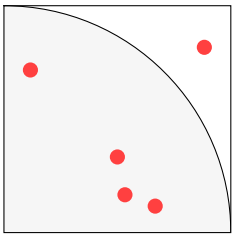
EXPERIMENTOS USANDO PI

Queremos implementar algoritmos para calcular o valor de π usando métodos computacionais.

Pi usando Monte Carlo

O método de Monte Carlo é uma técnica de amostragem estatística, teve seu desencadeamento após o desenvolvimento do *ENIAC*[1], primeiro computador eletrônico, desenvolvido durante a Segunda Guerra Mundial, para lidar com grandes cálculos. O método baseia-se em números "aleatórios" para resolver os seus problemas que é aplicada com sucesso em diversos problemas contemporâneos [2].

`monteCarlo()` O problema consiste em montar um quadrado de comprimento 1, e $\frac{1}{4}$ de uma circunferência inscrita nesse quadrado e de forma aleatório disparar pontos dentro do espaço.



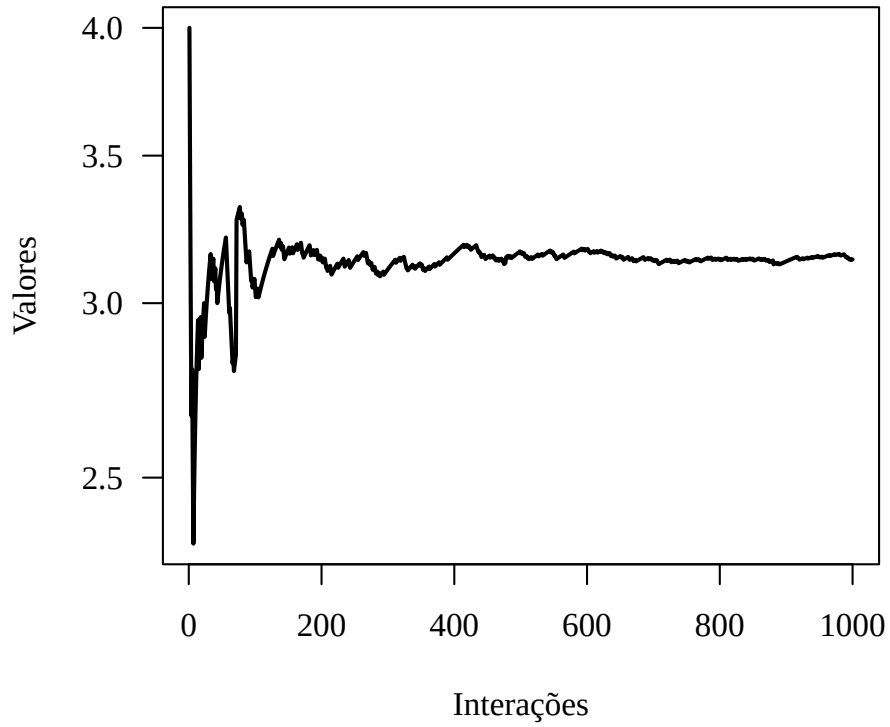
$$A = \pi \cdot R^2 \Longrightarrow A = \pi$$
$$A_c = \frac{\pi}{4} \approx 4 \cdot \frac{\text{dentro}}{\text{total}} = \pi$$

```
long double monteCarlo(unsigned long long n) {
    unsigned long long ins;
    ins = 0;
    long double x, y, z, pi;

    srand(time(NULL));
    unsigned long long i;
    for (i = 0; i < n; i++) {
        x = (long double) rand() / (long double) RAND_MAX;
        y = (long double) rand() / (long double) RAND_MAX;

        z = x * x + y * y;
        if (z <= 1) {
            ins++;
        }
    }

    pi = (long double) 4 * ins;
```

[1] O ENIAC produziu 2,037 dígitos de π em 70 horas em 1949 usando a *Fórmula de Machin*[1, p. 592 e 627]

```
    pi = (long double) pi / (long double) n;

    return pi;
}
```

Figura 1: Convergência para o método de *Monte Carlo*

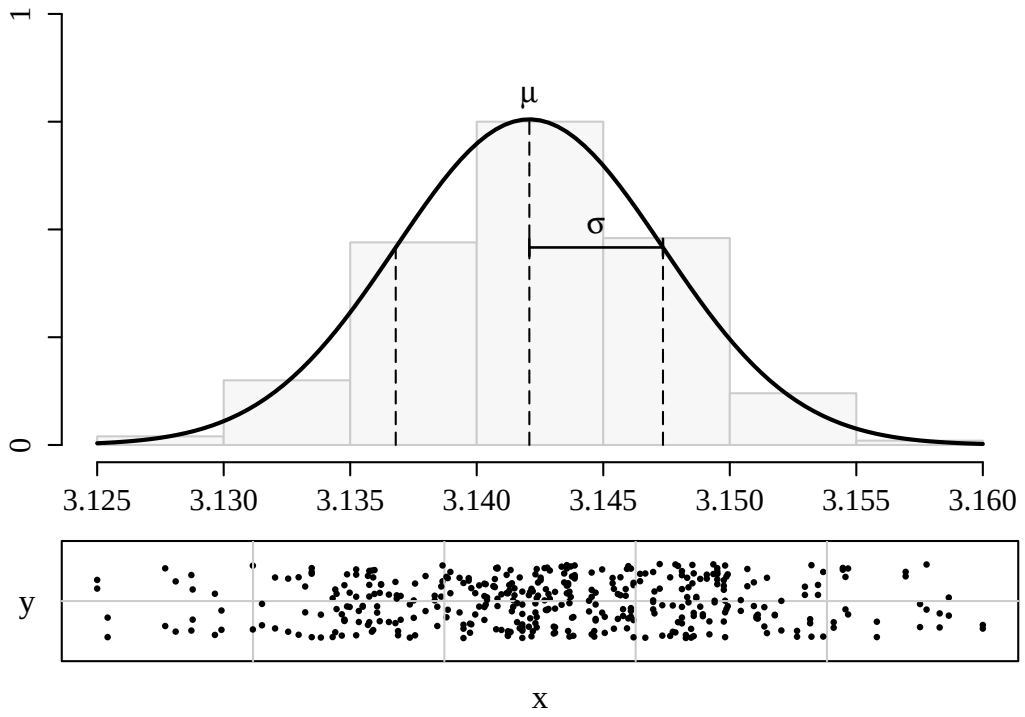


Fonte: Subseção B.1

Observando que os valores coletados na Figura 1 convergem com flutuações nos valores, pois os valores são obtidos de forma aleatória. Então, podemos interpretar estatisticamente este resultado realizando uma hipótese de normalidade na amostra.

Temos, um histograma:

Figura 2: Histograma dos valores obtidos no método de *Monte Carlo*, com curva de densidade, aplicado à coleta de π



Fonte: Subseção B.2

Devido às propriedades do gráfico, temos:

- O ponto $x = \mu$ é um ponto de máximo absoluto, sendo o único ponto crítico do gráfico, sendo representado pela linha pontilhada central da Figura 2
- Possui dois pontos de inflexão $x = \mu - \sigma$ e $x = \mu - \sigma$, sendo representado pelas linhas pontilhadas nas extremidades do gráfico.
- A área entre $\mu \pm \sigma$ representa 68% da área total do gráfico, ou seja, 68% dos valores de π estão presentes nesse intervalo.

Sendo: $mean(var)$, média aritmética dos valores de π obtidos.

$$var = \{x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n\}$$

$$\mu = v\bar{a}r = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \frac{x_1 + x_2 + \cdots + x_n}{n}$$

$sd(var)$, desvio padrão dos valores obtidos, ou seja, medida de dispersão com as

mesmas unidades que a amostra.

$$\sigma = sd = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - v\bar{a}r)^2}$$

$sd(var)/sqrt(m)$, desvio padrão da média ($v\bar{a}r$), no limite para m grande. O desvio padrão da média (ξ) caracteriza as flutuações dos valores $v\bar{a}r_i$ em torna da média população μ.

$$\xi = \frac{\sigma}{\sqrt{m}}$$

E realizando testes estatísticos nos dados para determinar se os dados afastam ou não da distribuição normal.

```
shapiro.test(var)
```

```
[1] Shapiro-Wilk normality test

data:  var
W = 0.9987, p-value = 0.6886
```

Observando que o $valor - p$ retornado pelo teste é maior que 0,05, fortalecendo a hipótese que os dados são normalmente distribuídos.

Além disso, tem-se:

```
library(nortest)
ad.test(var)
```

```
[1]   Anderson-Darling normality test

data:  var
A = 0.2726, p-value = 0.6684
```

```
ks.test(var, "pnorm", mean(var), sd(var))
```

```
[1] Asymptotic one-sample Kolmogorov-Smirnov test

data:  var
D = 0.015002, p-value = 0.978
alternative hypothesis: two-sided
```

O $valor - p$ em todos os testes anteriores foram superiores que 0,05, fortalecendo a nossa hipótese inicial de que a normalidade não é rejeitada, como demonstrado na Figura 2. Então, apresentando erros de medição aleatórios.

Desenvolvendo um caso geral

Para facilitar o desenvolvimento dos algoritmos para calcular arctg vamos realizar um caso geral, onde iremos adotar o valor para x sendo igual a $1/a$, pois em todas as fórmulas utilizadas é usado arctg do tipo arctg $1/a$. Então, podemos desenvolver a série da função arctg da seguinte maneira:

$$A \cdot \operatorname{arctg} x = A \cdot \sum_{k=0}^{n} \left((-1)^k \frac{x^{2k+1}}{2k+1} \right) + A \cdot R_n(x) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow A \cdot \operatorname{arctg}\left(\frac{1}{a}\right) = A \cdot \sum_{k=0}^{n} \left((-1)^k \frac{\left(\frac{1}{a}\right)^{2k+1}}{2k+1} \right) + A \cdot R_n\left(\frac{1}{a}\right)$$

$$= A \cdot \underbrace{\sum_{k=0}^{n} \left((-1)^k \frac{1}{a^{2k+1}} \cdot \frac{1}{2k+1} \right)}_{P_n\left(\frac{1}{a}\right)} + A \cdot R_n\left(\frac{1}{a}\right)$$

$$P_n\left(\frac{1}{a}\right) = \frac{1}{a} - \frac{1}{3a^3} + \frac{1}{5a^5} + \frac{1}{7a^7} - \frac{1}{9a^9} + \frac{1}{11a^{11}} + \cdots + \frac{1}{(2n+1) \cdot a^{2n+1}} - \frac{1}{(2n+3) \cdot a^{2n+3}}$$

$$\frac{1}{(2n+1) \cdot a^{2n+1}} - \frac{1}{(2n+3) \cdot a^{2n+3}} =$$
$$= \frac{(2n+3) \cdot a^{2n+3} - (2n+1) \cdot a^{2n+1}}{(2n+1) \cdot a^{2n+1} \cdot (2n+3) \cdot a^{2n+3}} =$$
$$= \frac{(2n+3) \cdot a^2 - (2n+1)}{(2n+1) \cdot (2n+3) \cdot a^{2n+3}}, \text{ usando que } n = 2k, \text{ temos,}$$
$$= \frac{(4k+3) \cdot a^2 - (4k+1)}{(4k+1) \cdot (4k+3) \cdot a^{4k+3}}$$

$$P_n\left(\frac{1}{a}\right) = \sum_{k=0}^{n} \left(\frac{(4k+3) \cdot a^2 - (4k+1)}{(4k+1) \cdot (4k+3) \cdot a^{4k+3}} \right)$$
$$= \sum_{k=0}^{n} \left(\frac{(i+3) \cdot a^2 - (i+1)}{(i+1) \cdot (i+3) \cdot a^{i+3}} \right), \; i{+}{=}4$$

generalArctg()

```
1  long double generalArctg(unsigned long int n, unsigned long int a
       ) {
2      unsigned long int pow, aux_pow, numerator, quotient;
3      long double res;
4
5      pow = a * a * a;
6      aux_pow = a * a * a * a;
7      res = 0;
8
9      int i;
10     for (i = 0; i < n; i+=4) {
11         numerator = (unsigned long int) (i + 3) * (a * a) - (i +
               1);
12         quotient = (unsigned long int) (i + 1) * (i + 3) * pow;
13         res += (long double) numerator / quotient;
14
15         pow *= aux_pow;
16     }
17
18     return res;
19 }
20
```

$$\left|R_n\left(\frac{1}{a}\right)\right| \leq \frac{\left(\frac{1}{a}\right)^{2n+3}}{2n+3}$$

$$\begin{aligned} A \cdot \frac{1}{a^{2n+3}} \cdot \frac{1}{2n+3} &< A \cdot \frac{1}{a^{2n+3}} \cdot \frac{1}{2 \cdot (n+1)} \overset{?}{<} \epsilon \\ \frac{1}{\epsilon} \cdot \frac{A}{2a} &< a^{2 \cdot (n+1)} \cdot (n+1) \end{aligned}$$

Como $\epsilon = 10^{-d}$, tem-se: $10^d \cdot \frac{A}{2a} < a^{2 \cdot (n+1)} \cdot (n+1)$, sendo n então a quantidade de iterações necessárias.

generalErrorHandle()

```
1  unsigned long int generalErrorHandle(unsigned long int d,
       unsigned long int A, unsigned long int a) {
2      unsigned long int n, err, small, pow, aux_pow;
3
4      n = 0;
5      err = 1;
```

```
6
7       aux_pow = a * a;
8       pow = aux_pow;
9
10      int i;
11      for (i = 0; i < d; i++) {
12          err *= 10;
13      }
14
15      small = err * A / (2 * a);
16
17      while (small >= (unsigned long int) pow * (n + 1)) {
18          pow *= aux_pow;
19          n++;
20      }
21
22      return n;
23  }
24
```

Porém utilizando essas funções para $\pi/4 = \text{arctg}\,(1)$ o maior erro que conseguimos alcançar, devido às limitações dos tipos utilizados (`unsigned long int` e `long double`) nas funções, é $\epsilon = 10^{-9}$. Então é necessário utilizar funções para cálculos de precisão arbitrária, sendo, nesse caso, utilizado a biblioteca *GNU MPFR*, uma biblioteca *C* para cálculos de ponto flutuante de precisão múltipla com arredondamento correto, é baseado na biblioteca *GNU Multiple Precision Arithmetic* (*GMP*).

Usando *MPFR* e *GMP*

eralArctg_mpfr() Substituindo os tipos tradicionais pelos utilizados nas bibliotecas, temos:

```
1   void generalArctg_mpfr(const mpz_t n, unsigned long int a, fp_t
        res) {
2       fp_set_ui(res, 0);
3
4       mpz_t i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp,
            numerator, quotient;
5       mpz_inits(i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp,
            numerator, quotient, NULL);
6
7       mpz_set_ui(a_gmp, a);
8       mpz_pow_ui(aux_pow_4, a_gmp, 4); // aux = a^4
9       mpz_pow_ui(aux_pow_2, a_gmp, 2); // aux = a^4
```

```
10      mpz_pow_ui(pow, a_gmp, 3); // pow = a^3
11
12      fp_t frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr;
13      fp_inits(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr, NULL);
14
15      for (mpz_set_ui(i, 0); mpz_cmp(i, n) < 0; mpz_add_ui(i, i, 4)
            ) { // for (int i = 0; i < n; i+=4) {...}
16          mpz_add_ui(i_1, i, 1); // i + 1
17          mpz_add_ui(i_3, i, 3); // i + 3
18
19          // numerator
20          mpz_mul(numerator, i_3, aux_pow_2); // (i + 3) * a^2
21          mpz_sub(numerator, numerator, i_1); // (i + 3) * a^2 - (i
                + 1)
22
23          // quocient
24          mpz_mul(quotient, i_1, i_3); // (i + 1) * (i + 3)
25          mpz_mul(quotient, quotient, pow); // (i + 1) * (i + 3) *
                a^{i+3}
26
27          fp_set_z(numerator_mpfr, numerator);
28          fp_set_z(quotient_mpfr, quotient);
29
30          fp_div(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr); // frac =
                numerator / quotient
31          fp_add(res, res, frac); // res += frac
32
33          mpz_mul(pow, pow, aux_pow_4); // pow *= a^4
34      }
35      mpz_clears(i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp,
            NULL);
36
37      fp_clears(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr, NULL);
38  }
39
```

eralErrorHandle_gmp()

```
1   void generalErrorHandle_gmp(unsigned long int d, unsigned long
        int A, unsigned long int a, mpz_t n) {
2       mpz_set_ui(n, 0);
3
4       mpz_t err, aux_pow, pow, aux_cmp;
5       mpz_inits(err, aux_pow, pow, aux_cmp, NULL);
6       mpz_set_ui(err, 1);
7
```

```
8       for (int i = 0; i < d; i++) {
9           mpz_mul_ui(err, err, 10);
10      }
11
12      mpz_mul_ui(err, err, A);
13      mpz_div_ui(err, err, 2 * a);
14
15      mpz_set_ui(aux_pow, a);
16      mpz_set(pow, aux_pow);
17
18      mpz_set(aux_cmp, pow);
19      mpz_mul(aux_cmp, aux_cmp, n);
20      while (mpz_cmp(err, aux_cmp) > 0) {  // err >= aux_cmp
21          mpz_mul(pow, pow, aux_pow);
22          mpz_set(aux_cmp, pow);
23          mpz_add_ui(n, n, 1);
24          mpz_mul(aux_cmp, aux_cmp, n);
25      }
26
27      mpz_clears(err, aux_pow, pow, aux_cmp, NULL);
28  }
29
```

Fórmula de *Machin* Original

`machin()` Função `machin` resolvendo a *Fórmula de Machin Original*:

$$\frac{\pi}{4} = 4 \cdot \operatorname{arctg} \frac{1}{5} - \operatorname{arctg} \frac{1}{239}$$

```
1   void machin(unsigned long long err, fp_t pi) {
2       fp_t arctg_5;
3       generalArctgWithError_mpfr(arctg_5, err, 4, 5);
4
5       fp_t arctg_239;
6       generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 1, 239);
7
8       fp_sub(pi, arctg_5, arctg_239);
9       fp_mul_ui(pi, pi, 4);
10
11      fp_clears(arctg_5, arctg_239, NULL);
12  }
13
```

Fórmula de *Kikuo Takano*

`takano()` Função `takano` resolvendo a *Fórmula de Kikuo Takano*:

$$\frac{\pi}{4} = 12 \cdot \operatorname{arctg} \frac{1}{49} + 32 \cdot \frac{1}{57} - 5 \cdot \frac{1}{239} + 12 \cdot \operatorname{arctg} \frac{1}{110.443} \qquad \text{(K. Takano, 1982)}$$

```
1  void takano(unsigned long long err, fp_t pi) {
2      fp_t arctg_49;
3      generalArctgWithError_mpfr(arctg_49, err, 12, 49);
4
5      fp_t arctg_57;
6      generalArctgWithError_mpfr(arctg_57, err, 32, 57);
7
8      fp_t arctg_239;
9      generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 5, 239);
10
11     fp_t arctg_110443;
12     generalArctgWithError_mpfr(arctg_110443, err, 12, 110443);
13
14     fp_add(pi, arctg_49, arctg_57);
15     fp_sub(pi, pi, arctg_239);
16     fp_add(pi, pi, arctg_110443);
17     fp_mul_ui(pi, pi, 4);
18
19     fp_clears(arctg_49, arctg_57, arctg_239, arctg_110443, NULL);
20 }
21
```

Fórmula de *Fredrik Carl Mülertz Størmer*

`stormer()` Função `stormer` resolvendo a *Fórmula de Fredrik Carl Mülertz Størmer*:

$$\frac{\pi}{4} = 44 \cdot \operatorname{arctg} \frac{1}{57} + 7 \cdot \frac{1}{239} - 12 \cdot \frac{1}{682} + 24 \cdot \operatorname{arctg} \frac{1}{12.943} \qquad \text{(F. C. M. Størmer, 1896)}$$

```
1  void stormer(unsigned long long err, fp_t pi) {
2      fp_t arctg_57;
3      generalArctgWithError_mpfr(arctg_57, err, 44, 57);
4
5      fp_t arctg_239;
6      generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 7, 239);
7
```

```
8       fp_t arctg_682;
9       generalArctgWithError_mpfr(arctg_682, err, 12, 682);
10
11      fp_t arctg_12943;
12      generalArctgWithError_mpfr(arctg_12943, err, 24, 12943);
13
14      fp_add(pi, arctg_57, arctg_239);
15      fp_sub(pi, pi, arctg_682);
16      fp_add(pi, pi, arctg_12943);
17      fp_mul_ui(pi, pi, 4);
18
19      fp_clears(arctg_57, arctg_239, arctg_682, arctg_12943, NULL);
20  }
21
```

APÊNDICES

A Valor de Pi

Sendo, π_n, n a quantidade de casas decimais, temos:

π_{100} = 3.14159 26535 89793 23846 26433 83279 50288 41971 69399 37510 58209 74944 59230 78164 06286 20899 86280 34825 34211 70679

B Código fonte e Dados

B.1 Convergência para o método de *Monte Carlo*

Código 1: Código fonte para a convergência para o método de *Monte Carlo*

```
par(family = "serif")

pdf("generated/plot_monteCarlo.pdf", width = 5.6, height = 4)
dat <- read.table("generated/pi_monteCarlo_convergence.dat")
par(mar=c(5, 5, 1, 5))
plot(dat$V1, dat$V2,
    type = "l",
    xlab = "Interações",
    ylab = "Valores",
    las = 1,
    lwd = 2,
    log = "y",
    family = "serif")
dev.off()
```

B.2 Histograma dos valores obtidos no método de *Monte Carlo*

Código 2: Código fonte para o histograma dos valores obtidos no método de Monte Carlo

```
par(family = "serif")

dat <- read.table("generated/pi_monteCarlo_histogram.dat")
var <- dat$V2

m <- mean(var)
s <- sd(var)
#e <- sd(var) / sqrt(m)

pdf("generated/histogram_monteCarlo.pdf", height = 4, width =
    5.6)

layout(matrix(c(1, 1, 1,
                1, 1, 1,
                1, 1, 1,
                2, 2, 2), nrow=4, byrow=TRUE))

fun <- dnorm(var, mean = m, sd = s)

par(mar=c(3, 3, 2, 3))
histogram <- hist(var,
    prob = TRUE,
    ylim = c(0, 100),
    col = c("gray97"),
    border = c("gray80"),
    axes = FALSE,
    ylab = "", xlab = "", main=NULL, family = "serif")

xfit <- seq(min(var), max(var), by = (max(var) - min(var)) / 3)

axis(side = 1, family = "serif", cex.axis = 1.35)
axis(side = 2, at = c(0,25,50,75,100), labels = c(0,"","","",1),
    family = "serif", cex.axis = 1.35)

curve(dnorm(x, mean = m, sd = s),
    col = "black",
    lwd = 2,
    yaxt = "n",
    add = TRUE)

```

```
40 segments(m, 0, m, dnorm(m, m, s), col = "black", lty = "longdash"
       , lwd = 1)
41 text(m, dnorm(m, m, s) + 5, expression(mu), family = "serif", cex
        = 1.35)
42 segments(m + s, 0, m + s, dnorm(m + s, m, s), col = "black", lty
       = "longdash", lwd = 1)
43 segments(m - s, 0, m - s, dnorm(m - s, m, s), col = "black", lty
       = "longdash", lwd = 1)
44
45 segments(m, dnorm(m + s, m, s), m + s, dnorm(m + s, m, s), col =
       "black", lty = "solid", lwd = 1.25)
46 segments(m, dnorm(m + s, m, s) - 2, m, dnorm(m + s, m, s) + 2,
       col = "black", lty = "solid", lwd = 1.25)
47 segments(m + s, dnorm(m + s, m, s) - 2, m + s, dnorm(m + s, m, s)
        + 2, col = "black", lty = "solid", lwd = 1.25)
48 text((m + m + s) / 2, dnorm(m + s, m, s) + 5, expression(sigma),
       family = "serif", cex = 1.35)
49
50 strip_chart <- function(add = FALSE) {
51     chart <- stripchart(var, method = "jitter",
52         ylab = "", xlab = "", xaxt="n", ylim = c(0.85, 1.15), pch
               = 16,
53         family = "serif", add = add)
54 }
55
56 par(mar=c(3, 3, 0, 3))
57 strip_chart()
58 grid(nx = 5, ny = 2, lty = "solid", lwd = 1, col = "gray80")
59 mtext("x", side = 1, line = 1, las = 1, family = "serif", cex =
       1)
60 mtext("y", side = 2, line = 1, las = 1, family = "serif", cex =
       1)
61 strip_chart(add = TRUE)
62
63 dev.off()
```

Referências

[1] BERGGREN, L.; BORWEIN, J.; BORWEIN, P. **Pi**: a source book. Nova Iorque: Springer Science, 1997. ISBN 978-1-4757-2738-8.

[2] ULAM, S. **Special Issue**. 15, [*S. l.*]: Los Alamos Science, 1987.