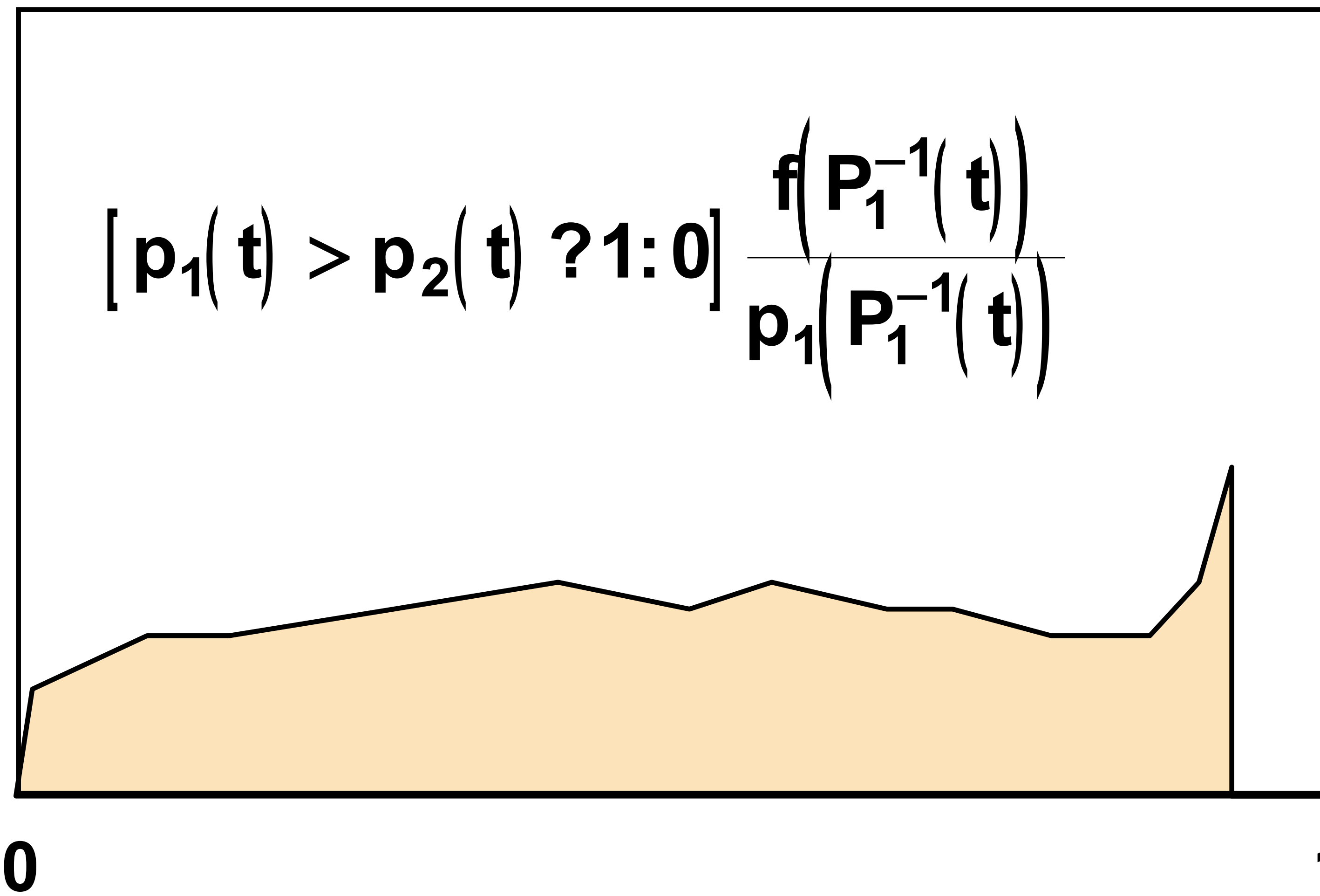
Jeden člen kombinovaného odhadu



Aritmetický průměr

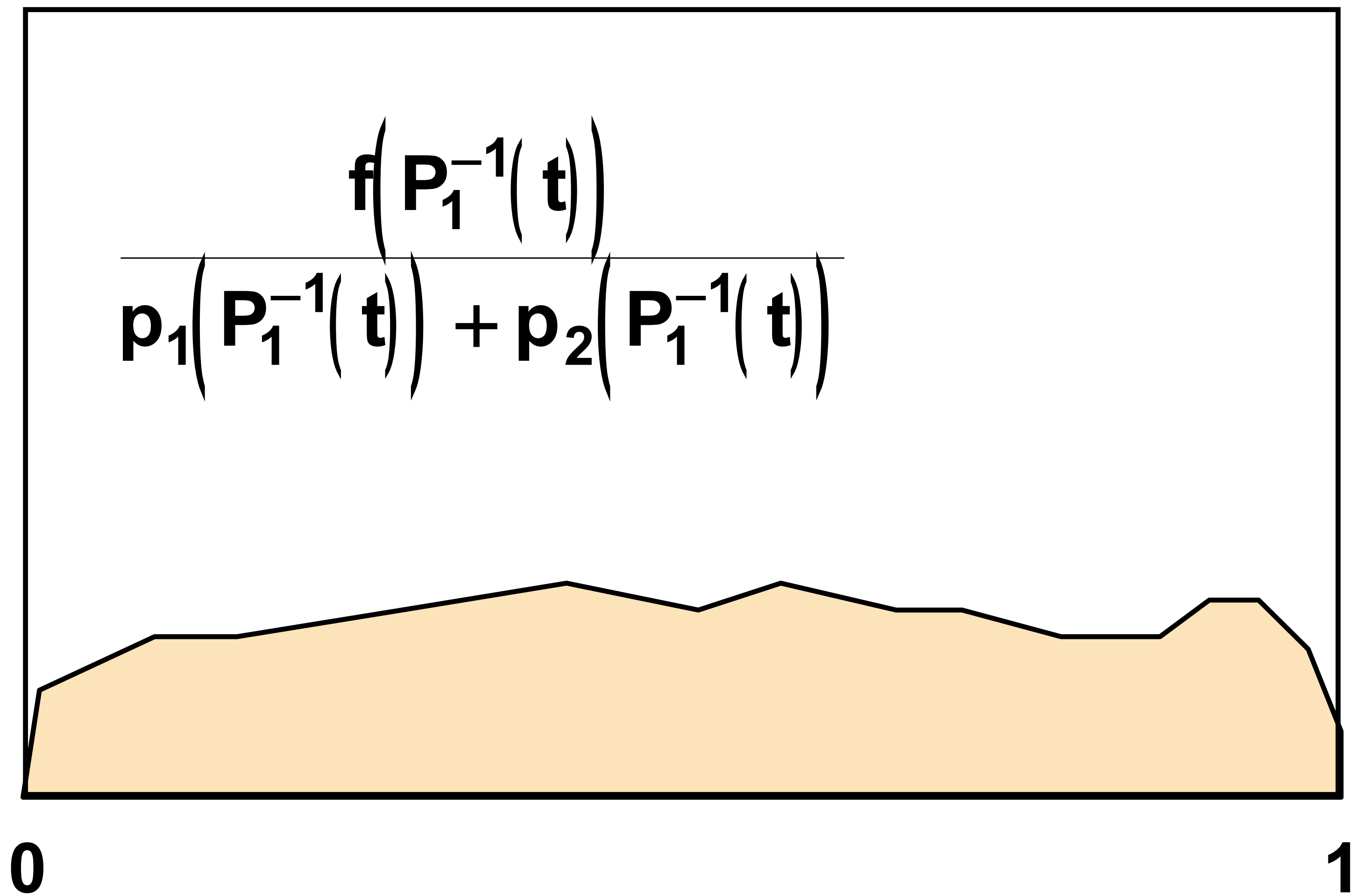


Maximum



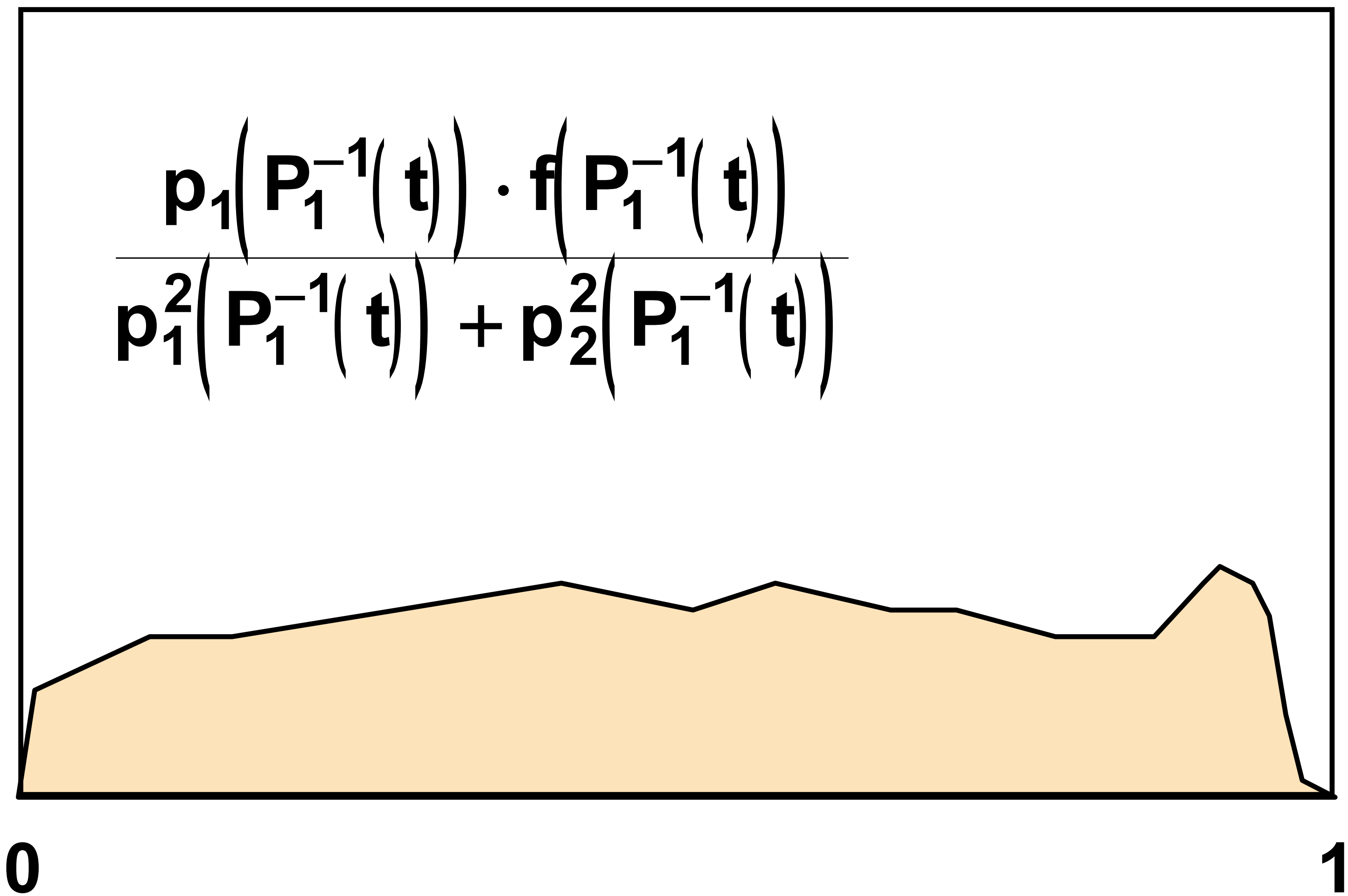
$$\left[p_1(t) > p_2(t)\ ?\ 1 : 0\right] \frac{f\left(P_1^{-1}(t)\right)}{p_1\left(P_1^{-1}(t)\right)}$$

Vyrovnaná heuristika

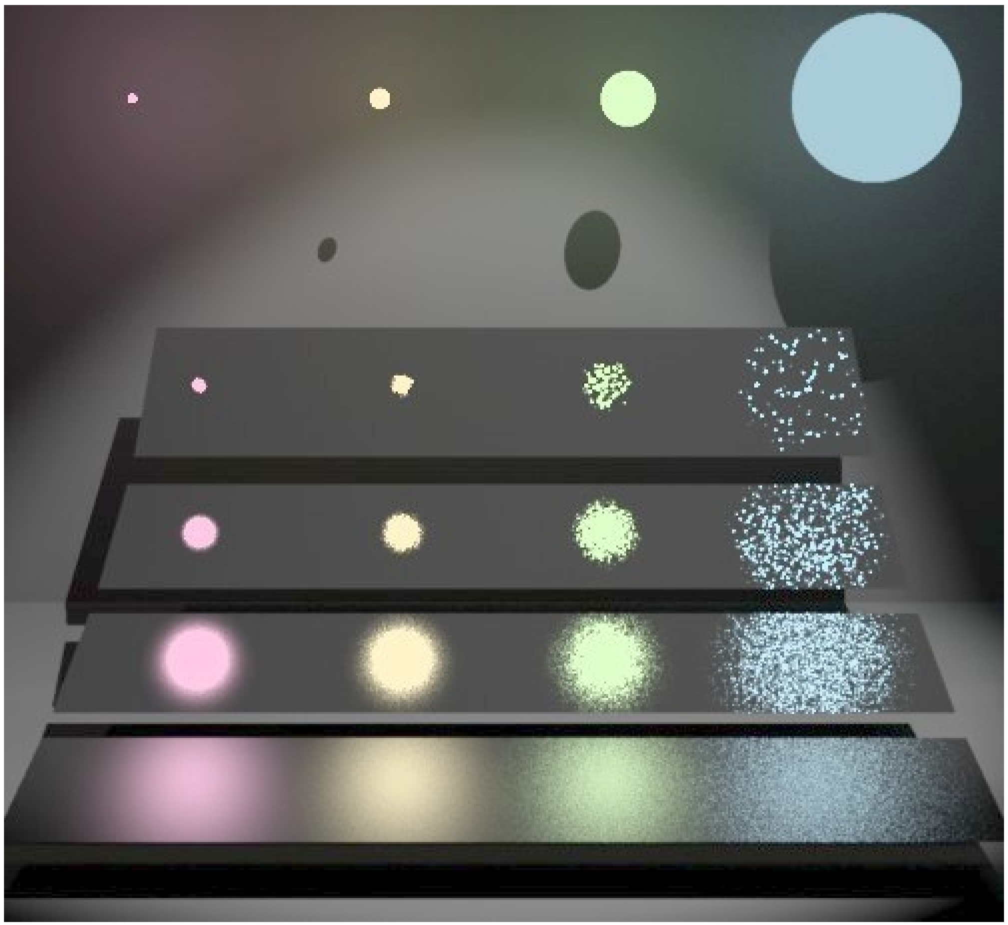


Mocninná heuristika pro β=2

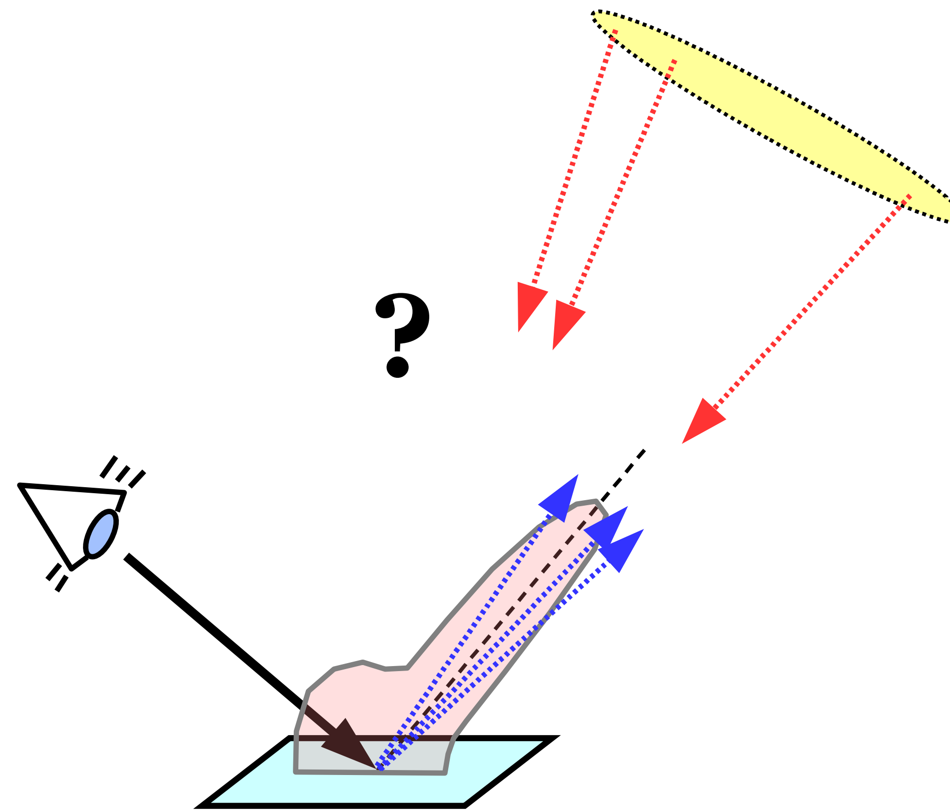
$$\frac{p_1\left(P_1^{-1}(t)\right)\cdot f\left(P_1^{-1}(t)\right)}{p_1^2\left(P_1^{-1}(t)\right)+p_2^2\left(P_1^{-1}(t)\right)}$$



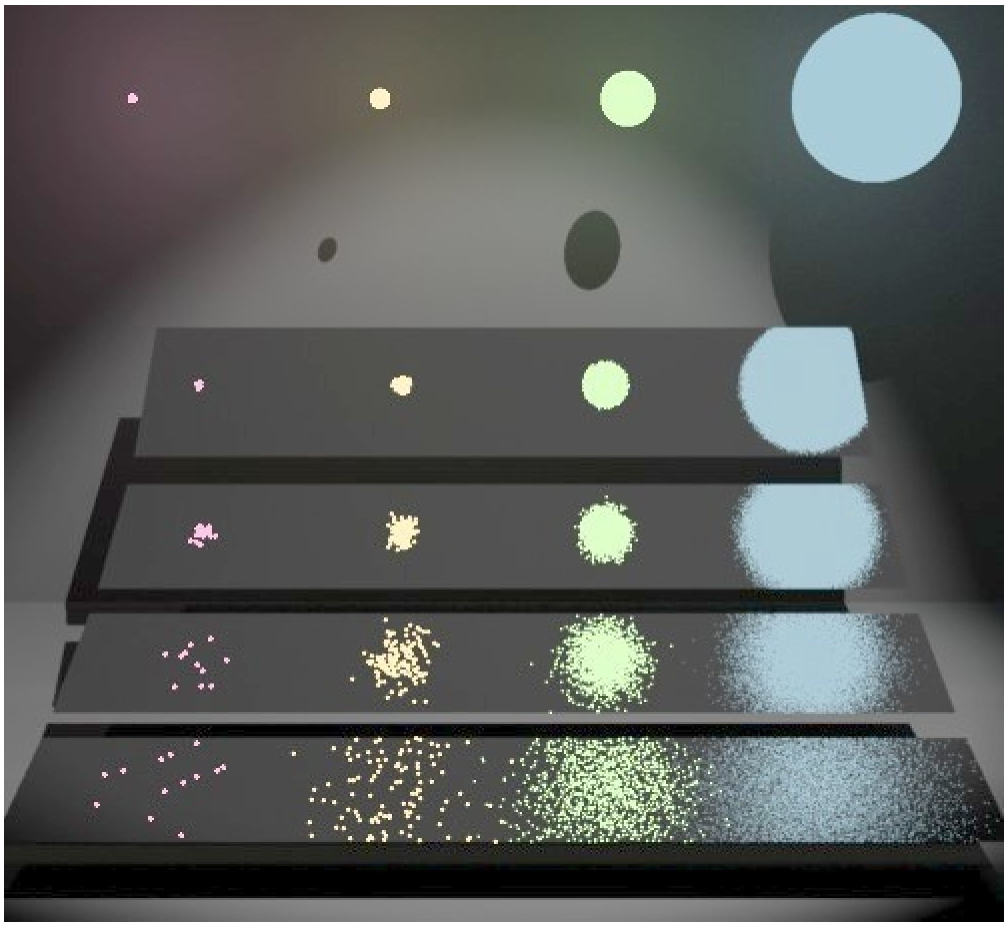
Příklad z renderingu



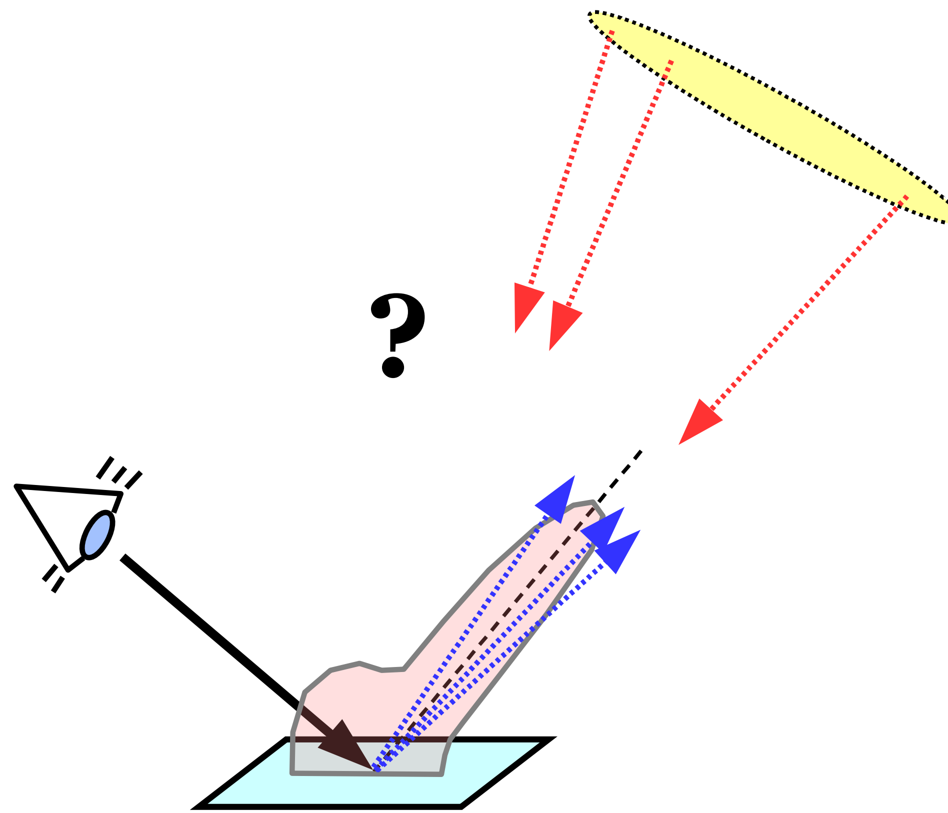
© 1995 Eric Veach, Leonidas J. Guibas



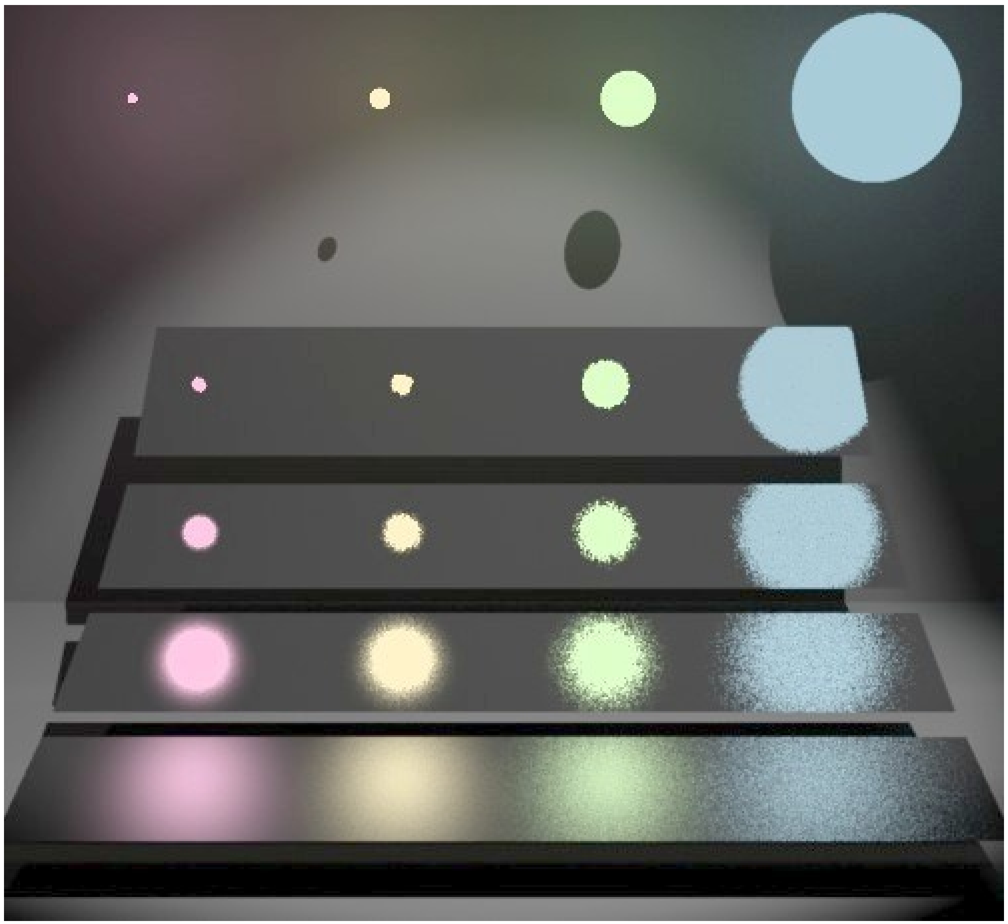
Příklad z renderingu



© 1995 Eric Veach, Leonidas J. Guibas



Příklad z renderingu

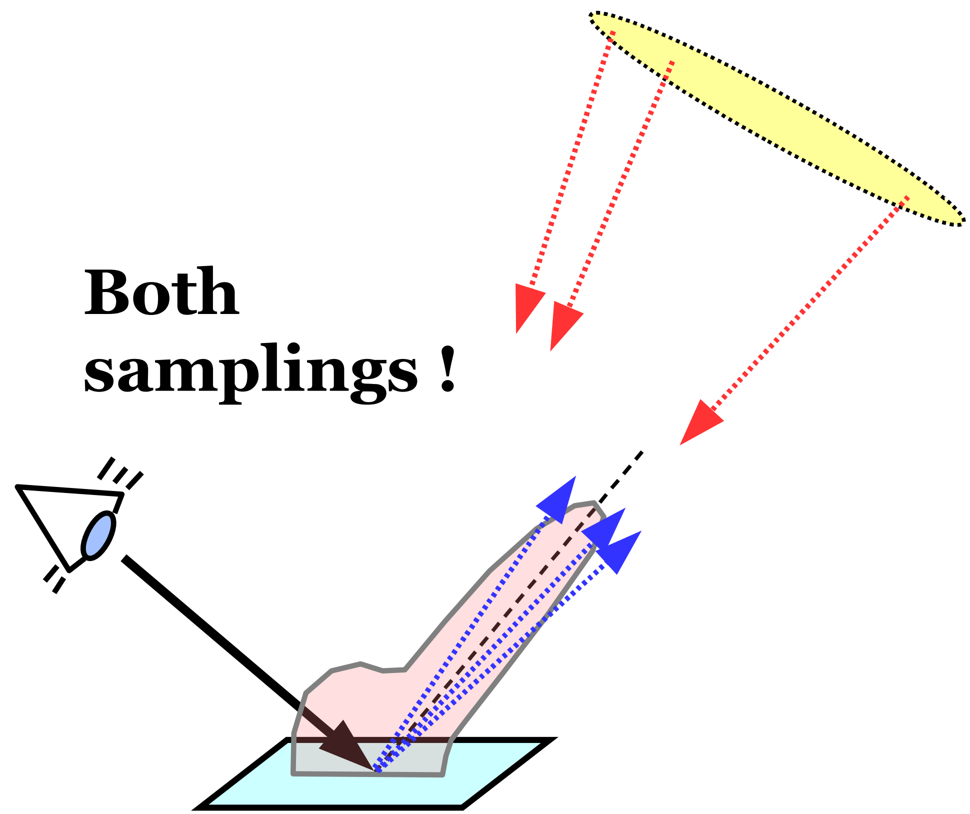


© 1995 Eric Veach, Leonidas J. Guibas

Power heuristics

$\beta = 2$

Both samplings !



Řídící funkce

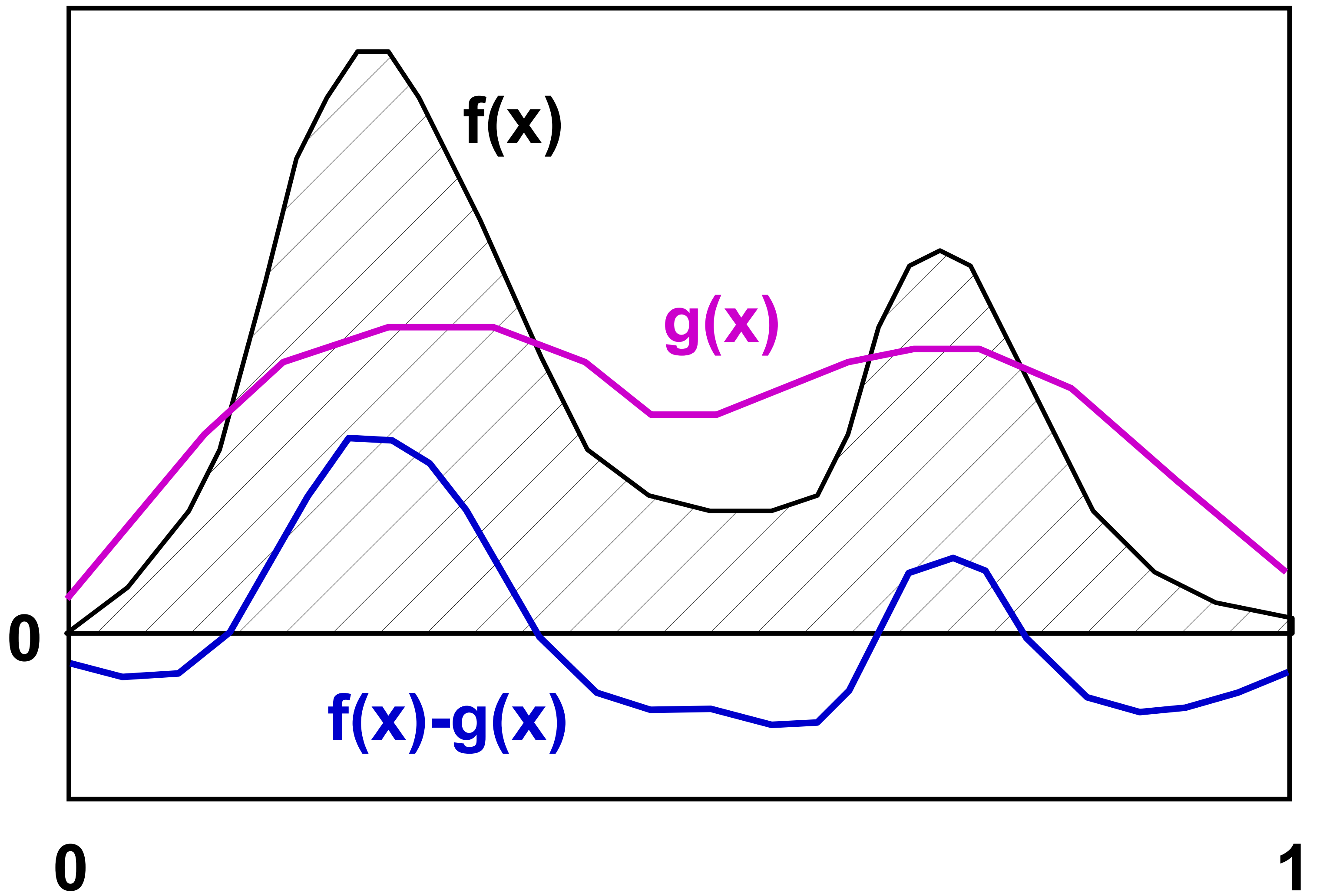
Funkce **g(x)**, která **aproximuje integrand** a dokážeme ji **analyticky zintegrovat**:

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

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

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

Transformace řídící funkcí



Řešení integrálních rovnic

Fredholmova integrální rovnice druhého typu:

$$\underbrace{f(x)}_{\text{neznámá}} = g(x) + \int_0^1 K(x,y) \cdot \underline{f(y)}\, dy$$

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

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

$\{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \ldots\}$ se nazývá **Markovovský řetězec**, jestliže pravděpodobnost $\mathbf{p_i(x)}$ závisí pouze na ξ_{i-1}

Úspornější funkcionální zápis: $\underline{f = g + Tf}$

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

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:

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

Nestranný odhad s jedním náhodným vzorkem:

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

Ruská ruleta pro integrální rovnice

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

$\{\xi_1, \xi_2, \dots \xi_k\}$ 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 (pdf) $p_i(x)$.

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

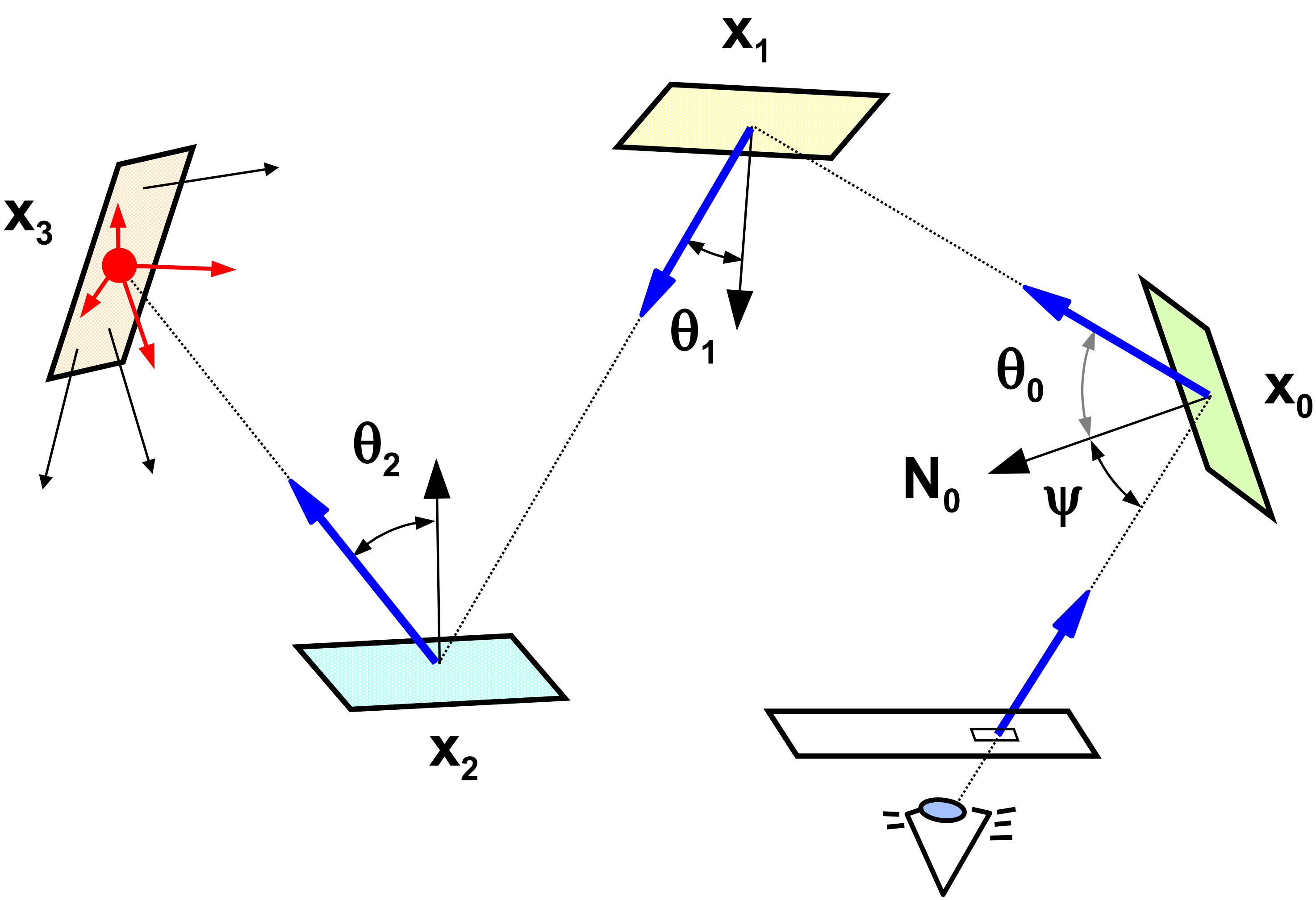
Ve fyzikálních aplikacích je často: $$\int_0^1 K(x, y)\, dy < 1$$

Tehdy lze jádro **K** použít ke kostrukci tzv. **subkritického rozdělení pravděpodobnosti**:

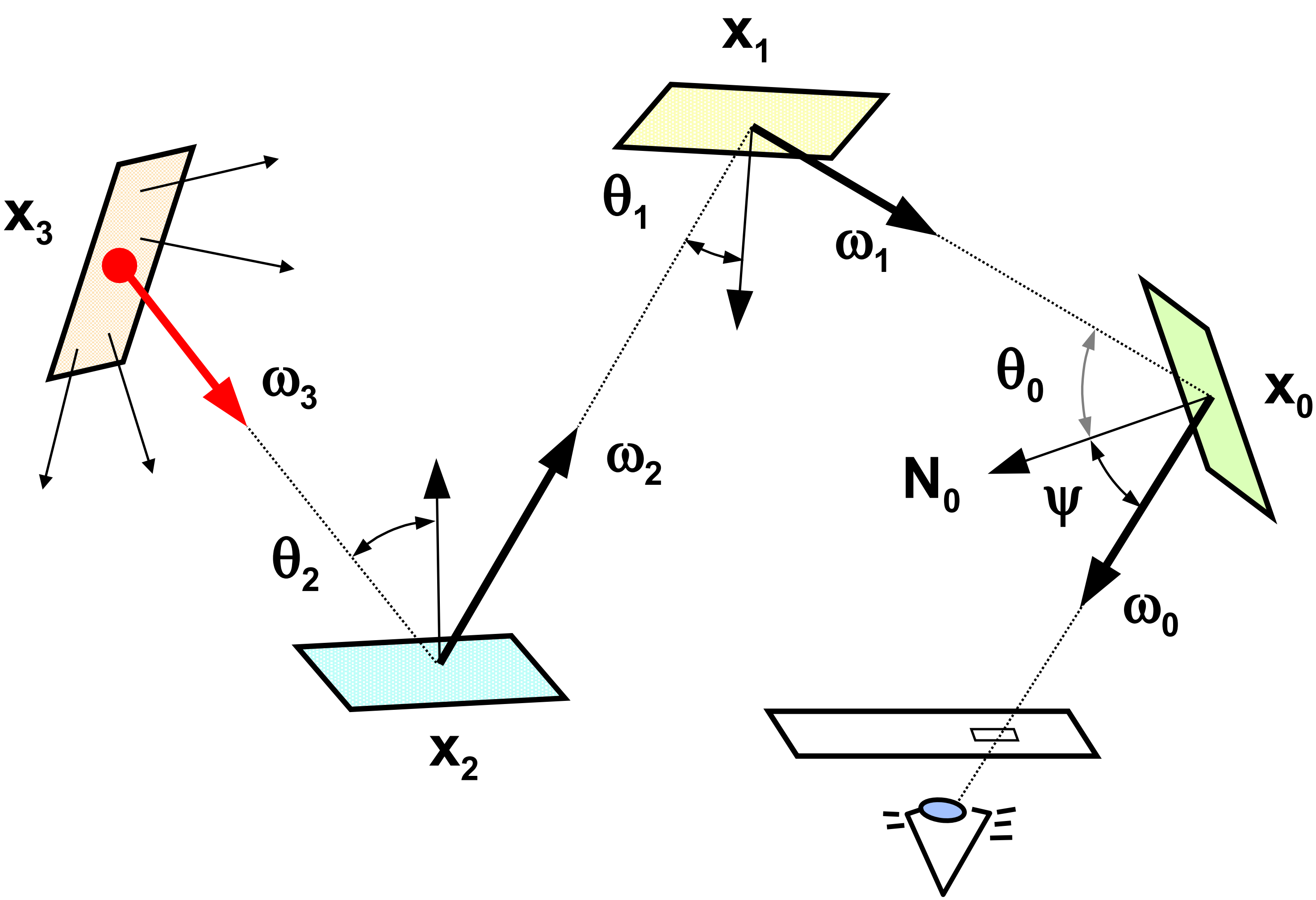
$$P_i = \int_0^1 K(\xi_{i-1}, y)\, dy, \qquad p_i(x) = \frac{K(\xi_{i-1}, x)}{P_i}$$

Odhad pak bude mít tvar: $$\boxed{\langle f(x) \rangle_{subcrit} = \sum_{i=1}^{k} g(\xi_i)}$$

Path Tracing – náhodná procházka



Path Tracing – šíření světla



Odhad příští události

Předchozí odhad mívá **velký rozptyl** (málo sčítanců je nenulových). Lepší výsledky dává metoda odhadující člen **g(x)** o jeden stupeň přesněji:

$$f(x) = g(x) + h(x)$$

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

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

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

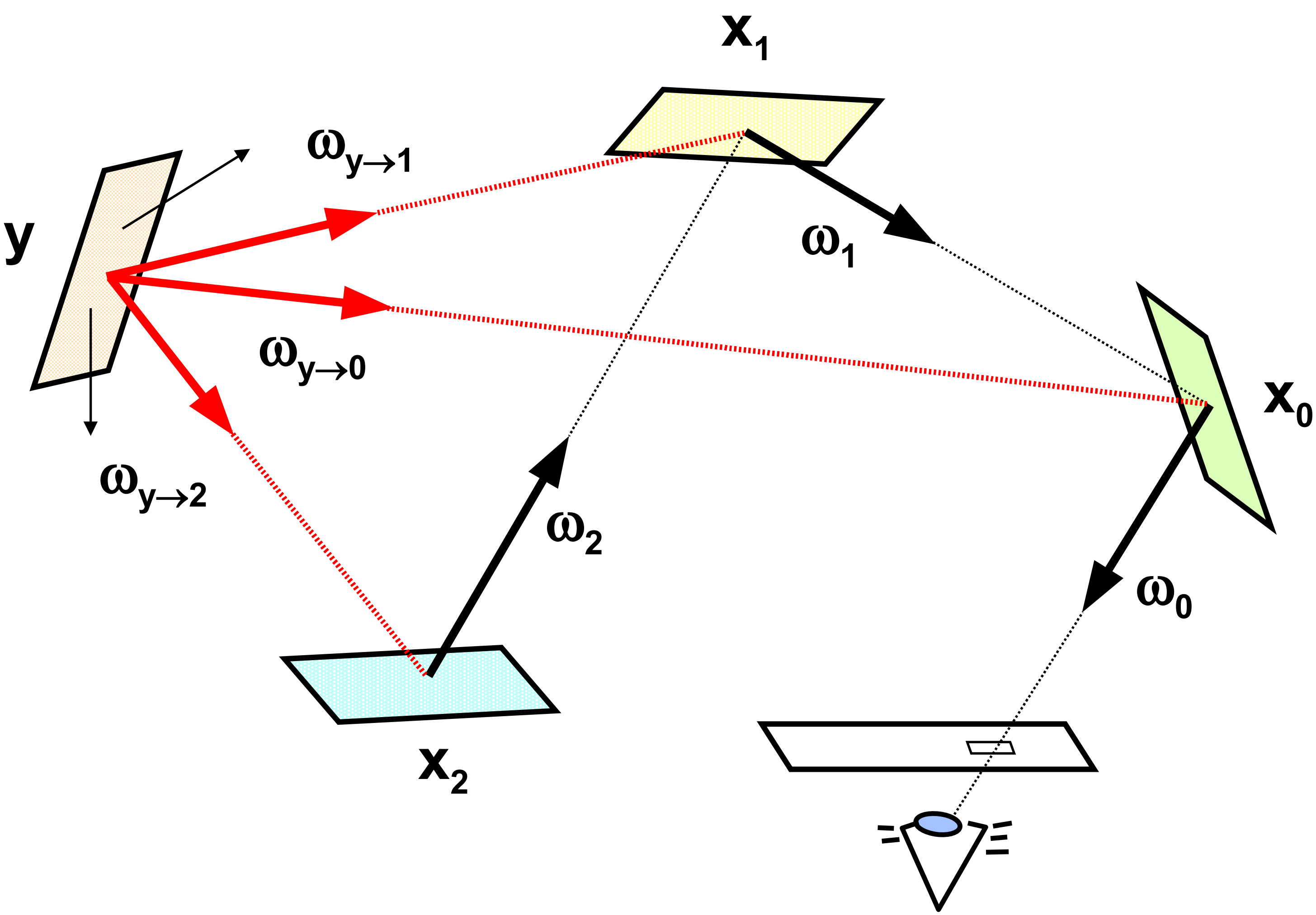
Odhad funkce **h**:

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

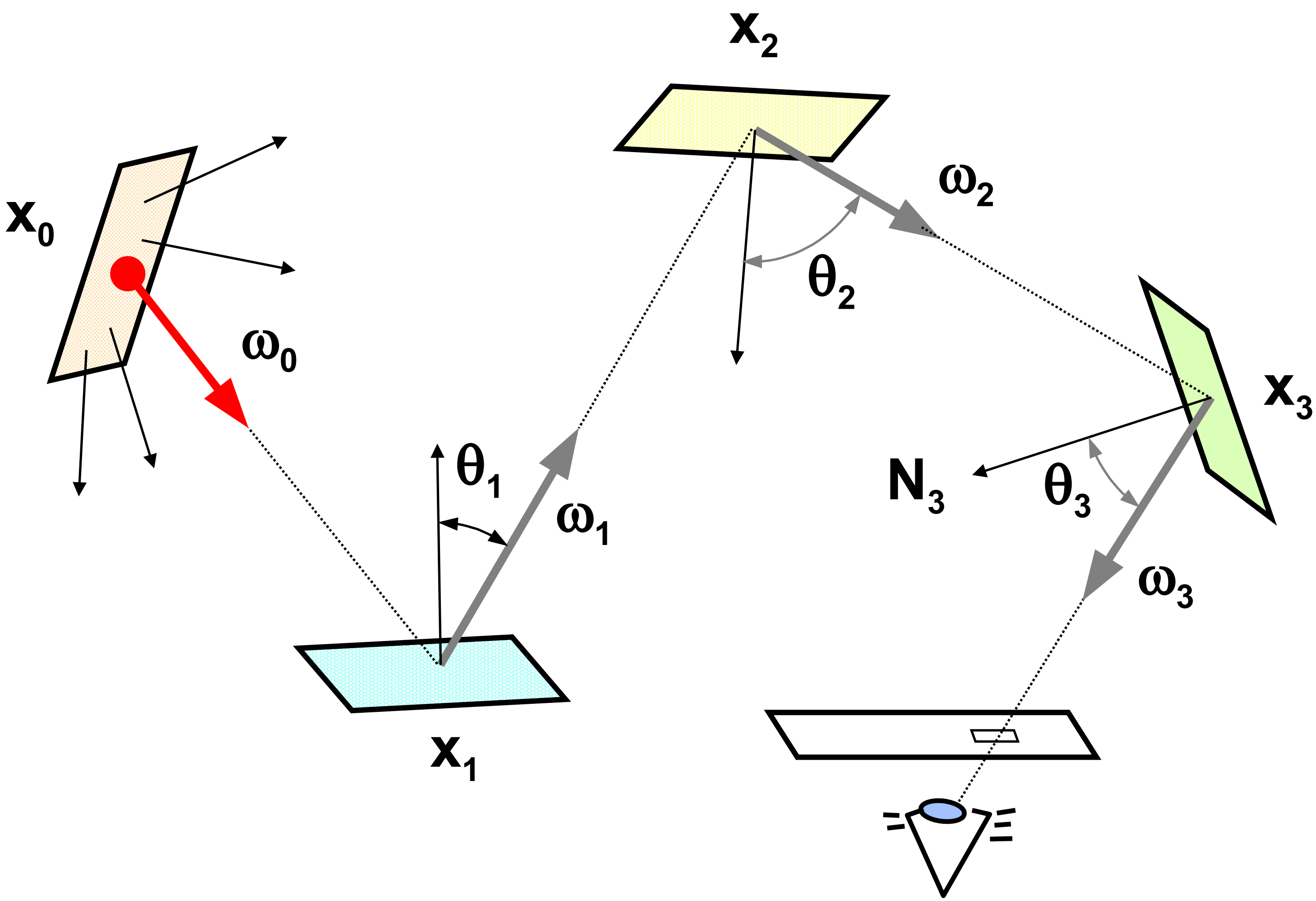
Odhad integrální rovnice:

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

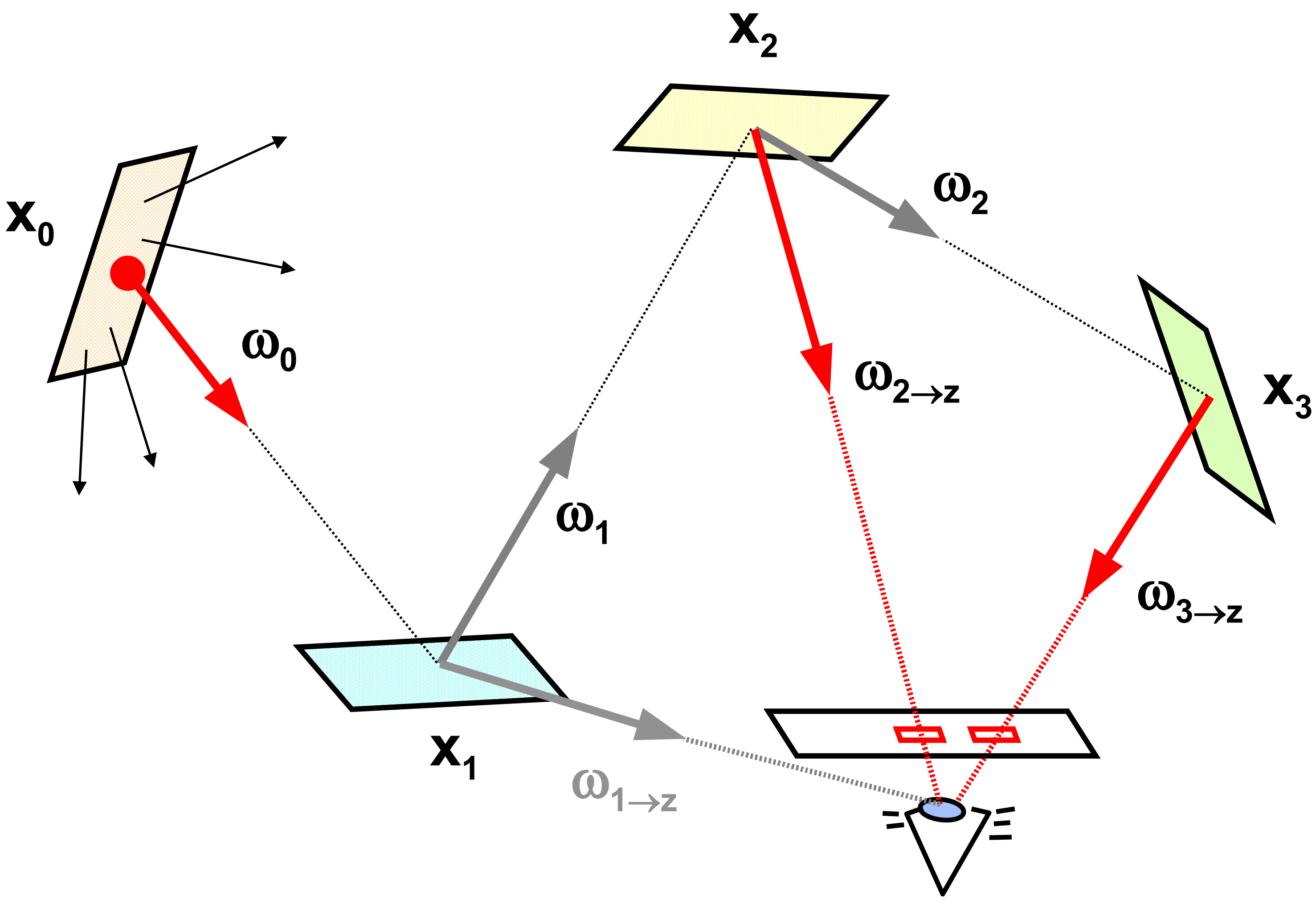
NEE pro Path Tracing



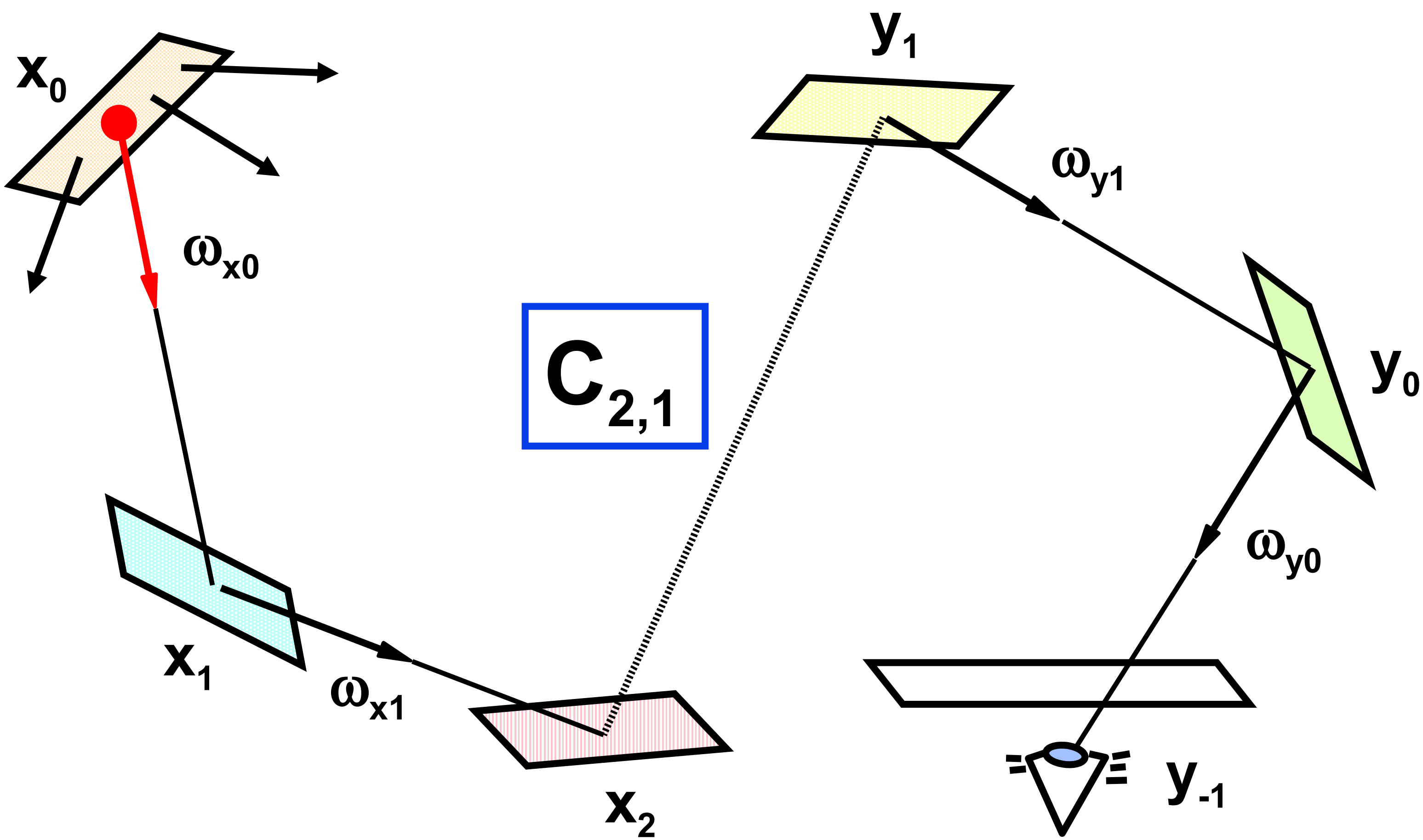
Light Tracing – šíření světla



NEE pro Light Tracing



Obousměrný Path Tracing



Bidir PT – příklad

© 1995 Eric Veach,
Leonidas J. Guibas

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