Modelación

Alan Reyes-Figueroa
Métodos Numéricos II

(Aula 01) 09.julio.2024

Modelos Matemáticos

Un modelo matemático es una descripción aproximada, expresada mediante simbología matemática, de alguna clase de fenómenos del mundo exterior.

La simulación matemática y computacional es un método de **conocimiento**, (mediante el cual puede ganarse intuición y entendimiento), o un método de **pronóstico** (conocimiento a futuro), **controlado** (bajo condiciones controladas), de estos modelos.

Distinguimos principalmente dos tipos de modelos:

- **Problema directo**: A partir de leyes locales específicas (leyes físicas, químicas, biológicas, económicas, etc.) que actúan sobre un sistema estudiado, respondemos a la pregunta de cómo se comportará el sistema en un caso determinado.
  En este caso todos los parámetros del sistema en cuestión son conocidos, y se investiga el comportamiento del modelo en diferentes condiciones.

- **Problema inverso**: Consiste en la obtención de los parámetros del modelo mediante la confrontación de los datos observados, con los resultados de una simulación.

Ejemplos de problemas directos e inversos:

1. Ajuste de curvas:
Suponga que según algún modelo teórico, el valor de una cantidad y depende de otra cantidad $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ mediante una ecuación como

$$y = \beta^T \mathbf{x} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \ldots + \beta_d x_d.$$

Problema Directo: Dado un valor de observación $\mathbf{x}_j$, estimar el valor de y para dicho dato

$$\hat{y}_j = \beta^T \mathbf{x}_j.$$

Problema Inverso: Dado una muestra de puntos observados $(\mathbf{x}_i, y_i)$, $1 \leq i \leq n$, (dado un conjunto de datos), ¿cómo determinar los valores de los parámetros $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_d$.
¿Y qué tan seguros estamos del resultado? Dar una estimación de la confianza de los parámetros encontrados.

Un ejemplo de uso: La determinación de la vida media de una sustancia radiactiva a partir de mediciones de los tiempos de los productos de desintegración.

2. Tomografía axial computarizada (CT):
Deseamos obtener cortes transversales a través de un cuerpo vivo y mostrar imágenes de estos cortes. Los rayos X se transmiten parcialmente a través del cuerpo y la opacidad de diversas estructuras internas a los rayos X varía, de modo que una imagen de la variación del coeficiente de absorción en el cuerpo daría una buena imagen. Las únicas mediciones que se pueden realizar de forma no invasiva es hacer pasar rayos X a través del paciente y medir la absorción total a lo largo de las líneas a través del cuerpo.

Para $u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2)$, $s \in \mathbb{R}$ y $\theta \in S^1$, La **transformada de Radón** en $\mathbb{R}^2$ se puede definir como el siguiente operador integral $\mathcal{R} : C_0^\infty(\mathbb{R}^2) \to C^\infty(S^1 \times \mathbb{R})$

$$f(\theta, s) = \mathcal{R}(u)(\theta, s) = \int_{\mathbb{R}} u(s\theta + t\theta^\perp)\, dt.$$

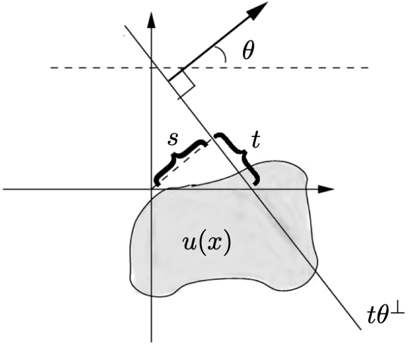
Si $\theta = (\cos\varphi, \sin\varphi)$, con $\varphi \in [0, 2\pi)$, entonces

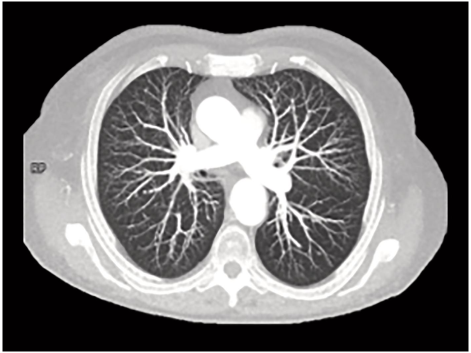
$$f(\varphi, s) = \mathcal{R}(u)(\varphi, s) = \int_{\mathbb{R}} u\big(s\cos\varphi - t\sin\varphi,\ s\sin\varphi + t\cos\varphi\big)\, dt.$$

Modelos Matemáticos

Problema Directo: conociendo la función $u(\mathbf{x})$, calcular su transformada de Radón.

Problema Inverso: Dada una colección de integrales de línea (los datos $=$ las absorciones a lo largo de muchas direcciones), ¿cómo reconstruimos la absorción en función de la posición en el cuerpo (la imagen)?





3. Deconvolución de imágenes:
El problema de *deblurring* (o deconvolución) de recuperar una señal de entrada $u \in C^0(\mathbb{R})$ de una señal observada

$$f(t) = \int_{\mathbb{R}} K(t-s)\, u(s)\, ds + n(t).$$

ocurre en muchas aplicaciones de procesamiento de imágenes y procesamiento de señales. K se llama el kernel de convolución, y n es una función de ruido.

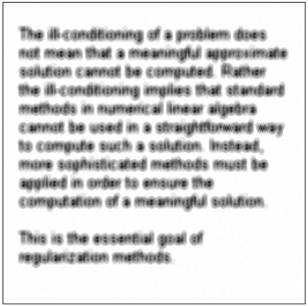
La señal sin ruido está dada por $f(t) = \int_{\mathbb{R}} K(t-s)\, u(s)\, ds$, y su transformada de Fourier es $\widehat{f}(\xi) = \int_R Re^{-e\xi t} f(t)\, dt$.
El teorema de convolución nos dice que $\widehat{f}(\xi) = \widehat{K}(\xi)\, \widehat{u}(\xi)$.
Luego, usando la transformada inversa, tenemos

$$u(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{it\xi}\, \widehat{u}(\xi)\, d\xi = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} e^{it\xi}\, \frac{\widehat{f}(\xi)}{\widehat{K}(\xi)}\, d\xi.$$

Modelos Matemáticos

Sin embargo, sólo podemos observar una señal con ruido $\widehat{f}(\xi) = \widehat{K}(\xi)\,\widehat{u}(\xi) + \widehat{n}(\xi)$. Así, la estimación para la deconvolución es

$$u_{est}(t) = u(t) + \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} e^{it\xi}\,\frac{\widehat{n}(\xi)}{\widehat{K}(\xi)}\,d\xi = \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} e^{it\xi}\,\frac{\widehat{K}(\xi)\widehat{u}(\xi) + \widehat{n}(\xi)}{\widehat{K}(\xi)}\,d\xi.$$

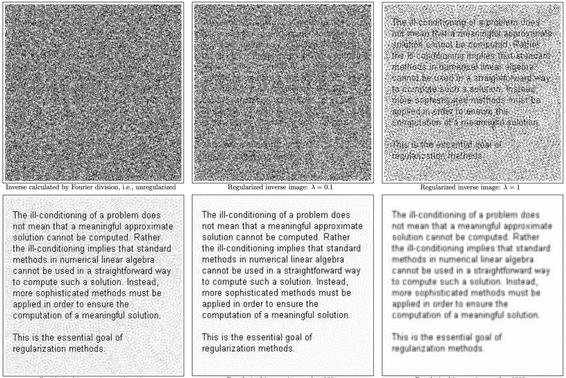

The ill-conditioning of a problem does not mean that a meaningful approximate solution cannot be computed. Rather the ill-conditioning implies that standard methods in numerical linear algebra cannot be used in a straightforward way to compute such a solution. Instead, more sophisticated methods must be applied in order to ensure the computation of a meaningful solution.

This is the essential goal of regularization methods.

Blurred image with noise

Problema Directo: conociendo la imagen $u(\mathbf{x})$, calcular su convolución $\widehat{f}(\xi)$.

Problema Inverso: Dada la señal observada ruidosa $\widehat{f}(\xi) + \widehat{n}(\xi)$, recuperar la imagen original $u(\mathbf{x})$.



Inverse calculated by Fourier division, i.e., unregularized | Regularized inverse image: $\lambda = 0.1$ | Regularized inverse image: $\lambda = 1$

Regularized inverse image: $\lambda = 10$ | Regularized inverse image: $\lambda = 100$ | Regularized inverse image: $\lambda = 1000$

Modelos Discretos y Continuos

Casi siempre, clasificamos los modelos atendiendo a la naturaleza de las variables y funciones que intervienen en la modelación:

1. **Modelos continuos:** cuando trabajamos con con funciones en $\mathbb{R}$ ó $\mathbb{C}$ (o sus versiones n-dimensionales $\mathbb{R}^n, \mathbb{C}^n$). Son los más comunes en ingeniería, y hacen uso de herramientas de cálculo y análisis matemático.
2. **Modelos discretos:** cuando trabajamos con conjuntos finitos, o conjuntos como $\mathbb{N}, \mathbb{Z}$ ó $\mathbb{Q}$ (o sus versiones n-dimensionales). Son los más comunes en ciencias de la computación. Aparecen siempre que queremos discretizar la modelación de un fenómeno continuo.
3. **Modelos probabilísticos:** o **estocásticos**. Aparecen siempre que queremos modelar incerteza, o fenómenos en los que interviene la probabilidad. Pueden ser discretos o continuos. Hacen uso extensivo de distribuciones de probabilidad. Comúnmente aparecen al modelar datos. A los modelos no estocásticos los llamamos **modelos determinísticos**.

Simulación

En la actualidad, los términos de **simulación matemática** y **simulación computacional** son sinónimos. De hecho, la mayoría de modelos matemáticos requiere la realización de cálculos computacionales, o experimentos, como popularmente se les llama.

Por otra parte, cualquier cálculo es posible sólo sobre la base de un modelo matemático. Existe mucho en común entre la realización de un experimento de laboratorio y un experimento computacional.

Experimento de laboratorio	Experimento computacional
Muestra	Modelo matemática
Instrumento físico	Programa o algoritmo
Calibración	Prueba del programa
Medición	Cálculos
Análisis de datos	Análisis de datos

Simulación $=$ irremplazable cuando el experimento de laboratorio no se puede realizar, o se dificulta, o es muy costoso.

Construcción de modelos

La construcción de un modelo matemático o computacional requiere de varias etapas:

- Formulación de las leyes a los objetos principales del modelo.
- Investigación del problema matemático, y sus propiedades.
- Comprobación de la coherencia del modelo con la realidad:
  - Simulaciones
  - Comprobación de hipótesis
  - Pruebas estadísticas
  - Determinación de parámetros
  - Ajuste a datos observados
- Análisis del modelo y sus posibles modificaciones:
  - Selección de variables
  - Selección de modelos
  - Comparación
- Formulación de resultados y conclusiones.

Construcción de modelos

Otro esquema de construcción de modelos (Tarásievich, 2004):

- Elaboración de un modelo cualitativo.
- Elaboración de un modelo matemático:
  - Establecer naturaleza del modelo (discreto, continuo, estocástico, determinístico)
  - Establecer factores y parámetros fundamentales, y su orden de significancia
  - Condiciones iniciales o de frontera.
- Estudio del problema (cualitativo y cuantitativo). Hallar soluciones analíticas o aproximadas.
- Elaboración de un algoritmo (en caso no sea posible una solución analítica).
- Simulaciones computacionales.
- Implementación y obtención de resultados.