

Metodología de la Modelación Matemática, Numérica y Computacional

Martín A. Díaz-Viera

Instituto Mexicano del Petróleo
mdiazv@imp.mx

Posgrado del Instituto Mexicano del Petróleo

13 de marzo de 2023

Contenido I

- 1 Introducción
 - Motivación
 - Antecedentes
 - Metodología
 - Objetivo
- 2 Metodología de la modelación
 - Procedimiento general
 - Diagrama del proceso de modelación
 - Etapas de la modelación
- 3 Etapas de la modelación
 - Modelo Conceptual
 - Modelo Matemático
 - Modelo Numérico
 - Modelo Computacional

Contenido II

4 Validación and Aplicación

- Validación
- Aplicación
- Ejemplo
- Referencias

Introducción

- Las presentaciones de este curso se basan en algunos apuntes desarrollados entre 2016 y 2018 [4].
- También incluye varias tesis de maestría, dos ya concluidas [8, 6] y otra aún en proceso [9].
- El objetivo es ofrecer una introducción simple y sistemática a estudiantes de grado y posgrado interesados en el modelado de medios porosos.
- Desde un punto de vista metodológico, se hace especial hincapié en los aspectos matemáticos, numéricos y computacionales de la modelización.

Antecedentes

- Para la toma de decisiones en múltiples problemas que ocurren en las ciencias y en la ingeniería, se requiere de herramientas que permitan pronosticar la respuesta de un sistema dado bajo ciertas condiciones.
- Este pronóstico usualmente toma la forma de distribuciones de variables en tiempo y espacio que describen el estado futuro del sistema analizado.
- Estas variables pueden referirse a la presión, esfuerzo, densidad, velocidad, concentración, temperatura, etc., para cada fase y en algunos casos incluso para cada componente dentro de cada fase en el sistema.

Antecedentes

- La herramienta que permite realizar estas predicciones es el *modelo*.
- Un modelo puede ser definido como una versión simplificada de un sistema real que imita o simula su comportamiento con una cierta aproximación.
- Los sistemas naturales, como los de ciencias de la tierra, son altamente complejos en lo que respecta a su estructura y a los procesos físicos, químicos y biológicos que involucran.
- Con el fin de investigar el comportamiento de estos sistemas, es necesario desarrollar modelos para comprender estos procesos y su interacción a las distintas escalas de espacio y tiempo.

Antecedentes

- Debido a la complejidad geométrica y al gran número de procesos involucrados en sistemas reales, es imposible describirlos con toda exactitud.
- La estructura de un sistema y los procesos que ocurren dentro de éste son por consiguiente representados por modelos conceptuales abstractos, diseñados para cumplir los requisitos de cierto tipo de problemas para una determinada escala de espacio y tiempo.
- Esto implica por ejemplo, la introducción de parámetros que representan las propiedades de los materiales y descripciones de los procesos relevantes.

Metodología

- Los modelos conceptuales al ser expresados en el lenguaje de las matemáticas resultan en modelos matemáticos que requieren ser resueltos.
- Sin embargo, debido al grado de complejidad que regularmente tienen estos problemas, las soluciones analíticas no siempre son una opción viable.
- Debido a ésto, se recurre a soluciones numéricas, que consisten en la discretización en espacio y tiempo de los problemas, permitiendo su implementación computacional mediante algoritmos eficientes y estables que aprovechen al máximo el poder de cómputo disponible.
- Los modelos computacionales son validados y luego aplicados a casos de estudio.

Objetivo

- El procedimiento de modelación antes descrito usualmente se realiza de una manera intuitiva y no consciente por la mayoría de los investigadores.
- A continuación se describirá una metodología sistemática de la modelación matemática, numérica y computacional que puede ser de gran utilidad tanto para los que son expertos como para los jóvenes que se inician en esta disciplina.

Procedimiento general

- El procedimiento general para predecir el comportamiento de un sistema es el *modelado*.
- En este proceso se construyen modelos que describen su comportamiento.
- El modelo de un sistema es un sustituto cuyo comportamiento imita al del sistema.
- Generalmente se tienen dos tipos de modelos: los construidos físicamente y los matemáticos.

Procedimiento general

- Los más utilizados a la fecha son los modelos matemáticos, ya que son los más versátiles y de menor costo.
- Formalmente el proceso de desarrollo de un modelo requiere de cuatro etapas: la modelación conceptual, matemática, numérica y computacional (ver Figura 1).
- Aunque cada vez es menos frecuente debido a la complejidad de los modelos de fenómenos reales, la solución analítica es posible en casos simples o en casos límites.
- Estas soluciones pueden ser empleadas para validar los modelos computacionales.

Diagrama del proceso de modelación



Figura 1: Diagrama del proceso de modelación.

Etapas de la modelación

El procedimiento general incluye las siguientes etapas:

- **Modelo conceptual:** Las hipótesis, postulados y condiciones a ser satisfechas por el modelo.
- **Modelo matemático:** La formulación matemática del modelo conceptual en términos de ecuaciones.
- **Modelo Numérico:** La discretización del modelo matemático mediante la aplicación de los métodos numéricos adecuados.
- **Modelo computacional:** La implementación del modelo numérico en una plataforma computacional.
- **Validación:** Comparaciones de los resultados con soluciones analíticas y/o publicadas.
- **Aplicación:** El modelo se aplica a casos de estudio.

Modelo Conceptual

- Primer paso en el proceso de modelado y probablemente el más importante.
- Una abstracción del sistema real.
- Una versión subjetiva y simplificada del sistema real.
- Basado en observaciones del sistema, resultados experimentales y análisis de modelos desarrollados previamente.
- Una descripción verbal de la composición del sistema, el fenómeno físico que ocurre y los mecanismos que lo gobiernan.
- Incluye todas las hipótesis, supuestos, condiciones, alcances y limitaciones.

Modelo Matemático

- La representación del modelo conceptual en forma de relaciones matemáticas.
- Diferentes enfoques: determinista o probabilístico.
- Un enfoque sistemático del modelado matemático de los sistemas continuos basado en las leyes del balance de masa, cantidad de movimiento y energía.
- Un sistema de PDEs con condiciones iniciales y de frontera.
- Un modelo estadístico/estocástico.

Modelo Numérico

- Una versión discreta de los modelos matemáticos
- Una solución aproximada pero consistente del modelo matemático.
- Una discretización en espacio y tiempo de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales.
- Métodos de diferencias finitas, elementos finitos y volúmenes finitos.

Modelo Computacional

- Una traducción del modelo numérico a un lenguaje de programación (C/C++, Fortran, Python).
- Implementado en una plataforma computacional específica (COMSOL Multiphysics[3], FEniCS[7], DuMu^X[5]).
- Permite múltiples resultados (simulaciones) dependiendo de los parámetros de entrada.

Validación

- Se confirma que los resultados numéricos son una buena aproximación del fenómeno en cuestión.
- Comparando con soluciones semi-analíticas
- Comparación con resultados publicados o resultados de pruebas de laboratorio.

Aplicación

- El modelo se aplica a casos de estudio del fenómeno específico de interés.
- El resultado del caso de estudio es la predicción del comportamiento del sistema bajo las condiciones supuestas.
- Tomar en cuenta las suposiciones, los conceptos utilizados y el grado de aproximación de la solución para interpretar correctamente los resultados.

Ejemplo

- Transporte de una componente (trazador) en una fase fluida en un medio poroso.
- Ver presentación Noyola2017_MsThesis_presentacion.pdf [8].

Referencias

- [1] M. B. Allen, I. Herrera and G. F. Pinder, *Numerical modeling in science and engineering*, John Wiley & Sons., USA, (1988).
- [2] I. Herrera and G. F. Pinder, *Mathematical Modeling in Science and engineering: An Axiomatic Approach*, John Wiley & Sons., USA, (2012).
- [3] COMSOL Multiphysics, *Modeling Guide Version 3.4*, COMSOL AB, USA, (2007).
- [4] M. A. Díaz-Viera and A. Ortiz-Tapia, *Modelación Matemática, Numérica y Computacional de Flujo y Transporte en Medios Porosos*, Notas del curso, CDMX, México (2018).
- [5] B. Flemisch, M. Darcis, K. Erbertseder, B. Faigle, A. Lauser, K. Mosthaf, S. Muthing, P. Nuske, A. Tatomir, M. Wolff, R. Helmig, "DuMu^X: Dune for multi-{phase, component, scale, physics,...} flow and transport in porous media", *Advances in Water Resources*, **34** (9), 1102 - 1112, (2011).
- [6] E. Linares and M. A. Díaz-Viera, *Modelo de flujo y transporte en medios porosos en FEniCS usando el método de elementos finitos mixtos. Aplicación a un caso de estudio para la simulación de un proceso de inyección de agua de baja salinidad a escala de laboratorio.*, Universidad Nacional Autónoma de México, México, (2018).
- [7] A. Logg, K. A. Mardal and G. Wells, *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method. The FEniCS Book*, Springer-Verlag, Berlin, (2012).
- [8] M. Noyola-Rodríguez and M. A. Díaz-Viera, *Modelo de transporte en medios porosos a escala de laboratorio para la simulación del proceso de taponamiento de taponamiento por microorganismos.*, Universidad Nacional Autónoma de México, México, (2017).
- [9] C. A. Romano-Pérez and M. A. Díaz-Viera, *Modelos de fractura discreta para la simulación de flujo y transporte en medios porosos fracturados.*, Universidad Nacional Autónoma de México, México, (2018).

Gracias!!!

Preguntas / Comentarios