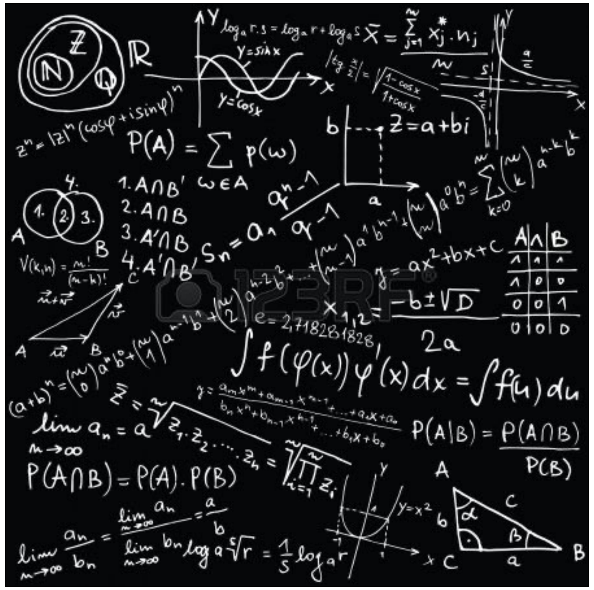
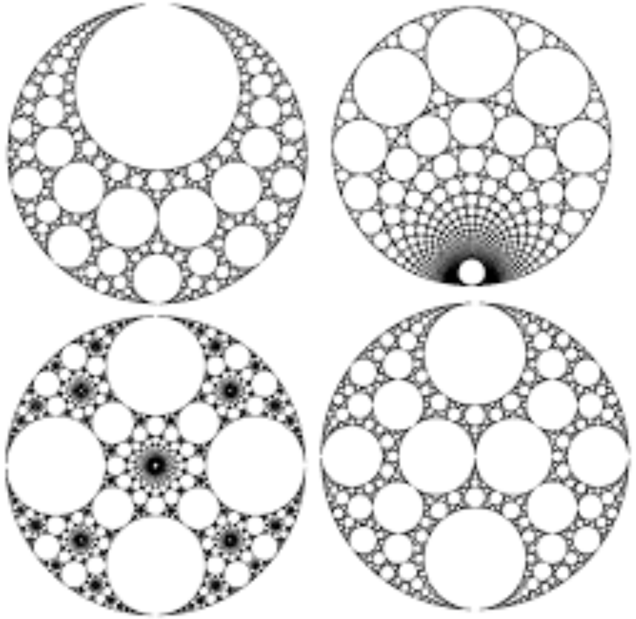
MODELADO MATEMÁTICO Y SIMULACIÓN I

1-90746

Unidad I: Introducción al modelado y simulación de procesos



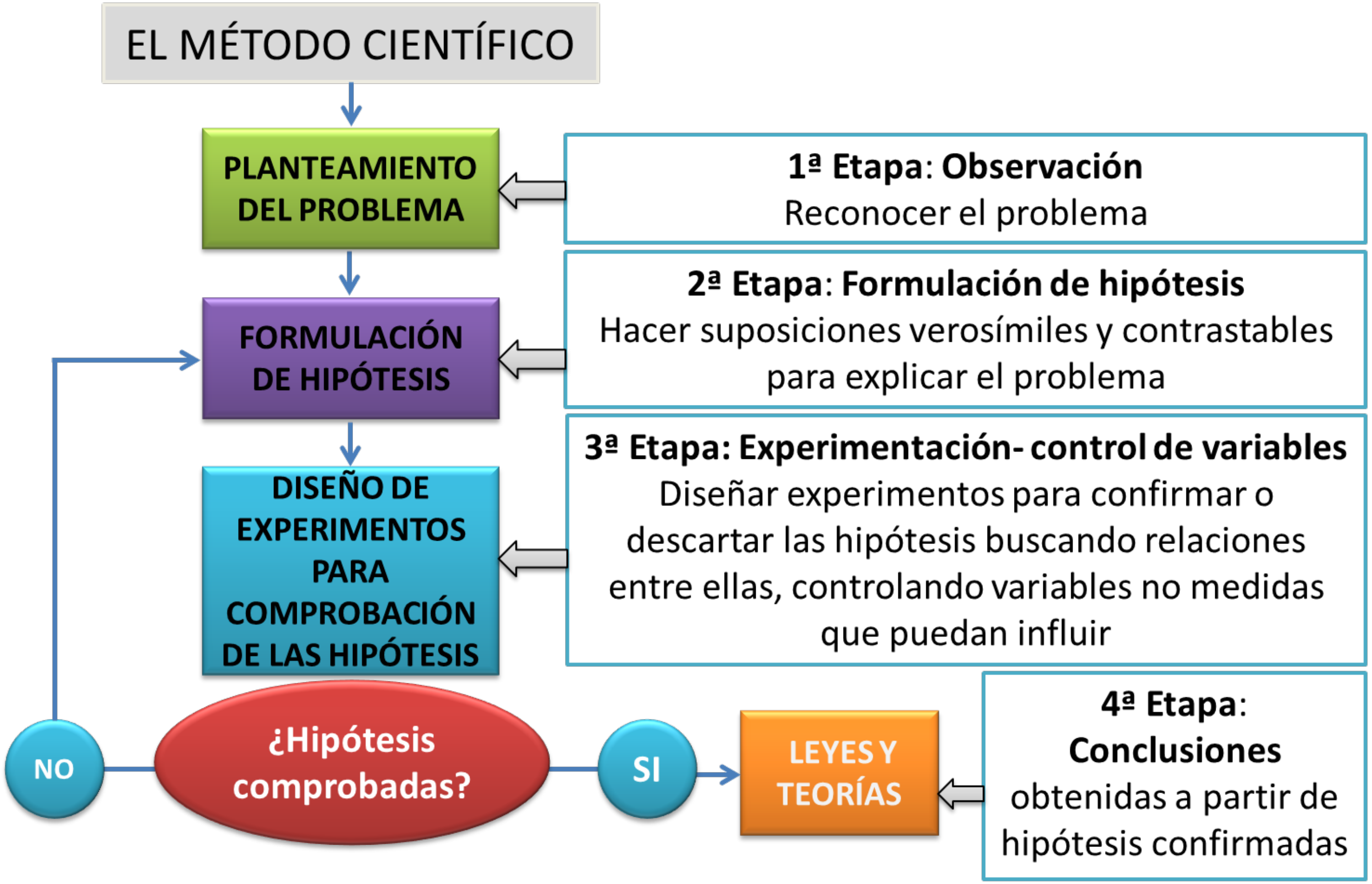
$$v_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}).$$



Portoviejo, Octubre 2023

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Necesidad de los modelos para la investigación en ciencias

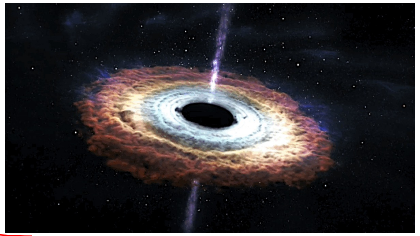


1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Definición 1: (Modelo como representación de la realidad)

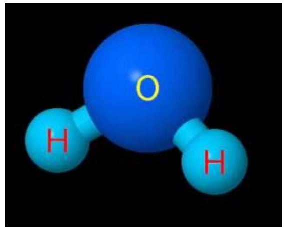
Representación ABSTRACTA de cierto ASPECTO DE LA REALIDAD, formada por los elementos que caracterizan a dicho aspecto y por las relaciones entre estos.

Realidad



ABSTRACCIÓN

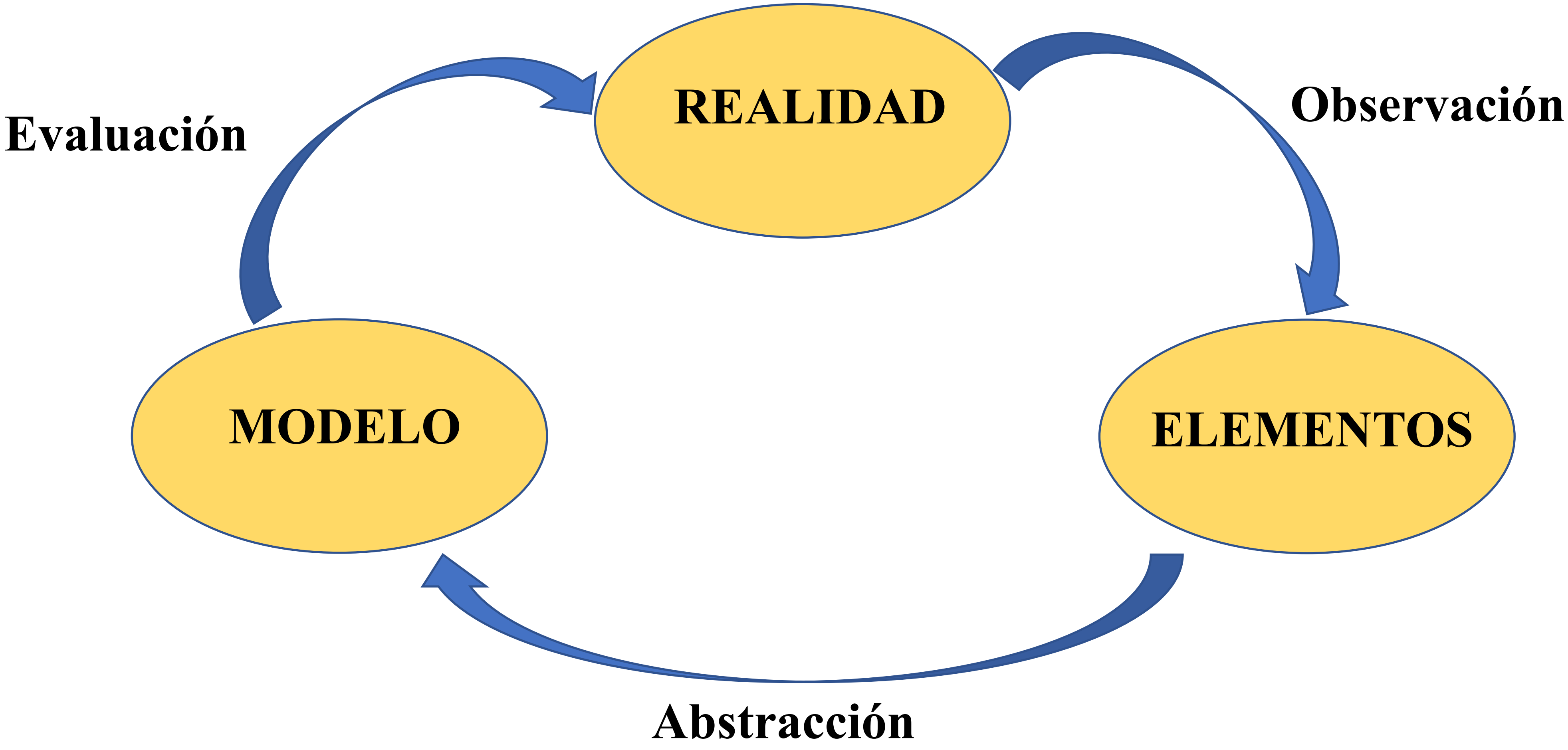
Modelo



$$R_{\mu\nu} - \frac{1}{2} g_{\mu\nu} R = \frac{8\pi G}{c^4} T_{\mu\nu},$$

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

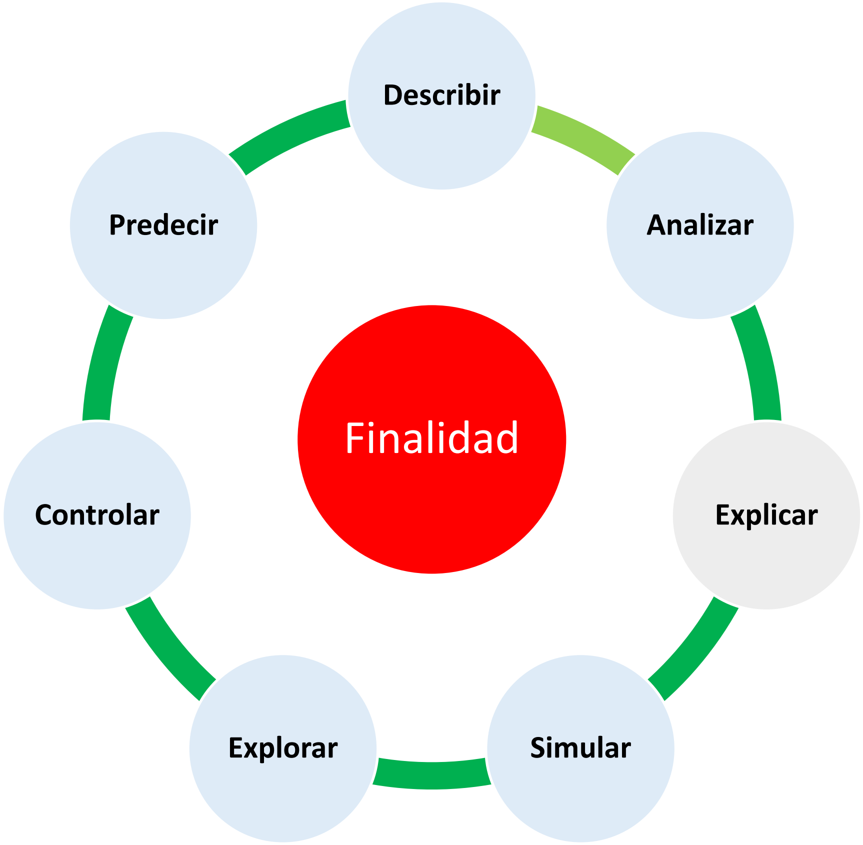
Definición 1: (Modelo como representación de la realidad)



1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Definición 2: (Modelo como representación de un sistema)

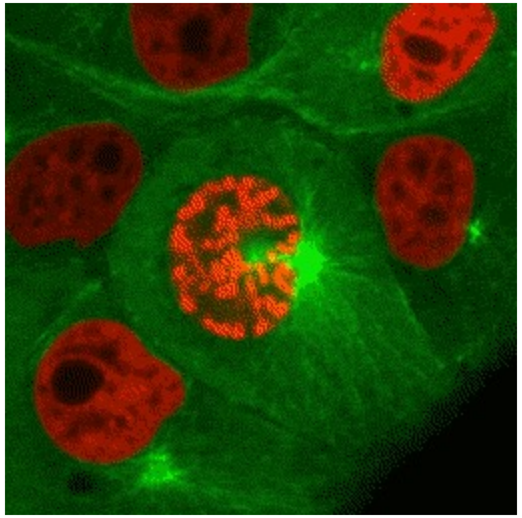
Representación de un SISTEMA que se construye con el PROPÓSITO DE ESTUDIARLO.

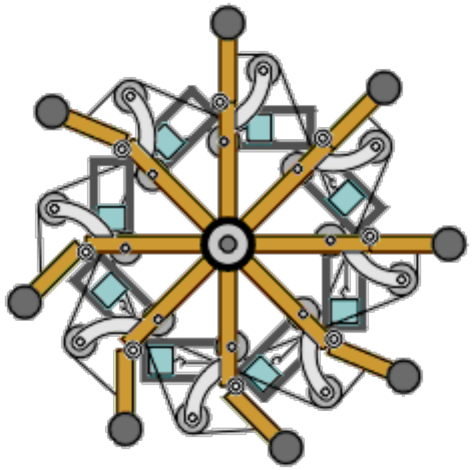


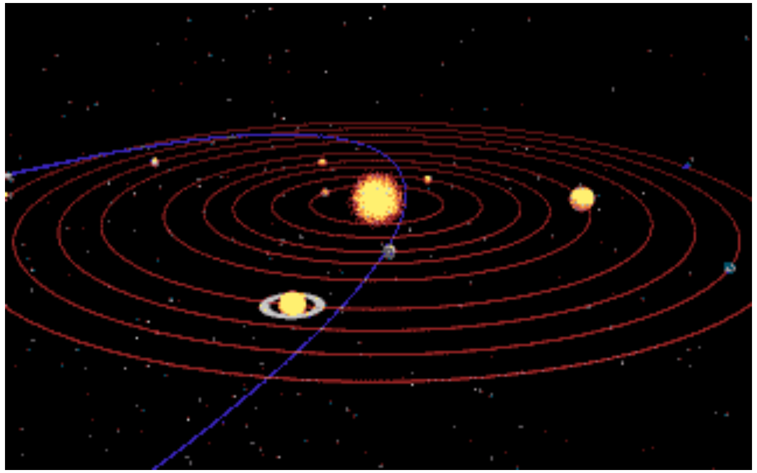
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Definición 3: (Sistema)

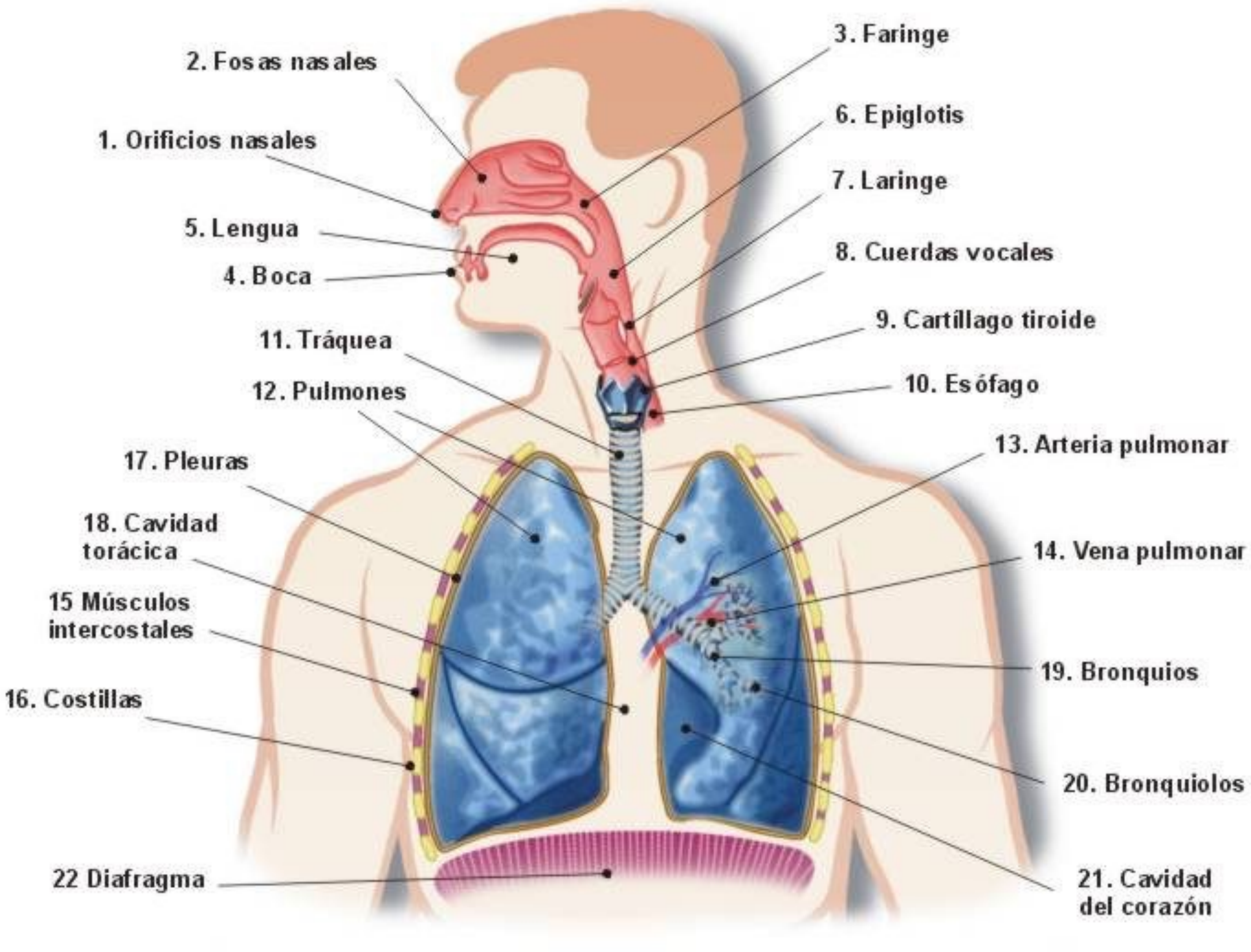
Es un CONJUNTO DE ELEMENTOS ORGANIZADOS que INTERACTÚAN DINÁMICAMENTE para CONSEGUIR UN OBJETIVO.



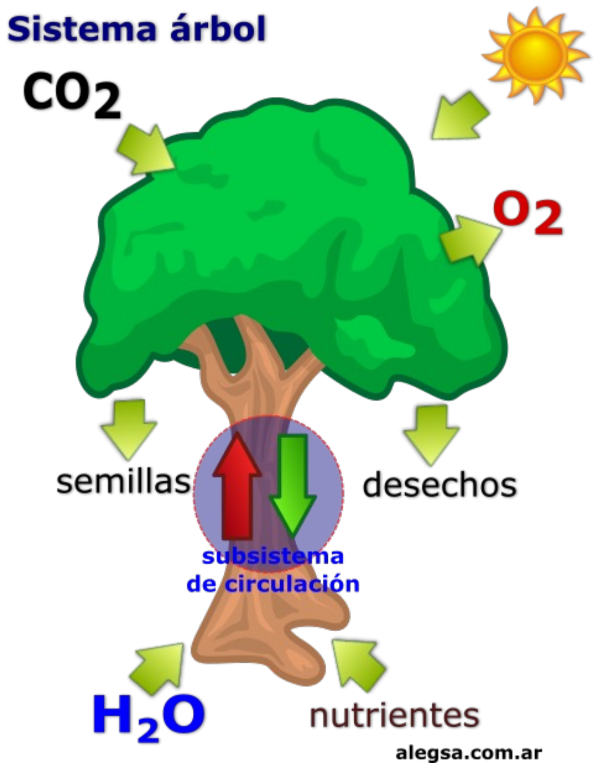




1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias



1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias



Elementos: hojas, corteza, ramas, troncos, agua, células vegetales, etc.

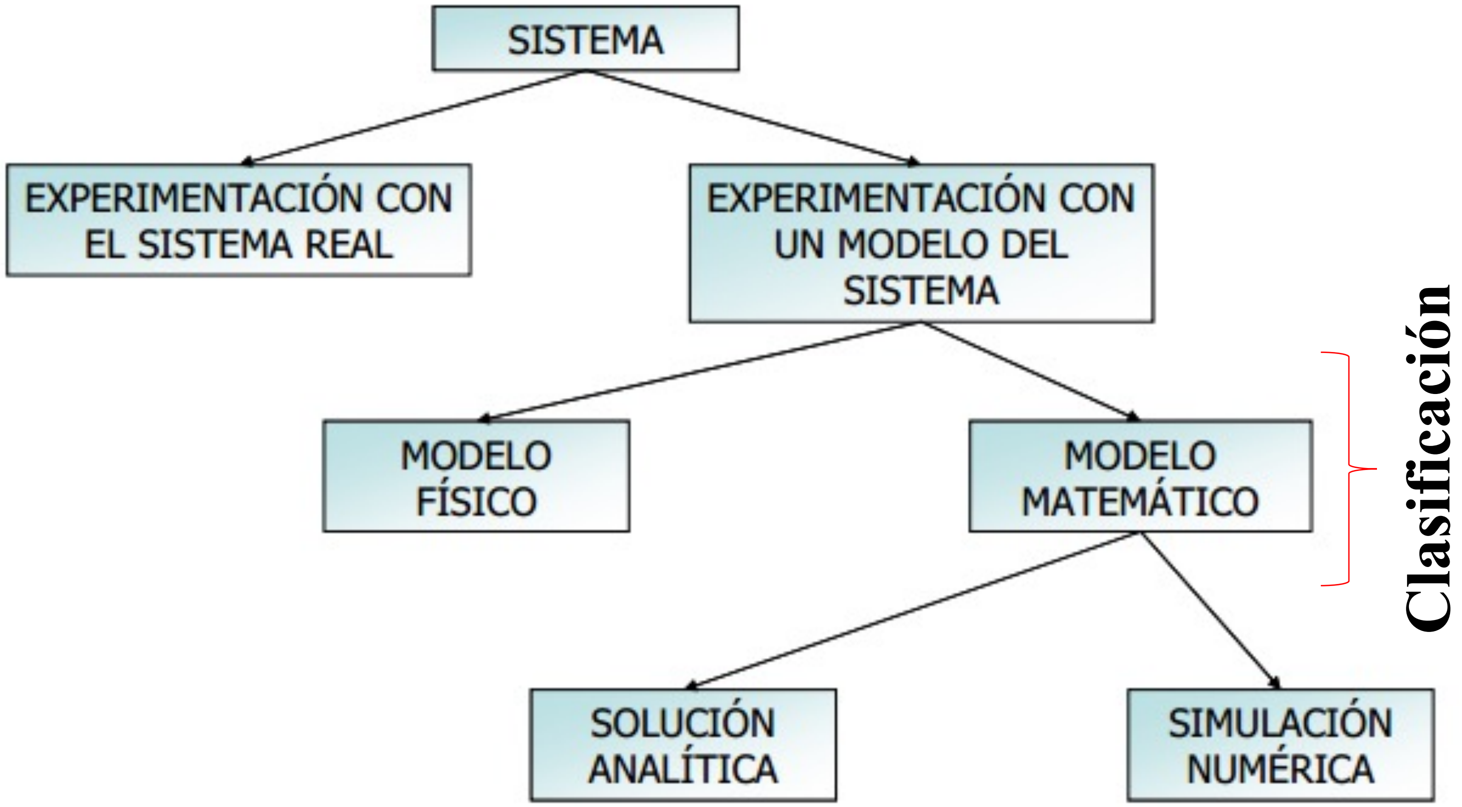
Entradas: dióxido de carbono, luz solar, agua, nutrientes, etc.

Salidas: desechos (hojas, ramas muertas, vapor), semillas, frutos, oxígeno, etc.

Objetivo: absorber CO2 y liberar oxígeno, proveer alimento y sombra, etc.

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias



1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Modelo

Físicos

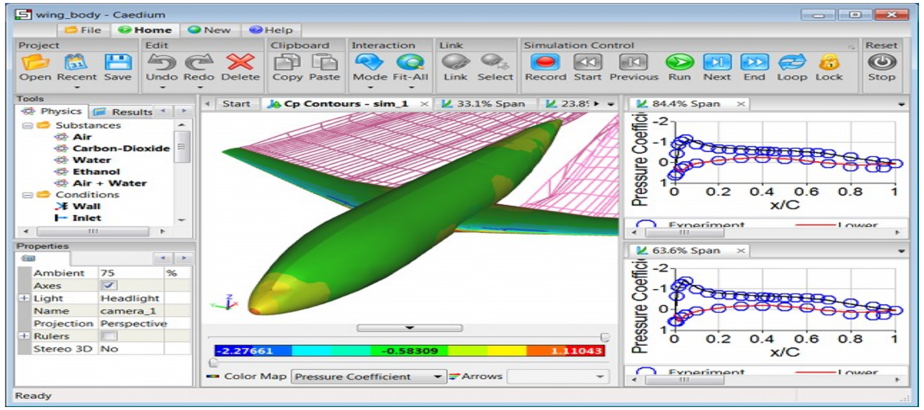
Matemáticos

Continuity $\quad \frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j)=0$

Momentum $\quad \frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i)+\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j)=-\frac{\partial P}{\partial x_i}+\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j}$

Energy $\quad \frac{\partial}{\partial t}(\rho h_{tot})+\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho h_{tot} u_j)=\frac{\partial P}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(u_i \tau_{ij}+\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j}\right)$

where $\quad \tau_{ij}=\mu\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j}{\partial x_i}+\frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\right) \qquad h_{tot}=h+\frac{1}{2}u_i^2$

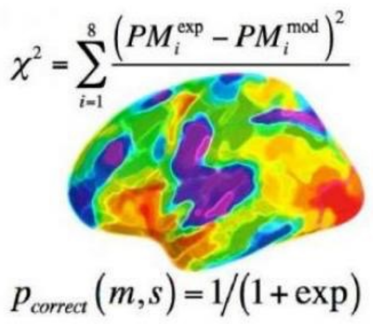


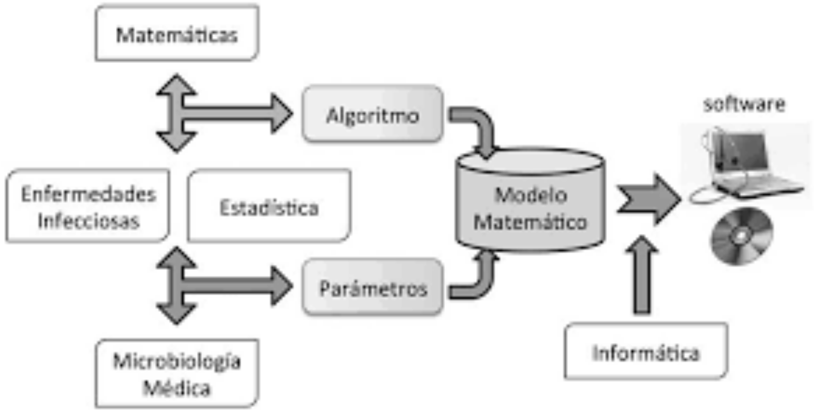
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Definición 4 (Modelo Matemático)

INFORMAL: **descripción aproximada** de una clase de fenómenos o sistemas del mundo real, **expresada con ayuda de símbolos matemáticos**.

FORMAL: **ecuación** o **conjunto de ecuaciones matemáticas**, junto con algunas **restricciones** o **condiciones auxiliares**, que dan solución a un **problema específico**.





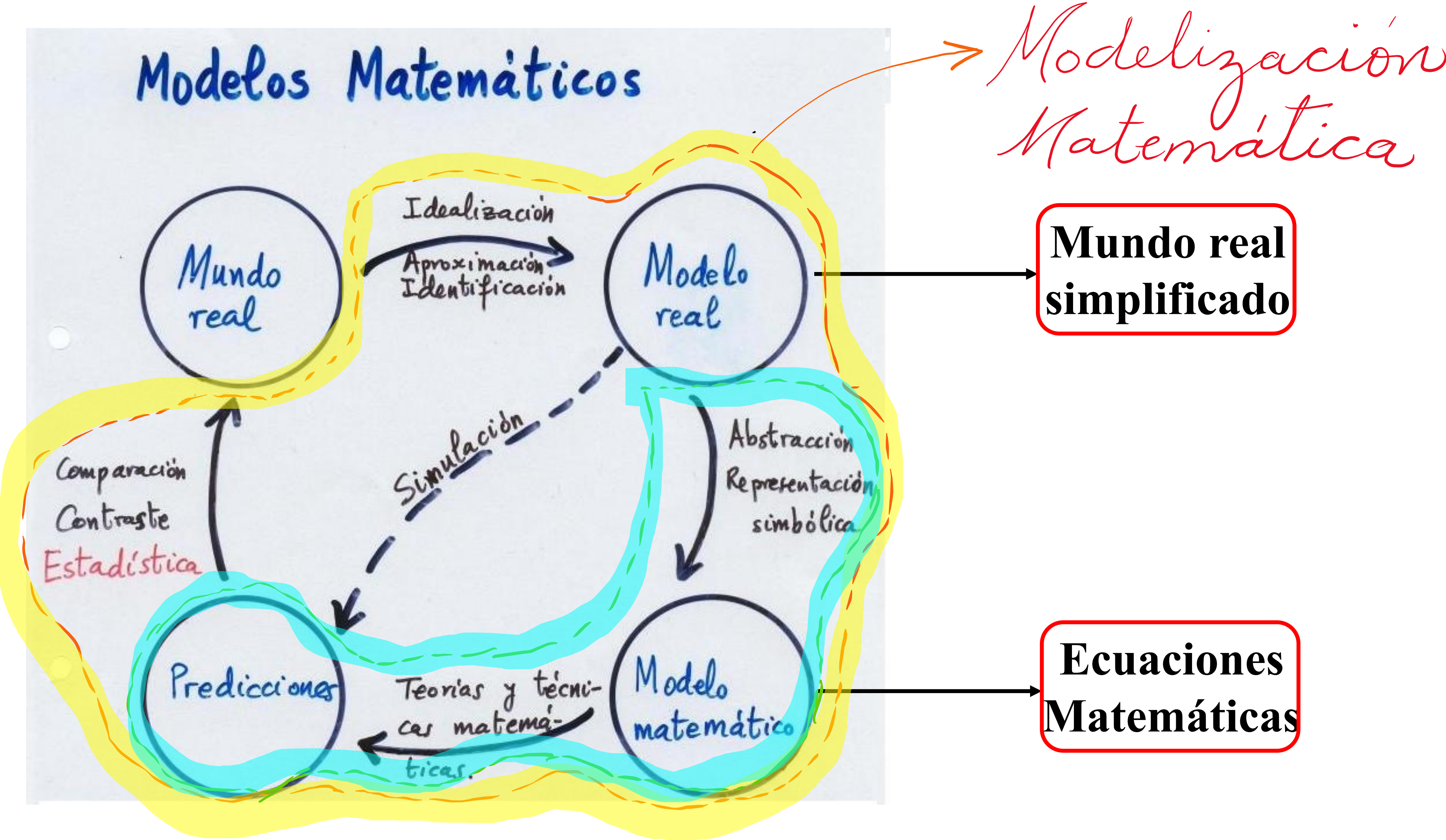
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Definición 5 (Modelización matemática)

Proceso para construir ecuaciones, expresiones o objetos matemáticos que representen los aspectos relevantes de un fenómeno o sistema.

El proceso incluye el **MÉTODO DE ANÁLISIS** de las ecuaciones; la **OBTENCIÓN** de **SOLUCIONES EXACTAS** o **APROXIMADAS**; las posibles **EVALUACIONES** y **SIMULACIONES**.

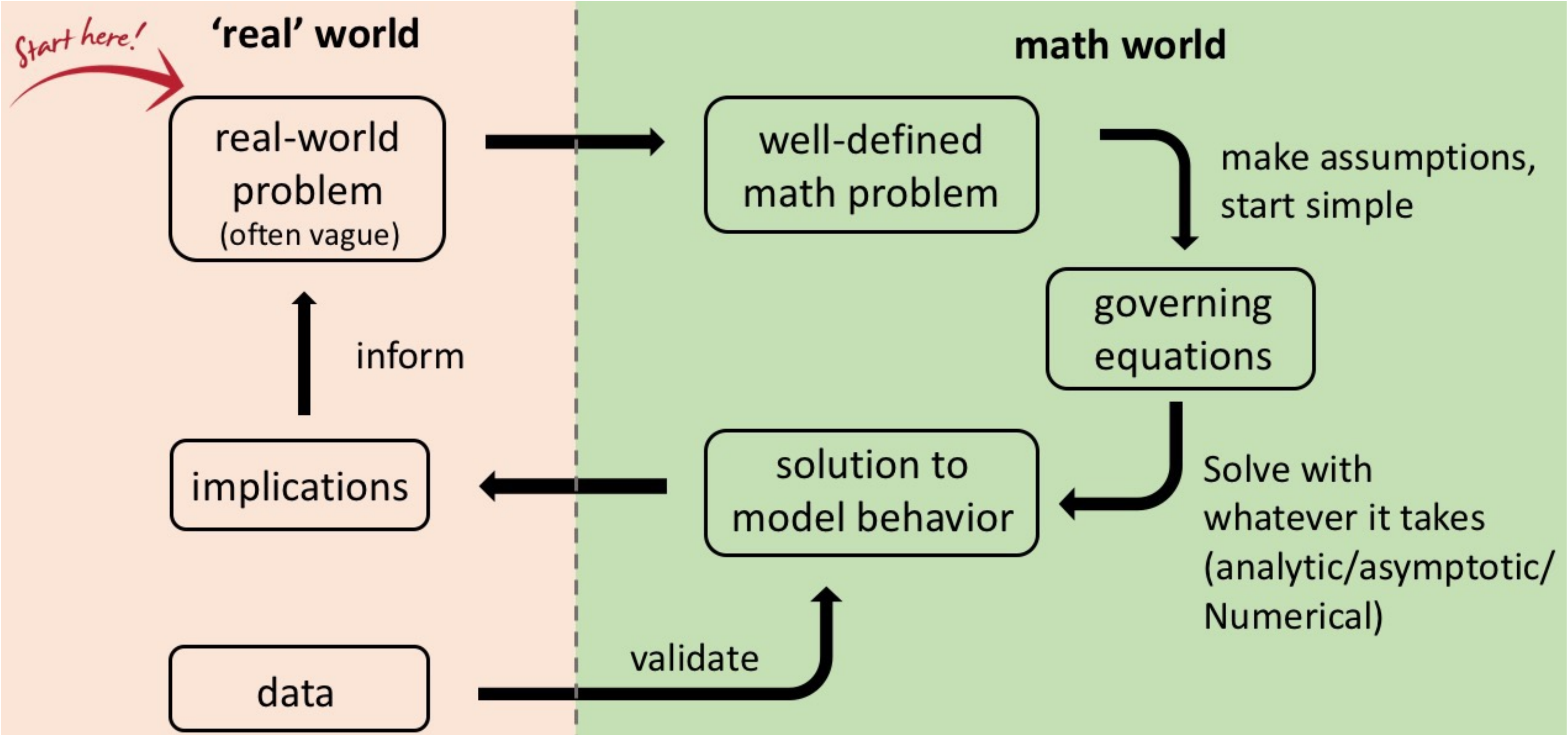
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias



Mundo real simplificado

Ecuaciones Matemáticas

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

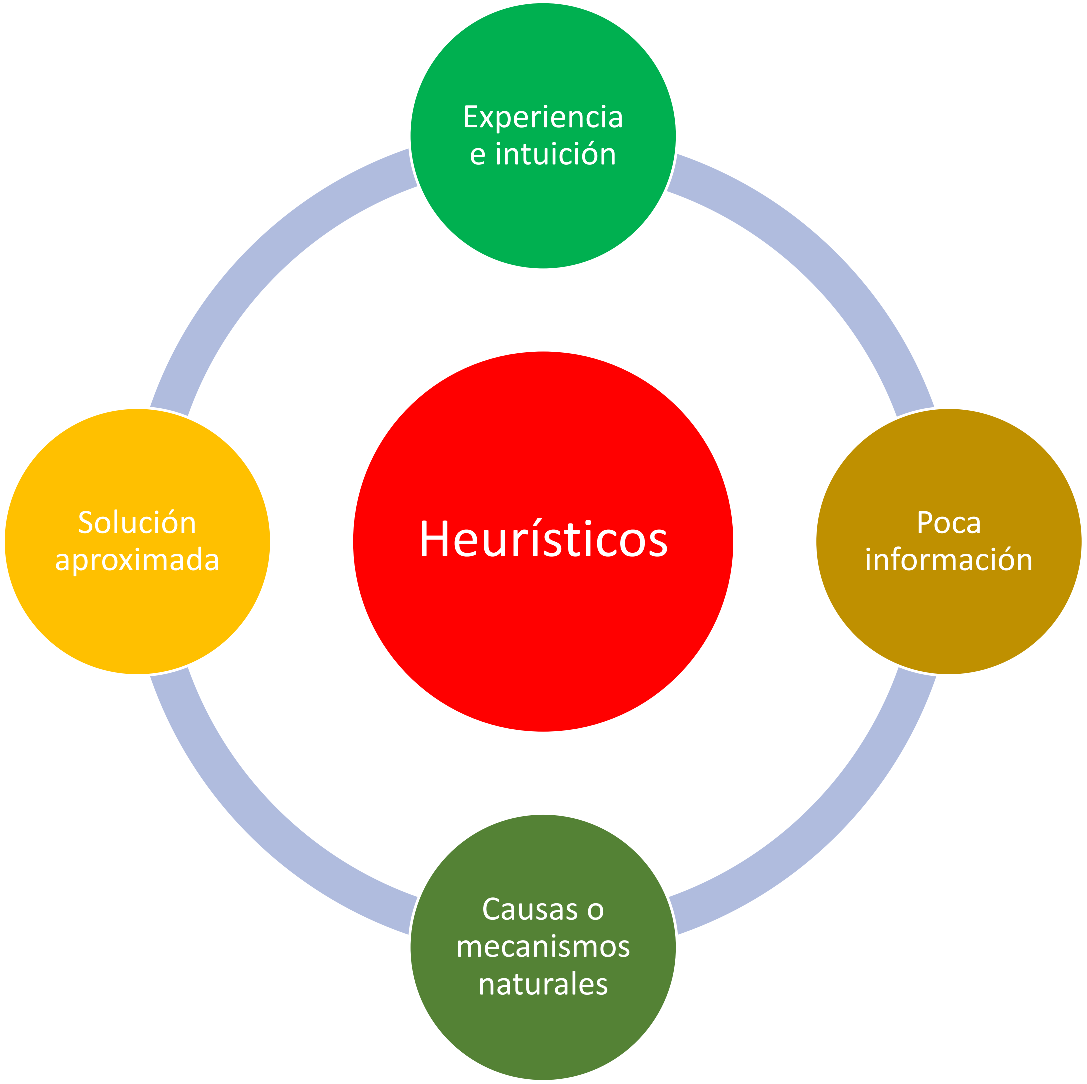


1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

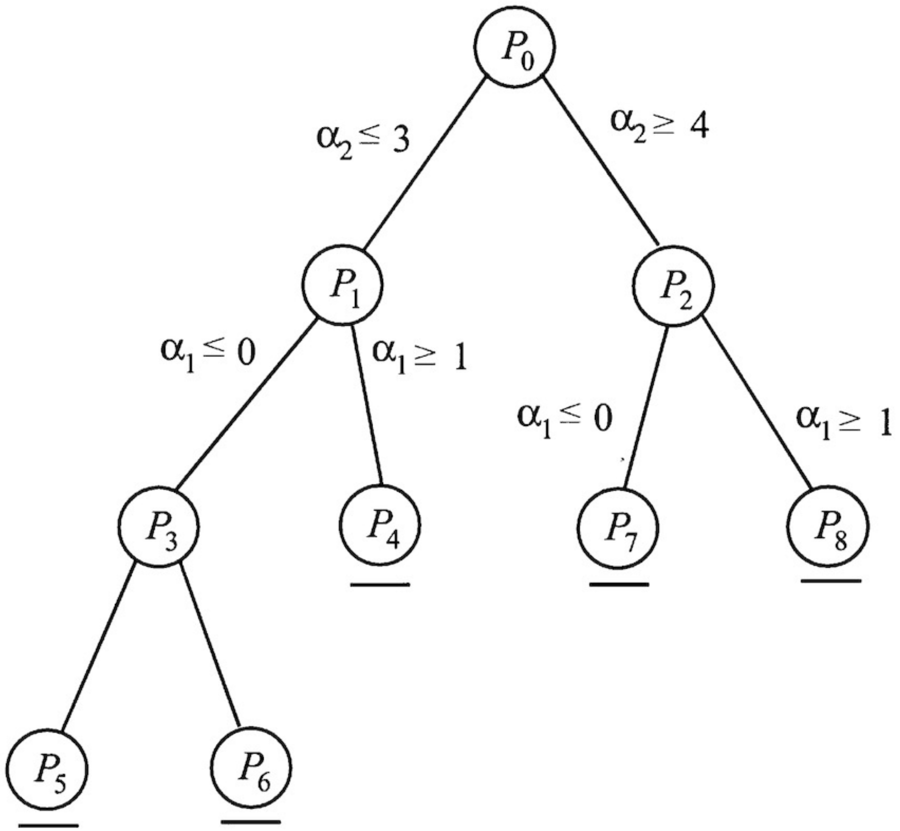
Tipos de modelos matemáticos

- Según
  - La información de entrada
    - Modelos heurísticos
    - Modelos empíricos
  - El tipo de representación
    - Modelos cualitativos o conceptuales
    - Modelos cuantitativos o numéricos
  - La aleatoriedad
    - Determinista
    - Estocástico
  - Su aplicación u objetivo
    - Modelo de simulación o descriptivo
    - Modelo de optimización
    - Modelo de control.

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias



Branch and Bound

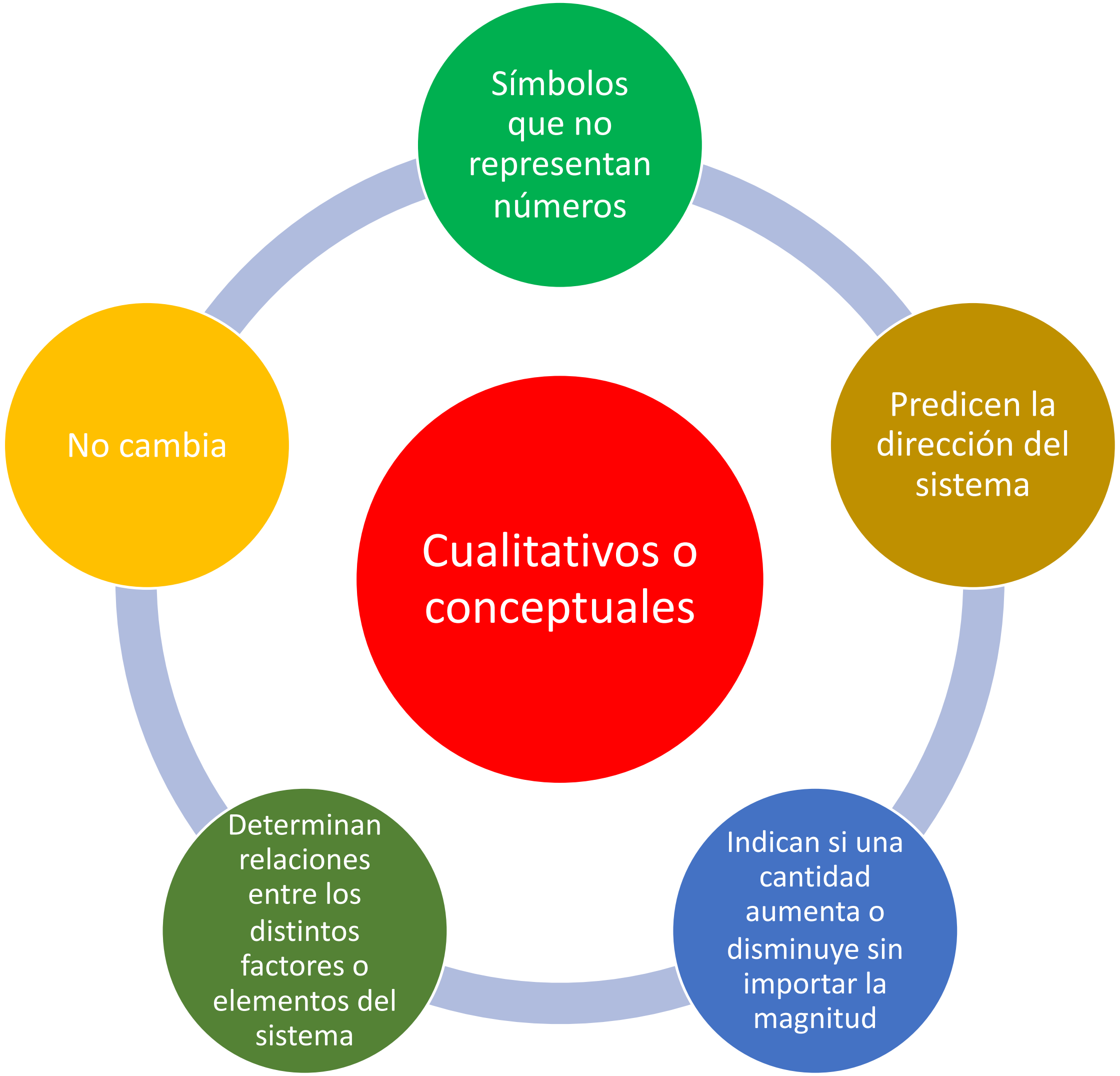


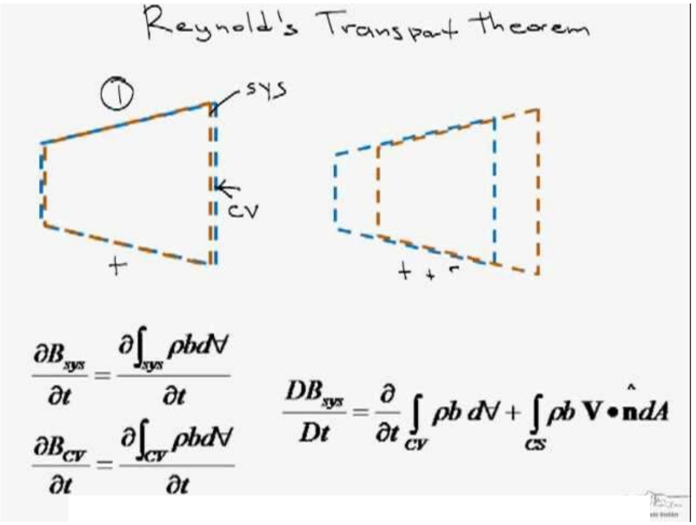
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

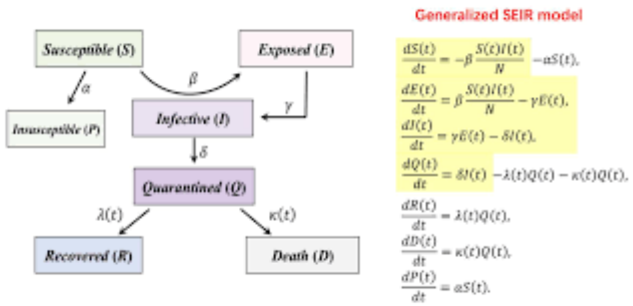
Empíricos

- Observaciones
- Experimentos
- $PV=nRT$

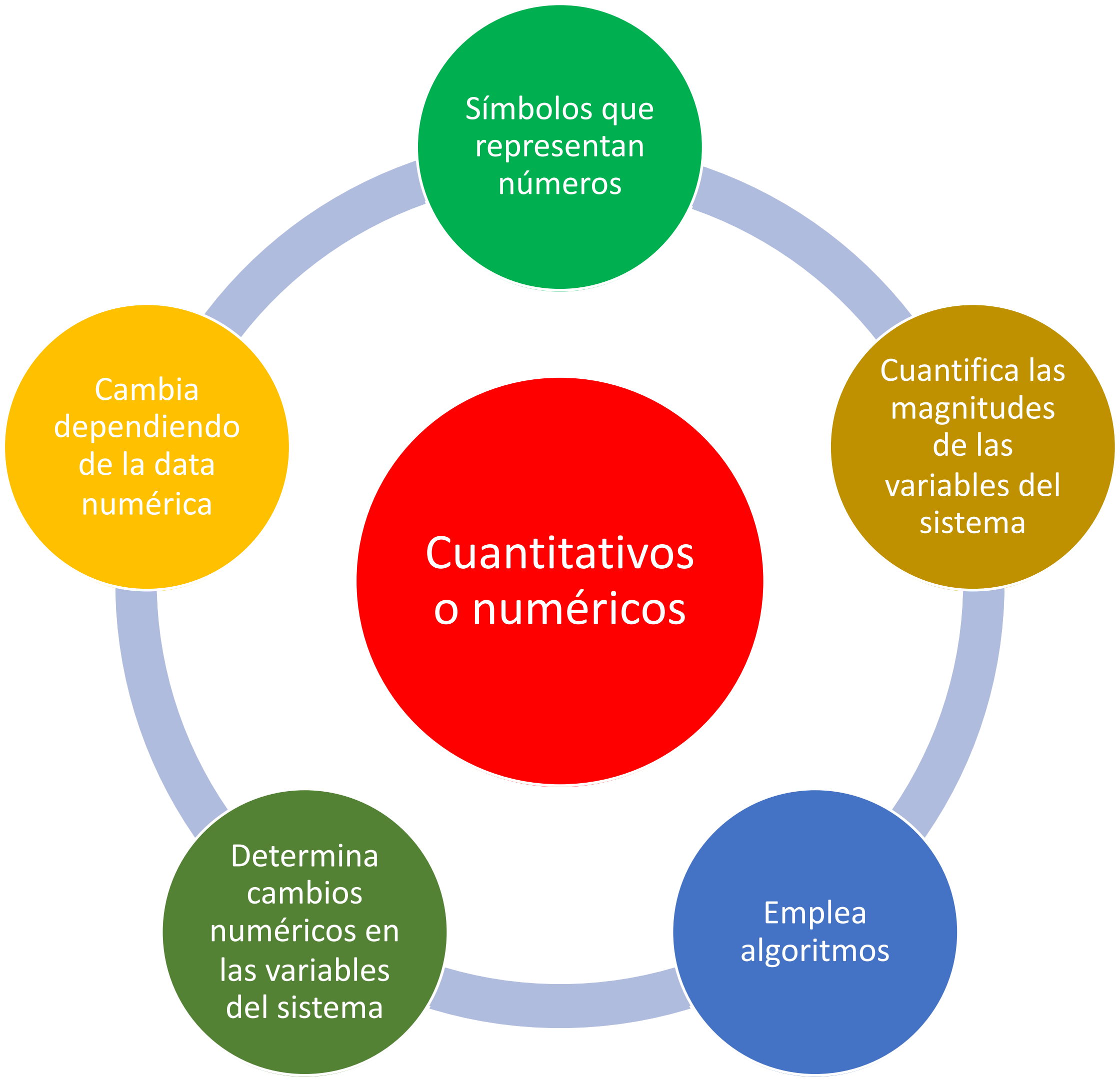
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias







1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias



RK4(a, b, N, α)

h $\leftarrow (b-a)/N$

$t_0 \leftarrow a$

$y_0 \leftarrow \alpha$

Para i desde 0 hasta N-1 hacer

$$t_i \leftarrow a + i * h$$

$$k_1 \leftarrow hf(t_i,\ y_i)$$

$$k_2 \leftarrow hf\left(t_i + \frac{1}{2}h,\ y_i + \frac{1}{2}k_1\right)$$

$$k_3 \leftarrow hf\left(t_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2\right)$$

$$k_4 \leftarrow hf(t_i + h,\ \ y_i + k_3\ )$$

$$y_{i+1} \leftarrow y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

Fin Para

Mostrar (t_0, y_0), (t_1, y_1), ... (t_N, y_N)

FIN

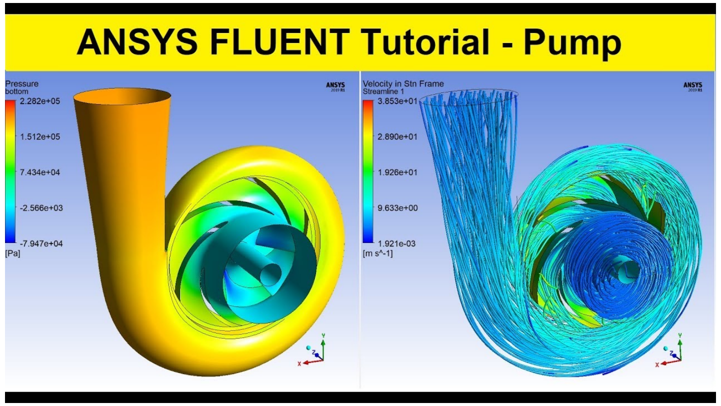
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

Dynamic Optimization

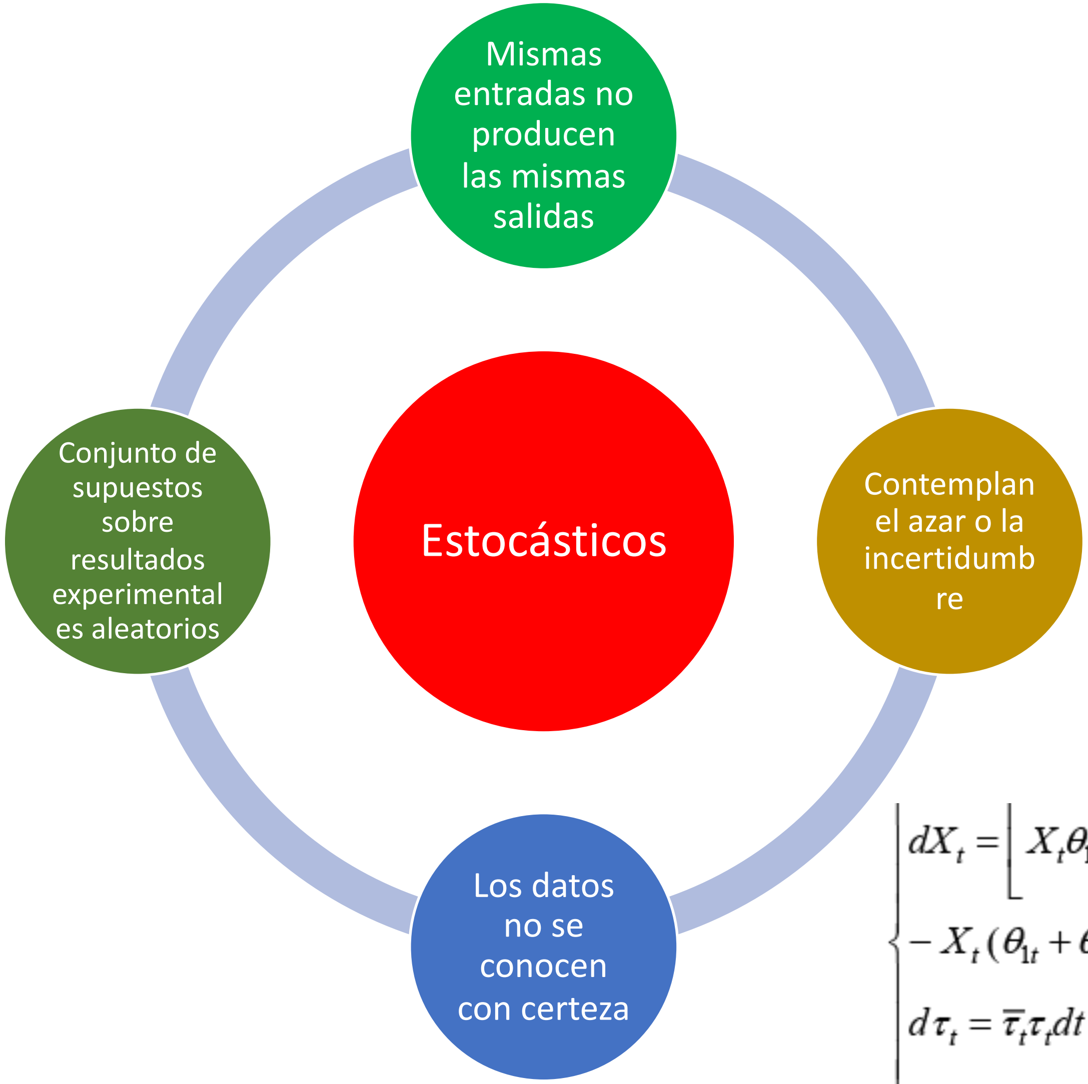
$\max_{u(t)} x_2(t_f)$	Objective Function
$subject\ to$	
$\frac{dx_1}{dt} = -(u + 0.5u^2)x_1$	Dynamic Equations
$\frac{dx_2}{dt} = u\, x_1$	
$x(0) = [1\ 0]^T$	Initial Conditions
$0 \le u \le 5$	Variable Constraints
$t_f = 1$	Final Time

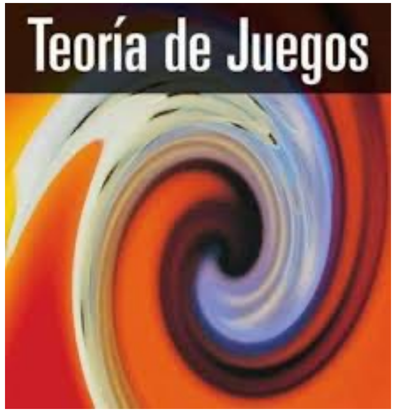
$$u\frac{\partial k}{\partial x}+v\frac{\partial k}{\partial y}=\left[P_k-(\varepsilon+D)\right]+\frac{\partial}{\partial y}\left[\left(\nu+\frac{\varepsilon_M}{Sc_k}\right)\frac{\partial k}{\partial y}\right]$$

$$u\frac{\partial \varepsilon}{\partial x}+v\frac{\partial \varepsilon}{\partial y}=\frac{\varepsilon}{k}\left[C_1 f_1 P_k - C_2 f_2 \varepsilon\right]+E+\frac{\partial}{\partial y}\left[\left(\nu+\frac{\varepsilon_M}{Sc_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial y}\right]$$



1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias





$$P = \sum_{t=0}^{n} \frac{p_t}{(1+r)^t}$$

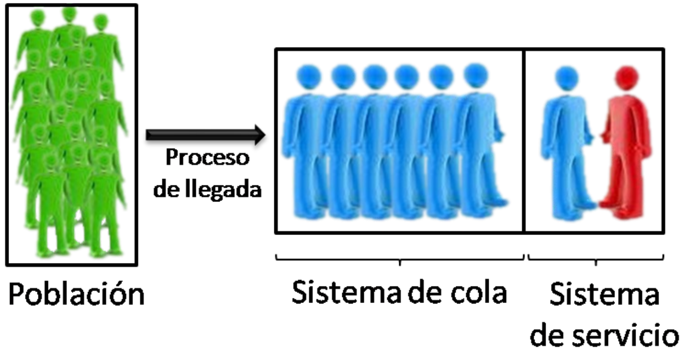
$$\begin{cases} dX_t = \left[X_t\theta_{1t}r_m + X_t\theta_{2t}r_b + X_t\theta_{3t}r_k + X_t\theta_{4t}r_V + X_t\left(1-\sum_{i=1}^{4}\theta_{it}\right)r_b^* - X_t\tau_t - (1+\tau_c)c_t \right]dt \\ -X_t(\theta_{1t}+\theta_{2t})\sigma_p dW_{P,t} + X_t\theta_{3t}\sigma_k \mathrm{d}W_{k,t} + X_t\theta_{4t}\sigma_V dW_{k,t} \quad x_0 = m_0 + b_0 + k_0 + V_0 + b_0^* > 0, \\ d\tau_t = \overline{\tau}_t\tau_t dt + \sigma_\tau\tau_t\left(\rho dW_{P,t} + \sqrt{1-\rho^2}dU_t\right), \quad \tau_0 > 0, \end{cases}$$

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

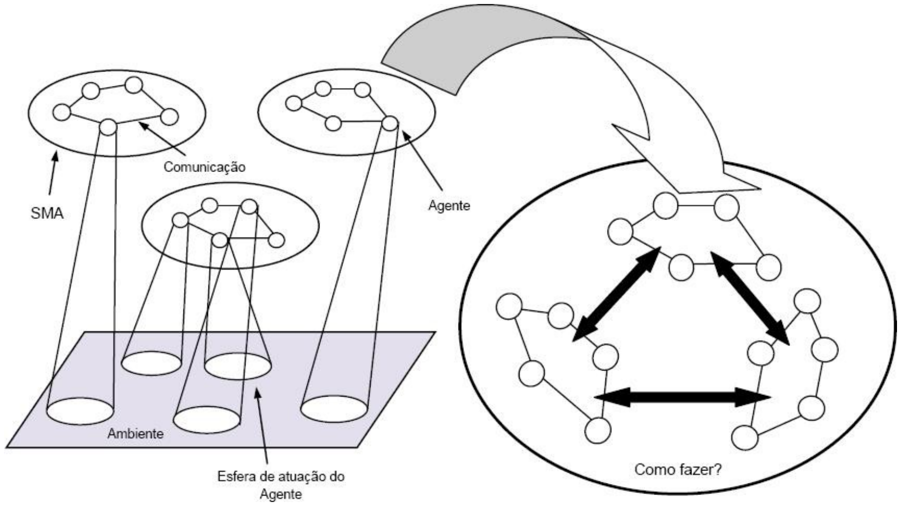
Simulación o descriptivo

- Estructuras matemáticas muy simples
- Predicen lo que sucede en una situación concrta
- La realidad se describe matemáticamente muy sencilla
- No proporciona robustez para escoger múltiples alternativas

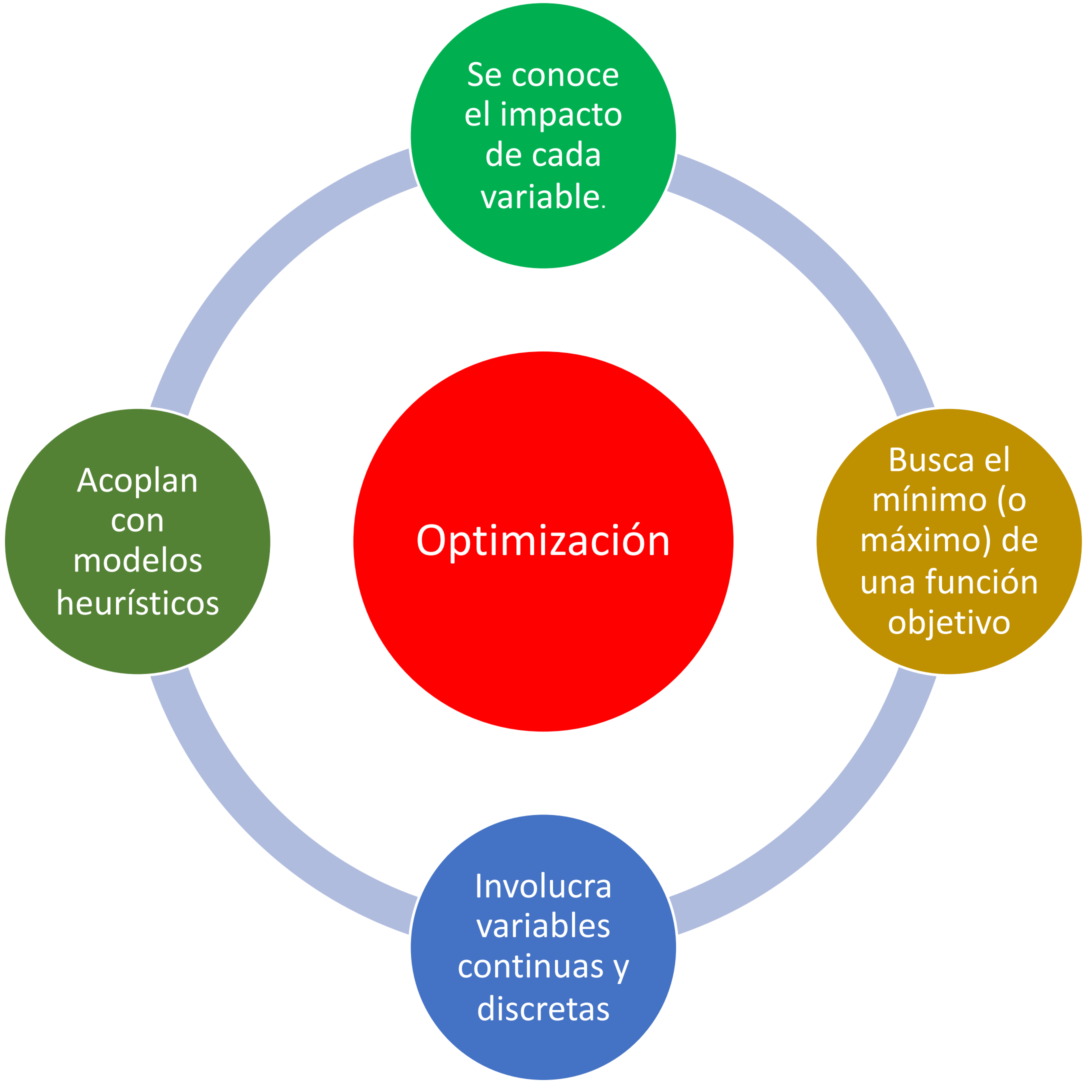
Sistema de cola

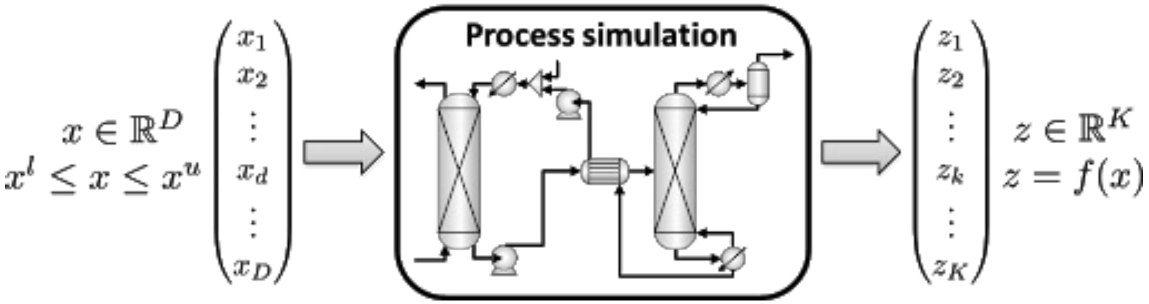


Multiagentes



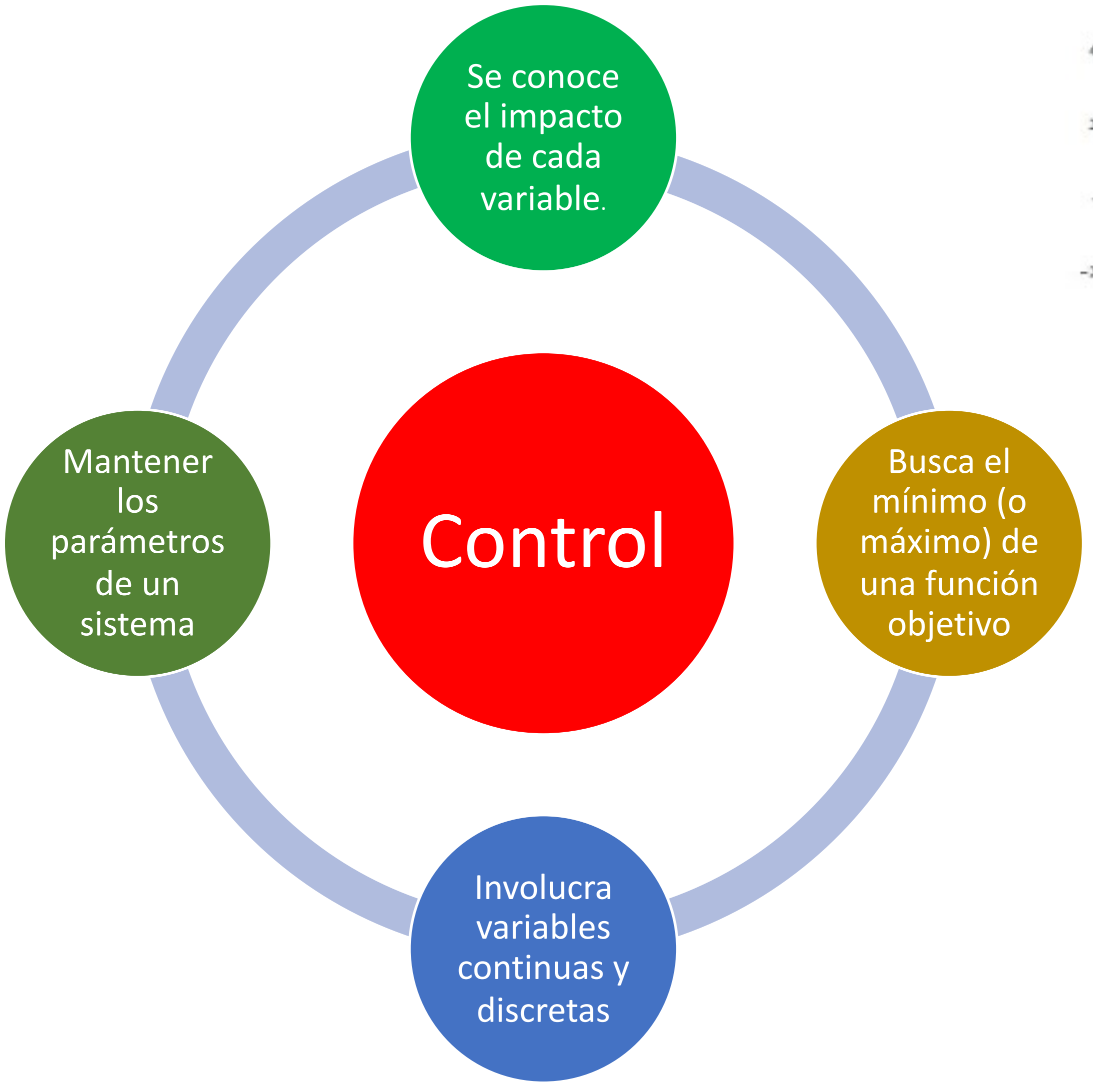
1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias

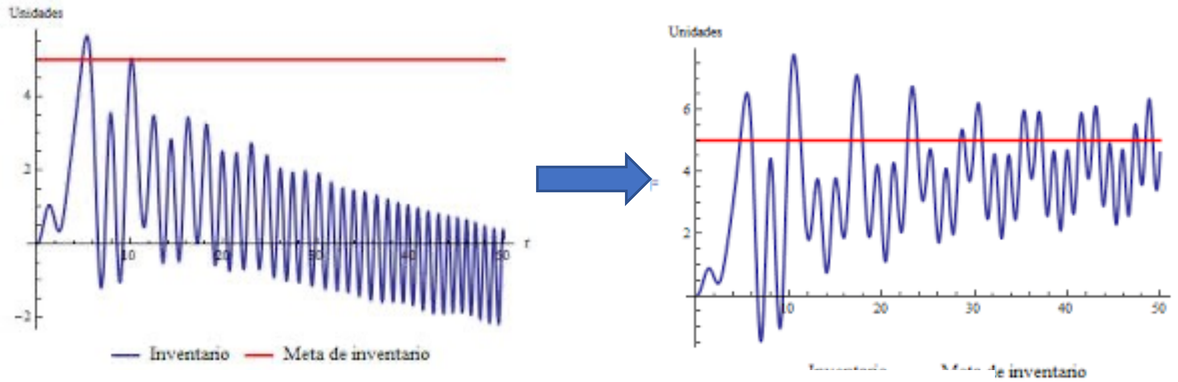




$$
\begin{cases}
\text{minimizar } f(x) \\
\text{sujeto a} \\
g_i(x) \leq 0 \qquad i = 1, \ldots, m \\
x \in S \subset \Re^n.
\end{cases}
$$

1.1.- Idea de un modelo matemático, tipos y sus usos en las ciencias





$$J = \int_0^{t_f} \left[AP^2 + B\exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right) + C\left(\frac{k_1}{10^{-pH}} + \frac{10^{-pH}}{k_2}\right)\right] dt, \tag{9a}$$

s.t.

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\mu_{max}\exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right)}{1 + \frac{k_1}{10^{-pH}} + \frac{10^{-pH}}{k_2}} \frac{S}{K_{sx} + S} X - k_d \exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right) X, \tag{9b}$$

$$\frac{dP}{dt} = q_{max}(1 - K_{ip}P)\frac{S}{K_{sp} + S} X + M_p X, \tag{9c}$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{-\mu_{max}\exp\left(-\frac{E_g}{RT}\right)}{1 + \frac{k_1}{10^{-pH}} + \frac{10^{-pH}}{k_2}} \frac{SX}{Y_x(K_{sx} + S)} - \frac{q_{max} S(1 - K_{ip}P)X}{Y_p(K_{sp} + S)} - X(G_s + M_s), \tag{9d}$$

$$T_{min} \le T(t) \le T_{max}, \tag{9e}$$

$$pH_{min} \le pH(t) \le pH_{max}, \tag{9f}$$