MODELACIÓN MATEMÁTICA
Una introducción al método

Profesor: Efraín Antonio DOMÍNGUEZ CALLE, Ph.D.
Página Web: http://mathmodelling.googlepages.com
e-mail: e.dominguez@javeriana.edu.co

OPTIMIZACIÓN DE MODELOS MATEMÁTICO

En la resolución del ***problema inverso de tipo 1*** (figura 1) es necesario establecer el valor óptimo de los parámetros empleados en la estructura del modelo matemático. En este curso se entiende por ***parámetros óptimos*** aquellos que disminuyen la desviación (error) ε entre los datos reales Q_{obs} y los simulados Q_{sim}. Esta reducción no se refiere a la disminución de un error local en concreto ε_i (ecuación 1), sino a la minimización de un funcional de estos errores.

$\varepsilon_i = Q^i_{obs} - Q^i_{sim}$	(1)

Matemáticamente el problema de la optimización de los parámetros del modelo matemático se reduce a la minimización (maximización) del criterio adoptado para la evaluación del desempeño del modelo. Debido a esto al criterio de desempeño también se le denomina como ***función objetivo*** Φ**.**

Figura 1. Problema inverso tipo I

Generalmente, se define como ***función objetivo*** Φ de la optimización alguna de las siguientes expresiones:

$\Phi_1 = \bar{\varepsilon} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left\lvert Q^i_{obs} - Q^i_{sim}\right\rvert$	(2)
$\Phi_2 = \varepsilon^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(Q^i_{obs} - Q^i_{sim}\right)^2$	(3)
$\Phi_3 = \bar{\varepsilon} = \frac{1}{n}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(Q^i_{obs} - Q^i_{sim}\right)^2}$	(4)
$\Phi_4 = \max\lvert\varepsilon\rvert = \max\left\lvert Q^i_{obs} - Q^i_{sim}\right\rvert$	(5)
$\Phi_5 = \max\left\lvert\varepsilon^2\right\rvert = \max\left[\left(Q^i_{obs} - Q^i_{sim}\right)^2\right]$	(6)

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

$\Phi_6 = \dfrac{s}{\sigma_\Delta}$	(7)
$\Phi_7 = BIS$	(8)
$\Phi_7 = R^2 = \left[\dfrac{\sum_{i=1}^{n} \left(Q_{obs}^{i} - \overline{Q}_{obs}\right)\left(Q_{sim}^{i} - \overline{Q}_{sim}\right)}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} \left(Q_{obs}^{i} - \overline{Q}_{obs}\right)^2 \left(Q_{sim}^{i} - \overline{Q}_{sim}\right)^2}} \right]^2$	(9)

Las funciones objetivo, de la ecuación (2) a la (6), exigen minimización en el proceso de optimización, mientras que las ecuaciones, de la (7) a la (9), maximización. Para efectos de la optimización, maximizar o minimizar significan lo mismo[1].

Las expresiones de la (2) a la (9) son funcionales $\Phi = f(k_1, k_2, ..., k_n)$ multivariados de orden n; donde n es el número de parámetros a optimizar en el modelo matemático. La minimización (maximización) de $\Phi = f(k_1, k_2, ..., k_n)$ se realiza en un dominio conocido para los parámetros del modelo matemático.

La gráfica de $\Phi = f(k_1, k_2, ..., k_n)$ se conoce cómo superficie de respuesta. Para el caso de un modelo matemático con dos parámetros ésta constituye un volumen. La superficie de respuesta se puedecontener varios mínimos (máximos) locales y uno global en el dominio de búsqueda de los parámetros óptimos.

Para detectar los extremos del funcional $\Phi = f(k_1, k_2, ..., k_n)$ es necesario que se cumplan las siguientes condiciones:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \Phi}{\partial k_1} = 0; \\ &\frac{\partial \Phi}{\partial k_2} = 0; \\ &\vdots \\ &\frac{\partial \Phi}{\partial k_n} = 0; \end{aligned} \qquad (10)$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_1^2} & \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_1 \partial k_2} & \cdots \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_1 \partial k_n} \\ \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_2 \partial k_1} & \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_2^2} & \cdots \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_2 \partial k_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_2 \partial k_1} & \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_2 \partial k_1} & \cdots \dfrac{\partial^2 \Phi}{\partial k_n^2} \end{vmatrix} > 0 \qquad (11)$$

[1] Minimizar una función objetivo $\Phi = f(\boldsymbol{x})$ representa lo mismo que maximizar $-\Phi$

Para garantizar el extremo de Φ es obligatorio que el determinante Δ (ecuación 11) sea mayor que 0. En los casos en que $\Delta \leq 0$ el extremo no existe ó es indeterminado. Para un ejemplo de este caso obsérvese la figura 2, en la cual en el intervalo [a, b] existe un número infinito de puntos que minimizan el funcional Φ.

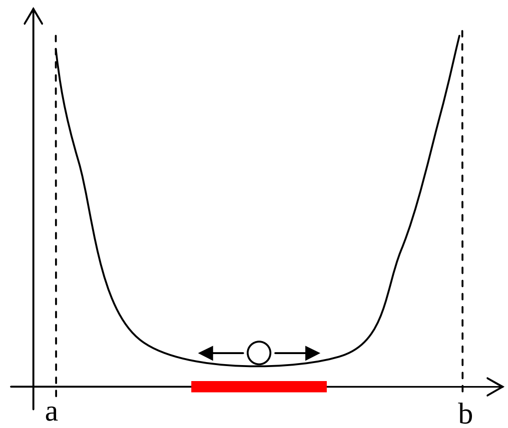

Figura 2. Mínimo indeterminado para $\Phi = f(k_1)$

Los procedimientos de optimización van desde el ensayo y error, aplicando todas las combinaciones posibles de $k_1, k_2, \ldots, k_n$ en la función objetivo $\Phi = f(k_1, k_2, ..., k_n)$, hasta encontrar aquellos que la minimizan en el dominio de definición de sus argumentos. Este método es sencillo para n pequeños. En caso contrario, esta búsqueda gasta muchos recursos computacionales y de tiempo. Una idea que puede mejorar la eficiencia en la búsqueda del extremo deseado consiste en cambiar la combinación secuencial de los valores de $k_1, k_2, \ldots, k_n$ por una aleatoria durante un largo número de iteraciones, escogiendo la combinación con el valor mínimo para Φ. Con esta técnica aleatoria no se sabe cuanto tiempo puede durar la convergencia de Φ a un valor mínimo aceptable.

Otra variante de búsqueda consiste en variar sólo una de las variables k_i. Por ejemplo, se puede variar k_1 mientras el resto de variables permanecen constantes. Al encontrar el máximo de Φ en el eje de k_1 este parámetro se deja fijo, optimizado y se empieza a variar k_2. Al encontrar el máximo de Φ en el dominio de k_2 este parámetro también se congela, optimizado, y se sigue con el mismo procedimiento hasta llegar a k_n. El funcional Φ debe alcanzar su magnitud mínima, en los dominios dados al ser calculado con los argumentos $k_{1,optimo}$, $k_{2,optimo}$, …, $k_{n,optimo}$.

Para acelerar la búsqueda del máximo, el método anterior puede ser perfeccionado utilizando el gradiente de la función objetivo como indicador de la dirección en la que ocurre el mayor cambio en la coordenada que se optimiza. De esta forma el gradiente:

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

$$grad(\Phi) = \left(\frac{\partial\Phi}{\partial k_1}, \frac{\partial\Phi}{\partial k_2}, ..., \frac{\partial\Phi}{\partial k_n} \right) \tag{12}$$

Define la dirección de búsqueda de las coordenadas óptimas k_1, k_2, …, k_n mediante las iteraciones:

$$\begin{aligned} k_1^{m+1} &= k_1^{m1} - r\frac{\partial\Phi}{\partial k_1}; \\ k_2^{m+1} &= k_2^{m1} - r\frac{\partial\Phi}{\partial k_2}; \\ &\vdots \\ k_n^{m+1} &= k_n^{m1} - r\frac{\partial\Phi}{\partial k_n} \end{aligned} \tag{13}$$

Donde m representa el contador de las iteraciones. En (13) r se varía hasta encontrar el mínimo de Φ, después de lo cual se reevalúa el gradiente y se comienza la búsqueda con el nuevo valor de $grad(\Phi)$. Existen varios métodos de selección de r uno de ellos consiste en minimizar la magnitud:

$$\sum_{i=1}^{r} \left(k_i - r\frac{\partial\Phi}{\partial k_i} \right)^2 \tag{9}$$

Existen otras variantes del método del gradiente, entre ellas la del gradiente conjugado, que produce una convergencia más rápida hacia el mínimo de Φ.

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