MODELAGEM:
ABSTRAÇÃO, SEGUNDA ETAPA - A IDEIA GERAL[1]

PARA ONDE VAMOS

Até agora, temos tratado principalmente da modelagem de populações, fazendo isso por meio de modelos de tempo discreto. Nesses modelos, assumimos, seja pela simplicidade ou por razões estruturais, que faz sentido falar sobre o estado do sistema em apenas alguns instantes de tempo (pontos discretos de tempo).

Para fazer isso, temos utilizado basicamente duas ferramentas: os *diagramas de estoques e fluxos* (representam qualitativamente nossa compreensão das quantidades que estamos monitorando e como elas se modificam no tempo) e *equações a diferenças* (representam o modelo mais quantitativamente).

Também trabalhamos na implementação dos modelos usando Python. Começamos a validar modelos – principalmente comparando nosso modelo com os dados reais e usando um pouco de bom senso.

Agora, vamos começar mais uma iteração do processo de modelagem. Você vai ver algumas coisas novas nesta segunda etapa:

• Começaremos a lidar com modelos de tempo contínuo - modelos em que assumimos que o sistema está em constante evolução no tempo, e nos quais somos capazes, em princípio, de investigar o estado do sistema em qualquer momento.

• Começaremos a olhar para outros sistemas diferentes de populações (sim, sabemos que sentirão saudades dos tubarões!): inicialmente, sistemas térmicos, e, logo depois, sistemas fisiológicos.

• Veremos uma nova ferramenta matemática: as equações diferenciais.

• Aprenderemos novas abordagens de implementação para equações diferenciais, tanto analíticas como numéricas.

• Introduziremos algumas novas ideias de validação, como comportamento limite.

• Começaremos a pensar em como sofisticar mais o trabalho que pode ser feito com os modelos, tanto através da introdução de modelos de parâmetros concentrados, como trabalhando com figuras de mérito.

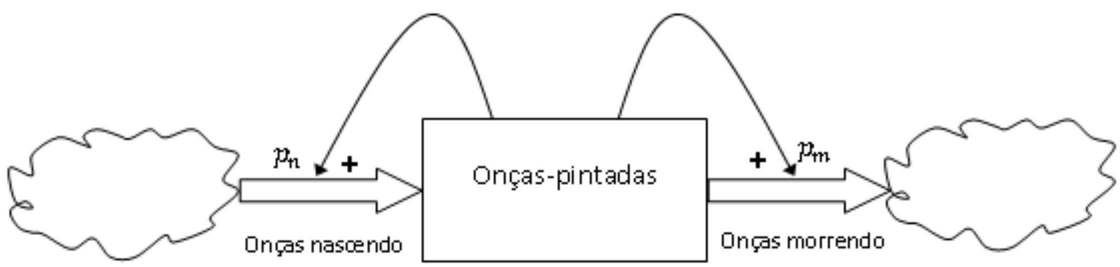
[1] Baseado no texto original “Abstraction, Act 2” de Mark Somerville, Olin College (2014).

• E, mais importante, estudaremos sistemas que se comportam de acordo com as leis da Física. Para determinar o comportamento de uma função no seu modelo, você agora poderá contar com modelos físicos validados (tais como modelos para radiação solar ou perda de calor através das paredes).

Ao mesmo tempo, nosso velho amigo, o diagrama de estoques e fluxos ainda estará conosco, e retomaremos as *equações a diferenças* para nos ajudar a dar sentido às *equações diferenciais*. Veja que, nesta segunda etapa, não será tudo realmente novo...

Equações Diferenciais e Diagramas de Estoques e Fluxos: O Primeiro Encontro

Como você se lembra da primeira parte do curso, podemos usar diagramas de estoques e fluxos para abstrair um sistema físico - ou seja, expressar nossas ideias sobre como um sistema físico funciona. Ao estudar as onças-pintadas, por exemplo, elaboramos o seguinte diagrama de estoques e fluxos:



E interpretamos o diagrama de E&F da seguinte forma:

• Há um certo número de onças-pintadas no parque.

• Ao longo do tempo, o número de onças-pintadas pode mudar devido a dois processos: nascimento e morte.

• O número de onças-pintadas nascidas a cada ano é proporcional ao número de onças-pintadas vivas atualmente.

• O número de onças-pintadas que morrem todos os anos também é proporcional ao número de onças-pintadas vivas atualmente.

Em seguida, criamos uma abstração mais formal, dada pelas equações a diferenças. Modelamos a população de onças-pintadas no ano *t + 1,* O_{t+1},[2] em função da população no ano *t*:

$$\begin{cases} O_{t+1} = O_t + [p_n - p_m] \cdot O_t & (1) \\ O_0 = O_{inicial} \end{cases}$$

Em palavras:

> A variação líquida (crescimento vegetativo) da população de onças-pintadas no decorrer do ano é proporcional à população de onças-pintadas atual. A constante de proporcionalidade é $p_n - p_m$, a qual podemos pensar como o crescimento vegetativo, dado em onças-pintadas por onças-pintadas, por passo (intervalo de tempo adotado). A população inicial de onças-pintadas (no ano 0) é $O_{inicial}$.

No segundo projeto, vamos usar uma ferramenta matemática parecida, mas um pouco diferente, para modelar o fluxo de estoques: as *equações diferenciais*. Como as equações a diferenças, você pode relacionar as equações diferenciais diretamente aos estoques e fluxos: um *fluxo* é algo que faz com que um estoque mude, de modo que a taxa total de variação de um determinado estoque deve depender dos fluxos ligados a ele. Em geral, se você está traduzindo um diagrama de estoques e fluxos para uma equação diferencial (ou vice-versa), **cada estoque deverá ter uma equação diferencial associada a ele, e essa equação deverá ter o mesmo número de contribuições que o total de fluxos de entrada e saída do estoque.**

Aqui vemos uma equação diferencial que é análoga a (1):

$$\begin{cases} \dfrac{dO(t)}{dt} = (p_n - p_m) \cdot O(t) & (2) \\ O_0 = O_{inicial} \end{cases}$$

Em palavras:

> A taxa a qual população de onças-pintadas está mudando atualmente é proporcional à população de onças-pintadas atual. A constante de proporcionalidade é p_n - p_m, que agora tem unidades de onças-pintadas por onças-pintadas por ano (observe a aparentemente pequena mudança nas unidades - isso é importante!). A população de onças-pintadas inicial (no tempo t = 0) é dada por $O_{inicial}$.

---

[2] Fizemos aqui uma mudança na notação bem marota... Na primeira parte do curso, foi utilizado *O(t)* para se referir ao número de onças-pintadas no ano t. Esta escolha de notação foi feita a fim de tornar mais clara a conexão entre a Matemática e a linguagem Python. Agora, mudamos o índice do intervalo para o sobrescrito, porque queremos fazer uma distinção entre a lista de números que representam as populações de onças-pintadas num determinado momento em cada ano, e a função *contínua* no tempo *O(t),* que representa o número de onças pintadas em qualquer instante *t*. Desculpem-nos pela artimanha na notação!

Tanto (1) quanto (2) são chamados de **problemas de valor inicial ou PVI's**. Isto significa que um valor inicial foi dado junto com as equações (diferenciais ou a diferenças), indicando-nos como transformar o passado no presente e o presente no futuro.

Os dois modelos (1) e (2) são bastante semelhantes. De fato, há apenas uma diferença entre eles: nós especificamos uma variação líquida ao longo de um período de tempo em (1) (equivalente a uma taxa de variação média), enquanto em (2) especificamos uma taxa de variação instantânea.

Uma maneira de ver quão intimamente relacionados estão estes dois modelos é reescrever (1), mas escolher as unidades para que o intervalo de tempo seja explícito[3]:

$$O(t+\Delta t) = O(t) + [p_n - p_m] \cdot \Delta t \cdot O(t) \tag{3}$$

Fazendo alguns cálculos algébricos, temos:[4]

$$\frac{O(t+\Delta t) - O(t)}{\Delta t} = [p_n - p_m] \cdot O(t) \tag{4}$$

Para chegar à taxa de variação instantânea, devemos tomar Δt bem pequeno. Matematicamente, isto quer dizer fazer Δt tender a zero, ou seja $\Delta t \to 0$:

$$\lim_{\Delta t \to 0} \frac{O(t+\Delta t) - O(t)}{\Delta t} = \frac{dO(t)}{dt}$$

Observe que o resultado obtido é, novamente, a equação (2).

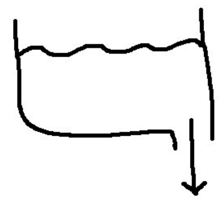
UM SEGUNDO EXEMPLO: O PROBLEMA DA BANHEIRA

Vamos analisar um segundo exemplo que nos permitirá ligar uma situação física simples a um diagrama de estoques e fluxos, o qual podemos usar, por sua vez, para desenvolver uma equação diferencial.

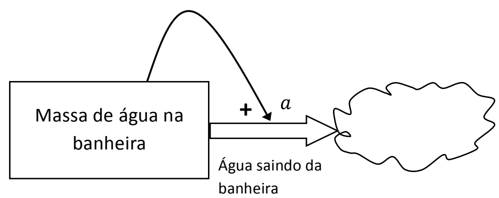
Imagine uma banheira cheia de água (certamente não esperamos que você faça o experimento nestes dias de seca; a não ser que reutilize a água para lavar o quintal). Não tem água entrando na banheira, mas uma parte da água sai por um dreno no fundo dela, como mostrado a seguir.

[3] Enquanto $p_n - p_m$ em (1) tem unidades de onça-pintada por onça-pintada por passo de tempo, que é adimensional, $p_n - p_m$ em (3) possui unidades de onça-pintada por onça-pintada por unidade de tempo, que resulta na unidade de tempo^{-1}.

[4] Lembre que $t + 1 = t + \Delta t$



Gostaríamos de monitorar a taxa de variação da água na banheira ao longo do tempo. Vamos começar com um diagrama de estoques e fluxos.



Note que escolhemos monitorar a *massa* de água na banheira. Poderíamos muito bem ter monitorado o volume de água, mas, por enquanto, será a massa. O diagrama de estoques e fluxos mostra um estoque (a massa de água na banheira) e um fluxo (a taxa de água deixando a banheira através do dreno). A taxa de água que sai através do dreno depende da quantidade de água na banheira[5]. A equação de Bernoulli, que traduz uma lei física, fornece os detalhes desta relação. Por enquanto, porém, vamos apenas dizer que o fluxo de saída é proporcional à massa de água na banheira, chamando a constante de proporcionalidade de a.

Se quiséssemos escrever uma equação a diferenças a partir deste diagrama de estoque e fluxo, ela ficaria assim:

$$m(t+1) = m(t) - a \cdot m(t)$$

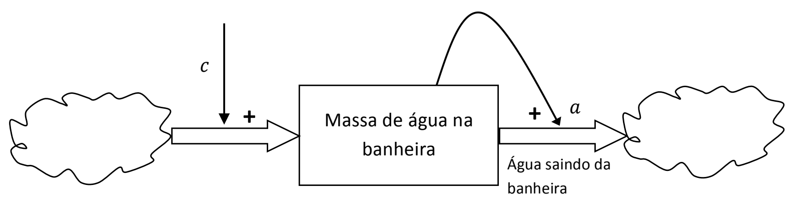
Isto diz simplesmente que a massa de água na banheira no instante $t + 1$ é igual à massa de água no instante t menos o volume de água que sai da banheira durante esse intervalo de tempo. Se tivéssemos de continuar nossa análise utilizando a equação a diferenças, que passo iríamos a escolher? Poderíamos olhar para o estado do sistema a cada 10 segundos, mas isso faz muito mais sentido quando estamos lidando com um estoque discreto, que podemos parar e contar (ou seja, sete lobos, 100 turmas do ensino fundamental, 800 tubarões). Como os nossos fluxos não são quantidades discretas de estoque (ou seja, 4 alces / ano), faz mais sentido usar um modelo contínuo. Aqui é onde as equações diferenciais entram. Podemos resolver uma equação diferencial para estudar a quantidade de água na banheira a

[5] pense sobre isto por uns minutos para se certificar de que faz sentido para você intuitivamente. Tem algo a ver com hidrostática. Pode ver http://www.youtube.com/watch?v=2tBWfqKA0Tk para um exemplo físico.

qualquer momento, e não apenas a cada 10 segundos. Mas estamos adiantando as coisas... Vamos escrever a equação diferencial[6] e ver o que ela nos diz:

$$\frac{dm}{dt} = -a \cdot m(t)$$

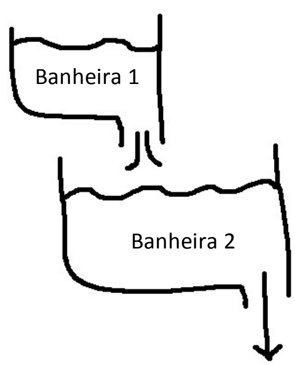
A equação diferencial nos diz que a taxa de variação da massa na banheira por unidade de tempo é igual à taxa de saída da água da banheira. E se complicássemos um pouco as coisas, ligando a torneira para que água fosse adicionada a uma taxa constante, c [kg/s], para a banheira? Bem, nós poderíamos apenas modificar o nosso diagrama de estoques e fluxos:

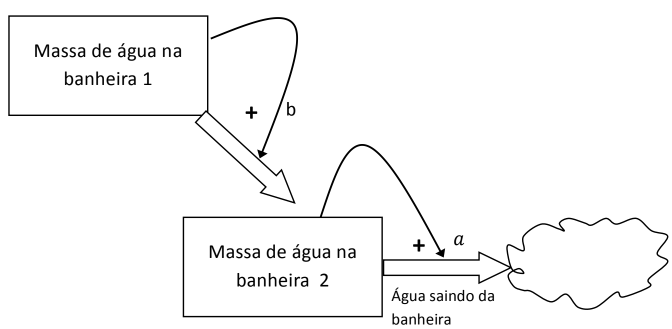


E adicionamos o termo extra à nossa equação diferencial:

$$\frac{dm}{dt} = c - a \cdot m(t)$$

Finalmente, se desejássemos criar um sistema com dois estoques, poderíamos acrescentar uma outra banheira de água desaguando na nossa banheira original, da seguinte forma:





Escrevemos, então, um sistema de equações diferenciais (um para cada estoque):

$$\frac{dm_1}{dt} = -b \cdot m_1(t)$$

$$\frac{dm_2}{dt} = b \cdot m_1(t) - a \cdot m_2(t)$$

[6] Pode ajudar lembrar que $\frac{dm}{dt} \backsimeq \frac{m(t+1)-m(t)}{\Delta t}$

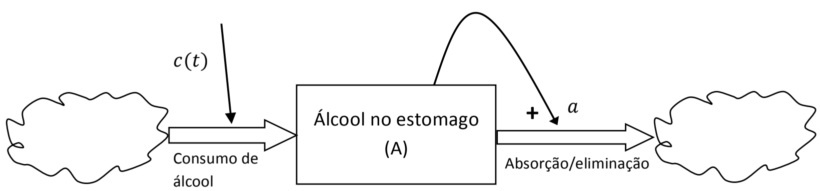
UM TERCEIRO EXEMPLO: SISTEMAS FARMACOCINÉTICOS

Quando você toma uma droga, seja uma aspirina ou cocaína, um conjunto diverso de eventos acontecem em seu corpo. A droga se desloca pelo seu organismo, e é gradualmente degradada e/ou eliminada do seu sistema; e seu corpo reage de diferentes maneiras à presença da droga. A *farmacocinética* lida com a questão de como as drogas se movem através do corpo (quanto tempo o Tylenol permanece em seu estômago, seu sangue, etc.), enquanto a *farmacodinâmica* lida com a questão de como seu corpo reage à droga.

Embora haja uma variedade de abordagens para a modelagem da farmacocinética, uma bem atraente é tentar construir um modelo baseado na fisiologia, ou seja, que monitora quanta droga está em cada parte do organismo. Tal modelo certamente se presta a um diagrama de estoques e fluxos: pode-se monitorar a quantidade da droga no estômago, no intestino delgado, na sangue, etc.

O MODELO FARMACOCINÉTICO MAIS COMUM: O COMPORTAMENTO DE PRIMEIRA ORDEM

Por uma variedade de razões, muitos processos biológicos de eliminação podem ser modelados como processos de primeira ordem - ou seja, a magnitude do fluxo é diretamente proporcional ao estoque. Assim, se você fosse modelar a quantidade de álcool no estômago de alguém ao longo de uma noite em um bar, você poderia desenhar um diagrama de E&F como este:



Aqui, o fluxo para o estômago, *c(t)*, é o consumo de álcool da pessoa como uma função do tempo, e *a* é a constante de eliminação. Quais são as unidades de *c(t)*? E de *a*?

O fluxo para fora do estômago é o processo de eliminação. A suposição do modelo de que o fluxo é controlado pela quantidade de álcool no estômago faz sentido físico para níveis baixo de consumo de álcool: se não houvesse álcool, não haveria nada para eliminar. Para níveis mais elevados de consumo, tal modelo pode ser menos adequado: se poderia imaginar, por exemplo, que há limites sobre quão rápido o álcool pode ser eliminado.

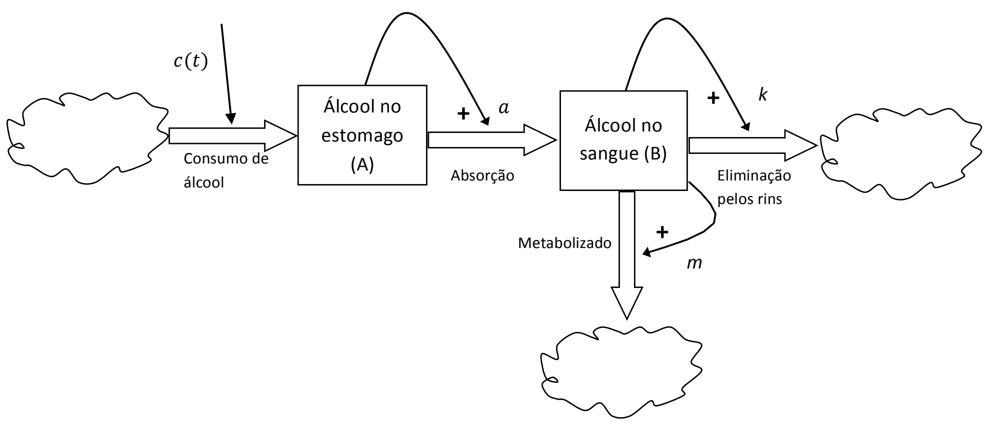
Correspondendo a este diagrama, temos a seguinte equação diferencial:

$$\frac{dA}{dt} = c(t) - a \cdot A,$$

que indica que a taxa de variação do estoque de álcool depende do fluxo de álcool devido a consumo, *c(t)*, e a taxa de eliminação do álcool, que é proporcional à quantidade de álcool que está no estômago, *A*. Note que isto é bastante análogo à equações a diferenças: você obtém uma equação a diferenças por estoque, e um termo adicional numa determinada equação a diferenças por fluxo.

COMPARTIMENTOS MÚLTIPLOS EM FARMACOCINÉTICA

Naturalmente, uma quantidade mais relevante do que a quantidade de álcool no estômago de um paciente pode ser o nível de álcool no seu sangue (CAS, concentração de álcool no sangue). Um modelo de estoques múltiplos poderia ser utilizado para representar a evolução temporal do CAS. Por exemplo, um possível modelo poderia ter esta aparência:



Este modelo está monitorando o álcool no estômago e no sangue; a transferência a partir do estômago para o sangue é modelado como um processo de primeira ordem. Uma vez que o álcool está no sangue, assumimos que ele pode ser removido por dois processos: ele pode ser metabolizado ou eliminado pelos rins. Para uma primeira versão do modelo, assumiremos que ambos são também processos de primeira ordem. Assim, as equações diferenciais para este modelo são

$$\frac{dA}{dt} = c(t) - a \cdot A$$

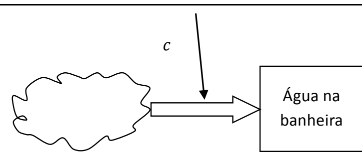
$$\frac{dB}{dt} = a \cdot A - k \cdot B - m \cdot B,$$

onde *A* é a quantidade de álcool no estômago, *B* é a quantidade de álcool no sangue, *c(t)* é a taxa de consumo de álcool, *a* é a constante de eliminação do estômago para o sangue, *m* é a constante do sangue para a metabolização, e *k* é a constante de eliminação do sangue para os rins.

PARANDO UM MOMENTO PARA REFLETIR

Em ModSim, temos usado diagramas de estoques e fluxos, equações a diferenças, e, a partir de agora, equações diferenciais. Nesta seção, faremos duas perguntas: (1) O que nos proporcionam estas diferentes representações? e (2) Como elas se relacionam umas com as outras?

A tabela a seguir é uma síntese que procura responder a essas questões.

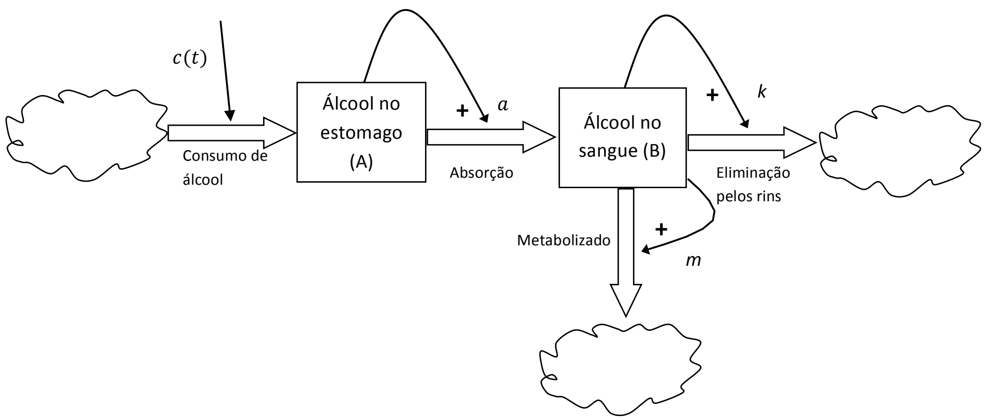
Tipo de representação	**Exemplo da Banheira**	**Vantagens**	**Desvantagens**
Estoques e Fluxos		Fácil para se conectar com o sistema físico; conservação é explícita; muito qualitativa	Muito qualitativa
Equação a Diferenças	$m(t+1) = m(t) + c$	Fácil de se implementar. Alto nível de formalidade. Rigorosa.	Inapropriada para sistemas contínuos, um pouco mais difíceis de interpretar
Equação Diferencial	$\frac{dm}{dt} = c$	Apropriada para sistemas contínuos. Alto nível de formalidade. Rigorosa.	Inapropriada para sistemas de tempo discretos, um pouco mais difíceis de interpretar

Engenharia
Modelagem e Simulação

EXERCÍCIOS

ÁLCOOL REVISITADO

Lembremos do segundo modelo de álcool:



$$\frac{dA}{dt} = c(t) - a \cdot A$$

$$\frac{dB}{dt} = a \cdot A - k \cdot B - m \cdot B$$

Por que são necessárias duas equações diferenciais? Por que a equação diferencial para A tem dois termos do lado direito, enquanto a equação diferencial para B tem três?

BALÃO!

Uma grande balão é ligado a uma fonte de ar comprimido que é usada para encher o balão através da sua entrada. Detecta-se que existe um pequeno furo no balão também. Isto pode ser representado pela seguinte equação diferencial:

$$\frac{dm}{dt} = \rho A_i V_i(m) - \rho A_f V_f(m)$$

Na equação acima, m é a massa de ar no balão, e ρAV é uma forma de expressar o fluxo de ar com uma determinada densidade do ar, ρ, através de uma entrada ou saída de área A, e a uma certa velocidade V. O índice i refere-se à entrada do balão e o subscrito f refere-se ao *furo*.

O que se pode concluir a partir da equação diferencial? Descreva, em palavras, o que é cada termo.

Desenhe, com a maior precisão possível, um diagrama de estoques e fluxos para este sistema. Certifique-se de colocar legendas em seu diagrama.