

# Métodos de Monte Carlo e Aproximações de $\pi$

Fernando Henrique Ferraz Pereira da Rosa

Matheus Moreira Costa

Tiago Luiz Tortella

Vagner Aparecido Junior

MAP-131 Laboratório de Matemática Aplicada

Prof. Dr. Eduardo Colli

30 de setembro de 2002

# 1 Introdução

Freqüentemente, costuma-se classificar os matemáticos em dois grupos: puros ou aplicados, mas existem claro, diversas outras maneiras de classificá-los. Assim como não se supõe que um físico teórico seja aquele que passe o dia inteiro numa sala fechada em frente a uma folha de papel, e o físico experimental aquele que passa o dia inteiro brincando num laboratório, não existe a rigor, um matemático essencialmente puro, ou essencialmente aplicado.

De acordo com [1], os métodos de Monte Carlo englobam o ramo da matemática aplicada (ou experimental) ligado a experimentos com números aleatórios. Suas aplicações se estendem as mais diversas áreas, incluindo ramos da Física, Química, Biologia, Astronomia, e até mesmo da Ecologia.

Segundo [3], o nome Monte Carlo foi cunhado durante a Segunda Guerra Mundial durante o projeto Manhattan, por causa da similaridade das simulações estatísticas com os jogos de azar, já que Monte Carlo (capital do Principado de Mônaco) era um centro de casinos, apostas e jogos.

Em [2] encontramos que uma das primeiras aplicações desses métodos surgiram do estudo da difusão aleatória de nêutrons num material radioativo, também durante a Segunda Guerra Mundial.

Hoje em dia os métodos de Monte Carlo são utilizados rotineiramente em diversos campos, da simulação de fenômenos físicos complexos, como estudo de modelos nucleares, até áreas mais mundanas, como a simulação de um jogo de Bingo.

Um dos pontos fortes da matemática pura (ou teórica) é sua preocupação com a abstração e a generalidade: pode-se modelar rigorosamente um problema e a partir da análise teórica compreender completamente seu funcionamento. Entretanto esse mesmo ponto forte carrega uma fraqueza inerente: quanto mais complexo o problema, mais difícil será sua modelagem em termos teóricos determinísticos. A idéia principal por trás de Monte Carlo na abordagem desses problemas, é *aproveitar ao máximo a força da análise teórica, e ao mesmo tempo evitar suas fraquezas substituindo a teoria por experimento, onde quer que a primeira falhe*.

Tomemos um exemplo para tornar essa idéia mais clara. Suponhamos que queiramos analisar o comportamento de uma colônia de formigas. Modelar isso matematicamente por métodos puramente teóricos levaria qualquer um a loucura: o número de variáveis envolvidas e o número de possíveis comportamentos tomariam conta do maior super-computador existente por uma infinidade. Agora se estivermos dispostos a mesclar nosso poder de análise teórica com modelos probabilísticos, conseguimos, na pior das hipóteses, formular o problema matematicamente.

No presente trabalho, iremos nos concentrar na aplicação de alguns métodos de Monte Carlo elementares, com o objetivo de conseguir aproximações de  $\pi$ . Analisamos 3 principais métodos, a saber: Agulha de Buffon, Método da Circunferência e Integração por Monte Carlo.

## 2 Método da Circunferência

Tomemos uma circunferência de raio 1 e um quadrado de lado 2, centrados na origem do sistema cartesiano de coordenadas, conforme a figura abaixo.

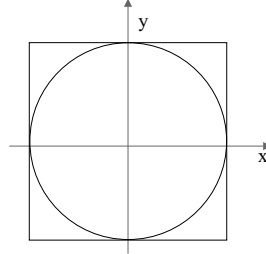


Figura 1

Nós sabemos que a área de uma circunferência é dada por:  $A_c = \pi R^2$ , e a área de um quadrado por  $A_q = l^2$ . No nosso caso com  $R = 1$  e  $l = 2$ , temos que  $A_c = \pi$  e  $A_q = 4$ . Fazendo a razão entre as duas áreas e isolando  $\pi$ :

$$\begin{aligned}\frac{A_q}{A_c} &= \frac{4}{\pi} \\ A_q \pi &= 4A_c \\ \pi &= \frac{4A_c}{A_q}\end{aligned}\tag{1}$$

Portanto podemos aproximar  $\pi$  pelo quociente das duas áreas. Imaginemos o seguinte experimento: jogamos  $n$  pontos aleatórios dentro desse quadrado. Contamos quantas vezes os pontos caem dentro da circunferência. Podemos aproximar  $\pi$  da seguinte forma:

$$\pi = \frac{4 \times \text{número de vezes que os pontos caíram dentro da circunferência}}{\text{número de pontos jogados}}$$

Formalizemos esse raciocínio agora. Qualquer ponto dentro desse quadrado, será da seguinte forma:  $(x, y)$  tal que  $x \in [-1, 1]$  e  $y \in [-1, 1]$ . E qualquer ponto da circunferência, será da forma:

$$x^2 + y^2 \leq 1$$

Basta então gerarmos  $n$  pares da forma  $(x, y)$ ,  $x$  e  $y$  variáveis aleatórias contínuas no intervalo  $[-1, 1]$ , e criar uma variável seguindo distribuição de Bernoulli  $A$ , dada por:

$$A_{(x,y)} = \begin{cases} 1 & \text{se } x^2 + y^2 \leq 1 \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Nossa aproximação de  $\pi$  será então:

$$\hat{\pi} = 4E(A)$$

(onde  $E(X)$  é a esperança matemática de  $X$ ).

Com a seguinte função em R simulamos 30 lançamentos com  $n$  pontos, para cada valor de  $n$ , e obtivemos as seguintes aproximações de  $\pi$ :

```

> # funcao que aproxima Pi por n pontos pelo Metodo da Circunferencia
> circ <- function(n) {
> x <- runif(n,-1,1)
> y <- runif(n,-1,1)
> z <- ifelse(x^2 + y^2 <= 1,1,0)
> 4 * mean(z)
> }

```

Tabela 1. Método da Circunferência

$n$	10	100	1000	10000	100000	1000000
$\hat{\pi}$	3.067	3.1306	3.1381	3.1407	3.1408	3.1416
$\sigma_{\hat{\pi}}$	0.597	0.1965	0.065	0.014	0.004	0.001

Notamos que esse método ofereceu uma boa aproximação, em particular,  $\pi$  está em todos os intervalos da forma  $[\hat{\pi} - \sigma_{\hat{\pi}}, \hat{\pi} + \sigma_{\hat{\pi}}]$

### 3 Agulha de Buffon

O problema da Agulha de Buffon é um dos problemas mais antigos na área de probabilidade e geometria. Ele foi enunciado pela primeira vez em 1777, e envolve o lançamento aleatório de uma agulha num plano com infinitas linhas paralelas e a determinação da probabilidade de que a agulha cruze uma das linhas. O resultado está diretamente relacionado com o valor de  $\pi$ .

Tomemos o caso mais simples, em que a distância entre as linhas é de uma unidade, assim como o comprimento da agulha. Há mais duas variáveis: o ângulo  $\theta$  em que a agulha cai e a distância  $D$  do centro da agulha até a linha mais próxima. O ângulo  $\theta$  pode variar de 0 a  $\pi$  e é medido a partir da linha que passa pelo centro da agulha e é paralela às outras linhas. É fácil perceber que a menor distância do centro da agulha a linha ( $D$ ) nunca pode ser maior que  $1/2$ . A figura abaixo ilustra os conceitos discutidos:

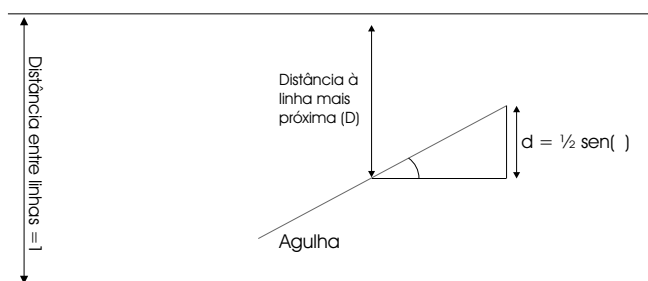


Figura 2

Também é fácil notar que o cateto oposto ao ângulo  $\theta$ ,  $d$ , mede  $1/2 \sin(\theta)$  (basta aplicar a definição de seno e usar-se do fato que se  $\theta$  é medido a partir da linha que corta a agulha no seu centro, e o tamanho da agulha é 1, então metade desse tamanho é  $1/2$  e portanto a hipotenusa do triângulo em questão vale  $1/2$ ).

Dadas essas condições iniciais, o ponto principal para resolver o problema é tentar prever, baseado somente no ângulo  $\theta$ , quando que a agulha cruza uma das linhas. Analisando o esquema, dando atenção especial para  $D$  e  $d$ , nota-se que a agulha só cruza uma das linhas quando  $D$  for menor que  $d$ . Ou seja, quando a menor distância do centro da agulha a uma das linhas for menor que o cateto oposto ao ângulo  $\theta$ . Em linguagem matemática, a agulha cruza uma das linhas quando:

$$D \leq 1/2 \sin(\theta)$$

Agora basta analisarmos quando que  $D$  é menor que  $1/2 \sin(\theta)$ . No gráfico abaixo, temos a função  $y = 1/2 \sin(x)$  plotada de 0 a  $\pi$  que são os possíveis valores para o ângulo  $\theta$ .

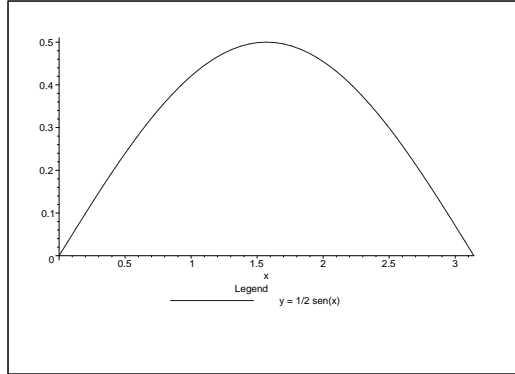


Figura 3

Vale notar que o valor máximo dessa função é  $1/2$ , quando  $\theta = \pi/2$ , e que todos os valores possíveis para  $D$  também estão nesse gráfico. Quando  $\theta$  varia de  $0$  a  $\pi$ , a menor distância  $D$  do centro da agulha a uma das linhas pode ir de  $0$  até  $1/2$ . Ou seja os valores possíveis de  $D$  estão no retângulo de base  $[0, \pi]$  e altura  $1/2$ . É fácil notar portanto, que como a agulha cruza uma das linhas quando  $D$  menor que  $1/2 \sin(\theta)$  então para todos os pontos sob o gráfico da função  $y = 1/2 \sin(\theta)$  a agulha cruza uma das linhas. Quando o ponto está na área restante, ou seja, acima do gráfico da função, a agulha então não cruza nenhuma linha.

Logo, a probabilidade de que a agulha cruze uma linha será dada pela razão entre a área do retângulo de base  $[0, \pi]$  e altura  $1/2$  e o gráfico da função  $y = 1/2 \sin(\theta)$ . A área do retângulo é dada por:

$$A_r = \pi/2 \quad (2)$$

E a área sob o gráfico da função  $y = 1/2 \sin(\theta)$  é dada pela seguinte integral:

$$A_f = \int_0^{\pi} \frac{\sin(x)}{2} dx \quad (3)$$

Calculando 3 e fazendo  $p = A_f/A_r$ :

$$\begin{aligned} A_f &= \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin(x) dx \\ &= \frac{1}{2} [-\cos(x)]_0^{\pi} \\ &= \frac{1}{2} (-\cos(\pi) + \cos(0)) \\ &= 1 \\ p &= \frac{A_f}{A_r} = \frac{1}{\pi/2} = \frac{2}{\pi} \end{aligned}$$

Finalmente, para que possamos aproximar  $\pi$  a partir do lançamento de agulhas, lembramos da definição de probabilidade para eventos discretos:

$$p = \frac{\text{número de sucessos}}{\text{número de eventos}} \quad (4)$$

Isolando  $\pi$  na penúltima equação:

$$p = \frac{2}{\pi} \Rightarrow \pi = \frac{2}{p}$$

Mas então, por 4:

$$\begin{aligned}\hat{\pi} &= \frac{2}{\frac{(\text{número de 'cruzamentos'})}{(\text{número de lançamentos})}} \\ &= \frac{2 \times (\text{número de lançamentos})}{(\text{número de 'cruzamentos'})}\end{aligned}$$

Com a ajuda de um programa de computador especialmente desenvolvido para simular Buffon, obtivemos as seguintes aproximações para  $\pi$  (lançamos 30 vezes  $n$  agulhas para cada  $n$ ):

Tabela 2. Agulha de Buffon

$n$	10	100	1000	10000	100000	1000000
$\hat{\pi}$	3.9615	3.1149	3.1694	3.1593	3.1376	3.1418
$\sigma_{\hat{\pi}}$	2.6749	0.5001	0.1411	0.0471	0.0130	0.0045

A aproximação não foi tão boa quanto para o primeiro método testado mas foi bem razoável, considerando o pequeno desvio padrão obtido.

## 4 Integração por Monte Carlo

Uma das principais aplicações dos Métodos de Monte Carlo é a estimação do valor de integrais múltiplas. Enquanto essas técnicas são fracas quando em comparação com métodos analíticos para resolução de integrais simples ou duplas, a partir do grau 6 ou 7 a estimação por Monte Carlo é a única saída computacionalmente viável.

Existem diversas técnicas de Integração por Monte Carlo mas vamos nos ater a uma das mais básicas, dado que requer apenas alguns conhecimento de Cálculo e Probabilidade. Uma pequena observação: primeiro explicaremos como funciona a Integração por Monte Carlo usando a Função de Importância e então mostraremos como aproximar  $\pi$  usando essa técnica.

### 4.1 Função de Importância

O seguinte método chama-se Função de Importância pois agregamos uma função à Integral que queremos avaliar, de modo a facilitar uma abordagem probabilística.

Suponhamos que queiramos estimar o valor da seguinte integral:

$$I = \int_a^b g(x)dx \quad (5)$$

Onde supomos  $g(x)$  definida e contínua no intervalo  $[a, b]$ , de modo que a Integral existe nesse intervalo.

A idéia é manipular a integral numa forma que possamos resolver por Monte Carlo. Para conseguir isso, vamos definir a seguinte função em  $[a, b]$ :

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{se } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (6)$$

Em seguida, notando que  $f(x)$  é constante em  $[a, b]$  inserimos 6 em 5, obtendo:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{f(x)} \int_a^b g(x)f(x)dx \\ I &= (b-a) \int_a^b g(x) \frac{1}{b-a} dx \end{aligned} \quad (7)$$

Observemos agora dois pontos fundamentais: em primeiro lugar,  $f(x)$  pode ser vista como uma Variável Aleatória Contínua Uniforme em  $[a, b]$ . Em segundo, lembrando a definição de Esperança Matemática para uma variável uniforme (vide [2]):

$$E(X) = \int_a^b xf(x)dx$$

É fácil notar que o lado direito da equação 7 pode ser visto como a Esperança Matemática da função  $g(x)$ , com  $x$  seguindo uma distribuição uniforme em  $[a, b]$ . Podemos então rescrever 7 como:

$$I = (b-a)E(g(x)) \quad (8)$$



O que nos permite estimar  $I$  coletando  $n$  amostras  $(x_1, x_2, \dots, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n)$  da variável  $f(x)$ , calculando  $g(x_i)$  para cada  $i$  ( $1 \leq i \leq n$ ), tirando a média desses valores e multiplicando por  $(b - a)$ . Em linguagem matemática:

$$\hat{I} = (b - a) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g(x_i) \quad (9)$$

## 4.2 Aproximando $\pi$

O método acima explicou como integrar uma função por métodos probabilísticos, mas o leitor pode estar se questionando qual a utilidade disso. Há diversos casos em que não se pode resolver uma integral analiticamente (pelo menos por métodos elementares) e então os únicos métodos possíveis são os métodos de aproximação numéricos. Esse é o caso em especial de uma das funções que vamos integrar. O método de Monte Carlo nesse caso possibilita uma boa aproximação.

Seja a função densidade de probabilidade do modelo contínuo Normal reduzido:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \quad (10)$$

Temos pela definição de função densidade probabilidade (f.d.p.) que, se  $h(x)$  é uma f.d.p deve-se satisfazer:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} h(x) dx = 1 \quad (11)$$

Mas então, como 10 é uma f.d.p por definição, temos por 11 que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} dx = 1 \quad (12)$$

Manipulando-se 12 obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/2} dx &= 1 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/2} dx &= \sqrt{2\pi} \end{aligned} \quad (13)$$

Finalmente, temos que se conseguirmos uma estimativa  $\hat{I}$  para a integral em 13, nossa estimativa de  $\pi$ , será dada por:

$$\hat{\pi} = \frac{\hat{I}^2}{2} \quad (14)$$

Resta-nos um problema: o método explorado em 4.1 só é possível de ser aplicado numa integral definida num intervalo de extremos finitos  $[a, b]$ . Entretanto podemos nos valer do seguinte artifício: sabemos que a função  $e^{-x^2/2}$  decresce muito rapidamente, e que analisando a sua derivada primeira (nominalmente  $-xe^{-x^2/2}$ ) também verificamos que ela é estritamente decrescente em  $[0, +\infty]$

e em  $[-\infty, 0]$ . Tomando um intervalo razoável centrado em 0, podemos estar seguros de que não estaremos muito longe do valor real dessa integral.

Tomemos como intervalo  $[a, b]$  o intervalo  $[-10, 10]$ . Para nos certificarmos de que esse é um bom intervalo, obtemos no Maple a seguinte aproximação para  $\pi$  resolvendo essa integral por métodos numéricos: 3.141592654. Também vale notar que  $e^{-x^2/2}$  para  $x = 10$  vale menos que  $0.2 \cdot 10^{-21}$ .

Juntando o que discutimos até agora, levando em conta a equação 9 da seção 4.1, as equações 14 e 13 da seção 4.2, e fazendo os ajustes necessários, temos que nosso estimador de  $\pi$  dada uma amostra de tamanho  $n$  será dado por:

$$\hat{\pi} = \frac{1}{2} \left( \frac{20}{n} \sum_{i=1}^n e^{-x_i^2/2} \right)^2 \quad (15)$$

onde  $x_i$  representa uma amostra de uma variável aleatória uniforme no intervalo  $[-10, 10]$ .

Com as seguintes funções em R podemos simulamos 30 amostras para cada amostra de tamanho  $n$ :

```
> intexp
function(a,n) {
  ((mean(exp(-runif(n,-a,a)^2/2))*2*a)^2)/2
}
> do30exp
function(n,a) {
  b <- intexp(n,a)
  for(i in 1:29)
    b <- c(b,intexp(n,a))
  b
}
```

Tabela 3. Integração por Monte Carlo

$n$	10	100	1000	10000	100000	1000000	10000000
$\hat{\pi}$	4.4515	3.1072	3.1248	3.1695	3.1409	3.1410	3.1426
$\sigma_{\hat{\pi}}$	5.2424	1.4218	0.3866	0.1422	0.045	0.0144	0.0038

Este método também forneceu aproximações razoáveis para  $\pi$  entretanto foi o pior dos três. Com um desvio padrão alto, considerando-se que fizemos  $n$  ir até 10 milhões. O melhor dos três métodos foi o primeiro, embora valha a pena se notar que esses resultados estão diretamente ligados à qualidade dos números pseudo-aleatórios gerados pelo programa usado para a simulação.

## Referências

- [1] HANDSCOMB D.C. e HAMMERSLEY J.M. *Monte Carlo Methods*. Methuen & CO LTD, 1964.
- [2] MORETTIN e P.A., BUSSAB W. O. *Estatística Básica*. Editora Saraiva, 2002.
- [3] ALLEN. C. R. *et al. Introduction to Monte Carlo Methods*. Computational Science Education Project. 1995.

## Sobre

A versão eletrônica desse arquivo pode ser obtida em <http://www.feferraz.net>

Copyright (c) 1999-2005 Fernando Henrique Ferraz Pereira da Rosa.  
É dada permissão para copiar, distribuir e/ou modificar este documento sob os termos da Licença de Documentação Livre GNU (GFDL), versão 1.2, publicada pela Free Software Foundation;  
Uma cópia da licença em está inclusa na seção intitulada "Sobre / Licença de Uso".