

# Modelización de Sistemas Biológicos

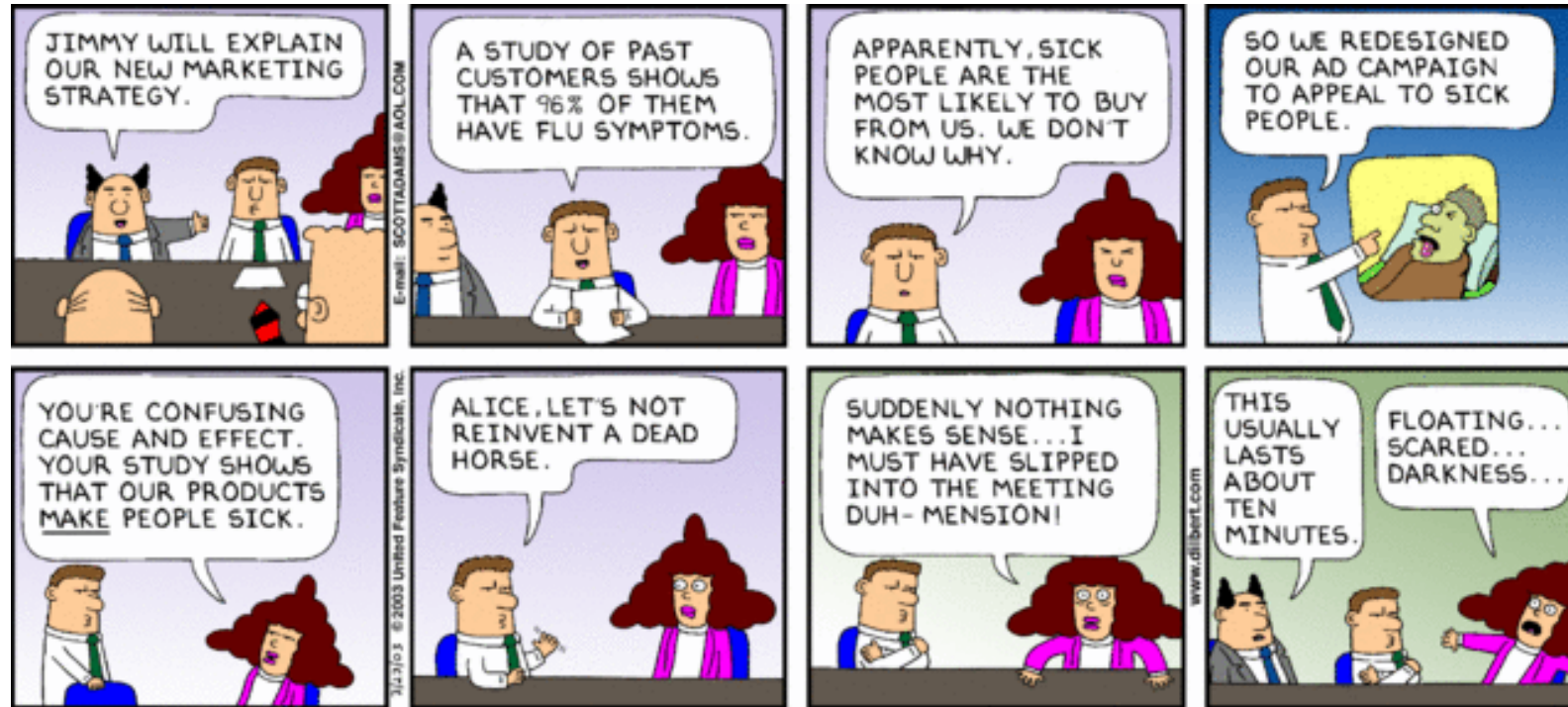
---

Diseño Experimental y Validación/Verificación



POLITÉCNICA

# Diseño Experimental



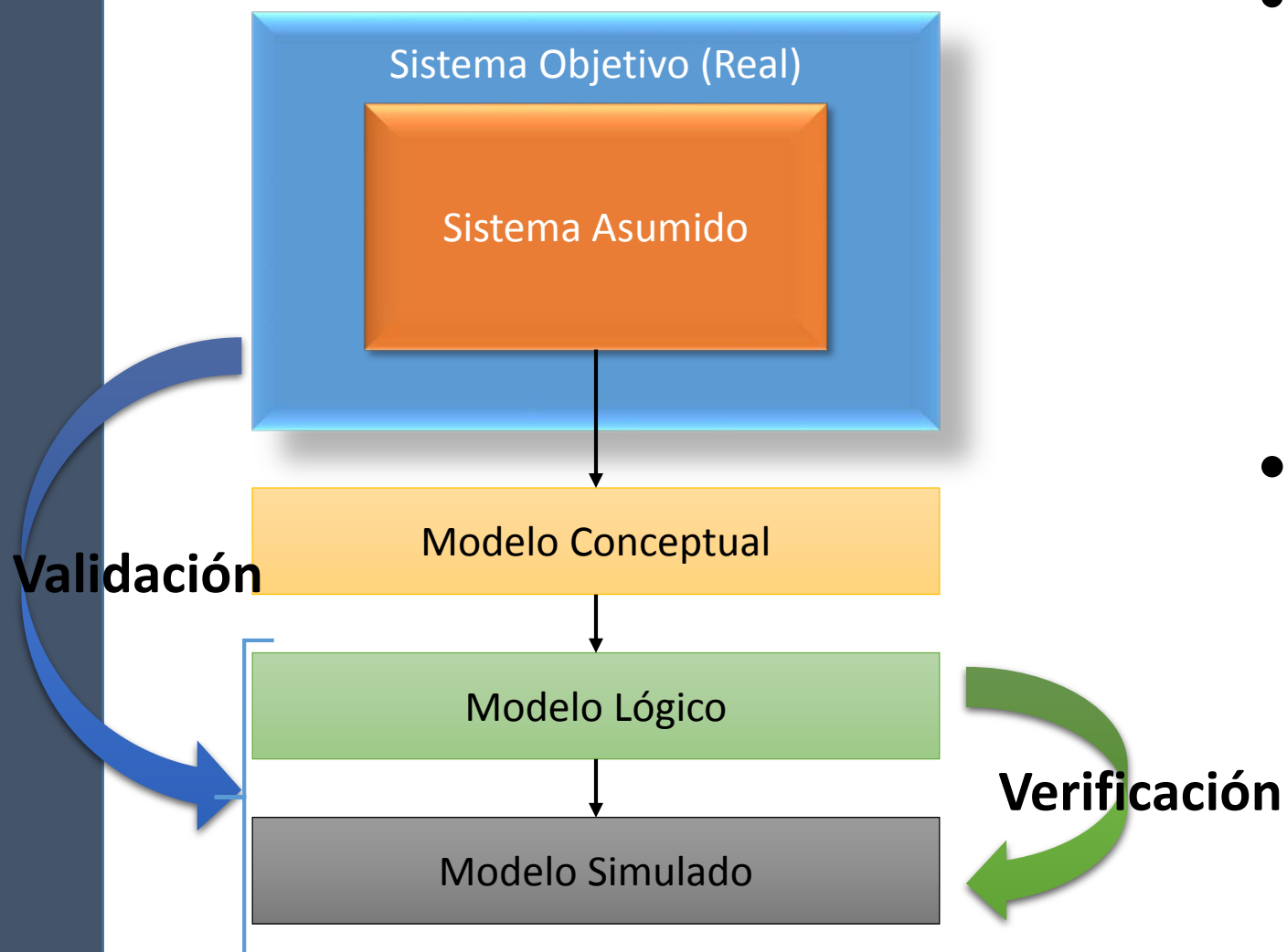
Verificación y Validación



# Contenidos

1. Verificación y Validación.
2. Diseño Experimental.

# Verificación y Validación (Revisión)



- **Verificación:** 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?*
- **Validación:** 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?*

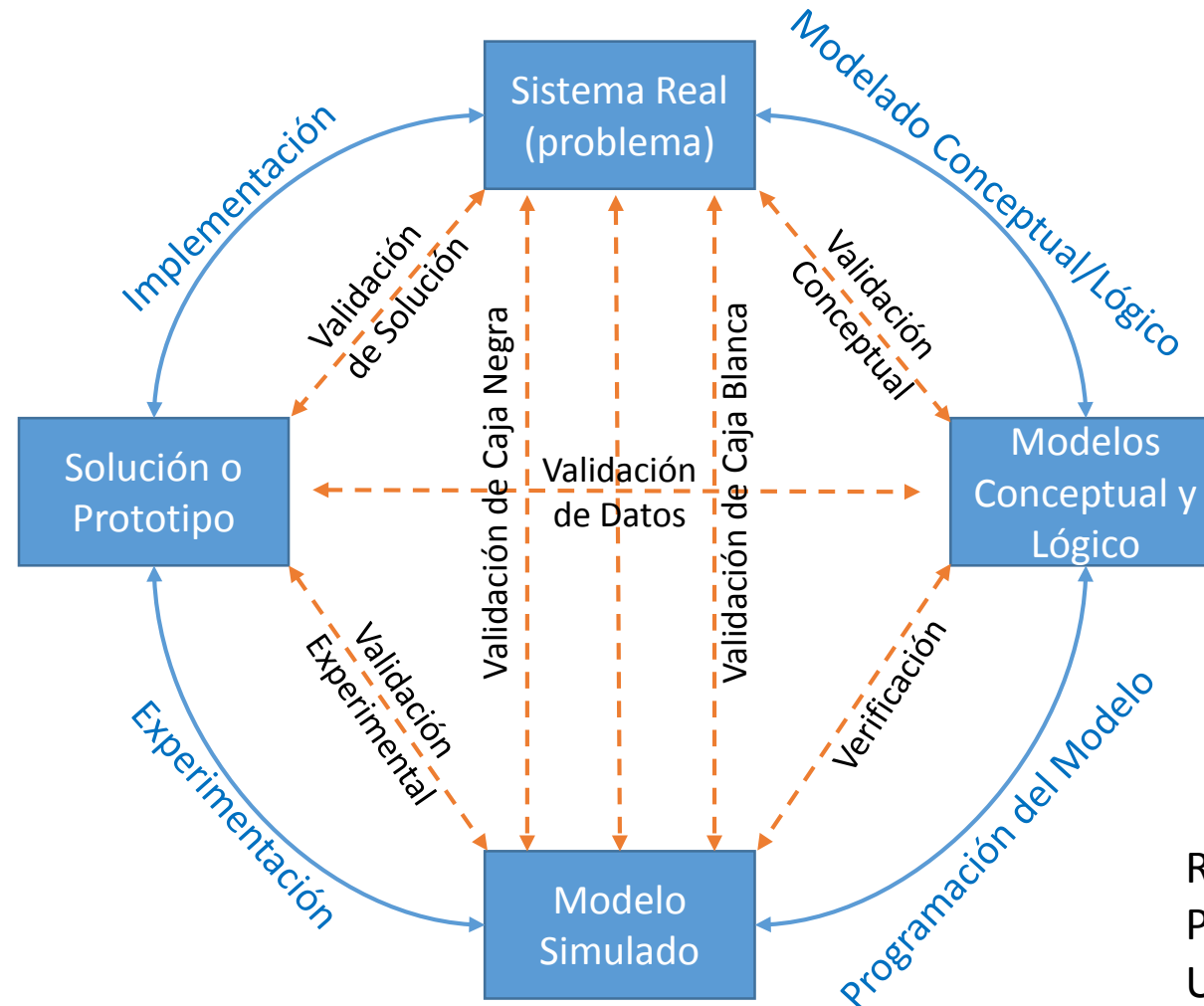
# Verificación y Validación

Introducción

# Análisis de un Modelo Simulado

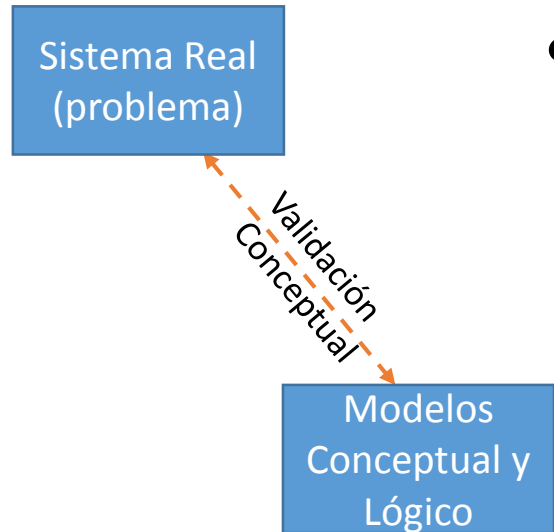
- El objetivo de analizar (validez/veracidad) los resultados de un modelo:
  - **NO** consiste en demostrar que es **CORRECTO**.
  - Consiste en probar que es **INCORRECTO**.
- Verificación:
  - Analizar el paso desde la especificación del **modelo lógico** al **modelo simulado**.
- Validación:
  - Estudiar el grado de precisión del modelo sujeto a que:
    - Todos los modelos tiene un cierto grado de error.
    - Los modelos se diseñan para un fin específico.
  - Diferencia entre validez y precisión:
    - La precisión se mide en una escala (de 0 a 100%) y está asociado a un error cometido.
    - Validez es una cualidad binaria (es válido o no es válido): ¿La precisión es suficiente?

# Verificación y Validación Dentro del Diseño de un Estudio Basado en Simulación



Robinson S (2004). Simulation: The Practice of Model Development and Use

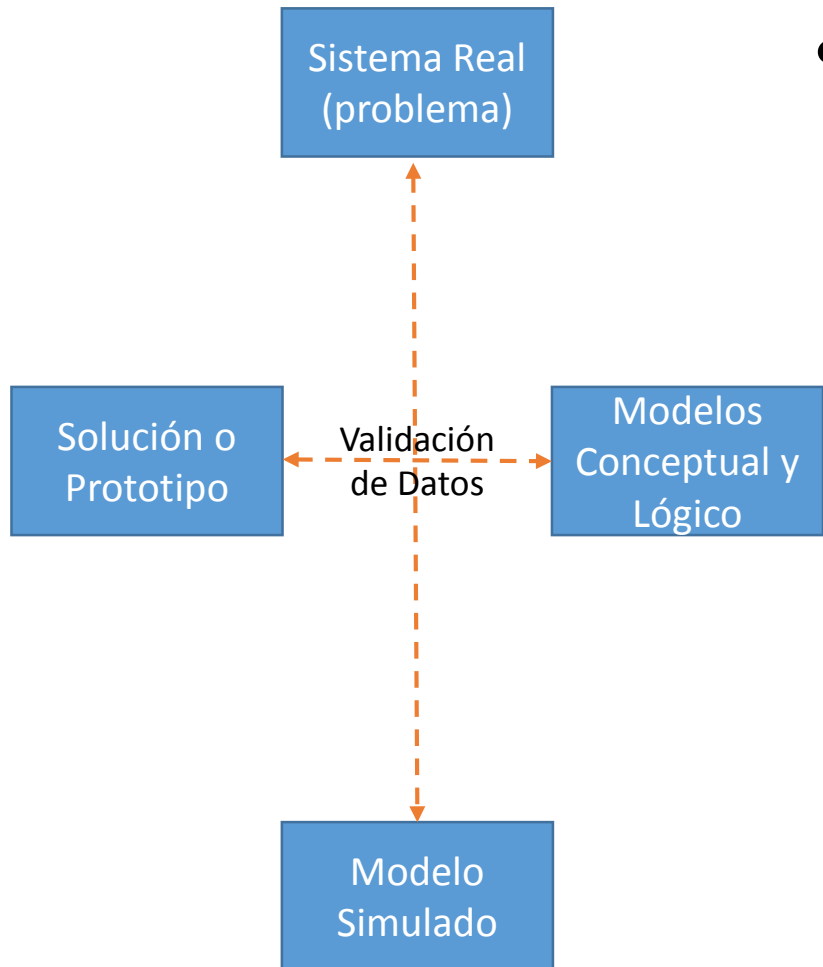
# Validación Conceptual



- Determinar que el concepto, las suposiciones de partida y las simplificaciones que conforman el modelo propuesto son suficientemente precisas para el objetivo del modelo.
  - Circular y discutir el modelo propuesto entre experimentalistas y modeladores.
  - Ambos deben acordar de forma conjunta las suposiciones y simplificaciones incluidas.



# Validación de Datos



- Determinar que los datos del entorno y los datos experimentales asociados con el modelo son suficientes para el objetivo del mismo.
  - Tanto datos par construir el modelo (entradas) como para validarlo (salidas).
  - Se deben investigar las fuentes de datos y su fiabilidad y disponibilidad.

# Validación de Caja Blanca



- Determinar que las distintas partes del modelo simulado representan los elementos correspondientes del sistema real con suficiente precisión para el objetivo del modelo (comprobación detallada).
  - Comprobación del código.
  - Aspectos a considerar:
    - Temporizaciones.
    - Control de los elementos.
    - Control de los flujos de ejecución.
- Comprobar los informes generados.

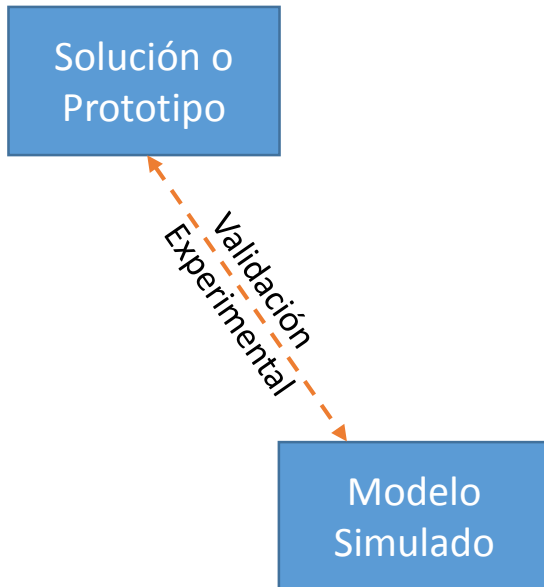
# Validación de Caja Negra



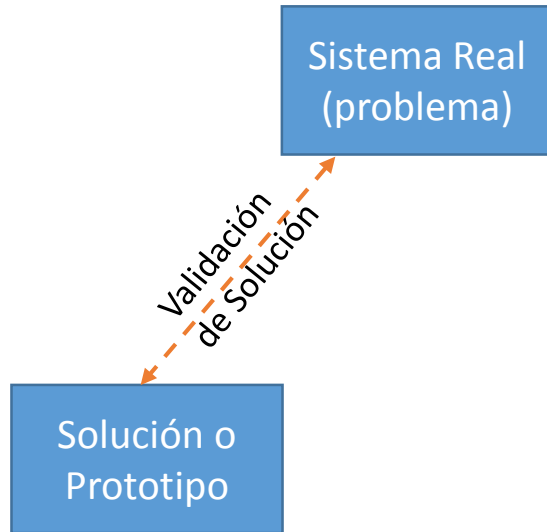
- Determinar que el modelo (en su conjunto) representa el sistema real con suficiente precisión para el objetivo del mismo.
  - Comparación con el sistema real.
  - Comparación con otros modelos:
    - Habitualmente modelos más sencillos o lo que sería la implementación directa del fenómeno de forma más simplista.

# Validación Experimental

- Determinar que los procedimientos experimentales adoptados proporcionan resultados suficientemente precisos para el objetivo del modelo.
  - Métodos estadísticos o de visualización para determinar el tiempo hasta el punto estacionario, duración de las simulaciones y número de repeticiones (hasta tener una buena precisión).
  - Análisis de sensibilidad (para mejorar la comprensión del modelo).

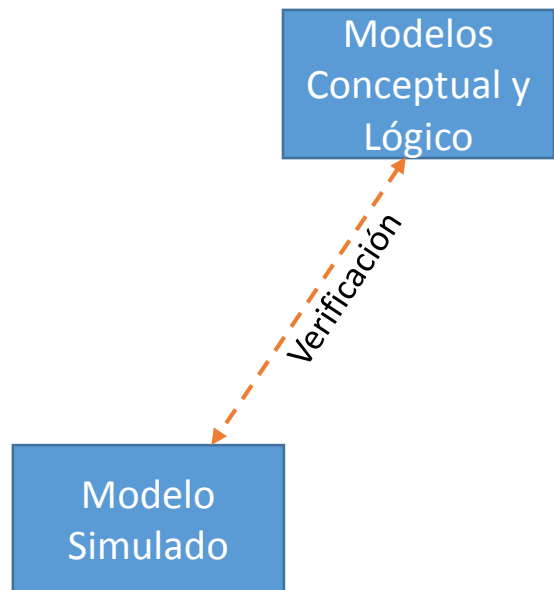


# Validación de Solución



- Determinar que los resultados obtenidos por el modelo para el prototipo son suficientemente buenos para el objetivo del mismo.
  - Nota:
    - La validación de la solución compara el modelo contra el prototipo.
    - Las pruebas de caja negra comparan el modelo contra el sistema real.
  - Una vez construido el prototipo es posible validar su funcionamiento contra los resultados del modelo.

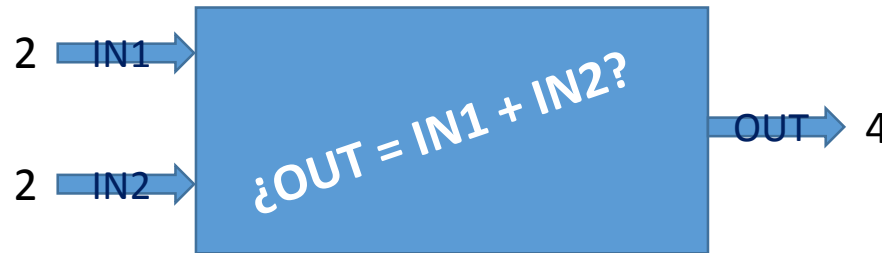
# Verificación



- Comprobar la fidelidad con la cual los modelos lógico y conceptual se han programado en el modelo de simulación implementado.
- La verificación garantiza que el modelo se ha programado correctamente, los algoritmos se han programado adecuadamente y el código no tiene errores o bugs.
  - Los métodos son muy parecidos a las pruebas de caja blanca (revisar el código, comparar salidas, ...) salvo:
    - La verificación comprueba el modelo simulado frente a los modelos conceptual y lógico.
    - Las pruebas de caja blanca comparan el modelo frente al sistema real.

# Aspectos a Considerar

- Validación de caja negra: ¿El modelo es válido?
  - Ejemplo: Entradas (2,2) y salida (4). Un modelo sencillo podría ser:



- Confiar en la validez de las pruebas de caja negra tiene el riesgo de un calibrado artificial del modelo.
- Eso puede llevar a que la simulación no sea representativa del sistema real.
  - Es importante combinar pruebas de caja blanca y negra.

# Aspectos a Considerar

- Dificultades:
  - No existe lo que se podría considerar como **validez general** en cualquier caso.
    - Los modelos son válidos para un objetivo en concreto.
  - Hay casos en los cuales no hay un sistema real contra el que compararse.
  - Si lo hay puede no ser “único”:
    - Diferentes perspectivas pueden tener distintas interpretaciones del sistema real.
  - En muchos casos lo que sabemos del sistema real es impreciso:
    - Si los datos recogidos no son fiables es difícil determinar si los resultados del modelo son correctos.
    - Incluso si los datos son precisos, el sistema real que se estudia es sólo una muestra de los posibles otros sistemas a estudiar (eso de por sí ya es una fuente de imprecisión).
  - El tiempo y los recursos para verificar y validar todos y cada uno de los aspectos del sistema es potencialmente enorme.



# Aspectos a Considerar

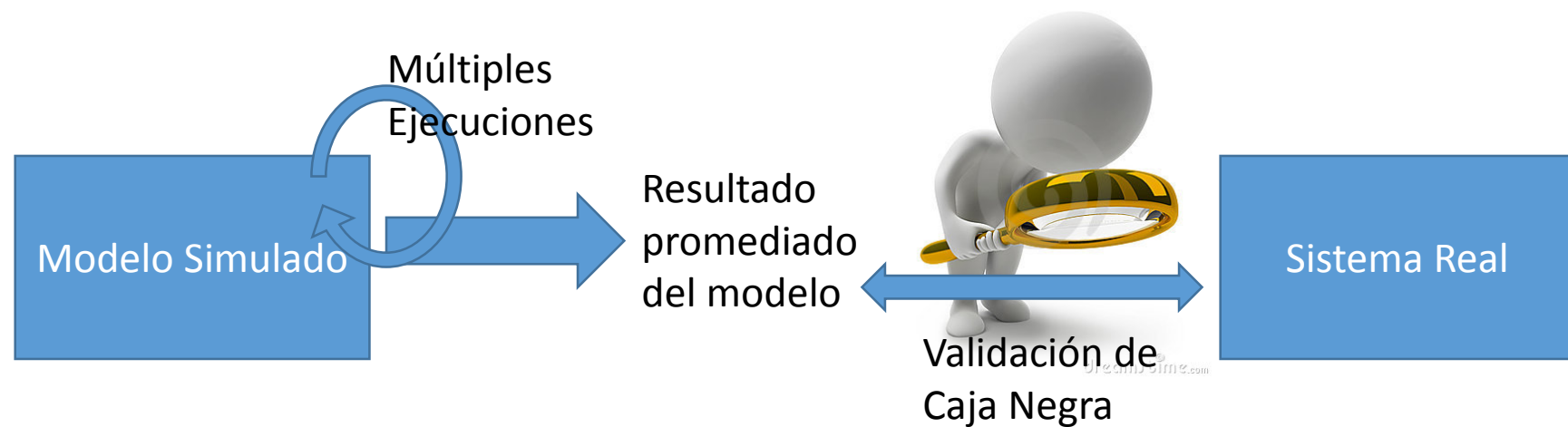
- Consideraciones finales:
  - La verificación/validación es un **proceso continuado e iterativo** que se lleva a cabo a lo largo de todo el ciclo de vida del estudio por medio de la simulación.
    - Ejemplo: Si el modelo conceptual se revisa cuando el proyecto va evolucionando entonces se tiene que re-validar.
  - La verificación/validación se integra dentro del proceso para eliminar barreras y objeciones en el uso del modelo y así mejorar su credibilidad de cara a los expertos del dominio.
- Conclusión:
  - A pesar de que, en teoría, un modelo o es válido o no lo es, llevar eso a la práctica es mucho más difícil.
  - Es mejor hablar en **confianza que se deposita en los resultados** del modelo.

# Diseño Experimental

Introducción

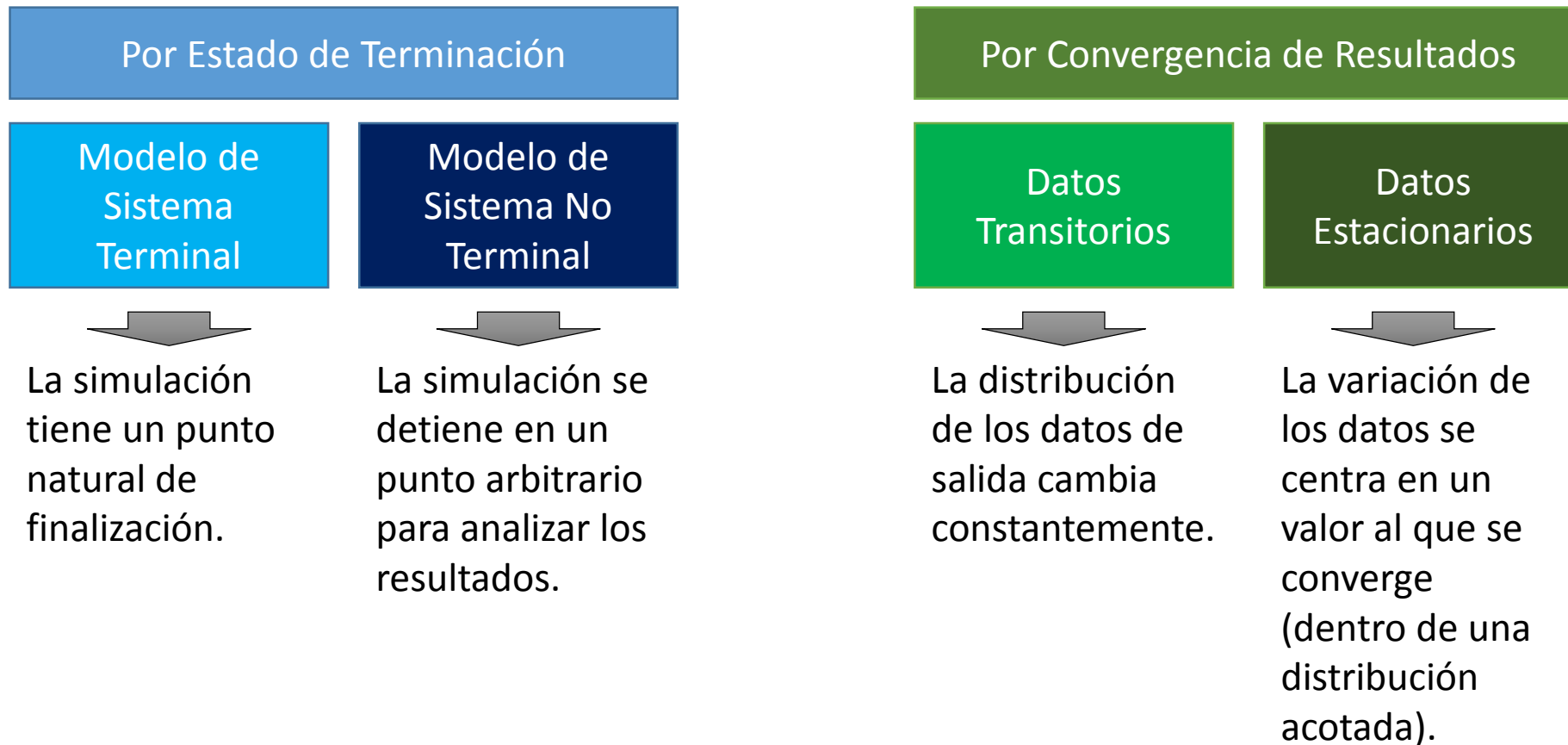
# Preparación de los Experimentos

- Para cualquier proceso de simulación con una componente estocástica se necesita:
  - Extraer resultados precisos del modelo (estimar el resultado promedio, de alguna manera).
  - Esto no tiene que ver con que el resultado sea correcto (eso implica una validación de caja negra).

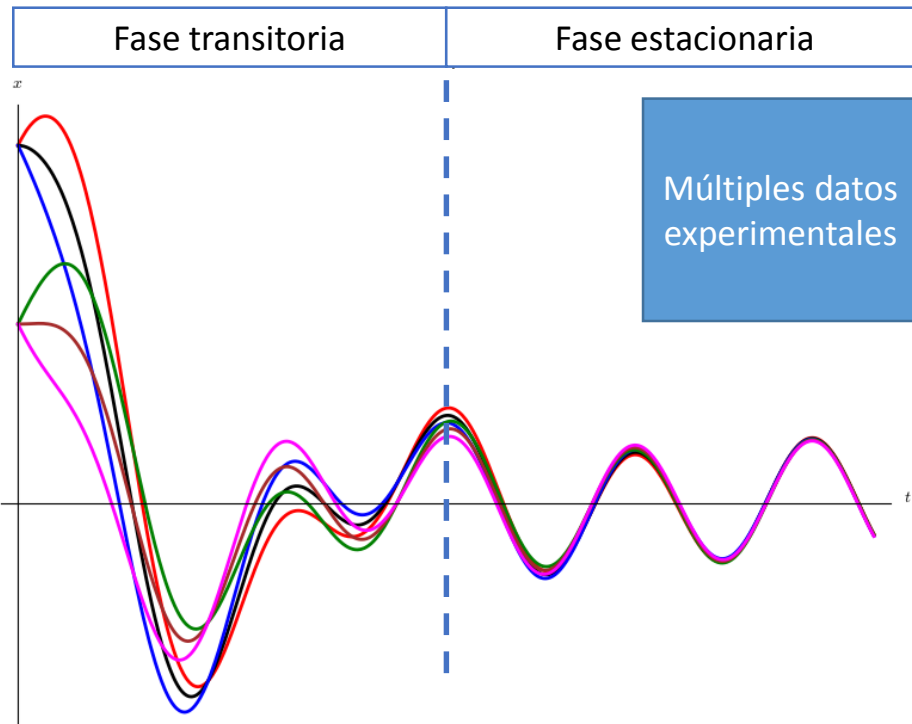


# Tipología de los Sistemas

- Para realizar el análisis de un sistema hay que considerar:



# Aspectos de Inicialización

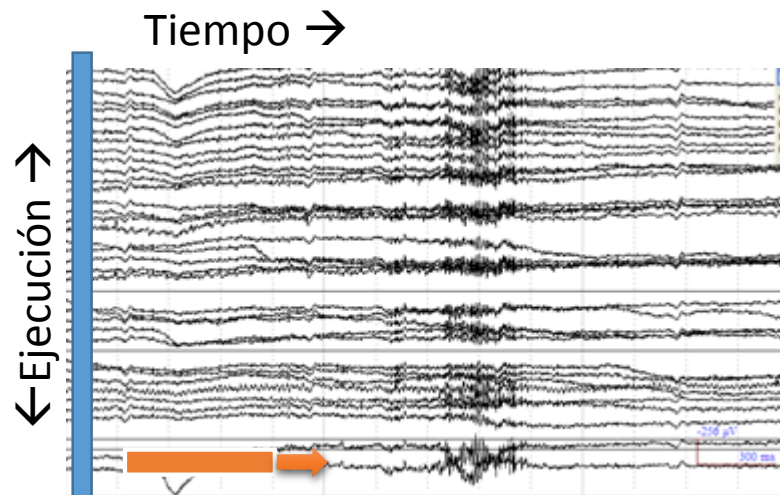


- Las simulaciones basadas en el tiempo tiene un periodo de “calentamiento” que determinan la fase en la cual las salidas del sistema cambian.
  - Las variaciones son no sólo dentro de una simulación sino que también entre simulaciones inicializadas con diferentes valores.
  - Posteriormente, si la simulación converge llegará a un estado estacionario (de mínima o acotada variación) .

¿Cómo se determina el punto a partir del cual el sistema está en un estado estacionario?

# Métodos de Determinación de Estacionalidad

Diferentes series temporales

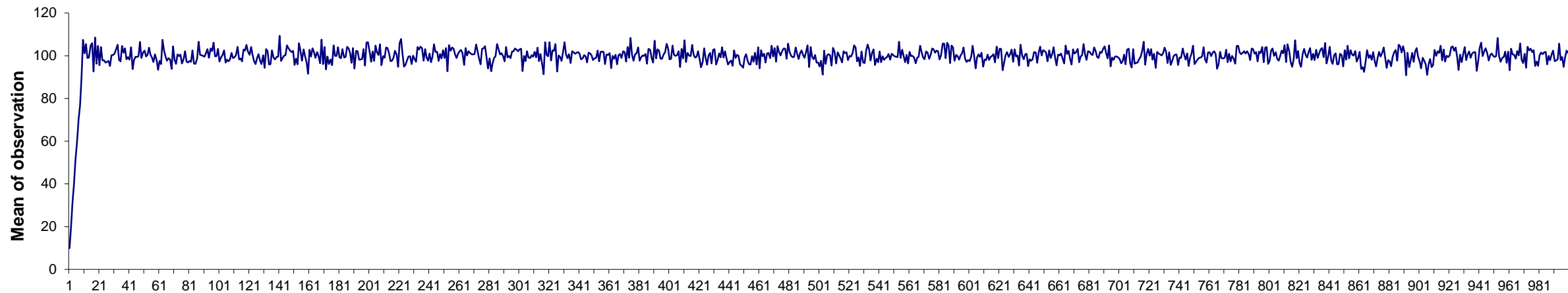


- Método de las series temporales:
  - Realizar varias ejecuciones ( $N \gg 10$ ).
  - Calcular la media de todas las ejecuciones para cada instante de tiempo.
- Método de Welch:
  - Realizar una serie de ejecuciones ( $N \sim 5$ ).
  - Calcular la media por cada instante de tiempo (como en el caso anterior).
  - Calcular una segunda media a lo largo del tiempo con una ventana deslizante de tamaño  $n$ .

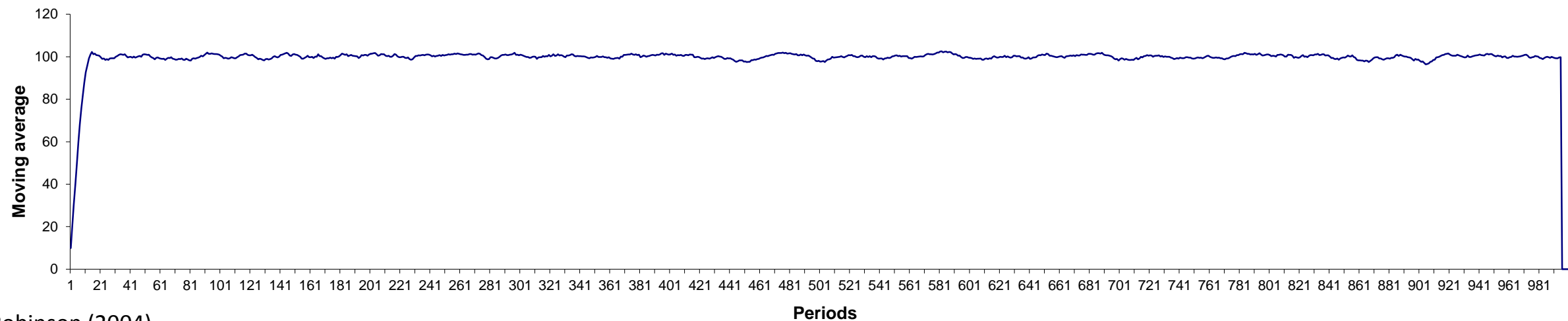
$$\bar{Y}_i(w) = \begin{cases} \frac{\sum_{s=-(i-1)}^{i-1} \bar{Y}_{i+s}}{2i-1} & \text{if } i = 1, \dots, w \\ \frac{\sum_{s=-w}^w \bar{Y}_{i+s}}{2w+1} & \text{if } i = w+1, \dots, m-w \end{cases}$$

# Métodos de Determinación de Estacionalidad

## Método de las Series Temporales



## Método de Welch



# Tiempo de Ejecución

- Habitualmente se usa el siguiente criterio:
  - El tiempo hasta encontrar la estacionalidad se asume que es el 10% del tiempo de ejecución:
    1. Se ejecutan una serie de simulaciones largas.
    2. Se determina el punto de estacionalidad.
    3. Se repiten las ejecuciones, poniendo como tiempo de ejecución el resultado anterior x11.
    4. De cada ejecución se elimina hasta el instante de estacionalidad y se usa el resto.

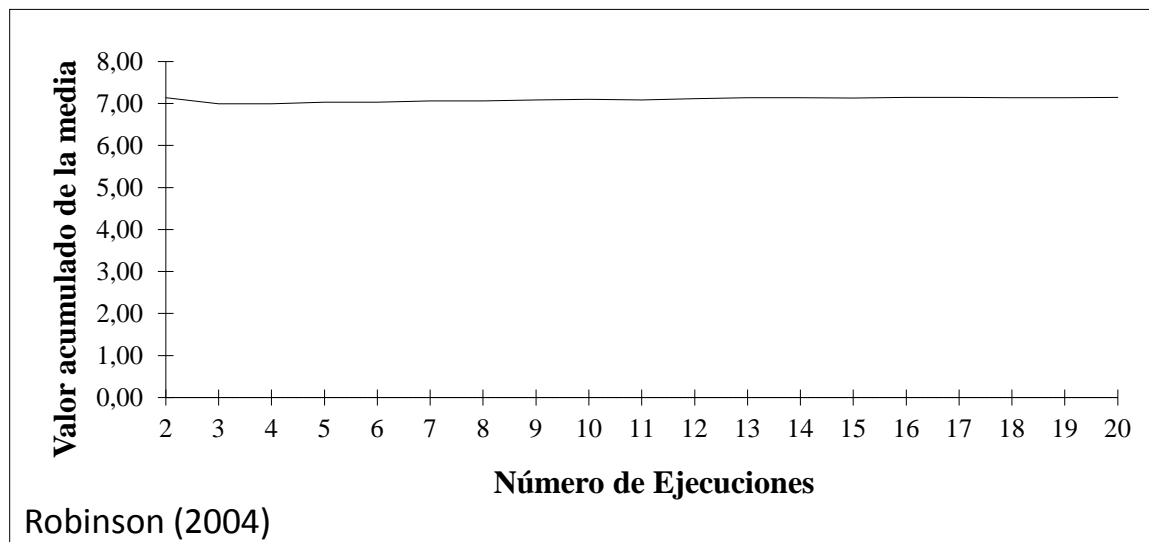


# Precisión de los Datos

- Un segundo problema de las simulaciones (que se da en todas aquellas que tienen una componente estocástica) es cómo acotar el grado de precisión de la simulación:
  - Para ello se requiere ejecutar varias veces la simulación completa y tener una forma de agregar los resultados.
  - No es cuestión de reportar lo que sería el estimador puntual de los resultados (la media)
  - También es importante conocer el grado de variabilidad (aleatoriedad que repercute en el resultado de la simulación).

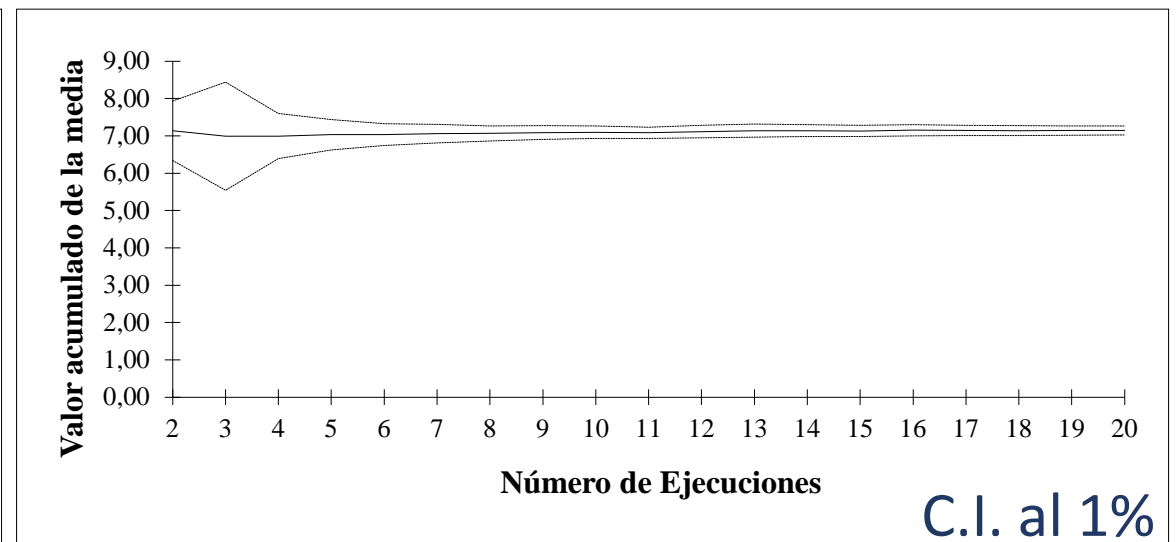
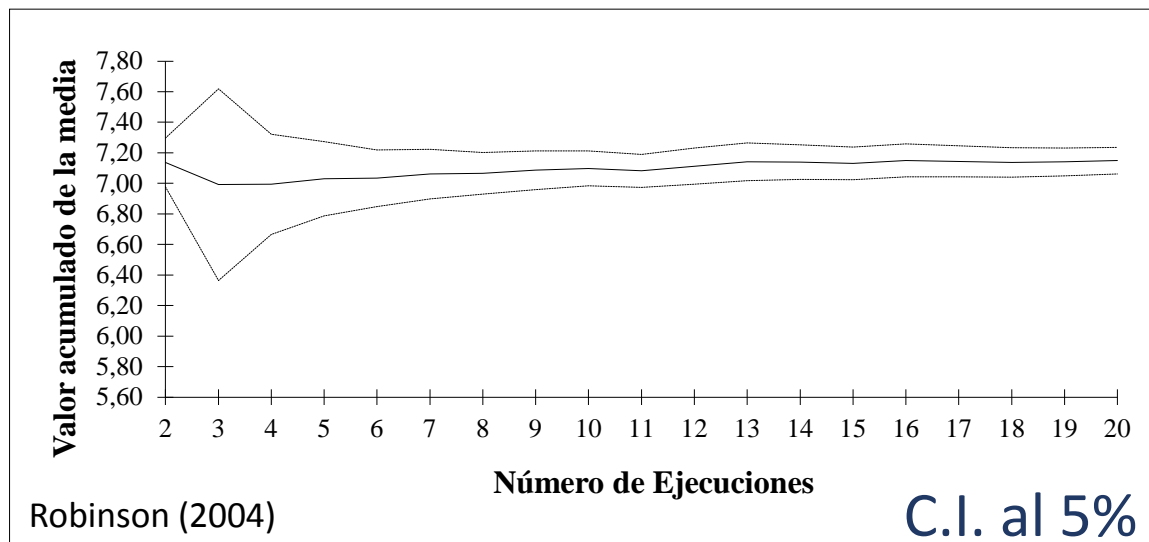
# Precisión de los Datos: Medias Acumuladas

- Representación acumulada de la media de múltiples valores:
  - Según se incrementa el número de ejecuciones el valor converge (la gráfica se hace plana).
  - El número de ejecuciones a realizar se puede subjetivamente fijar a cuando la gráfica es plana.
  - Pueden ser valores o series de valores.



# Precisión de los Datos: Intervalos de Confianza

- Valor estadístico de cómo la media puede variar debido al número de muestras:
  - Cuanto más reducido sea el intervalo de confianza mayor precisión habrá en el cálculo de la media.
  - El umbral de confianza de los intervalos se fija a priori (5% es lo habitual, salvo el caso de aplicaciones críticas 1%).



# Cálculo de los Intervalos de Confianza

$$CI = \bar{X} \pm t_{n-1, \alpha/2} \frac{S}{\sqrt{n}}$$

$CI$  es el intervalo de confianza para:

- $n$  ejecuciones
- Con un umbral de confianza del  $\alpha$ . ( $\alpha=0,05$  para 5%)

$t_{n-1, \alpha/2}$  = Valor de la distribución t-Student con  $n-1$  grados de libertad para el valor de significancia de  $\alpha/2$ .

Estimador de la desviación estándar:  $S = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2}{n - 1}}$

# Referencias

- Peer-Olaf Siebers (2013). University of Nottingham Verification & Validation / Experiment Preparation.
- Law and Kelton (2006) Simulation Modelling and Analysis
- Robinson (2004). Simulation: The practice of model development and use. John Wiley & Sons: Chichester, UK
- Roy and Mohapatra (2000). Causality and validation of System Dynamics models incorporating soft variables: Establishing an interface with structural equation modelling. In: Proceedings of the 18th International Conference of The System Dynamics Society, Bergen, Norway.
- Sargent (2000). Verification, validation, and accreditation of simulation models. In: Proceedings of the 2000 Winter Simulation Conference, Orlando, FL.

# Modelización de Sistemas Biológicos

---

Diseño Experimental y Validación/Verificación



POLITÉCNICA