Distribuições de Probabilidade em Simulação

Carlos M. Fonseca
Departamento de Engenharia Informática
Universidade de Coimbra

MEI 2020/2021

Bibliografia

- A. M. Law and W. D. Kelton, *Simulation Modeling and Analysis*, McGraw Hill Book Company, 3rd edition, 2000.
- J. Banks and J. S. Carson, *Discrete-Event System Simulation*, Prentice-Hall International, 1984.
- Ronald T. Kneusel, *Random Numbers and Computers*, Springer, 2018.

Introdução

- Quase todos os sistemas reais envolvem uma ou mais fontes de aleatoriedade
  - Tempo entre chegadas
  - Tempo de serviço / processamento / carregamento
  - Tipo de serviço pretendido, tamanho de um lote, ...
- É necessário especificar as respetivas distribuições de probabilidade (considerar a média só não chega!)
- A forma da distribuição é importante (tipicamente assimétrica)

Introdução

- Exemplo
  - Num sistema de fabrico, os tempo entre chegadas das peças a uma máquina seguem uma distribuição exponencial com média de 1 minuto
  - A tempo de processamento na máquina segue uma distribuição exponencial com média de 0.99 minutos
  - O tempo médio de espera na fila será 98.01 minutos (valor teórico)
  - Simulando apenas com base em valores médios, o tempo de espera seria zero…

Especificação das distribuições

- A partir de dados experimentais
  1) Usar os próprios valores (*trace-driven simulation*)
  2) Usar os próprios valores para construir uma função de distribuição empírica e amostrar dessa distribuição
  3) Ajustar uma distribuição teórica aos dados, avaliar a qualidade do ajustamento e amostrar dessa distribuição

Especificação das distribuições

1) Usar os próprios valores (*trace-driven simulation*)
   - Só permite reproduzir o que aconteceu historicamente
   - Dados disponíveis podem não ser suficientes
   - Útil na comparação de um sistema proposto com um existente (usando dados do sistema existente)
   - Recomendado para a validação de modelos

Especificação das distribuições

2) Usar os próprios valores para construir uma função de distribuição empírica e amostrar dessa distribuição

- Geração de “novos” dados a partir dos existentes
- Função de distribuição empírica pode não representar adequadamente a distribuição subjacente
  - Valores extremos limitados aos valores observados

Especificação das distribuições

3) Ajustar uma distribuição teórica aos dados, avaliar a qualidade do ajustamento e amostrar dessa distribuição

- “Suaviza” os dados e fornece informação global
- Permite gerar valores extremos fora do intervalo dos valores observados (mas também pode obrigar a truncar a distribuição)
- Por vezes há justificação física para a forma da distribuição
- Representação compacta e flexível

Distribuições contínuas

- Parametrização
  - Localização, γ
    - Tipicamente é o ponto médio ou o limite inferior do suporte (p. ex., a média, μ, da distribuição normal)
    - Desloca a distribuição para a esquerda ou para a direita
    - Se a variável aleatória X tiver parâmetro de localização 0, $Y = X + \gamma$ terá parâmetro de localização γ

Distribuições contínuas

- Parametrização
  - Escala, β
    - Determina a escala de medição dos valores da distribuição (p. ex., o desvio padrão, σ, da distribuição normal)
    - Comprime ou expande a distribuição sem alterar a sua forma básica
    - Se a variável aleatória X tiver parâmetro de escala 1, $Y = \beta X$ terá parâmetro de escala β

Distribuições contínuas

- Parametrização
  - Forma, α
    - Determina a forma da distribuição numa família de distribuições
    - Altera as propriedades da distribuição mais profundamente que γ e β (por exemplo, *skewness*)
    - Alguma distribuições não têm parâmetro de forma (p. ex. a distribuição exponencial) enquanto outras podem ter dois (p. ex., a distribuição beta)

Distribuições contínuas

- Distribuição uniforme, U(*a*,*b*)
- "Primeiro" modelo para uma quantidade que varia aleatoriamente entre *a* e *b*

$$f(x)=\begin{cases}\dfrac{1}{b-a} & se \quad a\le x\le b\\ 0 & caso\ contrário\end{cases}\qquad F(x)=\begin{cases}0 & se \quad x<a\\ \dfrac{x-a}{b-a} & se \quad a\le x\le b\\ 1 & se \quad x>b\end{cases}\qquad média=\frac{a+b}{2}\qquad variância=\frac{(b-a)^2}{12}$$

- Parâmetro de localização *a*, parâmetro de escala *b*−*a*, com *a* < *b*

Distribuições contínuas

- Distribuição exponencial, expo(β)
- Tempo entre chegadas de clientes a uma taxa constante, tempo até uma peça de equipamento falhar

$$f(x)=\begin{cases} \frac{1}{\beta}e^{-x/\beta} & se \quad x\geq 0 \\ 0 & caso\, contrário \end{cases} \qquad F(x)=\begin{cases} 1-e^{-x/\beta} & se \quad x\geq 0 \\ 0 & caso\, contrário \end{cases} \qquad média=\beta \qquad variância=\beta^2$$

- *P*arâmetro de escala $\beta > 0$
- Propriedade de falta de memória

Distribuições contínuas

- Distribuição gama, gamma(α,β)
- Tempo de serviço ou de reparação de um equipamento

$$f(x)=\begin{cases} \beta^{-\alpha} x^{\alpha-1} \dfrac{e^{-x/\beta}}{\Gamma(\alpha)} & se \quad x>0 \\ 0 & caso\,contrário \end{cases} \qquad média=\alpha\beta \qquad variância=\alpha\beta^2$$

- Parâmetro de escala $\beta > 0$, parâmetro de forma $\alpha > 0$
- expo(β) = gamma(1,β) e a distribuição χ^2 com k graus de liberdade é igual gamma(k/2,2), entre outros resultados

Distribuições contínuas

- Distribuição Weibull, Weibull(α,β)
- Tempo até completar uma tarefa ou até uma peça de equipamento falhar

$$f(x)=\begin{cases}\alpha\beta^{-\alpha}x^{\alpha-1}e^{-(x/\beta)^{\alpha}} & se \quad x>0\\ 0 & caso\,contrário\end{cases}\qquad F(x)=\begin{cases}1-e^{-(x/\beta)^{\alpha}} & se \quad x>0\\ 0 & caso\,contrário\end{cases}\qquad média=\frac{\beta}{\alpha}\Gamma\left(\frac{1}{\alpha}\right)$$

- Parâmetro de escala $\beta > 0$, parâmetro de forma $\alpha > 0$
- expo(β) = Weibull(1,β) e X ~ Weibull(α,β) se e só se X^{α} ~ expo(β^{α})

Distribuições contínuas

- Distribuição Normal, N(μ,σ^2)
- Erros de vários tipos, somas de muitas quantidades (pelo teorema do limite central)

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \qquad média=\mu \qquad variância=\sigma^2$$

- Parâmetro de localização μ, parâmetro de escala $\sigma > 0$
- Se $X_1,\ldots,X_n \sim N(0,1)$, então $X_1^2 + \ldots + X_n^2 \sim \chi^2$ com n graus de liberdade
- Se for usada para representar um tempo, a função densidade tem quer ser truncada em $x = 0$

Distribuições contínuas

- Distribuição lognormal, LN(μ,σ^2)
- Tempo de serviço, *produto* de muitas quantidades (pelo teorema do limite central)

$$f(x)=\begin{cases} \dfrac{1}{x\sqrt{2\pi\sigma^2}}\,e^{\frac{-(\log x-\mu)}{2\sigma^2}} & se \quad x>0 \\ 0 & caso\,contrário \end{cases} \qquad média=e^{\mu+\sigma^2/2} \qquad variância=e^{2\mu+\sigma^2/2}\left(e^{\sigma^2}-1\right)$$

- Parâmetro de localização μ, parâmetro de escala $\sigma > 0$
- X ~ LN(μ,σ^2) se e só se log X ~ N(μ,σ^2)

Distribuições contínuas

- Distribuição Triangular, *triang*(a,b,c)
- Modelo grosseiro na ausência de dados

$$f(x)=\begin{cases} \dfrac{2(x-a)}{(b-a)(c-a)} & se \quad a\leq x\leq c \\ \dfrac{2(b-x)}{(b-a)(b-c)} & se \quad c<x\leq b \\ 0 & caso\,contrário \end{cases}$$

$$F(x)=\begin{cases} 0 & se \quad x<a \\ \dfrac{(x-a)^2}{(b-a)(c-a)} & se \quad a\leq x\leq c \\ 1-\dfrac{(b-x)^2}{(b-a)(b-c)} & se \quad c<x\leq b \\ 1 & se \quad x>b \end{cases}$$

$$média=\frac{a+b+c}{3}$$

$$variância=\frac{a^2+b^2+c^2-ab-ac-bc}{18}$$

- Parâmetro de localização *a*, parâmetro de escala *b−a* e parâmetro de forma *c*, onde *a* ≤ *c* ≤ *b*

Distribuições discretas

- Distribuição de Bernoulli, Bernoulli(p)
  - Ocorrência aleatória com dois resultados possíveis
  - $0 \leq p \leq 1$ representa a probabilidade de sucesso
  - Média p e variância $p(1-p)$
- Distribuição uniforme discreta, DU(a,b)
  - Ocorrência aleatória com vários resultados inteiros possíveis igualmente prováveis
  - a e b inteiros

Distribuições discretas

- Distribuição binomial, bin(t,p)
  - Número de sucessos em t experiências de Bernoulli independentes, número de peças defeituosas num lote de tamanho t, número de itens num lote de tamanho aleatório, …
  - Média tp e variância $tp(1-p)$
- Distribuição geométrica, geom(p)
  - Número de falhas antes do primeiro sucesso numa sequência de experiências de Bernoulli independentes, número de peças inspecionadas antes de encontrar uma peça defeituosa, número de itens num lote de tamanho aleatório, …
  - Média $(1-p)/p$ e variância $(1-p)/p^2$

Distribuições discretas

- Distribuição binomial negativa, negbin(s,p)
  - Número de falhas antes do s-ésimo sucesso numa sequência de experiências de Bernoulli independentes, número de peças boas inspecionadas antes de encontrar a s-ésima peça defeituosa, número de itens num lote de tamanho aleatório, …
  - Média $s(1-p)/p$ e variância $s(1-p)/p^2$
- Distribuição de Poisson, Poisson(λ)
  - Número de eventos por intervalo de tempo quando estes ocorrem a uma taxa constante, número de itens num lote de tamanho aleatório, ...
  - Média λ e variância λ, onde $\lambda > 0$

Geração de valores pseudo-aleatórios

- Escolhidas as distribuições que melhor representam as variáveis de um sistema, há que gerar valores segundo essas distribuições
- Na base desse processo está a geração de valores uniformemente distribuídos entre 0 e 1
- Pressupõe-se que se tem acesso a um bom gerador de números pseudo-aleatórios

Geração de valores pseudo-aleatórios

- Aspetos a ter em conta
  - Exatidão
    - Os valores gerados devem seguir exatamente a distribuição pretendida
    - Atualmente existem métodos exatos (e eficientes) para todas as distribuições mais comuns
    - Aproximar uma N(0,1) como a soma de 12 variáveis U(0,1) menos 6 já não é necessário
    - A distribuição escolhida pode ser ela própria uma aproximação à distribuição real, mas isso depende muito da situação

Geração de valores pseudo-aleatórios

- Aspetos a ter em conta
  - Eficiência
    - Memória
    - Tempo
      - Tempo inicial (*setup*) – importante se os parâmetros da distribuição variam frequentemente
      - Tempo de execução marginal – tempo necessário para gerar cada valor
      - Ambos podem depender dos parâmetros da distribuição
  - Necessidades de sincronização

Geração de valores pseudo-aleatórios

- Abordagens
  - Transformação inversa
  - Composição
  - Aceitação-rejeição
  - Propriedades especiais

Transformação Inversa

- Dada a função de distribuição da distribuição contínua pretendida, $F(x)$
  - Gerar $U \sim \mathrm{U}(0,1)$
  - Retornar $X = F^{-1}(U)$
- Notar que $F(X) \sim \mathrm{U}(0,1)$ e que F^{-1} está sempre definida
- Por exemplo, para a distribuição exponencial
  - $F(x) = 1 - e^{-x/\beta}$ e $F^{-1}(u) = -\beta \log(1-u)$
  - Basta retornar $X = -\beta \log(U)$

Transformação Inversa

- Este método também pode ser utilizado para distribuições discretas
- Generalização
  - Gerar $U \sim U(0,1)$
  - Retornar $X = \min \{x : F(x) \geq U\}$
- Limitações
  - F^{-1} pode não admitir fórmula fechada e/ou ser difícil de calcular
  - Pode ser mais lento que outros métodos

Transformação Inversa

- Vantagens
  - Sincronização
    - Se U_1 e U_2 forem variáveis aleatórias independentes, também $X_1 = F_1(U_1)$ e $X_2 = F_2(U_2)$ serão variáveis aleatórias independentes
    - Fazendo $U_2 = U_1$, $X_1 = F_1(U_1)$ e $X_2 = F_2(U_1)$ serão o mais positivamente correlacionadas possível
    - Fazendo $U_2 = 1-U_1$, $X_1 = F_1(U_1)$ e $X_2 = F_2(1-U_1)$ serão o mais negativamente correlacionadas possível

Transformação Inversa

- Vantagens
  - Distribuições truncadas
    - Considerar uma função densidade truncada entre a e b
    - A nova função de distribuição será $F^*(x) = [F(x) - F(a)] / [F(b) - F(a)]$, para $a \leq x \leq b$
    - Geração
      - Gerar $U \sim \mathrm{U}(0,1)$
      - Calcular $V = F(a) + [F(b) - F(a)]\, U$
      - Retornar $X = F^{-1}(V)$

Composição

- Aplica-se quando a função de distribuição F se pode exprimir como uma combinação convexa de outras funções de distribuição F_i, $i = 1,2,\ldots$
- Formalmente, $F(\mathrm{x}) = p_1F_1(x) + p_2F_2(x) + \ldots$
- Geração
  - Gerar aleatoriamente um inteiro j tal que $\mathrm{P}(J = j) = p_j$
  - Retornar X segundo a função de distribuição F_j

Aceitação Rejeição

- Método *indireto*
- Considerar uma função $t(x) \geq f(x)$, onde $f(x)$ representa a função de densidade de probabilidade de interesse
- Considerar $r(x) = t(x) / c$, onde c é o valor do integral de $t(x)$ entre $-\infty$ e $+\infty$
- A função $r(x)$ é também uma função de densidade de probabilidade

Aceitação Rejeição

- Geração
  - Gerar Y com densidade r
  - Gerar U ~ U(0,1) independente de Y
  - Se $U \leq f(Y) / t(Y)$, retornar $X = Y$, senão tentar outra vez (do princípio)
- A eficiência deste método depende do custo de gerar Y e do valor de $1 / c$
- Para $c = 2$, a probabilidade de aceitação será $p = 1 / c = 0.5$ e será necessário tentar em média $1 + (1-p) / p = c = 2$ vezes

Propriedades Especiais

- Conjunto de técnicas específicas
- Exploram alguma propriedade da variável aleatória X de interesse
- Tipicamente, exprimir X em função de outras variáveis aleatórias que possam ser geradas mais facilmente

Propriedades Especiais

- Convolução
  - $X = Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_m$, onde m é fixo e $Y_1, Y_2, \ldots, Y_m$ são variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.) segundo outra distribuição
  - Não confundir com *composição*, que se aplica quando *a função de distribuição F(x) é uma combinação linear de outras funções de distribuição* $F_1(x)$, $F_2(x)$, *...*

Propriedades Especiais

- Convolução
  - Geração
    - *Gerar* $Y_1, Y_2, \ldots, Y_m$ i.i.d. com função de distribuição $G(x)$
    - *Retornar* $X = Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_m$
  - Exemplo
    - Uma variável aleatória com distribuição m-Erlang e média β pode ser definida como a soma de m variáveis aleatórias i.i.d. com distribuição exponencial e média β/m

Propriedades Especiais

- Se $Y \sim N(0,1)$, então $X = Y^2 \sim \chi^2_1$ (distribuição χ^2 com um grau de liberdade)
- Se $Z_1, Z_2, \ldots, Z_k \sim \chi^2_1$ i.i.d., $X = Z_1 + Z_2 + \ldots + Z_k \sim \chi^2_k$ (distribuição χ^2 com k graus de liberdade)
  - Gerar $Y_1, Y_2, \ldots, Y_k \sim N(0,1)$ i.i.d.
  - Retornar $X = Y_1^2 + Y_2^2 + \ldots + Y_k^2$
  - Para k elevado, notar que a distribuição χ^2_k é igual à distribuição gama com $\alpha = k/2$ e $\beta = 2$ e que pode ser mais eficiente gerar a variável aleatória diretamente como tal

Propriedades Especiais

- Se $Y \sim N(0,1)$ e $Z \sim \chi^2_k$ com Y e Z independentes, então $X = Y / \sqrt{Z / k} \sim t_k$ (distribuição t-Student com k graus de liberdade)
- Outros exemplos incluem as distribuições F e beta

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição uniforme, U(a,b)
  - Método da transformação inversa
    - Gerar $U \sim$ U(0,1)
    - Retornar $X = a + (b-a)\,U$
  - A constante $(b-a)$ deve ser pré-calculada

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição exponencial, expo(β)
  - Método da transformação inversa
    - Gerar U ~ U(0,1)
    - Retornar $X = -\beta \log(U)$
  - O cálculo do logaritmo é a operação mais lenta
  - Há outros métodos mais complicados que evitam o cálculo do logaritmo e são mais rápidos

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição gama, gamma(α,β)
  - Geração mais complicada
  - Notar que, se X ~ gamma(α,1), então βX ~ gamma(α,β) para qualquer $\beta > 0$
    - Basta considerar o caso gamma(α,1)
  - Notar que a distribuição gamma(1,1) é simplesmente a distribuição exponencial
    - Considerar apenas $0 < \alpha < 1$ e $\alpha > 1$
    - Aceitação-rejeição em combinação com transformação inversa

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição Weibull, Weibull(α,β)
  - Método da transformação inversa
    - Gerar $U \sim U(0,1)$
    - Retornar $X = \beta\,[-\log(U)]^{1/\alpha}$
  - Outra explicação é a propriedade especial
    - Se $Y \sim \text{expo}(\beta^\alpha)$, então $Y^{1/\alpha} \sim$ Weibull(α,β)

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição Normal, N(μ,σ^2)
  - Notar que, se $X \sim N(0,1)$, então $\mu + \sigma X \sim N(\mu,\sigma^2)$
  - Basta considerar o caso N(0,1)
  - Eficiência é particularmente importante porque é uma distribuição muito usada
    - Inclusive na geração de outras distribuições por aceitação-rejeição

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição Normal, N(0,1)
  - Método polar
  - Combinação de propriedade especial com aceitação-rejeição
    - Gerar U_1 e U_2 i.i.d. com distribuição U(0,1)
    - Calcular $V_i = 2U_i - 1$, $i = 1,2$, e $W = V_1^2 + V_2^2$
    - Se W > 1, tentar novamente (probabilidade de rejeição $1-\pi/4$)
    - Caso contrário, calcular $Y = \sqrt{(-2 \log W) / W}$, $X_1 = V_1 Y$ e $X_2 = V_2 Y$
    - Retornar X_1, X_2 ~ N(0,1)

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição Lognormal, LN(μ,σ^2)
  - Propriedade especial
    - Gerar $Y \sim N(\mu,\sigma^2)$
    - Retornar $X = e^Y$
  - Notar que μ e σ dizem respeito à variável Y
  - Dados $\mu' = E(X)$ e $\sigma'^2 = Var(X)$
    - $E(Y) = \mu = \log(\mu'^2 / \sqrt{\mu'^2 + \sigma'^2})$
    - $Var(Y) = \sigma^2 = \log(1 + \sigma'^2 / \mu'^2)$

Geração de Distribuições Contínuas

- Distribuição Triangular, *triang*(0,1,*c*)
  - Transformação inversa
    - Gerar $U \sim U(0,1)$
    - Se $U \leq c$, retornar $X = \sqrt{c\,U}$
    - Caso contrário, retornar $X = 1 - \sqrt{(1-c)\,(1-U)}$
    - Notar que não se pode substituir $(1-U)$ por U quando $U > c$
    - Porquê?

Geração de Distribuições Discretas

- Distribuição de Bernoulli, Bernoulli(p)
  - Transformação inversa
    - Gerar $U \sim U(0,1)$
    - Se $U < p$, retornar $X = 1$
    - Caso contrário, retornar $X = 0$
- Distribuição uniforme discreta, DU(i,j), i e j inteiros
  - Transformação inversa
    - Gerar $U \sim U(0,1)$
    - Retornar $X = i + \text{floor}[(j - i + 1)\, U]$

Geração de Distribuições Discretas

- Distribuição binomial, bin(t,p)
  - Convolução
    - Gerar Y_1, Y_2, …, Y_t ~ Bernoulli(p) i.i.d.
    - Retornar $X = Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_t$
  - Tempo proporcional a t
  - Método da transformação inversa requer procura
  - Há outras possibilidades…

Geração de Distribuições Discretas

- Distribuição geométrica, geom(p)
  - Transformação inversa
    - Gerar $U \sim U(0,1)$
    - Retornar $X = \text{floor}[\ \log(U) / \log(1-p)\ ]$
- Distribuição binomial negativa, negbin(s,p)
  - Convolução
    - Gerar $Y_1, Y_2, \ldots, Y_s \sim \text{geom}(p)$ i.i.d
    - Retornar $X = Y_1 + Y_2 + \ldots + Y_s$

Geração de Distribuições Discretas

- Distribuição de Poisson, Poisson(λ)
  - Propriedade especial
    1) Sejam $a = e^{-\lambda}$, $b = 1$ e $i = 0$
    2) Gerar $U_{i+1} \sim U(0,1)$ e substituir b por bU_{i+1}
    3) Se $b < a$, retornar $X = i$
    4) Incrementar i e voltar para 2)
  - Torna-se mais lento à medida que λ aumenta
  - Em alternativa, usar a transformação inversa com um método de procura eficiente