

CUANTIFICACIÓN DE INCERTIDUMBRE BAYESIANA APROXIMADA EN PROBLEMAS INVERSOS DE ODE

T E S I S

Que para obtener el grado de
Maestro en Probabilidad y Estadística

Presenta

César Isaí García Cornejo

Director de Tesis:

Dr. José Andrés Christen Gracia

Autorización de la versión final

Dedicatoria . . .

Resumen

El estudio del fenómeno de la violencia en México que acontece durante la conocida “Guerra contra las drogas” ha sido abordado desde diferentes perspectivas y mediante enfoques tanto cualitativos como cuantitativos. En referencia al último enfoque, aunque ya existen trabajos que analizan este problema a través de modelos estadísticos, aún existen aspectos por cubrir.

A partir de un análisis exploratorio de los datos seleccionamos el conjunto de covariables más relevantes y delimitamos una región para la modelación. Ya que los procesos de este tipo inducen correlación espacial, proponemos una serie de parametrizaciones de un modelo espacio-temporal jerárquico bayesiano con efectos de espacio y tiempo separables.

Palabras clave: modelación espacio-temporal, modelo jerárquico bayesiano, ciencia de datos, cómputo estadístico, inla, datos de áreas

Agradecimientos

A mis padres ...

Índice general

Resumen	III
Agradecimientos	V
Índice de figuras	IX
1. Introducción	1
2. Antecedentes	3
2.1. Solución bayesiana a problemas Inversos	3
2.2. Forward map aproximado y consistencia	3
2.3. MCMC	3
2.3.1. Metropolis-Hastings	4
2.4. Necesidad de trabajar con aproximaciones del Forward map	4
3. Implementación	5
3.1. Modelos de trabajo	5
3.1.1. Modelo Gravitatorio	6
3.1.2. Modelo Logístico	9
3.1.3. Modelo SIR	11
3.2. Enfoque bayesiano al problema inverso	12
3.2.1. Forward map	14
3.2.2. Simulación con MCMC	14
3.2.3. Resultados	14
3.3. Inferencia con aproximación.	14
3.3.1. Regla de interpolación(aproximación de forward map)	14
3.3.2. Simulación MCMC	14
3.3.3. Resultados	14
3.3.4. Experimentación con la convergencia.	15
4. Conclusiones y trabajo futuro	23
Referencias	25
A. Anexo	27

Índice de figuras

3.1. Varias trayectorias con la dinámica gravitación sujeta a fricción para varios valores de los parámetros g, b	9
3.2. Varias trayectorias con la dinámica de crecimiento logístico para varios valores de los parámetros K, r	11
3.3. Trayectoria de cada grupo del modelo SIR con $\beta = 0.009$ y $\gamma = 0.5$	12
3.4. Distribución posterior para g con Forward ordinario y Forward aproximado con 5 vecinos cercanos.	16
3.5. Distribución posterior para g con Forward ordinario y Forward aproximado con 8 vecinos cercanos.	17
3.6. Distribución posterior para g con Forward ordinario y Forward aproximado con 16 vecinos cercanos.	18
3.7. Distribución posterior para b con Forward ordinario y Forward aproximado con 5 vecinos cercanos.	19
3.8. Distribución posterior para b con Forward ordinario y Forward aproximado con 8 vecinos cercanos.	20
3.9. Distribución posterior para b con Forward ordinario y Forward aproximado con 16 vecinos cercanos.	21

Capítulo 1

Introducción

Explicar a grandes rasgos el problema inverso. Poner sus inconvenientes y dificultades así como escribir porque es de interés.

Luego, hablar de la inferencia bayesiana como método para hacer inferencia sobre el problema inverso, explicar la teoría de la estadística bayesiana así como sus paradigmas generales.

Hablar de MCMC como método de simulación para la distribución posterior de la estadística bayesiana. Explicar la teoría a grandes rasgos, esbozar el algoritmo.

Capítulo 2

Antecedentes

2.1. Solución bayesiana a problemas Inversos

Tratar a fondo sobre la teoría de problemas inversos. Cómo se define. Que es el Forward map. Métodos convencionales (superficialmente para resolución)

Método para problemas inversos (lineales)

Método por estadística bayesiana

Explicar como abordar el problema inverso con estadística bayesiana

2.2. Forward map aproximado y consistencia

Teoría

Aquí explicar la teoría clásica para la estadística bayesiana.

Ejemplos

2.3. MCMC

Introducción a la simulación por Monte Carlo.

2.3.1. Metropolis-Hastings

:

Explicar teoría de MCMC, teoremas de cadenas de Markov(appendice)

2.4. Necesidad de trabajar con aproximaciones del Forward map

Esbozar el algoritmo y explicar la practicidad de este. Poner un ejemplo ilustrativo.

Capítulo 3

Implementación

Debido a que nos encontramos en un terreno carente de fundamentos teóricos, nuestra mejor arma para probar que grado de aproximación de los problemas inversos son consistentes es por medio de experimentación metodológica. Esto nos permite revelar obstáculos del nuevo método así como también las grandes ventajas.

Gran parte del trabajo de tesis se centra primordialmente en la experimentación con la propuesta innovadora para la solución bayesiana del problema inverso. Se hacen los experimentos con una implementación en Python cuyo código se encuentra adjunto.

3.1. Modelos de trabajo

Existen una variedad de modelos a los que se puede aplicar la metodología descrita para problemas inversos. De hecho se puede implementar para cualquier modelo descrito por una ecuación diferencial ordinaria. Sin embargo, cada modelo tiene sus bemoles, lo que dificulta calibrar (en general), para cada aspecto en la distribución de los parámetros, como puede ser el caso de tomar las distribuciones a priori adecuadas, la variación de la muestra, los dominios adecuados para graficar las distribuciones a posterior, entre otras. Por ello, nos permitiremos enfocarnos en solo un par de modelos que son el modelo gravitatorio sujeto a fricción para un partícula en caída y el modelo de crecimiento logístico para una población en crecimiento.

3.1.1. Modelo Gravitatorio

Consideremos una partícula puntual en un campo gravitatorio cercano a la superficie terrestre. Por medio de la dinámica clásica podemos modelar dicha caída con las leyes de Newton. Sea $x(t)$ la distancia recorrida (unidimensional) por la partícula puntual en el tiempo t . De la segunda ley de Newton sabemos que

$$\sum F_i = m\ddot{x}(t) \quad (3.1)$$

donde $\sum F_i$ es la suma de fuerzas ejercida sobre la partícula con masa m .

Para el modelo de caída libre nos dice que la fuerza ejercida en la partícula es constante y se le conoce como constante de aceleración gravitacional g . De forma que la trayectoria se rige de (3.1) con únicamente la fuerza gravitacional $F = mg$. La ecuación de la dinámica es

$$\ddot{x}(t) = g$$

bajo las condiciones iniciales $x(0) = x_0, \dot{x}(0) = v_0$. La solución a la ecuación dinámica es [Sears y cols. \(1986\)](#)

$$x(t) = \frac{1}{2}gt^2 + v_0t + x_0$$

Sin embargo, dentro del marco establecido para el modelo gravitacional, no es un modelo realista ya que este no está considerando la desaceleración producto de la fricción con el medio que interactúa (aire). Por ello es necesario modelar la fuerza de fricción de forma adecuada. Un modelo físico plausible para la fricción es considerar una fuerza opuesta a la fuerza de gravedad y que está depende de la velocidad de la partícula. Consideremos dicha fuerza de fricción como $F_f = -bv(x)$. Podemos pensar que el modelo para la fuerza de fricción es una aproximación de los primeros polinomios de Taylor a primer grado, donde se descarta el termino constante ya que no tiene sentido físico que la fricción obedezca a marcos de referencia.

El modelo que estamos interesados es entonces el **modelo gravitatorio sujeto**

a **fricción**, cuya ecuación dinámica es

$$m\ddot{x} = mg - b\dot{x} \quad (3.2)$$

que representa la trayectoria de la partícula sujeta a dos fuerzas opuestas, la gravitatoria y la fricción con el medio. Además con las condiciones iniciales $x(0) = x_0, \dot{x}(0) = v_0$. Notemos que dados los parámetros $\theta = (g, b)$ podemos determinar unívocamente la trayectoria de interés.

Para poder hacer inferencia bayesiana en el problema inverso, es necesario construir el forward map $F(\theta)$. Esto puede ser de dos maneras, podemos resolver la ecuación diferencial y obtener $x(t)$ en términos de $\theta = (g, b)$ en caso de que exista dicha solución explícita. Otra forma de construir el forward map es utilizando métodos numéricos para resolver la EDO.

En este modelo sí tenemos solución explícita a la ecuación de la dinámica. Para poder resolverla expresamos la EDO en términos de la velocidad $v(t) = \dot{x}(t)$. Teniendo una EDO lineal de primer orden.

La solución a la ecuación dinámica

$$m \frac{dv}{dt} = mg - bv \quad (3.3)$$

se obtiene del siguiente análisis. Primeramente notemos que la aceleración de la partícula se anula. Es decir, la velocidad tiene una asíntota. Esto corresponde al caso cuando la fuerza gravitacional es igual y opuesta a la fuerza de fricción. Por tanto podemos definir una velocidad terminal v_T de la relación

$$mg - bv_T = 0 \quad \Rightarrow \quad v_T = \frac{mg}{b} \quad (3.4)$$

de reordenar e integrar (3.3)

$$\frac{dv}{dt} = -\frac{b}{m}(v - v_T) \quad (3.5)$$

e integrando con la condición inicial $v_0 = 0$

$$\int_0^v \frac{dv}{v - v_T} = -\frac{b}{m} \int_0^t dt$$

obtenemos

$$\log \left(\frac{v_t - v}{v_t} \right) = -\frac{b}{m} t$$

despejando para v

$$v = v_T \left(1 - \exp \left\{ -\frac{b}{m} t \right\} \right) \quad (3.6)$$

donde vemos que en efecto la velocidad terminal v_T es una asíntota debido a que $v(t)$ ya que se aproxima a v_T a medida que pasa el tiempo.

Para obtener la función de la trayectoria, simplemente integramos una vez más obteniendo

$$x(t) = \int_0^t v_T \left(1 - \exp \left\{ -\frac{b}{m} t \right\} \right) dt + x_0$$

tomando $x_0 = 0$, finalmente nos queda que la trayectoria de la partícula es

$$x(t) = v_T \left[t - \frac{m}{b} \left(1 - \exp \left\{ -\frac{b}{m} t \right\} \right) \right] \quad (3.7)$$

Por tanto, podemos tomar el forward map $F(g, b) = x(t)$, prescindiendo de m al considerar $m = 1$.

Por otro lado, recordemos que la idea principal es resolver el problema inverso. Es decir, dada una muestra de la trayectoria $x(t_i)$ como podemos inferir los parámetros $\theta = (g, b)$. La ciencia actual ya es conocida con buen grado de exactitud la aceleración de la gravedad g . Sin embargo, vamos a considerar que desconocemos su valor, lo que puede aplicar para constantes en alturas distintas a la superficie terrestre o constantes gravitacionales en otro planeta. Con fines ilustrativos esbozamos en la Fig 3.1 varias trayectorias según sus parámetros (g, b) y notamos en todas un carácter creciente en

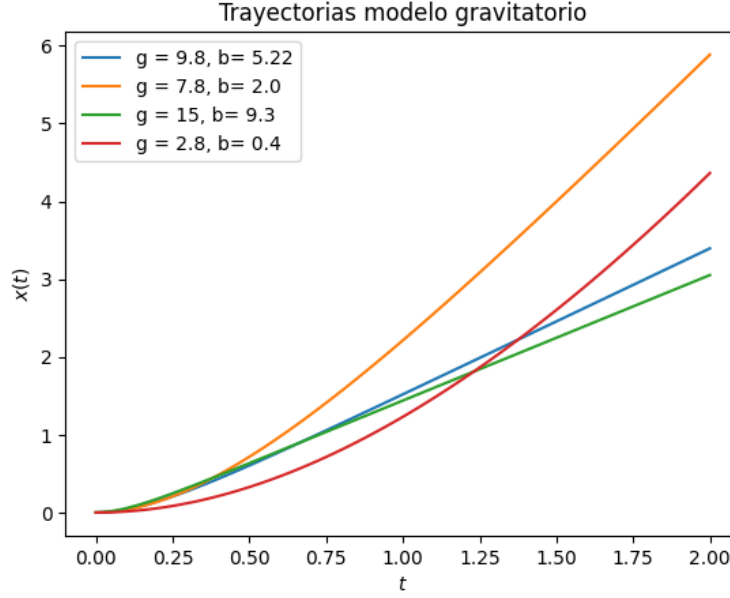


Figura 3.1: Varias trayectorias con la dinámica gravitación sujeta a fricción para varias valores de los parámetros g, b .

el tiempo.

3.1.2. Modelo Logístico

Un modelo de crecimiento poblacional simple caracterizado por una ecuación diferencial es aquel que la tasa de cambio de la población es proporcional al tamaño actual de la población. Sea $P(t)$ el tamaño de la población al tiempo t . El modelo descrito es

$$\frac{dP}{dt} = \lambda P(t) \quad (3.8)$$

donde λ es la tasa de crecimiento y con la condición $P(0) = P_0$.

La solución explícita al modelo en (3.8) es

$$P(t) = P_0 e^{\lambda t} \quad (3.9)$$

que es una función creciente en el tiempo. Sin embargo, este modelo solo es valioso para pequeños intervalos de tiempo, ya que el crecimiento en una la tasa de cambio

de la población tiende a decaer a medida que se consumen los recursos.

Para saldar con la dificultad planteada, podemos modelar la tasa de crecimiento de una población considerando tanto al tamaño de la población como a los recursos aún presentes. Consideremos a K como la capacidad de sustento, que se puede interpretar como la cantidad máxima de población que los actuales recursos permiten mantener, entonces esperamos que a medida que crece la población, la tasa de crecimiento de la misma decrezca.

El modelo que se propone es conocido como el modelo de crecimiento logístico. Este nos dice que el cambio de la población es proporcional al tamaño de la población misma así como a la proporción de recursos disponibles. Dicho modelo se puede escribir con la ecuación de Verhulst

$$\frac{dP}{dt} = rP \left(1 - \frac{P}{K}\right) \quad (3.10)$$

donde r es la tasa de crecimiento y K la capacidad de sustento.

A pesar de que la ecuación diferencial del modelo de crecimiento logístico es no lineal tiene solución explícita. Notemos que la EDO pertenece a la familia de las EDO de Bernoulli, esto es tiene la forma

$$\frac{dy}{dt} + P(x)y = Q(x)y^n$$

y además puede transformarse a una EDO lineal de primer orden con $u(x) = y^{1-n}$.

Por tanto, del cambio $u(t) = P^{-1}$ obtenemos la solución explícita a (3.8)

$$P(t) = \frac{KP_0 e^{rt}}{K + P_0 (e^{rt} - 1)} \quad (3.11)$$

donde verificamos que $\lim_{t \rightarrow \infty} = K$.

Podemos ver en la Fig 3.2 que sus trayectorias son no decrecientes y tiene asintóticamente al parámetro K .

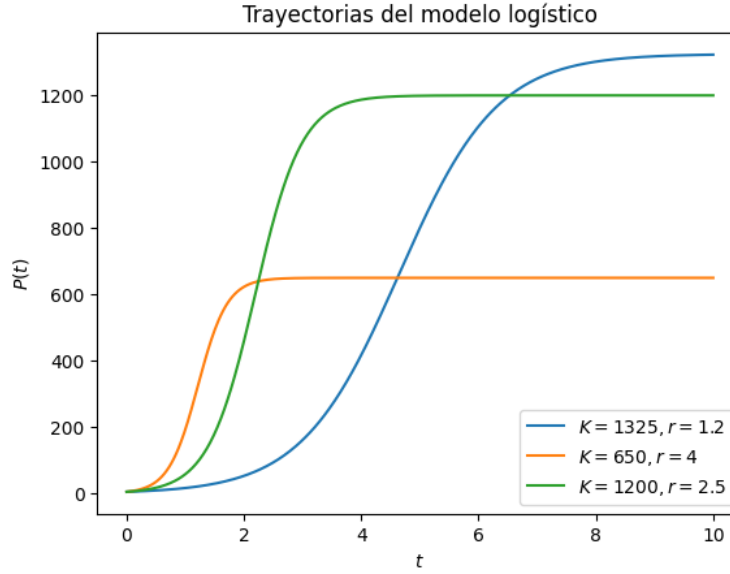


Figura 3.2: Varias trayectorias con la dinámica de crecimiento logístico para varios valores de los parámetros K, r .

3.1.3. Modelo SIR

Los modelos epidemiológicos clasifican a la población en clases que distinguen si han tenido o no cierta enfermedad. Un modelo que captura con buena aproximación a varias enfermedades se es el modelo SIR. Este propone dividir a las N personas de una población en tres grupos:

1. Susceptible (S): Todas las personas que no han tenido la enfermedad ni están enfermas del brote de interés.
2. Infectado (I): Son las personas que actualmente portan el patógeno y son además un vector de transmisión.
3. Recuperado (R): Para aquellas personas que se han recuperado de la enfermedad y ya tienen inmunidad o también para aquellas que perecieron.

Así, el modelo propuesto supone que la tasa de cambios de las personas susceptibles decrece proporcionalmente a la cantidad de infectados y la cantidad de susceptibles restantes. De igual forma, la cantidad de recuperados crece con una tasa proporcional a la cantidad de infectados. La dinámica del modelo SIR se da con el siguiente sistema

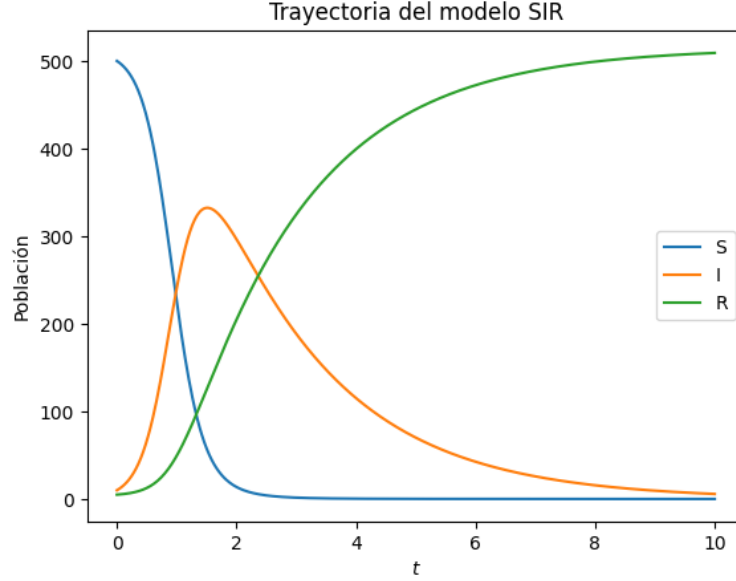


Figura 3.3: Trayectoria de cada grupo del modelo SIR con $\beta = 0.009$ y $\gamma = 0.5$.

de EDO's

$$\begin{aligned}\frac{dS}{dt} &= -\beta SI \\ \frac{dI}{dt} &= \beta SI - \gamma I \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma I\end{aligned}\tag{3.12}$$

donde β es la tasa de infección, γ es la tasa de recuperación y $S + I + R = N$.

La solución explícita para $S(t)$, $I(t)$, $R(t)$ no existe en general, por ello se requieren métodos numéricos para resolver numéricamente para cada grupo y poder construir el forward map. En la Fig. 3.3 tenemos un ejemplo para un caso del modelo SIR con tasa de infección $\beta = 0.009$ y tasa de recuperación $\gamma = 0.5$

3.2. Enfoque bayesiano al problema inverso

Una vez establecidos los modelos sobre los que trabajaremos, nos enfocamos en abordar el problema inverso para los mismos. Para ello, es necesario tener a disposición una muestra de la trayectoria del modelo al cual deseamos inferir sus parámetros.

Según sea el caso, podemos tomar mediciones de caída de un objeto para ciertos tiempo, o podemos contar la población para cada intervalo de tiempo, observar los grupos de personas en un brote de cierto patógeno. Denotemos estas observaciones por y_1, y_2, \dots, y_n .

Sin embargo, no es fácil tener acceso a dicha muestra, por lo que optaremos por simular los datos directamente del modelo seleccionando los parámetros convenientemente y además agregar un ruido gaussiano. Es decir, tomamos θ fijo, luego consideramos los tiempos a los cuales corresponderá la muestra, denotados por t_1, t_2, \dots, t_n . Posteriormente, con el forward map F_θ generado según el modelo (ya sea analítico o numérico) evaluamos para cada tiempo (denotado por $F_\theta(t_i)$) y agregamos un ruido $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$. Así la muestra considerada se constituye por

$$y_i = F_\theta(t_i) + \varepsilon_i \tag{3.13}$$

para $i = 1, 2, \dots, n$.

Una vez establecida la muestra y_i , ahora nuestro propósito es abordar el problema inverso, esto es buscamos θ tal que $y_i \approx F_\theta(t_i)$. Del capítulo 2 sabemos que hay varias maneras de abordar el problema, en adelante solamente se usará el enfoque bayesiano del problema inverso.

3.2.1. Forward map

3.2.2. Simulación con MCMC

3.2.3. Resultados

3.3. Inferencia con aproximación.

3.3.1. Regla de interpolación(aproximación de forward map)

3.3.2. Simulación MCMC

3.3.3. Resultados

3.3.4. Experimentación con la convergencia.

En esta sección se abordan las diferentes simulaciones para cada modelo. Empezando por el modelo de gravedad sujeto a fricción, nos interesa la distribución posterior de los parámetros g y b . Con la metodología establecida y usando MCMC con la a priori [Grafico de la priori](#) anteriormente mencionada obtenemos una simulación de la distribución posterior conjunta. Tomando la marginal de cada parámetro y haciendo el histograma para la estimación de la distribución marginal tenemos las siguientes distribuciones posteriores marginales.

Poner la distribución posterior marginal con Forward ordinario

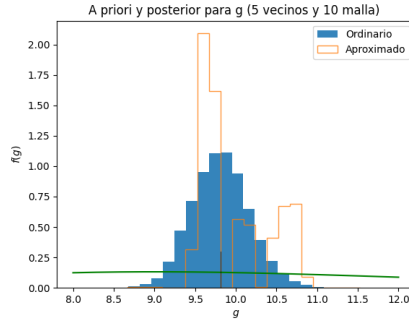
Consideremos ahora la distribución posterior conjunta obtenida con el Forward map aproximado. En este caso, se hace el experimento para la cantidad de 5,8,16 vecinos cercanos y a su vez cada uno de ello haciendo la malla cada vez más fina. Para cada Forward con la cantidad dada de vecinos cercanos se propone una malla en el espacio de parámetros $(g, b) \in \Theta$ de tamaño 10x10, 15x15, 30x30, 50x50.

La muestra inicial de la trayectoria que sigue el modelo se hace mediante simulación desde la misma ecuación diferencial dada por el modelo. Es de nuestra elección la cantidad de muestra n que queremos para la distribución posterior conjunta de los parámetros. Sin embargo, para dicha simulación es necesario fijar dos parámetros, que llamaremos parámetros verdadero y obtener la trayectoria $x_t|\theta$.

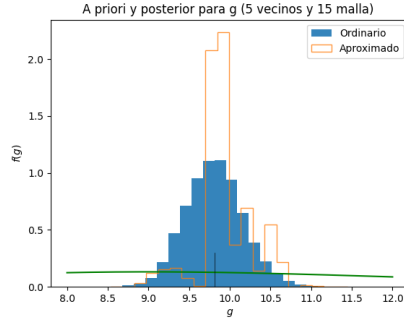
Para la simulación de los datos consideramos una muestra de 30 datos del modelo de gravedad en el intervalo de tiempo $[0, 1.5]$.

Las distribuciones posteriores marginales de g se muestran en las figuras [3.4](#) [3.5](#) [3.6](#)

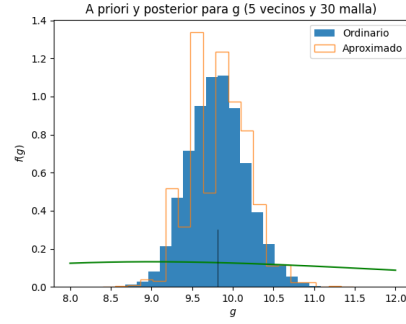
Para el otro parámetro b tenemos las siguientes posteriores



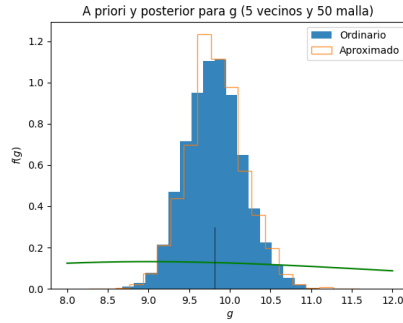
(a) Posterior con Forward aproximado en
malla de 10x10



(b) Posterior con Forward aproximado en
malla de 15x15

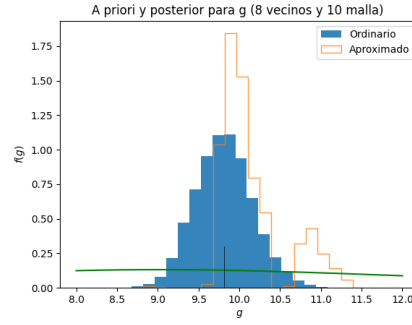


(c) Posterior con Forward aproximado en
malla de 30x30

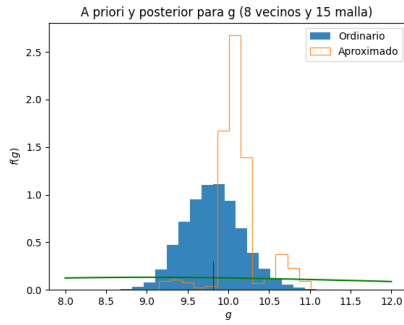


(d) Posterior con Forward aproximado en
malla de 50x50

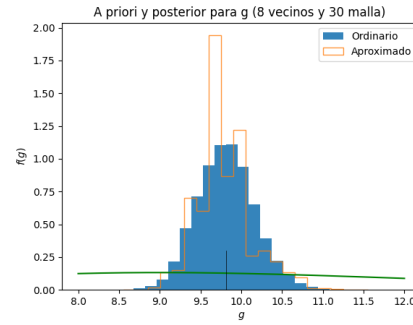
Figura 3.4: Distribución posterior para g con Forward ordinario y Forward aproximado con 5 vecinos cercanos.



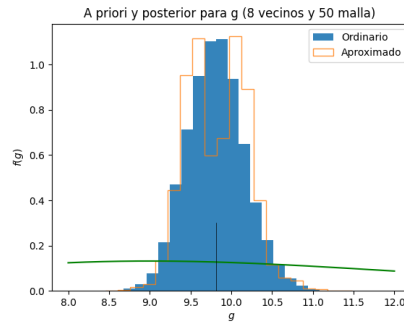
(a) Posterior con Forward aproximado en
malla de 10x10



(b) Posterior con Forward aproximado en
malla de 15x15

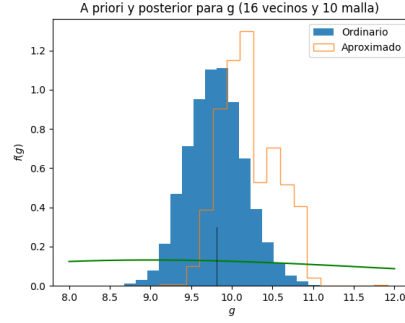


(c) Posterior con Forward aproximado en
malla de 30x30

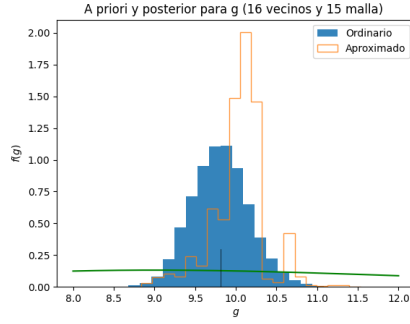


(d) Posterior con Forward aproximado en
malla de 50x50

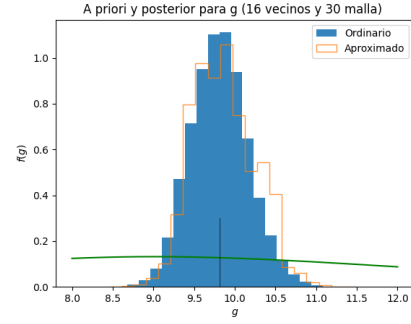
Figura 3.5: Distribución posterior para g con Forward ordinario y Forward aproximado con 8 vecinos cercanos.



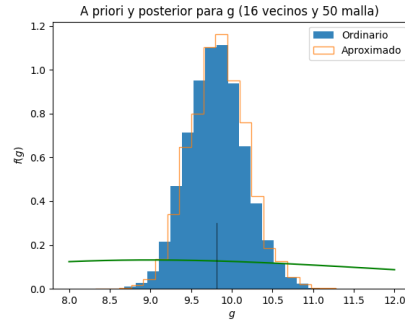
(a) Posterior con Forward aproximado en malla de 10x10



(b) Posterior con Forward aproximado en malla de 15x15

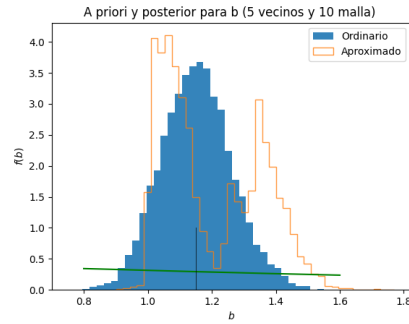


(c) Posterior con Forward aproximado en malla de 30x30

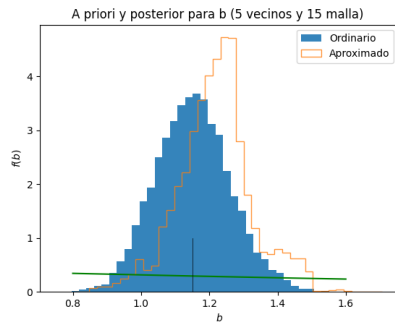


(d) Posterior con Forward aproximado en malla de 50x50

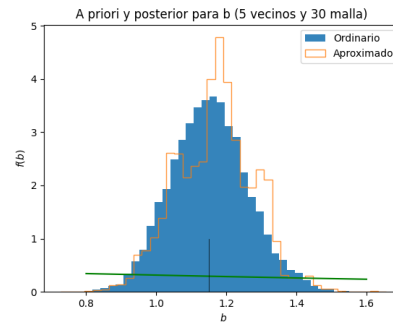
Figura 3.6: Distribución posterior para g con Forward ordinario y Forward aproximado con 16 vecinos cercanos.



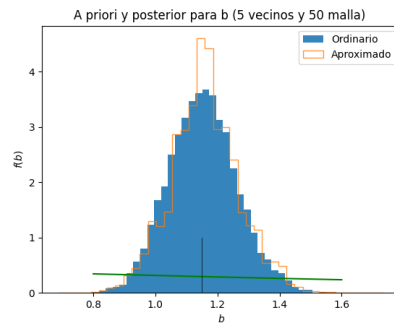
(a) Posterior con Forward aproximado en
malla de 10x10



(b) Posterior con Forward aproximado en
malla de 15x15

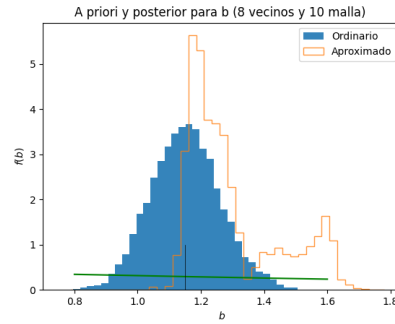


(c) Posterior con Forward aproximado en
malla de 30x30

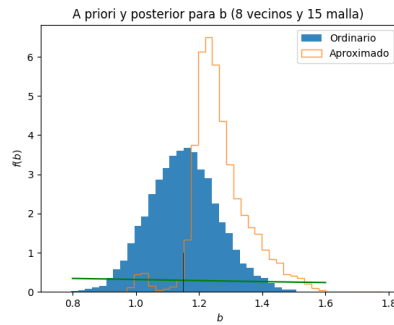


(d) Posterior con Forward aproximado en
malla de 50x50

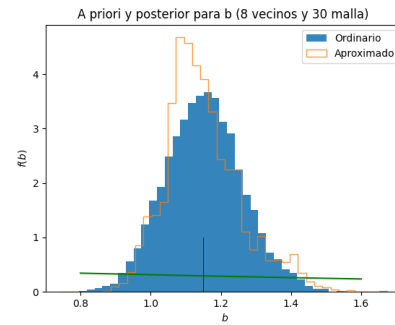
Figura 3.7: Distribución posterior para b con Forward ordinario y Forward aproximado con 5 vecinos cercanos.



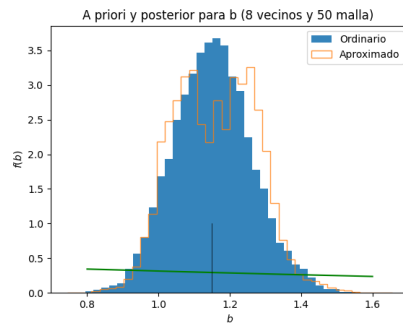
(a) Posterior con Forward aproximado en malla de 10x10



(b) Posterior con Forward aproximado en malla de 15x15

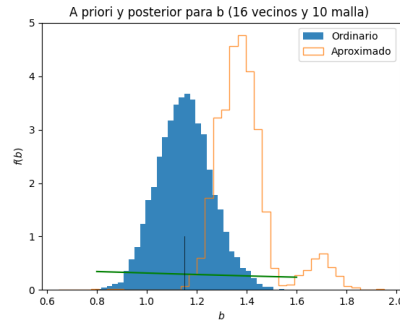


(c) Posterior con Forward aproximado en malla de 30x30

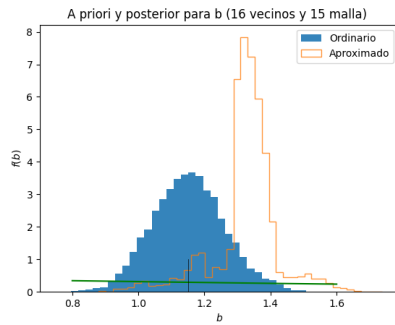


(d) Posterior con Forward aproximado en malla de 50x50

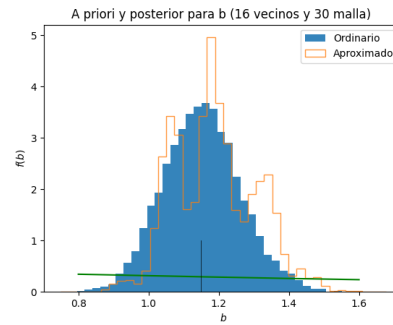
Figura 3.8: Distribución posterior para b con Forward ordinario y Forward aproximado con 8 vecinos cercanos.



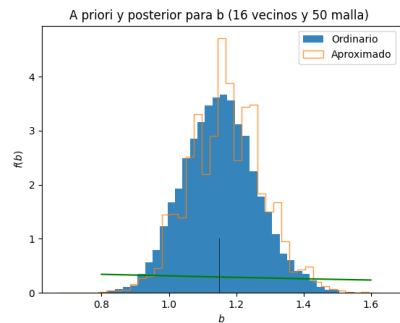
(a) Posterior con Forward aproximado en
malla de 10x10



(b) Posterior con Forward aproximado en
malla de 15x15



(c) Posterior con Forward aproximado en
malla de 30x30



(d) Posterior con Forward aproximado en
malla de 50x50

Figura 3.9: Distribución posterior para b con Forward ordinario y Forward aproximado con 16 vecinos cercanos.

Capítulo 4

Conclusiones y trabajo futuro

Referencias

Sears, F. W., Zemansky, M. W., Young, H. D., Vara, R. H., García, M. G., Gümes, E. R., ... Benites, F. G. (1986). *Física universitaria*. Fondo Educativo Interamericano Naucalpan de Juárez, México.

Apéndice A

Anexo

