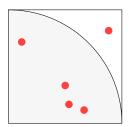
EXPERIMENTOS USANDO PI

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].

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;

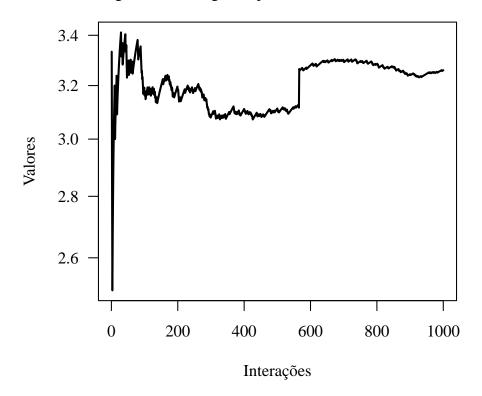
   z = x * x + y * y;
   if (z <= 1) {
      ins++;
   }
}

pi = (long double) 4 * ins;</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]

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

Figura 1: Convergência para o método de Monte Carlo

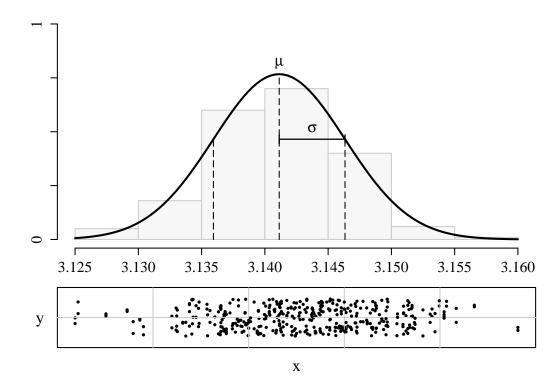


Fonte: Subseção B.1

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 = 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()
               long double generalArctg(unsigned long int n, unsigned long int a
                   unsigned long int pow, aux_pow, numerator, quotient;
                   long double res;
            3
                   pow = a * a * a;
                   aux_pow = a * a * a * a;
                   res = 0;
                   int i;
                   for (i = 0; i < n; i+=4) {
            10
                       numerator = (unsigned long int) (i + 3) * (a * a) - (i + a)
                           1);
                       quotient = (unsigned long int) (i + 1) * (i + 3) * pow;
            12
                       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.

```
6
7
        aux_pow = a * a;
        pow = aux_pow;
8
9
        int i;
10
        for (i = 0; i < d; i++) {
11
            err *= 10;
12
        }
13
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
        return n;
22
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

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

```
void generalArctg_mpfr(const mpz_t n, unsigned long int a, mpfr_t
      res) {
      mpfr_set_ui(res, 0, DEFAULT_ROUND);
3
      mpz_t i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp,
4
          numerator, quotient;
      mpz_inits(i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp,
5
          numerator, quotient, NULL);
      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
9
```

```
10
       mpz_pow_ui(pow, a_gmp, 3); // pow = a^3
11
       mpfr_t frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr;
12
       mpfr_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
           // numerator
19
           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+3}
26
27
           mpfr_init_set_z(numerator_mpfr, numerator, DEFAULT_ROUND)
           mpfr_init_set_z(quotient_mpfr, quotient, DEFAULT_ROUND);
28
29
           mpfr_div(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr,
30
               DEFAULT_ROUND); // frac = numerator / quotient
           mpfr_add(res, res, frac, DEFAULT_ROUND); // 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,
35
          NULL);
36
       mpfr_clears(frac, numerator_mpfr, quotient_mpfr, NULL);
37
38
39
```

```
eralErrorHandle_gmp() -
```

```
void generalErrorHandle_gmp(unsigned long int d, unsigned long
  int A, unsigned long int a, mpz_t n) {
  mpz_set_ui(n, 0);

mpz_t err, aux_pow, pow, aux_cmp;
  mpz_inits(err, aux_pow, pow, aux_cmp, NULL);
  mpz_set_ui(err, 1);
```

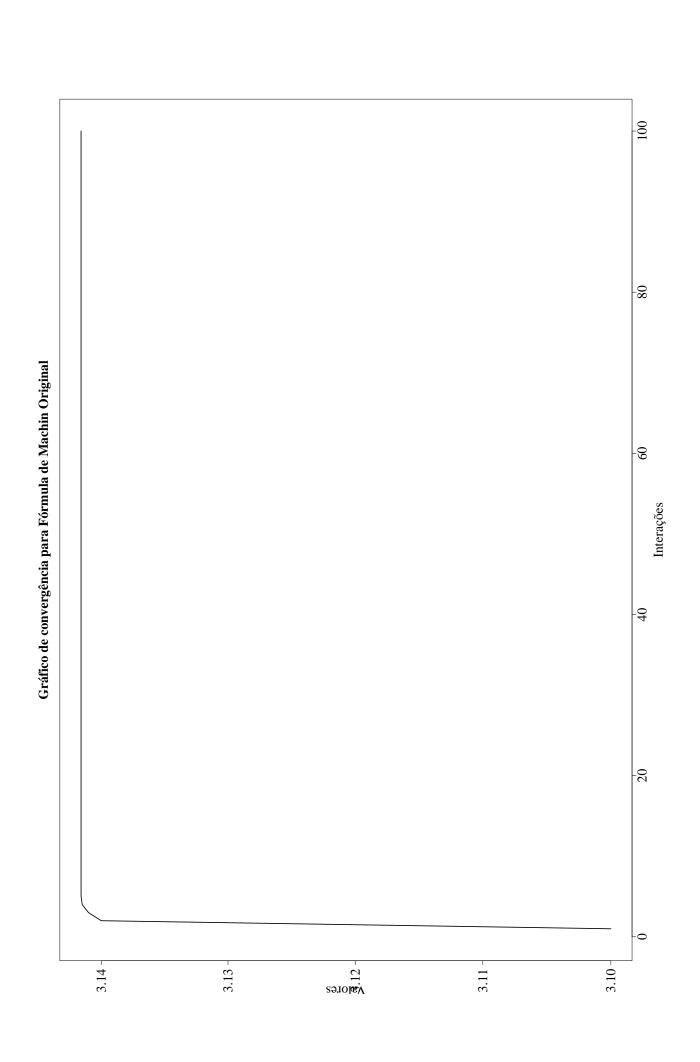
```
7
       for (int i = 0; i < d; i++) {</pre>
8
           mpz_mul_ui(err, err, 10);
       }
10
11
       mpz_mul_ui(err, err, A);
       mpz_div_ui(err, err, 2 * a);
13
14
15
       mpz_set_ui(aux_pow, a);
16
       mpz_set(pow, aux_pow);
17
       mpz_set(aux_cmp, pow);
18
       mpz_mul(aux_cmp, aux_cmp, n);
19
       while (mpz_cmp(err, aux_cmp) > 0) { // err >= aux_cmp
20
           mpz_mul(pow, pow, aux_pow);
           mpz_set(aux_cmp, pow);
22
           mpz_add_ui(n, n, 1);
23
           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:

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

```
void machin(unsigned long long err, mpfr_t pi) {
2
       mpfr_t arctg_5;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_5, err, 4, 5);
3
4
       mpfr_t arctg_239;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 1, 239);
6
7
       mpfr_sub(pi, arctg_5, arctg_239, DEFAULT_ROUND);
       mpfr_mul_ui(pi, pi, 4, DEFAULT_ROUND);
10
       mpfr_clears(arctg_5, arctg_239, NULL);
11
12
13
```



FÓRMULA DE KIKUO TAKANO

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

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

```
void takano(unsigned long long err, mpfr_t pi) {
       mpfr_t arctg_49;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_49, err, 12, 49);
3
4
       mpfr_t arctg_57;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_57, err, 32, 57);
6
       mpfr_t arctg_239;
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 5, 239);
10
       mpfr_t arctg_110443;
11
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_110443, err, 12, 110443);
12
13
       mpfr_add(pi, arctg_49, arctg_57, DEFAULT_ROUND);
       mpfr_sub(pi, pi, arctg_239, DEFAULT_ROUND);
15
       mpfr_add(pi, pi, arctg_110443, DEFAULT_ROUND);
16
       mpfr_mul_ui(pi, pi, 4, DEFAULT_ROUND);
17
18
       mpfr_clears(arctg_49, arctg_57, arctg_239, arctg_110443, NULL
19
          );
20
21
```

FÓRMULA DE FREDRIK CARL MÜLERTZ STØRMER

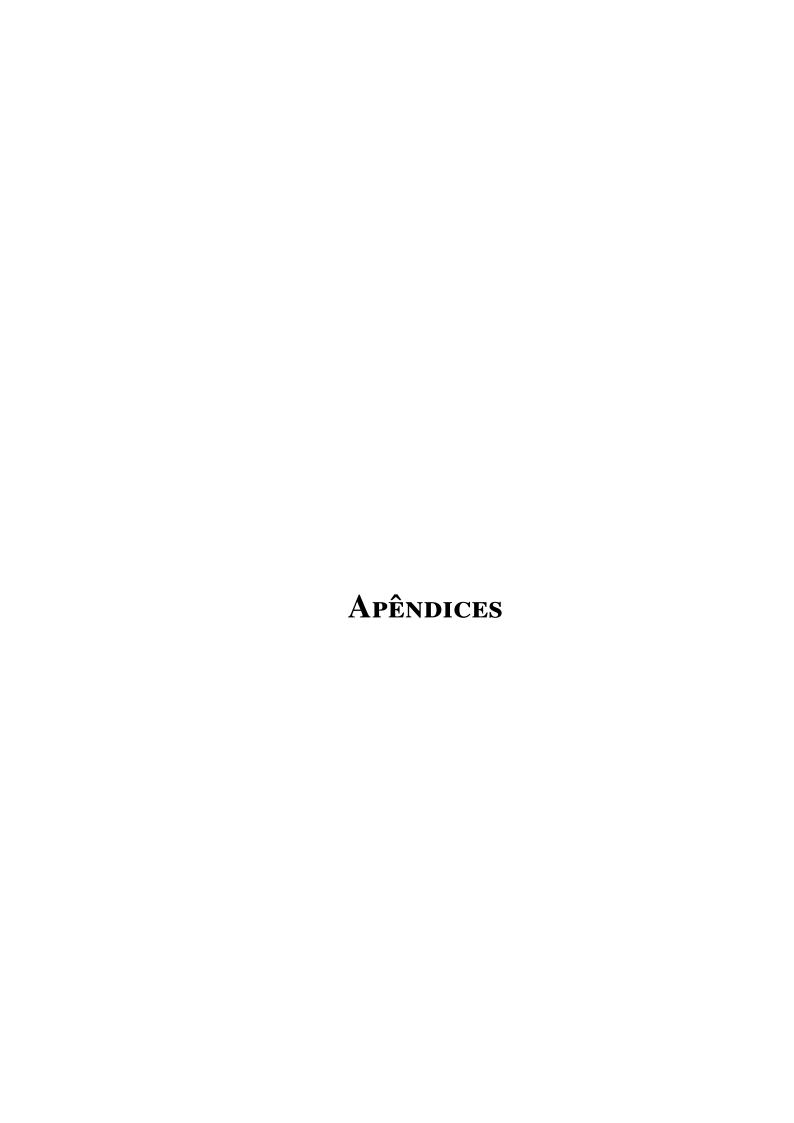
stormer() Função stormer resolvendo a Fórmula de Fredrik Carl Mülertz Størmer:

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

void stormer(unsigned long long err, mpfr_t pi) {
 mpfr_t arctg_57;
 generalArctgWithError_mpfr(arctg_57, err, 44, 57);

mpfr_t arctg_239;
 generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 7, 239);

```
7
       mpfr_t arctg_682;
8
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_682, err, 12, 682);
10
       mpfr_t arctg_12943;
11
       generalArctgWithError_mpfr(arctg_12943, err, 24, 12943);
12
13
       mpfr_add(pi, arctg_57, arctg_239, DEFAULT_ROUND);
14
       mpfr_sub(pi, pi, arctg_682, DEFAULT_ROUND);
15
       mpfr_add(pi, pi, arctg_12943, DEFAULT_ROUND);
16
       mpfr_mul_ui(pi, pi, 4, DEFAULT_ROUND);
17
18
19
       {\tt mpfr\_clears(arctg\_57, arctg\_239, arctg\_682, arctg\_12943, NULL}
           );
20
21
```



A VALOR DE PI

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

05070 27056 23526 60127 64848 30840 76118 30130 52793 20542 74628 65403 60367 45328 65105 70658 74882 25698 15793 67897 66974 22057 50596 83440 86973 50201 41020 67235 85020 07245 22563 26513 41055 92401 90274 21624 84391 40359 98953 53945 90944 07046 91209 14093 87001 26456 00162 37428 80210 92764 57931 06579 22955 24988 72758 46101 26483 69998 92256 95968 81592 05600 10165 52563 75678

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)
3
   dat <- read.table("generated/pi_monteCarlo_convergence.dat")</pre>
   par(mar=c(5, 5, 1, 5))
   plot(dat$V1, dat$V2,
       type = "1",
       xlab = "Interações",
       ylab = "Valores",
9
       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 =
10
       5.6)
11
   layout(matrix(c(1, 1, 1,
12
                     1, 1, 1,
13
14
                    1, 1, 1,
                    2, 2, 2), nrow=4, byrow=TRUE))
15
16
17
   fun \leftarrow dnorm(var, mean = m, sd = s)
18
   par(mar=c(3, 3, 2, 3))
19
   histogram <- hist(var,
       prob = TRUE,
21
       ylim = c(0, 100),
22
       col = c("gray97"),
24
       border = c("gray80"),
       axes = FALSE,
25
       ylab = "", xlab = "", main=NULL, family = "serif")
27
   xfit <- seq(min(var), max(var), by = (max(var) - min(var)) / 3)
28
29
   axis(side = 1, family = "serif", cex.axis = 1.35)
   axis(side = 2, at = c(0,25,50,75,100), labels = c(0,"","","",1),
31
       family = "serif", cex.axis = 1.35)
32
33
   curve(dnorm(x, mean = m, sd = s),
34
       col = "black",
35
       1wd = 2,
36
       yaxt = "n",
37
       add = TRUE)
```

```
segments(m, 0, m, dnorm(m, m, s), col = "black", lty = "longdash"
       , 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
43
      = "longdash", lwd = 1)
45
   segments(m, dnorm(m + s, m, s), m + s, dnorm(m + s, m, s), col =
      "black", lty = "solid", lwd = 1.25)
   segments(m, dnorm(m + s, m, s) - 2, m, dnorm(m + s, m, s) + 2,
      col = "black", lty = "solid", lwd = 1.25)
   segments(m + s, dnorm(m + s, m, s) - 2, m + s, dnorm(m + s, m, s)
47
       + 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
           family = "serif", add = add)
53
54
55
  par(mar=c(3, 3, 0, 3))
56
57
   strip_chart()
   grid(nx = 5, ny = 2, lty = "solid", lwd = 1, col = "gray80")
   mtext("x", side = 1, line = 1, las = 1, family = "serif", cex =
  mtext("y", side = 2, line = 1, las = 1, family = "serif", cex =
60
      1)
   strip_chart(add = TRUE)
61
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.