BIOMECÁNICA Y MODELIZACIÓN EN MECANOBIOLOGÍA

Actualización teórica y experimental

Ricardo L. Armentano y Edmundo I. Cabrera Fischer (comps.)

EUDEBA

UTN.BA
UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL
FACULTAD REGIONAL BUENOS AIRES

FACULTAD DE INGENIERIA
Universidad de Buenos Aires

ÍNDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN

Pablo Miguel Jacovkis

1. Sistemas y modelos

Para nuestros propósitos, un sistema es un conjunto (tal vez infinito) de elementos, con atributos numéricos o no numéricos, tal que los elementos están influidos por relaciones. Esta definición es muy general, para permitir su aplicación a casi todos (o directamente todos) los posibles casos en los cuales se puede construir un modelo matemático; de hecho, al analizar algunos modelos matemáticos en detalle, como haremos a continuación, se aclarará perfectamente esta definición un tanto abstracta. Por empezar, un modelo matemático es la representación (usualmente simplificada) de un sistema por medio del lenguaje matemático. Por ejemplo, el modelo matemático del sistema solar (o, para ser más preciso, porque se pueden construir muchos otros modelos matemáticos del sistema solar más complejos, un modelo matemático simple del sistema solar) tiene como sus elementos al sol y a los planetas (y tal vez a los satélites de los planetas, y a los cometas, etc.). Sus atributos son sus diámetros, sus masas, sus posiciones y sus velocidades; todos atributos numéricos: si se quieren incluir atributos no numéricos se puede agregar que el Sol es "estrella", que Mercurio, Venus, Tierra y Marte son "planetas interiores", que el resto de los planetas son "planetas exteriores", que los satélites son "satélites", etc. Las relaciones son las ecuaciones diferenciales que rigen sus movimientos: en general en un modelo de este tipo los diámetros y los atributos no numéricos son superfluos, porque no se usan; los atributos no numéricos, porque están implícitos en las ecuaciones diferenciales o no tienen importancia, y los diámetros porque, teniendo en cuenta las distancias consideradas, son irrelevantes. Si lo que tenemos es un modelo fluvial que incluye el transporte y difusión de varios tipos de partículas suspendidas, tal vez sea importante, en los resultados, la clasificación de las partículas como "contaminantes" o "no contaminantes".

En el caso de estos ejemplos las relaciones son ecuaciones pero, en un problema de programación lineal, por ejemplo, las relaciones pueden ser desigualdades ("encontrar el máximo de tal función lineal de ciertas variables en las cuales determinadas combinaciones lineales de dichas variables son menores que o iguales a tales constantes y mayores que o iguales a cero").

Los modelos más primitivos son modelos mentales. Todo ser humano tiene modelos mentales del universo, del lugar donde vive, o de cómo suceden las cosas. Los modelos mentales pueden ser inconsistentes o incompletos, debido a que para detectar contradicciones, por ejemplo, es necesario un cuidadoso análisis que la mayoría de los seres humanos no está en condiciones de llevar (mentalmente) a cabo. Pero el *homo sapiens* tiene la habilidad de comunicarse por medio del lenguaje; así aparecen los modelos verbales, que en general tienen menos inconsistencias que los modelos mentales, porque usualmente un modelo verbal está sujeto a algún análisis, tal vez muy intuitivo. De todos modos, un modelo verbal no es robusto, en el sentido de que la información transmitida verbalmente cambia (y a veces cambia mucho) de individuo en individuo (el juego del teléfono roto es un excelente ejemplo al respecto).

Uno de los más importantes avances tecnológicos en la historia de la humanidad fue la invención de la escritura. A partir de ese momento, existieron los modelos escritos. En general un modelo escrito es más consistente y completo que un modelo verbal, porque el escritor (o escriba) tiene tiempo para pensar sobre lo que está por escribir, y también es más robusto porque, aunque un modelo escrito puede ser interpretado de maneras diferentes, esta situación suele ser poco frecuente, al menos hasta que no haya pasado mucho tiempo; por otra parte, si bien desgraciadamente muchos documentos, obras literarias y tratados científicos de la antigüedad se han perdido, otros, notablemente, se han conservado, en algunos casos (por ejemplo los Manuscritos del Mar Muerto) muy bien. Pero la verdadera revolución en "modelización" se produjo cuando se empezaron a formular los modelos matemáticos y físicos.

Un modelo matemático es un modelo que emplea símbolos matemáticos y usa teorías matemáticas. Un modelo físico es una construcción física que representa algún proceso físico que queremos estudiar. Los elementos de la construcción física pueden ser exactamente los elementos del proceso en el cual estamos interesados, o pueden ser diferentes, y debe encontrarse alguna correspondencia entre el comportamiento de nuestro modelo y el comportamiento del proceso real que estamos estudiando.

Cuando, hace más de sesenta años, aparecieron las computadoras, los modelos matemáticos comenzaron a ser cada vez más complejos y detallados. Dado que uno genera un modelo para computar algún resultado, eso significa que tal y tal elemento se comportan de esta o aquella manera, y antes de las computadoras solamente se podían explotar modelos muy simples, en su mayoría lineales (era extraordinariamente tedioso resolver un sistema de ecuaciones lineales que incluyera una matriz de 10 por 10). Los modelos matemáticos son en general más baratos que los modelos físicos, y se implementan mucho más rápidamente: por ejemplo, un modelo matemático de un río como el Paraná puede prepararse con gran velocidad y también puede muy rápidamente transformarse en un modelo matemático del río Uruguay, mientras que para preparar un modelo físico del río Paraná en el Instituto Nacional del Agua de Argentina hay que fabricar una reproducción cuidadosa del lecho del río (a menor escala, por supuesto) y para transformar este modelo en un modelo del río Uruguay lo que hay que hacer es prácticamente destruir el modelo anterior y construir uno nuevo. Sin embargo, los modelos físicos continúan siendo extremadamente importantes por dos razones fundamentales: por un lado, a la larga todos los modelos matemáticos (al menos al principio de su uso) tienen que ser comparados –si es posible– con lo que pasa efectivamente en la realidad (o sea: nunca nos podemos conformar con una elucubración matemática, por más seguros que estemos de ella, hasta no cotejarla con la realidad); por otro lado, existen unos cuantos fenómenos físicos (más de los que en general se cree, incluso en física clásica) que no son todavía lo suficientemente conocidos como para ser representados por ecuaciones y desigualdades matemáticas, a menos que uno emplee relaciones empíricas (que por supuesto son extremadamente convenientes, pero no necesariamente ayudan cuando uno está tratando de entender el correspondiente complejo proceso físico). Por ejemplo, el fenómeno de turbulencia no se conoce todavía suficientemente, y no hay ecuaciones conceptuales que representen exactamente el ciclo hidrológico, es decir, cómo la lluvia en una cuenca hídrica se transforma en caudal en un río de dicha cuenca.

2. Modelos matemáticos

Comencemos tomando un modelo muy sencillo, a saber, un modelo discreto que simula el crecimiento de una población en ausencia de guerras y restricciones naturales tales como falta de tierras o de alimentos y, aparte, sin inmigración ni emigración. Tal modelo puede escribirse como

$$P_{n+1}=P_n(1+\alpha), \tag{1}$$

donde P_n indica la población al comienzo del período n (por ejemplo, al comienzo del año n) y α es la tasa de crecimiento de la población. Aunque sepamos el valor de α, la ecuación (1) no alcanza para conocer completamente la evolución de la población. Y no alcanza porque necesitamos algo más: necesitamos las *condiciones iniciales* (en este caso, una sola condición inicial), o sea el valor de la población en el período inicial, que podemos indicar, sin pérdida de generalidad, como el correspondiente a $n = 0$. Es decir, necesitamos también una ecuación

$$P_0=a, \tag{2}$$

donde a es un número real (positivo) que indica el tamaño de la población al comienzo de nuestros cálculos. De hecho, este es un modelo con sólo una variable, P, pero el estado del sistema representado por el modelo en cada período se indica por el valor de todas sus variables (en este caso, una) en ese período (indicado con el subíndice n en el ejemplo) y el estado inicial tiene que conocerse, es decir, los valores de todas las variables en el instante inicial tienen que prescribirse.

Esta es una característica de todos los modelos que cambian con el tiempo, sea en un número discreto de instantes, como en este modelo sencillo, sea en un continuo de instantes.[1] Los modelos que varían con

1. De todos modos, desde un punto de vista práctico, el estado de un modelo continuo debe ser computado solamente en un número finito de instantes, de modo que siempre hay que adoptar algún tipo de "discretización". Análogamente, en un modelo discreto, desde el punto de vista teórico podemos pensar en infinitos instantes, pero en la práctica nos tenemos que contentar con un número finito de resultados.

el tiempo se llaman modelos de evolución, o transientes, o dinámicos, o impermanentes. En esta clase de modelos, además de las ecuaciones –o, más generalmente, de las relaciones– que gobiernan su comportamiento, algunos datos son *siempre* necesarios: las condiciones iniciales. Por ejemplo, en un modelo más complejo, la ecuación del calor unidimensional (la clásica ecuación parabólica en derivadas parciales), que representa la conducción del calor en una barra infinita unidimensional, a saber

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\sigma^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

donde $u=u(x,t)$ indica la temperatura en la posición x en el instante t, y σ^2 es la difusividad térmica, la condición inicial es $u(x,0) = u_0(x)$, donde 0 es una función conocida. Concretamente, los datos necesarios son infinitos (teóricamente, deben suministrarse los valores para todo x, $-\infty < x < \infty$).

El problema con los modelos (determinísticos) de evolución cuyas datos conocidos son solamente las condiciones iniciales (y los parámetros –sobre los cuales se discutirá en la subsección 2.1– como σ^2 en la ecuación del calor y la tasa de crecimiento α en el modelo poblacional) es que, si el modelo representa el proceso físico, todo lo que podemos hacer es predecir el estado del modelo en el futuro: no podemos "modificar" este futuro, en el sentido de que el futuro está completamente determinado por las ecuaciones y desigualdades del modelo y por las condiciones iniciales.[2] Ahora bien, en lo posible queremos no solamente *predecir* sino también *controlar*, es decir, tomar medida para que en algún instante del futuro el estado del sistema sea un estado que nos

2. De hecho, eso es exactamente lo que Laplace tenía en mente cuando escribió su famosa frase "podemos pensar el estado presente del universo como el efecto de su estado anterior y la causa de lo que vendrá. Una inteligencia que, en un instante dado, conociera todas las fuerzas de las cuales la naturaleza está animada y la posición respectiva de los seres que la componen, si por añadidura fuera lo suficientemente poderosa como para analizar esos datos, incluiría en la misma fórmula los movimientos de los más grandes cuerpos del universo y de los del más liviano átomo; nada sería incierto para ella, y el futuro, como el pasado, estarían presentes ante sus ojos" (Laplace, 1814). Las ecuaciones de movimiento requieren como condiciones iniciales la posición y la velocidad de todos los elementos del sistema. Como no se incluyen condiciones de contorno –sobre las cuales se discutirá en seguida–, las posiciones y velocidades iniciales determinan las futuras posiciones y velocidades. De hecho, como la mecánica clásica es reversible, la flecha del tiempo no importa, y podríamos –al menos teóricamente– conocer no sólo el futuro sino también el pasado.

satisfaga, o al menos que esté tan cerca como sea posible de un estado que nos satisfaga. Para esta clase de "control" necesitamos también otros datos. Por ejemplo, la evolución de la población puede ser modificada por medio de la inmigración o de la emigración. Si representamos con la variable n la inmigración o la emigración del tiempo n al tiempo n+1 (inmigración como valor positivo, emigración como valor negativo, algebraicamente hablando), la ecuación (1) se transforma en

$$P_{n+1}=P_n(1+\alpha)+I_n. \tag{3}$$

Por supuesto, la existencia del dato In no significa que en la práctica haya un "control", es decir, no siempre podemos cambiar el valor de I para tener, después de un cierto período simluado, los resultados que queremos. Pero a veces sí podemos.

En nuestro ejemplo con una ecuación diferencial parabólica este "control" está disponible si en lugar de tener una barra infinita tenemos una finita con extremos en los puntos a y b, es decir, los puntos x satisfacen $a \leq x \leq b$, y entonces el problema debería formularse de la siguiente manera:

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\sigma^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{4}$$

$$u(x,0)=u_0(x), \tag{5}$$

$$u(a,t)=u_L(t), \quad u(b,t)=u_R(t). \tag{6}$$

En (6) u_L y u_R son las condiciones de contorno de la ecuación diferencial en derivadas parciales (4) con condiciones iniciales (5) (la teoría de la ecuación del calor muestra –o mejor dicho demuestra– que para una barra finita esas condiciones de contorno son admisibles). Tal vez podemos controlar L y R, tal vez no. Pero es obvio que, cuando se introducen condiciones de contorno en el problema, los resultados en el futuro no están completamente determinados por el estado del sistema en el instante inicial. Cuando se trabaja con ecuaciones diferenciales en derivadas parciales es usual decir que un problema con condiciones iniciales, pero sin condiciones de contorno, es un problema de valores iniciales, o un problema de Cauchy, y un problema que tiene tanto condiciones iniciales como de contorno es un problema mixto de condiciones iniciales y de contorno.[3]

2.1. Parámetros

Esto significa que siempre necesitamos como datos (si el modelo evoluciona con el tiempo) las condiciones iniciales; a veces necesitamos también algunos datos que representan influencias externas sobre el modelo a lo largo del tiempo (por ejemplo, las condiciones de contorno de las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales) y finalmente necesitamos una clase de datos distinta: los parámetros, como α en la ecuación (1) y σ^2 en la ecuación (4). En general, los parámetros son constantes, o cambian rara vez, durante el tiempo de simulación, y a menudo uno de los más importantes problemas que uno tiene para implementar un modelo útil es tener los parámetros correctos.[4] A veces uno puede medir los parámetros (o encontrar sus valores buscando en tablas conocidas o en bibliografía) y a veces no. Cuando uno no puede medir los parámetros, es necesario ajustarlos (o calibrarlos), es decir, obtener valores de los parámetros tan cercanos a los verdaderos (desconocidos) como sea posible. Volveremos sobre este tema más adelante.

2.2 Problemas estacionarios

Algunos modelos no representan problemas de evolución, es decir, el tiempo no figura como variable. En esos casos decimos que los modelos son estacionarios o permanentes. Muchos modelos de

3. Observemos en este punto una diferencia entre la ecuación del calor (que es la ecuación en derivadas parciales parabólica lineal homogénea más simple posible) y las ecuaciones de movimiento en las cuales estaba pensando Laplace: para la ecuación del calor, la flecha del tiempo *importa*. Podemos predecir el futuro, pero no calcular el pasado, y es interesante comprobar que esto está indicado por el hecho de que el parámetro *debe* ser positivo.

4. A veces, según el valor de un parámetro un modelo se comporta de maneras completamente distintas, y es importante saber qué valores de un parámetro son los límites entre un comportamiento y otro. No discutiremos este fenómeno en este capítulo.

ingeniería civil son estacionarios, dado que los ingenieros (y la gente en general) prefieren túneles que no cambian con el tiempo, puentes que no cambian con el tiempo, etc. Las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales elípticas rigen típicamente el comportamiento de fenómenos estacionarios. La más sencilla ecuación elíptica lineal homogénea (en tres dimensiones) puede escribirse

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}=0, \qquad (7)$$

donde $u=u(x,y,z)$ es una función de tres variables en un dominio tridimensional Ω. En este caso, los datos los suministran las condiciones de contorno (las condiciones iniciales no son ni posibles ni necesarias, dado que el proceso no cambia con el tiempo), por ejemplo

$$u(x,y,z)=g(x,y,z) \text{ sobre la frontera } \partial\Omega \text{ de } \Omega. \qquad (8)$$

con g función conocida.

La ecuación (7) se conoce como ecuación de Laplace. Si en lugar de ser homogéneo el lado de la derecha fuera diferente de cero, por ejemplo

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}=f(x,y,z), \qquad (9)$$

la función (conocida) $f(x,y,z)$ agrega datos adicionales, y la ecuación (9) se denomina ecuación de Poisson. Por supuesto podemos incluir coeficientes que multiplican cada término, incluyendo más términos, etc., y entonces los parámetros adicionales tiene que ser medidos o ajustados. La condición de contorno (8) se denomina condición de Dirichlet, y por supuesto hay otros tipos de condiciones de contorno.

2.3 Modelos determinísticos y estocásticos

Todos esos modelos, de evolución o estacionarios, son modelos determinísticos, en el sentido de que suponiendo que las ecuaciones representan exactamente el fenómeno bajo estudio, que podemos llevar a cabo todas las mediciones con la precisión requerido, y que si los errores originados en los cálculos con un número finito de decimales de números que contienen un número infinito de dígitos están acotados satisfactoriamente, obtendremos el resultado exacto (más menos, por supuesto, un error aceptable): en un modelo de evolución, por ejemplo, deberíamos obtener como resultado qué sucedería, con esos parámetros, esas condiciones inciales, y esas condiciones de contorno, en el instante final T del tiempo de simulación. Pero algunos modelos muy importantes son modelos estocásticos, en el sentido de que el modelo deberá reflejar una situación real en la que el estado del sistema cambia en forma azarosa. Por ejemplo, un modelo de colas de espera: el sistema consiste de un empleado que está ocupado atendiendo a la primera persona en una cola, hay otra gente esperando en la cola, y tanto el tiempo de atención del empleado al cliente como el tiempo entre llegadas de sucesivos clientes a la cola son aleatorios. Y queremos modelizar este proceso.

Aquí tenemos dos problemas distintos: por un lado, la computadora es una máquina determinística: uno espera que, si uno corre un programa en su computadora hoy, un día frío y húmedo, con un cierto conjunto de datos, y mañana, día caluroso y seco, se corre el programa con exactamente el mismo conjunto de datos, el resultado debería ser el mismo. Uno se pondría extremadamente nervioso si el resultado fuera diferente. ¿Cómo podemos representar, con una máquina determinística, una situación que incluye aleatoriedad? Y, por otra parte, si el resultado es aleatorio, suponiendo que el primer problema se soluciona, ¿qué significa el resultado? El resultado podría haber sido completamente diferente, porque se han incluido variables aleatorias en el modelo.

No nos detendremos en modelos estocásticos en este capítulo, pero podemos decir que el primer problema se resuelve usando números *pseudoaleatorios*, esto es, números generados determinísticamente pero tales que un estadístico profesional no puede diferenciarlos de números auténticamente aleatorios. El segundo problema se resuelve simulando muchas instancias del proceso bajo estudio, de modo que podamos coleccionar la información relevante necesaria. De paso, comentemos que usualmente los modelos estocásticos son de evolución.

Introduzcamos ahora algunos modelos simples, que nos servirán para hacer comentarios sobre el proceso de modelización.

3 Dinámica poblacional

El modelo demográfico más simple posible (o, si estamos hablando de seres vivientes en general, no necesariamente humanos, el modelo más simple posible de dinámica poblacional) es el modelo (1), (2) o, si incluimos inmigración / emigración, el modelo (3), (2). Por supuesto este modelo no es sustentable durante un período prolongado: a la larga, toda la superficie de la Tierra terminaría ocupada por seres humanos, sin espacio para moverse de un lugar a otro. Pero para un período corto el modelo puede ser perfectamente realista. Hemos mencionado que el término I_n puede ser considerado un "control", en el sentido de que por medio de esta variable alguien puede tratar de obtener determinados resultados después de algunos años. De hecho, la variable ha sido (o ha intentado ser) un control. Por ejemplo, varios países (los países de inmigración: Estados Unidos, Canadá, Argentina, Uruguay, y otros) tuvieron durante el siglo XIX una política activamente favorable a la inmigración (tal vez selectiva: la Constitución Argentina, por ejemplo, indica en uno de sus artículos que la Argentina está interesada en la inmigración *europea*) y otros países (Italia, España) no tenían problemas en que algunos de sus habitantes lo abandonaran, como un mecanismo para reducir tensiones sociales. No siempre el control funcionó exactamente como estaba planeado: Gran Bretaña estaba interesada en la emigración hacia sus colonias "blancas" (Canadá, Australia, Nueva Zelandia) y sin embargo muchas personas emigraron de Gran Bretaña a Estados Unidos.

Por supuesto, el control puede ser el propio parámetro α: una eficiente política sanitaria puede incrementar su valor, de modo que la población crezca más rápidamente, y por otra parte una política de control de la natalidad (como la china) puede reducir el valor de α.

Por último, notemos que es obvio que se puede construir una versión continua (exponencial) de este modelo: si en vez de un intervalo temporal igual a uno tenemos un intervalo temporal arbitrario Δt, y seguimos considerando a α como la tasa de crecimiento por unidad de tiempo, la ecuación (1) se convierte en

$$\frac{P(t+\Delta t)-P(t)}{\Delta t}=\alpha P(t)$$

y cuando Δt tiende a cero llegamos a la ecuación diferencial ordinaria

$$\frac{dP}{dt}=\alpha P(t)$$

con condición inicial $P(0)= P_0$. La solución de esta ecuación es por supuesto $P(t)=P_0e^{\alpha t}$. La "condición de control" sería ahora el flujo inmigratorio o emigratorio "instantáneo" $I(t)$ –en el caso en que lo tomemos en cuenta– de modo que podríamos escribir

$$P(t)=P_0e^{\alpha t}+I(t). \tag{10}$$

La ecuación (10) es simplemente la versión continua –y la ecuación (3) la versión discreta– de este modelo elemental de población.

De todos modos, a menudo este modelo es demasiado simple. Por un lado, para períodos prolongados no es realista, dado que la población no puede crecer indefinidamente. Por otro lado, en muchas ocasiones necesitamos un modelo más detallado, que incluya, por ejemplo, cómo se distribuye la población según su edad, su ubicación geográfica o su clase social.

Para tener en cuenta el primer problema (el segundo problema no lo consideraremos), el modelo logístico puede ser una buena aproximación. La idea es que los recursos alcanzan sólo para una población limitada, por lo cual la tasa de crecimiento de la población, en vez de ser proporcional a la población (como cuando la población crece exponencialmente) debería ser proporcional a la población, pero multiplicada por un factor que disminuye con la población. La función decreciente posible más sencilla es una función lineal, de modo que la ecuación logística continua es

$$\frac{dP}{dt}=P(t)(a-bP(t)), \tag{11}$$

donde, por supuesto, la condición inicial es $P(0)= P_0$, con P_0 pequeño.

Análogamente, la ecuación logística discreta es

$$P_{n+1}=P_n(1+a(1-\frac{P_n}{K})) \tag{12}$$

o (si consideramos un intervalo temporal distinto de la unidad)

$$\frac{P_{t+\Delta t}-P_t}{\Delta t}=aP_t(1-\frac{P_t}{K}), \tag{13}$$

y $b=\frac{a}{K}$.

3.1 La ecuación logística continua

La ecuación logística continua fue formulada por primera vez por P.-F. Verhulst (Verhulst, 1844), y está regida por la ecuación (11), que es una ecuación diferencial ordinaria no lineal de primer orden, con la condición inicial $P(0)=P_0$. Se puede demostrar que esta ecuación tiene una solución explícita –ver por ejemplo (Haberman, 1998)–, a saber

$$P(t)=\frac{a/b}{1+(\frac{a-bP_0}{bP_0})e^{-at}},$$

o

$$P(t)=\frac{a/b}{1+(\frac{a-bP_0}{bP_0})e^{-at}},$$

y entonces se ve fácilmente que

$$\lim_{t\to\infty}P(t)=\frac{a}{b}=K,$$

y que si $P(0)<K$ entonces $P(t)$ crece siempre, y es siempre menor que K (si $P(t)>K$ entonces $P(t)$ decrece siempre y es siempre mayor que a/b, aunque este caso no nos interesa). De hecho, podemos deducir esta propiedad analizando la ecuación (11) directamente, sin conocer su solución explícita.

Aquí hay dos parámetros que es necesario ajustar, a saber, a y b (o K). En casos simples, como los regidos por las ecuaciones (1) o

(10), que tienen pocos parámetros, probablemente la mejor manera de llevar a cabo el ajuste sea aplicar directamente, por ejemplo, mínimos cuadrados: tenemos los datos registrados para varios instantes $t_{i_1}, t_{i_2}, \ldots, t_{i_n}$; también sabemos cuál es la población inicial P_0. Entonces buscamos el mínimo

$$\min_{\alpha} \sum_{i=1}^{N} (\ln P_{i_j} - \ln P_0 - \alpha t_{i_j})^2$$

para el caso exponencial.[5]

El caso logístico es más complicado: el problema se puede atacar desde diferentes ángulos. Por ejemplo, la curva que se obtiene en el caso logístico es una sigmoide, es decir, tiene forma de S: cerca del instante inicial se parece a una exponencial, y entonces podemos tratar de usar sólo valores cercanos al tiempo inicial para ajustar a, y de esta forma aproximar K para el resto de los valores. O podemos "discretizar" la ecuación, y usar la discretización. De todas maneras, este ejemplo muestra que ajustar un modelo no es necesariamente fácil, no sólo desde el punto de vista técnico: de hecho, un ajuste consiste en esencia en resolver un problema inverso, o sea un problema en el cual, sabiendo el resultado, queremos calcular los datos, o algún dato, y los problemas inversos están mal condicionados en el sentido de Hadamard.[6] A menudo el ajuste se obtiene empíricamente, sobre

5. De paso, podemos comentar que si bien el venerable método de mínimos cuadrados es una técnica muy usada para ajustar modelos, no es necesariamente la mejor: por un lado, tiene muchas propiedades teóricas "buenas" y, además, podemos obtener un conjunto mínimo de valores usando herramientas del análisis matemático: el valor extremo estará (si existe en el interior de un dominio) en un punto en el cual la derivada sea cero; por otra parte, el método no es robusto, en el sentido de que la existencia de un valor fuera de rango (un "outlier") –sea porque tal valor existe o porque se midió mal– puede cambiar notoriamente el resultado. Mínimos cuadrados es esencialmente una minimización en el espacio ; si queremos minimizar en (es decir, si queremos minimizar la suma de los valores absolutos en vez de la suma de los cuadrados) el problema es de desviaciones mínimas absolutas y se puede enfocar desde el punto de vista de un problema de programación lineal. (Ver por ejemplo, Barrodale y Roberts, 1973).

6. Sin formalizar demasiado, un problema bien condicionado es un problema en el cual
1. Existe una solución;
2. La solución es única;
3. La solución depende continuamente de los datos del problema.
Si un problema no es bien condicionado se considera mal condicionado. Por supuesto, para formalizar esta definición necesitamos una topología que le dé sentido al término "continuamente".

todo cuando hay muchos parámetros: por ejemplo, si uno está tratando de modelizar un tramo de un río con un modelo hidrodinámico, probablemente el ajuste se lleve a cabo por medio de un enfoque tipo "prueba y error", en el cual la experiencia del modelista es fundamental. Por supuesto, también se pueden encarar enfoques basados en matemática teórica, que son muy interesantes y plantean desafíos intelectuales no triviales (Groetsch, 1993).

3.2 La ecuación logística discreta

En este caso, lo que tenemos en general –ecuación (12) o (13)– es

$$\frac{P_{t+\Delta t}-P_t}{\Delta t}=aP_t(1-\frac{P_t}{K}).$$

Se puede observar que acá también el límite de la población es K, tanto para poblaciones que inicialmente están por encima de K como para las que inicialmente están por debajo. Si el intervalo temporal es unitario, es decir, si Δt=1, tenemos

$$P_{t+1}-P_t=aP_t(1-\frac{P_t}{K}),$$

es decir,

$$P_{t+1}-P_t=P_t(a-bP_t),$$

con $b=\frac{a}{K}$, y entonces

$$P_{t+1}=P_t(1+a-bP_t)=P_t(\gamma-bl$$

con γ=1+a. . Sea ahora x_t tal que $P_t=\frac{\gamma}{b}x_t$. Entonces

$$\frac{\gamma}{b}x_{t+1}=\frac{\gamma}{b}x_t(\gamma-\gamma x_t),$$

$x_{t+1}=\gamma x_t(1-x_t)$.

Si 0 y 0≤γ≤4, *t*siempre. En un artículo memorable (May, 1976) –ver también Li y Yorke (1975)– Robert M. May mostró el sorprendente comportamiento de esta ecuación, según sea el valor del parámetro γ. Concretamente, se puede probar que, si excluimos del análisis los valores iniciales 0 y 0, para los cuales *i*0 siempre, y 0, para el cual *t* si *t*≥1, entonces

1. Si γ≤3, la iteración converge (por supuesto, si γ≤1 converge a cero; si 1<γ<3 el límite es $1-\frac{1}{\gamma}$);
2. De 3 en adelante, *t* se aproximará, oscilando, a dos valores cuando x_t tiende a ∞ hasta aproximadamente 3.45 (3.44948...). Entonces –incrementando γ–x_t se aproximará, oscilando, a cuatro valores, luego a ocho valores, luego a dieciséis valores ... , hasta alrededor de 3.57 (3.56994...).
3. En ese momento aparece el caos (excepto para algunos rangos aislados de λ donde el comportamiento no es caótico). Es decir, si se cambia ligeramente el valor inicial x_0 el comportamiento de la iteración cambia en forma impresionante. Además, no se puede observar ninguna oscilación con período finito.

La tasa entre dos duplicaciones consecutivas tiende a una constante (la constante de Feigenbaum). De este modo se pueden modelizar, con la ecuación logística discreta, situaciones en las cuales una población tiene un comportamiento caótico. Como May dice en su artículo "... fluctuaciones de una población animal que son aparentemente erráticas en los datos censales no tienen que ser necesariamente representativas de extravagancias de un medio ambiente impredecible o errores de muestreo: pueden derivar en forma perfectamente normal de un crecimiento poblacional rígidamente determinista ...".

3.3 Retraso

Si el retraso entre el instante en que es concebido un descendiente y el instante en que pasa a ser fértil es significativo (en el sentido de que la población total puede haber cambiado) tanto el modelo exponencial como el logístico (en sus versiones discreta y continua) tienen que ser reemplazados por un modelo con un tiempo de retraso. El modelo continuo general pasa a ser

$$\frac{dP(t)}{dt}=f(P(t-t_d)) \tag{14}$$

donde d es el retraso, y f una función general cualquiera. En el caso exponencial (14) pasa a ser

$$\frac{dP(t)}{dt}=\alpha P(t-t_d) \tag{15}$$

donde ahora α es una tasa de crecimiento constante. Si la tasa de crecimiento $R(P)$ cambia con la población, (15) se transforma en

$$\frac{dP(t)}{dt}=\alpha P(t-t_d) \tag{16}$$

En particular, la ecuación logística con retraso es

$$\frac{1}{P(t)}\frac{dP(t)}{dt}=R(P(t-t_d)). \tag{17}$$

Las ecuaciones del tipo de la (14), (15), (16) o (17) se llaman ecuaciones diferenciales con retraso, y muchas veces son considerablemente más difíciles de resolver que las ecuaciones diferenciales ordinarias. Más concretamente, si tenemos en cuenta el retraso la solución puede oscilar alrededor del punto de equilibrio $P(t)=a/b$ o, lo que es peor, desestabilizarse. No analizaremos acá este fenómeno, pero nos sirve de advertencia acerca, por un lado, de que al introducir cambios (incluso complicaciones que parecen insignificantes) se puede llegar a tener problemas si no se trabaja con cuidado, y, por otra parte, de que un buen análisis teórico puede ahorrar mucho tiempo de experimentación numérica.

4. Modelos de tránsito

Ahora cambiamos de modelos discretos algebraicos a modelos regidos por ecuaciones diferenciales ordinarias. En un trabajo brillante, dos distinguidos especialistas en mecánica de fluidos, James Lighthill y Gerald B. Whitham, formularon el modelo de tránsito como, en cierto sentido, un modelo de dinámica de fluidos, donde los vehículos (automóviles, autobuses, camiones) se asimilaban a partículas de un fluido (Lighthill y Whitham, 1955b).[7] Independientemente de Lighthill y Whitham, P. I. Richards (Richards, 1956) modelizó también el flujo de tránsito por medio de un enfoque de dinámica de fluidos; publicó sus resultados en una revista científica especializada en ese tipo de problemas. A partir de entonces, fue apareciendo una abundante bibliografía; aquí seguimos sobre todo el enfoque de R. Haberman (Haberman, 1998). No es extraño que la teoría apareciera en la década de 1950: después de la Segunda Guerra Mundial se produjo el acceso a la propiedad de automóviles de las clases medias de los países de Europa Occidental, hasta entonces restringido a las clases medias de Estados Unidos, lo cual a menudo originó problemas de tránsito conocidos (embotellamientos, accidentes, etc.) que había que resolver.

El modelo que presentaremos es muy simple, y nos servirá para ver cómo uno lo va planteando: consideramos una carretera con un carril, y no permitimos el sobrepaso, o sea el modelo puede funcionar razonablemente bien en puentes y túneles, donde en muchos países no está permitido sobrepasar ningún vehículo. Además, consideraremos una longitud media L del vehículo (cuando eliminamos estas restricciones los modelos son más complejos y atractivos por su dificultad, por supuesto, pero en general es útil comenzar con una teoría simple –el "modelo de juguete"– e ir incrementando –cuando es posible– su complejidad). Tomando individualmente a los vehículos, decimos que la posición del vehículo i en el tiempo t es $x_i(t)$, su velocidad es $dx_i(t)/dt$ y su aceleración es $d^2x_i(t)/dt^2$.

Consideramos un corto intervalo de tiempo Δt entre los tiempos t y $t+\Delta t$, y contamos los vehículos que pasan al costado de un observador ubicado en el punto x. La cantidad medida es el *flujo de tránsito* $q(x,t)$

7. Este trabajo es la segunda parte de un artículo muy importante (Lighthill y Whitham, 1955a) dedicado a analizar un modelo simplificado en dinámica de fluidos unidimensional; la comparación de ambos artículos nos permite observar las diferencias que existen entre el enfoque de dinámica de fluidos "original" y el "adaptado" para tránsito.

durante el intervalo $[t, t+\Delta t]$. Suponemos un continuo de vehículos, y fijamos una unidad de tiempo muy pequeña, cambiando convenientemente el intervalo temporal (por supuesto la cantidad q ahora no es más un entero necesariamente). Análogamente consideramos ahora una "fotografía" en el tiempo t de los vehículos entre los puntos x y $x+\Delta x$. A esta cantidad la llamamos la *densidad* de vehículos $\rho(x,t)$ en el intervalo $[x, x+\Delta x]$; de nuevo, suponemos una unidad de medida de espacio muy pequeña, y ρ no es necesariamente un entero. En algunos casos simples podemos calcular ρ directamente; por ejemplo, si consideramos vehículos de la misma longitud igualmente distribuidos en la carretera con una distancia d entre ellos. Si Δx es, digamos, un kilómetro, entonces la densidad (vehículos por kilómetro) es

$$\rho = 1/(L+d)$$

(por supuesto L y d también deberían medirse en kilómetros). Ahora bien, si todos los vehículos tienen velocidad constante u, en Δt unidades de tiempo cada vehículo habrá recorrido $u\Delta t$ kilómetros (con las correspondientes unidades de u), y entonces es fácil ver que $q = u \times \rho$. Si u no es constante, puede demostrarse (y es muy intuitivo) que si aceptamos que existe un *campo de velocidades*, o sea que en cada punto x en cada instante t suponemos que hay un vehículo "puntual" a través de x con velocidad $u(x,t)$, entonces

$$q(x,t) = u(x,t)\rho(x,t),$$

y por supuesto

$$u(x,t) = \frac{dx}{dt}.$$

Individualizando el vehículo ubicado en x en el instante t como $x(t)$, podemos escribir

$$u(x(t),t) = \frac{dx}{dt},$$

y sabiendo la posición de la "partícula" en el instante inicial 0, a saber

$$u(x(t),t)=\frac{dx}{dt},$$

tenemos una ecuación diferencial de primer orden.

4.1 Una ecuación de conservación

Tenemos ahora que obtener una ecuación de conservación. Tomemos un intervalo espacial $[x,x+\Delta x]$, y un intervalo temporal $[t, t+\Delta t]$. Sabemos que la cantidad de vehículos que ingresan (por la izquierda) al intervalo $[x, x+\Delta x]$, es decir, aproximadamente $q(x,t)\Delta t$, menos la cantidad de vehículos que egresan de dicho intervalo (por la derecha), o sea, aproximadamente) $q(x+\Delta x,t)\Delta t$, debe ser igual a la variación de la cantidad de vehículos que están "adentro" de ese intervalo entre los tiempos $t+\Delta t$ y t, o sea, aproximadamente, $(\rho\,(x,t+\Delta t)-\rho\,(x,t))\Delta x$, es decir,

$$(q(x,t)-q(x+\Delta x,t))\Delta t=(\rho\,(x,t+\Delta t)-\rho\,(x,t))\Delta x.$$

Ahora dividimos por Δx y por Δt, y hacemos tender convenientemente ambos Δt y Δx a cero, para obtener

$$-\partial q(x,t)/\partial x=\partial\rho(x,t)/\partial t\,,$$

o sea,

$$\partial\rho(x,t)/\partial t+\partial q(x,t)/\partial x=0,$$

o, tomando en cuenta que $q=u\varrho$,

$$\partial\rho(x,t)/\partial t+\partial(u(x,t)\rho(x,t))/\partial x=0. \qquad (18)$$

La ecuación de conservación dice simplemente que lo que "entra" (si no hay creación o destrucción de eso que entra) o sale o se acumula (suponiendo que lo que "entra" es más que lo que "sale"). Hay una enorme cantidad de modelos en los cuales está presente una ecuación de conservación, y en esos casos asegurarse de que el correspondiente modelo numérico también es conservativo puede ser un primer test (no el único) de confiabilidad del mismo.

Tenemos aquí la ecuación diferencial en derivadas parciales (18), y dos funciones desconocidas ρ y q, o ρ y u. Necesitamos alguna clase de "ecuación de estado" que conecte ambas ecuaciones. Si hacemos la suposición que $u=u(\rho)$ (es decir, que la velocidad depende de la densidad del flujo, lo cual parece –al menos en muchos casos– plausible,[8] tendremos entonces

$$\partial\rho(x,t)/\partial t + \partial(\bar{u}(\rho(x,t))\rho(x,t))/\partial x = 0$$

o, más generalmente,

$$\partial\rho(x,t)/\partial t + \partial(q(x,t)))/\partial x = 0. \qquad (19)$$

Si q es una función lineal de ρ, la ecuación (19) es la ecuación diferencial lineal hiperbólica más simple posible, a saber

$$\partial\rho(x,t)/\partial t + c\ \partial(\rho(x,t))/\partial x = 0, \qquad (20)$$

donde $c=dq/d\rho$. En este caso, busquemos entonces una solución sobre la recta $dx/dt=c$ de la derivada total

$$D\rho(x(t),t)/Dt. \qquad (21)$$

Tenemos

$$D\rho(x(t),t)/Dt = \partial\rho/\partial t + \partial\rho/\partial x.dx/dt = \partial\rho/\partial t + c\partial\rho/\partial x = \partial\rho/\partial t + dq/d\rho.\ \partial\rho/\partial x = 0.$$

Eso significa que, sobre la recta $dx/dt=c$, la derivada total (21) es cero. Es decir, ρ es constante sobre la recta, y por lo tanto, si 0, entonces $\rho(x,t) = \rho(x - ct,0) = \rho(x_0,0) = \rho_0(x_0)$, que conocemos porque es la condición inicial. Por consiguiente, la ecuación (20), la ecuación lineal homogénea hiperbólica más simple que hay, se resuelve fácilmente: la solución es exactamente la condición inicial transportada, al tiempo t, una distancia ct.

8. Por ejemplo, si no hay otro vehículo en la carretera, $\rho=0$, y entonces se puede alcanzar la velocidad máxima *max*: *max*, donde *max* es una cota superior técnica o legal. Por otra parte, si $\rho=\rho_{max}$, tenemos que los vehículos están "paragolpe contra paragolpe", y la velocidad es cero, $u(\rho_{max}) = 0$. Se puede construir una función decreciente entre esos valores. La construcción de esa función y su validación pueden ser parte importante del proceso de modelización.

¿Qué sucede si q es una función no lineal de ρ, a saber $dq/d\rho = c(\rho)$? Observemos de nuevo la solución sobre la curva $dx/dt=dq/d\rho = c(\rho(x(t),t))$. Gracias al teorema fundamental de ecuaciones diferenciales ordinarias, sabemos que, bajo condiciones iniciales plausibles (que suponemos) existe una solución, al menos hasta que se alcanza un cierto tiempo T. Tomamos nuevamente el diferencial total $D\rho(x(t),t)/Dt$ sobre dx/dt, y de nuevo encontramos que la derivada total es cero, de modo que la solución es una constante, como antes, así que dx/dt es una recta, como antes. Pero sabemos que para funciones no lineales las cosas son distintas que lo que son para funciones lineales, así que nos preguntamos ¿qué error hemos cometido en nuestro razonamiento?

Ninguno. *Hay* una diferencia. Antes, todas las curvas 0 diferían solamente en el punto inicial 0, y por consiguiente eran paralelas, y ahora pueden tener diferentes pendientes: las curvas son 0. Pero esto significa que dos rectas, que comienzan en 1 y 2, pueden alejarse una de la otra, o pueden cruzarse, dependiendo de los valores de sus respectivas pendientes. Si se alejan, todo está bien, no hay problemas. Pero si se cruzan, entonces la solución de (20)[9] tiene una discontinuidad, porque en el punto de intersección valores diferentes que provienen de puntos diferentes no pueden dar la misma solución. En esos casos lo que tenemos se llama un *choque*, y representa exactamente eso: un choque entre un vehículo que alcanza a otro vehículo que está más adelante pero va más despacio.

Lo que se ha obtenido es una *onda de choque*. La teoría de las ecuaciones hiperbólicas como leyes de conservación y ondas de choque es –aparte de su extraordinaria utilidad en muchas situaciones, por ejemplo en los ejemplos recién indicados– fascinante desde el punto de vista matemático, y puede ser consultada en muchos libros de texto, por ejemplo en el excelente libro de J. Smoller (1992).

Vimos entonces que podemos comenzar con una condición inicial legítima y muy "buena" (en el sentido de que sea tan derivable como se quiera) y a pesar de ello llegar a una discontinuidad. De todas maneras, el mundo no se viene abajo por culpa de esa discontinuidad: podemos continuar trabajando con la ecuación si aceptamos una definición de solución *débil*, que es un concepto muy útil en muchas situaciones. ¿Qué es exactamente una solución débil? La idea en general es que una solución débil es una solución que no necesariamente tiene todas las propiedades que tiene una solución "auténtica", y por supuesto que

9. Observemos que ahora $c=c(\varrho)$ no es más constante, así que ahora (20) es *no* lineal.

si un problema tiene una solución "auténtica" la solución es también una solución débil. Esto puede obligar a descartar algunos métodos numéricos de solución, o a usarlos resignándose a perder información. Usualmente la decisión hay que tomarla antes y puede implicar reemplazar algo sencillo y conocido por un enfoque nuevo y complicado, pero más exitoso. Un buen análisis teórico del problema bajo estudio puede advertirnos de las dificultades y evitarnos resultados incomprensibles.

5 Construcción, ajuste y operación de un modelo

En la mayoría de los casos tratados a partir de la aparición de la computadora, tenemos modelos cuyas ecuaciones no pueden resolverse analíticamente excepto en situaciones muy especiales, de modo que tienen que ser resueltas numéricamente. No siempre esto es un problema hoy en día. A veces los métodos numéricos diseñados para trabajar con estos modelos son sumamente satisfactorios, y el problema técnico no es resolver las (tal vez complicadas) ecuaciones diferenciales del modelo, sino ajustar los parámetros del mismo. Por ejemplo, en un modelo fluvial unidimensional (que calcula alturas y caudales en diversos puntos de un río) el problema es (a veces) encontrar los coeficientes de conducción, que influyen en el flujo de agua dependiendo de la geometría de la sección transversal del río, del tipo de fondo, etc. De hecho, tenemos un conjunto de parámetros: en un punto del río la sección transversal no tiene por qué ser igual a la de otro punto del río, el tipo de lecho también puede variar, y los coeficientes de conducción dependen también de las correspondientes alturas que alcanza el agua. Ahora bien, si tenemos 100 puntos de discretización, y en cada punto tenemos registrada la sección transversal para 20 valores distintos de alturas hidrométricas, en realidad necesitamos ajustar 2000 parámetros y, aunque teóricamente podemos pensar que encontrar los valores de esos parámetros que minimizan las diferencias entre los resultados de un modelo corrido con registros históricos y los valores reales de dichos registros es un problema inverso, en la práctica es más simple y más eficiente, muy a menudo, contar con un modelista experimentado que, mediante un método de prueba y error cuidadosamente diseñado obtenga los valores requeridos (incluso tal vez corriendo el modelo automáticamente varias veces). Por supuesto, el modelista debe comenzar con valores de los parámetros intuitivamente razonables; si el río es similar a otros ríos en los cuales ha trabajado, y/o la geometría es similar, y/o el caudal es similar, etc., es razonable pensar que se puede comenzar el ajuste usando valores de coeficientes de conducción ya usados en el otro río. Es posible también que el modelista necesite varios registros históricos (por ejemplo, los registros de alturas hidrométricas para un año seco, para un año ni particularmente seco ni particularmente húmedo, y para un año húmedo), para que puedan simularse muchas situaciones distintas, y puedan compararse los resultados con varios juegos de registros de datos recolectados.

Otro problema que puede existir modelizando ríos (y en muchas otras situaciones) es lo que se llama "calentamiento" (*warming-up*) del modelo. Para llevar a cabo una corrida se necesitan condiciones iniciales y de contorno. Las condiciones de contorno en general se conocen: para una corrida de ajuste, por ejemplo, uno puede usar como condición de contorno aguas arriba las alturas hidrométricas registradas en el punto aguas arriba durante un cierto período, y como condición aguas abajo las correspondientes alturas hidrométricas. Pero uno no necesariamente conoce cuál es el estado inicial del río, es decir, las alturas y caudales en todos los puntos de discretización.[10] Entonces es necesario un proceso mediante el cual, comenzando con condiciones iniciales "razonables" (razonables en el sentido de que lo sean físicamente: por ejemplo, la pendiente superficial correspondiente a una situación estacionaria), y lentamente, usando las condiciones de contorno, llevando el estado del sistema hasta que tenga los valores iniciales que debería tener (y entonces, tal vez, manteniendo esos valores durante un cierto período, para comenzar la corrida "real" en una situación estacionaria), uno puede comenzar la corrida: el modelo ya está preparado para ello. Esta es una de las diferencias fundamentales entre problemas que involucran ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (y a veces otros tipos de ecuaciones) en las cuales solamente se han prescripto condiciones iniciales –es decir, problemas de Cauchy– y problemas mixtos, con condiciones iniciales y de contorno, como este: en los problemas de Cauchy, una vez que se dan las condiciones iniciales, si el problema está bien planteado en el sentido de Hada-

10. Estamos suponiendo que el problema se resuelve numéricamente mediante diferencias finitas, es decir, reemplazando convenientemente las derivadas por cocientes incrementales en ciertos puntos, los puntos de discretización. Si se usa otro tipo de método numérico, tal vez haya ligeras modificaciones en este enfoque, pero esencialmente la idea es la misma. Este comentario vale también para el análisis de los coeficientes de conducción arriba mencionados.

mard, los resultados para el futuro están completamente determinados (despreciando por supuesto los errores numéricos) y no pueden ser modificados bajo ningún concepto; si no tenemos las condiciones iniciales reales (o condiciones iniciales suficientemente cercanas a las condiciones reales) no obtendremos nunca resultados satisfactorios. Pero en problemas mixtos con condiciones iniciales y de contorno, a menudo las condiciones de contorno "fuerzan" el problema a aproximar condiciones convenientes, y entonces podemos seguir.

Tanto en los modelos continuos como en los discretos existen reglas generales que, cuando es posible, se deben seguir: formular el problema y tratar de "traducirlo" a un modelo matemático. El modelo matemático no tiene que ser más complejo que lo estrictamente necesario: no tiene sentido preparar un modelo muy detallado que requiere muchas clases de datos diferentes si no se es capaz de recolectar (o saber que se puede recolectar en un futuro cercano) o imaginar los datos. El modelo también tiene que tener en cuenta los recursos computacionales disponibles: aunque hoy en día se pueden usar computadoras tremendamente poderosas y agrupamientos de computadoras (*clusters*), algunos problemas son realmente "grandes", por ejemplo algunos modelos meteorológicos tridimensionales; no hay que preparar nunca un modelo para el cual uno no pueda encontrar una computadora en la cual correrlo. A veces la programación del modelo fuerza a los modelistas a reanalizar las ecuaciones, o incluso a reanalizar las suposiciones. De todas maneras, con el modelo programado e implementado, después de muchas corridas con datos artificiales o especiales, uno está en condiciones de ajustar el modelo. Después del ajuste, es necesaria la validación: ¿cómo sabemos si los parámetros ajustados son (más o menos) los parámetros *reales* y no parámetros que "fuerzan" al modelo a aproximar la situación real que hemos usado para el ajuste pero no otras situaciones? Si es posible,[11] es necesario validar el modelo con otras situaciones reales no utilizadas para el ajuste: para que el modelo pueda considerarse bien ajustado, las diferencias (en la norma elegida) entre los resultados simulados y los valores reales deben ser razonablemente similares a las diferencias obtenidas en las corridas usadas para el ajuste. Cuando el modelo tiene muchos parámetros, es posible que, según los datos de entrada, algunos parámetros no estén involucrados en los cálculos; por consiguiente, es conveniente que las corridas de validación aseguren que todos los pa-

11. A veces uno no tiene tiempo, o no tiene otros datos históricos, como para validar el modelo.

rámetros participen de los cálculos (por supuesto esto significa que es importante que las corridas de ajuste "recorran" todos los parámetros). Pero sólo después de que el modelo haya sido suficientemente ajustado[12] podemos empezar a aprovecharlo bien.

Si el modelo está listo para los experimentos numéricos que queremos llevar a cabo con él, entonces puede ser una herramienta poderosa para evaluar la factibilidad o las consecuencias –a largo plazo– de diferentes alternativas.[13] Naturalmente, lo que nos ofrece el modelo es un menú de escenarios: sería muy peligroso creer que uno, y sólo uno, es el resultado asociado con una alternativa, porque existen siempre "condiciones de contorno" que no controlamos. Para el modelo de tránsito, por ejemplo, es posible evaluar cuán conveniente puede ser la construcción de un nuevo túnel o puente en una ciudad.

Es siempre importante saber qué es lo que el modelo *no* puede hacer: por ejemplo, un modelo fluvial que use un método en diferencias finitas implícito para resolver numéricamente las ecuaciones de un río no es apto para modelizar la rotura brusca de un dique, porque en este caso seguro que hay que analizar una onda de choque, y los métodos en diferencias finitas implícitos en general "suavizan" la onda de choque.

A veces, el modelista es una persona, con experiencia en el problema, en su formulación matemática y en su programación. Pero en general (sobre todo si el problema a modelizar es complejo) la modelización es llevada a cabo por un grupo de trabajo interdisciplinario. Cada científico o profesional tiene que ser capaz de entender el lenguaje y el tipo de enfoque de los demás; esto no solamente es importante y útil para el éxito de la modelización, sino que es tremendamente enriquecedor para cada participante.

Por último, es interesante observar que, como herramienta de modelización, la matemática aplicada puede a veces comportarse como una ciencia experimental, en el sentido de que sus criterios comienzan a parecerse a los criterios de los físicos y de los ingenieros. A veces

12. Por supuesto no siempre el ajuste termina siendo satisfactorio. De todos modos, cuando se usa un modelo es importante saber cuán bien representa el fenómeno modelizado, para evitar extraer conclusiones que no estén suficientemente fundamentadas.

13. Cuán lejano puede ser el horizonte (el "largo plazo") depende, por supuesto, del tipo de modelo. Para un modelo lineal, el horizonte puede ser razonablemente distante, porque los modelos lineales son estables. Pero un meteorólogo que está pronosticando el tiempo debe quedarse satisfecho con un horizonte de apenas unos días en el futuro porque, como mostró E. N. Lorenz (Lorenz, 1963), el problema está mal condicionado (peor aún: es caótico).

es extremadamente conveniente elaborar una estrategia cuidadosa y eficiente de diseño de experimentos. En Jacovkis (2005) puede consultarse un análisis de este tipo de enfoque de matemática aplicada.

Bibliografía

Barrodale, I. y Roberts F. D. K.: "An improved algorithm for discrete 1 linear approximation", en SIAM Journal on Numerical Analysis 10(5), 1973, pp. 839-848.

Groetsch, C. W.: *Inverse Problems in the Mathematical Sciences,* Vieweb, Braunschweig, 1993.

Haberman, R.: *Mathematical Models,* SIAM, Filadelfia, 1998.

Jacovkis, P. M.: "Computadoras, modelización matemática y ciencia experimental", en *Revista Iberoamericana de Ciencia, Tecnología y Sociedad,* 2, N° 5, 2005, pp. 51-63.

Laplace, P.S.: *Essai Philosophique sur les Probabilités,* Mme. Ve. Courcier, París, 1814. Hay traducción al castellano: *Ensayo Filosófico sobre las Probabilidades,* Buenos Aires, Espasa-Calpe, 1947.

Li, T.Y. y Yorke, J. A.: "Period three implies chaos", en *The American Mathematical Monthly,* 82 (10), 1975, pp. 985-992.

Lighthill, M. J. y Whitham, G. B.: "On kinematic waves I. Flood movement in long rivers" en *Proceedings Royal Society A,* 1955a, 229, pp. 281-316.

Lighthill, M. J. y Whitham, G. B.: "On kinematic waves II. A theory of traffic flows on long crowded roads" en *Proceedings Royal Society A,* 1955b, pp. 229, pp. 317-345.

Lorenz, E. N.: "Deterministic nonperiodic flow", en *Journal of the Atmospheric Sciences,* 1963, 20, pp. 130-141.

May, R M.: "Simple mathematical models with very complicated dynamics", en *Nature,* 1976, 261, pp. 459-467.

Richards, P. I.: "Shock waves on the highway" en *Operations Research,* 4, 1956, pp. 42-51.

Smoller, J.: *Shock Waves and Reaction-Diffusion Equations,* Nueva York, Springer-Verlag, 1983.

Verhulst, P.F.: "Recherches mathématiques sur la loi d'accroissement de la population" en *Nouveaux Mémoires de l'Académie Royale des Sciences et Belles-Lettres de Bruxelles,* 18, 1844, pp. 1-42.