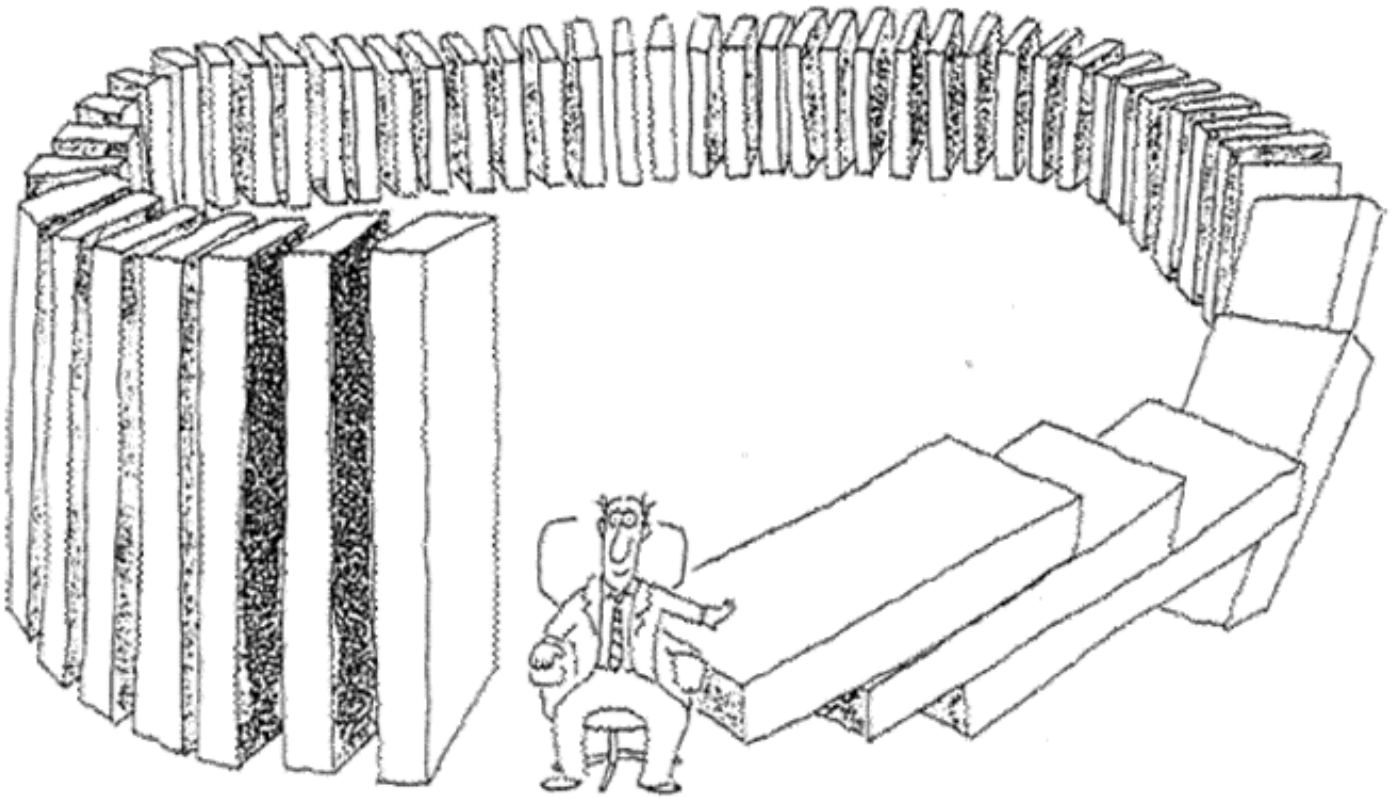
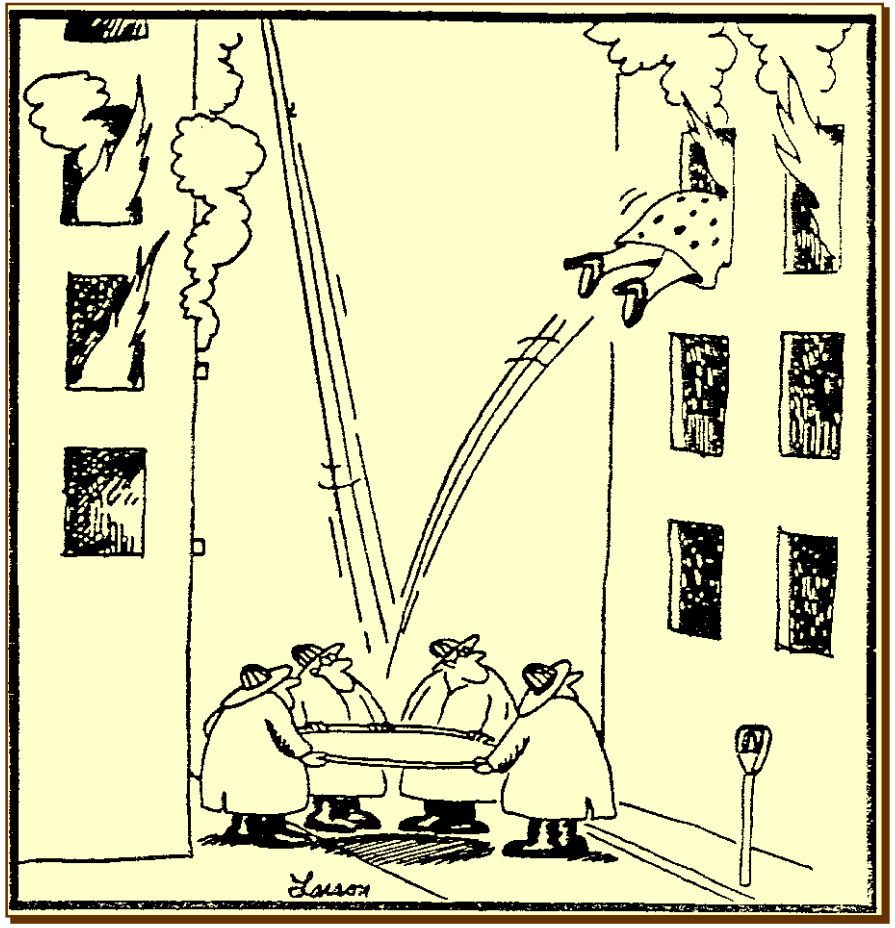
Modelización de Sistemas Biológicos

Simulación de Sistemas Continuos

POLITÉCNICA

Dinámica de Sistemas





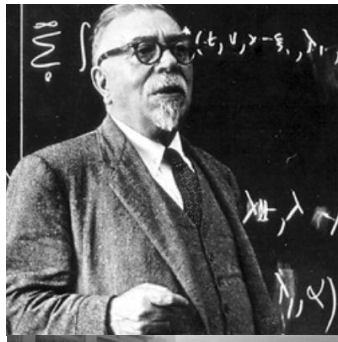
Contenidos

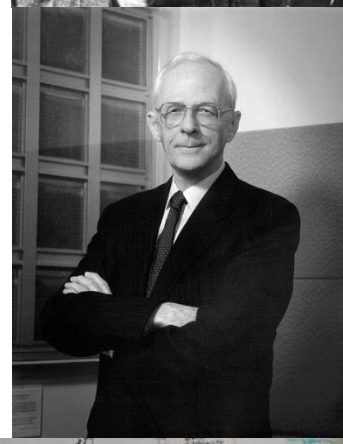
1. Introducción:
   - Dinámica de sistemas.
2. Modelado:
   - Modelado conceptual.
   - Modelado lógico.
3. Métodos de resolución.

Simulación de Sistemas Continuos

Introducción

Un Poco de Historia





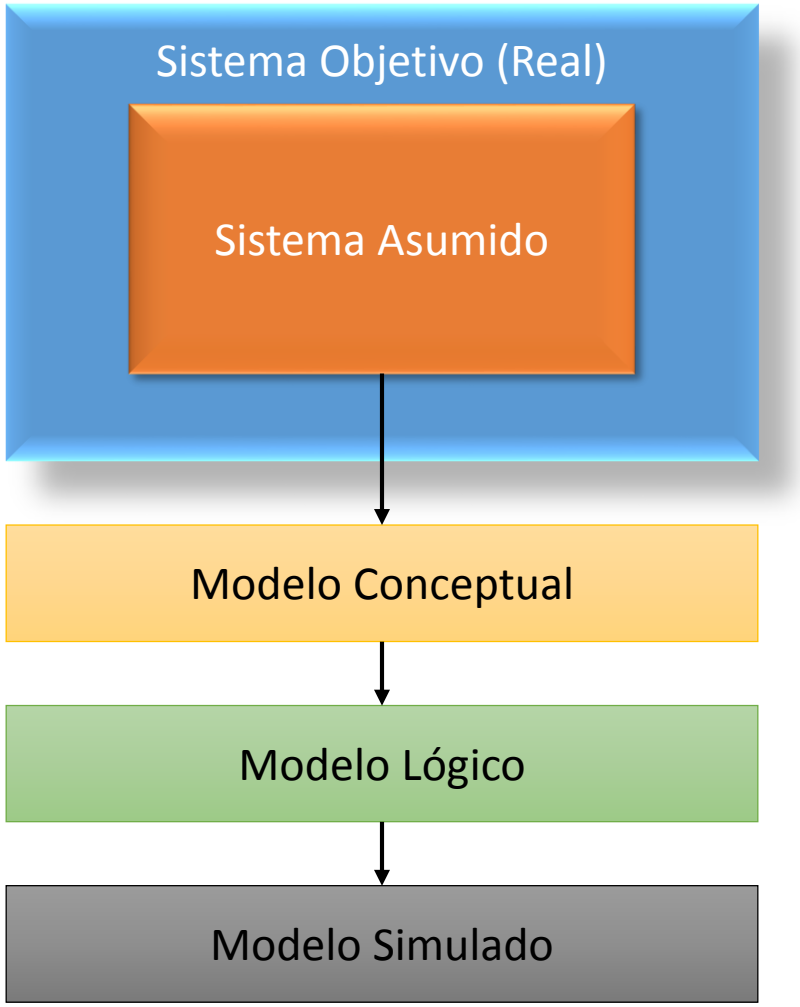
- Dinámica de sistemas:
  - Norbert Wiener (1940's): Estudios de como se regulan y controlan sistemas en biología, ingeniería o economía → **Cibernética**.
  - Jay Forrester (1950's): Aplicación de los principios de cibernética a sistemas industriales → **Dinámica industrial**.
  - John Collins (1970's) y John Sterman (1980's): Aplicación de los principios de la dinámica industrial a otros tipos de sistemas (sociales, económicos, urbanos, ecosistemas) → **Dinámica de sistemas**

Dinámica de Sistemas

- El modelado de sistemas se basa en la realimentación de partes del sistema como resultado de las salidas de otras partes del sistema.
  - La complejidad crece cuando esa realimentación produce ciclos.
  - Una parte del sistema se ve afectada (a la postre) por el resultado de su propia salida (directa o indirectamente).

- Un sistema se dice que es dinámico si:
  - Se describe por medio de recursos (cantidades numéricas) que varían a lo largo del tiempo.
  - Esta variación puede describirse de forma causal (provocada por la cantidad o variación de otro recurso).
  - Si además las relaciones causales dentro de un sistema cerrado tienen bucles.

Conceptualización de la Dinámica de Sistemas



Modelo Conceptual: Se realiza en dos pasos:

- Establecimiento de la hipótesis de causas-efectos que rigen el sistema (identificar conceptos relacionados).
- Diseño de diagramas de causalidad (grafo de relaciones causa-efecto entre los conceptos).

Modelo Lógico: Establecimiento de los números concretos a usar:

- Las relaciones del grafo causa-efecto se deben cuantificar.
- Asignar unidades a los conceptos.
- Fijar temporizaciones desde la causa al efecto (si procede).

Modelo Simulado: A este nivel se deben determinar los aspectos concretos para la resolución del modelo:

- Técnica numérica de resolución del sistema (integración o aproximación).
- Aspectos numéricos (e.g., pasos de tiempo).

Dinámica de Sistemas

- Representación del Modelo Conceptual:
  - Representaciones cualitativas.
  - Diagramas de bucles causales:
    - Cuáles son los conceptos.
    - Indicar si la influencia de los conceptos entre sí es positiva o negativa.
    - Cuáles son los límites del sistema (conceptos que se quedan dentro del sistema o se consideran externos).
- Representación del Modelo Lógico:
  - Representaciones cuantitativas.
  - Diagramas de existencias y flujos (*stock-and-flow*).
    - Valores numéricos a las cantidades agregadas de un recurso (existencia/*stock*).
    - Valores numéricos de la variación de los recursos en el tiempo (flujo/*flow*).

Simulación de Sistemas Continuos

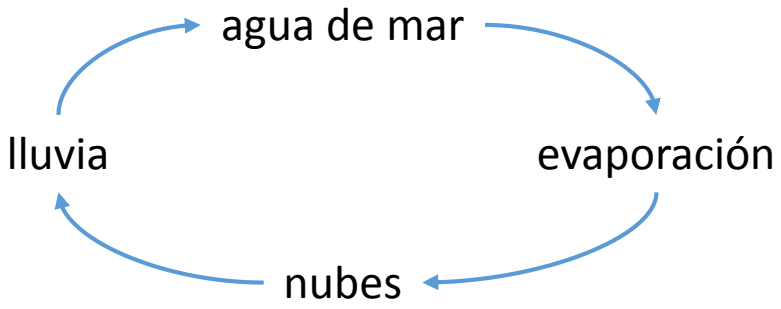
Modelo Conceptual

Relaciones Causa-Efecto

- Aunque en esencia son relaciones causales su visión más genérica es la de "*conceptos que tienen relación entre sí dentro del sistema y que se influyen de alguna manera*".
- Basadas en teorías o leyes conocidas (ciencias exactas/experimentales):
  - Reacción química → Producción de calor
  - Campo eléctrico → Campo magnético
  - Toxicidad de un medio → Muerte celular
- Basadas en hipótesis o intuición (ciencias sociales o economía):
  - Inseguridad económica → Ahorro
  - Desempleo → Robo
  - Uso del cinturón de seguridad → Número de muertos en accidentes

Cadenas Causales y Realimentación

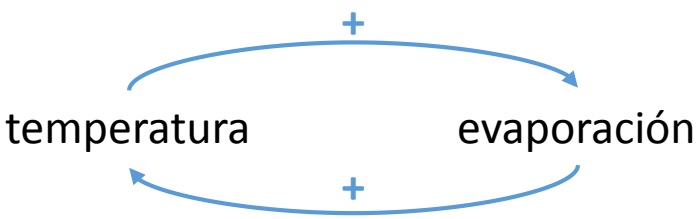
- **Cadenas Causales**: Cuando existen una serie de conceptos relacionados en secuencia por medio de causas-efectos.
- **Realimentación**: Cuando una cadena causal forma un ciclo o bucle.

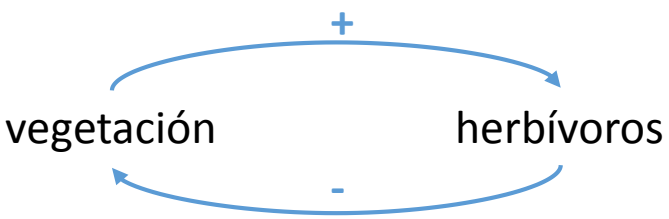


- Importante:
  - La realimentación causal es la que otorga el carácter dinámico al sistema.
  - La cadena de relaciones causales que forman el ciclo son

Diagrama de Bucles Causales

- *Causal Loop Diagram* (CLD):
  - Conceptos
  - Relaciones



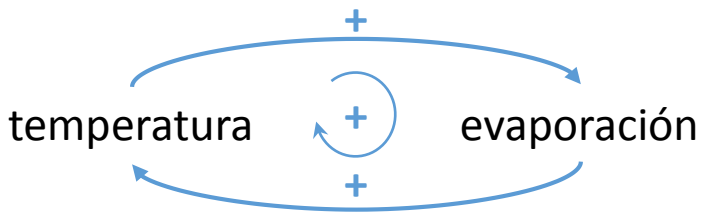


- Polaridad: se establece si la causa realimenta positiva o negativamente el efecto
  - "+": Si se incrementa la causa se incrementa el efecto.
  - "-": Si se incrementa la causa se decrementa el efecto.

Se utiliza para etiquetar las relaciones.

Diagrama de Bucles Causales

- Polaridad de los bucles:
  - Bucles positivos:
    - Aquellos bucles con un número par de signos "-".
    - Amplifican el efecto de las cantidades que forman el bucle.
    - Notación: +



  - Bucles negativos:
    - Aquellos bucles con un número impar de signos "-".
    - Generan efectos de equilibro o convergencia.
    - Notación: -

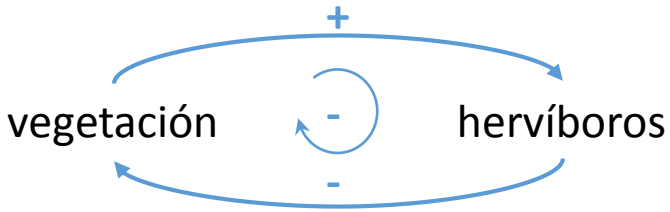
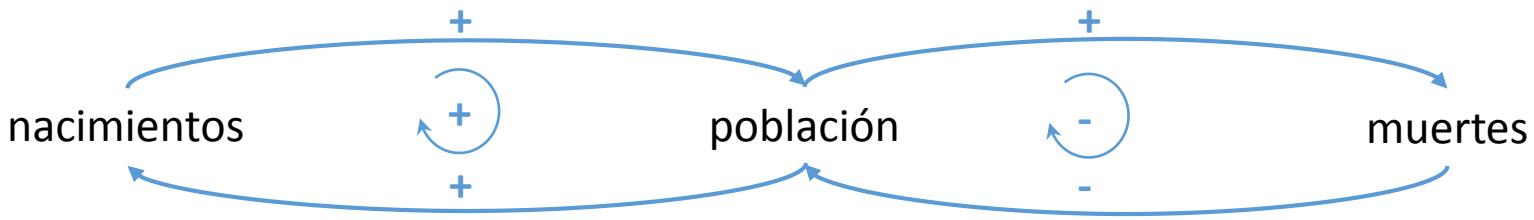
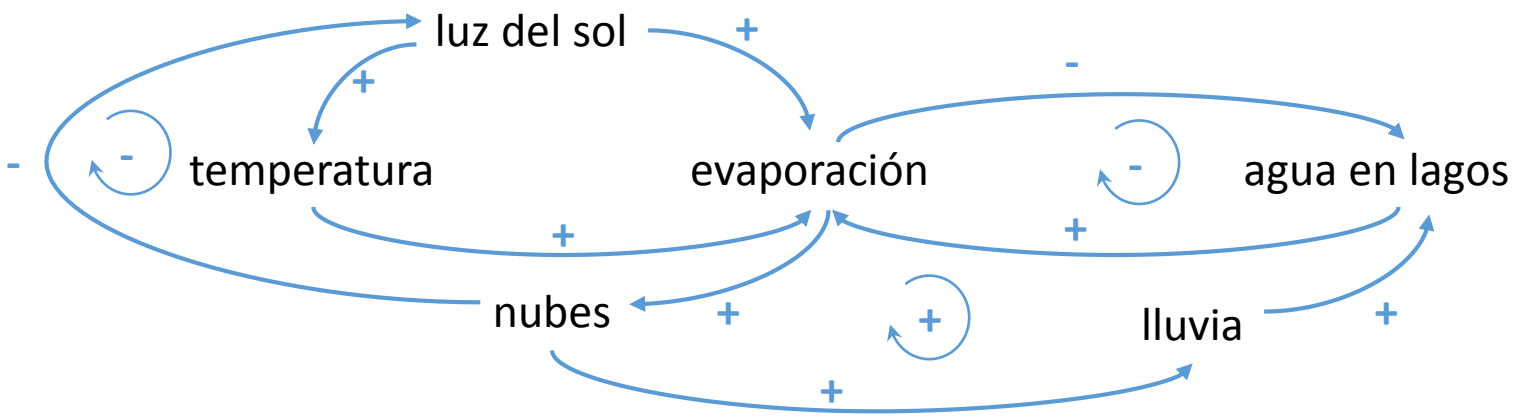


Diagrama de Bucles Causales

- Pueden darse más de un bucle en un sistema:
  - El efecto final del sistema dependerá del bucle o bucles dominantes.
  - Cambian a lo largo del tiempo.



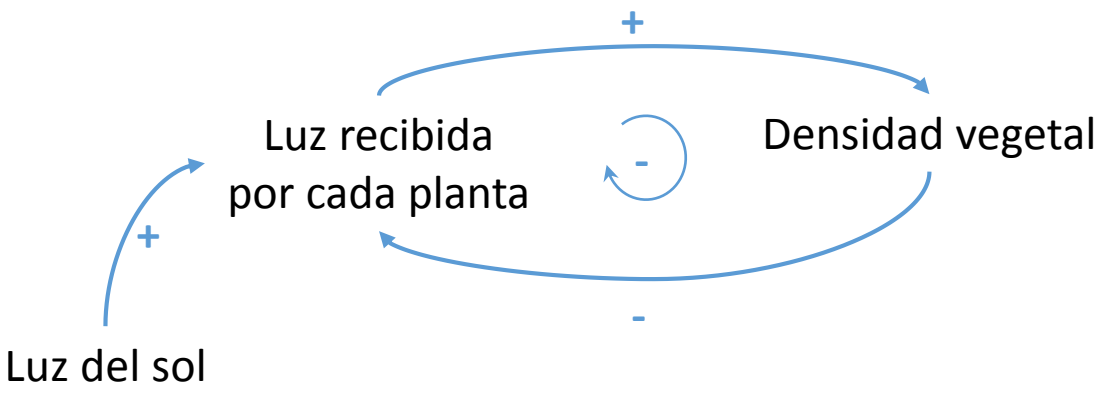
  - Puede haber bucles anidados:



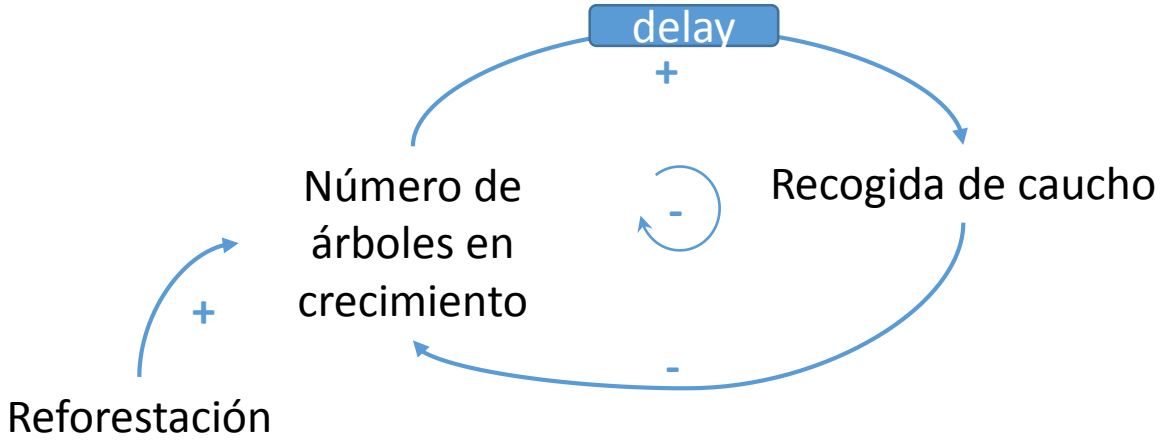
Si los bucles negativos son dominantes el sistema tiende a un estado estable.

Diagrama de Bucles Causales

- Elementos exógenos:
  - Conceptos que afectan a otros conceptos del sistema.
  - Pero que no se ven afectados por otros.

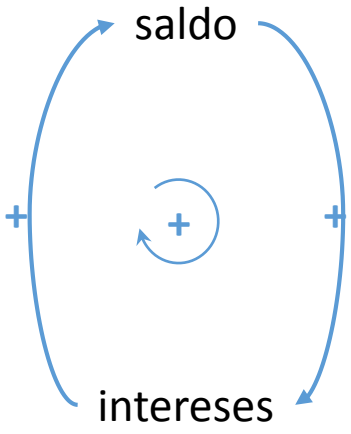


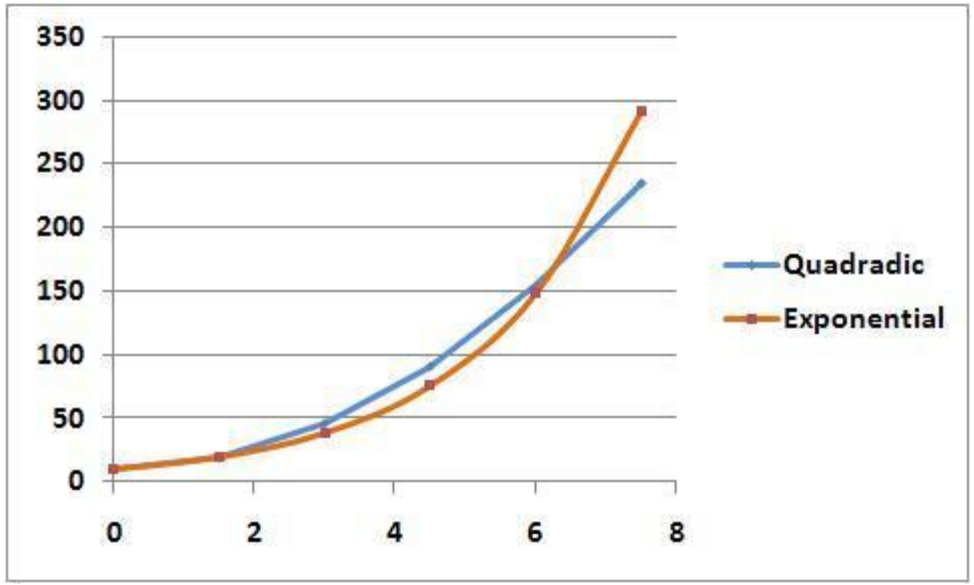
- Retardos:
  - Relaciones del sistema que se producen más lentamente.
  - Afecta a una dinámica del sistema con ciclos más largos.



Patrones de Comportamiento

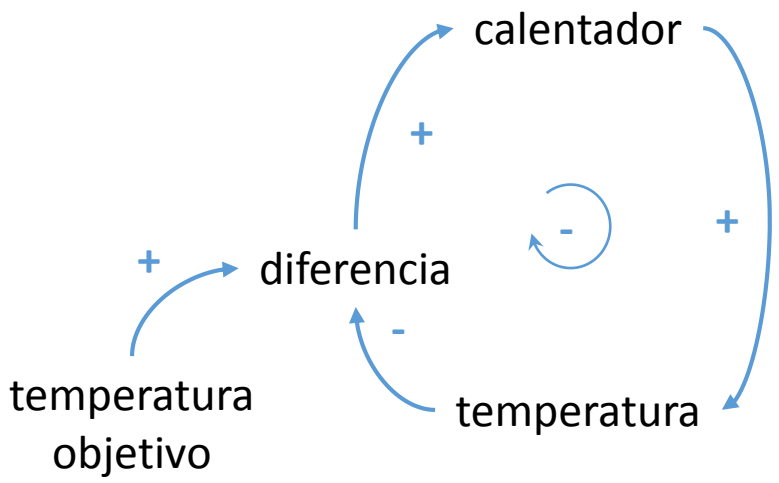
- Bucle de realimentación positiva con refuerzo:

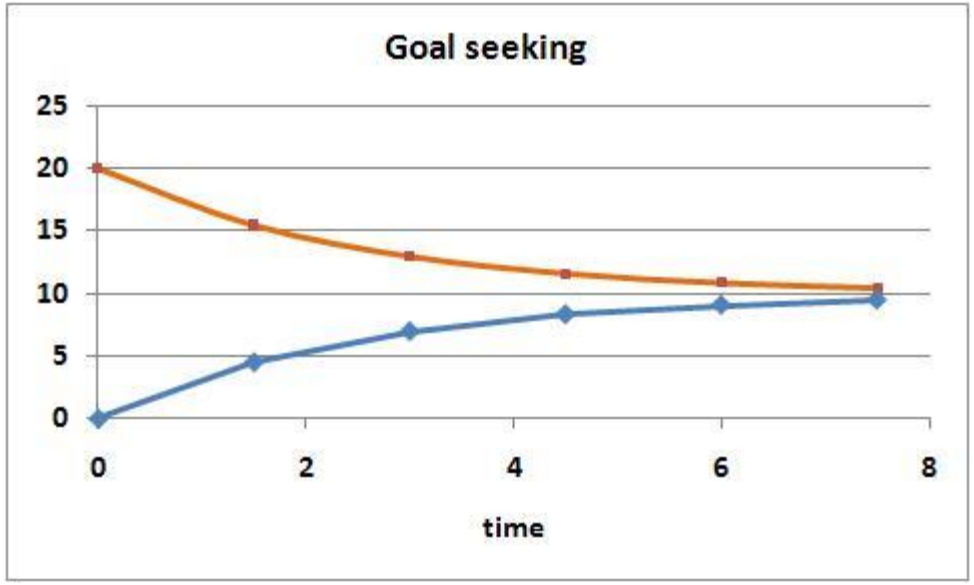




Patrones de Comportamiento

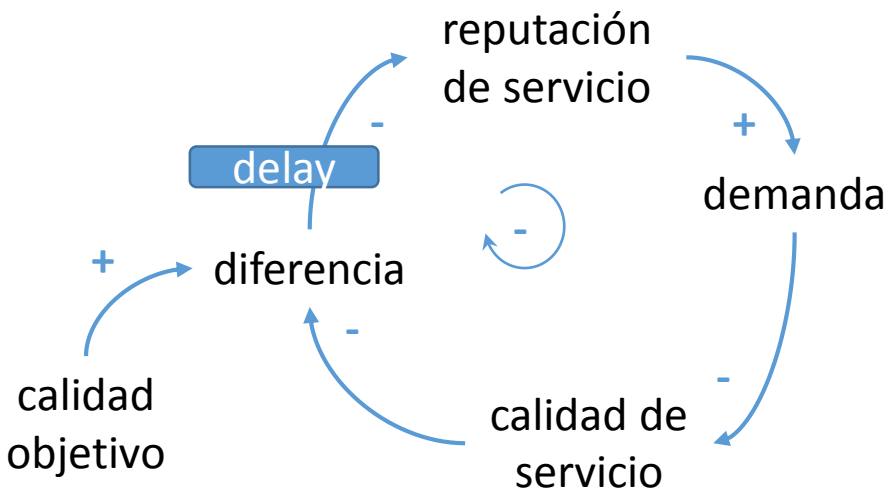
- Bucle de realimentación negativa con refuerzo:

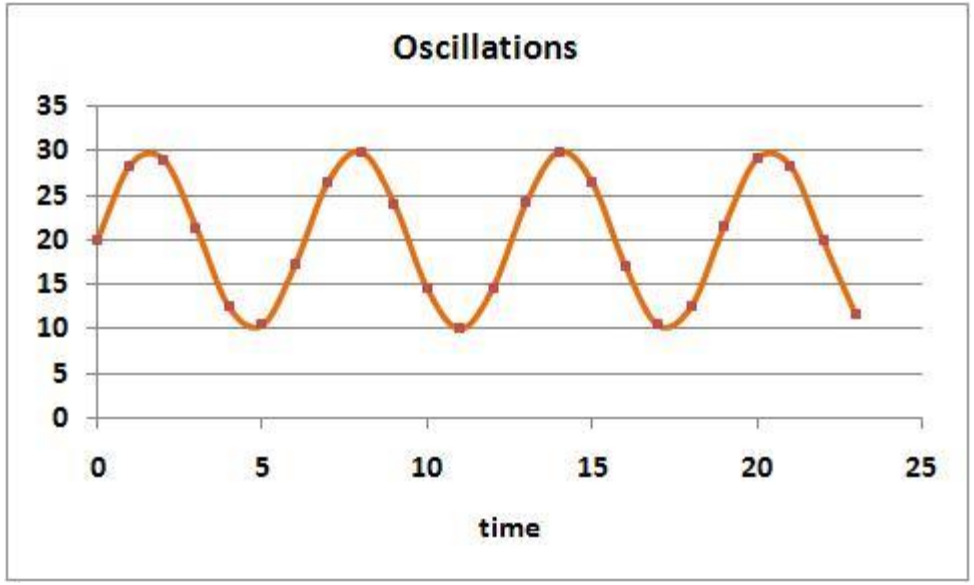




Patrones de Comportamiento

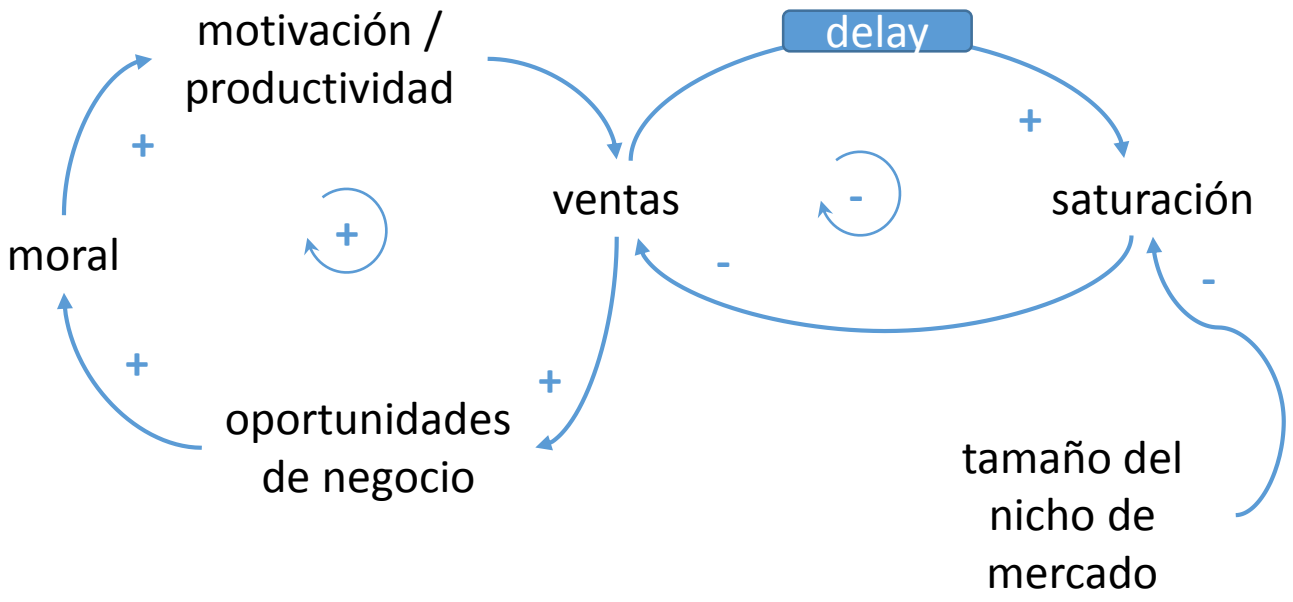
- Bucle de realimentación negativa con desfase temporal:

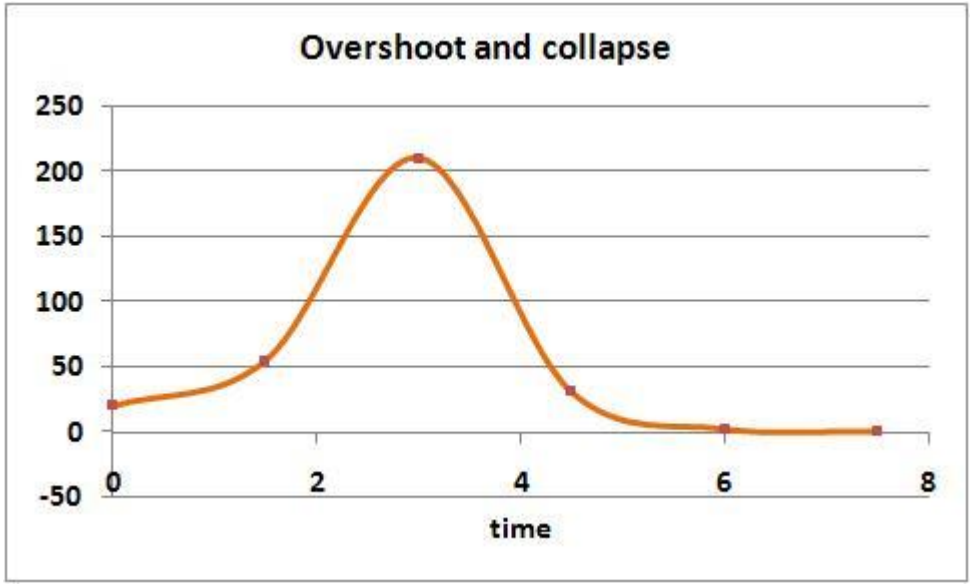




Patrones de Comportamiento

- Combinación de bucles positivos y negativos:



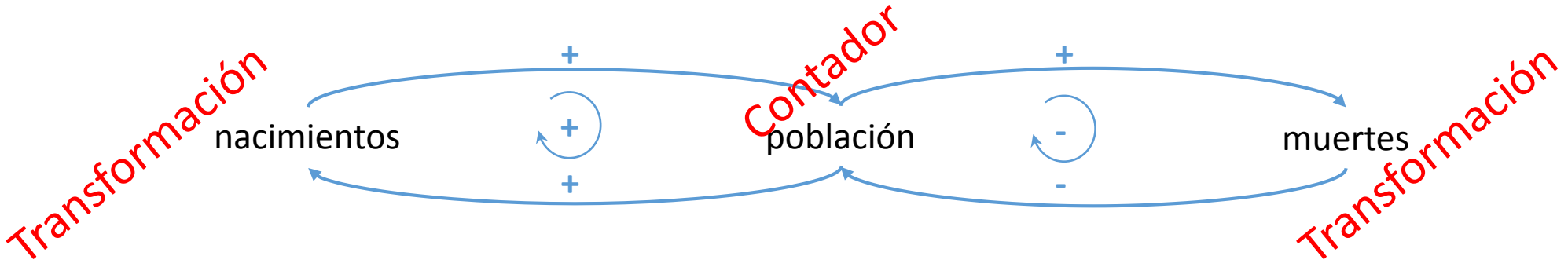


Simulación de Sistemas Continuos

Modelo Lógico

Modelos Lógicos Continuos

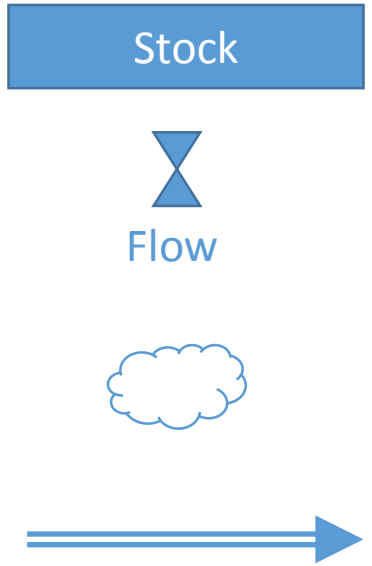
- Los diagramas de bucles causales están limitados por:
  - Proporcionar sólo una descripción cualitativa de los conceptos interrelacionados.
  - Los conceptos en realidad son de dos tipos:
    - Contadores absolutos de algún tipo de recurso o entidad.
    - Transformaciones que alteran o modifican esos contadores absolutos.



- Es necesario dividir ambos conceptos y cuantificar las transformaciones.

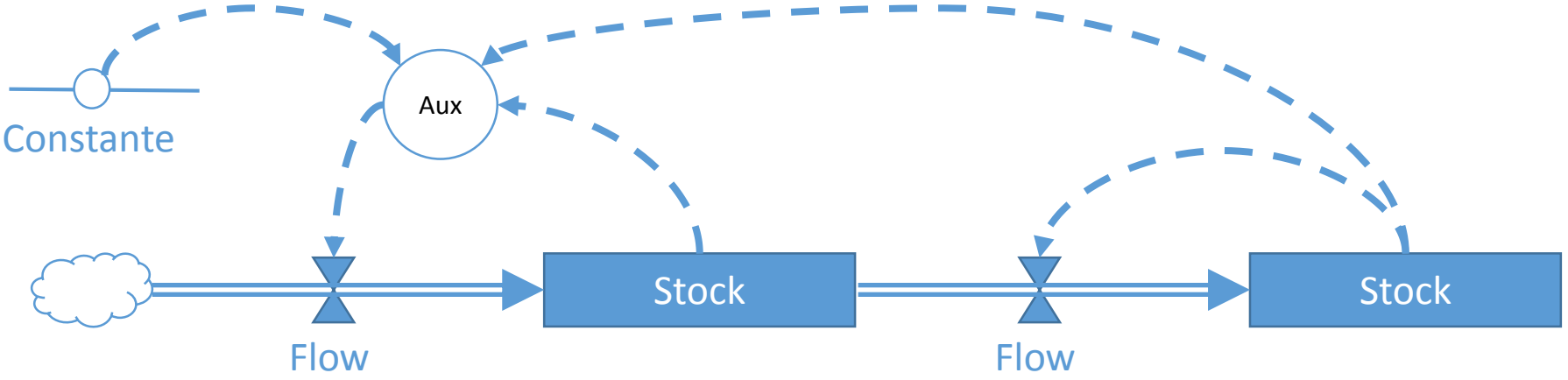
Diagramas *Stock-and-Flow*

- Ayuda para definir aspectos cuantitativos del modelo:
  - *Stocks* (existencias): Conceptos medidos en unas unidades que hacen de agregadores (entidades que se acumulan o consumen).
  - *Flows* (flujos): Definen los ratios con los que se consumen/crean *stocks*.
  - Fuente/Sumidero: Elemento externo capaz de proveer o de recoger cualquier cantidad transmitida por un flujo.
  - Arcos de flujo: Conectas *stocks* con fuentes/sumideros y están regulados por un flujo (implica cómo se modifican los stocks)



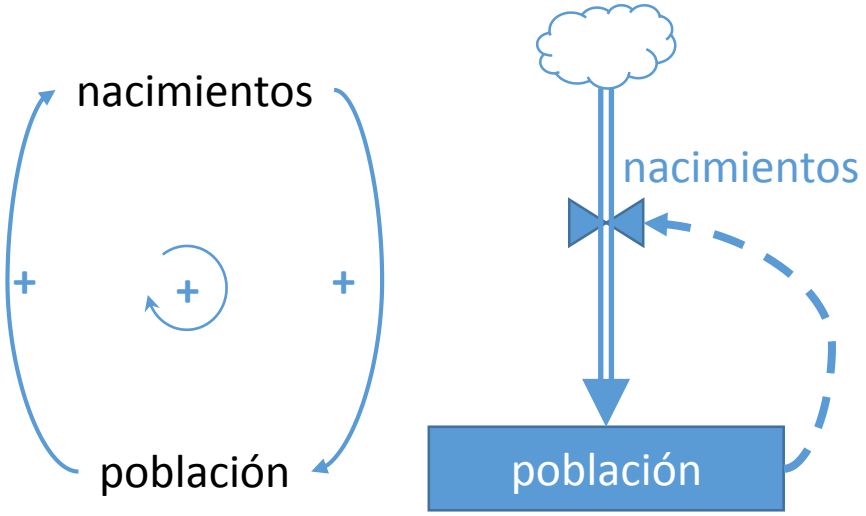
Diagramas *Stock-and-Flow*

- Ayuda para definir aspectos cuantitativos del modelo:
  - Constantes: Constantes del sistema (representan, por lo general, configuraciones generales del experimento.
  - Nodos auxiliares: Se utilizan para combinar valores que afectarán a los ratios de los flujos.
  - Arcos de causa-efecto: Conecta *stocks* y nodos auxiliares con flujos para indicar el efecto que tiene sobre ellos.



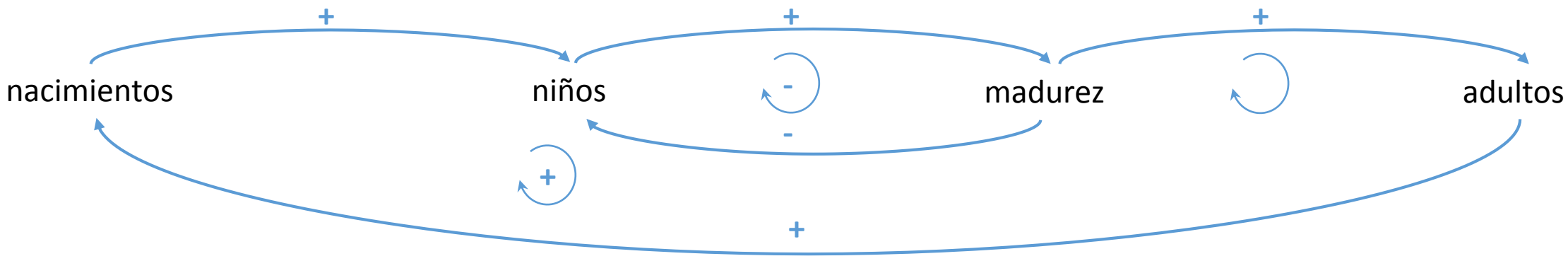
Diagramas *Stock-and-Flow*

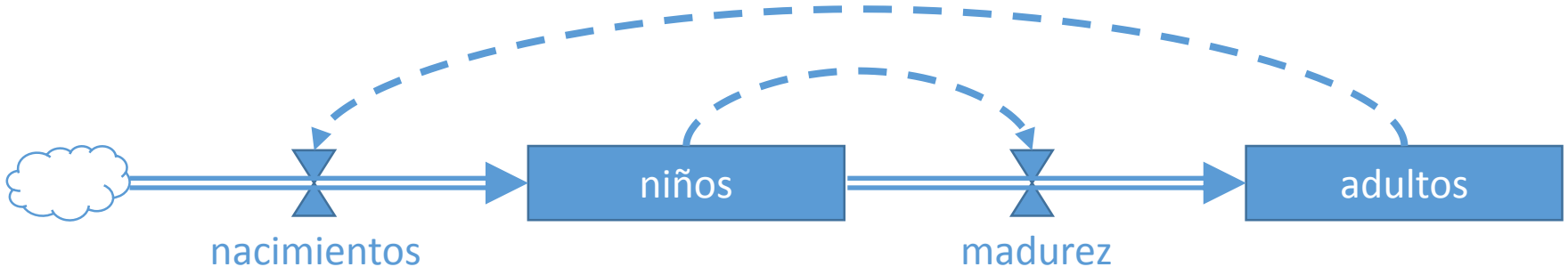
- Parametrización:
  - Los *stocks*:
    - Almacenan un contador de entidades
    - Asociado a una unidad de medida.
    - Su valor es la suma del valor anterior más/menos los arcos de flujo que entran/salen de él.
  - Los *flows*:
    - Se midan en esas mismas unidades por unidad de tiempo.
    - Su valor depende sólo de las entradas (de los arcos de tipo causa-efecto).



población = *X* personas
nacimientos = *Y* personas/año
Y = 0,015 *X*

Ejemplo

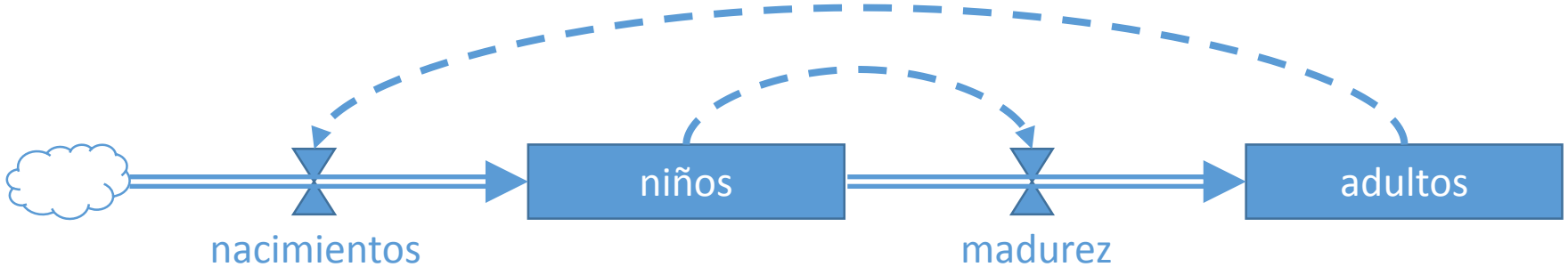

+
+
+
nacimientos
niños
madurez
adultos
-
-
+
+


niños
adultos
nacimientos
madurez

Simulación de Sistemas Continuos

Resolución

Inicialización del Modelo

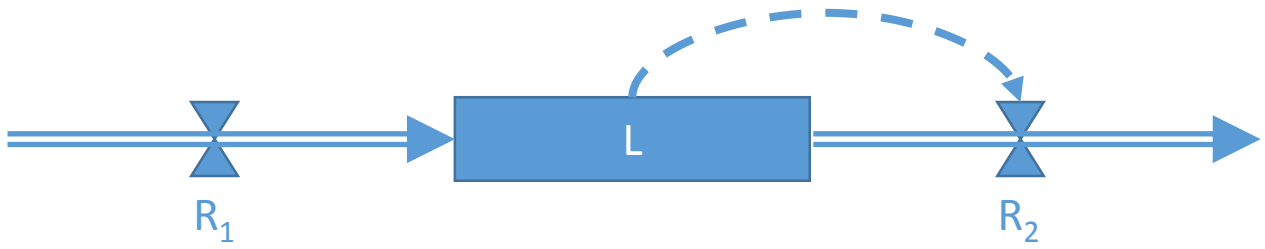


- Para poder calcular la evolución del modelo es necesario disponer de una serie de información:
  - Valor inicial de los *stocks* (en este caso, *niños* y *adultos*).
  - Las ecuaciones que rigen los *flows* (fórmula de la tasa de nacimiento según el número de adultos y la tasa de niños que al año se convierten en adultos [que sería lo mismo que 1/los años hasta la madurez]).

Traducción a Ecuaciones

- Las funciones de cálculo de flujos (*flows*) representan variaciones sobre los valores de los *stock*, por lo tanto:
  - Dichos valores dependen del estado de los propios *stocks* en un instante *t* determinado.
    - Representados por ecuaciones diferenciales respecto del tiempo.
  - El valor en un instante de tiempo dado de los *stocks* depende del valor inicial y de la “suma” de todo lo que ha pasado.
    - Representado por una integral a lo largo del tiempo de dichos valores.

Traducción a Ecuaciones



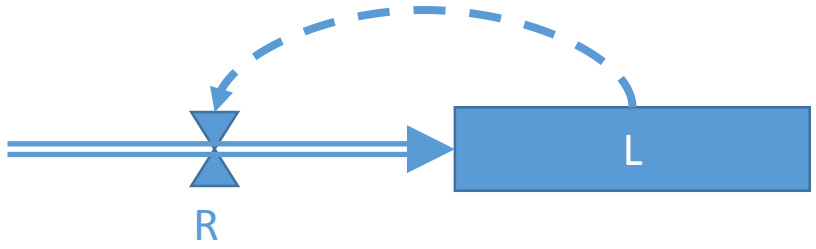
- Ecuación diferencial:

$$\frac{dL}{dt} = R_1(t) - R_2(t)$$

- Ecuación integral:

$$L(t) = \int_{t_0}^{t} \left(R_1(s) - R_2(s)\right) \mathrm{ds} + \mathrm{L}(t_0)$$

Traducción a Ecuaciones



- Ecuación diferencial:

$$\frac{dL}{dt} = R(t)$$

- Ecuación integral:

$$L(t) = \int_{t_0}^{t} R(s)ds + L\,(t_0)$$

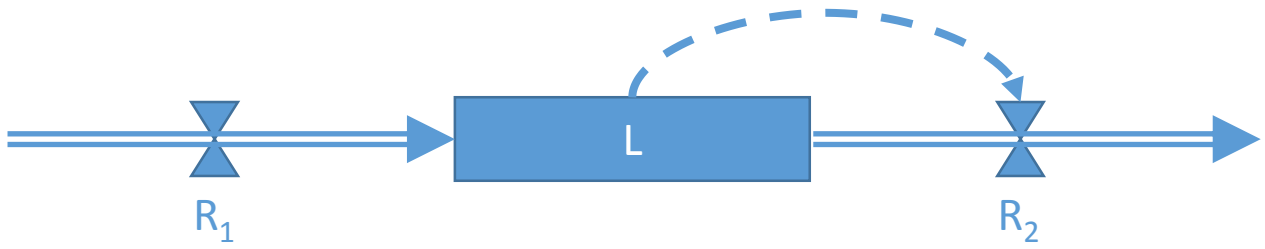
Supongamos que:

$$R(t) = k\,L(t)$$

Entonces:

$$\frac{dL}{dt} = k\,L(t)$$

Traducción a Ecuaciones



- Ecuación diferencial:

$$\frac{dL}{dt} = R_1(t) - R_2(t)$$

- Ecuación integral:

$$L(t) = \int_{t_0}^{t} \big(R_1(s) - R_2(s)\big) ds + L(t_0)$$

Supongamos que:

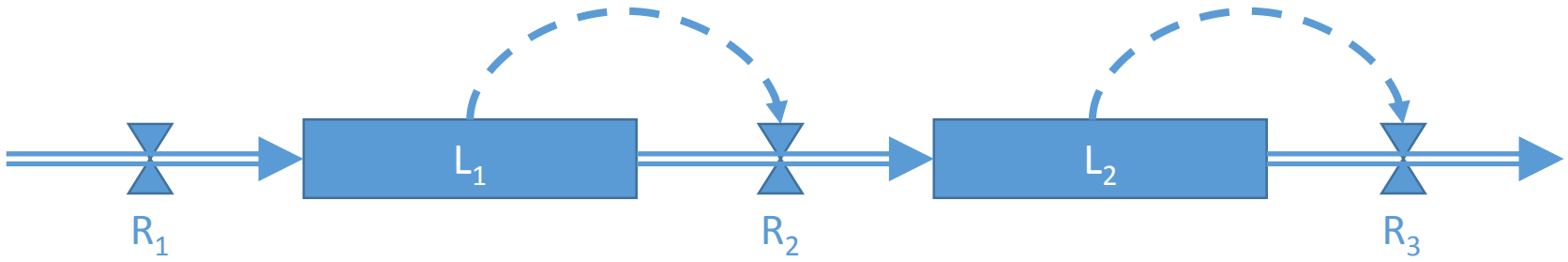
$$R_1(t) = k_1$$

$$R_2(t) = k_2\, L(t)$$

Entonces:

$$\frac{dL}{dt} = k_1 - k_2 L(t)$$

Traducción a Ecuaciones



- Ecuación diferencial:

$$\frac{dL_1}{dt} = R_1(t) - R_2(t) \qquad \frac{dL_2}{dt} = R_2(t) - R_3(t)$$

- Ecuación integral:

$$L_1(t) = \int_{t_0}^{t} \big(R_1(s) - R_2(s)\big) ds + L_1(t_0)$$

$$L_2(t) = \int_{t_0}^{t} \big(R_2(s) - R_3(s)\big) ds + L_2(t_0)$$

Supongamos que:

$$R_1(t) = k_1$$

$$R_2(t) = k_2 L_1(t)$$

$$R_3(t) = k_3 L_2(t)$$

Entonces:

$$\frac{dL_1}{dt} = k_1 - k_2 L_1(t)$$

$$\frac{dL_2}{dt} = k_2 L_1(t) - k_3 L_2(t)$$

Resolución de los Sistemas Dinámicos

- La resolución se basa en la integración de ecuaciones diferenciales ordinarias, $\dot{y} = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0.$, que se pueden resolver por medio de:
  - Métodos monopaso:
    - El más sencillo es el método aproximado de Euler:
      - Se define un paso de tiempo (Δt):
        - Se calcula los niveles de los elementos *stock* en base a los *flows* entrantes/salientes.
        - Se calculan los nuevos valores de los *flows* con los valores ya actualizados de los *stocks*.
        - Se avanza el reloj un paso de tiempo.
    - Otras alternativas son Runge-Kutta (de órdenes 3, 4, 5 …):

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)$$
$$t_{n+1} = t_n + h$$

$$k_1 = f(t_n, y_n),$$
$$k_2 = f(t_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{h}{2}k_1),$$
$$k_3 = f(t_n + \tfrac{h}{2}, y_n + \tfrac{h}{2}k_2),$$
$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3).$$

  - Métodos multipaso:
    - Adams-Bashforth, Adams–Moulton o BDF (de 2, 3, 4, … pasos)

Referencias

- Simulation Model Design and Execution, Fishwick, Prentice-Hall, 1995 Introduction to Computer Simulation: A system dynamics modeling approach, Nancy Roberts et al, Addison-Wesley, 1983
- Business Dynamics: Systems thinking and modeling for a complex world, John D. Sterman, McGraw-Hill,2000
- System Dynamics Methods: A Quick Introduction, C.W. Kirkwood, 1998: http://www.public.asu.edu/~kirkwood/sysdyn/SDIntro/SDIntro.htm
- Strategic Modelling and Business Dynamics. J.D. Morecroft, Wiley, Chichester, UK, 2007
- The Dymola System Dynamics Library, Version 2.0. F.E. Cellier, 2007
- VenSim User's Guide

Modelización de Sistemas Biológicos

Simulación de Sistemas Continuos

POLITÉCNICA