

USANDO O MÉTODO DE MONTE CARLO PARA ENCONTRAR RAÍZES DE EQUAÇÕES

Antônio Carlos da Silva Filho (Uni-FACEF)
Fabiano Guasti Lima (USP)

1 INTRODUÇÃO

Um dos principais problemas no cálculo numérico refere-se à procura de raízes de equações. Nestas situações busca-se encontrar os valores de x que satisfazem $f(x) = 0$. Vários métodos têm sido propostos na literatura, como o da bissecção, da secante, de Newton, etc. Este trabalho propõe uma variação dos métodos da bissecção e da secante baseada no “método de Monte Carlo”.

O nome “Método de Monte Carlo” O nome foi dado na segunda guerra mundial, devido à similaridade entre os processos estatísticos e os “jogos de azar”. Os métodos de Monte Carlo são simulações estatísticas que utilizam seqüências de números aleatórios. Podemos localizar as origens da simulação estocástica até uma experiência realizada no século XVIII por Georges Louis Leclerc, Conde de Buffon. Leclerc jogava, aleatoriamente, uma agulha sobre um quadro cheio de linhas paralelas desenhadas nele. A partir de suas observações, ele derivou a probabilidade de que a agulha interceptasse uma linha. Pouco depois, Pierre Simon de Laplace viu neste experimento uma maneira de obter uma estimativa estatística para o número π .

William Sealy Gossett, que trabalhou com o pseudônimo de “*Student*” (e foi quem propôs a distribuição hoje conhecida como “distribuição t de Student”), realizou experimentos de amostragem em Matemática Estatística. Gossett trabalhou com números aleatórios em seus experimentos e, para gerar os números, utilizou o método Top-Hat (rotação de discos). A partir dessa época a quantidade de números aleatórios necessários nos experimentos era cada vez maior. Passou-se a estocar os números em tabelas que eram publicadas para uso dos que delas precisavam. Essa foi uma idéia de L. H. C. Tippett que, em 1927, publicou uma tabela com 40000 dígitos extraídos aleatoriamente de dados do censo americano. Ela foi publicada em

"*Random Sampling Numbers*", Tracts for Computers, nº 15, Cambridge University Press, New York, 1927.

John von Neumann propôs, em 1946, o primeiro algoritmo gerador de números pseudo-aleatórios, tendo-o chamado de "método do meio dos quadrados". O seguinte exemplo será ilustrativo deste algoritmo (BLUM, 1986). Considere um valor inicial qualquer, um número com quatro casas decimais dado, como o número $x_0 = 0,9876$. Eleva-se x_0 ao quadrado, obtendo-se $x_0^2 = 0,97535376$. Forma-se, a seguir, o número x_1 com as quatro casas decimais do meio: $x_1 = 0,5353$. Repete-se em seguida o procedimento, obtendo-se: $x_1^2 = 0,28654609$ e $x_2 = 0,6546$, $x_3 = 0,8501$, $x_4 = 0,2670$, $x_5 = 0,1289$, etc. Constatou-se, porém, uma preponderância de pequenos valores entre os números gerados por este método, levando à elaboração de diversos outros algoritmos. Vários deles estão descritos no livro "Numerical Recipes" (PRESS, 1986) e em vários artigos espalhados pela literatura especializada (EICHENAUER-HERRMANN, 1993, 1995; L'ECUYER, 1990, 1994; TEZUKA, 1995).

O método de solução numérica de problemas que se baseia na simulação usando variáveis aleatórias é conhecido como Método de Monte Carlo. Sua origem data de 1949, com a publicação do artigo "The Monte Carlo method" (METROPOLIS, 1949). A denominação do método provém do nome da cidade do principado de Mônaco, famosa pelo cassino homônimo. O princípio do Método de Monte Carlo já era conhecido antes da publicação do artigo de Metropolis: era utilizado, por exemplo, no tratamento de dados de amostras aleatórias em estatística. Mas a sua ampla aplicação não era viável antes do aparecimento dos computadores eletrônicos (FISHMAN, 1996).

Com o avanço da informática, os cientistas começaram a utilizar o computador para gerar e armazenar números aleatórios, baseados em métodos deterministas como o de Lemer, e as tabelas perderam a sua utilidade.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

Consideremos o seguinte problema matemático: $\xi \in \Re$ é um zero da função $f(x)$ ou raiz da equação $f(x) = 0$ se $f(\xi) = 0$, sendo que os zeros podem ser reais ou complexos. Neste trabalho, estaremos limitados aos zeros reais. Faremos uso do

seguinte teorema: “Sendo $f(x)$ contínua em um intervalo $[a, b]$, se $f(a)f(b) < 0$ então existe pelo menos um ponto $x = \xi$ entre a e b que é zero de $f(x)$ ”. Assim, por exemplo, a função $f(x) = x^3 - 9x + 3$ tem um zero em cada um dos seguintes intervalos: $I_1 = [-5, -3]$, $I_2 = [0, 1]$ e $I_3 = [2, 3]$.

Quando estimamos um valor x_k como sendo o candidato a ser a raiz do problema em questão, precisamos testar se x_k encontra-se suficientemente próximo da raiz exata ξ . Estabelecemos que x_k é *raiz aproximada* com precisão ε se x_k satisfizer : (i) $|x_k - \xi| < \varepsilon$ ou (ii) $|f(x_k)| < \varepsilon$.

A fim de satisfazer a condição (i) acima, procuramos reduzir o intervalo $[a, b]$ de tal modo que $\xi \in [a, b]$ e $b - a < \varepsilon$. Nestas condições, $|x - \xi| < \varepsilon$ sempre que $x \in [a, b]$. Deste modo, *qualquer* $x \in [a, b]$ pode ser tomado como x . A fim de evitar problemas com “looping”, coloca-se um critério de parada, limitando o número de iterações a ser realizado.

No Método da Bisseccção, dada uma função $f(x)$ contínua no intervalo $[a, b]$ onde existe uma raiz única, é possível determinar tal raiz subdividindo sucessivas vezes o intervalo que a contém pelo ponto médio de a e b . Após n iterações, a raiz estará contida no intervalo:

$$[b_n - a_n] = \left(\frac{b_0 - a_0}{2^n} \right)$$

Sendo, então, ξ tal que:

$$|\xi - x_{n+1}| < \left(\frac{b_0 - a_0}{2^{n+1}} \right)$$

No método de Monte Carlo, temos a seguinte variação:

- (i) o primeiro passo é definir uma função, digamos, $f(x)$;

- (ii) o segundo passo consiste em encontrar um intervalo fechado $[a, b]$, contido no domínio da função $f(x)$, com a e b reais, tal que $f(a) \neq 0$, $f(b) \neq 0$ e $f(a) \cdot f(b) < 0$;
- (iii) a seguir, sorteia-se, aleatoriamente, um número entre a e b , que chamaremos de c , e calcula-se $f(c)$;
- (iv) calcula-se, então, o produto $f(a) \cdot f(c)$ e verifica-se se é menor, igual ou maior do que zero.

Se o produto for igual a zero, c é raiz de $f(x)$;

Se for menor do que zero, repete-se o procedimento acima, substituindo b por c ;

Se for maior do que zero, repete-se o procedimento substituindo-se a por c .

Repete-se o processo até que o tamanho do intervalo resultante seja menor do que um erro previamente estipulado.

O número c será, então, dentro da precisão estabelecida, a raiz da função $f(x)$.

A implementação computacional deste procedimento implica o uso de um gerador de números aleatórios, facilmente encontrável em qualquer linguagem de programação. Não há necessidade de que o gerador de números aleatórios seja perfeito: o método funciona igualmente bem mesmo se o gerador for viciado.

Os cálculos foram feitos utilizando o MatLab 7.1.0.246 (R14) Service Pack 3.

3 RESULTADOS

Foram feitas 10.000.000 de repetições para cada caso, a fim de se tirar uma média representativa tanto do tempo computacional quanto do número de iterações.

Apresentamos, aqui, o cálculo feito para duas funções diferentes.

Tabela 1. Função: $f(x) = x^2 - 5x + 6$; Raiz encontrada: 3,0000000000000000

	Bisseccção	Monte Carlo		

Total de repetições	Tempo(s)	Número médio de iterações	Tempo(s)	Número médio de iterações	a	b
10.000.000	6,859	50	49,906	70,63	2,5	3,5
10.000.000	6,782	50	49,094	69,61	2,9	3,9
10.000.000	10,672	50	47,562	67,41	2,99	3,99

Tabela 2. Função: $f(x) = x^3 - x - 1$; Raiz encontrada: 1,32471795724475

Total de repetições	Bisseccção		Monte Carlo		a	b
	Tempo(s)	Número médio de iterações	Tempo(s)	Número médio de iterações		
10.000.000	118,48	50	206,67	70,61	1,0	2,0
10.000.000	118,56	50	199,66	68,40	1,3	2,3

Podemos ver, das tabelas acima, feitas para duas funções diferentes, mas com a mesma amplitude inicial, que, enquanto o número médio de iterações para o método da bissecção é de 50, ele se eleva para algo em torno de 70, em ambos os casos. Como foi definido o mesmo ε para ambos os casos (10^{-15}), isto significa, aproximadamente, 40% a mais de iterações para os cálculos feitos com o método de Monte Carlo. Foram feita, a fim de se estimar uma média mais realista, dez milhões de análises, para cada caso, e calculada uma média para este total.

4 ANÁLISE E CONCLUSÃO

A vantagem deste método sobre outros equivalentes, como o método da bissecção, é que não é necessário nenhum cálculo para se encontrar o número que chamamos de c : basta sortear um, usando o gerador ou “chutando” um número entre a e b .

Didaticamente falando, este método tem a seu favor o fato de que pode ser usado em sala de aula, sem o auxílio do computador, apenas com uma calculadora de mão, substituindo-se o gerador de números aleatórios por um “chute” qualquer para o número c , desde que tal “chute” seja um número entre a e b (não é necessário nenhum cálculo, como encontrar o ponto médio entre a e b ou o ponto em que o segmento de reta que une $(a, f(a))$ a $(b, f(b))$ cruza o eixo dos x).

BIBLIOGRAFIA

BLUM, L.; BLUM, M.; SCHUB, M. A simple unpredictable pseudo random number generator. *SIAM Journal on Computing*, v. 15(2), p. 364-383, 1986.

DORICIO, J. L. Números Randômicos e Aplicações. Disponível em: br.geocities.com/josedoricio/documentos/RandomNumbers1.pdf. Acesso em: 02 de maio 2008.

EICHENAUER-HERRMANN, J. Statistical independence of a newclass of inversive congruential pseudorandom numbers. *Mathematics of Computation*, v. 60, p. 375-384, 1993.

EICHENAUER-HERRMANN, J. Pseudorandom number generation by nonlinear methods. *International Statistical Reviews*, v. 63, p. 247-255. 1995.

FISHMAN, G. S. Monte Carlo: Concepts, Algorithms, and Applications. *Springer Series in Operations Research*. New York: Springer-Verlag, 1996.

HANSELMAN, Duane; LITTLEFIELD, Bruce. *Matlab 6 – Curso Completo*. São Paulo: Prentice Hall, 2003. 676 p.

L'ECUYER, P. Random numbers for simulation. *Communications of the ACM*. v. 33(10), p. 85-97, 1990.

L'ECUYER, P. Testing random number generators. In *Proceedings of the 1992 Winter Simulation Conference*, IEEE Press., p. 305-313, 1992.

L'ECUYER, P. Uniform random number generation. *Annals of Operations Research*, v. 53, p. 77-120, 1994.

METROPOLIS, N.; ULAM, S. The Monte Carlo Method. *J. Amer. Statistical Assoc.*, 1949, v. 44, p. 335-341.

PRESS, William H. *Numerical Recipes*. Cambridge: Cambridge University Press, 1986. 818 p.

TEZUKA, S. 1995. *Uniform Random Numbers: Theory and Practice*. Norwell, Massachusetts: Kluwer Academic Publishers, 1995. 228 p.