

Modelado, Simulación y Conocimiento

Aspectos epistemológicos – Proceso de Modelado y Simulación

Hugo Franco, PhD



UNIVERSIDAD
CENTRAL

Principios de M&S
Maestría en Modelado y Simulación

15 de mayo de 2015



Modelos en el contexto del
Conocimiento Científico

UNIVERSIDAD
CENTRAL

Modelos y Realidad

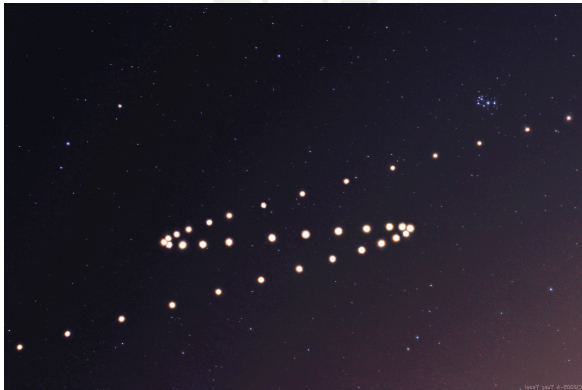
George E.P. Box. (frase atribuida) "Todos los modelos son erróneos, pero algunos son útiles"

Emergen entonces la preguntas

- *¿Se puede adquirir conocimiento de algo esencialmente erróneo?*
- *¿Que hacemos al construir modelos, implementar simulaciones e interpretar sus resultados?*
- *¿Cuál es la justificación científica de aplicar modelos?*

Ejemplo 1: Modelos cosmológicos

- El movimiento de los planetas (y su consecuente diferenciación de las estrellas) era conocido desde la Antigüedad
- ¿Cuál es la razón de ese movimiento aparentemente caprichoso?



Ejemplo 2: caracterización del movimiento I – Aristóteles (s. IV a.C.):

- **El estado natural de un cuerpo es el reposo.** El movimiento vertical se debe a la tendencia del elemento presente a volver a su lugar natural cuando se encuentre fuera de él (“esferas”).
Consecuencia: en el movimiento de caída libre la velocidad debe ser proporcional a la cantidad de su elemento constituyente.
 - La velocidad de un cuerpo es, además inversamente proporcional a la resistencia que ofrece el medio en que se mueve - “en el vacío, donde la resistencia es cero, la velocidad es infinita, luego el vacío no existe” (*horror vacui*).
- **Todo movimiento implica un motor;** la acción del motor debe prolongarse tanto como el movimiento mismo: *cessante causa, cessante effectus*
 - la causa del movimiento de un cuerpo separado de su motor es que produce un vacío en su desplazamiento que es ocupado por el aire de los alrededores, impulsándolo cada instante.

Ejemplo 3: caracterización del movimiento II – surgimiento de la mecánica

- En “Dos nuevas ciencias”, **Galileo** discute las matemáticas del movimiento uniformemente acelerado
 - 1 Todos los cuerpos, independientemente de su peso, caen en el vacío a una distancia determinada en el mismo tiempo.
 - 2 El movimiento de un cuerpo en caída libre o rodando por un plano inclinado, es uniformemente acelerado: se obtienen incrementos iguales de la velocidad en tiempos iguales.
- *Dichas matemáticas provienen del ajuste de las relaciones abstractas a las medidas obtenidas por la experiencia directa* → **Modelo**
- **Newton** introduce implícitamente el concepto de fuerza como mediador entre las mecánicas celeste y terrestre (esp. fuerza de gravedad)
 - El estado *natural* de un cuerpo es ahora el reposo o el movimiento rectilíneo uniforme, del que sale solo ante la presencia de una fuerza.
- **Euler** formaliza los conceptos de centro de masas, vector y plantea la ecuación $F = ma$ a partir de conceptos como *momento*.

Evolución de la concepción de Método y Modelo I

- **Francis Bacon** formuló el método experimental (*inductivo/empírico*) basado solamente en la observación y la colección de datos, cuyo análisis descubre correlaciones que llevan a hipótesis, la conformación y el reconocimiento de la "ley natural" (*Of the Advancement and Proficiency of Learning, or, The Partitions of Sciences*, 1640)

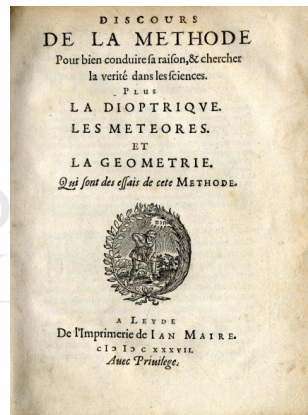
Goldman (2006)



Evolución de la concepción de Método y Modelo II

- **Rene Descartes** propuso una aproximación alternativa soportada en el método *deductivo/racional*, con el modelo matemático en el centro y el razonamiento deductivo como medio hacia el conocimiento (a través de la “duda metódica” – *Discurso del Método*, 1637).

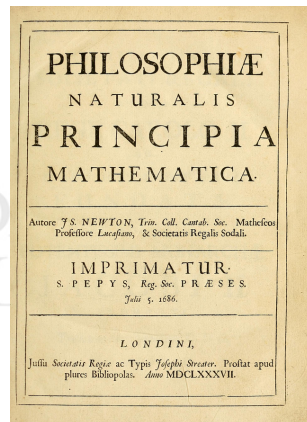
Goldman (2006)



Evolución de la concepción de Método y Modelo III

- **Isaac Newton** aplicó, sin formular explícitamente, el fundamento del trabajo científico posterior. Sus leyes no podían ser deducidas únicamente mediante experimentos, pero eran consistentes con la experiencia, haciendo posible una conceptualización e interpretación de la observación (*Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica*, 1687)
 - Surgimiento del método científico (“método hipotético–deductivo”). Formalización del uso del cálculo diferencial. Uso extensivo de modelos matemáticos que reproducen el comportamiento de fenómenos observados.

Goldman (2006)



¿Qué es un modelo?

Modelo de un fenómeno

- Es un **conjunto de representaciones formales** que incorpora sin ambigüedad los conocimientos adquiridos, mediante todas las fuentes pertinentes, sobre el fenómeno de interés para el estudio.
 - El modelo consiste en la especificación formal de los **elementos** de un sistema, las **relaciones** entre los mismos y los **parámetros** que permiten contextualizar el desempeño del sistema de acuerdo con las *características del entorno* y las relaciones del sistema del mundo real con el mismo.
- “*La Ciencia misma es una serie de modelos que proveen causalidades formales, llevando hacia correlaciones observables*” (Tolk, 2013).



Epistemología del Modelado y Simulación

UNIVERSIDAD
CENTRAL

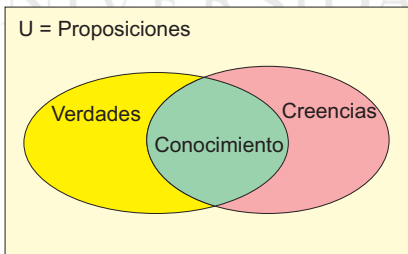
Epistemología

- **Etimología:** del griego: *episteme*: "conocimiento, comprensión", y *logos*: "tratado sobre...")

Definición

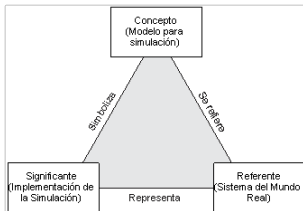
Epistemología es la rama de la filosofía dedicada a la naturaleza y alcance del conocimiento.

- La Epistemología se pregunta *qué es conocimiento, cómo puede ser adquirido y cuál conocimiento* pertinente a un aspecto particular de la realidad puede ser conseguido.



Transformación entre modos de Representación

Ontología, Teleología y Epistemología del M&S



- Consideraciones Ontológicas (vértices referente y concepto): “qué es” y qué describe” el modelo; en *referente*, la perspectiva ontológica de la realidad; en concepto, la representación ontológica de la realidad.

- Consideraciones Teleológicas: vértices concepto y significativo: “¿Cuál es el propósito del modelo y su simulación? En *concepto*, cuál es la pregunta de investigación; en *significante* cuál es la pregunta (en función de los resultados esperados) que rige la simulación.
- Consideraciones epistemológicas: la relación entre los vértices referente y concepto, “qué es verdadero/falso en la abstracción que a su vez es verdadero/falso en el sistema del mundo real”; entre los vértices concepto y significativo, “qué es verdadero/falso en la implementación que a su vez es verdadero/falso en el sistema bajo estudio”.

Objetivo del Modelado

Consideración Teleológica

El desarrollo del modelo asociado a un objeto, sistema o fenómeno, independientemente del ámbito científico o aplicado en el cual éste tiene existencia, busca la **caracterización cualitativa y cuantitativa de un aspecto específico del objeto del mundo real**,

- Estos aspectos usualmente corresponden a la dinámica (comportamientos, evolución y cambios de estado del sistema relacionado en *el tiempo*) de interés para la consecución de los objetivos del estudio.
- En Modelado y Simulación, el modelo formal (modelo matemático)

Características de un Modelo para Simulación

En el ***modelo para la simulación*** se pueden incluir características tales como:

- Relaciones matemáticas emergentes (de alto nivel) entre determinados aspectos del sistema.
- Mecanismos subyacentes relativos a las relaciones entre los diferentes elementos del sistema.
- Los valores umbrales de los parámetros que determinan la dinámica del sistema a partir de cambios de estado.
- Estructuras y patrones característicos, coherentes con la formulación conceptual del modelo, en los resultados.
- Patrones de interacción y competencia entre estructuras coherentes.

M&S como componente del conocimiento científico

Rita Colwell (1999): el Modelado y Simulación, como conjunto de métodos de solución de problemas, herramientas conceptuales y aproximaciones metodológicas, constituye un tercer componente de la ciencia, al lado de teoría y experimentación.

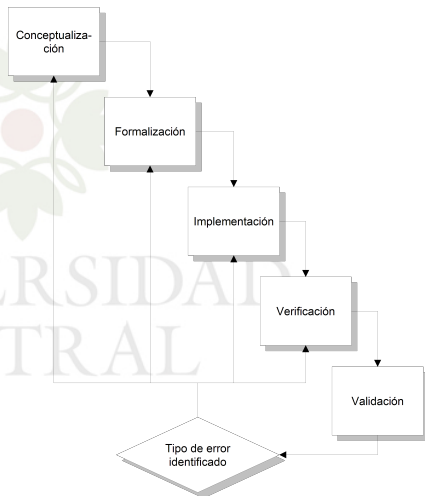
- The NFS Blue Ribbon Panel (2006, p. xvii): “El panel recomienda que la NSF asegure el trabajo de un comité del Consejo Nacional de Investigación [NRC] para explorar el asunto de la educación interdisciplinar y hacer recomendaciones para iniciar un ajuste de gran envergadura en nuestro sistema educativo.”
- Así pues, los métodos, procedimientos y técnicas propuestos en campo del Modelado y Simulación deben contar con un soporte epistemológico que respalde el conocimiento que aportado al análisis y solución de cada problema

Proceso de Modelado y Simulación

UNIVERSIDAD
CENTRAL

Ciclo de vida de un Modelo

- En la mayoría de áreas de aplicación el peso del trabajo relativo al modelado se centra en el desarrollo de un modelo para reproducir un comportamiento observado (y medido),
 - Sin embargo, en el M&S buena parte del trabajo se lleva a cabo en el componente de modelado en la búsqueda de dar respuesta a la pregunta de investigación, lo que requiere una aproximación metodológica



Descripción

- 1 **Conceptualización** (Modelo Narrativo): Análisis general del sistema real. Determinación de los elementos, aspectos y relaciones relevantes en el sistema bajo estudio: Definición de las partes relevantes Definición de los procesos y relaciones Un planteamiento claro del problema a solucionar (definición, delimitación) es fundamental
- 2 **Formalización** (Modelo Esquemático): Definición de las variables del modelo. Selección y exclusión de partes y relaciones (ecuaciones, procesos). Escalas temporal y espacial para la solución del problema
- 3 **Implementación** (Modelo Informático): Traducción a la representación codificada (programación) del modelo esquemático; Implica la solución a problemas de programación. Reorganización de ecuaciones. Representación de operaciones: Estructuración del código, optimización
- 4 **Verificación Funcional**. Análisis de Estabilidad: ¿Produce el modelo resultados razonables/creíbles? (experiencia, convergencia numérica). Análisis de sensibilidad: Variación de los resultados ante cambios en las variables dentro del rango de variación natural. Un parámetro crítico es aquél que induce cambios fuertes con pequeñas variaciones.
- 5 **Validación**: Comprobación del modelo con datos independientes (fuentes de terceros). Comparación de los resultados del modelo respecto a modelos equivalentes en función (trabajos previos).
- 6 **Certificación**: En algunos autores se incorpora el proceso de certificación del modelo como componente separado de la validación conceptual.

Modelos y Algoritmos

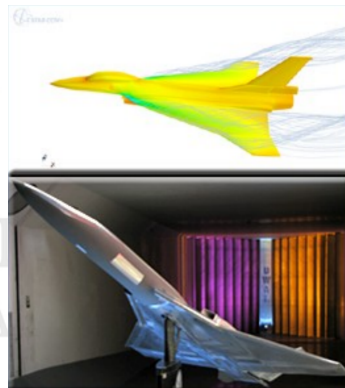
- El uso del modelado matemático para la solución de problemas del mundo real implica el desarrollo de *métodos reproducibles y de uso accesible* por los usuarios finales de los modelos matemáticos para la obtención de resultados válidos y útiles.
 - Tal necesidad fue abordada, entre otros, por al-Jwarizmi en sus diferentes trabajos sobre métodos algebraicos que conducirían posteriormente al desarrollo del concepto de algoritmo, en el contexto de las ciencias de la computación.
- Los algoritmos son la base sobre la que se construyen implementaciones numéricas de modelos adecuados para la reproducción de características y comportamientos de los fenómenos modelados mediante el uso del computador, lo que se conoce actualmente como simulación.

Utilidad de la Experimentación Numérica

- Las simulaciones computacionales (sustentadas en modelos matemáticos) permiten obtener resultados de utilidad en la caracterización del comportamiento de fenómenos, objetos –diseños- y procesos del mundo real que no pueden ser observados fácilmente en entornos experimentales controlados (laboratorio) o mediante observación directa.
- En la formulación de teorías consistentes se usan cada vez más resultados provenientes de la experimentación numérica propia del Modelado y Simulación, especialmente en casos de difícil o imposible aplicación de la experimentación tradicional (p. ej. astrofísica -dinámica de las galaxias, ciclo de vida de las estrellas-, mecánica cuántica -caracterización de la estructura de la materia, predicción de existencia de partículas subatómicas- etc.)

Ejemplo: Comportamiento aerodinámico

- Algo de historia: Bézier propuso la utilización de splines a partir de curvas paramétricas (formuladas por Casteljau en 1959) para el diseño de superficies curvas en automóviles
- En los procesos de diseño de móviles y aviones se introdujo el uso de “túneles de viento” para observar, mediante patrones observables (partículas en suspensión) el comportamiento aerodinámico de los prototipos.
- La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) simplificó la medida de variables en el dominio del experimento (e incrementó los datos obtenidos del mismo)
- Pero...



Definición de Simulación

Simulación (Bunge, 1969)

“Relación entre los objetos a y b , donde a “simula” b si i) existe una relación de correspondencia entre las partes y las propiedades de a y b , y ii) la analogía es de valor para a o la entidad c que la controla”

- Guala (2002) critica esta definición por ser “antropocéntrica” pero, sobre todo, imprecisa, al permitir que esta definición de simulación incluya, entre otros, la similitud entre fenómenos no controlados ni observados, el simple uso de analogías en descripciones verbales o la construcción de modelos estáticos (p.ej. mapas).

Simulación (Shannon y Johannes, 1976, p. 723) “El proceso de diseñar un modelo de un sistema real y llevar a cabo experiencias con el mismo con la finalidad de comprender el comportamiento del sistema o de evaluar nuevas estrategias, dentro de los límites impuestos por un criterio o conjunto de ellos, para el funcionamiento del sistema.”

Error experimental

- **En experimentación “tradicional”:** errores sistemáticos e incertidumbre introducida por la resolución de los aparatos de medida en la experimentación tradicional
- **En Simulación:** errores por aproximación numérica (representación computacional - error de punto flotante), problemas de convergencia e inestabilidades numéricas de los métodos.
 - Bajo la aproximación tecnológica actual a la computación, *las simulaciones por computador siempre contendrán errores por aproximación*
- En M&S el error, en el sentido epistemológico (Allchin, 2000, p. 1), se puede definir como “una afirmación falsa que es interpretada y justificada como verdadera” a partir de los resultados de la experimentación numérica de un proceso de Modelado y Simulación.

Justificación epistemológica de un Modelo (Validez)

Dentro de las estrategias identificadas en diversos campos científicos, destaca la propuesta por Rudge (1998), aplicada en dicho trabajo al estudio de Kettlewell (1955) en el campo de la biología evolutiva:

- 1 Comprobaciones experimentales y de calibración en las que el aparato de medida reproduce fenómenos conocidos.
- 2 Reproducción de artefactos que se sabe, de antemano, estarán presentes.
- 3 Descarte de explicaciones alternativas de los resultados obtenidos.
- 4 Uso de resultados experimentales en sí mismos para argumentar en favor de su validez
- 5 Uso de una teoría bien corroborada (independientemente) del fenómeno, que explica los resultados obtenidos
- 6 Uso de un aparato de medida basado en una teoría bien corroborada.
- 7 Uso de argumentos estadísticos (ejecución de múltiples instancias del experimento)
- 8 Análisis ciego
- 9 Intervención, en la que el experimentador manipula el objeto bajo observación
- 10 Confirmación independiente, mediante el uso de diferentes aproximaciones experimentales.

Validación en Modelado y Simulación

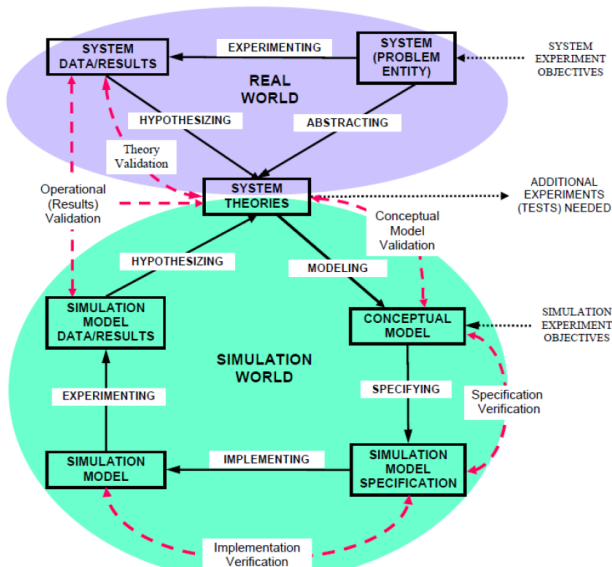
- Una secuencia de valores coincidentes entre medidas experimentales y resultados de simulaciones (considerando, obviamente, errores de observación y aproximación) a lo sumo pueden incrementar la confianza en el modelo, pero no son en sí mismos una prueba su validez.
 - Falsacionismo popperiano: una única instancia experimental no coincidente con el modelo empleado para la caracterización de un fenómeno o sistema, invalida completamente el modelo
- Desde un punto de vista epistemológico, una de las tareas de mayor dificultad en el ámbito del Modelado y Simulación es la determinación de la validez de la representación de un sistema real provista por un modelo matemático
 - La capacidad del modelo para reproducir de manera robusta las características y comportamiento del objeto, fenómeno o sistema bajo estudio es un indicador del conocimiento que se puede adquirir por medio del análisis de sus características y comportamiento

Verificación vs. Validación

La verificación de la consistencia interna del modelo para simulación y la validación del modelo desarrollado en términos de su fidelidad al sistema del mundo real bajo estudio son aspectos indispensables del proceso de modelado que deben llevarse a cabo en cada iteración del ciclo del modelado y, como se expondrá más adelante, en el modelado particular de cada módulo, aspecto, elemento o submodelo involucrado.

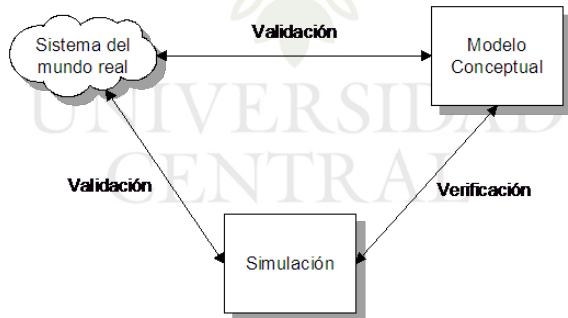
- La Verificación se desarrolla sobre las diferentes transformaciones de representación que permiten llevar la comprensión y conocimiento general de un objeto o sistema del mundo real a la implementación completa del algoritmo o conjunto de herramientas computacionales para la simulación de su comportamiento (calidad de la lógica interna y de la funcionalidad computacional).
- La Validación, por su parte, consiste en el proceso de determinar si el modelo para simulación obtenido es una representación precisa y fiel del sistema del mundo real bajo análisis. La Validación, por lo tanto, tiene un componente epistemológico en la medida en la que estudia la validez del conocimiento que se puede extraer de la interpretación del modelo y los resultados que arroja la experimentación numérica.

Verificación y Validación en M&S (Sargent 2010)



Ámbito de ejecución de las tareas de Verificación y Validación

- De manera análoga al citado Triángulo Semiótico de Ogden, es posible establecer claramente el ámbito de aplicación y las relaciones sobre las que se desarrollan los procesos de verificación y validación del modelo para la simulación.



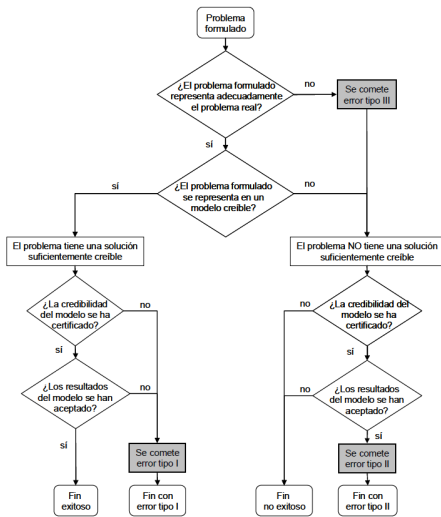
Técnicas de Validación de Modelos para Simulación

- Los procesos de verificación y validación propios del ciclo de vida del modelado deben llevarse a cabo de manera permanente durante el desarrollo del modelo para simulación.
 - La aplicación por sí sola de pruebas de verificación funcional y validez conceptual no basta para garantizar la eficiencia ni, probablemente, el éxito final del proceso (Carson, 2002).
 - Es necesario establecer prácticas y aplicables al proceso mismo de desarrollo para garantizar su calidad, reforzado por las propias pruebas de validez a realizar en cada proceso.

Clasificación de errores en la formulación de un modelo

En Balci (1998) se establece una caracterización de errores que pueden presentarse en el desarrollo de un modelo para simulación, según la fidelidad, credibilidad y verificación funcional y matemática del modelo obtenido, definiendo, por medio del proceso presentado en la Figura , los errores de Tipos I, II y III.

Derecha: Errores en el proceso de M&S según Balci (1998), según la adaptación de Cadavid (2010, p. 52)



Técnicas de validación representativas I

Xiang, Kennedy y Madey (2005, p.48)

- **Validación de apariencia:** contrastar, según la experiencia del responsable del modelado y de expertos en el área de aplicación, si el comportamiento presentado por la simulación del modelo corresponde, razonablemente, a lo esperado según su formulación y el sistema del mundo real bajo estudio. Se puede conseguir mediante el análisis de gráficas y animaciones que permitan hacer un seguimiento a los comportamientos de los elementos del modelo.
- **Rastreo:** de manera similar que la inspección de variables en los procesos de debugging (eliminación de errores) en programación de computadores, se puede hacer un seguimiento de los valores que toman las variables que determinan el estado y la dinámica del modelo.
- **Validación interna:** comparar los resultados de diferentes instancias de la misma simulación con diferentes semillas para la generación de números aleatorios. Es especialmente útil en experimentación numérica para modelos con carácter estocástico.
- **Validación mediante Datos Históricos:** cuando hay disponibilidad de datos obtenidos en ciclos anteriores o estudios de M&S aplicados a problemas análogos. Parte de los datos será usada entonces en la construcción del modelo y otra parte en las pruebas de su desempeño a partir de los comportamientos exhibidos por la simulación del modelo. Requiere técnicas estadísticas (prueba de hipótesis, Tests estadísticos)

Técnicas de validación representativas II

- **Análisis de Sensibilidad:** se presenta la entrada al sistema desarrollado con variaciones sistemáticas en los valores de entrada y de los parámetros internos del modelo implementado para observar los efectos de dichas variaciones en la salida (comportamiento) del modelo, comprobando, como sería de esperar, que dichos efectos sean equivalentes en la simulación y el comportamiento del sistema del mundo real.
- **Validación predictiva:** aplicable cuando existen datos empíricos de observaciones experimentales rigurosas, realizadas sobre el sistema del mundo real bajo estudio, consiste en la comparación de los patrones de comportamiento obtenidos mediante los dos tipos de observación.
- **Tests de Turing:** en implementaciones suficientemente elaboradas, se puede comprobar si un experto es capaz de diferenciar los resultados arrojados por la simulación del modelo desarrollado de aquellos obtenidos mediante técnicas experimentales aplicadas al sistema del mundo real.

Principios del Ciclo de Vida del M&S I

Balci (1997, p. 136):

- La verificación y la validación deben ser realizadas a lo largo de todo el ciclo de vida del M&S.
- El resultado de la verificación y la validación no debe considerarse como una variable binaria donde el modelo o simulación es absolutamente correcto o absolutamente incorrecta.
- Un modelo de simulación se construye con respecto a los objetivos de M&S y su credibilidad se juzga con respecto a esos objetivos.
- La Verificación y la Validación exigen independencia para evitar el sesgo del desarrollador.
- El proceso de Verificación, Validación y Acreditación es difícil y requiere creatividad y perspicacia.
- La credibilidad sólo puede ser exigida tras cumplir las condiciones requeridas para que el modelo o simulación pueda ser verificado, validado y acreditado.
- Una prueba completa del modelo para simulación no es posible.

Principios del Ciclo de Vida del M&S II

- El proceso de Verificación, Validación y Acreditación debe ser planificado y documentado.
- Los errores de tipo I, II y III (Balci, 1998) deben ser prevenidos a priori.
- Los errores deben ser detectados tan pronto como sea posible en el ciclo de vida del M&S.
- El problema de la respuesta múltiple debe ser detectado y resuelto apropiadamente.
- La prueba exitosa de cada submodelo (modulo) no implica una credibilidad general del modelo.
- El problema de la doble validación debe ser detectado y corregido apropiadamente.
- La validación del modelo para simulación no garantiza la credibilidad y aceptabilidad de los resultados de la simulación.
- Una buena formulación del problema bajo estudio es esencial para la aceptabilidad y acreditación de los resultados del proceso de M&S.

Certificación (según Balci, 1997)

- Origen: procesos de certificación de Software True [Normas técnicas para la verificación y validación de software IEEE 1998].
- La certificación no es necesariamente un componente conceptual del proceso de M&S, pero es relevante en el contexto de las aplicaciones
- La certificación tiene sentido si y solo si se lleva a cabo por una entidad independiente técnica, administrativa y financieramente
 - La independencia técnica implica que el agente de certificación (acreditado) determina, prioriza y programa sus propios esfuerzos y tareas
 - La independencia administrativa implica que el agente de certificación reporta al contratante del estudio de M&S de manera independiente a la organización responsable del estudio
 - La independencia financiera implica que el agente de certificación tiene su propia financiación para el proceso, luego su presupuesto no depende del asignado para el estudio de Modelado y Simulación.

Síntesis

Proceso de modelado (Sargent, 2010)

Sargent sintetiza su propuesta de procedimiento en los siguientes pasos:

- 1 Llegar a un acuerdo entre el responsable del M&S y los usuarios (patrocinadores) del modelo y sus resultados, especificando la aproximación para la validación del modelo y las técnicas de validación a ser empleadas en el proceso.
- 2 Especificar a priori el grado de exactitud de los resultados obtenidos para las variables de interés para el estudio antes de iniciar la implementación del modelo
- 3 Probar en todos los casos en los que sea posible las suposiciones e hipótesis que dan soporte al modelo
- 4 En cada iteración del ciclo del modelado, llevar a cabo al menos la validación de apariencia sobre el modelo conceptual empleado.
- 5 En cada iteración del ciclo del modelado, comprobar mediante la implementación de la simulación obtenida el comportamiento de cada aspecto del modelo susceptible de ser observado.
- 6 En al menos la última iteración del ciclo de modelado empleada, comparar el modelo según sus objetivos y los datos correspondientes al comportamiento del sistema desarrollado (salida) para al menos dos (2) condiciones experimentales (escenarios) diferentes.
- 7 Documentar el proceso de validación como un aspecto fundamental de la documentación general del proceso de modelado.
- 8 Si el modelo ha de ser empleado más de una vez para el soporte de actividades de una organización por un periodo dado de tiempo, establecer un calendario de