FICHA DE IDENTIFICACIÓN DE TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

Título: SIMULACION ESTOCASTICA
Autor: EDDY RODRIGO RAMIREZ CUBA
Fecha: 08/06/2022

Código de estudiante:36483

Carrera: GAS Y PETROLEO
Asignatura: SIMULACION Y MODELOS
Grupo: A
Docente: FERNANDO PARRA ARCE
Periodo Académico: I

Subsede: ORURO-BOLIVIA

RESUMEN:

Una simulación estocástica es una simulación de un sistema que tiene variables que pueden cambiar estocásticamente (aleatoriamente) con probabilidades individuales. Las realizaciones de estas variables aleatorias se generan y se insertan en un modelo del sistema. Las salidas del modelo se registran y luego el proceso se repite con un nuevo conjunto de valores aleatorios. Estos pasos se repiten hasta que se recopila una cantidad suficiente de datos. Al final, la distribución de los productos muestra las estimaciones más probables, así como un marco de expectativas con respecto a los rangos de valores en los que es más o menos probable que caigan las variables. A menudo, las variables aleatorias insertadas en el modelo se crean en una computadora con un generador de números aleatorios (RNG). Las salidas de distribución uniforme U (0,1) del generador de números aleatorios se transforman luego en variables aleatorias con distribuciones de probabilidad que se utilizan en el modelo del sistema Simulación estocástica.

TABLA DE CONTENIDOS

-

LISTA DE TABLAS Y CUADROS

Contenido 1 Etimología 2 simulación de eventos discretos 2.1 Distribuciones de probabilidad 2.1.1 Distribución de Bernoulli 2.1.1.1 Ejemplo: lanzamiento de una moneda 2.1.2 Distribución binomial 2.1.3 Distribución de Poisson 2.2 Métodos 2.2.1 Métodos directos y de primera reacción 2.2.2 Siguiente método de reacción 2.2.3 Métodos directos optimizados y de clasificación 2.2.4 Método directo logarítmico 2.2.5 Métodos de propensión parcial 2.3 Métodos aproximados 2.3.1 método de salto τ 2.3.2 Método de diferencia condicional 3 Simulación continua 3.1 Distribuciones de probabilidad 3.1.1 Distribución normal 3.1.2 Distribución exponencial 3.1.3 Distribución t de Student 3.1.4 Otras distribuciones 4 simulación combinada 5 simulación de Monte Carlo 5.1 Aplicación 6 generadores de números aleatorios 7 Véase también 8 referencias 9 Enlaces externos Etimología Simulación estocástica.

Capítulo 1

Introducción e información general

Simulación de eventos discretos Para determinar el siguiente evento en una simulación estocástica, se calculan las tasas de todos los posibles cambios en el estado del modelo y luego se ordenan en una matriz. A continuación, se toma la suma acumulada de la matriz y la celda final contiene el número R, donde R es la tasa total de eventos. Esta matriz acumulativa es ahora una distribución acumulativa discreta y se puede usar para elegir el siguiente evento eligiendo un número aleatorio z ~ U (0, R) y eligiendo el primer evento, de modo que z sea menor que la tasa asociada con ese evento. . Distribuciones de probabilidad Se utiliza una distribución de probabilidad para describir el resultado potencial de una variable aleatoria. Limita los resultados donde la variable solo puede tomar valores discretos. Distribución de Bernoulli Artículo principal: distribución de Bernoulli Una variable aleatoria X tiene una distribución de Bernoulli con el parámetro p si tiene dos resultados posibles codificados normalmente en 1 (éxito o defecto) o 0 (fracaso o supervivencia) donde están las probabilidades de éxito y fracaso y dónde . Para producir una variable aleatoria X con una distribución de Bernoulli a partir de una distribución uniforme U (0,1) hecha por un generador de números aleatorios, definimos tal que la probabilidad de y . Ejemplo: lanzamiento de una moneda Definir X = 1 if head comes up and X = 0 if tail comes up Por una moneda justa, ambas realizaciones son igualmente probables. Podemos generar realizaciones de esta variable aleatoria X a partir de una distribución uniforme proporcionada por un generador de números aleatorios (RNG) al tener si el RNG genera un valor entre 0 y 0.5 y si el RNG genera un valor entre 0.5 y 1. $P(X = 1) = P(0 \leq U < 1/2) = 1/2$ $P(X = 0) = P(1 \geq U \geq 1/2) = 1/2$ Por supuesto, los dos resultados pueden no ser igualmente probables (por ejemplo, el éxito del tratamiento médico). Distribución binomial Artículo principal: Distribución binomial A distribuido binomial variable aleatoria Y con los parámetros n y p se obtiene como la suma de n independientes e idénticamente distribuidos Bernoulli aleatorios variables $X_1, X_2, ..., X_n$ Ejemplo: se lanza una moneda tres veces. Calcula la probabilidad de obtener exactamente dos caras. Este problema se puede resolver mirando el espacio muestral. Hay tres formas de conseguir dos caras. HHH, HHT, HTH, THH, TTH, THT, HTT, TTT La respuesta es 3/8 (= 0,375). distribución de veneno Artículo principal: distribución de Poisson Un proceso de Poisson es un proceso en el que los eventos ocurren al azar en un intervalo de tiempo o espacio. La distribución de probabilidad para los procesos de Poisson con tasa constante λ por intervalo de tiempo viene dada por la siguiente ecuación. Definiendo como el número de eventos que ocurren en el intervalo de tiempo Se puede demostrar que los tiempos entre llegadas para eventos se distribuyen exponencialmente con una función de distribución acumulativa (CDF) de . La inversa de la CDF exponencial está dada por donde es una variable aleatoria distribuida uniformemente. La simulación de un proceso de Poisson con una tasa constante para el número de eventos que ocurren en el intervalo se puede realizar con el siguiente algoritmo. Empiece con y Genere una variable aleatoria a partir de una distribución uniforme Actualiza la hora con Si , entonces deténgase. De lo contrario, continúe con el paso 5. Continúe con el paso 2 Métodos Métodos directos y de primera reacción. Publicado por Dan Gillespie en 1977, y es una búsqueda lineal en la matriz acumulativa. Ver algoritmo de Gillespie . El algoritmo de simulación estocástica de Gillespie (SSA) es esencialmente un procedimiento exacto para simular numéricamente la evolución en el tiempo de un sistema que reacciona químicamente bien agitado teniendo debidamente en cuenta la aleatoriedad inherente a dicho sistema. Se basa rigurosamente en la misma premisa microfísica que subyace a la ecuación química maestra y proporciona una representación más realista de la evolución de un sistema que la ecuación determinista de la velocidad de reacción (RRE) representada matemáticamente por las EDO. Al igual que con la ecuación química maestra, la SSA converge, en el límite de un gran número de reactivos, a la misma solución que la ley de acción de masas. Siguiente método de reacción Publicado en 2000 por Gibson y Bruck. Esta es una mejora con respecto al primer método de reacción en el que se reutilizan los tiempos de reacción no utilizados. Para que el muestreo de reacciones sea más eficiente, se utiliza una cola de prioridad indexada para almacenar los tiempos de reacción. Por otro lado, para hacer más eficiente el recálculo de propensiones, se utiliza un gráfico de dependencia. Este gráfico de dependencia indica qué propensiones de reacción actualizar después de que se haya disparado una reacción en particular. Métodos directos optimizados y de clasificación Publicado en 2004 y 2005. Estos métodos clasifican la matriz acumulativa para reducir la profundidad de búsqueda promedio del algoritmo. El primero ejecuta una presimulación para estimar la frecuencia de disparo de las reacciones, mientras que el segundo ordena la matriz acumulativa sobre la marcha. Método directo logarítmico Publicado en 2006. Esta es una búsqueda binaria en la matriz acumulativa, lo que reduce la complejidad del tiempo del peor de los casos del muestreo de reacción a O (log M). Métodos de propensión parcial Publicado en 2009, 2010 y 2011 (Ramaswamy 2009, 2010, 2011). Utilice propensiones de reacción parciales factorizadas para reducir el costo computacional de escalar con el número de especies en la red, en lugar del número (mayor) de reacciones. Existen cuatro variantes: PDM, el método directo de propensión parcial. Tiene un costo computacional que escala linealmente con el número de especies diferentes en la red de reacción, independientemente de la clase de acoplamiento de la red (Ramaswamy 2009). SPDM, el método directo de clasificación de propensión parcial. Utiliza la clasificación dinámica de burbujas para reducir el factor previo del costo computacional en redes de reacción de múltiples escalas donde las tasas de reacción abarcan varios órdenes de magnitud (Ramaswamy 2009). PSSA-CR, el SSA de propensión parcial con muestreo de rechazo de composición. Reduce el costo computacional a tiempo constante (es decir, independiente del tamaño de la red) para redes débilmente acopladas (Ramaswamy 2010) usando muestreo de rechazo de composición (Slepoy 2008). dPDM, el método directo de retardo de propensión parcial. Extiende el PDM a las redes de reacción que incurren en demoras (Ramaswamy 2011) al proporcionar una variante de propensión parcial del método de demora-SSA (Bratsun 2005, Cai 2007). El uso de métodos de propensión parcial se limita a reacciones químicas elementales, es decir, reacciones con como máximo dos reactivos diferentes. Cada reacción química no elemental puede descomponerse de manera equivalente en un conjunto de reacciones elementales, a expensas de un aumento lineal (en el orden de la reacción) en el tamaño de la red. Métodos aproximados Un inconveniente general de las simulaciones estocásticas es que para los sistemas grandes, ocurren demasiados eventos que no pueden tenerse en cuenta en una simulación. Los siguientes métodos pueden mejorar drásticamente la velocidad de simulación mediante algunas aproximaciones. τ método de salto Dado que el método SSA realiza un seguimiento de cada transición, no sería práctico implementarlo para ciertas aplicaciones debido a la alta complejidad del tiempo. Gillespie propuso un procedimiento de aproximación , el método de salto tau que disminuye el tiempo de cálculo con una mínima pérdida de precisión. En lugar de dar pasos incrementales en el tiempo, haciendo un seguimiento de X (t) en cada paso de tiempo como en el método SSA, el método de salto tau salta de un subintervalo al siguiente, aproximando cuántas transiciones tienen lugar durante un subintervalo dado. Se supone que el valor del salto, τ, es lo suficientemente pequeño como para que no haya un cambio significativo en el valor de las tasas de transición a lo largo del subintervalo [t, t + τ]. Esta condición se conoce como condición de salto. Por tanto, el método de salto tau tiene la ventaja de simular muchas transiciones en un salto sin perder una precisión significativa, lo que se traduce en una aceleración del tiempo de cálculo. Método de diferencia condicional Este método se aproxima a los procesos reversibles (que incluyen los procesos de difusión / caminata aleatorios) teniendo en cuenta solo las tasas netas de los eventos opuestos de un proceso reversible. La principal ventaja de este método es que se puede implementar con una simple declaración if reemplazando las tasas de transición anteriores del modelo con tasas nuevas y efectivas. El modelo con las tasas de transición reemplazadas puede resolverse, por ejemplo, con el SSA convencional. Simulación continua Mientras que en el espacio de estados discretos se distingue claramente entre estados particulares (valores) en el espacio continuo, no es posible debido a cierta continuidad. El sistema generalmente cambia con el tiempo, las variables del modelo y luego también cambian continuamente. De este modo, la simulación continua simula el sistema a lo largo del tiempo, dadas las ecuaciones diferenciales que determinan las tasas de cambio de las variables de estado. Ejemplo de sistema continuo es el modelo de depredador / presa o el equilibrio de carro-poste Distribuciones de probabilidad Distribución normal Artículo principal: distribución normal Se dice que la variable aleatoria X tiene una distribución normal con los parámetros μ y σ, abreviados por $X \in N(\mu, \sigma 2)$, si la densidad de la variable aleatoria está dada por la fórmula $x \in R$. Muchas cosas en realidad están distribuidas normalmente o muy cerca de ella. Por ejemplo, la altura y la inteligencia se distribuyen aproximadamente normalmente ; Los errores de medición también suelen tener una distribución normal . Distribución exponencial Artículo principal: distribución exponencial La distribución exponencial describe el tiempo entre eventos en un proceso de Poisson , es decir, un proceso en el que los eventos ocurren de manera continua e independiente a una tasa promedio constante. La distribución exponencial es popular, por ejemplo, en la teoría de colas cuando queremos modelar el tiempo que tenemos que esperar hasta que se produce un determinado evento. Los ejemplos incluyen el tiempo hasta que el próximo cliente ingresa a la tienda, el tiempo hasta que una determinada empresa incumple o el tiempo hasta que alguna máquina tiene un defecto. Distribución t de Student Artículo principal: distribución t de Student La distribución t de Student se utiliza en finanzas como modelos probabilísticos de rendimiento de activos. La función de densidad de la distribución t viene dada por la siguiente ecuación: donde es el número de grados de libertad y es la función gamma . Para valores grandes de n , la distribución t no difiere significativamente de una distribución normal estándar . Por lo general, para valores n > 30, la distribución t se considera igual a la distribución normal estándar

Simulación combinada A menudo es posible modelar un mismo sistema mediante el uso de visiones del mundo completamente diferentes. La simulación de eventos discretos de un problema, así como la simulación continua de eventos del mismo (simulación continua con los eventos discretos que interrumpen el flujo continuo) pueden conducir eventualmente a las mismas respuestas. A veces, sin embargo, las técnicas pueden responder diferentes preguntas sobre un sistema. Si necesariamente necesitamos dar respuesta a todas las preguntas, o si no sabemos para qué se va a utilizar el modelo, es conveniente aplicar una metodología combinada continua / discreta . Técnicas similares pueden cambiar de una descripción estocástica discreta a una descripción continua determinista de una manera dependiente del tiempo y el espacio. El uso de esta técnica permite la captura de ruido debido a un pequeño número de copias, mientras que su simulación es mucho más rápida que el algoritmo convencional de Gillespie. Además, el uso de la descripción determinista del continuo permite las simulaciones de sistemas arbitrariamente grandes. simulación del Monte Carlo Monte Carlo es un procedimiento de estimación. La idea principal es que si es necesario conocer el valor promedio de alguna variable aleatoria y no se puede enunciar su distribución, y si es posible tomar muestras de la distribución, podemos estimarlo tomando las muestras, de forma independiente, y promediando ellos. Si hay suficientes muestras, entonces la ley de los grandes números dice que el promedio debe estar cerca del valor real. El teorema del límite central dice que el promedio tiene una distribución gaussiana alrededor del valor verdadero. Como ejemplo simple, suponga que necesitamos medir el área de una forma con un contorno irregular complicado. El enfoque de Monte Carlo consiste en dibujar un cuadrado alrededor de la forma y medir el cuadrado. Luego lanzamos dardos al cuadrado, lo más uniformemente posible. La fracción de dardos que caen sobre la forma da la relación entre el área de la forma y el área del cuadrado. De hecho, es posible convertir casi cualquier problema integral, o cualquier problema de promediado, en esta forma. Es necesario tener una buena forma de saber si estás dentro del contorno y una buena forma de saber cuántos dardos lanzar. Por último, pero no menos importante, debemos lanzar los dardos de manera uniforme, es decir, utilizando un buen generador de números aleatorios.

Bibliografía y referencias (EJEMPLOS)

(Slepoy 2008): Slepoy, A; Thompson, AP; Plimpton, SJ (2008). "Un algoritmo de Monte Carlo cinético en tiempo constante para la simulación de grandes redes de reacciones bioquímicas". Revista de Física Química . 128 (20): 205101. Código Bibliográfico : 2008JChPh.128t5101S . doi : 10.1063 / 1.2919546 . PMID 18513044 . (Bratsun 2005):

EVALUACIÓN DEL DOCENTE

	CRITERIO DE EVALUACIÓN	PUNTAJE	CALIFICACIÓN
1	Entrega adecuada en plazo y medio.	10	
2	Cumplimiento de la estructura del trabajo.	10	
3	Uso de bibliografía adecuada.	10	
4	Coherencia del documento.	10	
5	Profundidad del análisis.	15	
6	Redacción y ortografía adecuados.	10	
7	Uso de gráficos e ilustraciones.	10	
8	Creatividad y originalidad del trabajo.	15	
9	Aporte humano, social y comunitario.	10	

Calificación Final: /100