Métodos Computacionais B

Agenor Hentz[1] Leonardo Brunnet[1] Heitor Fernandes[1]

[1]Instituto de Física, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil

Semestre 2016-1

Área 3

1. **Números Aleatórios e Método de Monte Carlo**
2. **Sequências de Números Aleatórios**
   - Características de Geradores de Números Aleatórios
   - Geradores Linear de Números Aleatórios Congruentes
   - Método de Schrage
3. **Histogramas e a Densidade de Probabilidade**
   - Histogramas
   - Densidade de Probabilidade
   - Relação entre histogramas e FDPs
   - Gerando números aleatórios em C

Números Aleatórios e Método de Monte Carlo

Como vimos anteriormente, mesmo sistemas dinâmicos completamente determinísticos podem apresentar comportamento caótico, onde dois sistemas diferentes cujo estado inicial sejam muito parecidos, exibem comportamento cada vez mais descorrelacionado, de forma que após um certo intervalo de tempo os dois sistemas apresentam comportamentos completamente diferentes. Em situações reais na natureza, o número de diferentes variáveis que influenciam o comportamento dinâmico de sistemas, mesmo os mais simples, é imenso. Caso a influência externa que age sobre um sistema dinâmico seja importante o suficiente a ponto de modificar o comportamento do sistema e, além disso, caso esta influência externa tenha carácter estocástico, o resultado do comportamento do sistema dinâmico pode chegar a ser completamente aleatório. Um exemplo simples é o ato de jogar uma moeda e verificar se a face que fica voltada para cima é cara ou coroa. Poderíamos, a princípio, imaginar que caso se conhecessem todas as forças que agem sobre a moeda no momento do lançamento, seria possível se conhecer o resultado de determinada jogada. Entretanto, o atrito com o ar, as forças que agem sobre a moeda no momento que a mesma toca o solo, as variações mínimas na força do dedo que dá o empurrão na moeda, enfim todos estes efeitos combinamos fazem com que a probabilidade de que tenhamos cara ou coroa seja, respectivamente, de 50% e 50% ou algo muito próximo disto dependendo das características físicas da moeda.

Sequências de Números Aleatórios

Uma sequência de números $x_1, x_2, ...$ é dita aleatória ou randômica quando duas propriedades básicas são observadas: uniformidade e independência.
A uniformidade indica que os números da sequência são obtidos através de uma função de probabilidade uniforme $f(x)$:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & x_{min} \leq x \leq x_{max} \\ 0, & \text{outro valor,} \end{cases}$$

entre os valores limites da série x_{min} e x_{max}; como exemplo típico podemos considerar números aleatórios reais gerados entre 0 e 1.
A propriedade de independência ocorre quando a sequência de números é completamente aleatória, ou seja, um dado valor x_i pode ser escolhido com igual probabilidade dentro do intervalo x_{min} e x_{max} independente dos valores anteriores da série $x_{i-1},\ x_{i-2},\ ...$

Características de Geradores de Números Aleatórios

O método mais simples de gerar uma sequência de números aleatórios é através do chamado *gerador congruente*. Neste tipo de algoritmo, determinado número aleatório é gerado através de uma função cujos argumentos são os últimos números aleatórios gerados anteriormente:

$$x_{i+1} = f(x_i, x_{i-1}, ...). \tag{1}$$

Por este motivo, costuma-se dizer que os números aleatórios gerados a partir de um gerador congruente são, na verdade, *pseudo-aleatórios*. Alguém que saiba o algoritmo utilizado na geração dos números aleatórios poderá, conhecendo também a série de números gerados anteriormente, conhecer também os próximos valores da série. Entretanto, esta é uma característica benéfica em determinados contextos, por exemplo na simulação computacional que utiliza números aleatórios na atribuição de variáveis específicas e onde deseja-se repetir a simulação e verificar o resultado de pequenas modificações quando a mesma série de números é utilizada nas duas versões. Caso as duas séries utilizadas fossem diferentes seria praticamente impossível de se verificar se os resultados observados na simulação são causados pelas mudanças feitas no algoritmo ou pelo fato de se utilizar outra série de números aleatórios.

Características de Geradores de Números Aleatórios

Uma característica facilmente verificável é que, uma vez que o i-ésimo número da sequência depende exclusivamente do números gerados anteriormente - e muitas vezes depende somente do $(i-1)$-ésimo número gerado -, teremos a partir de determinado ponto a repetição de, pelo menos, parte da série gerada. Dito de outra maneira, embora possamos gerar uma série infinita de números aleatórios segundo a equação (2), a série terá repetição cíclica de comprimento C. A distância $L = i - 0$, entre os números x_i e x_0, compreende o que se chama de *cauda*, que é a região transiente da série que ocorre antes que ocorra o primeiro número que caracteriza o início dos ciclos periódicos. Assim, chama-se de *período* de uma série aleatória a distância $L + C$.

$$\{X\} = \overbrace{3,\ 5,\ 2,}^{\text{cauda } L=3}\ \underbrace{1,\ 9,\ 8,\ 7,}_{\text{regiao cíclica } C=4}\ \ 1,\ 9,\ 8,\ 7,\ 1,\ \ldots$$

Figura: Sequência de números aleatórios entre 1 e 9, mostrando a região da cauda, a região cíclica. O período desta sequência é $L + C = 7$.

Características de Geradores de Números Aleatórios

Existem características desejáveis aos geradores utilizados em computação:

1. o gerador deve ser simples o suficiente para que seu algoritmo possa ser facilmente implementado e não tome muito tempo computacional para que possa ser executado, uma vez que, dependendo da aplicação, milhões ou mais números aleatórios deverão ser gerados;
2. o período do gerador deve ser grande o suficiente para que dentro de determinada aplicação nunca se atinja o fim do período. Caso isto ocorra, costuma-se considerar que o gerador perde sua utilidade para esta dada aplicação. Isto ocorre pois os números gerados serão repetitivos, fazendo com que ocorram padrões na simulação, podendo influenciar resultados e gerando falsos resultados;
3. os valores sucessivos da sequência devem ser independentes e distribuídos de maneira uniforme.

Geradores Linear de Números Aleatórios Congruentes

No caso mais simples, a função (1) depende somente do último número aleatório gerado (x_i). O exemplo mais utilizado deste tipo de função é:

$$x_{i+1} = (a\, x_i + b) \bmod m, \tag{2}$$

onde a, b e m são números naturais e (w mod z) é a operação que retorna o resto da divisão entre os números w e z.
Pode-se verificar facilmente que os números da sequência gerada são inteiros e dados pela equação (2), distribuídos no intervalo [0; m-1].
Para que os números aleatórios gerados estejam no intervalo [0; 1], basta que os números gerados sejam divididos por m.

Geradores Linear de Números Aleatórios Congruentes

Verifica-se que do ponto de vista de eficiência computacional de um gerador de números aleatórios do tipo congruente linear devemos observar as seguintes recomendações:

- o módulo de m deve ser grande, uma vez que quanto maior m, maior será o possível período do gerador;
- para que a computação de (mod m) seja eficiente, m deve ser uma potência de 2, ou seja, $m = 2^k$, onde k é um número natural;
- se b for diferente de zero, o máximo período possível será obtido se, e somente se:
  - todo número inteiro que é fator de m, também é fator de $a - 1$;
  - a-1 é múltiplo de 4, se m é múltiplo de 4;

Todas estas exigências são obtidas no caso em que $a = 2^k$, $a = 4\,c + 1$ e $b = d$, onde k e c são números inteiros positivos e d é um número ímpar.

Geradores Linear de Números Aleatórios Congruentes

Há um problema grave relacionado com qualquer gerador de números aleatórios congruentes lineares, uma vez que há uma forte tendência de correlação entre dois valores sorteados consecutivamente. Esta correlação pode ser observada se fizermos um gráfico onde graficamos no eixo das ordenadas o i-ésimo número aleatório sorteado e no eixo das absissas colocarmos o $(i+1)$-ésimo número aleatório sorteado. Este tipo de gráfico produz um padrão de linhas paralelas que depende dos valores de a, b e m escolhidos: quanto mais compacta for a malha de linhas melhor é o gerador de números obtido.

Outro problema que imediatamente fica evidente é o fato de que, dependendo da combinação de valores de a e x_i, a multiplicação destes números na equação (2) poderá ser maior do que valor máximo do tipo de variável utilizada, o que seguramente pode causar problemas na distribuição dos números aleatórios utilizadas. Este problema é evitado na implementação do algoritmo de Schrage, descrito abaixo.

Método de Schrage

O método de Schrage consiste em substituir a expressão (2), com b = 0, por:

$$(ax_i) \bmod m = \begin{cases} a(x_i \bmod q) - r\,\mathrm{int}(\frac{x_i}{q}), & \text{se } \geq 0 \\ a(x_i \bmod q) - r\,\mathrm{int}(\frac{x_i}{q}) + m, & \text{senao,} \end{cases} \quad (3)$$

usando para isto o fato de que m pode ser fatorado da seguinte maneira:

$$m = a\,q + r,$$

onde $r = m \bmod a$ e $q = \mathrm{int}(m/a)$. O método clássico de Schrage utiliza as constantes $a = 16807$, $m = 2147483647$, $q = 127773$ e $r = 2836$. Este gerador possui período de $2^{31} - 2\ \sim 2.1 \times 10^9$. Há, entretanto, um problema com este gerador no fato de que uma vez que um valor pequeno é previamente sorteado, o próximo número aleatório terá valor menor do que a média.

Histogramas e a Densidade de Probabilidade

Considere que estamos medindo uma propriedade qualquer X de um conjunto de objetos como, por exemplo, a velocidade dos carros que atravessam determinado cruzamento. Suponha que N seja o número total de medidas realizadas. Uma forma de organizar este conjunto de dados é através da criação de um histograma h. Para tal fim, definimos inicialmente os extremos do histograma, ou seja, o valor mínimo X_{min} e máximo X_{max} da propriedade medida (por exemplo, dois valores que sejam, respectivamente, menor e maior do que as velocidades mínimas e máximas medidas). Em seguida, definimos a quantidade M de intervalos que constituirão o histograma. Agora basta distribuir os N valores medidos da variável X nos M intervalos do histograma. Em outras palavras, para o i-ésimo intervalo do histograma, $h(i)$, basta contar quantos valores do conjunto de medidas estão entre X_i e X_{i+1}, onde:

$$X_i = X_{min} + i\ \Delta x,$$

e

$$X_{i+1} = X_{min} + (i+1)\ \Delta x,$$

com Δx igual a:

$$\Delta x = \frac{x_{max} - x_{min}}{M}.$$

Histogramas e a Densidade de Probabilidade

A probabilidade $P(X_i)$ de que uma das N medidas em particular, escolhida ao acaso, esteja no i-ésimo intervalo $h(i)$ é dada por:

$$P(X_i) = \frac{h(i)}{N} \tag{4}$$

O valor médio $< X >$ das variáveis medidas pode ser facilmente encontrado:

$$< X >= \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} X_j,$$

onde a soma é realizada sobre todas as N partículas. Entretanto, a mesma média poderia ser igualmente realizada sobre todos os M intervalos do histograma h:

$$< X >= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{M} h(i)\, X_i. \tag{5}$$

uma vez que pode ser facilmente visto que:

$$\sum_{j=1}^{N} X_j = \sum_{i=1}^{M} h(i)\; X_i.$$

Mesmo correndo o risco de sermos repetitivos, vale a pena lembrar que o somatório no lado esquerdo da equação acima é realizado sobre todas as N medidas, enquanto que o somatório no lado direito é realizado sobre todos os M intervalos do histograma.

Histogramas e a Densidade de Probabilidade

A equação (5) pode ser re-escrita, usando-se a definição (4), como:

$$< X >= \sum_{i=1}^{M} \frac{h(i)}{N} X_i = \sum_{i=1}^{M} P(X_i)\, X_i. \quad (6)$$

De maneira análoga, podemos verificar facilmente que:

$$< X^2 > = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} X_j^2 = \sum_{i=1}^{M} P(X_i)\, X_i^2. \quad (7)$$

De maneira geral temos, para um dado valor k:

$$< X^k >= \sum_{i=1}^{M} P(X_i)\, X_i^k. \quad (8)$$

Neste caso, diz-se que $< X^k >$ representa o k-ésimo **momento** da distribuição para os valores de X.

Densidade de Probabilidade

Considere uma função $f(x)$ com a seguinte característica:

$$\int_{x_0}^{x_f} f(x)\, dx = 1 \tag{9}$$

e sob a condição de que

$$f(x) \geq 0, \quad \text{para} \;\; x_0 \leq x \leq x_f,$$

onde x_0 e x_f são os pontos iniciais e finais da integração. A partir desta definição, tem-se que a probabilidade $P(x)$ de f ser encontrada dentro do intervalo infinitesimal $[x;\, x+dx]$ é dada por:

$$P(x) = f(x)\, dx,$$

para $x_0 \leq x \leq x_f$. Como consequência, a probabilidade $P([a;\, b])$ de f estar entre dois valores quaisquer a e b é dada por:

$$P([a;\, b]) = \int_a^b f(x)\, dx \tag{10}$$

para $x_0 \leq (a, b) \leq x_f$ e $a \leq b$. Uma função f com as características acima recebe o nome de *função densidade de probabilidade* (FDP).

Densidade de Probabilidade

Considere agora uma dada função unidimensional bem comportada $g(x)$, com

$$g(x) \geq 0, \quad \text{para} \;\; x_0 \leq x \leq x_f.$$

Esta função pode ser transformada em uma função densidade de probabilidade $fdp(x)$ entre os dois limites x_0 e x_f, através da equação:

$$fdp(x) = \frac{g(x)}{\mathcal{N}}, \tag{11}$$

onde a normalização $\mathcal{N}$ é dada por:

$$\mathcal{N} = \int_{x_0}^{x_f} g(x')dx'. \tag{12}$$

Das definições (11) e (12), fica claro que a função $fdp(x)$ obedece à definição (9), sendo consequentemente uma função densidade de probabilidade também.

Densidade de Probabilidade

Adicionalmente, definimos a *função densidade cumulativa* (FDC) $fdc(x)$ como sendo:

$$fdc(x) \equiv \int_{x_0}^{x} fdp(x')\, dx'. \tag{13}$$

Fica claro pela definição acima que para $x_0 \leq x \leq x_f$ temos que $0 \ \leq \ fdc(x) \ \leq \ 1$.

Relação entre histogramas e FDPs

Histogramas e funções densidade de probabilidade são definições que estão intimamente ligadas. Imagine que estamos criando um histograma h a partir de um número N de medidas de determinada propriedade de um grupo numeroso de objetos. Este conjunto de medidas é especificado por $X = \{X_1, X_2, ..., X_N\}$. Considere que esta propriedade medida não é necessariamente a mesma para todos os corpos, mas segue uma distribuição f que pode ser, a princípio, desconhecida do indivíduo que as realiza. Assim, o conjunto $\{X\}$ é uma coleção de números aleatórios que seguem a distribuição f. Podemos construir um histograma h, com M partições, a partir deste conjunto de medidas. A partir da equação (4) podemos ver que a probabilidade $P(X_i)$ de medirmos o valor X_i para este conjunto de N medidas é dado por $h(X_i)/N$. Desde já fica claro que a função $P(X_i)$ obedece às condições necessárias para ser classificada como uma FDP e, em particular, obedece à equação (11). Podemos imaginar o caso limite em que o número de medidas é infinitamente grande, de maneira que $P(X_i)$ ficará cada vez mais semelhante à f. Podemos tomar um segundo caso limite, em conjunto com o primeiro, é considerarmos o número M de divisões do histograma h infinitamente grande. Neste caso, com estas duas condições, podemos, finalmente, considerar que:

$$P(X_i) = \lim_{M,N\to\infty} \frac{h(i)}{N} = f(X_i)\, dx.$$

Relação entre histogramas e FDPs

Assim, temos que a média $< x >$ é dada por:

$$< x >= \int_{x_{min}}^{x_{max}} x f(x)\, dx$$

e, portanto, $< x^k >$, com k sendo um valor inteiro é:

$$< x^k >= \int_{x_{min}}^{x_{max}} x^k f(x)\, dx.$$

Exemplo

Imaginemos que exista em uma sala um número grande de pessoas. A tabela (1) apresenta o número de pessoas que possuem determinada idade:

índice	número de pessoas	idade	Pr(idade)
1	2	15	2/30
2	3	16	3/30
3	5	17	5/30
4	8	18	8/30
5	6	19	6/30
6	4	20	4/30
7	2	21	2/30

Tabela: Tabela contendo o número de pessoas que contém determinada idade em um dado recinto hipotético. A última coluna refere-se à probabilidade uma pessoa qualquer escolhida ao acaso neste recinto de ter a idade especificada na segunda coluna. Esta probabilidade é obtida através da equação 11.

Exemplo

Podemos calcular a idade média ($< idade >$) das pessoas através da sala através das seguintes relações:

$$< idade >= \frac{15+15+16+...+21}{30} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{7} n_i \ \times \ (idade)_i, \tag{14}$$

onde $\mathcal{N}$ é a normalização, que neste caso é o número total de pessoas (30), e n_i é o número de pessoas com idade dada pelo índice i e $(idade)_i$ é a idade dada pelo índice i.

A equação acima pode ser re-escrita como:

$$< idade >= \sum_{i=1}^{7} \frac{n_i}{\mathcal{N}} \ \times \ (idade)_i = \sum_{i=1}^{7} \Pr(idade)_i \ \times \ (idade)_i, \tag{15}$$

onde $\Pr(idade)_i$ é a probabilidade de determinada pessoa ter a idade $(idade)_i$ no recinto acima. A resposta é 18,1 anos.

Exemplo

De forma análoga, caso quiséssemos calcular a idade quadrática média $< idade^2 >$ poderíamos usar:

$$< idade^2 >= \frac{15^2 + 15^2 + 16^2 + ... + 21^2}{30} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{i=1}^{7} n_i \ \times \ (idade)_i^2, \tag{16}$$

que pode ser re-escrito como sendo:

$$< idade^2 >= \sum_{i=1}^{7} \frac{n_i}{\mathcal{N}} \ \times \ (idade)_i^2 = \sum_{i=1}^{7} \Pr(idade)_i \ \times \ (idade)_i^2. \tag{17}$$

O resultado é o valor de 330,1.

Exemplo

Podemos encontrar a dispersão dos valores da idade σ, também conhecido como desvio padrão, através da equação:

$$\sigma = \sqrt{< x^2 > - < x >^2} \tag{18}$$

Para o presente caso:

$$\sigma = \sqrt{< idade^2 > - < idade >^2} = \sqrt{330,1 - 18,1^2} \sim 1,578.$$

Gerando números aleatórios em C

Uma forma fácil de gerar números aleatórios em C é usando a função *drand48()* que está presenta na biblioteca *stdlib.h*. Segue exemplo do uso.

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>

int main (void) {

  int i;

  for(i=0;i<10;i++) {
    printf("%f ",drand48());
  }
  printf("\n");

  return 0;
}
```

Este programa produzirá **sempre** a mesma sequência de números aleatórios.

Gerando números aleatórios em C

A forma de alterar a sequência de números produzidos é alterar a semente (*seed*) do gerador. Isto é feito por meio da função *drand48(num_seed)*, onde num_seed é um inteiro. No exemplo a seguir, a função *time(NULL)* é utilizada como seed uma vez que devolve o número de segundo desde 1970. (Deve-se tomar o cuidado de não chamar o programa duas vezes no mesmo segundo: neste caso, duas sequência iguais serão produzidas.)

```c
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>

int main (void) {

  int i;

  srand48(time(NULL));
  for(i=0;i<10;i++) {
    printf("%f ",drand48());
  }
  printf("\n");

  return 0;
}
```

Útil: Guardar qual a semente utilizada. É importante quando precisamos reproduzir os resultados prévios.