

UNIVERSIDADE DE ÉVORA
MESTRADO EM MATEMÁTICA APLICADA

**ESTUDO DA PROPORÇÃO DE PERÍODOS
ELEVADOS EM AUTÓMATOS DE WOLFRAM
POR SIMULAÇÃO DE MONTE-CARLO**

Dissertação realizada por:
Sandra Cristina Amador Pinelas Ferreira da Silva

ÉVORA
1997

UNIVERSIDADE DE ÉVORA
MESTRADO EM MATEMÁTICA APLICADA

**ESTUDO DA PROPORÇÃO DE PERÍODOS
ELEVADOS EM AUTÓMATOS DE WOLFRAM
POR SIMULAÇÃO DE MONTE-CARLO**



103 047

Dissertação realizada por:
Sandra Cristina Amador Pinelas Ferreira da Silva

ÉVORA
1997

**Este trabalho não inclui as observações
e críticas feitas pelo júri.**

INDICE

CAPÍTULO 0: Prólogo.....	2
CAPÍTULO 1: Importância da Metodologia Experimental..... na Modelação Matemática	3
CAPÍTULO 2: Estado da Arte nos Autómatos Celulares.....	4
CAPÍTULO 3: Que São os Autómatos Celulares?	
3.1 - Definição e Regras dos Autómatos Celulares.....	8
3.2 - Classificação Qualitativa dos Autómatos.....	14
3.3 - Classificação Quantitativa dos Autómatos.....	23
CAPÍTULO 4: Plano de Experimentação Realizado	
4.1 - Algoritmo.....	27
4.2 - Análise Espectral.....	30
4.3 - HIP.....	37
CAPÍTULO 5: Método de Monte-Carlo	
5.1 - O Método de Monte-Carlo.....	39
5.2 - Testes de Qualidade da Simulação.....	59
5.3 - Resultados.....	68
BIBLIOGRAFIA.....	71

CAPÍTULO 0

PRÓLOGO

Foi com grande prazer que desenvolvi este trabalho sob a orientação do Prof. Doutor Mario Markus a quem muito agradeço todo o apoio e disponibilidade demonstrada.

Foi igualmente muito importante a cooperação e empenho do Prof. Doutor Carlos Braumann para o desenvolvimento deste trabalho, a quem dirijo um muito obrigado.

Obrigado ainda ao Dr. Karsten Koetter que me deu apoio técnico ao longo de todo o trabalho.

Ao Dr. Tiago de Oliveira que neste trabalho, bem como desde alguns anos, esteve do meu lado como bom professor e grande amigo pessoal.

Obrigado aos meus pais que sempre me apoiaram e incentivaram a prosseguir, principalmente nos momentos mais difíceis.

CAPÍTULO 1

IMPORTÂNCIA DA METODOLOGIA EXPERIMENTAL NA MODELAÇÃO MATEMÁTICA

Criar mitos, lendas ou histórias sempre foi o caminho mais rápido na busca desse entendimento; no entanto criar modelos matemáticos para as aplicações físicas foi o mais eficaz, pelo menos depois de Newton. Mas a complexidade de muitos desses modelos nem sempre torna esse estudo acessível, ainda que se tenha o auxílio computacional. Os Autómatos Celulares são hoje em dia uma alternativa à modelação por Equações Diferenciais. E isto por duas razões:

- ◆ tempo, espaço e estado são *discretizados*. Esta *discretização* é como um esboço que pode ter como objectivo a solução de Equações Diferenciais por um processo computacional alternativo às metodologias da análise numérica, mas que salvaguarda com a aproximação desejada as propriedades qualitativas do sistema a modelar.

- ◆ os Autómatos Celulares podem ser facilmente implementados em computadores paralelos.

A *discretização* pode ter como objectivo a solução de Equações Diferenciais; no entanto, os Autómatos Celulares são uma aproximação completamente diferente, são uma descrição da natureza tal como as Equações Diferenciais. É claro que quando resolvemos Equações Diferenciais numericamente também construímos um Autómato Celular, mas não é esse o objectivo.

CAPÍTULO 2

ESTADO DA ARTE NOS AUTÓMATOS CELULARES

Os Autómatos Celulares foram originalmente introduzidos por von Neumann e Ulam (1963, 1966) com a denominação original de Espaços Celulares. Tinham como objectivo principal a idealização de sistemas biológicos, em particular, modelos biológicos auto-reprodutivos. No entanto é comum encontrar hoje em dia estudos feitos com base em Autómatos Celulares nas mais variadas áreas. Vejamos alguns exemplos, citados por Mario Markus num relatório enviado à Comunidade Económica Europeia sobre Autómatos Celulares:

♦ Reconhecimento de padrões e de imagens: a aproximação por Autómatos Celulares está bem apetrechada para o reconhecimento de padrões veja-se as referencias de Preston e Duff [1] e de Levialedi [2]. Na verdade, depois da digitalização de uma imagem sobre um reticulado vários algoritmos foram desenhados para limpar o ruído, para passar ao esqueleto ou para o encontro de padrões e contagem do numero de elementos conexos. Tais algoritmos são utilizados em diferentes campos, citados no texto de Preston [1]. Por exemplo, na imagem biomédica é possível identificar e contar cada um dos núcleos de células em imagens de tecidos.

♦ Modelos de memória: novamente com a referência [1], novos modelos de aprendizagem e algoritmos de pesquisa baseados em estruturas de Autómatos foram propostos no âmbito das redes neurais, a referencia de síntese é o artigo de Rujan [4].

♦ Hidrodinâmica: os modelos de Autómatos Celulares para magnetoidrodinâmica foram desenvolvidos, como por exemplo nos artigos de Chen e Matthaws [5] e de Montgomery e Doolen [6]. Foram de extrema importância na fisica dos plasmas e no estudo do controle da fusão nuclear, dado que permitem uma computação rápida de sistemas

onde o espaço de parâmetros é de dimensionalidade muito elevada. A discussão crítica desta afirmação é feita por Orsag e Yakhot [7].

◆ Colunas de dominância ocular: estas colunas são regiões do córtex visual do cérebro que recebem sinais neuronais de ambas as vistas. Durante o processo de desenvolvimento nervos aferentes com sinais de cada um dos olhos devem crescer e formar sinapses com os tecidos correspondentes no córtex. Como resultado a região fica organizada por “spots and stripes”, isto é, pontos ou manchas e linhas de zonas dominadas respectivamente pelo olho esquerdo e pelo olho direito no padrão estilo zebra. Tais zonas são as colunas de dominância ocular. Têm sido visualizadas por experiências de marcação radioactiva. O estudo teórico e experimental podem ser encontrados nas referências [8-11]. O modelo que utiliza um Autómato Celular de Gás em Reticulado¹ é dado em por Ermentrout e Edelstein-Keshet [12].

◆ Organização temporal e espacial de colónias de insectos simulada por Autómatos Celulares Moveis: Miramontes e outros autores [13] introduziram os Autómatos Celulares Moveis, ACM, para descrever interacções entre elementos que se movem. Por exemplo, descrevem medidas de oscilações de pequeno período no comportamento de activação de colónias de formigas *Leptothorax* confinadas. As referências são [14-17]. Foi estabelecido, através de uma experimentação cuidadosa, que as formigas individuais não são osciladores periódicos e que podem activar ou desactivar através de contacto físico directo e quando isoladas tornam-se activas espontaneamente, sem estímulo externo. Para além disso, este processo de activação espontânea envolve caos de dimensão pouco elevada, aqui a referência é Cole [18] como era nos textos [16] e [17].

A simulação da organização espacial inclui padrões concêntricos, como são observados nas colmeias de abelhas e na formiga *Leptothorax*, sendo as referências [19-21].

◆ Caminhos traçados pelas formigas: as formigas são conhecidas por comunicar por uma série de meios incluindo sinais químicos chamados ferormonas que depositam ao longo do seu caminho. Uma feromona indicadora da passagem de uma formiga, depositada por uma formiga obreira retornando de um sítio onde encontrou comida até ao

¹ Autómatos Celulares de Gás em Reticulado são modelos de partículas moveis. O sistema consiste numa grelha na qual as partículas se movem e se relacionam.

ninho, induz recrutamento de outras obreiras para encontrar a mesma comida², a referencia é dada pelo artigo de Deneubourg, Goss, Franks e Pasteels [22]. A modelação por Autómatos Celulares permitiu descobrir que quando indivíduos estão procurando retomar caminhos já feitos podem criar novos caminhos nas linhas em que vários caminhos se cruzam. Um efeito autocatalítico está presente porque quando as formigas atravessam de um trilho para o outro mais feromona é adicionada ao caminho escolhido. Os modelos calculados via Autómatos Celulares por Ermentrout e Edelstein-Keshet [12] fazem com que tendencialmente evoluções dos caminhos das formigas passem de movimentos desordenados até um único caminho.

♦ Modelos em Ecologia: há um número de exemplos recentes de sistemas presa-predador que usam Autómatos Celulares. Um Autómato aleatório foi desenvolvido para a ecologia das plantas no Jasper Ridge Biological Preserv [23]. Há duas ou mais espécies de plantas que produzem sementes com uma dispersão aleatória e probabilidades aleatórias de germinação. Competição inter-específica é autorizada. O resultado destas simulações parece explicar algumas das pequenas e grandes manchas de dispersão de uma espécie noutra, patente nos ecossistemas naturais.

Camazine [24] descreve um Autómato Celular de Gás em Reticulado para a formação de anéis em banda nos favos de mel das abelhas, este modelo autoriza que a postura de ovos aleatória em células fechadas que estão próximo uma da outra. Mel e pólen são colocados aleatoriamente em células, delas removidos também aleatoriamente a uma taxa proporcional ao numero de células vizinhas. Regras simples como estas são suficientes para encontrar uma aproximação muito rigorosa aos padrões encontrados experimentalmente.

Por via de simplificação de um modelo de hospedeira e parasita discreto e colocando o sistema resultante numa grelha Hassel, Comins e May [25] estudaram os efeitos espaciais no sistema. O Autómato compara-se favoravelmente com as simulações em modelos diferenciais.

Dytham e Shorrocks [26] da Universidade de Leeds reportaram recentemente um Autómato Celular descrevendo populações de *Drosophila*, isto é, a mosca do vinagre. Duas espécies, isto é, a mosca do vinagre e a *Drosophila Simulans* poderão nunca se excluir uma à outra

² “Recrutamento” tem um sentido comunitário. isto é, trata-se do comportamento de um ser vivo que é imitado por outros elementos da mesma classe, neste caso as formigas obreiras. Recrutamento é um termo técnico utilizado em sociobiologia.

globalmente apesar de haver uma competição local forte, isto é, se cada uma das espécies tiver distribuições agregadas.

♦ Tecidos biológicos e vascularização: trabalho recente de M. A. Mainster [27] contem um Autómato Celular de Gás sobre Reticulado para simular morfogénese (a morfogénese é um conceito essencial da biologia teórica, é a criação de formas dos seres vivos a partir da diferenciação das primeira células do embrião até ao ser adulto), em particular a morfogénese da retina. As simulações dão os seguintes resultados: formação de sistemas de distribuição de sangue, reparação das feridas, atrofia, formação de padrões em volta de pontos de agregação na retinopatia diabética.

Neste trabalho veremos como sendo os Autómatos Celulares de construção tão simples nos podem conduzir a resultados tão complexos. Para tal vamos estudar a sua natureza, caracterização, e classificação, baseando-nos não só no estudo exaustivo de alguns deles como também numa amostragem, por simulação de Monte Carlo.

CAPÍTULO 3

QUE SÃO OS AUTÓMATOS CELULARES?

3.1 - DEFINIÇÃO E REGRAS DOS AUTÓMATOS CELULARES

Um Autômato Celular é um modelo matemático para sistemas naturais complexos envolvendo um grande número de componentes identicamente simples com interações locais. Consiste numa cadeia de posições, células, cada uma com um conjunto finito de valores possíveis. O valor de cada célula envolve sincronicamente instantes de tempo discretos, de acordo com regras idênticas. O valor de determinada regra é determinado pelos valores existentes, previamente, na sua vizinhança.

Começemos por ver alguns exemplos de Autômatos Celulares simples, em que cada célula depende apenas de três outras que a antecedem no instante de tempo anterior, para depois passarmos ao estudo e classificação de Autômatos Celulares mais complexos.

Definimos como $x_t(i)$ o valor da célula i no instante de tempo t ; os valores possíveis de $x_t(i)$ são sempre inteiros entre 0 e $k-1$ (espaço de estados). Neste trabalho vamos considerar exclusivamente autômatos unidimensionais, onde cada variável tem apenas dois valores possíveis, 0 e 1 (sistema binário), ou seja, faremos sempre $k=2$. O valor de cada variável $x_t(i)$ é obtido em função da variável $x_{t-1}(i)$ e de uma vizinhança desta. É a estas funções que chamamos regras locais.

Cada regra é portanto uma relação entre uma célula central, $x_t(i)$, e as células suas vizinhas. Cada regra envolve $2r+1$ células do instante de tempo anterior, isto é

$$x_t(i) = F(x_{t-1}(i-r), x_{t-1}(i-r+1), \dots, x_{t-1}(i), \dots, x_{t-1}(i+r)), \quad (1)$$

em que F é uma função arbitraria que especifica a regra a ser usada no Autómato Celular. O parâmetro r determina assim o “raio de acção” de cada regra.

Outra forma que temos de escrever a equação (1) é

$$x_t(i) = f\left[\sum_{j=-r}^r \alpha_j x_{t-1}(i+j)\right] \quad (2)$$

onde α_j são constantes inteiras, e a função f é definida no espaço de estados.

Para uma análise mais fácil, comecemos por ver os casos em que $r=1$.

Facilmente podemos entender que usando apenas 0's e 1's temos $2^3 = 8$, casos possíveis:

111 , 110 , 101 , 100 , 011 , 010 , 001 , 000.

Cada um destes casos dará origem a uma nova célula que também ela será 0 ou 1, e assim teremos $2^8 = 256$ regras (2^n para regras de n dígitos).

Exemplo 3.1.1: $f(111) = 0$ $f(110) = 1$
 $f(101) = 0$ $f(100) = 1$
 $f(011) = 1$ $f(010) = 0$
 $f(001) = 1$ $f(000) = 0,$

é uma regra possível, que ao ser aplicada a uma condição inicial

$t=0,$ 010111000011000100

vem

$t=1,$ 0010110011110101

Dizemos que uma regra é legal se:

♦ o estado inicial nulo não for alterado ($f(000) = 0$) pois nada gera nada, o que reduz as regras possíveis para metade;

♦ deve verificar-se ainda a simetria das condições ($f(001) = f(100)$, $f(110) = f(011)$), por razões físicas: em muitos casos um *objecto* não se altera se lhe rodarmos a vizinhança.

Assim para um total de $2^8=562$ regras ficamos reduzidos a 32 regras legais.

Regra nº	0	4	18	22	32	36	50	54	72	76	90	94	104	108	122	126
111	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
110	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
101	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1
100	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
011	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
010	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
001	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Regra nº	128	132	146	150	160	164	178	182	200	204	218	222	232	236	250	254
111	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
110	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
101	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1
100	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
011	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
010	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
001	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
000	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Considerámos $x_t(i)$ como sendo o valor de i no instante t , por isso a regra

$$\begin{array}{cccccccc} 111 & 110 & 101 & 100 & 011 & 010 & 001 & 000 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

pode ser definida por $x_{t+1}(i) = x_t(i-1) \oplus x_t(i+1)$, isto é, a regra 90 é a soma dos extremos em base binária ou a disjunção exclusiva dos extremos. Se definirmos $x_t(i) = x_+$, $x_t(i-1) = x^-$, $x_t(i+1) = x^+$, temos que esta regra pode ser escrita como: $x_+ = x^- \oplus x^+$.

Vejamos outros casos obtidos por métodos mais ou menos semelhantes:

$$\text{Regra 18} \rightarrow x_+ = x \vee (x^- \oplus x^+)$$

$$\text{Regra 22} \rightarrow x_+ = x \vee (x^- \wedge x^+)$$

$$\text{Regra 54} \rightarrow x_+ = x \oplus (x^- \vee x^+)$$

$$\text{Regra 150} \rightarrow x_+ = x^- \oplus x \oplus x^+.$$

Voltando ainda ao exemplo 1, poder-se-ia pensar que as células que se encontram nos extremos em cada intervalo de tempo não têm vizinhança, mas a realidade não é essa, existem três formas de resolver essa questão:

♦ a primeira é considerar cada autômato como sendo um anel, isto é, se tiver $x_t(0) x_t(1) x_t(2) \dots x_t(n-2) x_t(n-1) x_t(n)$ a vizinhança de $x_t(0)$ é $x_t(n-r+1) \dots x_t(n-1) x_t(n)$ à esquerda e $x_t(1) x_t(2) \dots x_t(r)$ à direita; a vizinhança de $x_t(n)$ é $x_t(0) x_t(1) \dots x_t(r-1)$ à direita e $x_t(n-r) x_t(n-r+1) \dots x_t(n-1)$ à esquerda; obtendo-se assim um Autômato Celular Circular.

♦ podemos ainda ter Autômatos Celulares Limitados, que são aqueles em que as r primeiras e r últimas células para cada instante de tempo t , são sempre zero;

♦ por ultimo temos os Autômatos Celulares Reflexivos muito semelhantes aos autômatos celulares limitados, com a diferença de que em vez de células nulas nos extremos teremos um efeito de reflexo, isto é numa sequencia $x_t(0) x_t(1) x_t(2) \dots x_t(n-2) x_t(n-1) x_t(n)$ teremos à esquerda de $x_t(0)$, $x_t(r-1) x_t(r-2) \dots x_t(0)$, e à direita de $x_t(n)$, $x_t(n) x_t(n-1) \dots x_t(n-r+1)$.

Dizemos que um Autômato Celular tem período p se

$$\forall i \quad x_t(i) = x_{t+p}(i).$$

Quando se representa um Autômato Celular, com $k=2$ por exemplo, não se apresenta os valores de cada célula, 0's e 1's, mas sim pontos negros e pontos brancos para uma visualização mais fácil do autômato.

Concretizemos agora a situação para as regras de 5 células ($r = 2$): mantendo a notação anterior, temos que $x_t(i)$ é o valor de i no instante t , e este será um valor inteiro, é obtido em função de $i-2$, $i-1$, i , $i+1$ e $i+2$, no instante de tempo anterior, isto é

$$x_t(i) = F(x_{t-1}(i-2), x_{t-1}(i-1), x_{t-1}(i), x_{t-1}(i+1), x_{t-1}(i+2)),$$

em que F é uma função arbitrária que especifica a regra a ser usada no Autômato Celular.

Chamamos regras totalizantes às regras em que o valor de uma célula depende do resultado da soma das anteriores. Ou seja, temos que a soma

$$S = x_{t-1}(i-2) + x_{t-1}(i-1) + x_{t-1}(i) + x_{t-1}(i+1) + x_{t-1}(i+2),$$

pode ser 0, 1, 2, 3, 4 ou 5, e damos-lhe o código

$$C = \sum_{S=0}^5 f(S) * 2^S.$$

Exemplo 3.1.2: $f(0) = 0$
 $f(1) = 0$
 $f(2) = 1$
 $f(3) = 0$
 $f(4) = 1$
 $f(5) = 0$

$$C = f(0) * 2^0 + f(1) * 2^1 + f(2) * 2^2 + f(3) * 2^3 + f(4) * 2^4 + f(5) * 2^5 = 20.$$

As regras totalizantes são:

Regra nº	0	2	4	6	8	10	12	14	16	18	20	22	24	26	28	30
S(0)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
S(1)	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
S(2)	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
S(3)	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1
S(4)	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
S(5)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Regra nº	32	34	36	38	40	42	44	46	48	50	52	54	56	58	60	62
S(0)	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
S(1)	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1	0	1
S(2)	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
S(3)	0	0	0	0	1	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1
S(4)	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1
S(5)	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

NOTA 3.1.3: $S(0) = 1$ não é considerado nas regras totalizantes.

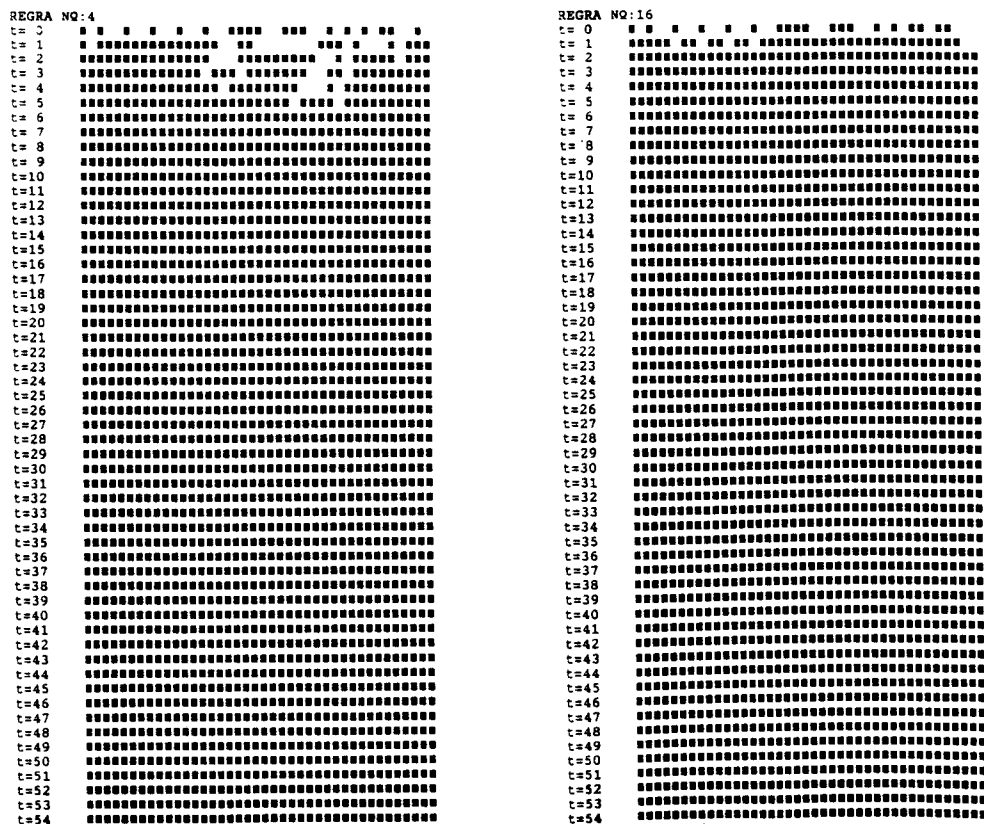
3.2 - CLASSIFICAÇÃO QUALITATIVA DOS AUTÓMATOS

Vamos neste capítulo fazer uma classificação qualitativa dos Autómatos Celulares, onde definiremos empiricamente quatro classes que serão estudadas sob o ponto de vista quantitativo na secção seguinte.

Com base na estrutura dos Autómatos Celulares em cada uma das 32 regras legais podemos observar quatro tipos de classes qualitativas (acompanhadas de algumas configurações de Autómatos Celulares que evoluem segundo cada uma das referidas regras totalizantes dentro de cada classe, sendo a condição inicial aleatória, isto é, em cada célula temos um 0 ou um 1, espaço preto ou branco respectivamente, escolhidos independentemente com probabilidade $\frac{1}{2}$):

- ◆ Classe 1: o autómato evolui para um estado homogéneo - regras 0, 4, 16, 32, 36, 48, 54, 60 e 62.

Figura 3.2.1:



```

REGRA NO:32
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NO:36
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NO:48
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NO:54
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ: 60
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ: 62
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

◆ Classe 2: a evolução do autômato celular origina conjuntos estáveis, ou periódicos - regras 8, 24, 40, 56 e 58.

Figura 3.2.2:

```

REGRA NQ: 8
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

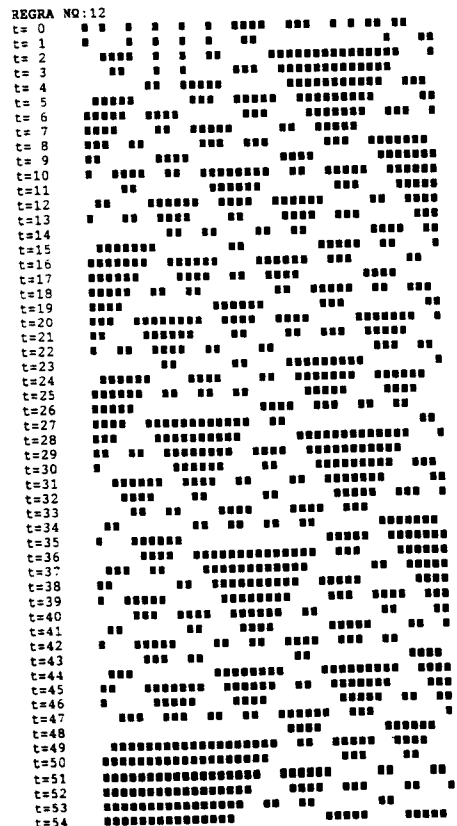
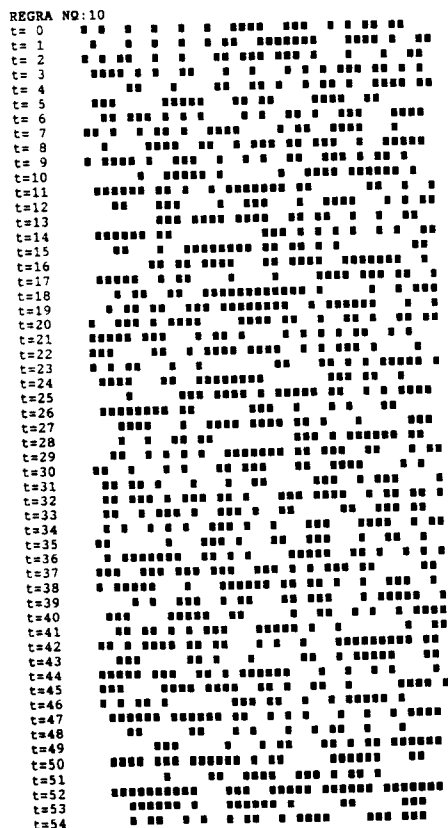
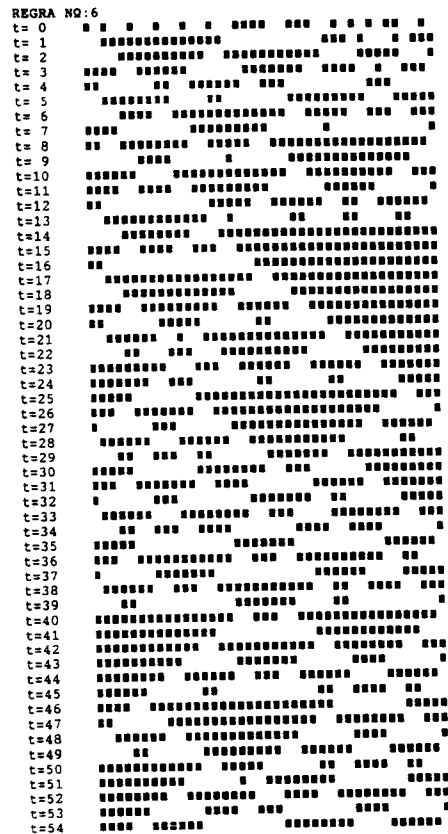
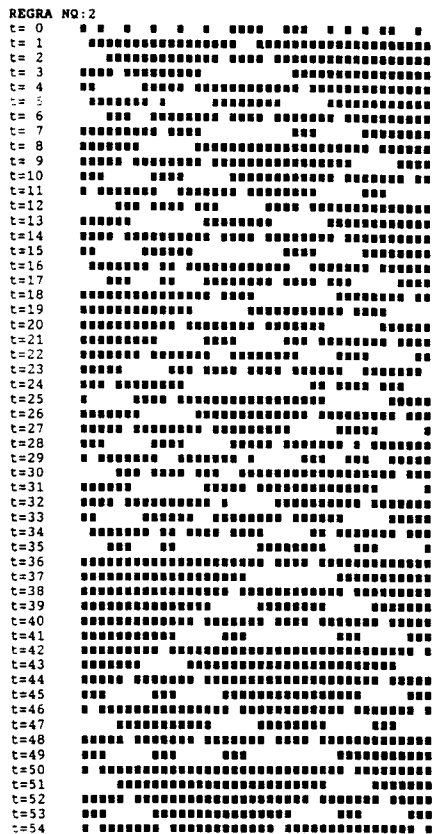
```

REGRA NQ: 24
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```


♦ Classe 3: obtemos estruturas caóticas - regras 2, 6, 10, 12, 14, 18, 22, 26, 28, 30, 34, 38, 42, 44, 46, e 50.

Figura 3.2.3



```

REGRA NQ:14
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:18
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:22
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:26
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ: 28
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ: 30
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ: 34
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ: 38
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:42
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:44
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:46
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

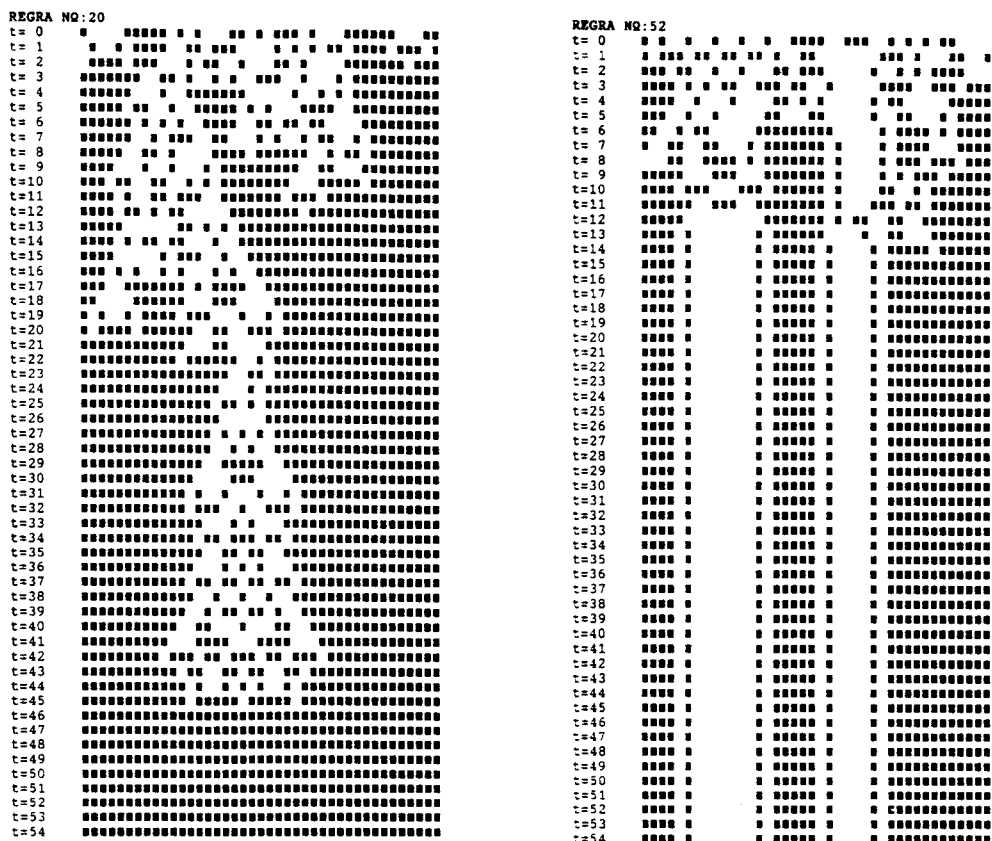
```

REGRA NQ:50
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

♦ Classe 4: observa-se estruturas complexas localizadas, por vezes com um tempo de vida longo - 20 e 52.

Figura 3.2.4:



NOTA 3.2.1: O facto de variarmos a condição inicial, numa mesma regra, não irá afectar grandemente o resultado qualitativo dessa, pois apesar de existirem diferenças a nível de pequenos detalhes, a estrutura é a mesma. (Os estados iniciais excepcionais também podem existir mas são tão raros que a probabilidade destes aparecerem é muito baixa ou até mesmo nula).

NOTA 3.2.2: Algumas estruturas, dentro de uma mesma classe, como é o caso das originadas pela regra 12, são mais regulares do que outras, como é o caso das originadas pela regra 10.

3.3 - CLASSIFICAÇÃO QUANTITATIVA DOS AUTÓMATOS

Vamos agora fazer uma classificação quantitativa dos Autómatos Celulares:

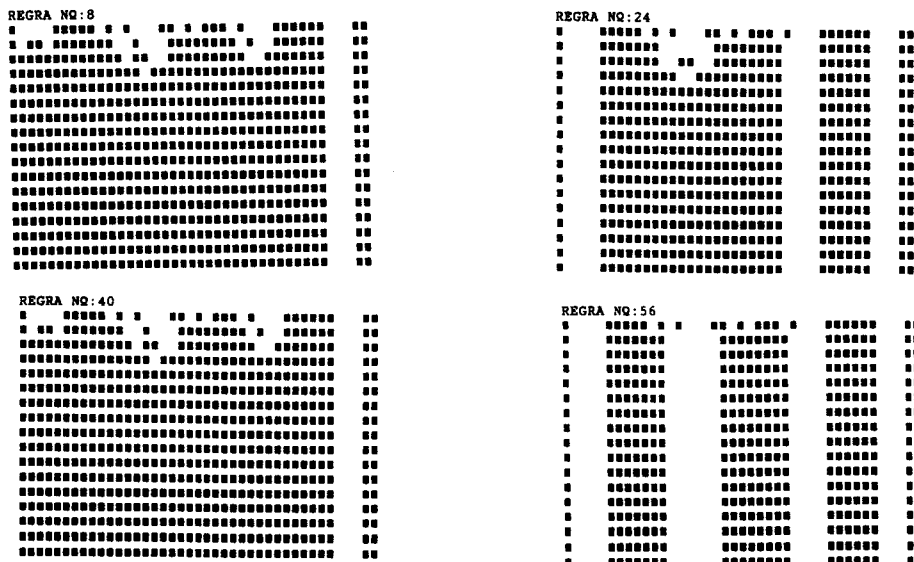
♦ Classe 1: o Autômato Celular ao fim de um numero finito de passos, após a condição inicial, adquire um estado homogêneo, no qual todas as células têm o mesmo valor. A sua evolução destrói toda a informação relativamente à condição inicial.

Algumas configurações de autómatos celulares de classe 1 podem não ter um estado completamente homogêneo no inicio, mas atingem rapidamente a homogeneidade com o aumento do comprimento do Autômato Celular.

♦ Classe 2: os Autómatos Celulares desta classe, independentemente da sua estrutura inicial (tipicamente curta), têm uma configuração bastante simples, no sentido em que ou são estáveis ou têm períodos baixos (usualmente inferiores a $k!$), que aparecem desde muito cedo.

Por exemplo, exceptuando o caso trivial, para a regra 8 e 40 apenas a sequencia 111 (limitada por 00 em cada um dos lados) é persistente, ou seja mantém essa mesma configuração, no entanto na regra 24 tanto 111 como 1111 são persistentes, e na regra 56 qualquer sucessão de dois ou mais 1 consecutivos é persistente.

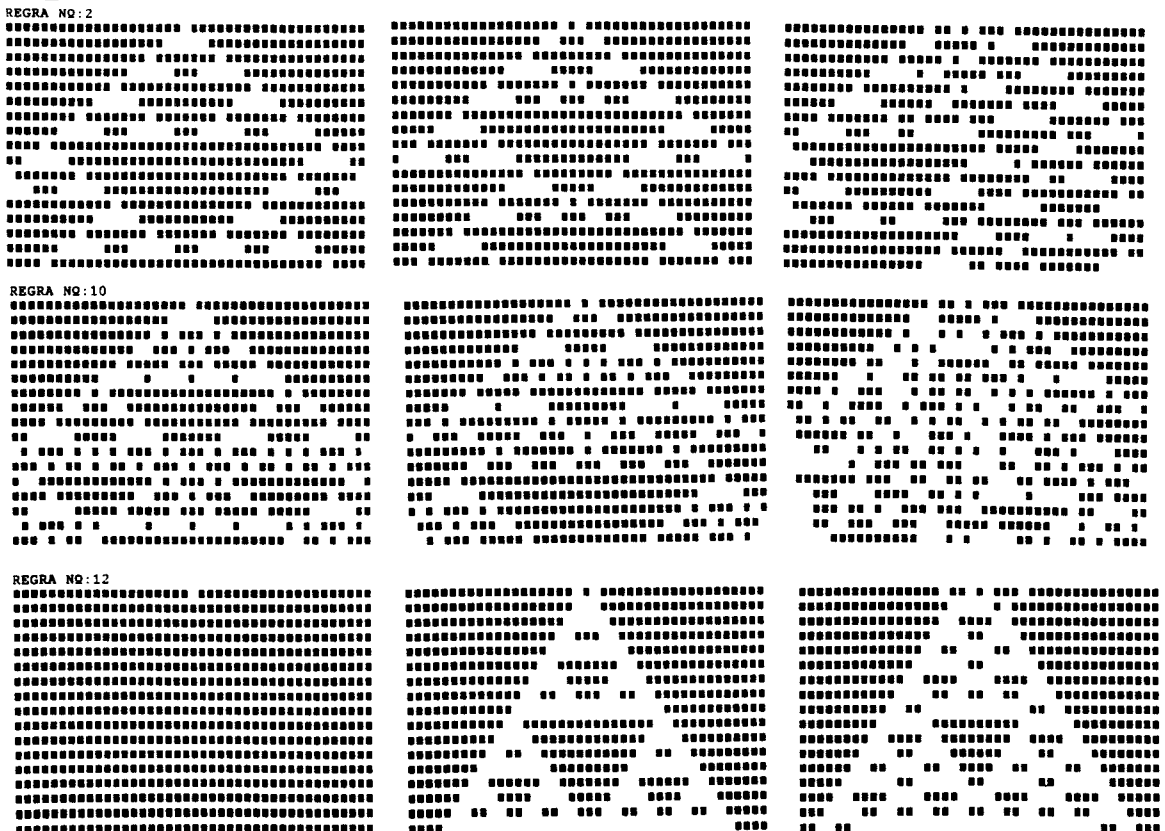
Figura 3.3.1:



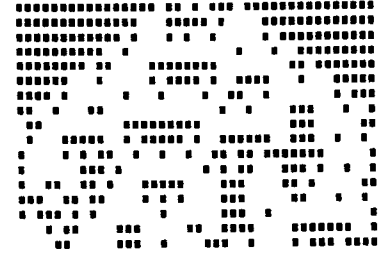
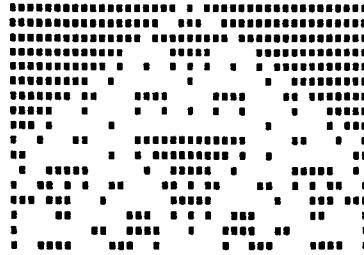
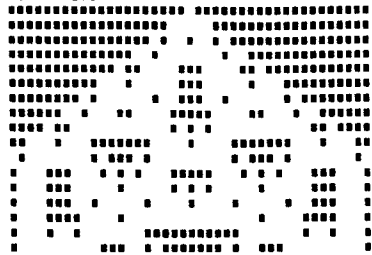
◆ Classe 3: a evolução dos Autómatos Celulares de classe 3 para quase todas as condições iniciais possíveis conduz-nos a estados não periódicos (“caóticos”). Só após um número suficientemente grande de passos, estes Autómatos Celulares nos poderão conduzir a estados iguais aos estados iniciais. Ou seja, nesta classe encontraremos períodos muito elevados e muitas vezes estes aparecem tão tarde que dificilmente podem ser determinados.

Na figura 3.2.3 vimos alguns exemplos de casos típicos de Autómatos Celulares de classe 3, partindo de estados iniciais aleatórios, e ainda, que dentro desta classe existem casos mais complexos do que outros (por exemplo, regra 10 é mais complexa do que a regra 12). Nas figuras 3.3.2 podemos ainda ver, com maior pormenor, como a influência da condição inicial é importante na estrutura do Autómato Celular, o que por vezes nos conduz a casos excepcionais como já foi citado anteriormente. A maior regularidade desta classe é-nos dada pelo aspecto dos grandes triângulos “negros” em que todas as células desses triângulos têm o mesmo valor. Estes negros ocorrem quando num instante de tempo algumas células consecutivas tomam o mesmo valor, destruindo-se progressivamente pelo efeito das outras células vizinhas; isto é, a “informação” das células vizinhas pode “afogar” o efeito dessas células consecutivas, formando assim um declive que dará o aspecto triangular.

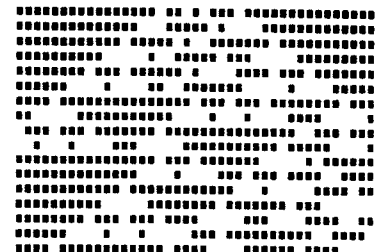
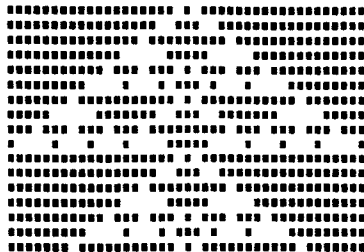
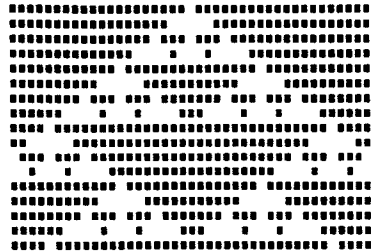
Figura 3.3.2:



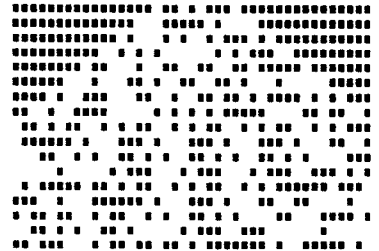
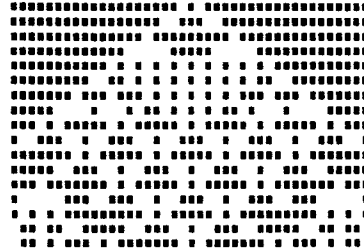
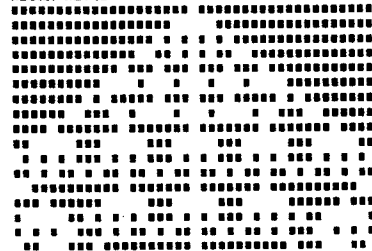
REGRA NQ:26



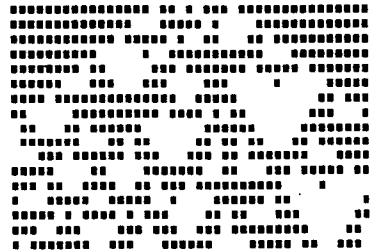
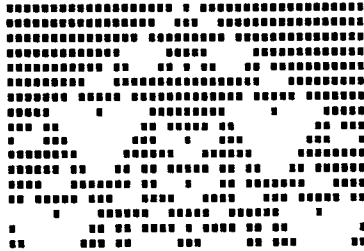
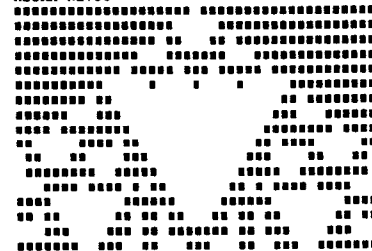
REGRA NQ:34



REGRA NQ:42



REGRA NQ:50



◆ Classe 4: As figuras 3.3.3 mostram-nos Autómatos Celulares de classe 4 segundo a regra 20, para condições iniciais aleatórias. Na maioria dos casos, todas as células acabam por “morrer” (atingirem o zero) após um numero finito de instantes de tempo. Contudo, nalguns casos as estruturas periódicas persistem por tempo infinito. Não é possível determinar quanto tempo leva uma estrutura a “morrer”, nem sequer dizer à priori se ela é persistente ou não.

Os Autómatos Celulares de classe 4 são de certo modo imprevisíveis relativamente aos seus períodos dado que as estruturas localmente complexas tendem, a terminar cada vez mais tarde quando fazemos aumentar a largura do autómato. Esta característica distingue-os relativamente aos das outras classes. No entanto, na secção 4.3 veremos uma forma de resolver este problema.

Figura 3.3.3:

```

REGRA NQ:20
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:20
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:20
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

```

REGRA NQ:20
t= 0
t= 1
t= 2
t= 3
t= 4
t= 5
t= 6
t= 7
t= 8
t= 9
t=10
t=11
t=12
t=13
t=14
t=15
t=16
t=17
t=18
t=19
t=20
t=21
t=22
t=23
t=24
t=25
t=26
t=27
t=28
t=29
t=30
t=31
t=32
t=33
t=34
t=35
t=36
t=37
t=38
t=39
t=40
t=41
t=42
t=43
t=44
t=45
t=46
t=47
t=48
t=49
t=50
t=51
t=52
t=53
t=54

```

CAPÍTULO 4

PLANO DE EXPERIMENTAÇÃO REALIZADO

4.1 - ALGORITMO

Vamos agora debruçar o nosso estudo sobre os períodos dos Autómatos Celulares Limitados, e em particular aos referentes às regras 12, 20, 22, 24, 28, 42 e 52. Ou seja, neste capítulo vamos fazer variar a largura L e estudar o comportamento dos Autómatos Celulares Limitados para todas as condições iniciais possíveis, e segundo as ditas regras.

Fixemos a largura L . Como $k=2$, temos 2^L condições iniciais possíveis, obtidas quando escrevemos todos os valores inteiros (entre 0 e 2^L-1) em linguagem binária, isto é:

$$\begin{aligned} 0 &\rightarrow 0 \dots 0000, \\ 1 &\rightarrow 0 \dots 0001, \\ 2 &\rightarrow 0 \dots 0010, \\ 3 &\rightarrow 0 \dots 0011, \\ 4 &\rightarrow 0 \dots 0100, \\ &\dots \\ 2^L-1 &\rightarrow 1 \dots 1111. \end{aligned}$$

É desta forma que encontramos a primeira linha do autómato. Como estamos a trabalhar com Autómatos Celulares Limitados, com $r=2$, devemos colocar dois zeros em cada extremidade da linha, e assim temos a primeira linha do Autómato Celular pronta para a partir dela, e segundo uma das regras previamente escolhida, ser construída a segunda linha do

Autómato. Agindo para a segunda linha como para a primeira, encontraremos a terceira linha... E assim por diante.

Neste trabalho foram feitas 300 linhas, por cada Autómato Celular.

Exemplo 4.1.1: fixemos $L=5$, e a regra nº 12. Temos 32 condições iniciais possíveis:

00000, 00001, 00010, 00011, ..., 11110, 11111.

Vamos trabalhar com

00 00000 00, 00 00001 00, 00 00010 00, 00 00011 00 ... 00 11110 00, 00 11111 00

aplicando a regra nº 12 a estas condições, temos

00 00000 00, 00 00001 00, 00 00010 00, 00 00011 00 ... 00 11110 00, 00 11111 00
00000 , 00000 , 00000 , 00111 ... 10011 , 10001

tratando a segunda linha como a primeira, e assim por diante obtemos os Autómatos

00 00000 00, 00 00001 00, 00 00010 00, 00 00011 00 ... 00 11110 00, 00 11111 00
00 00000 00, 00 00000 00, 00 00000 00, 00 00111 00 ... 00 10011 00, 00 10001 00
00 00000 00, 00 00000 00, 00 00000 00, 00 01111 00 ... 00 01111 00, 00 00100 00
00 00000 00, 00 00000 00, 00 00000 00, 00 11001 00 ... 00 11001 00, 00 00000 00
00 00000 00, 00 00000 00, 00 00000 00, 00 11110 00 ... 00 11110 00, 00 00000 00
00 00000 00, 00 00000 00, 00 00000 00, 00 10011 00 ... 00 10011 00, 00 00000 00
00 00000 00, 00 00000 00, 00 00000 00, 00 01111 00 ... 00 01111 00, 00 00000 00

No entanto surge um problema: o programa computacional usado dá-nos como maior valor inteiro $2^{16} - 1$, ou seja, só permite o estudo dos Autómatos Celulares até $L = 16$.

Para resolver esta questão, colocamos à esquerda das 16 células, tantas quantas necessárias para o comprimento desejado, por forma a que estas percorram todos os valores possíveis mas com a condição de que cada mudança só deve ser operada após o “bloco” das 16 células ter percorrido todos os casos possíveis.

Depois de construídos todos os Autómatos possíveis para uma largura L fixada (e uma regra fixada) bastar-nos-á procurar os períodos de cada Autómato Celular, que se fará simplesmente por comparação sucessiva das varias linhas até que existam duas iguais. O período é a distância entre elas.

O comprimento de cada Autómato Celular é 300. Ou seja, cada Autómato Celular tem 300 linhas; assim teremos 300 unidades de tempo.

4.2 - ANÁLISE ESPECTRAL

Vamos agora construir gráficos de barras, para cada uma destas regras onde serão assinalados os respectivos períodos, e assim verificar a sua evolução quando fazemos variar a largura a dos Autómatos Celulares.

A cada um destes gráficos chamamos espectro.

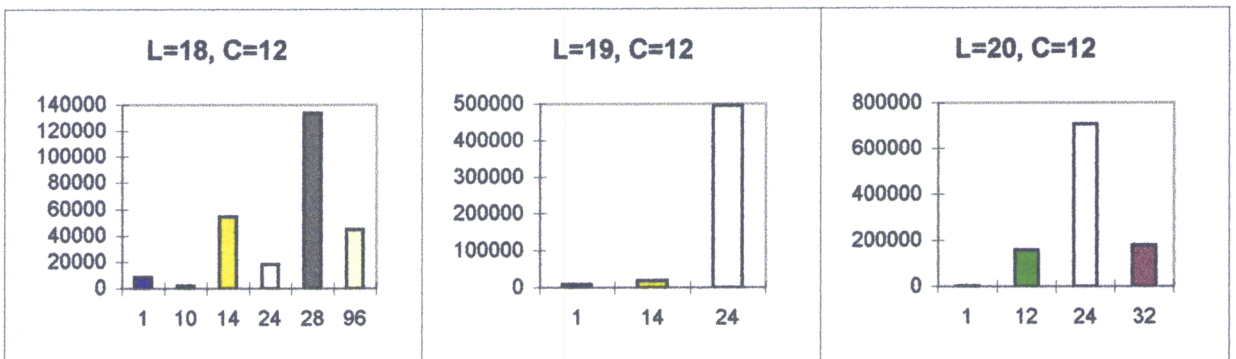
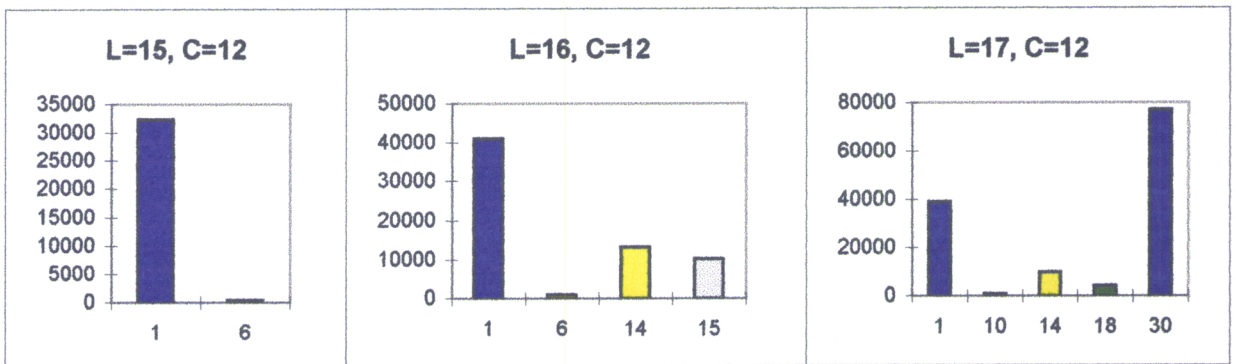
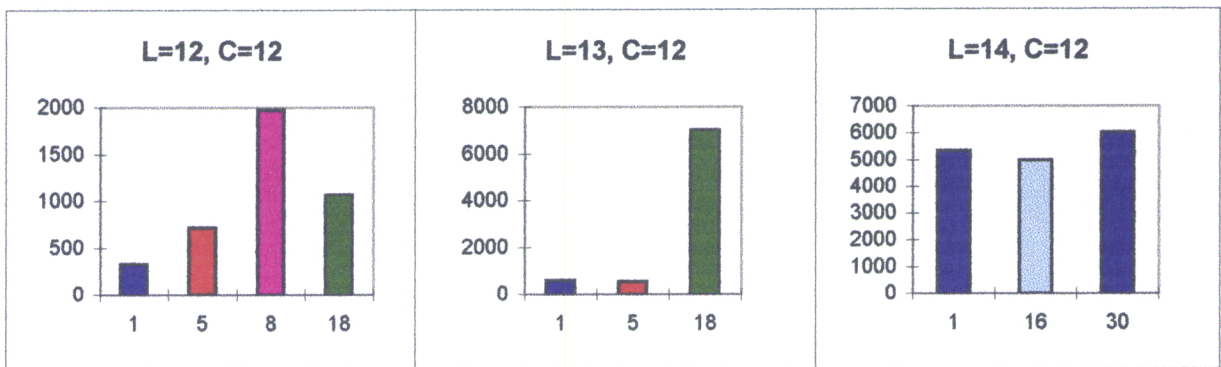
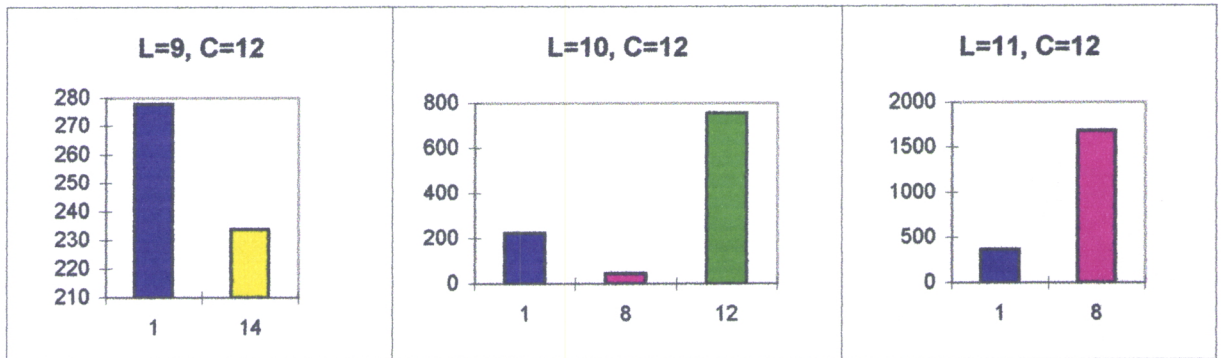
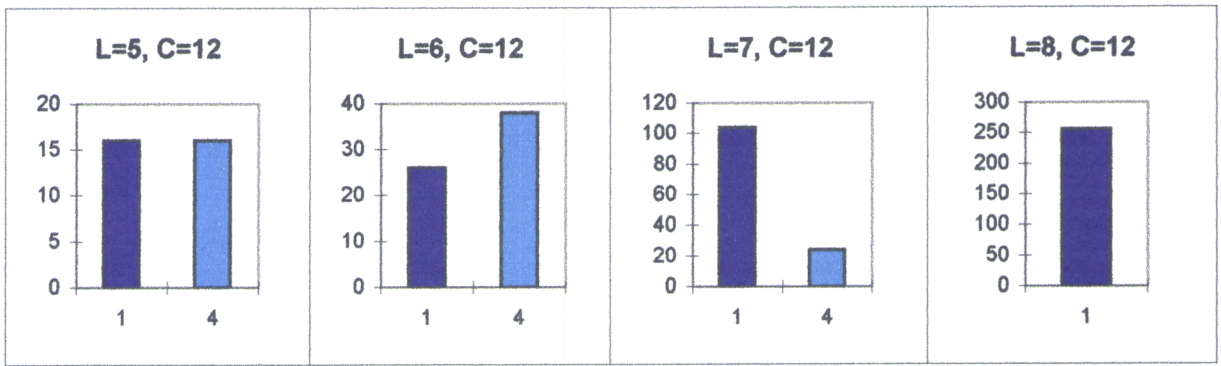
NOTA 4.2.1: é de realçar o facto de que para cada regra foi estipulada uma relação entre cada período e uma cor, para uma identificação mais fácil da evolução dos espectros à medida que o L aumenta; assim, por exemplo, para a regra 12 o período 1 é azul escuro, o período 4 é azul claro, o período 14 é amarelo, etc..

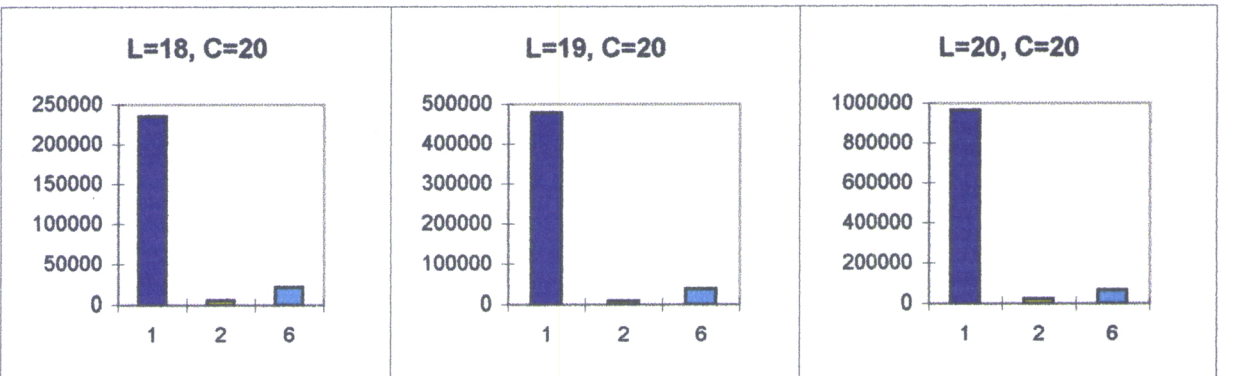
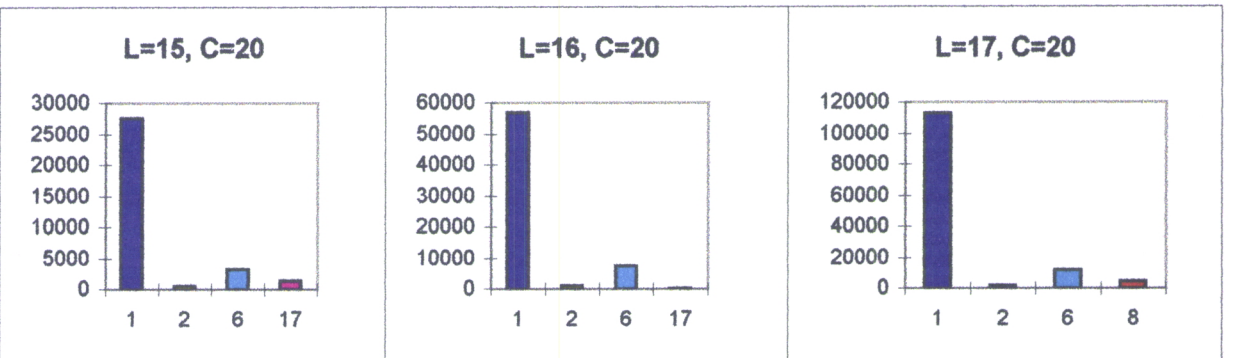
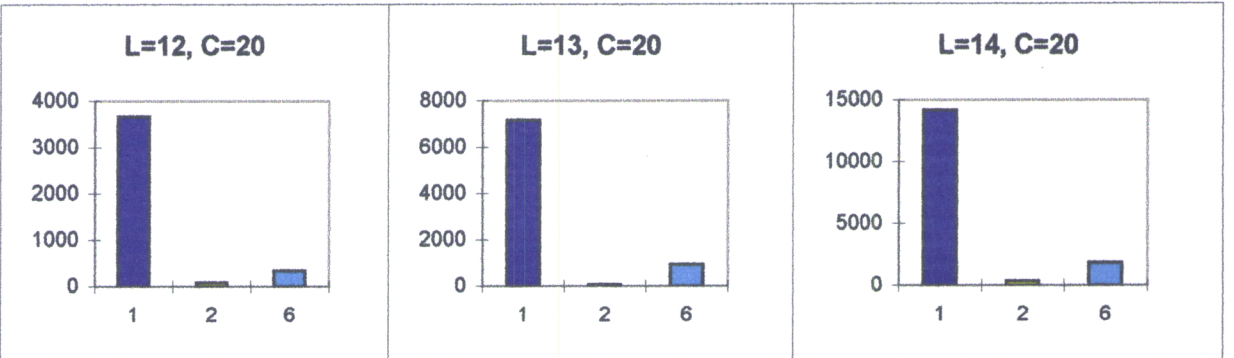
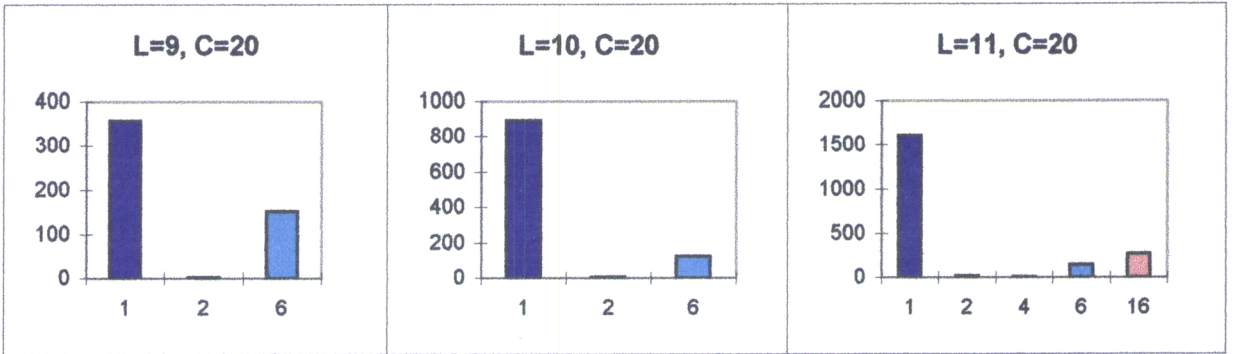
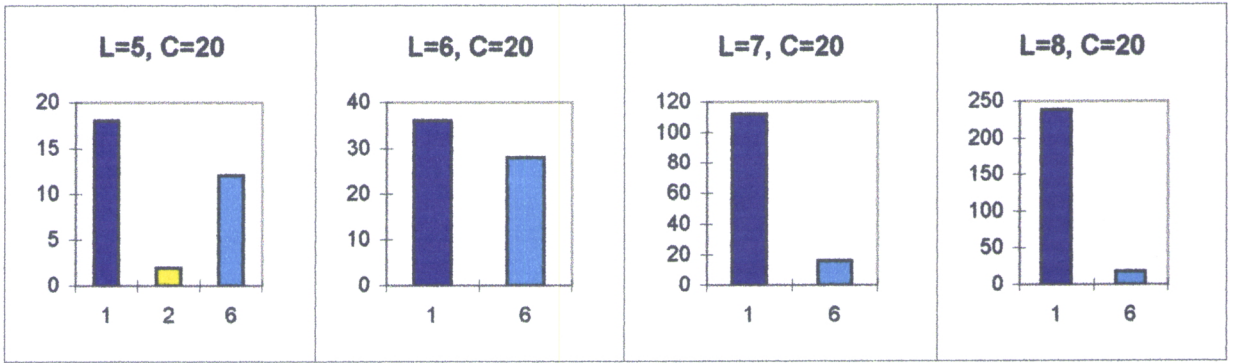
NOTA 4.2.2: Na figura 4.2.1 não aparece a regra 24 pois para todos os valores de L , entre 5 e 20, os Autómatos Celulares Limitados têm sempre período 1.

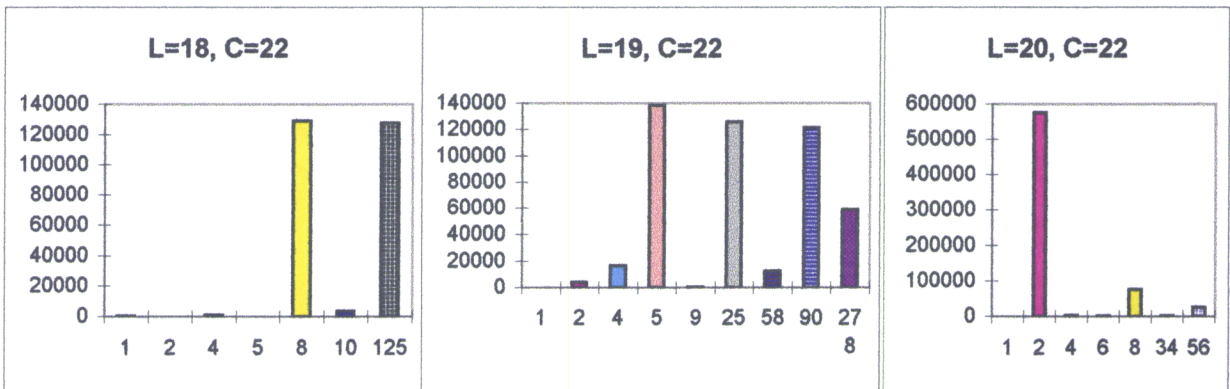
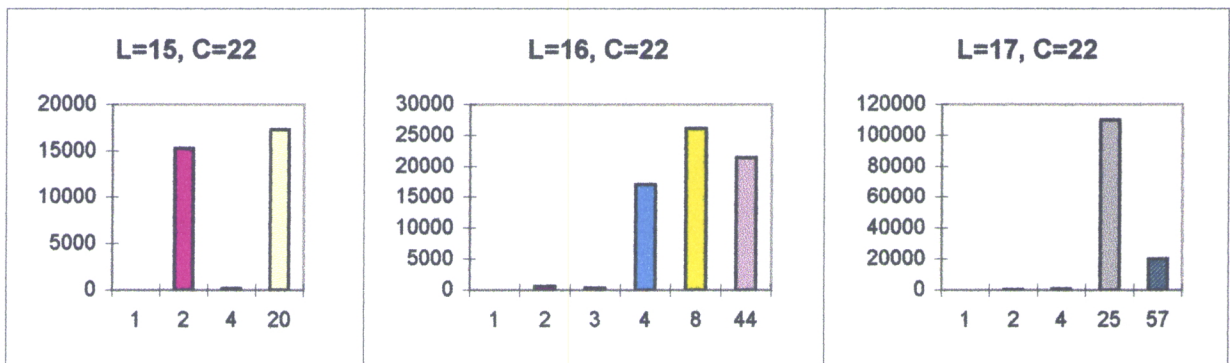
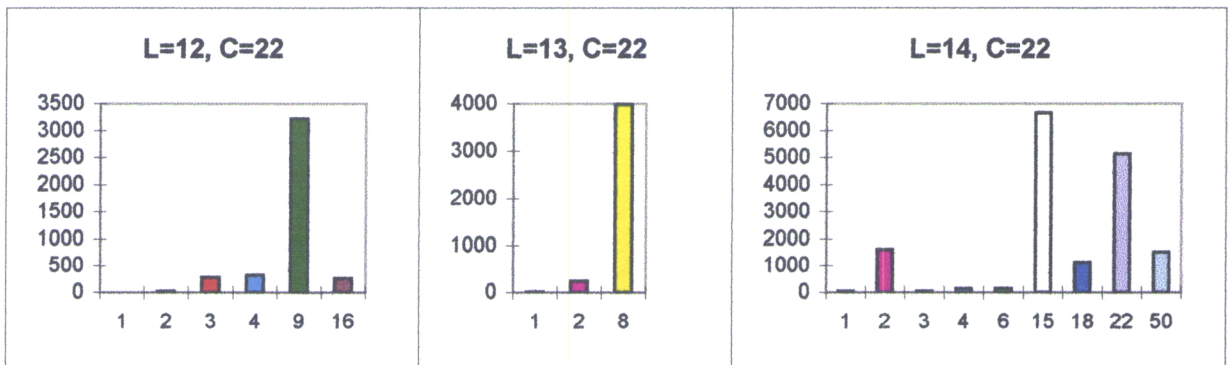
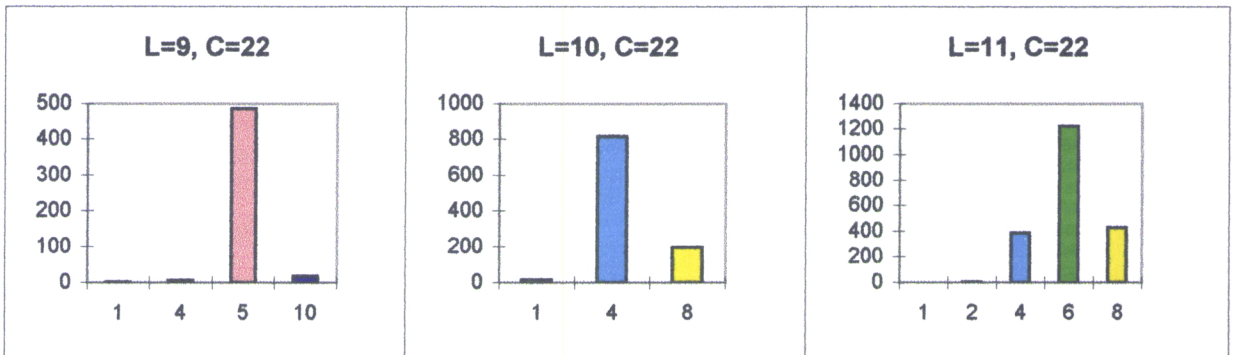
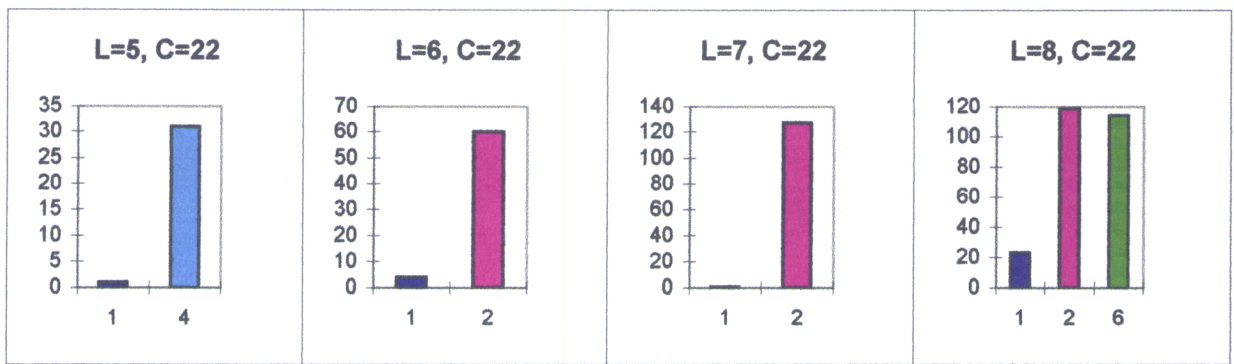
Pela figura 4.2.1 verificaremos que:

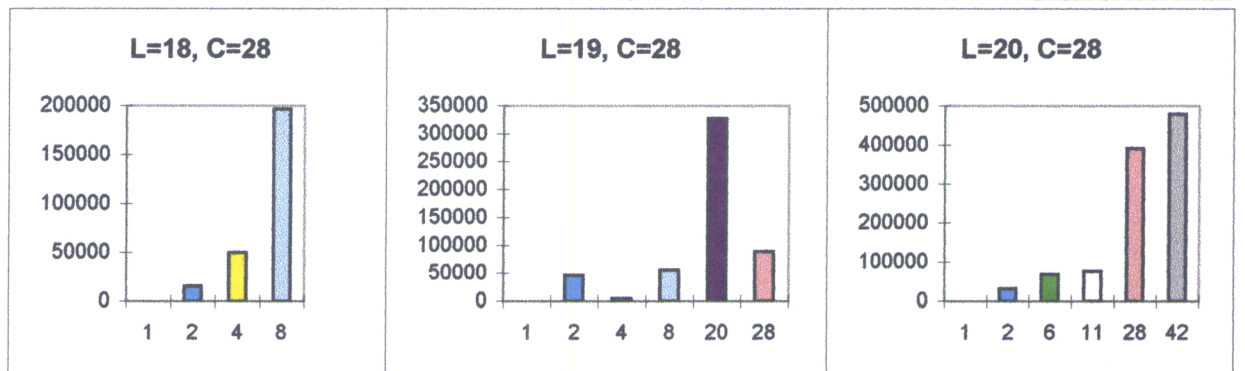
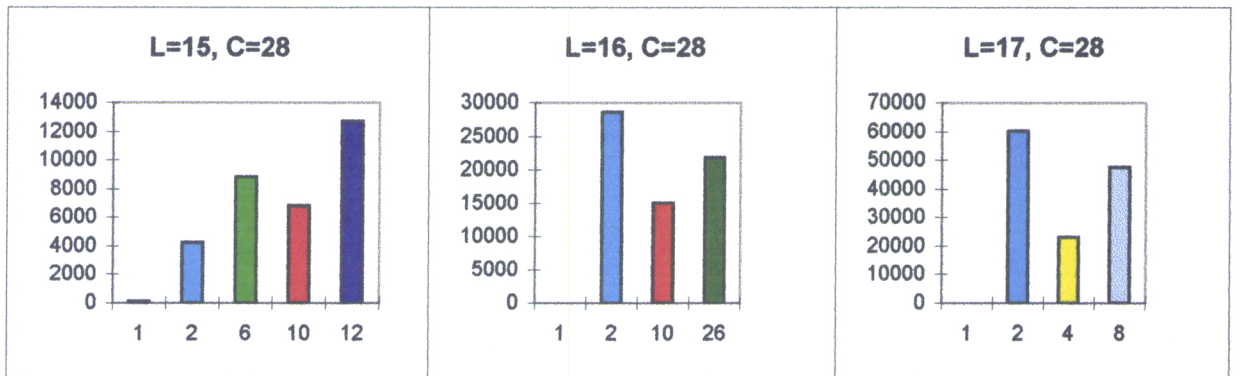
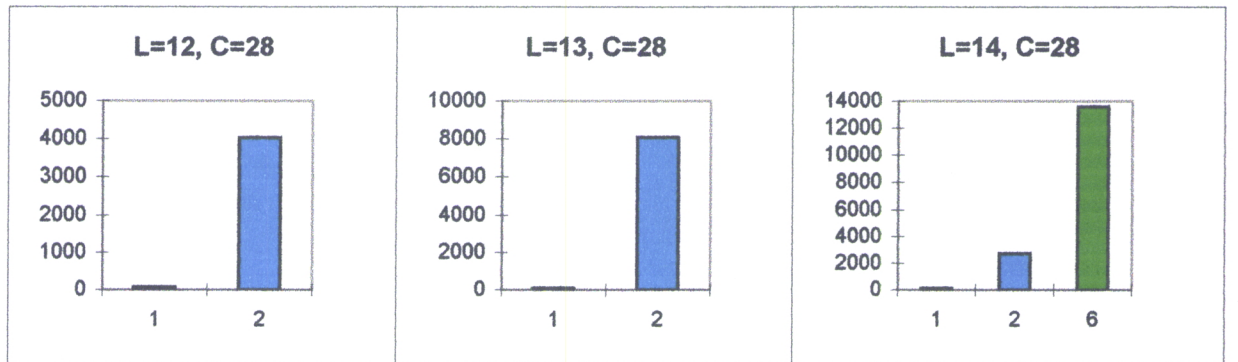
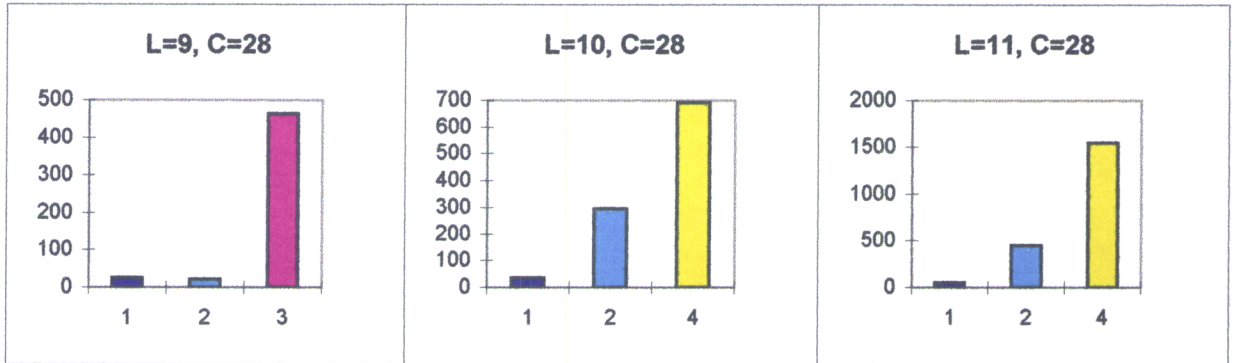
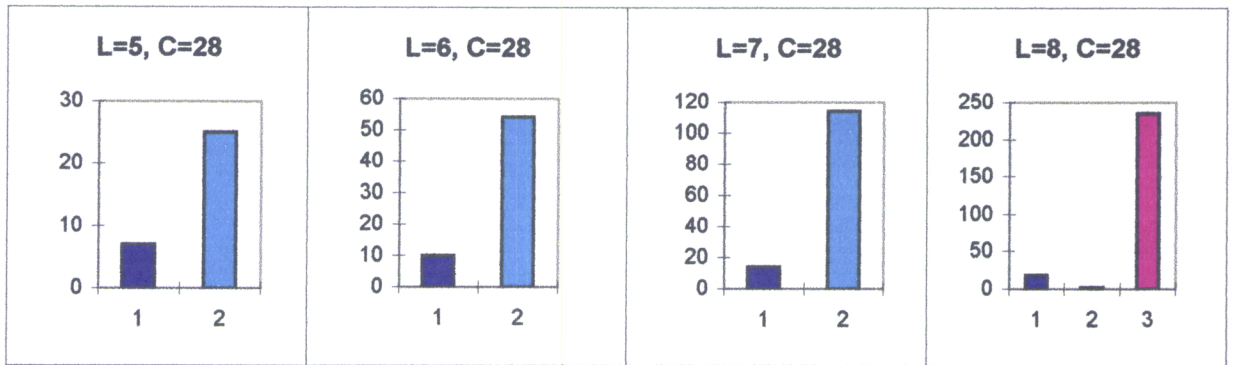
◆ para as regras 20 e 52 (classe 4) os espectros tendem a manter a sua estrutura quando L aumenta;

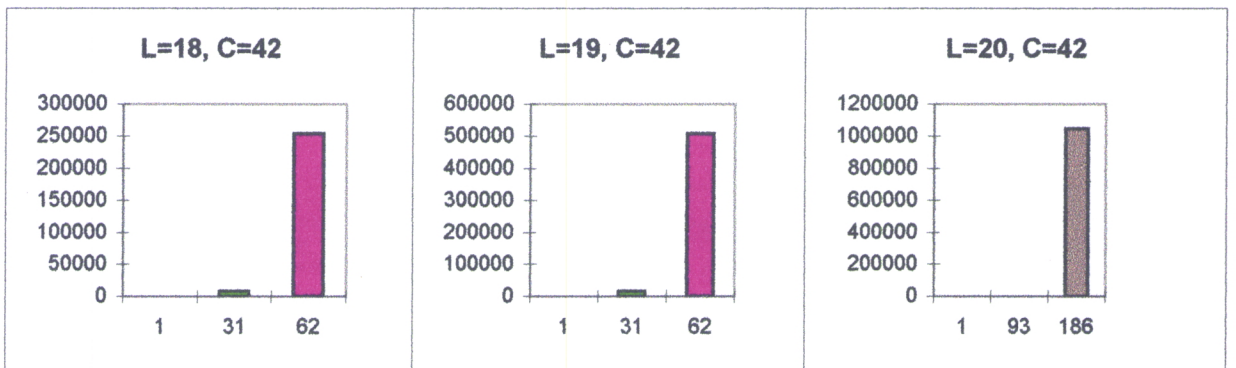
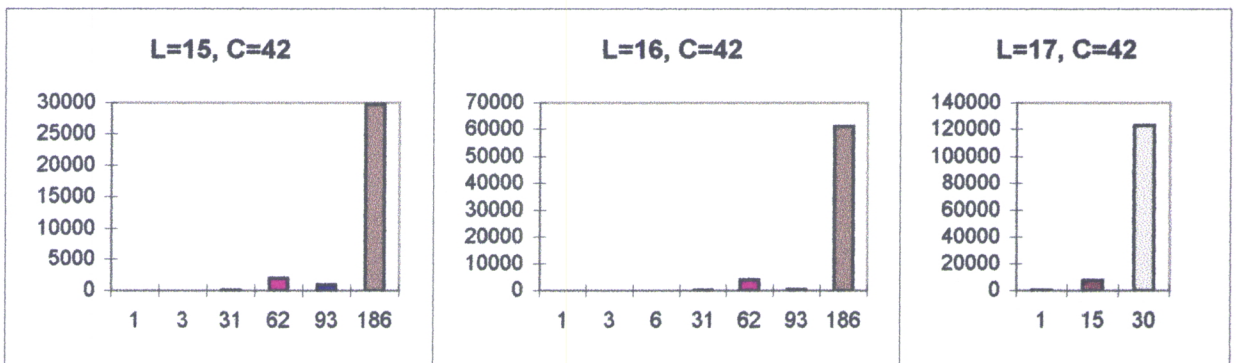
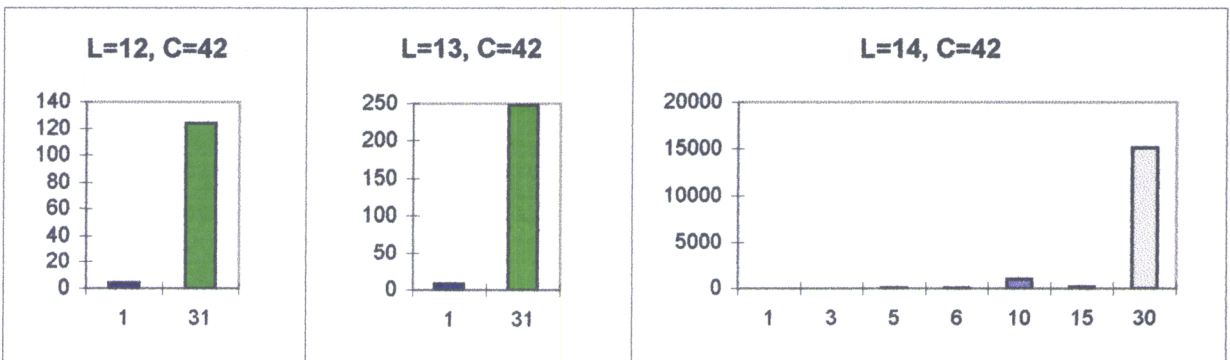
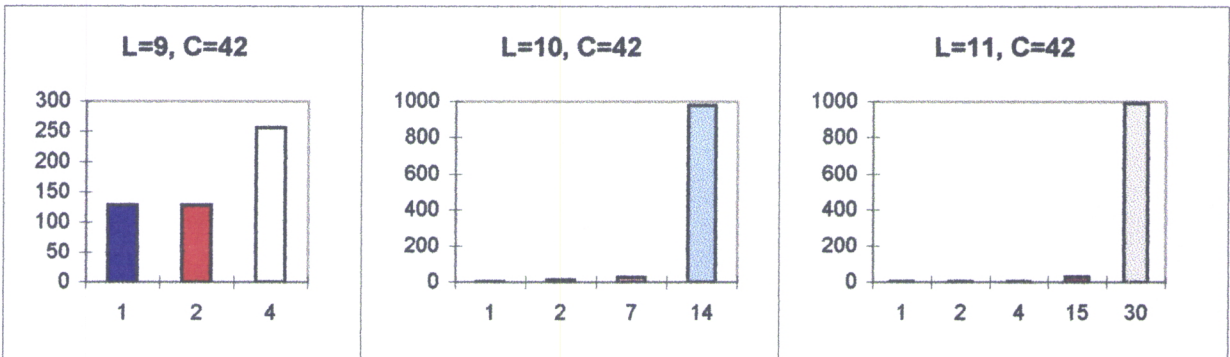
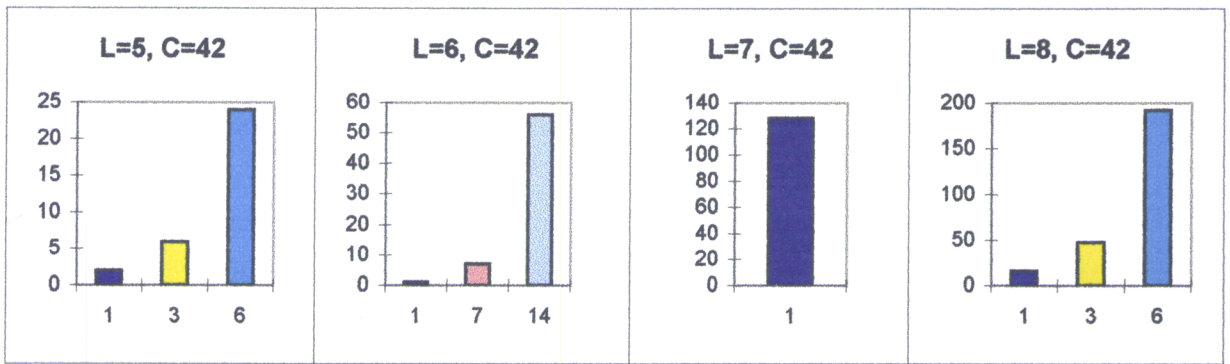
◆ para as regras 12, 22, 28 e 42 (classe 3) os espectros são sempre imprevisíveis, no sentido em que a sua estrutura (cor e altura das barras para cada gráfico) varia completamente a cada novo período.

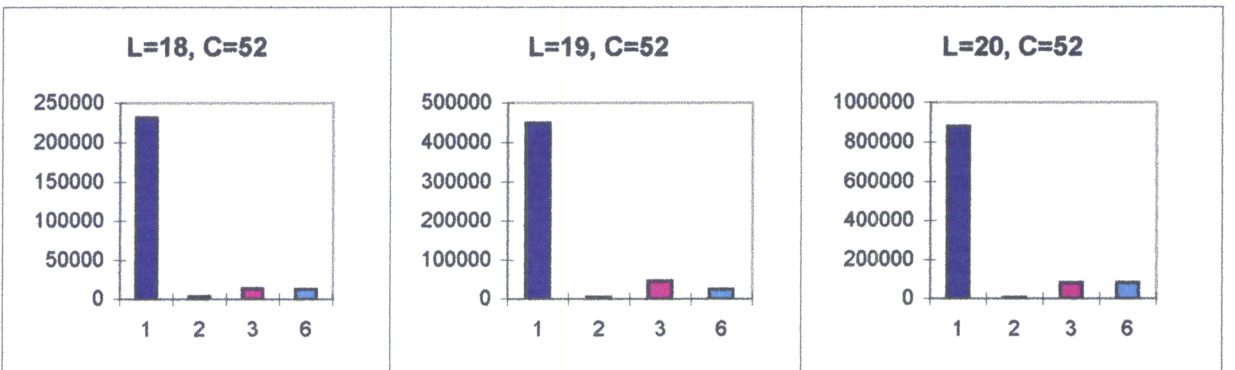
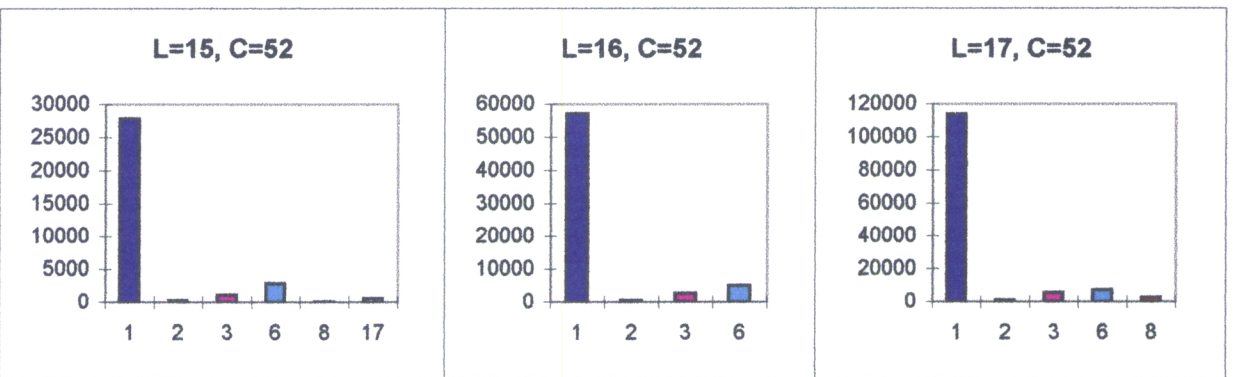
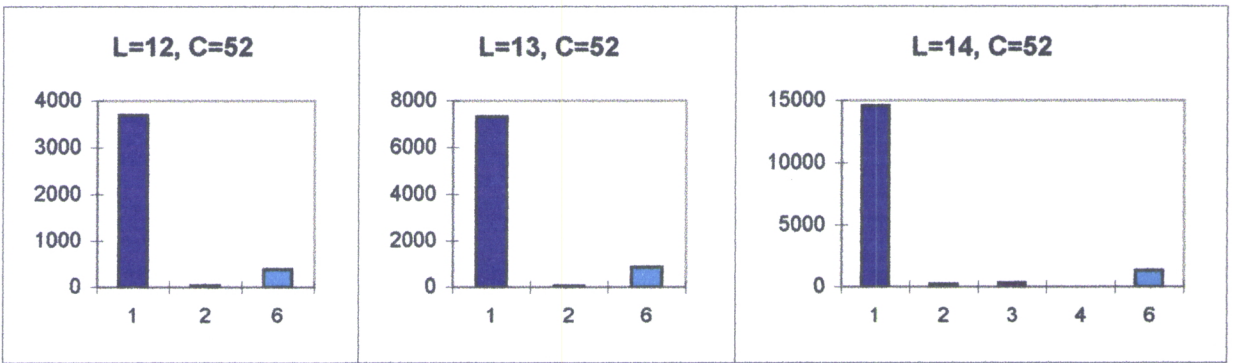
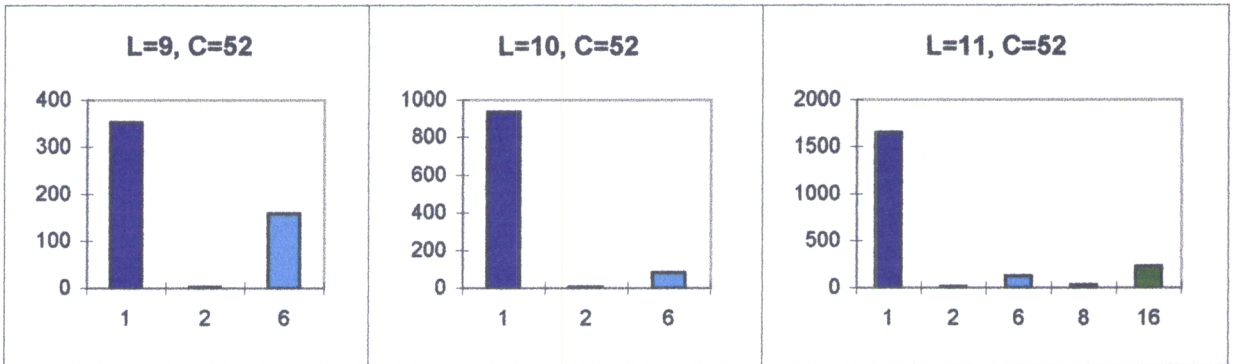
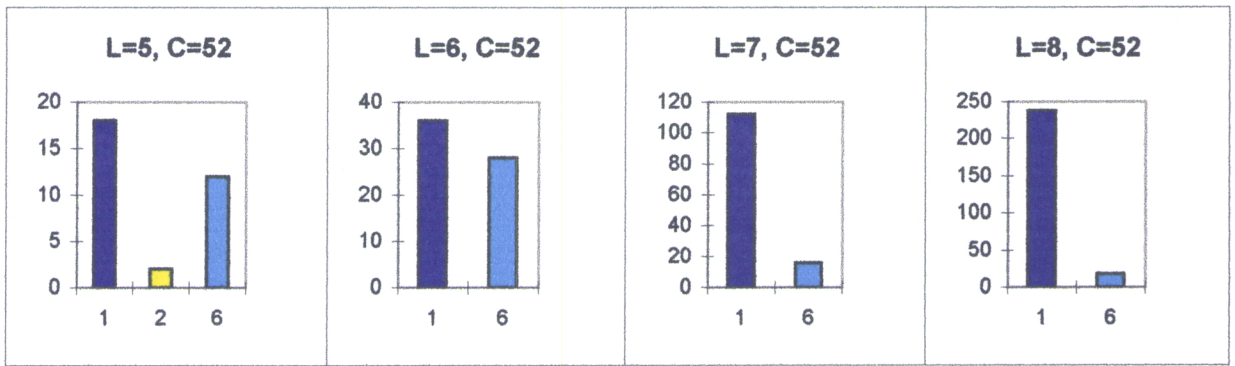












4.3 - HIP

Seja L a largura de um Autómatos Celular, isto é, o número de células de cada linha do Autómatos. Assim para um comprimento L , teremos 2^L condições iniciais possíveis.

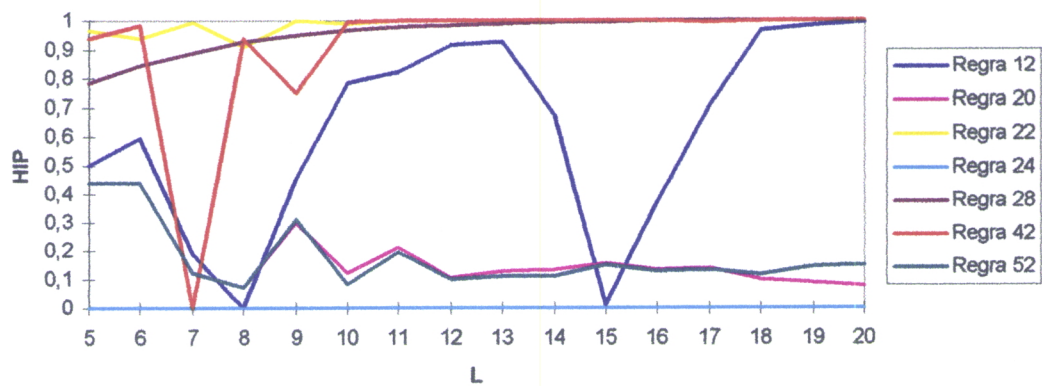
Definimos por HIP (High Periods) a probabilidade do período ser superior a um. Ou seja, para um determinado comprimento L

$$\text{HIP} = \frac{\text{numero de periodos diferentes de 1}}{\text{numero total de casos possíveis}}.$$

Com base nos valores do HIP verifica-se que com o aumento da largura L dos Autómatos Celulares Limitados estes tendem a aparecer agrupados em classes (que correspondem às que haviam sido definidas anteriormente), e apesar de se não poder diferenciar as classes 1 e 2 entre si visto que ambas têm essencialmente períodos um, podemos fazer uma redefinição quantitativa das classes, sendo esta última preferível à anterior, visto não ser subjectiva:

- ◆ Classe 2: HIP = 0 para cada L ;
- ◆ Classe 3: HIP quase 1 para L suficientemente grande;
- ◆ Classe 4: HIP baixo mas não zero.

Vejamos como evoluem os Autómatos Celulares Limitados com o crescimento de L representado no eixo das abcissas, com os respectivos HIP's no eixo das ordenadas:



Por limitações do elevado numero de casos para $L > 20$, dificilmente se poderá continuar a fazer este estudo para todas as condições iniciais possíveis, assim para resolver este problema podemos recorrer a técnicas de amostragem por simulação de Monte-Carlo.

CAPÍTULO 5

METODO DE MONTE-CARLO

5.1 - O METODO DE MONTE-CARLO

Tal como foi dito na secção anterior, por limitações computacionais não é possível continuar o estudo em causa considerando todas as condições iniciais possíveis. Neste capítulo vamos proceder ao estudo do HIP por amostragem no espaço das condições iniciais.

Quando fazemos uma aproximação por amostragem, é importante estar conscientes de que não vamos obter resultados exactos mas sim aproximações. Logo devemos ter duas preocupações base:

- ◆ fazer uma amostragem realmente aleatória ;
- ◆ controlar o erro de estimativa, para o que necessitamos de encontrar o melhor tamanho da amostra.

Definimos $HIP = \frac{\text{numero de periodos diferentes de 1}}{\text{numero total de casos possiveis}}$; seja y o numero de períodos diferentes de 1 num total de M casos possíveis. Então, pretendemos estimar a proporção $p = \frac{y}{M}$, onde p representa o HIP.

Seja \hat{p}_n o estimador de p , ou seja, se considerarmos n ($n \leq m$) como sendo o tamanho da amostra retirada das M condições iniciais existentes e

k o numero de elementos da amostra com período diferente de 1, $\hat{p}_n = \frac{k}{n}$.

Como só estamos interessados no facto de os períodos ou serem 1 ou serem diferentes de 1, podemos concluir que o numero N de elementos da amostra com período diferente de 1 tem uma distribuição binomial com parâmetros n e p.

Diz-se que a sucessão de variáveis aleatórias (X_n) converge quase-certamente, ou com probabilidade 1, para a variável aleatória X e escreve-se

$$X_n \xrightarrow{qc} X \quad \text{ou} \quad qc\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = X$$

se a probabilidade da sua convergência é um, isto é, se

$$P(\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = X) = 1.$$

Vamos agora mostrar que $\hat{p}_n \xrightarrow{qc} p$:

Lei Forte dos Grandes Números [32]: Seja X_1, X_2, \dots uma sucessão de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com X, com momentos de 1ª e 2ª ordem, isto é, com media e variância. Então,

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \xrightarrow{qc} E(X).$$

Dem.: Consideremos primeiro que $X_k \geq 0$, $k = 1, 2, \dots$.

Fixemos, temporariamente $\alpha > 1$, e definimos $u_n = [\alpha^n]$, onde o parêntesis recto denota a parte inteira. Note-se que $u_n \rightarrow +\infty$.

O primeiro passo é provar

$$\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P} \left(\left| \frac{\sum_{i=1}^{u_n} X_i - E \left(\sum_{i=1}^{u_n} X_i \right)}{u_n} \right| > \varepsilon \right) < \infty.$$

Como as variáveis X_n são independentes e identicamente distribuídas com X ,

$$\text{Var} \left(\sum_{i=1}^n X_i \right) = \sum_{i=1}^n \text{Var}(X_i).$$

Pela desigualdade de Tchebycheff³

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P} \left(\left| \frac{\sum_{i=1}^{u_n} X_i - E \left(\sum_{i=1}^{u_n} X_i \right)}{u_n} \right| > \varepsilon \right) &= \sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P} \left(\left| \frac{\sum_{i=1}^{u_n} X_i - u_n E(X)}{u_n} \right| > \varepsilon \right) \leq \\ &\leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\text{Var} \left(\sum_{i=1}^{u_n} X_i \right)}{\varepsilon^2 u_n^2} = \frac{1}{\varepsilon^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{u_n} \text{Var}(X) \leq \\ &\leq \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{2}{\alpha - 1} \text{Var}(X) < +\infty, \end{aligned}$$

pois

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{u_n} \leq 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{u_n} \right)^{\alpha} = 2 \frac{1}{\alpha} \frac{1}{1 - 1/\alpha} = \frac{2}{\alpha - 1}.$$

Assim, fica provado que $\sum_{n=1}^{\infty} \mathbb{P} \left(\left| \frac{\sum_{i=1}^{u_n} X_i - u_n E(X)}{u_n} \right| > \varepsilon \right) < \infty$, o que,

pelo lema de Borel-Canteli, implica que

³ A desigualdade de Bienaymé-Tchebycheff diz que $P(|\bar{X} - \mu| \geq \varepsilon) \leq \sigma^2 / n\varepsilon^2$, e decorre directamente da desigualdade de Tchebycheff, $P(\varphi(X) \geq \varepsilon) \leq E(\varphi) / \varepsilon$, (a ser demonstrada mais tarde) quando fazemos $\varphi(X) = (\bar{X} - \mu)^2$.

$$\frac{\sum_{i=1}^{u_n} X_i}{u_n} \rightarrow E(X)$$

com probabilidade 1.

Dado k natural, existe um n tal que $u_n \leq k \leq u_{n+1}$. Logo, com $X_i > 0$

$$\frac{u_n}{u_{n+1}} \frac{\sum_{i=1}^{u_n} X_i}{u_n} \leq \frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k} \leq \frac{u_{n+1}}{u_n} \frac{\sum_{i=1}^{u_{n+1}} X_i}{u_{n+1}}.$$

Como $\frac{u_{n+1}}{u_n} = \frac{[\alpha^{n+1}]}{[\alpha^n]} \rightarrow \alpha$, vem com probabilidade 1,

$$\frac{1}{\alpha} E(X) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k} \leq \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k} \leq \alpha E(X)$$

para qualquer $\alpha > 1$. Fazendo $\alpha \downarrow 1$ por valores racionais, vem

$$E(X) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k} \leq \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k} \leq E(X)$$

e assim

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k} = \limsup_{k \rightarrow \infty} \frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k}$$

portanto, com probabilidade 1, existe limite.

Caso $X_i, i=1, 2, \dots$, não sejam variáveis aleatórias positivas, vem

$$\frac{\sum_{i=1}^k X_i}{k} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k X_i^+ - \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k X_i^- \rightarrow E(X^+) - E(X^-) = E(X),$$

onde $X_i^+ = \max(X_i, 0)$ e $X_i^- = \max(-X_i, 0)$.

□

NOTA 5.1.1: Este teorema pode ser demonstrado prescindindo da condição da existência de momento de segunda ordem.

Neste caso, trabalhando com as variáveis aleatórias

$$X_i = \begin{cases} 1 & \text{se o elemento } n^\circ i \text{ da amostra tiver período } \neq 1 \\ 0 & \text{se o elemento } n^\circ i \text{ da amostra tiver período } 1 \end{cases} \quad (i=1, 2, \dots, n),$$

vem $\hat{p}_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n}$ que segue uma distribuição binomial, com parâmetros n e $E(X) = 1 \times p + 0 \times (1 - p) = p$. Logo, pela Lei Forte dos Grandes Números, como os X_i têm variância finita, conclui-se que $\hat{p}_n \xrightarrow{q.c.} p$.

Porém, não sabemos qual é a ordem n a partir da qual $|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon$.

Em vez disso vamos ver que valor de n dá para o acontecimento $|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon$ uma probabilidade suficientemente grande, isto é,

$$P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) \geq 1 - \delta$$

com $\delta > 0$ pequeno.

A convergência quase-certa, ou com probabilidade um, é o tipo de convergência mais forte que encontramos em estatística e que muitas vezes pode ser dispensada e aplicada uma convergência mais fraca, como é o caso da convergência em probabilidade:

Diz-se que a sucessão de variáveis aleatórias (X_n) converge em probabilidade, para a variável aleatória X e escreve-se

$$X_n \xrightarrow{p} X \quad \text{ou} \quad p\text{-}\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = X$$

se e só se:

$$\forall \varepsilon > 0 : \lim_{n \rightarrow \infty} P(|X_n - X| \leq \varepsilon) = 1.$$

Com efeito, $\hat{p}_n \xrightarrow{p} p$ (pela Lei Fraca dos Grandes Números⁴ [32]), e portanto, dado $\delta > 0$, tem-se, para n suficientemente grande,

$$P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) \geq 1 - \delta.$$

Mas, mais uma vez, não temos informação sobre o valor n a partir do qual esta relação se verifica. Porém, é possível aproximar uma distribuição binomial por uma distribuição normal através do Teorema de DeMoivre-Laplace.

Teorema de DeMoivre-Laplace [29]: Seja X_1, X_2, \dots , uma sucessão de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com X , seguindo uma distribuição binomial de parâmetros n e p . A distribuição limite de

$$Z_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i - np}{\sqrt{np(1-p)}}$$

é normal reduzida⁵.

⁴ A Lei Fraca dos Grandes Números é em tudo igual à Lei Forte dos Grandes Números, mas é menos exigente relativamente ao tipo de convergência, basta que se verifique a convergência em probabilidade, pelo que este resultado é corolário do resultado anteriormente obtido $\hat{p}_n \xrightarrow{q} p$.

⁵ Ou seja, a sucessão Z_n converge em distribuição para uma variável aleatória normal reduzida.

NOTA 5.1.2: Este teorema é um caso particular do Teorema do Limite Central, que nos diz que, dada uma sucessão de variáveis aleatórias independentes e identicamente distribuídas com valor médio μ e desvio padrão σ , a media reduzida tem uma distribuição assintoticamente normal.

Demonstração do Teorema: Sabendo que se X e Y são variáveis aleatórias com funções geradoras de momentos $M_X(\theta)$ e $M_Y(\theta)$, respectivamente, então X e Y terão a mesma distribuição de probabilidade se e só se $M_X(\theta) = M_Y(\theta)$.

Vamos determinar a função geradora de momentos de Z_n , a que chamaremos $M_{Z_n}(\theta)$, que sabemos existir visto cada X_i seguir uma distribuição binomial. Designemos por $M(\theta)$ a função geradora de momentos de $\frac{X-p}{\sqrt{p(1-p)}}$, onde X é uma variável aleatória binomial com parâmetros n e p . Vem

$$Z_n = \frac{\sum_{i=1}^n X_i - np}{\sqrt{np(1-p)}} = \frac{1}{\sqrt{n}} \left(\frac{X_1 - p}{\sqrt{p(1-p)}} + \frac{X_2 - p}{\sqrt{p(1-p)}} + \dots + \frac{X_n - p}{\sqrt{p(1-p)}} \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{n}} T_n, \text{ onde } T_n = \frac{X_1 - p}{\sqrt{p(1-p)}} + \frac{X_2 - p}{\sqrt{p(1-p)}} + \dots + \frac{X_n - p}{\sqrt{p(1-p)}}.$$

Ora

$$M_{T_n}(\theta) = [M(\theta)]^n,$$

visto que a função geradora de momentos da soma de variáveis independentes é o produto das respectivas funções geradoras de momentos.

Como, por definição de função geradora de momentos,

$$M_Y(\theta) = E[e^{\theta Y}],$$

obtemos, ao substituírmos θ por $\frac{\theta}{\sqrt{n}}$,

$$M_{Z_n}(\theta) = \left[M\left(\frac{\theta}{\sqrt{n}}\right) \right]^n.$$

Desenvolvendo $M\left(\frac{\theta}{\sqrt{n}}\right)$ pela formula de Taylor vem, com $0 \leq \xi_n \leq \frac{\theta}{\sqrt{n}}$,

$$\begin{aligned} M_{Z_n}(\theta) &= \left[M\left(\frac{\theta}{\sqrt{n}}\right) \right]^n = \\ &= \left[1 + \frac{\theta}{\sqrt{n}} M'(0) + \frac{\theta^2}{2n} M''(0) + \frac{\theta^3}{6n\sqrt{n}} M'''(\xi_n) \right]^n = \\ &= \left[1 + \frac{\theta}{\sqrt{n}} M'(0) + \frac{\theta^2}{2n} M''(0) \left(1 + O\left(\frac{\theta}{\sqrt{n}}\right) \right) \right]^n. \end{aligned}$$

Como $M'(0) = 0$ porque estamos a trabalhar com variáveis centradas, e $M''(0) = 1$ porque as variáveis são reduzidas, isto é foram divididas pelo desvio padrão, vem

$$M_{Z_n}(\theta) = \left[1 + \frac{\theta^2}{2n} \left(1 + O\left(\frac{\theta}{\sqrt{n}}\right) \right) \right]^n.$$

Como $\lim_{n \rightarrow \infty} (1 + \zeta_n)^n = e^{\lim_{n \rightarrow \infty} n\zeta_n}$, vem que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} M_{Z_n}(\theta) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[1 + \frac{\theta^2}{2n} \left(1 + O\left(\frac{\theta}{\sqrt{n}}\right) \right) \right]^n = e^{\frac{\theta^2}{2}}.$$

A função $e^{\frac{\theta^2}{2}}$ é a função geradora de momentos das variáveis aleatórias que seguem uma distribuição normal de media 0 e

variância 1, ficando assim provado que Z_n segue assintoticamente uma distribuição normal centrada e reduzida.

□

Queremos saber qual o menor n para o qual $P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) \geq 1 - \delta$, com $\delta=1\%$ (pois procuramos uma boa probabilidade) e $\varepsilon=5\%$ (não foi escolhido inferior pois os valores de n eram demasiado elevados, levando bastante tempo de computação).

Apliquemos o Teorema de DeMoivre-Laplace às variáveis aleatórias X_i ($i = 1, 2, \dots$).

Claro que, fazendo $q=1-p$, vem

$$N = \sum_{i=1}^n X_i, \quad \hat{p}_n = \frac{N}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n} = \bar{X} \quad \text{e} \quad Z_n = \frac{\hat{p}_n - p}{\sqrt{pq/n}}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) &= P(-\varepsilon \leq \hat{p}_n - p \leq \varepsilon) = \\ &= P\left(-\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}} \leq \frac{\hat{p}_n - p}{\sqrt{\frac{pq}{n}}} \leq \frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}}\right) \cong \\ &\cong \Phi\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}}\right) - \Phi\left(-\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}}\right) = \\ &= \Phi\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}}\right) - \left(1 - \Phi\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}}\right)\right) = 2\Phi\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}}\right) - 1, \end{aligned}$$

onde Φ representa a função de distribuição de uma variável aleatória normal reduzida.

Se pretendemos $P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) \geq 1 - \delta$, com $\varepsilon=0.05$ e $\delta=0.01$, isto verifica-se aproximadamente quando

$$2 \Phi \left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}} \right) - 1 \geq 0.99 \Leftrightarrow \Phi \left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}} \right) \geq 0.995 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}} \geq 2,57.$$

$$\Leftrightarrow$$

Como o pior caso possível corresponde a $p = q = 1/2$ (por ser mínimo de $\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}}$), esta desigualdade será seguramente verificada se

$$\frac{0.05}{\sqrt{\frac{0.25}{n}}} \geq 2.57,$$

ou seja se

$$\sqrt{n} \geq 25,7 \Leftrightarrow n \geq 660.49.$$

Este é um bom resultado no sentido de que n não é muito grande, mas é aproximado. No entanto, podemos encontrar resultados mais seguros se utilizamos a desigualdade de Tchebycheff:

Teorema (Desigualdade de Tchebycheff) [29]: Seja X uma variável aleatória, $\varphi(x)$ uma função não-negativa e supomos que $E(\varphi(x))$ existe; Então qualquer que seja $k>0$ vem

$$P(\varphi(x) \geq k) \leq E(\varphi(x)) / k.$$

Dem.: Fixemos $k>0$.

X tem como função de distribuição $F(x) = P(X \leq x)$.

Então:

$$E(\varphi(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x) dF(x) =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\varphi(x) < k} \varphi(x) dF(x) + \int_{\varphi(x) \geq k} \varphi(x) dF(x) \geq \\
&\geq \int_{\varphi(x) \geq k} \varphi(x) dF(x) \geq k \int_{\varphi(x) \geq k} dF(x) = k P(\varphi(x) \geq k).
\end{aligned}$$

Logo $P(\varphi(x) \geq k) \leq E(\varphi(x)) / k$, como se pretendia. □

Pela Desigualdade de Tchebycheff, com $\sigma^2 = pq/n = \text{Var}(\hat{p}_n - p) = E(\hat{p}_n - p)^2$, vem que:

$$\begin{aligned}
P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) &= P\left(\frac{|\hat{p}_n - p|}{\sigma} \leq \frac{\varepsilon}{\sigma}\right) = \\
&= 1 - P\left(\frac{|\hat{p}_n - p|}{\sigma} \geq \frac{\varepsilon}{\sigma}\right) = \\
&= 1 - P\left(\frac{(\hat{p}_n - p)^2}{\sigma^2} \geq \frac{\varepsilon^2}{\sigma^2}\right) \geq \\
&\geq 1 - \frac{E\left(\frac{(\hat{p}_n - p)^2}{\sigma^2}\right)}{\left(\frac{\varepsilon}{\sigma}\right)^2} = \\
&= 1 - \frac{1}{\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{pq/n}}\right)^2} = 1 - \frac{pq}{n\varepsilon^2} = 1 - \frac{p(1-p)}{n\varepsilon^2}.
\end{aligned}$$

O pior caso que podemos obter é quando $p = q = 1/2$, pois é quando a função $r(p) = 1 - \frac{p(1-p)}{n\varepsilon^2}$ atinge o seu mínimo, e por ser o pior é este que vai ser estudado para o cálculo de n .

Queremos $P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) \geq 1 - \delta$, com $\varepsilon = 0.05$ e $\delta = 0.01$.

Uma condição suficiente para que se verifique

$$P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) \geq 1 - \delta$$

é que

$$1 - \frac{\frac{1}{2}(1 - \frac{1}{2})}{n\epsilon^2} \geq 1 - \delta \Leftrightarrow \frac{0.25}{n \cdot 0.0025} \leq 0.01 \Leftrightarrow n \geq 10000.$$

Como neste caso o valor de n é muito elevado, devemos procurar um novo teorema que nos dê melhores resultados.

O próximo Teorema dar-nos-á uma ajuda preciosa:

Teorema de Hoeffding [30]: Sejam X_1, X_2, \dots, X_n variáveis aleatórias independentes, $\mu_i = E(X_i)$ e $P(0 \leq X_i \leq 1) = 1, \forall i=1, \dots, n$.

Suponhamos que $\mu_i \in (0, 1)$.

Seja $\mu = (\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n)/n$.

Então, para $\epsilon > 0$ e $\bar{X} = (X_1 + X_2 + \dots + X_n)/n$, vem

$$P(\bar{X} - \mu \geq \epsilon) \leq e^{-2n\epsilon^2}.$$

Dem.: Vamos supor que $\epsilon < 1 - \mu$.

Definimos

$$I_{[x, \infty)}(y) = \begin{cases} 1 & \text{se } y \geq x \\ 0 & \text{se } y < x \end{cases}.$$

Observe-se que para $h \geq 0$,

$$P(\bar{X} - \mu \geq \epsilon) = P(\bar{X} \geq \epsilon + \mu) = E(I_{[\mu + \epsilon, \infty)}(\bar{X})) \leq E(e^{h(\bar{X} - \mu - \epsilon)}).$$

Provaremos o teorema se encontrarmos um majorante para $E(e^{h(\bar{X} - \mu - \epsilon)})$.

A independência das variáveis aleatórias permite-nos escrever

$$\begin{aligned} E(e^{h(\bar{X} - \mu - \epsilon)}) &= E(e^{h\bar{X} - hn(\mu + \epsilon)}) = \\ &= e^{-hn(\mu + \epsilon)} E(e^{h\bar{X}}) = \\ &= e^{-hn(\mu + \epsilon)} E(e^{h(X_1 + X_2 + \dots + X_n)}) = \\ &= e^{-hn(\mu + \epsilon)} E(e^{hX_1} e^{hX_2} \dots e^{hX_n}) = \end{aligned}$$

$$= e^{-hn(\mu+\varepsilon)} \prod_{i=1}^n E(e^{hX_i}).$$

Como a função exponencial é uma função convexa, para $a < x < b$

$$e^{hx} \leq \frac{b-x}{b-a} e^{ha} + \frac{x-a}{b-a} e^{hb}.$$

Por isso e como por hipótese $P(0 \leq X_i \leq 1) = 1, \forall i=1, \dots, n$, vem, fazendo $a=0$ e $b=1$

$$E(e^{hX_i}) \leq E(1 - X_i + X_i e^h) = 1 - \mu_i + \mu_i e^h.$$

Logo

$$E(e^{hn(\bar{X}-\mu-\varepsilon)}) \leq e^{-hn(\mu+\varepsilon)} \prod_{i=1}^n (1 - \mu_i + \mu_i e^h).$$

Recordemos que para variáveis não negativas y_1, y_2, \dots, y_n

$$\left(\prod_{i=1}^n y_i \right)^{\frac{1}{n}} \leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i.$$

Aplicando este resultado ao produto $\prod_{i=1}^n (1 - \mu_i + \mu_i e^h)$, vem que

$$\begin{aligned} \prod_{i=1}^n (1 - \mu_i + \mu_i e^h) &\leq \left(\frac{\sum_{i=1}^n (1 - \mu_i + \mu_i e^h)}{n} \right)^n = \\ &= \left(\frac{n - n\mu + n\mu e^h}{n} \right)^n = (1 - \mu + \mu e^h)^n \end{aligned}$$

assim,

$$E(e^{hn(\bar{X}-\mu-\varepsilon)}) \leq e^{-hn(\mu+\varepsilon)} (1 - \mu + \mu e^h)^n.$$

Procurando o mínimo da função $f(h) = e^{-hn(\mu+\varepsilon)} (1 - \mu + \mu e^h)^n$, vem

$$\begin{aligned}
f'(h) &= -n(\mu + \varepsilon)e^{-hn(\mu + \varepsilon)}(1 - \mu + \mu e^h)^n + e^{-hn(\mu + \varepsilon)}n(1 - \mu + \mu e^h)^{n-1} \mu e^h = \\
&= ne^{-hn(\mu + \varepsilon)}(1 - \mu + \mu e^h)^{n-1} \left[-(1 - \mu + \mu e^h)(\mu + \varepsilon) + \mu e^h \right] = \\
&= ne^{-hn(\mu + \varepsilon)}(1 - \mu + \mu e^h)^{n-1} \left[(-1 + \mu)(\mu + \varepsilon) - \mu e^h(\mu + \varepsilon) + \mu e^h \right] = \\
&= ne^{-hn(\mu + \varepsilon)}(1 - \mu + \mu e^h)^{n-1} \left[(-1 + \mu)(\mu + \varepsilon) + \mu e^h(1 - \mu - \varepsilon) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
f'(h) = 0 &\Leftrightarrow (-1 + \mu)(\mu + \varepsilon) + \mu e^h(1 - \mu - \varepsilon) = 0 \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow e^h = \frac{(1 - \mu)(\mu + \varepsilon)}{\mu(1 - \mu - \varepsilon)}.
\end{aligned}$$

O mínimos da função obtêm-se para

$$h_0 = \ln \left[\frac{(1 - \mu)(\mu + \varepsilon)}{\mu(1 - \mu - \varepsilon)} \right],$$

que é positivo.

Trata-se de facto de um mínimo pois $f'(h) < 0$ para $h < h_0$, e $f'(h) > 0$ para $h > h_0$.

Substituindo h_0 em $e^{-hn(\mu + \varepsilon)}(1 - \mu + \mu e^h)^n$, obtemos

$$E(e^{\ln(\bar{X} - \mu - \varepsilon)}) \leq e^{nw(\varepsilon, \mu)},$$

onde

$$\begin{aligned}
w(\varepsilon, \mu) &= -(\mu + \varepsilon) \times \ln \left[\frac{(1 - \mu)(\mu + \varepsilon)}{\mu(1 - \mu - \varepsilon)} \right] + \ln \left(1 - \mu + \frac{(1 - \mu)(\mu + \varepsilon)}{(1 - \mu - \varepsilon)} \right) = \\
&= (\mu + \varepsilon) \times \ln \left[\frac{\mu(1 - \mu - \varepsilon)}{(1 - \mu)(\mu + \varepsilon)} \right] + \ln \left(\frac{(1 - \mu)(1 - \mu - \varepsilon) + (1 - \mu)(\mu + \varepsilon)}{(1 - \mu - \varepsilon)} \right) = \\
&= (\mu + \varepsilon) \times \ln \left[\frac{1 - \mu - \varepsilon}{1 - \mu} \frac{\mu}{\mu + \varepsilon} \right] + \ln \left(\frac{1 - \mu}{1 - \mu - \varepsilon} \right) = \\
&= (\mu + \varepsilon) \times \ln \left(\frac{\mu}{\mu + \varepsilon} \right) + (\mu + \varepsilon) \times \ln \left(\frac{1 - \mu - \varepsilon}{1 - \mu} \right) + \ln \left(\frac{1 - \mu}{1 - \mu - \varepsilon} \right) \\
&= (\mu + \varepsilon) \times \ln \left(\frac{\mu}{\mu + \varepsilon} \right) + (1 - \mu - \varepsilon) \times \ln \left(\frac{1 - \mu}{1 - \mu - \varepsilon} \right).
\end{aligned}$$

Seja $G(\varepsilon, \mu) = -w(\varepsilon, \mu)/\varepsilon^2$.

Então podemos escrever $E(e^{\ln(\bar{X}-\mu-\varepsilon)}) \leq e^{nw(\varepsilon, \mu)} = e^{-n\varepsilon^2 G(\varepsilon, \mu)}$.

Vamos agora provar que

$$g(u) = \begin{cases} \frac{1}{1-2\mu} \ln\left(\frac{1-\mu}{\mu}\right) & \text{se } 0 < \mu < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2\mu(1-\mu)} & \text{se } \frac{1}{2} < \mu < 1 \end{cases}$$

é o mínimo da função $G(\varepsilon, \mu)$ relativamente a ε para $0 < \varepsilon < 1-\mu$.
Observe-se que

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 \frac{\partial G(\varepsilon, \mu)}{\partial \varepsilon} &= \\ &= \frac{2}{\varepsilon} w(\varepsilon, \mu) - \left[\ln\left(\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}\right) + (\mu+\varepsilon) \frac{\frac{-\mu}{(\mu+\varepsilon)^2}}{\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}} - \ln\left(\frac{1-\mu}{1-\mu-\varepsilon}\right) + (1-\mu-\varepsilon) \frac{\frac{(1-\mu)}{(1-\mu-\varepsilon)^2}}{\frac{1-\mu}{1-\mu-\varepsilon}} \right] \\ &= \frac{2}{\varepsilon} w(\varepsilon, \mu) - \left[\ln\left(\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}\right) - \ln\left(\frac{1-\mu}{1-\mu-\varepsilon}\right) \right] = \\ &= \frac{2(\mu+\varepsilon)}{\varepsilon} \ln\left(\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}\right) + \frac{2(1-\mu-\varepsilon)}{\varepsilon} \ln\left(\frac{1-\mu}{1-\mu-\varepsilon}\right) - \ln\left(\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}\right) + \ln\left(\frac{1-\mu}{1-\mu-\varepsilon}\right) = \\ &= \frac{2(\mu+\varepsilon)}{\varepsilon} \ln\left(\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}\right) - \frac{2(1-\mu-\varepsilon)}{\varepsilon} \ln\left(\frac{1-\mu-\varepsilon}{1-\mu}\right) - \ln\left(\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}\right) - \ln\left(\frac{1-\mu-\varepsilon}{1-\mu}\right) = \\ &= \left(-1 + \frac{2(\mu+\varepsilon)}{\varepsilon}\right) \ln\left(\frac{\mu}{\mu+\varepsilon}\right) + \left(-1 - \frac{2(1-\mu-\varepsilon)}{\varepsilon}\right) \ln\left(\frac{1-\mu-\varepsilon}{1-\mu}\right) = \\ &= -\left(1 - \frac{2}{\frac{\varepsilon}{\mu+\varepsilon}}\right) \ln\left(1 - \frac{\varepsilon}{\mu+\varepsilon}\right) + \left(-1 - \frac{2(1-\mu)}{\varepsilon} + 2\right) \ln\left(1 - \frac{\varepsilon}{1-\mu}\right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left(1 - \frac{2}{\frac{\varepsilon}{1-\mu}}\right) \ln\left(1 - \frac{\varepsilon}{1-\mu}\right) - \left(1 - \frac{2}{\frac{\varepsilon}{\mu+\varepsilon}}\right) \ln\left(1 - \frac{\varepsilon}{\mu+\varepsilon}\right) = \\
&= H\left(\frac{\varepsilon}{1-\mu}\right) - H\left(\frac{\varepsilon}{\mu+\varepsilon}\right), \quad \text{onde } H(z) = \left(1 - \frac{2}{z}\right) \ln(1-z).
\end{aligned}$$

Claro que $0 \leq \frac{\varepsilon}{\mu+\varepsilon} < 1$ e $0 \leq \frac{\varepsilon}{1-\mu} < 1$. Consequentemente, para $|z| < 1$, $H(z)$ tem como desenvolvimento em serie

$$\begin{aligned}
H(z) &= -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k} + \frac{2}{z} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k} = \\
&= -\left(z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3} + \frac{z^4}{4} + \frac{z^5}{5} + \dots\right) + \frac{2}{z} \left(z + \frac{z^2}{2} + \frac{z^3}{3} + \frac{z^4}{4} + \frac{z^5}{5} + \frac{z^6}{6} + \dots\right) = \\
&= 2 + \left(\frac{2}{3} - \frac{1}{2}\right)z^2 + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\right)z^3 + \left(\frac{2}{5} - \frac{1}{4}\right)z^4 + \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{5}\right)z^5 + \dots
\end{aligned}$$

Dado que os coeficientes são positivos, $H(z)$ é uma função crescente para $0 < z < 1$.

Assim, se $\frac{\varepsilon}{1-\mu} > \frac{\varepsilon}{\mu+\varepsilon}$, $\frac{\partial G}{\partial \varepsilon} > 0$. Isto é, G é crescente para $\varepsilon > 1 - 2\mu$. Assim, se $1 - 2\mu > 0$, G tem um mínimo em $\varepsilon = 1 - 2\mu$, que é

$$\begin{aligned}
g(\mu) &= -\frac{(1-\mu) \times \ln\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right) + \mu \times \ln\left(\frac{1-\mu}{\mu}\right)}{(1-2\mu)^2} = \\
&= \frac{(1-\mu) \times \ln\left(\frac{1-\mu}{\mu}\right) - \mu \times \ln\left(\frac{1-\mu}{\mu}\right)}{(1-2\mu)^2} = \\
&= \frac{(1-2\mu) \times \ln\left(\frac{1-\mu}{\mu}\right)}{(1-2\mu)^2} =
\end{aligned}$$

$$= \frac{\ln\left(\frac{1-\mu}{\mu}\right)}{1-2\mu}.$$

Se $1-2\mu \leq 0$, G tem um mínimo em $\varepsilon = 0$, dado que G só está definido para $\varepsilon > 0$. Devemos procurar prolongar G por continuidade, ou seja, calcular $G(0, \mu)$ fazendo

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} G(\varepsilon, \mu) &= \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{\varepsilon^2} \left((\mu + \varepsilon) \times \ln\left(\frac{\mu}{\mu + \varepsilon}\right) + (1 - \mu - \varepsilon) \times \ln\left(\frac{1 - \mu}{1 - \mu - \varepsilon}\right) \right) = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{\varepsilon^2} \left(\ln\left(\frac{1 - \mu}{1 - \mu - \varepsilon}\right) + (\mu + \varepsilon) \times \left(\ln\left(\frac{\mu}{\mu + \varepsilon}\right) - \ln\left(\frac{1 - \mu}{1 - \mu - \varepsilon}\right) \right) \right) = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln\left(\frac{1 - \mu - \varepsilon}{1 - \mu}\right)}{\varepsilon^2} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\mu \left(\ln\left(\frac{\mu}{\mu + \varepsilon}\right) + \ln\left(\frac{1 - \mu - \varepsilon}{1 - \mu}\right) \right)}{\varepsilon^2} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln\left(\frac{\mu}{\mu + \varepsilon}\right) + \ln\left(\frac{1 - \mu - \varepsilon}{1 - \mu}\right)}{\varepsilon} \end{aligned}$$

usando a regra de Cauchy para levantar as indeterminações, vem:

$$\begin{aligned} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{1 - \mu - \varepsilon} \frac{1}{2\varepsilon} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mu \frac{\frac{-1}{\mu + \varepsilon} + \frac{-1}{1 - \mu - \varepsilon}}{2\varepsilon} - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\frac{-1}{\mu + \varepsilon} + \frac{-1}{1 - \mu - \varepsilon}}{1} = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\frac{-1 + \mu}{1 - \mu - \varepsilon} + \frac{\mu}{\mu + \varepsilon}}{2\varepsilon} + \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\mu + \varepsilon)(1 - \mu - \varepsilon)} = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\frac{-1 + \mu}{(1 - \mu - \varepsilon)^2} + \frac{-\mu}{(\mu + \varepsilon)^2}}{2} + \frac{1}{\mu(1 - \mu)} = \\ &= \frac{-1 + \mu}{2(1 - \mu)^2} + \frac{-1}{2\mu} + \frac{1}{\mu(1 - \mu)} = \end{aligned}$$

$$= \frac{-1}{2(1-\mu)} + \frac{-1}{2\mu} + \frac{1}{\mu(1-\mu)} = \frac{1}{2\mu(1-\mu)}.$$

Visto que $g(\mu) \geq g(1/2) = 2$, temos

$$E(e^{\ln(\bar{X}-\mu-\varepsilon)}) \leq e^{-n\varepsilon^2 G(\varepsilon, \mu)} \leq e^{-2n\varepsilon^2}.$$

Caso $\varepsilon \geq 1 - \mu$, então as hipóteses do teorema implicam que

$$P(\bar{X} - \mu \geq \varepsilon) = 0 \leq e^{-2n\varepsilon^2}.$$

□

Aplicando este teorema às variáveis X_i ($i = 1, 2, \dots, n$) atrás consideradas, para o que temos que impor que $p (= \mu_i) \neq 0, 1$, vem para $\varepsilon > 0$, que

$$P(\hat{p}_n - p \geq \varepsilon) \leq e^{-2n\varepsilon^2}.$$

No caso $p = 0$, vem $\hat{p}_n = 0$, pelo que $P(\hat{p}_n - p \geq \varepsilon) = 0 \leq e^{-2n\varepsilon^2}$.

No caso $p = 1$, vem $\hat{p}_n = 1$, pelo que $P(\hat{p}_n - p \geq \varepsilon) = 0 \leq e^{-2n\varepsilon^2}$.

Obtemos um resultado análogo a este para $P(-\hat{p}_n + p \geq \varepsilon)$, isto é,

$$P(-\hat{p}_n + p \geq \varepsilon) \leq e^{-2n\varepsilon^2}.$$

Com efeito, usando as variáveis $Y_i = 1 - X_i$, que também verificam as condições do teorema de Hoeffding, vem $\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i = 1 - \bar{X} = 1 - \hat{p}_n$, $\mu_i = 1 - p$ e $\mu = 1 - p$, pelo que $\bar{Y} - \mu = -\hat{p}_n + p$.

$$\begin{aligned} P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) &= P(-\varepsilon \leq \hat{p}_n - p \leq \varepsilon) = \\ &= P(\hat{p}_n - p < \varepsilon) - P(\hat{p}_n - p \leq -\varepsilon) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 1 - P(\hat{p}_n - p \geq \varepsilon) - P(-\hat{p}_n + p \geq \varepsilon) \geq \\
&\geq 1 - e^{-2n\varepsilon^2} - e^{-2n\varepsilon^2} = 1 - 2e^{-2n\varepsilon^2}
\end{aligned}$$

Assim bastará fazer $1 - 2e^{-2n\varepsilon^2} \geq 0,99$. Como queremos $\varepsilon = 0,05$, vem

$$\begin{aligned}
1 - 2e^{-2n\varepsilon^2} \geq 0,99 &\Leftrightarrow -2e^{-0,005n} \geq 0,99 - 1 \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow e^{-0,005n} \leq 0,005 \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow -0,005n \leq \ln(0,005) \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow n \geq 1059,6635.
\end{aligned}$$

Ou seja, uma amostra de 1060 valores garante-nos que o estimador do HIP difere deste não mais de 5% com uma probabilidade de erro inferior a 1%, desde que o HIP seja diferente de 0 e de 1.

Claro que este é um estimador conservador. Se tivéssemos usado a aproximação decorrente do Teorema do Limite Central, para uma amostra de $n = 1060$ e uma probabilidade de erro igual a 1%, o erro ε cometido seria dado aproximadamente por

$$\begin{aligned}
P(|\hat{p}_n - p| \leq \varepsilon) \cong 0,99 &\Leftrightarrow 2\Phi\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{pq/n}}\right) - 1 \cong 0,99 \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow \Phi\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{pq/n}}\right) \cong 0,995 \Leftrightarrow \\
&\Leftrightarrow \frac{\varepsilon}{\sqrt{pq/n}} \cong 2,57.
\end{aligned}$$

Tal como anteriormente, o pior caso dá-se quando $p = q = 1/2$, e assim

$$\frac{\varepsilon}{\sqrt{\frac{pq}{n}}} \cong 2,57 \Leftrightarrow \frac{\varepsilon}{0,01535} \cong 2,57 \Leftrightarrow \varepsilon \cong 0,0395.$$

Assim numa amostra de 1060 valores sabemos, pelo teorema Hoeffding, que existe uma probabilidade de 99% de o erro entre o HIP real e o HIP estimado não diferirem mais que 5%. No entanto o Teorema do Limite Central, que dá uma aproximação excelente (visto a amostra ser bastante grande), indica que esse erro é da ordem dos 4%.

5.2 - TESTES DE QUALIDADE DA SIMULAÇÃO

Tal como foi dito no início da secção anterior uma das nossas preocupações era dispor de uma mostragem aleatória. Na realidade, porem, nós trabalhamos com números pseudo-aleatórios gerados por um processo determinístico. Por essa razão, convém testar se esses números satisfazem as propriedades estatísticas desejadas para sequencias de números aleatórios.

Uma hipótese estatística designa-se por H , por vezes com índice: H_0, H_1, H_2 , etc. e consiste numa afirmação sobre a lei de X . Na pratica, a hipótese estatística é uma afirmação sobre o valor ou valores possíveis de um parâmetro θ da lei de probabilidade de X .

Um teste de hipóteses consiste:

- ◆ no confronto de duas hipóteses: H_0 - dita Hipótese Nula
e
 H_1 - dita Hipótese Alternativa;
- ◆ na construção de um regra estatística que permite decidir:
ou rejeita H_0
ou não rejeita H_0 .

NOTA 5.3.1: a rejeição de H_0 não significa a aceitação de H_1 . Tal como a não rejeição de H_0 não significa a sua aceitação. A decisão de rejeitar/não rejeitar H_0 é condicionada por uma probabilidade de erro $\alpha = P(\text{rejeitar } H_0 \mid H_0 \text{ é verdadeira})$ que deve ser fixada previamente.

O gerador de que dispomos gera números no intervalo $[0,1[$. Pretendemos um gerador de números inteiros que sigam uma distribuição uniforme discreta num conjunto $\{0, 1, 2, \dots, 2^L-1\}$.

Sendo Y um valor em $[0,1[$, faremos

$$X = \text{Int} (Y \times 2^{16})$$

que terá as características desejadas.

Para testar a qualidade deste gerador, vamos efectuar vários tipos de teste: media, variância, distribuição por intervalos, e correlação serial.

Começemos por retirar uma amostra de m elementos X_1, X_2, \dots, X_m gerados por este gerador no conjunto $\{0, 1, 2, \dots, 2^{16}-1\}$, e assim estes valores devem ter média $\mu = \frac{2^{16} - 1}{2}$ e variância $\sigma^2 = \frac{(2^{16})^2 - 1}{12}$.

Para testar a hipótese nula de que X ter média $\mu = 32767$ começamos por calcular a média das variáveis a que chamamos $\bar{X} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m X_i$.

Para testar a hipótese nula de que a média da população é $\mu=a$ aplicamos a estatística $Z = \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}}$, que terá uma distribuição aproximadamente normal reduzida. Então, utilizando um teste bilateral, aceitamos H_0 ao nível de 0,05 se, para dada amostra de tamanho m com media \bar{x} , se tiver

$$\left| \frac{\bar{x} - a}{\sigma / \sqrt{m}} \right| \leq 1,96$$

e rejeitamos H_0 em caso contrário.

Para testar a hipótese H_0 que uma população normal tem variância σ^2 , consideramos a variável aleatória $\chi^2 = \frac{ms^2}{\sigma^2}$, onde s^2 é a variância amostral, que tem distribuição aproximadamente qui-quadrado com $m-1$ graus de liberdade. Então, se uma amostra aleatória de tamanho m acusa variância s^2 , seremos levados, com base num teste bilateral, a aceitar H_0 ao nível 0,05 se,

$$\chi_{0,025[m-1]}^2 \leq \frac{ms^2}{\sigma^2} \leq \chi_{0,975[m-1]}^2$$

e rejeita-la em caso contrário.

Para testarmos a distribuição por intervalos podemos também aplicar um teste qui-quadrado.

Supondo que os X_i têm distribuição em $\{0, 1, 2, \dots, 2^{16} - 1\}$, então $Y_i = \text{Int}\left(\frac{X_i}{2^{16}} \times 100\right)$ terá distribuição aproximadamente uniforme em $\{0, 1, 2, \dots, 99\}$.

Gerando $m = 10000$ valores de X_i e sendo $r_k =$ numero de valores iguais a k ($k = 0, 1, \dots, 99$), o valor esperado de r_k é 100 (aproximadamente).

Aplicando um teste qui-quadrado de ajustamento da distribuição, aceitamos a hipótese nula de que a distribuição é uniforme se

$$\chi_{0,025[99]}^2 \leq \sum_{i=0}^{99} \frac{(r_i - 100)^2}{r_i} \leq \chi_{0,975[99]}^2$$

e rejeitamos em caso contrário.

Sabendo que se duas variáveis aleatórias são independentes então o seu coeficiente de correlação é zero. É esta a base para testarmos a independência das variáveis, pois se o coeficiente de correlação for diferente de zero, sabemos que as variáveis são dependentes. Aqui vamos testar se há correlação entre os elementos consecutivos da sequencia (correlação serial) de números aleatórios gerados pelo computador. A hipótese nula é que esta correlação é 0.

A variância amostral dos X é

$$s^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (X_i - \bar{X})^2,$$

a covariância amostral entre X_i e X_{i+1} é

$$C_1 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^{m-1} (X_i - \bar{X})(X_{i+1} - \bar{X})$$

e a correlação amostral é

$$\hat{\rho}_1 = \frac{C_1}{s^2}.$$

Raramente $\hat{\rho}_1$ é exactamente zero, mas terá grande probabilidade de ser um valor muito próximo de zero. Poder-se-á então perguntar se o valor do coeficiente de variação, $\hat{\rho}_1$, obtido é ou não suficientemente próximo de zero para podermos concluir alguma coisa sobre a independência.

Para testarmos o coeficiente de correlação devemos verificar se para uma amostra de tamanho n

$$t = \frac{\hat{\rho}_1 \sqrt{m-2}}{\sqrt{1-\hat{\rho}_1^2}}$$

segue uma distribuição de Student com m-2 graus de liberdade. Logo, aceitamos a hipótese nula se

$$\left| \frac{\hat{\rho}_1 \sqrt{m-2}}{\sqrt{1-\hat{\rho}_1^2}} \right| \leq t_{n-2[m-2]}.$$

e rejeitamos em caso contrário.

Vamos começar por testar as variáveis aleatórias:

O espaço amostral é o de todos os valores inteiros entre 0 e 65535, do qual retiramos uma amostra de m = 10000.

Como pretendemos testar a e variância de uma amostra de 10000 valores, devemos conhecer o valor do qui-quadrado com 9999 graus de liberdade (para a variância), que é $\chi_{0,025[9999]}^2 = 9723,3$ e $\chi_{0,975[9999]}^2 = 10277,6$. Para testar a distribuição por intervalos num teste qui-quadrado com 99 graus de liberdade temos os valores $\chi_{0,025[99]}^2 = 73,34$ e $\chi_{0,975[99]}^2 = 128,8$.

Para o teste do coeficiente de correlação temos necessidade de conhecer o valor da distribuição de Student com 9998 graus de liberdade, que é $t_{0,975[9998]} = 1,96$.

Geramos 4 amostras com $m = 10000$ elementos cada e aplicamos os testes anteriores.

Obtivemos os seguintes resultados:

$$\diamond \bar{X} = 32568,4626 \Rightarrow Z = \left| \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}} \right| = 1,049429 < 1,96;$$

$$s^2 = 364020892,095203 \Rightarrow \frac{ms^2}{\sigma^2} = 10169,608763;$$

$$\sum_{i=0}^{99} \frac{(r_i - 100)^2}{r_i} = 80;$$

$$\rho = \rho(X_i, X_{i+1}) = 0,006793 \Rightarrow t = 0,679290;$$

$$\diamond \bar{X} = 32726,7408 \Rightarrow Z = \left| \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}} \right| = 0,212802 < 1,96;$$

$$s^2 = 359365839,013615 \Rightarrow \frac{ms^2}{\sigma^2} = 10039,561094;$$

$$\sum_{i=0}^{99} \frac{(r_i - 100)^2}{r_i} = 74;$$

$$\rho = \rho(X_i, X_{i+1}) = -0,006571 \Rightarrow t = -0,657087;$$

$$\diamond \bar{X} = 32665,2046 \Rightarrow Z = \left| \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}} \right| = 0,538070 < 1,96;$$

$$s^2 = 358309164,060539 \Rightarrow \frac{s^2}{\sigma^2} = 10010,040890;$$

$$\sum_{i=0}^{99} \frac{(r_i - 100)^2}{r_i} = 92;$$

$$\rho = \rho(X_i, X_{i+1}) = -0,005898 \Rightarrow t = -0,589772;$$

$$\diamond \bar{X} = 32687,4312 \Rightarrow Z = \left| \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}} \right| = 0,420585 < 1,96;$$

$$s^2 = 361849072,762065 \Rightarrow \frac{s^2}{\sigma^2} = 10108,934902;$$

$$\sum_{i=0}^{99} \frac{(r_i - 100)^2}{r_i} = 98;$$

$$\rho = \rho(X_i, X_{i+1}) = -0,006503 \Rightarrow t = -0,650270.$$

Todos os testes, relativos à aleatoriedade das variáveis aceitaram as correspondentes hipóteses nulas correspondentes às propriedades desejadas do gerador.

Concluo que o gerador de números uniformes tem comportamento estatístico aceitável.

Em todo o caso, nada garante que a simulação do HIP não venha a envolver características dos números aleatórios gerados menos desejáveis que porventura tenham escapado aos testes. Convém assim verificar se os valores simulados do HIP, \hat{p}_{1060} , uma vez que aceitamos amostras de tamanho 1060, seguem de facto uma distribuição binomial de parâmetros $n = 1060$ e $p = \text{HIP}$, isto é, com media $\mu = np = 1060p$ e variância $\sigma^2 = np(1-p) = 1060p(1-p)$.

Para tal, socorremo-nos de casos já estudados em que conhecíamos o valor exacto do HIP, ou seja, conhecíamos p , e fomos determinar o HIP amostral \hat{p}_{1060} por simulação, comparando os resultados.

Consideramos 5 casos em que testamos a media e variância, todos eles com $n=1060$. Para cada caso, repetimos a experiência $m = 20$ vezes. Como \hat{p}_{1060} tem distribuição binomial e $n = 1060$, a sua distribuição é aproximadamente normal com media $\mu = 1060p$ e variância $\sigma^2 = 1060p(1-p)$.

Representando $X_i = \hat{p}_{1060,i}$, $i = 1, 2, \dots, 20$, a experiência numero i das $m = 20$ experiências efectuadas, e por $\bar{X} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m X_i$, $\frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}}$ terá

distribuição aproximadamente normal e $\frac{ms^2}{\sigma^2}$, com

$s^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (X_i - \bar{X})^2$, terá distribuição aproximadamente qui-quadrado com m-1 graus de liberdade.

Para 19 graus de liberdade $\chi_{0,025[19]}^2 = 8,91$ e $\chi_{0,975[19]}^2 = 32,9$. Vejamos os resultados dos testes:

◆ L=8, regra 22

eixo da media estimada



$$p = 0,91015625$$

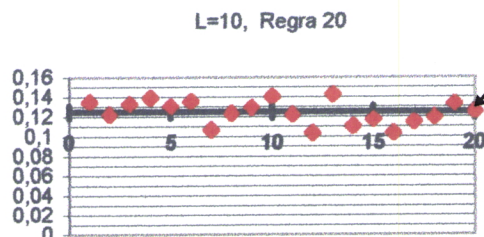
$$\sigma^2 = 0,0000771433$$

$$\bar{X} = 0,913632075 \Rightarrow Z = \left| \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}} \right| = 1,769798896$$

$$s^2 = 0,0000467927 \Rightarrow \frac{ms^2}{\sigma^2} = 12,13137813$$

◆ L=10, regra 20

eixo da media estimada



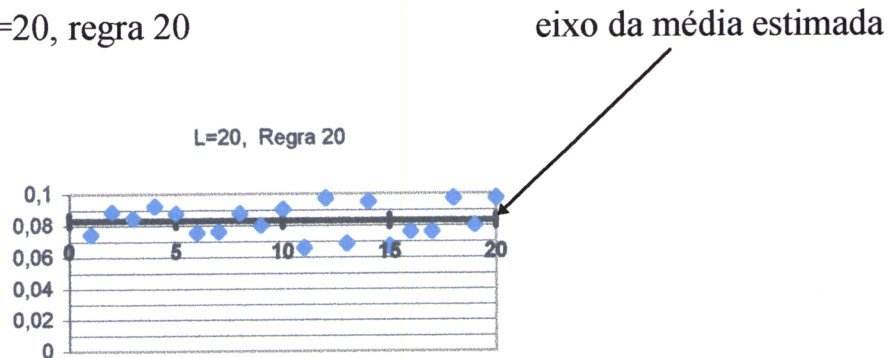
$$p = 0,125$$

$$\sigma^2 = 0,000103184$$

$$\bar{X} = 0,124528302 \Rightarrow Z = \frac{|\bar{X} - \mu|}{\sigma / \sqrt{m}} = 0,207669603$$

$$s^2 = 0,000146709 \Rightarrow \frac{ms^2}{\sigma^2} = 28,43639589$$

◆ L=20, regra 20



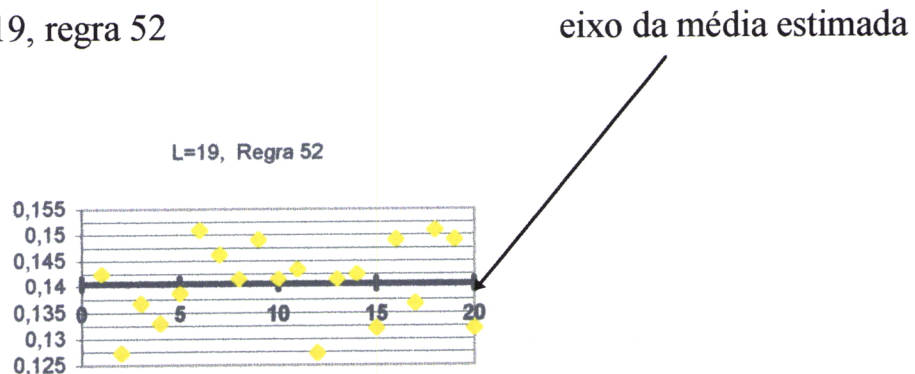
$$p = 0,079956055$$

$$\sigma^2 = 0,0000693991$$

$$\bar{X} = 0,083018868 \Rightarrow Z = \frac{|\bar{X} - \mu|}{\sigma / \sqrt{m}} = 1,6442144$$

$$s^2 = 0,000105207 \Rightarrow \frac{ms^2}{\sigma^2} = 30,31939759$$

◆ L=19, regra 52



$$p = 0,142944336$$

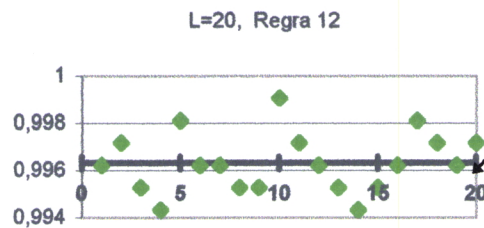
$$\sigma^2 = 0,000115577$$

$$\bar{X} = 0,140613208 \Rightarrow Z = \frac{|\bar{X} - \mu|}{\sigma / \sqrt{m}} = 0,96971948$$

$$s^2 = 0,0000559737 \Rightarrow \frac{ms^2}{\sigma^2} = 9,68598731$$

◆ L=20, regra 12

eixo da média estimada



$$p = 0,996826172$$

$$\sigma^2 = 0,0000029847$$

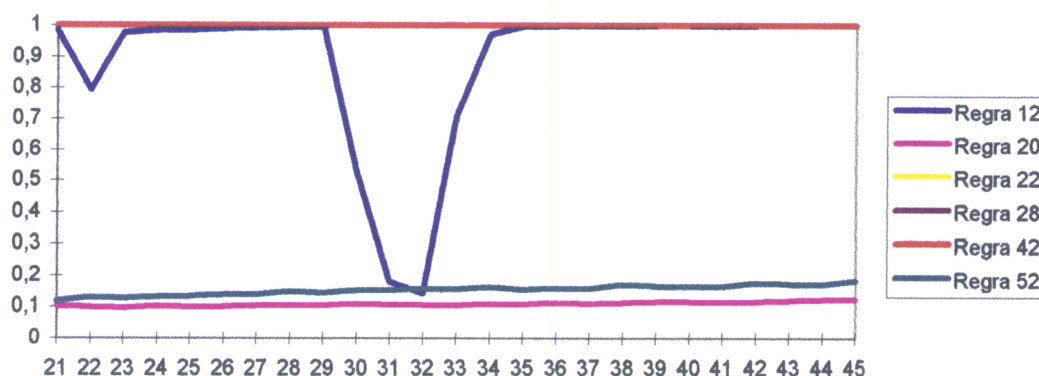
$$\bar{X} = 0,996320755 \Rightarrow Z = \left| \frac{\bar{X} - \mu}{\sigma / \sqrt{m}} \right| = 1,308327188$$

$$s^2 = 0,0000015833 \Rightarrow \frac{ms^2}{\sigma^2} = 10,60926461$$

Para todos os casos, os testes aceitaram a hipótese nula de que a média e a variância são as indicadas.

5.3 - RESULTADOS

Agora que já conhecemos a qualidade do gerador de números aleatórios, e como o suporte estatístico que nos garante que numa amostra de 1060 valores a proporção estimada apenas irá diferir da real, no máximo, 5% com uma probabilidade superior a 99%, procedemos às simulações, de que resulta o gráfico:



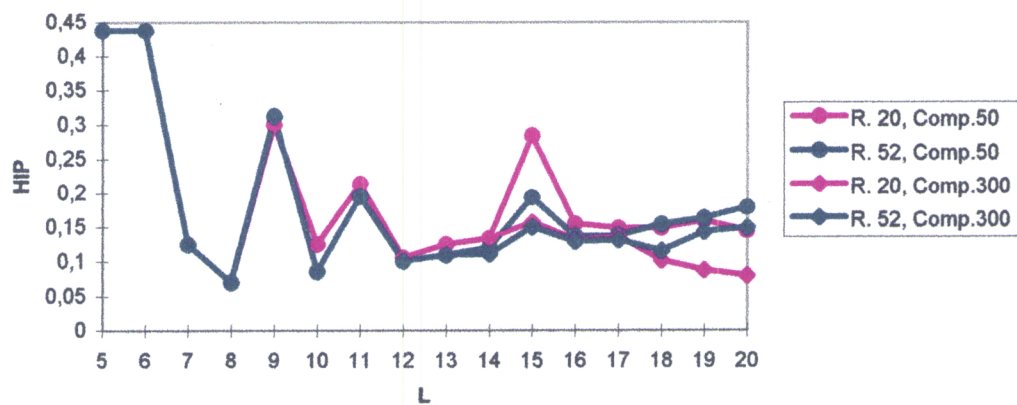
valores do HIP obtidos por simulação

NOTA 5.3.1: O gráfico não apresenta a regra 24 pois esta tem sempre período 1.

Neste momento dois problemas poderão ser levantados:

- ◆ o facto das regras 20 e 52 registarem uma subida gradual;
- ◆ a regra 12 apresentar algumas dificuldades de estabilização.

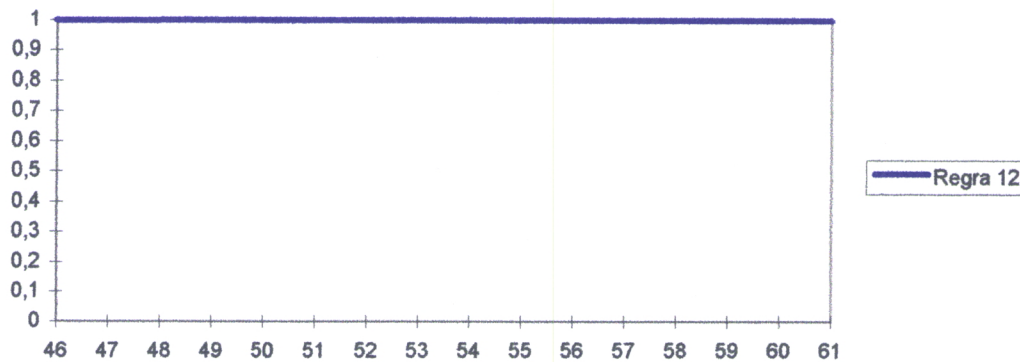
Vejam os que relativamente à primeira questão, a subida gradual do valor do HIP não é um aumento real, ou seja, não é uma diminuição de períodos 1. Esta “diminuição” é registada pelo facto de que quando a largura L do Autómato Celular aumenta os períodos tendem a aparecer mais tarde e, como este estudo foi feito até ao comprimento 300 ($t=300$) é natural que existam muitos períodos 1 que não sejam contabilizados por virem a aparecer para $t > 300$. Para verificar esta ideia, fizemos o estudo do HIP para larguras L entre 5 e 20, e considerando todas as condições iniciais possíveis (isto é, os resultados são exactos e não obtidos por amostragem), como no início, mas em vez de considerarmos um comprimento 300 considerarmos comprimento 75; verificamos que, a partir de certa altura o HIP destes últimos aumentava o que comprova a insuficiência do comprimento.



valores do HIP para A.C. com comprimento 75 vs. 300

NOTA 5.3.2: Quando $L < 13$ para a regra 52, e $L < 14$ para a regra 20, os comprimentos conduzem a um mesmo HIP.

Relativamente à instabilidade da regra 12, tentámos responder a esta questão prolongando o estudo estatístico desta regra até $L=61$, obtendo-se o seguinte gráfico:



Assim, apesar de esporadicamente o HIP da regra 12 se afastar de 1, ele volta a tomar esse valor rapidamente, não nos levando de forma alguma a duvidar da classificação dos Autómatos Celulares Limitados segundo o HIP de cada regra quando a largura L aumenta.

Podemos então concluir, e tal como havíamos suspeitado anteriormente, que existe uma forte relação entre o HIP e a classe a que pertence determinada regra.

BIBLIOGRAFIA

CAPÍTULO 2:

- [1] - K. Preston e M. J. D. Duff
“*Modern Cellular Automata. Theory and Applications*”
MIT Press (1984);
- [2] - S. Leviaidi
“*The Characteristics of Parallel Algorithms*”
MIT Press (1987) p. 191;
- [3] - T. Kohonen
“*Self Organization and Associative Memory*”
Springer (1984);
- [4] - P. Rujan
“*Systems whit Learning and Memory Abilities. A Workshop*”
Paris (1987);
- [5] - H. Chen, W. H. Matthaws
Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 1845;
- [6] - D. Montgomery, C. D. Doolen
Phys. Lett. A120 (1987) 229;
- [7] - S. A. Orsag, V. Yakhot
Phys. Rev. Lett. 56 (1986) 1691;
- [8] - S. E. Fraser
Dev. Biol, 79 (1980) 453-464;
- [9] - N. Swindale
Proc. R. Soc. B208 (1980) 204;

- [10] - K. D. Miller, J. B. Keller e M. P. Stryker
Science 245 (1989) 605-615;
- [11] - S. E. Fraser e D. H. Perkel
preprint (1990);
- [12] - G. B. Ermentrout e L. Edelstein-Keshet
J. Theor. Biol. 160 (1993) 97-133;
- [13] - O. Miramontes, R. V. Solé e B. C. Goodwin
Physica D 63 (1993) 145-160;
- [14] - N. R. Franks e S. Bryant
“*Chemistry e Biology of Social Insects*”
(ed. por J. Eder e H. Rembold) Peperny (1987);
- [15] - N. R. Franks, S. Bryant e R. Griffiths
Bull. Math. Biol. 52 (1990) 597;
- [16] - B. J. Cole
Am. Nat. 137 (1991) 244;
- [17] - B. J. Cole
J. Insect Behav. 4 (1991) 129;
- [18] - B. J. Cole
Proc. Roy. Soc. London B 244 (1991) 253;
- [19] - S. Camazine, J. Sneyd, M. J. Jenkins e J. D. Murray
J. Theor. Biol. 147 (1990) 443;
- [20] - S. Camazine
Behav. Ecol. Sociobiol. 28 (1991) 61;
- [21] - N. R. Franks e A. B. Sendova- Franks
Behav. Ecol. Sociobiol. 30 (1992) 109;
- [22] - J. L. Deneubourg, S. Goss, N. Franks e J. M. Pasteels
J. Ins. Behav 2 (1989) 717-725;
- [23] - K. A. Moloney, S. A. Livin, N. R. Chiariello e L. Buttel

preprint (1991);

- [24] - S. Camazine
Behav. Ecol. Sociobiol. 28 (1986) 19-33;
- [25] - M. P. Hassell, H. N. Comins e R. M. May
Nature 353 (1991) 255-258;
- [26] - C. Dytham e B. Shorrocks
Evol. Ecol. 6 (1992) 342-351;
- [27] - M. A. Mainster
Eye 6 (1992) 420-427;

CAPITULO 3:

- [28] - Stephen Wolfram
Theory and Applications of Cellular Automata
Advanced series on complex systems - volume 1
World Scientific

CAPITULO 5:

- [29] - J. Tiago de Oliveira
Probabilidades e Estatística
Conceitos, Métodos e Aplicações - volume I e II
McGraw Hill
- [30] - George S. Fishman
Monte Carlo
Concepts, Algorithms, and Applications
Springer

[31] - B. J. F. Murteira
Probabilidades e Estatística
Volume I e II
McGraw Hill

[32] - P. Billingsley
Probability and Measure
Wiley, N. Y. 1986