# **Apuntes – Módulo 1**

## **Curso: Modeling and Simulation of Natural Processes**

**Universidad de Ginebra - Prof. Bastien Chopard et al.** **Semana 1 – Introducción y conceptos generales**

### **1. Objetivos del curso y contexto general**

* Se presenta el curso y se indica que este busca enseñar a modelar fenómenos naturales, tanto desde lo teórico como desde lo práctico.
* En el curso se utilizará el enfoque de "experimento numérico"como herramienta principal, usando Python.
* Se pone énfasis en la interdisciplinariedad (profesores de física, biología e informática), por el contenido se denota un enfoque muy ingenieril.
* Se tratarán ejemplos de procesos naturales modelados: fluidos, tráfico, crecimiento de tejidos, ecosistemas, epidemias, economía, etc.

Se denota la siguiente frase muy representativa de lo que es un modelo: *“Un modelo no es la realidad, sino una representación simplificada con propósito”*

### **2. ¿Qué es un modelo?**

* Un modelo es una abstracción que simplifica la realidad para describir, entender o predecir un sistema.
* No hay un modelo único para un fenómeno → depende de la escala y pregunta específica.
* El curso da una frase inspiradora cita de Einstein muy interesante: “Todo debe hacerse lo más simple posible, pero no más simple”.

**Tipos de modelos comunes:**

* Ecuaciones diferenciales (ODEs/PDEs)
* Autómatas celulares
* Métodos de Monte Carlo
* Simulación basada en agentes
* Lattice Boltzmann (flujo de fluidos a nivel de partículas)

Ejemplo de aplicación correcta de modelos: En lugar de modelar la atmósfera por moléculas (¡inviable!), se discretiza en celdas con presión, temperatura, etc.

### **3. Modelar el espacio y el tiempo**

**Dimensiones clave en un modelo:**

* **Tiempo**: puede ser continuo, discreto o representado por eventos.
* **Espacio**: puede representarse de forma fija (euleriano) o móvil (lagrangiano).

**Estrategias temporales:**

* Tiempo continuo → ideal, pero computacionalmente inviable.
* Tiempo discreto → dividimos el tiempo en pasos (Δt).
* Simulación de eventos discretos → sólo modelamos eventos relevantes (útil en colas, por ejemplo).

**Estrategias espaciales:**

* **Euleriano**: fijamos puntos en el espacio y observamos qué pasa allí.
* **Lagrangiano**: seguimos a los objetos que se mueven en el espacio.

También se introducen las redes complejas: estructuras donde los nodos representan agentes (personas, empresas, etc.) y los enlaces representan interacción (no necesariamente físicas).

### **4. Ejemplo aplicado: Modelización biomédica**

**Caso real de una aplicación puede ser:** simulación de trombosis en aneurismas cerebrales.

* Se modela el flujo sanguíneo, la biología y la interacción con la pared arterial.
* Se usan imágenes 3D reales para recrear la geometría de los vasos.
* Se simulan procesos de coagulación (trombos) tras insertar un stent.
* El modelo usa ecuaciones como Lattice Boltzmann para describir el flujo.

**Validación del modelo**: Se comparan resultados simulados con imágenes médicas reales → buena concordancia visual y cuantitativa.

Este es un gran ejemplo de cómo la simulación ayuda a tomar decisiones médicas.

### **5. Introducción a los métodos de Monte Carlo**

#### **¿Qué es este método?**

* Método de muestreo aleatorio → en vez de resolver fórmulas exactas, simulamos muchas veces y sacamos estadísticas.
* Ejemplo simple: lanzar una moneda múltiples veces para calcular la probabilidad de cierto resultado (como 3 caras en 4 lanzamientos).

#### **Aplicaciones:**

* Juego de cartas (guerra): difícil de analizar con combinatoria → mejor simular.
* Problemas físicos complejos: simulación de procesos cuando la teoría es demasiado difícil.

Dato curioso: *El método Monte Carlo fue bautizado así por los físicos Ulam, von Neumann y Metropolis, en el contexto del Proyecto Manhattan.*

### **6. Monte Carlo de Cadenas de Markov (MCMC)**

* Sirve para muestrear espacios de estado usando un proceso estocástico.
* Utiliza reglas de transición para mover un sistema de un estado a otro.
* Introducción al equilibrio detallado: condición para que el sistema alcance una distribución estable.

**Regla de metrópolis**:

* Si la nueva energía es más baja → se acepta el cambio.
* Si es más alta → se acepta con cierta probabilidad.

Se puede aplicar para simular gases, calcular presiones, estudiar configuraciones moleculares, etc.

### **7. Monte Carlo Dinámico (o cinético)**

* Se usa para simular procesos que evolucionan en el tiempo (por ejemplo, reacciones químicas simples).
* Comparación entre:  
  + Solución analítica (ecuaciones diferenciales)
  + Simulación estocástica (aleatoriedad → fluctuaciones)

Acá también se introduce el algoritmo de Gillespie, más preciso para simular reacciones químicas con eventos discretos.

El algoritmo selecciona aleatoriamente el evento que ocurrirá y avanza el tiempo con una fórmula basada en probabilidad exponencial.

Al repetir muchas simulaciones → los resultados se acercan al valor esperado (solución analítica).

### **Conclusiones – Módulo 1**

* Esta primera semana se da una base sólida de lo qué es modelar y cómo se representa el tiempo, el espacio y la aleatoriedad.
* Lo que más me llamó la atención:  
  + La comparación entre distintos enfoques para modelar espacio/tiempo.
  + Cómo una simulación puede reemplazar una ecuación compleja.
  + El caso biomédico mostró cómo los modelos no son sólo teoría, sino que pueden tener impacto clínico real.