https://github.com/guilhermeivo/computing-projects/ guilhermeivo

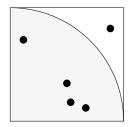
3 de fevereiro de 2025

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

Pi usando Monte Carlo

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].

nonteCarlo() 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;</pre>
```

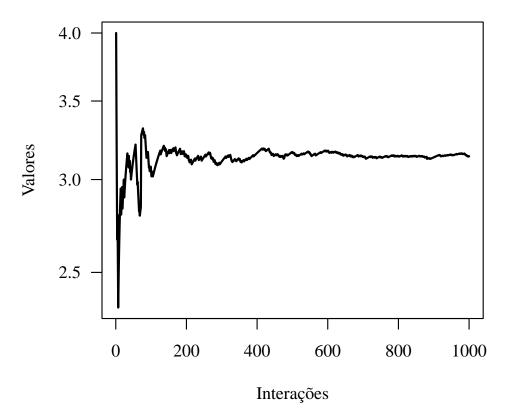
 $^{^{1}}$ O ENIAC produziu 2,037 dígitos de π em 70 horas em 1949 usando a *Fórmula de Machin*[1, p. 592 e 627]

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

pi = (long double) 4 * ins;
pi = (long double) pi / (long double) n;

return pi;
}</pre>
```

Figura 1: Convergência para o método de Monte Carlo

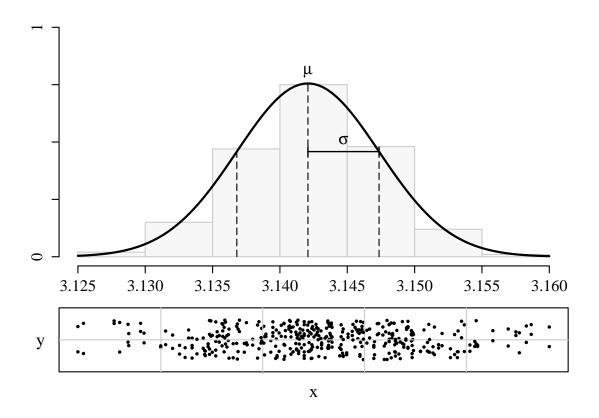


Fonte: Subseção B.1

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 = μ 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.

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

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

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

ara 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:

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

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

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

$$P_{n} \left(\frac{1}{a} \right)$$

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

$$\frac{1}{(2n+1) \cdot a^{2n+1}} - \frac{1}{(2n+3) \cdot a^{2n+3}} =$$

$$= \frac{(2n+3) \cdot a^{2n+3} - (2n+1) \cdot a^{2n+1}}{(2n+1) \cdot a^{2n+1} \cdot (2n+3) \cdot a^{2n+3}} =$$

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

$$= \frac{(4k+3) \cdot a^2 - (4k+1)}{(4k+1) \cdot (4k+3) \cdot a^{4k+3}}$$

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

```
generalArctg()
```

2

long double generalArctg(unsigned long int n, unsigned long int a) { unsigned long int pow, aux_pow, numerator, quotient;

long double res; 3

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

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

$$A \cdot \frac{1}{a^{2n+3}} \cdot \frac{1}{2n+3} < A \cdot \frac{1}{a^{2n+3}} \cdot \frac{1}{2 \cdot (n+1)} \stackrel{?}{<} \epsilon$$

$$\frac{1}{\epsilon} \cdot \frac{A}{2a} < a^{2 \cdot (n+1)} \cdot (n+1)$$

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.

```
unsigned long int generalErrorHandle(unsigned long int d, unsigned
      long int A, unsigned long int a) {
       unsigned long int n, err, small, pow, aux_pow;
2
3
       n = 0;
4
       err = 1;
6
       aux_pow = a * a;
7
       pow = aux_pow;
8
9
       int i;
10
       for (i = 0; i < d; i++) {
11
```

ralErrorHandle() -

12

13

}

err *= 10;

```
14
        small = err * A / (2 * a);
15
16
        while (small >= (unsigned long int) pow * (n + 1)) {
17
            pow *= aux_pow;
18
            n++;
19
        }
20
21
22
        return n;
23
24
```

Porém utilizando essas funções para $\pi/4 = \arctan(1)$ 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

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

```
void generalArctg_mpfr(const mpz_t n, unsigned long int a, fp_t res)
       fp_set_ui(res, 0);
2
       mpz_t i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp, numerator,
4
          quotient;
       mpz_inits(i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp,
5
          numerator, quotient, NULL);
6
       mpz_set_ui(a_gmp, a);
7
       mpz_pow_ui(aux_pow_4, a_gmp, 4); // aux = a^4
8
       mpz_pow_ui(aux_pow_2, a_gmp, 2); // aux = a^4
       mpz_pow_ui(pow, a_gmp, 3); // pow = a^3
10
11
       fp_t frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr;
12
       fp_inits(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr, NULL);
13
14
       for (mpz_set_ui(i, 0); mpz_cmp(i, n) < 0; mpz_add_ui(i, i, 4)) {</pre>
15
          // for (int i = 0; i < n; i+=4) {...}
           mpz_add_ui(i_1, i, 1); // i + 1
16
           mpz_add_ui(i_3, i, 3); // i + 3
17
18
```

```
19
           // numerator
           mpz_mul(numerator, i_3, aux_pow_2); // (i + 3) * a^2
20
           mpz_sub(numerator, numerator, i_1); // (i + 3) * a^2 - (i + 3)
21
               1)
22
           // quocient
23
           mpz_mul(quotient, i_1, i_3); // (i + 1) * (i + 3)
24
           mpz_mul(quotient, quotient, pow); // (i + 1) * (i + 3) * a^{i}
25
               +3}
26
           fp_set_z(numerator_mpfr, numerator);
27
           fp_set_z(quotient_mpfr, quotient);
28
29
           fp_div(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr); // frac =
30
               numerator / quotient
           fp_add(res, res, frac); // res += frac
31
32
33
           mpz_mul(pow, pow, aux_pow_4); // pow *= a^4
34
       mpz_clears(i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp, NULL);
35
       fp_clears(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr, NULL);
37
38
39
```

rrorHandle_gmp()

```
void generalErrorHandle_gmp(unsigned long int d, unsigned long int A,
       unsigned long int a, mpz_t n) {
       mpz_set_ui(n, 0);
2
3
       mpz_t err, aux_pow, pow, aux_cmp;
4
       mpz_inits(err, aux_pow, pow, aux_cmp, NULL);
       mpz_set_ui(err, 1);
6
7
       for (int i = 0; i < d; i++) {
8
           mpz_mul_ui(err, err, 10);
       }
10
11
       mpz_mul_ui(err, err, A);
12
       mpz_div_ui(err, err, 2 * a);
13
14
15
       mpz_set_ui(aux_pow, a);
16
       mpz_set(pow, aux_pow);
17
       mpz_set(aux_cmp, pow);
18
19
       mpz_mul(aux_cmp, aux_cmp, n);
       while (mpz_cmp(err, aux_cmp) > 0) { // err >= aux_cmp
20
```

FÓRMULA DE MACHIN ORIGINAL

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

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

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

FÓRMULA DE KIKUO TAKANO

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

$$\frac{\pi}{4} = 12 \cdot \arctan \frac{1}{49} + 32 \cdot \frac{1}{57} - 5 \cdot \frac{1}{239} + 12 \cdot \arctan \frac{1}{110443}$$
 (K. Takano, 1982)

```
void takano(unsigned long long err, fp_t pi) {
   fp_t arctg_49;
   generalArctgWithError_mpfr(arctg_49, err, 12, 49);

fp_t arctg_57;
   generalArctgWithError_mpfr(arctg_57, err, 32, 57);
```

```
7
       fp_t arctg_239;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 5, 239);
10
       fp_t arctg_110443;
11
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_110443, err, 12, 110443);
13
       fp_add(pi, arctg_49, arctg_57);
14
       fp_sub(pi, pi, arctg_239);
15
       fp_add(pi, pi, arctg_110443);
16
       fp_mul_ui(pi, pi, 4);
17
       fp_clears(arctg_49, arctg_57, arctg_239, arctg_110443, NULL);
19
20
21
```

FÓRMULA DE FREDRIK CARL MÜLERTZ STØRMER

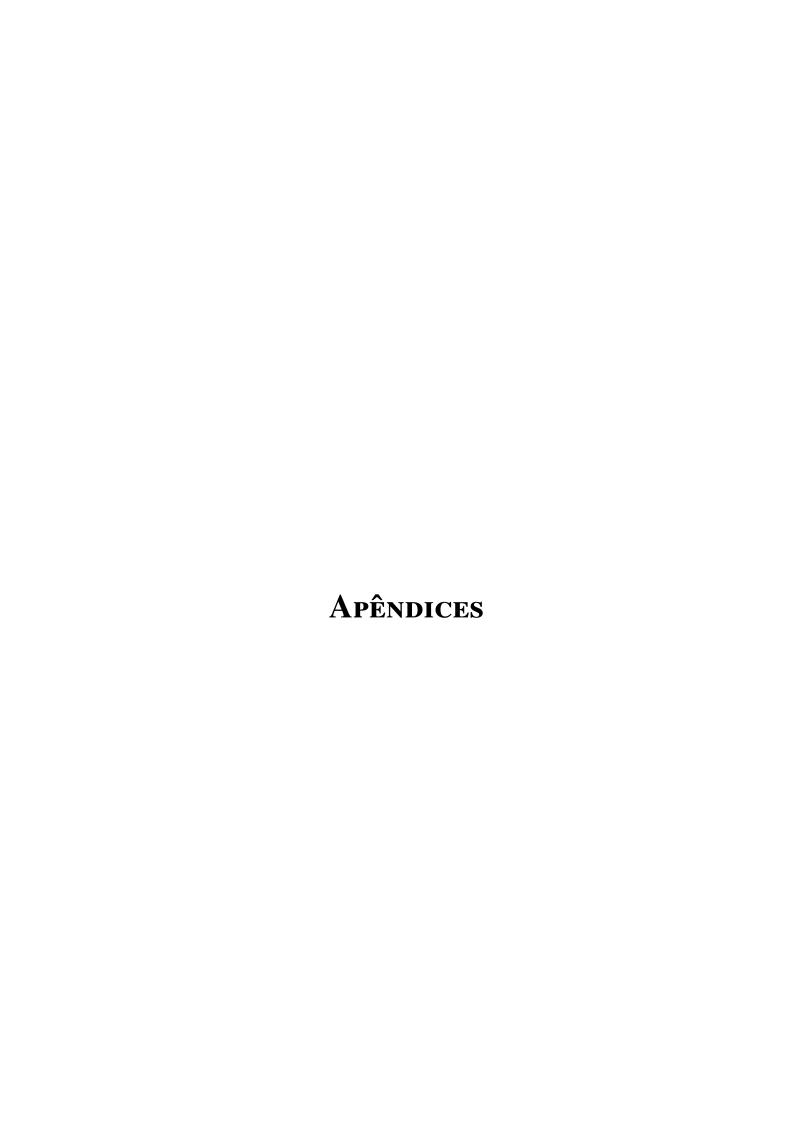
stormer() Função stormer resolvendo a Fórmula de Fredrik Carl Mülertz Størmer:

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

```
void stormer(unsigned long long err, fp_t pi) {
1
       fp_t arctg_57;
2
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_57, err, 44, 57);
3
4
       fp_t arctg_239;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 7, 239);
       fp_t arctg_682;
8
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_682, err, 12, 682);
10
11
       fp_t arctg_12943;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_12943, err, 24, 12943);
12
13
       fp_add(pi, arctg_57, arctg_239);
14
       fp_sub(pi, pi, arctg_682);
15
       fp_add(pi, pi, arctg_12943);
16
       fp_mul_ui(pi, pi, 4);
17
18
       fp_clears(arctg_57, arctg_239, arctg_682, arctg_12943, NULL);
19
20
21
```

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.



A VALOR DE PI

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

 $\pi_{100} = 3.14159\ 26535\ 89793\ 23846\ 26433\ 83279\ 50288\ 41971\ 69399\ 37510\ 58209\ 74944$ 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")
3 | pdf("generated/plot_monteCarlo.pdf", width = 5.6, height = 4)
  dat <- read.table("generated/pi_monteCarlo_convergence.dat")</pre>
   par(mar=c(5, 5, 1, 5))
   plot(dat$V1, dat$V2,
       type = "1",
7
       xlab = "Interações",
       ylab = "Valores",
       las = 1,
10
       lwd = 2,
       log = "y",
12
       family = "serif")
13
   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")</pre>
   var <- dat$V2</pre>
   m <- mean(var)</pre>
   s <- sd(var)
   #e <- sd(var) / sqrt(m)</pre>
   pdf("generated/histogram_monteCarlo.pdf", height = 4, width = 5.6)
10
11
   layout(matrix(c(1, 1, 1,
12
13
                     1, 1, 1,
                     1, 1, 1,
14
                     2, 2, 2), nrow=4, byrow=TRUE))
16
   fun \leftarrow dnorm(var, mean = m, sd = s)
17
   par(mar=c(3, 3, 2, 3))
19
   histogram <- hist(var,</pre>
20
       prob = TRUE,
21
       ylim = c(0, 100),
22
       col = c("gray97"),
23
       border = c("gray80"),
24
       axes = FALSE,
25
       ylab = "", xlab = "", main=NULL, family = "serif")
26
27
   xfit \leftarrow seq(min(var), max(var), by = (max(var) - min(var)) / 3)
28
29
   axis(side = 1, family = "serif", cex.axis = 1.35)
30
   axis(side = 2, at = c(0,25,50,75,100), labels = c(0,"","","",1),
31
       family = "serif", cex.axis = 1.35)
32
   curve(dnorm(x, mean = m, sd = s),
34
       col = "black",
35
       lwd = 2,
36
37
       yaxt = "n",
       add = TRUE)
38
39
   segments(m, 0, m, dnorm(m, m, s), col = "black", lty = "longdash",
40
       lwd = 1)
```

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