

## INICIATIVA ACADÉMICA DE MODELACIÓN Y SIMULACIÓN

### 1 Identificación

<b>Curso:</b>	CC2017 – Modelación y Simulación	<b>Créditos:</b>	5
<b>Ciclo:</b>	Segundo	<b>Requisitos:</b>	Estructuras de Datos y Algoritmos Ecuaciones Diferenciales 1 Teoría de Probabilidades
<b>Año:</b>	2024		
<b>Profesor:</b>	Alan Reyes-Figueroa	<b>Horario:</b>	Martes – 16:30-18:55 – CIT 301
<b>Email:</b>	agreyes	<b>Sala:</b>	Jueves – 17:20-18:55 – CIT 215

#### Sitio Web del Curso:

- <https://pfafner.github.io/sim2024>

#### Office Hours:

- Viernes de 18:00 a 19:00 hrs, o por solicitud del estudiante. También pueden enviar sus dudas a través del correo electrónico institucional.

### 2 Descripción

Este es un curso introductorio a la modelación y simulación computacional, y en general al cómputo científico. Tiene como objetivo cubrir algunos temas relacionados con métodos numéricos computacionales, y se estudian algoritmos para cálculo científico y su implementación computacional. Se estudian tres grandes temas:

- 1) Modelación continua y discreta, principalmente mediante EDO.
- 2) Optimización numérica continua y discreta,
- 3) Simulación de fenómenos mediante distribuciones de probabilidad.

La primera parte del curso estudiamos relacionados con modelos diferenciales: estudiamos algunas EDO y EDP clásicas, desde el enfoque de la construcción del modelo diferencial. Aprenderemos algunas técnicas para analizar cualitativamente los modelos diferenciales, y aprenderemos algoritmos numéricos para la solución de EDOs y sistemas de EDOs.

En el segundo bloque, introducimos los temas de optimización numérica, principalmente los métodos de gradiente, así como métodos de la familia de gradiente conjugado y métodos quasi-Newton. El tema culmina haciendo un estudio de la teoría de optimización restringida, particularmente programación lineal. Al final hacemos una introducción a algunos métodos de optimización combinatoria y discreta.

En la parte final del curso hacemos uso de distribuciones de probabilidad, para modelar aquellos fenómenos en los que interviene algún componente estocástico. Abordaremos algoritmos numéricos para la generación de muestras aleatorias, y de distribuciones de probabilidad, y aplicaremos estos algoritmos al estudio de ciertos problemas de modelación. Se hace una introducción a técnicas de inferencia bayesiana.

El curso cuenta con una parte práctica extensiva, en la que el estudiante implementará en código computacional cada uno de los algoritmos estudiados. Parte fundamental del curso es utilizar las herramientas aprendidas en varios proyectos aplicados donde se trabajará con datos reales y comunicar los resultados mediante proyectos.

### 3 Competencias a Desarrollar

#### Competencias genéricas

1. Piensa de forma crítica y analítica.
2. Resuelve problemas de forma estructurada y efectiva.
3. Desarrolla habilidades de investigación y habilidades de comunicación a través de seminarios y presentaciones ante sus colegas.

#### Competencias específicas

- 1.1 Entiende y domina los fundamentos matemáticos que formalizan la modelación computacional y la simulación estadística.
- 1.2 Conoce y profundiza los principales algoritmos de simulación, sus limitaciones, así como la formulación de diferentes modelos y representaciones computacionales.
- 1.3 Comprende los conceptos teóricos y prácticos relacionados con la modelación computacional.
- 2.1 Aplica métodos y técnicas comunes para la solución de problemas asociados ecuaciones diferenciales, optimización numérica, generación de variables aleatorias y modelos estocásticos.
- 2.2 Aplica de forma efectiva soluciones computacionales para resolver problemas aplicados de modelación y simulación.
- 2.3 Utiliza un enfoque global para resolver problemas. Utiliza herramientas auxiliares en su solución, como lógica, álgebra, cálculo probabilidad y estadística, entre otros.
- 3.1 Desarrolla todas las etapas de una investigación o proyecto aplicado donde se utilizan elementos de modelación y simulación computacional: anteproyecto, formulación de hipótesis, diseño experimental, metodología, resultados y conclusiones.
- 3.2 Escribe un reporte técnico sobre la solución de un problema de interés, teórico o aplicado. Concreta un análisis riguroso y conclusiones importantes.
- 3.3 Comunica de manera efectiva, en forma escrita, oral y visual, los resultados de su investigación.

### 4 Metodología Enseñanza Aprendizaje

El curso se desarrollará durante diecinueve semanas, con cinco períodos semanales de cuarenta y cinco minutos para desenvolvimiento de la teoría, la resolución de ejemplos y problemas, comunicación didáctica y discusión. Se promoverá el trabajo colaborativo de los estudiantes por medio de listas de ejercicios y proyectos. El curso cuenta con una sesión semanal para la implementación de algoritmos y la práctica de las técnicas del curso.

El resto del curso promoverá la revisión bibliográfica y el auto aprendizaje a través de la solución de los ejercicios del texto, y problemas adicionales, y el desarrollo de un proyecto. Se espera que el alumno desarrolle su trabajo en grupo o individualmente, y que participe activamente y en forma colaborativa durante todo el curso.

## 5 Contenido

1. Modelación matemática: Principios generales de la modelación. Representaciones, modelos discretos, continuos y estocásticos. Ejemplos y aplicaciones.
2. Modelos continuos: Ecuaciones diferenciales (EDO). Análisis cualitativo de EDO, isoclinas, espacio de fase, análisis de puntos críticos. Funciones de transferencia. Solución numérica de EDOs. Método de Euler, métodos multi-paso. Métodos de Runge-Kutta-Fehlberg. Sistemas de EDO. Análisis de puntos críticos. Solución numérica de sistemas de EDO. Ejemplos y aplicaciones: Modelo SIR, Modelos en ecología y epidemiología. Introducción y ejemplos de modelación con EDPs. Aplicaciones: Modelos de difusión. Modelos discretos: Ecuaciones en diferencias. Aplicaciones y modelos en finanzas. Autómatas celulares. Ejemplos de procesos difusivos. Agentes discretos. Modelación usando agentes.
3. Elementos de optimización: Optimización continua. Método de descenso gradiente. Método de Newton. Gradiente conjugado y métodos cuasi-Newton. Programación lineal. Aplicaciones: modelos de transporte, modelos de asignación. Optimización combinatoria: algoritmos genéticos (GA), optimización por enjambres de partículas (PSO), evolución diferencial (DE).
4. Variables aleatorias: ejemplos y usos de distribuciones discretas y continuas. Generación de variables aleatorias. Teorema de la Fórmula Integral, método de rechazo. Métodos de reducción de varianza: variables antitéticas, varianza de control, reducción de varianza por condicionamiento, muestreo estratificado. Ejemplos. Análisis estadístico de datos simulados: algoritmo para saber cuando dejar de obtener muestras, aproximación Bootstrap, Teorema de Glivenko-Cantelli, muestreo inverso. Variables aleatorias multivariadas. Varianza y valor esperado condicional. Generación de variables aleatorias multivariadas. Polytrees y árboles de Chow-Liu.
5. Simulación de eventos discretos: Distribución de Poisson. Procesos de Poisson. Teoría de colas. Modelos  $(M, M, 1)$ ,  $(M, G, 1)$ ,  $(M, G, 1)$  con prioridad,  $(M, M, c)$ ,  $(M, G, c)$ , modelo de Erlang. Modelación de redes de colas, paralelización. Modelos de inventarios.
6. Cadenas de Markov en tiempo discreto. Propiedades. Estados transientes y absorbentes. Propiedades de equilibrio. Métodos bayesianos: Markov Chain Monte Carlo (MCMC), algoritmo de Metrópolis-Hastings, muestreador de Gibbs. Elementos de cadenas de Markov en tiempo continuo.

## 6 Bibliografía

### Textos:

- S. Ross (2006). *Simulation*. 4th Edition. Academic Press.
- K. Atkinson, W. Han y D. Stewart (2009). *Numerical Solution of Ordinary Differential Equations*. John Wiley.

### Referencias adicionales

- J. Matousek y B. Gärtner. (2007). *Understanding and Using Linear Programming*. Springer.
- M. Martcheva (2010). *An Introduction to Mathematical Epidemiology*. Springer.
- C. Robert y G. Casella (2004). *Monte Carlo Statistical Methods*. 2nd Edition. Springer.
- C. Robert (2007). *The Bayesian Choice*. 2nd Edition. Springer.
- B. Zeigler, A. Muzy y E. Kofman (2019). *Theory of Modeling and Simulation*. 3rd Edition. Academic Press.
- J. A. Sokolowski y C. M. Banks (2010). *Modeling and Simulation Fundamentals*. John Wiley & Sons.

## 7 Actividades de evaluación

Actividad	Cantidad aproximada	Porcentaje
Laboratorios	entre 8 y 12	50%
Pruebas cortas	2	10%
Proyectos	2	40%

## 8 Cronograma

Semana	Tópico	Fecha	Actividades
1	Introducción al curso. Aspectos generales de modelación y simulación.	01-05 julio	
2	<b>Modelos EDO y EDP:</b> formulación general. Ecuaciones autónomas. Análisis de puntos críticos.	07-12 julio	
3	Solución numérica de EDOs y sistemas de EDOs. Método de Euler, métodos de Runge-Kutta-Fehlberg.	15-19 julio	
4	Sistemas de EDO. Análisis cualitativos. Aplicaciones en epidemiología y ecología.	22-26 julio	
5	Elementos de EDP y diferencias finitas. Modelos de difusión. <b>Modelos discretos:</b> Recurrencias. Modelos financieros.	29 julio-02 agosto	
6	Autómatas celulares. Ejemplos. Modelos basados en agentes. Ejemplos.	05-09 agosto	
7	<b>Programación lineal:</b> Forma ecuacional. Soluciones factibles. Convexidad y poliedros convexos. Vértices y soluciones.	12-16 agosto	
8	Versión primal y dual de un problema de PL. Algoritmo simplex. Ejemplos de problemas.	19-23 agosto	
9	Aplicaciones: modelos de transporte, Modelos de asignación.	26-30 agosto	
10	<b>Optimización combinatoria.</b> Algoritmos genéticos. Enjambres de partículas.	02-06 septiembre	
	<i>Semana de asueto</i>	09-13 septiembre	
11	Otros algoritmos de optimización discreta.	16-20 septiembre	Proyecto 1
12	<b>Generación de variables aleatorias:</b> Distribuciones y usos. Teorema de la transformada integral. Método de rechazo.	23-27 septiembre	
13	Métodos de reducción de varianza. Ejemplos. Análisis estadístico de datos simulados.	30 sept-04 octubre	
14	Aproximación Bootstrap, Teorema de Glivenko-Cantelli. Muestreo inverso.	07-11 octubre	
15	Generación de variables aleatorias multivariadas. Entropía, polytrees, árboles de Chow-Liu.	14-18 octubre	
16	<b>Teoría de colas:</b> Procesos de Poisson. Modelos $(M, M, 1)$ , $(M, G, 1)$ , $(M, M, c)$ , $(M, G, c)$ .	21-25 octubre	
17	Modelo de Erlang. Modelación de redes de colas, paralelización. Modelos de inventarios.	28 octubre-01 nov	
18	<b>Elementos de simulación bayesiana:</b> Estadística bayesiana Cadenas de Markov en tiempo discreto.	04-08 noviembre	
19	Markov Chain Monte Carlo. Algoritmo Metrópolis-Hastings. Muestreador de Gibbs. Aplicaciones.	11-15 noviembre	
20	Presentación de proyectos.	18-22 noviembre	Proyecto 2