MODELACIÓN MATEMÁTICA

Una introducción al método

Profesor: Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE, Ph.D.
Página Web: http://www.mathmodelling.org
e-mail: edoc@mathmodelling.org

2. NOCIONES FUNDAMENTALES DE MODELACIÓN MATEMÁTICA

2.1. LA MODELACIÓN COMO MÉTODO COGNOSCITIVO

La teoría del conocimiento, "***gnoseología***", es una rama de la filosofía en la que se estudian la naturaleza de la cognición, sus posibilidades y la relación entre el conocimiento y la realidad. Esta teoría tiene como principal objetivo determinar las condiciones y criterios necesarios para garantizar la autenticidad y veracidad de la cognición, esto quiere decir que es potestad de la gnoseología el responder al segundo interrogante filosófico "sobre sí es o no cognoscible el mundo", de este modo, la gnoseología investiga las condiciones, mecanismos, principios formas y métodos de la actividad cognitiva del hombre (Алексеев и Панин: 2000). En una primera aproximación la cognición se puede definir como el conjunto de procesos que proporcionan al hombre la posibilidad de recolectar, tratar y utilizar información sobre el mundo y sobre si mismo. A los fenómenos y procesos a los que se enfoca la actividad cognitiva del hombre se les denomina ***objeto cognitivo***, mientras que a quien efectúa la acción cognitiva se le conoce como ***sujeto cognitivo***, de esta forma la cognición se puede entender como la interacción entre el sujeto y el objeto cognitivos, cuya finalidad es obtener la verdad que permita la asimilación del objeto cognitivo según las necesidades del sujeto. De aquí surge la necesidad de estudiar los mecanismos de interacción que permiten la transmisión del conocimiento desde el objeto al sujeto cognitivo.

Uno de los métodos que permite describir estos mecanismos es la modelación, la cual constituye un método cognoscitivo en el que el objeto en estudio es reemplazado con otro, llamado modelo, que cumple con relación al primero unas condiciones de analogía. Después de reemplazar el original por su modelo, el modelo es estudiado y analizado. Las conclusiones y elementos que surjan de este análisis son transferidos al objeto original con base en los criterios y condiciones de analogía y semejanza antes mencionadas. En ***epistemología*** (ciencia del conocimiento científico) los modelos son la forma de explicar la realidad, ejemplos de esto son: el modelo de mecánica newtoniana, el cuántico de Maxwell y el relativista de Einstein.

La modelación se aplica en aquellas situaciones donde el estudio o análisis del objeto cognitivo es inviable, resulta muy costoso o demasiado riesgoso. El trabajar con el modelo del objeto cognitivo y no con su original ofrece la ventaja de que, en forma segura, rápida y sin grandes gastos económicos permite estudiar las propiedades del objeto cognitivo en cualquier situación imaginable.

Un paso fundamental de la modelación consiste en la construcción o selección del objeto (tangible o abstracto) que reemplaza al objeto real en estudio. La forma como se reemplaza el objeto real de estudio define el tipo de modelación, el cual puede ser físico, matemático, análogo, lógico, etc. Cada tipo de modelación tiene sus ventajas, desventajas y requerimientos. De los tipos de modelación mencionados el matemático goza de una gran universalidad, la cual aunada al gran desarrollo de los ordenadores ofrece una gran flexibilidad para la solución de problemas complejos. Según la Enciclopedia Matemática (Виноградов: 1977) por ***modelo matemático*** se entiende la descripción aproximada de una clase de fenómenos del mundo exterior, expresada con ayuda de simbolismos matemáticos. Esta noción representa un poderoso método cognoscitivo ya que el análisis de modelos matemáticos de la realidad permite penetrar la esencia de los fenómenos estudiados. En la actualidad es difícil imaginar la ciencia sin la amplia aplicación de modelos matemáticos, aún más, disciplinas científicas como la mecánica, la física y sus múltiples divisiones pueden ser vistas como un conjunto ordenado de modelos matemáticos que se acompañan de un fundamento teórico sobre el nivel de veracidad con que estos modelos reflejan la realidad (ejemplo: modelos corpuscular y ondulatorio de la luz). Esto permite enunciar que a través de los modelos matemáticos las disciplinas científicas interactúan con la matemática. En esencia es esto lo que reflejan la opinión de Kant cuando enuncia que “el estudio de la naturaleza contendrá ciencia en sentido propio sólo en la medida en que pueda aplicar las matemáticas”.

La aplicación de la modelación matemática consiste en el reemplazo del objeto cognitivo por su imagen matemática (modelo matemático) la cual, implementada en algoritmos lógico – numéricos en un ordenador, permite estudiar las cualidades del proceso original. Este método de cognición conjuga las ventajas de la teoría y del experimento. Al trabajar con el modelo matemático y no con el objeto cognitivo (proceso o fenómeno en estudio) en forma relativamente rápida y barata se pueden estudiar sus propiedades de estado y pronosticar la evolución del mismo (***ventaja teórica***). Al mismo tiempo los algoritmos numéricos permiten, apoyándose en la potencia de cálculo de los ordenadores, verificar las cualidades del objeto cognitivo en una forma no accesible para los enfoques teóricos (***ventaja del experimento***).

La modelación matemática ha sido aplicada desde los tiempos en que aparecieron las ciencias exactas. No por casualidad algunos métodos de cálculo llevan el nombre de grandes científicos como Newton y Euler e incluso la palabra "algoritmo" se desprende del nombre del científico árabe del medio evo Al–Guarismi. El segundo nacimiento de la modelación matemática tuvo lugar con la aparición del ordenador en los años 40 – 50 del siglo XX y fue impulsado por los requerimientos, sin precedente, de los gobiernos de Estados Unidos y de la Unión Soviética (Самарскии и Михайлов, 1997) para la creación de escudos de defensa antiaérea contra mísiles nucleares. En este caso la modelación matemática cumplió con todas las expectativas, explosiones nucleares, trayectorias de misiles y lanzamiento de satélites fueron realizados con anterioridad en las entrañas de ordenadores con la ayuda de modelos matemáticos. Este éxito contribuyó al desarrollo de la modelación matemática hasta sus niveles actuales posicionándola en el núcleo estructural de la sociedad de la información. El sorprendente progreso de los medios de tratamiento y transmisión de información requiere de un núcleo de análisis que permita convertir la materia prima de la información en conocimiento. El desarrollo histórico de la modelación matemática muestra que ella debe ser el núcleo intelectual de las tecnologías de la información ya que esto permitirá resolver no solo problemas directos sino también problemas inversos para la gestión de sistemas complejos.

2.2. ESQUEMA GENERAL DE LA MODELACIÓN

El proceso de modelación matemática de cualquier objeto cognitivo (proceso, fenómeno) consiste en un plan de trabajo preciso que se enmarca en tres etapas que conforman la ***trilogía modelo – algoritmo – programa*** (véase figura 1).

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

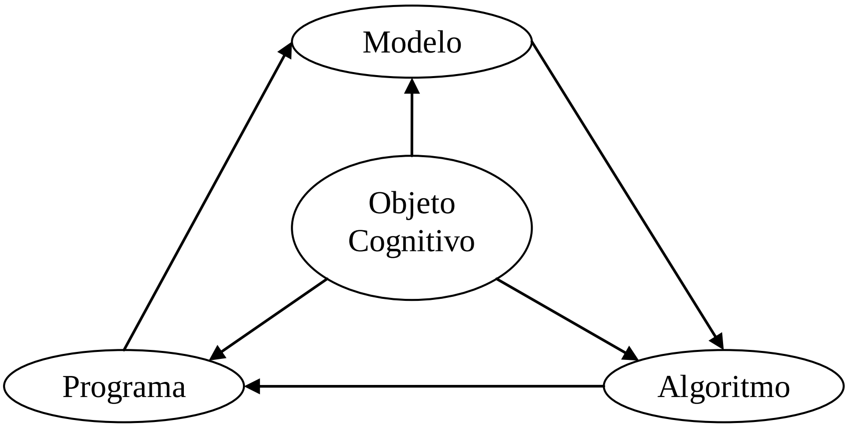


Figura 1. Trilogía Modelo – Algoritmo – Programa
(Tomado de: Samarsky y Mikhailov, 1997)

En la primera etapa se escoge o construye el ***equivalente al objeto cognitivo***, el cual refleja en forma matemática sus propiedades más relevantes, los mecanismos a los que obedece su comportamiento y las conexiones entre sus partes y con su entorno. El modelo matemático es propuesto e investigado con métodos teóricos, lo que permite obtener información previa sobre el objeto cognitivo. Esta etapa requiere de un conocimiento amplio sobre el proceso en estudio y culmina con la formulación de las expresiones matemáticas que formalizan las concepciones cualitativas que se tiene del proceso.

En la segunda etapa se escoge o desarrolla el ***algoritmo de cálculo*** que permite implementar el modelo en un ordenador. El modelo es llevado a una forma que permita la aplicación de métodos numéricos, se define la secuencia de las operaciones lógicas y aritméticas necesarias para encontrar, con la precisión requerida, las incógnitas que expresan las variables de estado del modelo. El algoritmo de calculo no debe distorsionar las cualidades básicas del modelo y en consecuencia del objeto cognitivo, también debe ser económico y adaptable a las particularidades de los problemas que se resuelven y al nivel tecnológico de los ordenadores disponibles.

En la tercera etapa se crean los ***programas de ordenador*** que traducen el modelo y el algoritmo a un lenguaje entendible por el ordenador. A estos programas también se les exige ser económicos y adaptables, y son la ***versión digital equivalente al objeto cognitivo*** lista para la realización de experimentos numéricos en el ordenador.

Después de cumplir la trilogía modelo – algoritmo – programa el investigador obtiene una herramienta universal, flexible y de bajo costo. Esta herramienta se depura y sintoniza con experimentos numéricos que permiten demostrar su adecuada correspondencia con el objeto cognitivo para posteriormente realizar los experimentos que arrojarán todas las características, cualitativas y cuantitativas, que se requiere conocer del proceso en estudio. Finalmente es necesario enunciar que el proceso de modelación se acompaña del perfeccionamiento paulatino de los tres eslabones de la triada.

Para hacer aplicable el esquema general de la modelación son necesarios dos elementos adicionales: a) el ***esquema general del modelo*** y b) ***el protocolo de modelación***. Cada vez que se construye el equivalente del objeto cognitivo en estudio se utiliza el postulado de la valides de las ***relaciones causa – efecto*** característico del ***determinismo científico***. Este principio teórico general puede ser descrito con el siguiente conjunto de tesis:

1) Los sistemas y procesos materiales son universalmente condicionados;

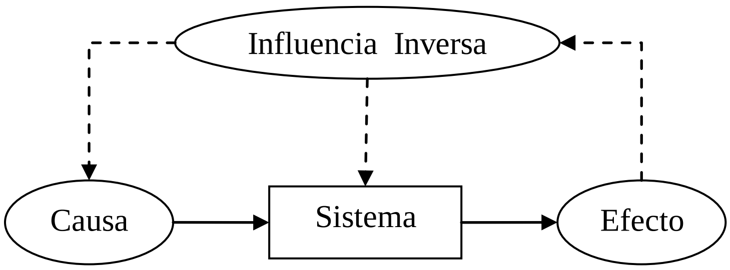
2) Cada suceso tiene su causa y es generado por otro suceso. La generación de un suceso se acompaña de la transferencia de sustancia, energía, movimiento e información.

3) Existe una gran variedad de formas de determinación y el principio del determinismo es la fuente de todas ellas.

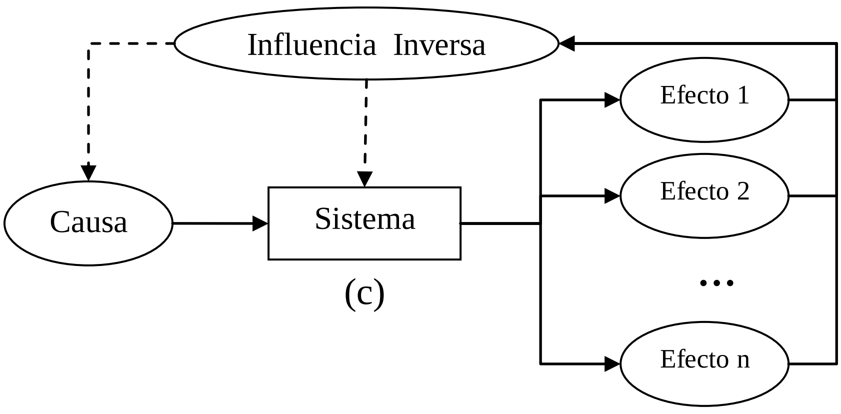
4) La determinación de los procesos está condicionada por un carácter ordenado y regular. Cada proceso o fenómeno se rige por las relaciones establecidas con su entorno.

El principio de la determinación establece los elementos y subordinación de la relación causa – efecto, designando a la causa como la interacción misma y al efecto como el resultado de la interacción. La causa precede al efecto pero no todo lo que precede a un fenómeno es su causa (la noche precede al día pero no es la causa del mismo). Causas iguales producen efectos iguales y la recurrencia del efecto ante una causa es indicio de ley. La causa detona un flujo de materia, energía, movimiento o información el cual transcurre en un dominio abstracto o tangible. Este dominio es el equivalente de la ***noción de sistema*** y el flujo mencionado refleja lo que usualmente se denomina como ***proceso***. En general, observando la secuencia y los elementos impuestos por el principio del determinismo, las relaciones causa – efecto pueden ser clasificadas como ***relaciones causa – efecto secuenciales*** (véase figura 2 – a) reflejan procesos en sistemas en los que no existe posibilidad de flujo de materia, energía o información del efecto a la causa o al sistema mismo. Por el contrario, las ***relaciones causa – efecto con retroalimentación*** se dan en aquellos sistemas que sí lo permiten. El esquema causa – efecto tipo (a) es un caso particular (reducido) del esquema tipo (b). En este esquema por ***sistema*** se entiende "un complejo de elementos que interactúan" (Bertalanffy: 1976), siendo una cualidad intrínseca del elemento su necesaria presencia en el sistema para que este pueda existir. La definición de sistema propuesta por Bertalanffy debe ser ajustada explicitando que el conjunto de elementos es limitado y ordenado por una estructura que le da coherencia. Esta estructura abarca las relaciones y enlaces estables entre los elementos, lo que incluye su ubicación espacial y los enlaces entre las distintas etapas de desarrollo.

(a)



(b)



(c)

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

Figura (2). Esquema de las relaciones causa – efecto: (a) secuénciales (b) con retroalimentación.

Un tipo especial de relaciones causa-efecto son aquellas en las que la causa, al actuar sobre el sistema, puede desencadenar distintos efectos (véase figura 2 – c) y todos estos efectos tienen lugar con uno u otro nivel de probabilidad. La imprecisión sobre el nivel de aparición de cada efecto no rompe el principio de determinación, lo que sucede es que estas relaciones constituyen una cadena de relaciones lineales sobre las cuales no se tienen un conocimiento total.

La práctica demuestra que en la naturaleza los procesos transcurren bajo los esquemas enunciados, por ello el modelo que se utilice como análogo de un proceso natural debe contener una estructura muy similar a la presente en estos esquemas. En efecto, el ***esquema general de los modelos matemáticos*** presenta una estructura muy similar que se representa de la siguiente forma:

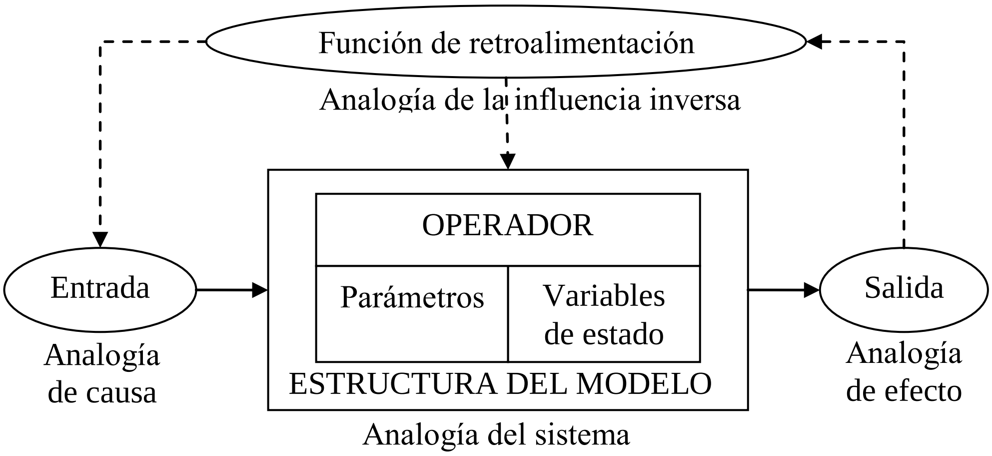


Figura 3. Esquema general de un modelo matemático

En detalle: las ***entradas*** del modelo representan las variables que activan el flujo de materia, energía o información en el sistema (por ejemplo la precipitación al caer y redistribuirse sobre la cuenca impulsa los flujos de agua en la misma), las entradas son la analogía de la causa. Las ***salidas*** están conformadas por el vector de variables que caracterizan el estado del sistema (por ejemplo los caudales líquido y sólido de una cuenca). A su vez la ***estructura del modelo*** –analogía del sistema en el que transcurre el proceso– es el mecanismo de transformación de las entradas en salidas. En si la

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

estructura del modelo es el corazón del mismo, por ello su grado de complejidad, como elemento del modelo, es mayor. La estructura del modelo está conformada por:

El ***operador*** – la estructura matemática que establece las reglas de correspondencia entre las entradas (causas) y su imagen en el dominio de las salidas (efectos). Más estrictamente el operador matemático refleja un conjunto de funciones (***X***) en otro conjunto funcional (***Y***).

Los ***parámetros*** – magnitudes encargadas de describir las características físicas y funcionales del sistema.

Las ***variables de estado*** – magnitudes que representan el estado del sistema y cuya evolución espacio temporal constituye las salidas del modelo.

La ***función de retroalimentación*** – mecanismo que refleja el grado en el que las salidas del modelo influyen en el transcurrir de los procesos del sistema. Generalmente es una cualidad intrínseca del operador del modelo. En parte representa el orden de no linealidad del proceso en estudio.

2.3. EJEMPLOS DE OPERADORES MATEMÁTICOS

Entre las nociones descritas el operador matemático es de gran importancia. La selección del operador matemático es una tarea difícil que se basa en la experiencia existente sobre el proceso en estudio. Generalmente para establecer el operador matemático se hace uso de las leyes de conservación de masa, momento, energía e información en un volumen de control determinado. Como ejemplos de operador matemático se pueden enunciar las siguientes expresiones:

Operador de ***diferenciación***

$$L = \frac{d}{dt} \Rightarrow L\left[f(t)\right] = \frac{df(t)}{dt} = f_t^{'}.$$

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

Operador de Laplace o ***laplaciano*** – Operador diferencial "Δ" definido en un espacio $\Re^n$ y definido por la expresión $L = \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x_1} + \frac{\partial^2}{\partial x_2} + \dots \frac{\partial^2}{\partial x_n}$ donde $(x_1, x_2, ..., x_n)$ son coordenadas en $\Re^n$. Es un operador diferencial elíptico de segundo orden que juega un papel muy importante en la fisicomatemática y la geometría. sí $g = f(x_1, x_2 ... x_n)$

$$\Rightarrow L(g) = \Delta g = \frac{\partial^2 g}{\partial x_1} + \frac{\partial^2 g}{\partial x_2} + \dots + \frac{\partial^2 g}{\partial x_n}.$$

Operador de Hamilton, ***hamiltoniano*** u operador ***nabla*** - Operador diferencial de primer orden representado por el signo ∇ y aplicable para la descripción de operaciones diferenciales en análisis vectorial (Hamilton: 1853). En un sistema cartesiano rectangular de coordenadas $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$ con los vectores unitarios $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, ..., \boldsymbol{e}_n$ el operador nabla se expresa de la forma $\nabla \equiv \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{e}_j \frac{\partial}{\partial x_j}$.

La aplicación del operador hamiltoniano sobre una función escalar $f(x)$, entendida como la multiplicación del operador nabla por el escalar $f(x)$, produce el ***operador de gradiente*** de la función $grad\left[f(x)\right] = \nabla f(x) \equiv \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{e}_j \frac{\partial f(x)}{\partial x_j}$, o sea el vector con las coordenadas $\left(\frac{\partial f(x)}{x_1}, \frac{\partial f(x)}{x_2}, ..., \frac{\partial f(x)}{x_n}\right)$. El producto escalar del operador ∇ por un campo vectorial $\boldsymbol{a} = (a_1, a_1, ..., a_n)$ produce el ***operador de divergencia*** del campo vectorial $\boldsymbol{a}$:

$div(\boldsymbol{a}) \equiv \nabla \boldsymbol{a} = \sum_{j=1}^{n} \boldsymbol{e}_j \frac{\partial a_j}{\partial x_j}$. El producto vectorial del operador ∇ por los vectores $\boldsymbol{a}_j = (a_{j1}, a_{j2}, ..., a_{jn})$ produce el ***operador rotacional (o rotor)*** del conjunto de vectores $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, ..., \boldsymbol{a}_n$, o sea el vector

$$\left[\nabla, \boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, ..., \boldsymbol{a}_{n-2}\right] \equiv rot(\boldsymbol{a}) = \begin{vmatrix} \boldsymbol{e}_1 & \boldsymbol{e}_n & \cdots & \boldsymbol{e}_n \\ \dfrac{\partial}{\partial x_1} & \dfrac{\partial}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial}{\partial x_n} \\ a_{11} & a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n-2,1} & a_{n-2,2} & \cdots & a_{n-2,n} \end{vmatrix}.$$

El cuadrado escalar del operador hamiltoniano da como resultado el operador de Laplace:

$$\Delta = \nabla.\nabla = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}.$$

La estructura del operador matemático define las características del modelo matemático. Los operadores que contienen derivadas parciales representan ***sistemas multivariados***, que experimentan cambios en más de una dimensión. Un ejemplo de ello es la simulación del movimiento del agua en un lago, donde además de las variaciones de la velocidad de agua en el tiempo es necesario estudiar el campo de velocidades en las direcciones {x, y, z}. Los operadores compuesto por ecuaciones diferenciales ordinarias describen cambios en una solo dimensión, usualmente en el tiempo, pero podría ser en una de las dimensiones espaciales.

2.4. EL PROBLEMA DIRECTO Y EL PROBLEMA INVERSO

Durante la modelación matemática se resuelven dos tipos de problemas, estos son conocidos como el problema directo y el problema inverso. Para explicarlos es necesario apoyarse en el esquema general de un modelo matemático. En el ***problema directo*** de todos los elementos del esquema general el único desconocido es la salida. Esta es la situación ideal de la modelación matemática, en ella, ya se han establecido las entradas, las variables de estado, el operador y los parámetros (véase figura 4).

Figura 4. Esquema general para el problema directo.

Existen tres clases de problema inverso. En el ***primer tipo de problema inverso*** la información conocida es la relacionada con las entradas, variables de estado, operador matemático y las salidas. Se desconocen los parámetros del modelo (véase figura 5). Resolver este tipo de problema significa encontrar el conjunto de parámetros idóneos que aplicados al operador matemático y utilizando las entradas conocidas produce las salidas observadas.

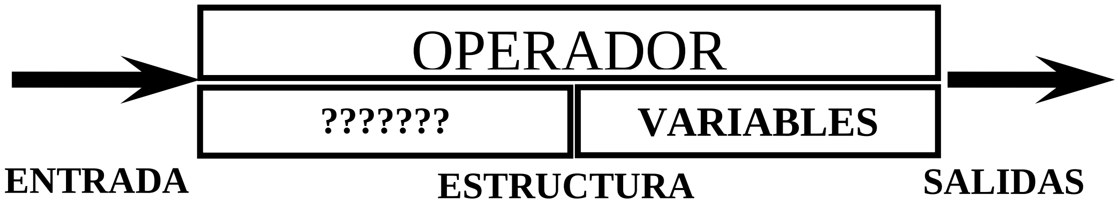


Figura 5. Primer tipo de problema inverso.

En el **segundo tipo de problema inverso** se conocen las salidas, las variables de estado, los parámetros, el operador y se desconocen las entradas. A través de este problema se intentan reconstruir las causas que produjeron determinado efecto en el sistema bajo estudio (véase figura 6).

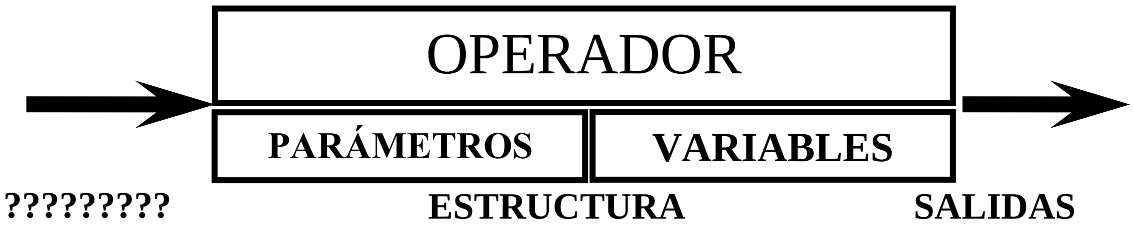


Figura 6. Segundo tipo de problema inverso.

En el **tercer tipo de problema inverso** el elemento desconocido es el operador matemático. Constituye la situación más compleja y resolverlo significa encontrar las

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

ecuaciones que mejor trasponen las entradas en salidas. En este caso se trata de definir las ecuaciones que mejor relacionan una señal de entrada con otra de salida. Un ejemplo de este tipo de problema se tiene cuando se supone que existe algún tipo de correspondencia entre dos variables observadas y mediante el análisis regresivo se intenta construir una ecuación matemática que las relacione con el fin de utilizar una de ellas como predictor de la otra.

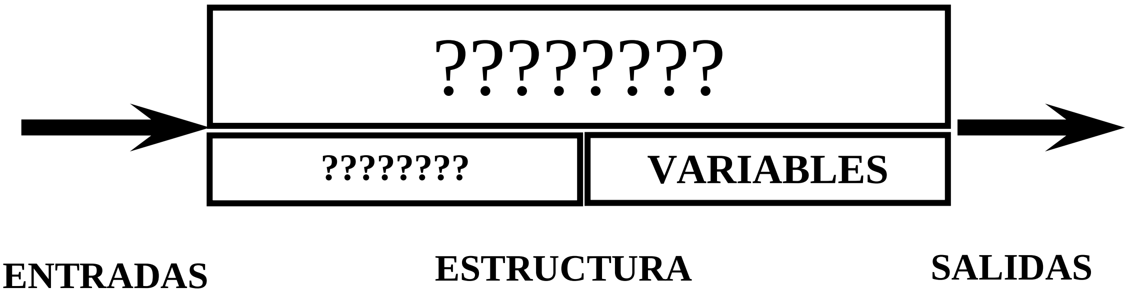


Figura 7. Tercer tipo de problema inverso.

2.6. CLASIFICACIÓN DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS

No existe una clasificación única y general de los modelos matemáticos, sin embargo es pertinente entender las formas que existen de clasificarlos para conocer que tipo de modelo matemático debe ser aplicado en cada caso particular. Existen por lo menos 3 criterios de clasificación de los modelos matemáticos. El ***primer criterio de clasificación*** esta definido por la capacidad del modelo de tomar en cuenta o no la incertidumbre en la realización del proceso que se estudia. Esto se refiere al esquema de relación causa efecto que se aplica. Sí el esquema seleccionado es cómo el de la figura 2c, entonces el ***modelo*** es ***determinista*** y supone que a un conjunto de valores de entrada y parámetros le corresponde un conjunto determinado de valores de salida. En este tipo de modelos se asume el conocimiento total del proceso en análisis y una vez llevada la modelación al problema directo se conoce con precisión todo lo que ocurrirá en el sistema. La variable de estado de un modelo determinista no puede ser de carácter aleatorio. Sí por el contrario el esquema seleccionado es el presentado en la figura 2c, entonces el ***modelo*** es ***estocástico***, en él a un conjunto de valores de entrada y parámetros le corresponden varios posibles conjuntos de salida, cada una de ellas caracterizada por una probabilidad de aparición (de éxito). Obligatoriamente en un modelo estocástico la variable de estado es de carácter aleatorio. El ***segundo criterio de clasificación*** consiste en determinar la evolución o no del proceso en el tiempo. Sí el modelo matemático puede hacer seguimiento de las variaciones temporales del proceso en estudio entonces este es un ***modelo dinámico*** (no estacionario), en ellos el tiempo participa como una variable independiente. En el caso contrario se tiene un ***modelo estático*** (estacionario[1]), es decir sin el tiempo como variable independiente. El ***tercer criterio de clasificación*** analiza el número de dimensiones en las que varían la variable de estado y los parámetros del modelo. Si la estructura matemática sólo considera los cambios de estas en una dimensión, por ejemplo en el tiempo, entonces se tiene un ***modelo aglutinado.*** Sí por el contrario se toma en cuenta dos o más dimensiones, por ejemplo los cambios en el tiempo y en una coordenada espacial ó en dos coordenadas espaciales, este será un ***modelo distribuido***. Formalmente, los modelos aglutinados se representan con ecuaciones diferenciales ordinarias con uno o menos argumentos independientes, mientras que los distribuidos son ecuaciones en derivadas parciales con dos o más.

Se pueden utilizar otros criterios de clasificación de los modelos matemáticos, entre ellos la clasificación por disciplinas (modelos hidrológicos, biológicos, ecológicos, etc.) y la clasificación según la validez del principio de superposición para el operador matemático aplicado (***modelo lineal o no lineal***). Otro criterio consiste en clasificar al modelo por la claridad física de su operador matemático. Si este último ha sido deducido totalmente de leyes físicas se habla de un ***modelo de caja blanca*** o basado en la física del proceso y sí por el contrario la deducción del operador esta relacionada con la solución del problema inverso tipo 2 se habla de un modelo de caja negra.

2.6.1. EJEMPLOS DE MODELOS Y SU CLASIFICACIÓN

A continuación algunos modelos matemáticos son descritos con la terminología presentada anteriormente y clasificados según los tres criterios, arriba enunciados.

I) Ecuaciones diferenciales ordinarias

[1] Estático y estacionario son categorías similares pero no idénticas. Estático hace referencia a la ausencia total de evolución temporal, mientras que estacionario señala la invariabilidad temporal del patrón de comportamiento . Este último puede ser estable pero invariante, como sucede con las oscilaciones sinusoidales climatológicas que se repiten año a año.

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

Modelo de crecimiento poblacional

$$\frac{da}{dt} = k_g a - k_d a. \qquad (1)$$

Donde:

a	-	Concentración de algas	mg/m^3
k_g	-	Taza de crecimiento de primer orden	d^{-1}
k_d	-	Respiración/Excreción	d^{-1}

La ecuación (1) representa un modelo matemático determinista, dinámico (no estacionario) y aglutinado. Como variable independiente usa la coordenada temporal t y en calidad de parámetros el coeficiente $k = k_g - k_d$ (insertar referencia). Como operador matemático utiliza una ecuación diferencial ordinaria, homogénea y de primer grado. Su variable de estado es la concentración de algas. Dado que la ecuación diferencial es homogénea simula un sistema que no tiene entradas (sistema autónomo). Resolver este modelo matemático significa encontrar la función $a(t)$ que muestra el la evolución en el tiempo de la población de algas.

Modelo predador – presa para el sistema fitoplancton – zooplancton

$$\frac{da}{dt} = (k_g - k_{ra})a - C_{gz}za; \qquad (2)$$

$$\frac{dz}{dt} = (a_{ca}\varepsilon C_{gz})za - k_{dz}z. \qquad (3)$$

Donde:

C_{gz}	-	Taza de consumo por zooplancton	d^{-1}
z	-	Concentración de zooplancton	g/m^3
a_{ca}	-	Relación carbono/clorofila	gC/gChla
ε	-	Factor de eficiencia de consumo	d^{-1}
k_{dz}	-	Taza de perdida de primer orden por respiración excreción	d^{-1}

La ecuación (2) representa un modelo predador – presa que simula en el tiempo la interacción de dos especies ubicadas en diferentes categorías en la cadena alimenticia, siendo a la presa y z el predador. Este modelo se clasifica cómo determinista, dinámico (no estacionario) y aglutinado. Cómo variable independiente también usa el tiempo y su vector de estado está compuesto por las variables a y z. Su vector de parámetros se compone de los coeficientes C_{gz}, a_{ca}, ε y k_{dz}. Su operador matemático está compuesto por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, también homogéneo y cuya solución son las funciones $a(t)$ y $z(t)$ que muestran los valores de población de algas y zooplancton para cualquier momento de tiempo t_i que pertenezca al intervalo de tiempo $0 \le t \le t_n$.

Modelos lluvia-escorrentía

Los modelos lluvia-escorrentía son un buen ejemplo de cómo un mismo proceso puede ser simulado con distintas estructuras matemáticas. A continuación se presenta para el mismo proceso una versión aglutinada y otra distribuida (Kovalenko, 1998). En capítulos posteriores se analiza como de un modelo distribuido se puede obtener uno aglutinado.

Variante aglutinada

$$\tau \frac{dQ(t)}{dt} + \frac{1}{k} Q(t) = \dot{X}(t) . \qquad (4)$$

En el cual:

τ	–	Tiempo de relajamiento	– T;
Q	–	afluencia	– L^3/T;
t	–	coordenada temporal	– T;
K	–	coeficiente de escorrentía	
X	–	precipitaciones	– L^3/T.

Esta ecuación representa un modelo determinista, dinámico (no estacionario) y aglutinado en el que la cuenca hidrológica se estudia como un punto material sin geometría, cuyo funcionamiento se simula con una ecuación diferencial ordinaria de primer orden, no homogénea, caracterizada con los parámetros k y τ. Las entradas de

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

este modelo están constituidas por las precipitaciones $\dot{X}(t)$ que son transformadas por el operador matemático en la variable de estado $Q(t)$ que representa los caudales de agua registrados en la salida de la cuenca. Solucionar el modelo cuatro significa encontrar la función $Q(t)$.

Variante distribuido

$$\frac{\partial h}{\partial t}+\frac{\partial q_x}{\partial x}+\frac{\partial q_y}{\partial y}=\dot{X}\ ; \tag{5}$$

$$q_x = Ch^{3/2}\frac{i_x}{\sqrt{i_x^2+i_y^2}}; \tag{6}$$

$$q_y = Ch^{3/2}\frac{i_y}{\sqrt{i_x^2+i_y^2}}. \tag{7}$$

Donde h – lámina de agua;
q_x – caudal elemental en la dirección *x*;
q_y – caudal elemental en la dirección *y*;
$\dot{X}$ – Intensidad de las precipitaciones;
C – coeficiente de Chezy;
i_x – pendiente del terreno en la dirección *x*;
i_y – pendiente del terreno en la dirección *y*.

La variante distribuida del modelo lluvia-escorrentía es un sistema dinámico (no estacionario) con ecuaciones en derivadas parciales, cuyo operador matemático es el de gradiente y que utiliza como parámetros características que definen las condiciones hidráulicas que condicionan el movimiento del agua por la superficie de una cuenca hidrológica. En calidad de entrada funciona la precipitación neta y como variables de estado la altura de la lámina de agua h y los caudales elementales q_x y q_y.

<u>Modelo para la migración de contaminantes</u>

$$\frac{\partial C_i}{\partial t}=V_x\frac{\partial C_i}{\partial x}+V_y\frac{\partial C_i}{\partial y}+V_z\frac{\partial C_i}{\partial z}+\frac{\partial}{\partial x}E_x\frac{\partial C_i}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}E_y\frac{\partial C_i}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}E_z\frac{\partial C_i}{\partial z}\pm$$
$$\pm\psi(C_{i-1},C_i,C_{i+1},V_x,V_y,V_z,x,y,z,t)\pm\varphi(C_i,x,y,z,t) \tag{8}$$

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

Donde:

C_i	-	Concentración del *i*-esimo componente;
V_x, V_y, V_z	-	Velocidades del fluido en las direcciones x, y, z;
E_x, E_y, E_z	-	Coeficientes de difusión en las direcciones x, y, z;
t	-	Tiempo;
x, y, z	-	Coordenadas en el plano cartesiano;
$\psi(C_{i-1}, C_i, C_{i+1}, V_x, V_y, V_z, x, y, z, t)$	-	Cinéticas de reacción no conservativas;
$\varphi(C_i, x, y, z, t)$	-	Fuentes o sumideros de sustancias conservativas.

La ecuación (8) representa el modelo matemático que simula la migración de contaminantes en un sistema con múltiples componentes ($i = 1...n$), cinéticas de reacción no conservativas y fuentes ó sumideros de sustancias conservativas. Es dinámico y distribuido. Su operador matemático está compuesto por los operadores de divergencia y gradiente. Su vector de parámetros contiene las velocidades del fluido que transporta los contaminantes, los coeficientes de difusión en cada dirección y los coeficientes para las cinéticas de reacción. Como entradas al modelo operan las fuentes y sumideros de sustancias. El componente de gradiente del operador explica el fenómeno de advección del contaminante, mientras que el de divergencia explica los fenómenos de difusión molecular y turbulenta.

2.7. CONDICIONES INICIALES Y DE FRONTERA

La solución de todo modelo matemático exige, además de la definición de su esquema general, estipular las condiciones iniciales y de frontera. Estas últimas garantizan la existencia y unicidad de la solución del modelo matemático. Si el modelo matemático está constituido por un operador distribuido (derivadas parciales) son necesarias ambos tipos de condición. Si el operador es aglutinado (ecuaciones diferenciales ordinarias) sólo se necesitan condiciones iniciales.

Resolver una ecuación diferencial es encontrar su función primitiva. Esto se logra mediante la operación de integración. Al integrar la función diferencial la primitiva se encuentra con precisión de una constante, llegando así a una familia de curvas de la que se debe escoger aquella que convierte en identidad a la ecuación diferencial. La curva apropiada se escoge utilizando la información sobre las condiciones iniciales y de frontera.

2.8. MÉTODOS DE SOLUCIÓN

Las ecuaciones diferenciales se resuelven por métodos analíticos y numéricos. Las ecuaciones diferenciales ordinarias sencillas se resuelven analíticamente por el método de separación de variables, sin embargo para ecuaciones complejas puede no existir una combinación de funciones elementales que conviertan en igualdad a la ecuación diferencial. En esos casos se aplican métodos aproximados. Entre estos métodos se encuentran el de las isoclinas, el de aproximaciones sucesivas y los numéricos como el de Euler y el de Runge-Kutta (Insertar Referencia). Estos últimos métodos son los más utilizados gracias a la flexibilidad que presentan para resolver ecuaciones diferenciales de diferente nivel de complejidad.

La solución analítica de las ecuaciones en derivadas parciales se puede encontrar aplicando los métodos de la matemático-física. Estas soluciones se hallan con mayor dificultad y por ello usualmente se aplican métodos numéricos cómo las diferencias finitas o el de elementos finitos (insertar referencia). Estos han probado gran eficiencia para la solución de ecuaciones en derivas parciales de alto orden de complejidad.

En el capítulo siguiente se presentan algunas nociones de cálculo diferencial, métodos numéricos y programación orientada a objetos, las cuales serán pertinentes en el desarrollo del presente curso.

3. EL PROTOCOLO DE MODELACIÓN MATEMÁTICA

La modelación matemática de procesos hidrológicos debe enmarcarse en un número finito de pasos ordenados (Figuras 8, 9 y 10) que conviertan el proceso de modelación en una secuencia lógica, discreta, de acciones orientadas a la obtención de un resultado con la calidad esperada. Exige además formular un cronograma de trabajo con tiempos muy aproximados a los de ejecución. Por ello es necesario plantear un Protocolo de Modelación que permita aplicar en forma sistemática la modelación matemática de procesos hidrológicos. El flujograma planteado a continuación, asegura un desarrollo ordenado en cualquier proyecto de modelación, despreciarlo convierte la modelación matemática en una tarea de derroche de tiempo, aumentando considerablemente los costos de aplicación, y disminuyendo la calidad de los resultados obtenidos. Adicionalmente el protocolo facilita la definición de puntos de enlace con otras actividades y permite integrar la participación de expertos de distintas temáticas en la optimización del modelo en aplicación y en la interpretación de sus resultados.

Durante la modelación matemática de procesos hidrológicos es oportuno seguir el siguiente orden de trabajo:

3.1. DEFINIR EL OBJETIVO DE LA MODELACIÓN

Toda modelación matemática debe partir de la pregunta ¿para que modelar un proceso? Este análisis permite establecer, que tipo de modelo es más apropiado (aglutinado o distribuido, determinístico o estocástico), con cual precisión se requiere trabajar y cual es el marco de tiempo de ejecución del proyecto de modelación.

3.2. FORMULACIÓN DEL MODELO CONCEPTUAL

Con base en el objetivo de la modelación, la disponibilidad de información existente y la factibilidad de realizar o no trabajo de campo, se establece el modelo conceptual, que determina la complejidad de los procesos a tomar en cuenta (cuales se modelan, cuales no se consideran en su totalidad o pueden simplificarse en gran medida) y comprende la percepción del usuario sobre el proceso objeto de modelación.

3.3. SELECCIÓN DEL TIPO DE MODELO A UTILIZAR

De acuerdo con el modelo conceptual, se escoge que tipo de modelo es más apropiado.

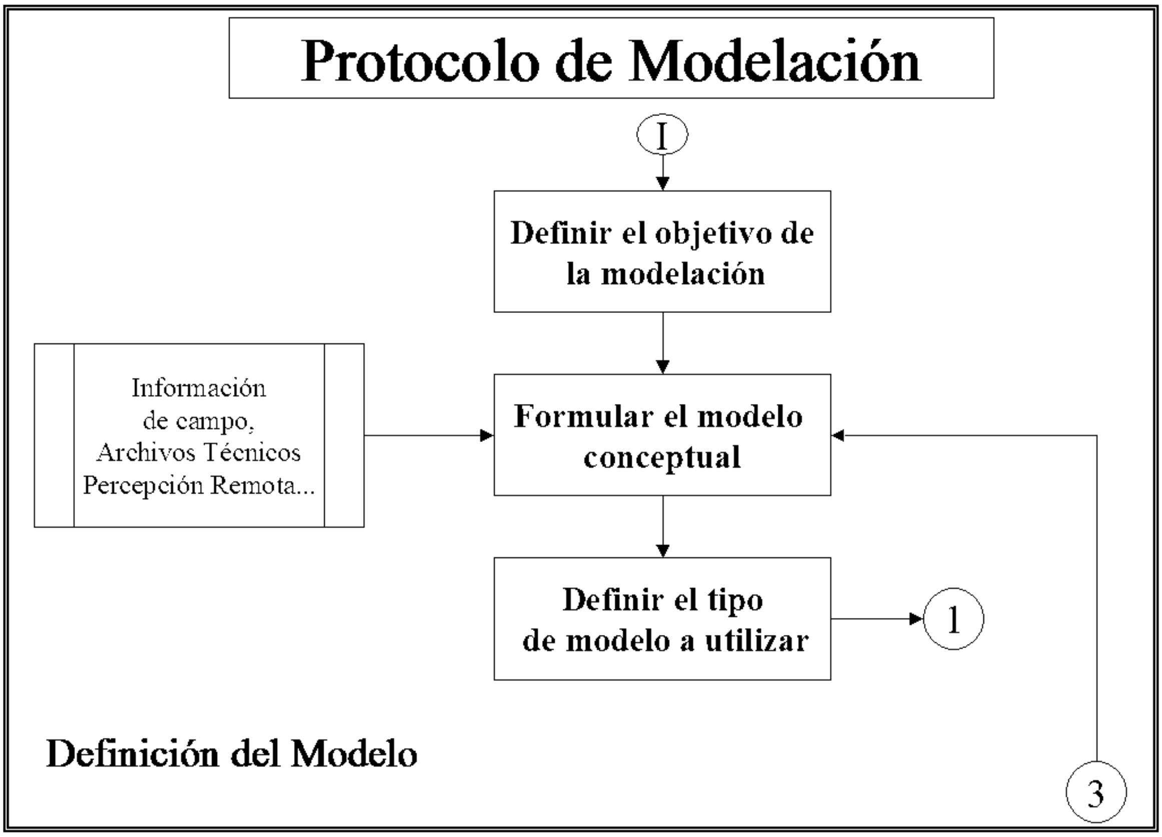


Figura 8. Primera etapa del protocolo de modelación

3.4. SELECCIÓN DEL CÓDIGO A APLICAR

Es posible que el tipo de modelo escogido, ya esté programado y sea parte de un sistema de modelación comercial, que este disponible a través de la Internet, o que sea producto de investigaciones anteriores. Si existen varias alternativas, estas deben ser analizadas y de ellas se debe escoger la más adecuadas al modelo conceptual y a la disponibilidad de información y recursos económicos.

Si no existen códigos desarrollados, o los existentes no se ajustan al modelo conceptual será necesario desarrollarlos, lo cual implica cubrir las siguientes etapas: a) formulación numérica, b) codificación para el ordenador y c) verificación del código.

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

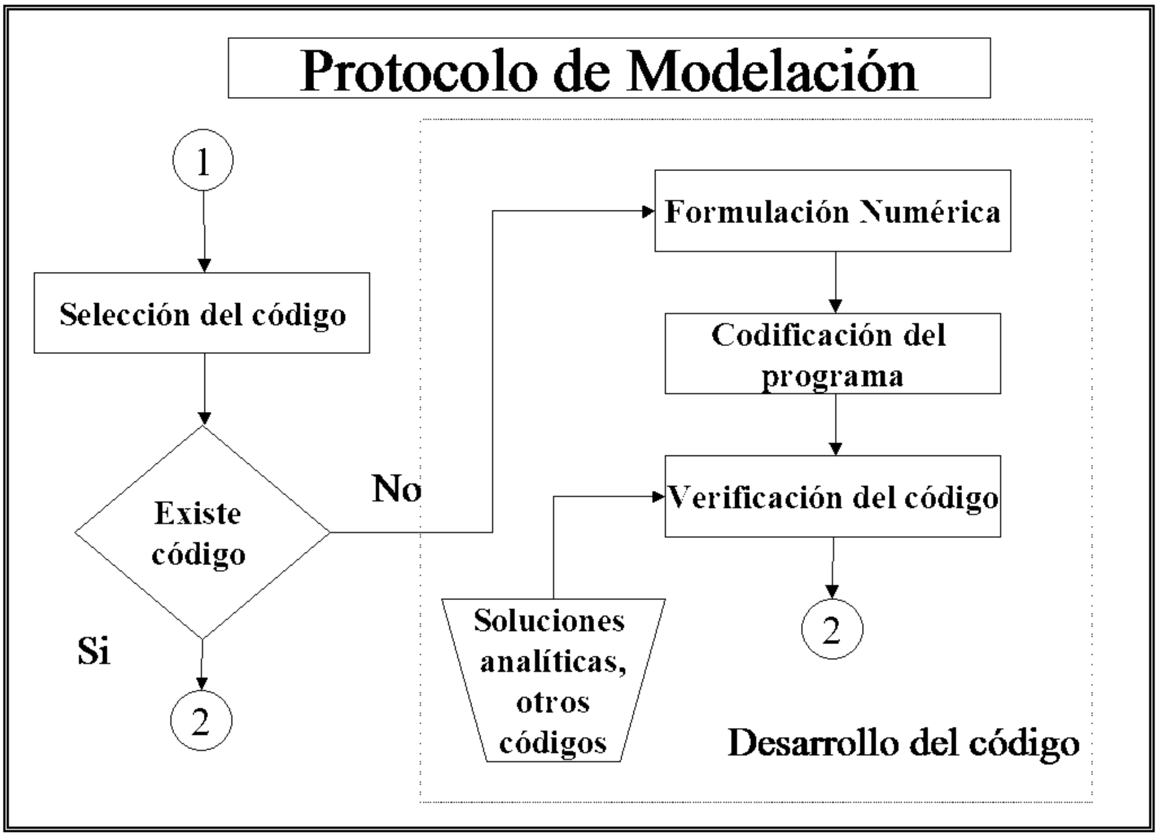


Figura 9. Segunda etapa del protocolo de modelación

3.5. PARAMETRIZACIÓN DEL MODELO

Con la información disponible, y en algunos casos apoyados en hipótesis de trabajo, se establecen las magnitudes de los parámetros que componen la estructura matemática. Si el valor de los parámetros se obtiene a través de mediciones de campo existentes o adicionalmente programadas, se dice que el modelo se parametrizó. Si el valor de los parámetros se establece a través de la solución del problema inverso, se dice que los parámetros se identificaron.

3.6. VALIDACIÓN DEL MODELO

Con el fin de probar cual es el rango de bondad del modelo, este se parametriza con una parte de la información existente, luego sin cambiar los parámetros encontrados, se prueba el modelo en un rango de datos no utilizados durante la parametrización, calculando el error promedio del modelo. Si este error está dentro de los límites permisibles, se considera que el modelo está validado, de lo contrario se repite el proceso de parametrización hasta encontrar un juego de parámetros que permita pronosticar con una bondad de ajuste adecuada. Existen criterios de validación para determinar cuando el ajuste de lo pronosticado con lo real es adecuado, entre ellos se pueden mencionar el criterio del Centro Hidrometeorológico Ruso (S/□□) , el Criterio Bayesiano de Información (BIS – por sus siglas en ingles) empleado por la Nacional Oceanic and Atmosferic Administration (NOAA), el criterio de eficiencia de Nash-Sucktliffe y el porcentaje de pronósticos acertados (con mayor detalle véase parágrafo 4.).

3.7. SIMULACIÓN

Con el modelo validado, se puede dar inicio a la simulación bajo las condiciones planteadas, este procedimiento es técnico y solamente hay que verificar que los parámetros e hipótesis planteados estén reflejados en el código implementado para el modelo matemático. Expresado de otro modo, este es el paso en el que modelo matemático es explotado operativamente.

3.8. ANÁLISIS Y PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

En esta etapa se trata de obtener el mayor número de respuestas con los datos obtenidos por el modelo y se verifica la coherencia de los resultados. Una vez analizado esto, se procede a consolidar el documento soporte para el proceso de toma de decisiones.

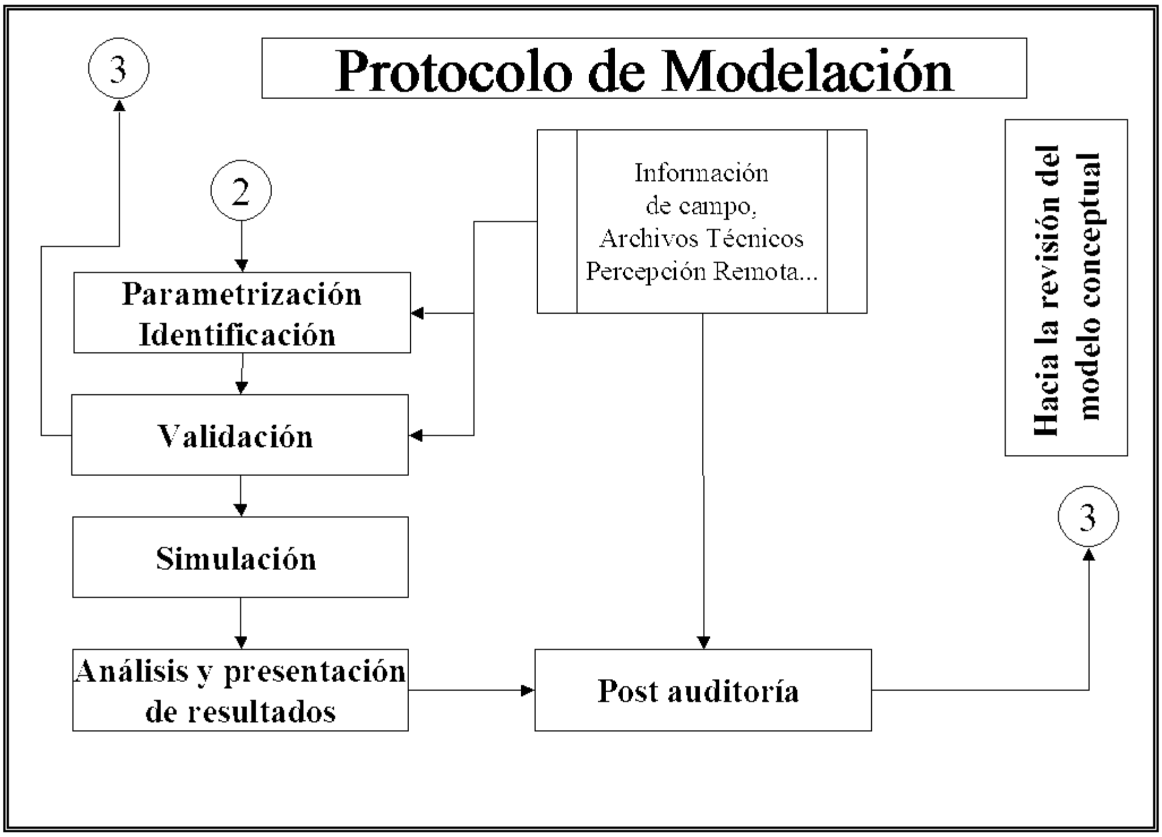


Figura 6. Tercera etapa del protocolo de modelación

3.9. POST AUDITORIA

La modelación no se detiene en el paso anterior, si en el modelo realizado se incluye información nueva, obtenida por otros medios, o que no estaba disponible en el momento inicial de la modelación este puede mejorar y hacer cambiar nuestra percepción sobre el proceso real, provocando la inducción de mejoras en el modelo conceptual planteado. Por otro lado la realización del modelo puede ser tan acertada que el mismo, al aplicarlo nos revele puntos importantes a mejorar en el modelo conceptual, formulando así un proceso de retroalimentación continua entre el desarrollo del modelo mismo y sus subsecuentes aplicaciones.

4. CRITERIOS DE EVALUACIÓN DE LA BONDAD DE AJUSTE DE LOS MODELOS MATEMÁTICOS.

Un modelo sin validar (véase parágrafo 3.7.) es una herramienta inútil, que no permite hacer conclusiones validas para apoyar los procesos de toma de decisiones. La validación consiste en la comparación de los resultados obtenidos en la simulación con el modelo matemático y los observados en la realidad. Existen, además del control visual de los resultados, criterios objetivos para evaluar la bondad de ajuste de los datos simulados contra los valores observados. La objetividad de estos criterios consiste en que además de ser mesurables cuantitativamente cada uno de ellos tiene valores críticos que definen en que caso la bondad de ajuste es suficiente y en cuales no.

4.1. CRITERIO DEL CENTRO HIDROMETEOROLÓGICO DE RUSIA (S/σ_Δ)

Si se simboliza a los valores reales como Q_i^r y a los modelados con Q_i^m, entonces es posible simbolizar los incrementos de los valores reales como:

$$\Delta_i = Q_i^r - Q_{i-1}^r . \tag{1}$$

El incremento medio será entonces:

$$\overline{\Delta} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\Delta_i \quad . \tag{2}$$

Aquí n – representa el número de pronósticos evaluados. A su vez: la desviación estándar de los incrementos de los valores reales σ_Δ se determina con la ecuación:

$$\sigma_\Delta = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(\Delta_i - \overline{\Delta})^2}{n-1}} \tag{3}$$

La desviación estándar de los errores de los pronósticos se establece de la siguiente forma:

$$S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(Q_i^r - Q_i^m)^2}{n-1}} \tag{4}$$

Observando las ecuaciones (1), (2), (3) y (4) se deduce que el criterio S/σ_Δ relaciona la desviación estándar de los incrementos de la magnitud pronosticada con la

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

desviación de los errores de pronóstico, exigiendo que la variabilidad de los errores cometidos en los pronósticos no supere la variabilidad de los incrementos de las afluencias. En conclusión, la relación S/σ_Δ mide la habilidad que tiene la metodología de pronóstico para superar al "pronóstico por inercia", de ningún modo describe el nivel de error que se pueda cometer en los pronóstico. Por esto, adicionalmente se evalúa el porcentaje de pronósticos acertados, el cual en caso de ser igual o mayor al 80% demostraría una bondad de ajuste muy buena, mientras que si el porcentaje de aciertos se encuentra entre el 60 y 79% esta se cataloga como satisfactoria y para los casos en que es menor del 60% inaceptable. Para determinar el porcentaje de pronosticos acertados se debe determinar el error máximo $\Delta_{\max}$ permitido para cada pronóstico, este se puede definir como: $\Delta_{\max} = 0{,}674\sigma_\Delta$. Este $\Delta_{\max}$ fue propuesto por el Centro Hidrometeorológico de Rusia (CHR), pero el $\Delta_{\max}$ también puede ser dictado por las necesidades del sector usuario que requiere de los pronósticos hidrológicos. Por ejemplo el Subcomité Hidrológico y de Plantas Eléctricas (SHPE) de Colombia establece que el error máximo permitido para los pronósticos de afluencias mensuales no debe superar el 30% (ISA, 2001). Finalmente, para determinar si un modelo matemático esta validado se exige que: $S/\sigma_\Delta \leq 0{,}8$. Para el pronóstico perfecto $S/\sigma_\Delta = 0$, una buena validación cumple con $S/\sigma_\Delta \leq 0.50$ y una satisfactoria con $0.51 \leq S/\sigma_\Delta \leq 0.80$. Sí $S/\sigma_\Delta > 0{,}8$ la parametrización del modelo se debe repetir.

4.2. CRITERIO DE INFORMACIÓN BAYESIANO (BIS)

Este criterio toma en cuenta el error promedio absoluto de la modelación y su desviación estandar (NOAA, 1999)

$$\overline{\Delta}_m = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left| Q_i^m - Q_i^r \right|}{n-1} \tag{5}$$

$$\sigma_{\Delta m} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} \left| Q_i^m - Q_i^r \right|}{n-1}} \tag{6}$$

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana

El BIS también toma en cuenta la relación entre el predictor y la variable pronosticada a través del coeficiente de regresión “a” y no deja de lado la variabilidad de la magnitud pronosticada dado que utiliza su desviación estándar de modo que:

$$SC = \frac{\sigma_{\Delta m}}{a} \tag{7}$$

$$BIS = \frac{1}{\sqrt{\frac{SC^2}{\sigma_Q} + 1}} \tag{8}$$

Sí el modelo matemático produce pronósticos perfectos entonces $BIS = 0$, para una validación satisfactoria es necesario que se cumpla la siguiente desigualdad:

$$BIS \geq 0{,}80 \tag{9}$$

Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE
Departamento de Ecología y Territorio
Facultad de Estudios Ambientales y Rurales
Pontificia Universidad Javeriana