

Tema 6

Estimación de parámetros, validación de modelos y análisis de sensibilidad

6.1 Calibración

Una vez que se ha identificado el modelo y se ha programado, necesitamos aplicarlo al problema concreto que nos ocupa. Para ello necesitamos en primer lugar obtener los valores de los parámetros que utiliza el modelo estos pueden **medirse** directamente en el campo (sería la manera de proceder en un modelo físico) u obtenerse utilizando técnicas de **optimización** que a partir de unos valores conocidos de las variables de entrada produzcan los correspondientes resultados en las variables de estado y de salida (sería la manera de proceder en los modelos empíricos).

6.1.1 medición de parámetros

Uno de los errores más habituales cuando se trabaja en la modelización de sistemas ambientales es medir primero en el campo y modelizar después sobre estos datos.

El modo de proceder más adecuado sería empezar por una correcta identificación del problema que, al menos nos permitiera conocer cuales son los parámetros que habrá que medir. Si el modelo se ha construido podremos haber hecho incluso un análisis de sensibilidad que nos permita determinar que parámetros merece la pena medir con mayor precisión y mayor resolución espacial.

El problema es que también podemos encontrar parámetros que no puedan medirse por la falta de tecnología apropiada o su elevado coste. En este caso tendremos que utilizar funciones de transferencia que permitan obtener a partir de variables conocidas o fáciles de medir las variables que plantean dificultades. Incluso podemos encontrar con que, si pretendemos simular condiciones pasadas, los objetos sobre los que deben medirse los parámetros no existan ya y la única opción sea hacer una estimación razonable.

Estrategias de muestreo

Las medidas, al igual que los modelos, son también abstracciones de la realidad. Por tanto, al igual que en la modelización, es imprescindible diseñar la estrategia de muestreo de forma adecuada a los parámetros que van a medirse y a los objetivos de la campaña de muestreo. Hay que tener en cuenta que un modelo puede no dar los resultados adecuados debido a una campaña de muestreo inadecuada.

Entre los aspectos que resulta necesario tener en cuenta cabe destacar:

1. Las variables y parámetros que van a medirse

2. Las técnicas que se utilizarán
3. El esquema espacial y temporal de muestreo

Debe ponerse especial cuidado en el muestreo de los parámetros con un alto grado de sensibilidad, aunque en realidad la sensibilidad de un modelo a un parámetro concreto depende en numerosas ocasiones de los valores de otras variables, por lo que el análisis de sensibilidad *a priori* no es fácil.

En los últimos años ha habido un importante auge de los modelos distribuidos en los que se representa de forma explícita la heterogeneidad espacial. La sofisticación de estos modelos ha sobrepasado la capacidad para parametrizarlos.

Si se dispone de conocimiento *a priori* acerca del sistema que se está estudiando podemos reducir el esfuerzo de muestreo mediante la aplicación de muestreos de tipo estratificado basados en variables cuya distribución espacial resulta conocida y que tiene una relación significativa con la variable a medir. Los muestreos jerárquicos pueden resultar útiles para intensificar el muestreo en zonas de mayor variabilidad.

6.1.2 Optimización

Cuando estamos trabajando con un modelo empírico, los valores de los parámetros deben calibrarse a partir de una muestra de valores de entrada y de salida del modelo y de una función objetivo cuyo valor debe minimizarse.

Uno de los objetivos más sencillos sería un modelo de regresión lineal que utiliza una variable de entrada x y una variable de salida y . El modelo a calibrar sería una ecuación de tipo $y' = A + BX$ en el que los parámetros A y B deben ser tales que minimicen la función objetivo $\sum_{i=1}^n ny' - y^2$.

Los valores de los parámetros, tras calibrar el modelo, deben tener valores con cierto sentido físico, si no es así puede que el modelo tenga poder predictivo para el conjunto de datos utilizado en la calibración pero tendrá muy poca capacidad explicativa y será muy poco generalizable.

En el proceso de optimización debe tratar de ajustarse el modelo no sólo a las variables de salida sino también a las de estado.

Una vez calibrado el modelo, en la fase de validación debe utilizarse un conjunto de valores diferentes a los utilizados en la fase de calibración.

La calibración de modelos empíricos distribuidos resulta especialmente compleja debido al elevado número de parámetros con los que tratar, pudiéndose llegar a calibraciones multiobjetivo o a calibraciones por áreas separadas.

6.2 Validación y Verificación

Validación es el proceso de comprobar que los resultados aportados por el modelo para las variables de salida y de estado no son muy diferentes a los medidos en la realidad. Existen diferentes índices que permiten cuantificar el grado de ajuste entre los datos medidos y los resultados del modelo.

Coefficiente de determinación r^2 , es decir el cuadrado del coeficiente de correlación:

$$r^2 = \frac{cov(o, m)}{sd(o)sd(m)}^2 \quad (6.1)$$

donde $cov(o, m)$ es la covarianza entre los valores observados y los devueltos por el modelo, $sd(o)$ la desviación típica de los valores observados y $sd(m)$ la desviación típica de los resultados del modelo.

Es el más utilizado, oscila entre 0 y 1 y representa el porcentaje de varianza en los datos observados explicado por el modelo. El problema de este índice es que es insensible a desviaciones constantes o proporcionales, es decir que si se cumple que $m_i = A + B o_i$, r^2 será igual a 1 haciéndonos creer que el modelo responde perfectamente a la realidad. Otro problema es que es muy sensible a los valores extremos que harán crecer el índice dando de nuevo una falsa apariencia de buen ajuste.

Eficiencia del modelo se debe a Nash y Sutcliffe (1970), se basa en la ecuación:

$$NS = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (o_i - m_i)^2}{\sum_{i=1}^n (o_i - \bar{o})^2} \quad (6.2)$$

Este índice produce resultados menores o iguales a 1, si el resultado es 1 el ajuste es perfecto, si es cero el error es del mismo orden de magnitud que la varianza de los datos observados por lo que la media de los datos observados tendrá una capacidad predictora similar al modelo. Valores inferiores a cero implican que la media tiene una capacidad predictora más alta que el modelo (lo que implica desde luego que el modelo es muy malo).

Este índice no es sensible al efecto de los valores proporcionales pero sigue siendo sensible a los valores extremos.

Índice de ajuste modificado (Wilmott (1981))

$$W = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (o_i - m_i)^2}{\sum_{i=1}^n (|m_i - \bar{o}| + |o_i - \bar{o}|)^2} \quad (6.3)$$

oscila entre 0 y 1, este último valor implica un ajuste perfecto. Al igual que los anteriores es sensible a la presencia de valores extremos.

RMSE/MAE, el cociente entre el error cuadrático medio y el error absoluto medio permite determinar hasta que punto la existencia de valores extremos está afectando al modelo.

$$\frac{RMSE}{MAE} = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (o_i - m_i)^2}{n}}}{\frac{\sum_{i=1}^n |o_i - m_i|}{n}} \quad (6.4)$$

6.3 Errores e incertidumbre

Es necesario comprobar que el modelo se comporte de manera adecuada y los valores obtenidos por el modelo para las variables de estado y de salida son similares a los medidos directamente. Lo más habitual es utilizar procedimientos estadísticos basados en las magnitudes de los errores.

Error es la diferencia entre el valor estimado de una variable (\hat{x}) y el valor, medido directamente o no, que se considera correcto (x):

$$\epsilon_x = \frac{|x - \hat{x}|}{|x|} \quad (6.5)$$

Suele utilizarse el siguiente estimador del error medio:

$$E = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (mod - med/med)^2}{N}} \quad (6.6)$$

Exactitud es el grado de similitud entre los valores medidos y los obtenidos por el modelo. Se trata de un concepto complementario al de error de manera que $Exactitud = 100 - Error$ expresados en tantos por ciento.

No debe confundirse exactitud con **precisión**. Este último concepto refleja el grado de detalle con el que una variable puede medirse. Un metro de campo, por ejemplo, tiene menor precisión que un pie de rey pero dará posiblemente menor error al medir el diámetro de un tronco. Los ordenadores son capaces de devolvernos valores ilusoriamente precisos con muchas cifras decimales, pero es necesario tener en cuenta que su exactitud no puede ser mayor que la precisión de los parámetros y variables de entrada.

Si el modelo produce errores inaceptables puede ser por varias causas:

- El modelo no es apropiado para modelizar el sistema
- El modelo es apropiado pero está mal construido (errores de programación, errores en las ecuaciones)
- Las variables y parámetros utilizados no se han medido correctamente

La solución de estos problemas implica la reconstrucción del modelo. Por tanto el proceso de modelización es iterativo e interactivo.

Los errores pueden surgir en cualquier fase del proceso de modelización, en la identificación, en la toma de datos, pueden aparecer errores en el cálculo con decimales, etc. De hecho podría darse el caso de que rechazásemos un buen modelo por dar resultados erróneos cuando el error en realidad estaba en las variables de entrada.

De este modo podemos clasificar los errores en:

Errores de aproximación . Surgen cuando se utilizan métodos numéricos para resolver integrales o ecuaciones diferenciales. Los métodos numéricos son por su propia naturaleza métodos aproximados en los que siempre existe una desviación respecto a la solución real. La magnitud de esta desviación es, en todo caso, controlable y puede ser reducida aunque a costa de incrementar los tiempos de computación.

Errores computacionales . Cuando un ordenador almacena un número utiliza para ello un determinado número de bytes (dependiendo) del tipo de número (entero o real, con signo o sin signo), en algunas operaciones matemáticas los decimales deben truncarse para poder almacenar dicho número. Las desviaciones que se producen de este modo son pequeñas, pero pueden propagarse y acumularse a lo largo de cientos de operaciones en un modelo y dar lugar a desviaciones importantes respecto a los resultados reales.

Errores de propagación . Los pequeños errores en los datos de entrada o en los parámetros del modelo pueden propagarse a lo largo de las sucesivas iteraciones en los cálculos implicados en la ejecución de un modelo.

En modelización es siempre necesario abordar el problema de la propagación de errores ya que al incluir cálculos desarrollados a lo largo de múltiples iteraciones, pequeños errores en los datos de entrada pueden incrementarse de forma considerable a lo largo de la ejecución del modelo. Los estudios realizados acerca de propagación de errores parten de la formulación de error vista anteriormente para establecer como se propagan los errores en el caso de los diversos operadores que pueden verse implicados:

- En una suma en la que ambos sumandos tienen el mismo signo

$$y = x_1 + x_2 \quad (6.7)$$

$$\epsilon_y \approx \frac{x_1}{x_1 + x_2} \epsilon_{x_1} + \frac{x_2}{x_1 + x_2} \epsilon_{x_2} \quad (6.8)$$

Puesto que $\frac{x_1}{x_1 + x_2} + \frac{x_2}{x_1 + x_2} \equiv 1$ sólo una fracción de los errores se propaga.

- Si los dos sumandos tienen distinto signo, aunque $\frac{x_1}{x_1+x_2} + \frac{x_2}{x_1+x_2} \equiv 1$ uno de los dos términos será menor que -1 o mayor que 1 con lo que uno de los errores se amplificará
- En el caso de un producto $\epsilon_y \approx \epsilon_{x_1} + \epsilon_{x_2}$
- Para una división $\epsilon_y \approx \epsilon_{x_1} - \epsilon_{x_2}$
- En el caso de una potencia $y = x^p$ el error será $\epsilon_y \approx p\epsilon_x$. Si $p < 1$ (raíces) no hay amplificación del error, pero si lo habrá si $p > 1$
- En caso de aparezcan varias de las operaciones anteriores combinadas, simplemente habrá que combinar las reglas anteriores en el orden apropiado
- En algunos casos será necesario calcular derivadas para hacer una estimación de errores:

$$y = f(x) \quad (6.9)$$

$$\epsilon_y \approx \frac{df(x)}{dx} \epsilon_x \quad (6.10)$$

En los modelos más complejos, una aproximación de este tipo al análisis de la propagación de errores puede ser absolutamente inviable. Un enfoque alternativo puede ser utilizar métodos Montecarlo, estos consisten en ejecutar varias veces el modelo añadiendo términos de error a los datos de entrada procedentes de funciones de distribución conocidas, a partir del conjunto de resultados puede establecerse el grado de error ϵ_y que corresponde a un error ϵ_x . Este tipo de aproximaciones puede servir incluso para analizar los efectos de los errores en parámetros distribuidos, en este caso para obtener resultados fiables necesitaríamos incluso centenares de simulaciones.

No siempre es posible validar adecuadamente un modelo debido a que no es posible medir todas las variables especificadas en el modelo con el nivel de exactitud adecuado, o a que la escala espacial o temporal del modelo lo hace imposible. En estos casos puede ser útil la comparación con otros modelos para determinar las diferencias.

6.4 Análisis de sensibilidad

El análisis de sensibilidad mide cuanto pueden llegar a afectar a los resultados de un modelo variaciones relativamente pequeñas en los valores de los parámetros. Tiene un gran número de utilidades:

- En primer lugar sirve para comprobar la lógica interna de un modelo, ayuda a entender como funciona el modelo o porque no funciona correctamente y aprender más acerca de su funcionamiento.
En un modelo pequeño, con pocos parámetros puede resultar obvio a partir del estudio de sus ecuaciones que parámetros van a tener más influencia sobre los resultados del modelo; pero en un modelo complejo esto no será tan obvio y puede resultar imprescindible un análisis de sensibilidad.
- Para definir la importancia de cada parámetro lo que servirá para determinar el grado de esfuerzo que debe prestarse a su medición o muestreo.
- Medir como la incertidumbre en la determinación de un parámetros puede afectar a la certidumbre del parámetro.
- Detectar si el modelo está *sobreparametrizado*, esto ocurre cuando existen parámetros a los que el modelo resulta insensible, en este caso será necesario eliminar algunos para simplificar el modelo.

También puede hacerse un análisis de sensibilidad de las funciones, se trata de determinar como afectan distintas formulación de las ecuaciones utilizadas para modelizar los procesos y relaciones del sistema a los resultados finales.

Uno de los presupuestos básicos del análisis de sensibilidad, y que no tiene por que cumplirse en todos los casos, es que el papel que cada parámetro juega en el modelo es una representación razonable de su papel en el sistema. De este modo la sensibilidad del modelo al parámetro será equivalente a la sensibilidad del sistema al parámetro.

El análisis de sensibilidad suele hacerse ejecutando el modelo para diversos valores del parámetro cuya sensibilidad quiere calcularse dejando fijos todos los demás. Sin embargo la sensibilidad a un parámetro dependerá de los valores adoptados por los demás parámetros, con lo que puede ser más complejo hacer un análisis de sensibilidad. Otra consideración importante es que si el modelo es muy sensible a un parámetro pero este varía muy poco, dicha sensibilidad no va a ser relevante.

En algunos casos puede no ser realista hacer un análisis de sensibilidad ejecutando el modelo para todas las posibles combinaciones de todos los rangos de las variables de interés. En estos casos es preferible utilizar métodos de Montecarlo para hacer unas pocas pruebas con algunos de los posibles valores de las variables a comprobar.

Un caso especialmente complicado es el de los modelos distribuidos en los cuales las estructuras de autocorrelación presentes en los parámetros y variables de estado van a generar autocorrelación en los errores que pueden aumentar de manera no lineal la incertidumbre de los modelos.

6.5 Incertidumbre en la modelización

Zimmermann(2000) define seis causas de incertidumbre en la modelización:

1. Falta de información, requiere la recolección de información adicional aunque hay que tener en cuenta que la información debe ser adecuada tanto en calidad como en cantidad. En todo caso la complejidad de los sistemas ambientales obliga a una simplificación de la información disponible. El objetivo estaría en buscar un adecuado punto intermedio entre simplicidad y completitud.
2. Evidencias contradictorias, en ocasiones los resultados de un modelo pueden aparecer en contradicción con otros resultados previos o con la evidencia de campo, es necesario evaluar si estas contradicciones se deben a errores o están realmente presentes.
3. Ambigüedad, cuando la información se suministra en un formato que puede dar lugar a confusiones
4. Incertidumbre de las medidas por falta de precisión, puede solventarse utilizando técnicas de medición más precisas. Sin embargo la inversión en instrumental caro no garantiza la falta de errores.
5. Los juicios *a priori* del investigador a la hora de evaluar los resultados de un modelo pueden ser diferentes a los de otro investigador.