

Universidad Nacional De Colombia

Trabajo 1 - Hielos

Modelos no lineales

Autores:

Sofía Cuartas García Santiago Carvajal Torres

Entregado a:

Juan Carlos Correa Morales

Contents

Introducción	2
Marco Teórico.	2
Estudios previos	2
Bases teóricas y conceptuales	2
Objetivo	3
Experimento	3
Prueba piloto	3
Descripción del experimento	4
Análisis descriptivo	6
Resumen de los datos	6
Modelos	7
Modelo para 10 ML	8
Modelo de decrecimiento muy popular	8
Modelo logistico	9
Modelo bertalanffy	0
Elección del mejor modelo	1
Modelo para 20 ML	1
Modelo de decrecimiento muy popular	1
Modelo logistico	2
Modelo bertalanffy	2
Elección del mejor modelo	3
Modelo para 30 ML	3
Modelo de decrecimiento muy popular	3
Modelo logistico	5
Modelo bertalanffy	5
Elección del mejor modelo	6
Conclusiones 1	6

Introducción

La modelación de la tasa de descongelamiento de hielo es de suma importancia en el contexto actual de cambio climático y sus consecuencias globales. Los polos terrestres y las regiones glaciares están experimentando un aumento en la velocidad de descongelamiento debido al aumento de las temperaturas, lo que tiene un impacto directo en el nivel del mar y en los ecosistemas circundantes. La modelación de esta tasa de descongelamiento nos permite comprender mejor cómo el calentamiento global afecta a estas áreas y anticipar sus futuros efectos.

Además, esta modelación es esencial para la toma de decisiones políticas y estratégicas a nivel internacional. Los países costeros necesitan planificar la adaptación a los cambios en el nivel del mar, mientras que los científicos utilizan estos modelos para prever cómo afectará el descongelamiento a la biodiversidad y los recursos naturales. En resumen, la modelación de la tasa de descongelamiento de hielo no solo es un indicador clave del cambio climático, sino que también proporciona información crucial para abordar los desafíos que plantea el derretimiento de los glaciares y las capas de hielo.

Marco Teórico.

Estudios previos

Numerosos estudios científicos han documentado este proceso y han arrojado resultados alarmantes en las últimas décadas. Por ejemplo, investigaciones realizadas por el Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC) indican que el derretimiento de los casquetes polares, como el de Groenlandia y la Antártida, ha contribuido significativamente al aumento del nivel del mar en todo el mundo. Se estima que el nivel del mar ha aumentado aproximadamente 3.3 milímetros por año en promedio desde la década de 1990, y se prevé que esta tasa aumente en el futuro.

Además, los estudios han revelado que el descongelamiento de glaciares en regiones montañosas también está ocurriendo a un ritmo acelerado. Estos glaciares proporcionan agua dulce vital para millones de personas que dependen de los ríos alimentados por ellos. El derretimiento de estos glaciares plantea preocupaciones sobre la disponibilidad de agua en el futuro, así como sobre los riesgos de deslizamientos de tierra y deslizamientos de hielo en las áreas circundantes. Los científicos están utilizando una variedad de herramientas, incluyendo imágenes satelitales y perforaciones en el hielo, para monitorear y comprender mejor estos cambios en los casquetes polares y glaciares, con la esperanza de tomar medidas adecuadas para abordar los desafíos que plantea el descongelamiento de estas importantes fuentes de agua dulce y la contribución al cambio climático.

Bases teóricas y conceptuales.

El paso del estado sólido al estado líquido del agua, conocido como fusión, es un proceso fundamental en la ciencia y tiene bases teóricas y conceptuales bien establecidas. Se presentan alguna de las bases teóricas y conceptuales claves de este proceso:

Teoría Cinética Molecular: La teoría cinética molecular sostiene que todas las sustancias están compuestas por partículas en constante movimiento. En el caso del agua, estas partículas son moléculas de H_2O . En el estado sólido, estas moléculas están organizadas en una estructura cristalina en la que las fuerzas intermoleculares mantienen a las moléculas en posiciones fijas y cercanas unas a otras.

Energía Interna: La energía interna de una sustancia se relaciona con la energía cinética y potencial de sus partículas. En el estado sólido, las moléculas tienen una energía interna relativamente baja, y sus movimientos son vibratorios alrededor de posiciones de equilibrio. A medida que se agrega energía al sistema, como calor, la energía interna de las moléculas aumenta.

Punto de Fusión: Cada sustancia tiene un punto de fusión característico, que es la temperatura a la que las fuerzas intermoleculares en el estado sólido se debilitan lo suficiente como para permitir la transición

al estado líquido. Para el agua, su punto de fusión a la presión normal es de 0 grados Celsius (32 grados Fahrenheit).

Energía de Fusión: Para que una sustancia pase del estado sólido al líquido, se debe suministrar una cantidad específica de energía llamada calor de fusión. En el caso del agua, se requiere una gran cantidad de calor para romper las fuerzas intermoleculares en la estructura cristalina y permitir que las moléculas se desplacen libremente en el estado líquido.

Cambios en la Estructura: Durante el proceso de fusión, las moléculas de agua en el estado sólido comienzan a moverse con mayor libertad a medida que se les suministra calor adicional. Esto conduce a una ruptura gradual de la estructura cristalina y a la formación de un líquido en el que las moléculas están más separadas y tienen mayor energía cinética.

En resumen, el proceso de fusión del agua se basa en principios de la teoría cinética molecular y se caracteriza por cambios en la energía interna, la estructura molecular y la adición de calor para superar las fuerzas intermoleculares en el estado sólido. Este proceso es fundamental tanto en la naturaleza como en diversas aplicaciones tecnológicas y científicas.

Objetivo

Ajustar un modelo de decrecimiento que tenga como covariable los minutos que este estuvo expuesto a temperatura ambiente y como variable respuesta el volumen de hielo derretido, además se espera que el modelo alcance un buen ajuste.

Experimento

Prueba piloto

Se decidió llevar a cabo una prueba piloto con el propósito de determinar el tiempo apropiado para tomar medidas en el experimento principal, que involucraba llenar recipientes con 10, 20 y 30 ml de agua, congelarlos y luego observar cuánto se derretía. La prueba piloto fue esencial por las siguientes razones:

Determinar el intervalo de tiempo adecuado: Antes de comenzar el experimento principal, necesitabamos establecer cuánto tiempo debía transcurrir antes de medir la muestra. Sacar las muestras demasiado pronto significaría que aún estarían en gran parte congeladas, lo que arrojaría resultados poco útiles. En contraste, retirarlas demasiado tarde podría resultar en que el hielo se derritiera por completo, lo que también sería inapropiado. La prueba piloto permitió encontrar un equilibrio en el tiempo de espera.

Evaluar la variabilidad: Realizando varias pruebas con diferentes cantidades de agua (10, 20 y 30 ml), pudimos determinar si la cantidad de agua tenía alguna influencia en el tiempo que tardaba en derretirse el hielo. Esta evaluación ayudó a anticipar si sería necesario ajustar las expectativas o el enfoque para las mediciones posteriores en el experimento principal.

Ajustar el procedimiento: La prueba piloto también brindó la oportunidad de realizar ajustes en el procedimiento experimental si fuera necesario. Por ejemplo, si se hubiera observado que todas las muestras se derretían de manera similar en un corto período de tiempo, podría haberse decidido usar recipientes más grandes o modificar la temperatura ambiente de congelación para obtener resultados más interesantes y significativos.

Con los resultados de la prueba piloto, pudimos identificar que había cierta variabilidad en los tiempos de inicio y finalización para cada muestra. Esto sugiere que factores como la temperatura ambiente o las diferencias en la cantidad de agua pueden influir en el proceso de derretimiento del hielo. Basándose en estos datos, decidimos que los tiempos adecuados para tomar las muestras eran en **20, 40 y 60 minutos**.

Table 1: Prueba piloto

Medida	Inicio	Final
10	12	60
10	15	65
20	16	70
20	14	74
30	15	82
30	15	80

El experimento se puede ver como un diseño de dos factores cada uno con tres niveles fijos y se decidió hacer cuatri replicas.

Descripción del experimento.

Para garantizar igualdad de condiciones en todas las tomas se utilizaron recipientes de plástico con tapa de una capacidad máxima de 40 ml, en ellos se almacenaron tres diferentes volúmenes de agua (10, 20 y 30 ml) dicha agua provenía la misma botella de agua potable, los volúmenes se midieron con una jeringa, luego se almacenaron en el congelador de un refrigerador estándar hasta que se formara completamente el hielo; con la ayuda de un temporizador se midieron tres diferentes tiempos (20, 40 y 60 minutos) en cuanto sonaba el temporizador se media (con la misma jeringa con que se llenaron los recipientes) el volumen de agua resultante y se registraba el dato; en la figura uno se muestra parte del proceso.









Figure 1: Evidencia fotográfica del experimento

Análisis descriptivo

Table 2: Primeros datos en la base de datos

Valor_inicial	Tiempo	Volumen_derretido
10	20	2.4
10	20	2.0
10	20	2.6
10	20	2.4
10	40	5.0
10	40	4.9

Resumen de los datos

Se puede observar que el valor inicial de agua en los recipientes tiene un impacto significativo en el tiempo de derretimiento del hielo. Los recipientes con menos agua tienden a tener un tiempo de derretimiento más corto, mientras que los recipientes con más agua tienen un tiempo de derretimiento más largo. Además, la variabilidad en las mediciones puede variar según la cantidad de agua presente, siendo más alta en los recipientes con 20 ml de agua como podemos ver en su desviación estándar.

Table 3: Resumen de los datos

Valor_inicial	Tiempo	Media	DesviacionEstandar
10	20	2.350	0.2516611
10	40	5.425	0.5560276
10	60	8.600	0.2828427
20	20	4.550	1.2897028
20	40	9.450	1.7233688
20	60	13.050	1.3304135
30	20	18.400	2.2449944
30	40	22.000	0.8164966
30	60	26.250	0.9574271

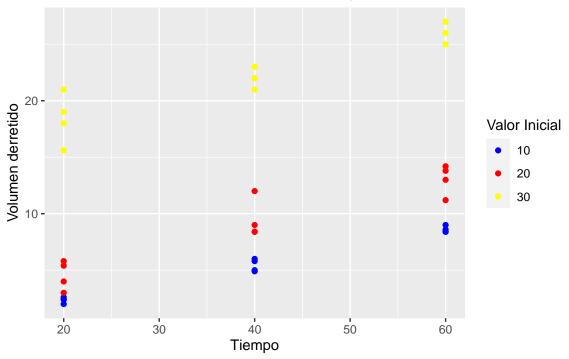
Más medidas de resumen numericas se muestran a continuación

```
## Valor_inicial: 10
   Volumen_derretido
##
           :2.000
##
   1st Qu.:2.550
##
   Median :5.400
##
   Mean
           :5.458
   3rd Qu.:8.400
##
   Max.
           :9.000
## Valor_inicial: 20
   Volumen_derretido
          : 3.000
##
   Min.
   1st Qu.: 5.700
##
  Median : 8.700
   Mean
          : 9.017
```

```
##
    3rd Qu.:12.250
            :14.200
##
    Max.
##
##
  Valor_inicial: 30
##
    Volumen_derretido
    Min.
           :15.60
##
    1st Qu.:20.50
##
##
    Median :22.00
##
    Mean
            :22.22
##
    3rd Qu.:25.25
    Max.
            :27.00
```

Esto graficamente es:

Volumen Derretido en Función del Tiempo



Modelos

En el gráfico de los datos, las diferentes medidas para las cuales fueron tomados los datos, tienen un comportamiento diferente, por lo se decidió ajustar modelos diferentes para los recipientes con 10, 20 y 30 ml. Además de esto utilizamos dos modelos diferentes, como Bertalanffy y Gompertz, dado que en término de sus ecuaciones son más diferentes.

```
modelo_logistico <- nls(Volumen_derretido~SSlogis(Tiempo,Asym,b2,b3),data = datos_10ml)</pre>
```

```
## Error in iniFn(mCall = mCall, data = data, LHS = LHS, ...): too few distinct input values to fit a l
```

Dado que la función **nls** ni **Optim** no converge por la cantidad de datos, se decidió ajustar los modelos con la librería **GENSA** dado que usualmente tiene mejor estabilidad que las otras funciones mencionadas anteriormente.

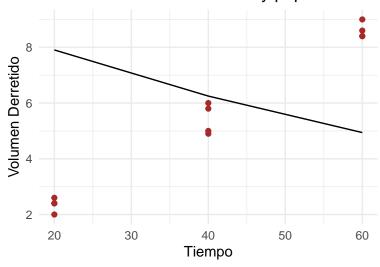
Modelo para 10 ML

Modelo de decrecimiento muy popular

$$Y(t) = Y(0) \times e^{-\beta_0 t}$$

```
# Definir la función de ajuste
modelo <- function(Valor_inicial, Tiempo, b0) {</pre>
  Valor_inicial*exp(-b0*Tiempo)
# Definir la función objetivo para la optimización
objetivo <- function(params) {</pre>
  b0 <- params[1]
  predicciones <- modelo(datos_10ml$Valor_inicial, datos_10ml$Tiempo, b0)</pre>
  error <- sum((datos_10ml$Volumen_derretido - predicciones)^2)</pre>
  return(error)
}
# Definir límites para los parámetros
limites <- matrix(c(-100,  # limite inferior para b0 y b1
                    100), # limite superior para b0 y b1
                  ncol = 2,
                  byrow = TRUE)
# Ejecutar la optimización con GENSA
resultado_optimizacion_10ml <- GenSA(fn = objetivo,
                                 lower = limites[,1],
                                 upper = limites[,2])
# Obtener los valores óptimos de los parámetros
valores_optimos_10ml <- resultado_optimizacion_10ml$par</pre>
```

Modelo de decrecimiento muy popular

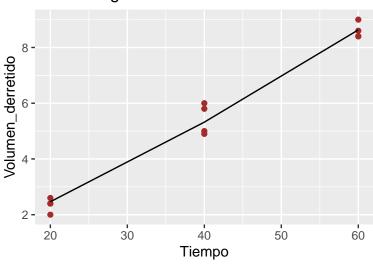


Modelo logistico

```
# Definir la función de ajuste
modelo <- function(Tiempo, b0, b1) {</pre>
  b0 / ((1 - exp(b1 * Tiempo))^(-1))
# Definir la función objetivo para la optimización
objetivo <- function(params) {</pre>
  b0 <- params[1]
  b1 <- params[2]
  predicciones <- modelo(datos_10ml$Tiempo, b0, b1)</pre>
  error <- sum((datos_10ml$Volumen_derretido - predicciones)^2)</pre>
  return(error)
}
# Definir límites para los parámetros
limites \leftarrow matrix(c(-100, -100,
                                    # límite inferior para b0 y b1
                     100, 100), # limite superior para b0 y b1
                   ncol = 2,
                   byrow = TRUE)
# Ejecutar la optimización con GENSA
resultado_optimizacion_logistico_10ml <- GenSA(fn = objetivo,</pre>
                                  lower = limites[1, ],
                                 upper = limites[2, ])
# Obtener los valores óptimos de los parámetros
valores_optimos_logistico_10ml <- resultado_optimizacion_logistico_10ml$par
valores_optimos_logistico_10ml
```

[1] -15.509816009 0.007374075

Modelo logístico

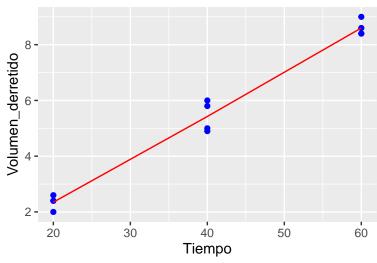


Modelo bertalanffy

$$Y_i = \beta_0 (1 - \beta_1 e^{-\beta_2 * t_i})^3$$

```
# Definir la función de ajuste
modelo <- function(Tiempo, b0, b1, b2) {</pre>
  b0 * ((1 - b1 * exp(-b2 * Tiempo))^3)
}
# Definir la función objetivo para la optimización
objetivo <- function(params) {</pre>
  b0 <- params[1]
  b1 <- params[2]
  b2 <- params[3]
  predicciones <- modelo(datos_10ml$Tiempo, b0, b1,b2)</pre>
  error <- sum((datos_10ml$Volumen_derretido - predicciones)^2)</pre>
  return(error)
}
# Definir límites para los parámetros
limites \leftarrow matrix(c(-100,-100, -100,
                                         # límite inferior para b0 y b1
                    100, 100, 100), # limite superior para b0 y b1
                  ncol = 3,
                  byrow = TRUE)
# Ejecutar la optimización con GENSA
resultado_optimizacion_bertalanffy_10ml <- GenSA(fn = objetivo,
                                 lower = limites[1, ],
                                 upper = limites[2, ])
# Obtener los valores óptimos de los parámetros
valores_optimos_bertalanffy_10ml <- resultado_optimizacion_bertalanffy_10ml$par
```

Modelo bertalanffy



Elección del mejor modelo

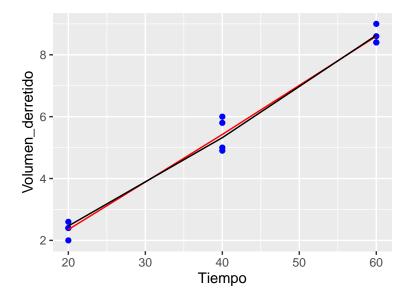


Table 4: MSE muestras de 10 ML

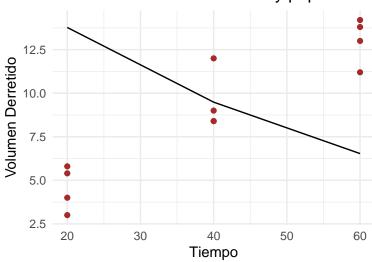
bertalanffy	gompertz
1.3575	1.457262

Modelo para 20 ML

Modelo de decrecimiento muy popular

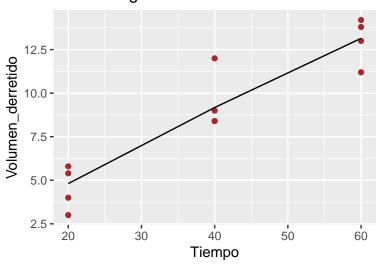
$$Y(t) = Y(0) \times e^{-\beta_0 t}$$

Modelo de decrecimiento muy popular



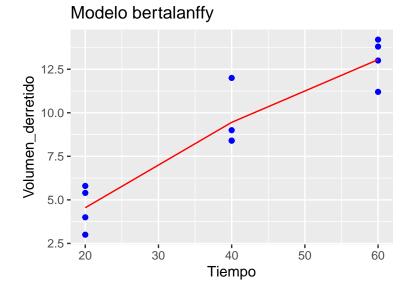
Modelo logistico

Modelo logístico



Modelo bertalanffy

$$Y_i = \beta_0 (1 - \beta_1 e^{-\beta_2 * t_i})^3$$



Elección del mejor modelo

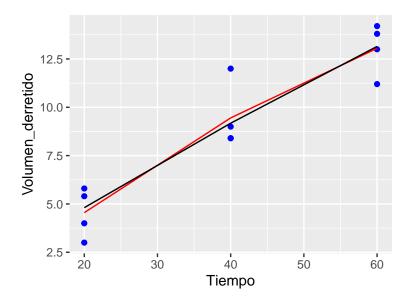


Table 5: MSE muestras de 20 ML

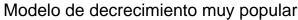
bertalanffy	Logistico
19.21	19.81207

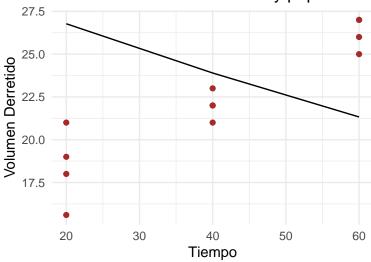
Modelo para 30 ML

Modelo de decrecimiento muy popular

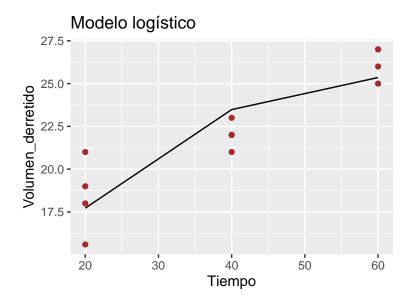
$$Y(t) = Y(0) \times e^{-\beta_0 t}$$

```
# Definir la función de ajuste
modelo <- function(Valor_inicial, Tiempo, b0) {</pre>
  Valor_inicial*exp(-b0*Tiempo)
}
# Definir la función objetivo para la optimización
objetivo <- function(params) {</pre>
  b0 <- params[1]
  predicciones <- modelo(datos_30ml$Valor_inicial, datos_30ml$Tiempo, b0)</pre>
  error <- sum((datos_30ml$Volumen_derretido - predicciones)^2)</pre>
  return(error)
}
# Definir límites para los parámetros
limites <- matrix(c(-100,</pre>
                              # limite inferior para b0 y b1
                     100), # limite superior para b0 y b1
                   ncol = 2,
                   byrow = TRUE)
# Ejecutar la optimización con GENSA
resultado_optimizacion_30ml <- GenSA(fn = objetivo,
                                 lower = limites[,1],
                                 upper = limites[,2])
# Obtener los valores óptimos de los parámetros
valores_optimos_30ml <- resultado_optimizacion_30ml$par</pre>
```



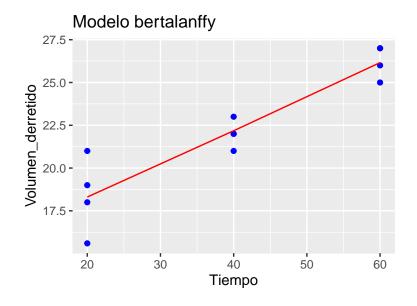


Modelo logistico



Modelo bertalanffy

$$Y_i = \beta_0 (1 - \beta_1 e^{-\beta_2 * t_i})^3$$



Elección del mejor modelo

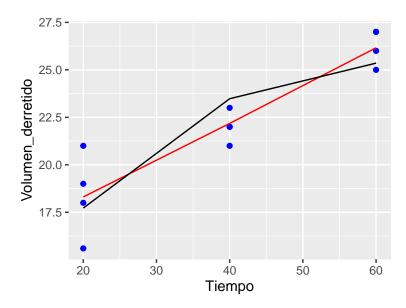


Table 6: MSE muestras de 30 ML

bertalanffy	Logistico
20.06485	33.70446

Conclusiones

Gráficamente se ve que el modelo que se nombró como modelo de decrecimiento muy popular tiene un ajuste muy deficiente pues no captura la tendencia de los datos, los modelos Bertalanffy y Gompertz gráficamente parecer capturar bien la tendencia con un desemeño similar, cuando se pasa a comparar la medida de ajuste **MSE** el modelo Bertalanffy alcanza un menor valor, por lo que se prefiere este modelo.

El modelo de crecimiento de Bertalanffy podría ser considerado como un primer paso hacia la creación de un modelo que pueda anticipar el proceso de fusión de los casquetes polares. Esto se debe a que se evidenció que tanto el tamaño del hielo como el tiempo de exposición tienen un impacto en el volumen de hielo derretido. Sin embargo, es fundamental resaltar que predecir el derretimiento de los casquetes polares es un desafío complejo debido a la amplia gama de factores externos que afectan este fenómeno y no se tuvieron en cuenta en este experimento. Por lo tanto, se necesita llevar a cabo una investigación más minuciosa y meticulosa, empleando una metodología bien establecida, para abordar completamente esta cuestión.