

## 2 Simulação estocástica

A simulação computacional consiste em empregar técnicas matemáticas em computadores com o propósito de gerar ensaios que tentam reproduzir de maneira análoga um processo ou operação do mundo real. Para isso, inicialmente é necessário construir um modelo matemático que corresponda à situação real que se deseja simular. Se o modelo matemático contém elementos estocásticos, então ela será chamada de simulação estocástica.

Simulação estocástica vem sendo aplicada na modelagem de diversos problemas reais de engenharia, física, biologia, química, matemática, economia e atuária. Nesse trabalho, a simulação é usada para gerar cenários dos valores que as variáveis do modelo poderiam assumir em tempos futuros. Aqui, serão consideradas como variáveis aleatórias, os índices econômicos para os rendimentos, inflação e a idade de morte do indivíduo.

Esse capítulo tem por objetivo introduzir os conceitos básicos e os algoritmos fundamentais de simulação estocástica que serão utilizados no modelo a ser apresentado nos capítulos 4 e 5. Entre eles estão: a geração de números pseudo-aleatórios; a geração de alguns tipos de variáveis aleatórias; e, finalmente, a geração de vetores aleatórios normais multivariados. É assumido que o leitor tenha um conhecimento prévio da teoria básica de probabilidade.

### 2.1 Geração de números pseudo-aleatórios

A geração de números aleatórios é o alicerce de qualquer sistema de simulação estocástica. Porém, nos computadores digitais as conhecidas funções que geram números aleatórios não são efetivamente aleatórias. Números realmente aleatórios são gerados por um processo físico. Para isso, são construídos dispositivos físicos que analisam fenômenos microscópicos ou quânticos e através de um conversor digital conseguem gerar um número aleatório. Na prática o que se usa em simulação estocástica são os geradores de números pseudo-aleatórios. Esses geradores produzem uma seqüência determinística de números inteiros ou em ponto flutuante na precisão do computador, que imita uma seqüência de variáveis aleatórias independentes e uniformemente

distribuídas num intervalo  $[0, 1]$ . A essência de uma seqüência de números pseudo-aleatórios é a sua imprevisibilidade, no sentido de que ninguém é capaz de, ao vê-la, dizer qual é a regra determinística que a produz e conseguir prever qual é o próximo número da seqüência.

O método mais conhecido que gera uma seqüência de números pseudo-aleatórios é o LCG (*Linear Congruential Generator*).

O LCG gera uma seqüência  $\{u_i\}$  de números reais entre  $[0, 1]$ . Para isso, ele usa a seguinte equação de recorrência para gerar números inteiros entre 0 e  $m$ :

$$v_{i+1} = (a \times v_i + b) \bmod m, i \geq 0,$$

onde  $a$ ,  $b$  e  $m$  são inteiros e  $\bmod$  é a operação módulo. O termo  $v_0$  dessa recorrência é chamado de semente do gerador e é um outro parâmetro de entrada para o método. A seqüência  $\{u_i\}$  é obtida fazendo  $u_i = v_i/(m - 1)$ .

Uma desvantagem do método LCG é que, por essa fórmula de construção, ele gera uma seqüência periódica. O ideal é fazer uma boa escolha dos parâmetros de entrada a fim de que o período seja grande. O período do LCG é no máximo  $m$ , e na maioria dos casos é menor do que isso. Para se obter um período máximo deve-se fazer as escolhas para  $a$ ,  $b$ ,  $m$  e  $v_0$  de acordo com os seguintes critérios:

1.  $a > 0$ ,  $b > 0$ ;
2.  $m > \max(a, b, v_0)$ ;
3.  $b$  e  $m$  devem ser primos entre si;
4.  $a - 1$  deve ser divisível por todos os fatores primos de  $m$ ;
5.  $a - 1$  deve ser um múltiplo de 4 se  $m$  for um múltiplo de 4.

Uma boa escolha segundo Press et al. em [8] é  $a = 1664525$ ,  $b = 1013904223$ , e  $m = 2^{32}$ .

O método LCG é capaz de gerar boas seqüências pseudo-aleatórias, mas é conhecido que suas propriedades estão longe do ideal. Se for necessário um gerador melhor, sugere-se utilizar o *Mersenne Twister* (MT) proposto por Matsumoto e Nishimura em 1977 [6]. Hoje, existem algoritmos rápidos baseados no MT que tem período  $2^{19937} - 1$ <sup>1</sup>. Para maiores detalhes em algoritmos de geração de números pseudo-aleatórios veja [8].

<sup>1</sup>No endereço <http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/m-mat/MT/emt.html> encontra-se uma excelente implementação para o gerador MT.

## 2.2

### Geração de variáveis aleatórias

Essa seção vai mostrar como gerar uma variável aleatória discreta ou contínua usando um gerador de números pseudo-aleatórios. Para os algoritmos a seguir, adota-se que a variável aleatória  $U$  possui uma distribuição uniforme no intervalo  $[0, 1]$ .

#### 2.2.1

##### Geração de variáveis aleatórias discretas

Inicialmente, será estudado um algoritmo simples que gera uma variável aleatória discreta  $X$  que possui uma função massa de probabilidade dada por:

$$Pr(X = x_i) = p_i, \quad i = 0, 1, \dots, \quad \sum_i p_i = 1.$$

Considere que os valores  $x_i$ ,  $i \geq 0$ , são ordenados de tal forma que  $x_0 < x_1 < x_2 < \dots$ , e que  $F$  é a função distribuição acumulada de  $X$ , isto é,  $F(x_k) = \sum_{i=0}^k p_i$ . Então, para gerar a variável  $X$  deve-se primeiro gerar um número pseudo-aleatório  $U$  e depois determinar o valor de  $X$  de acordo com a seguinte regra:

$$X = x_i \text{ se } F(x_{i-1}) \leq U < F(x_i).$$

Esse método, na realidade, calcula a inversa de  $F$  e, por isso, ele é chamado de método da transformação inversa discreta.

Nesse trabalho, o método da transformação inversa será usado para gerar um variável aleatória  $X$  com distribuição Bernoulli( $p$ ). Portanto,  $X$  pode assumir apenas dois valores ( $X = 0$  ou  $X = 1$ ), onde a probabilidade de sucesso ( $X = 1$ ) é igual a  $p$  e a de insucesso ( $X = 0$ ) é igual a  $(1 - p)$ .

#### 2.2.2

##### Geração de variáveis aleatórias contínuas

O método da transformação inversa para variáveis aleatórias discretas pode ser generalizado para gerar variáveis aleatórias contínuas. Para qualquer função distribuição de probabilidade  $F$ , a variável aleatória  $X$ , definida por  $X = F^{-1}(U)$ , tem distribuição  $F$ , onde  $U$  é uma variável aleatória distribuída uniformemente no intervalo  $[0, 1]$ .

Assim, uma variável aleatória contínua  $X$  pode ser gerada a partir de uma função de distribuição contínua  $F$ , pela geração de um número aleatório  $U$  e fazendo  $X = F^{-1}(U)$ .

Um exemplo muito simples, seria o problema de gerar uma variável aleatória  $X$  uniformemente distribuída no intervalo  $[a, b]$ , cuja distribuição é dada por:

$$F(X) = \frac{x - a}{b - a}, a \leq x \leq b.$$

Como  $x = F^{-1}(u)$ , tem-se que:

$$u = F(x) = \frac{x - a}{b - a}$$

Explicitando  $x$ , obtém-se que:

$$x = a + (b - a)u.$$

Portanto, para gerar  $X$  deve-se gerar um número pseudo-aleatório  $U$  e atribuir a  $x$  o valor  $a + (b - a)U$ .

Considere, agora, que  $X$  seja uma variável aleatória exponencial com parâmetro  $\lambda$ . A função de distribuição de  $X$  é dada por:

$$F(x) = 1 - e^{-\lambda x}, 0 < x < \infty.$$

Novamente, ao fazer  $x = F^{-1}(u)$ , tem-se que:

$$u = F(x) = 1 - e^{-\lambda x}$$

ou,

$$1 - u = e^{-\lambda x}.$$

Explicitando  $x$ , obtém-se que:

$$x = -\frac{1}{\lambda} \log(1 - u).$$

Como  $U$  é distribuída uniformemente em  $[0, 1]$ , então  $(1 - U)$  também é distribuída da mesma forma. Portanto,  $\log(1 - U)$  possui a mesma distribuição de  $\log U$ . Em resumo, para se gerar uma variável aleatória exponencial  $X$ , deve-se gerar um número pseudo-aleatório  $U$  e depois atribuir a  $X$  o valor

$$x = -\frac{1}{\lambda} \log U.$$

O problema desse método é que na maioria das vezes não existe uma fórmula fechada para a inversa da função  $F$ , como exemplo, cita-se o caso onde  $F$  é a distribuição de uma variável aleatória normal.

Existe um outro método que permite gerar eficientemente uma gama

maior de variáveis aleatórias, que é o método da rejeição.

Suponha que exista um método para gerar uma variável aleatória  $Y$  com função de densidade  $g$ . A idéia é usá-lo para gerar uma outra variável aleatória contínua  $X$  com função de densidade  $f$ .

Para isso, considere que exista uma constante  $c$  tal que

$$\frac{f(y)}{g(y)} \leq c, \forall y.$$

O algoritmo a seguir gera uma variável aleatória  $X$  com densidade  $f$  pelo método da rejeição:

Passo 1: Gere  $Y$  com função de densidade  $g$ .

Passo 2: Gere um número pseudo-aleatório  $U$ .

Passo 3: Se  $U \leq \frac{f(Y)}{cg(Y)}$ , faça  $X = Y$ . Caso contrário, volte ao Passo 1.

A seguir, alguns algoritmos de rejeição para gerar uma variável aleatória normal  $Z$  de média 0 e variância 1 serão apresentados.

Assume-se que a variável  $Y$  nesse caso é uma exponencial de parâmetro 1. Ao usar a exponencial deve-se restringir o domínio de  $Z$  considerando somente o caso onde ela assume valores positivos. Então, primeiramente, um método de rejeição que gera uma variável aleatória  $X$  que corresponde ao valor absoluto de uma normal será descrito. Uma vez que  $X$  foi gerada, é muito fácil gerar  $Z$ , basta sortear um novo número pseudo-aleatório  $U$  e fazer

$$Z = \begin{cases} X & \text{se } U \leq \frac{1}{2} \\ -X & \text{se } U > \frac{1}{2} \end{cases}$$

As funções densidades de  $X$  e de  $Y$  são, respectivamente:

$$f(x) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2}, 0 < x < \infty$$

e

$$g(y) = e^{-y}, 0 < y < \infty.$$

Como

$$\frac{f(y)}{g(y)} = \sqrt{2/\pi} e^{y-y^2/2},$$

pode-se afirmar que o valor máximo desse quociente ocorre no ponto  $y$  que maximiza  $y - y^2/2$ , ou seja, em  $y = 1$ . A constante  $c$  pode ser escolhida da seguinte forma:

$$c = \max \frac{f(y)}{g(y)} = \frac{f(1)}{g(1)} = \sqrt{2e/\pi},$$

e assim, o quociente:

$$\frac{f(y)}{cg(y)} = e^{y-y^2/2-1/2} = e^{-(y-1)^2/2}$$

Em conclusão, o método de rejeição para gerar uma variável normal  $Z$  de média 0 e variância 1 fica da seguinte forma:

Passo 1: Gere uma variável aleatória exponencial  $Y$  com parâmetro  $\lambda = 1$ .

Passo 2: Gere um número pseudo-aleatório  $U_1$ .

Passo 3: Se  $U_1 \leq e^{-\frac{(Y-1)^2}{2}}$ , faça  $X = Y$ . Caso contrário, volte ao Passo 1.

Passo 4: Gere um número pseudo-aleatório  $U_2$ .

Passo 5: Se  $U_2 \leq \frac{1}{2}$ , faça  $Z = X$ . Caso contrário, faça  $Z = -X$ .

Existem algoritmos mais eficientes que esse para a geração de variáveis aleatórias normais de média 0 e variância 1, um exemplo importante deles é o método polar.

Considere que  $X$  e  $Y$  sejam variáveis aleatórias normais independentes de média 0 e variância 1. E seja  $(R, \theta)$  a representação polar do vetor  $(X, Y)$ , isto é,  $R^2 = X^2 + Y^2$  e  $\tan \theta = \frac{Y}{X}$ .

Como  $X$  e  $Y$  são independentes, a densidade conjunta delas é o produto das densidades individuais, e portanto é dada por:

$$f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2} = \frac{1}{2\pi} e^{-(x^2+y^2)/2}. \quad (2-1)$$

Para determinar a densidade conjunta de  $R^2$  e  $\Theta$ , considere a seguinte mudança de variáveis:  $d = x^2 + y^2$  e  $\theta = \tan^{-1}(y/x)$ . Usando a equação (2-1) e o Jacobiano dessa transformação, pode-se afirmar que a densidade conjunta  $f(d, \theta)$  é dada por:

$$f(d, \theta) = \frac{1}{2} \frac{1}{2\pi} e^{-d/2}, \quad 0 < d < \infty, \quad 0 < \theta < 2\pi.$$

Essa densidade é o produto de uma densidade de uma variável exponencial com parâmetro  $\lambda = 1/2$  por uma densidade de uma variável uniforme em  $[0, 2\pi]$ . Portanto, tem-se que:

$R^2$  e  $\theta$  são variáveis aleatórias independentes, sendo que  $R^2$  é uma variável exponencial com parâmetro 1/2 e  $\Theta$  é uma variável uniforme distribuída no intervalo  $[0, 2\pi]$ .

A conseqüência desses fatos proporciona um outro método para gerar um par de variáveis normais padrão. Os seus passos são:

Passo 1: Gere dois números pseudo-aleatórios  $U_1$  e  $U_2$ .

Passo 2: Faça  $R^2 = -2 \log U_1$  e  $\Theta = 2\pi U_2$ .

Passo 3: Faça  $X = R \cos \Theta$  e  $Y = R \sin \Theta$ .

Mais detalhes sobre outros métodos para gerar variáveis normais padrão veja [10].

Vale observar que, para gerar uma variável aleatória normal  $W$  de média  $\mu$  e variância  $\sigma^2$ , basta gerar uma variável normal  $Z$  de média 0 e variância 1 e atribuir à  $W$  o valor  $\mu + \sigma Z$ .

## 2.3

### Geração de vetores aleatórios normais multivariados

O processo de geração de cenários econométricos requer um algoritmo que gere um vetor aleatório normal multivariado  $\mathbf{X}$  de dimensão  $k$  com média  $\mathbf{0} = (0, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^k$  e matriz de variância e covariância  $\Sigma \in \mathbb{R}^{k \times k}$ . Serão apresentados dois métodos bem conhecidos que resolvem esse problema, o método da rotação e o método da fatoração triangular.

Como a matriz  $\Sigma$  é simétrica e definida positiva, então existe uma matriz  $\mathbf{P}$  tal que  $\mathbf{P}^T \Sigma \mathbf{P} = \mathbf{I}$ , onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade  $k \times k$ . Pois como  $\Sigma$  é simétrica, ela é diagonalizável, e assim pode-se escrever  $\Sigma = \mathbf{Q} \mathbf{D} \mathbf{Q}^T$ , onde  $\mathbf{D}$  é uma matriz diagonal contendo os autovalores de  $\Sigma$  e  $\mathbf{Q}$  é uma matriz ortogonal. Como  $\Sigma$  é definida positiva, então os seus autovalores são todos positivos, e portanto, os elementos da diagonal de  $\mathbf{D}$  são positivos. Escrevendo  $\mathbf{P} = \mathbf{Q} \mathbf{D}^{1/2}$ , onde  $\mathbf{D}^{1/2} \mathbf{D}^{1/2} = \mathbf{D}$ , pode-se concluir que  $\Sigma = \mathbf{P} \mathbf{P}^T$ .

Fazendo  $\mathbf{Y} = \mathbf{P}^T \mathbf{X}$ , tem-se que  $\mathbf{Y}$  é um vetor aleatório normal multivariado de média  $\mathbf{0}$  e variância  $\mathbf{I}$ , pois

$$E[\mathbf{Y}] = E[\mathbf{P}^T \mathbf{X}] = \mathbf{P}^T E[\mathbf{X}] = \mathbf{0}$$

e

$$\text{Var}[\mathbf{Y}] = \text{Var}[\mathbf{P}^T \mathbf{X}] = E[(\mathbf{P}^T \mathbf{X})(\mathbf{P}^T \mathbf{X})^T] - (E[\mathbf{P}^T \mathbf{X}])^2 = \mathbf{P}^T E[\mathbf{X} \mathbf{X}^T] \mathbf{P} = \mathbf{P}^T \Sigma \mathbf{P} = \mathbf{I}.$$

Para gerar esse vetor  $\mathbf{Y}$  basta gerar um número aleatório normal  $Z$  para cada uma das  $k$  coordenadas de  $\mathbf{Y}$  utilizando algum dos métodos apresentados na seção anterior.

Resumindo, o primeiro método para gerar o vetor normal aleatório multivariado  $\mathbf{X} \sim N_k(\mathbf{0}, \Sigma)$  consiste em gerar um vetor normal aleatório multivariado  $\mathbf{Y} \sim N_k(\mathbf{0}, \mathbf{I})$  e atribuir a  $\mathbf{X}$  o vetor  $(\mathbf{P}^T)^{-1} \mathbf{Y}$ . Esse procedimento

é chamado de método da rotação. Ele é considerado um método caro pois para executá-lo é necessário determinar todos os autovalores de  $\Sigma$ .

Um algoritmo mais eficiente para a geração de um vetor aleatório normal multivariado é o chamado método da fatoração triangular, que será apresentado a seguir.

Como a matriz  $\Sigma$  é simétrica definida positiva, é possível aplicar nela uma fatoração Cholesky e escrevê-la na forma:  $\Sigma = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ , onde  $\mathbf{L}$  é uma matriz triangular inferior.

Considerando que  $\mathbf{Y} \sim N_k(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ , podemos afirmar que o vetor  $\mathbf{X} = \mathbf{L}\mathbf{Y}$  é um vetor aleatório normal multivariado de média  $\mathbf{0}$  e variância  $\Sigma$ . Isso vem do fato que,

$$E[\mathbf{X}] = E[\mathbf{L}\mathbf{Y}] = \mathbf{L}E[\mathbf{Y}] = \mathbf{0}$$

e que

$$\text{Var}[\mathbf{X}] = \text{Var}[\mathbf{L}\mathbf{Y}] = E[(\mathbf{L}\mathbf{Y})(\mathbf{L}\mathbf{Y})^T] - (E[\mathbf{L}\mathbf{Y}])^2 = \mathbf{L}E[\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T]\mathbf{L}^T = \mathbf{L}\mathbf{I}\mathbf{L}^T = \Sigma.$$

Portanto, o método da fatoração triangular para gerar o vetor  $\mathbf{X} \sim N_k(\mathbf{0}, \Sigma)$  deve gerar inicialmente um vetor aleatório  $\mathbf{Y} \sim N_k(\mathbf{0}, \mathbf{I})$  e depois fazer  $\mathbf{X} = \mathbf{L}\mathbf{Y}$ . Por ele ser bem eficiente, ele será o método adotado nesse trabalho.