#### Geração de Números Pseudo-Aleatórios

Carlos M. Fonseca
Departamento de Engenharia Informática
Universidade de Coimbra

MEI 2020/2021

## Bibliografia

- Ronald T. Kneusel, Random Numbers and Computers, Springer, 2018.
- Pierre L'Ecuyer, "Efficient and portable combined random number generators," *Communications of the ACM*, vol. 31, no. 6, June 1988. https://doi.org/10.1145/62959.62969

#### Aleatoriedade

- Muitos sistemas exibem comportamentos imprevisíveis
  - Por exemplo, o tempo de serviço numa cantina
- Simular esses sistemas obriga à modelação desses comportamentos
  - Por exemplo, para prever o tempo de espera numa fila
- Modelos probabilísticos (ou estocásticos)

- O que é uma experiência aleatória?
  - Experiência cujo resultado é imprevisível
- O que é uma sequência aleatória?
  - "Sequência de números numa dada gama de valores tal que não é possível prever o próximo valor com base nos valores que o precedem"
  - Normalmente considera-se uma distribuição uniforme.

- Geração de sequências aleatórias
  - Atirar uma moeda ao ar
  - Lançar um dado (justo)
  - Decaimento radioativo
  - "Estática" apanhada por um recetor de rádio ou televisão não sintonizado
  - Outros?

Moeda ao ar

- $1^a$  sequência 11 caras (H) e 15 coroas (T) (p = 0.2786)
- $2^a$  sequência 13 caras (H) e 13 coroas (T) (p = 1.0)

Gerar números de 0 a 7

- A aleatoriedade dos humanos não é em geral muito boa...
- Experiência
  - Pedir a cada estudante da turma para escolher um número à sorte entre 0 e 255
  - O que deveria acontecer?
  - O que se pode esperar que aconteça?

## Sequências Pseudo-Aleatórias

- O que é uma sequência pseudo-aleatória?
  - "Sequência de números gerada deterministicamente que é indistinguível de uma verdadeira sequência de números aleatórios"
- Indistinguível?
  - Qualquer procedimento aritmético nunca pode gerar números aleatórios!

## Sequências Pseudo-Aleatórias

- Gerador de números pseudo-aleatórios
  - Geração de bytes pseudo-aleatórios (p.ex.)
  - Agrupando esses bytes, pode-se obter inteiros de qualquer tamanho, ou mesmo números de vírgula flutuante (p.ex., usando apenas a mantissa)
  - Dado um valor r ∈ [0,1[, um inteiro em [a,b[ pode ser facilmente obtido como i = floor( $r \cdot (b-a)$ ) + a

## Sequências Pseudo-Aleatórias

- O método "Middle Square"
  - Tomar um inteiro de 32 bits
  - Elevá-lo ao quadrado e guardá-lo como um inteiro de 64 bits
  - Retornar os 32 bits do meio...
  - Usar esse resultado como valor inicial para gerar o próximo número

## Método "Middle Square"

```
def middle_square(seed=0xfedcb2ed):
    while True:
        seed *= seed
        seed = (seed >> 16) & 0xffffffff
        yield seed # 32 bits
rng = middle_square()
x = next(rng)
```

## Método "Middle Square"

- Foi uma das primeiras tentativas de gerar uma sequência de números pseudo-aleatórios (von Neumann, 1951)
- Ilustra bem a ideia por trás destes geradores
- Não é um bom método
  - Uma vez encontrado um zero, a sequência passa a ser zero daí em diante
- A ideia foi recentemente retomada com modificações simples mas importantes

## Método "Middle Weyl"

- Modificação do método Middle Square
- Simples e muito rápido
  - A implementação em C compila para apenas 4 instruções máquina
- Período maior ou igual a 264 (bastante respeitável)
- Distribuição uniforme (discreta)
- Escolha da seed permite gerar sequências diferentes (mesmo em paralelo!)
- Excelentes resultados em testes de aleatoriedade

# Método "Middle Weyl"

```
# Ver também https://arxiv.org/abs/1704.00358
def middle weyl(seed=0xb5ad4eceda1ce2a9):
    x = w = 0
    while True:
        x = x * x
        W = W + seed \% (2**64) # 64 bits
        x = (x + w) \% (2**64) # 64 bits
        x = ((x >> 32) | (x << 32)) % (2**64)
        yield x % (2**32) # yield only 32 bits
rng = middle_weyl()
x = next(rng)
```

## Geração de números pseudo-aleatórios

- Dado um valor  $r \in [0,1[$ , um inteiro em [a,b[ pode ser facilmente obtido como  $i = floor(r \cdot (b-a)) + a$
- Do mesmo modo, dado um valor inteiro  $P \in [0,m[$ , um valor real  $w \in [0,1[$  pode ser facilmente obtido como w = P / m

Gerador congruencial linear (LCG) misto

$$x_{n+1} = (a x_n + c) \bmod m$$

onde  $a \in o$  multiplicador (0 < a < m),  $c \in o$  incremento  $(0 \le c < m)$  e  $m \in o$  módulo.

- Qualidade da sequência depende da escolha dos parâmetros *a*, *c* e *m*.
  - Período necessariamente menor ou igual a *m*

```
# Exemplo simples
def lcg_10(seed=7):
    m = 10
    a = 3
    c = 9
    while True:
        seed = (a * seed + c) % m
        yield seed
```

- Diferentes escolhas de a e c, bem como do valor inicial, influenciam o período do gerador
  - No exemplo anterior, o período só será máximo (10) se a = 1 e  $c \in \{1,3,7,9\}$ .
- No entanto, não basta o período ser longo
  - Para a = c = 1, a sequência é "0 1 2 3 4 5 6 7 8 9"

- Regras para a escolha de m,  $a \in c \neq 0$ :
  - *m* e *c* serem primos entre si
  - -a-1 ser divisível pelo fatores primos de m
  - a−1 ser divisível por 4 se m for divisível por 4
- Se todas a condições forem satisfeitas, o período será igual a m para todos os valores iniciais (seed).
- *m* deve ser tão grande quanto possível. É comum ser uma potência de 2.

- Para c = 0 (LCG multiplicativo), m é normalmente um primo ou uma potência de 2 e a escolha de a segue outras regras. O valor inicial (seed) tem que ser diferente de zero.
- Exemplos de LCGs "clássicos"

```
1)MINSTD Apple CarbonLib C++ (a = 16807, c = 0, m = 2^{31}-1)
```

- 2)MINSTD C++ (a = 48271, c = 0, m =  $2^{31}-1$ )
- 3) RANDU (a = 65539, c = 0, m =  $2^{31}$ ) NÃO USAR!!!
- Período igual a  $m \ (\approx 10^9)$  é hoje em dia insuficiente

Análise do gerador RANDU

$$x_{n+1} = ((2^{16}+3) x_n) \mod 2^{31}$$
  
 $x_{n+2} = ((2^{16}+3)^2 x_n) \mod 2^{31}$   
 $= ((2^{32}+6(2^{16})+9) x_n) \mod 2^{31}$   
 $= (6(2^{16}+3)-9) x_n) \mod 2^{31}$   
 $= (6 x_{n+1}-9 x_n) \mod 2^{31}$ 

 É fácil ver que cada valor está relacionado linearmente com os dois valores anteriores

- Em estudos de simulação, é muitas vezes necessário gerar sequências pseudo-aleatórias independentes
- Dividir o período de um LCG em várias partes disjuntas sem ter que iterar
- No caso dos LCGs multiplicativos (c = 0)

 $x_{i+j} = (a^j x_i) \mod m = ((a^j \mod m) x_i) \mod m$ 

onde (ai mod m) pode ser facilmente pré-calculado

## Implementação de LCGs

- Supondo que a e  $x_n$  são ambos inteiros de 32 bits, o seu produto irá ocupar até 64 bits
- A decomposição de Schrage permite calcular o produto ax sem overflow  $(a x) \mod m = A(x) + B(x) m$

onde, usando sempre divisão inteira,

$$A(x) = a (x \mod q) - r (x / q) \mod q = m / a$$
 e  $r = m \mod a$   
 $B(x) = 1$  se  $A(x) < 0$  e 0 caso contrário

• Notar que m = a q + r e que x < m.

## Combinação de Geradores

- Geradores diferentes podem ser combinados de modo a obter novos geradores com período mais longo
  - 1) Sejam  $W_1, ..., W_l$  variáveis aleatórias independentes (inteiras) tais que  $W_1$  é uniformemente distribuída entre 0 e d-1, onde d é um inteiro positivo. Então,  $W = (W_1 + ... + W_l)$  mod d também segue uma distribuição uniforme entre 0 e d-1.
  - 2) Dada uma família de I geradores com períodos  $p_j$ , j = 1,...,I, o período p da sequência  $\{x_i = (x_{i,1},...,x_{i,l}), i = 1, 2,...\}$  é o menor múltiplo comum de  $p_1,...,p_l$ .

## Combinação de Geradores

Então, dados / geradores

$$X_{j,i} = f_j(X_{j,i-1})$$

com período  $p_i$ , se  $x_{1,i}$  mod  $p_1$  for uniformemente distribuída entre 0 e  $p_1$ –1,

$$Z_i = (x_{1,i} - x_{2,i} + x_{3,i} - \dots + (-1)^{i-1} x_{i,i}) \mod p_1$$

é uma sequência pseudo-aleatória uniformemente distribuída entre 0 e  $p_1$  – 1

• Para que o período seja o mais longo possível, os valores de  $p_j$  devem ser primos entre si. No caso de geradores congruenciais lineares multiplicativos, onde  $m_j$  é primo e portanto o período  $p_j = (m_j - 1)$  é par, os valores de  $p_j$  / 2 devem ser primos entre si

#### Teste de Geradores Pseudo-Aleatórios

Carlos M. Fonseca
Departamento de Engenharia Informática
Universidade de Coimbra

MEI 2020/2021

# Bibliografia

- R. T. Kneusel, Random Numbers and Computers, Springer, 2018.
- J. Banks and J. S. Carson, *Discrete-Event System Simulation*, Prentice-Hall International, 1984.
- A. M. Law and W. D. Kelton, *Simulation Modeling and Analysis*, McGraw Hill Book Company, 3rd edition, 2000.
- A. Rukhin *et al.*, A Statistical Test Suite for Random and Pseudorandom Number Generators for Cryptographic Applications, NIST Special Publication 800-22, Revision 1a, April 2010.
- E. L. Lehman and J. P. Romano, *Testing Statistical Hypothesis*, Springer, 2005.

#### Testes de aleatoriedade

- Boas sequências pseudo-aleatórias são "indistinguíveis" de verdadeiras sequências aleatórias (apesar de determinísticas)
  - Uniformidade
  - Independência
- A verificação destas propriedades é feita com recurso a testes empíricos

## Testes empíricos

- Gerar uma sequência de valores  $U_i$ , i = 1, ..., n, no intervalo [0,1] (ou [0,1[, ou ]0,1[, conforme o caso)
- Verificar se esses valores parecem seguir uma distribuição uniforme U(0,1)
- Testes de ajustamento
  - Teste de χ2, teste de Kolmogorov-Smirnov, ...
- Testes de independência
  - Testes de correlação, auto-correlação, ...

# Teste de ajustamento de $\chi^2$

- Dividir o intervalo [0,1] em k sub-intervalos de igual comprimento e gerar uma sequência de valores  $U_i$ , i = 1, ..., n
  - Regra geral, devemos ter  $k \ge 100$  e  $n \mid k \ge 5$
- Contar quantos valores caem em cada sub-intervalo, e designar esses números  $f_i$ , j = 1,...,k
- Para uma distribuição uniforme, a probabilidade de cada valor cair em cada sub-intervalo é  $p_j = 1 / k$  e o número esperado de valores em cada intervalo é  $n p_i = n / k$

# Teste de ajustamento de $\chi^2$

Calcular

$$\chi^{2} = \sum_{j=1}^{k} \frac{(f_{j} - n p_{j})^{2}}{n p_{j}} = \frac{k}{n} \sum_{j=1}^{k} \left( f_{j} - \frac{n}{k} \right)^{2}$$

- Rejeitar a hipótese nula de uniformidade dos  $U_i$  se  $\chi^2 > \chi^2_{k-1,1-\alpha}$ , onde  $\chi^2_{k-1,1-\alpha}$  representa o quantil  $1-\alpha$  da distribuição de  $\chi^2$  com k-1 graus de liberdade
- Valores típicos de  $\alpha$  incluem 0.05, 0.10, ou mesmo valores maiores
- Alguns autores consideram que  $\chi^2 < \chi^2_{k-1,\alpha}$  também é indicativo de não aleatoriedade

# Teste de ajustamento de $\chi^2$

#### Exemplo:

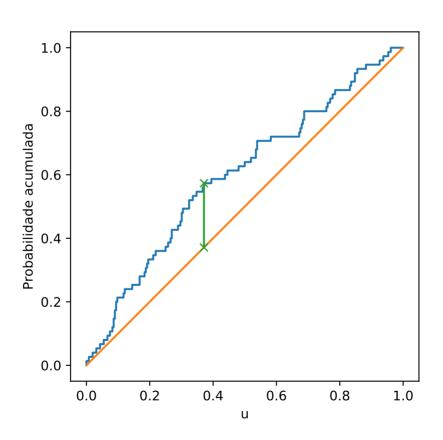
```
-x = (19, 172, 244, 47, 2, 22, 43, 175, 5, 76, 137, 240, 50, 138, 213, 123, 21, 77, 14, 137, 24, 128, 31, 23, 74, 138, 201, 149, 174, 37, 83, 22, 69, 246, 43, 133, 30, 95, 176, 114, 101, 94, 86, 226, 214, 8, 66, 217, 217, 23, 197, 0, 199, 112, 219, 173, 83, 77, 78, 194, 17, 25, 195, 68, 54, 237, 89, 56, 176, 49, 48, 64, 11, 24, 69)
```

- -n = 75,  $U_i = x_i / 256$
- -k = 8 intervalos [(j-1)/k, j/k[, j = 1,...,k]
- f = (18, 9, 16, 4, 7, 6, 10, 5)
- $-\chi^2 = 19.613 > \chi^2_{7,0.99} = 18.475 > \chi^2_{7,0.95} = 14.067$  (muito longe de ser uniforme)

## Teste de Kolmogorov-Smirnov

- Compara a função de distribuição cumulativa  $F_{\cup}(u) = u$ ,  $0 \le u \le 1$ , da distribuição U(0,1) com a função de distribuição cumulativa empírica  $S_n(u)$  calculada a partir dos dados
- A estatística de teste é  $D = \max |F_{\cup}(u) S_n(u)|$
- Rejeitar a hipótese de uniformidade se D exceder o valor crítico do teste para o número de pontos n e nível de significância α considerados

# Teste de Kolmogorov-Smirnov



#### Teste série

- Generalização do teste de  $\chi^2$  para mais dimensões, d
- Por exemplo, para d=2, proceder como anteriormente, mas considerando a sequência de pares  $(U_1, U_2)$ ,  $(U_3, U_4)$ ,  $(U_5, U_6)$ , ..., e dividindo o quadrado unitário em  $k^2$  subregiões
- Aplicar o teste de  $\chi^2$  tendo em conta que agora  $p_j = 1 / k^2$ ,  $j = 1, ..., k^2$ , e que o número de graus de liberdade é  $k^2-1$

#### Teste série

- Exemplo: sequência anterior
  - **X** = ((19, 172), (244, 47), (2, 22), (43, 175), (5, 76), (137, 240), (50, 138), (213, 123), (21, 77), (14, 137), (24, 128), (31, 23), (74, 138), (201, 149), (174, 37), (83, 22), (69, 246), (43, 133), (30, 95), (176, 114), (101, 94), (86, 226), (214, 8), (66, 217), (217, 23), (197, 0), (199, 112), (219, 173), (83, 77), (78, 194), (17, 25), (195, 68), (54, 237), (89, 56), (176, 49), (48, 64), (11, 24), (69, ...))
  - -n = 37,  $U_i = x_i / 256$
  - -k = 8 daria origem a  $k^2 = 64$  intervalos e a  $n / k^2 = 0.578$  (muito menor que 5, dever-se-ia considerar um valor de k menor, como 3 ou mesmo 2)

# Teste de separação (gap test)

- Em vez da frequência com que os valores (ou tuplos de valores) ocorrem numa sequência, este teste conta o comprimento das sub-sequências de valores fora de um dado intervalo
- Este teste requer uma sequência muito longa (n > 10<sup>8</sup> valores) para ser fiável
- Considerando novamente a distribuição U(0,1) e o intervalo  $[\alpha, \beta[$ , é possível calcular as probabilidades de cada comprimento ocorrer.

#### Gap test

• Probabilidades de ocorrência de cada comprimento

$$p_0 = \beta - \alpha$$
 $p_i = p_0 (1 - p_0)^i$ , para  $0 < i < t$ 
 $p_{>t} = (1 - p_0)^t = 1 - p_0 - p_1 - \dots - p_{t-1}$ 

• Aplicar o teste de  $\chi^2$  tendo em conta que agora há diferentes valores de  $p_j$ , j=0,...,t. O número de graus de liberdade é t, porque há t+1 classes

#### Gap test

- Exemplo: sequência anterior (valores arredondados por simplicidade de visualização,  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0.5$ )
  - -x = (0.07, 0.67, 0.95, 0.18, 0.01, 0.09, 0.17, 0.68, 0.02, 0.30, 0.54, 0.94, 0.20, 0.54, 0.83, 0.48, 0.08, 0.30, 0.05, 0.54, 0.09, 0.50, 0.12, 0.09, 0.29, 0.54, 0.79, 0.58, 0.68, 0.14, 0.32, 0.09, 0.27, 0.96, 0.17, 0.52, 0.12, 0.37, 0.69, 0.45, 0.39, 0.37, 0.34, 0.88, 0.84, 0.03, 0.26, 0.85, 0.85, 0.09, 0.77, 0.00, 0.78, 0.44, 0.86, 0.68, 0.32, 0.30, 0.30, 0.76, 0.07, 0.10, 0.76, 0.27, 0.21, 0.93, 0.35, 0.22, 0.69, 0.19, 0.19, 0.25, 0.04, 0.09, 0.27)

#### Teste do máximo de t

- Teste de frequência para o máximo de *t* amostras
- Dividir a sequência em sub-sequências de comprimento *t*, tomar o máximo de cada uma e elevar esse valor a *t*
- A distribuição dos valores resultantes deverá ser uniforme (porquê?)
- Aplicar o teste de  $\chi^2$  tendo em conta que agora o número de amostras é  $n \mid t$ . O número de graus de liberdade depende do número de intervalos usados para testar a uniformidade.

#### Teste do máximo de t

- Exemplo: sequência anterior (valores arredondados por simplicidade de visualização, t=5)
  - -X = ((0.07, 0.67, 0.95, 0.18, 0.01), (0.09, 0.17, 0.68, 0.02, 0.30), (0.54, 0.94, 0.20, 0.54, 0.83), (0.48, 0.08, 0.30, 0.05, 0.54), (0.09, 0.50, 0.12, 0.09, 0.29), (0.54, 0.79, 0.58, 0.68, 0.14), (0.32, 0.09, 0.27, 0.96, 0.17), (0.52, 0.12, 0.37, 0.69, 0.45), (0.39, 0.37, 0.34, 0.88, 0.84), (0.03, 0.26, 0.85, 0.85, 0.09), (0.77, 0.00, 0.78, 0.44, 0.86), (0.68, 0.32, 0.30, 0.30, 0.76), (0.07, 0.10, 0.76, 0.27, 0.21), (0.93, 0.35, 0.22, 0.69, 0.19), (0.19, 0.25, 0.04, 0.09, 0.27))
- *n | t* deverá ser pelo menos 10<sup>6</sup>

# Teste de correlação série

 Calcula o coeficiente de correlação entre cada valor na sequência e o valor seguinte

$$C = \frac{n(U_0U_1 + U_1U_2 + \dots + U_{n-2}U_{n-1} + U_{n-1}U_0) - (U_0 + U_1 + \dots + U_{n-1})^2}{(U_0^2 + U_1^2 + \dots + U_{n-1}^2) - (U_0 + U_1 + \dots + U_{n-1})^2}$$

• Para  $U_i$  uniformes, C deverá estar no intervalo  $[m-2\sigma, m+2\sigma]$ , com m=-1 / (n-1) e  $\sigma=\frac{1}{n-1}\sqrt{\frac{n(n-3)}{n+1}}$ , para  $\alpha\approx 0.05$ .

## Teste de permutação

- Dividir a sequência em sub-sequências de comprimento  $t \le 5$ , e tomar as permutações que ordenariam cada sub-sequência
- Há t! permutações possíveis
- Aplicar o teste de  $\chi^2$  notando que o número de amostras é n / t, e que o número de classes é t!

## Teste de permutação

- Exemplo: sequência anterior (valores arredondados por simplicidade de visualização, t = 5)
  - -X = ((0.07, 0.67, 0.95, 0.18, 0.01), (0.09, 0.17, 0.68, 0.02, 0.30), (0.54, 0.94, 0.20, 0.54, 0.83), (0.48, 0.08, 0.30, 0.05, 0.54), ...)
  - -P = ((5, 1, 4, 2, 3), (4, 1, 2, 5, 3), (3, 1, 4, 5, 2), (4, 2, 3, 1, 5), ...)
- Para t = 4 ou t = 5, n deverá ser pelo menos 108

- Testes de hipóteses
  - Hipótese de investigação
  - Hipótese nula,  $H_0$
  - Hipótese alternativa, H<sub>1</sub>
  - Pressupostos subjacentes ao processo de amostragem
  - Estatística de teste
  - Distribuição da estatística de teste sob a hipótese nula

- Aplicação de um teste de hipóteses
  - Nível de significância,  $\alpha$
  - Região crítica
  - Valor observado da estatística de teste
  - Decisão
    - Rejeitar H<sub>0</sub> em favor de H<sub>1</sub> quando o valor observado da estatística de teste pertence à região crítica
    - Caso contrário,  $n\tilde{a}o$  rejeitar  $H_0$  por falta de evidência nesse sentido

- Aplicação de um teste de hipóteses (em alternativa)
  - Nível de significância,  $\alpha$
  - Valor observado da estatística de teste
  - Cálculo do p-valor
  - Decisão
    - Rejeitar  $H_0$  em favor de  $H_1$  quando o p-valor é menor ou igual que o nível de significância  $\alpha$
    - Caso contrário,  $n\tilde{a}o$  rejeitar  $H_0$  por falta de evidência nesse sentido

#### p-valor

- É o menor valor de significância  $\alpha$  que conduziria à rejeição da hipótese nula
- Sugere quão fortemente os dados contradizem a hipótese nula
- Não é a probabilidade de alguma das hipóteses estar correta ou incorreta!!!
- Hoje em dia pode ser calculado (ou aproximado) facilmente para cada conjunto de observações (usando o computador)

- Tipos de erro
  - Tipo I: Rejeitar  $H_0$  quando ela é de facto verdadeira
  - Tipo II: Não rejeitar  $H_0$  quando ela é de facto falsa
- A probabilidade de cometer um erro de Tipo I é menor ou igual a  $\alpha$
- A probabilidade de cometer um erro de Tipo II está relacionada com a potência do teste

- Experiência 1
  - Gerar uma sequência pseudo-aleatória de um dado comprimento, n
  - Aplicar o teste de uniformidade de  $\chi^2$  considerando  $\alpha = 0.05$
  - O *p*-valor  $\acute{e}$  p = 0.032
  - O que é que isto diz sobre o gerador?

- Experiência 2
  - Gerar 100 sequências pseudo-aleatórias de um dado comprimento, n
  - Aplicar o teste de uniformidade de  $\chi^2$  considerando  $\alpha = 0.05$
  - Há 4 p-valores menores ou iguais a 0.05
  - O que é que isto diz sobre o gerador?

- Experiência 3
  - Gerar 100 sequências pseudo-aleatórias de um dado comprimento, n
  - Aplicar todos os testes referidos a cada sequência
  - Como é que podemos decidir se o gerador é bom ou mau?

- Recordar que todos os testes podem falhar mesmo que a sequência seja verdadeiramente aleatória
  - A probabilidade de um dado teste falhar nas condições da hipótese nula é menor ou igual que  $\alpha$
  - Uma possibilidade é comparar a proporção de testes falhados de cada tipo com o que acontece com (uma realização de) uma sequência verdadeiramente aleatória, enquanto estimativa das probabilidades de erro de Tipo I

- Comparação de geradores
  - Calcular a proporção de testes falhados de cada tipo para cada gerador e para uma sequência verdadeiramente aleatória
  - Calcular a diferença absoluta entre essas proporções e considerar a norma do vetor resultante
  - Ordenar os diversos geradores em conformidade
  - Resultados são relativos, mas não absolutos

- Observações finais
  - Considerar que um teste de aleatoriedade falha quando p < 0.05 ou p > 0.95 leva a que o teste deva falhar em média até 1/10 das vezes mesmo para um gerador ideal
  - Importa distinguir entre testes para geradores pseudoaleatórios e os testes estatísticos subjacentes