BIS0005 - Bases Computacionais da Ciência

Aula 08 - Modelagem e Simulação Computacional

Saul Leite
Centro de Matemática, Computação e Cognição
Universidade Federal do ABC

Q2 2018

Exemplo 1

Vamos fazer um *script* para imprimir todos os números de Fibonacci de 1 até N, onde N é fornecido pelo usuário.

Números de Fibonacci:

	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
F_n:	0	1	1	2	3	5	8	13	21	34	55	89	144

Lembre-se, a sequencia de Fibonacci inicia com 0 e 1 e após isso, os números são sempre a soma dos dois anteriores.

Exemplo 1: Solução

```r
N <- as.numeric(readline("Digite o valor de N: "))

F.anter <- 0
F.atual <- 1
cat(F.anter," ")
for( i in 1:N )
{
  cat(F.atual," ")
  F.proxi <- F.atual + F.anter
  F.anter <- F.atual
  F.atual <- F.proxi
}
```

Exemplo 2

Fazer uma **função** *potencia* que recebe dois inteiros não-negativos a e n por parâmetro e calcula a potência a^n. Ou seja, calcula:

$$a^n = \underbrace{a \times a \times \cdots \times a}_{n \text{ vezes}}$$

Atenção para o caso em que n é zero! (Você **não** pode usar o operador ^)

Exemplos de chamada da função:

```r
potencia(2,3)
```

```
## [1] 8
```

```r
potencia(5,6)
```

```
## [1] 15625
```

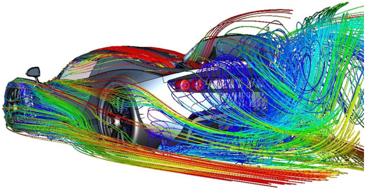
MODELAGEM E SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

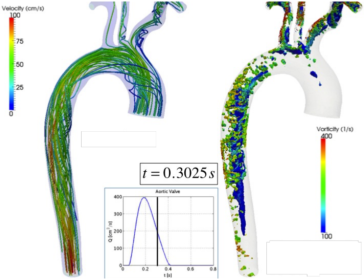
Motivação

A Modelagem e Simulação Computacional está cada vez mais presente em diversas áreas.

Permitem estudar sistemas reais de maneira aproximada, através modelos matemáticos que os representam.

Tais modelos são implementados em simulações computacionais, que são executadas visando obter um melhor entendimento do sistema real.





Motivação

Desta forma, a **Modelagem e Simulação Computacional** configuram-se como uma poderosa ferramenta para:

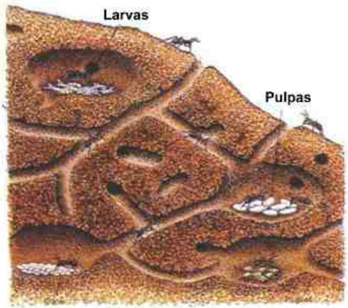
- Observar comportamentos;
- Testar teorias e hipóteses;
- Predizer comportamentos e ações futuras;

Definição de Sistema

O termo **sistema** vem do grego *snistánai* e significa "fazer ficar junto".

Um sistema é:

- Um conjunto de elementos interconectados que interagem entre si.
- Um sistema e seus elementos estão inseridos em um ambiente.



Sistema: forma de se estudar

Há três formas de se estudar um sistema:

- Experimentos com o Sistema Real;
- Experimentos com Modelos Físicos;
- Experimentos com Modelos Matemáticos.

Experimentos com o Sistema Real

Podem ser empregados quando é possível trabalhar diretamente com o sistema real:

- atuando em seus elementos e/ou
- alterando sua configuração.

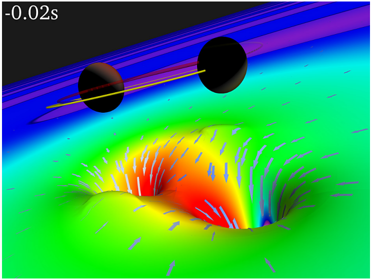
Como exemplo tem-se um experimento real de **teste de impacto** (ou *crash-test*) realizado em um veículo da General Motors:

Experimentos com o Sistema Real

Entretanto, tratar diretamente com o sistema real pode não ser possível:

- O experimento pode ser muito **caro** ou **perigoso**. Por exemplo, analisar pessoas em uma situação de incêndio.

- Pode ser **impossível tratar diretamente** com sistemas reais. Exemplo: a análise dos buracos negros, ou situações onde não há evidências da existência do sistema.



Experimentos com o Sistema Real

Em muitas situações é necessário construir um **modelo** que represente parcialmente o sistema e realizar experimento com este modelo.

- Desta forma, é possível estudar o sistema real de maneira indireta, deixando-o inalterado.

Um **modelo** é uma representação parcial de um objeto, sistema ou ideia.

Tipos de modelo

Há duas formas de se construir o modelo de um sistema:

- através de um modelo físico
- através de um modelo matemático

Tipos de modelo: modelo físico

Os modelos físicos consideram: **experimentos com objetos reais** tais objetos atuam como representações parciais do sistema que se deseja estudar

Como exemplo: mapas e maquetes.

Tipos de modelo: modelo matemático

Modelos matemáticos usam símbolos em lugar de dispositivos físicos, procurando representar as principais características e comportamentos do sistema alvo que se deseja analisar.

Há duas formas de solução de modelos matemáticos:

- Solução analítica;
- Solução numérica (via simulação).

EXEMPLO: ESTIMANDO O VALOR DE PI

Estimando o valor de Pi

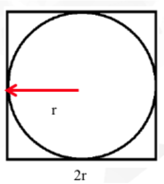
Iremos ilustrar **simulação computacional** com o **"Método de Monte Carlo"** para estimar o valor de pi.

O Métodos Monte Carlo foi primeiro usado por Metropolis, Von Neumann, e Ulam em 1940, durante o projeto Manhattan (bomba atômica).

Consiste na geração de números aleatórios para calcular propriedades de interesse.

Estimando o valor de Pi

Considere um quadrado com um circulo circunscrito:



Sabe-se que:

$$\text{(Área do quadrado): } A_Q = l^2 = 4r^2$$

$$\text{(Área do circulo): } A_C = \pi r^2$$

Desta forma, temos:

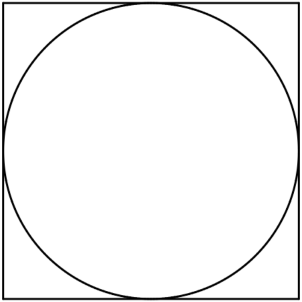
$$\frac{A_C}{A_Q} = \frac{\pi r^2}{4r^2} \quad \longrightarrow \quad \pi = 4\frac{A_C}{A_Q}$$

Estimando o valor de Pi

O método de **Monte Carlo** é utilizado para estimar a relação entre as áreas da circunferência e do quadrado. Ou seja, para estimar:

$$\frac{A_C}{A_Q}$$

Para tornar os cálculos mais simples, assume-se que o quadrado tenha um lado de tamanho $l = 1$. Assim, o raio da circunferência é $r = \frac{1}{2}$.

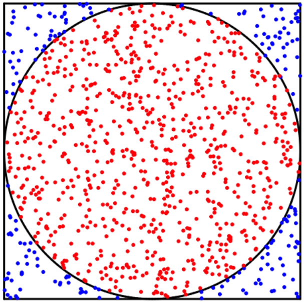


Estimando o valor de Pi

Utilizando um computador **sorteamos aleatoriamente** alguns pares de números aleatórios no intervalo $[0,1]$.

Cada par de números representará as coordenadas x e y de um ponto que pertence à área do quadrado.

Podemos estimar as áreas do quadrado contando quantos pontos caem sobre cada uma das figuras.



$$\frac{A_C}{A_Q} \approx \frac{\text{número de pontos no círculo}}{\text{número totais de pontos no quadrado}}$$

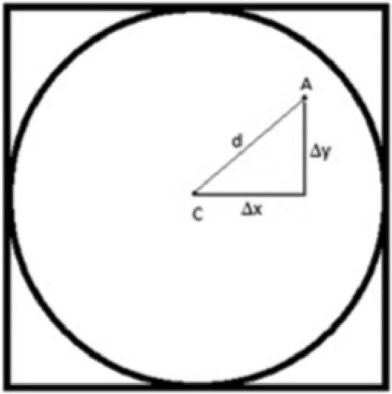
Estimando o valor de Pi

Dadas as coordenadas (x, y) de um ponto A qualquer, oriundas de um sorteio aleatório, podemos saber se o ponto está dentro ou fora do círculo, calculando a distância Euclideana entre A e o centro do círculo C (com coordenadas $x = 0.5$ e $y = 0.5$).

$$d = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2}$$

$$\Delta x = x_A - x_C$$

$$\Delta y = y_A - y_C$$



Estimando o valor de Pi

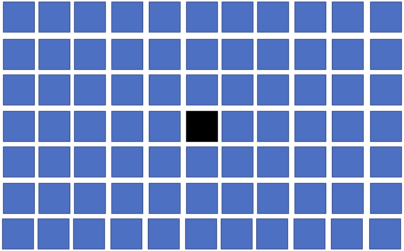
```
N <- 1000              # Número de pontos aleatórios a serem lançados
pontos.circulo = 0  # Número de pontos dentro do círculo
for( i in 1:N ){
  # Gerando components x e y do ponto aleatório
  x <- runif(1)
  y <- runif(1)

  # Calculando a distância do ponto para o centro do círculo
  d <- sqrt((x-0.5)^2 + (y-0.5)^2)

  if( d <= 0.5 ){
    pontos.circulo <- pontos.circulo + 1
  }
}
# Calculando o valor da aproximação
pi.aprox <- 4.0*(pontos.circulo)/N
cat("Aproximação para pi = ",pi.aprox)
```

EXEMPLO: DIFUSÃO DE CONTAMINANTE PELO MAR

Obs.: No exemplo que segue, iremos considerar um modelo simples. Geralmente usa-se um modelo matemático que explica o fenômeno que iremos estudar. Mas a ideia aqui é tentar reproduzir o efeito de forma simples, sem introduzir as equações matemáticas.

Difusão de contaminante

Vamos considerar um outro exemplo de simulação. Suponha que um navio petroleiro naufragou e está soltando petróleo no mar. Gostaríamos de **simular a propagação do petróleo** a medida que o tempo passa.



Dividimos o mar em pequenas caixas. A **caixa central** representa a posição do naufrágio.

Difusão de contaminante

Iremos representar o grau de contaminação com um valor que varia no intervalo $[0, 1]$. O valor 1 representa alta contaminação e 0 representa nenhuma contaminação.

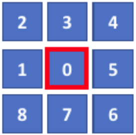
Os valores de cada caixa são representados através de uma matriz. O valor **inicial** da matriz é dado abaixo:

0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

Difusão de contaminante

Para fazer a difusão do contaminante, usaremos a seguinte regra de propagação:

- A cada novo instante de tempo, o novo valor de contaminação de uma caixa é a **média** do valor atual da caixa e de seus vizinhos:



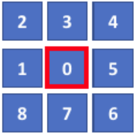
- A regra acima vale para todas as caixas exceto pela caixa central (onde ocorreu o naufrágio), que ficará fixa em 1 e as caixas das bordas, que permanecerão com 0.

Difusão de contaminante

Ou seja, o novo valor da caixa central v_0 será dada por:

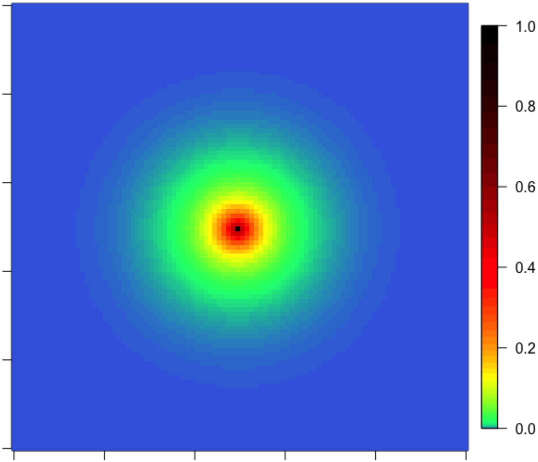
$$v_0 = \sum_{i=0}^{8} p_i v_i,$$

em que $p_i = 1/9$ e v_i representa o valor da sua i-ésima vizinha.



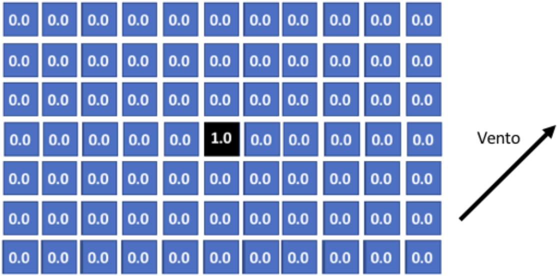
Difusão de contaminante

Esse processo é repetido várias vezes, e tem-se o seguinte resultado (baixe o *script* do Tidia.)



Difusão de contaminante

Suponha que nós temos uma situação diferente. Temos agora um vento apontando para Nordeste. Como modelar essa nova situação?



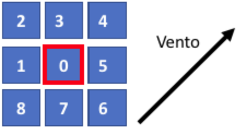
Difusão de contaminante

Voltando para a nossa regra de atualização dos contaminantes, podemos pensar em alterar os pesos:

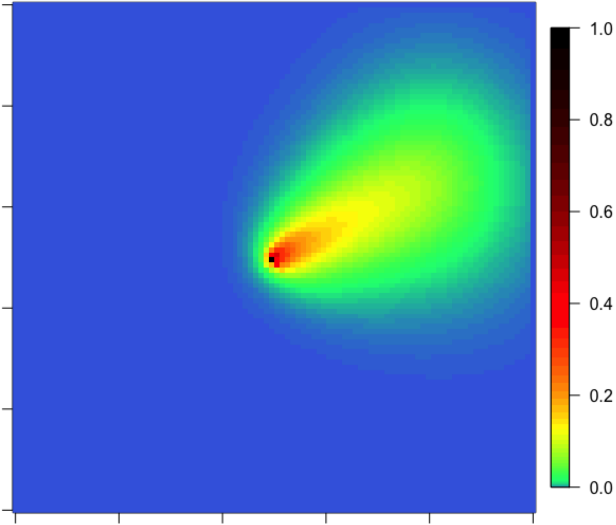
$$v_0 = \sum_{i=0}^{8} p_i v_i,$$

em que

$$p_i = \begin{cases} \frac{1}{18} & \text{para } i = 0, 2, 3, 4, 5, 6 \\ \frac{4}{18} & \text{para } i = 1, 7, 8 \end{cases}$$



Difusão de contaminante



Atividades para casa

Fazer **TODOS** os exercícios dos slides.

Ler capítulos 8 e 9 do livro Bases Computacionais.

Revisar todo conteúdo das aulas 5 a 8 para a Prova 2.

Referências

- Aulas dos Profs. David Correa Martins Jr, Jesús P. Mena-Chalco.
- Livro Bases Computacionais da Ciência.