FIZICĂ ŞI INGINERIE

SIMULAREA SISTEMELOR FIZICE COMPLEXE ÎN BAZA MODELELOR ABM

Roman GUŢU, Gheorghe CĂPĂŢÂNĂ, Florentin PALADI

Modelele computaţionale ABM (*agent based models*) se consideră a fi o nouă metodologie dezvoltată în scopul de a studia procese din sisteme complexe la interacţiunea dintre structurile macro- şi microscopice. De regulă, multe asemenea sisteme sunt caracterizate prin faptul că proprietăţile lor generale, rezultat al superpoziţiei mai multor stări individuale ale subsistemelor componente, nu pot fi deduse printr-o simplă extrapolare a evoluţiei părţilor componentelor de la un nivel structural inferior la unul mai superior, ci reprezintă proprietăţi calitativ noi [1]. Acesta este şi cazul sistemelor complexe care posedă proprietatea de autoorganizare. Totodată, asemenea sisteme neliniare complexe necesită şi metode mai avansate, „netradiţionale" de cercetare, modelele analitice fiind acceptabile doar în cazuri-limită, iar simplificarea corespunzătoare a modelului riscă să conducă deseori la excluderea a însuşi factorului-cheie. Pe de altă parte, un studiu la nivel microscopic ar descrie adecvat interacţiunea şi comportarea părţilor componente sau agenţilor care formează sistemul complex, iar, în consecinţă, şi a sistemului în ansamblu.

Totodată, au fost elaborate şi programe de calcul corespunzătoare. De exemplu, JAS reprezintă un cunoscut program pentru simulări în baza modelelor ABM cu următoarele trăsături de bază: simularea evenimentelor discrete temporal, bazat pe tehnica de programare Java, management flexibil al unităţii de timp utilizate (secunde, minute, ore, zile etc.), generator de evenimente desfăşurate în timp real, suport pentru intrări/ieşiri XML de date şi format SVG al fişierelor, posibilitate de clasificare a sistemelor modelate, Sim2Web pentru prezentarea în reţeaua globală Internet a simulărilor şi interacţiunea cu utilizatorii on-line, MultiRun pentru gestionarea cu modele ce posedă cicluri repetate la calibrarea automatică a parametrilor, componentă pentru efectuarea calculelor statistice bazată pe pachetul *cern.jet* ce posedă fişier şi bază de date cu intrări/ieşiri etc. [2]. În particular, *jas.statistic* reprezintă o bibliotecă de funcţii statistice proiectată ca parte integrantă a procesului de simulare. Deoarece seturile de date colectate la diferite etape ale executării programului sunt deseori actualizate, iar, uneori, şi însăşi structura datelor se modifică, codul-sursă a fost optimizat cu scopul de a reduce volumul memoriei ocupate a calculatorului şi a consumului de timp CPU. Structura *jas.statistic* conţine trei compartimente: *jas.statistics* pentru interfeţe, *jas.statistics.reflectors* pentru extragerea datelor şi memorarea lor, iar *jas.statistics.functions* conţine funcţiile utilizate la efectuarea calculelor statistice în baza algoritmilor localizate în *cern.jet.stat*.

Au fost propuse şi modele teoretice pentru a descrie autoorganizarea. Elementul central al acestor modele reprezintă noţiunea de „cluster”. Dacă vom considera un set format din *M* elemente (entităţi sau agenţi), atunci fiecare agent poate avea conexiuni cu fiecare din cei *M*-1 agenţi rămaşi. Rodgers et al. [3-6] a dezvoltat şi soluţionat analitic un model cinetic care descrie distribuţia clusterilor după dimensiune în prezenţa a doar două fenomene din următoarele posibile: creştere (*growth*), fragmentare (*fragmentation*), coagulare (*coagulation*), adunare (*addition*) şi anexare (*attachment*). Celor 10 combinaţii posibile le vor corespunde diferite variante ale modelului. Distribuţia de echilibru a clusterilor după dimensiune, obţinută de către autori în formă analitică, posedă o dependenţă de putere truncată exponenţial (*power law with an exponential cut-off*). Rezolvarea numerică a acestui tip de probleme implică schema reprezentată Figură. De notat că un pas al programului de calcul corespunde realizării unei stări noi a sistemului pentru condiţiile de frontieră date şi în cazul condiţiilor iniţiale nenule. Aceste valori iniţiale sunt definite *a priori*.

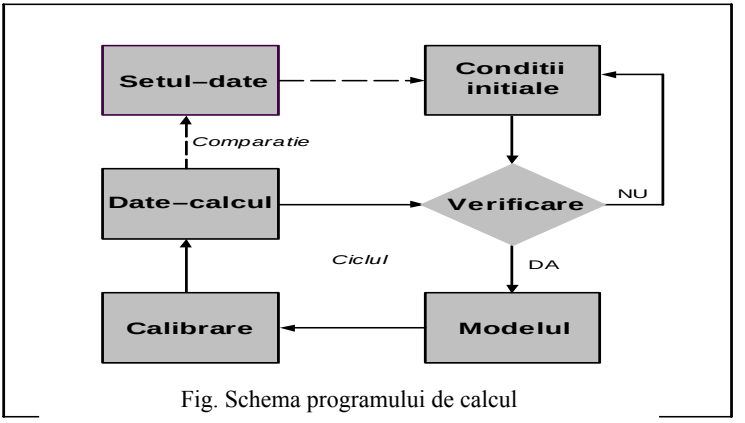


Fig. Schema programului de calcul

Ca un test pentru algoritmul realizat, am considerat modelul de molecule rigide, pe un grilaj pătrat bidimensional cu condiţii periodice la limită [7]. Toate formele au fost formate din patru celule învecinate, unul dintre cele trei tipuri de celule: neutru, pozitiv sau negativ. Interacţiunile dintre celule sunt doar între celulele vecine, compuse din două celule neutre, una pozitivă, şi una negativă. Am considerat sisteme relativ mici, realizate din 40 de particule pe o reţea 32×30.

Am identificat un agent cu o moleculă sau un grup de molecule. Iniţial, fiecare agent coincide cu o moleculă rigidă (sau aproximată printr-o formă geometrică). Fiecare agent, în timpul simulării, poate exercita următoarele acţiuni: (1) trecerea la o nouă poziţie pe grilaj, (2) combinarea cu un alt

agent, sau (3) împărţirea în doi agenţi diferiţi (dacă este format din mai multe componente inseparabile). Divizarea este interzisă pentru fiecare dintre agenţii iniţiali. Mişcarea a unui agent este decisă stochastic, deciziile care fuzionează sunt deterministe, iar decizia de a împărţi un agent în două elemente este determinată de procesul de adaptare. Mutarea fiecărui agent seamănă cu un algoritm MC Metropolis, cu multiple tentative de mişcări, predefinite de un set de *M* mişcări permise. Mişcările permise sunt deplasarea cu o singură unitate pe reţea şi rotaţii prin multiplii lui 90°. Pentru fiecare nouă mutare *m*, potenţialul energetic E_m se calculează (E_m=+∞. În cazul în care tentativa de mişcare duce la o suprapunere cu un alt agent). Mişcarea reală este selectată cu probabilitatea:

$$P_m = \min\{1, \exp((E_0 - E_m)/k_B T)\}/M \quad 1 \le m \le M \quad [1],$$

unde E_0 este energia potenţială înainte de mişcare, *T* este parametru ce corespunde temperaturii algoritmului canonic MC.

Am considerat aplicarea modelării bazate pe agenţi pe problema moleculară de autoasamblare. Am arătat că este posibil să se elaboreze o combinaţie stochastico-deterministă, iar normele de adaptare, care conduc un sistem haotic să se organizeze într-o configuraţie ordonată este realizarea stărilor cu valoarea minimă a energiei sistemului. O caracteristică-cheie este că algoritmul, prin autodefinirea agenţilor, defineşte mutările pentru a fi testate şi le actualizează ca *payoff*-uri la simulare. Conceptele de combinare inteligentă şi fragmentare pot fi folosite pentru a extinde sistemele de simulare diferite de la MC şi pentru a efectua simulări ale sistemelor reale. Multe pachete de modelare a sistemelor fizice moleculare implementează mişcările corpurilor rigide, de exemplu, utilizatorul decide la începutul simulării ce porţiuni ale sistemului sunt rigide (de exemplu, moleculele de solvent sau a unor porţiuni ale unei proteine) şi care sunt dinamice. Se pot utiliza regulile stabilite pentru agenţi pentru a defini *ab initio* ce porţiuni ale sistemului sunt rigide, modificând definiţia încontinuu în procesul simulării.

Referinţe:

1. PALADI, F. *Sisteme complexe: modele analitice şi numerice avansate de tip cluster*. Chişinău: CEP -USM, 2005, 174 p. ISBN 9975-70-581-2.
2. JAS library, http://jaslibrary.sourceforge.net/index.html [Accesat 29.05.2013].
3. RODGERS, G.J., YAP, Y.J. Growth and addition in a herding model. In: *Eur. Phys. J. B*. 2002, vol. 28, pp. 129-132;
4. RODGERS, G.J., ZHENG, D. A herding model with preferential attachment and fragmentation. In: *Physica A*. 2002, vol. 308, p. 375-380.
5. RAWAL, S., RODGERS, G.J. Growth and coagulation in a herding model. In: *Physica A*. 2004, vol. 344, p.50-55.
6. PALADI, F., EREMEEV, V. A Szilard model-based computational study of the evolution of agents-clusters, In: *Physica A*. 2005, vol. 348, p. 630-640.
7. TROISI, A, WONG, V., RATNER, M.A. An agent-based approach for modeling molecular self-organization. In: *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. 2005, vol.102, no. 2, p. 255-260.