

## MODELE COMPUTAȚIONALE ABM DE CERCETARE A SISTEMELOR COMPLEXE

Conf.univ. dr. Florentin PALADI \*  
Catedra de Fizică Teoretică, Universitatea de Stat din Moldova

*Scopul principal al acestui articol este cercetarea aspectelor microscopice ale modelelor stocastice, care pot fi comparate cu modelele computaționale bazate pe agenți (ABM), precum și stabilirea conexiunii dintre modelele ABM și procesele stocastice. O aplicare a abordării propuse se referă la procesul de nucleere, fenomen întâlnit pe larg în natură și tehnologie, care poate fi considerat ca un reprezentant al fenomenelor de agregare în sistemele complexe. În special, noi propunem un model generic stocastic pentru formarea centrelor de cristalizare. În general, este cunoscut faptul că la baza mecanismului tranzițiilor de fază de gradul întâi este apariția acestor centre de cristalizare și atât nucleul definit ca un cluster de molecule sau atomi, cât și lucrul de nucleere, o barieră de energie pentru tranziția de fază, sunt principalele mărimi termodinamice în teoria dată. Totodată, din punct de vedere statistic, formarea cristalitului de dimensiune critică este un fenomen aleator, cu o probabilitate determinată considerabil de valoarea lucrului de nucleere.*

*The main purpose of this article is to get new insights into microscopic explanations of stochastic models, which can be compared with the agent-based computational models, and to bridge the gap between agent-based models (ABM) and stochastic processes. An application of the proposed approach refers to the nucleation process, a widely spread phenomenon in both nature and technology, which may be considered as a representative of the aggregation phenomena in complex systems. In particular, we propose a generic stochastic model for crystal nucleation. It is generally known that first-order phase transitions occur by nucleation mechanism, and both the nucleus, a cluster of molecules or atoms, and the nucleation work, a energy barrier to the phase transition, are basic thermodynamic quantities in the theory of nucleation. However, the critical nucleus formation is statistically a random event with a probability largely determined by the nucleation work.*

**Cuvinte cheie:** tranziții de fază; sisteme complexe; ABM; procese stocastice

### INTRODUCERE

Modelele ABM (*agent based models*) reprezintă o metodologie nouă, dezvoltată cu scopul de a studia procese din sisteme complexe la interacțiunea dintre structurile macro- și microscopice. De regulă, multe asemenea sisteme sunt caracterizate prin faptul că proprietățile lor generale, rezultat al superpoziției mai multor stări individuale ale subsistemelor componente sau un agregat al acestora, nu pot fi deduse printr-o simplă extrapolare a evoluției părților componentelor de la un nivel structural inferior la unul superior, ci reprezintă proprietăți calitativ noi. Acesta este cazul sistemelor complexe care manifestă deseori proprietatea de autoorganizare, ce reprezintă, în temei, capacitatea sistemului de a manifesta noi strategii individuale de evoluție [1–17]. Totodată, asemenea sisteme neliniare complexe necesită și metode mai avansate, “netradiționale” de cercetare, modelele analitice fiind acceptabile doar în cazuri limită, iar simplificarea corespunzătoare a modelului riscă să conducă deseori la excluderea a însăși factorului-cheie. Pe de altă parte, un design flexibil la nivel microscopic ar descrie adecvat interacțiunea și comportarea părților componente sau agenților care formează sistemul complex, iar, drept consecință, și a sistemului în ansamblu. Metodologia respectivă s-a consolidat pe parcursul ultimelor decenii ale secolului XX, deși ponderea rezultatelor corespunzătoare în totalul cercetărilor științifice,

---

\* tel.: 577584, e-mail: fpaladi@usm.md

atât din motive obiective, cât și subiective, este încă ne semnificativă. Totodată, modelele ABM oferă atât un grad sporit de generalitate, cât și posibilitatea unei estimări adecvate a rezultatelor. Mai mult ca atât, avantajul esențial al acestora constă în capacitatea lor de a descrie fenomene complexe, deoarece modelele ABM suportă o detaliere mai bogată a fenomenului. Totodată au fost elaborate și 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, bazată pe tehnica de programare Java, management flexibil al unității de timp utilizate (secunde, minute, ore, zile etc.), generator de evenimente desfășurate în timp real, suport pentru intrări/ieșiri XML de date și format SVG al fișierelor, posibilitate de clasificare a sistemelor modelate, Sim2Web pentru prezentarea în rețeaua globală Internet a simulărilor și interacțiunea cu utilizatorii online, MultiRun pentru gestionarea cu modele ce posedă cicluri repetate pentru calibrarea automată a parametrilor, componentă pentru efectuarea calculelor statistice bazată pe pachetul *cern.jet* ce posedă fișier și bază de date cu intrări/ieșiri etc. [18]. În particular, *jas.statistic* reprezintă o bibliotecă de funcții 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 și însăși structura datelor se modifică, codul-sursă a fost optimizat cu scopul de a reduce volumul memoriei ocupate a calculatorului și a consumului de timp CPU. Structura lui *jas.statistic* e alcătuită din trei părți: *jas.statistics* pentru interfețe, *jas.statistics.reflectors* pentru extragerea datelor și memorarea lor și *jas.statistics.functions* care conține funcțiile utilizate la efectuarea calculelor statistice în baza algoritmilor, localizate în *cern.jet.stat*.

O altă problemă actuală se referă la modelarea computațional-probabilistică și AMB a sistemelor complexe de tip cluster. În general, clusterul reprezintă un agregat format dintr-un număr oarecare de elemente similare considerate unitare și indivizibile. Astfel, această problemă actuală în domeniu constă în demonstrarea conexiunii dintre modelarea probabilistică sau stocastică și cea computațională ABM, despre care cunoscutul fizician italian D. Costantini în 2004 a menționat următoarele: "Our ambition is to bridge the gap between agent-based computational models (where there is a lack of probabilistic insight) and stochastic processes (that appear "phenomenological" if they are non-"agent-based")" [17]. Importanța rezolvării acestei probleme rezidă în faptul că soluția ei ar oferi în cazul modelelor ABM un instrument puternic de optimizare a distribuției agenților în sistem, care în modelele ABM se realizează, de regulă, prin metoda probelor și erorilor. Totodată, ecuațiile probabilistice sau stocastice determină valoarea medie a soluției problemei, care în modelarea ABM se obține doar după realizarea tuturor interacțiunilor posibile din sistem, care în cazul unui număr mare de particule poate rula pe calculator o perioadă îndelungată de timp. Nu în ultimul rând, cercetarea ar putea demonstra un fapt fascinant privind existența unor legități universale în sistemele complexe indiferent de natura lor.

## BAZELE MODELELOR COMPUTAȚIONALE ABM

În continuare vom efectua o generalizare a componentei matematice a modelelor respective, deoarece simularea propriu-zisă a sistemului se realizează conform unui set de funcții bine definite atât deterministic, cât și stocastic. Aceste funcții descriu în mod univoc dinamica sistemului la nivel microscopic. Mai mult ca atât, o eventuală stare de echilibru este descrisă cu ajutorul unei funcții bine definite de parametrii structurali și de condițiile inițiale, impuse sistemului. Să considerăm că în fiecare moment de timp  $t$  un element, singleton sau agent  $i$ , unde  $i \in 1, 2, \dots, n$ , este descris univoc cu ajutorul unei variabile de stare  $x(i, t)$ , iar evoluția acesteia este caracterizată de ecuația:

$$x(i, t) = f_i(x(i, t), x(-i, t); a(i)), \quad (1)$$

unde sunt specificate caracteristicile individuale atât sub aspect funcțional și structural ( $f_i$  și  $a(i)$ , respectiv), cât și starea celorlalte unități, cu excepția lui  $i$ , din sistem,  $x(-i, t)$ . După ce au fost apreciate caracteristicile sistemului la nivel microscopic, urmează definirea unor mărimi macroscopice, astfel  $Y$  referindu-se la întreg ansamblul:

$$Y(t) = F(x(1, t), \dots, x(n, t)). \quad (2)$$

Problema se reduce la rezolvarea ecuației (2) pentru fiecare moment de timp  $t$ , indiferent de particularitățile lui  $f_i$ , astfel încât o soluție există oricând dacă vom rezolva iterativ fiecare termen  $x(i, t)$  din (2) folosind relațiile:

$$\begin{aligned} Y(0) &= s(x(1, 0), \dots, x(n, 0)), \\ Y(1) &= s(x(1, 1), \dots, x(n, 1)) \\ &= s(f_1(x(1, 0), x(-1, 0); a(1)), \dots, f_n(x(n, 0), x(-n, 0); a(n))) \quad (3) \\ &= g_1(x(1, 0), \dots, x(n, 0); a(1), \dots, a(n)), \\ &\vdots \\ Y(t) &= g_t(x(1, 0), \dots, x(n, 0); a(1), \dots, a(n)). \end{aligned}$$

Ecuația de mișcare (3) exprimă univoc valoarea lui  $Y$  în orice moment de timp  $t$  prin condițiile inițiale ale sistemului și valorile parametrilor  $a(i)$ . Când  $g_t$  converge către o funcție independentă de timp, se obține expresia pentru valoarea de echilibru a lui  $Y$ , ca funcție de condițiile inițiale și parametri:

$$Y^e = \lim_{t \rightarrow \infty} Y_t = g(x(1, 0), \dots, x(n, 0); a(1), \dots, a(n)) \quad (4)$$

Relațiile (1)–(4) definesc formalismul matematic atât al modelelor microscopice dinamice, cât și cel al modelelor ABM. Să considerăm în continuare implementarea acestei scheme în cazul modelului bazat pe agentul reprezentativ: indicele  $i$  se omite în virtutea faptului că nu putem vorbi despre caracteristici individuale sub aspect funcțional și structural, iar ecuațiile rezultante de mișcare (3) vor fi foarte simple, adică este posibilă transformarea lor algebrică, pot fi calculate derivatele, comparate diferite soluții care descriu starea de echilibru etc. În varianta “tradițională”, atunci când condițiile de echilibru sunt impuse sistemului din exterior, acesta trece în echilibru, iar mișcarea lui către echilibru este ignorată. Prin urmare, o asemenea descriere nu poate fi una de tip cinetic și va fi ignorată în continuare.

Să revenim însă la modelele ABM analizând din ecuațiile (3) ecuația de mișcare pentru  $Y(t)$ . Pentru valori mari ale lui  $t$  și  $n$ , evaluarea expresiei  $g_t(\dots)$  poate fi dificilă, fiind imposibilă orice tentativă de soluționare a ei prin metode algebrice. Această situație este similară celei din teoria jocurilor când este implicat un număr mare de agenți. Totodată funcțiile (3) sunt complet determinate, astfel fiind posibilă calcularea valorilor lui  $Y(t)$  pentru diferiți parametri și condiții inițiale, în particular specificând forma funcțională  $\hat{g}_t(x_{1,0}, \dots, x_{n,0}, \alpha_1, \dots, \alpha_n, \bar{\beta})$  pentru a fi acordată unui oarecare set artificial de date generat de simulare, unde  $\beta$  sunt coeficienții pentru  $\hat{g}_t(\dots)$ . De exemplu, dacă  $\hat{g}_t(\dots)$  posedă o dependență liniară, atunci vor exista doi coeficienți  $\beta_0$  și  $\beta_1$  (punctul de intersecție și panta) pentru a fi estimați în baza datelor simulării. Aceasta este o practică obișnuită în simulare, iar modelele obținute sunt denumite *metamodelle* sau *simulatoare* etc. [14]. Latura slabă a acestei proceduri constă în faptul că setul de date artificiale poate să nu fie reprezentativ pentru toate rezultatele modelului respectiv. Cu alte cuvinte, este posibil ca atunci când vom alege un alt set de parametri comportarea funcției  $g_t(\dots)$  să se schimbe substanțial, iar metamodelul  $\hat{g}_t(\dots)$  să devină o descriere vagă a realității. Aici sunt necesare două observații. În primul rând, dacă modelul se referă la date obținute în simularea pe calculator, atunci el ar trebui să conțină și referințe la unele date experimentale. În timp ce aceste date observabile care generează procesul sunt necunoscute, rezultatele simulării ar putea, în principiu, devia de la descrierea corectă într-un oarecare moment de timp. În al doilea rând, ar putea exista și

anumite combinații ireale de parametri, dar de care nu ar trebui să se țină cont atât timp cât sunt rare (acesta nu este cazul modelelor, al căror scop reprezintă studierea fenomenelor critice). Uneori combinații particulare ale parametrilor adecvați modelului pot fi obținute prin metoda “probelor și erorilor”, iar atunci când valoarea de echilibru a lui  $Y$  (vezi relația (4)) nu depinde de condițiile inițiale, sistemul se va considera ergodic. Dacă sistemul este ergodic, pentru  $t > T$  starea sistemului va caracterizată de o singura funcție de distribuție  $F(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ , indiferent de starea sa inițială, iar fiecare rezultat particular al simulării se va încadra în limitele generale de evoluție a sistemului în ansamblu.

Aproximarea prin ecuația de mișcare  $g_t(\dots)$  a variabilei  $Y$  nu poate fi utilizată pentru estimarea de mai departe a datelor reale. Expresia care nu conține nici un coeficient necunoscut reprezintă o descriere a modelului bazat pe simulare pentru un set concret de parametri structurali și condiții inițiale și poate fi folosită pentru a estima capabilitatea modelului respectiv de a reproduce fenomenul analizat, prin aplicarea aceluiași metamodel  $\hat{g}_t(\dots)$  datelor reale și comparând vectorul-coeficient  $\bar{\beta}$ , estimat în baza datelor artificiale, cu setul de coeficienți corespunzători, obținuți pe baza datelor reale. Totodată, diferiți vectori-coeficienți  $\bar{\beta}$  sunt obținuți pentru diferite valori ale parametrilor de structură  $\alpha_i$ . Astfel, efectuând o comparare a rezultatelor simulării cu datele reale, putem varia valorile coeficienților de structură cu scopul de a micșora diferența dintre rezultate. Procedura respectivă se numește calibrare. Pe de altă parte, un exces de parametri ar putea deseori conduce la o subidentificare a modelului în virtutea reducerii restricțiilor, dar acest fapt nu poate fi un obstacol categoric în elaborarea modelului. Mai degrabă incapacitatea acestuia de a descrie satisfăcător fenomenul, de exemplu, în cazul modelelor algebrice simple, reprezintă un adevărat obstacol. Modelele ABM acceptă descrierea fenomenelor complexe și aceasta este o trăsătură fundamentală a lor. Subidentificarea modelului este uneori inevitabilă, deoarece evoluția sistemelor complexe este nedeterministă, bazată pe o interacțiune deseori aleatoare a părților componente.

Domeniul de aplicație al modelelor ABM este foarte vast. Din punct de vedere metodologic, modelele ABM trebuie validate atât la nivel macro, cât și la micronivel. Validarea la macronivel este dificilă, deoarece deseori rezultatele posedă o dependență complexă, și doar uneori, ca în cazul modelelor statistice simple, se obțin distribuții Gauss cu valori medii și dispersii constante. O problemă de natură tehnică reprezintă gestionarea unui volum uneori enorm de date, fapt ce implică programarea paralelă [19]. Mai mult ca atât, aceste date trebuie să fie funcții de timp. Totodată acești indicatori temporali fie lipsesc, fie posedă un caracter neunivoc. Care sunt atunci criteriile necesare pentru validarea modelelor ABM? În primul rând, comparația cu datele experimentale observabile, atunci când ele există, nu poate fi un criteriu sigur în cazul sistemelor complexe. Importanța majoră a modelului ar putea rezulta atunci fie din faptul că acesta sporește nivelul nostru teoretic de înțelegere a unui fenomen oarecare, fie că permite “experimentarea” pe calculator, fie ambele cazuri ar putea fi caracteristice. Făcând o paralelă cu studiul materiei la nivelul atomic-molecular, această situație este similară cu modelarea dinamicii moleculelor (*MD computer simulation*), când, folosind simulările pe calculator, putem studia detaliat mișcarea moleculară sau explora domenii ale temperaturii și presiunii în prezent inaccesibile experimental, iar rezultatele sunt folosite atât la testarea teoriilor curente, cât și pentru scoaterea în evidență a noi proprietăți încă neobservate experimental. Prin urmare, un al doilea criteriu important este acela, că modelul generează informații noi. Să admitem că a fost elaborat un model care doar descrie satisfăcător un fenomen sau altul deja cunoscut. Este bine? Da, dar ceva mai mult este necesar, de exemplu, să se obțină noi informații și noi dependențe sau conexiuni. Aceasta ne conduce la o întrebare fundamentală: cum pot fi integrate rezultatele cercetărilor din domeniul sistemelor complexe efectuate pe tematici similare? Căci doar comparând cu diferite lucrări

din domeniu vom putea evidenția elementele de noutate și valoarea unei cercetări concrete. După cum se știe, știința se dezvoltă prin acumularea graduală a cunoștințelor. Orice contribuție nouă este rezultatul unor studii precedente, astfel încât ea trebuie să fie în concordanță cu lucrările existente în care sunt folosite și alte metode de cercetare. Prin urmare, cel puțin se va face o conexiune cu alte lucrări (metode) din domeniu. Totodată studiul trebuie fundamentat și pe baza altor simulări ABM. În prezent, însă, este încă destul de dificil ca în acest nou domeniu de cercetare care se află într-o ascensiune rapidă să fie trasate conexiuni și limite bine determinate. În particular, în studiul descris în paragraful următor am încercat, pentru prima dată, să demonstrăm explicit existența legăturii dintre modelele computaționale ABM și cele probabilistice sau stocastice.

## APLICAȚIE. MODEL PROBABILISTIC DE FORMARE A NUCLEELOR DE CRISTALIZARE

Să considerăm că într-un sistem există  $N$  particule care se pot afla în trei stări diferite, pe care le vom numi *cluster*, *interfață* și *lichid*, și pot îndeplini trei acțiuni (iarăși *cluster*, *interfață* și *lichid*). Interacțiunea implică întotdeauna, în limbajul modelelor ABM, un agent activ și altul pasiv. În modelele geometrico-probabilistice de cristalizare [20–24] agentul activ este numit agresor, iar existența lui este condiția necesară și suficientă de generare a nucleelor în modelul Kolmogorov [24, p.19]. Astfel există patru combinații posibile care sunt prezentate în Tabelul 1, unde  $p_1 \dots p_4$  reprezintă probabilitatea de a depista aleator o oarecare particulă în una din cele patru combinații de stări sau, cu alte cuvinte, cota populației corespunzătoare caracterizată de fiecare combinație de stări.

Tabelul 1. Distribuția particulelor în clusteri

Tipul	Starea permisă	Starea interzisă	Probabilitatea de distribuție a particulelor	<i>Cluster</i>	<i>Interfață</i>	<i>Lichid</i>
1.	<i>Cluster/nucleu</i>	<i>Interfață</i>	$p_1$	$p_1$	–	0
2.	<i>Interfață</i>	<i>Lichid</i>	$p_2$	0	$p_1$ $p_2$	–
3.	<i>Interfață</i>	<i>Cluster/nucleu</i>	$p_3$	$-p_3$	$p_3$	0
4.	<i>Lichid</i>	<i>Interfață</i>	$p_4$	0	–	$p_4$
Probabilitatea stărilor				$p_1^-$	$p_4$	–
				$p_3$	$p_1^+ p_2^+$	$p_2^+ p_4$
					$p_3^- p_4$	

Distribuția schematică a particulelor în clusteri este ilustrată în Figura 1. Fie  $N = 1, 2, \dots, \infty$  reprezintă numărul total de particule în lichidul subrăcit, iar  $\{n_1, n_2, n_3, n_4\}$  este distribuția lor în patru grupuri de stări care corespund probabilităților  $\{p_1, p_2, p_3, p_4\}$ .

Fiecare grup reprezintă un *cluster*, iar dimensiunea fiecărui cluster poate varia de la 0 până la  $N$ ,  $n_i = 0, N, i = 1, 4$ , și

$$\sum_{i=1}^4 n_i = N. \text{ Astfel, numărul rezultatelor}$$

posibile  $P$  este funcție de  $N$ , iar soluția explicită se calculează astfel [1, 25]:

$$P(N) = \frac{1}{3!} \prod_{i=1}^3 (N + i), \quad (5)$$

unele rezultate numerice fiind prezentate în Tabelul 2. În caz general, pentru un număr arbitrar de clusteri  $n > 1$  se obține:

$$P(N) = \frac{1}{(n-1)!} \prod_{i=1}^{n-1} (N + i) \quad (6)$$

Tabelul 2. Unele rezultate numerice ale distribuției pentru  $n=4$

$N$	$P$	$N$	$P$	$N$	$P$
1	4	20	1,771	100	176,851
2	10	30	5,456	200	1,373,701
5	56	40	12,341	500	21,084,251
10	286	50	23,426	1,000	167,668,501

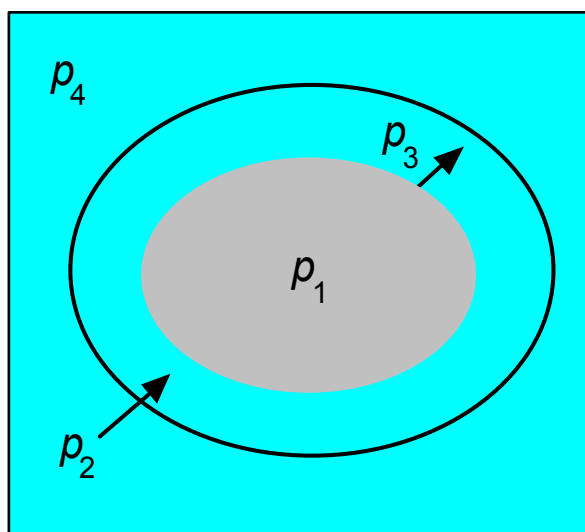


Figura 1. Reprezentarea schematică a distribuției particulelor cu ponderile corespunzătoare în cluster,  $p_1$ , lichid,  $p_4$  și la interfață,  $p_2$  și  $p_3$ .

După cum deja am menționat, în acest paragraf vom demonstra, pe baza unei aplicații concrete, existența legăturii dintre modelele computaționale ABM și cele probabilistice sau stocastice. Astfel în termenii folosiți în cadrul modelelor computaționale ABM, în urma fiecărei interacțiuni agentul pasiv obține payoff-ul +1, dacă este în starea preferată, un payoff 0 în cazul stării neutre sau un payoff -1 în cazul stării respinse (în engl. *payoff* – câștig). Agentul activ sau agresorul nu este influențat de rezultatele interacțiunii. Astfel acesta oricând obține un payoff pozitiv, deoarece acționează conform stării sale preferate. În model nu există interacțiunea strategică din teoria matematică a jocurilor, deoarece payoff-ul agentului pasiv depinde de alegerea făcută de agresor, pe când alegerea respectivă nu va depinde în nici un mod de preferințele agentului pasiv. Astfel echilibrul Nash nu poate fi aplicat. Evoluția sistemului este estimată cantitativ cu ajutorul valorii medii a probabilității  $\pi$  și a dispersiei  $\sigma^2$  calculate pentru payoff, care caracterizează corespunzător gradul de stabilitate și cel al eterogenității într-un sistem complex. Rezultatele preliminare pentru două cazuri limită sunt evidente: dacă toate particulele ar poseda aceeași evoluție, atunci în sistem ar exista o polarizare maximă a stărilor, iar pentru o dispersie omogenă de stări  $p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = 1/4$  se constată menținerea stării metastabile  $\pi=0$ .

Să considerăm în continuare că fiecare particulă interacționează cu întregul grup atât ca agresor, cât și în calitate de agent pasiv. Atunci valoarea medie a indicelui de stabilitate  $\pi$  se calculează astfel:

$$\pi = p_1(p_1 - p_3) + (p_2 + p_3)(-p_1 + p_2 + p_3 - p_4) + p_4(p_4 - p_2). \quad (7)$$

sau, ținând cont de egalitatea  $\sum_{i=1}^4 p_i = 1$ , putem exprima în (7), de exemplu, probabilitatea  $p_4$  prin celelalte probabilități. Se obține:

$$\pi = p_1(p_1 - p_3) + (1 - p_1 - 2p_2 - p_3)(1 - p_1 - p_2 - p_3) + (p_2 + p_3)(-1 + 2p_2 + 2p_3). \quad (8)$$

Din teoria lichidelor subrăcite și a sticlelor se cunoaște că odată cu creșterea asimetriei în sistem are loc creșterea stabilității stării lichide subrăcite și descreșterea stabilității stării cristaline sau, viceversa, descreșterea stabilității fazei lichide și creșterea stabilității celei cristaline, în funcție de semnul parametrului de control respectiv [26]. Acum putem defini gradul de asimetrie în modelele ABM ca distanța de la centrul sferei:

$$d(l, r, c) \equiv d(p_1, p_2, p_3, p_4) = \sqrt{l^2 + r^2 + c^2}$$

, unde această distribuție se definește în spațiul tridimensional cu axele de coordonate  $l, c$  și  $r$ :

$$l = p_1 - p_3, \quad (9a)$$

$$c = p_2 + p_3 - p_1 - p_4, \quad (9b)$$

$$r = p_4 - p_2, \quad (9c)$$

iar  $d \in [0, \sqrt{2}]$ : toate punctele, prin urmare, se vor afla în interiorul acestei sfere cu centrul în origine. Vom menționa că  $l + c + r = 0$  și diferite distribuții pot genera același punct în spațiu. De exemplu, originea de coordonate corespunde atât setului de probabilități  $p_1 = p_2 = p_3 = p_4 = 1/4$ , cât și fiecăre combinații de tipul  $p_1 = p_3, p_2 = p_4$ .

Pentru a reprezenta graficul bidimensional care descrie stabilitatea/instabilitatea sistemului, vom considera fixate unele probabilități. Astfel, în Figura 2 este prezentată dependența instabilității clusterelor,  $1-\pi$ , de probabilitatea  $p_1$  pentru un sistem format din 100 particule pentru cazurile când particulele la interfața lichid-cluster lipsesc, (a); ponderea particulelor la interfață  $p_2+p_3$  constituie doar 1/10 din numărul lor total în sistem, (b); și când ponderea particulelor la interfață este egală cu 3/10, și anume  $p_2=p_3=0.15$  (c),  $p_2=0.1, p_3=0.2$  (d) și  $p_2=0.2, p_3=0.1$  (e). Observăm că în absența interfeței dintre lichid și cluster, după cum și era de așteptat, sistemul este în starea de instabilitate

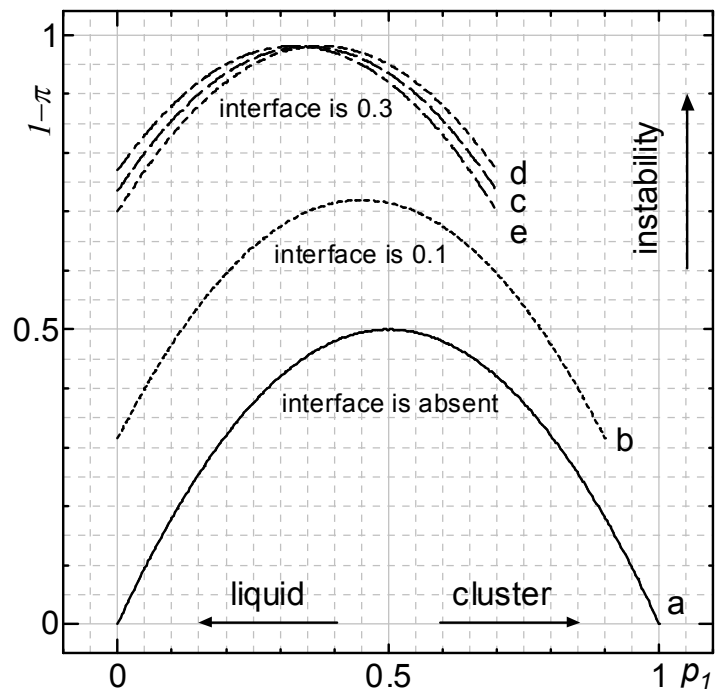


Figura 2. Dependența instabilității clusterelor,  $1-\pi$ , de probabilitatea  $p_1$  pentru cazurile: (a) particulele la interfața lichid-cluster lipsesc; (b) ponderea particulelor la interfață constituie 1/10 din numărul lor total; ponderea particulelor la interfață este egală cu 3/10, și anume  $p_2=p_3=0.15$  (c),  $p_2=0.1, p_3=0.2$  (d) și  $p_2=0.2, p_3=0.1$  (e); a fost cercetat sistemul format din 100 particule.

maximă pentru  $p_1=p_4=0.5$ . Odată cu creșterea numărului de particule la interfață, adică  $p_2+p_3$  crește, are loc micșorarea stabilității sistemului, indiferent de faptul dacă fluxul de particule la interfață se realizează din contul fazei lichide sau al particulelor din cluster. Totodată, particulele din interfața lichid-cluster contribuie la accelerarea formării clusterelor datorită deplasării maximumului de instabilitate în regiunea valorilor mici pentru  $p_1$ . Curbele (d) și (e) din figură mai indică faptul că un flux mai mare din faza lichidă ( $p_2>p_3$ ) sau din cluster ( $p_2<p_3$ ) determină o creștere nesemnificativă a instabilității ramurii corespunzătoare, însă valoarea maximă  $\pi$  rămâne constantă pentru  $p_2+p_3=\text{const}$ .

În Figura 3 este prezentată dependența, în planul  $(p_1, p_3)$ , a mărimii  $\pi(p_1, p_2, p_3)$  pentru  $p_2=0.05$ , curba continuă,  $p_2=0.1$ , curba frântă, și  $p_2=0.15$ , curba punctată. Valorile aflate pe curbe corespund lui  $\pi=0$ , în interior se află domeniul de valori pentru care  $\pi<0$ , iar în exterior – cazul  $\pi>0$ . Observăm că odată cu creșterea fluxului de particule din lichid la interfață are loc micșorarea domeniului nefizic negativ  $\pi<0$  și deplasarea lui concomitentă în regiunea valorilor mai mici pentru setul  $(p_1, p_3)$ , adică pentru concentrații mai mici ale clusterelor. Este important de menționat că fenomenul de generare și extincție a clusterelor se produce la temperaturi foarte joase în comparație cu temperatura de tranziție  $T_{ga}$  [27, 28]. Acest fapt arată că unele molecule se pot rearanja chiar și la temperaturi atât de joase și, astfel, lichidele subrăcite și sticlele ar poseda structuri ce crează o distribuție a timpului de relaxare a aranjamentului molecular. Pe baza "modelului structurii de tip cluster" [29] un astfel de aspect cinetic al rezultatelor se interpretează după cum urmează: lichidele subrăcite posedă o structură eterogenă, alcătuită din clusteri cu un aranjament molecular diferit și interfețe ale clusterelor cu un aranjament oarecum neordonat al moleculelor. Având în vedere faptul că moleculele din cluster își încetinesc mișcările lor de rearanjare mai jos de  $T_{ga}$ , se consideră că moleculele situate la interfața dintre clusteri rămân mai mobile și posedă în continuare un timp de relaxare mai scurt decât cele din cadrul clusterelor, rearanjându-se pentru a se anexa la clusterii deja prezenți sau pentru a forma noi centre de cristalizare. Moleculele aflate inițial la interfață și incluse în cadrul clusterelor prin acest rearanjament sunt, totuși, determinate în următorul moment să-și încetinească mișcările lor de rearanjare. Aceste procese fiind repetate ar rezulta în fenomenul neordinar menționat anterior de generare și extincție a nucleelor de cristalizare. Comportamente similare la cristalizare au fost raportate în cazul simulărilor pe calculator ale dinamicii moleculare pentru clusterii de cupru, NaCl și SeF<sub>6</sub> [30–32], unde cristalizarea se produce la suprafața sau în apropierea suprafeței clusterelor considerați în calitate de centre sau nuclee de cristalizare.

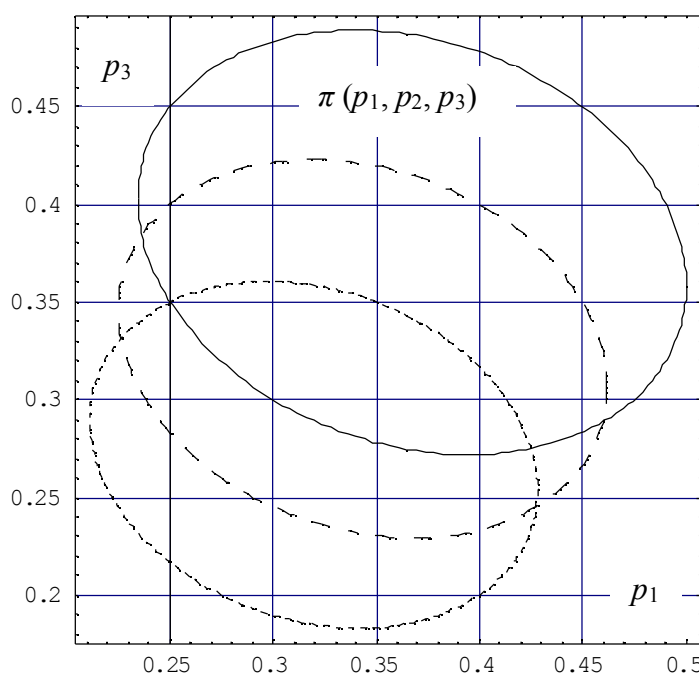


Figura 3. Dependența în planul  $(p_1, p_3)$  a mărimii  $\pi(p_1, p_2, p_3)$  pentru  $p_2=0.05$ , curba continuă,  $p_2=0.1$ , curba frântă, și  $p_2=0.15$ , curba punctată. Valorile aflate pe curbe corespund lui  $\pi=0$ , în interior se află domeniul de valori pentru care  $\pi<0$ , iar în exterior – cazul  $\pi>0$ .



### CONCLUZII

Folosind în calitate de date pentru comparație rezultatele simulării ABM pe calculator a interacțiunii într-un sistem eterogen, a fost demonstrată cu succes existența conexiunii dintre modelele probabilistice și cele computaționale ABM. Totodată, metodologia propusă oferă pentru modelele ABM un instrument eficient de optimizare, în primul rând, a distribuției agenților în sistem care în modelele ABM se realizează, de regulă, prin metoda probelor și erorilor. Mai mult ca atât, rezultatele analitice reprezintă valoarea medie a soluției problemei care, în modelarea ABM, se obține doar după realizarea tuturor interacțiunilor posibile din sistem, ce poate rula pe calculator, în cazul unui număr mare de particule, o perioadă îndelungată de timp. În așa mod, evoluția sistemului este estimată cantitativ cu ajutorul valorii medii și a dispersiei calculate cu ajutorul probabilității ce caracterizează corespunzător nivelul de stabilitate și cel al asimetriei într-un sistem eterogen. În model nu există interacțiunea strategică din teoria matematică a jocurilor, deoarece payoff-ul agentului pasiv depinde de alegerea făcută de agresor, pe când alegerea respectivă nu va depinde în nici un mod de preferințele agentului pasiv. Astfel, echilibrul Nash nu poate fi aplicat. Nu în ultimul rând, această cercetare demonstrează un fapt fascinant privind existența legităților universale în sistemele complexe indiferent de natura lor.

Modelele alternative Ewens și Yule-Zipf-Simon admit o interpretare reușită a proceselor de formare a clusterilor în sistemele complexe, scopul final al lor fiind obținerea distribuțiilor de echilibru în baza unor structuri elementare sau agenți și a interacțiunii lor aleatoare, precum și argumentarea la nivel microscopic a legităților empirice observate în diferite sisteme complexe. Astfel, modelele respective pot fi direct asociate cu modelele computaționale ABM, pe de o parte, și cu cele stocastice, pe de alta. Cu toate acestea, a fost arătat că în modelul Ewens datele empirice atât în privința generării, cât și a fragmentării clusterilor sunt nesatisfăcător interpretate, iar în modelul matematic alternativ Yule-Zipf-Simon probabilitatea de formare a clusterilor este independentă de dimensiune, iar distribuția de echilibru sau numărul mediu de clusteri nu pot fi obținute analitic. Totodată, G.J.Rodgers a dezvoltat și soluționat analitic modele cinetice care descriu distribuția clusterilor după dimensiune în prezența a doar două transformări din sistem, fiind posibilă determinarea exactă a unor valori universale ale puterilor care pot varia continuu în funcție de probabilitate [33–35]. Deși nu este necesar să se cunoască detaliat comportarea sistemului la nivel microscopic, latura esențială a acestor modele reprezintă caracterul lor universal în contextul unor interacțiuni complexe.

În cadrul modelului probabilistic dezvoltat în al treilea paragraf, am cercetat în continuare formarea nucleelor de cristalizare într-un sistem de  $N$  particule care se pot afla în trei stări diferite numite *cluster*, *interfață* și *lichid*. În modelele geometrico-probabilistice de cristalizare agentul activ este numit agresor, iar existența lui este condiția necesară și suficientă de generare a nucleelor în modelul Kolmogorov. A fost dedusă formula generală pentru distribuția particulelor în clusteri în funcție de numărul total de particule în sistem și numărul corespunzător de stări. A fost cercetată calitativ dependența stabilității clusterilor de probabilitatea de anexare a particulelor la cluster, iar rezultatele au fost interpretate în contextul "modelului structurii de tip cluster". Astfel, este arătat că odată cu creșterea numărului de particule la interfața lichid-cluster are loc micșorarea stabilității sistemului, indiferent de faptul dacă fluxul de particule la interfață se realizează din contul fazei lichide sau al particulelor din cluster. Totodată, particulele din interfața lichid-cluster contribuie la accelerarea formării clusterilor datorită deplasării maximumului de instabilitate în regiunea valorilor mici ale probabilității de anexare. Moleculele aflate inițial la interfață și incluse în cadrul clusterilor prin acest rearanjament sunt, totuși, determinate în următorul moment să-și încetinească mișcările lor de rearanjare. Aceste procese fiind repetate ar putea rezulta în

fenomenul neordinar de generare și extincție a nucleelor de cristalizare, care se produce la temperaturi foarte joase în comparație cu temperatura de tranziție  $T_{ga}$  unde rolul rearanjamentului molecular la interfață este hotărâtor.

## REFERINȚE

1. Paladi F. Sisteme complexe: modele analitice și numerice avansate de tip cluster. Chișinău: CEP USM, 2005. 174 p.
2. Adomian G. Applications of nonlinear stochastic systems theory to physics (Mathematics & its applications series). Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1988. 248 p.
3. van Kampen N.G. Stochastic processes in physics and chemistry. Dordrecht: Elsevier, 1992. 480 p.
4. Higgins J.J., Keller-McNulty S. Concepts in probability and stochastic modeling. Wadsworth Publishing Co Inc, 1994. 432 p.
5. Snell J.L. Topics in contemporary probability and its applications (Probability & stochastics series). CRC Press Inc, 1995. 400 p.
6. Taylor H.M., Karlin S. An introduction to stochastic modeling. San Diego: Academic Press, 1998. 631 p.
7. Brzezniak Z., Zastawniak T. Basic stochastic processes: a course through exercises. Verlag Berlin and Heidelberg GmbH&Co.K: Springer, 1998. 236 p.
8. Øksendal B. Stochastic differential equations: an introduction with applications. Verlag Berlin and Heidelberg GmbH&Co.K: Springer, 1998. 346 p.
9. Schmelzer J., Röpke G., Mahnke R. Aggregation phenomena in complex systems. Weinheim, New York: Wiley-VCH, 1999. 459 p.
10. Grimmett G.R., Stirzaker D.R. Probability and random processes. Oxford University Press, 2001. 608 p.
11. Papoulis A., Pillai S.U. Probability, random variables and stochastic processes. McGraw-Hill Education, 2001. 852 p.
12. Descalzi O., Martínez J., Rica S. Instabilities and nonequilibrium structures (Nonlinear phenomena & complex systems). Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2004. 423 p.
13. Contini B., Leombruni R., Richiardi M. (editors), Advances in complex systems. 2004, vol.7, no.2, 288 p.
14. Kleijnen J.P.C. Experimental design for sensitivity analysis, optimization, and validation of simulation models. In: Banks J. (editor), Handbook of Simulation, New York: Wiley, 1998, chapter 6, p.173–223.
15. Gleick J. Chaos: making a new science. New York: Penguin Books, 1988. 368 p.
16. Horgan J. From complexity to perplexity. Scientific American. 1995, vol.272, no.6, p.104–109.
17. Garibaldi U., Costantini D., Viarengo P. A finite characterization of Ewens sampling formula. Advances in Complex Systems. 2004, vol.7, no.2, p.265–284.
18. M.Sonnessa, JAS: Java agent-based simulation library, an open framework for algorithm-intensive simulations. In: Contini B., Leombruni R., Richiardi M. (editors), Advances in complex systems, Singapore: World Scientific, 2004, p.43–56.
19. Paladi F., Dotenco D., Gamurari V. Measuring heterogeneity in stochastic models. Studia Universitatis USM. 2007, no.1, p.319–322.
20. Кендалл М., Морган П. Геометрические вероятности. Москва: Наука, 1972. 192 с.
21. Любков Б.Я. Теория кристаллизации в больших объемах. Москва: Наука, 1975. 256 с.
22. Александров Л.Н. Кинетика образования и структуры твердых слоев. Новосибирск: Наука, 1972. 227 с.

23. Сирота Н.Н. (редактор), Кристаллизация и фазовые переходы (сборник статей). Минск: Издательство АН БССР, 1962. 445 с.
24. Беленький В.З. Геометрико-вероятностные модели кристаллизации. Феноменологический подход. Москва: Наука, 1980. 88 с.
25. Paladi F. Bridging the gap between stochastic and agent-based computational models. *Anale Științifice ale USM, seria "Științe fizico-matematice"*. 2005, p.78–81.
26. Paladi F. Effects of asymmetry and external field on phase transitions in the presence of an intermediate metastable state. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2010, doi:10.1016/j.physa.2010.01.015-7.
27. Paladi F., Oguni M. Anomalous generation and extinction of crystal nuclei in non-equilibrium supercooled liquid *o*-benzylphenol. *Physical Review B*. 2002, vol.65, no.14, 144202–6.
28. Paladi F., Oguni M. Generation and extinction of crystal nuclei in an extremely non-equilibrium glassy state of salol. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003, vol.15, no.23, p.3909–3917.
29. Oguni M. ‘Intra-cluster rearrangement’ model for the  $\alpha$ -process in supercooled liquids, as opposed to ‘cooperative rearrangement of whole molecules within a cluster’. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1997, vol.210, no.2–3, p.171–177.
30. Valkealahti S., Manninen M. Molecular dynamics simulation of crystallization of liquid copper clusters. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1997, vol.9, no.20, p.4041–4050.
31. Chushak Y.G., Bartell L.S. Simulations of spontaneous phase transitions in large, deeply supercooled clusters of SeF<sub>6</sub>. *Journal of Physical Chemistry B*. 1999, vol.103, no.50, p.11196–11204.
32. Chushak Y.G., Bartell L.S. Crystal nucleation and growth in large clusters of SeF<sub>6</sub> from molecular dynamics simulations. *Journal of Physical Chemistry A*. 2000, vol.104, no.41, p.9328–9336.
33. Rodgers G.J., Zheng D. A herding model with preferential attachment and fragmentation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2002, vol.308, no.1–4, p.375–380.
34. Rodgers G.J., Yap Y.J. Growth and addition in a herding model. *The European Physical Journal B*. 2002, vol.28, no.1, p.129–132.
35. Rawal S., Rodgers G.J. Growth and coagulation in a herding model. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2004, vol.344, no.1–2, p.50–55.

*Primit la redacție: 1 iunie 2009*