Modelización de Sistemas Biológicos

Introducción a Simulación y Modelización

POLITÉCNICA

Contenidos

1. Conceptos generales y terminología.
2. Experimentación, modelización y simulación.
3. Modelos para simulación:
   - Características y tipología.
   - Técnicas de construcción y conceptualización.
4. Diseño y estudio dirigido por simulación:
   - Pasos del diseño.
   - Tipología de simuladores.
5. Apéndices:
   - Historia.
   - Lenguajes y paquetes específicos de simulación.

Introducción a Simulación y Modelización

Conceptos Generales y Terminología

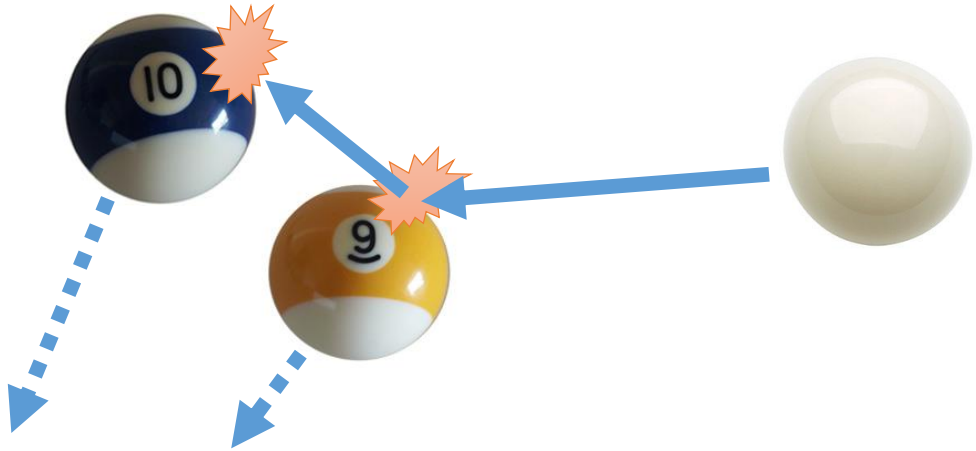
Evolución del Método Científico

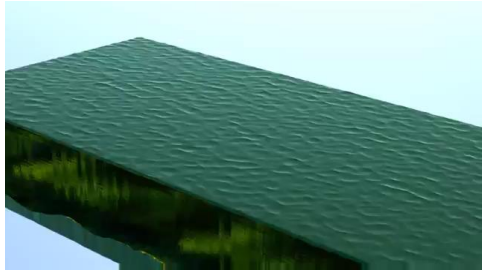
- Método tradicional:
  1. Observar el comportamiento de un fenómeno.
  2. Elaborar una hipótesis explicativa del fenómeno.
  3. Diseñar y llevar a cabo experimentos para probar o descartar la validez de la hipótesis.
- En la elaboración de la hipótesis y en la experimentación se asumen una serie de simplificaciones o idealizaciones del fenómeno a estudiar y su entorno:
  - Para poder describirlo por medio de una serie de herramientas matemáticas (e.g., ecuaciones diferenciales, funciones de probabilidad, autómata de estados, …)

4

¿En qué consiste la simulación?

- Imitación del funcionamiento de una serie de aspectos del mundo real a lo largo de una serie de dimensiones (volumen y/o tiempo):
  - Se aplica a sistemas complejos que son imposibles de describir por medios matemáticos analíticos.
  - La alternativa es un modelo matemático incompleto (por ejemplo que describe aspectos puntuales del fenómeno global) y la utilización de ordenadores para recrear escenarios controlados de ese fenómeno a mayor escala.





Realflow © by NextLimit

¿Por qué simular?

Como **herramienta descriptiva**: Permite responder a preguntas "*qué pasaría si…*".

- Permite definir escenarios difícilmente reproducibles en la realidad:
  - E.g., Los efectos de un tsunami.
- Permite controlar entradas que no podrían controlarse en el escenario real.
  - E.g., La intensidad y el foco de un seismo.
- Permite monitorizar variables del problema que no se podrían recoger en la realidad.
  - E.g., La temperatura puntual en determinadas posiciones de un reactor de fisión.
- Permite alterar la resolución de las escalas (espaciales y temporales).
  - E.g., El efecto mediambiental a largo plazo en una determinada zona.

¿Por qué simular?

Como **herramienta prescriptiva**: Permite seleccionar el mejor diseño para un escenario/problema determinado:

- Permite modificar el diseño de una forma barata:
  - E.g., La estructura de un presa.
- Permite recorrer multitud de valores de variables de entrada o de alternativas de diseño.
  - E.g., Perfiles aerodinámicos de un fuselaje ante diferentes flujos de corriente.
- Permite monitorizar variables del problema que no se podrían recoger en la realidad.
  - E.g., Efectos de un fármaco sobre la pared celular en una determinada zona.
- Permite alterar la resolución de las escalas (espaciales y temporales):
  - E.g., Fatiga de materiales de construcción a largo plazo.

¿Por qué simular?

Como **entorno de entrenamiento**: Permite formar y entrenar operarios de un tipo de instalación bajo condiciones controladas:

- Establece un entorno seguro ante el manejo de equipamiento peligroso/caro:
  - E.g., Simulador de vuelo.
- Permite modificar el escenario para incluir de forma controlada las situaciones que se quieran estudiar.
  - E.g., Simular un fallo en una central nuclear.

- En estos casos hay una serie de factores adicionales clave:
  - Fidelidad de la simulación con el escenario real (en más factores de lo “meramente numérico”).
  - Entornos interactivos e inmersivos.

Ventajas de la Simulación

- Sobre la resolución analítica:
  - Aplicable cuando no hay herramientas matemáticas analíticas.
  - … o cuando las hay, pero su resolución y explicación es demasiado compleja.
  - Permite la comparación de diseño (de un sistema) o estrategias (de gestión de un sistema) alternativas bajo una serie de circunstancias.
  - Permite comprimir y expandir las escalas de tiempo.
- Sobre el prototipado físico o el sistema real :
  - Más barato (en la mayoría de casos) en costes de desarrollo y experimentación.
  - Más configurable y controlable que un modelo físico o sistema real.
  - La experimentación es más segura, en escenario en los cuales el prototipo físico/sistema o su entorno son peligrosos.
  - Mayor/menor velocidad de la que se producen los fenómenos a estudiar.
  - Es más fácil recopilar datos e instrumentar el experimento.

Inconvenientes de la Simulación

- Sobre la resolución analítica:
  - En los modelos estocásticos, la simulación proporciona una estimación de la solución (a diferencia de la solución analítica).
  - A menudo es costosa en tiempo y recursos.
  - Si el modelo no es válido los resultados no son correctos.
- Sobre el prototipado físico o el sistema real:
  - El modelado es un arte y una ciencia. La calidad del análisis final depende de la habilidad del modelador en crear un modelo fiel a la realidad (*Garbage In – Garbage Out*).
  - Los resultados de las simulaciones pueden ser complicados de interpretar.
  - Aunque permite probar el sistema antes de comprometer recursos, al final el prototipo y seguro el sistema final se tienen que desarrollar.

Terminología

- **Sistema**: Objeto formado por un conjunto de componentes interrelacionados entre sí.
  - E.g., Una célula es un sistema biológico delimitado por una membrana y compuesto de orgánulos y cuyo funcionamiento incluye reacciones físico-químicas y rutas metabólicas.
- Un sistema presenta **propiedades emergentes**, que son propiedades que no presentan sus componentes (e.g., en la célula la propiedad emergente es la vida).
  - No se puede analizar mediante una serie de descomposiciones.

Terminología

- **Entorno**: El conjunto de los elementos externos que interactúan con los componentes del sistema.
  - E.g., La célula es un sistema que intercambia materia y energía con su entorno, habita en un espacio intercelular que le afecta en propiedades como son acidez, presión, temperatura, etc.
- Es frecuente que para el estudio de sistemas complejos se dividan estos en un conjunto de **subsistemas** interrelacionados entre sí.
  - E.g., La corteza cerebral es un sistema formado por células (neuronas / glia) que se relacionan mediante potenciales de acción y neurotransmisores.
- El **sistemismo** postula que todos los objetos son sistemas o componentes de otro sistema.

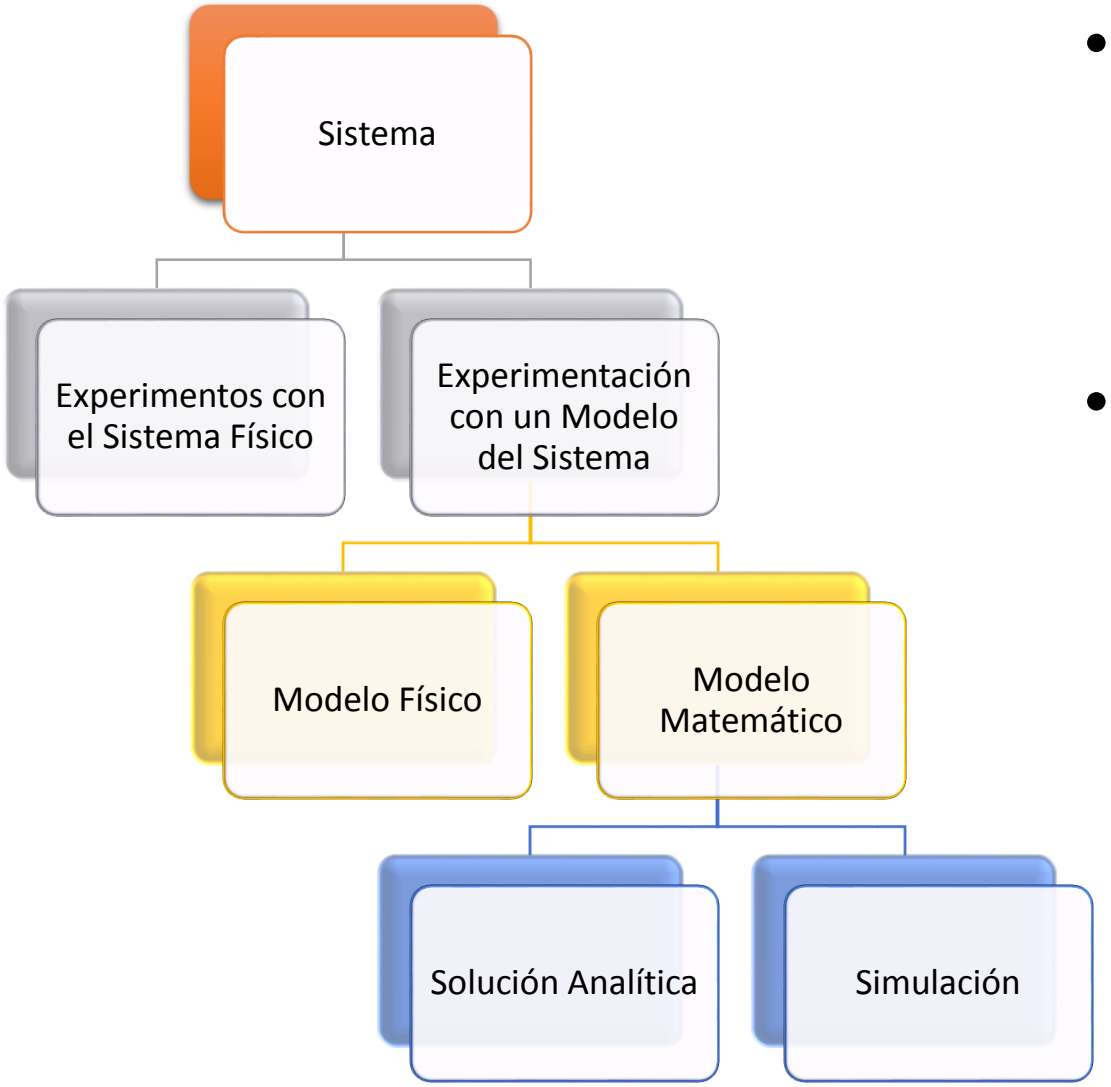
Terminología

- **Complejidad**: Los sistemas reales son complejos (en parte, por ello se recurre a la simulación) debido a:
  - La complejidad de los elementos que lo componen.
  - El número de elementos que lo componen.
  - La complejidad de las interrelaciones entre elementos, tanto internas como con el entorno.
  - El número de interrelaciones existentes.

Introducción a Simulación y Modelización

Experimentación, Modelización y Simulación

Experimentación con Sistemas



- Modelización:
  - Prototipado físico (a escala y/o controlado) o
  - Modelización matemática.
- Simulación:
  - (En teoría) la simulación es la última de las alternativas a considerar.
  - … no obstante, lo bueno que tiene la simulación es que no hace falta plantear la alternativa analítica.

Proceso de Modelización

- El proceso de modelización y simulación parte de un **sistema objetivo**, que es el sistema que se desea estudiar o construir:
  - Sistema real existente.
  - Sistema real que se quiere diseñar/construir.
  - Sistema conceptual.
  - Sistema imaginario.
- El sistema objetivo queda definido por una serie de límites (lógicos, físicos y/o temporales) así como por las interacciones internas y externas que se van a tener en cuenta.

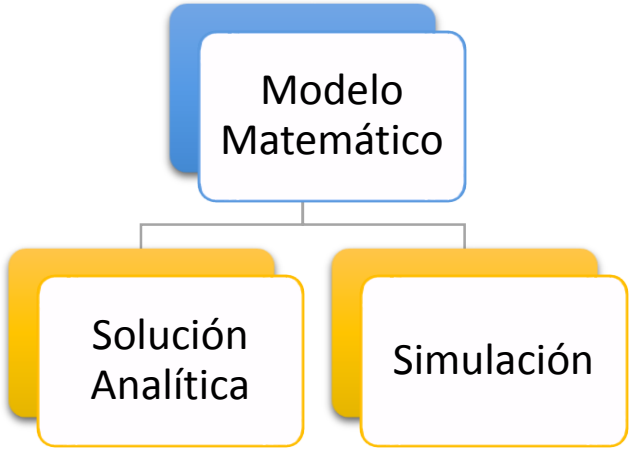
Terminología

- **Modelo**: Descripción simplificada de un sistema obtenida como resultado de un proceso de abstracción del mismo:
  - La descripción debe ser adecuada al estudio del sistema objetivo que se quiera realizar (las características del sistema en las que estamos interesados así como a las condiciones de entorno a las que queremos someter el sistema).
  - Debemos asumir que el comportamiento del modelo (al menos en lo referente a los fenómenos a estudiar) debe ser igual al del sistema objetivo.

Terminología

- **Variables de estado**: El conjunto mínimo de variables necesarias para describir todos los aspectos de interés del sistema.
  - El modelo debe ser adecuado al estudio del sistema objetivo que se quiera realizar, es decir, a las características del sistema en las que estamos interesados así como a las condiciones de entorno a las que queremos someter el sistema.
  - Los valores de dichas variable en un instante de tiempo constituyen el **estado del sistema**.
  - Tanto el modelo como las variables de estado dependen de la óptica con la que se estudie un sistema objetivo.
  - Las variables pueden ser:
    - Discretas: Toman una serie (finita) de posibles valores.
    - Continuas: Toman valores dentro del rango de números reales.

Resolución de los Modelos



- El sistema objetivo es complejo, y el modelo también lo puede ser (pero menos); pero al estar definido en términos matemáticos es resoluble:
  - Por **métodos analíticos**.
  - Y si no es posible así, por medio de la **simulación**:
    - Evaluar el modelo numéricamente y recopilar datos para estimar sus características.

- En muchos casos, las limitaciones para la solución analítica se deben al número de componentes y de sus relaciones.
- Que el modelo sea complejo es necesario para otorgarle el mayor grado de validez.

Resolución de los Modelos

- **<u>Resolución analítica</u>**:
  - Aplicable cuando el modelo es suficientemente simple como para que las herramientas matemáticas disponibles puedan resolverlo.
  - Se puede dar el caso de (sobre-)simplificar el modelo para hacerlo resoluble por métodos analíticos, lo cual puede comprometer su fidelidad al sistema objetivo.
- **<u>Simulación</u>**:
  - La simulación consiste en operar con el modelo matemático que representa al sistema objetivo.
  - El modelo debe ser operable (cosa que el sistema objetivo puede no ser).
    - Puede calcularse su comportamiento ante entradas conocidas, obteniendo el resultado del mismo y la modificación de su estado.
    - Eso no implica que para una salida deseada se pueda analíticamente conocer cuáles son las entradas necesarias.

Terminología

- **<u>Simulación por ordenador</u>**: Ejecución en un ordenador (o varios) de las componentes matemáticas y algorítmicas asociadas a un modelo:
  - Instanciando los valores de entrada.
  - Recogiendo unos datos de monitorización y de salida del fenómeno simulado.
  - A pesar de su traducción directa de modelo a simulación por ordenador, ésta debe considerar otros factores meramente computacionales:
    - Precisión de las operaciones aritméticas.
    - Aspectos de rendimiento y eficiencia.
    - Escalabilidad de la simulación.
    - Otros requisitos no funcionales.

Terminología

- **<u>Modelos computacionales</u>**: Modelo de un sistema (nuevo o mejoras de un sistema existente) cuando se utiliza la simulación con fines de diseño (como herramienta prescriptiva):
  - Permite definir metodologías de diseño interactivo (*computational steering*), que incluye un bucle con:
    - Herramientas interactivas de diseño.
    - Simulación de modelos.
    - Visualización científica y análisis de datos.
  - Muy vinculado al paradigma SBES (*Simulation-based Engineering and Science*).
  - El objetivo es que los modelos sean fieles al sistema pero fáciles de extender y cambiar.

Introducción a Simulación y Modelización

Modelos para Simulación

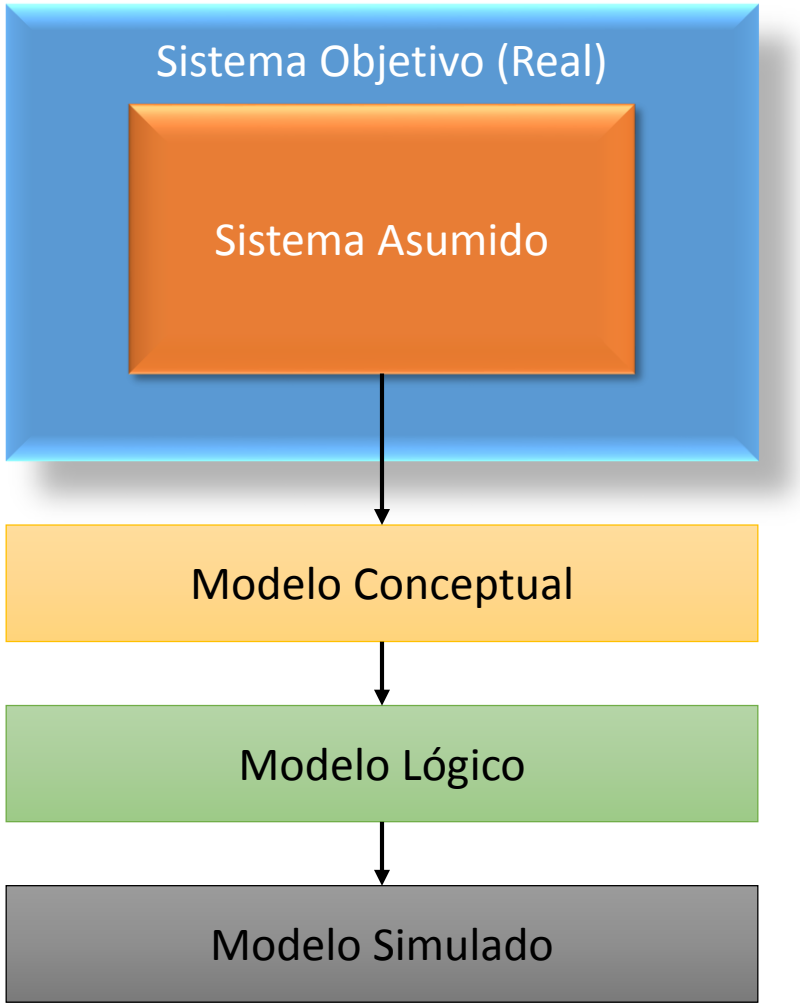
Características de los Modelos para Simulación

- El modelo es una representación **abstracta** y **simplificada** del sistema objetivo:
  - Se define por medio de los componente principales y una serie de suposiciones y asunciones sobre cómo funciona el sistema.
    - El modelo se desarrolla a partir de aproximaciones e hipótesis y, por lo tanto, representa tan sólo parcialmente el sistema objetivo.
    - El modelo se formula para un fin determinado y debe ser útil para dicho fin (para otros fines pueden ser necesarios otros modelos).
    - El modelo debe alcanzar un compromiso entre sencillez y la necesidad de representar adecuadamente los aspectos esenciales del sistema objetivo.
- El modelo se basa en una abstracción matemática usarla para definirlo:
  - E.g., Teoría de colas, programación lineal, ecuaciones diferenciales, autómatas de estados, …

Técnicas para la Construcción de Modelos

- Los modelos se construyen por medio de varias técnicas:
  - **Abstracción**: Eliminar detalles no fundamentales, representando solamente los detalles necesarios para el fin para el que se construye el modelo.
  - **Idealización**: Sustituir elementos reales por conceptos, por ejemplo, sustituyendo medidas reales por una función.
  - **Agregación**: Parcelación del modelo en componentes:
    - Cada componente sólo debe conocer parte de la información de estado y contribuye con su estado a una parte del estado global del modelo.
    - Sabe realizar parte del proceso de simulación:
      - Coge la parte del estado que le interesa,
      - realiza una serie de operaciones y
      - modifica su estado y el de los componentes con los que se relaciona.
  - **Generalización/Especialización**: Los componentes se agrupan en clases y subclases con propiedades comunes y específicas.

Conceptualización de los Modelos



A nivel del sistema real se selecciona los límites del fenómeno a estudiar / recrear.
Dentro de esos límites se establecen que factores se considerar objetivo del estudio.

Modelo Conceptual: Se abstraen los factores fundamentales, aquí se aplican las técnicas antes vistas:

- Eventos, actividades, procesos, variables de estado, componentes y sus relaciones.
- Medidas de rendimiento y parámetros a monitorizar.
- Requisitos de datos para el estudio.
- Selección del nivel de detalle (asunciones/suposiciones de partida del estudio).

Modelo Lógico: Formalización matemática de los componentes y sus relaciones así como de entradas y salidas.

Modelo Simulado: Implementación del Modelo Lógico en el lenguaje, biblioteca o paquete que se seleccione.

Ejemplo de Modelo: Caída Libre

- Caída libre de una bola de acero:
  - Alta masa y reducida superficie: Se puede despreciar la resistencia del aire [Abstracción] Modelo Conceptual
  - Caída de poca altura: La fuerza gravitatoria *g* es constante e igual a *9.81 m/s²* [Idealización] Modelo Conceptual

$$\frac{dv}{dt} = g \quad \Rightarrow \quad v(t) = -gt + v_0$$

$$y(t) = -\frac{1}{2} g t^2 + v_0 t + y_0$$

Modelo Lógico

- Caída libre de un paracaídas:
  - Densidad del aire: Si la altura no es muy grande se podrá considerar que la densidad del aire es constante [Idealización]. Modelo Conceptual

$$m\frac{dv}{dt} = \frac{1}{2}\rho C_D A v^2 - mg$$

Modelo Lógico

Tipología de los Modelos

- **Dimensiones**: ¿Qué fenómenos estudia el modelo?
  - **Aspectos de ámbito**: Amplitud del entorno que afecta a los fenómenos que estudia el modelo.
  - **Aspectos de detalle**: Definición de la escala de los efectos hay que seleccionar para estudiar el fenómeno.
- **Determinismo**: ¿El comportamiento del sistema depende únicamente de variables de entrada conocidas?
  - **Deterministas**: El resultado del modelo depende únicamente de factores de entrada que se pueden ajustar y definir.
  - **Estocástico**: Depende de un factor aleatorio o de factores deterministas que el modelo no contempla o no puede describir.

Tipología de los Modelos: El Tiempo

- **Carácter temporal**: ¿El tiempo es un factor a considerar en el modelo?
  - **Modelos estáticos**: No dependen del tiempo o están asociados a un punto de equilibrio.
  - **Modelos dinámicos**: Se estudia el comportamiento a lo largo del tiempo. A la hora de definir cómo el tiempo afecta al sistema tenemos:
    - **Modelos de tiempo discreto**: Las modificaciones que se realizan a lo largo del tiempo suceden en instantes puntuales de tiempo. Los cambios de estado son, por lo tanto, instantáneos en esos instantes de tiempo.
    - **Modelos de tiempo continuo**: La evolución del estado del sistema es continuo a lo largo del tiempo.
    - **Modelos híbridos**: Parte del estado del sistema se puede modelizar con tiempo discreto y parte con tiempo continuo.

Terminología

Hay una serie de conceptos de especial relevancia en el caso de los modelos de tiempo discreto:

- **Actividad**: Representa un periodo de tiempo de una determinada duración a lo largo de la cual se realiza una acción que modifica el estado del sistema.
- **Evento**: Instante puntual en el tiempo en el cual se realiza un cambio en el estado del sistema.
- **Proceso**: Secuencia de eventos ordenados en el tiempo.

Terminología

- **Recurso**: Son puntos de coordinación del proceso de simulación, requeridos para la ejecución de una actividad. A lo largo de la simualción son utilizados/creados/destruidos.
  - Algunos recursos están fijos y otros se producen y consumen: E.g., las proteínas en las redes metabólicas.
  - Algunos son renovables: E.g., oxígeno u otras moléculas que entrar en el entorno.
  - Algunos son compartidos: E.g., medios de difusión, espacios intercelulares, sustratos y ecosistemas.
  - Algunos son coordinados: E.g., un receptor en la membrana celular se activa cuando las moléculas de dos ligandos se le acoplan. El receptor es un recurso coordinado.

Precisión de los Modelos

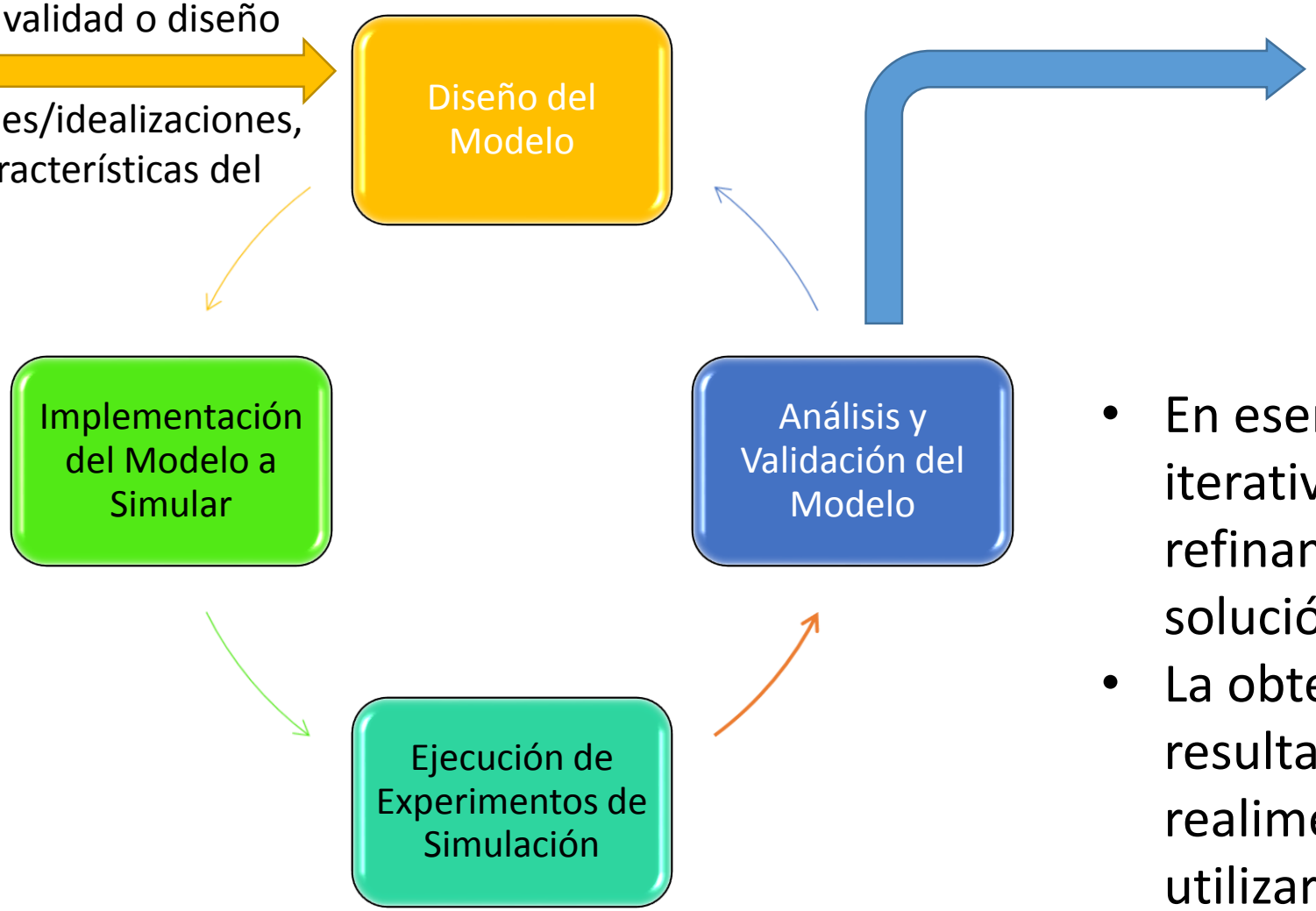
- Equilibrio entre precisión del modelo y su complejidad.
  - Para ello, el modelo debe ser:
    - Una representación fidedigna del sistema objetivo.
    - Suficientemente simple para ser modelada y simulada con unos recursos de tiempo y cómputo razonables.
  - En la fase de diseño se deben considerar:
    - Los factores clave en el funcionamiento del sistema que afectan al fenómeno a estudiar.
    - Los factores no relevantes para tal fin sólo hacen el modelo más complicado de diseñar, comprender y resolver.
  - Desde el punto de vista de las herramientas matemáticas:
    - El uso de funciones continuas sobre el tiempo complican el modelo, sobre todo si no son relevantes para el objeto del estudio.
    - La utilización de factores estocásticos abstrae aspectos del entorno que sólo queremos modelar parcialmente.

Introducción a Simulación y Modelización

Diseño y Estudio Dirigido por Simulación

Diseño y Estudio Dirigido por Simulación

Hipótesis a validad o diseño a realizar, abstracciones/idealizaciones, límites y características del modelo



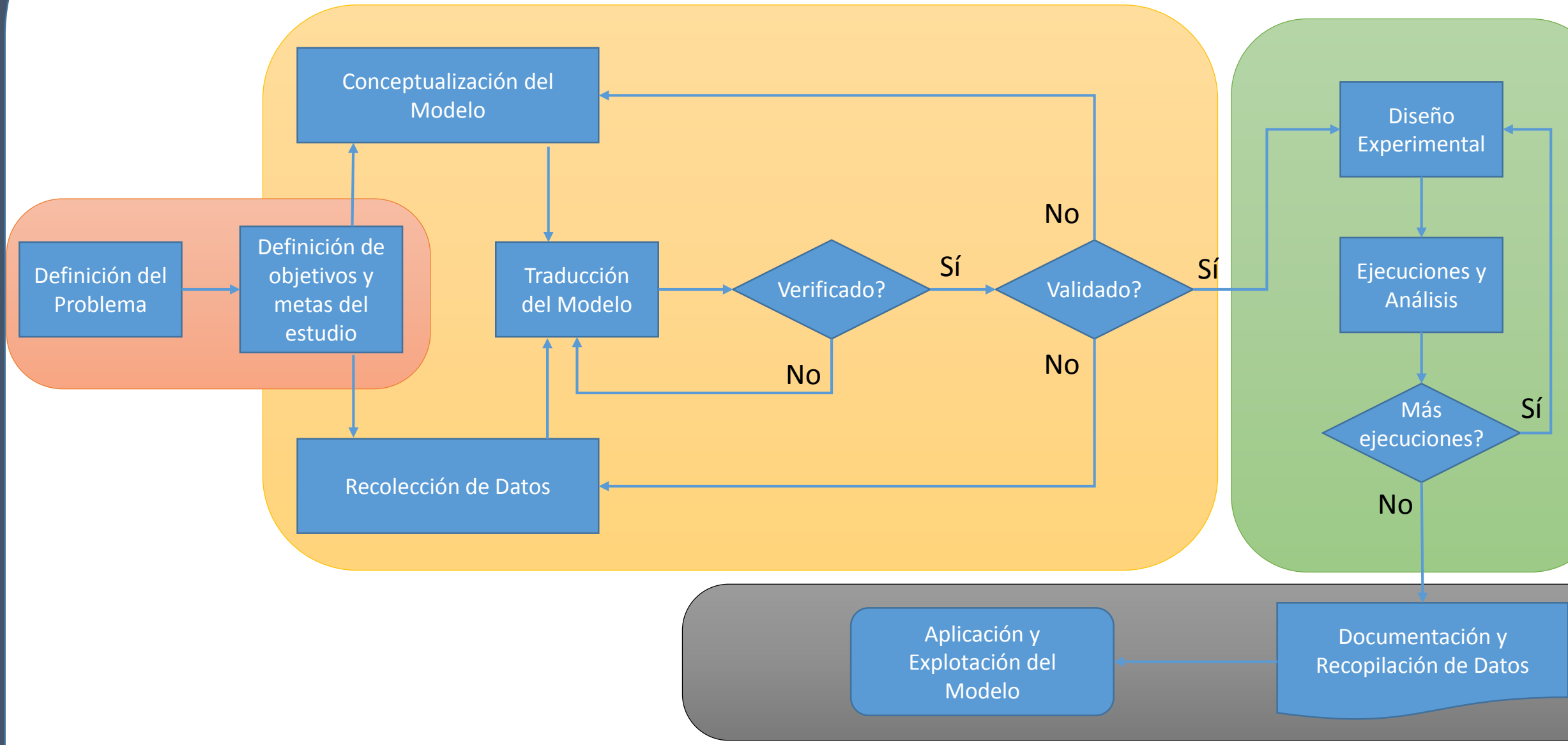
Resultados del modelo, hipótesis validada/refutada, datos de operación, diseño optimizado o fenómeno estudiado.

- En esencia, es un proceso iterativo y de refinamiento de una solución.
- La obtención de resultados parciales realimenta el modelo a utilizar.

Aspectos a Considerar en la Simulación

- Crecimiento en la complejidad de los modelos:
  - Aumenta la fidelidad del modelo frente al sistema objetivo a cambio de complejidad en el diseño y programación del modelo.
  - En la actualidad las técnicas de modelado, el software y herramientas permiten manejar modelos muy complejos de forma flexible.
- Consumo de recursos computacionales:
  - Los ciclos de CPU son cada vez más baratos y eficientes, no obstante la simulación evoluciona y siempre puede “pedir más”.
- “Simulación no (sólo) es programación”:
  - La simulación es mucho más que programar el modelo y ejecutarlo.
  - El objetivo de la pregunta a realizar requiere un diseño del experimento y un análisis de los resultados de simulación.

Pasos en el Diseño de un Estudio de Simulación



Pasos: Definición del Problema

- Implica la comprensión por ambas partes del escenario:
  - El analista debe entender **el problema**.
  - El experto del dominio debe entender **la formulación**.
- Crear un modelo no es *per se* un objetivo …
- … un modelo se crea para responder a una pregunta/hipótesis:
  - ¿Cuál es el mejor diseño?, ¿Cuál es la mejor estrategia?, ¿Cómo funciona tal proceso?, ¿En qué afecta tal factor? …
- Los objetivos pueden cambiar en el momento en el cual se van obteniendo resultados que nos dan más información sobre los fenómenos a estudiar.
- La última palabra es la del experto del dominio. ¡Éste es su modelo!

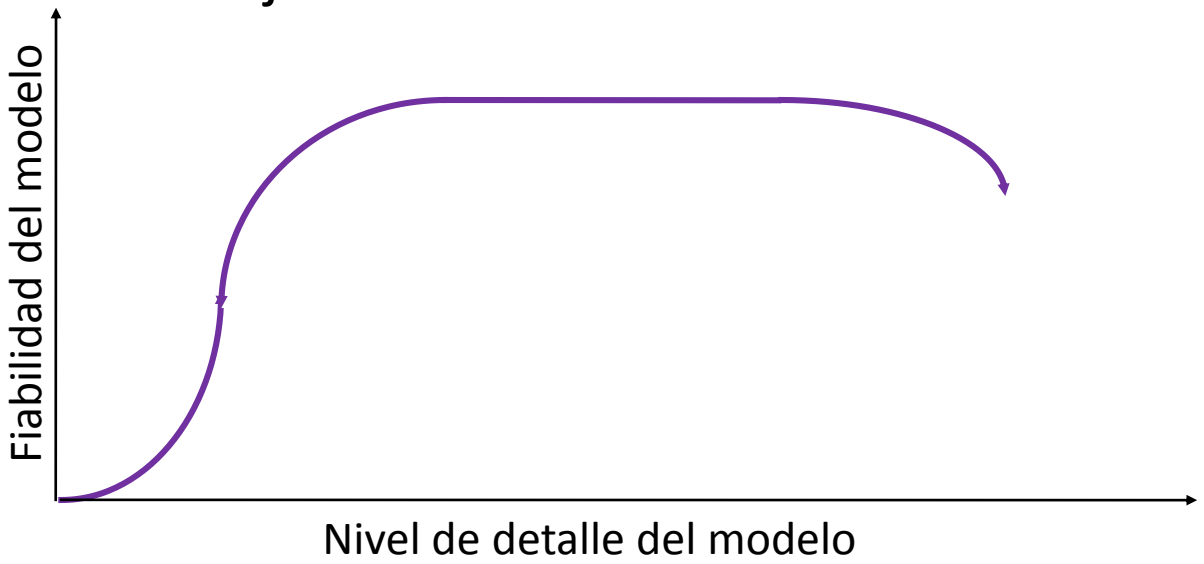
Pasos: Objetivos y Metas del Estudio

- Se deben definir al alcance del proyecto y los requisitos (funcionales y no funcionales):
  - Identificar los escenarios a investigar.
  - Establecer criterios de decisión.
  - Establecer el tipo de información a reportar (depende del usuario final).
  - Determinar los requisitos a nivel de datos.
  - Fijar los requisitos de computación (hardware/software) y de personal.
  - Establecer una agenda con hitos y una planificación.
  - Determinar tarifas y calcular los costes.

Selección del Nivel de Detalle

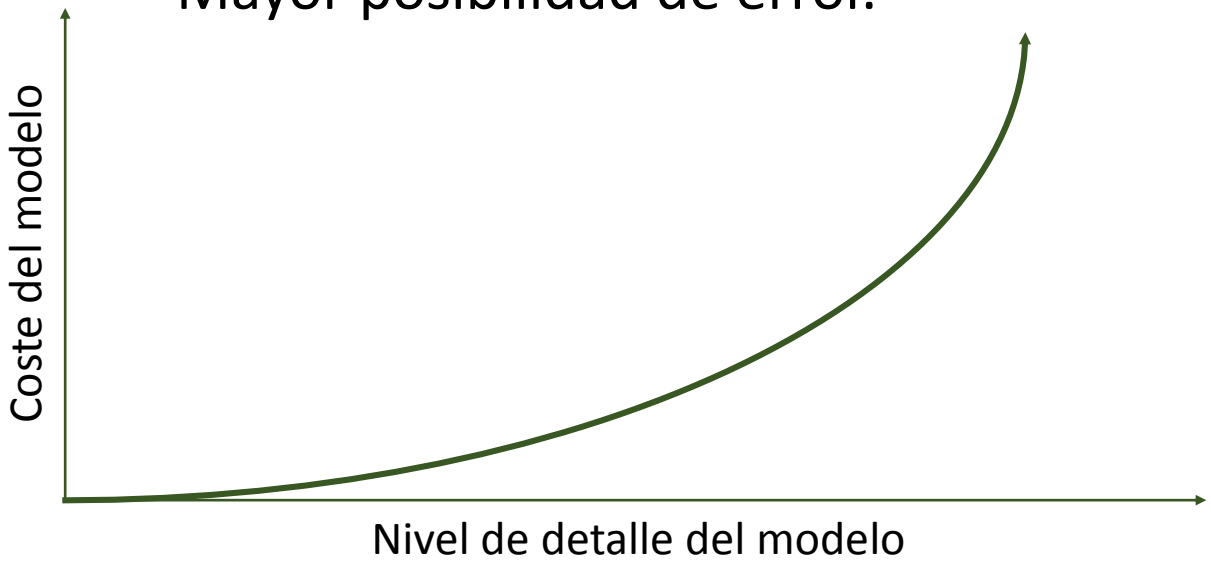
Niveles Bajos de detalle:

- Problemas:
  - Pérdida de información y de resolución en los datos generados.
  - Pueden no ser alcanzables los objetivos del modelo.



Niveles Altos de detalle:

- Problemas:
  - Requieren más tiempo y más esfuerzo.
  - Simulaciones más largas.
  - Mayor posibilidad de error.



Pasos: Recolección de Datos

- Objetivo:
  - Recolección de datos para **recrear las entradas del modelo** de acuerdo con los datos experimentales que se recogen en el sistema objetivo (de forma empírica).
  - Recolección de datos para **validar la salida del modelo** frente a lo que en realidad se observa en el sistema objetivo.
- Procesado:
  - Determinación de variables aleatorias.
  - Ajuste a distribuciones.

Pasos: Traducción del Modelo

- A mano: Más como ejercicio formativo que como aplicación.
- Hojas de cálculo: Se da mucho en economía y análisis de riesgos.
- Lenguajes de programación general: Java, C/C++/C# o FORTRAN.
- Lenguajes específicos de simulación: SIMSCRIPT, SIMAN, …
- Paquetes de simulación: Arena, Simulink, EXTEND, …

Se deben considerar aspectos tales como:

- Flexibilidad en el modelado.
- Comodidad en el uso y facilidad para incluir términos de simulación.
- Experiencia del modelador.

Pasos: Traducción del Modelo

Modelado por medio de lenguajes de propósito general

- Ventajas:
  - No hay coste de software adicional.
  - Portable a otros sistemas.
  - No se necesita formación adicional.
- Inconvenientes:
  - Todo modelo comienza desde cero.
  - El código es difícilmente reusable.
  - Ciclos de desarrollo muy largos.
  - Dificultades en la fase de verificación.

Pasos: Traducción del Modelo

Modelado por medio de lenguajes de simulación general

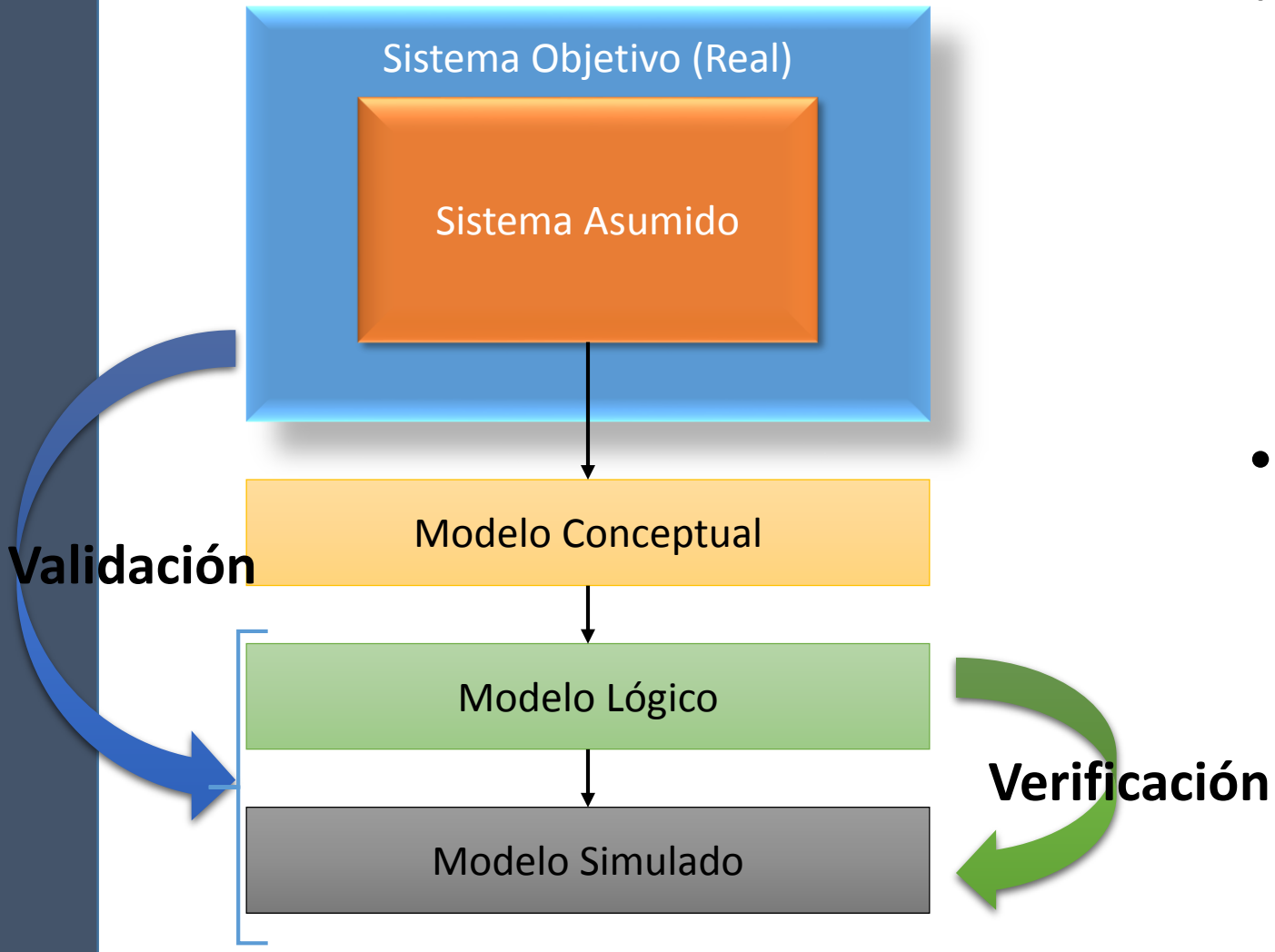
- Ventajas:
  - Funcionalidades estándar habituales en modelado.
  - Ciclos de desarrollo más cortos.
  - Mejor soporte en la verificación del modelo.
  - Código legible.
- Inconvenientes:
  - Coste del software mayor.
  - Se requiere formación en ese lenguaje.
  - Portabilidad sujeta al soporte de dicho lenguaje.

Pasos: Traducción del Modelo

Modelado por medio de paquetes específicos de simulación

- Ventajas:
  - Desarrollo muy rápido de modelos complejos.
  - Ciclos de aprendizaje corto.
  - No se programa – menor número de errores.
- Inconvenientes:
  - Coste del software alto.
  - Ámbito de aplicación limitado.
  - Flexibilidad/extensibilidad limitada.
    - Puede no ajustarse al problema.

Pasos: Verificación y Validación



- **<u>Verificación</u>**: Probar a que la lógica operacional del proceso de simulación es correcta.
  - Depuración del código de la simulación.
  - *¿El modelo hace lo que yo quiero que haga?*
- **<u>Validación</u>**: Probar que el modelo representa fielmente el sistema objetivo.
  - Comparación de los resultados del modelo con los datos recogidos del sistema real.
  - *¿El modelo hace lo que hace el sistema real?*

Pasos: Diseño Experimental

- Aspectos a considerar:
  - Selección de escenarios a simular y barrido de parámetros.
  - Tipo de análisis de los datos de salida:
    - Análisis estacionario (*steady-state*): Propiedades que aparecen en ejecuciones largas o en la operativa continua del modelo.
    - Análisis de simulaciones terminadas: Si las simulaciones tienen una condición de finalización, ¿cuál es el estado del sistema cuando se da esa situación?
  - Número de ejecuciones de la simulación y duración (número de iteraciones) de cada ejecución.
  - Mecanismo de inicialización.
  - Reducción de la varianza.
- Existen métodos formales para el diseño experimental: E.g., Método de Taguchi.

Pasos: Ejecuciones y Análisis

- Automatización de las ejecuciones y de la recogida de datos.
- Tests estadísticos sobre la significancia de los resultados:
  - Estimadores puntuales.
  - Estimación de intervalos de confianza.
  - Test de comparaciones simples y múltiples.
- Interpretación de los resultados.

Pasos: Documentación y Recopilación de Datos

- Documentación del modelo:
  - Descripción formal del mismo.
  - Documentación del código.
  - Control de versiones.
- Documentación de los resultados:
  - Etiquetar los packs de resultados con los parámetros usados en la simulación, la inicialización, y demás que permita identificarlos unívocamente.
  - Si se puede, referencia a la versión del sistema de control de versiones.
  - Archivado de resultados.
  - Generación de una tabla de nivel más alto reportando resultados agregados.

Tipología de las Simulaciones

- Las simulaciones y los modelos sobre los que se basan se pueden catalogar de acuerdo a varios criterios:
  - Si el estudio considera el tiempo como un facto relevante del fenómeno y cómo afecta.
  - Del conocimiento de todas las transformaciones internas del sistema de forma determinista.
  - Del conocimiento que se dispone en la fase de diseño sobre entradas, salidas y transformaciones del sistema.
  - Carácter deductivo o inductivo en la construcción del modelo.

Tipologías de Simulaciones (Tiempo)

- **Simulaciones estáticas**: Representan el estado del sistema en un instante concreto en el tiempo.
    - Métodos de Monte-Carlo o métodos de optimización.
- **Sistemas dinámicos**: Simulan el comportamiento del sistema a lo largo del tiempo:
    - **Simulaciones continuas**: El estado y la evolución del sistema varía de forma continua.
        - Ecuaciones diferenciales ordinarias o en derivadas parciales.
    - **Simulación de eventos discretos**: El estado del sistema se modifica instantáneamente en determinados instantes de tiempo.
        - Modelos de eventos discretos, modelos probabilísticos o simulaciones basadas en agentes.

Tipologías de Simulaciones (Otros)

Determinismo

Deterministas

Todas las transformaciones depende sólo de variables de entrada y estado conocidas.

Estocásticos

Existen variables de entrada o transiciones entre estados desconocidas que se pueden modelizar con cálculo probabilístico.

Entradas

Explícitos

Las variaciones de estado y las salidas dependen sólo de las entradas del sistema.

Implícitos

Las variaciones de estado y las salidas dependen del estado interno o de salidas previas.

Salidas

Deductivos

El sistema se modela sobre la base de una teoría.

Inductivos

El sistema se modela sobre la base de datos empíricos recogidos.

Evaluación Coste/Beneficio de la Simulación

- Una de las ventajas de simular frente a hacer prototipos es el coste, no obstante los costes de la simulación son de diferente tipo:
  - Adquisición del software (especialmente paquetes específicos o licencias de lenguajes).
  - Tiempo del modelador, programador y analista.
  - Costes de ejecución (en especial grandes simulaciones, coste de CPU/disco/etc.).
  - Costes derivados del tiempo requerido para tener el modelo (coste de oportunidad).

Introducción a Simulación y Modelización

Apéndice

Un Poco de Historia

- Segunda Guerra Mundial:
  - Métodos de Monte Carlo: Usados en el diseño de la bomba atómica.
  - En la actualidad se siguen usando en modelos de predicción de riesgo, de integración compleja y en simulación estática.
- Años 50’ y 60’:
  - Utilización generalizada de sistemas de cómputo (superordenadores).
  - Primeros lenguajes de simulación: SIMSCRIPT y GPSS (IBM).
  - Simulación se ve como alternativa de último recurso.

Stanisław Ulam

Harry Markowitz

Un Poco de Historia

- Años 60’ y 70’:
  - Los sistemas de cómputo siguen siendo instalaciones dedicadas de acceso limitado.
  - Pritsker presenta GASP IV (1974): Dispara una serie de aplicaciones muy diversa.
- Años 70’ y 80’:
  - Pritsker y Pegden desarrollan SLAM (1979).
  - Los modelos ganan en fidelidad a la hora de usar herramientas más sofisticadas.
  - Pegden desarrolla SIMAN (1982): Primeras herramientas usables en grandes sistemas y entornos PC.

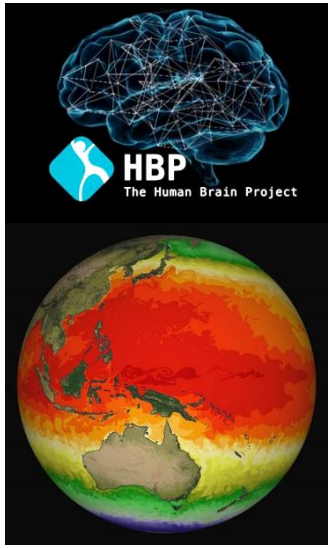
Alan Pritsker

Claude Dennis Pegden

Un Poco de Historia

- Años 80’ y 90’:
  - Entornos basados en PCs y lenguajes de simulación muy sofisticados.
  - Inclusión de visualización científica: Los modelos se pueden visualizar y analizar.
- Años 90’ hasta la actualidad:
  - Nuevos modelos de simulación: simulación social y basada en agentes.
  - Extensión de la simulación fuera de los campos de ingeniería o ciencias experimentales.
  - Proyectos de simulación de grandes sistemas: Simulación climática(CEIST/JAMSTEC) y del cerebro (HBP).

Henry Markram



Lenguajes Genéricos de Simulación

- GPSS:
  - Lenguaje estructurado de bloques.
  - Ejecución interpretada.
  - Basado en FORTRAN.
  - Elementos: *Transactions / Facilities*.
- SIMSCRIPT II.5:
  - Lenguaje natural de descripción del problema.
  - Programa compilado.
  - Lenguaje completo.
  - Elementos: *Processes / Resources / Continuous*
- MODSIM III:
  - Lenguaje orientado a objetos.
  - Programas compilados modulares.
  - Basado en Modula2.
  - Elementos: *Processes*.
- SIMULA:
  - Lenguaje de descripción basado en ALGOL.
  - Programas compilados.
  - Elementos: *Processes*.
- SLAM:
  - Lenguaje estructurado por bloques.
  - Ejecución interpretada.
  - Basado en FORTRAN con extensiones.
  - Elementos: *Network / Event / Continuous.*
- CSIM:
  - Lenguaje orientado a procesos.
  - Basado en C/C++.
  - Elementos: *Processes*.

Paquetes de Simulación Específica

- OPNET/COMNET: Simulador de comunicaciones y redes.
- SIMFACTORY: Simulación de plantas de fabricación.
- MCELL: Simulador de microfisiología celular.
- NEST/NEURON: Simuladores de redes neuronales.
- GROMACS/ABALONE/MDYNAMIX: Simuladores de dinámica molecular.
- FOLDX: Simulador de plegamiento de proteínas.
- AUTODOCK: Simulador de *docking* de proteínas.
- …

Introducción a Simulación y Modelización

Organización del Resto del Curso

Organización del Curso

1. ~~Introducción a simulación y modelización~~
2. Simulaciones Monte Carlo
3. Componente aleatoria de los modelos
4. Simulación de eventos discretos
5. Simulación de eventos continuos e híbridos
6. Verificación y validación
7. Modelos computacionales bio-Inspirados
8. *Artificial life* y nuevos paradigmas de simulación

Matlab/Simulink: Simulación ger

Mcell: Simulación de interaccion
de partículas en la célula

Casos Prácticos

Modelización de Sistemas Biológicos

Introducción a Simulación y Modelización

POLITÉCNICA