Experimentos usando Pi

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

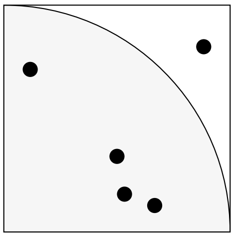
11 de abril de 2025

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 aplicado com sucesso em diversos problemas contemporâneos [3].

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



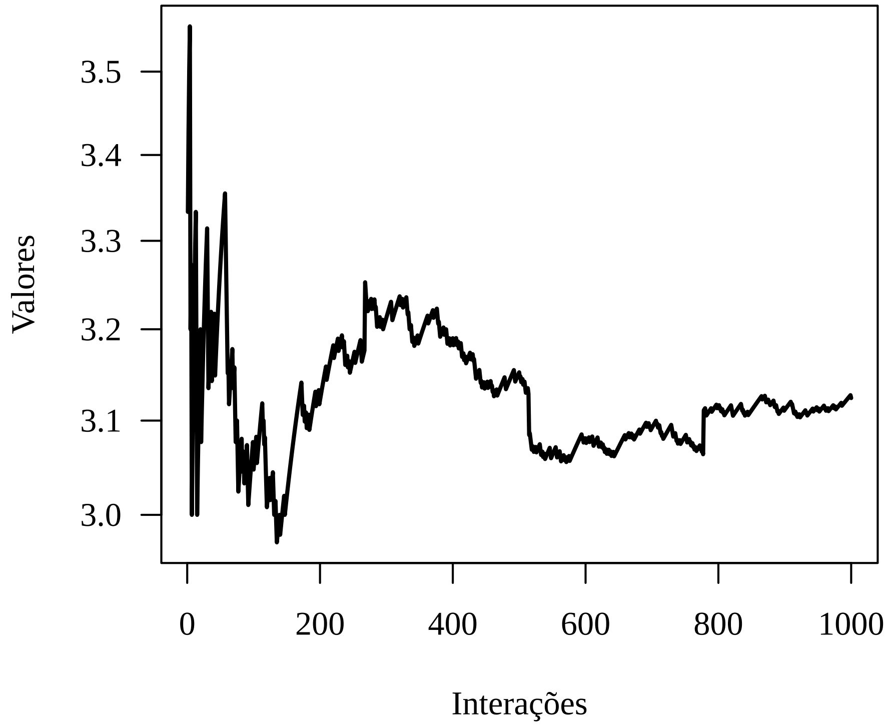
$$A = \pi \cdot R^2 \Longrightarrow A = \pi$$
$$A_c = \frac{\pi}{4} \approx 4 \cdot \frac{\text{dentro}}{\text{total}} = \pi$$

```
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*[2, p. 592 e 627]

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

    return pi;
}
```

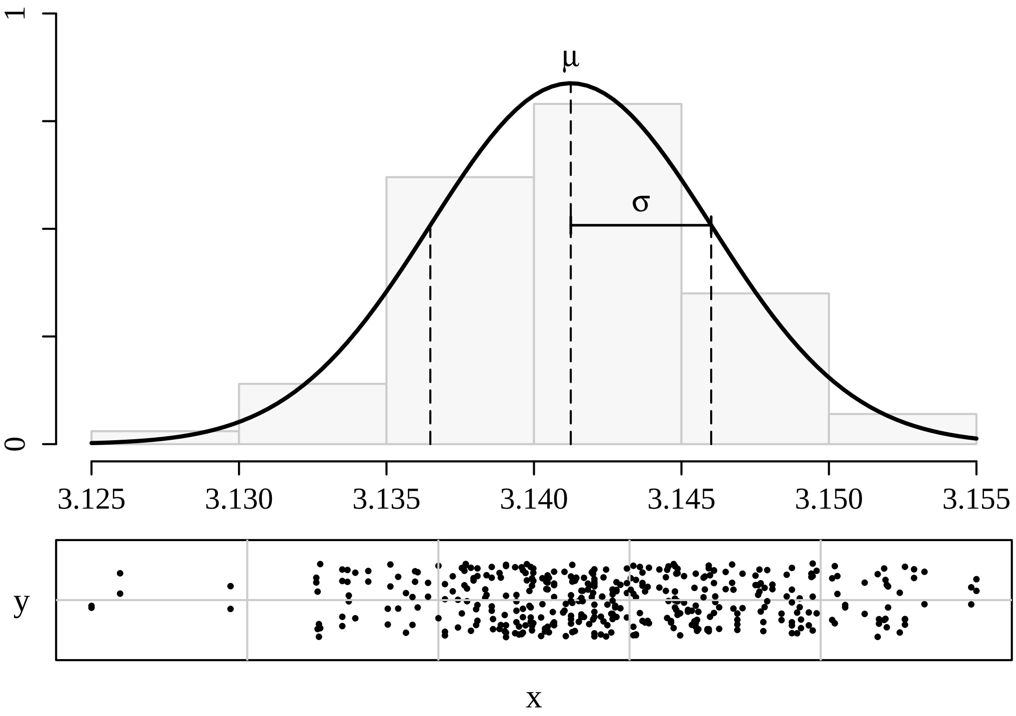
Gráfico 1: Convergência para o método de *Monte Carlo*



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Observando que os valores coletados na Gráfico 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.

Figura 1: Histograma dos valores obtidos no método de *Monte Carlo*, com curva de densidade, aplicado à coleta de π



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Devido às propriedades da função, temos:

- O ponto $x = \mu$ é um ponto de máximo absoluto, sendo o único ponto crítico do gráfico, representado pela linha pontilhada central da Figura 1.
- Possui dois pontos de inflexão $x = \mu - \sigma$ e $x = \mu - \sigma$, 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.

Defina: $mean(var)$, 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 foi superior a 0,05, fortalecendo a nossa hipótese inicial de que a normalidade não é rejeitada, como demonstrado na Figura 1. 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:

$$\begin{array}{rcl} S_n & = & 1 + r + r^2 + \cdots + r^n \\ -\, r \cdot S_n & = & r + r^2 + \cdots + r^n + r^{n+1} \\ \hline S_n - rS_n & = & 1 - r^{n+1} \end{array}$$

$$\Longrightarrow S_n = \frac{1 - r^{n+1}}{1 - r}$$

$$\lim_{n \to \infty} S_n = \begin{cases} \dfrac{1}{1-r}, \; |r| < 1 \\ \text{diverge, caso contrário} \end{cases}$$

$$S_n = \sum_{k=0}^{n} r^n = 1 + r + r^2 + \cdots + r^n$$

$$\therefore \quad \{r^n\}_{n=0}^{\infty} = \lim_{n\to\infty} \sum_{k=0}^{n} r^n = \sum_{n=0}^{\infty} r^n = \frac{1}{1-r}, \quad |r| < 1 \; \forall r \in \mathbb{R} \qquad \text{(Série Geométrica)}$$

Considerando $r = -x^2$ e desenvolvendo pelo teorema de diferenciação e integração para séries de potências, temos

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n x^{2n} = \frac{1}{1+x^2}$$

$$\Longrightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \left((-1)^n \int x^{2n} \, dx \right) + \text{cte} = \int \frac{1}{1+x^2} \, dx$$

$$\Longrightarrow \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1} + \text{cte} = \operatorname{arctg} x$$

Para $x = 0$, temos $\operatorname{arctg} x = 0$,

$$\therefore \quad \operatorname{arctg} x = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{2n+1}, \quad |x| < 1 \; \forall x \in \mathbb{R} \tag{1}$$

Sendo uma série alternada, podemos reescrever a série com estimativa do erro

$$\begin{aligned} \operatorname{arctg} x \approx S_n &= \sum_{k=0}^{n} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{2k+1} + R_n(x), \text{ substituindo } x = 1/a \\ &= \underbrace{\sum_{k=0}^{n} \left((-1)^k \frac{1}{a^{2k+1}} \cdot \frac{1}{2k+1} \right)}_{P_n\,(1/a)} + R_n\,(1/a) \end{aligned}$$

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

Observando o aparecimento de uma série telescópica e otimizando para o desenvolvimento computacional, temos

$$\begin{aligned} b_n - b_{n+1} &= \frac{1}{(2n+1)\cdot a^{2n+1}} - \frac{1}{(2n+3)\cdot a^{2n+3}} \\ &= \frac{(2n+3)\cdot a^{2n+3} - (2n+1)\cdot a^{2n+1}}{(2n+1)\cdot a^{2n+1}\cdot(2n+3)\cdot a^{2n+3}} \\ &= \frac{(2n+3)\cdot a^{2} - (2n+1)}{(2n+1)\cdot(2n+3)\cdot a^{2n+3}}, \text{ usando que } n = 2k \\ &= \frac{(4k+3)\cdot a^{2} - (4k+1)}{(4k+1)\cdot(4k+3)\cdot a^{4k+3}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_n\left(1/a\right) &= \sum_{k=0}^{n} \frac{(4k+3)\cdot a^{2} - (4k+1)}{(4k+1)\cdot(4k+3)\cdot a^{4k+3}} \\ &= \sum_{\substack{i=0\\ i+=4}}^{n} \frac{(i+3)\cdot a^{2} - (i+1)}{(i+1)\cdot(i+3)\cdot a^{i+3}} \end{aligned}$$

generalArctg()

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

    pow = a * a * a;
    aux_pow = a * a * a * a;
    res = 0;

    int i;
    for (i = 0; i < n; i+=4) {
        numerator = (unsigned long int) (i + 3) * (a * a) - (i + 1);
        quotient = (unsigned long int) (i + 1) * (i + 3) * pow;
        res += (long double) numerator / (long double) quotient;

        pow *= aux_pow;
    }

    return res;
}

```

Desenvolvendo o resto

$$\begin{gathered} |R_n| \leq \frac{1}{a^{2n+3}} \cdot \frac{1}{2n+3} \\ \frac{1}{a^{2n+3}} \cdot \frac{1}{2n+3} < \frac{1}{a^{2\cdot(n+1)}} \cdot \frac{1}{2\cdot(n+1)} \overset{?}{<} \epsilon \\ \frac{1}{\epsilon} \cdot \frac{1}{2a} < a^{2\cdot(n+1)} \cdot (n+1) \end{gathered}$$

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 e A o valor de contração/expansão no eixo y da função.

generalErrorHandle()

```c
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;

    n = 0;
    err = 1;

    aux_pow = a * a;
    pow = aux_pow;

    int i;
    for (i = 0; i < d; i++) {
        err *= 10;
    }

    small = err * A / (2 * a);

    while (small >= (unsigned long int) pow * (n + 1)) {
        pow *= aux_pow;
        n++;
    }

    return n;
}

```

Porém, utilizando essas funções para $\pi/4 = \text{arctg}\,(1)$ alcançamos as limitações das representações utilizadas (`unsigned long int` e `long double`) ao tentar calcular para um d grande, que no caso dos pontos flutuantes segue a norma específica para formatos e operações para aritmética em sistemas de computadores, IEEE 754[2][4]. Então é necessário utilizar funções para cálculos de precisão arbitrária, sendo, nesse caso, utilizada a biblioteca *GNU MPFR*, uma biblioteca *C* para cálculos de ponto flutuante de precisão múltipla com arredondamento correto, e baseada na biblioteca *GNU Multiple Precision Arithmetic* (*GMP*).

Usando *GNU MPFR* e *GNU GMP*

Usaremos como prefixo ou sufixo nos nomes das funções e das variáveis `fp` para caso use pontos flutuantes de valor arbitrário em sua composição e o prefixo ou sufixo `gmp` para caso use valores inteiros de valor arbitrário.

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

```c
void generalArctg_fp(const mpz_t n, unsigned long int a, fp_t res) {
    fp_set_ui(res, 0);

    mpz_t i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp, numerator, quotient;
    mpz_inits(i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp, numerator, quotient,
         NULL);

    mpz_set_ui(a_gmp, a);
    mpz_pow_ui(aux_pow_4, a_gmp, 4); // aux = a^4
    mpz_pow_ui(aux_pow_2, a_gmp, 2); // aux = a^4
    mpz_pow_ui(pow, a_gmp, 3); // pow = a^3
```

[2]Representado na norma por `binary64` dependendo da arquitetura da máquina.

```

    fp_t frac, numerator_fp, quotient_fp;
    fp_inits(frac, numerator_fp, quotient_fp, NULL);

    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) {...}
        mpz_add_ui(i_1, i, 1); // i + 1
        mpz_add_ui(i_3, i, 3); // i + 3

        // numerator
        mpz_mul(numerator, i_3, aux_pow_2); // (i + 3) * a^2
        mpz_sub(numerator, numerator, i_1); // (i + 3) * a^2 - (i + 1)

        // quocient
        mpz_mul(quotient, i_1, i_3); // (i + 1) * (i + 3)
        mpz_mul(quotient, quotient, pow); // (i + 1) * (i + 3) * a^{i+3}

        fp_set_z(numerator_fp, numerator);
        fp_set_z(quotient_fp, quotient);

        fp_div(frac, numerator_fp, quotient_fp); // frac = numerator / quotient
        fp_add(res, res, frac); // res += frac

        mpz_mul(pow, pow, aux_pow_4); // pow *= a^4
    }
    mpz_clears(i, i_1, i_3, aux_pow_4, aux_pow_2, pow, a_gmp, NULL);

    fp_clears(frac, numerator_fp, quotient_fp, NULL);
}

```

generalErrorHandle_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);

    for (int i = 0; i < d; i++) {
        mpz_mul_ui(err, err, 10);
    }

    mpz_mul_ui(err, err, A);
    mpz_div_ui(err, err, 2 * a);

    mpz_set_ui(aux_pow, a);
    mpz_set(pow, aux_pow);

    mpz_set(aux_cmp, pow);
    mpz_mul(aux_cmp, aux_cmp, n);
    while (mpz_cmp(err, aux_cmp) > 0) {  // err >= aux_cmp
        mpz_mul(pow, pow, aux_pow);
        mpz_set(aux_cmp, pow);
        mpz_add_ui(n, n, 1);
```

```c
        mpz_mul(aux_cmp, aux_cmp, n);
    }

    mpz_clears(err, aux_pow, pow, aux_cmp, NULL);
}

```

Fórmula de *Machin* Original

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

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

```c
void machin(unsigned long long err, fp_t pi) {
    fp_t arctg_5;
    generalArctgWithError_mpfr(arctg_5, err, 4, 5);

    fp_t arctg_239;
    generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 1, 239);

    fp_sub(pi, arctg_5, arctg_239);
    fp_mul_ui(pi, pi, 4);

    fp_clears(arctg_5, arctg_239, NULL);
}

```

Fórmula de *Kikuo Takano*

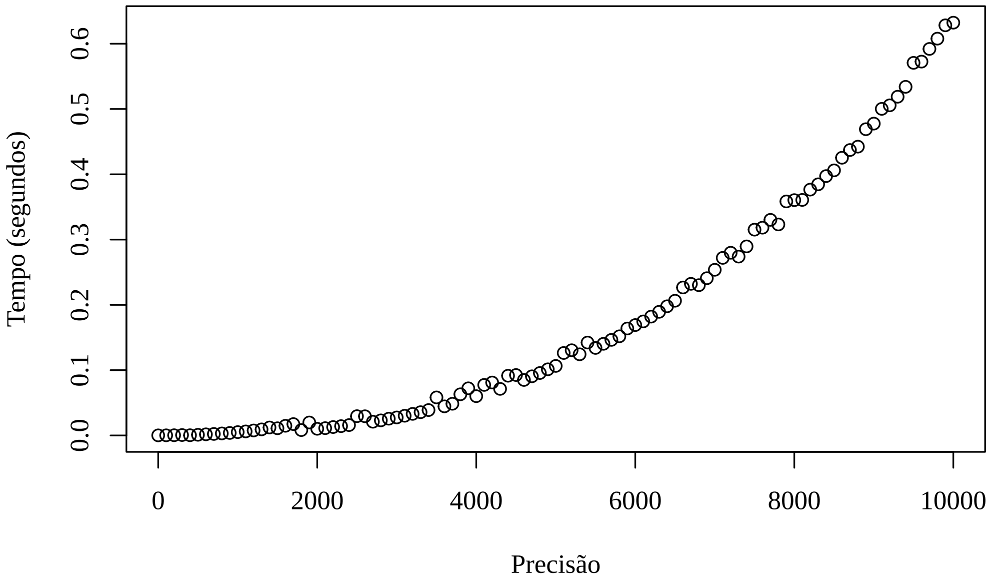
`takano()` Função `takano` resolvendo a *Fórmula de Kikuo Takano*:

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

```c
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);

    fp_t arctg_239;
    generalArctgWithError_mpfr(arctg_239, err, 5, 239);

    fp_t arctg_110443;
    generalArctgWithError_mpfr(arctg_110443, err, 12, 110443);

    fp_add(pi, arctg_49, arctg_57);
    fp_sub(pi, pi, arctg_239);
    fp_add(pi, pi, arctg_110443);
    fp_mul_ui(pi, pi, 4);
```

```

    fp_clears(arctg_49, arctg_57, arctg_239, arctg_110443, NULL);
}

```

Gráfico 2: Tempo de evolução com o aumento da precisão do valor de π usando fórmula de *Kikuo Takano*



Fonte: Elaborado pelo próprio autor

Fórmula de *Fredrik Carl Mülertz Størmer*

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

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

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

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

    fp_t arctg_682;
    generalArctgWithError_mpfr(arctg_682, err, 12, 682);

    fp_t arctg_12943;
    generalArctgWithError_mpfr(arctg_12943, err, 24, 12943);

    fp_add(pi, arctg_57, arctg_239);
    fp_sub(pi, pi, arctg_682);
    fp_add(pi, pi, arctg_12943);
    fp_mul_ui(pi, pi, 4);
```

```

    fp_clears(arctg_57, arctg_239, arctg_682, arctg_12943, NULL);
}

```

Referências

[1] ADVANCED MICRO DEVICES. **AOCC User Guide**. 5.0 ed. 57222, [*S. l.*]: [*S. n.*], 2024. Disponível em: `https://docs.amd.com/r/en-US/57222-AOCC-user-guide`. Acesso em: 14 de mar. de 2025.

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

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

[4] IEEE STANDARD FOR FLOATING-POINT ARITHMETIC. **IEEE Padrão 754-2019 (Revisão de IEEE 754-2008)**, [*S. l.*], 2019. DOI 10.1109/IEEESTD.2019.8766229.

Apêndices

A Valor de Pi

Sendo, π_n, n a quantidade de casas decimais, temos, usando fórmula de *Kikuo Takano*:

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