

# Modelagem Matemático-computacional

## Aula 3

Nesta aula o professor Luciano fez uma revisão do conceito de método científico e apresentou alguns problemas da modelagem tradicional.

### I. A MODELAGEM MATEMÁTICO-COMPUTACIONAL E O MÉTODO CIENTÍFICO

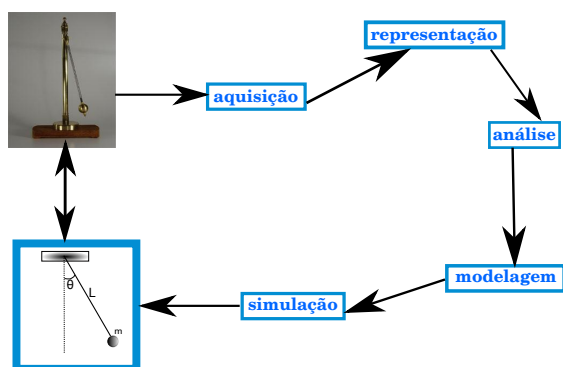


Figura 1 Etapas de pesquisa no estudo de um pêndulo.

Vimos na última aula que o método científico parte de um problema de interesse e busca modelá-lo, permitindo fazer previsões. Assim, uma vez estabelecido o fenômeno ou sistema que será estudado, obtêm-se medidas capazes de quantificá-lo. Estas medidas são representadas de uma forma conveniente para permitir a análise de como os parâmetros e variáveis do sistema podem afetar seus possíveis resultados. Então, estas relações servem para estabelecer uma lei, normalmente expressa em uma fórmula matemática que será o modelo do fenômeno (ou sistema) em questão. Finalmente, os resultados do modelo são confrontados com observações do sistema real, de modo que a validação do modelo permitirá usá-lo para fazer previsões.

#### A. Pêndulo

O pêndulo (1) é um sistema útil para exemplificar como as etapas do método científico surgem naturalmente no estudo de um fenômeno. Idealmente, o pêndulo mais simples é constituído de uma haste rígida em cuja extremidade se encontra uma massa. Esse sistema é fixo a uma parede, por exemplo, e pode oscilar quando sujeito a uma perturbação de sua posição de equilíbrio. Consideramos que a haste tem massa desprezível, enquanto que a massa do corpo preso em sua extremidade tem toda a massa concentrada em um único ponto.

Como variáveis deste sistema, podemos considerar o

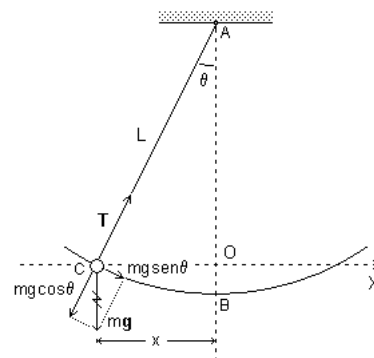


Figura 2 Pêndulo simples e suas variáveis. Fonte: <http://www.ufsm.br/gef/Mhs06.htm>.

comprimento  $L$  da haste, a massa  $m$ , a posição angular  $\theta$  que a haste faz com uma linha vertical que passa pelo ponto de fixação da haste à parede e a aceleração da gravidade  $g$ .

Em seguida, as variáveis deverão ser relacionadas através de uma fórmula matemática. Podemos partir da segunda Lei de Newton para obter a dinâmica do sistema:

$$\begin{aligned}\vec{F} &= m\vec{a} \\ mL\ddot{\theta} &= -mg \sin \theta \\ \ddot{\theta} &= -\frac{g \sin \theta}{L}.\end{aligned}\tag{1}$$

Note que a equação 1 é não linear na variável  $\theta$ , de modo que a solução para qualquer ângulo somente pode ser obtida numericamente. Na abordagem padrão, fazemos a aproximação de pequenos ângulos  $\sin \theta \approx \theta$ , levando a:

$$\begin{aligned}\ddot{\theta} &= -\frac{g}{L}\theta \\ \theta(t) &= \theta_0 \cos\left(\sqrt{\frac{g}{L}}t + \phi\right).\end{aligned}\tag{2}$$

Assim, nesta abordagem, a posição angular do pêndulo com o tempo é uma função trigonométrica  $\sin(t)$  ou

$\cos(t)$  com período constante dado por  $T = 2\pi\sqrt{\frac{L}{g}}$ , independente da massa. Embora este modelo seja aproximadamente factível para explicar a natureza oscilatória do pêndulo, ele é incompleto, pois não incorpora dissipação. Assim, neste modelo o pêndulo nunca chegaria ao repouso.

## II. PROBLEMAS TRADICIONAIS EM MODELAGEM

Vimos na seção anterior (exemplo do pêndulo) que a modelagem tradicional é permeada por uma série de dificuldades que podem acarretar em modelos incompletos ou mesmo errados de um dado fenômeno.

### A. Não-linearidades

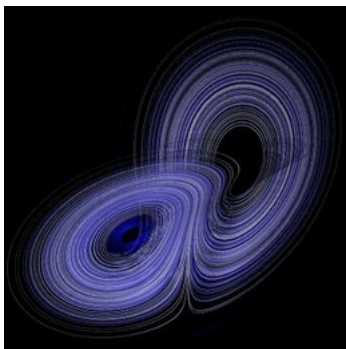


Figura 3 Exemplo de sistema caótico: o atrator de Lorenz. Fonte: <http://mandelbrot.ifsc.usp.br/>.

Por muito tempo, vários sistemas físicos foram tradicionalmente descritos por modelos lineares, já que este tipo de relação permitia resolvê-los analiticamente considerando aproximações apropriadas. Sabemos que não existe sistema real linear, dada a impossibilidade de se construir um sistema ideal. Um típico exemplo de fenômeno que surge em sistemas não-lineares é o *caos* (2). Embora um sistema caótico seja determinístico, isto é, dada uma condição inicial o sistema sempre evolui da mesma forma, pequenas variações nesta condição inicial podem levar a resultados totalmente divergentes entre si. Em biologia um trabalho que destacou-se pela precisão de seus resultados foi o modelo de Hodgkin e Huxley para a condução elétrica em um neurônio.

### B. Múltiplas Escalas

A coexistência de escalas é também um problema na modelagem de fenômenos naturais. Imagine a extensão e complexidade do estudo dos seres humanos desde as moléculas, células, órgãos, tecidos que os compõem como indivíduos até sua relação que dá origem a sistemas sociais. Assim, o entendimento do ambiente humano não



Figura 4 Vários níveis de organização biológicos onde a diferença de escalas um fator importante no entendimento de níveis individuais ou relacionados. Fonte: <http://www.biologando.com.br/ecologia/>.

estaria restrito à ecologia, sendo necessário o estudo de cada indivíduo, com cada órgão, cada célula e cada molécula. Em um dado momento, este processo de reducionismo inviabiliza a obtenção de novos conhecimentos, levando à reintegração de cada um destes níveis. Vários estudos têm buscado incorporar a multiescalaridade para compor seus modelos (3).

### C. Acidentes históricos



Figura 5 Extinção dos dinossauros ilustrada. Fonte: <http://cienciasvirtual-bio.blogspot.com.br/>.

A construção de modelos pode tanto prever o futuro como explicar o passado. Pode-se conceber um modelo que incorpora possíveis acidentes históricos, como a queda do meteoro que extinguiu os dinossauros. Atualmente, a área de astronomia tem estudado vários fenômenos espaciais que poderiam destruir planetas ou galáxias, desmitificando interpretações de previsões feitas no passado (4).

### D. Variabilidade

Nenhum indivíduo é micro ou macroscopicamente idêntico. Estudos de biologia e materiais recorrentemente têm buscado incorporar a variabilidade característica de seus objetos de estudo em modelos estatísticos que re-



Figura 6 Estudo da variabilidade em laranjas pela Embrapa permite detectar padrões de doenças vegetais. Fonte: <http://www.cenargen.embrapa.br/>.

produzem em certo grau de aproximação as diferenças observadas em sistemas reais (5; 6).

### E. Complexidade

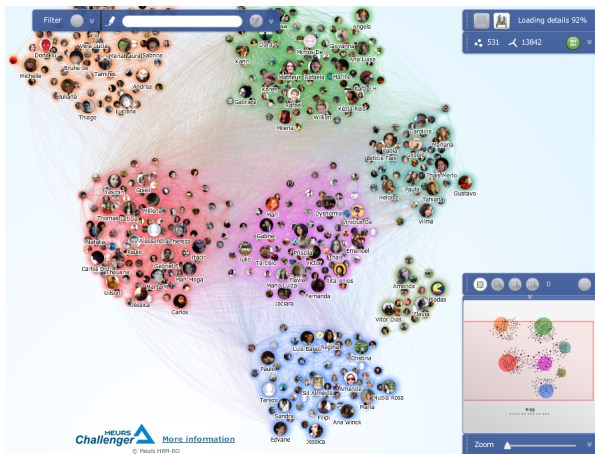


Figura 7 Relações de amizade em redes sociais também pode ser modelada por sistemas complexos. Há formação de aglomerações de amigos (clusters) que podem ser ligados entre si pelas relações de conhecimento, ilustrando a ideia de que "é preciso de até 6 amigos intermediários para conhecer qualquer pessoa no mundo!". Fonte: <https://www.facebook.com/pages/Challenger-Network-Graph/229069747110227>.

Muitos sistemas possuem um número elevado de elementos, escalas e relacionamentos, de modo que tentativa de descrevê-los excede nossa capacidade cognitiva. Estes sistemas requerem que uma nova ciência seja concebida para que sua complexidade possa ser entendida.

### III. MODELAGEM COMPUTACIONAL NA ATUALIDADE

Com o aumento da capacidade e da memória dos computadores foi possível armazenar e processar uma quantidade crescente de dados. Atualmente quase tudo é informatizado: dados médicos, econômicos, bem como pesquisas (astronomia, genética, sociologia, etc), artes,

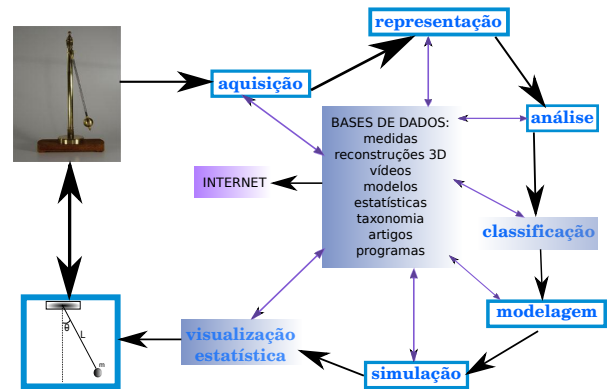


Figura 8 Reformulação das etapas do método científico com o advento da informática.

mídia e comunicação. Essa imensa quantidade e variedade de dados pressupõe métodos automáticos de análise, além de bases de armazenamento para organizá-los de forma lógica. Tipicamente, estes métodos automáticos são baseados em técnicas de *reconhecimento de padrões*. Notadamente, o computador foi determinante na facilidade de estudo que introduziu na ciência, desde a coleta automatizada de dados até a sua visualização. A *visualização* é uma das formas mais interessantes de se apresentar um determinado estudo que conta com uma vasta quantidade de dados (é bem mais agradável entender um gráfico do que uma tabela cheia de números!).

Diante destas novas possibilidades decorrentes do uso de computadores, podemos redefinir o método científico acrescentando as etapas de reconhecimento de padrões e visualização que, junto com as demais, estão concetadas à bases de dados e à internet.

### Referências

- [1] FRENCH, A. P., Vibration and waves. m.i.t. Introductory Physics Series. Taylor and Francis, 1971. ISBN 0748744479, 9780748744473.
- [2] KELLERT, Stephen H. (1993). In the Wake of Chaos: Unpredictable Order in Dynamical Systems. University of Chicago Press. p. 32. ISBN 0-226-42976-8.
- [3] TORRES, R. da S.; FALCÃO, A.X.; COSTA, L. da F., A graph-based approach for multiscale shape analysis. *Pattern Recognition*, v. 7, n. 6, p. 1163-1174, 2004.
- [4] <http://www.nasa.gov/topics/earth/features/2012.html>.
- [5] COSTA, Luciana et al. Identificação de genótipos de trigo promissores para cruzamentos. *Crop Breed. Appl. Biotechnol.* (Online), v. 11, n. 1 Viçosa, 2011.
- [6] SALEGHAFFARI, S.; RAIS-ROHANI, M.; MARIN, E. B.; BAMMANN, D. J., A new approach for determination of material constants of internal state variable based plasticity models and their uncertainty quantification. *Computational Materials Science*, v. 55, n. 0, p. 237-244, 2012.
- [7] <http://cyvision.ifsc.usp.br/networks/papers.htm>.