Aula 6

Roteiro

- Método de Monte Carlo
- Estimando somatórios
- Calculando erro
- Estimando π
- Erro de π
- Integração de Monte Carlo
- Monte Carlo Ray Tracing

Método de Monte Carlo

- Classe de algoritmos baseado em amostragem aleatória repetida
  - obter solução aproximada para problemas determinísticos
- Ideia central: grande número de amostras repetidas acabam revelando a solução
  - no limite, amostras dão a solução

Lei dos grandes números!

$$M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i \qquad P\left[\lim_{n \to \infty} M_n = \mu\right] = 1$$

- Arcabouço teórico para método de Monte Carlo

Calculando uma Soma

- Calcular o valor de um somatório (problema da aula 1)
  - N (número de parcelas) é muito grande
  - calcular valor de cada parcela é fácil

$$G_N = \sum_{i=1}^{N} g(i)$$

- Como usar aleatoriedade para resolver (aproximar) este somatório?
- Usando valor esperado!

- Seja X uma v.a. uniforme em [1, N]
  - P[X = i] = 1/N para i=1, …, N

$$E[g(X)] = \sum_{i=1}^{N} P[X=i]\, g(i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(i) = \frac{G_N}{N}$$

Calculando Soma

- Logo, temos que $G_N = N\, E[g(X)]$
- Podemos agora estimar $E[\ g(X)\ ]$. Como?

Gerando amostras, fazendo a média!

- Seja X_i sequência iid de v.a. uniforme $[1, N]$
  - escolher um valor para n (número de amostras)

$$M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(X_i) \longleftarrow \text{Média amostral com } n \text{ amostras}$$

- Temos que $E[M_n] = E[g(X)]$, para todo n
- $M_n \rightarrow E[g(X)]$ quando $n \rightarrow oo$ (pela lei dos grds números)
- M_n é estimador de E[g(X)], logo N^*M_n é estimador para G_N

Figueiredo 2021

Arestas no Facebook

- Quantas arestas tem a rede de amizade do Facebook?
  - função indicadora de aresta, $g(i, j) = 1$ se existe aresta entre perfil i e j
  - número de perfis $n_p = 5*10^9$

$$T = \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=i+1}^{n_p} g(i, j) \longleftarrow \text{T = número de arestas}$$

Problema: somatório tem ~ 10^{19} termos!

- Como construir um método de Monte Carlo para obter um valor aproximado para T?

Arestas no Facebook

- Seja Z = (*i*, *j*) uma v.a. uniforme no conjunto de pares entre os n_p perfis
  - $N = n_p(n_p-1)/2$ → número total de pares

$$E[g(Z)] = \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=i+1}^{n_p} \frac{1}{N} g(i,j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=i+1}^{n_p} g(i,j) = \frac{T}{N}$$

- Seja Z_i sequência iid de v.a. uniforme sobre pares

$$M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(Z_i)$$

← Média amostral com *n* amostras, estimador para E[g(Z)]

- Logo *T* é aproximado por $M_n * N$

Jogando Paciência

- Qual é a fração de vezes que um algoritmo determinístico *A* vence o jogo de paciência?
  - vencer depende apenas da permutação das cartas do baralho (não há aleatoriedade)
- Seja *s* uma permutação das cartas
  - $f_A(s) = 1$ se algoritmo *A* vence com permutação s, 0 c.c.
- *N* = número total de permutações das cartas, *N* = 52!

$$F_A = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^{N} f_A(s)$$

← Fração de vezes que algoritmo *A* vence

Problema: somatório tem 52! termos!

- *Monte Carlo to the rescue!*

Jogando Paciência

- Seja *S* uma v.a. uniforme em [1, N]
  - uniforme entre todas possíveis permutações das cartas

$$E[f_A(S)] = \sum_{s=1}^{N} \frac{1}{N} f_A(s) = \frac{1}{N} \sum_{s=1}^{N} f_A(s) = F_A$$

- Valor esperado já é a fração que queremos!
- Seja S_i sequência iid de v.a. uniforme em [1, N]
  - S_i é uma permutação das cartas

$$M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} f_A(S_i)$$

Média amostral da fração
de vezes que algoritmo vence

- Logo, F_A é a aproximado por M_n

Vantagens e Desvantagens

- Trocar $G_N = \sum_{i=1}^{N} g(i)$ por $M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(X_i)$
- **Quando esta ideia é boa?**

- Comparação entre *N* (parcelas) e *n* (amostras)
- Se *N* for pequeno, ideia não é boa
  - podemos calcular G_N diretamente
- Se calcular g(.) é muito caro, boa ideia mesmo quando *N* pequeno
- Se *g*(*i*) for muito “errática”, ideia não é boa
  - ex. um valor de *g*(*i*) é maior que todo o resto da soma
  - estimador pode ser muito ruim se *n* não for muito grande
- Qualidade da aproximação depende de *N, n, g*()

Calculando o Erro

- Podemos usar Chebyshev para calcular *n*
  - para precisão ε e confiança β, temos

$$P[M_n \in [\mu - \epsilon, \mu + \epsilon]] > 1 - \frac{\sigma^2}{\epsilon^2 n} = \beta$$

- onde μ e σ^2 são o valor esperado e variância da v.a. que será aproximada pelo estimador

$$\mu = E[g(X)] \qquad \sigma^2 = Var[g(X)]$$

- *g*( ) é geralmente uma função indicadora (para contar coisas) e *X* é uma v.a. uniforme nos valores que *g* pode assumir
- **Problema**: muitas vezes não sabemos σ^2
  - temos que estimar com o estimador

Erro da Paciência

- Seja F_A = 0.1 fração de vezes que algoritmo *A* vence
  - *S* é v.a. uniforme nas permutações
  - $\mu = E[\, f_A(S)\,] = 0.1$, $\sigma^2 = Var[f_A(S)] = 0.1*0.9 = 0.09$
- Supor $\varepsilon = 10^{-4}$ e $\beta = 0.99$

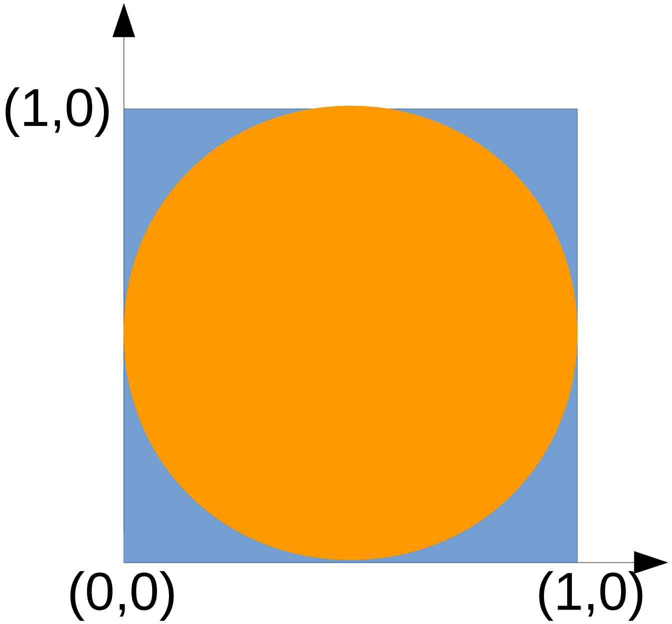
$$P[M_n \in [\mu - \epsilon, \mu + \epsilon]] > 1 - \frac{\sigma^2}{\epsilon^2 n} = \beta$$

$$1 - \frac{0.09}{(10^{-4})^2 n} = 0.99 \rightarrow n = 9 * 10^8$$

- Muito, muito menor do que 52! ~ 10^{68}

Calculando π

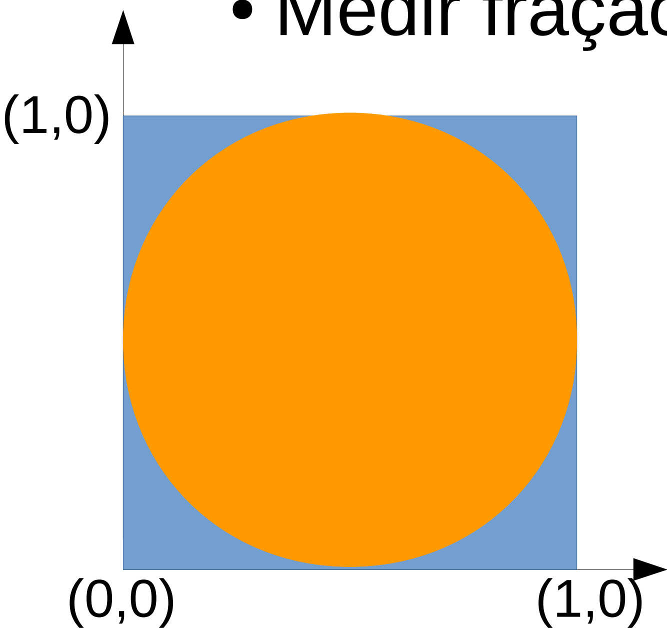
- Como estimar o valor de π?
  - ou qualquer valor que tenha relação com geométrica
- **Ideia**
  - Escrever π como relação entre áreas
  - Usar Monte Carlo para estimar relação



- A_q = Área do quadrado = 1
- A_c = Área do círculo = $\pi r^2 = \pi/4$
- $\pi = 4 * A_c / A_q$
- Estimar A_c / A_q

Calculando π

- Ideias para estimar $A_c\,/\,A_q$?
- Gerar *n* pontos uniforme no quadrado
- Medir fração do pontos que estão dentro do círculo



- Seja *X* e *Y* duas v.a. uniformes contínuas em [0, 1]
- Seja $g(x, y)$ indicadora do ponto (x, y) estar dentro do círculo
  - $g(x,y) = 1$ se $(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2 <= 1$
- Temos $E[g(X, Y)] = A_c\,/\,A_q = \pi/4$
- Como estimar $E[g(X, Y)]$?

Calculando π

- Seja X_i, Y_i sequência iid uniforme em [0,1]
  - v.a. contínua

$$M_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} g(X_i, Y_i)$$

Fração de pontos que estão dentro do círculo

- M_n converge para π/4 (pela lei dos grds números)
- Logo π pode ser estimado por $4*M_n$

O Erro de π

- Podemos usar Chebyshev para calcular *n*
  - para precisão ε e confiança β, temos

$$P[M_n \in [\mu - \epsilon, \mu + \epsilon]] > 1 - \frac{\sigma^2}{\epsilon^2 n} = \beta$$

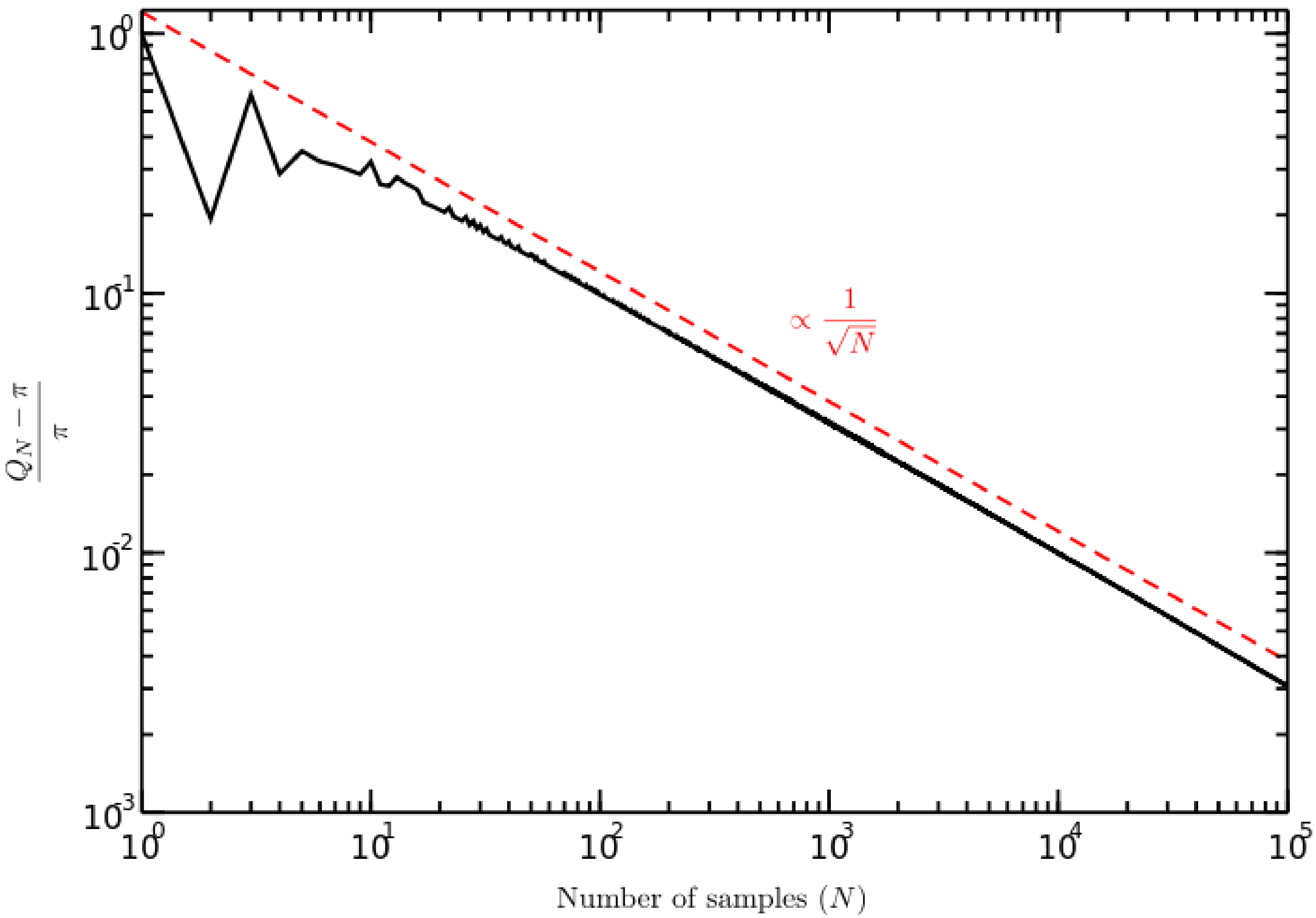
- μ= E[g(X,Y)] = P[g(X,Y) = 1] = $\pi/4$
- σ^2 = Var[g(X,Y)] = $\pi/4$ (1-$\pi/4$)
- Não sabemos π mas σ^2 de uma v.a. indicadora tem valor máximo quando p = ½ → σ^2 = ¼
- Supor $\varepsilon = 10^{-4}$ e $\beta = 0.99$
  - então temos que n = 2.5 * 10^9

MSE e SEM

- Mean Squared Error (MSE), ou Erro Quadrático Médio
    - medida clássica para erro de preditores ou estimadores
    - $\mathrm{MSE}(\phi') = E_{\phi'}[(\phi' - \phi)^2]$, onde ϕ' é o estimador e ϕ o valor a ser estimado
- Seja M_n (média amostral) o estimador para o valor μ
    - $\mathrm{MSE}(M_n) = \mathrm{Var}(M_n) = \sigma^2/n$
- Standard Error of the Mean (SEM)
    - medida de erro relativo
    - $\mathrm{SEM}(M_n) = \sigma/\mathrm{sqrt}(n) = \mathrm{sqrt}(\mathrm{MSE}(M_n))$
- Para qualquer M_n, sempre decresce como sqrt(n)
    - não é muito rápido!

SEM de π

- SEM(M_n) = σ/sqrt(n)
- Erro relativo = | $4M_n - \pi$ | / π
- Teoria e prática estão bem de acordo!
- Repare 1/sqrt(n) é devagar !



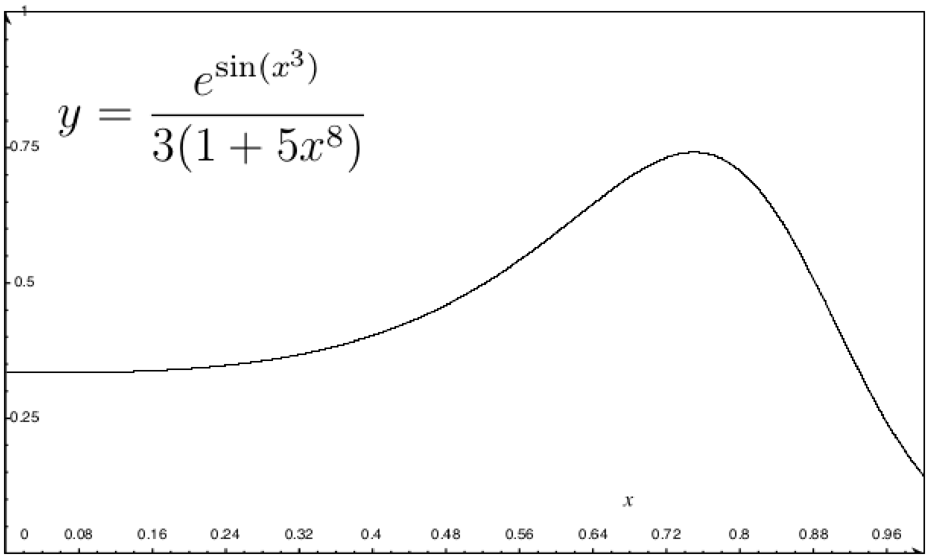
Figueiredo 2021

Integração Numérica

- Encontrar a integral definida de uma função

$$\int_{x=a}^{x=b} h(x)\,dx$$

- **Problema:** função pode não ser integrável analiticamente



- **Solução:** integração numérica
- Conjunto de algoritmos para calcular valor da integral
  - muito usado na física, química, engenharia, etc

- Abordagem via Monte Carlo é uma classe de algoritmos
  - *Monte Carlo integration*

Integração de Monte Carlo

- Generalização da ideia de computar o valor de π
- Calcular razão entre área de “baixo da curva” (integral) e de um “quadrado” (limites de integração)
- Estimar este valor usando amostras uniformes
- Supor 0 <= h(x) <= 1, para x em [0, 1]

$$I = \int_{x=0}^{x=1} h(x)\,dx$$

- Definir função indicadora para ponto de baixo da curva
  - $g(x, y) = 1$ se $h(x) <= y$, e zero c.c.
- Seja X, Y v.a. contínuas uniformes em [0, 1]

Integração de Monte Carlo

- Valor esperado

$$E[g(X,Y)] = \int_{y=0}^{y=1} \int_{x=0}^{x=1} f_{XY}(x,y)\, g(x,y)\, dx\, dy$$

- $f_{XY}(x,y) = f_X(x)\, f_Y(y) = 1$ (densidade conjunta de duas v.a. contínuas uniformes e independentes em [0,1])
- $E[\, g(X,Y)\,]$ = fração entre área abaixo da curva e área do quadrado [0,1] = área abaixo da curva = integral de h
- Como estimar $E[\, g(X,Y)\,]$?
- Seja X_i, Y_i sequência iid de uniformes em [0, 1]

$$M_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} g(X_i, Y_i) \longleftarrow \text{Fração de pontos que estão abaixo da curva}$$

Figueiredo 2021

Integração de Monte Carlo

- Método alternativo: relacionar valor esperado diretamente com valor da integral

$$I = \int_{x=0}^{x=1} h(x)\,dx$$

- Seja X v.a. contínua uniforme em [0, 1]

$$E[h(X)] = \int_{x=0}^{x=1} f_X(x)\,h(x)\,dx = \int_{x=0}^{x=1} h(x)\,dx = I$$

- Pois $f_X(x) = 1$ (densidade da v.a. uniforme em [0,1])
- Como estimar $E[\,h(X)\,]$?
- Seja X_i sequência iid uniforme em [0, 1]

Converge para valor esperado em n (lei dos grds números) ←

$$M_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(X_i)$$

Generalização

- Funciona para qualquer limite de integração, e qualquer número de dimensões
  - grande vantagem da abordagem Monte Carlo

$$I=\int_{\omega} h(\vec{x})\,d\vec{x} \qquad\qquad V=\int_{\omega} d\vec{x}$$

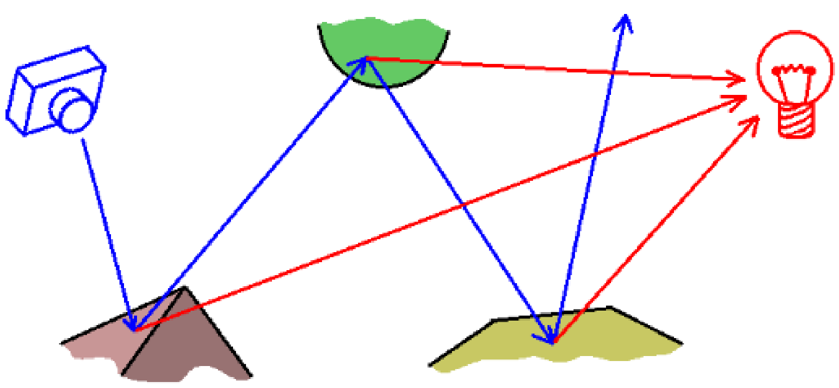
- onde x é um ponto em um espaço de k dimensões, ω um "pedaço" fechado deste espaço, e V é o volume de ω
- Seja X_i uma sequência iid de v.a. uniforme no espaço ω
  - X_i tem k dimensões
- Temos

$$M_n=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(\vec{X}_i)$$ converge para I/V quando n → infinito

Monte Carlo *Ray Tracing*

- Integração de Monte Carlo em Computação Gráfica
- **Problema:** determinar cor (intensidade de luz) em um pixel em uma cena construída por computador

Integral formulation ("rendering equation")



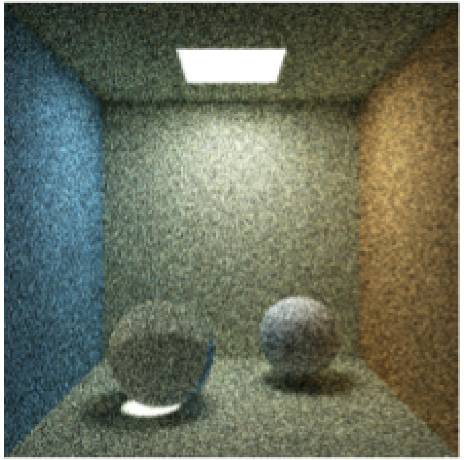
$$R = \int_{\Omega} L(y)dy$$

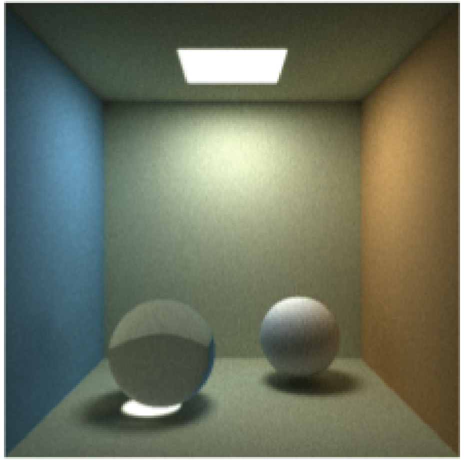
← Resolvida numericamente usando método de Monte Carlo

- Integrate over all possible light paths y ← Muitos, muitos caminhos!

Monte Carlo *Ray Tracing*

$$\int_\Omega L(y)dy = E\left[\frac{L(Y)}{\text{pdf}[Y]}\right]$$


menos amostras


mais amostras

Advantage of Monte-Carlo

- Good compromise between cost and precision: $\epsilon = O\left(1/\sqrt{N}\right)$
  - in contrast, integration by e.g. trapezoid rule has an error of $\epsilon = O\left(1/N^{2/d}\right)$, for d dimensions

Disadvantage of Monte-Carlo

- Output is random

slides: cortesia de Gustavo Pfeifer (ex-aluno de MSc do PESC)