1.Modelos e simulação

Objectivos: *Explicar os objectivos e importância da Modelação e Simulação e dar exemplos ilustrativos*.

Referências: L. Ljung e T. Glad (1994). *Modeling of Dynamic Systems*. Prentice Hall Information and System Sciences Series, caps. 1 e 2.

Sistemas

Um sistema é um objecto ou uma colecção de objectos que interagem e cujas propriedades queremos estudar. Exemplos:

- Um campo de colectores solares para produção de energia
- A rede de distribuição de energia eléctrica em Portugal
- Uma máquina de papel
- Uma rede de comunicações
- Um servidor de uma rede de computadores
- Um paciente sujeito a anestesia
- A infecção pelo vírus HIV1 no corpo humano

Perguntas

A Engenharia (ou a mera mas nobre curiosidade humana) tenta responder a **questões** sobre estes e outros sistemas. Por exemplo:

- Como melhorar o desempenho da produção de energia no campo de colectores solares?
- Será que a rede de distribuição de energia é estável ou podem surgir oscilações de amplitude crescente?
- Como é possível ajustar as válvulas numa máquina de papel para produzir papel de "boa" qualidade?
- Como reage o corpo humano à administração de um fármaco anestésico?
- Quais os índices de desempenho de uma rede de computadores?

Experimentação

Muitas destas perguntas podem ser respondidas por *experimentação*: *Testar o sistema real e ver o que acontece*!

Uma actividade central das Ciências Naturais durante vários séculos (em particular desde o século XVI) consistiu em fazer perguntas apropriadas sobre as propriedades dos sistemas e respondê-las através da experimentação.

Esta é a base do Método Experimental que se baseia no ciclo:

- Observação
- Hipótese
- Experimentação

Embora baseado em sólidos princípios científicos, o método experimental tem limitações.

Por vezes é desadequado ou impossível realizar experiências. Razões:

- É muito **caro** (ex.: a realização de múltiplos testes arbitrários numa máquina de papel implica a produção de papel invendável)
- É excessivamente **perigoso** (ex.: treinar operadores de uma instalação nuclear para reagir a situações perigosas)
- O **sistema ainda não existe** (ex.: Ao projectar uma nova aeronave pretende-se avaliar o efeito de diferentes formas das asas nas propriedades aereodinâmicas).

Modelos

Um modelo de um sistema é um outro sistema, construído numa "tecnologia" mais simples e barata cujo comportamento (evolução no tempo) é uma imagem das variáveis que queremos estudar no sistema real.

- **Modelos analógicos** (ex.: modelos reduzidos de barragens)
- **Modelos matemáticos**: Sistemas de equações diferenciais ou de diferenças; modelos de acontecimentos discretos (e. g. Redes de Petri).

Modelos e simulação

Um modelo pode ser usado para avaliar como é que o sistema modelado reagiria em dadas circunstâncias.

Num modelo matemático relativamente simples, isso pode ser feito resolvendo analiticamente as equações que o constituem.

Em modelos mais complexos a solução analítica pode ser substituída pela solução numérica.

Como construir um modelo?

- **Modelação Física**: Aplicação das relações fundamentais da Física, da Química, da Termodinâmica, etc. (conservação da massa, conservação da energia, conservação do momento, leis de Kirchof, lei de Ohm, ...)
- **Identificação**: Ajuste de funções matemáticas (e. g. polinómios) ou de parâmetros de equações que descrevem as funções que queremos representar aos dados medidos no sistema real.

Verificação dos modelos

Não é difícil construir um modelo.

A dificuldade está em que o modelo represente bem a realidade.

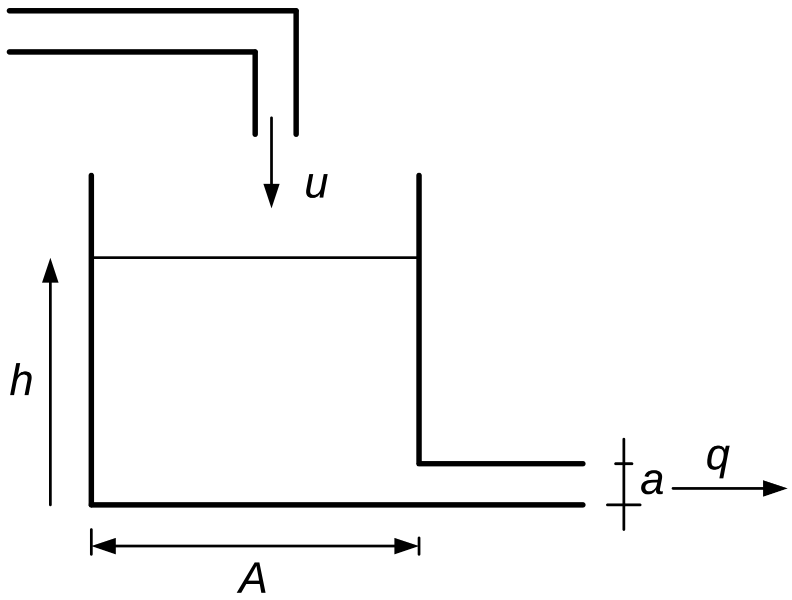
Todos os modelos têm um certo domínio de validade, definido pelo intervalo de valores em que é válido.

Para validar um modelo, as previsões que ele faz devem ser confrontadas com as observações experimentais.

Tipos de modelos

- Determinísticos / Estocásticos
- Dinâmicos / Estáticos
- Tempo contínuo / Tempo Discreto
- Distribuídos / Concentrados
- Guiados pelo tempo / Guiados por acontecimentos

Exemplo: Tanque



Como escrever as equações de um modelo do tanque que relacione o caudal de entrada com o nível?

Conservação da massa

+

Conservação da energia

Conservação da massa

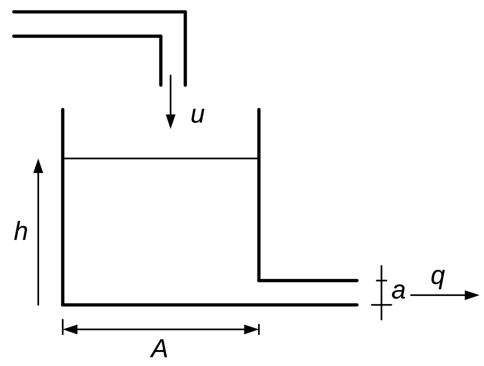
Considere-se um intervalo de tempo pequeno, Δt , em torno do instante t

Neste intervalo o nível varia de uma quantidade Δh

A variação do volume é dada:

Geometricamente por $A\Delta h$

Pela conservação da massa por $(u(t)-q(t))\Delta t$



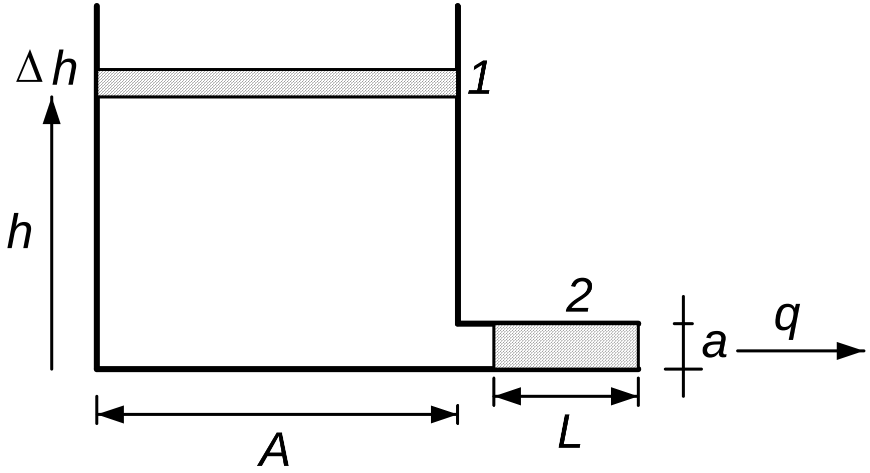
Igualando estes termos e dividindo por Δt , obtém-se

$A\dfrac{\Delta h}{\Delta t}=u(t)-q(t)$ tomando o limite $\Delta t \to 0$, obtém-se a eq. diferencial:

$$A\frac{dh}{dt}=u(t)-q(t)$$

Conservação da energia

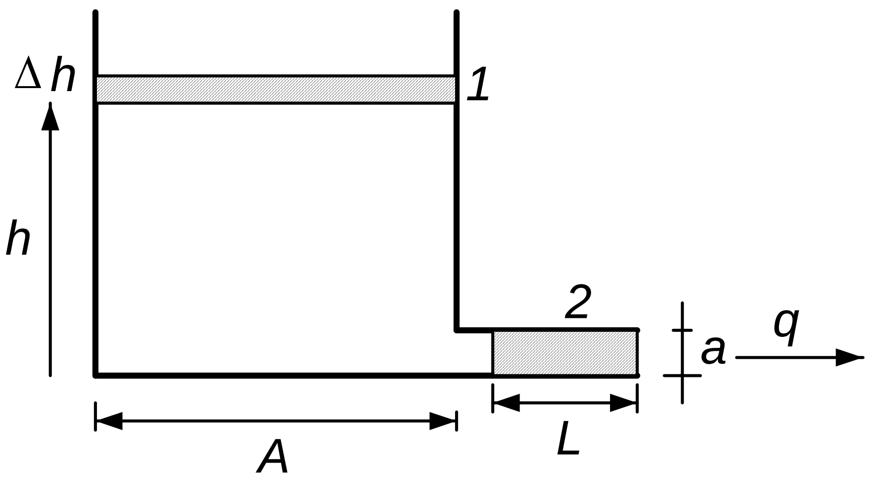
A conservação da energia permite relacionar o caudal de saída com o nível.



Durante o intervalo de tempo Δt a energia potencial do elemento de água 1 é transformada em energia cinética do elemento de água 2, que sai pelo orifício de saída.

$$E_{pot} = \Delta m g h$$

$$E_{cin} = \frac{1}{2}\Delta m v^2$$



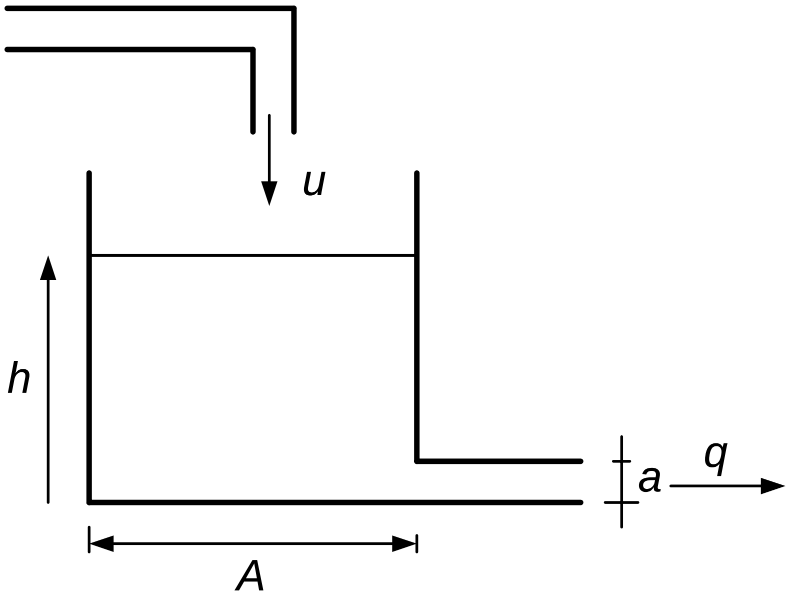
$$v = \frac{L}{\Delta t} \quad \text{e} \quad L = \frac{q\Delta t}{a} \Rightarrow v = \frac{q}{a}$$

$$E_{cin} = \frac{1}{2}\Delta m\left(\frac{q}{a}\right)^2$$

$$E_{pot} = E_{cin}$$

$$\Delta mgh = \frac{1}{2}\Delta m\left(\frac{q}{a}\right)^2$$

Conclui-se a Lei de Bernoulli: $q = a\sqrt{2gh}$



Conservação da massa:

$$A\frac{dh}{dt} = u(t) - q(t)$$

Conservação da energia:

$$q = a\sqrt{2gh}$$

Modelo matemático do tanque:

$$\frac{d}{dt}h(t) = -\frac{a\sqrt{2g}}{A}\sqrt{h(t)} + \frac{1}{A}u(t) \qquad h(0) \text{ dado}$$

O que nos "diz" o modelo sobre a evolução do nível?

- Se o caudal de entrada fôr constante, atinge-se um valor de equilíbrio? Como calculá-lo?
- Como evolui o nível $h(t)$ em função do tempo a partir de uma dada condição inicial?

Nível de equilíbrio no tanque

No equilíbrio o nível $h(t)$ é constante e a derivada é nula.

$$0 = -\frac{a\sqrt{2g}}{A}\sqrt{h} + \frac{1}{A}u$$

$$\bar{h} = \frac{\bar{u}^2}{2ga^2}$$

Evolução qualitativa do nível

Podemos ter uma ideia qualitativa da evolução no tempo de $h(t)$ se observarmos os sinais da deirivada dados pela equação diferencial:

$$\frac{d}{dt}h(t) = -\frac{a\sqrt{2g}}{A}\sqrt{h(t)} + \frac{1}{A}u(t)$$

Para fixar ideias, consideremos $A = 1$, $a\sqrt{2g} = 1$ e um caudal constante $u(t) = 1\, t \geq 0$:

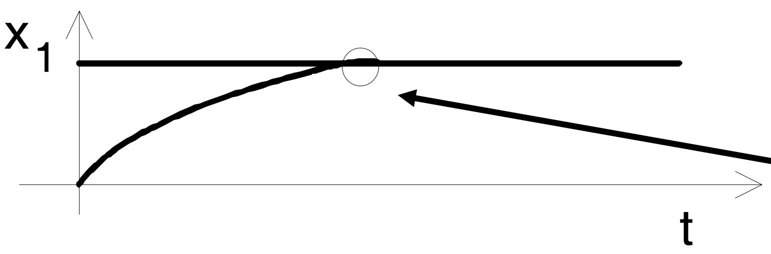
$$\frac{d}{dt}h(t) = -\sqrt{h(t)} + 1$$

$$\frac{d}{dt}h(t) = -\sqrt{h(t)} + 1$$

Para valores de $h(t)$ entre 0 e 1 (nível de equilíbrio), a função

$$-\sqrt{h(t)} + 1$$

é positiva. Como esta função dá o valor da derivada, o nível $h(t)$ é crescente. Repare-se que o nível não pode atingir o equilíbrio num instante finito pois isso violaria o teorema de existência e unicidade de uma equação diferencial.



Se isto fosse possível, por este ponto passariam duas soluções.

A concavidade da curva que representa a solução depende da 2ª derivada.

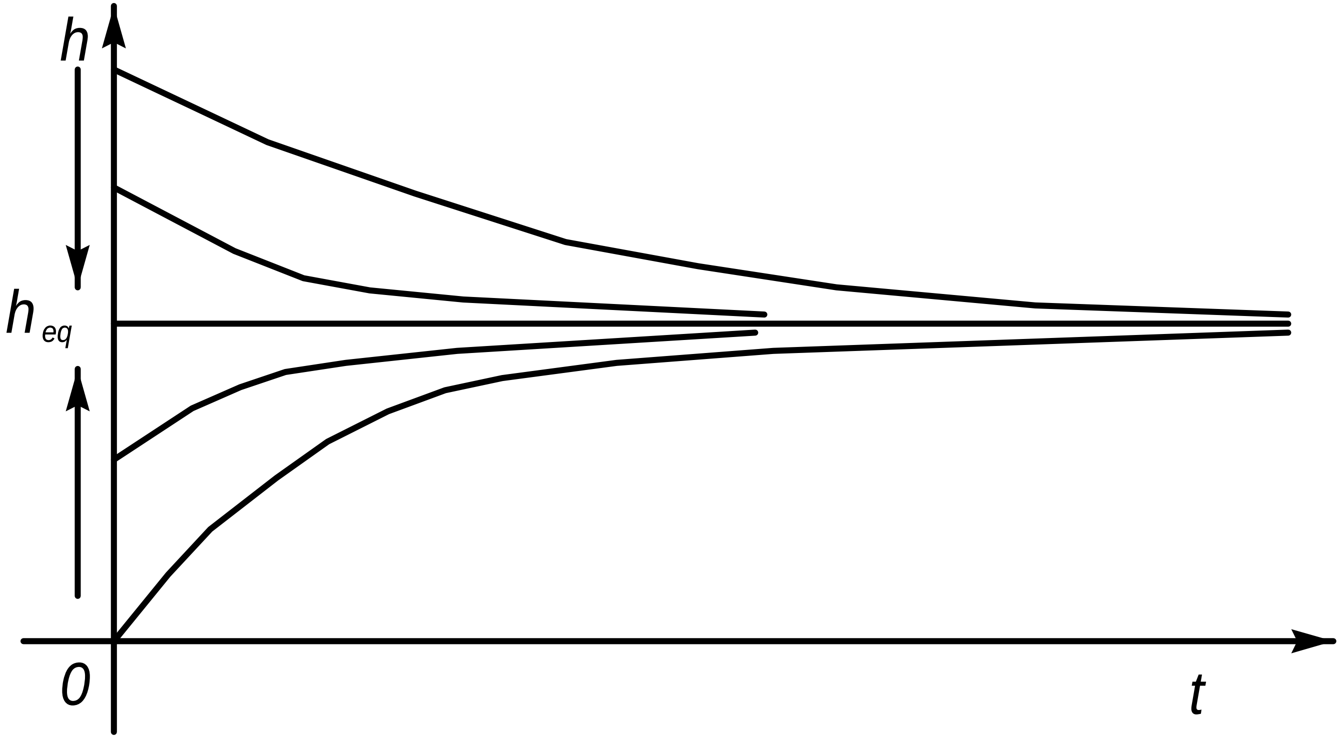
$$\frac{d^2}{dt^2}h(t)=\frac{d}{dt}\left(\frac{dh}{dt}\right)=\frac{d}{dt}\left(-\sqrt{h}+1\right)=-\frac{d}{dh}\left(\sqrt{h}\right).\frac{dh}{dt}=-\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{h}}\left(-\sqrt{h}+1\right)$$

$$\frac{d^2}{dt^2}h(t)=\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{h}}\left(\sqrt{h}-1\right)$$

Para h entre 0 e 1 a 2ª derivada é negativa e a concavidade está virada para baixo.

Para h maior que 1 a 2ª derivada é positiva e a concavidade está virada para cima.

Com base nesta discussão, podemos assim concluir que a forma qualitativa das soluções para várias condições iniciais é

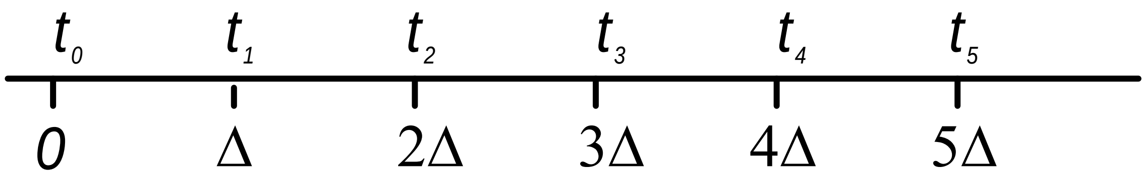


Integração numérica com o método de Euler

$$\frac{d}{dt}h(t) = -\sqrt{h(t)} + 1$$

Definir uma grelha de pontos para o tempo

$$t_k = k\Delta \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$



Aproximar a derivada por diferenças finitas

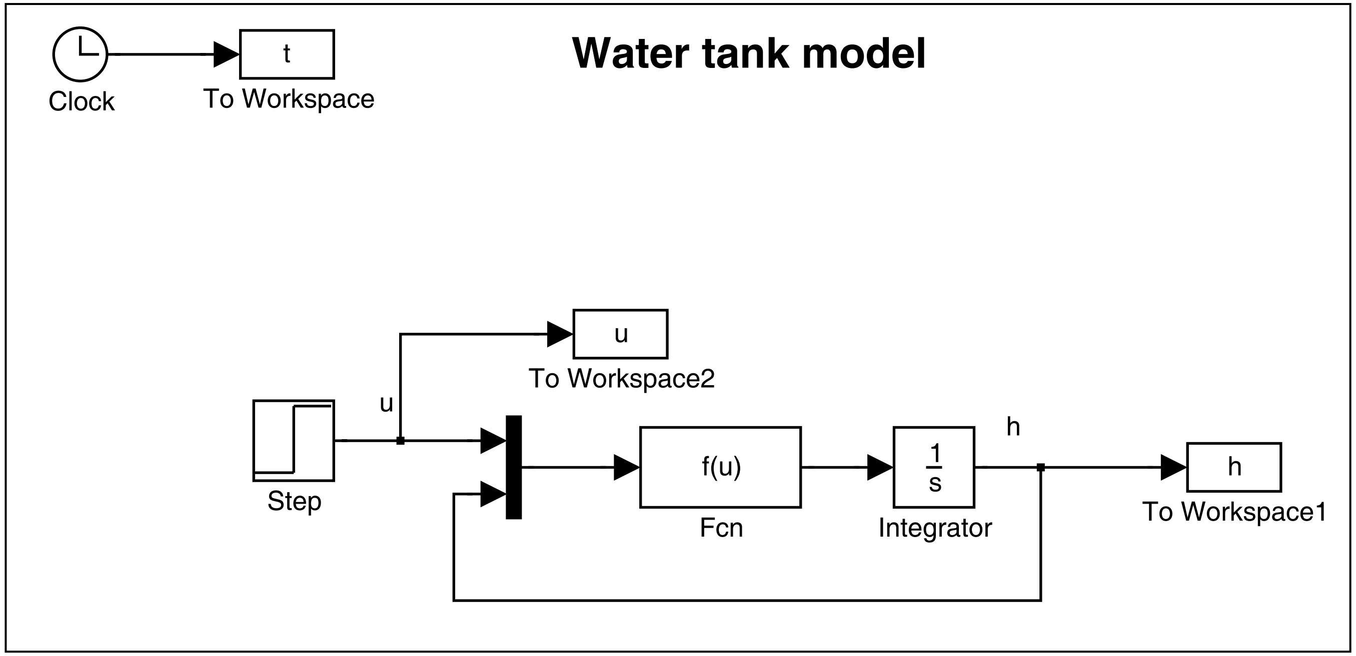
$$\frac{d}{dt}h(t) \approx \frac{h(t_k) - h(t_{k-1})}{\Delta} \quad \mapsto \quad h(t_k) = h(t_{k-1}) + \Delta\left(-\sqrt{h(t_{k-1})} + 1\right)$$

Pseudo-código para simulação do tanque

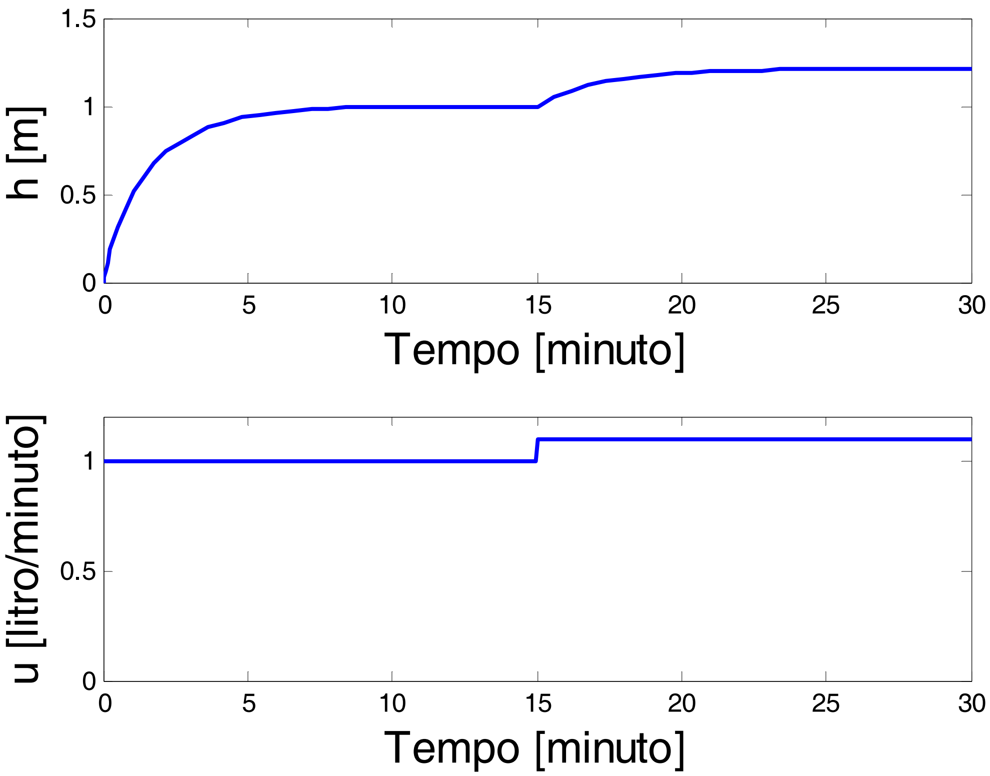
1. Definir os parâmetros que entram na simulação (Δ).
2. Definir a condição inicial $h(0) = valor\ dado$
3. Executar o ciclo do tempo, para $k = 1$ até k_{final}
    a. $h(t_k) = h(t_{k-1}) + \Delta\left(-\sqrt{h(t_{k-1})} + 1\right)$
4. Mostrar os resultados

Diagrama de blocos para simulação no SIMULINK

$$\frac{d}{dt}h(t) = -\sqrt{h(t)} + 1$$



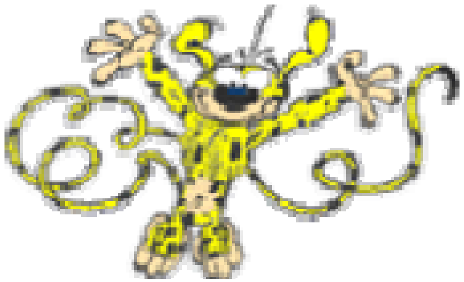
Simulação do tanque



A simulação parte de uma condição inicial nula (tanque inicialmente vazio). Entre $t = 0\,\mathrm{min}$ e $t = 15\,\mathrm{min}$ o caudal de entrada é mantido em $1\ litro/\mathrm{min}$ .O nível sobe até atingir um valor de equilíbrio. Em seguida, o caudal aumenta para $1{,}1 litro/\mathrm{min}$, o que causa uma nova variação do nível, que estabiliza novamente num outro valor do equilíbrio.

Modelos de eco-sistemas

Num eco-sistema há vários seres vivos que interagem. Neste exemplo considera-se um ecosistema simplificado com apenas duas espécies.



Marsupilamis Sympaticus, L.

Monstrus Ferocissimus, L.

O objectivo é construir um modelo matemático que permita calcular a evolução do número de indivíduos de cada espécie ao longo do tempo.

Sejam $N_1(t)$ e $N_2(t)$ o número de indivíduos de cada espécie no instante t.

λ_i Taxa de natalidade da espécie i = Número de novas crias que nascem

por unidade da população e

por unidade de tempo

Por unidade de tempo nascem $\lambda_i N_i$ novas crias da espécie i

μ_i Taxa de mortalidade da espécie i =Número de mortos

por unidade da população e

por unidade de tempo

Por unidade de tempo morrem $\mu_i N_i$ indivíduos da espécie i

Considerem-se dois instantes de tempo t e $t+\Delta$ separados por um intervalo de tempo muito pequeno Δ.

$$\begin{bmatrix} Variação \\ de\ N_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n^o\ nascim.\ de\ N_1 \\ por\ unidade\ de \\ população\ e \\ unidade\ de\ tempo \end{bmatrix} N_1\Delta - \begin{bmatrix} n^o\ mortos\ de\ N_1 \\ por\ unidade\ de \\ população\ e \\ unidade\ de\ tempo \end{bmatrix} N_1\Delta$$

$$\lambda_1 \qquad\qquad\qquad \mu_1$$

$$\frac{d}{dt} N_1(t) = \left(\lambda_1 - \mu_1(N_1, N_2)\right) N_1(t)$$

Modelo da interacção entre as duas populações

$$\frac{d}{dt}N_1(t) = \left(\lambda_1 - \mu_1(N_1, N_2)\right)N_1(t)$$

$$\frac{d}{dt}N_2(t) = \left(\lambda_2 - \mu_2(N_1, N_2)\right)N_2(t)$$

A taxa de mortalidade depende da disponibilidade de comida, bem como da maneira como as espécies interagem entre si.

Consideram-se dois casos:

- Competição
- Predador e presa

Caso 1: As espécies competem pelo mesmo alimento

$$\mu_i(N_1, N_2) = \gamma_i + \delta_i(N_1 + N_2) \qquad \delta_i > 0, \quad i = 1, 2$$

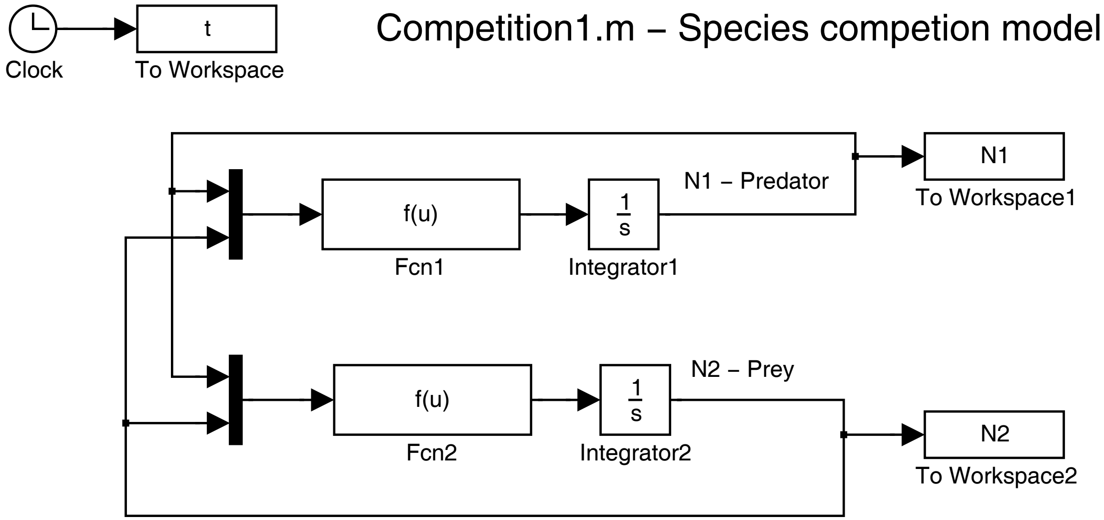
Termo constante da taxa de mortalidade

Quanto maior fôr o número de indivíduos, maior é a competição pelo alimento disponível e maior a taxa de mortalidade

$$\frac{d}{dt} N_1(t) = (\lambda_1 - \gamma_1) N_1(t) - \delta_1 \left[N_1(t) + N_2(t) \right] N_1(t)$$

$$\frac{d}{dt} N_2(t) = (\lambda_2 - \gamma_2) N_2(t) - \delta_2 \left[N_1(t) + N_2(t) \right] N_2(t)$$

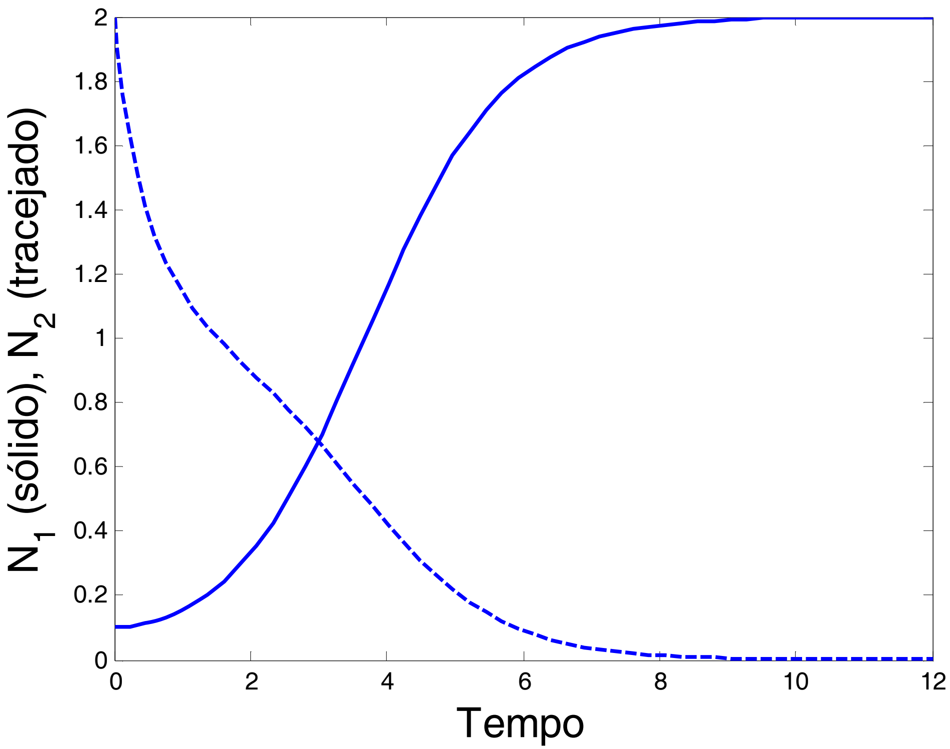
Diagrama de blocos para a simulação



$$\frac{d}{dt}N_1(t) = (\lambda_1 - \gamma_1)N_1(t) - \delta_1\left[N_1(t) + N_2(t)\right]N_1(t)$$

$$\frac{d}{dt}N_2(t) = (\lambda_2 - \gamma_2)N_2(t) - \delta_2\left[N_1(t) + N_2(t)\right]N_2(t)$$

Competição entre duas espécies



$$\lambda_1 = 3,\ \lambda_2 = 2,\ \gamma_1 = \gamma_2 = \delta_1 = \delta_2 = 1$$

Pode mostrar-se que se

$$\frac{\lambda_1 - \gamma_1}{\delta_1} > \frac{\lambda_2 - \gamma_2}{\delta_2}$$

a espécie 2 extingue-se e a espécie 1 aproxima-se do limite

$$\frac{\lambda_1 - \gamma_1}{\delta_1}$$

Caso 2: Predador e Presa

A primeira espécie (predador) caça a segunda (presa).

O alimento disponível para a espécie 1 é proporcional a $N_2(t)$ e a sua taxa de mortalidade diminui quando $N_2(t)$ aumenta:

$$\mu_1(N_1, N_2) = \gamma_i - \alpha_1 N_2$$

Conversamente, para a espécie 2

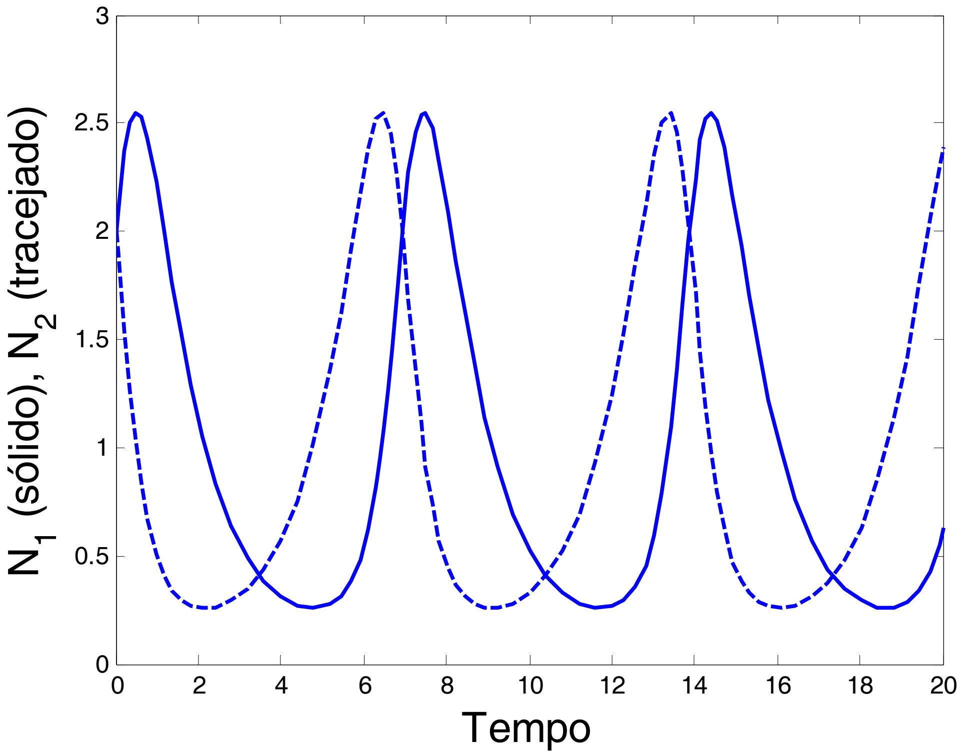
$$\mu_2(N_1, N_2) = \gamma_2 + \alpha_2 N_1$$

Equações do modelo predador/presa

$$\frac{d}{dt}N_1(t) = (\lambda_1 - \gamma_1)N_1(t) + \alpha_1 N_1(t)N_2(t)$$

$$\frac{d}{dt}N_2(t) = (\lambda_2 - \gamma_2)N_2(t) - \alpha_2 N_1(t)N_2(t)$$

Oscilações no modelo predador/presa



$$\lambda_1 = 1,\ \gamma_1 = 2,\ \lambda_2 = 2,\ \gamma_2 = 1,\ \alpha_1 = \alpha_2 = 1$$

Face à abundância de presas (2), o número de predadores (1) aumenta, forçando o número de presas a diminuir.

A redução do número de presas aumenta a taxa de mortalidade dos predadores devido à redução do alimento disponível, o que reduz o seu número. Por sua vez, isto permite que o número de presas volte a aumentar. O ciclo repete-se.

Vito Volterra (1860-1940) foi um matemático italiano que deu importantes contributos à teoria das equações às derivadas parciais e à teoria das equações integrais.

Além de um matemático brilhante, foi socialmente muito activo, tendo lutado como aviador na 1ª Grande Guerra e, no plano das ideias políticas, enquanto parlamentar a partir de 1922. Em 1931 foi forçado a abandonar a Universidade de Roma por se recusar a subscrever um pacto de lealdade ao Governo Fascista de então.

No período entre as duas guerras mundiais estudou a equação de Verhulst e desenvolveu modelos para as relações predador-presa, sendo considerado em conjunto com **Alfred Lotka** o fundador da **Biologia Matemática**.

O interesse de Volterra por este tipo de problemas foi atraído pelas observações do seu colega Biólogo Dancona, segundo as quais, durante o período da I Guerra Mundial, a percentagem de peixes predadores aumentara nas capturas no mar Adriático. Volterra desenvolveu um modelo matemático que explicou qualitativamente o fenómeno.

Exemplo 3: Um sistema económico

Modelo simples da Economa Nacional que considera as variáveis:

- $y(t)$: o produto interno bruto (PIB) no ano t GROSS DOMESTIC PRODUCT (GDP)
- $c(t)$: o consumo total no ano t CONSUMPTION
- $I(t)$: o total de investimentos no ano t INVESTMENT
- $g(t)$: os gastos do governo no ano t GOVERNMENT SPENDING

O PIB (anual) é o total de bens e serviços gerados num país num ano.

Tem-se (para um país com as exportações iguais às importações):

$$y(t) = c(t) + I(t) + g(t)$$

Repare-se que aqui o tempo se mede em números inteiros.

Hipóteses

Para modelar a Economia, diferentes correntes de pensamento económico fazem hipóteses diferentes. Neste exemplo apresenta-se um modelo Keynesiano simples, baseado nas seguintes hipóteses:

GROSS DOMESTIC PRODUCT (GDP)

1. O consumo do ano corrente é proporcional ao PIB do ano anterior:

$$c(t) = a\, y(t-1) \qquad a > 0$$

2. O investimento é proporcional ao aumento do consumo:

$$I(t) = b\left[c(t) - c(t-1)\right] \qquad b > 0$$

As equações

$$y(t) = c(t) + I(t) + g(t)$$

$$c(t) = a\, y(t-1)$$

$$I(t) = b(c(t) - c(t-1))$$

constituem um modelo simples da Economia Nacional.

O modelo pode ser usado para estudar como é que o Governo pode influenciar a economia. Nesse caso, o crescimento do PIB pode ser visto como um objectivo.

O governo pode fazer isto de diversas maneiras:

- Influenciar $c(t)$ através dos impostos (um aumento do imposto de transacção causa um decréscimo no concumo);
- Influenciar $I(t)$ através da taxa de juro (uma taxa de juro mais baixa torna mais fácil pedir empréstimos o que favorece o investimento)

Neste exemplo vamos apenas considerar os gastos do governo como meio de este influenciar a economia.

$$y(t) = c(t) + I(t) + g(t)$$

$$c(t) = a\, y(t-1)$$

$$I(t) = b(c(t) - c(t-1))$$

Uma outra forma do modelo (relaciona $g(t)$ com $y(t)$):

$$y(t) = ay(t-1) + b\left[ay(t-1) - ay(t-2)\right] + g(t)$$

Reordenando, obtém-se a **equação de diferenças** que relaciona $g(t)$ (“entrada”) com $y(t)$ (“saída”):

$$y(t) - (a + ab)\, y(t-1) + aby(t-2) = g(t)$$

Alternativamente, podemos organizar o modelo exprimindo o modo como as variáveis $y(t)$ e $c(t)$ variam de ano para ano. Tem-se:

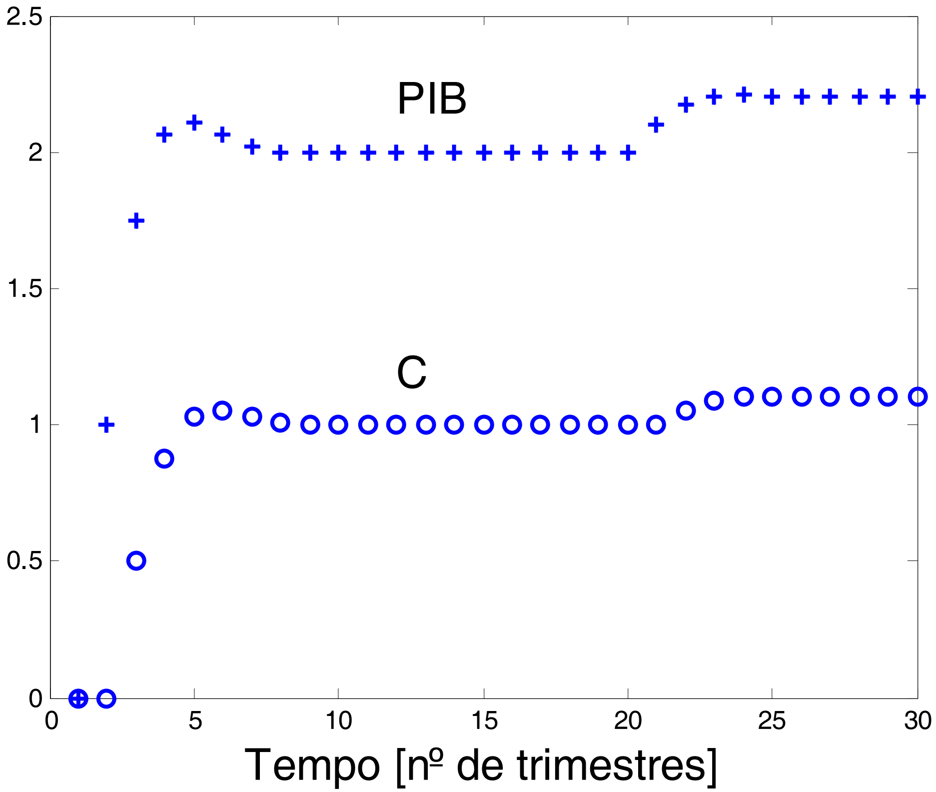
$$c(t+1) = ay(t)$$

e ainda:

$$y(t+1) = c(t+1) + I(t+1) + g(t+1)$$
$$y(t+1) = c(t+1) + b(c(t+1) - c(t)) + g(t+1)$$
$$y(t+1) = (1+b)ay(t) - bc(t) + g(t+1)$$

Isto resulta no sistema de 2 equações de diferenças de 1ª ordem

$$\begin{bmatrix} c(t+1) \\ y(t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & a \\ -b & (1+b)a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c(t) \\ y(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} g(t+1)$$




```
C(1)=0;    % Initial conditions
PIB(1)=0;

% Simulation

g(1)=0;
for t=1:(Tfinal-1)
    g(t+1)=1;
    if t>=20
        g(t+1)=1.1;
    end;
    C(t+1)=a*PIB(t);
    PIB(t+1)=-
b*C(t)+(1+b)*a*PIB(t)+g(t+1);
end;

% Show results
```

$a = b = 0.5$

Saltos de 1 e 0.1 em $g(t)$

Exemplo: Servidor Apache

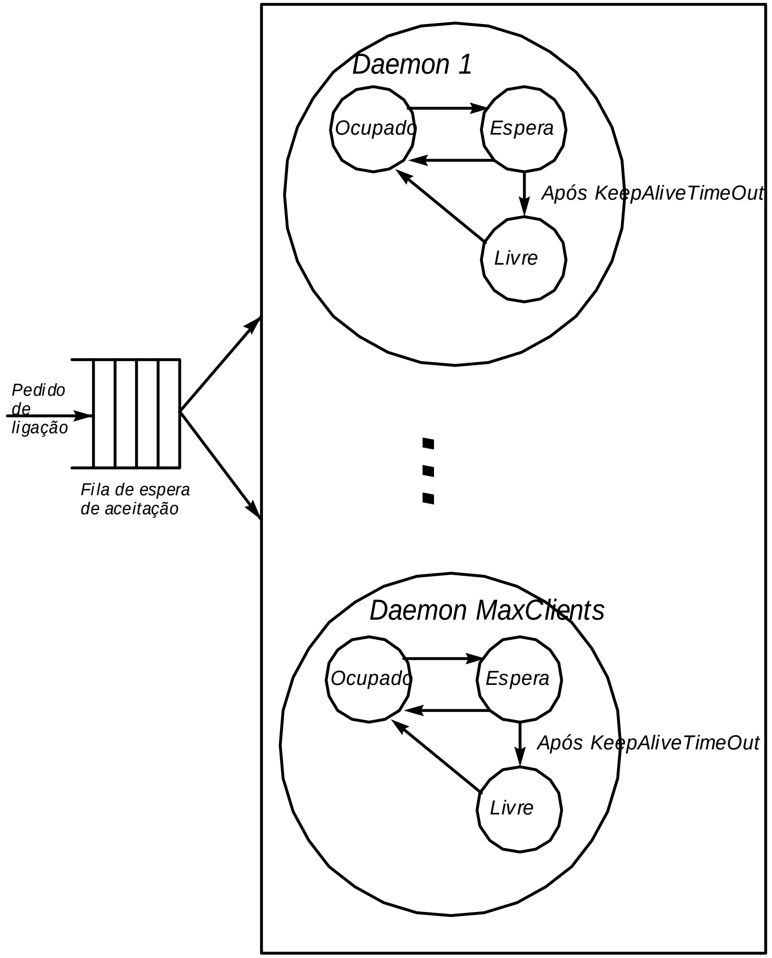
O servidor Apache é um programa de computador responsável por aceitar pedidos de HTTP (*Hypertext Transfer Protocol*) de clientes (denominados *web browsers*) servindo-lhes respostas HTTP (por exemplo páginas web tal como documentos html ou imagens).

O servidor está estruturado na forma de processos (subprogramas que correm independentemente, lançados pelo programa servidor) denominados “daemons”. O número máximo de daemons que podem existir simultâneamente é configurável entre 2 e 60000.

Os pedidos dos clientes entram no servidor através de uma fila de espera, onde aguardam que haja um daemon disponível. Os daemons podem estar em um de três estados:

Livre Ocupado Espera

Quando um daemon está "livre" e aceita um pedido passa ao estado "ocupado". Após processar o pedido do cliente, o daemon não passa de novo ao estado "livre", mas sim a um estado de "espera" e a ligação permanece aberta por forma a que subsequentes pedidos do mesmo cliente sejam processados mais eficientemente. Enquanto está no estado de "espera", o daemon não pode processar pedidos de outros clientes.

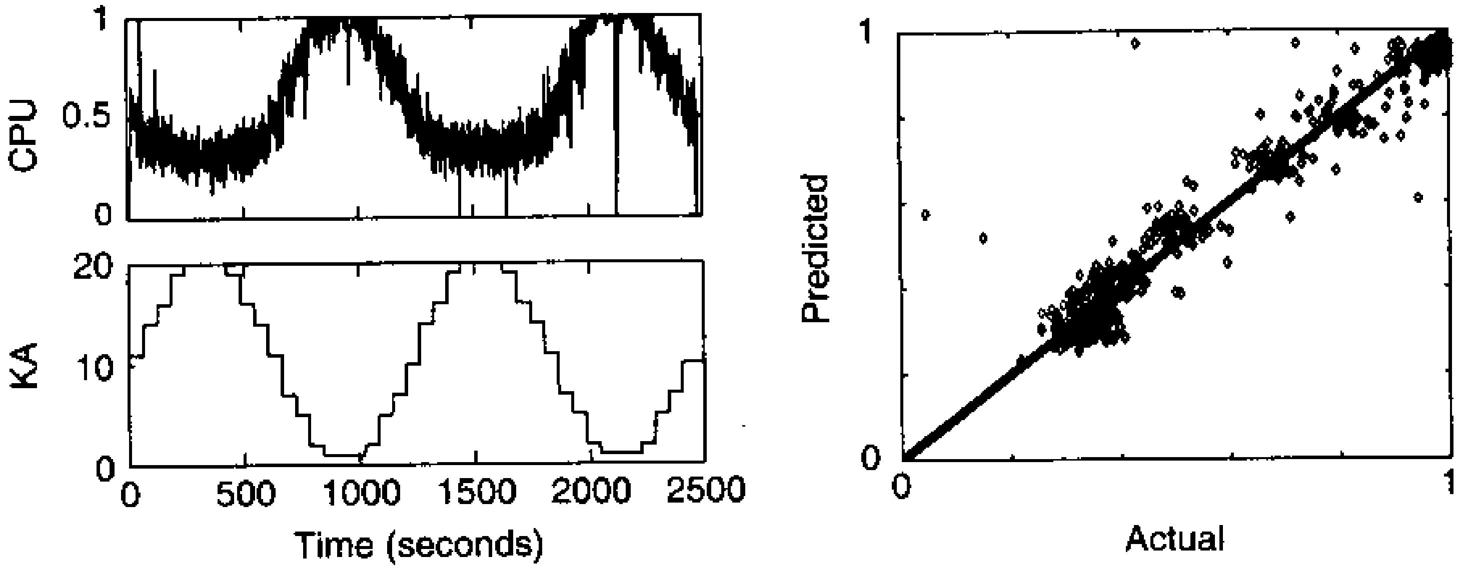

Daemon 1
Ocupado
Espera
Após KeepAliveTimeOut
Livre
Pedido de ligação
Fila de espera de aceitação
Daemon MaxClients
Ocupado
Espera
Após KeepAliveTimeOut
Livre

Um dos parâmetros do servidor Apache é o *keepAliveTimeOut* (KA) que determina o tempo máximo que um daemon pode ficar no estado de espera até que a ligação com o cliente seja interrompida e ele passe de novo ao estado "livre".

O parâmetro KA influencia a carga de CPU usada.

- KA muito grande: a CPU é subutilizada, dado que há processos que requerem CPU e que não se conseguem ligar ao servidor;
- KA muito pequeno: a ligação termina permaturamente o quer faz desperdiçar CPU para repôr a ligação ao mesmo cliente.

A relação entre o valor de KA e a carga de CPU usada pode ser estabelecida através de observações experimentais, em que se varia KA e se regista a carga de CPU:



(a) Experimental data

(b) Model evaluation

A partir destes dados, a relação entre KA e a carga de CPU é modelada por

$$y(k+1) = \alpha\, y(k) + \beta\, u(k)$$

em que $y(k) = CPU - 0.58$, $u(k) = KA - 11$, k é o tempo discreto e α e β são números que se podem estimar pelo método dos mínimos quadrados a partir de observações experimentais. Neste caso, obtém-se $\alpha = 0.6$ e $\beta = -0.014$.

Este modelo pode ser utilizado para projectar um algoritmo quer ajuste KA por forma a quer se obtenha uma carga de CPU optimizada.

Referência: J. L. Hellerstein, Y. Diao, S. Parekh e D. M. Tilbury (2004). *Feedback Control of Computing Systems*. Wiley Interscience. Pp. 16-18 e 57-58.

Conclusões

- Foram dados exemplos em áreas de aplicação muito diferentes. No entanto os modelos resultantes têm muitas características comuns.
- O modelo consiste numa equação diferencial ou num sistema de equações diferenciais que relacionam as diversas variáveis no sistema. A partir da solução destas equações podem calcular-se outras variáveis.
- No caso dos exemplos em tempo discreto (Economia, Servidor Apache), obtêm-se equações de diferenças, mas a estrutura é a mesma.
- O uso de equações diferenciais ou de diferenças é uma consequência do carácter dinâmico dos sistemas que se consideraram, em que o comportamento actual depende do passado.

- A construção dos modelos envolve vários graus de aproximação. As equações para certos circuitos eléctricos são muito exactas. As equações do tanque incluem hipóteses adicioinais sobre a não existência de turbulência.
- Para os exemplos biológico e económico, é óbvio que as taxas de variação não são assim. No entanto, espera-se que os modelos estejam qualitativamente correctos e que permitam tirar conclusões sobre o funcionamento dos sistemas.
- O mesmo se passa com o modelo do servidor Apache. Este não é obtido a partir de “leis” fundamentais, mas inferido (identificado) a partir de dados expewrimentais.