

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Uma Abordagem Introdutória

Adriana Meireles M. Abreu¹ e João José de Assis Rangel²

¹Universidade Estadual do Norte Fluminense UENF/CCT/LAMAV. Av. Alberto Lamego, 2000, Campos dos Goitacases - RJ, CEP:28030-130.

²Centro Federal de Educação Tecnológica de Campos. Rua Dr. Siqueira, 273, Campos dos Goitacases - RJ, CEP:28015-000.

e-mail: jjrangel@uenf.br

Resumo

Este artigo apresenta, de forma introdutória, o campo da simulação computacional. São apresentados, como ilustração, dois casos distintos de modelagem e simulação computacional, relacionados à expectativa de vida das cigarras e à distribuição não uniforme da dureza no diamante. Atualmente, esta técnica é usada nos mais diferentes setores produtivos visando à melhoria dos produtos e, em alguns casos, é absolutamente imprescindível ao aprimoramento de novos produtos.

Palavra chave: Simulação computacional, modelagem matemática e modelos

1 Introdução

Já nos primórdios, sabia-se que simular uma realidade era uma forma de ampliar o conhecimento e avançar no aprimoramento dos produtos.

A técnica da Simulação Computacional consiste em estabelecer um modelo capaz de descrever ou representar o problema real a ser submetido à manipulação "experimental" em um computador. Em outras palavras, Simulação Computacional consiste em conduzir "experimentos" em um computador, envolvendo relações de conteúdo lógico e matemático, necessários à descrição do comportamento e da estrutura de um problema real, em períodos de tempo bem definidos.

Note que a palavra experimentos aparece entre aspas, já que o programa

Simulador pode funcionar como um laboratório virtual onde os experimentos podem ser realizados.

Neste sentido, a Simulação visa a compreender o funcionamento, prever o desempenho, o comportamento, dominar e controlar a evolução do sistema real, através da avaliação de estratégias a serem adotadas dentro das restrições impostas pela realidade. A simulação é obtida através do uso de modelos, que descrevem de forma segura e confiável esse problema real.

Um modelo é uma abstração ou uma aproximação, que é usado para entender a realidade. Ou ainda, um modelo é uma representação simplificada da realidade. Nele, são ressaltados ou destacados os pontos essenciais do problema que deseja-se analisar através da simulação computacional.

2 A Modelagem de um Problema

Há muito tempo as pessoas têm usado modelos. Uma descrição escrita de uma batalha, uma réplica de um prédio, o uso de símbolos para representar dinheiro, números e relações matemáticas são todos exemplos de modelos.

Modelos podem ser utilizados na arquitetura através de maquetes e plantas; na geografia através dos mapas; na aviação e exploração espacial, através dos modelos em escala e o efeito dos simuladores de voo. Na Ciência, em geral, os modelos são de natureza matemática, estatística e/ou computacional, constituídos com o uso de equações e relações, e usados para simulação em computador.(GALDINO, 1998)

Para a realização de uma modelagem é preciso inicialmente conhecer a natureza do problema, tais como: características físicas, químicas, biológicas, etc. Após esse processo, faz-se um modelo matemático que represente a tradução do problema, ou seja, esse problema foi expresso em palavras (em português) e será traduzido para linguagem matemática (em "matematiquês") e vice versa. (NACHBIN, 1998)

A matemática é usada como instrumento intelectual, que, através da abstração e formalização, sintetiza idéias, as quais surgem em situações as mais diversas e, por isto mesmo, camufladas na sua essência. O objetivo da matemática é, então, extrair esta essência e formalizá-la em um contexto abstrato onde ela possa ser trabalhada intelectualmente, desenvolvida e absorvida com uma extraordinária economia de pensamento.

Esquemáticamente, podem-se distinguir as características básicas do processo de matematização de um problema ou do que chama-se de um modelo matemático de um problema com o diagrama da Figura 1: (BASSANEZI, 1988)

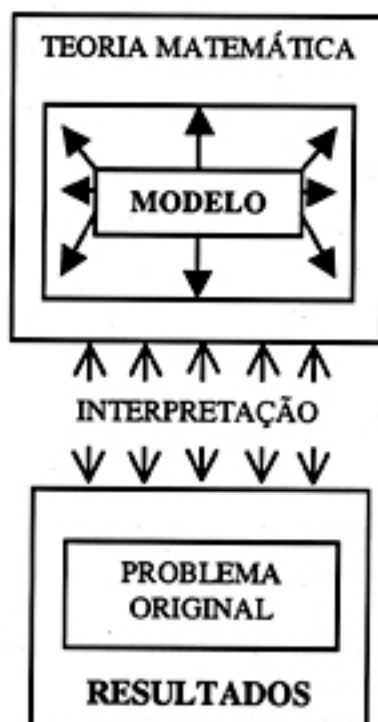


Figura.1: Esquema para modelagem matemática de um problema.

Note na Figura 1 que os resultados encontram-se juntos com o problema original. Isto deve-se ao fato de que, após o problema ter sido analisado através de técnicas matemáticas e/ou computacionais, os resultados devem ser investigados para ver a correspondência com o problema original.

Após ultrapassada a fase da modelagem, tendo-se confiança no modelo desenvolvido, ou seja, o modelo desenvolvido realmente traduz a realidade da melhor forma possível, podem-se simular situações mais complexas do problema em estudo.

Esta é uma visão geral de como as coisas podem ser feitas. Ou seja, qualquer problema em estudo pode ser modelado e, a partir do uso deste modelo, chegar-se ao estudo de situações mais complexas através da sua simulação ou, em outras palavras, "experimentação em computador".

Por exemplo, certos problemas podem ser simples, mas tornam-se praticamente impossíveis de se acharem soluções "exatas" através dos modelos matemáticos analíticos. Uma alternativa à solução analítica do problema é achar soluções "aproximadas" por métodos numéricos computacionais, que podem ser implementados via simulação computacional.

A modelagem de uma situação ou problema real pode, mais uma vez, ser exemplificada visualizando o seguinte esquema mostrado na Figura 2.

Observe nesta Figura que o *problema não matemático* passa por um processo de experimentação e abstração, onde a experimentação possibilitará a obtenção de *dados* experimentais ou empíricos que ajudam na compreensão do problema, na modificação do modelo e na decisão de sua validade.

A experimentação propriamente dita é um processo essencialmente laboratorial e/ou estatístico. Já a abstração descreve o

processo de seleção das variáveis essenciais e formulação em linguagem "natural" do problema ou da situação real.

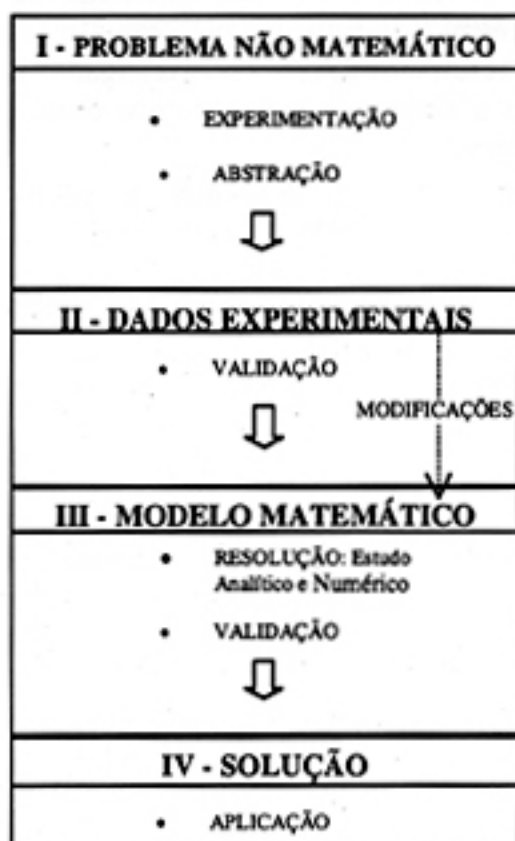


Figura 2 - Esquema de uma modelagem: Busca de um modelo matemático que descreva o problema estudado. (NACHBIN, 1998)

A resolução é dada a partir de um estudo analítico e numérico que definirá a linguagem matemática derivada da linguagem "natural" do problema. Após a criação do *modelo matemático* e antes da obtenção da *solução* certa, realiza-se uma comparação entre a solução obtida via resolução do modelo matemático e os dados reais, estando, assim, realizando uma validação da solução.

Caso esse modelo inicial não possua o grau de aproximação entre os dados reais, então realizam-se modificações nas suas variáveis, ou na lei de formação, e com isso o próprio modelo inicial é modificado e o processo se inicia novamente.

Tendo então a definição do modelo certo e a descoberta da solução, a modelagem

permitirá, através de simulações computacionais, fazer previsões, tomar decisões, explicar e entender; enfim, participar do mundo real com capacidade de influenciar em suas mudanças.

A linguagem oferecida pelas equações diferenciais é fundamental na transferência e entendimento da linguagem "natural", uma vez que a palavra-chave *variação* aparece quase sempre nas situações reais.

Tomando como extrema importância o modelo numérico, tem-se que oferecer uma atenção especial para a validação do mesmo, ou seja, na validação numérica o que deseja-se é ver se os resultados teóricos, relativos à parte matemática, são observados numericamente. Isso aumentará a confiança com respeito à capacidade "exploratória" do código escrito.

"O modelo computacional (para o cientista computacional) é como uma *sonda* que vai navegando por um espaço desconhecido e que está equipada para enviar informações interessantes sobre esse espaço jamais navegado. Essas informações interessantes são as grandezas que são visualizadas através de uma interface gráfica. A partir delas, pode-se adquirir uma intuição apurada desse novo "território explorado" e possivelmente fazer descobertas de cunho teórico e/ou prático".

3 Aplicação de Modelos para Simulação Computacional

3.1 As expectativas de vida das cigarras são números primos (NACHBIN, 1998)

As cigarras possuem um ciclo de vida que se resume em passar a maior parte da sua vida debaixo da terra (inicialmente na forma de ninfas) e quando saem para superfície elas cantam, se reproduzem e morrem. Espécies que vivem na parte Leste e Sul dos Estados Unidos passam, respectivamente, dezessete e treze anos debaixo da terra. Quando aparecem na superfície (todas ao mesmo tempo), ocupam algumas centenas de quilômetros de raio.

As cigarras, ao retornarem à superfície, são devoradas facilmente pelos pássaros. Sabidamente, segundo Jay Gould, as cigarras evitam que os pássaros possam depender delas para viver, fazendo com que esse retorno à superfície ocorra em longos períodos de tempo. Na pior das hipóteses, vai haver um único banquete para pássaros de três em três anos (ou quatro em quatro gerações).

Usando um raciocínio "matemático", notou-se que as expectativas de vida dessas cigarras são **números primos**. E formulou-se uma investigação importante para construção do modelo:

Será apenas uma coincidência? Ou existirá uma razão para que os números primos tenham preferência sobre os não-primos na história da evolução das cigarras?

No modelo matemático foram incluídas diversas espécies de pássaros e cigarras, cada qual com uma expectativa de vida diferente. Isso é feito para verificar, de fato, se as cigarras com expectativas de vida iguais a um número primo têm maiores chances de sobrevivência.

Concluiu-se após realização, com dados aleatórios de "experimentos computacionais" com o modelo, que em condições iniciais todas as cigarras vão à extinção. Mas as cigarras "anos-primos" sobrevivem. Escolheram-se três espécies de cigarras, com expectativas de vida iguais a 12, 13 e 15 anos respectivamente. Escolheram-se também três espécies de pássaros com expectativas de vida iguais a 2, 3 e 5 anos.

Foi visto, através de simulação computacional, uma extinção em massa com várias gerações de cigarras morrendo. Ao final, notou-se que no máximo uma ou duas gerações de uma, ou duas espécies sobrevivem. As espécies que sobrevivem, quase sempre, são as que têm expectativas de vida iguais a números primos. Mais do que isso, quando uma espécie de cigarras vai à extinção, quase sempre este fato está associado a uma enorme população de pássaros com expectativas de vida iguais a um divisor da expectativa de vida das cigarras extintas. Após a extinção, há um decaimento

brutal da população de pássaros, voltando a um nível normal.

3.2 O Diamante Carbonado não tem Dureza Homogênea em seu corpo. (RANGEL,1998)

Esta foi uma questão que ficou sem resposta durante alguns anos; desde que cientistas russos detectaram e mediram a dureza no corpo de um determinado tipo de diamante (o DSPC - Diamante Sintético Policristalino do tipo Carbonado) e verificaram que possuía dureza, não uniforme, aí então permaneceu esta dúvida.

Os cientistas que fizeram este estudo o fizeram com o intuito de determinar a melhor posição para fixar estes diamantes nas ferramentas em que eles viriam a trabalhar. Determinando a melhor posição, a vida útil das ferramentas tenderia a ser maior, obtendo assim uma vantagem competitiva.

Porém, a causa que levava estes diamantes a terem esta diferença de dureza no seu corpo não tinha ficado esclarecida, necessitando, então, de novas investigações.

Uma vez determinada a causa que levava os diamantes a terem uma região mais dura, poderia, por exemplo, encontrar a solução para ampliar esta parte e obter, assim, diamantes "mais duros".

No entanto, recentemente, a explicação para esta questão foi obtida. Isto aconteceu durante uma pesquisa realizada no Laboratório de Materiais Avançados (LAMAV) na UENF, no qual investigava-se, através de simulação computacional, a distribuição de temperatura durante a síntese deste diamante.

Neste estudo, foi elaborado um modelo matemático e computacional para simulação da distribuição de temperatura durante o processo de síntese do Diamante Carbonado. Este modelo constituiu-se basicamente da modelagem da geração do calor por corrente elétrica, da distribuição das temperaturas, dos efeitos térmicos do processo e da transição de fase do grafite para o diamante.

Durante as simulações computacionais, chegou-se dentre outros resultados a um "mapa" de temperaturas (ou seja, a um perfil de temperaturas) formado pelas temperaturas no momento em que o diamante se transformava a partir do grafite. Este mapa mostrava uma coincidência entre os valores de temperatura na região de maior dureza, contrastando com outros valores na região de menor dureza.

Este fato ajudou a esclarecer a possível causa para o diamante apresentar a diferença entre as durezas.

É importante ser dito que apenas pôde-se chegar a esta conclusão através de simulação computacional, já que as condições reais do processo impedem que esta análise seja feita de forma direta, ou seja, de forma experimental.

4 Conclusão

Hoje, assiste-se a um avanço crescente da utilização de simulação computacional em aplicações científicas e/ou tecnológicas, ou ainda, como recurso didático.

Isto deve-se basicamente aos seguintes fatores:

- a) Aumento da capacidade de processamento atrelado às reduções de custo dos computadores;
- b) Aumento do nível de complexidade nas investigações e análises de processos e produtos.

Para ilustrar, pode-se mencionar o fato de a Procter & Gamble fazer simulação computacional, usando supercomputadores que modelam moléculas sujeitas à fricção com a pele. Isto, apenas para entender melhor as assaduras e combatê-las. (LAJOIE, 1999)

Na Exxon, reduziram os custos de prospecção de petróleo em 66%. Os poços de petróleo foram modelados para determinar-se os melhores locais para perfuração. (LAJOIE, 1999)

Muitas aulas podem ser ministradas com auxílio de simuladores, que representam, em muitos casos, o fenômeno que se deseja

explicar.

Ou, ainda, pode-se usar um simulador como forma de exercitar certas habilidades, como os simuladores de voo.

Como consideração final, deve-se destacar que equações matemáticas representam uma estrutura ideal que não existe na natureza. Logo, dados obtidos através de simulação computacional de modelos matemáticos são uma aproximação que, de acordo com o nível de complexidade requerido nas investigações, contrastando com as restrições impostas pelas hipóteses simplificadoras, podem descrever de forma satisfatória a solução de processos físicos, químicos, biológicos, dentre outros.

5 Referências bibliográficas

- [1] GALDINO, G. P. Introdução à pesquisa operacional. Campos dos Goytacazes: [sn], 1998. Apostila do Setor de Engenharia de Produção na UENF.
- [2] NACHBIN, A., TABAK E. Equações diferenciais em modelagem matemática computacional. [SI]: IMPA, 1998. 21º Colóquio Brasileiro de Matemática.
- [3] BASSANEZI, R. C., FERREIRA W. C. Equações diferenciais com aplicações. São Paulo: Harbra, 1988.
- [4] RANGEL, J. J. A. Análise através de simulação computacional do perfil de temperatura durante a síntese do diamante policristalino do tipo carbonado. Tese (Doutorado em Engenharia e Ciência dos Materiais) - Universidade Estadual do Norte Fluminense, 1998.
- [5] LAJOIE, S. - Quando Tamanho é o que Interessa. INFO Exame, v. 14, n.157, p.100-103, abril 1999.