# ISTORIA UTILIZĂRII MODELĂRII ȘI SIMULĂRII ASISTATE DE CALCULATOR ÎN ȘTIINȚĂ

**Cristina-Maria DABU**[1]

cmdabu@yahoo.com

ABSTRACT: The beginning of mathematical modeling in science may be placed in time around the year 1620, when Gunter has invented the firs analogical computing device, a forerunner of slide rule. Today, mathematical modeling, scientific computing and computer assisted simulations have become usual tools in scientific research, in the study of a multitude of natural systems in physics, astrophysics, biology, biochemistry, medicine, economics, psychology, and social sciences . These scientific tools allow the study of systems evolution for different initial and environmental conditions, decreasing the costs for laboratory experiments and other investigation technologies. At the same time, these models permit performance estimations in the case of complex systems, for which the analitic solutions are impossible to be obtained.

KEYWORDS: mathematical modeling, scientific computing, computer assisted modeling, scientific research

## Prezentare generală

Modelarea matematică și simulările asistate de calculator au devenit o parte uzuală a cercetării științifice pentru studiul unei multitudini de sisteme naturale din fizică, astrofizică, biologie, biochimie, medicină, economie, psihologie, științe sociale, etc.

Aceste instrumente științifice permit studiul direcțiilor de evoluție ale sistemelor în diferite condiții inițiale și de mediu, reducând costurile experimentelor de laborator sau al altor tehnologii de investigare. Totodată ele permit estimarea performanțelor în cazul sistemelor complexe, pentru care soluțiile analitice sunt imposibil de obținut. [1]

---

1 Dr. ing., membru al Diviziei de Istoria ştiinţei a CRIFST al Academiei Române.

Prin însăși natura sa, din cele mai vechi timpuri știința s-a folosit de modele. Metodologia cercetării științifice implică parcurgerea urmatorilor pași:

1. Observarea proceselor și studierea lor prin experimente
2. Colecționarea și sistematizarea informațiilor culese
3. Elaborarea de ipoteze
4. Construirea modelelor
5. Testarea ipotezelor pe baza modelelor construite
6. Confirmarea sau infirmarea ipotezelor
7. Ajustarea modelelor
8. Validarea modelelor
9. Aducerea rezultatelor la cunoștința comunității științifice
10. Modificarea, dezvoltarea sau invalidarea modelelor în funcție de rezultatul testelor și opiniile cercetătorilor în domeniu

Modelele, ca instrumente ale cercetării științifice folosite în toate domeniile științei din cele mai vechi timpuri, pot fi clasificate în:

1. Modele verbal-descriptive- folosite în toate disciplinele stiințifice, cu precadere în cele nematematizate,
2. Modele grafice
3.Modele fizice analogice (de tipul machetelor statice sau dinamice),
4. Modelele matematice liniare și neliniare
5. Modele cinetice
6. Modelele de simulare
7. Modelele sistemice
8. Modele specifice cercetarii operaționale

Elaborarea unui model necesită parcurgerea urmatoarelor etape:

1. Alegerea structurii sau fenomenului pentru care se elaborează modelul;
2. Stabilirea elementelor de bază pentru model (descrierea interacțiilor dinamice între subsistemele componente, specificarea și descrierea variabilelor și a parametrilor care îl caracterizează, realizarea de simplificări în scrierea ecuațiilor matematice, declararea ipotezelor de elaborare și estimarea validității lor);
3. Descrierea matematică/sistemică/fizică, etc a modelului;
4. Identificarea parametrilor sistemului prin comparație cu datele experimentale;
5. Validarea modelului prin echivalența datelor provenite din sistemul real cu cele generate de model;
6. Compararea modelului cu modele anterioare și elaborarea de sugestii pentru modificări și experimente ulterioare. [2]

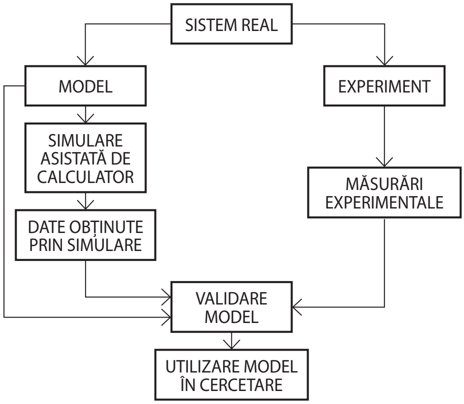


**Fig. 1** – Algoritmul elaborării unui model în știință

### Repere istorice privind utilizarea modelelor şi a simulărilor asistate de calculator în ştiinţă

Începutul modelării în științe îl putem plasa în anii 1620, când Gunter a inventat primul dispozitiv analogic de calcul, un predecesor al riglei de calcul.

În lucrarea sa *Principia*, Newton a fost primul care a găsit soluții aproximative la ecuațiile diferențiale prin procedee numerice. Generațiile următoare de savanți au utilizat metoda lui Newton în mecanica astrală, pentru a modela și aproxima traiectoriile planetelor. Unul dintre cele mai renumite procese de calcul numeric și modelare rămas în istorie din știința timpurie, îl constituie cel din anul 1748, realizat de Clairot, Lalande și Lepaute, având ca obiectiv determinarea la traiectoriei cometei Haley. Despre calculul acestei traiectorii Lalande scria «timp de 6 luni am calculat de dimineața până seara, uneori chiar și în timpul mesei…». Rezultatul calculelor a reprezentat o estimare a traiectoriei și duratei de deplasare a planetei, estimare care a dovedit a avea o diferență de doar 31 de zile față de realitate, respectiv 13 aprilie 1749. Urmatoarea revenire a cometei Haley din anul 1853 s-a dovedit a avea o eroare de predicție de numai 5 zile, iar predicția din anul 1910 a avut o eroare de numai 2,7 zile.

Anul 1918 va reprezenta de asemenea un moment important în istoria modelării științifice. Forest Ray Moulton (1872–1952), profesor de astronomie la universitatea din Chicago, a realizat în perioada aprilie – iunie 1918 o lucrare amplă de modelare a traiectoriilor proiectilelor, lucrare folosită ca bază de pornire pentru elaborarea tabelelor balistice pentru armata americană. Cercerarea s-a concretizat ulterior într-un volum intitulat „Noi metode în balistica exterioară”, și publicat în anul 1926. Lucrarea descrie în amănunt metode pentru modelarea și estimarea traiectoriilor proiectilelor și elaborarea tabelelor balistice, inclusiv a tabelelor destinate apararii antiaeriene.

O altă modelare remarcabilă rămasă în istoria științei a fost cea a matematicianului norvegian Carl Stormer care, împreună cu echipa sa de cercetători a calculat orbitele a numerosi electroni aflați în câmpul magnetic al pămantului. Cercetarea, întinsă pe mai mulţi ani, avea ca scop confirmarea teoriei sale privind aurora boreală. În perioada 1926–1955 au fost calculate 120 de orbite, necesitând 4500 de ore de muncă. [3]

Dezvoltarea tehnicii de calcul și dezvoltarea de sisteme software din ce în ce mai sofisticate, au permis noi abordări în domeniile clasice ale științei (astronomie, fizică, economie, științe sociale), precum și în domenii interdisciplinare precum bioinginerie, biofizică, biochimie, bioinformatică, inginerie biomedicală. Astfel asistăm la construirea și utilizarea tot mai frecventă în activitatea de cercetare a pachetelor de programe pentru modelarea și simularea diverselor tipuri de procese, precum și la apariția unei game din ce în ce mai variate de modele [4].

Modelele matematice construite și simulate cu ajutorul calculatoarelor sunt utilizate pentru explicitarea și studiul comportamentului proceselor evitând experimentele, uneori extrem de laborioase și costisitoare. [5]

Un domeniu important în care și-a găsit aplicarea modelarea științifică a fost funcţionarea inimii. O cauză importantă a deceselor în urma disfuncţionalităţilor cardiace o constituie fenomenul fibrilaţiei ventriculare, în care funcţionarea inimii coordonată corect este înlocuită de oscilații locale ineficiente ale ventriculelor. Modelarea matematică a aratat de ce se produce acest fenomen.

Figura proeminentă în această direcţie a cercetării teoretice o reprezintă Arthur Winfree care, în anul 1989, a primit premiul Einthoven pentru contribuțiile sale la studiul și modelarea activității cardiace. Au fost utilizați algoritmi puternici de calcul și au fost aplicate modele de simulare specifice pentru studiul fluxului sanguin în inima. Multe realizări experimentale ulterioare au fost sugerate de modelare. Chiar în cazul utilizării modelelor simple bidimensionale, progresul a fost suficient pentru a determina un început semnificativ în proiecterea valvelor cardiace artificiale. În prezent sunt în dezvoltare modele tridimensionale, de complexitate ridicată.

Modelarea are de asemenea un impact enorm în neuroștiințe. Modelul Hodgkin-Huxley pentru descrierea curenților ionici membranari a fost extins și aplicat la un mare număr de membrane neuronale pentru diverse categorii de neuroni. Rolul dendritelor în determinarea caracteristicilor de intrare-ieșire ale neuronilor nu a fost înțeles înaintea descoperirii teoriei cablurilor a lui Rall. Începând cu anii 70, au fost dezvoltate modele matematice cantitative și calitative ale rețelelor neuronale. În plus, lucrările lui Fitzhugh au demonstrat valoarea modelelor neliniare simplificate și a analizei matematice calitative.

Altă contribuție majoră a modelării matematice în fiziologie o constituie teoria dinamicii cross-bridge, aplicată în studiul mușchilor striați. Introdusă de A.F. Huxley în 1957 și dezvoltată de T.E. Hill, Podolsky, Lacker și alții, această teorie a oferit nu numai o explicare satisfăcătoare a comportamentului mecanic al mușchiului, dar a fost folosită de asemenea pentru furnizarea principiilor de organizare pentru cercetările biochimice asupra fundamentului energetic și a mecanismelor implicate în controlul contracțiilor musculare.

Sfârșitul anilor 50 va aduce un nou concept, «modelul neuronului artificial – Perceptronul», cu implicații deosebite in dezvoltarea ulterioară a inteligenței artificale. Perceptronul este un model de celulă nervoasă artificială elaborat de Frank Rosenblatt în anul 1957, în cadrul Laboratotului Aeronautic al Universității Cornell. Este caracterizat prin mai multe intrări, după modelul dendritelor neuronale, o ieșire – corespunzătoare axonului –, și o funcție de transfer ce caracterizează neuronul artificial. Fiecare intrare este caracterizată printr-o anumită pondere. Structura este specifică sistemelor de inteligență artificială, cu capacitatea de autoinstruire prin algoritmi specifici de învățare, procesul de instruire determinând modificarea valorilor ponderilor intrărilor.

Percepronul multistrat, dezvoltat în anul 1986, este alcătuit din mai multe straturi de neuroni artificiali interconectați. Structurile pe bază de perceptron multistrat folosesc algoritimi de invatare prin metoda „back propagation” și se utilizează în sistemele inteligente de recunoaștere a imaginilor. [5]

**Axiomatica modelării matematice în bioştiinţe**

Deosebirea fundamentală în privinta abordării problematicii între biologia clasică, experimentală, și „biologia matematică” o constituie modul de descriere al fenomenelor pentru diferite niveluri de organizare, precum și modul în care trebuie selectate și integrate procesele studiate la scară mică (celular, subcelular) în cadrul fenomenelor de la un nivel superior pentru a păstra întregul înțeles biofiziologic. Un exemplu elocvent în acest sens: în cazul rețelelelor neurale se folosesc așa-numiții „neuroni ideali", structuri puternic simplificate, care ignoră foarte mult din ceea ce se cunoaște în domeniul biologiei și fiziologiei celulare.

Utilizarea modelelor matematice în cadrul bioștiințelor prezintă o multitudine de avantaje. Cu ajutorul modelelor pot fi cercetate o serie de mecanisme biologice și fiziologice, în domenii de complexitate extrem de ridicată, unde transformările elementare sunt foarte puțin cunoscute. Totodată, modelele pot fi folosite pentru predictarea de fenomene noi, testabile, putând evidenția deficiențe ale cunoștințelor curente și putând sugera totodată noi experimente sau direcții de cercetare, subliniind în același timp interdisciplinaritatea necesară elaborării lor. Modelele matematice au constituit, după cum menționam mai înainte, punctul de plecare pentru ipoteze și cercetări biologice și fiziologice, un exemplu în acest sens fiind reprezentat de modelul Hodgkin-Huxley, ce pornește de la ipoteza generării curenților macroscopici de către o serie de „pori" moleculari, ceea ce a dus la descoperirea ulterioară a canalelor ionice membranare și a mecanismelor ce stau la baza funcționării acestora.

Sistemele biologice sunt sisteme continue, caracterizate printr-un grad ridicat de complexitate și ierarhizare. De aceea, în construirea modelelor matematice care descriu evoluția unui sistem biologic trebuie avute în vedere câteva elemente, cum ar fi specificitatea sistemului studiat și caracterul discret al măsurătorilor în contextul unui sistem care evoluează continuu precum și reuniunea unor proprietăți ale modelului obținut: coerența rațională, unicitate, capacitate de predicție. Având în vedere că un model matematic reprezintă în esență formalizarea, cu ajutorul diferitelor categorii de ecuații matematice, a transformărilor intervenite între diferitele subsisteme ale unui sistem biologic, Pierre Delattre propunea în anii 1971 următorul formalism pentru un sistem de transformări: [6]

Axioma 1:

Obiectele studiate sunt împarțite în clase de echivalență funcțională. Clasele E1, E2, …, En, numărul de elemente din clase la momentul t fiind N1, N2, …, Nn. Fiecare clasa corespunde unei stări funcționale distincte.

*Axioma 2:*

Între două clase oarecare, Ej și Ek, posibilitatea de transformare poate fi:

1. inexistentă
2. cu sens unic
3. cu dublu sens

Axiomele 1 și 2 definesc structura topologică, calitativă a modului de descriere adoptat.

Axioma 3:

Pentru o transformare Ej→Ek, provocată de un câmp de intensitate φ

$$F_{kj} = p_j * \varphi * N_j$$

unde: $p_j$ = probabilitate elementară, reprezintă un factor de proporționalitate dependent de clasele considerate.

*Axioma 4:*

Pentru o transformare spontană, Ej→Ek,

$$F_{kj} = n_{kj} * N_j$$

unde: $n_{kj}$ = factor de proporționalitate

*Axioma 5:*

Pentru o transformare care implică aj elemente de la clasa Ej, aj+1 elemente de la clasa Ej+1, …, aj+p elemente de la clasa Ej+p, F trebuie sa fie determinată în funcție de clasele de început și de sfârșit ale transformării:

$$F = k * N_j^{aj} * N_{j+1}^{aj+1} * \ldots * N_{j+p}^{aj+p}$$

unde: k = factor de proporționalitate

*Axioma 6:*

O transformare Ej→Ek poate, într-o manieră generală, să sustragă akj elemente din clasa Ej și să adauge bkj elemente în clasa Ek, unde a, b > 1.

Această axiomă permite descrierea unor fenomene cum ar fi:

1. disociația,
2. polimerizarea,
3. depolimerizarea,
4. multiplicarea,
5. reproducerea, etc.

*Axioma 7:*

Anumite restricții, în particular de natură geometrică, pot impune între anumite clase respectarea unor relații de tipul:

$$\xi\,(N_j, N_k, \ldots) = 0$$

Când există restricții (ξ), ele antrenează o reducere a dimensiunii ecuațiilor ce descriu evoluția sistemului și, implicit, reducerea numărului de variabile.

Această axiomă se referă la faptul că, din rațiuni geometrice, elementele anumitor clase pot fi supuse la restricții care impun respectarea între ele a anumitor relații.

Exemplu: clase cum ar fi volumul și suprafața unui anumit domeniu din spațiu – numărul elementelor situate în clasa de suprafață poate fi determinat în fiecare moment de numărul de elemente din clasa de volum.

Ecuațiile care descriu comportamentul temporar al sistemului de transformări se obțin făcând pentru clasa respectivă bilanțul între intrări și ieșiri:

$$dN_j/dt = -S_j + Q_j + E_j,\ j = 1, \ldots, n$$

unde: $n$ = numărul de clase al sistemului; $S_j$ = ieșirile elementelor din clasa $E_j$ în funcție de conținutul celorlalte clase din sistem:

$$S_j = \xi\, a_{kj} * F_{kj} + a_{ej} * F_{ej}^{\ k}$$

unde: $F_{kj}$ = ieșirile clasei $E_j$ către alte clase $E_k$ ale sistemului; $F_{ej}$ = ieșirile clasei $E_j$ către exteriorul sistemului.

Qj = intrările de elemente Ej dependente de cel putin o clasă din sistem:

$$Q_j = \xi\, b_{jk} * F_{jk} + [F_{je}]$$

unde: $F_{jk}$ = intrările în clasa $E_j$ provenind din alte clase $E_k$; $F_{je}$ = intrările elementelor din clasa $E_j$, provenind din exteriorul sistemului, depinzând însă de conținutul cel putin al unei clase a sistemului; $E_j$ = intrările în clasa $E_j$ provenind din exteriorul sistemului.

Analizând din punct de vedere axiomatic ecuațiile ce descriu sistemul, se poate constata că, în cazul în care în descrierea anumitor transformări se regăsește axioma 5, sistemul studiat va avea un caracter neliniar, în timp ce, în cazul în care se constată că toate relațiile ce descriu sistemul îndeplinesc numai axiomele 3 și 4, atunci sistemul este liniar.

**Metode utilizate în modelarea matematică a biosistemelor**

În general, cercetătorul descrie un fenomen cu ajutorul a trei tipuri de parametri:

1. Parametrii Xi, cărora li se pot doar măsura valorile xi, fără a putea fi controlați.

2. Parametrii Uj, care pot fi măsurați, și cărora li se pot fixa apriori valorile uj,

3. Parametrii temporali Tk.

Prin experimente repetate, se obține o statistică de valori diferite pentru (Xi, Uj, Tk). Presupunând că între aceste valori se pot stabili relații de tipul

$$F_l\,(x_1, \ldots, x_n, u_1, \ldots, u_p, t_1, \ldots, t_q) = 0$$

în cazul în care numărul acestor funcționale este suficient, ele permit predictarea manierei în care vor varia acești parametrii unii în funcție de ceilalți. Funcționalele $f_l$ poartă numele de **legi**.

Modelele continue uzuale se construiesc stabilind ecuațiile de echilibru și de transfer de masa și energie dintre subsistemele sistemului și prin descrierea matematică a relațiilor între forțele care acționează asupra sistemului considerat și diferiți parametrii care le situează în spațiu și timp și le caracterizează. Pentru reprezentarea modelelor în general se utilizează funcții polinomiale, funcții pluriexponențiale, sisteme de ecuații diferențiale, modele probabilistice, etc.

Fenomenele studiate în biologie se caracterizează printr-un grad ridicat de stabilitate, proprietate ce ușurează cercetarea, fiind necesar ca modelul să prezinte aceleași particularități de rezistență la perturbații, așa cum prezintă sistemul biologic real. Dintre toate clasele de modele, cele mai apte de a reprezenta un fenomen ce caracterizează viul sunt modelele diferențiale. [5]

În funcție de modul în care se exprimă legile de evoluție ce caracterizează un biosistem deosebim:

Modele diferențiale:

1. Modele definite prin ecuații diferențiale autonome;
2. Modele definite prin ecuații diferențiale neautonome;
3. Modele definite prin ecuații diferențiale cu restricții;
4. Modele definite prin ecuații diferențiale cu întârziere (timpi morți);
5. Modele integrodiferențiale, care includ efecte de întârziere;
6. Modele definite de ecuații cu derivate parțiale;
7. Modele combinate, conținând toate tipurile de ecuații prezentate anterior;

8. Formalismul transformărilor punctuale;
9. Modele utilizând teoria automatelor;
10. Modele descrise prin limbaje universale de modelare (Matlab, Simulink);
11. Modele descrise prin limbaje de modelare specifice bioinformaticii. [5]

**Condiții necesare pentru stabilirea unui model**

1. Înțelegerea amănunțită a comportamentului sistemului studiat, pe baza observațiilor și a datelor experimentale.
2. Cunoașterea profundă a proprietaților diferitelor ecuații ce pot constitui modelul.
3. Problema trebuie formulată corect *în sens Hadamarad*, respectiv să verifice urmatoarele restricții:
   - Soluția trebuie să existe
   - Soluția trebuie să fie unică
   - Soluția trebuie să fie continuă în raport cu restricțiile condițiilor la limită, sau în raport cu condițiile inițiale.

În plus, este evident faptul ca pentru o ecuație sau un sistem de ecuații ce modelează un sistem biologic, soluția trebuie sa fie stabilă, adică să ramână aceiași din punct de vedere calitativ, în cazul unor variații relativ mici ale parametrilor care intervin în structura ecuației, sau a sistemului de ecuații, sau în cazul unor ușoare modificări ale structurii modelului (adăugarea sau eliminarea unor termeni liniari sau neliniari, modificarea ordinului ecuațiilor, introducerea sau eliminarea unor termeni de întârziere în domeniul timpului, introducerea factorilor de zgomot, etc). Altfel spus, modelul trebuie să fie *„grosier” în sens Andronov-Pontrjagin, sau stabil din punct de vedere structural*.

Modificări minore ale parametrilor sau structurii modelului pot conduce la efecte importante respectiv la obținerea așa numitelor *solutii de bifurcație*, respectiv soluții situate la granița între două comportamente calitativ diferite. Deoarece nu corespund unui comportament observabil, datorită instabilitații lor structurale, aceste soluții prezintă o importanță deosebită din punct de vedere practic. Ele permit definirea, în spațiul parametrilor sistemului considerat sau în spațiul funcțional, a domeniilor sau subspațiilor în interiorul cărora sistemul prezintă un comportament bine determinat din punct de vedere calitativ, precum și condițiile de modificare a respectivului comportament calitativ. [2]

## Concluzii:

Utilizarea modelelor matematice în cadrul științelor își are începuturile în secolul al XVII-lea și s-a intensificat pe măsura dezvoltării tehnicii de calcul și a tehnologiilor de măsurare și investigare. Cu ajutorul modelelor pot fi cercetate o serie de mecanisme și fenomene în domenii de complexitate extrem de ridicată, unde transformările elementare sunt foarte puțin cunoscute. Totodată, ele pot fi folosite pentru predictarea de fenomene noi, testabile, putand evidenția deficiențe ale cunoștințelor curente și sugera noi experimente sau direcții de cercetare.

### Bibliografie:

[1] Matlab – A Ubiquitous Tool for the Practical Engineer, Clara M. Ionescu: Cristina – Maria DABU, *Matlab în Biomodeling,* INTECH 2011,

[2] Cristina – Maria Dabu, M. D. Nicu, *Calculatoare în Biotehnici – Note de curs pentru uzul studentilor*, Universitatea „Politehnica" Bucureşti, 1997

[3] „A History of Scientific Computing, " Stephen G.Nash, editor, pp. 88–105. C W Gear, R. D. Skeel, *The Development of ODE Methods: A Symbiosis between Hardware and Numerical Analisys*© 1990 ACM Pres;

[4] Christley et al. BMC Systems Biology 2010, 4: 107, *Integrative multicellular biological modeling: acase study of 3D epidermal development using GPU algorithms*, 2010

[5] Cristina – Maria Dabu, *Contributii privind* modelarea matematică şi pe calculator a *structurilor neuronale cu aplicatie în radiobiologie*, Universitatea „Politehnică" Bucureşti, 2001

[6] Pierre Delattre, *L' evolution des systemes moleculaires*, Maloine-Doin, Paris, 1971