Método de Montecarlo

- Modelado de una Sala de Espera -

MODELOS Y SIMULACIÓN DE SISTEMAS BIOLÓGICOS

Contenidos

1

Introducción

Método de Monte Carlo

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- En la segunda mitad del Siglo XX, vinculado al desarrollo de la energía atómica, apareció la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales e integrales parciales en espacios de dimensiones muy altas, inalcanzable para las herramientas numéricas existentes.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- En la segunda mitad del Siglo XX, vinculado al desarrollo de la energía atómica, apareció la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales e integrales parciales en espacios de dimensiones muy altas, inalcanzable para las herramientas numéricas existentes.
- Década de 1930: Enrico Fermi experimentó con el método de Monte Carlo en el cálculo difusión de neutrones.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- En la segunda mitad del Siglo XX, vinculado al desarrollo de la energía atómica, apareció la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales e integrales parciales en espacios de dimensiones muy altas, inalcanzable para las herramientas numéricas existentes.
- Década de 1930: Enrico Fermi experimentó con el método de Monte Carlo en el cálculo difusión de neutrones.
- Década de 1940: Stanislaw Ulam inventó la versión moderna del método de Cadena de Markov Monte Carlo (MCMC) mientras trabajaba en proyectos de armas nucleares en el Laboratorio Nacional de Los Alamos.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- En la segunda mitad del Siglo XX, vinculado al desarrollo de la energía atómica, apareció la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales e integrales parciales en espacios de dimensiones muy altas, inalcanzable para las herramientas numéricas existentes.
- Década de 1930: Enrico Fermi experimentó con el método de Monte Carlo en el cálculo difusión de neutrones.
- Década de 1940: Stanislaw Ulam inventó la versión moderna del método de Cadena de Markov Monte Carlo (MCMC) mientras trabajaba en proyectos de armas nucleares en el Laboratorio Nacional de Los Alamos.
- Stanislaw Ulam y John Von Neumann proponen que aspectos de la investigación en fisión nuclear de Los Álamos podrían ser abordados con experimentos computacionales basados en probabilidades.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- En la segunda mitad del Siglo XX, vinculado al desarrollo de la energía atómica, apareció la necesidad de resolver ecuaciones diferenciales e integrales parciales en espacios de dimensiones muy altas, inalcanzable para las herramientas numéricas existentes.
- Década de 1930: Enrico Fermi experimentó con el método de Monte Carlo en el cálculo difusión de neutrones.
- Década de 1940: Stanislaw Ulam inventó la versión moderna del método de Cadena de Markov Monte Carlo (MCMC) mientras trabajaba en proyectos de armas nucleares en el Laboratorio Nacional de Los Alamos.
- Stanislaw Ulam y John Von Neumann proponen que aspectos de la investigación en fisión nuclear de Los Álamos podrían ser abordados con experimentos computacionales basados en probabilidades.
- Siendo secreto, el trabajo de von Neumann y Ulam requería un nombre en clave: Monte Carlo.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

Casino de Monte-Carlo, Principado de Mónaco

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Década de 1950: aparecen trabajos del uso de Monte Carlo en la literatura del área física. El primer gran artículo de MCMC fue publicado por Metrópolis et al. en 1953.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Década de 1950: aparecen trabajos del uso de Monte Carlo en la literatura del área física. El primer gran artículo de MCMC fue publicado por Metrópolis et al. en 1953.
- Década de 1980: aparecen trabajos importantes de MCMC en campos de computer vision e inteligencia artificial.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Década de 1950: aparecen trabajos del uso de Monte Carlo en la literatura del área física. El primer gran artículo de MCMC fue publicado por Metrópolis et al. en 1953.
- Década de 1980: aparecen trabajos importantes de MCMC en campos de computer vision e inteligencia artificial.
- Década de 1990: MCMC tiene su primera aparición significativa en estadística.

El método de Montecarlo

NO ES UN MODELO

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- Clase de algoritmos computacionales que emplean muestreos aleatorios repetidos para encontrar soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos.

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- Clase de algoritmos computacionales que emplean muestreos aleatorios repetidos para encontrar soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos.
- Se emplea para simular tanto sistemas estocásticos, como problemas completamente deterministas.

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- Clase de algoritmos computacionales que emplean muestreos aleatorios repetidos para encontrar soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos.
- Se emplea para simular tanto sistemas estocásticos, como problemas completamente deterministas.
- Se utiliza en casos en los que no existen soluciones analíticas o numéricas o son demasiado difíciles de implementar.

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- Clase de algoritmos computacionales que emplean muestreos aleatorios repetidos para encontrar soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos.
- Se emplea para simular tanto sistemas estocásticos, como problemas completamente deterministas.
- Se utiliza en casos en los que no existen soluciones analíticas o numéricas o son demasiado difíciles de implementar.
- Concepto subyacente: utilizar la aleatoriedad para resolver problemas que pueden ser deterministas en principio (aplicable a problemas que no tienen ningún contenido probabilístico).

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- Clase de algoritmos computacionales que emplean muestreos aleatorios repetidos para encontrar soluciones aproximadas a una gran variedad de problemas matemáticos.
- Se emplea para simular tanto sistemas estocásticos, como problemas completamente deterministas.
- Se utiliza en casos en los que no existen soluciones analíticas o numéricas o son demasiado difíciles de implementar.
- Concepto subyacente: utilizar la aleatoriedad para resolver problemas que pueden ser deterministas en principio (aplicable a problemas que no tienen ningún contenido probabilístico).
- Se generan artificialmente datos mediante el uso de un generador de números aleatorios y la función de probabilidad de interés.

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- De fácil implementación en computadora.

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- De fácil implementación en computadora.
- Aplicable a problemas complejos.

Introducción

MÉTODO DE MONTECARLO

- De fácil implementación en computadora.
- Aplicable a problemas complejos.
- En general, los métodos numéricos que se basan en el empleo de evaluar n puntos en el seno de un espacio m-dimensional para producir una solución aproximada tienen un error que decrece con orden $n^{-1/m}$ en el mejor caso, lo que los convierte en extremadamente ineficientes cuando m es alto ("maldición de la dimensionalidad"). En cambio, los métodos de Monte Carlo obtienen estimaciones con un error absoluto del orden $n^{-1/2}$, independientemente de m.

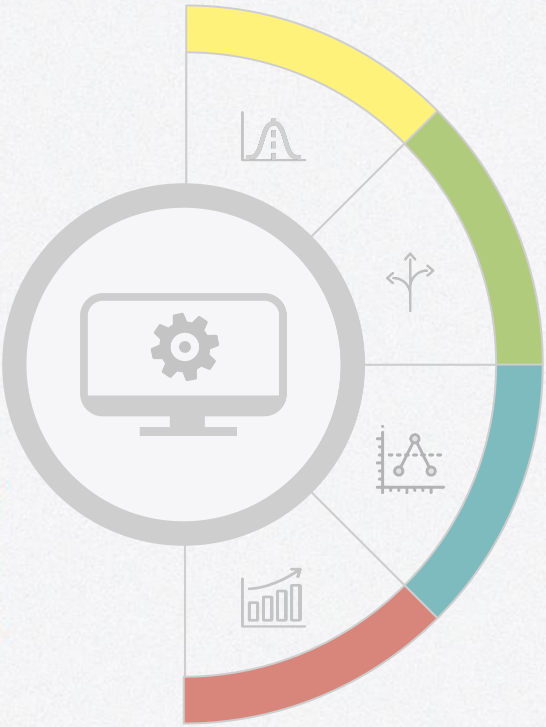
2

Método de Montecarlo

Esquema general y Motivación

Esquema Básico

MÉTODO DE MONTECARLO



01

Se determinan las propiedades estadísticas de las posibles entradas

02

Se generan muchas posibles entradas con las propiedades ya definidas.

03

Se realiza un cálculo determinista en las entradas

04

Se analizan estadísticamente los resultados

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria X con distribución F_X tal que $\phi = E(X)$.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria X con distribución F_X tal que $\phi = E(X)$.

El método de Monte Carlo en su versión más simple consiste en:

- Sortear valores para un conjunto $X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}$, de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas) a X.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria X con distribución F_X tal que $\phi = E(X)$.

El método de Monte Carlo en su versión más simple consiste en:

- Sortear valores para un conjunto $X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}$, de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas) a X.

Generar aleatoriamente

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria X con distribución F_X tal que $\phi = E(X)$.

El método de Monte Carlo en su versión más simple consiste en:

- Sortear valores para un conjunto $\underbrace{X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}}_{\textit{Muestra}}$, de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas) a X.

Generar aleatoriamente

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria X con distribución F_X tal que $\phi = E(X)$.

El método de Monte Carlo en su versión más simple consiste en:

- Sortear valores para un conjunto $\underbrace{X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}}_{\textit{Muestra}}$, de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas) a X.

Generar aleatoriamente

Tamaño de la muestra

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria X con distribución F_X tal que $\phi = E(X)$.

El método de Monte Carlo en su versión más simple consiste en:

- Sortear valores para un conjunto $X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}$, de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas) a X.
- Calcular $S_n = X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}$, la suma de los n valores sorteados.
- Calcular $\hat{X} = S_n/n$.
- Calcular $\hat{V} = \sum_{i=1}^{n} (X^{(i)})^2/(n(n-1)) - X^2/(n-1)$.

Historia

MÉTODO DE MONTECARLO

- Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria X con distribución F_X tal que $\phi = E(X)$.

El método de Monte Carlo en su versión más simple consiste en:

- Sortear valores para un conjunto $X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}$, de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas) a X.
- Calcular $S_n = X^{(1)}, X^{(2)}, \ldots, X^{(n)}$, la suma de los n valores sorteados.
- Calcular $\hat{X} = S_n/n$.
- Calcular $\hat{V} = \sum_{i=1}^{n} (X^{(i)})^2/(n(n-1)) - X^2/(n-1)$.
- $\hat{X}$ es un estimador insesgado de ϕ.

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.
- La justificación inicial del uso de Monte Carlo proviene de dos teoremas centrales de la probabilidad y la estadística:
  - La Ley Débil de los Grandes Números
  - Teorema del Limite Central

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.
- La justificación inicial del uso de Monte Carlo proviene de dos teoremas centrales de la probabilidad y la estadística:
  - La Ley Débil de los Grandes Números
  - Teorema del Limite Central

Sea $X_1, X_2, \ldots$ un conjunto de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas).

Sea $S_n = X_1 + \cdots + X_2$. Si existe la esperanza $\mu = E(X_i)$, entonces la Ley Débil de los grandes números establece que, para todo $\epsilon > 0$

$$\lim_{n \to \infty} \text{Prob}\left(\left| \frac{S_n}{n} - \mu \right| > \epsilon \right) = 0$$

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.
- La justificación inicial del uso de Monte Carlo proviene de dos teoremas centrales de la probabilidad y la estadística:
  - La Ley Débil de los Grandes Números
  - Teorema del Limite Central

Sea $X_1, X_2, \ldots$ un conjunto de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas).

Sea $S_n = X_1 + \cdots + X_2$. Si existe la esperanza $\mu = E(X_i)$, entonces la Ley Débil de los grandes números establece que, para todo $\epsilon > 0$

$$\lim_{n\to\infty} \text{Prob}\left(\left|\frac{S_n}{n} - \mu\right| > \epsilon\right) = 0$$

Si se suma n muestras independientes de X_i, la probabilidad que la suma (normalizada por n) esté lejos del valor exacto a estimar tiende a 0 con n

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.
- La justificación inicial del uso de Monte Carlo proviene de dos teoremas centrales de la probabilidad y la estadística:
    - La Ley Débil de los Grandes Números
    - Teorema del Limite Central

Sea $X_1, X_2, \ldots$ un conjunto de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas).

Si, adicionalmente existe la varianza $\sigma^2 = E((X_i - \mu)^2)$, el Teorema del Límite Central establece que

$$\lim_{n\to\infty} \text{Prob}\left(\frac{S_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} < a\right) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{a} e^{-x^2/2} dx$$

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.

- La justificación inicial del uso de Monte Carlo proviene de dos teoremas centrales de la probabilidad y la estadística:
  - La Ley Débil de los Grandes Números
  - Teorema del Limite Central

Sea $X_1, X_2, \ldots$ un conjunto de variables aleatorias i.i.d. (independientes e identicamente distribuidas).

Si, adicionalmente existe la varianza $\sigma^2 = E((X_i - \mu)^2)$, el Teorema del Límite Central establece que

$$\lim_{n\to\infty} \text{Prob}\left(\frac{S_n - n\mu}{\sigma\sqrt{n}} < a\right) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{a} e^{-x^2/2} dx$$

Indica cuál es el comportamiento asintótico de la distribución del error cometido al emplear S_n como estimador de μ: distribución de probabilidad de una variable aleatoria normal de media 0 y varianza 1

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.
- La justificación inicial del uso de Monte Carlo proviene de dos teoremas centrales de la probabilidad y la estadística:
    - La Ley Débil de los Grandes Números
    - Teorema del Limite Central

Con un número suficientemente alto de experimentos, es posible estimar el parámetro deseado con un pequeño error con alta probabilidad, y permiten cuantificar asintóticamente la relación entre estos dos valores (error y probabilidad) a través de la distribución normal.

Motivación

MÉTODO DE MONTECARLO

- El método de Monte Carlo no provee el valor exacto deseado, sino una aproximación, con un cierto error.
- La justificación inicial del uso de Monte Carlo proviene de dos teoremas centrales de la probabilidad y la estadística:
  - La Ley Débil de los Grandes Números
  - Teorema del Limite Central

Con un número suficientemente alto de experimentos, es posible estimar el parámetro deseado con un pequeño error con alta probabilidad, y permiten cuantificar asintóticamente la relación entre estos dos valores (error y probabilidad) a través de la distribución normal. Sin embargo, es necesario ser cauteloso en la aplicación práctica del método, ya que las implementaciones reales no verifican las hipótesis de estos dos teoremas.

3

Aplicaciones

Ejemplos y Simulación

Ejemplo 1

PROBABILIDAD DE GANAR UNA PARTIDA DEL “SOLITARIO”

- Baraja de 52 cartas, estrategia fija.
- 52! posibles ordenaciones de cartas de la baraja igualmente probables. *grande!*
- No existe método sistemático de determinar el número de combinaciones ganadoras.

Ejemplo 1

PROBABILIDAD DE GANAR UNA PARTIDA DEL "SOLITARIO"

- Baraja de 52 cartas, estrategia fija.
- 52! posibles ordenaciones de cartas de la baraja igualmente probables. *grande!*
- No existe método sistemático de determinar el número de combinaciones ganadoras.
- Abordaje mediante simulación:
  - Después de jugar ***n*** partidas, definimos:

$$X_i = \begin{cases} 1 \text{ si la partida i resulta en victoria} \\ 0 \text{ en cualquier otro caso} \end{cases}$$

Si X es una variable aleatoria que mide el "número de éxitos, con dos posibles resultados en cada experimento (éxito o fracaso) se dice que la variable aleatoria X se distribuye como una Bernoulli de parámetro $\boldsymbol{p}$ "

$$f(x,p) = \begin{cases} 1-p & \text{si } x = 0, \\ p & \text{si } x = 1, \\ 0 & \text{en cualquier otro} \end{cases}$$

$$E[X] = p$$

Ejemplo 1

PROBABILIDAD DE GANAR UNA PARTIDA DEL “SOLITARIO”

- Baraja de 52 cartas, estrategia fija.
- 52! posibles ordenaciones de cartas de la baraja igualmente probables. *grande!*
- No existe método sistemático de determinar el número de combinaciones ganadoras.
- Abordaje mediante simulación:
  - Después de jugar ***n*** partidas, definimos:

$$X_i = \begin{cases} 1 \text{ si la partida i resulta en victoria} \\ 0 \text{ en cualquier otro caso} \end{cases}$$

- X_i variables aleatorias independientes de Bernoulli que cumplen que:

$$E\{X_i\} = P\{\text{Ganar la partida de solitario}\}$$

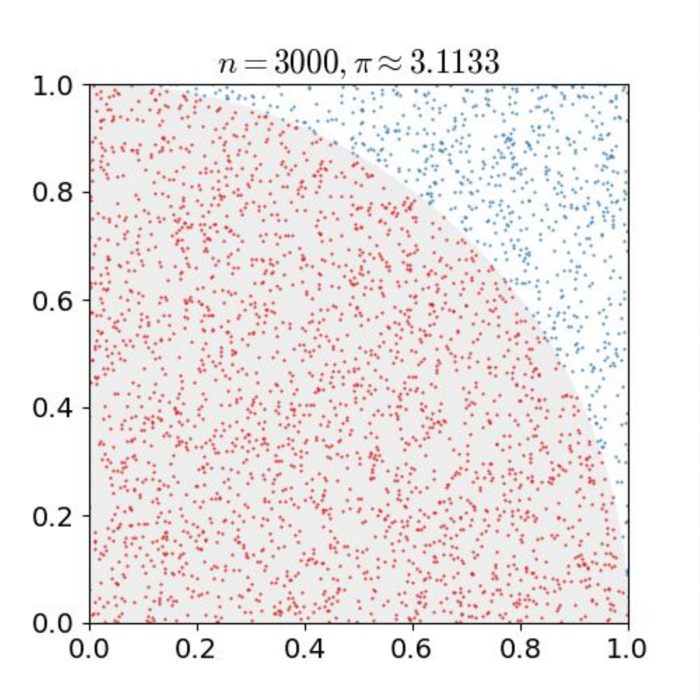
Por Ley de los Grandes números:

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} X_i}{n} = \frac{\text{número de partidas ganadas}}{\text{número de partidas jugadas}} \quad \text{converge a} \quad P\{\text{Ganar la partida de solitario}\}$$

Ejemplo 2

INTEGRACIÓN NUMÉRICA: CÁLCULO DEL VALOR DE π

- Se dibuja un cuadrado unitario y se inscribe un cuadrante dentro (sector circular)
- Se dibujan N puntos (x,y) de forma uniformemente aleatoria en un cuadrado
- Se cuentan los C puntos para los cuales $x^2 + y^2 < 1$
- La proporción C/N converge alrededor de $\pi/4$ a $N^{½}$. Se multiplica el resultado por 4 para obtener el valor deseado.



Simulación

Supongamos que se desea calcular un cierto valor ϕ, y se conoce una variable aleatoria $\boldsymbol{X}$, con distribución $\boldsymbol{F_X}$. Tal que $\phi = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{X})$

Procedimiento EstimaciónMonteCarlo (integer n, real $\widehat{X}$, real $\widehat{V}$)
Parámetro de entrada: n, *tamaño de la muestra*
Parámetros de salida: $\widehat{X}$, *estimador* de ϕ; $\widehat{V}$, *estimador* de $\text{Var}\left(\widehat{X}\right)$

1. $\widehat{X} = 0$. /* Inicialización */
2. $\widehat{V} = 0$.
3. For $i = 1, \ldots, n$ do
   3.1 Sortear un valor de la variable $X^{(i)}$ con distribución F_X
   3.2 $\widehat{X} = \widehat{X} + X^{(i)}$ /* Acumular*/
   3.3 $\widehat{V} = \widehat{V} + (X^{(i)})^2$ /* Acumular*/
4. $\widehat{X} = \widehat{X}/n$
5. $\widehat{V} = \widehat{V}/(n * (n-1)) - \widehat{X}^2/(n-1)$

Extraído de: Curso "Métodos de Monte Carlo" - Facultad de Ingeniería, Universidad de la República

Simulación

- Estimación de pi
- Lanzamiento de una moneda
- Cola en una Fotocopiadora

Simulación

- Estimación de pi
- Lanzamiento de una moneda
- Cola en una Fotocopiadora

Tpo Medio Llegadas	Tpo medio Espera	Tpo Medio Máq. Libre	Cola Máxima
2.9+/-3.0	3.6+/-2.2	1.0+/-2.3	8.0

4

Tarea

Entregas y reentregas

Quedan pendientes las tareas:

- Modelo de Deriva Difusión (DDM)
- Modelo de Sala de Espera

Domingo 26/10 - 23:59hs

Domingo 09/11 - 23:59hs

Quedan pendientes las tareas:

Modelo de Sala de Espera

Objetivo: Simular el tiempo medio de espera de los pacientes en una guardia médica durante 24 horas. Determinar el número de consultorios adecuado.

Se simulará en un tiempo paramétrico de 1 minuto la guardia de un hospital con N consultorios. Todas las distribuciones de las variables serán normales y se informarán como media±DS (desvío estándar).

La simulación comenzará a las 8am y se realizará durante 24hs. Los pacientes llegarán con un tiempo de arribo de M1±DS1 minutos de 8 a 22hs y de M2±DS2 de 22 a 8hs. Cada paciente tardará 5 minutos en entrar al consultorio y 2 minutos para salir. Habrá disponible un número N de consultorios. El tiempo de atención es de M3±DS3 minutos.

Quedan pendientes las tareas:

Modelo de Sala de Espera

Los datos de la simulación serán:

M1±DS1 = 2±1 minutos, M2±DS2 = 10±5 minutos, M3±DS3 = 25±15 minutos

La simulación comienza con N=5 consultorios.:

1. Calcular el tiempo medio de espera de los pacientes y graficar su curva para 24hs.
2. Aumentar el número de consultorios y ajustar este número para una espera razonable. Justificar.

NOTA: Utilizar un generador de números aleatorios y evitar siempre los valores negativos.

Quedan pendientes las tareas:

Modelo de Sala de Espera

Objetivo: Simular el tiempo medio de espera de los pacientes en una guardia médica durante 24 horas. Determinar el número de consultorios adecuado.

- La guardia del hospital tiene N consultorios.
- La simulación se realiza durante 24hs (a partir de las 8:00 hs).
- El tiempo de arribo de pacientes entre las 8:00 y las 22:00 hs es 2±1 min. (Distribucion NORMAL).
- El tiempo de arribo de pacientes entre las 22:00 y las 8:00 hs es 10±5 min. (Distribucion NORMAL).
- Cada paciente tarda 5 min en entrar al consultorio tras ser llamado, y 2 min para salir tras ser atendido.
- El tiempo de atención por paciente es de 25±15 min. (Distribucion NORMAL).

Simulación inicial del problema → N = 5 consultorios

Bibliografía

1. Metropolis, N. and Ulam, S. "The Monte Carlo Method." *J. Amer. Stat. Assoc.* **44**, 335-341, 1949.
2. Manno, I. *Introduction to the Monte Carlo Method.* Budapest, Hungary: Akadémiai Kiadó, 1999.
3. History of Monte Carlo Method: http://web.archive.org/web/20070519170205/http://stud2.tuwien.ac.at/~e9527412/history.html
4. Metropolis, N. "The Beginning of the Monte Carlo Method." *Los Alamos Science,* No. 15, p. 125.

¡Gracias!

¿Preguntas?

Lucía Lemes

llemes@cup.edu.uy