



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA

Diego Alex Mayer

Avaliação numérica de integrais não elementares pelo método de Monte Carlo

Florianópolis
2023

Diego Alex Mayer

Avaliação numérica de integrais não elementares pelo método de Monte Carlo

Trabalho de Conclusão de Curso submetido ao curso de Matemática do Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina como requisito parcial para a obtenção do título de Licenciado em Matemática.

Orientador: Prof. Gilles Gonçalves de Castro, Dr.

Florianópolis

2023

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Mayer, Diego Alex

Avaliação numérica de integrais não elementares pelo
método de Monte Carlo / Diego Alex Mayer ; orientador,
Gilles Gonçalves de Castro, 2023.

60 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) -
Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências
Físicas e Matemáticas, Graduação em Matemática -
Licenciatura, Florianópolis, 2023.

Inclui referências.

1. Matemática - Licenciatura. 2. Cálculo Numérico. 3.
Probabilidade. 4. Monte Carlo. I. Castro, Gilles Gonçalves
de . II. Universidade Federal de Santa Catarina. Graduação
em Matemática - Licenciatura. III. Título.

Diego Alex Mayer

Avaliação numérica de integrais não elementares pelo método de Monte Carlo

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do título de licenciado e aprovado em sua forma final pelo Curso de Matemática.

Florianópolis, 30 de junho de 2023.

Coordenação do Curso:
Prof. Felipe Lopes Castro, Dr.

Banca Examinadora

Prof. Gilles Gonçalves de Castro, Dr.
Orientador

Profa. Lindaura Maria Steffens, Dra.
Universidade do Estado de Santa Catarina - UDESC

Prof. Marcelo Sobottka, Dr.
Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Florianópolis, 2023.

Este trabalho é dedicado aos meus queridos pais, a
minha amada esposa Simone e minha querida filha
Catharine.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por estar sempre presente em minha vida.

A Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) e ao Departamento de Matemática (MTM) pelo suporte na realização deste trabalho.

A minha família por todo o amor e compreensão que recebi. Em especial a minha esposa Simone por ter sempre me apoiado em todos os momentos

Ao professor Gilles Gonçalves de Castro pela amizade e paciência na orientação deste trabalho.

A todos os colegas do curso de Matemática e a todos que, embora não citados, de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

“A mente que não se abre a uma nova ideia, jamais volta ao seu tamanho original.”
(Albert Einstein)

RESUMO

O objetivo deste estudo é propor um estudo da eficácia do método de Monte Carlo na solução numérica de integrais não elementares. O método de Monte Carlo foi implementado computacionalmente em *Spyder 3.9* que é uma IDE (*Integrated Development Environment*) do *Python* gratuita e de livre acesso. Após a implementação computacional do método de Monte Carlo e sua validação com a solução exata de algumas integrais elementares foi realizado um estudo comparativo do método de Monte Carlo com a Regra do Trapézio Múltipla e a Regra 1/3 de Simpson Múltipla afim de verificar se este método pode ser utilizado com uma alternativa para solução de integrais não elementares. Verificou-se pelos resultados obtidos para as integrais estudadas que o método de Monte Carlo é uma alternativa para o cálculo de integrais, entretanto o método requer um elevado tempo computacional para obter um estimativa satisfatória do valor da integral quando comparado com a Regra do Trapézio e a Regra 1/3 de Simpson Múltipla impossibilitando assim a sua efetiva utilização.

Palavras-chave: Integrais não elementares. Solução Numérica. Método de Monte Carlo.

ABSTRACT

The objective of this study is to propose a study of the effectiveness of the Monte Carlo method in the numerical solution of non-elementary integrals. The Monte Carlo method was computationally implemented in Spyder 3.9 which is a free and open source Python IDE (Integrated Development Environment). After the computational implementation of the Monte Carlo method and its validation with the exact solution of some elementary integrals, a comparative study of the Monte Carlo method with the Multiple Trapezoidal Rule and the Multiple Simpson's $1/3$ Rule was carried out in order to verify if this method can be used as an alternative for solving non-elementary integrals. It was verified by the results obtained for the studied integrals that the Monte Carlo method is an alternative for the calculation of integrals, however the method requires a high computational time to obtain a satisfactory estimate of the value of the integral when compared with the Trapezoid Rule and the $1/3$ Rule of Multiple Simpson, thus making its effective use impossible.

Keywords: Non-elementary integrals. Numerical solution. Monte Carlo method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Descrição gráfica da regra do trapézio.	19
Figura 2 – Descrição gráfica: (a) regra 1/3 de Simpson; (b) regra 3/8 de Simpson.	21
Figura 3 – Gráfico de $f(x) = x^2$ para $x \in [0, 3]$ gerado por a) $N = 10$, b) $N = 1000$, c) $N = 10000$ e d) $N = 1000000$ pontos.	45
Figura 4 – a) Distribuição Uniforme da variável x no intervalo $[0, 3]$ para $N = 1000$ pontos; b) Gráfico Quantil-Quantil do ajuste dos pontos gerados da variável x no intervalo $[0, 3]$	46
Figura 5 – a) Comparação do E_{pt} (%) em relação ao número de pontos gerados da variável x ; b) Comparação do tempo de simulação (segundos) em relação ao número de pontos gerados da variável x	47
Figura 6 – Gráfico de $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ para $x \in [-1, 1]$ gerado por $N = 10000000$ pontos aleatórios para a variável x	48
Figura 7 – Gráfico de $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ para $x \in [-4, 4]$ gerado por $N = 10000000$ pontos aleatórios para a variável x	49

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Principais operações da teoria dos conjuntos	25
Tabela 2 – Estimativa da integral da função $f(x) = x^2$ no intervalo $[0, 3]$ para diferentes N (número de pontos gerados a variável x) pelo Método de Monte Carlo.	46
Tabela 3 – Estimativa da integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ no intervalo $[-1, 1]$ para o método de Monte Carlo, Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla.	48
Tabela 4 – Estimativa da integral da função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ no intervalo $[-4, 4]$ para o método de Monte Carlo, Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla.	50
Tabela 5 – Estimativa das integrais não-elementares pelo método de Monte Carlo.	50

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
1.1	OBJETIVOS	15
1.1.1	Objetivo Geral	15
1.1.2	Objetivos Específicos	15
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	16
2.1	INTEGRAL	16
2.1.1	Integral Definida	16
2.1.2	O Teorema Fundamental do Cálculo	17
2.1.3	Integrais Não-Elementares	18
2.2	INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	18
2.2.1	Fórmulas de integração de Newton-Cotes	18
2.2.1.1	As Regras do Trapézio	19
2.2.1.2	As Regras de Simpson	21
2.3	PROBABILIDADE	24
2.3.1	Espaço Amostral e Eventos	24
2.3.2	Definições de Probabilidade	25
2.3.2.1	Definição clássica de probabilidade	25
2.3.2.2	Definição experimental de probabilidade	25
2.3.3	Axiomas e propriedades da probabilidade	26
2.3.4	Probabilidade Condicional	27
2.3.5	Regra do Produto	27
2.3.6	Independência entre Eventos	28
2.3.7	Teorema da Probabilidade Total	28
2.3.8	Teorema de Bayes	29
2.4	VARIÁVEIS ALEATÓRIAS	29
2.4.1	Função de probabilidade	29
2.4.2	Função de probabilidade acumulada	30
2.4.3	Valor esperado e variância	30
2.4.3.1	Propriedades do Valor Esperado	30
2.4.3.2	Propriedades da Variância	31
2.5	DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE DISCRETAS	32
2.5.1	Distribuição de Bernoulli	32
2.5.2	Distribuição Binomial	33
2.5.3	Distribuição de Poisson	33
2.6	DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE CONTÍNUAS	34
2.6.1	Distribuição Uniforme	34
2.6.2	Distribuição Normal	35

2.7	DISTRIBUIÇÃO AMOSTRAIS	36
2.7.1	Distribuição Amostral da Média	36
2.7.2	Distribuição Amostral da Proporção	37
2.8	LEI DOS GRANDES NÚMEROS	38
2.9	NÚMEROS ALEATÓRIOS	39
2.10	MÉTODO DE MONTE CARLO	40
2.10.1	Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais	41
2.10.1.1	Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais definidas	42
2.10.1.2	Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais impróprias	42
2.10.1.3	Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais múltiplas	42
3	RESULTADOS E DISCUSSÕES	44
3.1	VALIDAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO	44
3.2	APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO PARA ESTIMATIVA DE INTEGRAIS NÃO-ELEMENTARES	47
3.2.1	Estimativa para a integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ no intervalo [-1, 1].	47
3.2.2	Estimativa para a integral da função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ no intervalo [-4, 4]	49
3.2.3	Aplicação do método de Monte Carlo para outras integrais não- elementares	50
4	CONCLUSÃO	52
5	SUGESTÃO DE TRABALHOS FUTUROS	53
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54
	APÊNDICE A – ROTINAS ESCRITAS EM PYTHON UTILIZADAS NA ELABORAÇÃO DO TRABALHO	56
A.1	ROTINA: MÉTODO DE MONTE CARLO	56
A.2	ROTINA: REGRA DO TRAPÉZIO MÚLTIPLA	57
A.3	ROTINA: REGRA 1/3 DE SIMPSON MÚLTIPLA	58

1 INTRODUÇÃO

A literatura moderna atribui que os inventadores do cálculo foram *sir* Isaac Newton (1643-1727) e Gottfried Wilhelm Leibniz (1646-1716). Entretanto sabemos que as ideias básicas por trás da integração foram investigados há mais de 2500 anos pelos antigos gregos, tais como Eudócio e Arquimedes e que os métodos de encontrar as tangentes foram inventados por Pierre Fermat (1601-1665) e Issac Barrow (1630-1677), entre outros. Barrow foi professor na University of Cambridge, Inglaterra, e teve uma grande influência sobre Newton, pois foi o primeiro a entender a relação inversa existente entre a derivação e integração. O que Leibniz e Newton fizeram foi usar essa relação, na forma do Teorema Fundamental do Cálculo, para desenvolver o cálculo de uma forma mais sistemática e é nesse sentido que é atribuída a Leibniz e Newton a invenção do cálculo (STEWART, 2010).

O Teorema Fundamental do Cálculo afirma que dado uma função contínua f em um intervalo $[a,b]$:

1. Se $g(x) = \int_a^x f(t) dt$, então $g'(x) = f(x)$;
2. $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$, quando F for qualquer primitiva de f , isto é, $F' = f$.

Essa versão afirma que se tomarmos uma função F , a derivarmos e depois integrarmos o resultado, chegaremos de volta à função original F , mas na forma $F(b) - F(a)$.

O Teorema Fundamental do Cálculo é inquestionável o mais importante do cálculo e realmente é um dos grandes feitos da mente humana. Antes de sua descoberta, desde os tempos de Eudócio e Arquimedes até os de Galileu e Fermat, os problemas de encontrar áreas, volumes e comprimento de curva eram tão difíceis que somente um gênio poderia fazer frente ao desafio. Agora, porém armado com o método sistemático que Leibniz e Newton configuraram a partir do Teorema Fundamental do Cálculo estes problemas desafiadores se tornaram mais acessíveis para todos nós (STEWART, 2010).

A segunda parte de Teorema Fundamental do Cálculo fornece um método muito poderoso para calcular integral definida de uma função, desde que possamos encontrar uma primitiva desta função. Porém a tarefa de encontrar primitivas de funções não é trivial, em alguns casos, é impossível determinar primitivas em termos de funções elementares como polinômios, senos e cossenos, logaritmos e exponenciais, ou combinações e composições destas funções.

Quando não é possível calcular uma integral definida com uma primitiva, ou seja quando temos uma integral não elementar que não pode ser avaliada na forma de uma função elementar, uma solução é recorrer a série de Taylor, desde que a função seja infinitamente derivável, caso contrário segundo Guidorizzi (2013) não se pode gerar uma série de Taylor.

Na situação em que não é possível aplicar a série de Taylor uma alternativa é recorrer a integração numérica, seja pela Regra do Trapézio ou Regras 1/3 de Simpson. De acordo com Almeida (2010) para uma função $f(x)$ a ser integrada entre os limites “ a ” até “ b ”, a Regra do Trapézio calcula a média da função nessas extremidades e multiplica pelo comprimento do intervalo. Como essa aproximação fica muito longe da curva original, a Regra do Trapézio melhora o resultado dividindo o intervalo em vários subintervalos e realizando o mesmo cálculo em cada um deles e, portanto, a aproximação do valor da integral é igual a soma dos cálculos feitos em cada intervalo.

Já a Regra 1/3 de Simpson de acordo com Press e colaboradores (1988) é considerada mais precisa do que a Regra do Trapézio, pois ela consiste na aproximação da curva formada da função contínua $f(x)$ a ser integrada entre os limites “ a ” até “ b ”, por uma função de segunda ordem, criando uma parábola e a aproximando de uma curva. Logo na Regra do Trapézio, os pontos “ a ” até “ b ” são interligados por uma linha reta e na Regra 1/3 de Simpson, esses pontos são ligados por uma parábola, que pode se aproximar mais da curva da função a ser integrada.

Alternativamente a série de Taylor e as Regras do Trapézio e Simpson pode-se utilizar segundo Press *et al.* (2011) o método de Monte Carlo para a solução numérica de integrais. De acordo com IBM Cloud Learn Hub (2020) o método de Monte Carlo ou uma simulação de probabilidade múltipla, é uma técnica matemática, que é usada para estimar os possíveis resultados de um evento incerto. O método de Monte Carlo foi inventado por John von Neumann e Stanislaw Ulam durante a Segunda Guerra Mundial para melhorar a tomada de decisão em condições incertas. Foi nomeado em homenagem a uma conhecida cidade de cassinos, chamada Mônaco, uma vez que o acaso é principal elemento da abordagem de modelagem, semelhante a um jogo de roleta.

O método de Monte Carlo tipicamente envolve a geração de observações de alguma distribuição de probabilidades e o uso da amostra obtida para aproximar a função de interesse. A ideia geral do método é escrever a integral que se deseja calcular como um valor esperado. Na estimativa da integral o método de Monte Carlo gera aleatoriamente, usando uma distribuição de probabilidade uniforme, valores aleatórios para a variável independente (x) em um certo intervalo $[a, b]$. O método preenche todo intervalo $[a, b]$ com pontos aleatórios e através de mudança de variável na função $f(x)$ a ser integrada obtém se uma nova função $g(y)$. Para se obter uma estimativa para a integral basta calcular o valor médio da função $g(y)$ calculada para os pontos aleatórios gerados da variável x .

Neste contexto este trabalho tem como objetivo estudar a solução numérica de integrais não elementares pelo método de Monte Carlo comparando a eficiência deste método com e a Regra do Trapézio Múltipla e a Regra 1/3 de Simpson Múltipla.

1.1 OBJETIVOS

1.1.1 Objetivo Geral

Estudar a solução numérica de integrais não elementares pelo método de Monte Carlo

1.1.2 Objetivos Específicos

- Problematizar a dificuldade de encontrar soluções para integrais não elementares;
- Descrever o método de Monte Carlo e sua fundamentação teórica entorno da Lei dos Grandes Números e conceitos probabilísticos;
- Implementar computacionalmente o método de Monte Carlo em *Spyder*;
- Validar o algoritmo de Monte Carlo em *Spyder* com soluções de integrais definidas elementares;
- Avaliar a eficiência do método de Monte Carlo em relação a Regra do Trapézio Múltipla e a Regra 1/3 de Simpson Múltipla.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão bibliográfica desta monografia abrange duas grandes áreas da matemática que são o cálculo e a probabilidade. Inicialmente trataremos de uma forma muito sucinta dos principais resultados do cálculo de integrais, seja por meio de forma exata ou de forma numérica. Em seguida iremos nos dedicar a alguns conceitos importantes de probabilidade. A ideia no final é juntar estas duas grandes áreas no desenvolvimento teórico no que tange o método de Monte Carlo para o cálculo de integrais impróprias.

2.1 INTEGRAL

O conceito da integral surgiu a partir da necessidade de se calcular a área de uma região curva não simétrica e de problemas de distâncias. Essas foram algumas das situações para o surgimento da integral, mas a integral possui várias aplicações além dessas, como o cálculo de áreas, volumes e suas aplicações na física e na biologia.

2.1.1 Integral Definida

Nesta seção será definido a integral definida a partir da soma de Riemann.

Definição 1. *Se é uma f função contínua definida em $a \leq x \leq b$, dividimos o intervalo $[a,b]$ em n subintervalos de comprimentos iguais $\Delta x = (b-a)/n$. Sejam $x_0 (= a)$, x_1 , x_2 , ..., $x_n (= b)$ as extremidades desses subintervalos, e sejam pontos amostrais arbitrários nesses subintervalos, de forma que x_i^* esteja no i -ésimo subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$. Então a integral definida de f de a até b é*

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n f(x_i^*) \Delta x. \quad (1)$$

A soma

$$\sum_{i=1}^n f(x_i^*) \Delta x \quad (2)$$

é chamada de soma de Riemann, em homenagem ao matemático Bernhard Riemann (1826-1866). Em outras palavras a Definição 1 diz que a integral definida de uma função integrável pode ser aproximada com qualquer grau de precisão desejado por uma soma de Riemann.

2.1.2 O Teorema Fundamental do Cálculo

O Teorema Fundamental do Cálculo estabelece uma conexão entre os dois ramos do cálculo: o cálculo diferencial e o cálculo integral, ou seja, ele dá a relação inversa precisa entre a derivada e a integral. Issac Barrow (1630-1677) professor na University of Cambridge na Inglaterra foi o primeiro a entender a relação inversa existente entre a derivação e integração. Porém foram Leibniz e Newton que exploraram essa relação e usaram-na para desenvolver o cálculo de uma forma mais sistemática (STEWART, 2010).

O Teorema Fundamental do Cálculo costuma-se ser dividido em duas partes, em que a primeira parte é:

Teorema 1. (O Teorema Fundamental do Cálculo, Parte 1) Se f for contínua em $[a, b]$, então a função g definida por

$$g(x) = \int_a^x f(t) dt \quad a \leq x \leq b \quad (3)$$

é contínua em $[a, b]$ e derivável em (a, b) e $g'(x) = f(x)$.

Se uma integral definida tiver um limite de integração superior variável, um limite de integração inferior constante e um integrando contínuo, então a derivada da integral em relação ao seu limite superior é igual ao integrando calculando no limite superior (ANTON, BIVENS, DAVIS, 2014).

Já a segunda parte do Teorema Fundamental do Cálculo, que segue da primeira parte, nos fornece um método muito mais simples para o cálculo de integrais.

Teorema 2. (O Teorema Fundamental do Cálculo, Parte 2) Se f for contínua em $[a, b]$, então

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a) \quad a \leq x \leq b \quad (4)$$

onde F é qualquer primitiva de $f(x)$, isto é, uma função tal que $F' = f(x)$.

A segunda parte do Teorema Fundamental afirma que se conhecermos uma primitiva F de $f(x)$, então poderemos calcular $\int_a^b f(x) dx$ simplesmente subtraindo os valores de F nas extremidades do intervalo $[a, b]$ (STEWART, 2010).

Teorema 3. (O Teorema Fundamental do Cálculo) Suponha que $f(x)$ seja contínua em um intervalo $[a, b]$:

1. Se $g(x) = \int_a^x f(t) dt$, então $g'(x) = f(x)$;
2. $\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$, quando F for qualquer primitiva de f , isto é, $F' = f(x)$.

Essa versão afirma que se tomarmos uma função F , a derivarmos e depois integrarmos o resultado, chegaremos de volta à função original F , mas na forma $F(b) - F(a)$.

2.1.3 Integrais Não-Elementares

Integrais não-elementares são integrais onde não é possível encontrar uma primitiva em termos elementares, ou seja, a sua solução não pode ser escrita como uma composição finita funções elementares como polinômios, senos e cossenos, logaritmos e exponenciais, ou combinações e composições destas funções. A seguir são apresentados alguns exemplos de funções deste tipo:

- $f(x) = \sqrt{1-x^4}$
- $f(x) = \ln[\ln(x)]$
- $f(x) = \frac{1}{\ln x}$
- $f(x) = \frac{e^x}{x}$
- $f(x) = e^{e^x}$
- $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$
- $f(x) = \sin(x^2)$
- $f(x) = \cos(x^2)$

Quando não é possível calcular uma integral definida com uma primitiva, ou seja quando temos uma integral não elementar que não pode ser avaliada na forma de uma função elementar, uma solução é recorrer a série de Taylor, desde que a função seja infinitamente derivável, caso contrário segundo Guidorizzi (2013) não se pode gerar uma série de Taylor. Já na situação em que não é possível aplicar a série de Taylor uma alternativa é recorrer a integração numérica, seja pela Regra do Trapézio ou Regras de Simpson.

2.2 INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

A ideia básica da integração numérica é a substituição da função $f(x)$ por uma função que a aproxime razoavelmente no intervalo $[a,b]$ e que sua integral seja de fácil determinação.

2.2.1 Fórmulas de integração de Newton-Cotes

As *fórmulas de Newton-Cotes*, também chamadas de Regras de Quadratura de Newton-Cotes, são os esquemas mais comuns de integração numérica (CHAPRA, CANALE, 2008). A ideia básica por trás dessas fórmulas é substituir a função original que se deseja integrar por uma função aproximadora simples, de fácil integração, e avalia-lá em pontos igualmente espaçados:

$$I = \int_a^b f(x) dx \cong \int_a^b f_k(x) dx \quad (5)$$

em que $f_k(x)$ é um polinômio da forma

$$f_k(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{k-1}x^{k-1} + a_kx^k \quad (6)$$

em que k é o grau do polinômio.

As fórmulas de Newton-Cotes são classificadas, segundo as informações nos extremos do intervalo de integração, em **fórmulas fechadas**, que utilizam os valores de f nos extremos de integração, e **fórmulas abertas**, que não utilizam os valores de f pelo menos em um dos extremos de integração (SPERANDIO, MENDES E SILVA, 2003). Vamos enfatizar nesta seção as fórmulas fechadas mais importantes como as Regras do Trapézio e Simpson e suas variações.

2.2.1.1 As Regras do Trapézio

A *Regra do Trapézio* é a primeira fórmula de integração de Newton-Cotes, ou seja a mais simples, pois ela corresponde ao caso em que o polinômio na Eq. (6) é de primeiro grau:

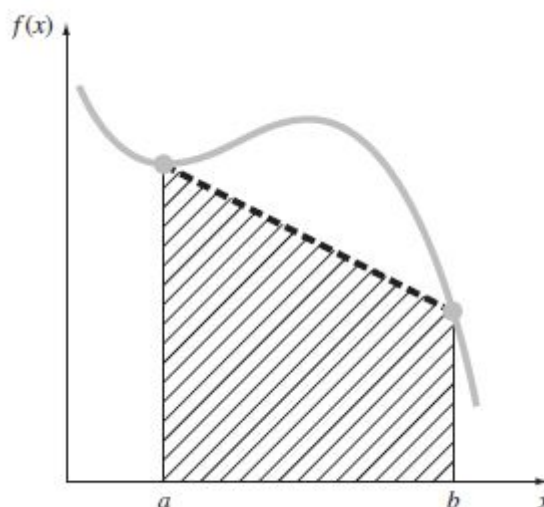
$$I = \int_a^b f(x) dx \cong \int_a^b f_1(x) dx \quad (7)$$

Podemos representar uma reta pela seguinte equação:

$$f(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \quad (8)$$

A área sob essa reta é uma estimativa para a integral de $f(x)$ entre os extremos a e b , conforme pode ser observado na Figura 1.

Figura 1 – Descrição gráfica da regra do trapézio.



Fonte: Adaptado de Chapra e Canale, 2008.

A estimativa da integral de $f(x)$ entre os extremos a e b é:

$$I \cong \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a} (x - a) \right] dx \quad (9)$$

O resultado da integração é

$$I \cong (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2} \quad (10)$$

que é chamada *regra do trapézio*. Observe geometricamente que a regra do trapézio é equivalente a aproximar a integral pela área do trapézio sob a reta ligando $f(a)$ e $f(b)$.

Observe quando empregamos a integral sob um segmento de reta para aproximar a integral sob a curva, conforme podemos observar na Figura 1, obviamente incidimos em um erro que pode ser considerável. Uma estimativa para o erro de truncamento local de uma única aplicação da regra do trapézio é

$$E_t = \frac{1}{12} f''(\xi) (b - a)^3 \quad (11)$$

em que ξ está em algum ponto do intervalo entre a e b . Observe que se a função que está sendo integrada for linear, a regra dos trapézios será exata. Caso contrário, para funções com derivadas de segunda ordem e de ordem superior não-nulas pode ocorrer algum erro.

Como podemos observar, tanto pela Figura 1 quanto pela expressão de erro, Eq. (11), se o intervalo de integração é grande, a regra do trapézio fornece resultados que pouco têm a ver com o valor da integral exata. Neste caso, o que podemos fazer para melhor a acurácia da regra do trapézio é dividir o intervalo de integração a e b em segmentos de igual tamanho e aplicar a regra a cada segmento. Por fim basta, somar as áreas correspondentes de todos os segmentos³. Este procedimento também é conhecido como *Regra do Trapézio Composta*.

Considerando que existem m segmentos de largura igual, a fórmula geral da *Regra do Trapézio Composta* é dada por:

$$I \cong (b - a) \frac{f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_i) + f(x_m)}{2m} \quad (12)$$

Como a soma dos coeficientes de $f(x)$ no numerador dividido por $2m$ é igual a 1, a altura média representa uma média ponderada dos valores da função. De acordo com a Equação (12), os pontos interiores têm um peso duas vezes maior do que as extremidades $f(x_0)$ e $f(x_m)$. Um erro para a aplicação múltipla da regra do trapézio pode ser obtido pela soma dos erros individuais em cada segmento, o que dá

$$E_t = -\frac{(b - a)^3}{12m^3} \sum_{i=1}^m f''(\xi_i) \quad (13)$$

em que $f''(\xi_i)$ é a segunda derivada em um ponto ξ_i no segmento i . Esse resultado pode ser simplificado por uma estimativa do valor médio da segunda derivada no intervalo todo como

$$\bar{f}'' \approx \frac{\sum_{i=1}^m f''(\xi_i)}{m}. \quad (14)$$

Portanto, $\sum_{i=1}^m f''(\xi_i) \approx m\bar{f}''$ e podemos reescrever

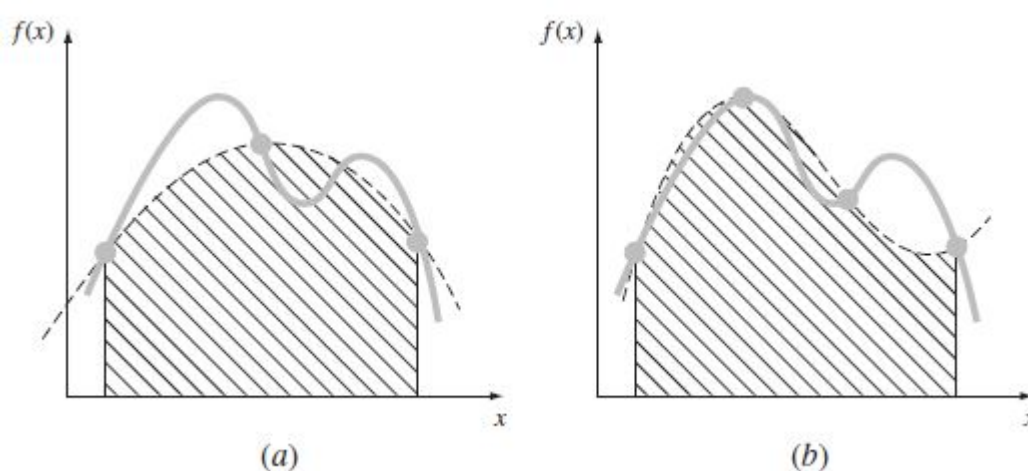
$$E_a = -\frac{(b-a)^3}{12m^2} \bar{f}'' \quad (15)$$

Logo, se o número de segmentos for dobrado, o erro de truncamento será dividido por quatro.

2.2.1.2 As Regras de Simpson

Uma alternativa eficaz a regra do trapézio, mesmo para a forma composta, para obter uma estimativa mais acurada de uma integral é usar polinômios de grau mais alto para ligar os pontos. Por exemplo de acordo com (Chapra e Canale, 2008) se usar o ponto médio entre $f(a)$ e $f(b)$, os três pontos podem ser ligados por uma parábola, conforme pode ser observado na Figura 2. Se existirem dois pontos igualmente espaçados entre $f(a)$ e $f(b)$, os quatro pontos podem ser ligados por um polinômio de 3º grau. As fórmulas que resultam de tomar as integrais desses polinômios são chamadas de regras de Simpson.

Figura 2 – Descrição gráfica: (a) regra 1/3 de Simpson; (b) regra 3/8 de Simpson.



Fonte: Adaptado de Chapra e Canale, 2008.

A segunda formula fechada de Newton-Cotes é obtida quando um polinômio interpolador de segundo grau é substituído na Eq. (5):

$$I = \int_a^b f(x) dx \cong \int_a^b f_2(x) dx \quad (16)$$

Se a e b forem designados por x_0 e x_2 e se $f_2(x)$ for representado por um polinômio de Lagrange de segundo grau, a integral se torna através de manipulações algébricas na seguinte fórmula:

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6} \quad (17)$$

em que $a = x_0$, $b = x_2$ e x_1 é o ponto médio entre a e b , o qual é dado por $(b-a)/a$. Essa equação é conhecida como *regra 1/3 de Simpson*.

A regra 1/3 de Simpson para um único segmento tem um erro de truncamento de

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi) \quad (18)$$

observe que a regra 1/3 de Simpson é mais acurada do que a regra do trapézio. A comparação com a Equação (11) indica que ela é mais acurada do que o esperado. Em vez de ser proporcional à terceira derivada, o erro é proporcional à quarta derivada. Além disso, de acordo com Burden e Faires (2008) a maior precisão da regra de Simpson, em relação à regra dos Trapézio, é intuitivamente explicada pelo fato de que a regra de Simpson inclui um cálculo de ponto médio, que oferece um melhor equilíbrio à aproximação.

Do mesmo modo como no caso da regra do trapézio, a regra 1/3 de Simpson pode ser melhorada dividindo-se o intervalo de integração em diversos segmentos de mesmo comprimento, $h = (b-a)/m$, e após algumas manipulações algébricas a integral se torna:

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,5}^{m-1} f(x_i) + 2 \sum_{j=2,4,6}^{m-2} f(x_j) + f(x_m)}{3m} \quad (19)$$

A estimativa do erro para a aplicação múltipla da regra 1/3 de Simpson é obtida da mesma forma que para a regra do Trapézio composta, somando-se os erros individuais para os segmentos e fazendo a média da derivada, resultando em:

$$E_a = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} \bar{f}^{(4)} \quad (20)$$

em que $\bar{f}^{(4)}$ é o valor médio da quarta derivada no intervalo.

De maneira análoga a regra do Trapézio e a regra 1/3 de Simpson, podemos obter a terceira fórmula fechada de Newton-Cotes, ajustando um polinômio de Lagrange de quarta ordem a quatro pontos e depois integrando, ou seja a integral resultante fica:

$$I = \int_a^b f(x) dx \cong \int_a^b f_3(x) dx \quad (21)$$

e fornece a fórmula geral

$$I \cong \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)] \quad (22)$$

em que $h = (b-a)/3$ e essa equação é chamada de *regra 3/8 de Simpson* por que h é multiplicada por 3/8. Através de algumas manipulações algébricas a regra 3/8 de Simpson pode ser expressa como:

$$I \cong (b-a) \frac{[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]}{8} \quad (23)$$

A regra 3/8 de Simpson tem um erro de

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\xi) \quad (24)$$

Observe que como o denominador da Equação (25) é maior do que o da Equação (20), a regra 3/8 de Simpson é mais precisa do que a regra de 1/3 de Simpson. Entretanto de acordo com Chapra e Canale, (2008) a regra 1/3 de Simpson é usualmente o método preferido, pois alcança uma acurácia de terceira ordem com três pontos em vez dos quatro pontos necessários para a versão 3/8. Porém, a regra 3/8 tem utilidade quando o número de segmentos é ímpar.

2.3 PROBABILIDADE

A Teoria da Probabilidade é o Ramo da Matemática que cria, desenvolve e em geral pesquisa modelos que podem ser utilizados para estudar experimentos ou fenômenos aleatórios (MORGADO, 2006). Nesta seção iremos ver noções e conceitos básicos sobre a Teoria de Probabilidade. Detalhes e demonstrações dos teoremas apresentados podem ser encontradas em BARBETTA (2010) e MORGADO (2006).

2.3.1 Espaço Amostral e Eventos

Seja um experimento aleatório qualquer.

Definição 2. O conjunto de “todos” os possíveis resultados do experimento é chamado de **espaço amostral** e é denotado pela letra grega Ω .

Exemplos Seguem alguns experimentos aleatórios com os respectivos espaços amostrais:

- a) lançamento de um dado e observação da face voltada para cima: $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$;
- b) retirada de uma carta de um baralho comum (52 cartas) e observação do naipe: $\Omega = \{\text{copas, espadas, ouros, paus}\}$;
- c) o número de mensagens que são transmitidas corretamente por dia em uma rede de computadores: $\Omega = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$
- d) a observação do diâmetro, em mm , de um eixo produzido em uma metalúrgica: $\Omega = \{d, \text{ tal que } d > 0\}$

O espaço amostral pode ser:

1. *finito*, formado por um número limitado de resultados possíveis, como nos exemplos (a) e (b);
2. *infinito enumerável*, formado por um número infinito de resultados, como no exemplo (c);
3. *infinito*, formado por intervalos de números reais, como no exemplo (d).

Definição 3. Um **evento** é qualquer subconjunto do espaço amostral finito: A é um evento $\Leftrightarrow A \subseteq \Omega$.

Exemplos Seja o experimento do lançamento de um dado. Temos $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. São exemplos de eventos:

- a) $A = \text{número par dado} = \{2, 4, 6\}$;
- b) $B = \text{número maior que 3 do dado} = \{4, 5, 6\}$;
- c) $C = \text{número 1} = \{1\}$;

Como um evento é um subconjunto do espaço amostral, então todos os conceitos da teoria de conjuntos podem ser aplicados aos eventos. Consideremos A e B eventos quaisquer, podemos observar na Tabela 1 que:

Tabela 1 – Principais operações da teoria dos conjuntos

Operação	Notação	Conjunto	Evento
a) união	$A \cup B$	reúne os elementos de ambos os conjuntos	ocorre quando ocorrer pelo menos um deles (A , B ou ambos)
b) interseção	$A \cap B$	formado somente pelos elementos que estão em A e B	ocorre quando ocorrer ambos os eventos (A e B)
c) complementar	\bar{A}	formado pelo elementos que não estão em A	ocorre quando não ocorrer o evento A (não A)

Definição 4. *Eventos são ditos **mutualmente exclusivos** se e só se eles não puderem ocorrer simultaneamente, ou seja, para dois eventos quaisquer, A e B , temos que A e B são mutuamente exclusivos se e somente se $A \cap B = \emptyset$*

2.3.2 Definições de Probabilidade

2.3.2.1 Definição clássica de probabilidade

Se um experimento aleatório tem n resultados *igualmente prováveis*, e n_A desses resultados pertencem a certo evento A , então a probabilidade de ocorrência do evento A será:

$$P(A) = \frac{n_A}{n} \quad (25)$$

Exemplo: Qual é a probabilidade de obtermos uma face “par” no lançamento de um dado se seis faces perfeitamente simétrico?

Solução: Veja que $\Omega = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ donde $j = 6$ e $A = \{2, 4, 6\}$ em que $n_A = 3$. Logo, $P(A) = \frac{3}{6} = \frac{1}{2}$.

2.3.2.2 Definição experimental de probabilidade

Muitas vezes, a alocação de probabilidade baseia-se em observações do passado. Seja um experimento aleatório com espaço amostral Ω e um evento A de interesse. Suponha que esse experimento seja repetido k vezes e o evento A ocorreu $k(A)$ vezes. A frequência relativa do evento A é dada por:

$$f(A) = \frac{k(A)}{k} \quad (26)$$

À medida que o experimento é repetido mais e mais vezes, sob as mesmas condições, a frequência relativa do evento A tenderá a ficar cada vez mais próximo da probabilidade de ocorrência do evento A , ou seja

$$P(A) = \lim_{k \rightarrow \infty} f(A) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k(A)}{k} \quad (27)$$

2.3.3 Axiomas e propriedades da probabilidade

Independentemente de como são obtidas, usando a definição clássica ou experimental, as probabilidades atendem a alguns axiomas.

Definição 5. *Seja Ω um espaço amostral finito. Uma função P definida para todos os subconjuntos de Ω é chamada uma probabilidade se*

- a) $0 \leq P(A) \leq 1$, para todo evento $A \subseteq \Omega$;
- b) $P(\Omega) = 1$;
- c) Se A e B são eventos disjuntos, então $P(A \cup B) = P(A) + P(B)$

O axioma (a) afirma que uma probabilidade é sempre um número entre 0 e 1. O axioma (b) afirma que, ao realizar o experimento, sempre vai ocorrer algum dos resultados possíveis, razão pela qual o espaço amostral é chamado de *evento certo*. Já o axioma (c) afirma que, ao unir eventos formados por resultados diferentes, a probabilidade de ocorrer essa união é dada pela soma das probabilidades de cada evento.

Com base nos axiomas apresentados, é possível escrever algumas propriedades da probabilidade:

1. Dado que o experimento é realizado, algum resultado certamente vai ocorrer. Assim, a probabilidade de um evento impossível é nula:

$$P(\emptyset) = 0 \quad (28)$$

2. Sejam A e \bar{A} eventos do espaço amostral ω . Como a probabilidade de ocorrência de Ω é igual a 1, a probabilidade de ocorrência do evento complementar a A , pode ser escrita como:

$$P(\bar{A}) = 1 - P(A) \quad (29)$$

3. Sejam A e B eventos quaisquer, então:

$$P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B) \quad (30)$$

Para três eventos quaisquer, a regra da adição é dada por:

$$P(A \cup B \cup C) = P(A) + P(B) + P(C) - P(A \cap B) - P(A \cap C) - P(B \cap C) + P(A \cap B \cap C) \quad (31)$$

2.3.4 Probabilidade Condicional

Muitas vezes, há interesse em calcular a probabilidade de ocorrência de um evento A , dada a ocorrência de um evento B . Exemplos:

- a) Qual a probabilidade de chover amanhã em Balneário Camboriú, sabendo que choveu hoje?
- b) Qual é a probabilidade de um dispositivo eletrônico funcionar sem problemas por 200 horas consecutivas, sabendo que ele já funcionou por 100 horas?

Em outras palavras, queremos calcular a probabilidade de ocorrência de A condicionada à ocorrência prévia de B . Essa probabilidade é representada por $P(A|B)$ (lê-se *probabilidade de A dado B*) e é definida por:

Definição 6. Sejam A e B eventos quaisquer, sendo $P(B) > 0$. Definimos probabilidade condicional de A dado B por:

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \quad (32)$$

2.3.5 Regra do Produto

Como consequência da probabilidade condicional, pode-se definir a Regra do Produto, obtida ao isolar a probabilidade da intersecção. A regra do produto possibilita calcular a probabilidade de ambos os eventos A e B ocorrerem:

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} \Rightarrow P(A \cap B) = P(B) \cdot P(A|B) \quad (33)$$

$$P(B|A) = \frac{P(B \cap A)}{P(A)} \Rightarrow P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B|A) \quad (34)$$

ou seja,

$$P(A \cap B) = P(B \cap A) = P(B) \cdot P(A|B) = P(A) \cdot P(B|A) \quad (35)$$

Para três eventos, a regra do produto é dada por:

$$P(A \cap B \cap C) = P(A) \cdot P(B|A) \cdot P(C|A \cap B) \quad (36)$$

É importante que seja observada a sequencia lógica dos eventos para montar as expressões precedentes.

2.3.6 Independência entre Eventos

Dois eventos são considerados independentes se a probabilidade de ocorrência de um não influencia na probabilidade de ocorrência do outro. Se A e B são independentes, então temos que:

$$P(A \cap B) = P(A) \cdot P(B) \quad (37)$$

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)} = \frac{P(A) \cdot P(B)}{P(B)} \Rightarrow P(A|B) = P(A) \quad (38)$$

$$P(B|A) = \frac{P(A \cap B)}{P(A)} = \frac{P(A) \cdot P(B)}{P(A)} \Rightarrow P(B|A) = P(B) \quad (39)$$

Para $P(A) > 0$ e $P(B) > 0$.

2.3.7 Teorema da Probabilidade Total

Na Teoria de Probabilidade, a lei da probabilidade total é uma regra fundamental que relaciona probabilidades marginais e probabilidades condicionais. Ela expressa a probabilidade total de um resultado que pode ser realizado através de vários eventos distintos. Portanto o Teorema da Probabilidade Total pode ser enunciado da seguinte forma:

Teorema 4. *Suponha que A_1, A_2, \dots, A_k sejam k eventos mutuamente exclusivos e exaustivos do espaço amostral Ω . Então para qualquer evento B deste espaço amostral, a probabilidade de ocorrência de B será dada por:*

$$P(B) = P(A_1 \cap B) + P(A_2 \cap B) + \dots + P(A_k \cap B) \quad (40)$$

Por meio da Regra do Produto, podemos reescrever cada uma destas interseções:

$$P(B) = P(A_1) \cdot P(B|A_1) + P(A_2) \cdot P(B|A_2) + \dots + P(A_k) \cdot P(B|A_k) \quad (41)$$

ou

$$P(B) = \sum_{i=1}^n P(A_i) \cdot P(B|A_i) \quad (42)$$

Observe, que algumas $P(B|A_i)$ poderão assumir valor zero por não haver interseção entre B e A_i . Logo, o Teorema da Probabilidade Total pode ser interpretado fisicamente como uma medida do peso de cada um dos eventos A_i , na contribuição para formar o evento B .

2.3.8 Teorema de Bayes

O Teorema de Bayes está intimamente relacionado ao Teorema da Probabilidade Total. Observe:

Teorema 5. *Suponha que A_1, A_2, \dots, A_k sejam k eventos mutuamente exclusivos e exaustivos do espaço amostral S . O Teorema de Bayes (em referência a Thomas Bayes) permite calcular a probabilidade de que um dos eventos A_i ocorra, sabendo que o evento B ocorreu:*

$$P(A_i|B) = \frac{P(A_i \cap B)}{P(B)} \leftrightarrow P(A_i|B) = \frac{P(A_i) \cdot P(B|A_i)}{P(B)} \quad (43)$$

Em que, $P(B)$ se refere ao Teorema da Probabilidade Total, dado pela Equação (41) ou Equação (42).

2.4 VARIÁVEIS ALEATÓRIAS

Um conceito de fundamental importância para a estatística indutiva é o de *variáveis aleatórias*, ou seja, de uma forma informal uma **variável aleatória** pode ser entendida como uma variável quantitativa, cujo resultado (valor) depende de fatores aleatórios. Além disso, ela pode ser pensada como uma função com valores numéricos utilizada para expressar os resultados de um experimento aleatório. Formalmente uma variável aleatória pode ser definida como:

Definição 7. *Variável aleatória é uma função real definida no espaço Ω tal que $[X \leq x]$ é evento aleatório para todo $x \in \mathbb{R}$.*

As variáveis aleatórias pode ser divididas entre:

- *Discreta:* Os possíveis resultados estão contidos em um conjunto finito ou enumerável;
- *Contínua:* Os possíveis resultados abrangem o intervalo de números reais.

2.4.1 Função de probabilidade

Definida uma variável aleatória discreta, temos a descrição do que pode ocorrer no experimento aleatório. Em alguns casos e sob certas suposições, temos duas informações:

- a) quais resultados podem ocorrer;
- b) qual é a probabilidade de cada resultado ocorrer.

Dessa forma, a distribuição de probabilidades de uma variável aleatória X é a descrição do conjunto de probabilidades associadas aos possíveis valores de X . Podemos definir função de probabilidade para uma variável aleatória discreta como:

Definição 8. Se X for discreta, com possíveis valores $\{x_1, x_2, \dots\}$ então a distribuição de probabilidades de X pode ser apresentada pela chamada **função de probabilidade**, que associa a cada valor possível x_i a sua probabilidade de ocorrência $p(x_i)$, ou seja:

$$p(x_i) = P(X = x_i) \quad (1, 2, \dots) \quad (44)$$

Uma função de probabilidade deve satisfazer:

- a) $p(x_i) \geq 0$
- b) $\sum_i p(x_i) = 1$

2.4.2 Função de probabilidade acumulada

Outra forma de representar uma distribuição de probabilidade de uma variável aleatória é através da de sua função de distribuição acumulada, que é definida por:

$$F(x) = P(X \leq x), \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (45)$$

Observe, que para qualquer $x \in \mathbb{R}$, a função de distribuição acumula descreve a probabilidade de ocorrer um valor até x .

2.4.3 Valor esperado e variância

O *Valor Esperado* de uma variável aleatória (X) é a média teórica (ou média populacional) de uma variável aleatória.

$$E(X) = \mu_X = \sum_i x_i \cdot p(x_i) \quad (46)$$

A *Variância* é uma medida de dispersão ou variabilidade em uma variável aleatória (X). É a média dos desvios quadráticos em torno da média, ou seja

$$V(X) = \sigma_X^2 = \sum_i (x_i - \mu_X)^2 \cdot p(x_i) \quad \text{ou} \quad V(X) = E(X^2) - [E(X)]^2 \quad (47)$$

O *Desvio Padrão* de uma variável aleatória (X) é uma medida de propagação da distribuição de probabilidade

$$\sigma_X = \sqrt{\sigma_X^2}$$

2.4.3.1 Propriedades do Valor Esperado

Sendo c uma constante e X uma variável aleatória, as seguintes relações são válidas:

1. O valor esperado de uma constante é a própria constante.

$$E(c) = c$$

2. Somando-se ou subtraindo-se uma constante à variável X , seu valor esperado ficará somado ou subtraído pela constante.

$$E(X + c) = E(X) + c$$

3. Multiplicando-se uma variável X por uma constante, seu valor esperado ficará multiplicado por essa constante.

$$E(c \cdot X) = c \cdot E(X)$$

4. O valor esperado da soma ou subtração de duas variáveis aleatórias quaisquer é igual a soma ou a subtração dos valores esperados das duas variáveis.

$$E(X + Y) = E(X) + E(Y)$$

$$E(X - Y) = E(X) - E(Y)$$

2.4.3.2 Propriedades da Variância

Sendo c uma constante e Y uma variável aleatória, as seguintes relações são válidas:

1. A variância de uma constante é igual a zero.

$$V(c) = 0$$

2. Somando-se ou subtraindo-se uma constante à variável X , sua variância não se altera.

$$V(X + c) = V(X)$$

3. Multiplicando-se uma variável X por uma constante, sua variância fica multiplicada pelo quadrado da constante.

$$V(c \cdot X) = c^2 \cdot V(X)$$

4. A variância da soma ou da subtração de duas variáveis aleatórias independentes é igual a soma das variâncias das duas variáveis.

$$V(X + Y) = V(X) + V(Y)$$

$$V(X - Y) = V(X) + V(Y)$$

2.5 DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE DISCRETAS

Nesta seção, serão apresentados alguns modelos de distribuição de probabilidade discretas padrões, como a *Distribuição de Bernoulli*, *Distribuição Binomial* e *Distribuição de Poisson*.

2.5.1 Distribuição de Bernoulli

Considere uma única tentativa de um experimento aleatório em que podemos ter *sucesso* ou *fracasso* (falha) nesta tentativa. Veja alguns exemplos:

- Lançar um dado e, ao cair, e observar se ocorreu a face *seis* ou não;
- Selecionar ao acaso uma pessoa de uma população e verificar se possui ou não possui *hipertensão*;
- Selecionar ao acaso um produto em uma linha de produção e observar se é ou não é defeituoso.

Se a variável aleatória X é dada pelo número de sucessos em uma única tentativa, então X pode assumir os seguintes valores:

$$X = 0, \text{ se for fracasso (falha)}$$

$$X = 1, \text{ se for sucesso}$$

Portanto, a variável X terá distribuição Bernoulli dada por:

$$P(X = x) = p^x \cdot (1 - p)^{1-x} \quad (48)$$

O valor esperado e variância de uma distribuição de Bernoulli podem ser calculados por:

$$E(X) = p \quad (49)$$

$$V(X) = p \cdot (1 - p) \quad (50)$$

2.5.2 Distribuição Binomial

Considere que vamos repetir um ensaio de Bernoulli “ n vezes” e que as repetições sejam independentes, isto é, o resultado de um ensaio não tem influência no resultado de qualquer outro. A probabilidade de ocorrer x sucessos em “ v ” tentativas será dada por:

$$P(X = x) = \binom{n}{x} \cdot p^x \cdot (1-p)^{n-x} \quad (51)$$

para $x = 0, 1, 2, \dots, n$. Diz-se que a variável aleatória X segue uma Distribuição Binomial com parâmetros n e p . Dessa forma, podemos denotar:

$$X \sim B(n, p) \quad (52)$$

Para utilizar uma Distribuição Binomial, algumas propriedades são necessárias, como:

1. Número de tentativas fixas;
2. Cada tentativa deve resultar num sucesso ou fracasso (falha), ou seja a ocorrência ou não-ocorrência de um determinado evento;
3. As probabilidades de sucesso devem ser iguais para todas as tentativas;
4. Todas as tentativas devem ser independentes.

Se X tem uma Distribuição Binomial e parâmetros n e p , então seu valor esperado e sua variância podem ser calculados por:

$$E(X) = n \cdot p \quad (53)$$

$$V(X) = n \cdot p \cdot (1-p) \quad (54)$$

2.5.3 Distribuição de Poisson

A distribuição de Poisson, sob certas condições, modela o número de ocorrências de um evento num intervalo de tempo, de comprimento, de área ou de volume. Por exemplo:

- a) Número de chamadas recebidas por uma central telefônicas por hora;
- b) Número de bactérias encontradas em uma superfície por milímetro quadrado;
- c) Número de defeitos num fio de cobre num determinado intervalo de comprimento.

Seja X o número de ocorrências de um evento por unidade de tempo, comprimento, área ou volume e λ a taxa média de ocorrências do evento no intervalo, as probabilidades associadas a ocorrência de Y podem ser calculadas pela distribuição de Poisson, dada por:

$$P(X = x) = \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^x}{x!} \quad (55)$$

para $x = 0, 1, 2, \dots$. Diz-se que a variável aleatória X segue uma distribuição de Poisson com parâmetros λ e pode ser denotado por:

$$X \sim P(\lambda) \quad (56)$$

Para utilizar uma Distribuição de Poisson, algumas condições são necessárias:

1. Independência entre as ocorrências dos eventos no intervalo considerado;
2. Os eventos devem ocorrer de forma aleatória, de forma que não haja tendência de aumentar ou diminuir o número de ocorrências no intervalo considerado;
3. A média de ocorrência do evento é a constante para todo o intervalo considerado.

Pode-se calcular o valor esperado e a variância de uma Distribuição de Poisson por:

$$E(X) = \lambda \quad (57)$$

$$V(X) = \lambda \quad (58)$$

2.6 DISTRIBUIÇÕES DE PROBABILIDADE CONTÍNUAS

Nesta seção, serão apresentados dois modelos de distribuição de probabilidade contínuas bastante conhecidos, como a *Distribuição Uniforme* e *Distribuição Normal*.

2.6.1 Distribuição Uniforme

A distribuição Uniforme representa variáveis com probabilidade constante. Diz-se que a variável aleatória X segue uma Distribuição Uniforme com parâmetros a e b , sendo $b > a$. Podemos denotar:

$$X \sim U(a,b) \quad (59)$$

Pode-se especificar a sua função densidade por:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & x < a \text{ ou } x > b \end{cases} \quad (60)$$

Em consequência sua função de distribuição acumulada é dado por:

$$F(x) = \begin{cases} 0, & x < a \\ \frac{x-a}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 1, & x > b \end{cases} \quad (61)$$

O valor esperado e a variância de uma distribuição uniforme podem ser calculados por:

$$E(X) = \frac{a+b}{2} \quad (62)$$

$$V(X) = \frac{(b-a)^2}{12} \quad (63)$$

Note que o valor esperado da distribuição uniforme é exatamente o ponto médio do intervalo $[a,b]$.

2.6.2 Distribuição Normal

A distribuição Normal é caracterizada por uma distribuição simétrica, em forma de sino, em que há maior probabilidade de a variável aleatória assumir valores centrais. Essa distribuição Normal também é distribuição de *DeMoivre-Laplace-Gauss* e é com certeza a mais importante das distribuições de probabilidade. Além de permitir modelar muitos fenômenos naturais e, além disso, possibilita realizar aproximações para calcular probabilidades de muitas variáveis aleatórias que têm outras distribuições, ou seja, ela é a base da inferência estatística.

A função densidade de probabilidade da distribuição Normal é dada por:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \cdot e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad (64)$$

para $-\infty < x < \infty$. Podemos denotar:

$$X \sim N(\mu, \sigma^2) \quad (65)$$

em que μ é a média e σ é o desvio padrão.

O valor esperado e a variância de uma Distribuição Normal podem ser calculados por:

$$E(Y) = \mu \quad (66)$$

$$V(X) = \sigma^2 \quad (67)$$

Algumas características da distribuição Normal podem ser destacadas, como:

1. a curva é simétrica em torno de μ , em consequência, os valores da média (μ) e da mediana são iguais, e também $(P(X < \mu - \alpha) = P(X > \mu + \alpha))$, $\forall \alpha \in \mathbb{R}$;
2. teoricamente, a curva prolonga-se de $-\infty$ a $+\infty$, sendo $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0$;
3. a área total sob a curva é igual a 1, ou seja, $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = 1$;
4. qualquer combinação linear de variáveis aleatórias normais é também uma variável aleatória normal; em especial, se X_1 e X_2 são variáveis aleatórias independentes e $X_1 : N(\mu_1, \sigma_1^2)$ e $X_2 : N(\mu_2, \sigma_2^2)$, então $\forall a, b \in \mathbb{R}$, $Y = aX_1 + bX_2$ tem uma distribuição Normal com

$$E(Y) = a\mu_1 + b\mu_2 \quad (68)$$

$$V(Y) = a^2\sigma_1^2 + b^2\sigma_2^2 \quad (69)$$

5. afastamentos da média, em unidades de desvio padrão, preservam a mesma área sob a curva, independentemente dos valores de μ e σ .

2.7 DISTRIBUIÇÃO AMOSTRAIS

Quando a amostragem é aleatória simples, ou seja a amostra de elementos retirados ao acaso da população, várias estatísticas apresentam distribuição amostrais que se aproximam de distribuições contínuas conhecidas à medida que o tamanho da amostra aumenta. Isso é o caso da média e da proporção que apresentam distribuições amostrais aproximadamente Normal.

2.7.1 Distribuição Amostral da Média

Seja uma amostra aleatória simples $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$. A variável aleatória \bar{X} representa a média dessas n observações:

$$\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n} \quad (70)$$

Então podemos associar à variável aleatória \bar{X} a uma distribuição de probabilidade, que é o que chamamos de distribuição amostral de \bar{X} (da média), ou seja distribuição da média amostral.

A distribuição da média amostra apresenta as seguintes propriedades:

1. o valor esperado de média amostral é igual à média da população, ou seja:

$$E(\bar{X}) = \mu \quad (71)$$

2. a variância da média amostral é inferior à variância da população (σ^2) e a relação é dada por:

$$V(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n} \quad (72)$$

3. (*Teorema Central do Limite*) Sejam X_1, X_2, \dots, X_n variáveis aleatórias independentes com a mesma distribuição (não necessariamente Normal). Se n for suficientemente grande, em geral para $n \geq 30$, a variável aleatória \bar{X} segue aproximadamente uma distribuição Normal:

$$\bar{X} \sim N\left(\mu_X; \frac{\sigma_X^2}{n}\right) \quad (73)$$

2.7.2 Distribuição Amostral da Proporção

Considere que o interesse é estudar a *proporção* (p) de um determinado evento na população. Neste caso, devemos tomar uma amostra aleatória, representativa da população para calcular a estimativa p .

$$\hat{P} = \frac{X}{n} \quad (74)$$

em que X representa o número de casos da amostra que apresentam a característica de interesse e n representa o número de casos totais da amostra.

A distribuição da população pode ser representada por uma variável aleatória de Bernoulli, do tipo 0–1. Considerando as observações como:

$$X_i = \begin{cases} 0, & \text{se o elemento não apresenta a característica de interesse} \\ 1, & \text{se o elemento apresenta a característica de interesse} \end{cases}$$

e dessa forma podemos denotar por:

$$X_i \sim \text{Ber}(p). \quad (75)$$

Verificamos que:

$$\bar{X} = \frac{X}{n} = \hat{P} \quad (76)$$

ou seja, podemos também denotar que:

$$\hat{P} \sim \text{Bin}(n, p) \quad (77)$$

em que a soma de n variáveis aleatórias Bernoulli's segue uma distribuição Binomial. Por isso, a proporção equivale a uma média aritmética de uma variável do tipo 0–1, e as propriedades da distribuição amostral da média também são aplicadas à distribuição amostral da proporção.

O valor esperado e a variância da distribuição amostral da Proporção podem ser calculados por:

$$E(\hat{P}) = p \quad (78)$$

$$V(\hat{P}) = \frac{p \cdot (1-p)}{n} \quad (79)$$

Portanto, se a variável aleatória discreta X tem distribuição Bernoulli, com média p e variância $p(1-p)$, então, a distribuição amostral da proporção \hat{P} pode ser aproximada pela distribuição Normal quando o n for suficientemente grande:

$$\hat{P} \sim N\left(p, \frac{p \cdot (1-p)}{n}\right)$$

2.8 LEI DOS GRANDES NÚMEROS

A *Lei dos Grandes Números* é um dos teoremas mais importantes no ramo da probabilidade, assim como de outras áreas. De uma forma geral, a lei diz que quanto maior o número de amostras, mais ela tenderá ao valor esperado, ou seja, tende para a probabilidade teórica, conforme pode ser observado na definição a seguir (*Lei Forte dos Grandes Números*):

Teorema 6. *Considere a variável aleatória X , com valor esperado μ e variância σ^2 , que irá representar o valor de um experimento aleatório e seja um conjunto X_1, X_2, \dots, X_n uma amostra aleatória, segue que:*

$$\bar{X} := \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mu \quad (80)$$

Portanto, a Lei dos Grandes Números afirma que a média assintótica dos valores das amostras converge para o valor esperado da variável aleatória. Como consequência, se fizermos a média de n amostras com n suficientemente grande podemos obter uma aproximação do valor esperado de X tão boa quanto pretendemos.

Outro resultado importante é a *Lei Fraca dos Grandes Números* considerando que X_1, X_2, \dots, X_n seja n amostras aleatórias igualmente distribuídas e independentes, onde cada uma possui uma média μ e variância σ^2 . Ao definirmos essa série da forma

$$\bar{X}_n = \frac{X_1 + X_2 + X_3 + \dots + X_n}{n} \quad (81)$$

temos que o valor esperado dessa variável é $E(\bar{X}) = \mu$

Em resumo, o resultado diz que quanto maior o n , ou seja, quando n tende para infinito, a média amostral coincidirá com a média populacional μ . O que nos resume a dizer que escolhido uma constante qualquer $\varepsilon > 0$ a probabilidade de que a diferença entre a média amostral e a média populacional seja maior que essa constante tenderá a zero, ou seja

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P\left(\left|\frac{X_1 + X_2 + X_3 + \dots + X_n}{n}\right|\right) = 1 \quad (82)$$

Observe que a Lei dos Grandes Números, que tem grande importância na probabilidade e estatística, tem uma ideia bem simples e intuitiva. Podemos usar como exemplo o lançamento de um dado de 6 faces não viciado onde cada lado tem uma chance igual de ser sorteado (1/6). Se lançarmos esse dado poucas vezes, poderemos ver que alguns lados podem sair mais vezes do que os outros, mas a medida que aumentamos o n (número de lançamentos), a Lei dos Grandes Números afirma que a média aritmética dos valores observados tendem a 1/6, ou seja, tendem ao valor esperado da variável aleatória.

2.9 NÚMEROS ALEATÓRIOS

O propósito dos geradores de números aleatórios é produzir uma sequência de números que aparentam ser gerados aleatoriamente de uma distribuição de probabilidade específica. Usualmente, um gerador de números aleatórios básico uniforme produz números que imitam variáveis aleatórias independentes da distribuição uniforme sobre o intervalo [0,1]. As variáveis aleatórias de outras distribuições (normal, qui-quadrado, exponencial, Poisson, etc.) são simuladas empregando-se transformações apropriadas aos números aleatórios uniformes (L'ECUYER, 2001).

Os geradores de números aleatórios são programas de computador cujo objetivo é imitar ou simular o comportamento típico de uma sequência de variáveis aleatórias independentes. São algoritmos específicos, sequenciais e determinísticos. Os números gerados são, portanto, apenas pseudo-aleatórios, mas com um leve abuso de linguagem são chamados de aleatórios. É importante então diferenciar:

- Número aleatório - definido como exibindo aleatoriedade verdadeira;
- Número pseudoaleatório - definido como possuindo a aparência de aleatoriedade, contudo exibindo um padrão de repetição específico.

Portanto, um gerador de números aleatórios pode ser definido como uma estrutura (S, μ, f, U, g) , em que S é um conjunto finito de estados, μ é uma distribuição de probabilidade em S usada para selecionar o estado inicial $s_0 \in S$, o mapeamento $f : S \rightarrow S$ é uma função de transição, U é um conjunto finito de símbolos de saída e $g : S \rightarrow U$ é uma função de saída.

O gerador opera da seguinte maneira: inicia-se do estado inicial s e faz-se $u_0 = g(s_0)$. Procede-se então de acordo com a recorrência $s_n = f(s_{n-1})$, para $n \geq 1$. A saída no passo n é $u_n = g(s_n) \in U$. Assume-se que existam procedimentos eficientes para calcular f e g e para gerar a s_0 de acordo com μ . As variáveis são os números aleatórios (ou observações) produzidos pelo gerador. Espera-se que as observações u_1, u_2, \dots, u_n comportem-se como variáveis aleatórias uniformemente distribuídas sobre o conjunto U . O conjunto U é frequentemente um conjunto de inteiros da forma $0, 2, \dots, n$ ou um conjunto finito de valores entre 0 e 1 para aproximar a distribuição $U[0,1]$. Como S é finito, o gerador eventualmente retornará a um estado já visitado, isto é s_{i+j} para algum $i, j \geq 0$. Então, $s_{n+j} = s_i$ para todo $n \geq i$. O menor $j > 0$ para o qual isso acontece é chamado de período ρ . O período não pode exceder a cardinalidade de S . Um gerador de números aleatórios bem projetado normalmente possui o período ρ próximo $|S|$, isto é, $\rho \approx 2b$ se cada estado é representado por b bits.

Os tipos de geradores de números aleatórios mais comumente utilizados são:

1. Geradores Congruentes Lineares;
2. Geradores de Atraso de Fibonacci;
3. Geradores de Registradores de Deslocamento;
4. Geradores Híbridos.

Portanto, os geradores de números aleatórios são ingredientes cruciais para uma grande faixa de aplicações, tais como experimentos estatísticos, simulação de sistemas estocásticos, análises numéricas como o método de Monte Carlo, algoritmos probabilísticos, jogos de computador e criptografia, entre outros .

2.10 MÉTODO DE MONTE CARLO

Suponha que se quer estimar θ , o valor esperado e a variância de alguma variável aleatória X são:

$$\theta = E(X) \quad (83)$$

$$\sigma^2 = V(X) \quad (84)$$

Suponha, além disso, que possam ser gerados valores de variáveis aleatórias independentes com a mesma distribuição de probabilidade de X . Cada vez que for

gerado um novo valor, diz-se que uma simulação foi concluída. Suponha que vão ser realizadas n simulações, assim, serão gerados X_1, X_2, \dots, X_n . Se

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (85)$$

for sua média, então pela lei forte dos grandes números, \bar{X}_n será usado como um estimador para θ . Seu valor esperado são dados a seguir:

$$E(\bar{X}_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E(X_i) = \theta. \quad (86)$$

ou seja,

$$V(\bar{X}_n) = \frac{\sigma^2}{n} \quad (87)$$

Além disso, decorre do Teorema Central do Limite que, para n grande, X_n terá uma distribuição normal aproximada. Assim, se σ/\sqrt{n} é pequeno, então X_n tende a estar próximo de θ e, quando n for grande, X_n será um bom estimador para θ . Esta abordagem para estimar um valor esperado é conhecida como a simulação de Monte Carlo. Mais detalhes podem ser vistos em (ROSS, 2011) e (RUBINSTEIN, 1981).

2.10.1 Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais

Os métodos de Monte Carlo tipicamente envolvem a geração de observações de alguma distribuição de probabilidades e o uso da amostra obtida para aproximar a função de interesse. A ideia geral do método é escrever a integral que se deseja calcular como um valor esperado.

Seja uma função $f(x)$ e suponha que se quer calcular θ , ou seja:

$$\theta = \int_0^1 f(x) dx \quad (88)$$

Para isso, considere Y uma variável aleatória distribuída no intervalo $(0,1)$ então pelo Método de Monte Carlo:

$$\theta = \int_0^1 f(x) dx = E[f(Y)] \quad (89)$$

Se Y_1, Y_2, \dots, Y_n são variáveis aleatórias uniformes independentes, tem-se que as variáveis aleatórias $f(Y_1), f(Y_2), \dots, f(Y_n)$ são variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas entorno da média θ . Portanto, pela lei forte dos grandes números, segue, com probabilidade 1, que

$$\sum_{i=1}^n \frac{g(Y_i)}{n} \rightarrow E[g(Y)] \quad (90)$$

em que $n \rightarrow \infty$.

Assim, pode-se aproximar θ gerando uma grande quantidade de números aleatórios y_i e tomar como aproximação o valor médio de $g(y_i)$.

2.10.1.1 Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais definidas

Para calcular a integral definida da forma $\int_a^b f(x) dx$ basta realizar uma mudança de variável $y = (x-a)/(b-a)$ e $dy = dx/(b-a)$. Assim, obtém-se:

$$\theta = \int_0^1 f[a+(b-a)y](b-a) dy = \int_0^1 g(y) dy \quad (91)$$

em que $g(y) = f[a+(b-a)y](b-a)$. Desse modo é possível aproximar θ gerando continuamente números aleatórios para x e tomando o valor médio de $g(y)$ calculado nesses números.

2.10.1.2 Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais impróprias

Se o interesse é calcular $\int_0^\infty f(x) dx$ basta realizar uma mudança de variável $y = 1/(x+1)$ e $dy = -dx/(x+1)^2 = -y^2 dx$. Assim, obtém-se:

$$\theta = \int_0^1 \frac{f(1/y-1)}{y^2} dy = \int_0^1 g(y) dy \quad (92)$$

em que $g(y) = \frac{f(1/y-1)}{y^2}$. Assim é possível aproximar θ gerando continuamente números aleatórios para x e tomando o valor médio de $g(y)$ calculado nesses números.

2.10.1.3 Método de Monte Carlo para o cálculo de integrais múltiplas

O Método de Monte Carlo também pode ser utilizado para o cálculo de integrais múltiplas. Seja a função de múltiplas variáveis $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ e suponha que se quer calcular θ , ou seja:

$$\theta = \int_0^1 \int_0^1 \dots \int_0^1 f(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n. \quad (93)$$

Tem-se que θ pode ser expresso como $\theta = E[U_1, U_2, \dots, U_n]$, onde U_1, \dots, U_n são variáveis aleatórias uniformes (0,1) independentes. Portanto, para calcular θ é preciso gerar k conjuntos independentes, cada um consistindo de n variáveis uniformes (0,1) independentes:

$$U_1^1, \dots, U_n^1$$

$$U_1^2, \dots, U_n^2$$

$$U_1^k, \dots, U_n^k.$$

Assim, as variáveis $g(U_1^1, \dots, U_n^i)$, $i = 1, \dots, k$ são todas independentes e identicamente distribuídas com média μ . Pode-se estimar θ por $\sum_{i=1}^k f(U_1^1, \dots, U_n^i) / k$

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados e discussões apresentados neste capítulo compreendem inicialmente a aplicação do método de Monte Carlo na solução de uma integral definida que possui primitiva. Neste ponto a ideia é verificar se o método é efetivo para determinar uma solução aproximada da integral estudada e assim validar o método e o algoritmo desenvolvido. Após a validação do método e do algoritmo este será aplicado na solução de algumas integrais não elementares mais conhecidas e para comparação da eficiência do método será utilizado a Regra do Trapézio Múltipla e a Regra 1/3 de Simpson Múltipla.

Todas os cálculos apresentados neste capítulo foram realizados em computador Intel(R) Core(TM) i7-4500U CPU @1,80 GHz, 8 GB de RAM com sistema operacional Windows 10 Home Single Language com 64 bits. Além disso, a implementação dos algoritmos para o método de Monte Carlo, Regra do Trapézio Múltipla e a Regra 1/3 de Simpson Múltipla, e geração de gráficos foi realizada no *Spyder* que é uma *IDE* do *Python 3.9* voltada especialmente para o cálculo numérico.

3.1 VALIDAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO

Para validação do método de Monte Carlo será utilizado a integral da função $f(x) = x^2$ no intervalo $[0, 3]$. Calculando a integral:

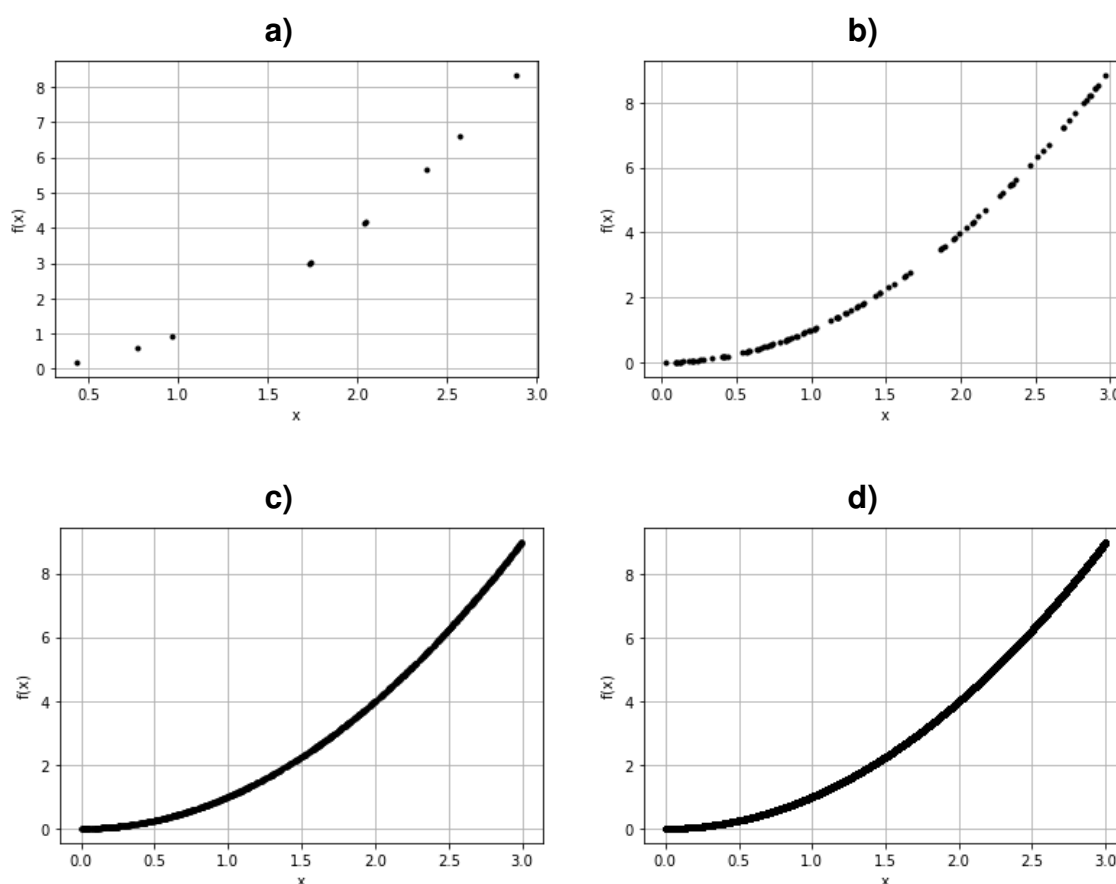
$$I = \int_0^3 x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_0^3 = \frac{3^3}{3} - \frac{0^3}{3} = \frac{27}{3} - \frac{0}{3} = 9 - 0 = 9$$

Portanto, a solução da integral é 9, ou seja $\int_0^3 x^2 dx = 9$.

O primeiro passo para a solução de uma integral pelo método de Monte Carlo é gerar pontos aleatórios para a variável x dentro do intervalo $[a, b]$ com base na distribuição Uniforme. Para isto foi utilizado uma função interna do *Python* definida por “ $x = \text{np.random.uniform}(a,b)$ ”, maiores detalhes sobre esta função podem ser encontrados nas documentações do *Spyder*.

Na Figura 3 pode-se observar a representação gráfica da função $f(x) = x^2$ no intervalo $[0, 3]$ para diferentes gerações de números aleatórios para variável x , tal como $N = 10$, $N = 1.000$, $N = 10.000$ e $N = 1.000.000$ pontos. Pode-se observar, conforme já era esperado, que os pontos gerados seguem uma distribuição Uniforme e isso é confirmado pela Figura 4 (a) que apresenta o gráfico da distribuição de probabilidade em função da variável x e a Figura 4 (b) que apresenta o gráfico *quantil-quantil*, também conhecido como *Q-Q plot*, mostrando claramente que os dados gerados não seguem uma distribuição normal, mas uma distribuição Uniforme. Dessa forma concluiu-se que o método funciona bem para geração de pontos aleatórios da variável x dentro do intervalo pré-determinado.

Figura 3 – Gráfico de $f(x) = x^2$ para $x \in [0, 3]$ gerado por **a)** $N = 10$, **b)** $N = 1000$, **c)** $N = 10000$ e **d)** $N = 1000000$ pontos.

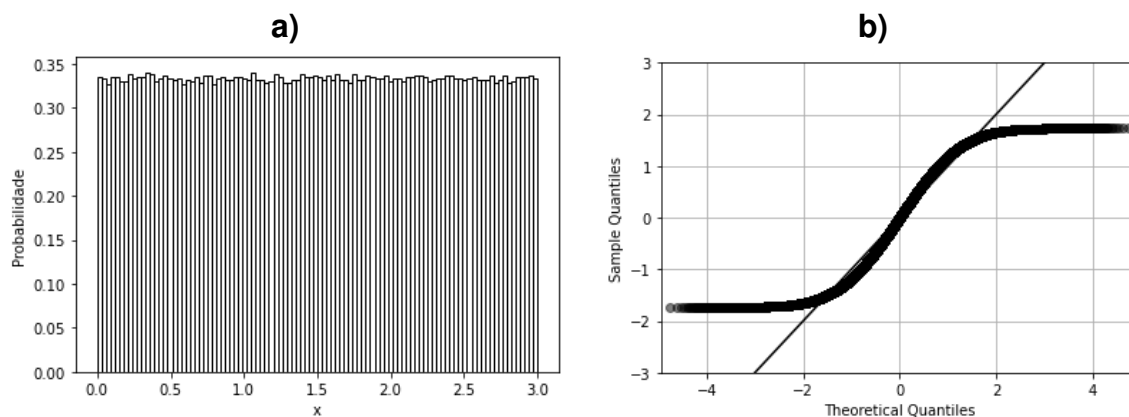


Fonte: Autor

Na Tabela 1 são exibidos os resultados obtidos para a estimativa da integral da função $f(x) = x^2$ no intervalo $[0, 3]$ para diferentes N (número de pontos gerados a variável x). Observa-se que na medida que o número pontos gerados aumenta mais próxima é a estimativa da integral em relação ao seu valor verdadeiro, pois o E_{pt} (Erro Relativo Percentual Verdadeiro) diminui significativamente. Isto também pode ser observado na Figura 5 (a) que apresenta uma comparação entre o E_{pt} com o número de pontos gerados para a variável x ;

Analisando a assertividade do método em relação ao valor verdadeiro da integral na Tabela 2, pode-se observar por exemplo que para $N = 100000000$ que a estimativa para a integral é correta em pelo menos 4 algarismos significativos, ou seja, pode-se garantir uma assertividade de pelo menos 4 algarismos significativos, garantindo assim que o método de Monte Carlo pode ser utilizado como uma estratégia para estimar integrais. Entretanto um ponto que merece atenção é o que pode ser observado na Tabela 3 e principalmente na Figura 5 (b), que apresenta o tempo de simulação em relação ao número de pontos gerados da variável x . Observa-se que para N grandes,

Figura 4 – **a)** Distribuição Uniforme da variável x no intervalo $[0, 3]$ para $N = 1000$ pontos; **b)** Gráfico Quantil-Quantil do ajuste dos pontos gerados da variável x no intervalo $[0, 3]$.



Fonte: Autor

Tabela 2 – Estimativa da integral da função $f(x) = x^2$ no intervalo $[0, 3]$ para diferentes N (número de pontos gerados a variável x) pelo Método de Monte Carlo.

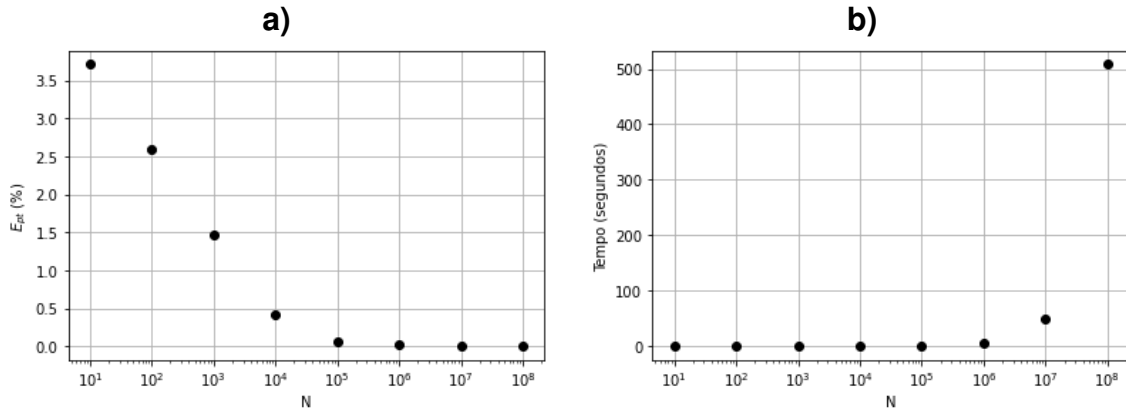
N	Aproximação	E_{pt} (%)	Tempo (s)
0	0,000000	100,0000	0,000000
10	9,334218	3,713538	0,000999
100	8,767192	2,586754	0,000999
1000	9,131770	1,464109	0,003996
10000	8,962276	0,419159	0,048972
100000	8,994132	0,065196	0,422199
1000000	9,001893	0,021030	5,655761
10000000	8,999348	0,007240	49,99046
100000000	8,999650	0,003889	507,8830

Fonte: Autor

como por exemplo $N = 100000000$ pontos, o tempo computacional é elevado, indicando assim que o método é caro computacionalmente.

O número de algarismos significativos foi obtida através de uma modificação

Figura 5 – **a)** Comparação do E_{pt} (%) em relação ao número de pontos gerados da variável x ; **b)** Comparação do tempo de simulação (segundos) em relação ao número de pontos gerados da variável x .



Fonte: Autor

no critério de Scarborough, desenvolvido por Scarborough (1955), que comparava a *Relação do Erro com Algoritmos significativos* dada por

$$E_{pt} = (0,5 \times 10^{2-n}) \% \Leftrightarrow n = 2 + \log(E_{pt}). \quad (94)$$

Originalmente o critério de Scarborough é dada por

$$E_{ppara} = (0,5 \times 10^{2-n}) \% \quad (95)$$

e ela é utilizada como *Critério de Parada* em processos iterativos, ou seja $E_{pt} < E_{ppara}$, em que E_{ppara} é um critério pré-estabelecido.

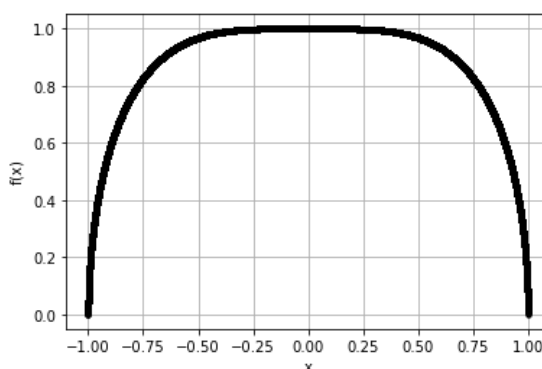
3.2 APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO PARA ESTIMATIVA DE INTEGRAIS NÃO-ELEMENTARES

A seguir são apresentados os resultados do emprego do método de Monte Carlo na estimativa da integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ no intervalo $[-1, 1]$ e da função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ no intervalo $[-4, 4]$. Os demais exemplos de funções que possuem integrais não elementares que foram introduzidas na revisão bibliográfica deste trabalho são apresentados numa forma compilada em uma tabela no final desta seção.

3.2.1 Estimativa para a integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ no intervalo $[-1, 1]$

A integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ é não elementar, ou seja, não é possível encontrar uma primitiva em termos elementares para essa integral. Na Figura 6 pode-se observar o gráfico da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ gerado por $N = 10.000.000$ pontos aleatórios da variável x no intervalo $[-1, 1]$.

Figura 6 – Gráfico de $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ para $x \in [-1, 1]$ gerado por $N = 10000000$ pontos aleatórios para a variável x .



Fonte: Autor

A estimativa da integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ no intervalo $[-1, 1]$ para o método de Monte Carlo, Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla são apresentados na Tabela 3. Pode-se observar principalmente que as estimativas da integral para a Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla são muito próximas, diferenciando-se somente no quinto algarismo significativo. Além disso, o tempo de solução tanto para a Regra do Trapézio Múltipla quanto para a Regra 1/3 de Simpson Múltipla são muito parecidos, sendo que a Regra 1/3 de Simpson Múltipla é levemente mais rápida.

Tabela 3 – Estimativa da integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ no intervalo $[-1, 1]$ para o método de Monte Carlo, Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla.

	Método de Monte Carlo ¹	Regra do Trapézio Múltipla ²	Regra 1/3 de Simpson Múltipla ²
Estimativa	1,748072	1,747622	1,747677
Tempo (segundos)	636,3373	0,576932	0,457738

¹ $N = 10000000$ pontos.

² $E_{para} = 0,5 \times 10^{2-6}$, ou seja, aproximação com assertividade de 6 algarismos significativos.

Fonte: Autor

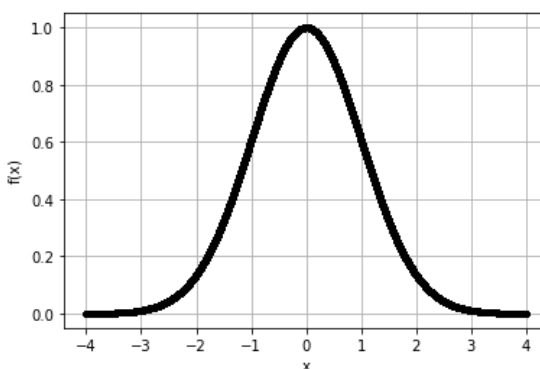
Já o método de Monte Carlo quando comparado com Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla mostrou-se bem menos eficiente. Primeiro ponto que vale destaque é que a diferença da estimativa para a integral está no terceiro algarismo, ou seja a precisão é baixa frente as regras convencionais. Segundo ponto que merece também atenção e de certo modo o mais importante é o tempo de simulação

extremamente elevado. Uma alternativa para melhorar a precisão do método de Monte Carlo seria gerar muito mais pontos aleatórios para a variável x , porém isto certamente torna o método caro computacionalmente e assim inviabilizando o seu uso.

3.2.2 Estimativa para a integral da função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ no intervalo $[-4, 4]$

A função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ é uma variação da função densidade de probabilidade da distribuição normal, que é sem dúvidas uma das distribuições mais utilizadas para modelar fenômenos naturais, entretanto a sua integral é não elementar. A Figura 7 apresenta o gráfico da função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ gerado por $N = 10000000$ pontos aleatórios da variável x no intervalo $[-4, 4]$. Observe que o gráfico da função tem a forma de um sino e que está em concordância com os gráficos das funções de densidade de probabilidade da distribuição normal.

Figura 7 – Gráfico de $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ para $x \in [-4, 4]$ gerado por $N = 10000000$ pontos aleatórios para a variável x .



Fonte: Autor

Na Tabela 4 é apresentada a estimativa da integral da função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ no intervalo $[-4, 4]$ para o método de Monte Carlo, Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla. Os resultados são muito similares aos observados para a estimativa da integral da função $f(x) = \sqrt{1-x^4}$ no intervalo $[-1, 1]$. Em que as estimativas da Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla se diferenciam no quinto algarismo significativo e os tempos de simulação são bastante baixos para essas regras, entretanto para a estimativa da integral desta função a Regra do Trapézio Múltipla foi levemente mais rápida do que a Regra 1/3 de Simpson Múltipla. Quando comparado a estimativa do método de Monte Carlo com a Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla observa-se que a distinção está no terceiro algarismo significativo, mostrando novamente a baixa precisão do método de Monte Carlo. Além disso, novamente o tempo computacional é bastante elevado e confirmando novamente que o método é extremamente caro computacionalmente.

Tabela 4 – Estimativa da integral da função $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$ no intervalo $[-4, 4]$ para o método de Monte Carlo, Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla.

	Método de Monte Carlo ¹	Regra do Trapézio Múltipla ²	Regra 1/3 de Simpson Múltipla ²
Estimativa	2,506191	2,506409	2,506411
Tempo (segundos)	536,6293	0,004000	0,015992

¹ $N = 10000000$ pontos.

² $E_{ppara} = 0,5 \times 10^{2-6}$, ou seja, aproximação com assertividade de 6 algarismos significativos.

Fonte: Autor

3.2.3 Aplicação do método de Monte Carlo para outras integrais não-elementares

Na Tabela 5 são apresentados um compilado das demais funções com integrais não elementares apresentadas na revisão bibliográfica deste trabalho.

Tabela 5 – Estimativa das integrais não-elementares pelo método de Monte Carlo.

Integral	Regra 1/3 de Simpson Múltipla ¹	Método de Monte Carlo	N	E_{pt} (%)
$\int_e^6 \ln[\ln(x)] dx$	1,170941	1,171962	10000000	0,087180
$\int_2^4 \frac{1}{\ln(x)} dx$	1,921347	1,922355	10000000	0,052460
$\int_2^4 \frac{e^x}{x} dx$	14,66166	14,679582	10000000	0,122239
$\int_{-4}^0 e^{e^x} dx$	5,293867	5,299503	10000000	0,106462
$\int_0^{\sqrt{\pi}} \sin(x^2) dx$	0,894751	0,894924	10000000	0,019280
$\int_{-4}^{\sqrt{\frac{\pi}{2}}} \cos(x^2) dx$	0,977771	0,977649	10000000	0,012483

¹ $E_{ppara} = 0,5 \times 10^{2-6}$, ou seja, aproximação com assertividade de 6 algarismos significativos

Fonte: Autor

Para avaliar o método de Monte Carlo utilizou-se somente as estimativas da Regra 1/3 de Simpson Múltipla com uma precisão de seis algarismos significativos.

Assumiu-se para efeito de comparação a estimativa obtida pela Regra 1/3 de Simpson Múltipla como um valor verdadeiro afim de comparar com a estimativa do método de Monte Carlo. Conforme já era esperado o E_{pt} (%) foi elevado indicando a baixa precisão do método de Monte Carlo, mesmo com a geração de $N = 10000000$ para a variável x dentro do intervalo de integração pré-especificado para cada função.

4 CONCLUSÃO

O método de Monte Carlo é uma técnica alternativa interessante para estimar um valor esperado de alguma variável aleatória. A ideia do método é gerar observações de alguma distribuição de probabilidade e observar o comportamento da estatística sobre as amostras. O método possui muitas aplicações e, neste trabalho o método de Monte Carlo foi utilizado para calcular integrais não elementares.

De uma maneira geral a utilização do método de Monte Carlo para o cálculo de integrais é uma alternativa, pois o método é de simples implementação. Além disso ele é abrangente, pois pode ser aplicado na estimativa de integrais com quaisquer limites de integração, e adaptativo, pois pode ser aplicado, além do cálculo de integrais definidas, para integrais impróprias e múltiplas.

Porém o método de Monte Carlo requer um elevado tempo computacional para gerar as estimativas das integrais e além disso conforme foi observado as estimativas são pouco satisfatórias quando comparado com as estimativas da Regra do Trapézio Múltipla e Regra 1/3 de Simpson Múltipla impossibilitando assim a sua efetiva utilização.

5 SUGESTÃO DE TRABALHOS FUTUROS

Algumas questões podem ser melhor exploradas, consistindo um caminho para pesquisas futuras, dentre elas merecem destaque:

- Desenvolver um método para determinar quando parar de gerar novos dados para o método de Monte Carlo baseado em técnicas de redução de variância;
- Avaliar a eficiência do método de Monte Carlo para o cálculo de integrais impróprias;
- Avaliar a eficiência do método de Monte Carlo para o cálculo de integrais múltiplas.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANTON, H.; BIVENS, I.; DAVIS, S. **Cálculo - Volume 1**. 10 ed. Porto Alegre: Bookman, 2014.

BARBETTA, P. A.; REIS, M. M.; BORNIA, A. C. **Estatística para cursos de engenharia e informática**. 2 ed. São Paulo: Atlas, 2008.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Análise Numérica**. 8 ed. São Paulo: Cengage Learning, 2008.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos Numéricos para Engenharia**. 7 ed. São Paulo: McGraw-Hill, 2008.

GUIDORIZZI, H. L. **Um curso de cálculo - Volume 1**. 5 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013.

L'ECUYER, P. Random Numbers. **International Encyclopedia Social and Behavioral Sciences**, p. 1-9, 2001.

MORGADO, A. C de O. **Análise Combinatória E Probabilidade: Com As Solucoes Dos Exercicios**. 1 ed. Rio de Janeiro: SBM - Sociedade Brasileira de Matemática, 2006.

PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Numerical Recipes in C - The Art of Scientific Computing**. 2 ed. United Kingdom: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, 1988.

PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; VETTERLING, W. T.; FLANNERY, B. P. **Métodos numéricos aplicados: C++**. 3 ed. Porto Alegre: Bookman, 2013.

ROSS, S. M. **An Elementary Introduction to Mathematical Finance**. 3 ed. United Kingdom: Cambridge University Press, 2011.

RUBINSTEIN, R. **Simulation and the Monte Carlo Method**. New Jersey: John Wiley and Sons, 1981.

SCARBOROUGH, J. B. **Numerical Mathematical Analysis**. 3. ed. Baltimore: Johns Hopkins Press, 1955.

SPERANDIO, D.; MENDES, J. T.; SILVA, L. H. M. **Cálculo Numérico Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos**. 1 ed. São Paulo: Prentice-Hall, 2003.

STEWART, J. **Cálculo - Volume I**. 6 ed. São Paulo: Cengage Learning, 2010.

Apêndices

APÊNDICE A – ROTINAS ESCRITAS EM *PYTHON* UTILIZADAS NA ELABORAÇÃO DO TRABALHO

A.1 ROTINA: MÉTODO DE MONTE CARLO

```

# Importando as bibliotecas
import numpy as np
import math
import time
print ("Método de Monte Carlo")
# Função:  $f(x) = x^{**2}$ 
# Intervalo:  $a = 0$  a  $b = 3$ 
# Integral:  $\int(f(x)) x^{**3}/9 = 9$ 
# Intervalo
a = 0
b = 3
valor_verdadeiro = 9
# Definindo o número de pontos
N = int(1e6)
# Definindo um contador
k = 0
variavel = []
inicio = time.time()
for i in range(1,N):
    k = k + 1
    # Gerando um valor aleatório de x entre a e b
    x = np.random.uniform(a,b)
    # Calculando  $y = (x-a)/(b-a)$  para cada x gerado
    y = (x-a)/(b-a)
    xx = a + (b-a)*y
    g_xx = xx**2
    # Calculando  $h(y) = (b-a)g(a+[b-a]y)$ 
    h = (b-a)*(g_xx)
    # Calculando  $\Theta = \int(0,a)g(x)dx$ 
    theta = h
    variavel.insert(k,theta)
# Calculando a média de theta
aproximacao = sum(variavel)/N
fim = time.time()
erro_absoluto = abs(valor_verdadeiro - aproximacao)

```

```
erro_relativo_verdadeiro = abs((valor_verdadeiro - aproximacao)/valor_verdadeiro)
erro_relativo_percentual_verdadeiro = abs((valor_verdadeiro -
aproximacao)/valor_verdadeiro)*100
print ("Tempo de execução:","%.6f" % (fim - inicio), "segundos")
print("Resultado da Integral:","%.6f" % aproximacao)
print("Erro Absoluto:","%.6f" % erro_absoluto)
print("Erro Relativo Verdadeiro:","%.6f" % erro_relativo_verdadeiro)
print("Erro Relativo Percentual Verdadeiro:","%.6f" % erro_relativo_percentual_verdadeiro)
```

A.2 ROTINA: REGRA DO TRAPÉZIO MÚLTIPLA

```
# Importando as bibliotecas
import numpy as np
import math
import time
print ("Regra do Trapézio Múltipla")
# Função:  $f(x) = x^{**2}$ 
# Intervalo: a = 0 a b = 3
# Integral:  $\int(f(x)) x^{**3}/9 = 9$ 
# Intervalo
a = 0
b = 3
valor_verdadeiro = 9
# Definindo o número de subintervalos  $n = \text{int}(1e6)$ 
# Intervalo
a = 0
b = 4
# Definindo a função
def f(x):
    y = math.sqrt(1 - x**4)
    return y
# Calculando o comprimento do intervalo
h = (b - a)/n
# Realizando um cálculo auxiliar
s0 = f(a) + f(b)
# Definindo um contador
s1 = 0
inicio = time.time()
for i in range(0,n-2):
    x = a + i*h
```

```
s1 = s1 + f(x)
aproximacao = (h/2)*(s0 + 2*s1)
fim = time.time()
erro_absoluto = abs(valor_verdadeiro - aproximacao)
erro_relativo_verdadeiro = abs((valor_verdadeiro - aproximacao)/valor_verdadeiro)
erro_relativo_percentual_verdadeiro = abs((valor_verdadeiro -
aproximacao)/valor_verdadeiro)*100
print ("Tempo de execução:","%.6f" % (fim - inicio), "segundos")
print("Resultado da Integral:","%.6f" % aproximacao)
print("Erro Absoluto:","%.6f" % erro_absoluto)
print("Erro Relativo Verdadeiro:","%.6f" % erro_relativo_verdadeiro)
print("Erro Relativo Percentual Verdadeiro:","%.6f" % erro_relativo_percentual_verdadeiro)
```

A.3 ROTINA: REGRA 1/3 DE SIMPSON MÚLTIPLA

```
# Importando as bibliotecas
import numpy as np
import math
import time
print ("Regra do 1/3 de Simpson Múltipla")
# Função: f(x) = x**2
# Intervalo: a = 0 a b = 3
# Integral: int(f(x)) x**3/9 = 9
# Intervalo
a = 0
b = 3
valor_verdadeiro = 9
# Definindo o número de subintervalos n = int(1e6)
# Intervalo
a = 0
b = 4
# Definindo a função
def f(x):
    y = math.sqrt(1 - x**4)
    return y
# Calculando o comprimento do intervalo
h = (b - a)/n
m = n/2
s0 = 0
inicio = time.time()
```

```
if n % 2 == 0:
    for i in range(1,n-1,2):
        x = a + 2*i*h
        s0 = s0 + 2*f(x)
    for i in range(2,n-2,2):
        y = a + (i-1)*h
        s1 = s1 + f(y)
    aproximacao = (h/3)*(f(a) + 4*s0 + 2*s1 + f(b))
else:
    print("Regra de Simpson necessita n par!")
fim = time.time()
erro_absoluto = abs(valor_verdadeiro - aproximacao)
erro_relativo_verdadeiro = abs((valor_verdadeiro - aproximacao)/valor_verdadeiro)
erro_relativo_percentual_verdadeiro = abs((valor_verdadeiro -
aproximacao)/valor_verdadeiro)*100
print ("Tempo de execução:','%0.6f' % (fim - inicio), "segundos")
print("Resultado da Integral:','%0.6f' % aproximacao)
print("Erro Absoluto:','%0.6f' % erro_absoluto)
print("Erro Relativo Verdadeiro:','%0.6f' % erro_relativo_verdadeiro)
print("Erro Relativo Percentual Verdadeiro:','%0.6f' % erro_relativo_percentual_verdadeiro)
```