

MONTE CARLO PARA PROBLEMAS DETERMINÍSTICOS: SISTEMAS LINEARES

Pedro Pablo Durand Lazo

Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas, CCET, UNIOESTE, 85819-110, Cascavel, PR e-mail:
pela@unioeste.br

Resumo- Discute-se o uso dos Métodos Monte Carlo na solução de problemas determinísticos, de maneira particular trata-se a solução numérica de Sistemas de Equações Lineares. Desenvolvem-se dois Métodos Monte Carlo para a solução de Sistemas Lineares implementando computacionalmente um deles. Finalmente, é feito um teste de eficiência e uma comparação com o método direto de Gauss.

Palavras-chave: Simulação, Método Monte Carlo, Problema Determinístico, Sistema Linear.

MONTE CARLO FOR NONSTOCASTIC PROBLEMS: LINEAR SYSTEMS

Abstract- Is argued the use of Monte Carlo Methods in the solution of nonstochastic problems and, of a particular way, in the numerical solution of Systems of Linear Equations. Two Monte Carlo Methods are developed for the solution of Linear Systems and for only one of them is made its computational implementaton. Finally, it is made a test of its efficiency and a comparison with the direct method of Gauss.

KeyWord: Simulation, Monte Carlo Method, Nonstochastic Problem, Linear Sistem.

1. INTRODUÇÃO

Os métodos numéricos conhecidos como Métodos Monte Carlo podem ser descritos como métodos de simulação estatística. Nestes métodos, o sistema é representado por funções de densidade probabilística e a simulação utiliza seqüências de números aleatórios. Métodos Monte Carlo foram usados por centúrias, porém, só durante as últimas décadas ganhou o status de um método numérico capaz de direcionar as mais complexas aplicações. Dadas sua importância e atualidade, este trabalho intenta verificar sua aplicação em problemas determinísticos de maneira específica na resolução de sistemas de equações lineares.

A primeira seção, 2, trata numa forma geral acerca do método. A seção 3 é dedicada a descrever a simulação de variáveis aleatórias. Na seção 4 discute-se a solução numérica dos sistemas de equações lineares e descrevem-se dois métodos Monte Carlo para sua solução. Finalmente, na seção 6, realiza-se a implementação computacional de um dos métodos descritos. Os resultados e conclusões são tratados nas seções 6 e 7, respectivamente.

2. O MÉTODO MONTE CARLO

Historicamente, Monte-Carlo designa um dossiê secreto da operação Overlord, nome de código dado durante a segunda guerra mundial à operação de desembarque na Normandia. O método Monte Carlo é um método numérico que permite resolver problemas matemáticos mediante a simulação de variáveis aleatórias. Os problemas que podem ser resolvidos por métodos Monte Carlo são de dois tipos chamados probabilísticos e determinísticos, segundo sejam ou não dependentes de fatores aleatórios. No caso probabilístico o método consiste em observar números aleatórios, escolhidos em tal maneira que simulam diretamente os processos aleatórios físicos do problema original para inferir a solução desejada a partir do comportamento destes números aleatórios. No caso de que o problema seja determinístico, o método consiste em tratá-lo mediante uma analogia probabilística. Assim, pode-se dizer que o método Monte Carlo é um método universal na solução de problemas matemáticos.

A criação do método Mote Carlo é devido a J. von Neumann e S. Ulam. O desenvolvimento inicial se re-

monta ao ano 1944. Sua primeira aplicação como ferramenta de pesquisa se deu no desenvolvimento da bomba atômica durante a segunda guerra mundial. Este trabalho envolve uma simulação direta dos problemas probabilísticos acerca da difusão aleatória dos nêutrons dentro de material físsil. Porém, o desenvolvimento sistemático dessas idéias teve que esperar o trabalho de Harris e Herman Kahn em 1948. Neste mesmo ano, Fermi, Metropolis, y Ulam obtiveram mediante os métodos de Monte Carlo, estimações para os valores próprios da Equação de Schrodinger.

A possibilidade de aplicar o método a problemas determinísticos foi noticiada por Fermi, von Neumann e Ulam e divulgado por eles nos imediatos anos seguintes à guerra.

Houve logo depois uma tentativa compreensível de resolver cada problema na vista mediante o método Monte Carlo, mas não se deu bastante atenção a quais destes problemas o método poderia resolver eficientemente e em quais poderia resultar ineficiente. Os proponentes de métodos numéricos convencionais não faziam outra coisa que apontar aqueles problemas onde os métodos de Monte Carlo eram marcadamente inferiores à análise numérica. Esta objeção é enfraquecida na sua relutância em discutir técnicas avançadas. Os últimos anos vieram em favor dos métodos de Monte Carlo devido fundamentalmente ao melhor reconhecimento dos problemas nos quais ele é o melhor e, alguns vezes, o único método disponível. Esses problemas cresceram em número pelo descobrimento das técnicas de redução de variância que o tornam eficiente, onde antes se mostrava ineficiente e também porque se adapta facilmente a problemas que envolvem uma massa de complicações práticas que aparecem mais freqüentemente em diversas áreas da matemática aplicada e a pesquisa operacional.

Alguns problemas que possuem uma solução que não é possível de obter por um método numérico convencional podem ser tratados por algum método Monte-Carlo. Pode acontecer também que seja conhecido um método numérico direto, mas que sua implementação computacional necessita de uma capacidade de memória maior do disponível, pode-se então utilizar um método Monte-Carlo.

O interesse particular do presente trabalho é a aplicação do método na solução de problemas determinísticos. De maneira mais específica focaremos nossa atenção na resolução de sistemas lineares.

De forma mais precisa, seja P um problema não aleatório (cálculo de uma integral, resolução de um sistema linear, resolução de uma equação em derivadas parciais,...) com uma solução incógnita S . Constrói-se um experimento aleatório Ξ associado a uma variável aleatória X e a uma função de densidade probabilística tal que a esperança matemática de X seja a solução S do problema P , isto é:

$$E(X) = S$$

Se aproxima a esperança matemática de X repetindo em computador um grande número de vezes (M para

fixar as idéias) o experimento Ξ chamado gerador de X . Se os x_k , ($k = 1, 2, \dots, M$), denotam os resultados sucessivos obtidos nestas M provas, a média

$$\frac{1}{M} \cdot \sum_{k=1}^M x_k$$

aproxima-se mais da esperança matemática de X , em consequência de S , quando maior é M (lei dos grandes números).

Resumindo, para tratar um problema determinístico P , isto é, achar uma solução teoricamente definida, deve-se:

1. Determinar um experimento aleatório Ξ e uma variável aleatória X com uma lei de probabilidade (distribuição ou densidade) dada tal que a esperança matemática de X seja igual à solução de P .
2. Gerar em computador a variável aleatória X com a lei de probabilidade dada.

Observação 1 Para cada problema P deve-se determinar uma variável aleatória (portanto um experimento) e uma lei de probabilidade que forneçam a solução. Não existe um método geral para determinar uma tal variável. Para dois experimentos que dão a solução do problema P a melhor é aquela para a qual a variável aleatória associada possui a menor variância.

3. SIMULAÇÃO DE VARIÁVEIS ALEATÓRIAS

Geração de uma variável aleatória

Definição 1 Diremos que geramos uma variável aleatória X que têm uma lei da probabilidade dada se definirmos um experimento que forneça um número inteiro M qualquer de valores $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M) = V_M$ tais que:

1. Para todo $k \in \{1, 2, \dots, M\}$: ξ_k é um valor de X
2. Para todo $D \subset \mathbb{R}$, se m_D denota o número de vezes que o evento $\xi \in D$ realiza-se na seqüência V_M , tem-se:

$$p(X \in D) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{m_D}{M}$$

O experimento Ξ chama-se o gerador da variável aleatória X .

Observação 2 Na pratica, é impossível que um experimento Ξ forneça um número infinito de resultados. Devemos ficar contentes de testar o gerador sob um número finito M (muito grande) anotando a frequência de um número finito de eventos. Jamais poderá se dizer que têm-se um gerador verificando a definição. Só poderá afirma-se que estamos mais ou menos perto deste gerador.

Teorema 1 Seja Ξ um gerador de uma variável aleatória X com uma lei de probabilidade dada. Se $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M)$ é a seqüência de resultados dados por o experimento Ξ , então

$$E(X) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \xi_k$$

Prova Provaremos o teorema somente no caso onde X é uma variável aleatória discreta finita. Seja $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ o conjunto dos valores que pode tomar com as probabilidades correspondentes (p_1, p_2, \dots, p_n) . Seja $n_k, (k = 1, 2, \dots, n)$ o número de termos de $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_M)$ que são iguais à $x_k, (k = 1, 2, \dots, n)$. Então,

$$\sum_{j=1}^M \xi_j = \sum_{k=1}^n x_k n_k$$

de onde,

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \xi_j = \sum_{k=1}^n x_k \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{n_k}{M}$$

Como Ξ é um gerador, tem-se:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{n_k}{M} = p_k$$

logo,

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \xi_j = \sum_{k=1}^n x_k p_k = E(X)$$

Variável aleatória uniformemente distribuída em $[0, 1]$

Seja X uma variável aleatória contínua tomando valores no intervalo $[0, 1]$, com a densidade de probabilidade

$$f(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x \notin [0, 1] \\ 1 & \text{se } x \in [0, 1] \end{cases}$$

Diz-se que X é uniformemente distribuída em $[0, 1]$ ou equiprobável em $[0, 1]$.

É conhecido que:

$$p(a \leq X \leq b) = \int_a^b f(x) dx = b - a \quad \text{se } 0 \leq a \leq b \leq 1$$

De forma mais geral, se $A \subset [0, 1]$,

$$p(X \in A) = \text{comprimento de } A$$

Existem muitas maneiras de gerar uma variável uniformemente distribuída em $[0, 1]$. Indicamos aqui só uma delas, conhecida como Método de congruência de geração de números aleatórios.

O gerador Ξ_X é o experimento que consiste em definir a seqüência $(\xi_k)_{1 \leq k \leq M}$ pelas relações seguintes:

$$\begin{cases} x_k = \text{resto da divisão de } ax_{k-1} + c \text{ por } m \\ \xi_k = \frac{x_k}{m} \quad k = 1, 2, \dots, M \end{cases}$$

onde m é um inteiro muito grande (por exemplo, $m = 2^{23}$); x_0 é um número qualquer de $[0, 1]$; c e a dois inteiros de $(0, m - 1)$.

A seqüência construída é periódica de período $\leq m$. Se m, a e x_0 verificam certas condições, então o período é igual que m . Como m é muito grande, a freqüência de aparição do evento $\xi_k \in A \subset [0, 1]$ é muito próximo do comprimento de A quando $M \rightarrow m$

Método direto de geração de variáveis aleatórias

Variável aleatória discreta

Seja R uma variável aleatória discreta que toma os valores $\{r_1, \dots, r_n\}$ com as probabilidades correspondentes (p_1, \dots, p_n) .

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \dots & r_j & \dots & r_n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_j & \dots & p_n \end{pmatrix}$$

É conhecido que

$$\sum_{i=1}^n p_i = 1$$

Considere-se uma variável aleatória X , uniformemente distribuída em $[0, 1]$, e um gerador Ξ_X de X .

Constroe-se o experimento Ξ a partir de Ξ_X da maneira seguinte:

Sejam:

1. (ξ_1, \dots, ξ_M) os valores dados por Ξ_X e
2. A_1, \dots, A_n n pontos do intervalo $[0, 1]$ tais que:

$$A_0 = 0, \quad A_n = 1 \text{ e } |A_i - A_{i-1}| = p_i, \quad i = 1, \dots, n$$

Os resultados (η_1, \dots, η_M) do experimento Ξ são definidos por:

$$(\alpha) \quad \begin{cases} \eta_i = r_j \text{ se } \xi_i \in]A_{j-1}, A_j] & \text{para } i = 1, \dots, M \\ \eta_i = r_1 \text{ se } \xi_i = 0 \end{cases}$$

De forma equivalente:

$$\eta_i = r_j \quad \text{se } j \text{ é o primeiro índice tal que :}$$

$$\eta_i \leq \sum_{k=1}^j p_k, \quad i = 1, \dots, M$$

Teorema 2 O experimento Ξ onde os resultados são definidos segundo (α) é um gerador da variável aleatória R tomando os valores $\{r_1, \dots, r_n\}$ com as probabilidades (p_1, \dots, p_n) .

Prova. Seja m_j o número de pontos da seqüência (ξ_1, \dots, ξ_M) , fornecida por o gerador Ξ_X que estão no intervalo $]A_{j-1}, A_j]$.

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{m_j}{M} = p(X \in]A_{j-1}, A_j])$$

Como X é uniformemente distribuída em $[0, 1]$ tem-se

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{m_j}{M} = |A_{j-1} - A_j| = p_j$$

Como m_j é também o número de pontos da seqüência (η_1, \dots, η_M) que são iguais a r_j , a última igualdade permite concluir que Ξ é um gerador de R ■

Variável aleatória contínua

Seja R uma variável aleatória contínua com densidade de probabilidade f .

Constroe-se o experimento Ξ a partir do gerador Ξ_X de uma variável X uniformemente distribuida em $[0, 1]$ da seguinte maneira:

Seja (ξ_1, \dots, ξ_M) a seqüência de resultados de Ξ_X . A seqüência de resultados (η_1, \dots, η_M) de Ξ é definida por:

$$(\beta) \quad \int_{-\infty}^{\eta_i} f(x)dx = \xi_i \quad i = 1, \dots, M$$

Fazendo

$$F(t) = \int_{-\infty}^t f(x)dx$$

F chama-se distribuição de R , (β) pode se escrever:

$$F(\eta_i) = \xi_i \quad i = 1, \dots, M$$

Teorema 3 *O experimento Ξ definido por (β) é um gerador da variável aleatória contínua R com densidade de probabilidade f .*

Prova. Seja m o número de termos da seqüência (η_1, \dots, η_M) que pertencem a um intervalo qualquer $[a, b]$. Conforme a relação (β) tem-se que se $\eta_i \in [a, b]$, então $\xi_i \in [F(a), F(b)]$. Logo m é também o número de termos da seqüência (ξ_1, \dots, ξ_M) que pertencem à intervalo $[F(a), F(b)]$. Como Ξ_X é um gerador de X , tem-se:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{m}{M} = p(X \in [F(a), F(b)]) = F(b) - F(a)$$

Assim,

$$F(b) - F(a) = \int_a^b f(t)dt$$

Logo

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{m}{M} = \int_a^b f(t)dt = p(R \in [a, b])$$

■

4. RESOLUÇÃO DE SISTEMAS LINEARES

Hammersly e Handscomb (HAMMERSLY,1975) recomendam fortemente o uso dos métodos convencionais para este tipo de problema e o uso de Monte Carlo somente quando uma solução não muito exata for requerida como ponto inicial de outro trabalho ou quando o problema for muito grande e intrincado para ser tratado de outra maneira. Menciona o fato de que já em 1956, Curtis, comparou teoricamente a eficiência dos métodos convencional e Monte Carlo no cálculo de uma componente da solução x de um sistema de equações simultâneas: $x = a + Hx$ onde H é uma matriz de ordem $n \times n$ e a é um vetor dado. Definindo a norma da matriz H como

$$\|H\| = \max_i \left(\sum_j h_{ij} \right)$$

usando o método Monte Carlo obteve as seguintes conclusões:

- Se $\|H\| > 1$, o método Monte Carlo deixa de ser eficiente
- Se $\|H\| = 0,9$, o método Monte Carlo é menos eficiente que um método convencional para achar a solução para 1% de precisão com $n \leq 554$ ou para 10% com $n \leq 84$.
- Se $\|H\| = 0,5$, tem-se (1%) com $n \leq 151$ e (10%) com $n \leq 20$

Observa também que a situação é diferente de quando foi realizado esta análise, porém as conclusões continuam sendo válidas e suportam a recomendação.

Poderia-se usar Monte Carlo na determinação de uma aproximação inicial para a construção da seqüência de aproximações de um método iterativo convencional o que justifica o desenvolvimento deste trabalho.

Um dos métodos Monte Carlo é baseado num proposto por von Neumann e Ulam (HAMMERSLY,1975). Seja P outra matriz de ordem $n \times n$ tal que

$$p_{ij} \geq 0 \quad \sum_j p_{ij} \leq 1$$

e tal que $h_{ij} \neq 0$ implica $p_{ij} \neq 0$. Seja

$$p_i = 1 - \sum_j p_{ij}$$

e

$$v_{ij} = \begin{cases} \frac{h_{ij}}{p_{ij}} & p_{ij} \neq 0 \\ 0 & p_{ij} = 0 \end{cases}$$

A matriz P pode descrever o término de um caminho aleatório sobre o conjunto de estados consistente dos inteiros de 1 a n . Se o caminho termina depois de k passos, passando a través da seqüência de inteiros

$$\gamma = (i_0, i_1, \dots, i_k)$$

então os sucessivos estados estão conectados pela probabilidade transitória :

$$P(i_{m+1} = j | i_m = i, k > m) = p_{ij}$$

e a probabilidade terminal:

$$P(k = m | i_m = i, k > m - 1) = p_i$$

Define-se

$$V_m(\gamma) = v_{i_0 i_1} v_{i_1 i_2} \dots v_{i_{m-1} i_m} \quad (m \leq k)$$

e

$$X(\gamma) = V_m(\gamma) \frac{a_{i_K}}{p_{i_K}}$$

Logo o valor esperado de $X(\gamma)$, condicionado a $i_0 = i$, é

$$\begin{aligned} \sum_{\gamma} P(\gamma) X(\gamma) &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i_1} \dots \sum_{i_k} p_{ii_1} \dots p_{i_{k-1} i_k} p_{i_k} v_{ii_1} \dots \\ &\quad v_{i_{k-1} i_k} \frac{a_{i_K}}{p_{i_K}} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{i_1} \dots \sum_{i_k} h_{ii_1} \dots h_{i_{k-1} i_k} a_{i_K} \\ &= a_i + (Ha)_i + (H^2a)_i + \dots \end{aligned}$$

Portanto, se a serie de Newmann converge (por exemplo, quando $\|H\| < 1$), o vetor x com componentes

$$x_i = E[X(\gamma)|i_0 = i]$$

é a solução do sistema linear.

No que segue, descrevem-se dois métodos Monte Carlo para a solução de sistemas lineares sem a interpretação markoviana do método sugerido por von Newmann e Ullan, descrito anteriormente. Estes métodos estão baseados na versão dada por Carasso (CARASSO,1970).

Cálculo do produto de uma matriz por um vetor

Seja A uma matriz de ordem $n \times n$ e x um vetor do \mathbb{R}^n ; desejamos calcular o produto Ax . Pondo $A = (a_{ij})_{n \times n}$ e $x = (x_i)$. Fazendo

$$a_{ij} = z_{ij} \cdot p_{ij}$$

com

$$p_{ij} > 0 \quad \text{e} \quad \sum_{j=1}^n p_{ij} = 1, \quad 1 \leq i \leq n$$

Para i fixo define-se a seguinte prova aleatória:

Selecionar aleatoriamente um índice do conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$

Seja \mathbf{J} a variável aleatória associada à prova. \mathbf{J} toma o valor do índice obtido. Suponhamos que \mathbf{J} tem a função de probabilidade p_{ij} , isto é,

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & j & \cdots & n \\ p_{i1} & p_{i2} & \cdots & p_{ij} & \cdots & p_{in} \end{pmatrix}$$

com

$$P([\mathbf{J} = j]) = p_{ij} \quad j = 1, \dots, n$$

e considere-se a variável aleatória \mathbf{Z} construída a partir de \mathbf{J} :

$$\mathbf{Z} = z_{i\mathbf{J}} \cdot x_{\mathbf{J}}$$

Tem-se:

$$P(\mathbf{Z} = z_{ij} \cdot x_j) = P([\mathbf{J} = j]) = p_{ij}$$

De onde,

$$\begin{aligned} E(\mathbf{Z}) &= \sum_{j=1}^n (z_{ij} \cdot x_j) \cdot p_{ij} = \\ &= \sum_{j=1}^n a_{ij} \cdot x_j = (Ax)_i \end{aligned}$$

onde $(Ax)_i$ é a i -ésima componente do vetor Ax . De modo mais geral, pode-se construir uma variável aleatória Z_N tendo como esperança matemática a i -ésima componente do vetor $A^N x$ onde

$$A^N = \underbrace{A \cdot A \cdot \cdots \cdot A}_{n \text{ vezes}}$$

Consideremos a seguinte prova aleatória:

Para $1 \leq k \leq N$ selecionar sucesivamente e de forma aleatória um índice j_k , um de cada vez, do conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$

k	índice	Var. aleat.	Lei de probabilidade
1	j_1	\mathbf{J}_1	$\{p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{in}\}$
2	j_2	\mathbf{J}_2	$\{p_{j_1 1}, p_{j_1 2}, \dots, p_{j_1 n}\}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
N	j_N	\mathbf{J}_N	$\{p_{j_{N-1} 1}, p_{j_{N-1} 2}, \dots, p_{j_{N-1} n}\}$

O resultado da prova é um conjunto $\{j_1, j_2, \dots, j_N\}$ formado por N elementos todos pertencentes ao conjunto $\{1, 2, \dots, n\}$.

Deve-se observar que as variáveis aleatórias $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \dots, \mathbf{J}_N$ não são independentes.

Considere-se a variável aleatória:

$$\mathbf{Z}_N = z_{i\mathbf{J}_1} \cdot z_{\mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2} \cdots z_{\mathbf{J}_{N-1} \mathbf{J}_N} \cdot x_{\mathbf{J}_N}$$

Tem-se

$$P([\mathbf{Z}_N = z_{i j_1} \cdot z_{j_1 j_2} \cdots z_{j_{N-1} j_N} \cdot x_{j_N}]) = P\left(\bigcap_{k=1}^N [\mathbf{J}_k = j_k]\right)$$

e usando as probabilidades condicionais pode-se escrever:

$$P\left(\bigcap_{k=1}^N [\mathbf{J}_k = j_k]\right) = P(\mathbf{J}_1 = j_1) P_{[\mathbf{J}_1 = j_1]} \left(\bigcap_{k=2}^N [\mathbf{J}_k = j_k]\right)$$

Repetindo o raciocínio, obtemos:

$$\begin{aligned} P\left(\bigcap_{k=1}^N [\mathbf{J}_k = j_k]\right) &= P([\mathbf{J}_1 = j_1]) \times \\ &\times P_{[\mathbf{J}_1 = j_1]}([\mathbf{J}_2 = j_2]) \times \\ &\times P_{[\mathbf{J}_1 = j_1] \cap [\mathbf{J}_2 = j_2]}([\mathbf{J}_3 = j_3]) \times \\ &\vdots \\ &\times P_{[\mathbf{J}_1 = j_1] \cap \dots \cap [\mathbf{J}_{N-1} = j_{N-1}]}([\mathbf{J}_N = j_N]) \end{aligned}$$

conforme a definição da prova, temos:

$$P_{[\mathbf{J}_1 = j_1] \cap \dots \cap [\mathbf{J}_{k-1} = j_{k-1}]}([\mathbf{J}_k = j_k]) = p_{k-1, j_k} \quad k = 2, \dots, N$$

Logo,

$$P([\mathbf{Z}_N = z_{i j_1} \cdot z_{j_1 j_2} \cdots z_{j_{N-1} j_N} \cdot x_{j_N}]) = p_{i j_1} \cdot p_{j_1 j_2} \cdots p_{j_{N-1} j_N}$$

Denotemos por

$$\mathcal{R} = \{J = (j_1, j_2, \dots, j_N) : j_k \in \{1, 2, \dots, n\}, k = 1, 2, \dots, N\}$$

A esperança matemática de Z_N é:

$$E(\mathbf{Z}_N) = \sum_{J \in \mathcal{R}} z_{i j_1} \cdot z_{j_1 j_2} \cdots z_{j_{N-1} j_N} \cdot x_{j_N} \cdot p_{i j_1} \cdot p_{j_1 j_2} \cdots p_{j_{N-1} j_N}$$

Assim,

$$E(\mathbf{Z}_N) = \sum_{(j_1, j_2, \dots, j_N) \in \mathcal{R}} a_{ij_1} \cdot a_{j_1 j_2} \cdots a_{j_{N-1} j_N} \cdot x_{j_N}$$

isto é,

$$E(\mathbf{Z}_N)_i = (A^N x)_i = i - \text{ésima componente de } A^N x$$

Cálculo da solução numérica do sistema linear: Método 1

Trata-se de resolver o sistema linear de ordem n :

$$Ax = b \text{ com } \det A \neq 0$$

Suponhamos que A pode-se escrever na forma:

$$A = I - H$$

onde, I é a matriz unitária de ordem n e H uma matriz com todos seus valores próprios de módulo estritamente menor do que 1. Prova-se que a iteração linear:

$$x^{(n+1)} = Hx^{(n)} + b$$

é tal que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x^{(n)} = A^{-1}b \text{ qualquer que seja o vetor } x^{(0)}$$

Tomando $x^{(0)} = b$ temos:

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= b \\ x^{(1)} &= b + Hb \\ &\vdots \\ x^{(N)} &= b + Hb + \cdots + H^N b \end{aligned}$$

Sejam h_{ij} $1 \leq i, j \leq n$ os termos da matriz H . Fazendo

$$h_{ij} = z_{ij} \cdot p_{ij}$$

com

$$p_{ij} > 0 \text{ e } \sum_{j=1}^n p_{ij} = 1, \quad 1 \leq i \leq n$$

Sejam

$$\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \dots, \mathbf{J}_N,$$

as variáveis aleatórias definidas anteriormente, e

$$\mathbf{Z}_i \quad 1 \leq i \leq N$$

as variáveis aleatórias seguintes:

$$\begin{aligned} \mathbf{Z}_1 &= z_{i\mathbf{J}_1} \cdot b_{\mathbf{J}_1} \\ \mathbf{Z}_2 &= z_{i\mathbf{J}_1} \cdot z_{\mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2} \cdot b_{\mathbf{J}_2} \\ &\vdots \\ \mathbf{Z}_N &= z_{i\mathbf{J}_1} \cdot z_{\mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2} \cdots z_{\mathbf{J}_{N-1} \mathbf{J}_N} \cdot b_{\mathbf{J}_N} \end{aligned}$$

Seja \mathbf{Z} a variável aleatória definida na forma:

$$\mathbf{Z} = b_i + \mathbf{Z}_1 + \mathbf{Z}_2 + \cdots + \mathbf{Z}_N$$

temos que \mathbf{Z} é uma variável aleatória e sua esperança matemática é:

$$E(\mathbf{Z}) = b_i + E(\mathbf{Z}_1) + \cdots + E(\mathbf{Z}_N)$$

Daí segue que:

$$E(\mathbf{Z}) = b_i + (Hb)_i + (H^2b)_i + \cdots + (H^N b)_i$$

Logo

$$E(\mathbf{Z}) = x_i^{(N)}$$

Cálculo da solução numérica do sistema linear: Método 2

Coonsidera-se uma variável aleatória \mathbf{Z}_i tal que

$$E(\mathbf{Z}_i) = x_i^{(\infty)} = (A^{-1}b)_i$$

com

$$x_i^{(\infty)} = b_i + (Hb)_i + (H^2b)_i + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} (H^k b)_i$$

Sejam h_{ij} $1 \leq i, j \leq n$ os termos da matriz H Fazendo

$$h_{ij} = z_{ij} \cdot p_{ij}$$

com

$$p_{ij} > 0 \text{ e } \sum_{j=1}^n p_{ij} < 1, \quad 1 \leq i \leq n$$

e denotemos:

$$pa_i = 1 - \sum_{j=1}^n p_{ij} \quad 1 \leq i \leq n$$

Considere-se a seguinte prova aleatória:

selecionar de forma aleatória um índice j_1 do conjunto $\{0, 1, 2, \dots, n\}$

k	índice	Variável aleatória	Lei de probabilidade
1	j_1	\mathbf{J}_1	$\{pa_i, p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{in}\}$

Se $j_1 = 0$ então parar, se não,

selecionar de forma aleatória um índice j_2 do conjunto $\{0, 1, 2, \dots, n\}$

k	índice	Var. aleatória	Lei de probabilidade
2	j_2	\mathbf{J}_2	$\{pa_{j_1}, p_{j_1 1}, p_{j_1 2}, \dots, p_{j_1 n}\}$

Se $j_2 = 0$ então parar, se não, continuar.

Assim, tendo $\mathbf{J}_k = j_k$ existe uma probabilidade pa_{j_k} de parar e uma probabilidade $p_{j_k j_{k+1}}$ de realizar $\mathbf{J}_{k+1} = j_{k+1}$

Sejam

$$\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2, \dots, \mathbf{J}_N$$

as variáveis aleatórias definidas anteriormente, e \mathbf{Z}_i a variável aleatória:

$$\mathbf{Z}_i = z_{i\mathbf{J}_1} \cdot z_{\mathbf{J}_1\mathbf{J}_2} \cdots z_{\mathbf{J}_{N-1}\mathbf{J}_N} \cdot b_{\mathbf{J}_N} \cdot \frac{1}{pa_{\mathbf{J}_N}}$$

onde N é o número de índices escolhidos no curso da prova (se $N = 0$ $\mathbf{Z}_i = b_i \cdot \frac{1}{pa_i}$).

Cálculo da esperança matemática de \mathbf{Z}_i
 Observe-se que

$$\mathbf{Z}_i = z_{ij_1} \cdot z_{j_1j_2} \cdots z_{j_{n-1}j_n} \cdot b_{j_n} \cdot \frac{1}{pa_{j_n}}$$

se realiza quando a seqüência (j_1, j_2, \dots, j_n) é escolhida. A probabilidade de que (j_1, j_2, \dots, j_n) seja escolhida é:

$$p_{ij_1} \cdot p_{j_1j_2} \cdots p_{j_{n-1}j_n} \cdot pa_{j_n}$$

Logo,

$$\begin{aligned} E(\mathbf{Z}_i) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{(j_1, \dots, j_n) \in N_n} z_{ij_1} \cdot z_{j_1j_2} \cdots z_{j_{n-1}j_n} \cdot b_{j_n} \cdot \\ &\quad \frac{1}{pa_{j_n}} \cdot p_{ij_1} \cdot p_{j_1j_2} \cdots p_{j_{n-1}j_n} \cdot pa_{j_n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{(j_1, \dots, j_n) \in N_n} h_{ij_1} \cdot h_{j_1j_2} \cdots h_{j_{n-1}j_n} \cdot b_{j_n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} (H^n b)_i = x_i \end{aligned}$$

5. IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Aqui se apresenta a execução do programa em linguagem Pascal para o primeiro dos métodos de Monte Carlo exposto no presente trabalho. Com a finalidade de comparar este método com os diretos, se apresenta também a execução do programa correspondente ao método de Gauss.

Para ilustrar melhor considera-se o sistema linear:

$$\begin{cases} 0.5x_1 - 0.2x_2 - 0.5x_3 = 0.6 \\ 0.2x_1 + 0.9x_2 + 0.5x_3 = 1.5 \\ -0.5x_1 - 0.5x_2 + 1.2x_3 = -2.7 \end{cases}$$

O vetor solução deste sistema é $x = (1, 2, -1)$.

A matriz ampliada do sistema é:

$$\begin{bmatrix} 0.5 & -0.2 & -0.5 & 0.6 \\ 0.2 & 0.9 & 0.5 & 1.5 \\ -0.5 & -0.5 & 1.2 & -2.7 \end{bmatrix}$$

A escolha deste sistema é para atender a condição de convergência do método de Monte Carlo, pois a matriz

H na decomposição $A = I - H$ tem autovalores de módulos menores do que 1:

$$H = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.2 & 0.5 \\ -0.2 & 0.1 & -0.5 \\ 0.5 & 0.5 & -0.2 \end{bmatrix}, \quad \|\text{autval}(H)\| = 0.469$$

Elaboraram-se dois programas Pascal, um correspondente ao método Monte Carlo e outro ao do método direto de Gauss. Nestes programas incluem-se instruções para registrar o início e o termino dos cálculos para obter o tempo de processamento e, desta maneira, usá-lo como parâmetro de comparação dos métodos.

O formato de saída dos resultados considera sete (7) dígitos significativos.

No caso do método de Monte Carlo, o programa realiza 300 vezes o experimento e cada um deles tem como resultado uma seqüência de 1.000 termos. O valor da aproximação da solução é a média destas 300 provas e corresponde ao vetor $x^{(18)}$ da seqüência de aproximações.

O software usado nesta implementação computacional foi o Turbo Pascal, Versão 7.0 da Borland International, Inc.

6. RESULTADOS

Execução dos Programas

Execução do Programa Pascal Monte Carlo

SISTEMAS LINEARES :
 MÉTODO DE MONTE-CARLO

```

INGRESSE A ORDEM DO SISTEMA : 3
INGRESSE OS COEFICIENTES A[I,J]
E O TERMO INDEPENDENTE B[I] DA
EQUAÇÃO 1: 0.5 -0.2 -0.5 0.6
EQUAÇÃO 2: 0.2 0.9 0.5 1.5
EQUAÇÃO 3: -0.5 -0.5 1.2 -2.7
Inicio : 18:59:23.39
X1=1.0486712
X2=2.0569483
X3=-0.9751820
Termino: 18:59:58.88
    
```

Comentário

O tempo que necessitou-se para a realização dos cálculos foi de 35.49 segundos. O resultado obtido tem uma exatidão média de 0.1.

Execução do programa Pascal Gauss

SISTEMAS LINEARES:
 MÉTODO DE GAUSS

INGRESSE A ORDEM DO SISTEMA : 3
 INGRESSE OS COEFICIENTES A[I,J]
 E O TERMO INDEPENDENTE B[I] DA
 EQUAÇÃO 1: 0.5 -0.2 -0.5 0.6
 EQUAÇÃO 2: 0.2 0.9 0.5 1.5
 EQUAÇÃO 3: -0.5 -0.5 1.2 -2.7
 Início : 13:30:41.21
 X1=1.0000000
 X2=2.0000000
 X3=-1.0000000
 Termino: 13:30:41.21

Comentário

O tempo que necessitou-se para a realização dos cálculos foi menos de um centésimo de segundo. O resultado obtido é a solução exata do sistema.

Teste de Eficiência e Comparação dos Métodos

Método de Monte Carlo O programa foi executado seis vezes. A seguinte tabela registra os resultados obtidos:

Solução Aproximada			Tempo(seg.)
1,0941820	2,1528707	-1,0061408	35,46
1,0486712	2,0569483	-0,9751820	35,49
1,0699638	2,0356566	-0,9886383	35,49
1,0534311	2,0217950	-1,1136459	35,46
1,0052874	2,1637639	-1,1541542	35,46
1,0397669	1,9382324	-1,2204276	35,48
1,0000000	2,0000000	-1,0000000	35,47

A última linha corresponde ao arredondamento uniforme dos valores e à média dos tempos.

Métodos Diretos (Clássicos) A seguinte tabela dá os resultados obtidos na execução do programa correspondente ao Método de Gauss:

Solução: 1,0000000	2,0000000	-1,0000000
Tempo: menos de um centésimo de segundo		

É fácil observar que o método direto de Gauss, considerado neste trabalho como representante dos métodos clássicos, conseguiu uma melhor performance tanto em precisão como em tempo de processamento.

7. CONCLUSÕES

Pode-se concluir portanto, que os métodos clássicos são mais eficientes que os de Monte Carlo no que se refere ao cálculo de soluções de sistemas lineares, pelo menos para os sistemas de pequeno porte.

Assim, tal como foi observado no início da secção 4, o uso dos métodos de Monte Carlo no cálculo de soluções de sistemas lineares não é prático e o valor de sua aplicação neste caso concreto tem um sentido fundamentalmente ilustrativo.

Desde o ponto de vista pedagógico, é importante se familiarizar com estes métodos visando sua aplicação em estudos onde podem-se mostrar mais eficientes seja no cálculo de aproximações ou em a solução de outros problemas.

REFERÊNCIAS

ALBRETCH, P. **Análise Numérica: um curso moderno:** Livros Técnicos e Científicos S.A.: Rio de Janeiro. 1973.

CARASSO, C. **Analyse Numerique:** Lidec.Inc.: Montreal. 1970

FISHMAN, G.S. **Monte Carlo: Concepts, Algorithms and Application:** Springer-Verlag: New York. 1996.

GOMES, Marcia A.; DA ROCHA, V. L. **Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais:** Mc.Graw-Hill. São Paulo. 1988.

HAMMERSLY, J.M. and HANDSCOMB, D. C. **Monte Carlo Methods:** Editora M. S. Bartlett: London. 1975.

HENRICE, P. **Elementes of Numerical Analysis:** John Wiley and Sons Inc. 1964.

MORAES, C.D.; MARINS, J. M. **Cálculo Numérico Computacional:** Editora Atlas: São Paulo. 1994.

RALSTON, A. **A firts course in numerical analysis:** Mc.Graw-Hill: New York. 1965.

STIEFEL, E. **Introduction à la mathématique numérique:** Dunod: Paris. 1967.

SÓBOL, I. M. **Método de Montecarlo:** MIR: Moscú.1976.