

MÉTODOS MATEMÁTICOS PARA MODELOS BASADOS EN AGENTES

Autor: BRUNO ADOLFO BUFFA
Director: DR. ANDRÉS ALBERTO BARREA

UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA

Marzo de 2015

Resumen

En este trabajo se desarrolla un marco matemático para el abordaje de los Modelos Basados en Agentes. Dicho marco es el denominado *marco de los modelos algebraicos*, el cual está referido a sistemas dinámicos polinomiales sobre un cuerpo finito. Este marco se presenta como un complemento al llamado *Protocolo ODD* con el objetivo de estandarizar la presentación y formulación de este tipo de modelos. En última instancia se exponen tres ejemplos de Modelos Basados en Agentes con el propósito de ilustrar los beneficios originados a partir de la inclusión del marco propuesto y finalmente se realiza una propuesta sobre el modo de proceder frente a modelos de tipo estocásticos mediante la presentación de las llamadas *Redes Booleanas Probabilísticas*.

Palabras claves:

- Modelos Basados en Agentes
- Sistemas Dinámicos Polinomiales
- Redes Booleanas Probabilísticas

Código de Clasificación: 37N99



Métodos Matemáticos para Modelos Basados en Agentes por Bruno Adolfo Buffa se distribuye bajo una Licencia Creative Commons Atribución-CompartirIgual 2.5 Argentina.

Índice general

Resumen	2
1. Introducción	4
2. Preliminares	8
3. Formulación matemática de los MBA	12
3.1. Introducción	12
3.2. Protocolo ODD	13
3.3. Marco matemático de los modelos algebraicos	15
3.4. Ejemplos	18
4. Discusión	29
5. Conclusión y trabajo a futuro	35
Bibliografía	37

Capítulo 1

Introducción

Un *modelo* puede ser definido como la representación de algún sistema real que tiene por fin último la intención de resolver un problema o responder cierta pregunta relacionada a ese sistema. En términos generales, el objetivo del proceso de modelado es entender el funcionamiento, explicar patrones observados y predecir el comportamiento frente a eventuales cambios en el sistema estudiado.

Todo modelo es una simplificación del sistema en la cual sólo se incluyen los aspectos que son relevantes para lograr el objetivo del modelado; es decir que se tienen en cuenta únicamente aquellos aspectos que estén relacionados con la pregunta que se quiera responder a través de la construcción del modelo. De esta manera, el problema que se intenta resolver, o sea el propósito del modelo, funciona como un filtro para incluir o no cierta característica del sistema real estudiado en dicho modelo ([RG]).

Dado que el modelo es una simplificación del sistema, es necesario establecer criterios, basados en las principales características y regularidades que identifican dicho sistema, para decidir si el modelo es considerado una buena representación del mismo. En este sentido, los autores Calvetti y Somersalo (ver [CS]) manifiestan que un modelo es siempre una simplificación y es considerado un buen modelo aquel que logre captar las características esenciales de la realidad y dejar fuera aquellos aspectos no esenciales.

Profundizando en esta perspectiva, dichos autores establecen que los *modelos matemáticos* son aquellos que expresan particularidades significativas del fenómeno real estudiado en términos matemáticos, sabiendo desde un inicio que los interrogantes de interés pueden ser respondidos más exacta y definitivamente usando herramientas matemáticas. Por esto es que ellos manifiestan que el modelado matemático es un trabajo de traducción del lenguaje natural no matemático y cualitativo a una forma matemática rigurosa que es generalmente cuantitativa. Además, este trabajo de modelado

implica decidir qué tipo de herramientas matemáticas son necesarias para el manejo de tal modelo, evaluar si es posible encontrar una solución adecuada y valorar cuán precisa se puede esperar que sea esta solución.

Por otra parte, en el trabajo de Railsback y Grimm (ver [RG]) se sugieren ciertos pasos inherentes a un proceso de modelado, llamado “Ciclo de Modelado”. Este hace referencia a una serie de tareas que se deben realizar sistemáticamente y de forma iterativa para mejorar en cada paso el modelo planteado e incluso poder replantear el problema que se busca resolver y el interrogante que se intenta responder. Este Ciclo de Modelado consta de cinco etapas que consisten en: 1) Formular el problema o pregunta que se quiere responder; 2) Plantear las hipótesis sobre los procesos y estructuras esenciales del sistema real que se está estudiando; 3) Construir el modelo propiamente dicho mediante la elección de escalas, entidades u objetos, variables de estado, procesos y parámetros; 4) Implementar el modelo, paso en el cual se utiliza la matemática y los programas de computación para traducir el modelo “verbal” en objetos formales que poseen una dinámica independiente regida por la lógica interna del modelo; 5) Analizar, evaluar y revisar el modelo, etapa en la que se debe corroborar si se responde la pregunta que ha guiado todo el proceso de modelado y comprobar si el camino elegido es el óptimo para resolver el problema.

Un tipo particular de modelado es el *modelado basado en agentes* o modelado basado en individuos –como se los denomina generalmente en el ámbito de la biología y ecología. Los modelos basados en agentes (MBA) son aquellos que, en vez de modelar al sistema en su totalidad (como en el paradigma de modelado con ecuaciones diferenciales), modelan a los agentes individuales que lo constituyen. Por esto se destaca que el punto de vista fundamental de este tipo de modelos es que el fenómeno macroscópico complejo emerge de la acción de los agentes individuales que sumados constituyen el sistema ([CS]).

Los individuos o agentes pueden representar a seres humanos, instituciones, organismos, células, etc. puesto que los MBA describen a los individuos como entidades únicas y autónomas que interactúan con todas las demás y con su entorno local. Se entiende que en tanto entidades únicas y autónomas, los agentes se diferencian entre sí mediante características particulares como pueden ser el tamaño, la ubicación o su historia, a la vez que cada uno de ellos actúa independientemente de los demás y persigue sus propios objetivos. Otra característica importante atribuida a los agentes es que poseen una conducta adaptativa, es decir que se les otorga la capacidad de ajustar su comportamiento dependiendo de su estado actual, el de los demás agentes y el de su entorno. Por todo esto es que en los MBA la dinámica propia del sistema surge a partir de las interacciones de los componentes individuales entre sí y con su entorno ([RG]).

Para otros autores (ver [Hin], [Izq]), se pueden caracterizar a los MBA como modelos computacionales que consisten en agentes individuales, los cuales siguen un conjunto de reglas que definen como interactuar con los otros agentes y con su ambiente. La simulación computacional es usada para analizar y evaluar la evolución del sistema como un todo.

Entre los ejemplos que podemos encontrar de modelos multiagentes donde los elementos constitutivos (agentes) interactúan entre sí, se destacan procesos inherentemente discretos tales como células inmunitarias individuales interactuando entre ellas en una porción de tejido (Ver [Cas], [Eub], [Pog], [Wan], [PSF]). En otros trabajos, tales como: [ECH], [An], [Man] se pueden encontrar MBA más sofisticados, los cuales simulan sistemas biológicos como el crecimiento tumoral y problemas relativos al sistema inmunitario.

Por lo expuesto hasta aquí, es claro que la simulación y el modelado basado en agentes es un paradigma de modelización útil para estudiar fenómenos en una amplia gama de campos, desde la biología molecular hasta la ecología, como así también en economía y sociología. Sin embargo, actualmente, no existe un acuerdo en la forma estándar de especificar dichos modelos. De hecho, las descripciones de los modelos no suelen estar dadas en términos matemáticos, haciendo difícil la tarea de utilizar herramientas matemáticas para estudiarlos, lo cual se realiza habitualmente a través de simulaciones y análisis estadístico de las mismas. A partir de estos inconvenientes se hace evidente la necesidad de encontrar un marco matemático lo suficientemente general de modo que la mayoría de los modelos discretos puedan ser formulados dentro de este marco y que además sea suficientemente rico como para proporcionar herramientas teóricas y computacionales útiles en la práctica que permitan el análisis del modelo ([HMJ]).

Como se planteó anteriormente, uno de los principales inconvenientes para el abordaje de los MBA es la falta de una descripción formal que permita implementarlos, analizarlos y evaluarlos utilizando herramientas matemáticas rigurosas. Con el fin de abordar este asunto, Grimm y otros (Ver [Gri]) proponen un protocolo para la especificación de modelos basados en agentes, el llamado “ODD Protocolo”, que proporciona una forma estándar para describir tales modelos.

El presente trabajo, apoyándose en la propuesta realizada en el artículo de Hinkelmann ([HMJ]) de encontrar un marco matemático para especificar y analizar los MBA, propone profundizar el trabajo de Grimm ([Gri]) y plantear una adición al protocolo ODD. Es decir, para el caso en el cual los agentes puedan tener una cantidad discreta de estados posibles se propone una caracterización de los mismos en base a sistemas dinámicos polinomiales de la siguiente manera.

Sea x_1, \dots, x_n una colección de variables que toman valores en un cuerpo

finito \mathbb{F} , dichas variables representan los agentes interactuantes en el sistema y los elementos de \mathbb{F} todos sus posibles estados. A cada variable x_i se le asocia una función de actualización local $f_i : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}$. Aquí se asume, teniendo en cuenta la conducta adaptativa atribuida a los agentes, que para actualizar su estado la variable considera los valores de estado de sus vecinos, los que están definidos por un grafo que codifica las relaciones de dependencia entre las variables.

A partir de dicho marco matemático, que se puede denominar marco de los modelos algebraicos, se presentan tres ejemplos de modelos basados en agentes implementando para su análisis el desarrollo expuesto anteriormente. Por último se formulan discusiones y propuestas surgidas de este análisis.

Capítulo 2

Preliminares

En este capítulo se enuncian los principales conceptos y resultados que serán usados a lo largo de este trabajo. Las pruebas de los teoremas y corolarios se pueden encontrar en el trabajo de Lidil y Niederreiter (ver [LN]).

Definición 1. Se definen los conceptos de grupo abeliano, anillo, dominio íntegro y anillo de división.

(i) Un *grupo* es un conjunto G dotado de una operación binaria $*$ sobre G que satisface las tres propiedades siguientes:

- a) La operación $*$ es asociativa; esto es, $a*(b*c) = (a*b)*c \quad \forall a, b, c \in G$.
- b) Existe un elemento $e \in G$ llamado unidad de G con respecto a $*$, tal que para todo $a \in G$, se cumple $a*e = a = e*a$.
- c) Para cada $a \in G$, existe un elemento $a^{-1} \in G$ llamado inverso de a con respecto a $*$, que cumple $a*a^{-1} = e = a^{-1}*a$.

Además, G se dice *abeliano* o conmutativo si se cumple:

- d) $a*b = b*a \quad \forall a, b \in G$.

(ii) Un *anillo* $(R, +, \cdot)$ es un conjunto R munido de dos operaciones binarias, denotadas por $+$ y \cdot que satisfacen:

- a) R es un grupo abeliano con respecto a $+$.
- b) \cdot es asociativa; esto es, $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c) \quad \forall a, b, c \in R$.
- c) Se cumple la propiedad distributiva; esto es, $a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$ y $(b + c) \cdot a = b \cdot a + c \cdot a$, para todo $a, b, c \in R$.

Además un anillo es llamado *anillo conmutativo con unidad* si \cdot es conmutativa y tiene una unidad multiplicativa; esto es, si existe un elemento $e \in R$ tal que $a \cdot e = a = e \cdot a \quad \forall a \in R$.

Notación: Se denota 0 a la unidad de R como grupo abeliano con respecto a la adición $(+)$ y se denomina elemento nulo.

(iii) Un *dominio íntegro* es un anillo conmutativo con unidad $e \neq 0$ que satisface: si $a \cdot b = 0$ entonces $a = 0$ o $b = 0$.

(iv) Un *anillo de división* es un anillo tal que todos los elementos no nulos de R forman un grupo con respecto a la operación \cdot .

Definición 2. (i) Un *cuerpo* es un anillo de división conmutativo.

(ii) Un *cuerpo finito* \mathbb{F} es un cuerpo con una cantidad finita de elementos. El número de elementos de un cuerpo finito se denomina orden del cuerpo y se denota $|\mathbb{F}|$.

Ejemplo. $\mathbb{F}_2 = \{[0], [1]\}$ con las operaciones definidas por la relación de congruencia módulo 2 es un cuerpo y consta de dos elementos, luego es un *cuerpo finito*. Este es el cuerpo finito que se utiliza generalmente en modelos de *Redes Booleanas*.

Teorema 1. Sea \mathbb{F} un cuerpo finito. Entonces \mathbb{F} tiene p^n elementos, donde p es un número primo.

Teorema 2 (Existencia y Unicidad de Cuerpos Finitos). Para todo número primo p y todo entero positivo n existe un cuerpo finito con p^n elementos. Además, todos los cuerpos finitos de $q = p^n$ elementos, son isomorfos entre sí.

Definición 3. Sea R un anillo arbitrario.

(i) Un *polinomio* sobre R es una expresión de la forma:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n a_i x^i = a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n$$

donde n es un entero no negativo, los *coeficientes* a_i , $0 \leq i \leq n$, son elementos de R , y x es un símbolo no perteneciente a R , llamado una indeterminada sobre R . El conjunto de todos los polinomios con indeterminada x y coeficientes en R se denota $R[x]$

(ii) Un *polinomio en varias variables* sobre R es una expresión de la forma:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{v \in \mathbb{N}^n: |v| \leq M} a_v X^v$$

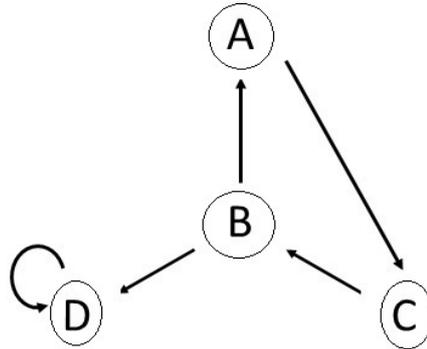
donde M un entero no negativo y si $v = (p_1, \dots, p_n)$, $X^v = x_1^{p_1} x_2^{p_2} \dots x_n^{p_n}$. El conjunto de todos los polinomios con indeterminadas x_1, \dots, x_n y coeficientes en R se denota $R[x_1, \dots, x_n]$

(iii) Un *Sistema Dinámico Polinomial* (SDP) es un sistema dinámico de tiempo discreto $f = (f_1, \dots, f_n) : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}^n$ donde cada función coordenada f_i es una función de n variables x_1, \dots, x_n , tomando, cada una de ellas, valores sobre un cuerpo \mathbb{F} , y cada f_i es un polinomio en las variables x_1, \dots, x_n .

Definición 4. Un *grafo dirigido* G es un par $G = (V, E)$ donde estos están definidos por:

- a) $V \neq \emptyset$ un conjunto no vacío de objetos llamados vértices o nodos.
- b) $E \subseteq \{(a, b) \in V \times V : a \neq b\}$ un conjunto de pares ordenados de elementos de V denominados aristas, donde por definición una arista va del primer vértice (a) al segundo (b).

Ejemplo. Sea V un conjunto de vértices y E un conjunto de aristas, donde $V = \{A, B, C, D\}$ y $E = \{(B, A), (B, D), (C, B), (A, C), (D, D)\}$. Entonces el grafo dirigido $G = (V, E)$ es de la forma:



Generalmente, a cada sistema se le asignan dos grafos dirigidos particulares definidos de la siguiente manera:

Definición 5. Sea \mathbb{F} un cuerpo finito y $f = (f_1, \dots, f_n) : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}^n$ un sistema dinámico de tiempo discreto sobre \mathbb{F}^n en las variables x_1, \dots, x_n .

(i) Se define el *grafo de dependencia* $D(f)$ de f como el grafo dirigido que tiene n vértices $1, \dots, n$, correspondientes a las variables x_1, \dots, x_n de f y que tiene un arista dirigida $i \rightarrow j$ si y sólo si x_i aparece en la función f_j . Es decir, $D(f)$ codifica la dependencia de las variables en f .

(ii) Se define el *espacio de fase* (o espacio de estado) de f , denotado por $S(f)$, como el grafo dirigido que tiene por vértices al conjunto \mathbb{F}^n y una arista dirigida de u a v si y sólo si $f(u) = v$. $S(f)$ codifica la dinámica de f .

Además, se define para cada $u \in \mathbb{F}^n$, la secuencia $\{u, f(u), f^2(u), \dots\}$ llamada la *órbita* de u y si $u = f^t(u)$ siendo t el menor número natural que cumple dicha igualdad, la secuencia $\{u, f(u), f^2(u), \dots, f^{t-1}\}$ se denomina *ciclo límite* de longitud t y u es un *estado periódico* de período t .

(iii) Un *atractor* del sistema dinámico f es un subconjunto del espacio de fase $A \subseteq S(f)$, al que, si se parte de ciertos puntos iniciales, el sistema evoluciona hacia A después de un tiempo suficientemente largo. Asimismo, para cada atractor se define su *base de atracción* como el conjunto de condiciones iniciales para las cuales el sistema dinámico, luego de una cierta cantidad de iteraciones, adopta algún estado perteneciente a A .

Definición 6. Un sistema dinámico polinomial puede ser iterado usando diferentes cronogramas de actualización. Estos se definen de la siguiente manera:

- (i) *Sincrónico*: Todas las variables son actualizadas al mismo tiempo;
- (ii) *Secuencial*: Las variables son actualizadas secuencialmente de acuerdo al orden especificado por un cronograma de actualización;
- (iii) *Asincrónico*: En cada paso de tiempo, se elige una variable de acuerdo a una distribución de probabilidad (usualmente uniforme) para ser actualizada.

Teorema 3 (Fórmula de Interpolación de Lagrange). Para $n \geq 0$, sean a_0, \dots, a_n , $n + 1$ elementos distintos de \mathbb{F} , y sean b_0, \dots, b_n , $n + 1$ elementos arbitrarios de \mathbb{F} . Entonces existe exactamente un polinomio $f \in \mathbb{F}[x]$ de grado $\leq n$ tal que $f(a_i) = b_i$ para $i = 0, \dots, n$. Este polinomio está dado por:

$$f(x) = \sum_{i=0}^n b_i \prod_{k=0, k \neq i}^n (a_i - a_k)^{-1} (x - a_k).$$

Corolario 1. Sea \mathbb{F} un cuerpo finito y $f : \mathbb{F} \rightarrow \mathbb{F}$ una función de \mathbb{F} en sí mismo. Entonces $f \in \mathbb{F}[x]$; es decir, f es un polinomio en \mathbb{F} .

Capítulo 3

Formulación matemática de los MBA

3.1. Introducción

En un proceso de modelado, y particularmente en el modelado basado en agentes, una etapa fundamental es la *formulación* del modelo. En este sentido, los autores Grimm y Railsback (ver [RG]) manifiestan que este paso está referido al avance desde la forma heurística del modelo en la que se piensa y delibera sobre el problema y las hipótesis que se tienen sobre el mismo, hacia una primera representación formal y rigurosa del modelo. En relación a esto, se establece que para la formulación de un modelo se deben tomar una serie de decisiones relacionadas a la estructura del mismo que consisten en diagramar ideas sobre éste, escribir palabras claves para explicar hipótesis y procesos, enunciar y formular ecuaciones, etc.

Siguiendo este razonamiento, dichos autores plantean que dentro de un proceso de modelado, se pueden identificar dos objetivos esenciales para las tareas de formulación y descripción del modelo. En primer lugar, le sirve al autor para identificar las decisiones que debe tomar a la hora de diseñar el modelo; ya que a partir de observar dicho modelo explícitamente, tiene mayores posibilidades de pensar y deliberar acerca de todas las partes del mismo. En cuanto a los objetivos de la formulación del modelo, se presenta el hecho de sentar las bases para la implementación del modelo. En el caso que se deba implementar dicha formulación en código computacional, es de suma importancia tener una descripción completa y clara respecto de cada uno de los aspectos del modelo para poder hacer una traducción al código sin ambigüedades. Por último, el objetivo más importante de la etapa de formulación del modelo es su *comunicación*. En efecto, a partir de la comu-

nicación del modelo a colegas y demás destinatarios, existe la posibilidad de que estos otros lo re-implementen, agreguen aspectos e incluso lo modifiquen, contribuyendo así a potenciar el conocimiento científico que se pueda obtener a partir del modelo y su análisis.

3.2. Protocolo ODD

3.2.1 Introducción

Actualmente, uno de los principales inconvenientes de los modelos basados en agentes es su falta de descripción formal, de modo que se favorezca la aplicación de herramientas matemáticas para su estudio. De hecho, muchas de las descripciones de los MBA presentes en la literatura son incompletas, haciendo improbable una nueva ejecución del modelo y de esa forma imposibilitando la réplica de sus resultados. Por otra parte, a menudo se encuentran MBA descriptos mediante la utilización de una gran cantidad de palabras y de forma superflua, quitando la simplicidad y claridad necesaria para la comprensión tanto del modelo como de sus resultados.

Frente a estos inconvenientes, una forma que resulta beneficiosa para superarlos es la *estandarización* en la manera de formular y describir los MBA. Efectivamente, en pos de lograr un acuerdo en una forma estándar para la descripción de este tipo de modelos, en el año 2006 un grupo de modeladores desarrollaron el denominado “Protocolo ODD” ([Gri]). En términos generales, el uso de este protocolo tiene el propósito de crear descripciones prácticas que se puedan comprender de manera rápida y sencilla, así como también, ayudarle al autor a organizar la información que tiene disponible de forma consistente y ordenada.

3.2.2 Componentes del Protocolo ODD

Las siglas ODD están referidas a los componentes clave del “Protocolo ODD” y corresponden a los términos en inglés: “Overview, Design concepts and Details”, lo que se puede traducir como: “visión general, conceptos de diseño y detalles”.

El protocolo está compuesto por siete elementos principales que son aquellos que un modelador debe establecer y diseñar a la hora de construir un MBA. A estos siete elementos se los pueden agrupar en referencia a cada uno de los componentes clave mencionados anteriormente. Los primeros tres (propósito; entidades, variables de estado y escalas; visión general de los procesos

y programación), se relacionan con la *visión general* acerca de qué es y cómo está diseñado el modelo. En segundo lugar, se encuentran los *conceptos de diseño*, los cuales representan las características esenciales del MBA. Finalmente, se encuentran tres elementos (inicialización, entradas, submodelos) que tienen el objetivo de establecer los *detalles* necesarios para completar la descripción del modelo.

A continuación, se enuncian detalladamente los elementos constitutivos del protocolo ODD:

Propósito: Contiene una descripción general del proceso que se intenta captar a través del modelo junto con un desarrollo claro y conciso del interrogante o problema que se pretende resolver con dicho modelo. En otras palabras, se busca responder: qué sistema se está modelando y qué se intenta aprender de él.

Entidades, Variables de Estado y Escalas: En este paso se deben determinar las *entidades* del modelo, es decir el tipo de objetos que se van a representar en él; las *variables de estado* que caracterizan y cuantifican a las entidades; y las *escalas temporales y espaciales* elegidas. En otras palabras, en esta etapa se deben especificar los componentes fundamentales del sistema y las variables de estado que los caracterizan; intentando de esta forma, describir el estado del modelo en cada momento.

En la mayoría de los MBA hay tres tipos de entidades: Los agentes, que pueden ser de una o más especies; el entorno (espacial) donde interactúan dichos agentes; y el ambiente global, que en general, es externo a los agentes y afecta a todos ellos. Usualmente, las variables de estado asociadas a los agentes contemplan sus propiedades o atributos (por ejemplo edad, tamaño, opinión, etc.) y su comportamiento estratégico. A su vez, las variables atribuidas al entorno espacial generalmente establecen el lugar preciso donde se encuentran los agentes mediante la partición del espacio en una malla formada por parcelas. Finalmente, el ambiente global hace referencia a las variables externas a los agentes, las cuales no se ven afectadas por la interacción de los mismos; habitualmente estas variables de estado varían en el tiempo pero no necesariamente en el espacio ([RG]). Ejemplos de éstas son el clima o variables ambientales como la contaminación.

Visión general de los procesos y programación: Esta etapa se ocupa de los procesos que afectan a las variables de estado asociadas a las entidades del modelo. La tarea en este paso es enumerar, a grandes rasgos, todos los procesos que modifiquen el estado de los componentes del sistema representado y así describir en primera instancia la dinámica de las entidades del modelo. Asimismo, el protocolo ODD incluye también una descripción de los procesos de observación y recopilación de datos utilizados para la construc-

ción realizada por el autor del modelo.

Por otra parte, la programación hace referencia a la importancia de otorgarle un orden a la sucesión de los procesos que afectan al comportamiento del sistema modelado.

Conceptos de diseño: En esta sección se establecen un conjunto de propiedades y conceptos básicos que se deben tener en cuenta a la hora de implementar el modelo; los cuales son muy importantes para su configuración y para la descripción de las características esenciales de un MBA. Algunas de las nociones para el diseño de un modelo propuestas por el protocolo ODD que se usarán en este trabajo son: 1) *Adaptación*, en referencia a cómo se adecuan las entidades al estado de las demás y a las variables ambientales; 2) *Interacción*, relativa a la dependencia entre las variables de estado y a las reglas de actualización de las mismas; 3) *Estocasticidad*, referida a si las reglas de actualización de las variables son determinísticas o estocásticas.

Inicialización: Este es el primer punto del apartado “Detalles” y está referido a las condiciones iniciales establecidas en el proceso de simulación. En otras palabras, en esta etapa se debe fijar la configuración del “mundo” modelado para dar comienzo a la implementación del modelo. Algunos ejemplos de posibles condiciones iniciales son: el número de agentes creados, los valores iniciales dados a las variables de estado, la disposición de los agentes en el entorno espacial, etc.

Entradas: Es necesario especificar cuáles son las entradas indispensables para detallar el estado de todas las variables y para computar las actualizaciones de dichas variables.

Submodelos: Esta última tarea consiste en dar una descripción detallada de las ecuaciones, reglas lógicas, algoritmos y parámetros del modelo. También se debe incluir aquí una justificación de las decisiones tomadas para todas las elecciones realizadas en relación a dichas construcciones.

3.3. Marco matemático de los modelos algebraicos

Hasta aquí se ha presentado una descripción del Protocolo ODD. Teniendo en cuenta que su objetivo fundamental es poder formular el modelo de forma completa y tan matemática como sea posible, se intenta una *especificación matemática* de los modelos basados en agentes que se encuentren formulados en dicho protocolo. Por consiguiente, se pueden reformular los componentes principales de la siguiente manera:

- (i) Variables de estado: Se denotan por x_1, \dots, x_n sin tener en cuenta las diferentes agrupaciones referentes a sus propiedades específicas como: individuo, entidad espacial o ambiental.
- (ii) Cada variable de estado x_i tiene un conjunto de estados X_i al cual pertenece. Por lo tanto, un estado del modelo en cada momento está dado por un elemento del producto cartesiano $X = X_1 \times \dots \times X_n$
- (iii) A cada variable de estado x_i se le asigna un conjunto finito de reglas para actualizar su estado. En efecto, en cada paso la variable x_i elige, determinística o estocásticamente, una regla que toma como entrada los estados de la totalidad o de algunas de las otras variables de estado y de esta forma asigna un nuevo estado a x_i .
 Notar que la elección de la regla podría involucrar variables agregadas y/u opciones al azar.
- (iv) Se debe proporcionar una especificación completa del orden en el que las variables de estado van a ser actualizadas. Esto significa que es necesario aclarar para calcular un nuevo estado del modelo, si se actualizan algunas variables antes que otras, algunas simultáneamente o si se elige un orden aleatorio de actualización. Además, es posible implementar distintas escalas temporales a través de la actualización de las variables de paso temporal más pequeño varias veces antes de actualizar las variables de paso temporal mayor.

Cabe observar que cada regla de actualización de una variable de estado puede ser enunciada mediante una función $f_i : X \rightarrow X_i$.

Finalmente, al ensamblar los componentes presentados anteriormente se llega a la representación del modelo como un sistema dinámico de tiempo discreto:

$$f = (f_1, \dots, f_n) : X \rightarrow X$$

donde la dinámica está generada por la iteración de esta función.

Ahora bien, con todo lo expuesto hasta aquí, se ha presentado esencialmente un patrón estándar para la especificación del espacio de estado y la función de actualización. Sin embargo, poco se gana en términos de riqueza matemática si únicamente se visualiza un MBA como una función del conjunto de estados en sí mismo sin una estructura matemática adicional.

Por esta razón, se propone la introducción de un marco matemático complementario que facilite el acceso a herramientas y resultados teóricos de disciplinas como la matemática y la programación. También, se torna indispensable que dicho marco respete al mismo tiempo la propiedad esencial de

los MBA, es decir que la dinámica global emerge de las interacciones locales. Por otra parte, es menester que la estructura matemática que se agregue a la formulación de un MBA en el protocolo ODD sea de naturaleza “benigna”, en el sentido que introduzca la menor cantidad posible de artefactos matemáticos para el manejo del modelo y que además sea computacionalmente accesible ([HMJ]).

De esta forma, se llega a proponer el marco matemático de los “*Modelos Algebraicos*” para la especificación de los MBA. Dicho marco consiste esencialmente en agregarle al espacio de estados del modelo (X) la estructura algebraica de un cuerpo finito y de esta forma lograr que $f = (f_1, \dots, f_n) : X \rightarrow X$ resulte un *sistema dinámico polinomial* de tiempo discreto. Cabe destacar que logrando formular un MBA como una función polinomial se logra obtener para su implementación y análisis, acceso a resultados y fundamentos teóricos provenientes de la geometría algebraica y del algebra computacional.

En efecto, la primera medida que se debe tomar es asignar una estructura de suma y de multiplicación al espacio de estado X_i de cada variable x_i obteniendo así un cuerpo finito (\mathbb{F}). Se observan aquí dos cuestiones, la primera es que X_i tiene estructura de cuerpo siempre y cuando la cantidad de elementos de X_i sea una potencia de algún número primo. La segunda observación es que, a fines de la implementación del modelo, es necesario que todas las variables de estado tomen valores en el mismo conjunto, es decir que $X_i = \mathbb{F}$ para todo i . Ambas cuestiones son fáciles de solucionar, ya sea por la elección de un número adecuado de estados posibles para las variables o mediante la introducción de duplicados de uno o más estados.

Como se afirmó anteriormente, el resultado de tomar a X como un espacio vectorial sobre el cuerpo finito \mathbb{F} (i.e. $X = \mathbb{F}^n$), es obtener una descripción de la función del MBA en términos de funciones coordenadas polinómicas.

Efectivamente, en primer lugar se toma una colección x_1, \dots, x_n de variables que toman valores en \mathbb{F} , las cuales representan las entidades del sistema modelado y donde los elementos de \mathbb{F} simbolizan todos los posibles estados de dichas variables. A cada x_i se le asocia una “función de actualización local” $f_i : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}$ que tiene como entradas los estados de todas las variables que estén en una “vecindad” de x_i . Aquí, la vecindad de una variable está representada mediante un grafo dirigido, definido apropiadamente para codificar la dependencia de las variables (*grafo de dependencia*). Las funciones f_i forman un sistema dinámico:

$$f = (f_1, \dots, f_n) : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}^n$$

donde la dinámica está generada por la iteración de f y se puede realizar, como se aclaró en los Preliminares de este trabajo, mediante la actualización

de las variables de forma sincrónica, asincrónica o secuencial. La dinámica de f por lo general se representa como un grafo dirigido en el que el conjunto de vértices es \mathbb{F}^n , llamado *espacio de estado* o espacio de fase ($S(f)$).

Ahora bien, como se enunció en el corolario de la *Fórmula de Interpolación de Lagrange*, toda función de actualización local $f_i : \mathbb{F}^n \rightarrow \mathbb{F}$ se puede expresar como un polinomio en las variables x_1, \dots, x_n , de lo que se obtiene el resultado más importante de este capítulo: f es un Sistema Dinámico Polinomial (SDP).

De este modo se ha logrado representar a un modelo presentado en el protocolo ODD como un sistema dinámico polinomial sobre un cuerpo finito, obteniendo de esto las siguientes ventajas:

- Los modelos se almacenan de forma matemática unificada;
- Las ambigüedades en la descripción verbal y la información incompleta pueden ser detectadas en la traducción a un modelo basado en ecuaciones;
- Es fácil de poner en práctica un modelo existente y modificarlo;
- Es fácil de comparar modelos e incorporar variables.

3.4. Ejemplos

A continuación, se presentarán tres ejemplos de modelos basados en agentes expuestos en el artículo de Hinkelmann (ver [HMJ]) con el objetivo de implementar lo expuesto hasta el momento en el presente trabajo y mostrar las ganancias de haber añadido los modelos algebraicos a una formulación que siga el protocolo ODD.

3.4.1 Modelo de infección simple

Este es un típico modelo para la propagación de una infección: los agentes son las células sobre una malla cuadrada, cada célula puede estar sana o infectada, las sanas se representan en blanco, las infectadas en negro. La Figura 3.1 (izq.) muestra la disposición de la malla con una célula y sus cuatro vecinos.

Los sistemas evolucionan de acuerdo con las siguientes reglas: Una célula adquiere un estado saludable, si sus cuatro vecinas están sanas, en cualquier

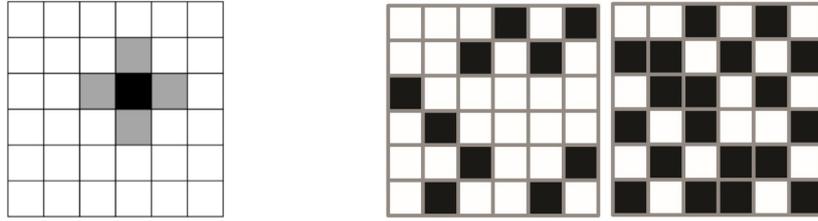


Figura 3.1: Modelo de Infección

otro caso se infecta. La Figura 3.1 (der.) muestra una malla con células infectadas al azar y luego su estado después de una iteración.

Se analiza ahora cómo traducir este modelo a un modelo algebraico. El grafo de dependencia de esta red es mostrado en la Figura 3.2. Las variables de estado representan a las células, las células sanas tienen estado ON (1) y las células infectadas tienen estado OFF (0). Dado que hay dos estados para cada variable, se elige \mathbb{F}_2 como cuerpo de base y, como la regla de actualización es homogénea para todas las células, resulta que para cada célula x con vecinos y_1, y_2, y_3, y_4 la función de actualización local está dada por:

$$f_x(y_1, y_2, y_3, y_4) = y_1 y_2 y_3 y_4$$

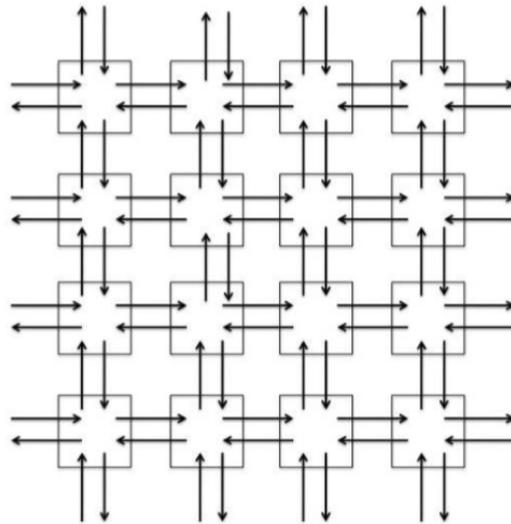


Figura 3.2: Grafo de dependencia para el modelo de infección

Se ve fácilmente que $f_x = 0$, es decir, x se infecta, en cualquier caso salvo que las cuatro vecinas sean saludables ($y_i = 1 \forall i$). Por lo tanto, el modelo constituye una red Booleana conjuntiva.

Para poder realizar un análisis de los estados estacionarios y los ciclos límites de este modelo, es necesario definir algunos conceptos y enunciar ciertos resultados para redes Booleanas presentes en el trabajo de Jarrah y otros (ver [JLV]). En primer lugar se observa que el grafo de dependencia del ejemplo (Figura 3.2) consta de un único componente *fuertemente conectado*. Es decir que todos los nodos están conectados entre sí a través de un camino dirigido o lo que es lo mismo, para todo par de vértices existe un grupo de aristas dirigidas que forman un camino entre ellos.

Por otra parte, se denomina bucle de un grafo dirigido a todo subconjunto de vértices $W \subseteq V$ tales que todos los elementos de W están conectados por algún camino dirigido. De esta manera, es posible enunciar el concepto de *número de bucle* de un grafo dirigido fuertemente conectado como el máximo común divisor de las longitudes (número de aristas) de todos los bucles dirigidos hacia cualquier vértice fijo del grafo (el número de bucle es independiente del vértice elegido).

A partir de los conceptos definidos anteriormente, es posible enunciar el resultado más importante del artículo de [JLV]. El Teorema 3.8 de dicho trabajo establece que si un ciclo límite de una red Booleana conjuntiva tiene longitud m , entonces m divide al número de bucle y además para cada divisor del número de bucle cuya factorización prima es $m = \prod_{i=1}^r p_i^{k_i}$, la cantidad de estados periódicos de período m está dada por la siguiente fórmula:

$$|A(m)| = \sum_{i_1=0}^1 \dots \sum_{i_r=0}^1 (-1)^{i_1+i_2+\dots+i_r} 2^{p_1^{k_1-i_1} p_2^{k_2-i_2} \dots p_r^{k_r-i_r}},$$

donde, si se divide por m , se obtiene la cantidad de ciclos límite de longitud m del modelo.

Por lo tanto, como el número de bucle del modelo de infección es 2, se tiene que todo ciclo límite tiene longitud 2. Más aún, como $|A(2)| = 2$, el modelo tiene dos estados periódicos de período 2 y un único ciclo límite, el

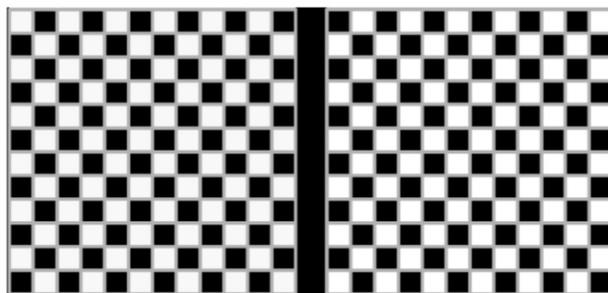


Figura 3.3: Estados periódicos de periodicidad 2

cual tiene longitud 2. Los dos estados de periodicidad 2 se muestran en la Figura 3.3, y además hay dos puntos fijos triviales dados por todas las células sanas y por todas las células infectadas.

Para una malla de tamaño $n \times n$ la base de atracción de dichos estados periódicos consta de $2^{\frac{n^2}{2}+1} - 2$ estados si n es par y de $2^{\frac{n^2+1}{2}} + 2^{\frac{n^2-1}{2}} - 2 = 2^{\frac{n^2-1}{2}} 3 - 2$ estados si n es impar. Esta cantidad se obtiene de considerar todos los subconjuntos posibles de células infectadas que se encuentren distribuidas como en alguno de los dos estados periódicos.

Cabe destacar que, aunque los estados estacionarios y el ciclo límite se pueden encontrar mediante el método de simulación del modelo, a diferencia del modelo algebraico, a este enfoque todavía le restaría demostrar que éstos son únicos.

Por otra parte, también es interesante resaltar que el teorema utilizado se aplica a mallas de tamaño $n \times n$ arbitrariamente grandes, a diferencia del método de simulación. Pues encontrar los estados periódicos y ciclos límite puede llegar a ser una tarea computacionalmente inaccesible si n es grande.

3.4.2 Juego de la Vida de Conway

Este ejemplo es el conocido Juego de la Vida de Conway (ver [Gar]), el cual es un autómata celular de 2 dimensiones, que usa los 8 vecinos de una célula para calcular el siguiente estado. A menudo los MBA no están descritos en forma de autómata celular, sin embargo, el Juego de la Vida cuenta con algunas de las características propias de muchos MBA. Este modelo es atractivo para el propósito de este trabajo ya que plantea un reto computacional interesante para el marco presentado anteriormente. Las reglas de este autómata celular tienen que cubrir muchos casos, lo que da como resultado que los polinomios que expresan dichas reglas se vuelven muy densos, es decir que contienen casi todos los términos posibles y de esta forma se afecta significativamente a la complejidad computacional de los algoritmos.

En este autómata celular las células se encuentran en uno de dos estados posibles, vivas (1) o muertas (0) y siguen las siguientes reglas de conducta:

- i) Cualquier célula viva con menos de dos vecinos vivos muere, es lo que se llama muerte por “soledad”.
- ii) Cualquier célula viva con más de tres vecinos vivos muere, por el “hacinamiento”.
- iii) Cualquier célula viva con dos o tres vecinos vivos vive en la próxima generación.

- iv) Cualquier célula muerta con exactamente tres vecinos vivos se convierte en una célula viva.

Naturalmente, las variables o agentes de este sistema son las células. Sólo hay 2 estados posibles para un agente, vivo o muerto. Por lo tanto, podemos describir su comportamiento con polinomios sobre \mathbb{F}_2 . Todo agente x tiene 8 vecinos x_1, \dots, x_8 . La función f_x que describe la transición del agente x es:

$$f_x(x, x_1, \dots, x_8) = \begin{cases} 0 & \text{si } \sum x_i < 2 \\ 0 & \text{si } \sum x_i = 2 \text{ y } x = 0 \\ 1 & \text{si } \sum x_i = 2 \text{ y } x = 1 \\ 1 & \text{si } \sum x_i = 3 \\ 0 & \text{si } \sum x_i > 3 \end{cases}$$

De este modo, se tiene que el modelo algebraico del Juego de la Vida es un sistema:

$$f = (f_1, \dots, f_{n^2}) : \mathbb{F}_2^{n \times n} \rightarrow \mathbb{F}_2^{n \times n}$$

$$x_i \mapsto f_i(x_1, \dots, x_{n^2})$$

donde n es la longitud del lado de la malla cuadrada donde están dispuestas las células.

Ahora, si se quieren encontrar todos los puntos fijos del sistema, se debe resolver el sistema de ecuaciones polinomiales:

$$f_i(x) - x_i = 0, \quad \text{para } i = 1, \dots, n^2.$$

Dado que el problema que se ha planteado se refiere a encontrar las raíces de un conjunto de polinomios, es necesario, para poder avanzar en el análisis del modelo, definir determinados conceptos y enunciar ciertos resultados relativos al campo de la *Geometría Algebraica*. Éstos se pueden encontrar con mayor detalle en los trabajos de Pachter y Sturmfels (ver [PS]) y Lauritzen (ver [Lau]).

Definición 7. Sea R un anillo conmutativo con unidad, un *ideal* I en R es un subgrupo de $(R, +)$ que cumple que $ax \in I$ para todo $a \in R$ y para todo

$x \in I$. Además, dados $r_1, \dots, r_n \in R$ se define el *ideal generado* por r_1, \dots, r_n , denotado por $\langle r_1, \dots, r_n \rangle$, de la siguiente manera:

$$\langle r_1, \dots, r_n \rangle = \{a_1 r_1 + \dots + a_n r_n : a_1, \dots, a_n \in R\}$$

Definición 8. Sea \mathbb{F} un cuerpo y $\mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ el anillo de polinomios en las variables x_1, \dots, x_n que toman valores en \mathbb{F} . Un *orden monomial* es un orden total \prec en el conjunto de monomios $\{x_1^{p_1} \dots x_n^{p_n} : p_1, \dots, p_n \in \mathbb{N}\} \subseteq \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ que satisface las siguientes condiciones:

- el monomio $1 = x_1^0 \dots x_n^0$ es el menor de todos los monomios.
- Si $x_1^{p_1} \dots x_n^{p_n} \prec x_1^{q_1} \dots x_n^{q_n}$, entonces $x_1^{p_1+k_1} \dots x_n^{p_n+k_n} \prec x_1^{q_1+k_1} \dots x_n^{q_n+k_n}$.

Además, dado un orden monomial \prec , se define el *término inicial* de $f = \sum a_v X^v \in \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ respecto de \prec de la siguiente manera:

$$\text{in}_\prec(f) = a_w X^w$$

donde $w = \max_\prec \{v \in \mathbb{N}^n : a_v \neq 0\}$.

Ejemplo (Orden Monomial Lexicográfico). Se define el *Orden Lexicográfico* \prec_{lex} de la siguiente manera: $x_1^{p_1} \dots x_n^{p_n} \prec_{lex} x_1^{q_1} \dots x_n^{q_n}$ si la primer componente no nula del vector $(q_1 - p_1, \dots, q_n - p_n)$ es positiva.

Definición 9. Un subconjunto finito \mathcal{G} de un ideal $I \subseteq \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ se denomina *base de Gröbner* de I con respecto al orden monomial \prec si los monomios iniciales de los elementos de \mathcal{G} generan el ideal inicial, i.e.

$$\langle \text{in}_\prec(f) : f \in I \rangle := \text{in}_\prec(I) = \langle \text{in}_\prec(g) : g \in \mathcal{G} \rangle$$

Además, \mathcal{G} es una *base de Gröbner reducida* si cumple:

- El coeficiente de $\text{in}_\prec(g)$ en g es 1, para toda $g \in \mathcal{G}$
- El conjunto $\{\text{in}_\prec(g) : g \in \mathcal{G}\}$ genera minimalmente $\text{in}_\prec(I)$
- Ningún término de cualquier $g \in \mathcal{G}$ está en $\text{in}_\prec(I)$

Afirmación. Sea \prec un orden monomial, I un ideal en $\mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$, \mathcal{F} un conjunto generador de I y \mathcal{G} un base de Gröbner de I respecto de \prec . Entonces:

$$\text{i } \langle \mathcal{G} \rangle = \langle \mathcal{F} \rangle = I$$

ii Se define para cualquier subconjunto $\mathcal{H} \subseteq \mathbb{F}[x_1, \dots, x_n]$ a

$$\mathcal{V}(\mathcal{H}) = \{(a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{F}^n : f(a_1, \dots, a_n) = 0 \forall f \in \mathcal{H}\}$$

entonces se cumple que $\mathcal{V}(\mathcal{F}) = \mathcal{V}(\langle \mathcal{F} \rangle) = \mathcal{V}(\langle \mathcal{G} \rangle) = \mathcal{V}(\mathcal{G})$

Ahora bien, continuando con el modelo del Juego de la Vida de Conway, el objetivo central es calcular una base de Gröbner del ideal generado por las ecuaciones para los puntos fijos del sistema y así obtener dichos puntos fijos.

Concretamente, si por ejemplo se toma una cuadrícula de tamaño 4×4 , los puntos fijos son las soluciones del sistema:

$$f_i(x) = x_i \quad i = 1, \dots, 16$$

es decir, si se denomina $\mathcal{F} = \{f_i(x) - x_i : i = 1, \dots, 16\}$, los puntos fijos constituyen el conjunto $\mathcal{V}(\mathcal{F})$.

Por esta razón, se calcula la base de Gröbner respecto del orden lexicográfico del ideal $I = \langle f_1(x) - x_1, \dots, f_{16}(x) - x_{16} \rangle$ para el anillo cociente $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_{16}]/J$ donde $J = \langle x_1^2 - x_1, \dots, x_{16}^2 - x_{16} \rangle$. Es importante observar que J es un ideal de polinomios que se anulan al evaluarlos en cualquier elemento de \mathbb{F}_2^{16} y por lo tanto en el anillo cociente $\mathbb{F}_2[x_1, \dots, x_{16}]/J$ se identifican todos los polinomios tales que su diferencia es un polinomio cuyas raíces son todos los elementos de \mathbb{F}_2^{16} , es decir que se diferencian en algún polinomio equivalente al polinomio nulo.

Luego, si se factorizan los polinomios de la base de Gröbner, es fácil encontrar las soluciones del sistema de 16 ecuaciones descrito anteriormente.

Llegado este punto, es necesario e importante realizar un análisis relativo a los beneficios obtenidos a partir de la implementación del modelo algebraico para el autómata celular referido.

En principio, para una malla de tamaño reducido, los puntos fijos del modelo se pueden encontrar fácilmente mediante la comprobación de todos los posibles estados a través de la simulación. Si la cuadrícula es 4×4 sólo hay que comprobar $2^{16} = 65536$ estados posibles, lo cual no supone ningún desafío computacional. Sin embargo, si el tamaño de malla aumenta, la cantidad de estados que se deben corroborar aumenta exponencialmente en relación al incremento de la cuadrícula mientras que el número de variables y de ecuaciones polinomiales sólo aumenta de forma lineal. Por ejemplo, para una malla 10×10 , el método de simulación tiene que verificar 2^{10} estados posibles. En contrapartida, el modelo algebraico tiene que calcular la base de Gröbner en un anillo de 100 indeterminadas para un ideal con 100 generadores. Dependiendo cuan densos sean los polinomios que determinen la

actualización de las variables, este último método puede llegar a ser considerablemente más sencillo y rápido que el primero.

3.4.3 Corredores Virtuales de Mariposas

Este último ejemplo describe y analiza la aparición de corredores virtuales en los movimientos de mariposas a través del espacio. En efecto, se sabe que la dispersión de muchos animales responde al paisaje en el que están viajando los individuos, ya sea evitando ciertos elementos del paisaje o siendo atraídos por otros. Por esta razón, se advierte que el paisaje puede canalizar los movimientos de las mariposas a través de vías o caminos a los que se denominan corredores. Más precisamente, la noción de corredor se refiere a un elemento lineal en el espacio el cual favorece la dispersión de los individuos. Sin embargo, en algunos casos el ojo humano no es capaz de visualizar estos corredores, por lo que resulta apropiado denominarlos *corredores virtuales*. Entre otros ejemplos se pueden mencionar setos o vallas creadas por la presencia de depredadores o caminos imaginarios seguidos en función de las características propias del terreno recorrido con el objetivo de la búsqueda de refugio para el apareamiento, alimento, etc.

Concretamente para el caso de las mariposas, se modela su comportamiento de “cumbreo” (*hilltopping* en inglés), es decir la estrategia seguida por las mariposas para el apareamiento, en la cuál se mueven hasta el punto más alto de su entorno espacial con el objetivo de encontrarse y aparearse.

En el marco del protocolo ODD, se establece que el *propósito* del modelo es entender bajo qué condiciones las interacciones entre las mariposas, su conducta de cumbreo y la topografía del paisaje, llevan al surgimiento de corredores virtuales.

El modelo se inicia con 500 mariposas en un paisaje discretizado en 150×150 parches o parcelas cuadradas, enumeradas. Una mariposa, ubicada en alguna parcela, se mueve con probabilidad q a la mejor parcela de las 8 vecinas, es decir a la que esté más elevada y se mueve aleatoriamente a cualquiera de sus vecinas con probabilidad $1 - q$. Inicialmente todas las mariposas se ubican en el mismo parche y se deja correr el modelo durante 1000 iteraciones.

Además de las mariposas, es necesario utilizar a las parcelas como agentes, i.e. cada mariposa y cada parche tienen asignados una variable x_i .

Suponiendo que todas las mariposas son homogéneas, el estado de cada una de ellas sólo consiste en su posición, indicada con el número de parcela.

El estado de los parches consta del número de mariposas ubicadas en él. Además, las parcelas se diferencian entre sí según cual está más elevada.

Más específicamente, cada mariposa es una variable x_1, \dots, x_{500} , cada parcela es una $x_{501}, \dots, x_{23000}$ y se denota un estado del sistema con una tupla $x = (x_1, \dots, x_{23000})$. El estado de una mariposa es alguna posición entre 1 y 22500 y el estado de cada parche es la cantidad de mariposas ubicadas en él (i.e. un número entre 1 y 500).

Se supone que se tiene un mapa que indica la elevación del sector espacial que se está modelando y a partir de éste se construyen 9 tablas diferentes que señalan lo siguiente: la primera asigna a cada parcela su vecina de mayor elevación y las 8 restantes simplemente asignan a cada parche el vecino del norte, del noroeste, del oeste, del suroeste, del sur, del sureste, del este y del noreste respectivamente.

Las actualizaciones son probabilísticas, sincrónicas y con probabilidades fijas.

Además, es importante observar que, dado los 22500 posibles estados diferentes para cada mariposa, se elige $p = 22501$ para la construcción del espacio de estado, que es el primer número primo mayor a 22500. De esta forma, como se describió en la sección 3.3, el modelo algebraico es un sistema de ecuaciones sobre \mathbb{F}_p .

Ahora bien, a partir de la información otorgada por la tabla donde se le asigna a la parcela a_i su vecina de mayor elevación b_i para cada $i \in \{1, \dots, 22500\}$, es posible generar el polinomio $g_{j,1}$ que actualiza una mariposa x_j para $j \in \{1, \dots, 500\}$ de la siguiente forma:

$$g_{j,1} = \sum_{i=1}^{22500} (1 - (a_i - x_j)^{p-1}) b_i.$$

Esta función es generada mediante los siguientes razonamientos. El estado de una mariposa es el número de parcela donde se encuentra, es decir que $x_j \in \{1, \dots, 22500\}$. Por lo tanto, por el *Pequeño Teorema de Fermat*, $(a_i - x_j)^{p-1}$ es igual a 1 salvo que $a_i = x_j$ i.e. la mariposa se encuentre en la parcela a_i . Luego, $1 - (a_i - x_j)^{p-1}$ se anula a menos que $a_i = x_j$, en tal caso es 1 y se multiplica por b_i . De esta manera $g_{j,1}$ interpola la primera tabla y sólo depende del estado de la variable x_j .

Para las demás tablas, el proceso de construcción de $g_{j,i}$ para $i = 2, \dots, 9$ es muy sencillo.

Por último, recordando que para cada mariposa existe una probabilidad q con la que detecta la elevación correcta, la función de actualización proba-

bilística para la mariposa x_j es:

$$f_j(x) = \begin{cases} g_{j,1}(x) & \text{con probabilidad } q \\ g_{j,2}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \\ g_{j,3}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \\ g_{j,4}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \\ g_{j,5}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \\ g_{j,6}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \\ g_{j,7}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \\ g_{j,8}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \\ g_{j,9}(x) & \text{con probabilidad } \frac{1-q}{8} \end{cases}$$

Continuando con el análisis de las variables de estado restantes, las funciones para la actualización del estado de las parcelas se construyen de la siguiente manera:

$$f_j(x) = \sum_{i=1}^{500} 1 - (x_i - (j - 500))^{p-1}$$

para todo $j \in \{501, \dots, 23000\}$. Como antes, cada sumando es 1 o 0 dependiendo de si x_i es igual a $j - 500$ o no, respectivamente. Entonces, cada término incrementa en 1 el estado de la parcela j siempre y cuando haya una mariposa x_i en estado j , es decir en la parcela j .

De esta forma, se llega al sistema dinámico polinomial que describe el modelo completo de los corredores virtuales de las mariposas:

$$f : \mathbb{F}_{22501}^{500+22500} \rightarrow \mathbb{F}_{22501}^{500+22500}$$

$$(x_1, \dots, x_{23000}) \mapsto (f_1(x), \dots, f_{23000}(x)).$$

Una vez formulado completamente el modelo algebraico, tienen lugar las preguntas sobre el comportamiento dinámico global del sistema. El capítulo siguiente se abocará a dichos interrogantes, teniendo en cuenta que todos ellos se pueden enunciar en términos de resolución de sistemas de ecuaciones

polinómicas, aunque cuentan con el aditamento de que se trata de un modelo estocástico, lo cuál complejiza de manera significativa su tratamiento y su análisis.

Capítulo 4

Discusión

Llegado a este punto, se vuelve oportuno revisar lo que se ha planteado hasta aquí con el objetivo de propiciar una discusión sobre el último ejemplo de la sección anterior y de esta forma elaborar una propuesta sobre un posible camino a seguir en el caso de modelos basados en agentes de tipo *estocásticos*.

Es importante destacar que sólo es viable aplicar los resultados del Capítulo 3 a modelos deterministas, como es el caso de los primeros dos ejemplos. Sin embargo, el último es un modelo de tipo estocástico. Como es evidente, en este caso las reglas de actualización de las variables de estado relativas a las mariposas son probabilísticas y por esta razón no se pueden especificar mediante polinomios convencionales. De hecho, se puede considerar que para cada paso temporal existe un sistema dinámico polinomial, dependiente de la probabilidad q , que especifica la manera en que se van a actualizar las variables.

A partir de este inconveniente, se intenta superar la imposibilidad de aplicar el marco de los modelos algebraicos a casos estocásticos mediante la incorporación de un tipo de modelos llamados *Redes Booleanas Probabilísticas*, desarrollados en profundidad en el artículo [Shm]. De esta manera, a continuación se desarrollarán las características esenciales de este tipo de modelos y se presentará un ejemplo de una Red Booleana Probabilística, con el objetivo de proponer un camino posible y trazar una línea de acción para el abordaje de modelos basados en agentes de tipo estocástico y así vencer el inconveniente expuesto anteriormente.

En términos generales, una Red Booleana Probabilística es una Red Booleana convencional a la que se le ha añadido un espacio de probabilidad para las reglas de actualización de las variables de estado. En efecto, en este tipo de modelos, a diferencia de los casos deterministas, la actualización de cada estado se lleva a cabo mediante un conjunto de funciones (Booleanas y polinómicas) en vez de ser una única función; a su vez, se asigna una cierta

probabilidad a la elección de cada una de ellas para especificar el estado del sistema en el paso temporal siguiente. Por esta razón, en cada paso temporal existe la posibilidad de que la transición de un estado de la red se dé hacia un conjunto de otros estados, con una cierta probabilidad asignada a cada uno de ellos, definiendo así un proceso aleatorio.

Concretamente, se define una Red Booleana Probabilística (RBP) por un grafo $G(V, F)$ conformado por un conjunto de nodos $V = \{x_1, \dots, x_n\}$ y una lista $F = \{F_1, \dots, F_n\}$ donde cada F_i es un conjunto de funciones Booleanas denotadas por:

$$F_i = \left\{ f_j^{(i)} \right\}_{j=1, \dots, l(i)}.$$

Cada $f_j^{(i)}$ es una posible función que determina el estado del nodo x_i en el siguiente paso y $l(i)$ es el número total de estas posibles funciones para dicho nodo; por lo que F_i se constituye como el conjunto de todas las funciones que, eventualmente, pueden determinar la actualización de x_i . Notar que si $l(i) = 1$ para todo i , la RBP es una Red Booleana convencional.

Una *realización* de la RBP es un vector de funciones Booleanas

$$\mathbf{f}_k = (f_{k_1}^{(1)}, \dots, f_{k_n}^{(n)}) : \mathbb{F}_2^n \rightarrow \mathbb{F}_2^n \quad \text{para } k = 1, \dots, N \text{ y } 1 \leq k_i \leq l(i),$$

donde $f_{k_i}^{(i)} \in F_i$ para todo $i = 1, \dots, n$ y $N = \prod_{i=1}^n l(i)$, es decir que N es el número total de “redes” que se pueden formar a partir de los conjuntos de funciones en F_i . En otras palabras, para cada k , \mathbf{f}_k actúa como una función de actualización completa de la red y de esta forma, dado un cierto estado de la red (x_1, \dots, x_n) , $\mathbf{f}_k(x_1, \dots, x_n) = (x'_1, \dots, x'_n)$ otorga el estado correspondiente luego de un paso temporal del modelo para la realización \mathbf{f}_k .

La dinámica de la RBP es esencialmente idéntica a la dinámica de una RB convencional pero con la diferencia que para cada punto temporal, la actualización de cada nodo x_i está determinado por una de las posibles $f_{j_0}^{(i)} \in \{f_j^{(i)}\}$. Esta elección se realiza de acuerdo a su correspondiente probabilidad, que se denota de la siguiente manera:

$$c_j^{(i)} = \Pr \{f^{(i)} = f_j^{(i)}\} = \sum_{k: f_{k_i}^{(i)} = f_j^{(i)}} \Pr \{\mathbf{f} = \mathbf{f}_k\}$$

donde $f^{(i)}$ es una variable aleatoria que toma valores en F_i y $\mathbf{f} = (f^{(1)}, \dots, f^{(n)})$ es el vector aleatorio que toma valores en $F_1 \times \dots \times F_n$.

Esto puede ser interpretado mediante la siguiente afirmación. En cualquier punto temporal, el paso de un estado al próximo se realiza mediante la elección de una red entre N posibles. A partir de esto, se intenta calcular

la probabilidad con que una red en particular es seleccionada; para ello, se define primero la siguiente matriz. Sea K la matriz $N \times n$ tal que:

$$K = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & l(n) \\ 1 & 1 & \cdots & 2 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 2 & 2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & \cdots & 2 & l(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ l(1) & l(2) & \cdots & l(n-1) & l(n) \end{pmatrix}$$

donde cada fila representa a una posible configuración de una red. En efecto, la fila m corresponde a la red m en el sentido que la entrada j de la i -ésima columna especifica que la función $f_j^{(i)}$ debe ser usada para la actualización del nodo x_i . Por lo tanto, es posible ahora establecer que la probabilidad de que la red i sea seleccionada es:

$$P_i = \prod_{j=1}^n c_{K_{ij}}^{(j)}$$

siendo K_{ij} la entrada ij de la matriz K . Es importante observar que se está suponiendo que las variables aleatorias $f^{(1)}, \dots, f^{(n)}$ son *independientes*, es decir, se cumple que:

$$\Pr \{f^{(i)} = f_k^{(i)}, f^{(j)} = f_l^{(j)}\} = \Pr \{f^{(i)} = f_k^{(i)}\} \Pr \{f^{(j)} = f_l^{(j)}\}$$

Es oportuno en este momento calcular, en primer lugar, la probabilidad de que el modelo pase de un estado (x_1, \dots, x_n) al estado (x'_1, \dots, x'_n) y luego construir la matriz de transición A envuelta en el *proceso de Markov* descripto. Efectivamente:

$$\begin{aligned} \Pr \{(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (x'_1, \dots, x'_n)\} &= \sum_{i: f_{K_{i1}}^{(1)}(x_1, \dots, x_n) = x'_1, \dots, f_{K_{in}}^{(n)}(x_1, \dots, x_n) = x'_n} P_i \\ &= \sum_{i=1}^N P_i \left[\prod_{j=1}^n (1 - |f_{K_{ij}}^{(j)}(x_1, \dots, x_n) - x'_j|) \right] \\ &= \sum_{i=1}^N P_i \cdot \Pr \{(x_1, \dots, x_n) \rightarrow (x'_1, \dots, x'_n) | \text{la red } i \text{ es seleccionada}\} \end{aligned}$$

Finalmente, asignando a cada $(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{F}_2^n$, su (única) representación entera en base 2, denotada por $C(x_1, \dots, x_n) = 1 + \sum_{j=1}^n 2^{n-j}x_j$, se construye la matriz de transición A , de tamaño $2^n \times 2^n$, ubicando en cada entrada ij la probabilidad de que se dé la transición del estado i (en representación de (x_1, \dots, x_n)) al estado j (representando a (x'_1, \dots, x'_n)); es decir:

$$A_{ij} = \mathbf{Pr} \{ (x_1, \dots, x_n) = i \rightarrow (x'_1, \dots, x'_n) = j \}$$

donde $i = C(x_1, \dots, x_n)$ y $j = C(x'_1, \dots, x'_n)$. Se observa que, dado que se cumple la igualdad $\sum_{i=1}^N P_i = 1$ y el hecho de que para todo (x_1, \dots, x_n) existe un (x'_1, \dots, x'_n) tal que $\prod_{j=1}^n (1 - |f_{K_{ij}}^{(j)}(x_1, \dots, x_n) - x'_j|) = 1$, se cumple que:

$$\sum_{j=1}^{2^n} A_{ij} = 1$$

para todo $i = 1, \dots, 2^n$.

Se presenta ahora un ejemplo para ilustrar lo desarrollado hasta aquí en relación a las Redes Booleanas Probabilísticas.

Sea la RBP compuesta por tres nodos (x_1, x_2, x_3) y donde $F_1 = \{f_1^{(1)}, f_2^{(1)}\}$, $F_2 = \{f_1^{(2)}\}$ y $F_3 = \{f_1^{(3)}, f_2^{(3)}\}$ con la siguiente tabla que define las funciones $f_j^{(i)}$ y las probabilidades $c_j^{(i)}$.

(x_1, x_2, x_3)	$f_1^{(1)}$	$f_2^{(1)}$	$f_1^{(2)}$	$f_1^{(3)}$	$f_2^{(3)}$
(0, 0, 0)	0	0	0	0	0
(0, 0, 1)	1	1	1	0	0
(0, 1, 0)	1	1	1	0	0
(0, 1, 1)	1	0	0	1	0
(1, 0, 0)	0	0	1	0	0
(1, 0, 1)	1	1	1	1	0
(1, 1, 0)	1	1	0	1	0
(1, 1, 1)	1	1	1	1	1
$c_j^{(i)}$	0,6	0,4	1	0,5	0,5

Dado que hay dos funciones posibles para la actualización del nodo x_1 , una función para el nodo x_2 y dos funciones para x_3 , luego hay $N = 4$ posibles

Es interesante observar qué sucede si se aplica de forma iterativa la matriz A sobre un vector inicial de distribución de probabilidad conjunta de los estados de la red. Por ejemplo, si se toma $D^0 = (\frac{1}{8}, \dots, \frac{1}{8})$, interpretando por esto que hay una probabilidad de $\frac{1}{8}$ de que la red inicialmente se encuentre en alguno de sus 8 estados posibles y se calcula

$$D^{t+1} := D^t A = D^0 A^{t+1}$$

entonces el vector que se obtiene para el límite cuando $t \rightarrow \infty$ es $\pi = (0,15; 0; 0; 0; 0; 0; 0; 0,85)$. De lo que se deduce que a largo plazo hay un 15% de probabilidad que la red adopte el primer estado i.e. el estado $(0, 0, 0)$ y hay un 85% de chances que adopte el último estado, osea el $(1, 1, 1)$. Este análisis es posible dado que la matriz A es una matriz de Markov (ya que se cumple $\sum_{j=1}^{2^n} A_{ij} = 1$ para todo $i = 1, \dots, 2^n$) y la Red Booleana Probabilística es un proceso de Markov homogéneo. Para una profundización sobre estas nociones ver el trabajo [Cin].

Capítulo 5

Conclusión y trabajo a futuro

A lo largo de este trabajo se ha propuesto un marco matemático adecuado para estandarizar la forma en que se formulan y especifican los modelos basados en agentes. A su vez, dicho marco proporciona el acceso a las herramientas teóricas y computacionales para el análisis de este tipo de modelos y conserva su característica fundamental, es decir que la dinámica global emerge de las interacciones locales.

En este contexto, se toma la idea del Protocolo ODD para estandarizar la formulación de los Modelos Basados en Agentes y a partir de ella se presenta un marco matemático aplicado a dicho protocolo; este marco matemático es el de los sistemas dinámicos polinomiales sobre un cuerpo finito. La propuesta se sugiere como un paso complementario al protocolo ODD y no como un reemplazo del mismo. En principio, es necesario que los modelos sean formulados mediante el protocolo ODD para que puedan ser comunicados y comprendidos por otros interlocutores; y a raíz de esto, los modelos algebraicos se ofrecen como un recurso adicional beneficioso para los modeladores. Entre otras cuestiones, los sistemas algebraicos propuestos pueden ser de gran ayuda a la hora de re-utilizar y re-implementar un modelo, así como también son convenientes para eliminar las ambigüedades creadas a partir de la descripción verbal del mismo.

Otros aspectos importantes añadidos mediante la incorporación de dicho marco matemático son, por un lado la posibilidad de comparar de forma precisa los distintos modelos mediante la contrastación de las ecuaciones polinomiales que los describen y por otro la incorporación del lenguaje matemático riguroso a través del cual se posibilita la aplicación de una abundante teoría algorítmica del álgebra computacional y fundamentación teórica de la geometría algebraica.

A continuación de la exposición del marco de los modelos algebraicos, se han presentado algunos ejemplos de modelos basados en agentes con la

finalidad de poner en práctica este paso adicional al protocolo ODD, como así también la de visualizar los beneficios obtenidos a partir del acceso a las herramientas teóricas e informáticas para su estudio.

Finalmente, retomando el último ejemplo, el cual es un modelo de tipo estocástico, se concluye el trabajo con una propuesta para un posible camino a seguir con el objetivo de abordar esta clase de Modelos Basados en Agentes. Esta propuesta se introduce mediante el desarrollo de las llamadas *Redes Booleanas Probabilísticas*.

Bibliografía

- [An] AN, Gary. In silico experiments of existing and hypothetical cytokine-directed clinical trials using agent-based modeling*. *Critical care medicine*, 2004, vol. 32, no 10, p. 2050-2060.
- [Cas] CASTIGLIONE, Filippo, et al. Simulating epstein-barr virus infection with c-immsim. *Bioinformatics*, 2007, vol. 23, no 11, p. 1371-1377.
- [Cin] CINLAR, Erhan. *Introduction to stochastic processes*. Courier Corporation, 2013.
- [CS] CALVETTI, Daniela; SOMERSALO, Erkki. *Computational Mathematical Modeling: An Integrated Approach Across Scales*. Siam, 2012.
- [Eub] EUBANK, Stephen, et al. Modelling disease outbreaks in realistic urban social networks. *Nature*, 2004, vol. 429, no 6988, p. 180-184.
- [ECH] ENDERLING, Heiko; CHAPLAIN, Mark Aj; HAHNFELDT, Philip. Quantitative modeling of tumor dynamics and radiotherapy. *Acta biotheoretica*, 2010, vol. 58, no 4, p. 341-353.
- [Gar] GARDNER, Martin. Mathematical games: The fantastic combinations of John Conway's new solitaire game "life". *Scientific American*, 1970, vol. 223, no 4, p. 120-123.
- [Gri] GRIMM, Volker, et al. A standard protocol for describing individual-based and agent-based models. *Ecological modelling*, 2006, vol. 198, no 1, p. 115-126.
- [Hin] HINKELMANN, Franziska Babette. Algebraic theory for discrete models in systems biology. 2011.
- [HMJ] HINKELMANN, Franziska, et al. A mathematical framework for agent based models of complex biological networks. *Bulletin of mathematical biology*, 2011, vol. 73, no 7, p. 1583-1602.

- [Izq] IZQUIERDO, Luis R., et al. Modelado de sistemas complejos mediante simulación basada en agentes y mediante dinámica de sistemas. *Empiria. Revista de metodología de ciencias sociales*, 2008, no 16, p. 85-112.
- [JLV] JARRAH, Abdul Salam; LAUBENBACHER, Reinhard; VELIZ-CUBA, Alan. The dynamics of conjunctive and disjunctive Boolean network models. *Bulletin of Mathematical Biology*, 2010, vol. 72, no 6, p. 1425-1447.
- [Lau] LAURITZEN, Niels. *Concrete abstract algebra: from numbers to Gröbner bases*. Cambridge University Press, 2003.
- [LN] LIDL, Rudolf. *Finite fields*. Cambridge University Press, 1997.
- [Man] MANSURY, Yuri, et al. Emerging patterns in tumor systems: simulating the dynamics of multicellular clusters with an agent-based spatial agglomeration model. *Journal of Theoretical Biology*, 2002, vol. 219, no 3, p. 343-370.
- [Pog] POGSON, Mark, et al. Formal agent-based modelling of intracellular chemical interactions. *Biosystems*, 2006, vol. 85, no 1, p. 37-45.
- [PS] PACHTER, Lior; STURMFELS, Bernd (ed.). *Algebraic statistics for computational biology*. Cambridge University Press, 2005.
- [PSF] PEÉR, G. U. Y.; SALTZ, David; FRANK, Karin. Virtual corridors for conservation management. *Conservation Biology*, 2005, vol. 19, no 6, p. 1997-2003.
- [RG] RAILSBACK, Steven F.; GRIMM, Volker. *Agent-based and individual-based modeling: a practical introduction*. Princeton university press, 2011.
- [Shm] SHMULEVICH, Ilya, et al. Probabilistic Boolean networks: a rule-based uncertainty model for gene regulatory networks. *Bioinformatics*, 2002, vol. 18, no 2, p. 261-274.
- [Wan] WANG, Zhihui, et al. Cross-scale, cross-pathway evaluation using an agent-based non-small cell lung cancer model. *Bioinformatics*, 2009, vol. 25, no 18, p. 2389-2396.