centro universitário FEI

IAAR
Inteligência Artificial Aplicada à Automação e Robótica

Programação Científica

Prof. Dr. Danilo H. Perico

MÉTODOS NUMÉRICOS

Objetivos da Aula

- Apresentar o **Algoritmo de Descida de Gradiente** para realizar o cálculo do mínimo de uma função
- Apresentar o **Algoritmo de Integração por Monte Carlo**

MÉTODOS NUMÉRICOS:
DERIVADAS E DESCIDA DE GRADIENTE

Relembrando - Computação Numérica

- Computação Numérica:
  - Uso de computadores para resolver problemas envolvendo números reais

Soluções analíticas *vs.* numéricas

- Soluções de problemas computacionais podem ser classificadas em:
  - **Analíticas *(ou soluções fechadas)*:**
    - Encontram uma **solução exata** através de solução de **equações simbólicas**
  - **Numéricas:**
    - Utilizam **aproximação** e diversas **iterações** para tentar convergir para a solução
    - Tendem a ser mais genéricos e computacionalmente mais custosos

Soluções de forma fechada

- “***Forma fechada***” significa:
    - um método de solução baseado em expressões analíticas ou na solução de um polinômio de grau 4 ou menor
    - Apenas cálculos não iterativos são suficientes para chegar a uma solução

Métodos Numéricos

- Por sua natureza **iterativa**, as soluções numéricas em geral são muito mais lentas do que suas correspondentes de forma fechada

Revisão Relâmpago de Cálculo: Derivadas e Gradiente

Cálculo

- Antes de entrar nos métodos analíticos, precisamos nos lembrar um pouco de cálculo

Derivada de uma função escalar

- Se tivermos uma função escalar f com uma única variável x, podemos escrevê-la como $f(x)$
- A derivada da função em respeito a x é df/dx
- A derivada representa a taxa de variação instantânea de $f(x)$ em relação a x

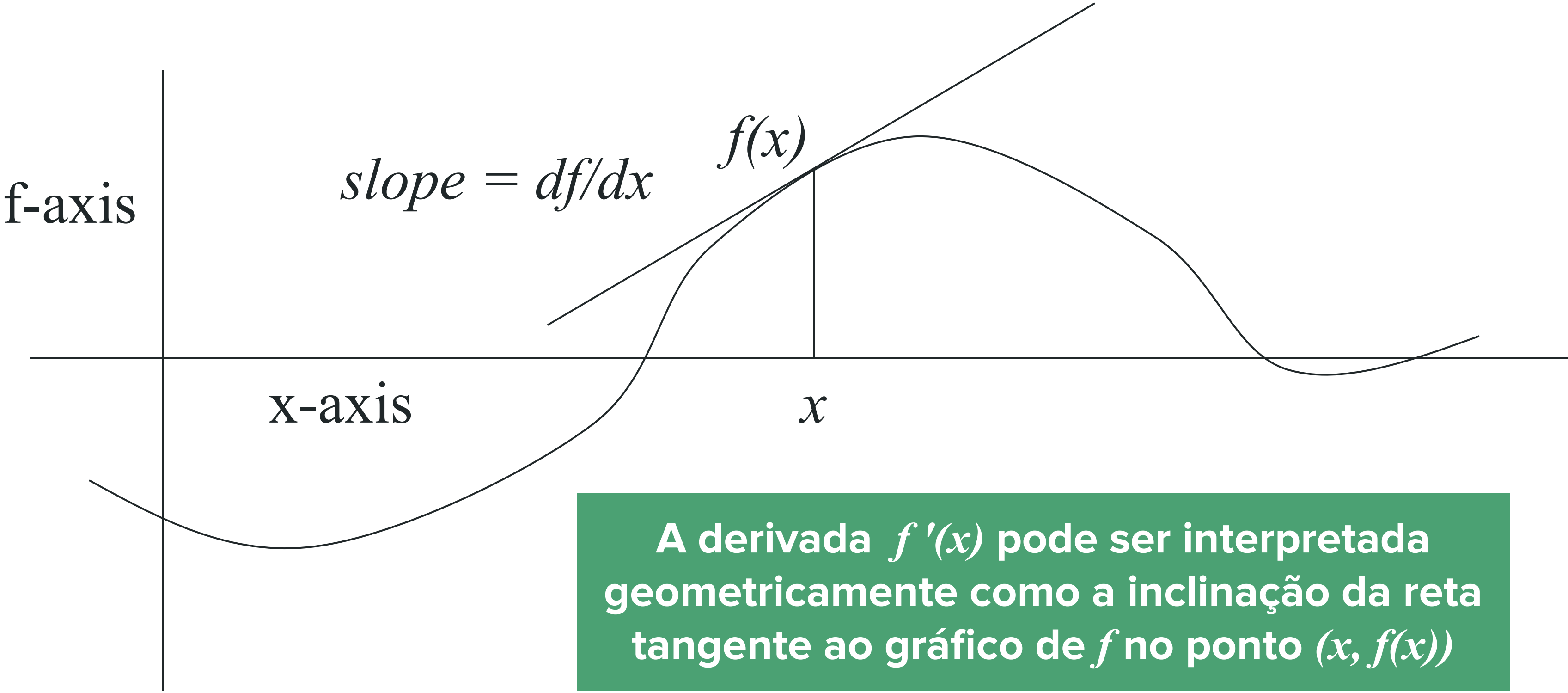
Derivada de uma função escalar

- A derivada é definida por limite:

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

- ***limite*** *é usado para descrever o comportamento de uma função à medida que o seu argumento se aproxima de um determinado valor*

Derivada de uma função escalar



A derivada $f'(x)$ pode ser interpretada geometricamente como a inclinação da reta tangente ao gráfico de f no ponto $(x, f(x))$

Derivada de $f(x)=x^2$

Por exemplo : $f(x) = x^2$

$$= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{(x+\Delta x)^2 - (x)^2}{\Delta x}$$

$$= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{x^2 + 2x\Delta x + \Delta x^2 - x^2}{\Delta x}$$

$$= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{2x\Delta x + \Delta x^2}{\Delta x}$$

$$= \lim_{\Delta x \to 0} (2x + \Delta x) = \boxed{2x}$$

Gradiente

- O gradiente de uma função multivariável de valores escalares $f(x, y, \ldots)$, denotado ∇f, contém todas as informações sobre suas derivadas parciais em um vetor:
    - $\nabla f = [\partial f/\partial x, \partial f/\partial y, \ldots]$

- Dá informações sobre a taxa de variação de uma função em relação a variáveis independentes

Gradiente

- Exemplo com 2 dimensões:
  - Se $f(x, y) = x^2.cos(y)$, qual é o **gradiente de** f (∇f)?

Gradiente

- Exemplo com 2 dimensões:
  - Se $f(x, y) = x^2.cos(y)$, qual é o **gradiente de** f (∇f)?
  - $\nabla f = \begin{bmatrix} 2x.cos(y) \\ -x^2.sen(y) \end{bmatrix}$

Gradiente

- Exemplo com 2 dimensões:
  - Se **$f(x, y) = x^2.cos(y)$**, qual é o **gradiente de f** (**∇f**)?
  - $$\nabla f = \begin{bmatrix} 2x.\cos(y) \\ -x^2.\text{sen}(y) \end{bmatrix}$$
- *∇f é uma função de valor vetorial, nesse caso, uma com uma entrada bidimensional e um resultado bidimensional*

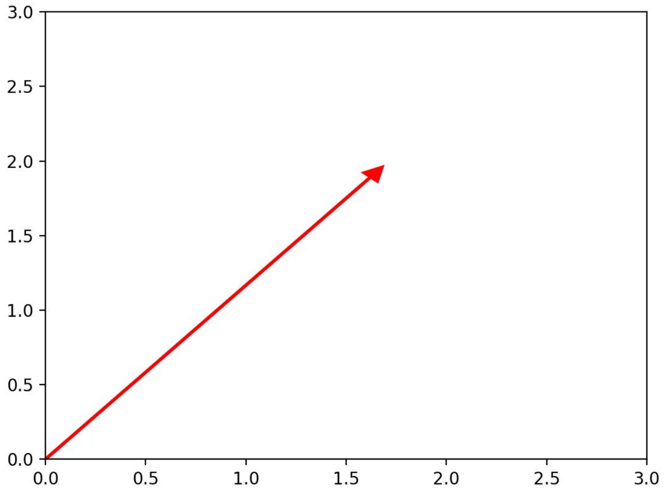
Gradiente

- Exemplo com 2 dimensões:
  - $\nabla \boldsymbol{f}$ para as entradas $\boldsymbol{x = 1.5}$ e $\boldsymbol{y = -1}$ é $\boldsymbol{\nabla f(1.5,-1)}$
  - $\nabla f = \begin{bmatrix} 2x.\cos(y) \\ -x^2.\text{sen}(y) \end{bmatrix} \Rightarrow \nabla f(1.5,-1) = \begin{bmatrix} 1.62 \\ 1.89 \end{bmatrix}$

Gradiente

- Exemplo com 2 dimensões:
  - Podemos representar **graficamente** o gradiente:

$$\nabla f(1.5,-1) = \begin{bmatrix} 1.62 \\ 1.89 \end{bmatrix}$$

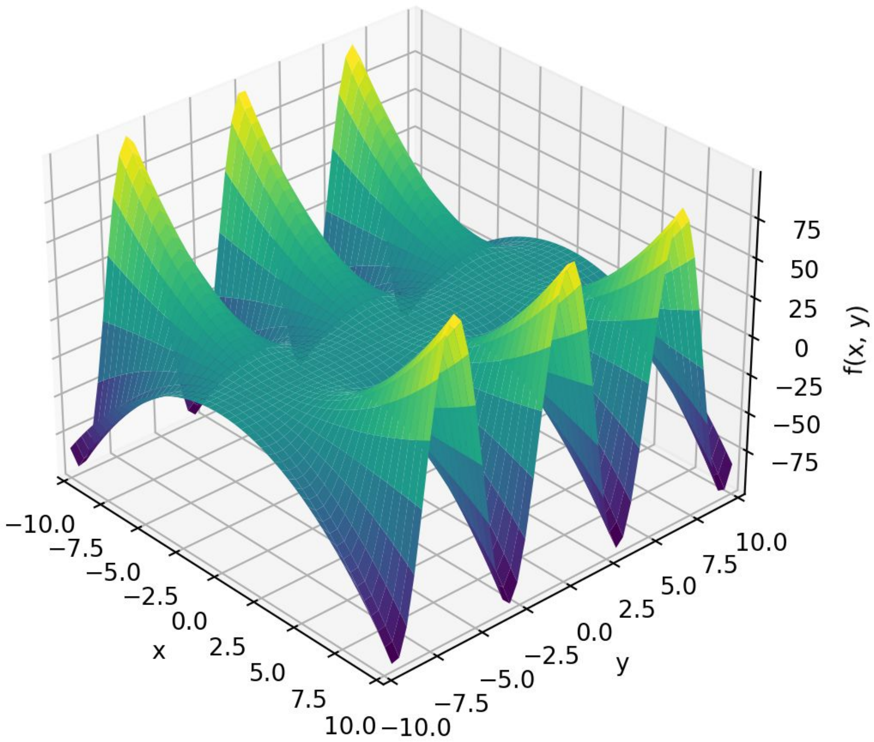


- O gradiente representa uma direção no espaço das entradas

Gradiente

- A primeira componente representa o quanto f aumenta em proporção ao aumento em x

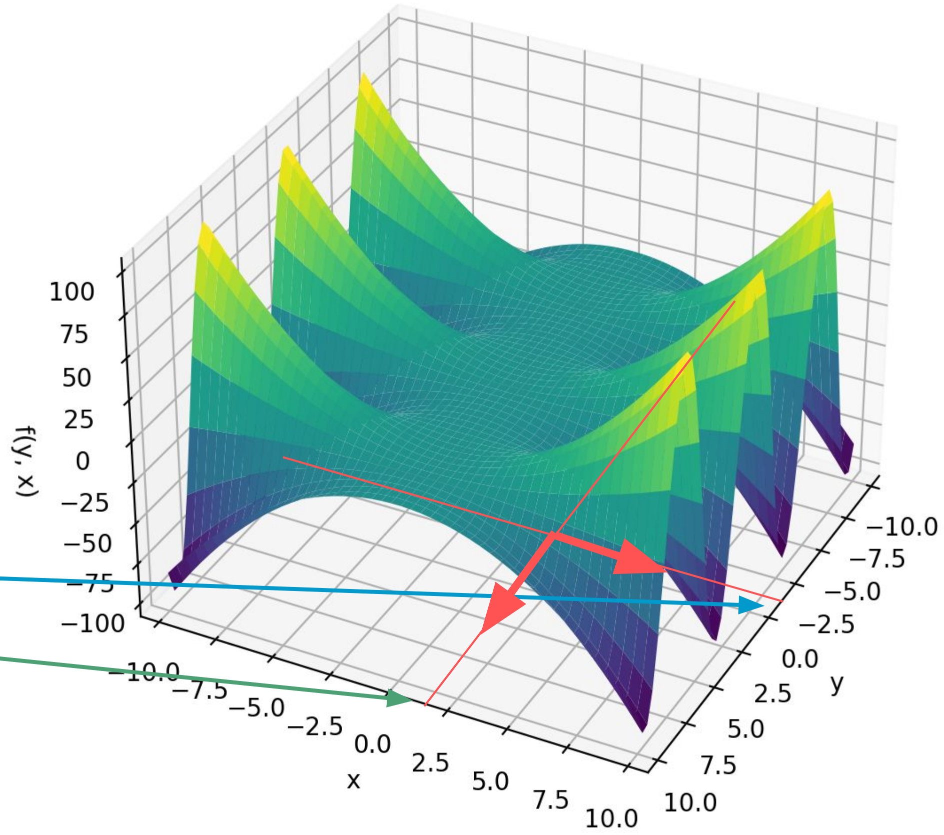
$$\nabla f(1.5,-1) = \begin{bmatrix} 1.62 \\ 1.89 \end{bmatrix}$$



Gradiente

- A primeira componente representa o quanto f aumenta em proporção ao aumento em x

$$\nabla f(\boxed{1.5}, \boxed{-1}) = \begin{bmatrix} 1.62 \\ 1.89 \end{bmatrix}$$

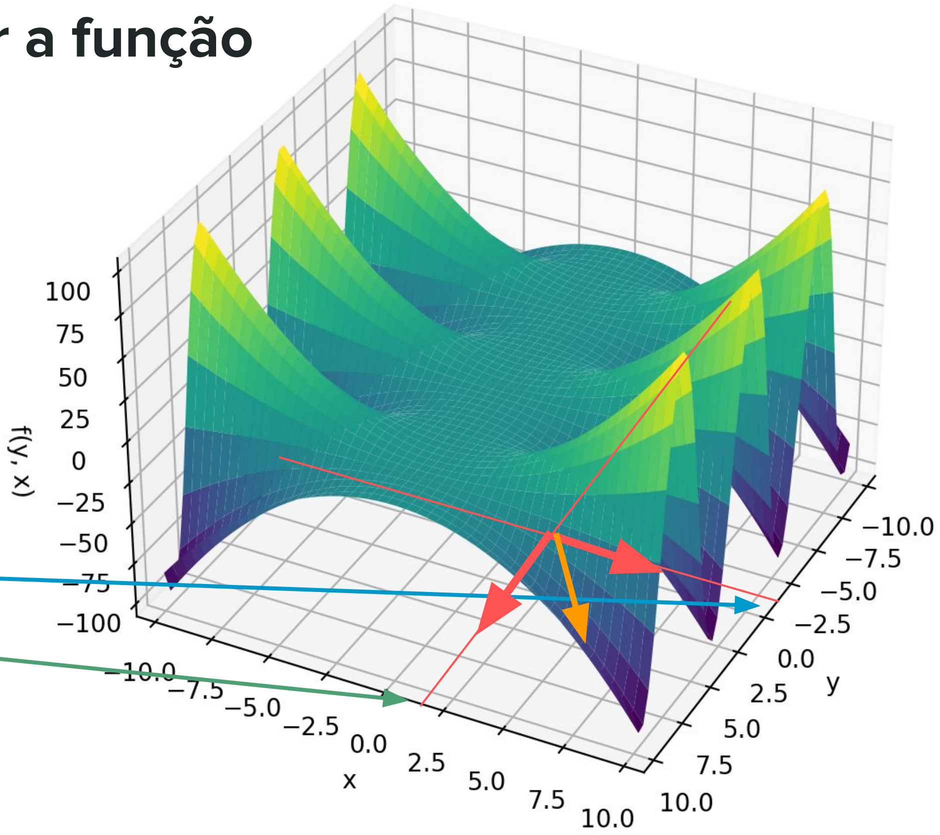


Gradiente

O vetor gradiente vai representar uma direção na qual podemos alterar as coordenadas da entrada para maximizar a função

- A primeira componente representa o quanto f aumenta em proporção ao aumento em x

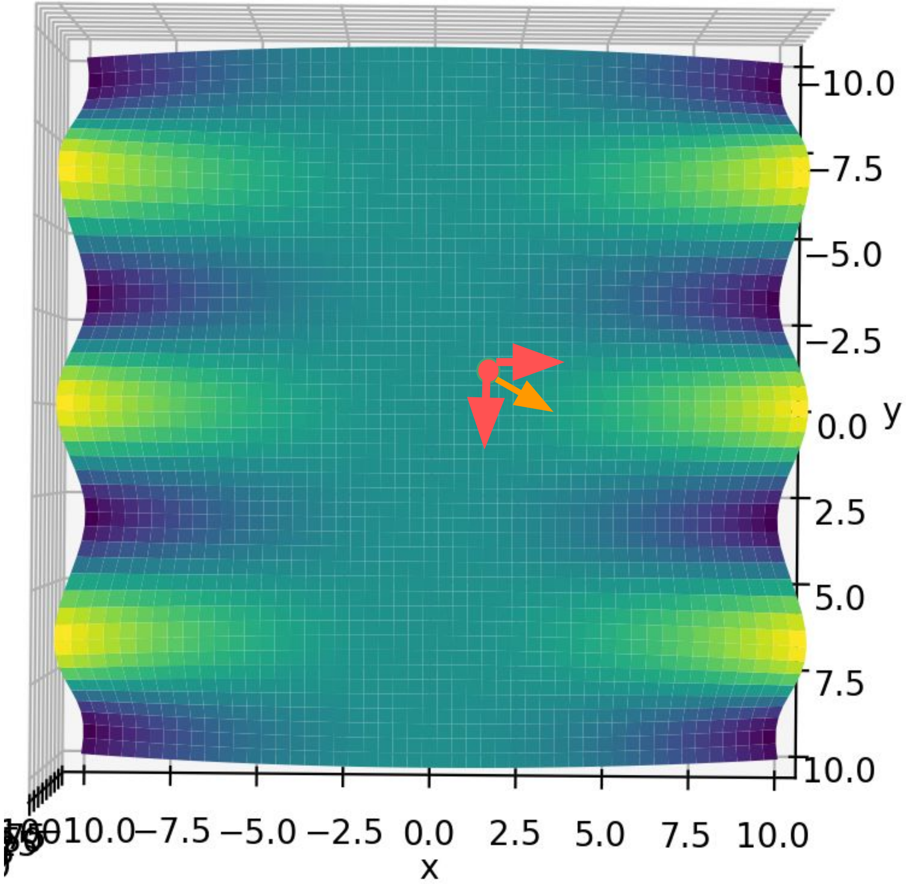
$$\nabla f(\boxed{1.5}, \boxed{-1}) = \begin{bmatrix} 1.62 \\ 1.89 \end{bmatrix}$$

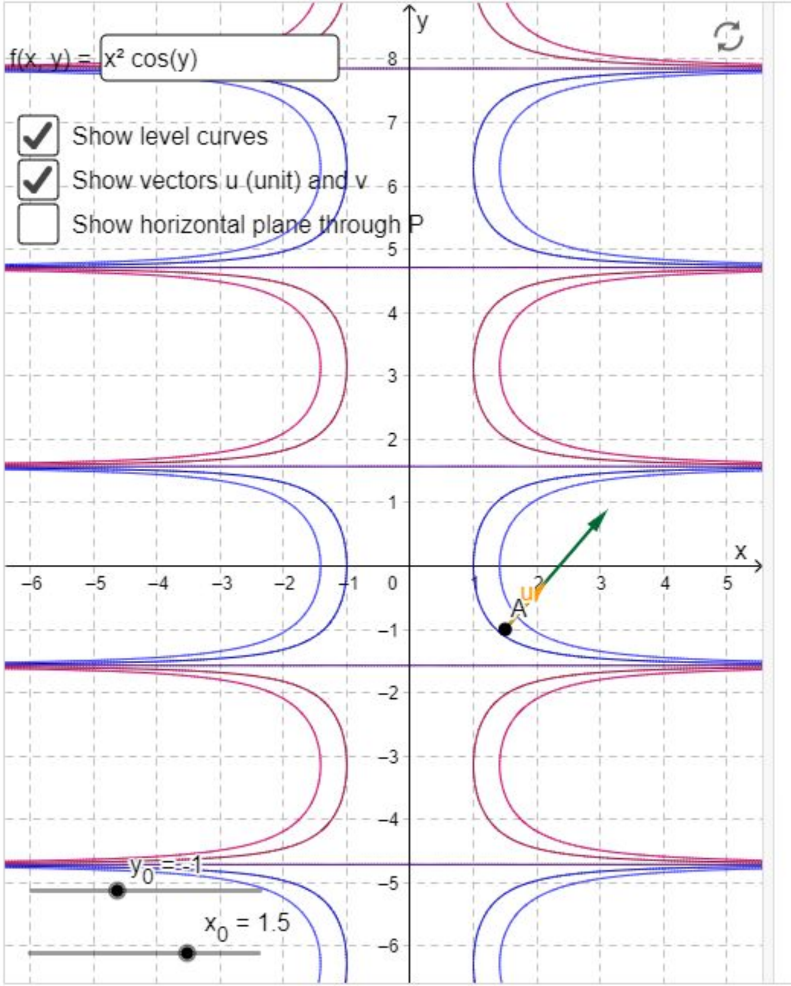


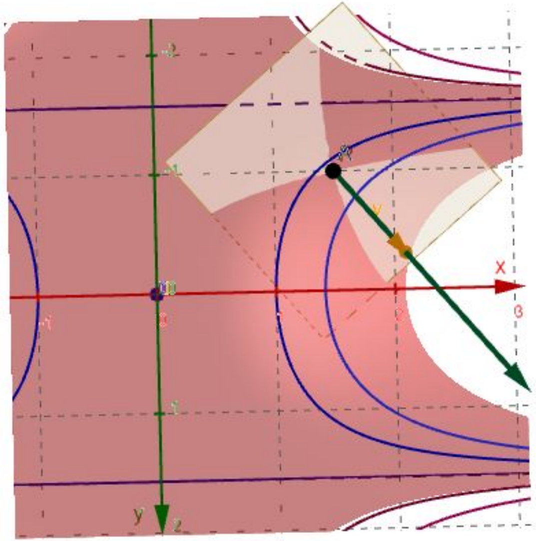
Gradiente

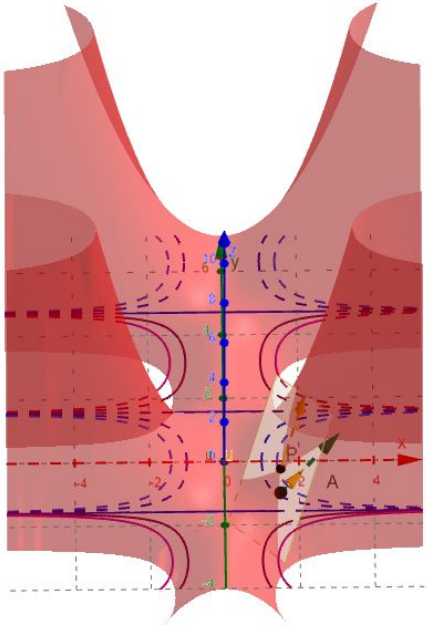
- A primeira componente representa o quanto f aumenta em proporção ao aumento em x

$$\nabla f(1.5,-1) = \begin{bmatrix} 1.62 \\ 1.89 \end{bmatrix}$$









https://www.geogebra.org/m/sWsGNs86

Gradiente

- **O vetor gradiente indica em qual direção deve-se ajustar os parâmetros de entrada para maximizar a função** f

Gradiente

- Para encontrar o **máximo** de uma função:
- Considere x o vetor das entradas $x = [x1, x2, x3, \ldots]$ e $f(x)$
- Considere também β como um número bastante pequeno
- Podemos ajustar as entradas da seguinte forma:

$$x_{t+1} = x_t + \beta \nabla f(x_t)$$

O Algoritmo de Descida de Gradiente

$$x_{t+1} = x_t + \beta \nabla f(x_t)$$

- Assim, podemos atualizar as componentes do vetor x_t de maneira proporcional na direção gradiente
- Utilizando ainda incrementos pequenos, ajustado por β, teremos que a saída da função com x_{t+1} será igual ou superior a saída da função para as entradas anteriores (x_t)

Descida de Gradiente

O Algoritmo de Descida de Gradiente

- Algoritmo muito usado em cálculo numérico
- Base de vários algoritmos de **Aprendizagem de Máquina,** por exemplo, **Redes Neurais**
- A ideia é encontrar o valor **mínimo** de uma função, seguindo a direção do gradiente
- É necessário que a função seja computável e diferenciável no ponto analisado

O Algoritmo de Descida de Gradiente

- Para realizar a descida do gradiente, basta ajustar na direção contrária:

$$x_{t+1} = x_t - \beta\nabla(x_t)$$

O Algoritmo de Descida de Gradiente

- Para realizar a descida do gradiente, basta ajustar na direção contrária:

$$x_{t+1} = x_t - \beta \nabla (x_t)$$

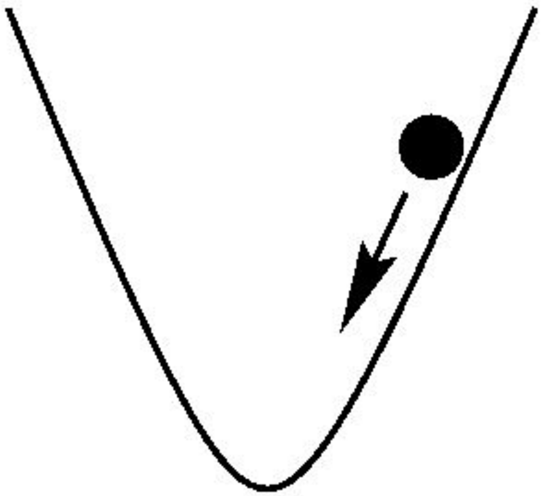
Em aprendizagem de máquina, essa é **taxa de aprendizado**

Taxa de Aprendizado

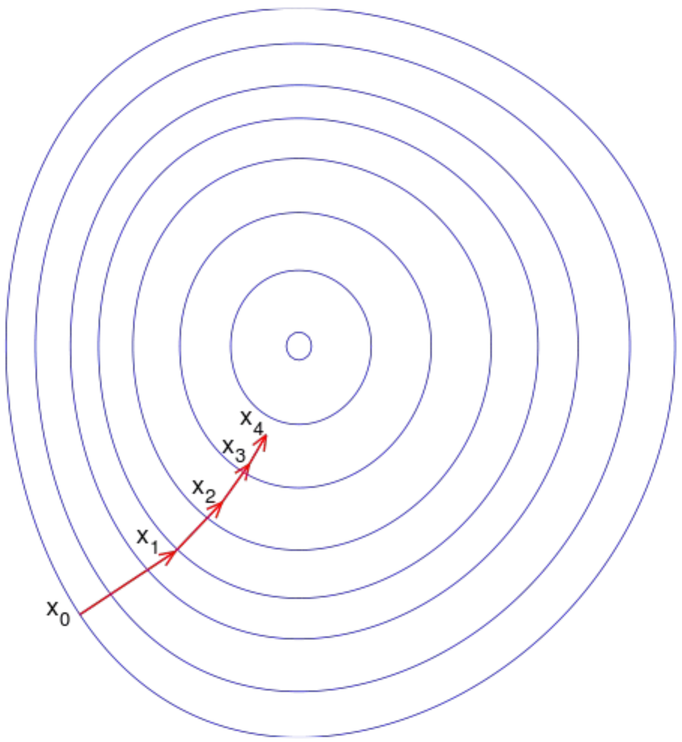
- O parâmetro β serve para diminuir o passo, onde $0 \leq \beta \leq 1$

Ideia central

- Se pudermos computar $f(x)$ e df/dx para qualquer valor de x, podemos sempre seguir o gradiente na direção do valor zero.

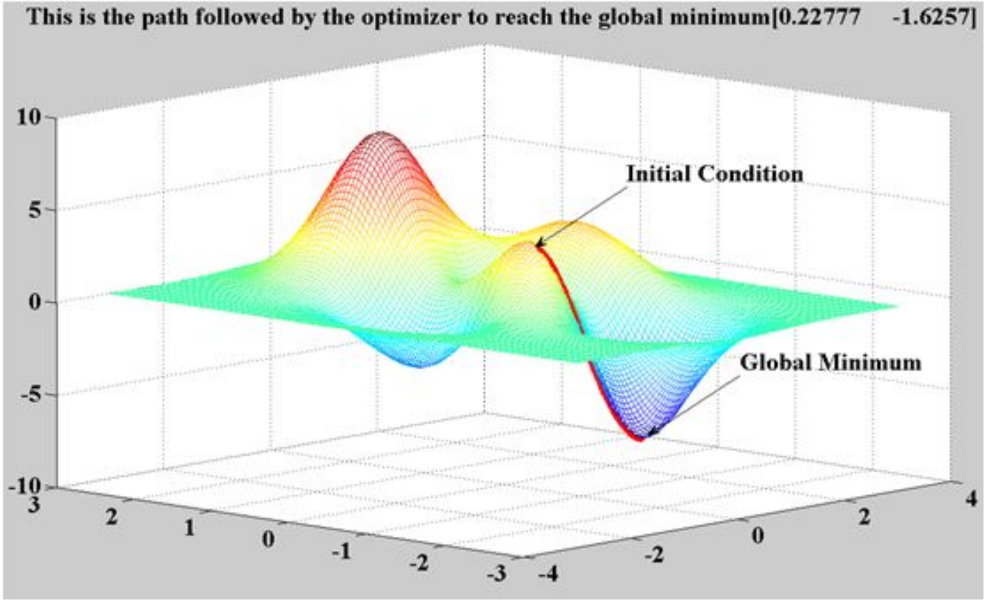


Descida de Gradiente

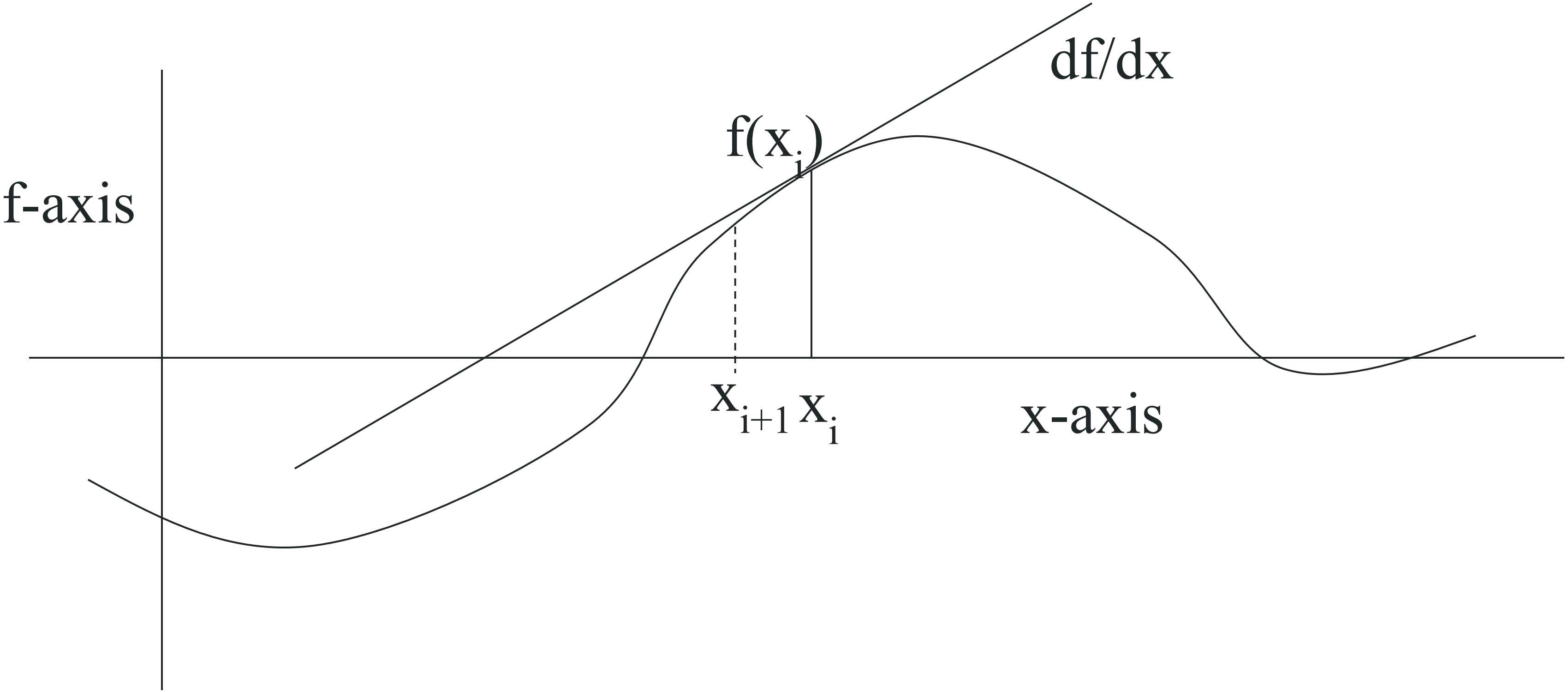


Ideia central

- Se pudermos computar *f(x)* e *df/dx* para qualquer valor de *x*, podemos sempre seguir o gradiente na direção do valor zero



Descida de Gradiente



Algoritmo de Descida de Gradiente

$x_0 = \text{valor inicial}$

$f_0 = f(x_0)$ // avalie f em x_0

while $(f'_n \neq 0)$ {

$s_i = \dfrac{df}{dx}(x_i)$ // compute inclinação

$x_{i+1} = x_i - \beta \cdot s_i$ // ande em x

$f'_{i+1} = f'(x_{i+1})$ // avalie f no novo x_{i+1}

}

MÉTODOS NUMÉRICOS: INTEGRAÇÃO POR MONTE CARLO

Métodos de Monte Carlo

- Os **Métodos de Monte Carlo** são uma classe amplamente utilizada de algoritmos computacionais para simular o comportamento de vários sistemas físicos e matemáticos
- São métodos estocásticos, geralmente usando números aleatórios - em oposição aos algoritmos determinísticos
- Por causa das requeridas iterações e do grande número de cálculos envolvidos, Monte Carlo requer grande capacidade computacional

Monte Carlo ?!

(Mônaco)

Métodos de Monte Carlo

- Monte Carlo é um dos 10 distritos do Principado de Mônaco
- Estância luxuosa conhecida pelo seu glamour, praias, cassinos e bares

Métodos de Monte Carlo

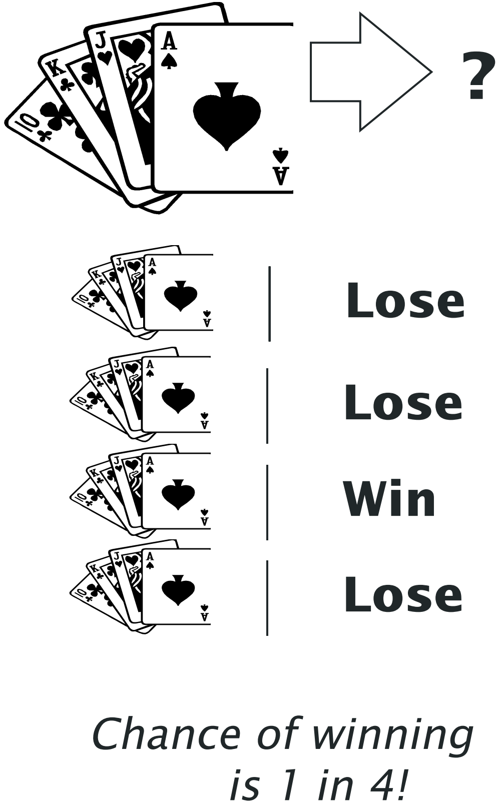
- **Casino de Monte Carlo** é um complexo de jogos e entretenimento cujo projeto é fruto do trabalho dos melhores arquitetos e artistas do século XIX situado com frente ao Mediterrâneo

Métodos de Monte Carlo

- **Método de Monte Carlo (MMC)** é qualquer método estatístico que se baseia em amostragens aleatórias massivas para obter resultados numéricos
- Repetindo sucessivas simulações um elevado número de vezes, para calcular probabilidades, tal como se, de fato, se registrassem os resultados reais em jogos de

Monte Carlo

- Considere o jogo de paciência: qual é a chance de ganhar com um baralho bem embaralhado?
- Difícil de calcular analiticamente porque ganhar ou perder depende de um procedimento complexo de reorganização das cartas
- **Por que não apenas jogar algumas mãos e ver empiricamente quantas de fato ganham?**
- Genericamente, pode aproximar uma função de densidade de probabilidade usando apenas amostras dessa densidade



Integração por Monte Carlo

- O Método de Monte Carlo usa o processo de amostragem aleatória para aproximar valores que estão muito próximos da solução real da integral
- Para integrar uma função complexa em um domínio W, a integração de Monte Carlo cria pontos aleatórios em um domínio simples V, que inclui o domínio W, verifica se cada ponto está fora ou dentro do domínio W e cria uma relação entre o total de pontos criados e o total de pontos que ficaram dentro de W

Integração por Monte Carlo

- Desta maneira, é possível calcular a área ou volume de um objeto complexo

Integração por Monte Carlo

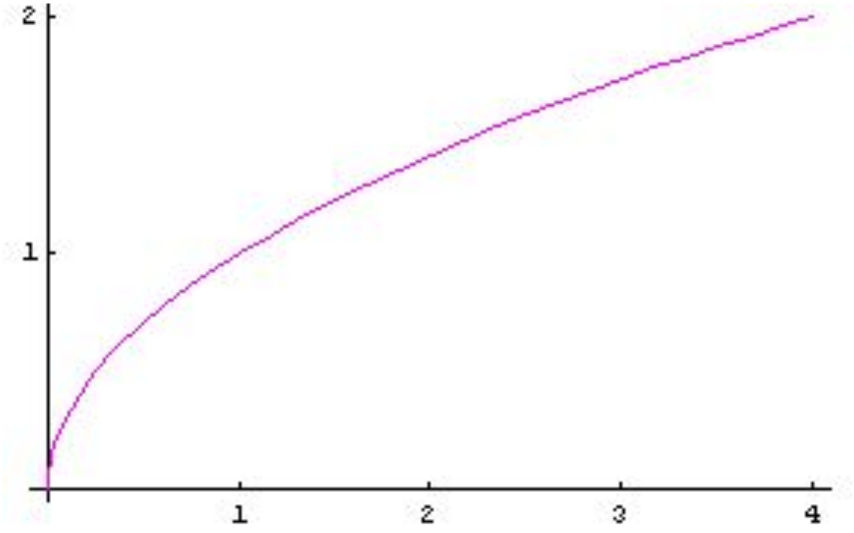
- A integral definida aproximada é obtida pela somatória do resultado da função com vários x aleatórios, dividido pelo número total de pontos x utilizados

$$(b-a)\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i) \approx \int_a^b f(x)\,dx$$

Exemplo 1

- Calcule a integral

$$\int_0^4 \sqrt{x}dx$$



- Utilizando 10 pontos aleatórios

Approximation for the integral

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f[x_i])$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*\frac{1}{10}\sum_{i=1}^{10} f[x_i]$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*\hat{f}$$

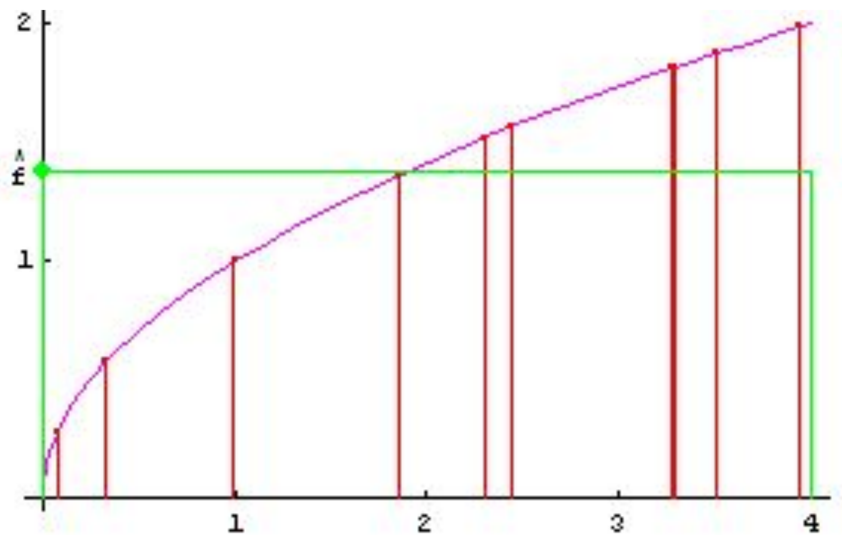
$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (4 - 0)*(1.37637)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (4)*(1.37637)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx 5.5055$$

The 'error estimate' $\approx$ 0.699126

Actual |Area-approx| $\approx$ 0.172166



- Utilizando 100 pontos aleatórios

Approximation for the integral

$$\int_0^4 (\sqrt{x})\,dx \approx (b-a)*(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f[x_i])$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})\,dx \approx (b-a)*\frac{1}{100}\sum_{i=1}^{100} f[x_i]$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})\,dx \approx (b-a)*\hat{f}$$

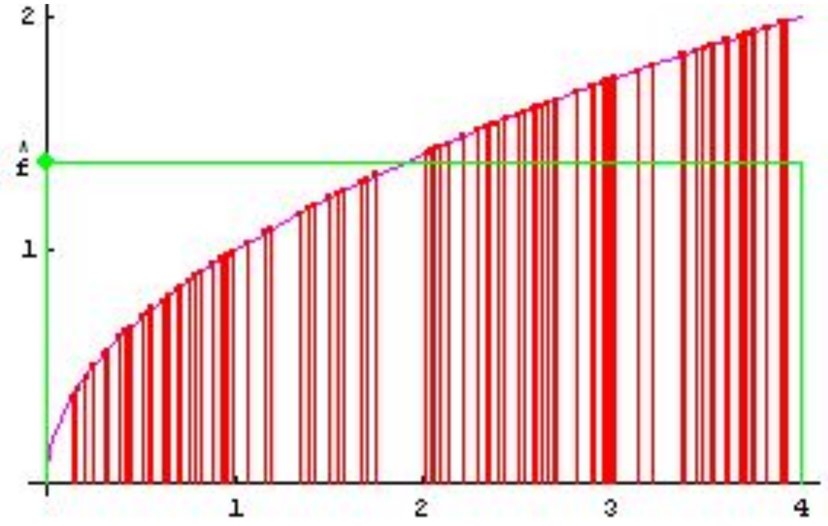
$$\int_0^4 (\sqrt{x})\,dx \approx (4 - 0)*(1.37374)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})\,dx \approx (4)*(1.37374)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})\,dx \approx 5.49494$$

The 'error estimate' $\approx$ 0.184606

Actual |Area-approx| $\approx$ 0.16161



- Utilizando 1000 pontos aleatórios

Approximation for the integral

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f[x_i])$$

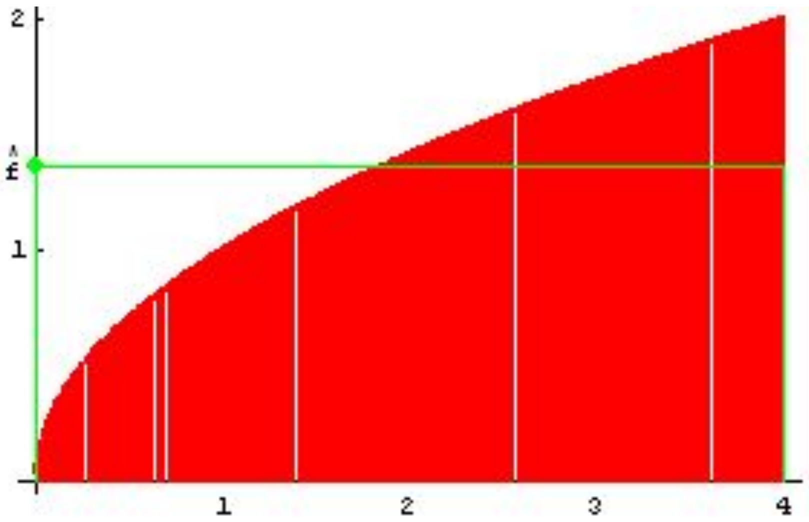
$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*\frac{1}{1000}\sum_{i=1}^{1000} f[x_i]$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*\hat{f}$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (4 - 0)*(1.35962)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (4)*(1.35962)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx 5.43848$$



The 'error estimate' $\approx$ 0.0587627

Actual |Area-approx| $\approx$ 0.105151

- Utilizando 1000 pontos aleatórios

Approximation for the integral

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f[x_i])$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*\frac{1}{10000}\sum_{i=1}^{10000} f[x_i]$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (b-a)*\hat{f}$$

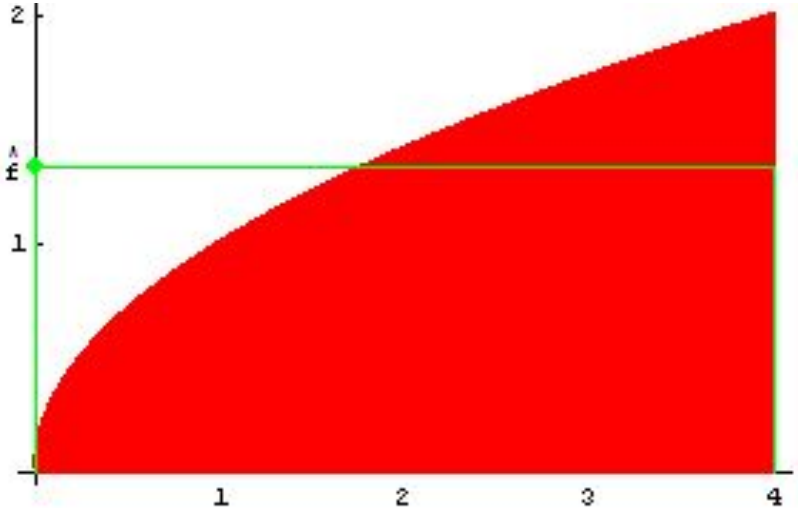
$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (4-0)*(1.33563)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx (4)*(1.33563)$$

$$\int_0^4 (\sqrt{x})dx \approx 5.34253$$

The 'error estimate' $\approx$ 0.0188432

Actual |Area-approx| $\approx$ 0.00919347



Integração por Monte Carlo

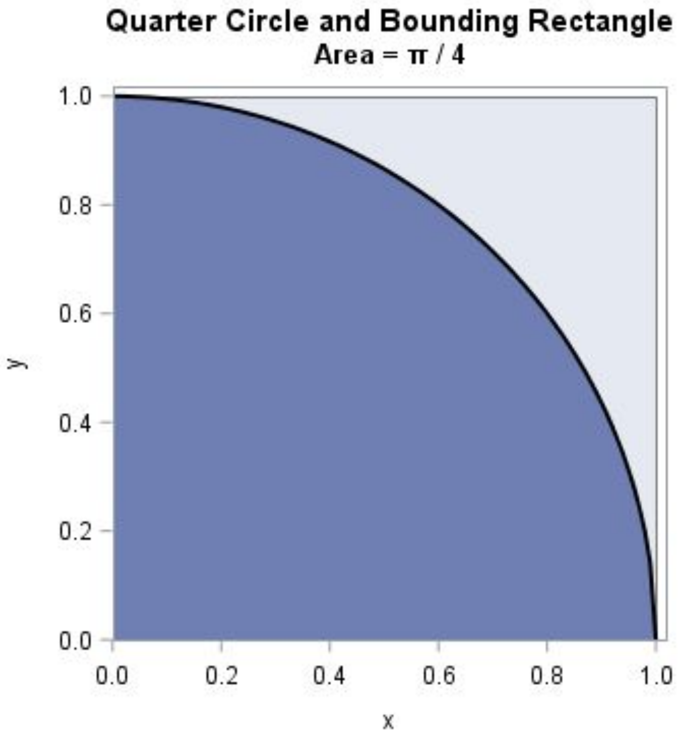
$$\int f dV \approx V \cdot \langle f \rangle \qquad e \qquad estimativa\_de\_erro = V \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}}$$

$$onde:$$

$$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f(x_i) \qquad e \qquad \langle f^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f^2(x_i)$$

Exemplo 2: cálculo de π

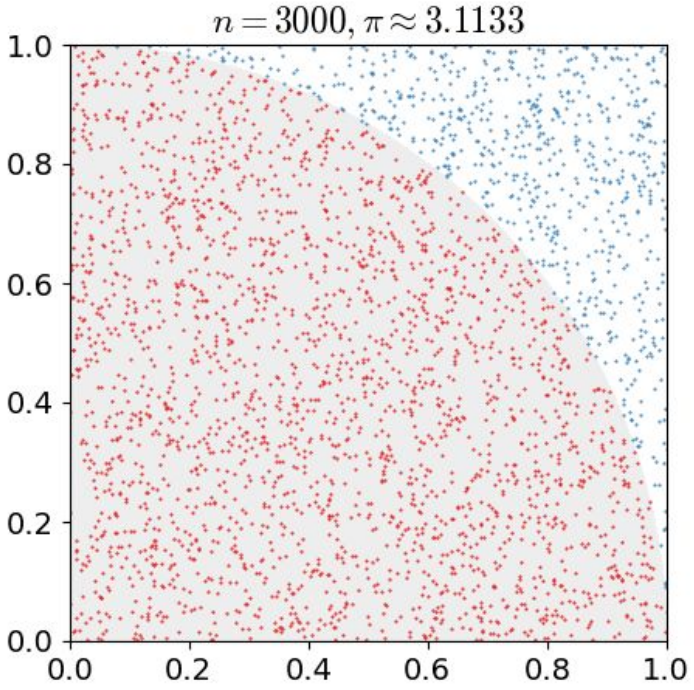
- Um exemplo clássico de Integração de Monte Carlo é a estimativa do valor de
- Podemos considerar um setor circular inscrito em um quadrado unitário
- Dado que a razão de suas áreas é $\pi/4$, o valor de π pode ser aproximado usando um método de Monte Carlo



Exemplo 2: cálculo de π

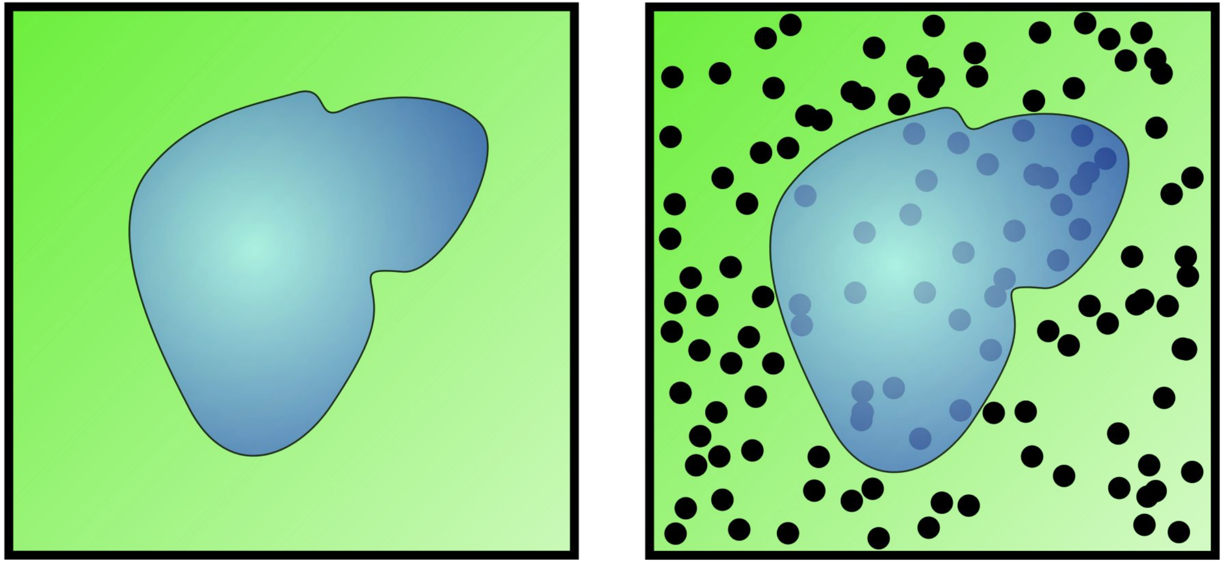
Seguindo o Método de Monte Carlo:

- Distribuir uniformemente um determinado número de pontos sobre o quadrado
- Contar o número de pontos dentro do quadrante, ou seja, com uma distância da origem menor que 1
- A razão entre a contagem interna e a contagem total da amostra é uma estimativa da razão entre as duas áreas, $\pi/4$
- Então, multiplicamos o resultado por 4 para estimar π



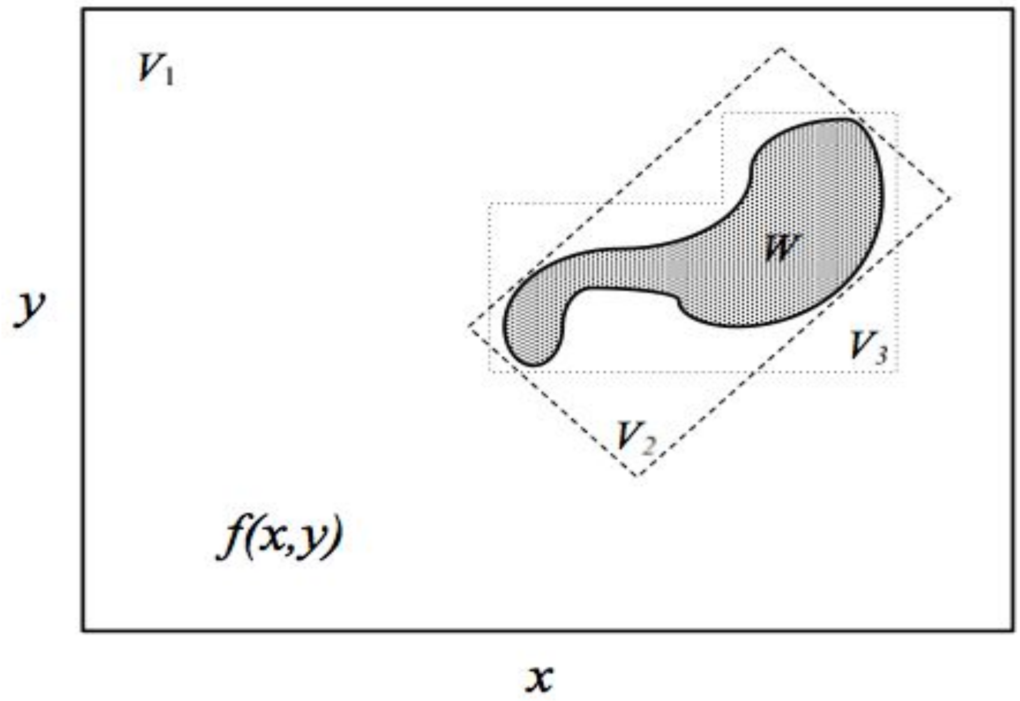
Exemplo

- Aplicação do método de Monte Carlo para determinar a área de um lago.



Fonte: *https://pt.wikipedia.org/wiki/M%C3%A9todo_de_Monte_Carlo*

Integração por Monte Carlo
Como escolher o V?



ENTREGA

Exercício 1

- Use o método de Descida de Gradiente para encontrar o mínimo das seguintes funções:
  a) $f(x) = x^2$, sendo $x_0 = 2$
  b) $f(x) = x^3 - 2x^2 + 2$, sendo $x_0 = 2$
- Verifique o que acontece mudando a taxa de aprendizado de 0.1 até 1.0

Exercício 2

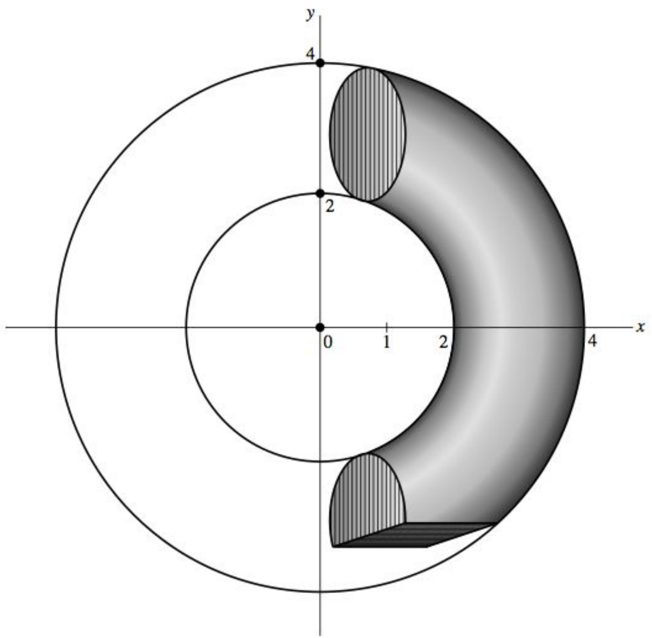
Calcule a solução das seguintes integrais:

a) $$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2}dx$$

b) $$\int_0^1 \sqrt{x+\sqrt{x}}\,dx$$

Exercício 3

a) Calcule a integral de volume do seguinte objeto:



Exercício 3

- O objeto é a interseção de ***um toroide e um cubo***, dado pelas seguintes condições:

$$z^2 + \left(\sqrt{x^2 + y^2} - 3\right)^2 \leqslant 1$$

define o toroide

$$x \geqslant 1$$

$$y \geqslant -3$$

Exercício 3

b) Imaginando que a densidade do material é 1, calcule o peso do objeto

c) Calcule também o centro de massa do objeto, dado por:

$$\int x\rho \, dx \, dy \, dz \qquad \int y\rho \, dx \, dy \, dz \qquad \int z\rho \, dx \, dy \, dz$$

Exercício 3

- Artigo (resumo) sobre o problema e sobre uma possível solução:
  - Integração por Monte Carlo: Estudo do Método Aplicado nos Cálculos de Volume e Centro de Massa de um Toroide Parcial