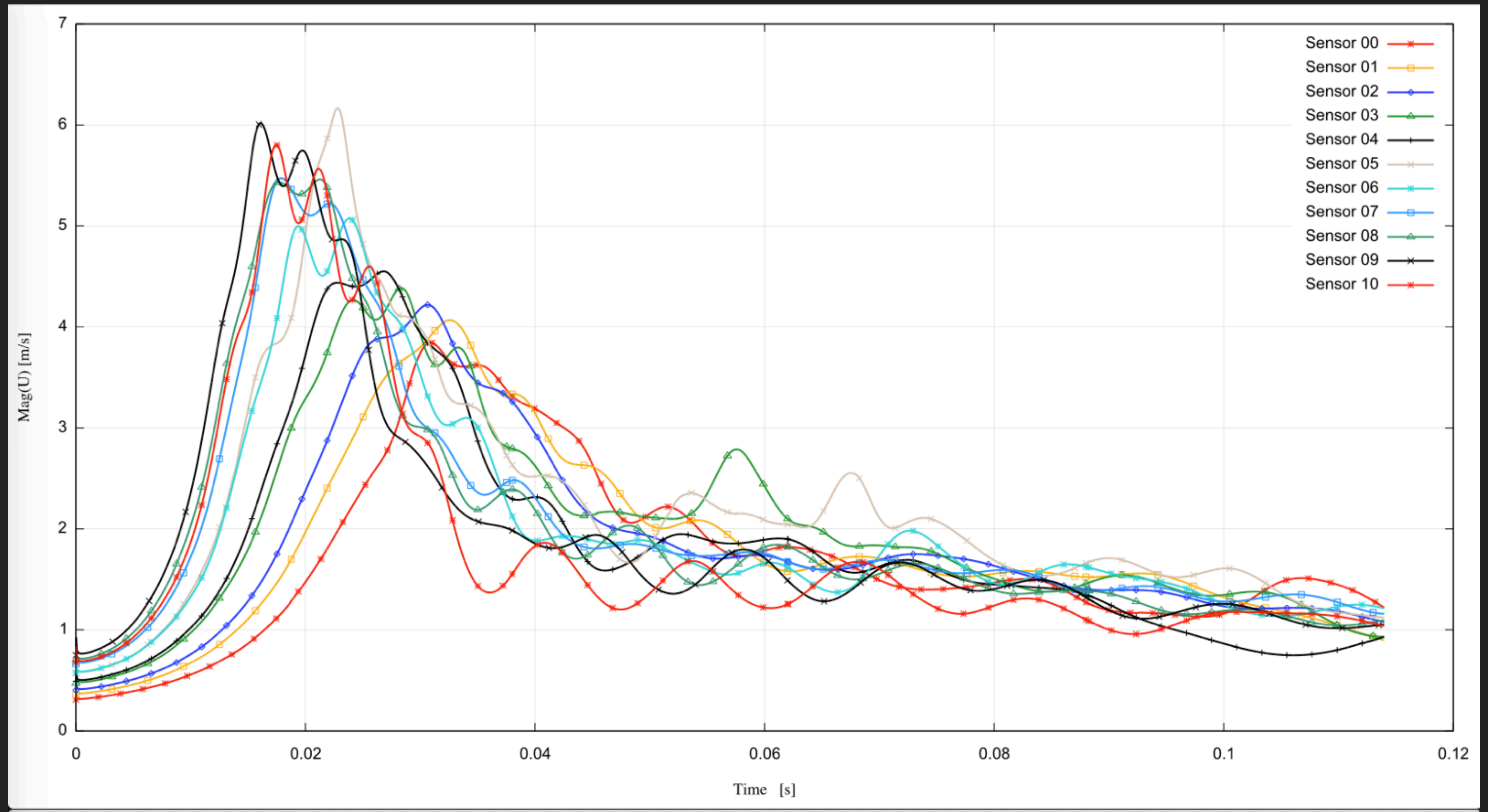


SESIÓN VIRTUAL - 2020.S02

MODELACIÓN MATEMÁTICA

Universidad Nacional de Colombia - Dr. Carlos Duque-Daza - 2020

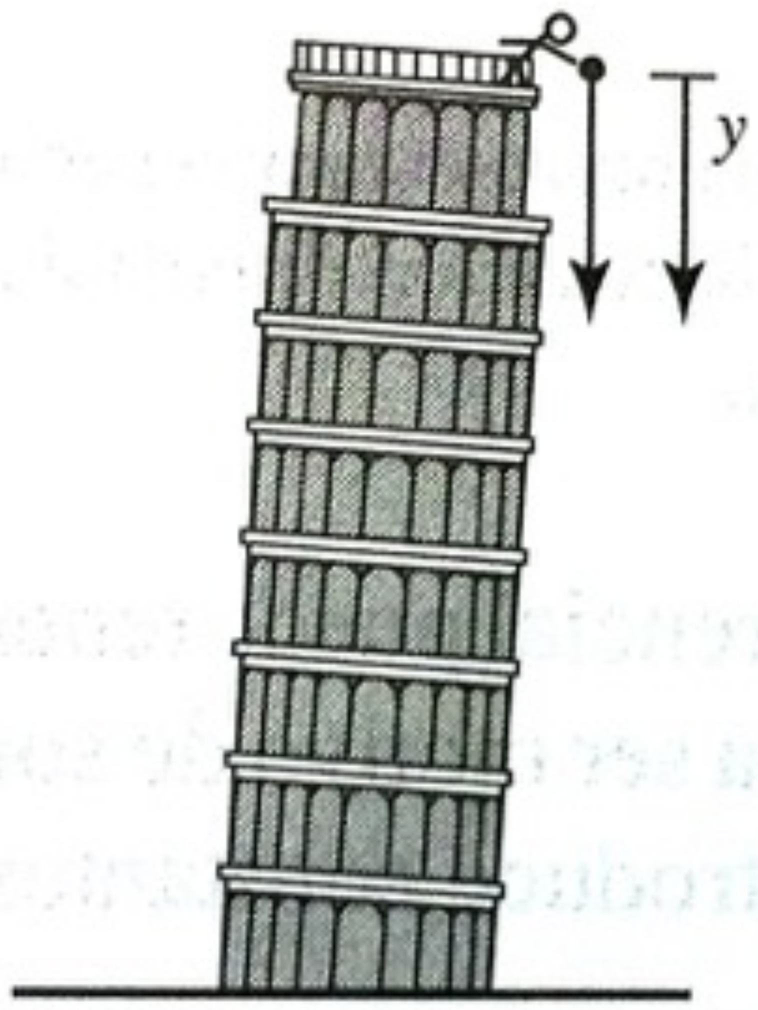
UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Modelación Basada en Ecuaciones Diferenciales Ordinarias

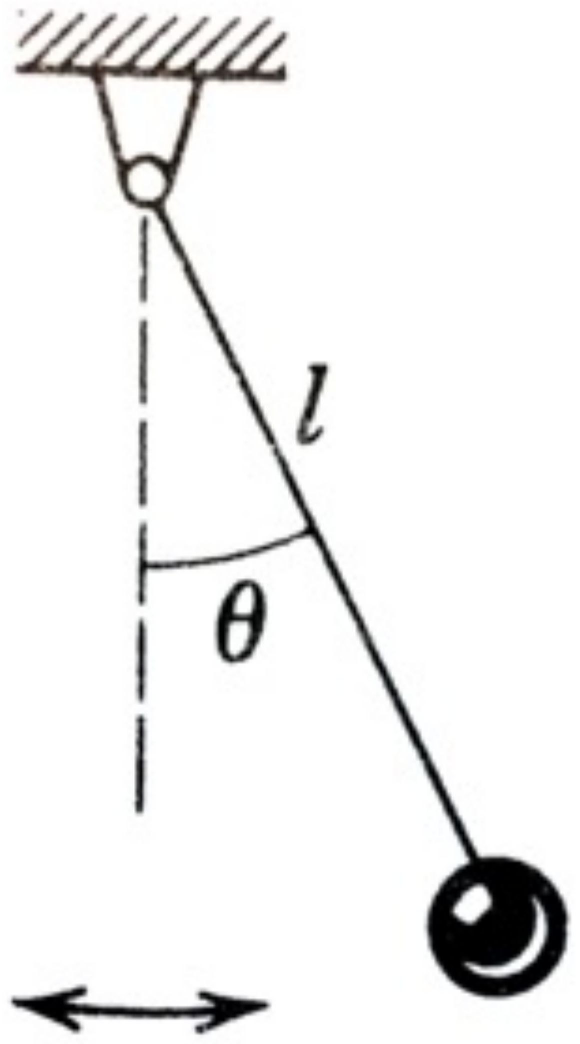
Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ingeniería
MODELACIÓN MATEMÁTICA

MODELOS COMUNES Y GENERALIZADOS

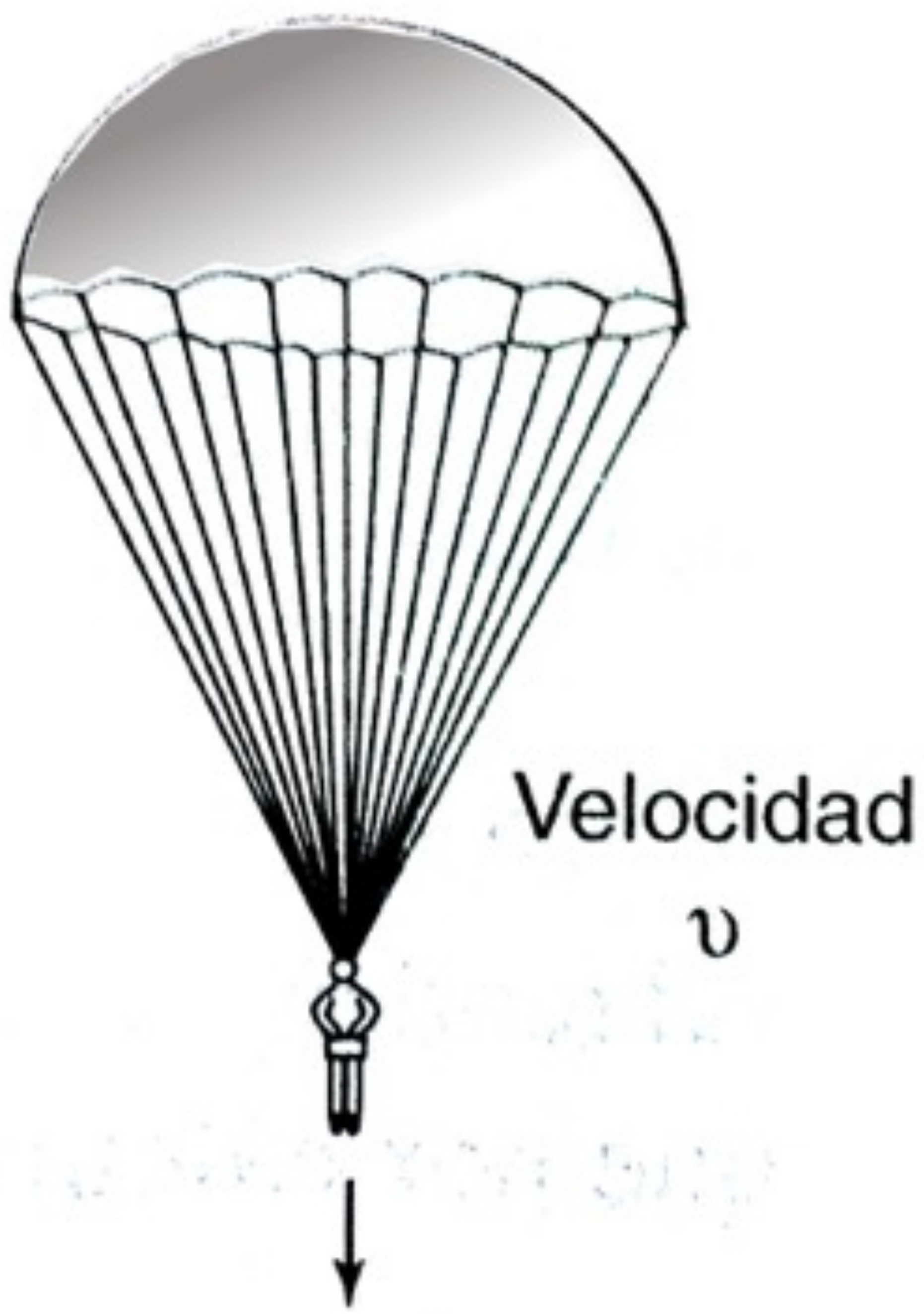
Reconoce alguna de estas situaciones?



Piedra en caída libre
$y'' = g = constante$



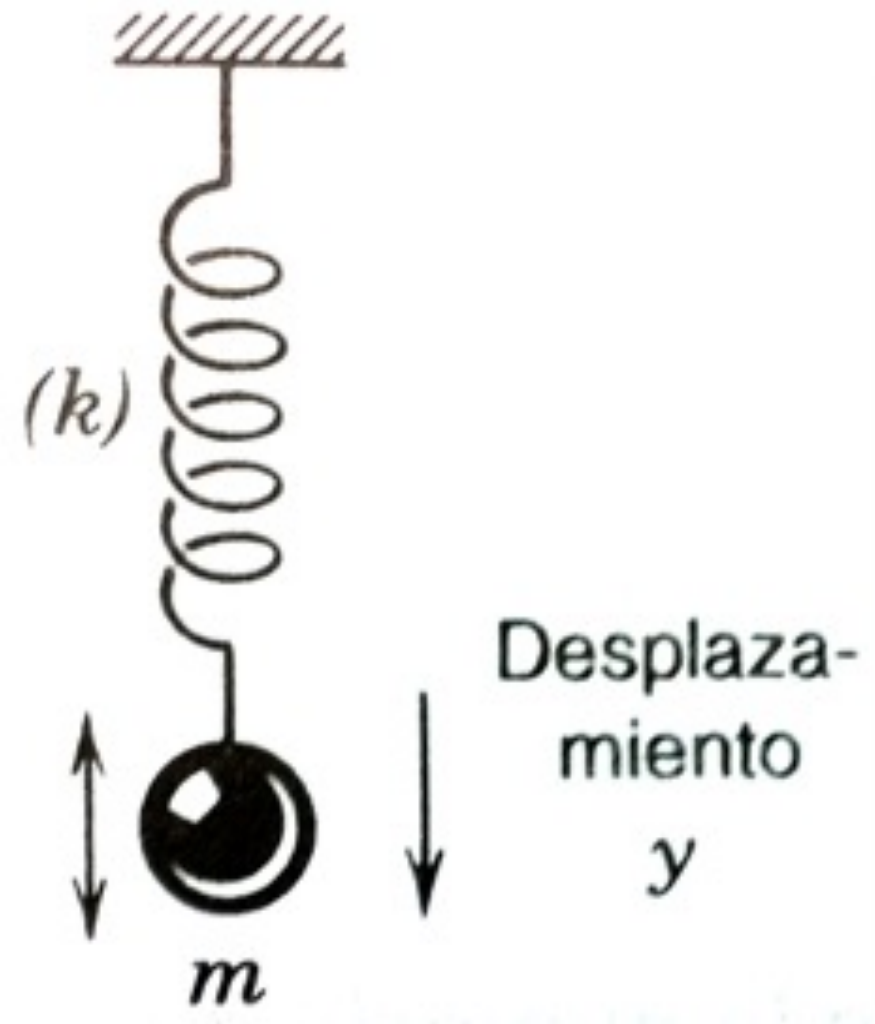
Péndulo
$l\theta'' + g \sin\theta = 0$



paracaidista
$m\upsilon' = mg - b\upsilon^2$

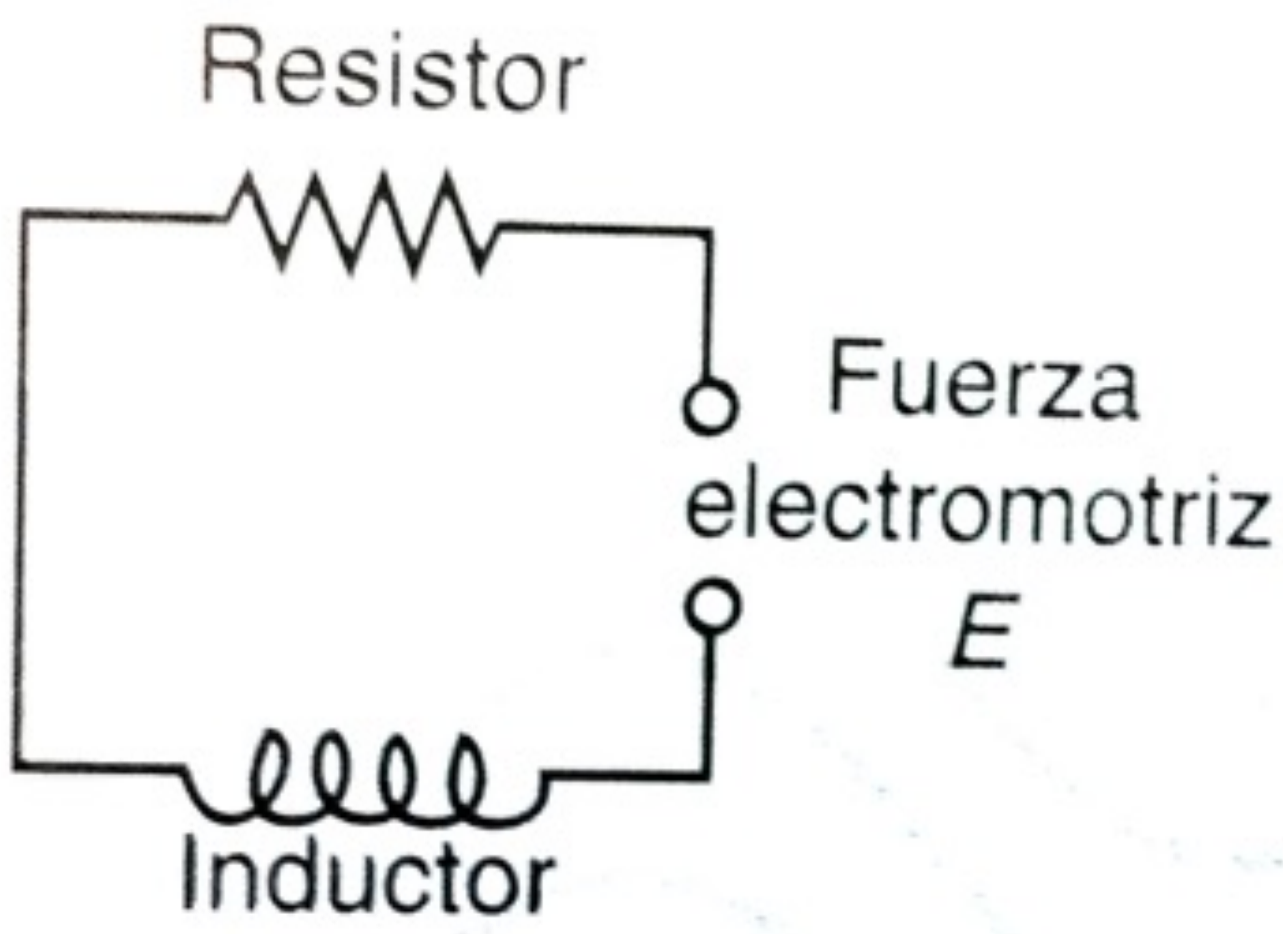
MODELOS COMUNES Y GENERALIZADOS

Algunas no tan comunes (para algunos…)



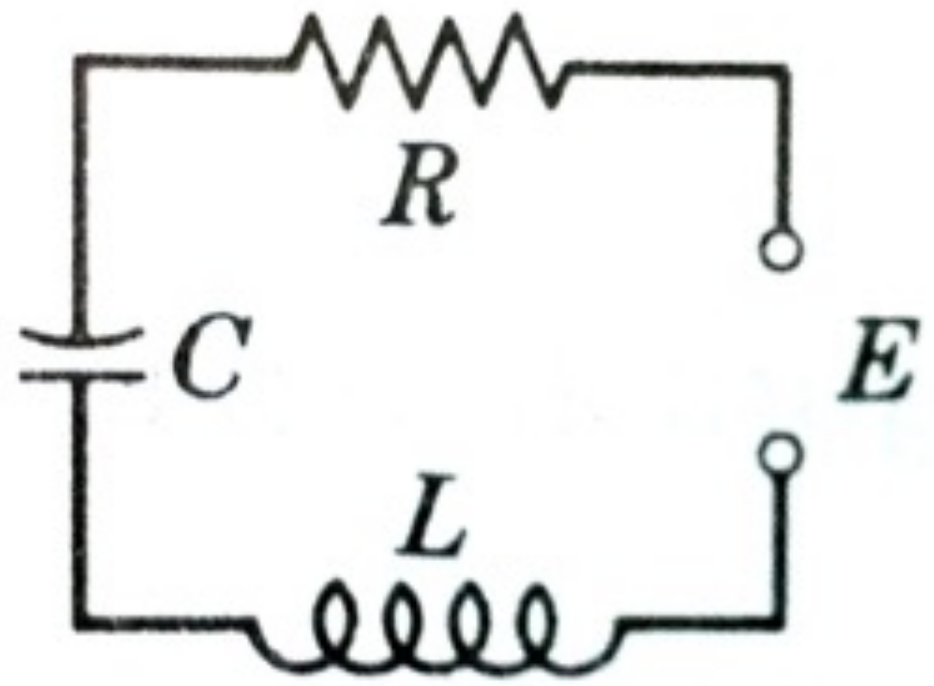
Masa oscilatoria en un resorte

$my'' + ky = 0$



Corriente I en un circuito RL

$LI' + RI = E$

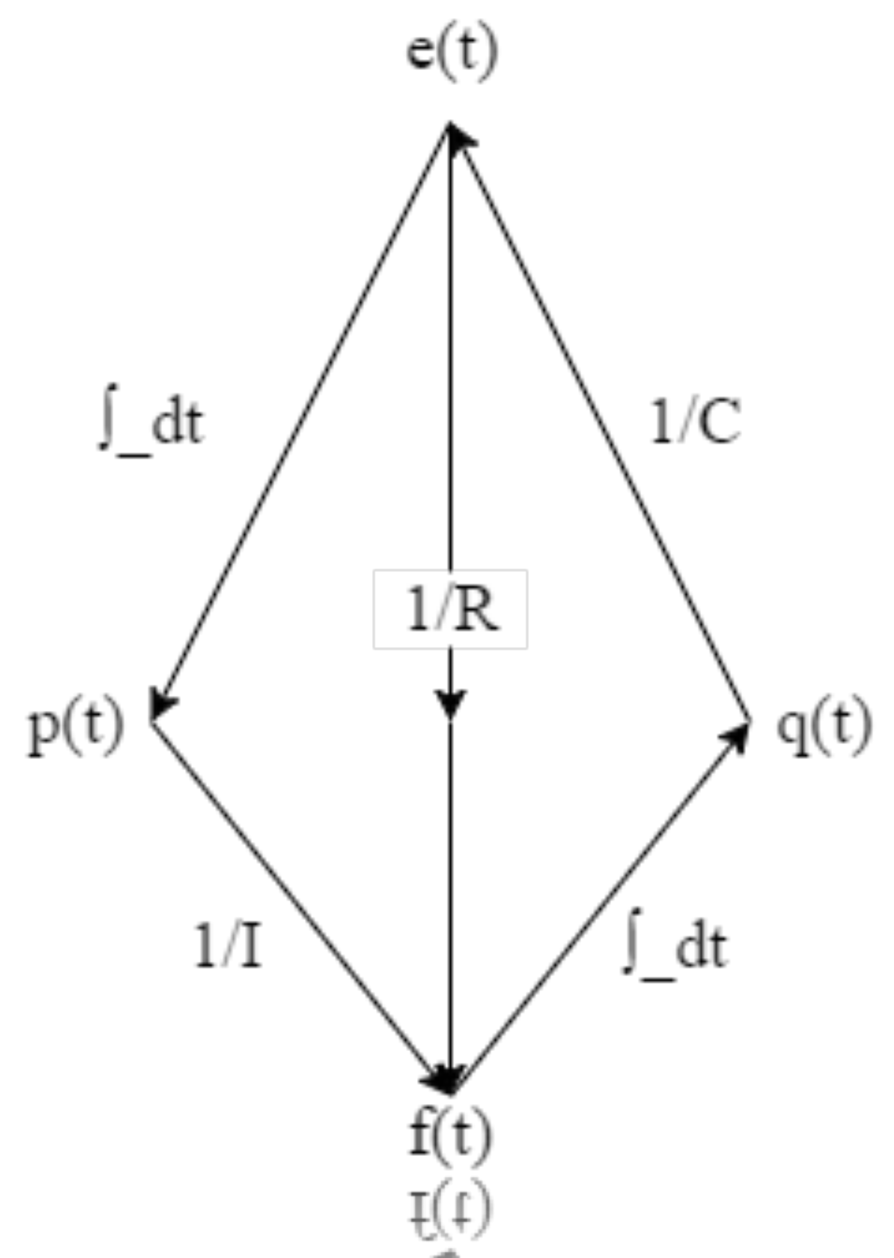


Corriente I en un circuito RLC

$LI'' + RI' + \frac{1}{C} I = E'$

También se puede expresar en términos de la carga eléctrica!!!

TETRAHEDRON DE ESTADO (TE)



- Representación gráfica más general para conversiones entre Flujos y Potenciales (Effort) es el TE.
- Permite determinar relaciones matemáticas entre diferentes variables de estado (generalizadas) para varios dominios de Energía

Energy Domain[2][Note 1]		$f(t)$	$e(t)$	$q(t)$	$p(t)$	R	I	C
Generalized	**Name**	**Generalized flow**	**Generalized effort**	**Generalized displacement**	**Generalized momentum**	**Resistance**	**Inertance**	**Compliance**
	Symbol	$f(t)$	$e(t)$	$q(t)$	$p(t)$	R	I	C

$$q(t) = \int f(t)\,dt \qquad f(t) = \frac{1}{R}e(t) \qquad e(t) = \frac{1}{C}\int f(t)\,dt$$

TETRAHEDRON DE ESTADO

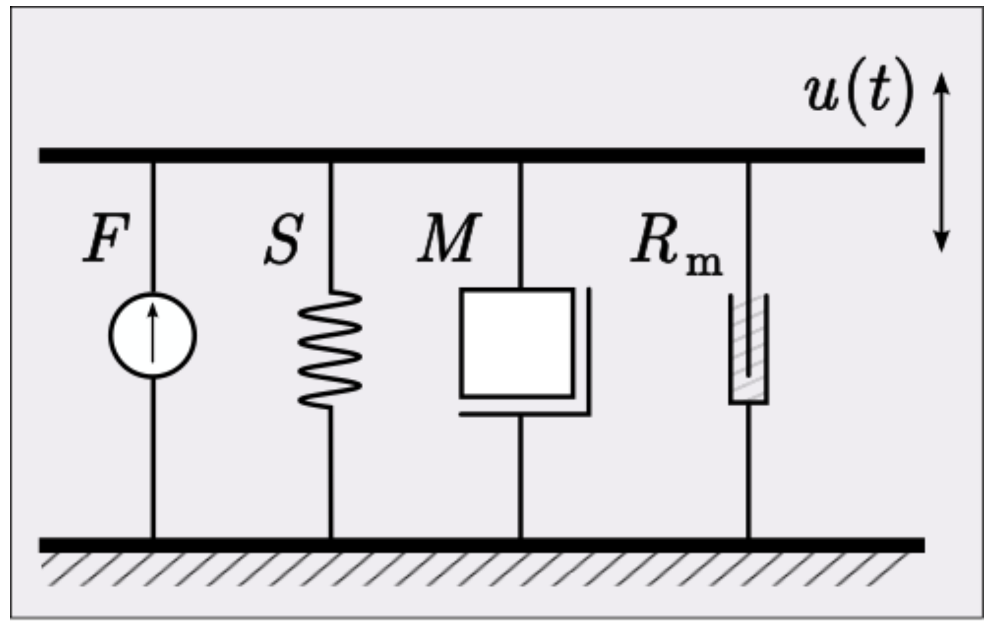
Energy Domain[2][Note 1]		$f(t)$	$e(t)$	$q(t)$	$p(t)$	R	I	C
Generalized	Name	Generalized flow	Generalized effort	Generalized displacement	Generalized momentum	Resistance	Inertance	Compliance
	Symbol	$f(t)$	$e(t)$	$q(t)$	$p(t)$	R	I	C
Linear mechanical	Name	Velocity	Force	Displacement	Linear momentum	Damping constant	Mass	Inverse of the spring constant
	Symbol	$v(t)$	$F(t)$	$x(t)$	$p(t)$	b	m	$\frac{1}{k}$
	Units	m/s	N	m	$N \cdot s$	$N \cdot s/m$	kg	m/N
Angular mechanical	Name	Angular velocity	Torque	Angular displacement	Angular momentum	Angular damping	Mass moment of inertia	Inverse of the angular spring constant
	Symbol	$\omega(t)$	$T(t)$	$\theta(t)$	$p_\tau(t)$	B	J	$\frac{1}{k_\tau}$
	Units	rad/s	$N \cdot m$	rad	$N \cdot m \cdot s$	$rad/(N \cdot m \cdot s)$	$kg \cdot m^2$	$1/(N \cdot m)$
Electromagnetic	Name	Current	Voltage	Charge	Flux linkage	Resistance	Inductance	Capacitance
	Symbol	$i(t)$	$V(t)$	$q(t)$	$\lambda(t)$	R	L	C
	Units	A	V	C	$V \cdot s$	Ω	H	F
Hydraulic/ pneumatic	Name	Volume flow rate	Pressure	Volume	Fluid momentum	Fluid resistance	Fluid inductance	Storage
	Symbol	$\varphi(t)$	$P(t)$	$V(t)$	$p_f(t)$	R_f	I_f	C_f
	Units	m^3/s	Pa	m^3	$Pa \cdot s$	$Pa \cdot s/m^3$	$Pa \cdot s^2/m^3$	m^3/Pa

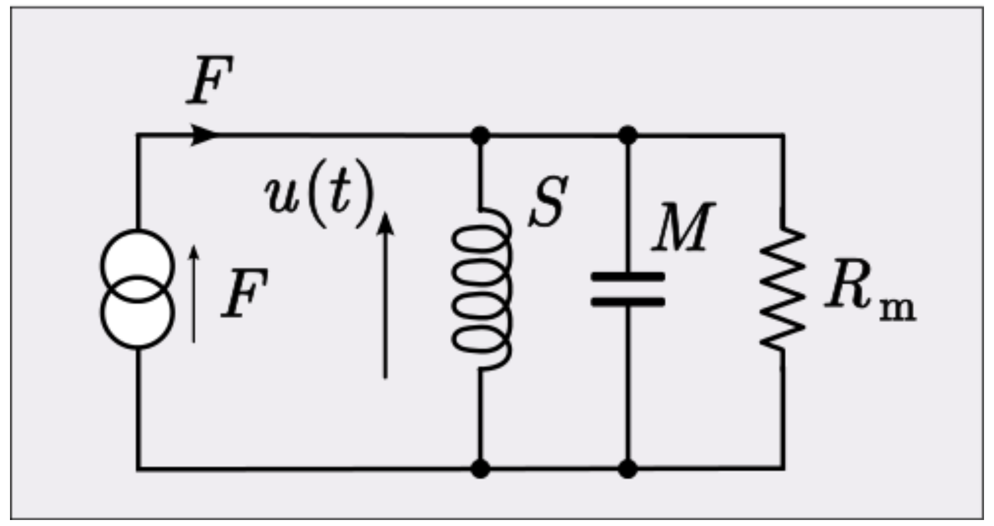
TETRAHEDRON DE ESTADO

- Analogías más comunes son las Mecánico-eléctricas (MEA).
- MEAs son útiles para modelar sistemas donde existen traductores entre diferentes dominios de energía.

Energy domain analogies[40]

Energy domain	Effort variable	Flow variable
Electrical	Voltage	Current
Mechanical	Force	Velocity
Fluid	Pressure	Volume flow rate
Thermal	Temperature difference	Entropy flow rate
Magnetic	Magnetomotive force (mmf)	Magnetic flux rate of change
Chemical	Chemical potential	Molar flow rate



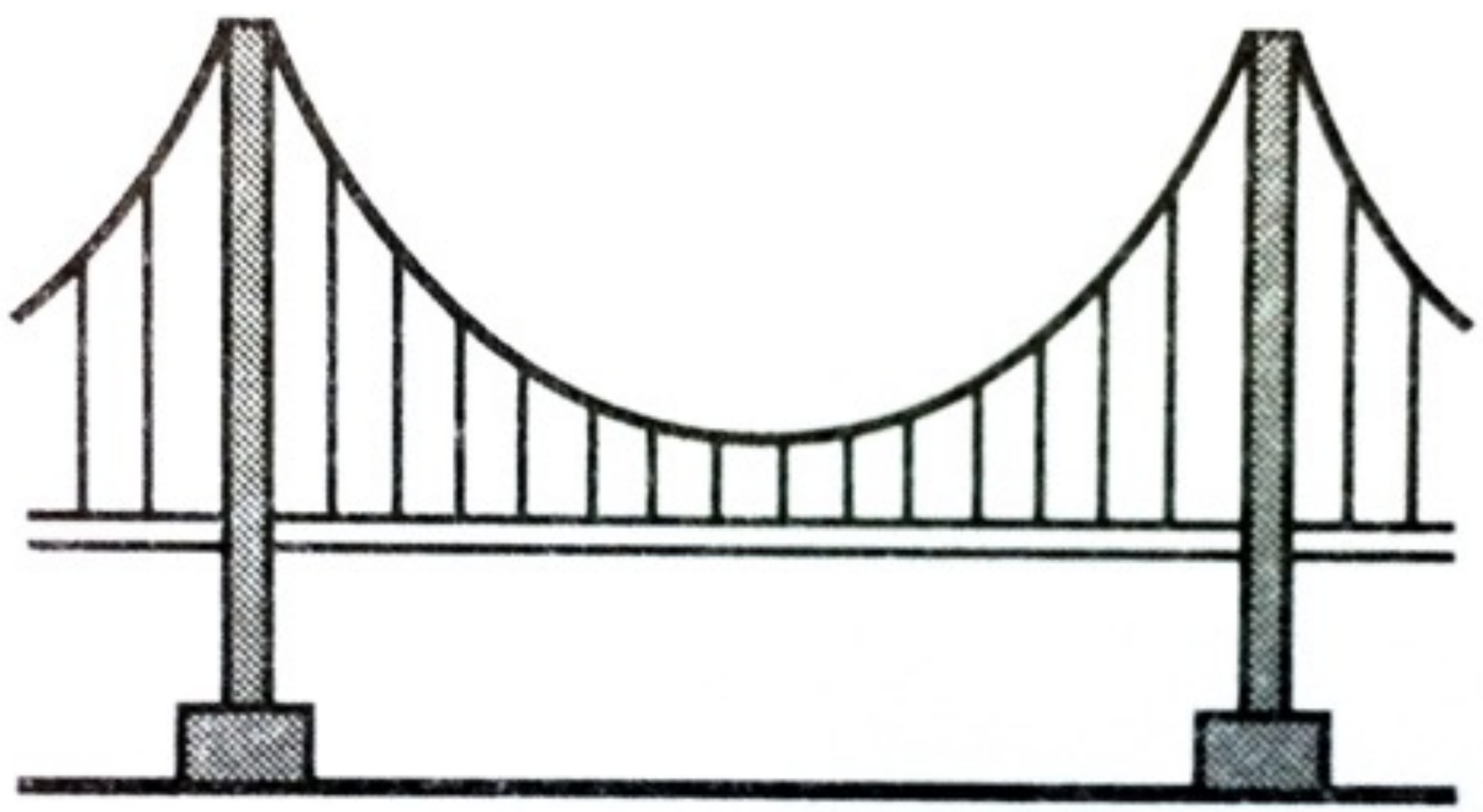


UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

MODELOS COMUNES Y GENERALIZADOS

Algunos modelos tienen un origen puramente geométrico

Problema de persecución
$y' = -y/\sqrt{a^2 - y^2}$



Cable de un paquete
$y'' = k\sqrt{1 + y'^2}$

MODELOS COMUNES Y GENERALIZADOS

Un modelo que veremos la próxima semana!!!

$$h\left(g + \frac{\mathrm{d}^2 h}{\mathrm{d}t^2}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}t}\right)^2 \left[\left(\frac{A}{a}\right)^2 - 1\right]$$

$$t_d = \sqrt{\frac{2h_0}{g_m}}$$

$$g_m = \frac{g}{\left[(A/a)^2 - 1\right]}$$

Relaciones Auxiliares (Comunes)

1. Transport Rates

Mass Transport

Molecular

$$N_A = -DA\frac{dC_A}{dz}$$

Fick's Law

Convective Interphase

$$N_A = k_C\, A(C^* - C)$$

$$N_A = K_{OC}\, A(C^* - C)$$

Energy Transport

$$q = -kA\frac{dT}{dz}$$

Fourier's Law

$$q = hA\Delta T$$

$$q = UA\Delta T$$

Momentum Transport

$$\tau = -\mu\frac{dv}{dz}$$

Newton's Viscosity Law

$$v = -\frac{K}{\mu}\frac{dp}{dz}$$

Darcy's Law

$$\tau_w = f\frac{\rho v^2}{2}$$

Shear Stress at Pipe Wall

Relaciones Auxiliares (Comunes)

2. Chemical Reaction Rates

First Order

$$r = k_r C_A$$

Second Order

$$r = k_r C_A^2 = k_r C_A C_B$$

3. Drag and Friction in Viscous Flow

Sphere

$$C_D = \frac{24}{Re}$$

$$F_D = C_D A_C \frac{\rho v^2}{2}$$

Pipe

$$f = \frac{16}{Re}$$

$$\Delta p = 4 f \rho \frac{v^2}{2} \frac{L}{D}$$

Relaciones Auxiliares (Comunes)

4. Equations of State for Gases

Ideal Gas

$$pV = nRT$$

Real Gas

$$pV = z(T_r, p_r)RT$$

5. Physical Equilibria

Henry's Law

$$y = Hx$$

Vapor-Liquid Equilibrium

$$yP_T = \gamma \times P^o$$

6. Thermodynamics

Enthalpy

$$\Delta H = Cp\Delta T$$

Relaciones Auxiliares (Comunes)

Que tienen en común las siguientes relaciones?

- Ley de Ohm
- Ley de Fick
- Ley de Fourier
- Ley de viscosidad de Ne
- Reacción quí den
- Le (Resortes)
- Ley de Stokes (Arrastre esfera)

$$V = i/R$$

$$J = -D$$

$$= -k\,A\,\frac{dT}{dx}$$

$$\tau = -\mu\frac{dv}{dx}$$

$$r = k_r\,C$$

$$F = k_s\,x$$

$$F_D = 3\,\pi\,\mu\,d\,v$$

TODAS ESTAS RELACIONES SON LINEALES!!!

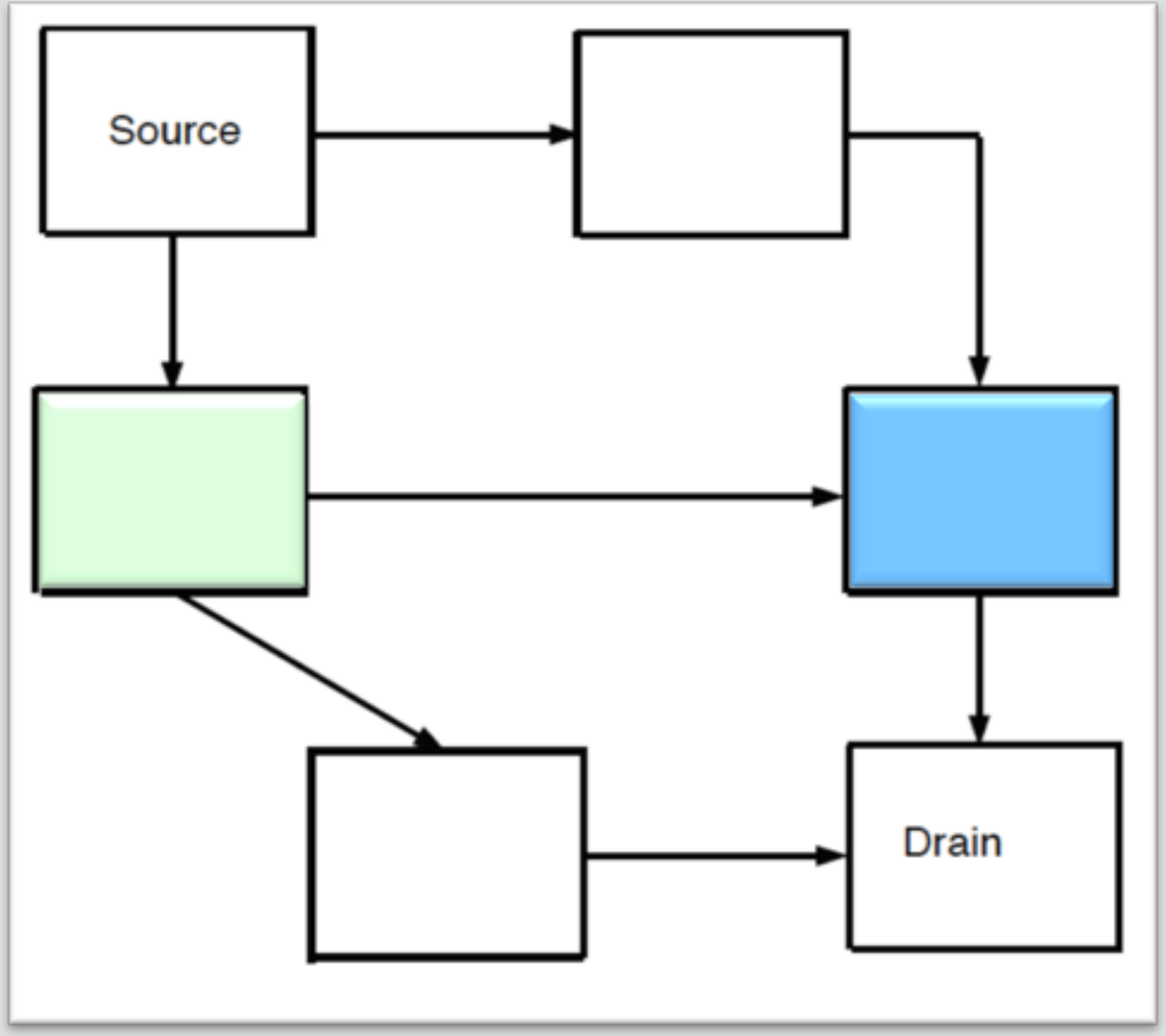
Tipos de Modelos Matemáticos

- Modelos Compartiméntales
- Modelos para Reacciones Químicas
- Modelos Newtonianos
- Modelos Poblacionales
- Modelos Hamiltonianos**
- Modelos basados en métodos Variacionales**

MODELOS COMPARTIMÉNTALES

- Útiles para estudios de transporte de material
- Es adecuado asumir que hay mezclado perfecto

$$\dot{m}_{in} = \dot{V}_{in}\, c_{in}$$
$$\dot{m}_{out} = \dot{V}_{out}\, c_{out}$$



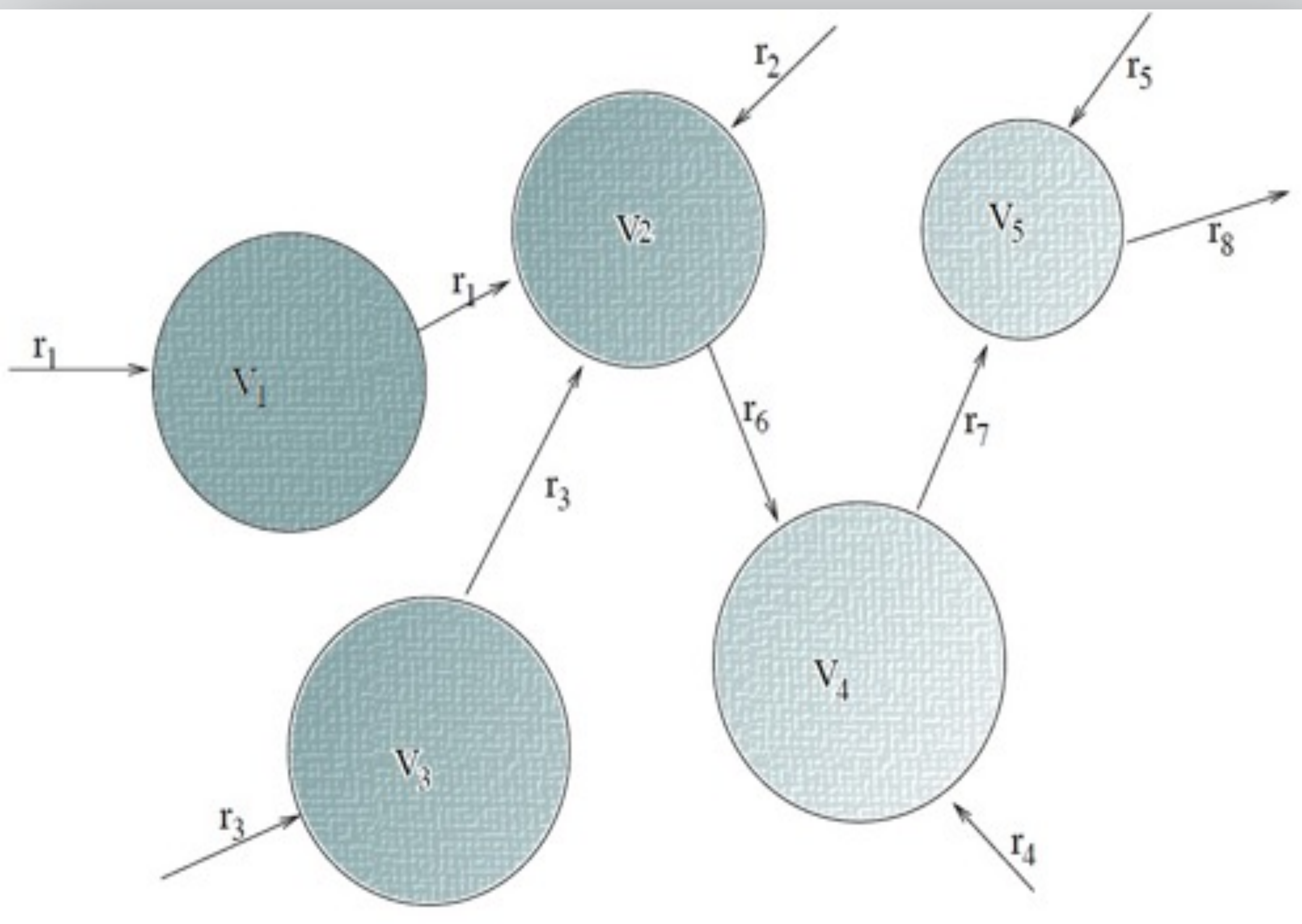
$$\frac{dx}{dt} = \text{Tasa de entrada} - \text{Tasa de salida}$$

MODELOS COMPARTIMÉNTALES

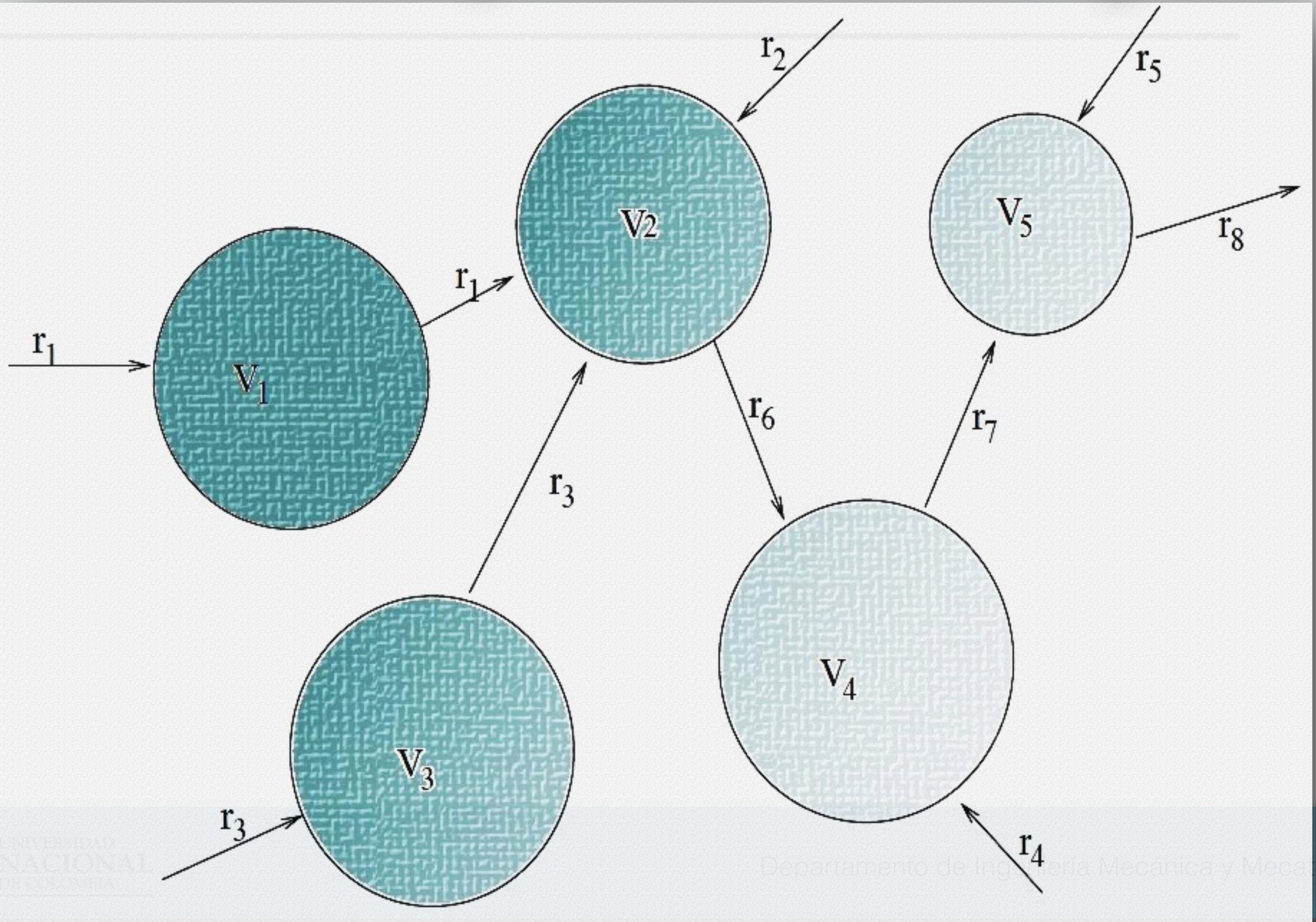
- Usados para modelar transporte de material, por ejemplo en sistemas biológicos
- Mezclado perfecto en cada compartimento permite obviar consideraciones de procesos de difusión y mezclado
- Cada compartimento se puede considerar como un recipiente adiabático, impermeable, con un número fijo de entradas y salidas de flujo (transportando material)
- Material también puede provenir de fuentes externas o ser depositado (consumido, extraído, etc) en sumideros externos
- Material transportado DEBE obedecer una ley de conservación (material, solventes, fluidos, energía, etc…)

MODELOS COMPARTIMÉNTALES. Ejemplo 1

- Un sistema de lagos está interconectado como se muestra en la figura.
- Cada lago contiene una concentración variable de contaminante, pero el volumen de líquido permanece constante.
- Desarrolle un simple modelo matemático para simular la cantidad de contaminante como función del tiempo.



Mod. Compartimientos — Ej. 1



MODELOS COMPARTIMÉNTALES - Ejemplo 1

Recuerde:

$$\frac{dx}{dt} = \text{Tasa de entrada} - \text{Tasa de salida}$$

x_1 : Masa en recipiente 1 $[M]$

r_1 : Rata de flujo VOLUMETRICO 1 $[L^3T^-1]$

V_1 : Volúmen total de líquido en compartimento 1 $[L^3]$

$\frac{x_1}{V_1}$: Concentración total en compartimento 1 $[ML^-3]$

MODELOS COMPARTIMÉNTALES - Ejemplo 1

$$\frac{dx_1}{dt} = -\frac{r_1}{V_1}x_1$$

$$\frac{dx_2}{dt} = +\frac{r_1}{V_1}x_1 + \frac{r_3}{V_3}x_3 - \frac{r_1+r_2+r_3}{V_2}x_2$$

$$\frac{dx_3}{dt} = -\frac{r_3}{V_3}x_3$$

$$\frac{dx_4}{dt} = \frac{r_1+r_2+r_3}{V_2}x_2 - \frac{r_1+r_2+r_3+r_4}{V_4}x_4$$

$$\frac{dx_5}{dt} = \frac{r_1+r_2+r_3+r_4}{V_4}x_4 - \frac{r_1+r_2+r_3+r_4+r_5}{V_5}x_5$$

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

MODELOS COMPARTIMÉNTALES - Ejemplo 2

- Sangre transporta medicina a un órgano a una tasa volumétrica $r_i(t)$ y la extrae a una rata $r_o(t)$. La concentración de entrada es $c_i(t)$.

- El órgano tiene un volumen inicial de Sangre V_0. El volumen de sangre cambia con el tiempo

- La concentración de entrada es $c_i(t)$, pero la de salida es $c(t)=x(t)/V(t)$ *(mezclado perfecto!!!!)*

- Determine un modelo matemático básico para calcular la cantidad de medicina $x(t)$ en el órgano.

REACCIONES QUÍMICAS

- Proceso de re-arreglo molecular (transformación), en donde la energía es liberada o absorbida, pero…
- No existe cambio en el peso molecular
- Pueden considerarse como modelos compartiméntales**
- Reacciones químicas se pueden clasificar como:
  - Reacciones simples (o elementales):
    - No pasos intermedios.
    - Ley de acción de Masas
  - Reacciones complejas

REACCIONES QUÍMICAS

- Si la reacción es completamente reversible y simétrica, y…
- Si se considera un cumplimiento estricto de la ley de masas
- Entonces, para la reacción dada, se tiene que (un modelo básico es)

$$\mathrm{n_A A + n_B B \rightleftharpoons n_C C + n_D D}$$

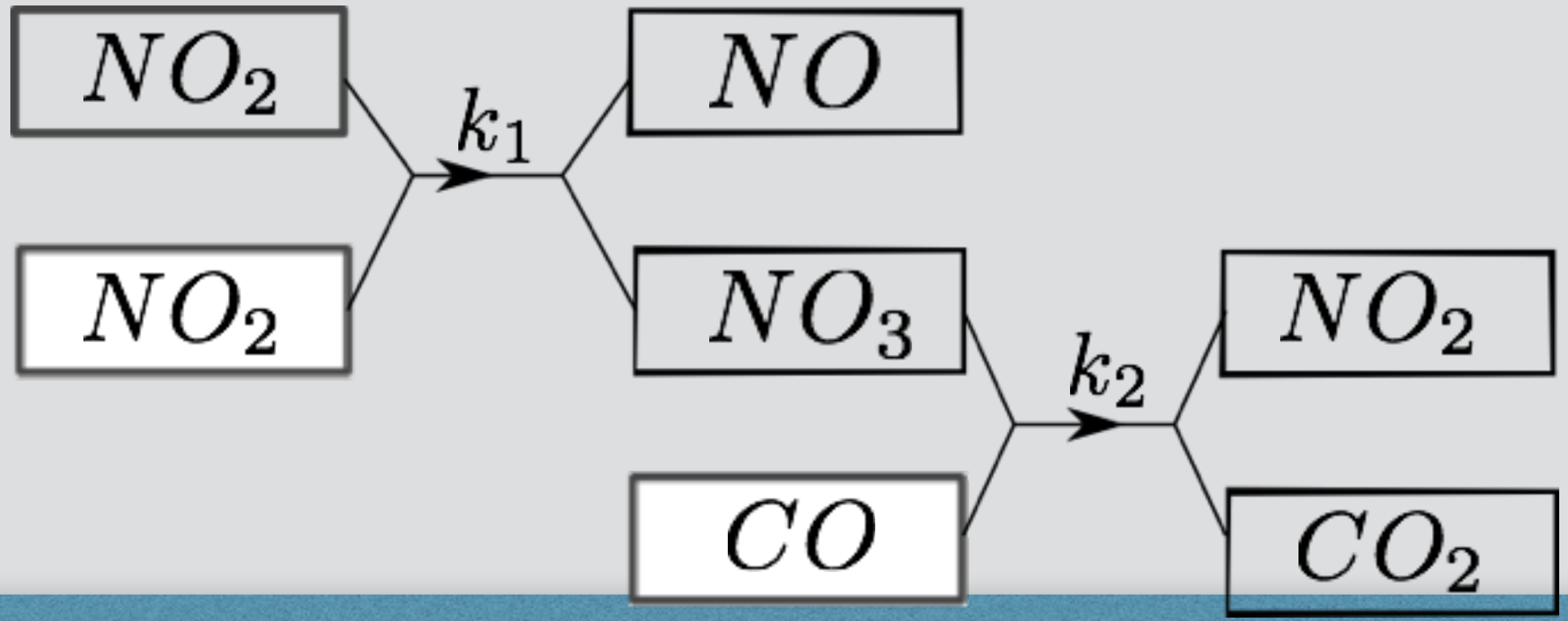
$$\frac{d[A]}{dt} = -k\, n_A [A]^{n_A}[B]^{n_B} + k\, n_A [C]^{n_C}[D]^{n_D}$$
$$\frac{d[B]}{dt} = -k\, n_B [A]^{n_A}[B]^{n_B} + k\, n_B [C]^{n_C}[D]^{n_D}$$
$$\frac{d[C]}{dt} = +k\, n_C [A]^{n_A}[B]^{n_B} - k\, n_C [C]^{n_C}[D]^{n_D}$$
$$\frac{d[D]}{dt} = +k\, n_D [A]^{n_A}[B]^{n_B} - k\, n_D [C]^{n_C}[D]^{n_D}$$

REACCIONES QUÍMICAS - Ejemplo 1

- Usando ley de acción de masas, determine un modelo matemático para simular la siguiente reacción compleja: $NO_2 + CO \rightarrow NO + CO_2.$
- Considere las siguientes reacciones elementales como mecanismo propuesto

$$2NO_2 \rightarrow NO + NO_3$$

$$NO_3 + CO \rightarrow NO_2 + CO_2$$



REACCIONES QUÍMICAS - Ejemplo 1

$$NO_2 + CO \rightarrow NO + CO_2.$$

$$2NO_2 \rightarrow NO + NO_3$$
$$NO_3 + CO \rightarrow NO_2 + CO_2$$

$$\frac{d[NO_3]}{dt} = -k_2[NO_3][CO] + k_1[NO_2]^2$$
$$\frac{d[CO]}{dt} = -k_2[NO_3][CO]$$
$$\frac{d[NO_2]}{dt} = -2k_1[NO_2]^2 + k_2[NO_3][CO]$$

MODELOS POBLACIONALES (I)

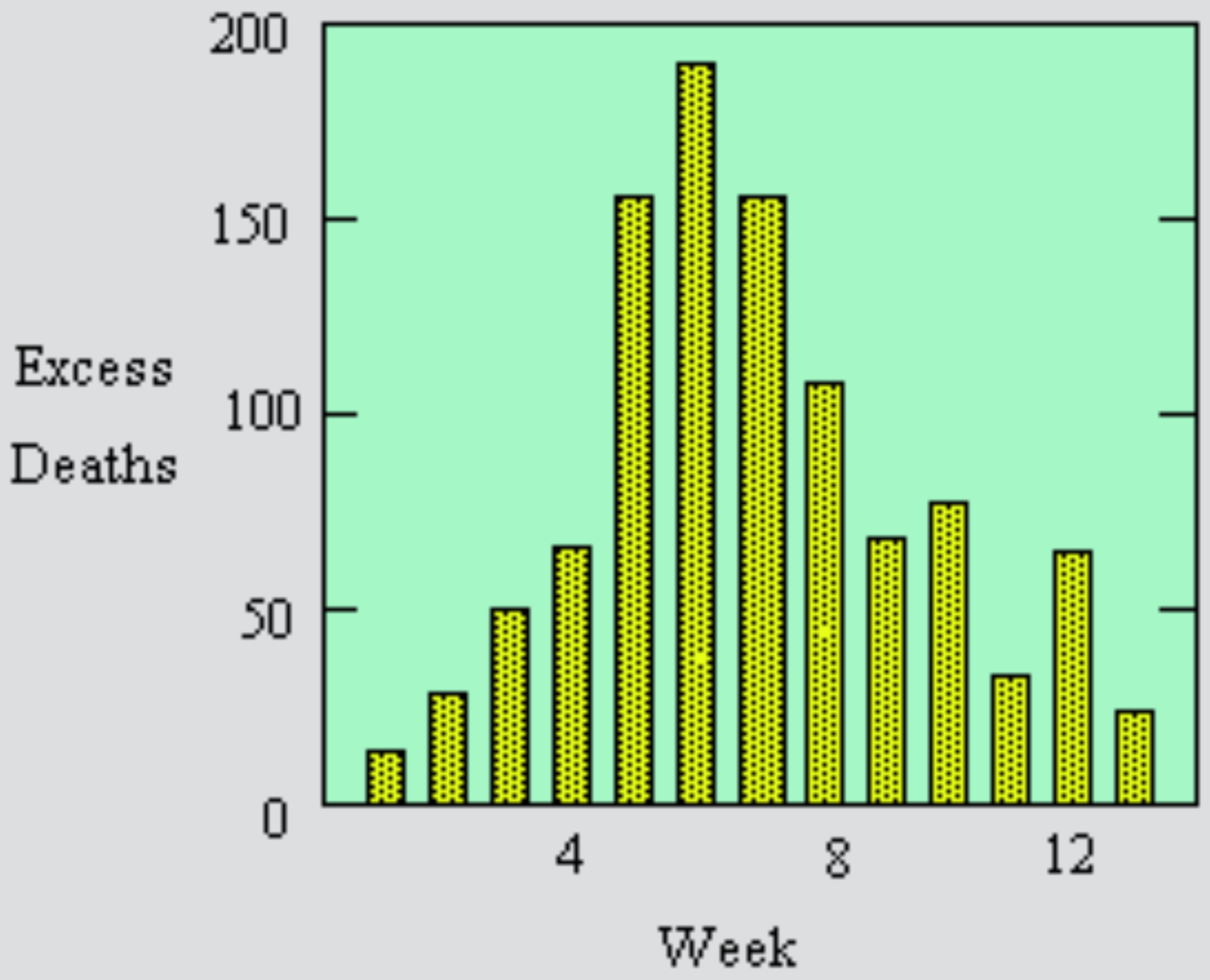
- Modelos matemáticos aplicables al estudio de evoluciones de sistemas compuestos por conjuntos de elementos con niveles dinámicos de interacción.
- Población puede ser cualquier colección de elementos que se puedan contar: Organismos, células biológicas, automóviles o partes de una línea de producción, etc…
- Surgen de conceptualizaciones o abstracciones más que de conceptos físicos o matemáticos específicos (lo cual no resta importancia a estos modelos)

MODELOS POBLACIONALES (II)

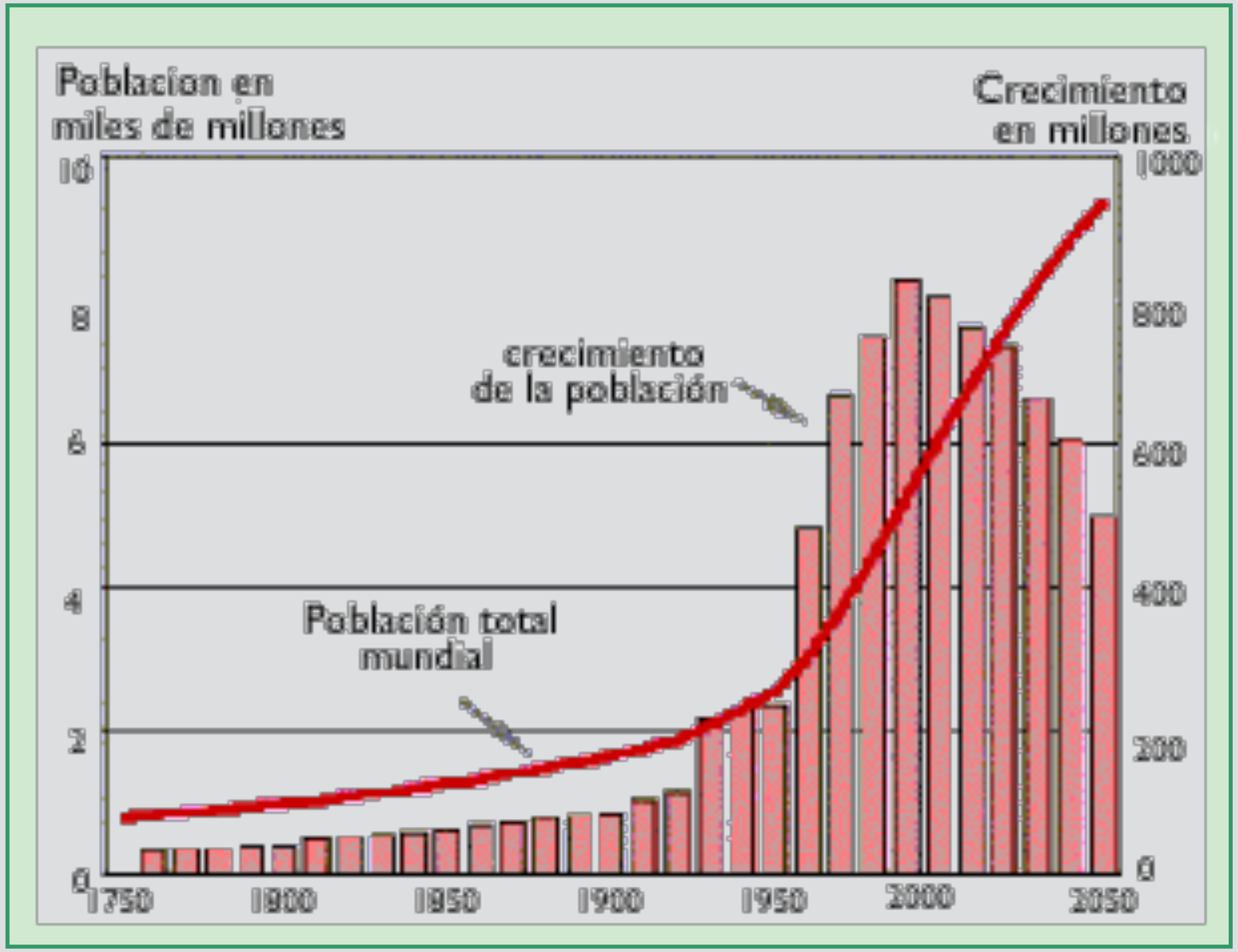
- Algunos de los modelos más reconocidos son:
  - Producción estable
  - Malthus (Sin limitante)
  - Logístico (Medio con capacidad límitada)
  - Gompertz (Crecimiento de tumor)
  - Población simple (Caso general…)
  - Lotka-Volterra (Mutua dependencia)
  - Etc… (Se verán con detalle más adelante)

ECUACIÓN DIFERENCIAL PARA EL MODELADO DE LA PROPAGACIÓN DE UNA ENFERMEDAD (SI)

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{ds}{dt} &= -b\,s(t)\,i(t) \\ \frac{di}{dt} &= b\,s(t)\,i(t) - k\,i(t) \end{aligned}}$$



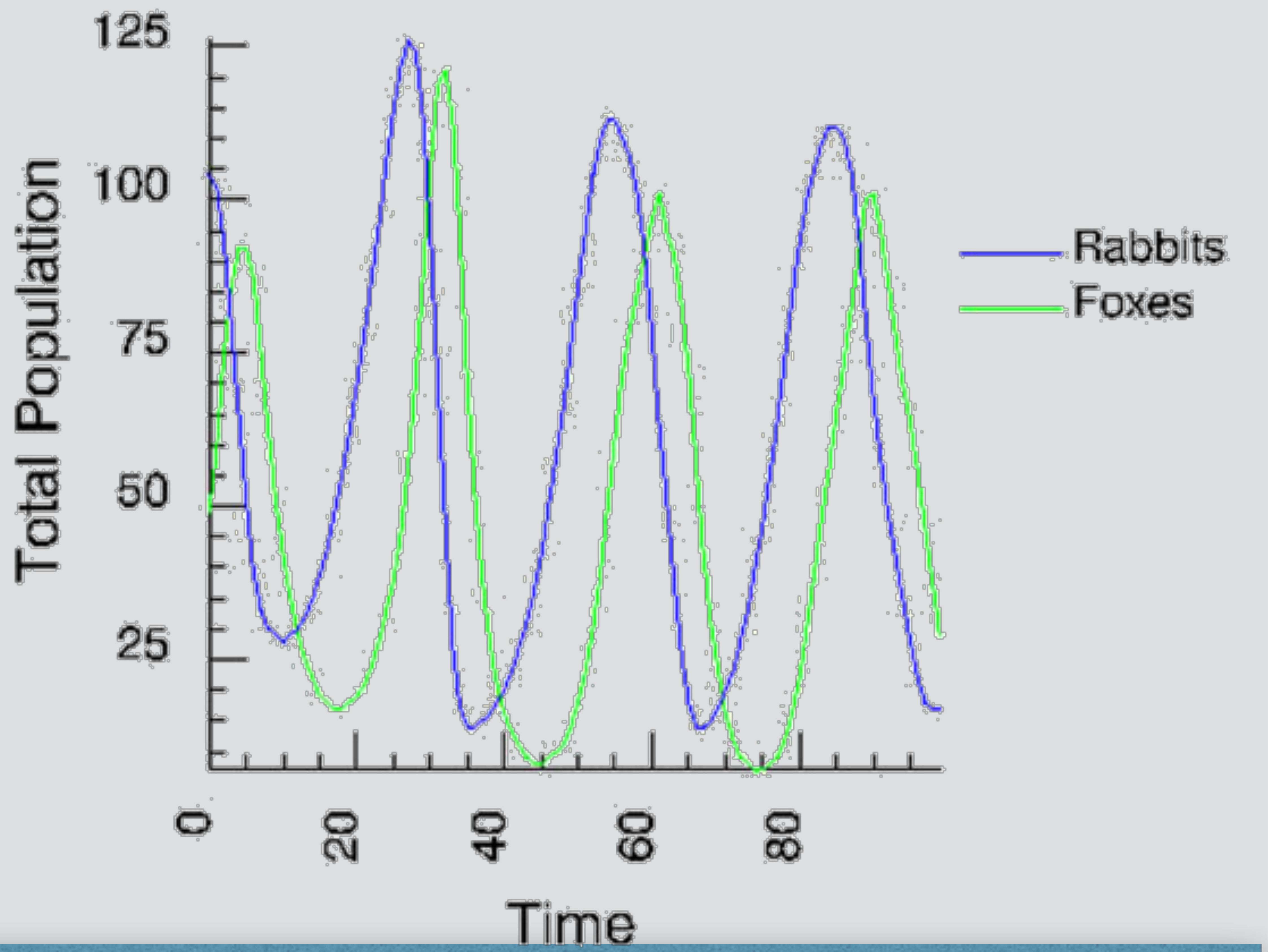
ECUACIÓN PARA EL ESTUDIO DE LA DINÁMICA DE CRECIMIENTO DE LA POBLACIÓN



$$\frac{dY}{dt} - KY = 0$$

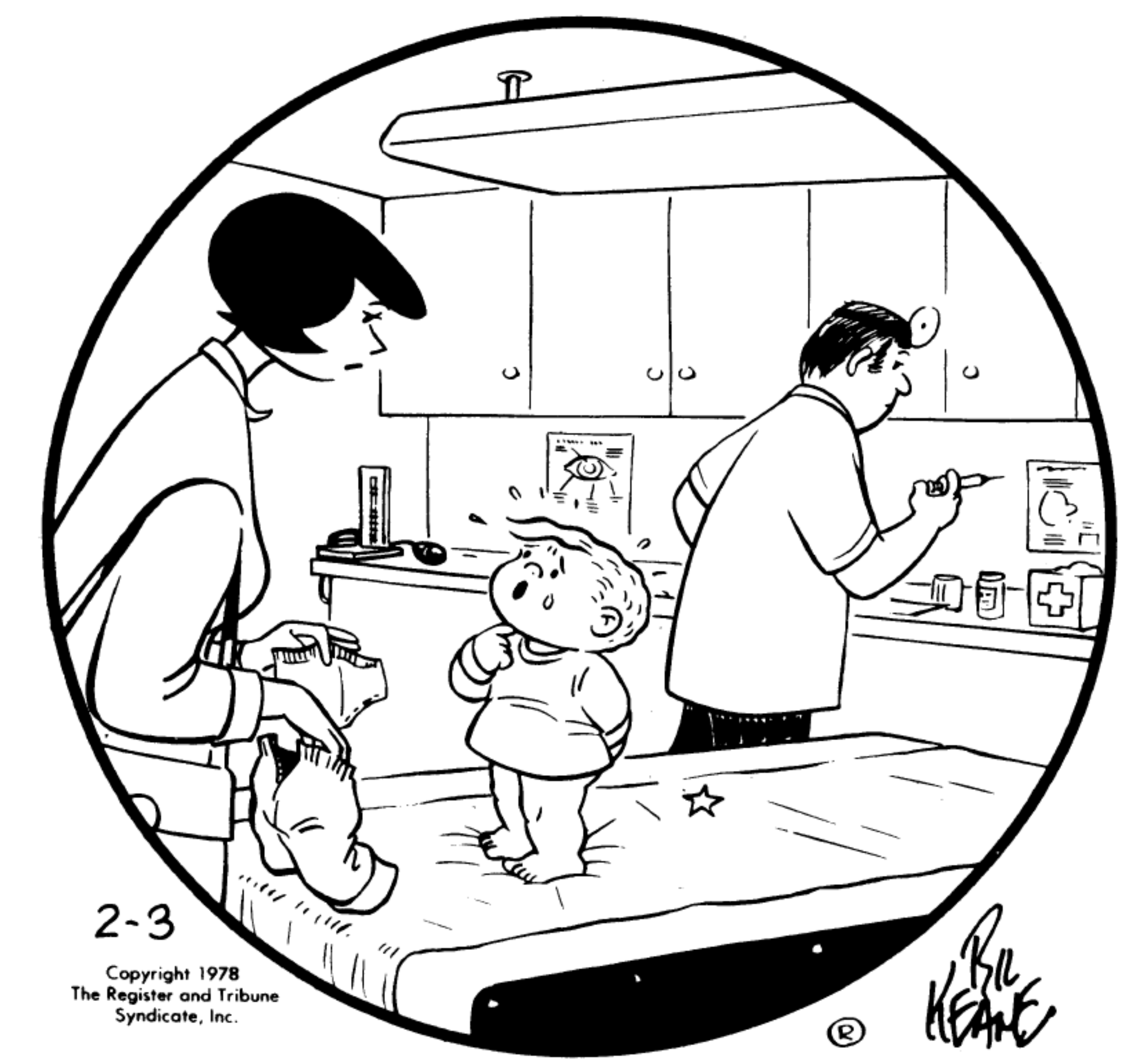
ECUACIÓN PARA UN MODELO DEPREDADOR PRESA (LOTKA-VOLTERRA)

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{dy}{dt} &= e\,y - c\,x\,y \\ \frac{dx}{dt} &= -a\,x + b\,x\,y \end{aligned}}$$



MODELOS FÁRMACO-CINÉTICOS (PK): COMPARTIMENTOS Y CINÉTICA QUÍMICA

- Modelos construidos para determinar o rastrear el transporte de niveles de medicamento (fármacos) en un organismo.
- Modelos Fármaco-cinéticos se centran en determinar cómo un medicamento se mueve a través del cuerpo
- Modelos Fármaco-Dinámicos se enfocan e examinar el efecto del medicamento en el cuerpo.



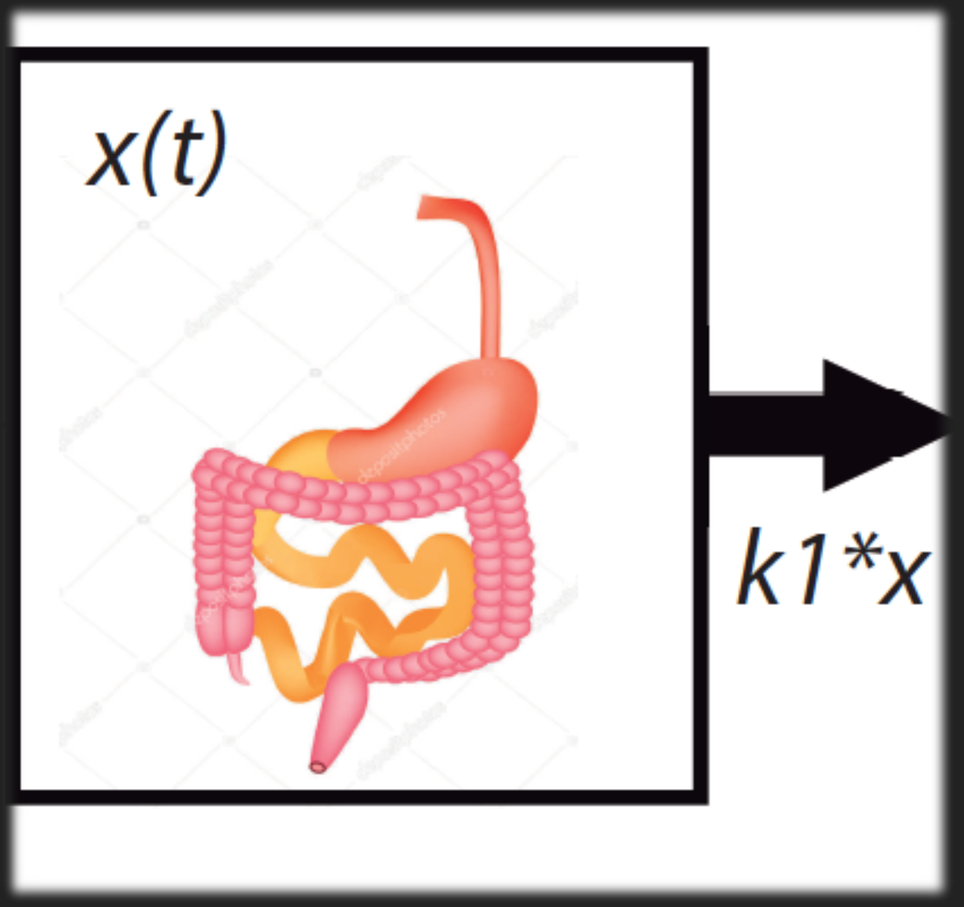
"How will that stuff get from down there up to my sore throat?"

MODELOS FÁRMACO-CINÉTICOS: COMPARTIMENTOS Y CINÉTICA QUÍMICA

- Existen diferentes niveles de complejidad en estos modelos, generalmente asociados al "orden" del proceso (orden de la reacción)
- Modelos simples se basan en la idea de combinar los conceptos de modelos compartimentales con los conceptos de cinética química de primer orden

ORGANO

$$\frac{dA}{dt} = -K A$$



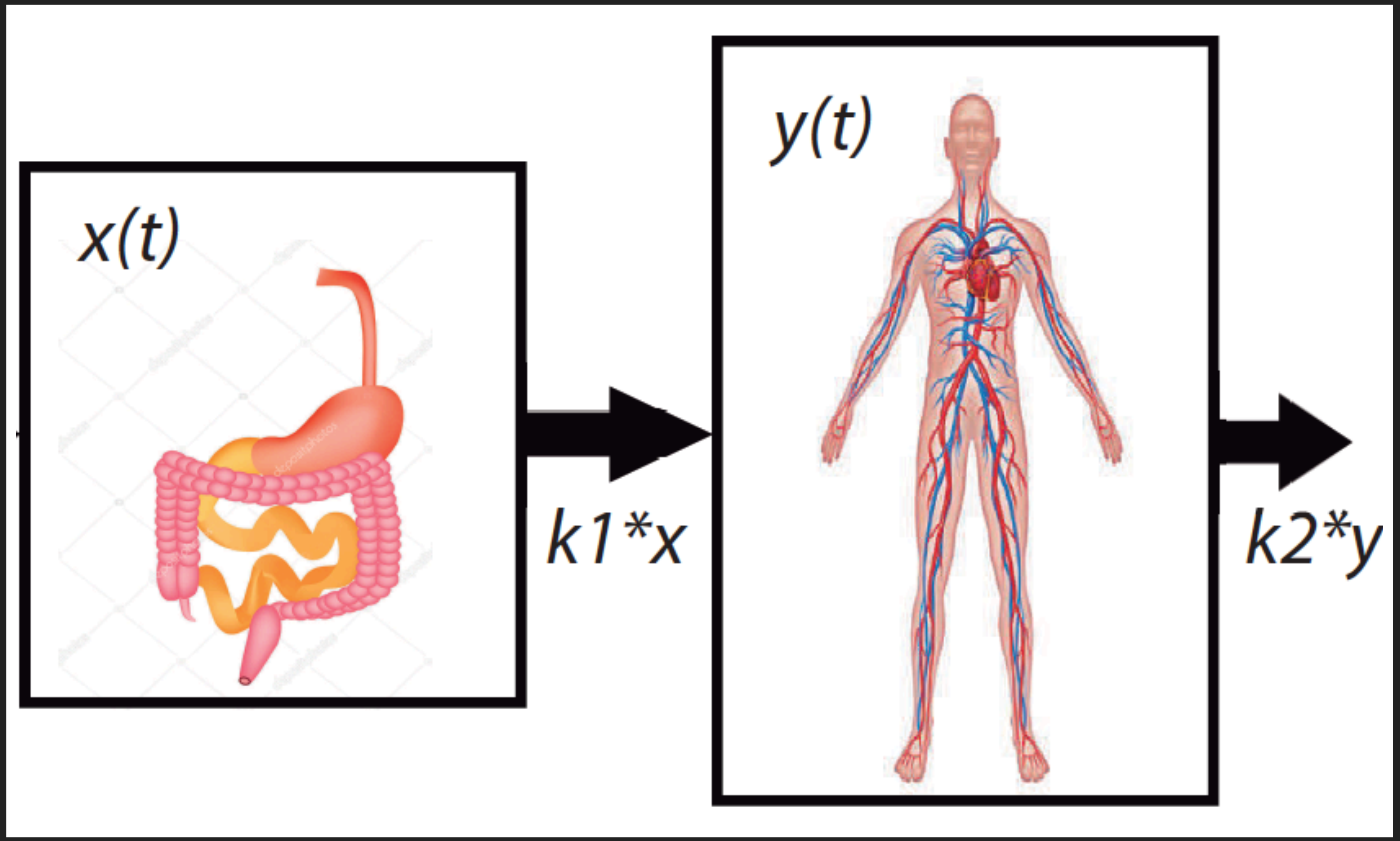
MODELOS FÁRMACO-CINÉTICOS: COMPARTIMENTOS Y CINÉTICA QUÍMICA

- Modelos simples para trazar el transporte a través de varios órganos puede obtenerse simplemente adicionando más compartimentos:

ORGANO 1 → ORGANO 2 →

$$\frac{dA}{dt} = -K_1 A$$

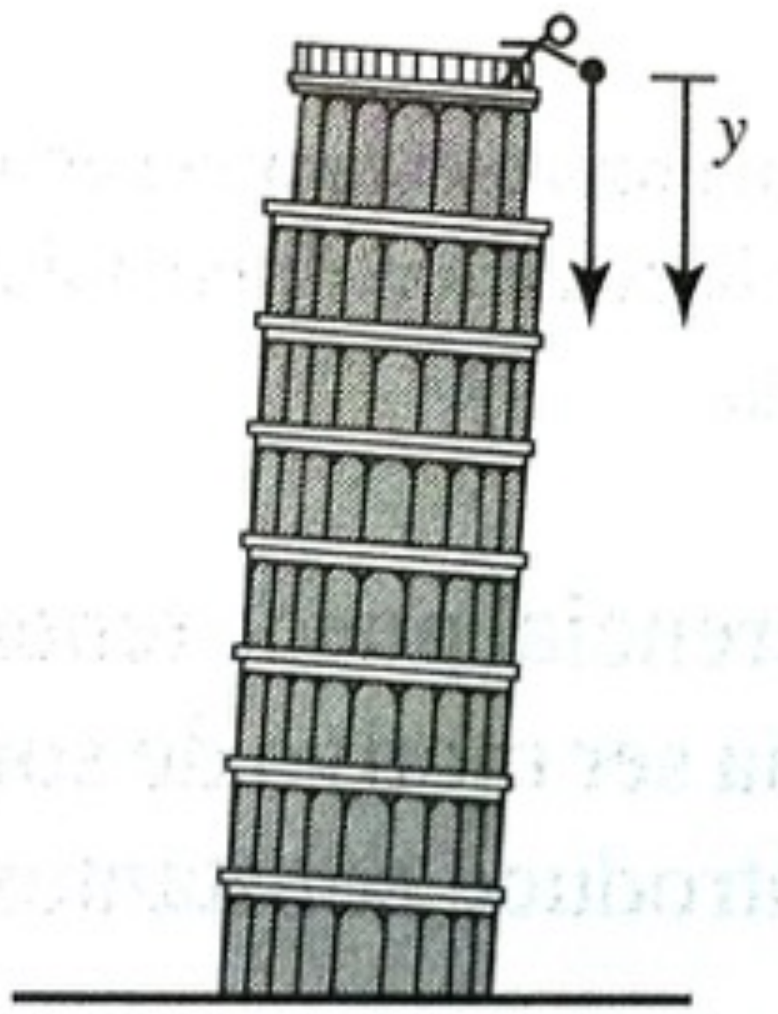
$$\frac{dB}{dt} = +K_1 A - K_2 B$$



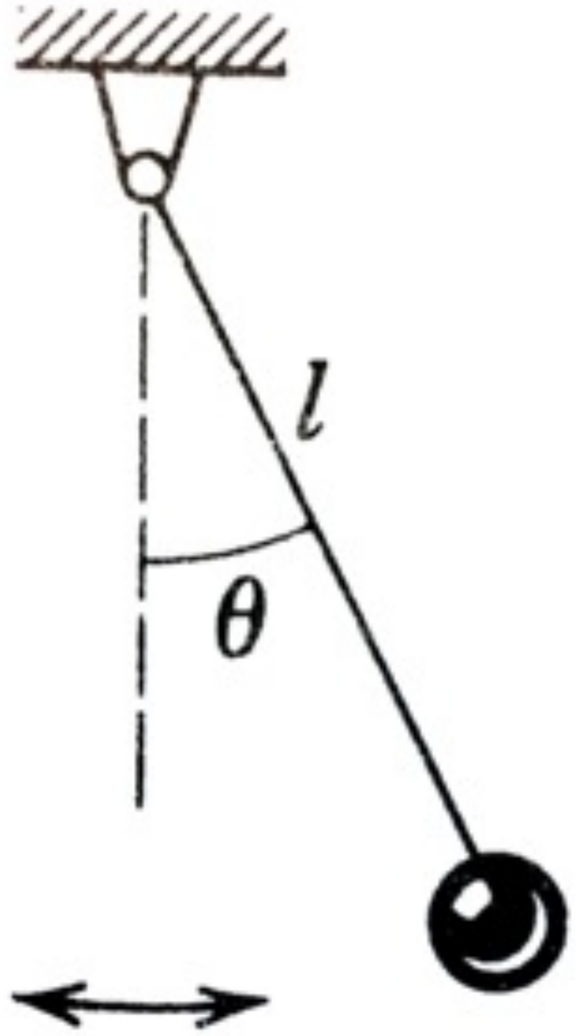
MODELOS NEWTONIANOS

- Modelos construidos (generalmente) a partir de la segunda ley de Newton
- Principio de conservación de energía es el otro elemento fundamental que complementa estos modelos
- Generalmente resultan en EDO's de segundo orden lineales (pero hay excepciones...)

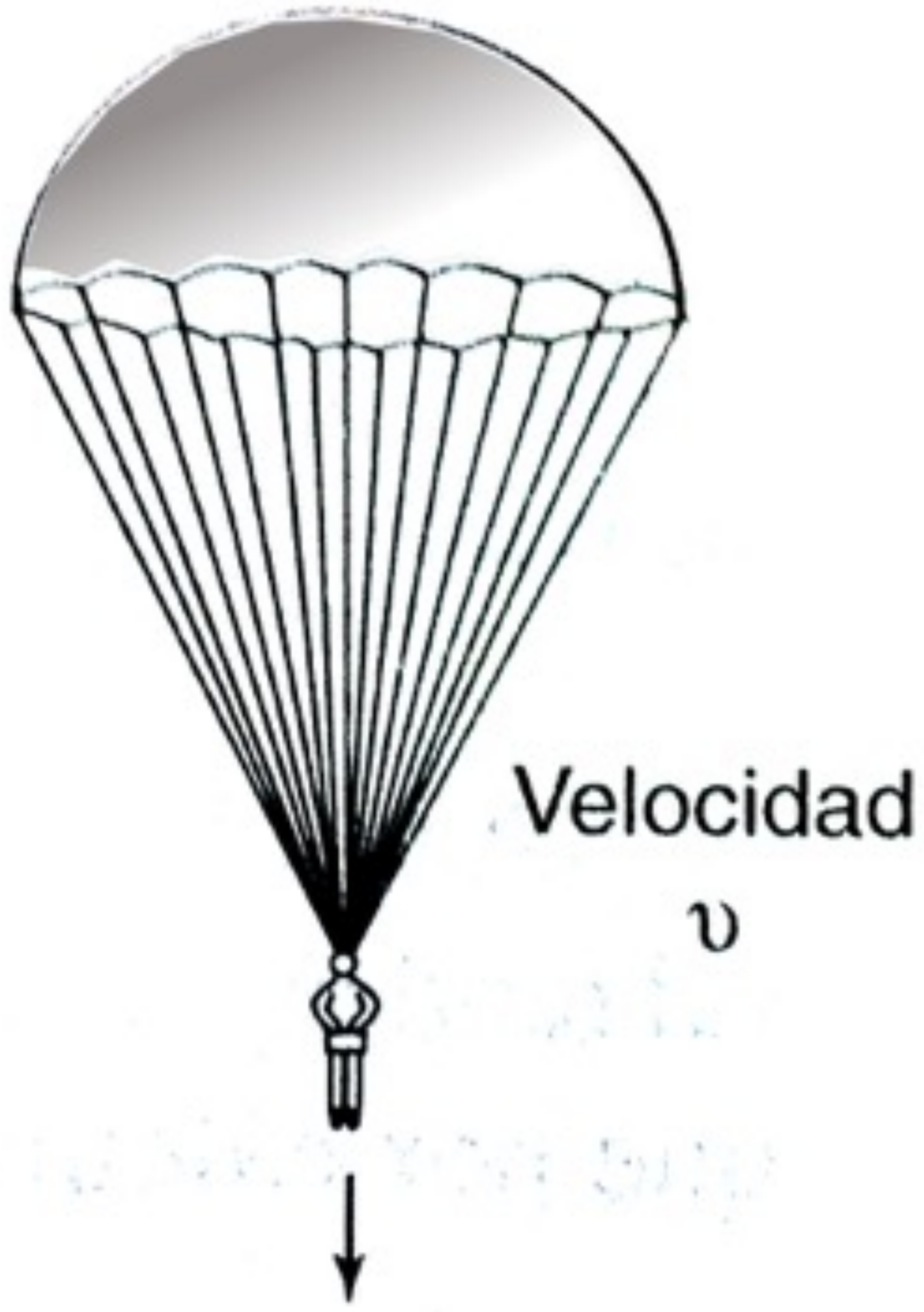
MODELOS NEWTONIANOS



Piedra en caída libre
$y'' = g = constante$

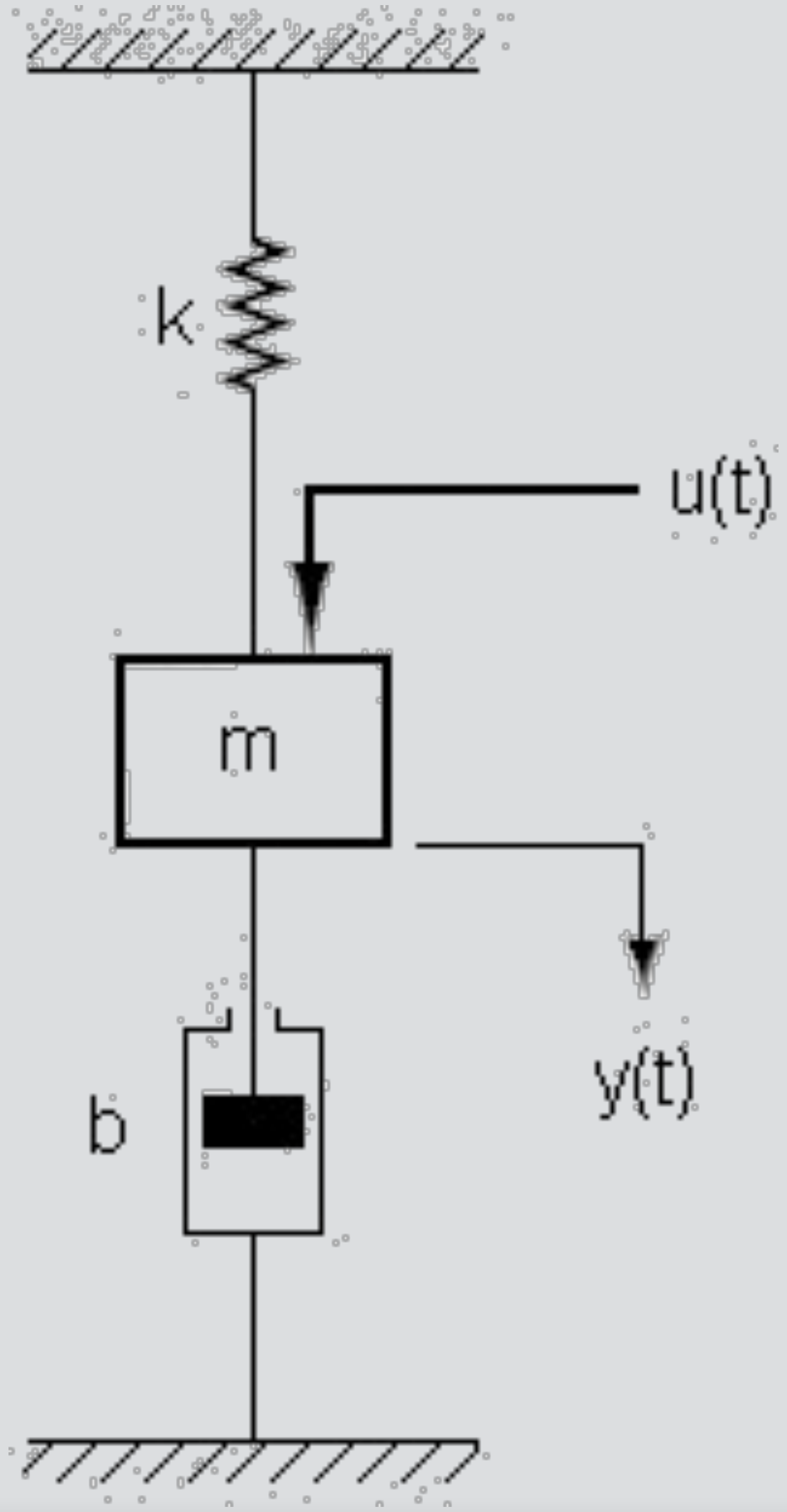


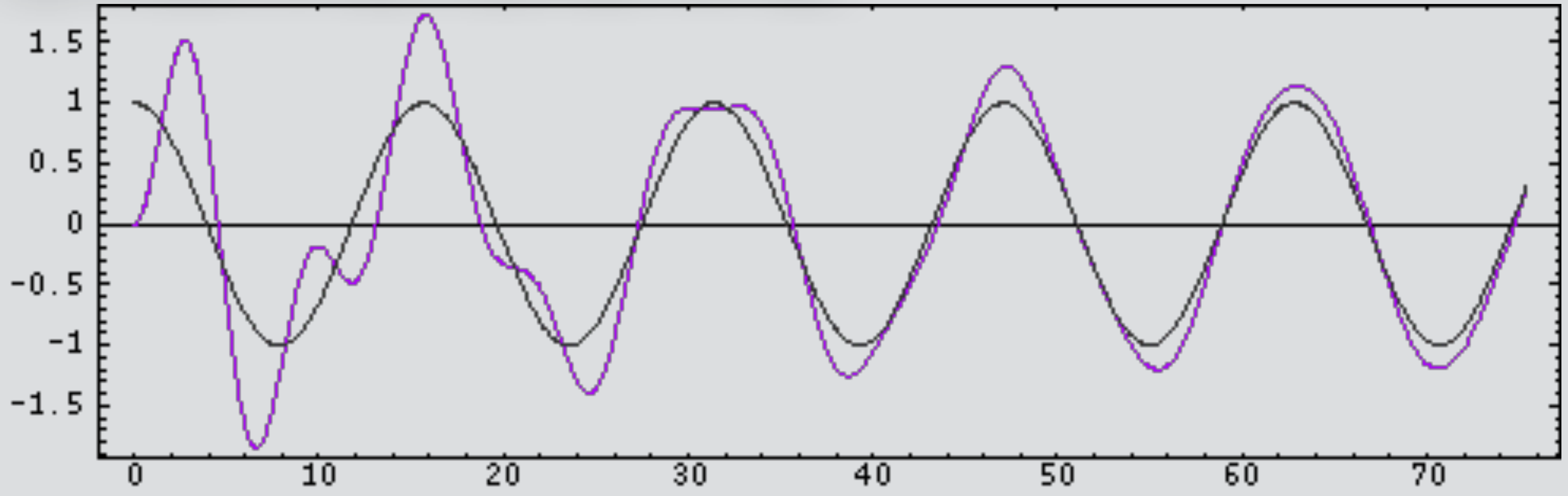
Péndulo
$l\theta'' + g \sin\theta = 0$

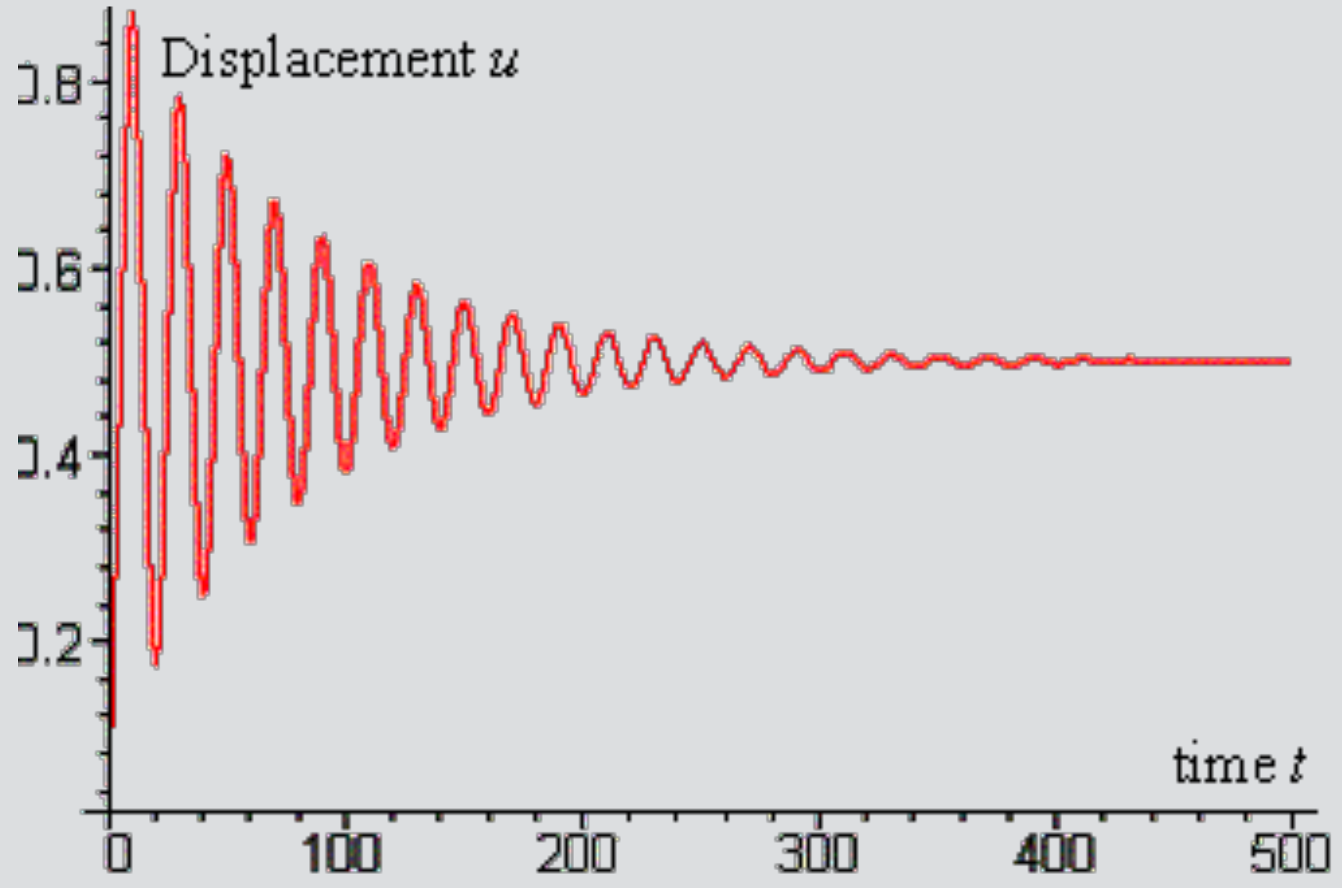


paracaidista
$m\upsilon' = mg - b\upsilon^2$

ECUACIÓN PARA VIBRACIONES FORZADAS AMORTIGUADAS CON MOVIMIENTO UNIDIMENSIONAL







$$m\ddot{y} + b\dot{y} + ky = u(t)$$

Resumen

- Modelos Compartiméntales
- Modelos para Reacciones Químicas
- Modelos Poblacionales
- Modelos Newtonianos
- Modelos Hamiltonianos**
- Modelos basados en métodos Variacionales**

Temas de estudio para la próximas clases

- Sistemas autónomos
- Conceptos de estabilidad
- Valores propios y estabilidad
- Sistemas de ODEs rígidos

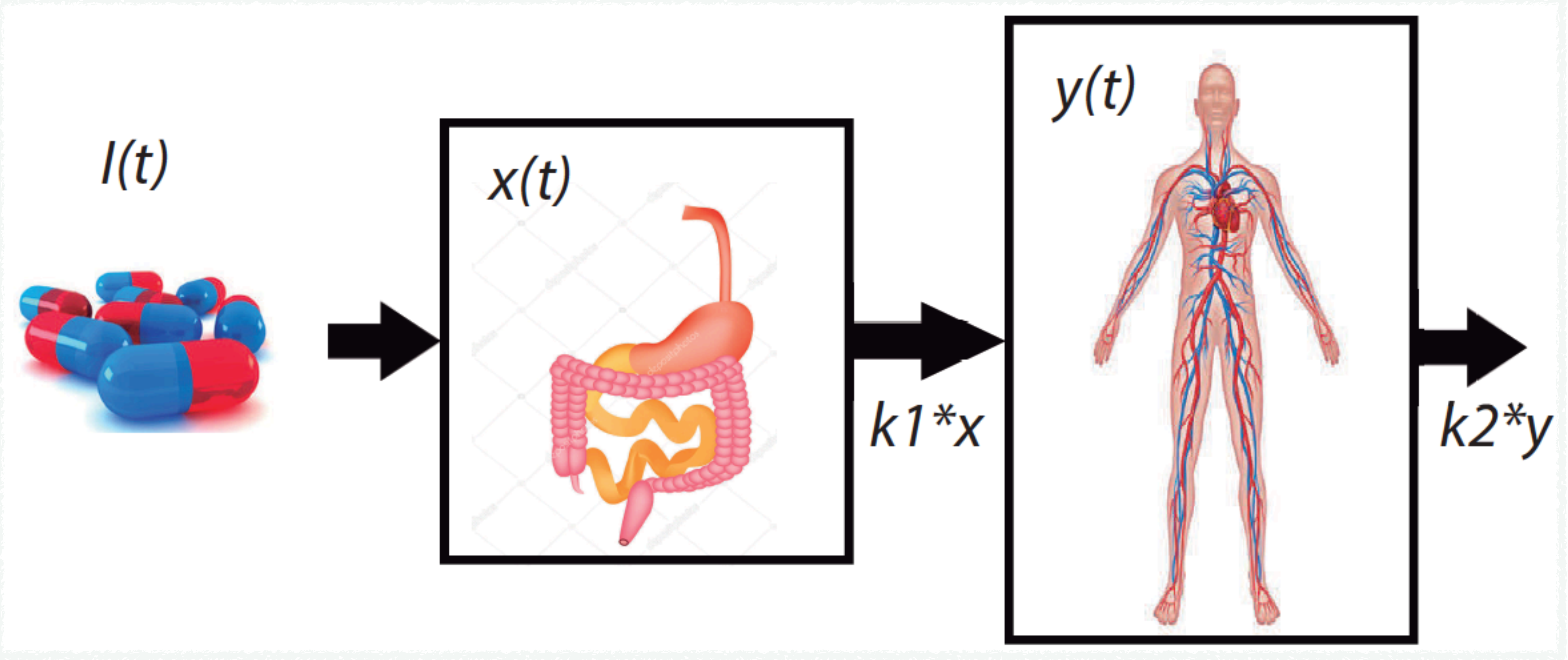
★ Uso de conceptos de conservación de Masa y Energía

EXPLORANDO MODELOS MIXTOS – MODELOS PK

1. Leer el material asociado a la actividad "trabajoIndividual.03"

2. Con base en las lecturas, llevar a cabo un corto resumen de los principales puntos de los modelos Farmaco-Cineticos (PK-models)

3. Construir el modelo matemático para el seguimiento del nivel de medicamento en el siguiente sistema:



$$k_1 = 0{,}6931$$
$$k_2 = 0{,}0231$$

MOST PEOPLE DON'T HAVE TIME TO MASTER THE VERY MATHEMATICAL DETAILS OF THEORETICAL PHYSICS.

Stephen Hawking

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA