



# Desenvolvimento de um software científico para a modelagem e simulação computacional

Dissertação de Mestrado

Mestrado em Ciência da Computação

**Brenno Lemos Melquíades dos Santos**

**Orientador: Prof. Alexandre B. Pigozzo**

24 de Março de 2024





# Sumário

## 1 Introdução

- ▶ **Introdução**
- ▶ Referencial teórico
- ▶ Software para modelagem e simulação
- ▶ Aplicações do software
- ▶ Conclusões e trabalhos futuros

- O desenvolvimento de modelos computacionais requer um conjunto de etapas: estudo do problema, formulação de hipóteses, construção, implementação e simulação do modelo.
- Uma das etapas mais desafiadoras é a implementação.
  - Requer o conhecimento de programação, estrutura de dados, bibliotecas, etc;
  - Um erro na implementação pode comprometer todo o trabalho.
- Questão científica:
  - É possível que ferramentas de software automatizem etapas do processo de modelagem computacional?

- Para responder a questão anterior, foi desenvolvido um software para auxiliar a implementação e simulação de modelos de Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs) com o objetivo de automatizar certas etapas do processo de modelagem.
- A partir de uma representação visual de um modelo, o software é capaz de gerar o código que implementa o modelo, simulá-lo e até exportar gráficos com os resultados.



# Sumário

## 2 Referencial teórico

- ▶ Introdução
- ▶ **Referencial teórico**
- ▶ Software para modelagem e simulação
- ▶ Aplicações do software
- ▶ Conclusões e trabalhos futuros

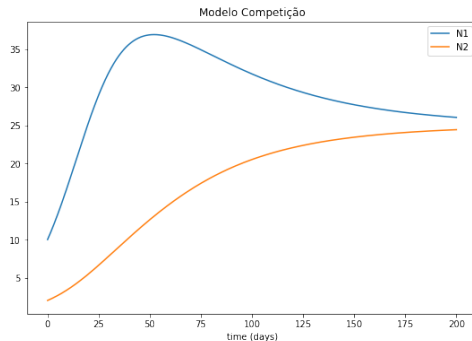
# Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs)

## 2 Referencial teórico

- Usadas para estudar o comportamento populacional ao longo do tempo;
- Diversas aplicações em várias áreas do conhecimento;
- Cada equação descreve a concentração de uma população diferente;

$$\frac{dN_1}{dt} = r_1 \cdot N_1 (1 - W_{11} \cdot N_1 - W_{21} \cdot N_2)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = r_2 \cdot N_2 (1 - W_{22} \cdot N_2 - W_{12} \cdot N_1) \quad (1)$$



Um modelo clássico da literatura é o modelo Predador-Presa. Este modelo descreve o comportamento de duas populações,  $H$  e  $P$ , que possuem uma relação de predação entre si.

Na equação, temos que

$\frac{dH}{dt} = r.H - a.H.P$	$H$	Presa
	$P$	Predador
(2)	$r$	Taxa de reprodução da presa
$\frac{dP}{dt} = b.H.P - m.P$	$m$	Taxa de mortalidade dos predadores
	$a$	Taxa de predação
	$b$	Taxa de reprodução dos predadores

- É uma maneira do usuário programar a máquina por meio de elementos gráficos que abstraem instruções do computador.
- Os elementos podem representar múltiplas operações por vez, com o objetivo de facilitar a programação.
- Exemplos: GRAIL, Scratch, Logisim, Blender.
- Editores baseados em nós são muitos usados porque possuem uma representação natural para operações complexas que combinam um conjunto de entradas para gerar uma ou mais saídas.



- GRail — 1968:





# Geração de código

## 2 Referencial teórico

- Recebe como entrada uma Representação Intermediária (RI) e gera como saída um código na linguagem alvo (por exemplo, Python).



# Geração de código baseada em *templates*

## 2 Referencial teórico

- Um *template* é um esqueleto (uma estrutura) que serve de referência para todo o processo de geração de código.
- Em sua essência, *templates* são arquivos com marcadores especiais que podem ser substituídos por outros valores dinamicamente.



# Sumário

## 3 Software para modelagem e simulação

- ▶ Introdução
- ▶ Referencial teórico
- ▶ **Software para modelagem e simulação**
- ▶ Aplicações do software
- ▶ Conclusões e trabalhos futuros



# Sumário

## 4 Aplicações do software

- ▶ Introdução
- ▶ Referencial teórico
- ▶ Software para modelagem e simulação
- ▶ **Aplicações do software**
- ▶ Conclusões e trabalhos futuros



# Sumário

## 5 Conclusões e trabalhos futuros

- ▶ Introdução
- ▶ Referencial teórico
- ▶ Software para modelagem e simulação
- ▶ Aplicações do software
- ▶ **Conclusões e trabalhos futuros**

## Conclusões e trabalhos futuros

### 5 Conclusões e trabalhos futuros

- Neste trabalho, foi desenvolvido um software para automatizar a implementação e simulação de modelos computacionais baseados em EDOs.
- A construção das equações do modelo matemático é auxiliada pela representação visual que foi criada permitindo que o usuário acompanhe a construção de todas as expressões e como elas estão sendo combinadas para formar o sistema de EDOs.
- Através da GUI, é possível ver as entradas e operações de cada expressão, os sinais de cada entrada, quais expressões fazem parte de uma determinada EDO, entre outras coisas.

# Conclusões e trabalhos futuros

## 5 Conclusões e trabalhos futuros

- Como limitações do trabalho, destaca-se:
  - A representação visual apresenta uma limitação na qual tornar-se mais difícil entender um modelo complexo com muitos nós e ligações.
  - Não foi realizada uma avaliação de usabilidade do software.



# Conclusões e trabalhos futuros

## 5 Conclusões e trabalhos futuros

- Como trabalhos futuros, destaca-se:
  - Geração de código e simulação de modelos estocásticos;
  - Ajuste de parâmetros;
  - Análise de sensibilidade de parâmetros;
  - Geração de código e simulação de Equações Diferenciais Parciais (EDPs);
  - Desenvolvimento de uma versão Web do software.

# Desenvolvimento de um software científico para a modelagem e simulação computacional