

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

19 de março de 2024



Universidade Federal de São João del-Rei



► Introdução

- ▶ Referencial teórico
- Software para modelagem e simulação Interface Gráfica
 Representação Intermediária
- Aplicações do software
- ► Conclusões e trabalhos futuros





Sumário

2 Referencial teórico

- Introdução
- ► Referencial teórico
- Software para modelagem e simulação Interface Gráfica
 Representação Intermediária
- Aplicações do software
- Conclusões e trabalhos futuros



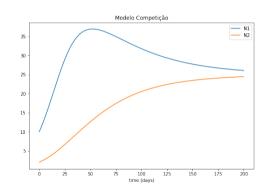
Equações Diferenciais Ordinárias (EDOs)

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;

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

$$rac{dN_2}{dt} = r_2.N_2(1 - W_{22}.N_2 - W_{12}.N_1) \end{tabular}$$





EDO — Modelo Predador-Presa

2 Referencial teórico

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

Na equação, temos que

$$rac{dH}{dt} = r.H - a.H.P$$
 (2) $rac{dP}{dt} = b.H.P - m.P$

$$egin{array}{lll} H & & & & & & Presa \\ P & & & & & Predador \\ r & & & & Taxa de reprodução da presa \\ m & & & & Taxa de predação \\ a & & & & Taxa de predação \\ b & & Taxa de reprodução dos predadores \\ \end{array}$$



Sumário

- ▶ Introdução
- Referencial teórico
- ➤ Software para modelagem e simulação Interface Gráfica Representação Intermediária
- ▶ Aplicações do software
- Conclusões e trabalhos futuros



Fluxograma de uso simplificado

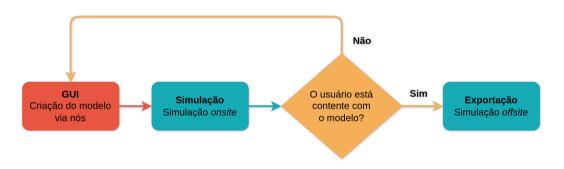


Figura 1: Fluxograma da experiência do usuário.

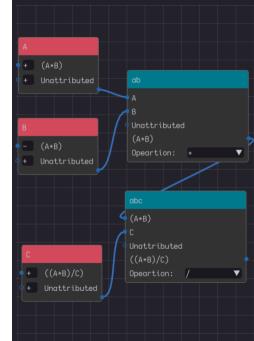
O software deve entregar as seguintes funcionalidades:

- Criação de modelos pela interface gráfica;
- Simulação do modelo e exibição dos resultados na interface;
- Exportação de PDF/Imagens com os resultados das simulações;
- Exportação de código equivalente ao modelo implementado;



Representação do Modelo

- O software necessita de uma interface simples de ser usada:
 - Mas também deve naturalmente relembrar uma EDO:
- Após diversas iterações, chegamos numa interface baseada em programação visual;
 - Estas interfaces existem desde 1963, mas tiveram uma renascença com o avanço dos computadores e a necessidade de softwares de edição de imagem/áudio/vídeo;





Fluxo de passagem de informações na interface

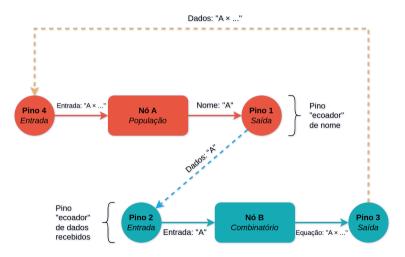


Figura 2: Relações entre nós e pinos.



GRall — 1968





Representação Intermediária

3 Software para modelagem e simulação



Universidade Federal de São João del-Rei



Representação Intermediária

- Com o objetivo de realizar tantas transformações, torna-se necessário a utilização de uma Representação Intermediária (RI);
- Inspirados nas arquiteturas de compiladores modernos (GCC, baseados em LLVM), separamos a estrutura em back-end e front-end;
- Essa abordagem garante o desacoplamento entre estrutura e produtos finais;

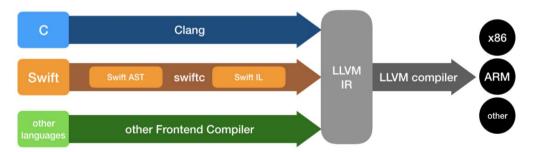


Figura 3: Exemplo de RI: LLVM-IR.



RI — Serde: Conversões automatizadas para JSON

3 Software para modelagem e simulação

```
Rust
#[derive(Serialize, Deserialize)]
struct Person {
    name: String,
    age: u8.
    phones: Vec<String >.
    address: Address.
#[derive(Serialize, Deserialize)]
struct Address {
    street: String,
    city: String,
 15/21
```

JSON

```
"name": "John Doe",
"age": 43,
"address": {
  "street": "1st St.".
  "city": "London"
"phones": [
  "+44 1234567",
  "+44 2345678"
```



RI — Templates

3 Software para modelagem e simulação

- Structs serializáveis podem ser usadas diretamente em templates;
- Suponha a variável people: Vec<Person>:

minijinja

```
{% for person in people %}
    {{ person.name }}, {{ person.age }} anos.
    Contato: {% for phone_nb in person.phones -%}
    {{ phone_nb }}
    {% - if not loop.last %}, {% endif -%}
    {% endfor %}

{% endfor %}
```



Sumário

4 Aplicações do software

- ▶ Introdução
- ▶ Referencial teórico
- Software para modelagem e simulação Interface Gráfica Representação Intermediária
- ► Aplicações do software
- Conclusões e trabalhos futuros





- ▶ Introdução
- ▶ Referencial teórico
- Software para modelagem e simulação Interface Gráfica
 Representação Intermediária
- Aplicações do software
- ► Conclusões e trabalhos futuros



Conclusões e trabalhos futuros

5 Conclusões e trabalhos futuros



Desenvolvimento de um software científico para a modelagem e simulação computacional