
Modelagem Computacional

[Simulação de Sistemas Complexos]

Prof. Marcos G. Quiles

O que é esse curso?

- ▶ Um curso de **programação** voltado à **simulação** de sistemas **complexos**
- ▶ Requisitos necessários:
 - ▶ Programação Básica em Linguagem C (ou qualquer outra)
 - ▶ Ferramentas para geração de gráficos (python, R, matlab, etc.)
 - ▶ Noções de estruturas de dados (grafos)
- ▶ **SUGESTÃO: Usar Jupyter/Python**
- ▶ **Relatório → Notebook (.ipynb)**



Objetivos

- ▶ Aprimorar as habilidades de programação a partir da simulação de diversos sistemas complexos, por exemplo:
 - ▶ Simulação de redes neurônios acoplados
 - ▶ Congestionamento em redes
 - ▶ Propagação de doenças ou rumores em redes sociais
 - ▶ Sistemas ecológicos
 - ▶ Evolução
 - ▶ Dinâmica molecular
 - ▶ dentre outros.



Ementa

- ▶ Introdução aos sistemas complexos; modelos discretos e contínuos; modelos determinísticos e estocásticos; caos; dinâmica espaço-temporal; estudo e simulação de alguns sistemas complexos.



Forma de Avaliação

- ▶ **Projetos realizados em grupos (P)**
 - ▶ Estudo do problema
 - ▶ Modelagem e implementação
 - ▶ Simulação
 - ▶ Análise de resultados e confecção do relatório
- ▶ A nota final será a média aritmética dos trabalhos
- ▶ Trabalhos terão pesos distintos conforme nível de dificuldade



Algumas Regras

- I. Grupos com no máximo 3 integrantes

- I. Upload de material:
 - I. **Apenas: PDF, ZIP ou IPYNB**

2. Material / Relatórios / etc.
 - I. Google/Classroom: e-mail @unifesp.br



Conceitos Fundamentais

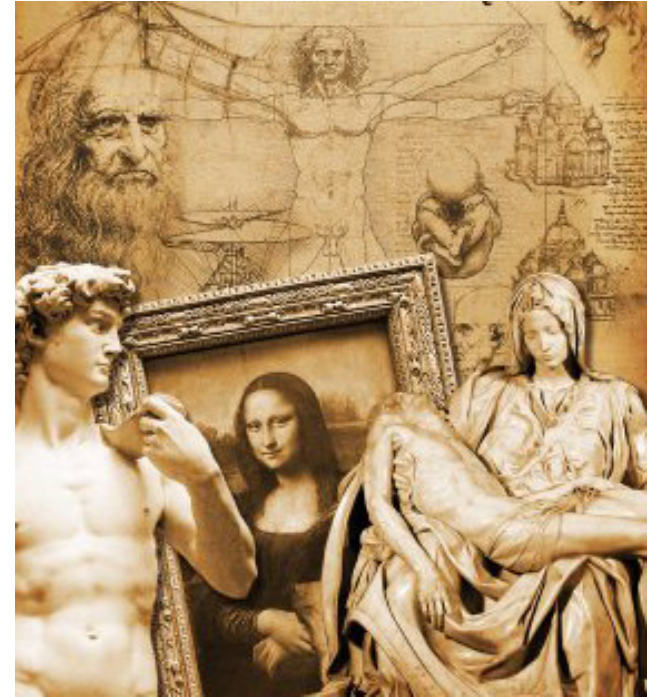


Sistemas Complexos

O que são?

A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ A partir do séc. XV: Grande mudança na ciência.
 - ▶ Igreja perde força sobre o homem;
 - ▶ Pesquisas que eram proibidas ou censuradas começam a ser praticadas;
 - ▶ Explosão de conhecimento, métodos e técnicas.
- ▶ Surgimento de grandes inovações e ideias que alteraram o pensamento humano.



A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ Essa época marca definitivamente o nascimento da **ciência** como a conhecemos.
- ▶ Com desenvolvimento vertiginoso:
- ▶ Partir do todo (**macro**) até chegar a menor parte (**micro**) para se entender mais profundamente o todo.

REDUCCIONISMO

A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ A ciência passa a realizar esse movimento (conhecer o micro para descrever o macro plenamente).
- ▶ Por exemplo: Para se entender o homem precisa-se partir da compreensão de conceitos macros:
 - ▶ As ideias sobre o que é o homem;
 - ▶ Seu corpo;
 - ▶ Seus membros;
 - ▶ Seus sistemas;
 - ▶ etc.



A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ ... até chegar a compreensão de conceitos micros, que possam ajudar a compreender esse mesmo homem:
 - ▶ A anatomia humana;
 - ▶ Sua fisiologia;
 - ▶ A microbiologia;
 - ▶ O DNA.



A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ Interessante nesse processo: **Grande volume de estudos e informações.**
- ▶ Necessidade de subcategorias que conseguissem continuar as pesquisas e dominar os conhecimentos adquiridos.



A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ Nesse ponto, surge o conceito de **disciplina**.
- ▶ A ciência passa a ter subcategorias específicas, que respondem por temas específicos.
- ▶ O pesquisador que domina uma subcategoria é denominado “**especialista**”.



A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ Em resumo:

- ▶ Partimos do século XV, onde existia uma única disciplina, a **ciência**, dominada por todos os estudiosos envolvidos...
- ▶ ... e chegamos no século XXI com uma infinidade de disciplinas especializadas.

A ciência como conhecemos: Introdução

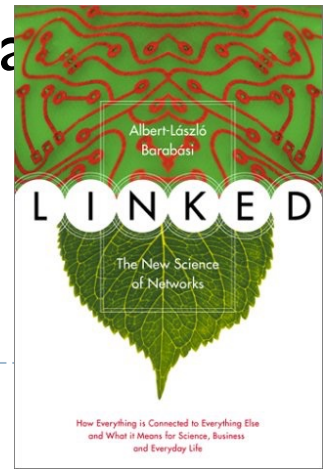
- ▶ No final do século XX: Alta especialização da ciência!
- ▶ A proposta da especialização nos dias de hoje já não é mais possível para muitas áreas do conhecimento.
- ▶ Algumas áreas já não conseguem mais avançar e se aprofundar no conhecimento. Chegaram ao seu limite!

A ciência como conhecemos: Introdução

Citação Barabási (2003):

- ▶ “O leitor já viu uma criança desmontar um brinquedo favorito? Viu-a chorar depois, ao perceber que não conseguiria remontar todas as peças? Bem, eis um segredo que nunca virou manchete: **desmontamos o universo** e não temos ideia de como **remontá-lo**. Após gastar trilhoes de dólares em pesquisas para demontar a natureza no século XX, só agora estamos reconhecendo que não dispomos de nenhuma pista como prosseguir – exceto para desmontá-lo ainda mais”.

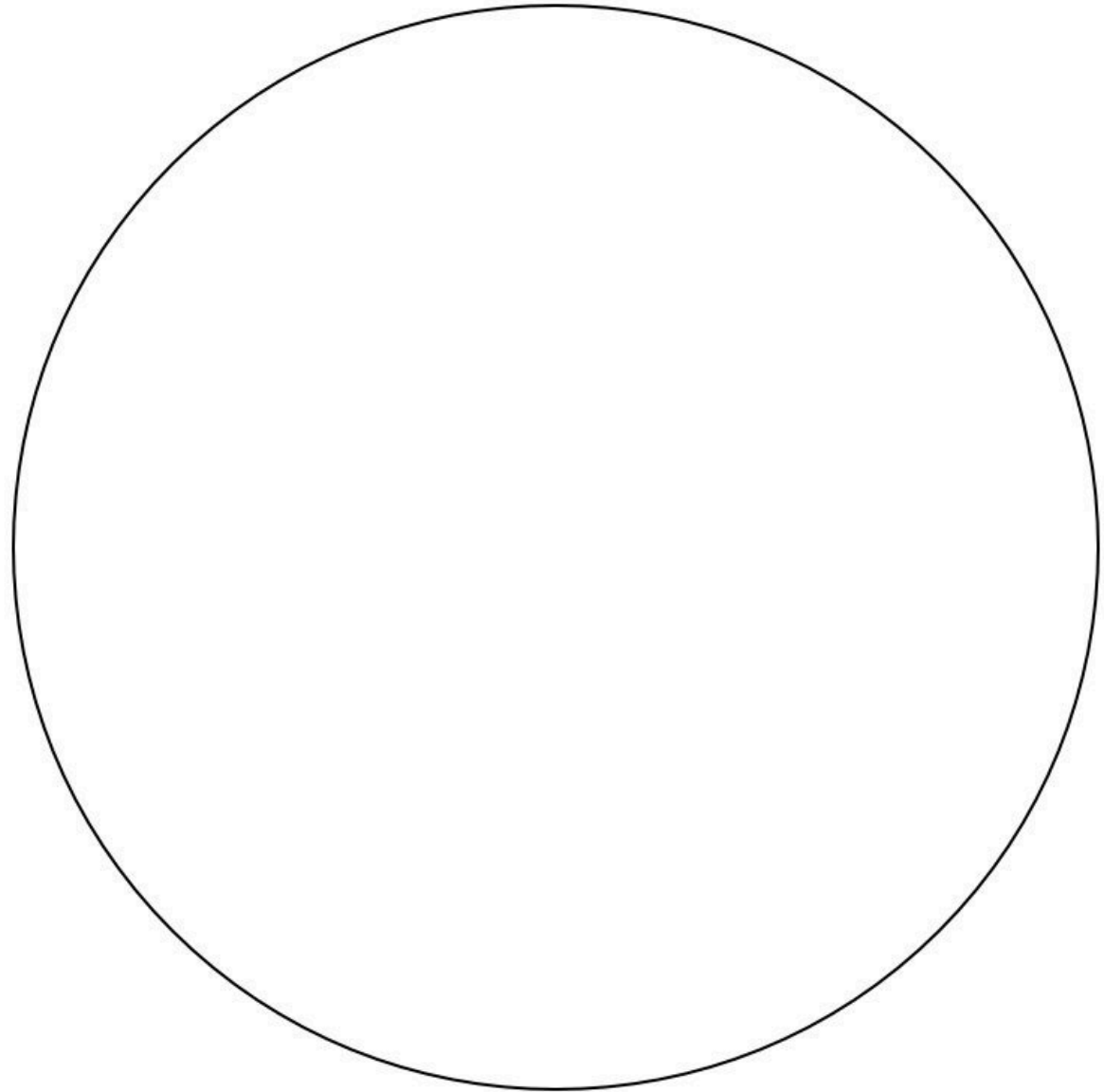
- ▶ Livro: Barabasi, A. *Linked*, Plume, 2003.



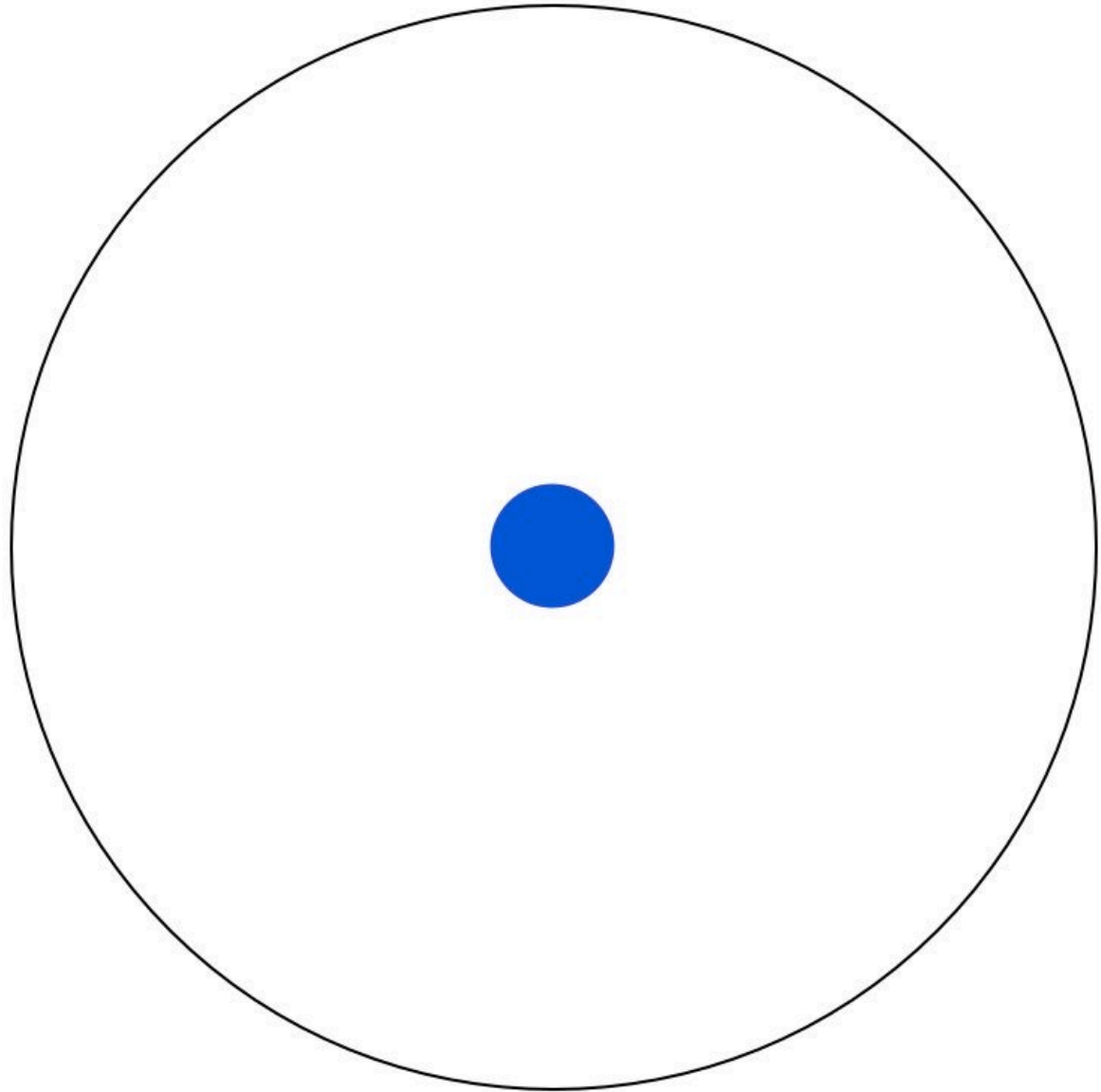
A ciência como conhecemos: Introdução

- ▶ No final do século XX: Proposta para reverter essa situação.
- ▶ Realizar o movimento inverso: Partir do micro e ir para o macro (**Integração das partes**).
- ▶ Assim surgem disciplinas agregadoras, que unem duas ou mais disciplinas específicas a fim de se compreender um mesmo fenômeno para o qual, **isoladamente**, elas não teriam alcance.
- ▶ Exemplo: Neurociências, Redes Complexas, etc.

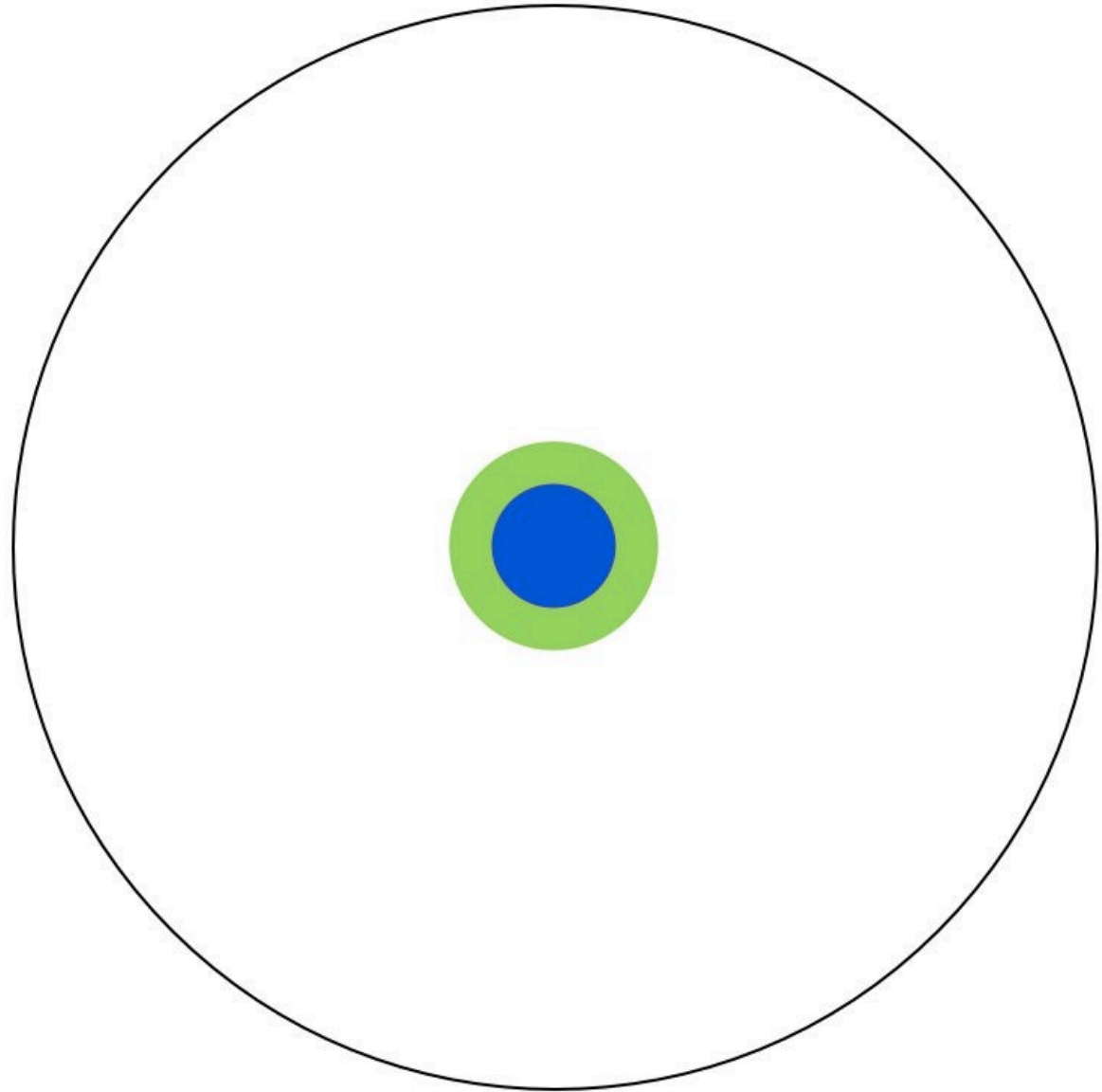
O Conhecimento: Total



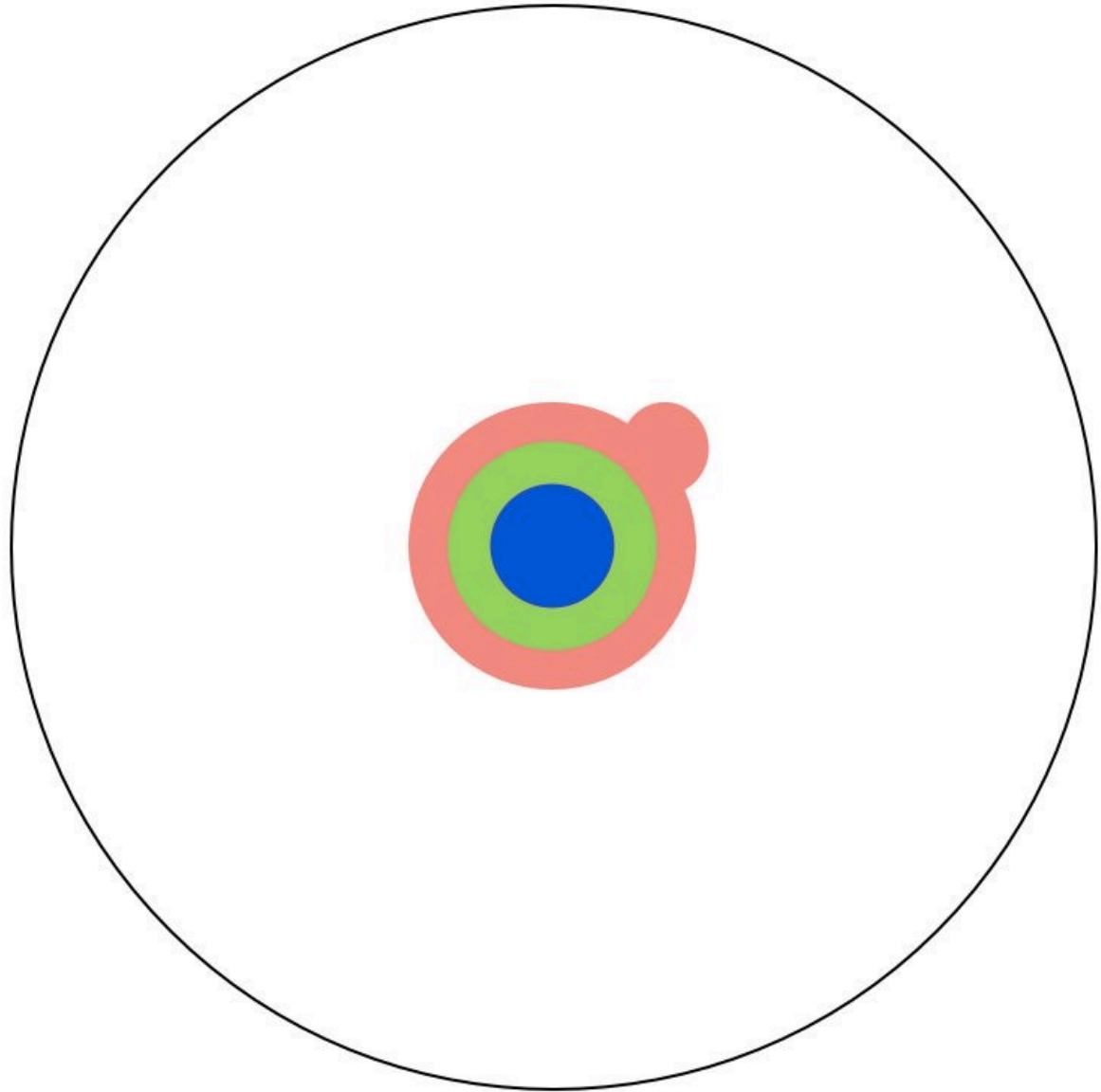
O Conhecimento: Fundamental



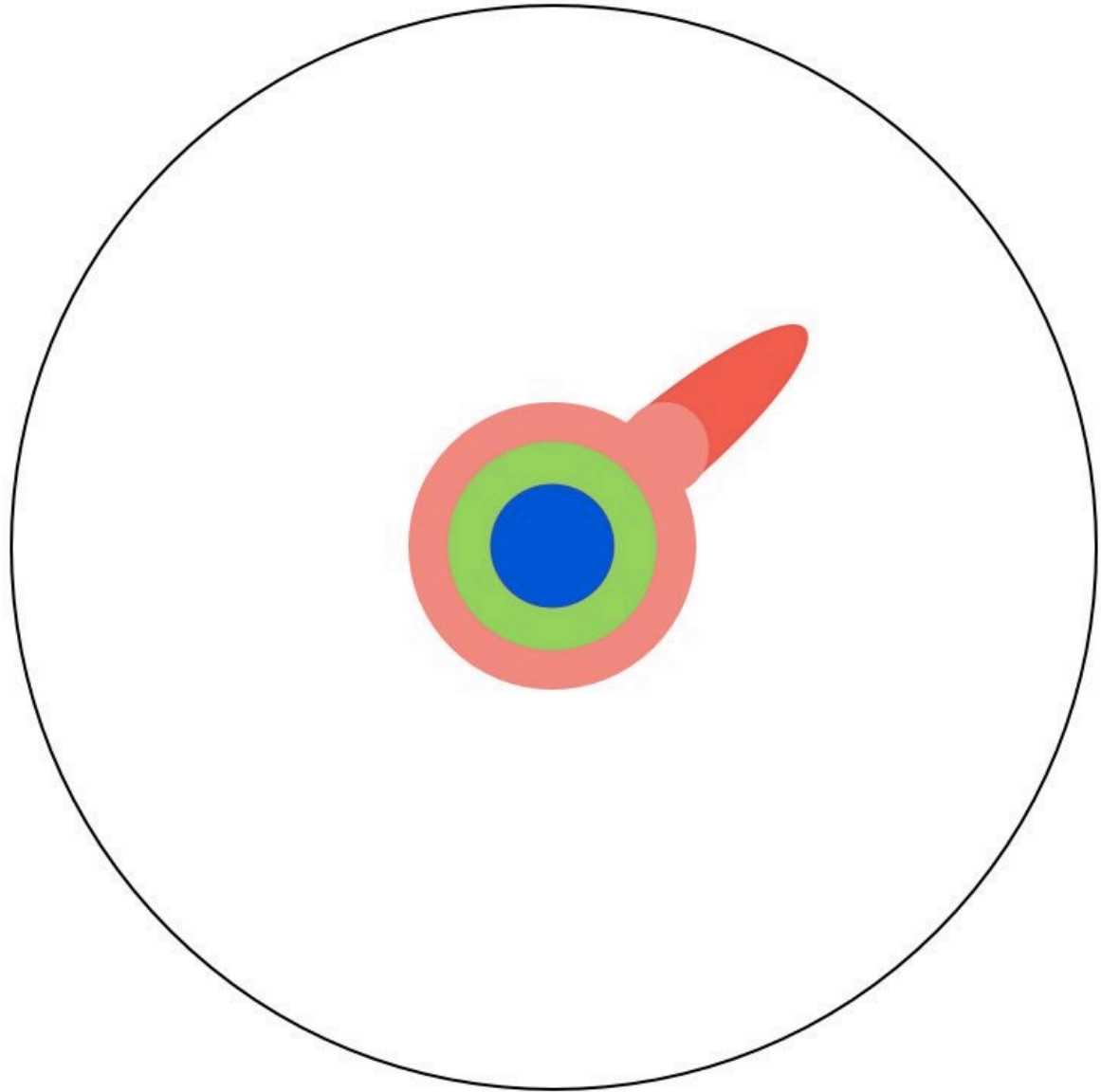
O Conhecimento: Ensino Médio



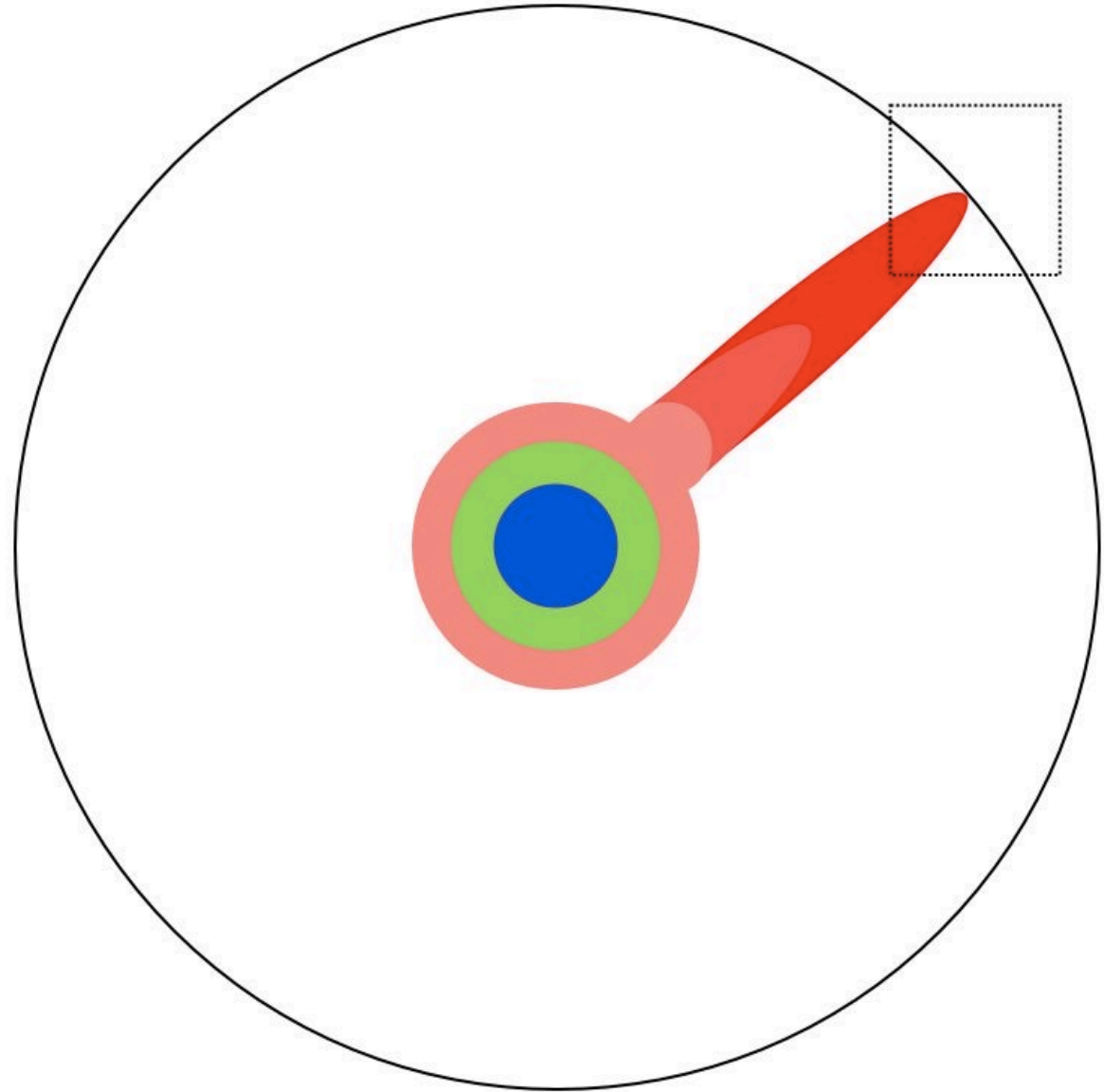
O Conhecimento: Superior



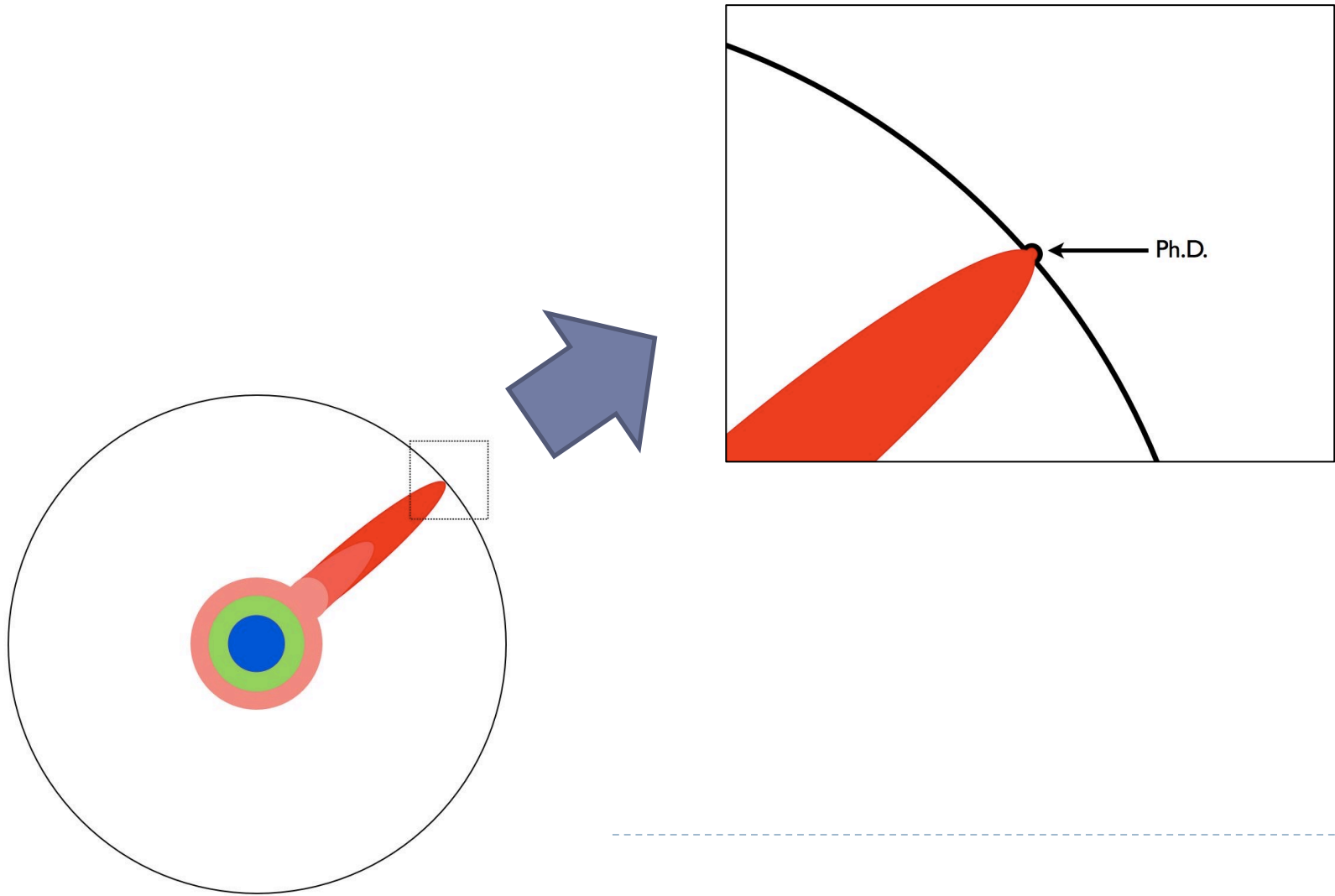
O Conhecimento: Mestrado



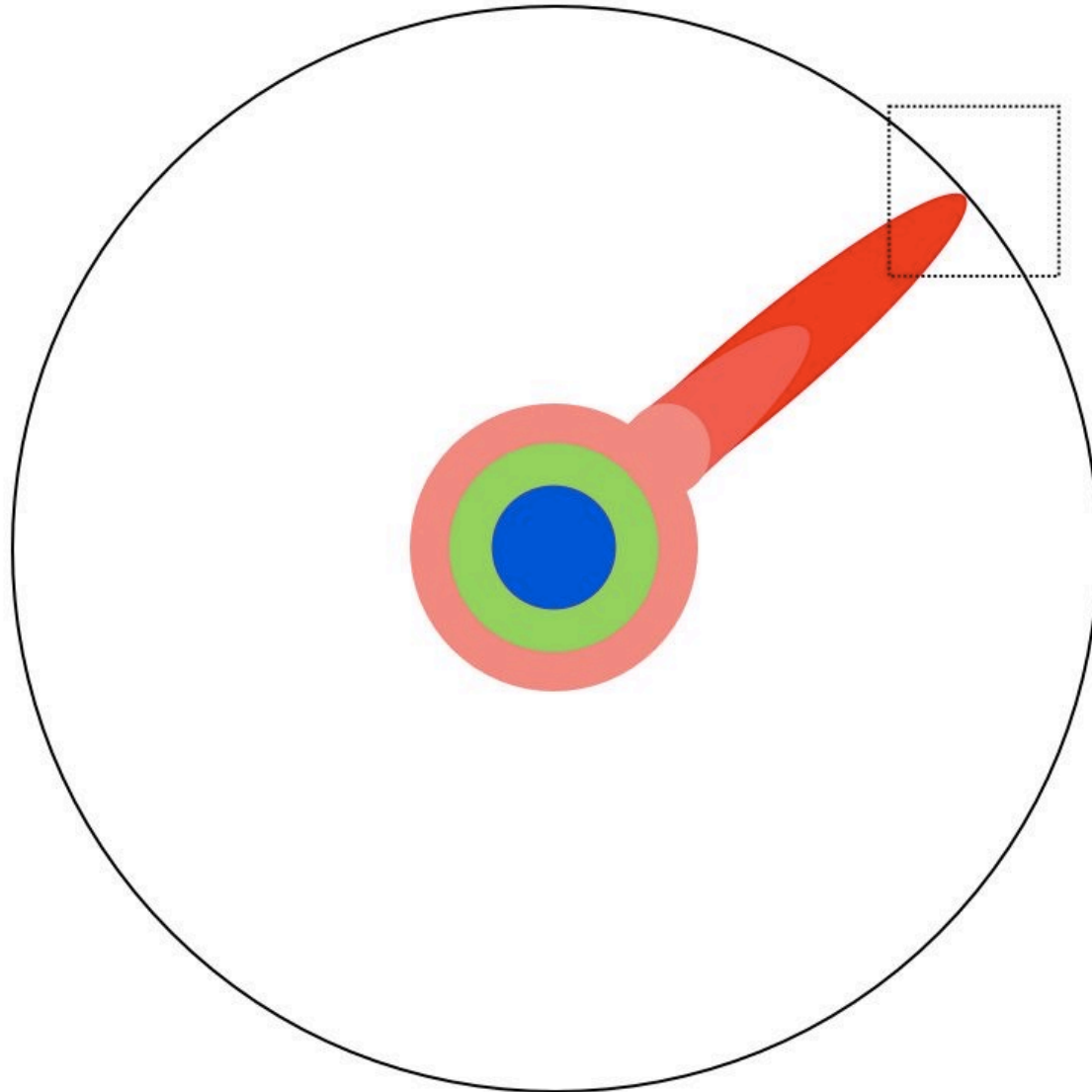
O Conhecimento: Fronteira



O Conhecimento: Doutorado



O Conhecimento: Qual o problema?




A ciência como conhecemos: Introdução

INTERDISCIPLINARIDADE

Bacharelado em Ciência e Tecnologia

Artigo - *PLOS Biology*



 OPEN ACCESS

ESSAY

88,643

VIEWS

78

CITATIONS

502

SAVES

18

SHARES

Mathematics Is Biology's Next Microscope, Only Better; Biology Is Mathematics' Next Physics, Only Better

Joel E Cohen

Published: December 14, 2004 • DOI: 10.1371/journal.pbio.0020439

Article

About the Authors

Metrics

Comments

Related Content

Download PDF 

Print

Share



Mas o que são os **Sistemas Complexos**?

- ▶ “Simplificando”:
 - ▶ São sistemas compostos por diversos elementos **interligados** no qual a compreensão do todo não pode ser obtida pelo **reducionismo**
 - ▶ Sistemas ditos **simples** podem ser entendidos a partir do estudo de suas partes



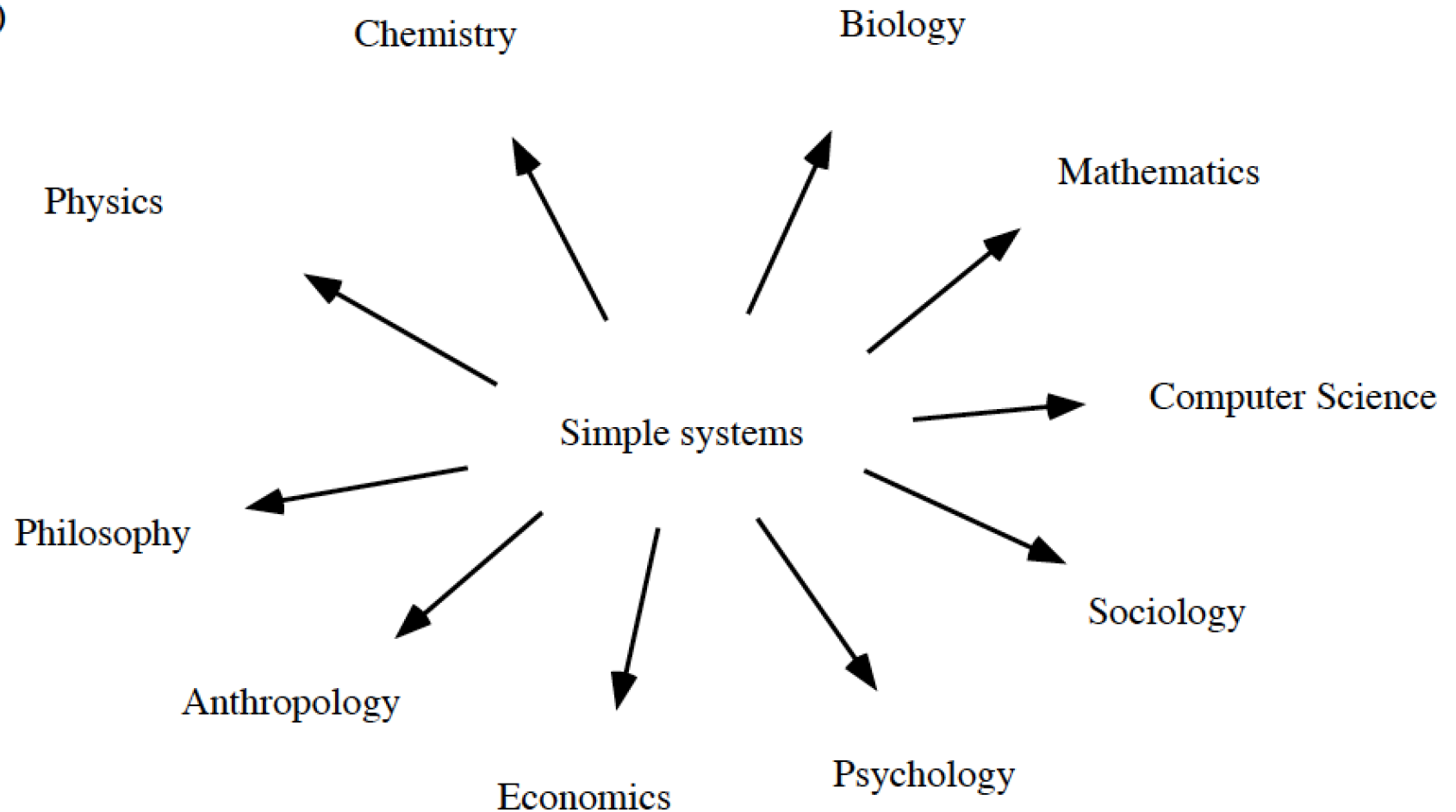
Sistemas Complexos

- ▶ “A dictionary definition of the word ‘complex’ is: ‘**consisting of interconnected or interwoven parts.**’ Why is the nature of a complex system inherently related to its parts? **Simple systems are also formed out of parts.** To explain the difference between simple and complex systems, the terms ‘interconnected’ or ‘interwoven’ are somehow essential. Qualitatively, to understand the behavior of a complex system **we must understand not only the behavior of the parts but how they act together to form the behavior of the whole.**”
 - ▶ Bar-Yam Yaneer (2003) “Dynamics of Complex Systems”, Westview Press.



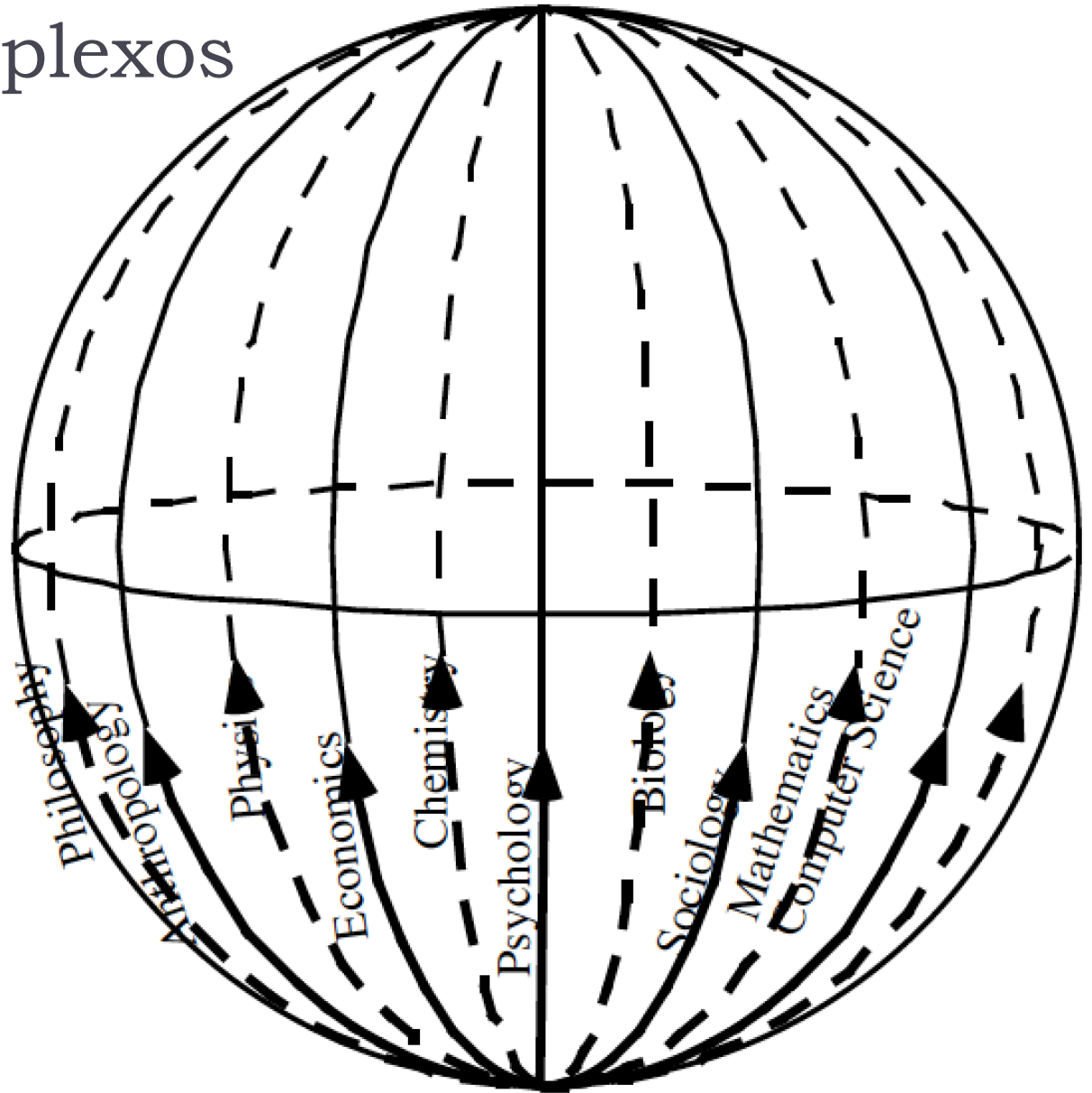
Sistemas Simples

a)



Complex systems

Sistemas Complexos



Simple systems

Sistemas Complexos



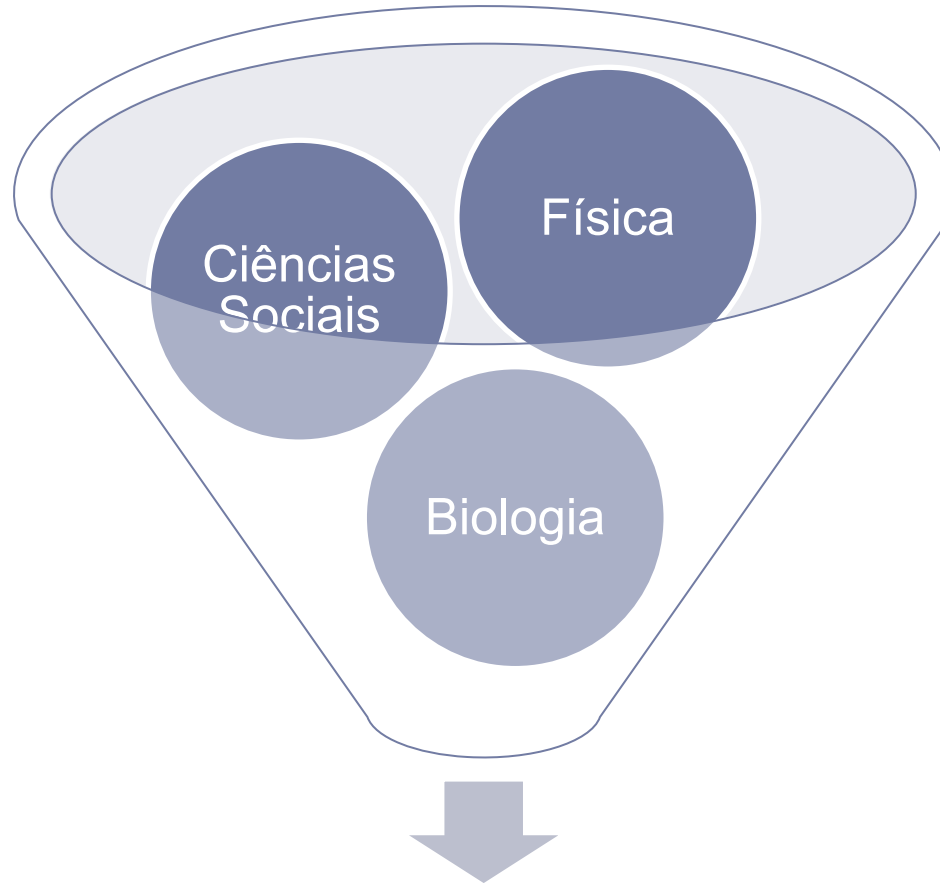
Sistemas Complexos

- ▶ Principais propriedades de um sistema complexo
 - ▶ Elementos que o compõe
 - ▶ Forma de interação entre os elementos

- ▶ Exemplo: Sistema nervoso (redes de neurônios)
 - ▶ Unidades (elementos): *neurônios*
 - ▶ Interação: *conexões sinápticas*
 - ▶ Formação da rede: *aprendizagem*



Sistemas Complexos



Modelos Complexos



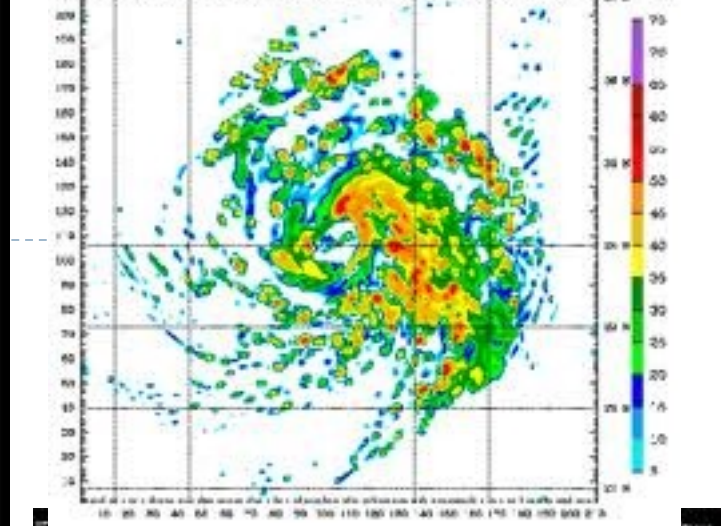
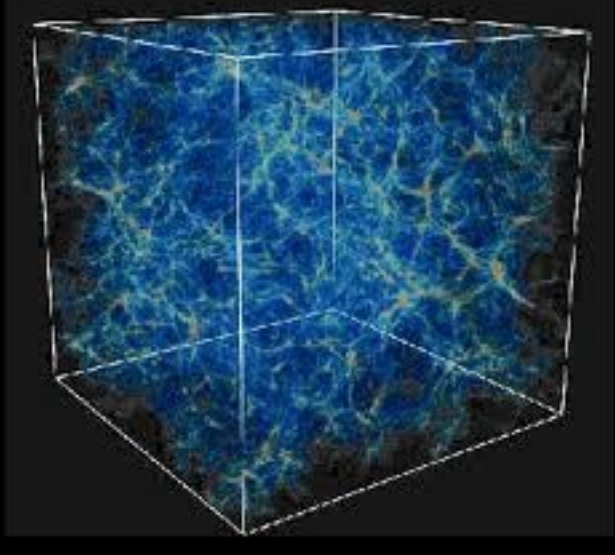
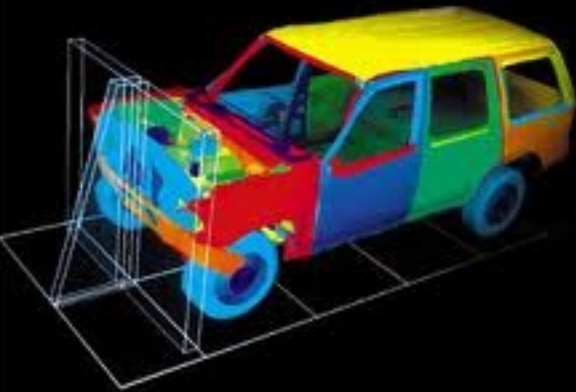
Estudo de Sistemas Complexos

- ▶ Extração das propriedades gerais do sistema
 - ▶ Modelo específico → Sistema complexo
- ▶ Modelagem Matemática
- ▶ Estudo analítico do modelo (complicado, modelos geralmente não-lineares)
- ▶ Como estudar tais sistemas?
 - ▶ Sem o reducionismo (precisamos estudar as partes no contexto global do problema)
 - ▶ Modelos não-lineares ('inexistência' de soluções analíticas)
 - ▶ Muitos parâmetros (não podemos simplificar tanto!)

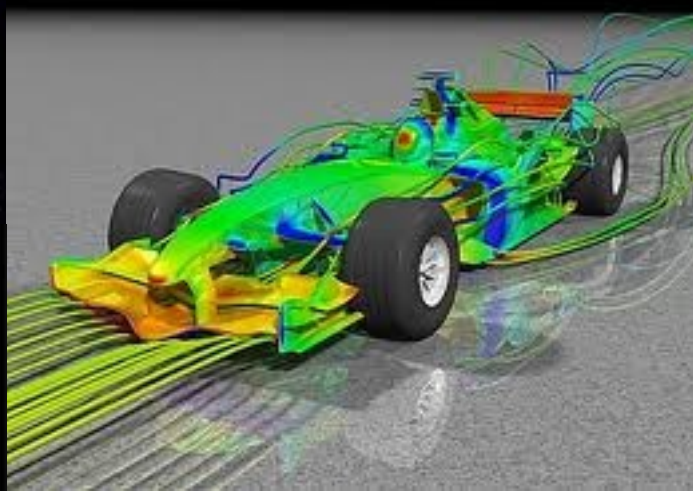
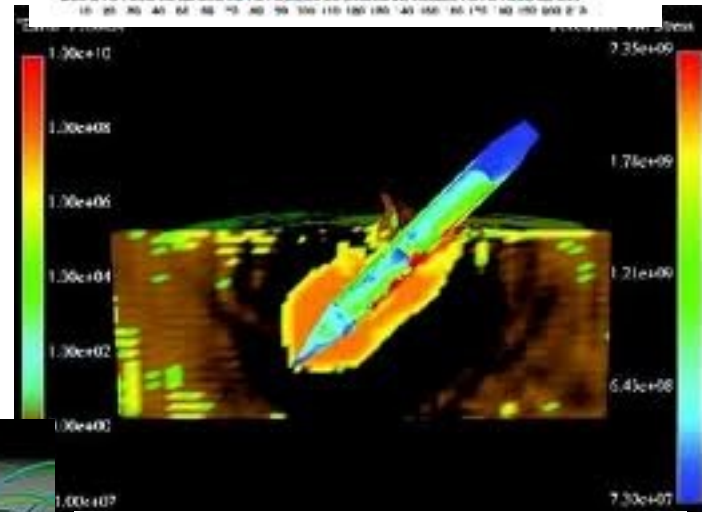


Simulação Computacional

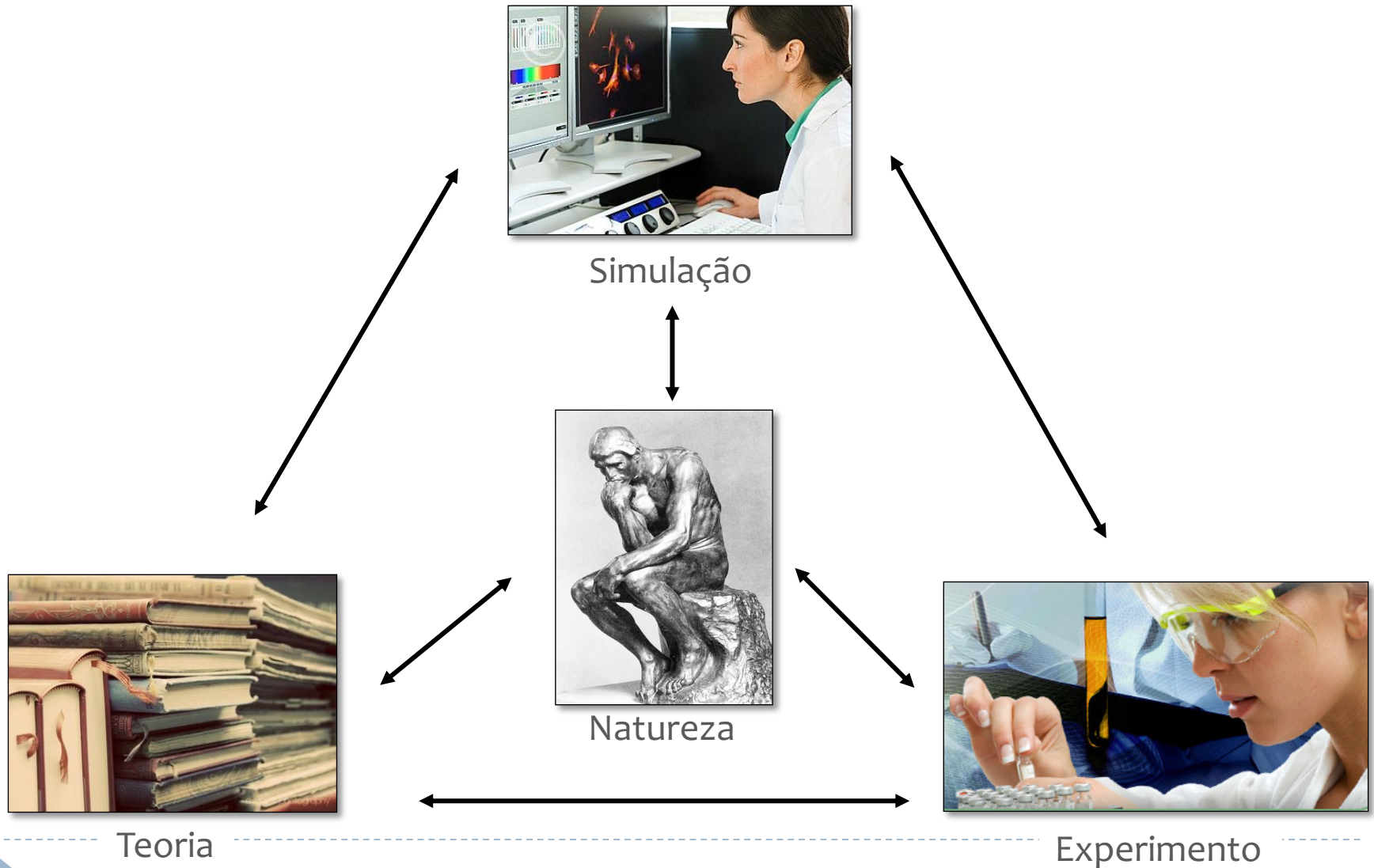
Eis uma possível solução.....



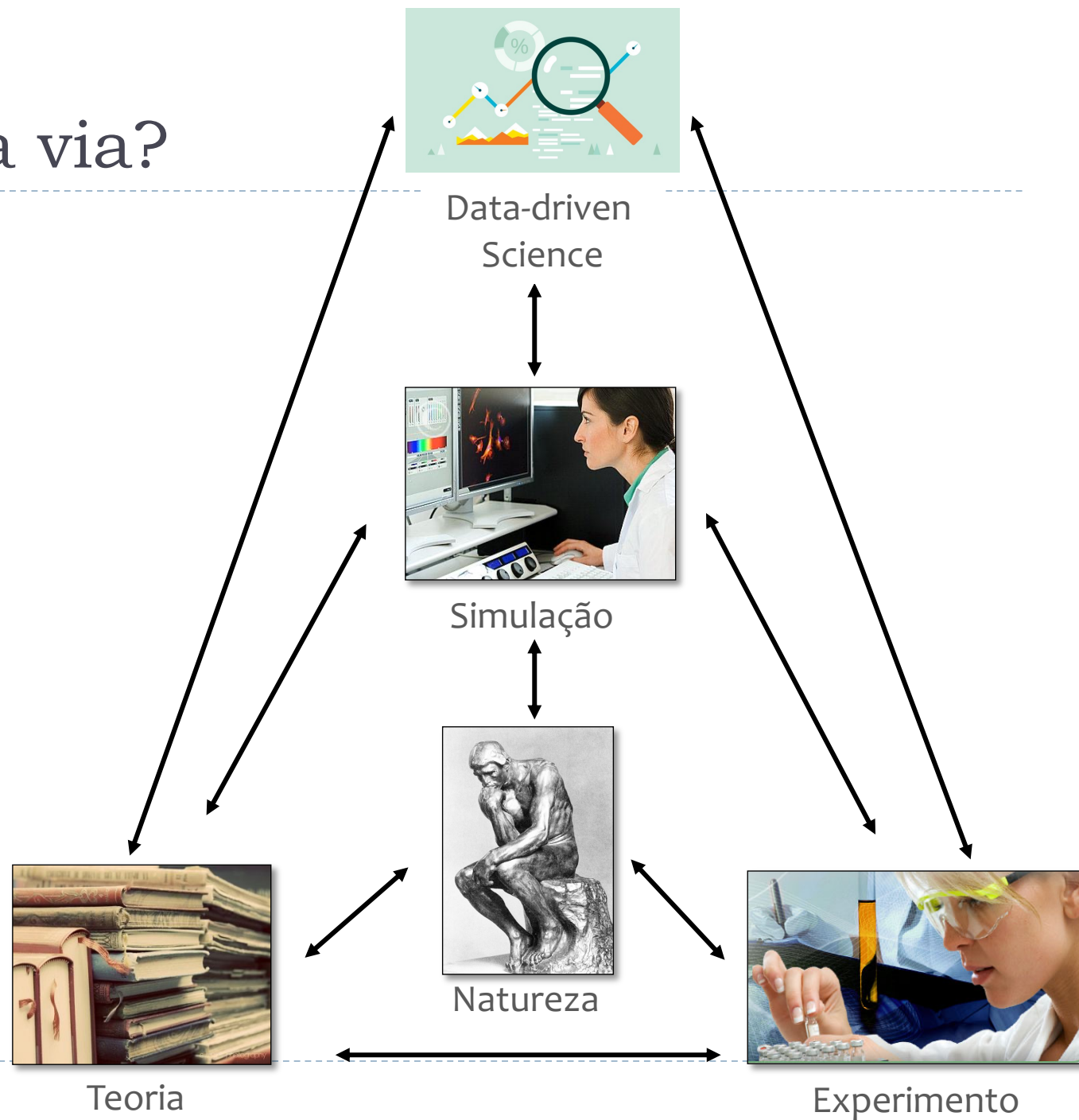
Simulação Computacional



O que é Simulação Computacional?



E a quarta via?



Simulação: Onde se aplica?

Ciências Sociais

Física

Geografia

Medicina

Química

Engenharias

Matemática

Biologia

Outras mais...



Simulação Computacional

- ▶ Modelos Complexos → Soluções Analíticas Complexas ou inexistentes
- ▶ Métodos computacionais usados para produzir respostas **aproximadas, porém precisas**, do problema em estudo



Áreas Relacionadas



Sobre essa disciplina

- *A **computação** como ferramenta integradora*
- *O profissional da Computação tem sido considerado por muitos como uma espécie de agente integrador das Ciências*



Computação

- ▶ Exemplificando o uso da computação em uma tarefa simples e comum:
 - ▶ Análise numérica de um *sistema de equações lineares*



Sistema de Equações Lineares

- ▶ Seja o sistema:

- ▶ $2x+3y = 18$

- ▶ $x-y=4$

- ▶ É fácil encontrar a solução analítica: $x=6$ e $y=2$

- ▶ O que acontece se o número de equações simultâneas for bem maior que 2?

- ▶ Nesse caso, o uso de computadores para resolver o problema se torna bastante interessante.



Computação pode fazer ainda mais!

- ▶ Manipulação Simbólica
- ▶ Visualização de dados
- ▶ Mineração de dados
- ▶ Simulações de Modelos Complexos



Simulação Computacional

- ▶ Por que a simulação computacional tem se tornado tão importante?
 - ▶ Soluções analíticas para problemas lineares → problemas reais não-lineares
 - ▶ Problemas reais com muitos graus de liberdade, muitas variáveis

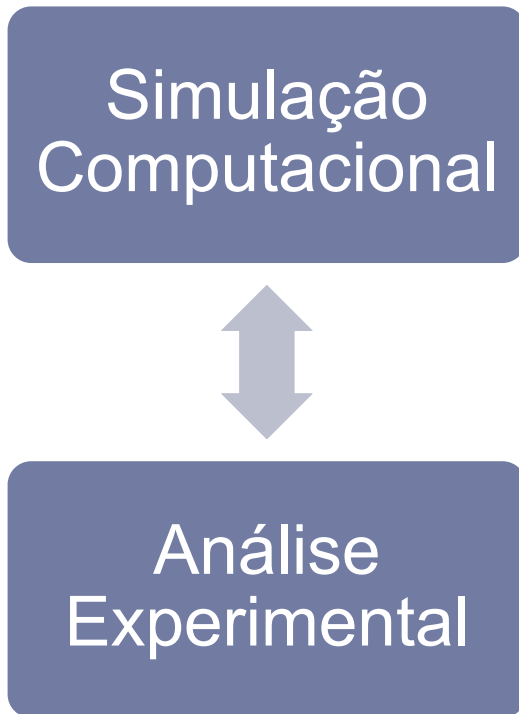


Simulação Computacional: analogia

Laboratory experiment	Computer simulation
sample	model
physical apparatus	computer program
calibration	testing of program
measurement	computation
data analysis	data analysis



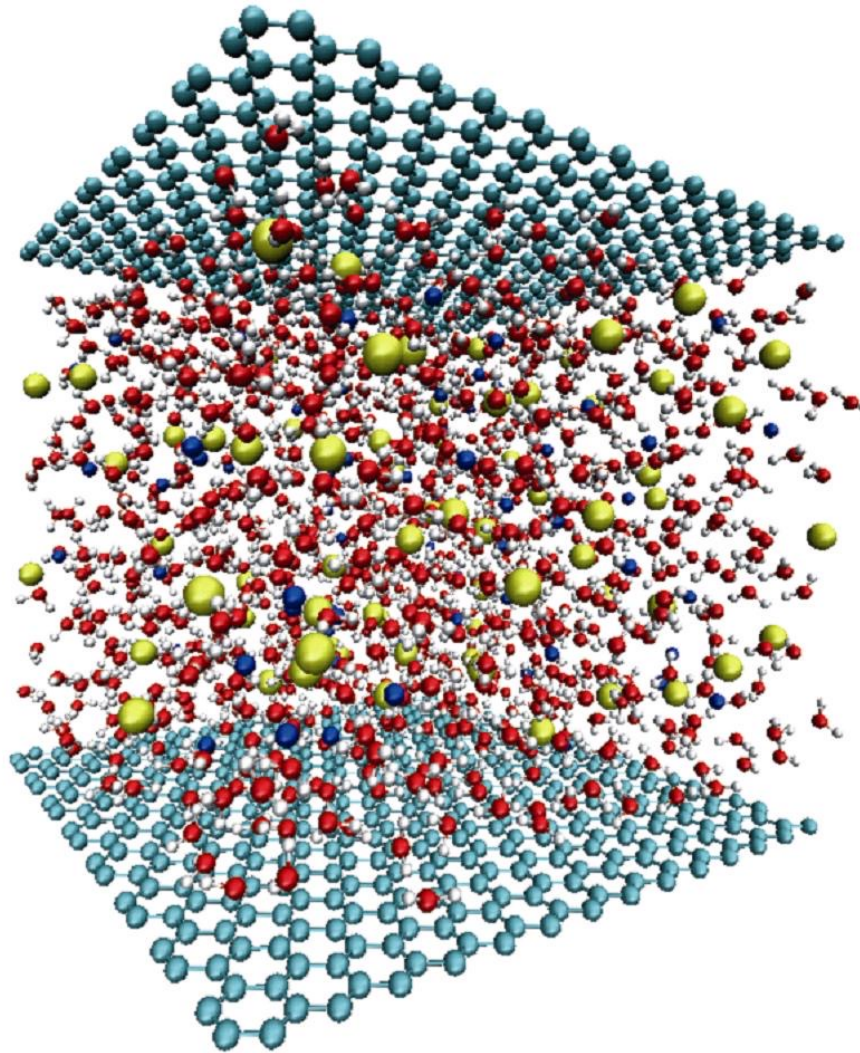
Simulação Computacional



- ▶ Simulações podem servir como uma ponte entre o ambiente experimental e os resultados teóricos
- ▶ Simulação de modelos idealizados sem a contrapartida experimental
- ▶ Simulações mais realistas do que modelos teóricos
- ▶ Entendimento do fenômeno simulado auxiliando o desenvolvimento de novas teorias



Simulação Computacional



Simulação de Sistemas Complexos

▶ Resumo:

- ▶ Sistemas complexos
 - ▶ São compostos por várias partes interligadas
- ▶ Simulação computacional
 - ▶ Permite a análise de sistemas complexos (não-lineares)

▶ Como representar tais sistemas?

- ▶ Suas partes
- ▶ Suas interconexões

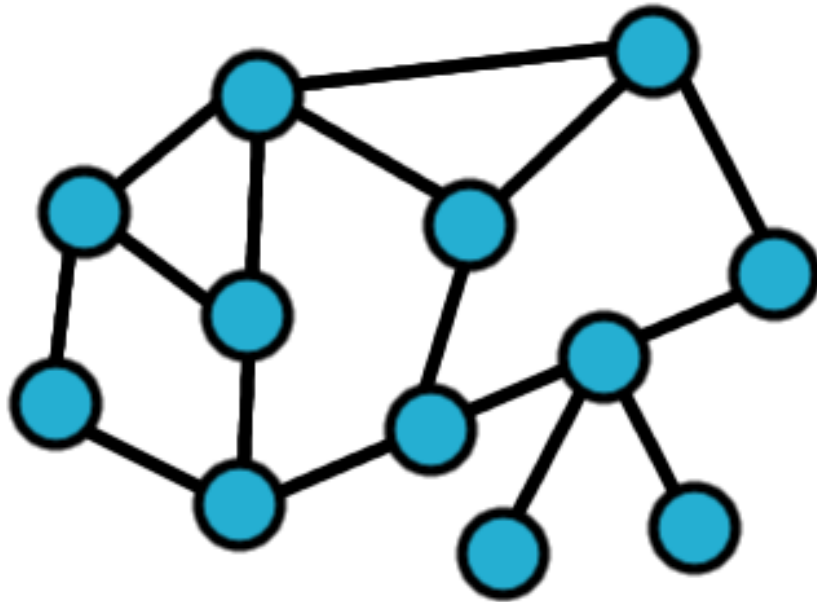


Redes Complexas

Representação abstrata do problema

O Que é uma Rede?

- ▶ Definição básica: conjunto de pontos interligados conexões



- ▶ Em computação e matemática as **redes** também são denominadas **grafos**

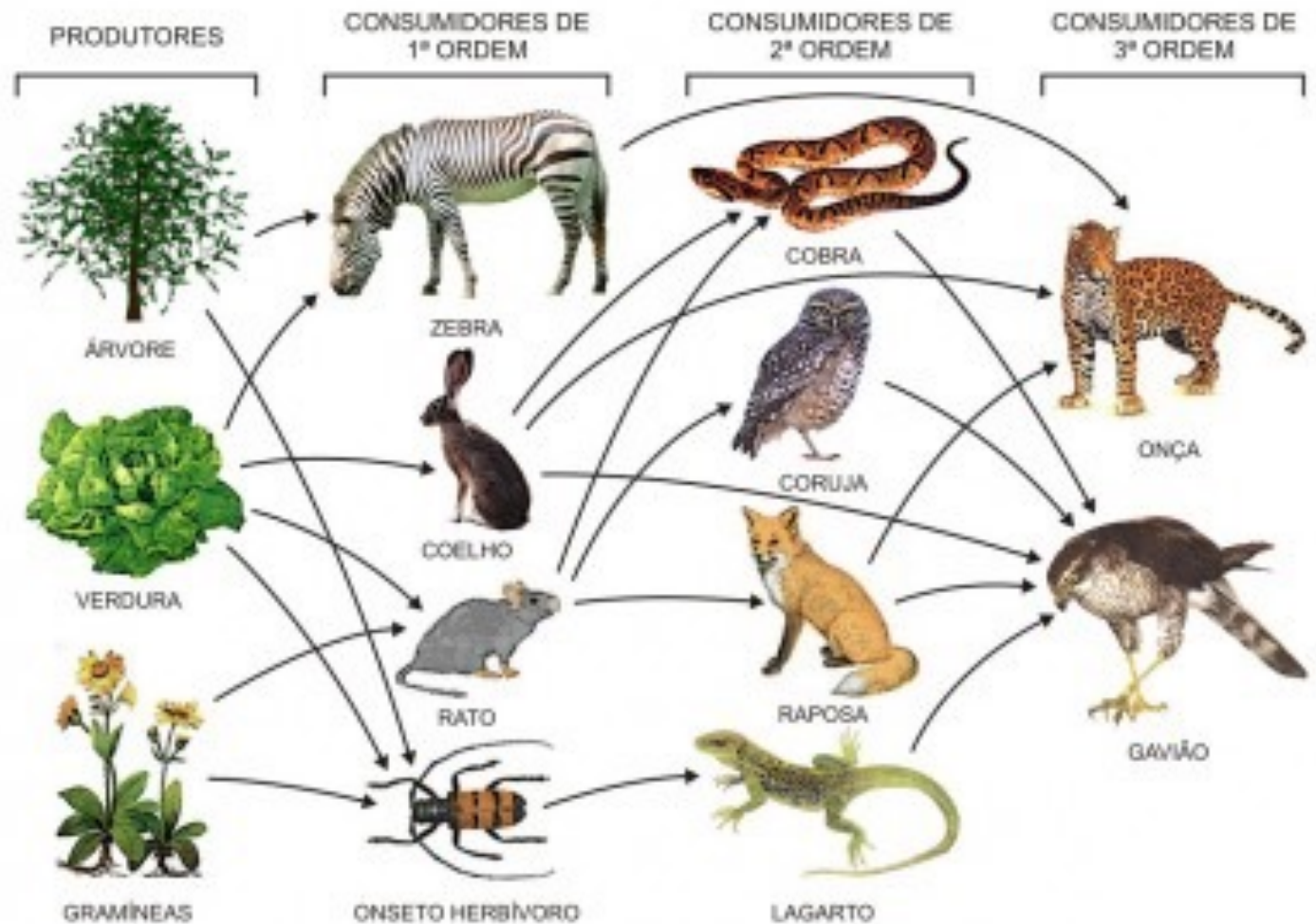


Redes: representação abstrata

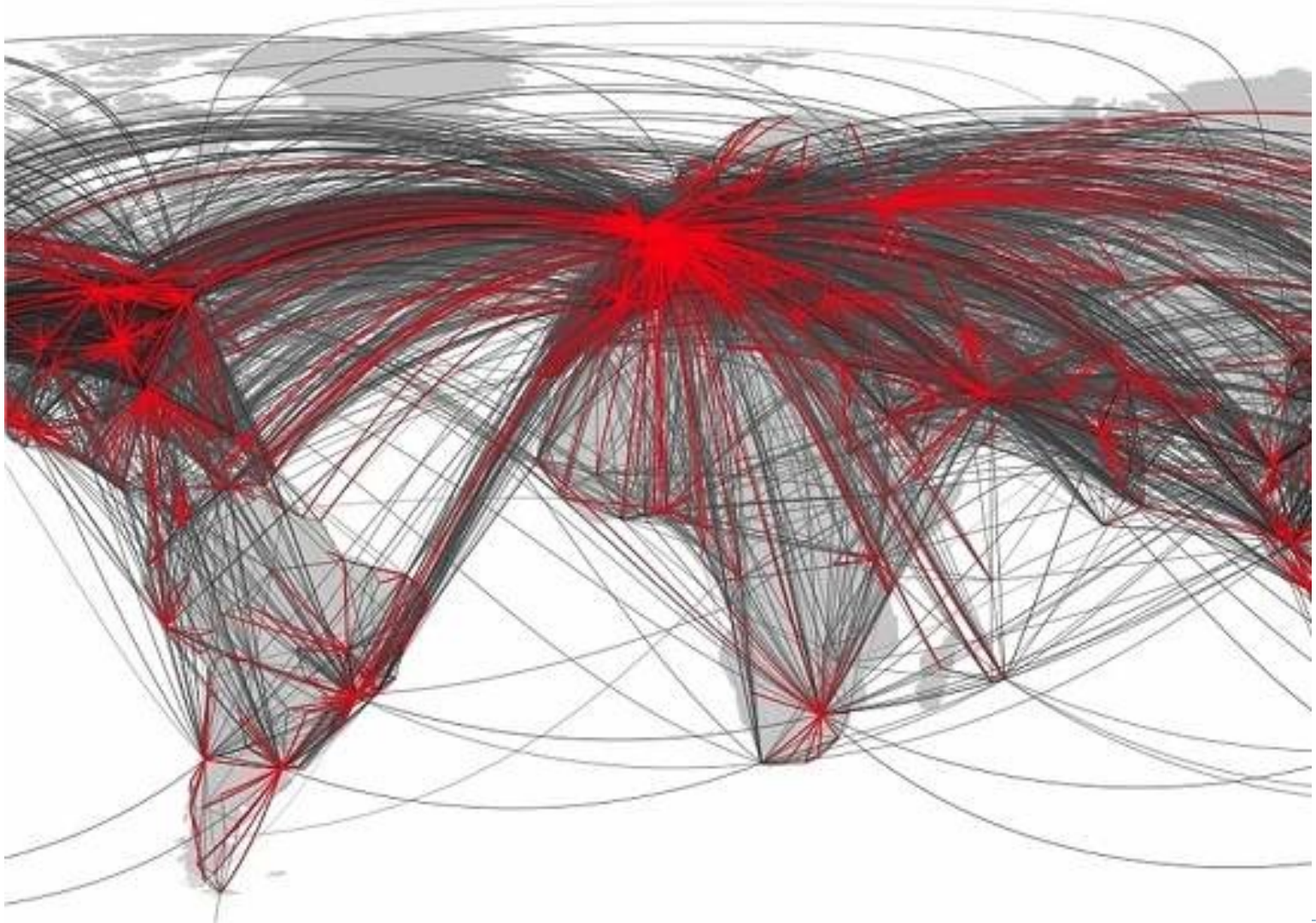
- ▶ Permite abstrair a representação de objetos e suas ligações
- ▶ **Objetos:** pessoas, compostos químicos, espécies, cidades, sites, etc.
- ▶ **Ligações:** amizade, reações, relações alimentares, estradas, links, etc.

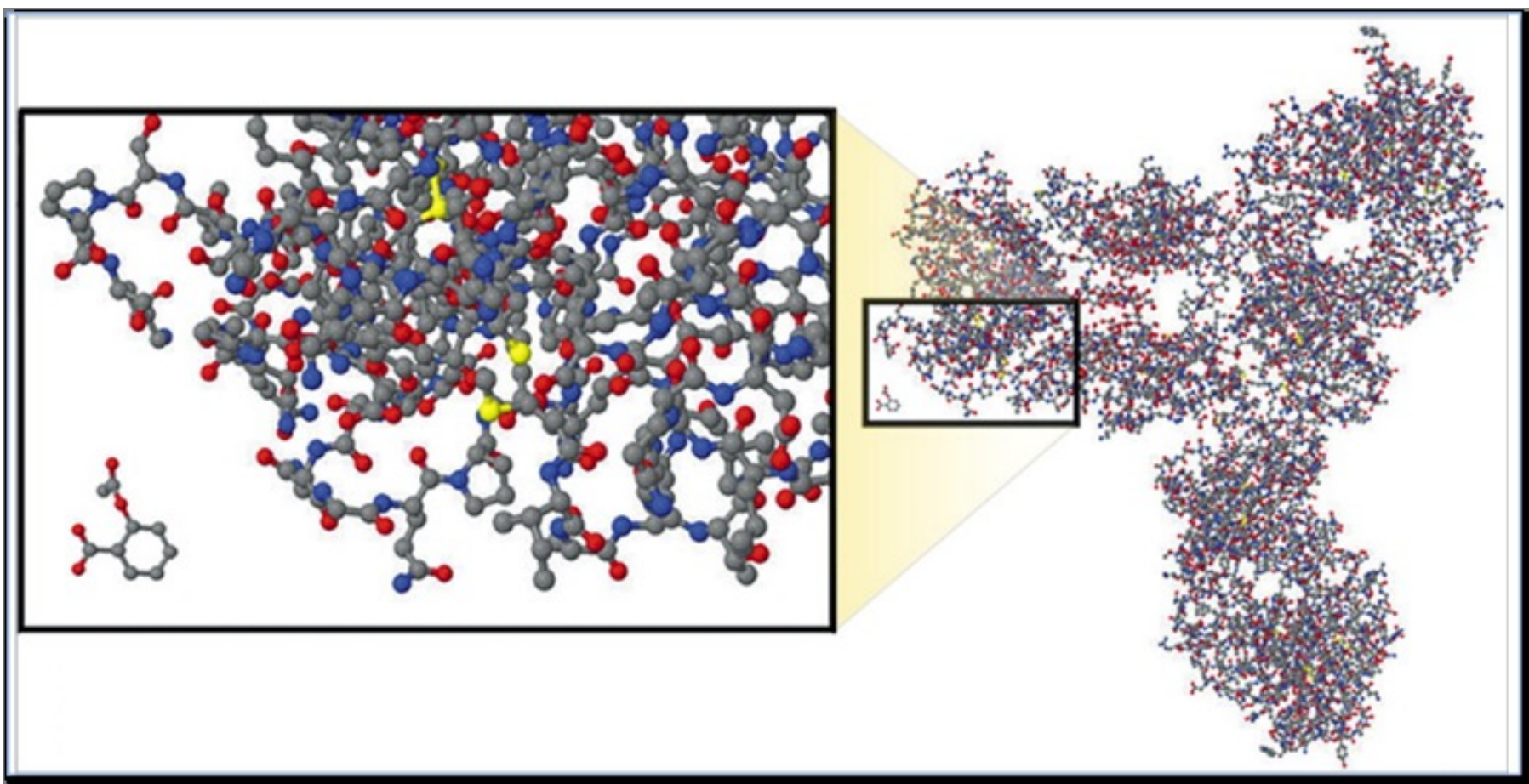


Exemplo 1



Exemplo 2

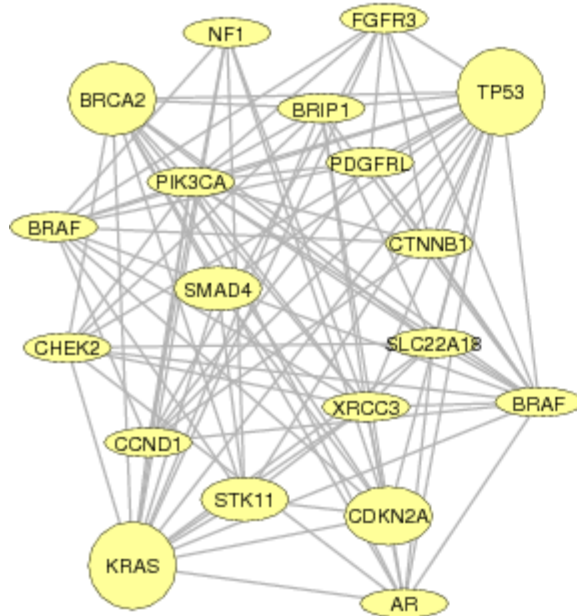




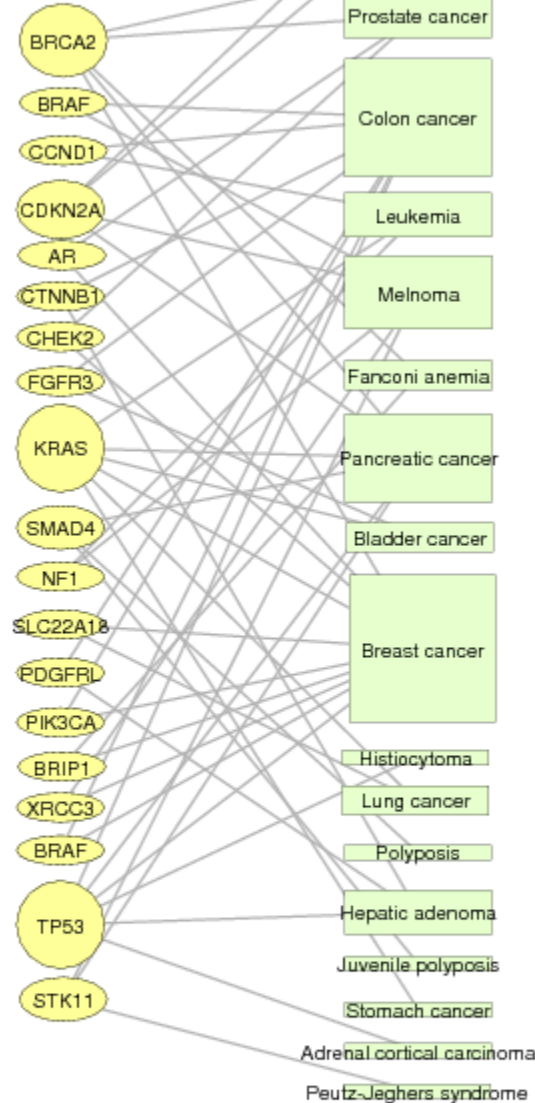
DISEASOME

PHENOME

GENOME



**Gene
network**



**Disease
network**

Estrutura e função: *Redes Complexas*



- ▶ Identificação de estruturas
- ▶ Qual a importância da estrutura?
- ▶ Como essas surgem e evoluem?
- ▶ Estrutura vs. função

- ▶ **Questão importante:**
- ▶ Redes distintas → propriedades similares



Bom, o que faremos?

Nossas aulas

1. Apresentação de um problema (física, biologia, etc.);
2. Discussão sobre o problema
 1. Elementos do sistema e suas relações
 2. Discreto vs. Contínuo
 3. Determinístico vs. Estocástico
3. Modelagem computacional do problema
4. Simulação
5. Confecção do relatório
6. Algumas apresentações de resultados



Projetos (2022)

1. Dinâmica de um projétil (1)
2. Modelagem Neural (1)
3. Rede Trófica (2)
4. Transmissão em Rede (2)
5. SIR (1)
6. SIR em Redes (2)

Obs. Poderá haver alterações ao longo do semestre



Bibliografia

- ▶ Não teremos livro texto específico
- ▶ Materiais serão fornecidos conforme a necessidade do problema tratado



Iniciação Científica

Aprendizado de Máquina em Ciências de Materiais

Projeto Financiado pela Shell/Fapesp

2 bolsas disponíveis: 12 x R\$ 1328,68

Requisitos:

Programação em Python

Noções de Aprendizado de Máquina

Inglês / Bom histórico escolar

Site Projeto: <https://www.cine.org.br/>

Site Grupo: <https://cidag.github.io/>



Alguns Vídeos

Divulgação CINE/SHELL:

<https://www.youtube.com/watch?v=DweW7utliBU>

Palestra ML in MS (Prof. Quiles):

<https://www.youtube.com/watch?v=LJqviaEhZM4>

Palestra Data-Driven em MS (Prof. Aron Walsh)

<https://www.youtube.com/watch?v=42fO3uhyE5M>

