

Sensibilidad paramétrica

1

Supongamos que tenemos un modelo $\frac{dy}{dt} = f(y, \phi, t)$
 que tiene una solución (única) $y = y(t, \phi)$

Supongamos cambiamos uno de los parámetros ϕ_j a $\phi_j + \Delta\phi_j$ $y = y(t, \phi_j + \Delta\phi_j)$

Expandiendo según Taylor $y(t, \phi_j + \Delta\phi_j) = y(t, \phi_j) + \frac{\partial y(t, \phi_j)}{\partial \phi_j} \cdot \Delta\phi_j + \frac{\partial^2 y(t, \phi_j + \theta \cdot \Delta\phi_j)}{\partial \phi_j^2} \cdot \frac{\Delta\phi_j^2}{2}$

Si el salto es lo suficientemente pequeño $\Delta y = y(t, \phi_j + \Delta\phi_j) - y(t, \phi_j) \approx \frac{\partial y(t, \phi_j)}{\partial \phi_j} \cdot \Delta\phi_j$

Y definimos la **sensibilidad local** (de primer orden) como $s(y; \phi_j) = \frac{\partial y(t, \phi_j)}{\partial \phi_j} = \lim_{\Delta\phi_j \rightarrow 0} \frac{y(t, \phi_j + \Delta\phi_j) - y(t, \phi_j)}{\Delta\phi_j}$

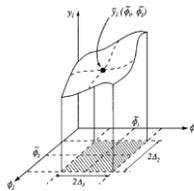
Que también se puede normalizar, también llamada **sensibilidad relativa** $S(y; \phi_j) = \frac{\phi_j}{y} \cdot \frac{\partial y}{\partial \phi_j} = \frac{\partial \ln y}{\partial \ln \phi_j} = \frac{\phi_j}{y} \cdot s(y; \phi_j)$

2

Sensibilidad global

Las sensibilidades locales proporcionan información sobre el efecto de un pequeño cambio en cada parámetro de entrada, en torno a un valor nominal fijo, sobre cada variable dependiente.

En cambio, las sensibilidades globales describen el efecto de grandes variaciones simultáneas de todos los parámetros.



3

Método diferencial directo

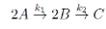
$$\frac{dy}{dt} = f(y, \phi, t)$$

$$\frac{d(\partial y / \partial \phi_j)}{dt} = \frac{ds(y; \phi_j)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial \phi_j} + \frac{\partial f}{\partial \phi_j} = \frac{\partial f}{\partial y} \cdot s(y; \phi_j) + \frac{\partial f}{\partial \phi_j}$$

$$\frac{ds(y; \phi_j)}{dt} = J(t) \cdot s(y; \phi_j) + \frac{\partial f(t)}{\partial \phi_j} \quad J(t) = \frac{\partial f}{\partial y} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial y_1} & \frac{\partial f}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f}{\partial y_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial y_1} & \frac{\partial f}{\partial y_2} & \dots & \frac{\partial f}{\partial y_n} \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial f(t)}{\partial \phi_j} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial \phi_j} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial \phi_j} \end{bmatrix}$$

4

Ejemplo: Reactor Batch isotérmico



con $k_1 = 1 \text{ L/mol.h}$, $k_2 = 2 \text{ L/mol.h}$
 Inicialmente el reactor se carga con solo 1 mol/L del reactivo A.

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_A^2$$

$$\frac{dC_B}{dt} = k_1 C_A^2 - k_2 C_B^2$$

$$\frac{dC_C}{dt} = k_2 C_B^2$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{bmatrix} -2k_1 C_A & 0 & 0 \\ 2k_1 C_A & -2k_2 C_B & 0 \\ 0 & 2k_2 C_B & 0 \end{bmatrix} \quad \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{p}} = \begin{bmatrix} -C_A^2 & 0 \\ C_A^2 & -C_B^2 \\ 0 & C_B^2 \end{bmatrix}$$

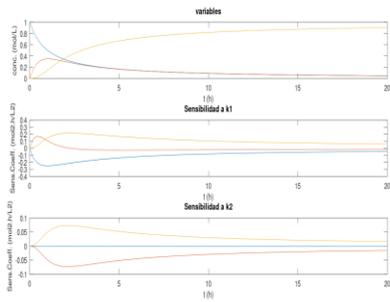
$$\dot{\mathbf{S}} = \begin{bmatrix} \dot{S}_{11} & \dot{S}_{12} \\ \dot{S}_{21} & \dot{S}_{22} \\ \dot{S}_{31} & \dot{S}_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2k_1 C_A & 0 & 0 \\ 2k_1 C_A & -2k_2 C_B & 0 \\ 0 & 2k_2 C_B & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \\ S_{31} & S_{32} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -C_A^2 & 0 \\ C_A^2 & -C_B^2 \\ 0 & C_B^2 \end{bmatrix}$$

5

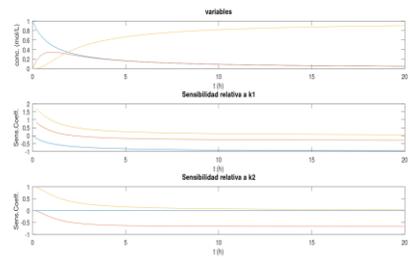
```

1 % Sensibilidad. Reactor batch
2 clear;clc;clf
3
4 k1 = 1; % L/mol.h
5 k2 = 2; % L/mol.h
6
7 function dx_dt = batch(x,t,k1,k2)
8 Ca = x(1); Cb = x(2); Cc = x(3);
9 S11 = x(4); S21 = x(5); S31 = x(6); S12 = x(7); S22 = x(8); S32 = x(9);
10 S = [S11 S12; S21 S22; S31 S32];
11
12 dCa_dt = -k1*Ca^2;
13 dCb_dt = k1*Ca^2 - k2*Cb^2;
14 dCc_dt = k2*Cb^2;
15
16 df_dx = [-2*k1*Ca 0 0; 2*k1*Ca -2*k2*Cb 0; 0 2*k2*Cb 0];
17 df_dp = [C_A^2 0; C_A^2 -C_B^2; 0 C_B^2];
18
19 dS_dt = df_dx*S + df_dp; dS_dt = dS_dt(t);
20
21 dx_dt = [dCa_dt dCb_dt dCc_dt dS_dt'];
22 endfunction
23
24 x0 = [1 0 0 zeros(1,6)];
25 t = linspace(0,20,101);
26 x = lodeo(@(x,t) batch(x,t,k1,k2),x0,t);
27
28 subplot(3,1,1)
    
```

6



7



8

Cuando no se puede calcular analíticamente
Método de diferencias finitas

$$s(y_i; \phi_j) = \frac{\partial y_i}{\partial \phi_j} \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta \phi_j} = \frac{y_i(t, \phi_j + \Delta \phi_j) - y_i(t, \phi_j)}{\Delta \phi_j}$$

(la expresión anterior es "hacia adelante", puede ser "hacia atrás" o "centrado")

9

Si construimos la matriz $S = [s_{ij}]$ $s_{ij} = \frac{p_j}{x_i} \frac{\partial x_i}{\partial p_j}$

La norma de las columnas s_j proporciona una medida de la importancia de los parámetros individuales. Una norma grande significa que un cambio de en el parámetro j tiene un efecto importante en el vector de resultados del modelo, si todos los demás parámetros son fijos. Se puede usar entonces el siguiente indicador para generar un ranking de importancia de cada parámetro:

$$\delta_j^{msqr} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_{ij}^2}$$

10

Otro indicador interesante es el índice de colinearidad: si los parámetros están muy correlacionados entonces no será fiable identificarlos individualmente.

Sobre la matriz de sensibilidades se realiza una normalización, cada columna (correspondiente a un parámetro) se normaliza

$$sn_j = \frac{s_j}{\|s_j\|}$$

Se buscan los valores propios de $SN^T * SN$

Y el indicador de colinearidad es $\gamma = \frac{1}{\sqrt{\lambda_{min}}}$

Cuanto mayor es mayor la colinearidad entre los parámetros; valores mayores a 20 indicarían que no se puede identificar ese conjunto de parámetros a la vez; en ese caso hay que probar con algún subconjunto que de menor índice.

11

El análisis de sensibilidad estocástico, se basa en el supuesto de que todos los parámetros de entrada son variables aleatorias cuyas funciones de densidad de probabilidad (FDP) son conocidas. En este caso, la sensibilidad global de la variable dependiente puede determinarse evaluando su correspondiente FDP.

$$\frac{dy}{dt} = f(y, \phi, t), \quad y(0) = y^i$$

Definimos un nuevo sistema $\frac{dx}{dt} = g(x, t)$ $x(0) = x^i$ $x = [x_1 \dots x_n \phi_1 \dots \phi_m]^T$
 $x^i = [x_1^i \dots x_n^i \phi_1^i \dots \phi_m^i]^T$
 $g(x, t) = [f_1 \dots f_n \ 0 \dots 0]^T$

Supongamos las condiciones iniciales tienen una probabilidad conocida $p^i(x)$.

Entonces las variables tendrán una probabilidad $p(x, t)$ que cumplirá

$$\frac{\partial p(x, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} [p(x, t) f_i] = 0, \quad p(x, 0) = p^i(x) \quad \text{Y el valor esperado será} \quad E(x, t) = \int x_i p(x, t) dx$$

12

Índices de Sensibilidad de Sobol

Dado un modelo de la forma $Y = f(X_1, X_2, \dots, X_n)$, siendo Y un escalar, un efecto de primer orden basado en la varianza para un factor genérico X_i puede escribirse como

$$V_{X_i}(E_{\mathbf{X}_{-i}}(Y | X_i))$$

donde X_i es el factor i -ésimo y \mathbf{X}_{-i} denota la matriz de todos los factores excepto X_i . El significado del operador E ("valor esperado") es que la media de Y se toma sobre todos los valores posibles de \mathbf{X}_{-i} manteniendo X_i fijo. La varianza externa se toma sobre todos los valores posibles de X_i . La medida de sensibilidad asociada (coeficiente de sensibilidad de primer orden) se escribe

$$S_i = \frac{V_{X_i}(E_{\mathbf{X}_{-i}}(Y | X_i))}{V(Y)}$$

Deshaciendo la varianza:

$$V_{X_i}(E_{\mathbf{X}_{-i}}(Y | X_i)) + E_{X_i}(V_{\mathbf{X}_{-i}}(Y | X_i)) = V(Y)$$

por lo que S_i varía entre 0 y 1.

13

También se puede definir el índice de sensibilidad total:

$$S_{T_i} = \frac{E_{\mathbf{X}_{-i}}(V_{X_i}(Y | \mathbf{X}_{-i}))}{V(Y)} = 1 - \frac{V_{\mathbf{X}_{-i}}(E_{X_i}(Y | \mathbf{X}_{-i}))}{V(Y)}$$

S_{T_i} mide el efecto total, es decir, los efectos de primer orden y de orden superior (interacciones) del factor X_i . Una forma de visualizar esto es considerando que $V_{\mathbf{X}_{-i}}(E_{X_i}(Y | \mathbf{X}_{-i}))$ es el efecto de primer orden de \mathbf{X}_{-i} , de modo que $V(Y)$ menos $V_{\mathbf{X}_{-i}}(E_{X_i}(Y | \mathbf{X}_{-i}))$ debe dar la contribución de todos los términos de la descomposición de la varianza que incluyen X_i .

14

La forma de calcular los índices desarrollada por Saltelli es la siguiente:

- Se generan aleatoriamente dos matrices A y B , con valores pseudo-experimentales de los parámetros, de $N \times m$ (N n° de simulaciones, m , n° de variables medidas).
- Se calculan las correspondientes salidas a evaluar $f(A)$ y $f(B)$.
- Se genera un set de matrices C , en las que cada columna de A es sustituida por la correspondiente columna de B (o al revés).
- Se calculan las correspondientes salidas $f(C)$.
- Hay varias formas de poder estimar los correspondientes índices. Una de ellas es:

$$S_{ii} = 1 - \frac{\frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N (f(B)_j - f(C)_j)^2}{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(A)_j^2 - f_0^2}$$

$$S_{pi} = \frac{\frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N (f(A)_j - f(C)_j)^2}{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N f(A)_j^2 - f_0^2}$$

Donde f_0 es el valor medio de $f(A)$

15