Marco Bayesiano para el análisis de datos, calibración de parámetros y modelamiento inverso

# Introducción

Universidad Industrial de Santander U18 Fest

### Introducción

### David A. Barajas-Solano

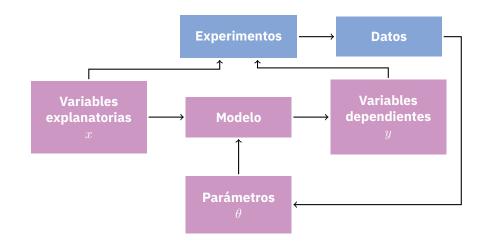
- Egresado de la UIS Ingeniería Civil
- Ph.D. en ciencias de la ingeniería (University of California, San Diego)
- Científico en Pacific Northwest National Laboratory
- Perfil científico en https://www.dbarajassolano.com

1

## Modelamiento en ciencia e ingeniería

- Modelos son objetos matemáticos usados para describir fenómenos en ciencia e ingeniería
- Los modelos son *calibrados* utilizando datos experimentales

### Modelamiento en ciencia e ingeniería



3

# Ejemplos de modelos

■ Ley de Hooke

$$\sigma = E\varepsilon$$

ightharpoonup Parámetros: Módulo de Young E

Δ

## Ejemplos de modelos

Ley de Hooke

$$\sigma = E\varepsilon$$

- Parámetros: Módulo de Young E
- Leyes de reacción

$$R = k[A][B]$$

- Observaciones indirectas e.g. respuesta química vs tiempo
- Parámetros: Tasa de reacción k

Δ

## Ejemplos de modelos

Ley de Hooke

$$\sigma = E\varepsilon$$

- ► Parámetros: Módulo de Young *E*
- Leyes de reacción

$$R = k[A][B]$$

- Observaciones indirectas e.g. respuesta química vs tiempo
- Parámetros: Tasa de reacción k
- Modelo logístico para variables categóricas

$$\log \frac{P(y=1)}{P(y=0)} = \alpha + \beta x$$

- ▶ Variable categórica dependiente y = 0, 1
- Variable explanatoria contínua x
- Parámetros  $\theta = \alpha, \beta$

4

### Objetivos

- Modelamiento probabilístico para la selección, calibración, y evaluación de modelos científicos
  - Selección: Cuál modelo utilizar?
  - Calibración: Qué valores utilizar para los parámetros?
  - Evaluación: Es el modelo calibrado útil?
- Marco Bayesiano para modelamiento probabilístico
- Programación probabilística para la práctica
- Algunos modelos sencillos con aplicaciones

### Programa

#### **Fundamentos**

- Lunes: Teoría de la probabilidad y teorema de Bayes
- Martes: Modelamiento y programación probabilística

### Regresión

■ *Martes*: Modelos lineales

■ Miércoles: Modelos no lineales

■ Jueves: Modelos jierárquicos

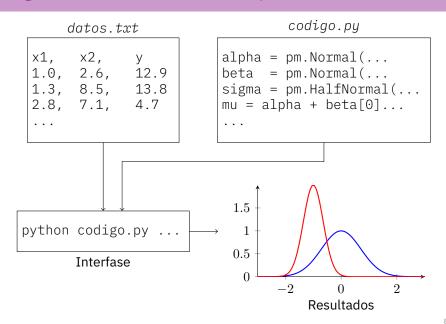
## Metodología

- Vamos a programar? **No**, pero...
- ...vamos a utilizar herrramientas de programación probabilística para explorar conceptos

### Herramientas de programación basadas en texto plano

- Lenguaje de programación Python
- Librería de programación probabilística PyMC3
- Interfase de cuadernos Jupyter Lab

### Programación basada en texto plano



## Programación basada en texto plano

### **Ventajas**

- Reproducibilidad: Se puede recrear mi análisis y resultados?
- *Transparencia*: Se puede ver cómo el análisis se ha hecho?
- Mantenibilidad: Se puede acceder, cambiar, o actualizar el análisis?

#### **Alternativas**

Software de oficina

# Ejemplo: Éste taller!

- Reproducibilidad: Software libre para generar todo el contenido (presentaciones, máquina virtual, cuadernos, etc.)
- Transparencia: Texto plano es transparente
- Mantenibilidad: Via Git

### Logística

- Cronograma
  - Dos mitades de 1h 20m
  - Pausa de 20m entre mitades (café y aromáticas afuera)
- Código, cuadernos y presentaciones disponibles en GitHub https://github.com/dbarajassolano/u18fest
- Preguntas bienvenidas a cualquier momento!