Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.

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

Guanajuato, Guanajuato, Verano 2024

*A mi madre **Rosa Cornejo** quien me apoyo emocionalmente y me incentivo a conseguir mis metas.*

*A mi padre **Julio García** quien con su esfuerzo logro darme la oportunidad de perseguir la profesionalización.*

*A mi novia **Zaira Martínez** quien me dío amor y apoyo durante la elaboración de la tesis así como en la maestría.*

Agradecimientos

A mis padres que me apoyaron incondicionalmente confiando en mí dándome el impulso que necesitaba para concluir la maestría antes y durante el periodo de la misma. Agradecer a mi asesor Andrés Christen por su valioso apoyo como asesor, quien además se mostró disponible y generoso. Agradecer a mi novia Zaira Martínez por su apoyo, comprensión y disciplina que nos sacó adelante día con día. A mis compañeros y ahora amigos cuyo apoyo mutuo fue central en nuestro crecimiento denotando sus fuertes valores como el compañerismo, empatía y amistad.

Índice general

Agradecimientos III

Índice de figuras VII

1. Introducción 1

2. Antecedentes 3
- 2.1. Problema inverso 3
- 2.2. Solución bayesiana a problemas inversos 6
- 2.3. Método MCMC 8
- 2.4. Forward map aproximado 11

3. Implementación 15
- 3.1. Modelos de trabajo 15
  - 3.1.1. Modelo Gravitatorio 16
  - 3.1.2. Modelo Logístico 19
  - 3.1.3. Modelo SIR 22
- 3.2. Enfoque bayesiano al problema inverso 23
  - 3.2.1. Distribución posterior 24
  - 3.2.2. Simulación con forward map ordinario 26
- 3.3. Simulación con forward map aproximado 37

4. Conclusiones y trabajo futuro 39

Referencias 41

A. Anexo 43

Índice de figuras

3.1. Varias trayectorias con la dinámica gravitación sujeta a fricción para varias valores de los parámetros g,b. 19
3.2. Varias trayectorias con la dinámica de crecimiento logístico para varias valores de los parámetros K,r. 21
3.3. Trayectoria de cada grupo del modelo SIR con $\beta = 0.009$ y $\gamma = 0.5$. . 23
3.4. Distribuciones marginal a priori para el parámetro g (izquierda) y b (derecha). 28
3.5. Muestra $\mathbf{y}$ del modelo gravitatorio. 29
3.6. Estimación de la distribución posterior conjunta por método MCMC Metropolis-Hastings. 30
3.9. Distribución predictiva del modelo gravitatorio para los valores de tiempo de 0.2s y 0.7s. 30
3.7. Distribución posterior (azul) y distribución a priori (verde) para el parámetros g y b del modelo gravitatorio. 31
3.8. Distribución predictiva para el modelo gravitatorio 32
3.10. Muestra $\mathbf{y}$ para el modelo logístico. 32
3.11. Distribuciones a priori para θ_1 y θ_2 33
3.12. Posterior conjunta para el modelo logístico. 33
3.13. Distribución posterior (azul) y distribución a priori (verde) para el parámetros θ_1 y θ_2 del modelo logístico. 34
3.14. Distribución predictiva para el modelo logístico. 34
3.15. Muestra $\mathbf{y}$ del modelo SIR. 35
3.16. Distribuciones marginal a priori para el parámetro β (izquierda) y γ (derecha). 36
3.17. Distribución posterior conjunta para el modelo SIR. 36
3.18. Distribución posterior (azul) y distribución a priori (verde) para el parámetros β y γ del modelo SIR. 37
3.19. Distribución predictiva para el modelo SIR. 37

Capítulo 1

Introducción

En una amplia gama de disciplinas se utilizan modelos que pretenden describir diversos fenómenos. La inmensa mayoría de estos modelos son matemáticos y establecen relaciones entre variables expresadas mediante ecuaciones dependientes de ciertos parámetros. El tipo de modelos consideraros son aquellos cuyas variables se pueden expresar ya sea en una forma funcional o en forma de ecuación diferencial ordinaria (ODE).

Proceso de modelación

El proceso de modelación de un fenómeno involucra tres sectores principales.Al investigar un fenómeno, se identifican, proponen y prueban las variables que influyen en él. Este proceso, conocido como **parametrización**, implica seleccionar las variables relevantes para la descripción del modelo.

Una vez determinadas las variables del modelo, se establecen explícita o implícitamente las relaciones entre ellas. Se pueden proponer modelos lineales generalizados, series temporales, ecuaciones diferenciales o simplemente ecuaciones algebraicas con las variables y parámetros de ajuste, que en adelante llamaremos simplemente parámetros. Este sector del proceso se conoce como **modelación directa**.

El último sector de la modelación es el **problema inverso**. Como su nombre indica, se refiere a inferir los parámetros del modelo a partir de una muestra del fenómeno modelado. Esto es opuesto al problema directo, que busca describir explícitamente la dinámica del fenómeno a partir de parámetros fijos.

El proceso de modelación no sigue una línea recta. Es por ello que se optó por llamar a sus partes como sectores de modelación en lugar de etapas de modelación, ya que todos estos sectores siguen un camino cíclico según las virtudes de cada modelo en particular.

Una vez aclarado que los modelos considerados son aquellos que pueden expresarse como una ODE dependientes de parámetros, la tesis se centra en el problema inverso desde el enfoque bayesiano. En el capítulo 2 se describe el paradigma bayesiano aplicado al problema inverso. Además de los antecedentes necesarios para hacer de este texto autocontenido.

En el capítulo 3 se describe las implementaciones realizadas para la inferencia bayesiana de los parámetros de tres modelos particulares según el paradigma convencional. Además, se propone un método aproximado para realizar el mismo procedimiento, cuestionando la factibilidad de esta propuesta como sustituto del paradigma original.

Capítulo 2

Antecedentes

En el capítulo precedente relata la estructura subyacente de la modelación. Formalizaremos y detallaremos los lineamientos del sector referente al problema inverso, cuya gestión no es única para cada caso, pues esta sujeto a las vicisitudes del modelo en cuestión. A diferencia de la mayoría de los enfoques al problema inverso, el enfoque bayesiano goza de ser un método apropiado pues para los modelos contemplados aquí la metodología es análoga (Tarantola (2005).)

2.1. Problema inverso

El estudio del problema inverso se remonta a mediados del siglo 17. Los físicos contemporáneos interesados en la relación causa-efecto de diferentes fenómenos físicos lograron predecir el comportamiento en la dinámica intrínseca. Así, para la ley de gravitacional de newton, una vez obtenidas las masas de los cuerpos celestes (causas) es realizable predecir las trayectorias que siguen los cuerpos en el tiempo (efecto). Estudiar los efectos de un fenómeno dada ciertas causas es el problema directo perteneciente al sector de modelación directa. El problema inverso toma la dirección opuesta, dados los efectos, es de interés investigar las causas que lo ocasionaron. Retomando un ejemplo newtoniano, dado un campo gravitatorio circundando cierto cuerpo celeste, es de interés conocer la masa de dicho cuerpo. Enfaticemos que el problema inverso adolece de no ser único, suele ser el caso que a ciertos efectos se correspondas varias causas. el hecho de que no exista una mapeo uno a uno entre causa y efecto complica el problema inverso. Sin embargo, la información que se tenga a priori del fenómeno es crucial para determinar con una menor ambigüedad las causas (Tarantola (2005)).

Modelos descritos por ODEs

Para describir fenómenos los modelos matemáticos pueden ser de una suntuosa cantidad de clases o estilos. Con fines pedagógicos, considere que se desea describir los costos de la renta Y de inmuebles en cierta ciudad (efecto). Supongase que de análisis previos se concluyo que dicho fenómeno esta vinculado al tamaño del inmueble X_1, número de habitaciones X_2, ingreso medio por habitante X_3 (causas). Un modelo plausible es por modelos lineales generalizados

$$Y = G(\beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3) + \varepsilon \tag{2.1}$$

donde G es la función liga, $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ un error aleatorio y $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3)$ son los parámetros del modelo (Dobson y Barnett (2018)). El problema directo considera predecir el valor de Y conociendo $X = (X_1, X_2, X_3)$ y los parámetros del modelo β. Para esta clase de modelos el problema directo no representa complejidad. En contraste, el problema inverso precisa estimaciones de β y σ dada muestras de Y y X, siendo un problema no trivial.

El análisis del problema inverso para modelos en general es bastante amplio. Por ello es necesario restringirlo a una clase menor de modelos, siendo estos los modelos dados por ODEs. Considerese un modelo para describir al dinámica de $y(t)$ a lo largo del tiempo t. Los modelos considerados son aquellos que se pueden expresar de la forma

$$G(t, y(t), y'(t), y''(t), ...) = 0$$

que es una ODE con G una función continua conocida.

Más aún, se puede obtener el análisis del problema inverso para sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias. Esto es

$$\begin{cases} G_1(t, y_1(t), y_1'(t), ..., y_2(t), y_2'(t), ..., y_d(t), y_d'(t), ...) = 0 \\ G_2(t, y_1(t), y_1'(t), ..., y_2(t), y_2'(t), ..., y_d(t), y_d'(t), ...) = 0 \\ \vdots \\ G_d(t, y_1(t), y_1'(t), ..., y_2(t), y_2'(t), ..., y_d(t), y_d'(t), ...) = 0 \end{cases}$$

con $G_1, G_2, ..., G_d$ funciones continuas conocidas (Apostol (2019)).

Observemos que la restricción implica restringir las variables en un soporte continuo, por lo que modelos con variables discretas deben de modificarse. En el capítulo 3 se detallan tres modelos de los cuales se consideraron los análisis del problema inverso. Dentro de estos se consideran modelos como la dinámica de caída libre sujeto a fricción, donde la distancia recorrida en caída se describe por

$$mx''(t) = mg - bx'(t) \tag{2.2}$$

con m, g, b parámetros del modelo.

Por el teorema de existencia y unicidad en ecuaciones diferenciales; dadas las condiciones iniciales, los parámetros del modelo definen unívocamente el modelo (Kelley (2010)). Consideremos el espacio de parámetros Θ que a su vez es la familia de *submodelos* posibles descrito por la ODE.

El problema directo es entonces aquel que dado un $\theta \in \Theta$ obtiene la trayectoria o solución de la ecuación diferencial. Dicho problema esta bien definido, pues resolver la ODE es posible al menos numéricamente. Denotemos por $\mathcal{Y}$ a las soluciones posibles de la ecuación diferencial. De esta forma existe un mapeo del espacio Θ a $\mathcal{Y}$ el cual llamaremos **forward map**. Así, el forward map es

$$\theta \mapsto F(\theta)$$

donde $\theta \in \Theta$ y $F(\theta) \in \mathcal{Y}$.

Para el modelo dado en (2.2) una vez dado $\theta = (m, g, b)$ la solución $x(t) \in \mathcal{Y}$ se obtiene del forward map, que en otras palabras es simplemente la solución analítica o numéricamente de la ecuación diferencial.

2.2. Solución bayesiana a problemas inversos

Principalmente existen dos razones para que las observaciones de un modelo no concuerden exactamente con las predicciones dadas por el mismo. La primera se debe a errores de medición por la incertidumbre de los aparatos de medición. El segundo motivo se debe a los defectos propios del modelo, pues a pesar de que el modelo pretende describir el fenómeno de interés estos nunca son lo mismo. Así se considera la vaga interpretación que jacta a los modelos como aproximaciones de los fenómenos. La relevancia de los errores abre una puerta a la cuantificación de la incertidumbre.

Por otro lado, el paradigma bayesiano para problemas inversos se centra en cuantificar la incertidumbre en los parámetros del modelo.Es decir, su objetivo es establecer una medida de probabilidad posterior a las observaciones de la trayectoria del modelo. Equivalentemente, se busca la distribución de probabilidad $\pi(\theta|\mathbf{y})$ donde $\mathbf{y} = (y_1, ..., y_n)$ son las observaciones de la trayectoria a lo largo del tiempo $t_1, t_2, \cdots, t_n$. Partiendo de la información acerca de los parámetros previo a cualquier observación, se propone una distribución de probabilidad $\pi(\theta)$ llamada distribución a priori, y tras aplicar el Teorema de Bayes obtener la distribución posterior (Wasserman (2013)).

Como ya se ha mencionado, no se espera que las observaciones de la trayectoria coincidan con las predicciones del modelo. En virtud de lo mencionado, ajustamos los errores conforme a una distribución normal. Para modelos dinámicos, aquellos que evolucionan con el tiempo, la predicción se obtiene del forward map con un vector de parámetros $\theta \in \Theta$ dado. De esta forma, obtenemos una función en el tiempo $y(t)$, Es decir, se tiene la igualdad $F(\theta) = y(t)$. Luego, se requieren las predicciones dadas por el modelo a tiempos fijos t_i, la cual simplemente es la evaluación $y(t_i)$, para todo $i \in \{1, ..., n\}$. Usando la notación alterna con el forward map, se tiene $F_\theta(t_i)$ como la predicción a tiempo fijo.

De esta forma, se establece que las discordancias entre observaciones y predicciones siguen una distribución normal de la forma

$$y_i = F_\theta(t_i) + \varepsilon_i, \qquad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2).$$

Dicho ajuste es elegido por antonomasia, debido a la predilección dentro de los de su clase. Cualquier otra distribución o forma funcional para ajustar los errores entre medición y modelo es un tópico interesante, sin embargo sale del propósito de la tesis por lo que se restringe al estudio clásico de ajuste (Berger (2013)).

En consecuencia, se ha establecido una distribución para las observaciones y_i las cuales tienen asociada una verosimilitud sobre θ y σ. Como se consideran errores independientes, pues se tratan de errores de medición, la verosimilitud se sigue de

$$\mathcal{L}(\theta, \sigma) = f(\mathbf{y}|\theta) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \left(y_i - F_\theta(t_i)\right)^2 \right\},$$

simplificando

$$f(\mathbf{y}|\theta) = \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{n/2} \exp\left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - F_\theta(t_i)\right)^2 \right\}, \tag{2.3}$$

Del teorema de Bayes, se obtiene la distribución posterior para los parámetros

$$\pi(\theta|\mathbf{y}) = \frac{f(\mathbf{y}|\theta)\pi(\theta)}{\int f(\mathbf{y}|\theta)\pi(\theta)d\theta}, \tag{2.4}$$

la constante de integración $h(\mathbf{y}) = \int f(\mathbf{y}|\theta)\pi(\theta)d\theta$ es la constante de normalización para la distribución posterior.

Salvo en análisis conjugado, donde la distribución a priori y la distribución posterior pertenecen a la misma familia, la obtención analítica de la constante de normalización $h(\mathbf{y})$ es un problema complejo. De aquí surge la necesidad de métodos numéricos para determinar la distribución posterior con precisión (Robert, Casella, y Casella (1999)).

Utilizar métodos numéricos de integración para $h(\mathbf{y})$ solamente es plausible para modelos de un solo parámetro ($d = 1$), es decir el espacio parametral $\Theta \subset \mathbb{R}$. En el caso de más de un parámetro ($d > 1$) aún es posible usar métodos numéricos, sin embargo tienen un desempeño deficiente.

A mediados del siglo XX, la estadística bayesiana inició un crecimiento sin precedentes tras descubrir e implementar métodos Montecarlo. Los métodos Montecarlo son un conjunto de algoritmos iterativos no deterministas con fin de estimar el valor de cierto calculo. El método Markov Chain Monte Carlo (MCMC) resulta ser conveniente para la estadística bayesiana, no solo porque evita el calculo de la constante de integración $h(\mathbf{y})$ sino por la generalidad que propicia al poder utilizarse para estimar una basta familia de distribuciones. Además, la estimación por este método tiene un error absoluto que decrece como $\frac{1}{N}$ en virtud del teorema del límite central (Casella y Berger (2024)), que es de orden menor que aquellos dados por métodos numéricos de integración. La asiduidad del método MCMC, tras prevalecer en el tiempo, nos da una idea de lo apropiado que es para la estadística bayesiana.

2.3. Método MCMC

Obtener la distribución posterior (2.4) con el método de Markov Chain Monte Carlo (MCMC) evita el calculo numérico de $h(\mathbf{y})$ como se ha mencionado previamente. En su lugar, MCMC estima la distribución posterior con una generosa muestra simulada de la misma distribución posterior salvo la constante de normalización. Por ende, con la misma muestra permite obtener estimaciones a cualquier momento de la distribución posterior asimismo la estimación de las distribuciones marginales. Los métodos MCMC busca encontrar una cadena de Markov $X^{(1)}, X^{(2)}, \cdots$ cuya distribución estacionaria sea la *distribución objetivo* [1] $f(x)$ pese a que la misma no esté normalizada.

[1] En aplicaciones a la estadística bayesiana usando MCMC, la distribución posterior es la distribución objetivo.

Algoritmo Metropolis-Hastings

El algoritmo de Metropolis-Hastings es un método de MCMC para generar muestras de una distribución objetivo $f(x)$ partiendo de muestras de una distribución propuesta $q(y|x)$ que no son necesariamente simétricas. Al igual que todo método MCMC, el algoritmo de Metropolis-Hastings genera una cadena $X_0, X_1, \cdots, X_N$ construyendo recursivamente la cadena dependiendo solamente del estado previo, es decir preservando la propiedad de Markov. El estado inicial X_0 se toma aleatoriamente. Luego, teniendo hasta el estado X_i, el estado X_{i+1} se obtiene siguiendo

1. Generar una propuesta $Y \sim q(y|X_i)$.

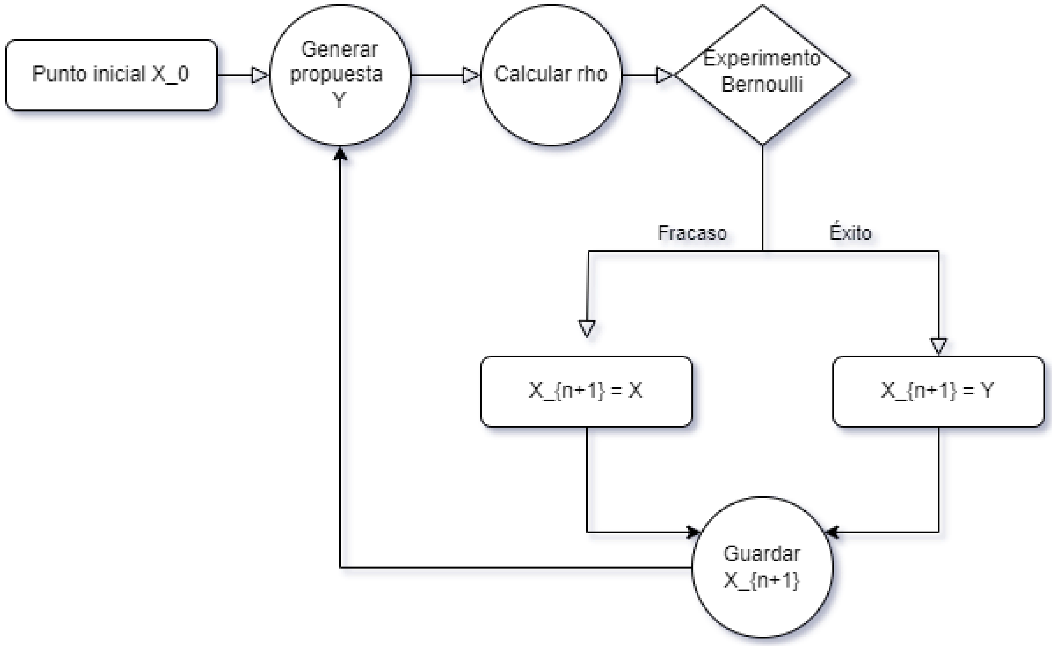
2. Calcular ρ

$$\rho = \text{mín}\left\{\frac{f(y)q(x|y)}{f(x)q(y|x)}, 1\right\}$$

3. Realizar un experimento Bernoulli con probabilidad de éxito ρ.

$$X_{i+1} = \begin{cases} Y & \text{probabilidad}\rho \\ X_i & \text{probabilidad}1-\rho \end{cases}$$

En el siguiente gráfico se muestra un diagrama de flujo del algoritmo Metropolis-Hastings.



El algoritmo previamente esbozado a manera de opúsculo, subrepticiamente converge en distribución estacionaria a la distribución objetivo. Indudablemente dicha convergencia está asegurada por el Teorema Ergódico en cadenas de Markov (Norris (1998)). En beneficio del mencionado teorema, basta con construir una cadena de Markov de estados continuos a tiempos discretos recurrente e irreducible y aperiódica cuyo kernel de transición cumpla con balance detallado con respecto a $f(x)$. Para ahondar en detalles se requiere de un extenso estudio en cadenas de Markov a tiempo discreto con una cantidad numerable no finita de estados, donde en lugar de la usual matriz de transición se usa un operador de salto llamado kernel de transición. Un estudio completo del algoritmo de Metropolis-Hastings se encuentra en (Mengersen y Tweedie (1996)).

Pese a la enrevesada formalización del método, la estructura del algoritmo Metropolis-Hastings basta para dilucidar en ciertos detalles. Primeramente, del paso uno es claro que se debe elegir una distribución asociada a la variable propuesta Y de forma que no sea un problema simular de esta. Además, dado que la propuesta se acepta o rechaza para ser realización de la variable X asociada a la distribución objetivo, entonces se debe eligir una distribución de Y tal que $supp\{X\} \subset supp\{Y\}$, que denota el soporte de la variable Y debe contener el soporte de la variable objetivo X.

Asimismo, el segundo paso del algoritmo Metropolis-Hastings se observa la prescindencia del factor de normalización de la distribución objetivo puesto que solo es relevante el cociente $\frac{f(y)}{f(x)}$, un atributo peculiar de la distribución posterior. Paralelamente, el tercer paso del algoritmo se observa la propiedad de Markov, ya que la aceptación de la propuesta para pertenecer a la cadena depende estocásticamente del estado que lo precede unicamente.

2.4. Forward map aproximado

Hay que destacar que, una vez abordado el enfoque bayesiano para el problema inverso y el método MCMC para obtener la distribución posterior de los parámetros del modelo bajo estudio, el reto a superar recae en la implementación de la metodología descrita. Es preciso tener presente que pese a ser una metodología ampliamente funcional, no se cierra la puerta a inquerir mejoras en su procedimiento. Es por ello que la propuesta principal del trabajo de tesis es la introducción del forward map aproximado.

El forward map aproximado F^*_θ es una construcción multifacética basada en aproximaciones de estadística espacial. Tal aproximación pretende crear una distribución posterior aproximada $\tilde{\pi}(\theta|\mathbf{y})$ con la sustitución del forward map a su versión aproximada, de forma que la simulación de esta nueva distribución posterior sea más eficiente por el algoritmo Metropolis-Hastings.

Construcción del forward map aproximado

Existen diferentes maneras de hacer las aproximaciones del forward map. La forma propuesta es considerar una discretización del espacio de parámetros Θ. Usando coordenadas canónicas, cada $\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^d$ se puede escribir como $\theta = (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_d)$. Consideremos para cada coordenada un intervalo $[\theta_i^{min}, \theta_i^{max}]$ para toda $i \in \{1, \cdots, d\}$, donde θ_i^{min} y θ_i^{max} son cotas para el espacio de parámetros que contenga la masa de probabilidad, puede pensarse en tomar cuantiles de 0.01 y 0.99 respectivamente de la distribución marginal a priori para θ_i. Posteriormente, tomemos una partición equidistante en M puntos para cada coordenada. Más llanamente, la partición de la coordenada $i-$ésima es el conjunto $\mathcal{M}_i = \{\theta_i^{(1)}, \theta_i^{(2)}, \cdots, \theta_i^{(M-1)}, \theta_i^{(M)}\}$ con $\theta_i^{(1)} = \theta_i^{min}$ y $\theta_i^{(M)} = \theta_i^{max}$. De esta forma, la partición crea una malla $\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \times \cdots \times \mathcal{M}_d$ del espacio parametral Θ. Observese que la cardinalidad de $\mathcal{M}$ es de M^d. Denotemos por ϑ a los elementos de $\mathcal{M}$, así el enmallado se constituye de M^d parámetros. Es decir, se establece que $\mathcal{M} = \{\vartheta_1, \vartheta_2, \cdots, \vartheta_{M^d}\}$, notese que $\vartheta_j \in \Theta$ para toda $j \in \{1, \cdots, M^d\}$.

Seguidamente, se requiere evaluar el forward map para cada elemento de $\mathcal{M}$, en la notación acordada se requiere $y_j = F(\vartheta_j)$, con $y_j = y_j(t)$ funciones continuas, que al estar restringidos a modelos dados por ODE es necesario un calculo intermedio. Dicho en otras palabras, solo se resuelven las ecuaciones diferenciales con los parámetros donde el enmallado interseca.

Para terminar, el forward map aproximado para parámetros $\theta \notin \mathcal{M}$ se propone buscar a los k vectores de parámetros ϑ más cercanos en distancia euclideana a θ, denotando estos k vecinos por $\vartheta^{(1)}, \cdots, \vartheta^{(k)}$ cada uno a una distancia $d_1, \cdots, d_k$ de θ, respectivamente; con $d_1 \leq d_2 \leq \cdots \leq d_k$. La aproximación al forward map con k vecinos en una malla con M particiones es

$$\tilde{F}_M^k(\theta) = \sum_{j=1}^{k} \omega_j F\left(\vartheta^{(j)}\right) \tag{2.5}$$

donde $\omega_j = d_j^{-1} / \sum_{i=1}^{k} d_i^{-1}$, que es una suma ponderada inversamente por las distancias, ya que se pretende que parámetros 'lejanos' de θ tengan menor relevancia que los 'cercanos'.

Consistencia y utilidad del forward map aproximado

La preeminencia potencial del uso del forward map aproximado para el estudio del problema inverso reside parcialmente en un menor tiempo de ejecución de la implementación en contraste con su análogo ordinario. Existen modelos de ecuaciones diferenciales cuya implementación del problema inverso bajo enfoque bayesiano toma días en ejecutarse, vease Galaviz (2023). Debido a la reticente necesidad humana en aplicaciones impostergables es imperativo agilizar el tiempo en operación. Concisamente en modelos epidemiológicos la rapidez de acción se torna fundamental como lo fue en la predicción de ocupación hospitalaria por COVID-19 en la zona metropolitana de la CDMX (Capistrán, Capella, y Christen (2020)).

Por otro lado, fuera de las aplicaciones prácticas del método esbozado con el forward map aproximado, es de sumo interés matemático el estudio de la consistencia del método propuesto. Recordemos que tenemos espacio de maniobra para la construcción del forward map aproximado al mover la densidad de puntos en la malla M así como en la cantidad de vecinos k usados para la suma ponderada. De esta misma forma, tras sustituir el forward map aproximado (2.5) en la expresión (2.4) obtenemos la distribución posterior aproximada de los parámetros del modelo. Formalizando, salvo un factor de normalización definimos

$$\tilde{\pi}_M^k(\theta|\mathbf{y}) \propto \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{n/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - F_M^k(\theta)\right)^2\right\}\pi(\theta),$$

la distribución posterior aproximada dado las observaciones $\mathbf{y} = (y_1, \cdots, y_n)$ al tiempo $t_1, \cdots, t_n$; respectivamente. Consideremos que la aproximación a la distribución posterior usando la metodología ordinaria del problema inverso es en efecto una aproximación plausible usando la *distancia de Kullback-Leibler*.

Si $f(x)$ y $g(x)$ son funciones de densidad de probabilidad. La distancia de Kullback-Leibler entre f y g se define como

$$D(f, g) = \int f(x) \log\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right) dx.$$

Se puede mostrar que $D(f, g) \geq 0$ y $D(f, f) = 0$ (Wasserman (2006)). Definamos la distancia entre las distribuciones posteriores como

$$c_M^k = D\left(\pi(\theta|\mathbf{y}), \tilde{\pi}_M^k(\theta|\mathbf{y})\right)$$

Diremos que el forward map aproximado es **consistente** si para una cantidad de vecinos k fijo y conocido, las distancias

$$c_M^k \to 0 \quad \text{a medida que} \quad M \to \infty$$

En el caso de un vecino ($k = 1$) la consistencia es trivial puesto que al hacer la malla más fina, el forward map aproximado será idéntico al forward map ordinario.

El estudio para $k > 1$ requiere de una estructura teórica sobre las cualidades particulares de la ecuación diferencial del modelo en cuestión. De forma que para indagar sobre la consistencia ees necesario usar técnicas heurísticas. En el capítulo siguiente se consideran modelos paramétricos particulares aplicando las metodologías del problema inverso con y sin aproximación para así cotejar empíricamente cierto grado de convergencia.

Capítulo 3

Implementación

La teoría desarrollada referente a la convergencia en problemas inversos con froward map aproximado no es suficientemente general para considerarse un estudio integro. En su defecto se ha optado por un desarrollo heurístico centrado en experimentación con una variedad de parámetros o indicadores estratégicamente seleccionados. En adelante encararemos dos frentes, el primero de ellos es la implementación en código por medio del lenguaje de programación python, donde se tomaran modelos rudimentarios de ecuaciones diferenciales ordinarias. El segundo frente es el estudio de las distribuciones posteriores aproximadas en función de los atributos del forward map aproximado. Cabe enfatizar que parte considerable del trabajo de tesis involucra la ejecución de conocimientos técnicos de programación. La implementación fundamental se encuentra en el enlace adjunto [1].

3.1. Modelos de trabajo

Existen una variedad de modelos a los que se puede aplicar la metodología anteriormente descrita para problemas inversos. 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

[1] Implementación disponible en https://github.com/cesarhttpc/Tesis

posterior, entre otras. Por ello, nos permitiremos enfocarnos en solo tres modelos que son el modelo gravitatorio sujeto a fricción para un partícula en caída, el modelo de crecimiento logístico para una población en crecimiento y finalmente el modelo epidemiológico SIR para brotes de enfermedades de transmisión directa.

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

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

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

$$x(t) = \frac{1}{2}gt^2 + v_0 t + x_0.$$

Véase los detalles del modelo en Alonso y Finn (1970)

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

$$m\ddot{x} = mg - b\dot{x}, \tag{3.2}$$

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 explicita. Otra forma de construir el forward map es utilizando métodos numéricos para resolver la EDO.

En este modelo sí tenemos solución explicita 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

$$m\frac{dv}{dt} = mg - bv, \tag{3.3}$$

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

$$mg - bv_T = 0, \quad \Rightarrow \quad v_T = \frac{mg}{b}, \tag{3.4}$$

de reordenar e integrar (3.3)

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

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

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

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

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

apegándose al método de integración dado por Sears y cols. (1986).

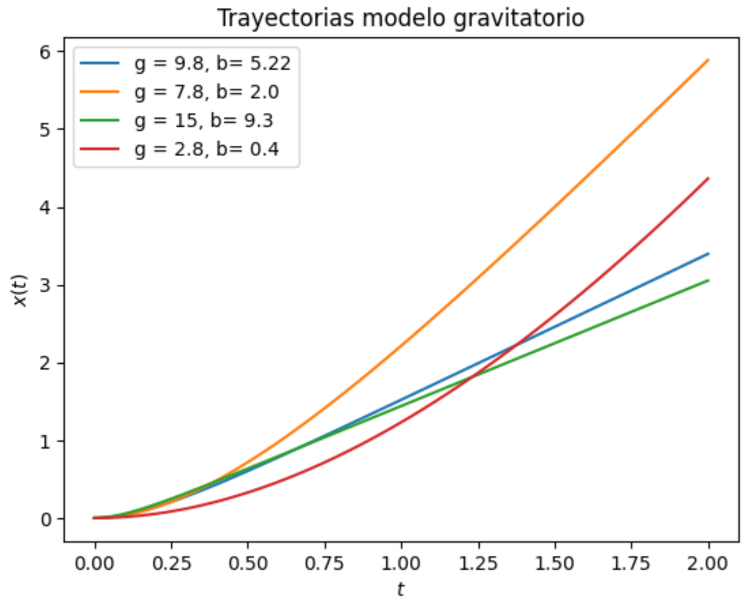


Figura 3.1: Varias trayectorias con la dinámica gravitación sujeta a fricción para varias valores de los parámetros g,b.

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 $x(t_i)$, se busca hacer inferencia de los parámetros $\theta = (g, b)$. La ciencia actual ya da por 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 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

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

donde λ es la tasa de crecimiento donde además se tiene la condición $P(0) = P_0$.

La solución explicita al modelo en (3.8) es

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

que es una función creciente en el tiempo. Sin embargo, este modelo solo es valioso para intervalos de tiempo pequeños, ya que la tasa de crecimiento de una poblacional real tiende a decaer a medida que se consumen los recursos para su sustento.

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 (Zill, Cullen, Hernández, y López (2002))

$$\frac{dP}{dt} = rP\left(1 - \frac{P}{K}\right), \tag{3.9}$$

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 explicita. Notemos que la EDO pertenece a la familia de las EDO de Bernoulli (Apostol (1991)), esto es tiene la forma

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

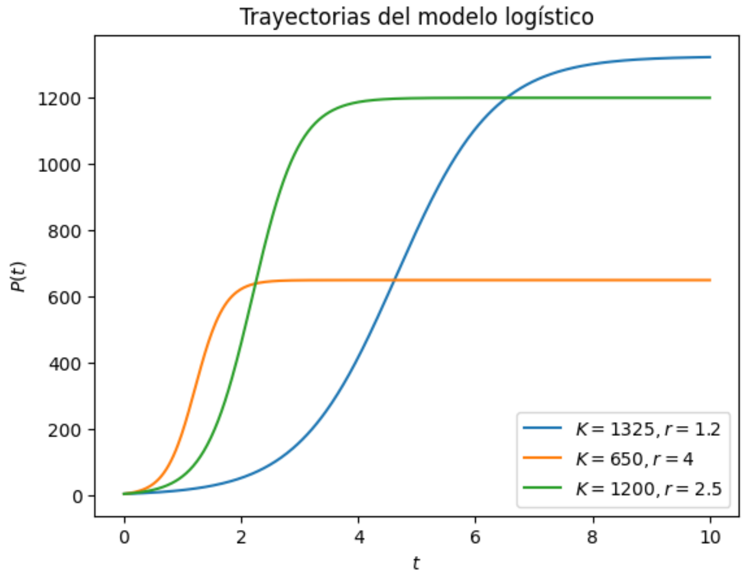


Figura 3.2: Varias trayectorias con la dinámica de crecimiento logístico para varias valores de los parámetros K,r.

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

Por tanto, del cambio $u(t) = P^{-1}$ obtenemos la solución explicita a (3.9)

$$P(t) = \frac{KP_0e^{rt}}{K + P_0\left(e^{rt} - 1\right)}, \tag{3.10}$$

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

Existe otra reparametrización del modelo logístico que simplifica los cálculos en la metodología del problema inverso. Escribiremos que $X(t)$ sigue el crecimiento logístico si satisface

$$\frac{dX(t)}{dt} = \theta_1 X(t)\left(\theta_2 - X(t)\right). \tag{3.11}$$

Con la parametrización dada por

$$\theta_1 = \frac{r}{K}, \qquad \theta_2 = K,$$

recuperamos la expresión dada en (3.9).

En la Fig 3.2 se muestran varias trayectorias del crecimiento poblacional con diferentes parámetros usando la parametrización interpretable en términos de tasa de crecimiento r y poblacional máxima K. Además, vemos que cada trayectoria es no decreciente y tiende asintóticamente al parámetro K.

3.1.3. Modelo SIR

Los modelos epidemiólogos 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): Cantidad de 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 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 $S + I + R = N$ (Weiss (2013)).

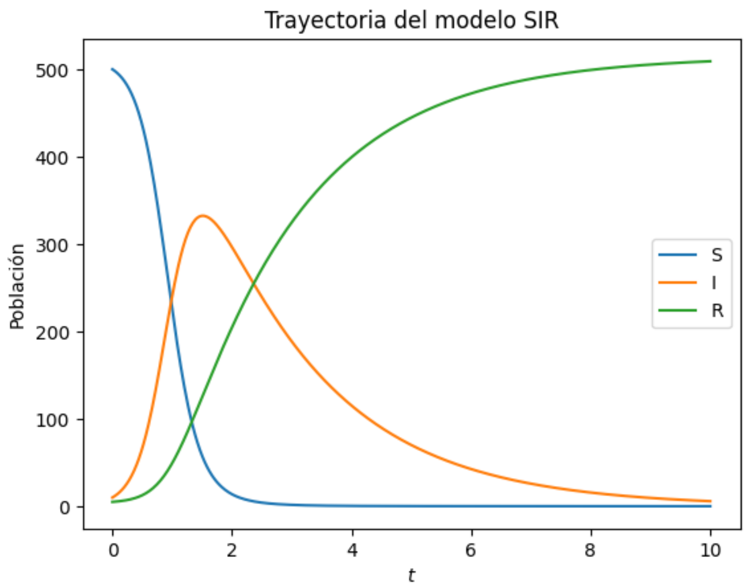


Figura 3.3: Trayectoria de cada grupo del modelo SIR con $\beta = 0.009$ y $\gamma = 0.5$.

La solución explicita para $S(t), I(t), R(t)$ no existe en general, por ello se requieren métodos numéricos (Mathews y Fink (2000)) para resolver numéricamente para cada grupo y poder construir el forward map . La implementación de python usando la paquetería odeint se pude ver en Jiménez Bedolla (2022) y en Griffiths y Higham (2010). En la Fig. 3.3 tenemos un ejemplo para un solo 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 realizar mediciones de caída de un objeto para ciertos tiempos, contar la cantidad de población para cada intervalo de tiempo, o observar los grupos de personas en un brote de cierto patógeno. Denotemos estas observaciones por $y_1, y_2, \cdots, y_n$.

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 $\theta \in \Theta$ fijo, luego consideramos los tiempos a los cuales corresponderá la muestra, denotados por $t_1, t_2, \cdots, t_n$. Posteriormente, con el forward map ordinario F_θ (sin aproximación por vecinos cercanos) 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 $i = 1, 2, \cdots, n$. Dicho de otra forma la muestra contemplada es

$$\{(y_1, t_1), (y_2, t_2), \cdots, (y_n, t_n)\}, \tag{3.14}$$

un conjunto de n tuplas.

Una vez establecida la muestra y_i, ahora el propósito es abordar el problema inverso, esto es, buscamos θ tal que $y_i \approx F_\theta(t_i)$. Ya hemos estudiado el enfoque bayesiano al problema inverso en el capítulo 2, desde luego la implementación obtenida aquí sera inicialmente el caso de forward map ordinario.

3.2.1. Distribución posterior

En la teoría de la estadística bayesiana, el paradigma central se basa en obtener la distribución posterior de los parámetros de interés dada ciertas observaciones a las que hemos denotamos por $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)$. En coordenadas canónicas, el vector de parámetros es $\theta = (\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_d) \in \mathbb{R}^d$. Recordemos de (2.4) que la distribución posterior satisface la ecuación

$$\pi(\theta|\mathbf{y}) \propto f(\mathbf{y}|\theta)\pi(\theta), \tag{3.15}$$

definida salvo una constante en términos de la verosimilitud y la distribución a priori.

El análisis del calculo de la verosimilitud se trató en la sección 2 del capítulo 2.

De la ecuación (2.3) junto con (3.15)

$$\pi(\theta|\mathbf{y}) \propto \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{n/2} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - F_\theta(t_i)\right)^2\right\}\pi(\theta), \tag{3.16}$$

rescatamos la distribución posterior en función del forward map, salvo una constante. De esta forma, resta discutir las cualidades deseadas para los modelos anteriormente descritos.

Para nuestro caso particular, todos los modelos propuestos en la sección precedente dependen de parámetros no negativos, es decir, $\theta_i \geq 0$ para toda $i = 1, \cdots, d$. Incluso algunos de ellos se tiene bastante certeza de su valor, que podría pensarse en ajustar una distribución a priori normal. Sin embargo, ajustar una normal conlleva a tener problemas en el soporte, por lo que puede pensarse en considerar una normal truncada a los positivos, sin embargo está complica innesariamente las expresiones para la distribución posterior.

Finalmente, se opta por proponer distribuciones a priori gamma, debido a que existe una parametrización en la cual se asemeja a una distribución normal pero con el soporte adecuado. La distribución gamma que tiene por máximo a θ_i^* y asemeja una normal es

$$\theta_i \sim Gamma\left(\alpha_i, \frac{\theta_i^*}{\alpha_i}\right), \tag{3.17}$$

con θ_i^* y α_i parámetros conocidos.

La parametrización de la $Gamma(\alpha, \beta)$ es tal que su función de densidad sea

$$f(\theta|\alpha,\beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)}\theta^{\alpha-1}\exp\left\{-\beta\theta\right\},$$

con α, β conocidos.

Como θ_i se proponen independientes, entonces la distribución a priori para θ es

$$\begin{aligned}\pi(\theta|\alpha) &= \pi(\theta_1|\alpha_1)\cdots\pi(\theta_d|\alpha_d)\\ &= \prod_{i=1}^{n}\left[\frac{1}{\Gamma(\alpha_i)}\left(\frac{\theta_i^*}{\alpha_i}\right)^{\alpha_i}\theta_i^{\alpha_i-1}\exp\left\{-\frac{\theta_i^*}{\alpha_i}\theta_i\right\}\right],\end{aligned} \tag{3.18}$$

desarrollando

$$\pi(\theta|\alpha) = \\ \frac{1}{\Gamma(\alpha_1)}\left(\frac{\theta_1^*}{\alpha_1}\right)^{\alpha_1}\theta_1^{\alpha_1-1}\exp\left\{-\frac{\theta_1^*}{\alpha_1}\theta_1\right\}\cdots\frac{1}{\Gamma(\alpha_d)}\left(\frac{\theta_d^*}{\alpha_d}\right)^{\alpha_d}\theta_d^{\alpha_d-1}\exp\left\{-\frac{\theta_d^*}{\alpha_d}\theta_d\right\}, \tag{3.19}$$

con $\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_p)$ y $\theta^* = (\theta_1^*, \cdots, \theta_d^*)$ conocidos.

Sustituyendo (3.18) en (3.16) se tiene la forma funcional de la distribución posterior

$$\pi(\theta,\sigma|\mathbf{y}) \propto \\ \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{n/2}\exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - F_\theta(t_i))^2\right\}\prod_{i=1}^{n}\left[\frac{1}{\Gamma(\alpha_i)}\left(\frac{\theta_i^*}{\alpha_i}\right)^{\alpha_i}\theta_i^{\alpha_i-1}\exp\left\{-\frac{\theta_i^*}{\alpha_i}\theta_i\right\}\right] \tag{3.20}$$

Notemos que la distribución en (3.20) no pertenece a una familia conocida. Para lidiar con este problema usamos métodos Monte Carlo. Más precisamente, podemos simular de la distribución posterior (3.20).

3.2.2. Simulación con forward map ordinario

Al incursionar a la estadística bayesiana se aprende que se puede obtener la distribución posterior por medio del famoso análisis conjugado. Es decir se propone una distribución a priori convenientemente para que la distribución posterior pertenezca a la misma familia. Sin embargo, el análisis conjugado puede ser no trivial o incluso no existir. Por ello es que simular de la distribución posterior con MCMC (Markov Chain Monte Carlo) es la via optima para tener una muestra $(X_i, i \in \{1, \cdots, T\})$

de dicha distribución, con la podemos estimar cualquier momento de la distribución. Si estamos interesados en obtener la media de X, en beneficio de la ley de grandes números (Van der Vaart (2000)), podemos estimar como

$$\mathbb{E}[X] \approx \frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T} X_i \tag{3.21}$$

De igual forma si estamos interesados en la media del estadístico $h(X)$ para un función h arbitraria, se estima por

$$\mathbb{E}[h(X)] \approx \frac{1}{T}\sum_{i=1}^{T} h(X_i) \tag{3.22}$$

donde X_i es la i-ésima simulación de la distribución posterior por Metropolis-Hastings.

La distribución objetivo que se implementa en el MCMC es la distribución posterior (3.20). Recordemos que la distribución posterior depende del forward map $F_\theta(t_i)$ obtenido de evaluar los tiempos de la muestra. Recordemos que $F_\theta(t_i)$ es la version discretizada de F_θ. Sea $\theta \in \mathbb{R}^d$ la función

$$\theta \mapsto F_\theta = x(t) \tag{3.23}$$

tal que $x(t)$ es la solución de la ecuación diferencial ordinaria $x(t) = G(t, x(t), x'(t), x''(t) \cdots)$ del modelo bajo consideración.

Simulación del modelo gravitatorio

Para poder hacer simulaciones, es necesario determinar completamente la distribución posterior. El Forward map para el modelo gravitatorio es $F_\theta = F(g, b) = x(t)$ con la ecuación diferencial de la dinámica gravitacional dada en (3.2) o equivalentemente en (3.7).

Además, es necesario saber como abordar el caso de la desviación estándar σ. En esencia existen dos formas, pensar en σ como parámetro conocido, por lo que no es necesario hacer inferencia, manteniendo la distribución posterior tal como se ha detallado. En el otro caso es para σ desconocida, al no tener certeza de su valor esta es agregada a los parámetros a inferir. Siguiendo el paradigma bayesiano, se establece una distribución a priori para σ independiente de la distribución a priori para θ. En otras palabras, ahora la distribución posterior depende de $d+1$ parámetros. Sin embargo para fines de esta tesis, nos abstendremos de los casos en los que σ es desconocida.

De esta manera, la distribución posterior (3.20) tendrá como variables unicamente al vector de parámetros θ, al ser una EDO dependiente solamente de g y b se sigue que $\theta = (g, b)$ siendo un vector en $\mathbb{R}^d$ con $d = 2$. Además es necesario definir las constantes para las distribuciones a priori gamma.

Consideremos las distribuciones a priori (3.17) como

$$g \sim Gamma\left(\alpha, \frac{\theta_1^*}{\alpha}\right) \tag{3.24}$$

$$b \sim Gamma\left(\beta, \frac{\theta_2^*}{\beta}\right) \tag{3.25}$$

con $\alpha = 10$, $\beta = 1.1$ con máximo en $\theta_1^* = 10$ y $\theta_2^* = 2$. Podemos observar las distribuciones a priori en la Fig. 3.4.

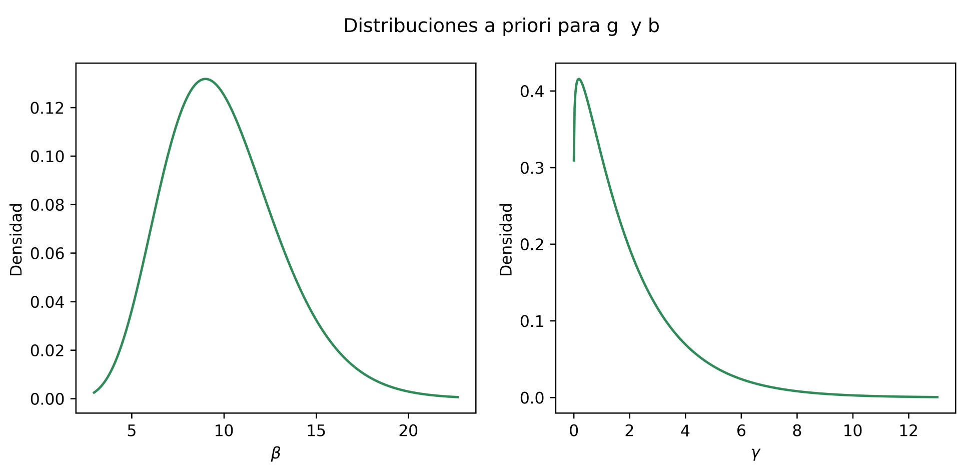


Figura 3.4: Distribuciones marginal a priori para el parámetro g (izquierda) y b (derecha).

Ahora, generamos una muestra $\mathbf{y}$ del forward map gravitatorio y agregamos un ruido gaussiano con $\sigma = 0.1$ obteniendo la muestra como en la Fig. 3.5.

Luego, con la metodología propuesta, usando el algoritmo MCMC Metropolis-

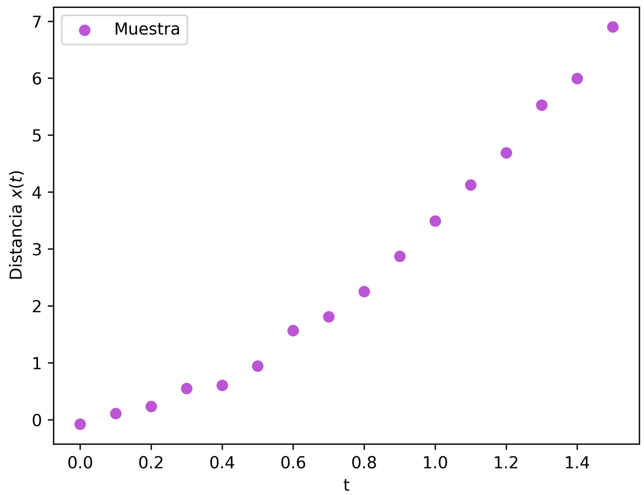


Figura 3.5: Muestra $\mathbf{y}$ del modelo gravitatorio.

Hastings (Christen y Fox (2010)) para una cadena de tamaño $T = 600,000$ y un burn in de 20,000 tenemos que la trayectoria seguida en el espacio de parámetros $\theta = (g, b)$ para la distribución posterior (conjunta) es el mostrado en la Fig. 3.6. Notemos que dicha posterior tiene alta correlación entre parámetros. Esto tiene la interpretación física que para valores altos de g es necesario tener más fricción b con el medio para la misma trayectoria $\mathbf{y}$.

Es de interés las marginales de la distribución posterior. Dado que la simulación de la cadena es bidimensional, de (3.22) tomamos $h_1(X_1, X_2) = 1_{\{X_1\}}$ y $h_2(X_1, X_2) = 1_{\{X_2\}}$, dicho de otra forma, simplemente tomamos el histograma sobre una componente de la cadena dada por MCMC. Podemos ver las estimaciones a las distribuciones marginales posteriores para los parámetros g y b en Fig. 3.7a y Fig. 3.7b

Finalmente, es de interés observar la distribución que puede generar las curvas predictivas. Es decir, de la cadena X_t fruto de MCMC, tomamos submuestreos en intervalos $X_{[iN,(i+1)N]}$ para tomar estimaciones puntuales (media) de g y b y así aplicar el forward map para cada estimación. Dicho de otra forma, la información obtenida de la distribución posterior se desea transmitir directamente a la trayectoria, generando así distribuciones sobre las mismas.

En la Fig. 3.8 se muestra en azul claro los distintos forward map F_θ con varias

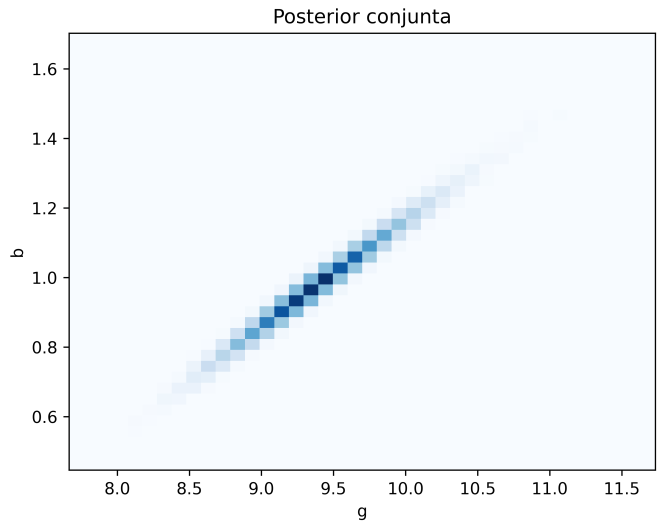


Figura 3.6: Estimación de la distribución posterior conjunta por método MCMC Metropolis-Hastings.

realizaciones de $\theta|\mathbf{y}$ dada por la estimación de la distribución posterior por Metropolis-Hastings, mientras que en azul oscuro se muestra el forward map de partida, es decir, de donde se realizaron las simulaciones para generar $\mathbf{y}$ (morado). Por tanto, notamos que de cierta forma, la información de la distribución posterior contiene a la simulación inicial.

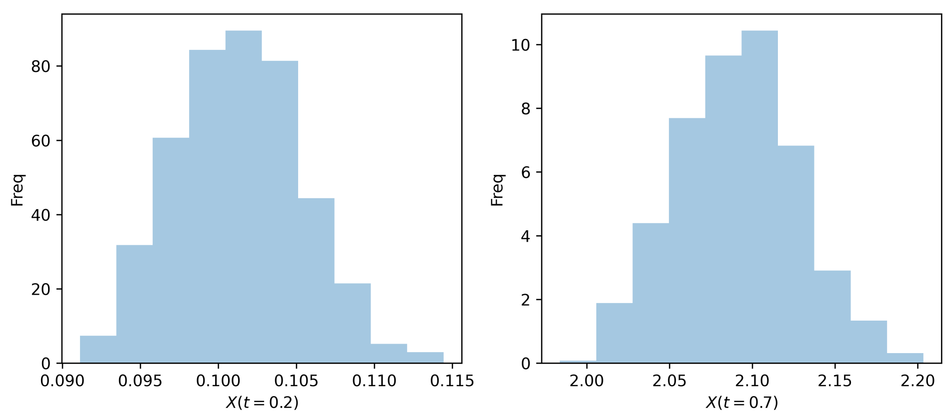
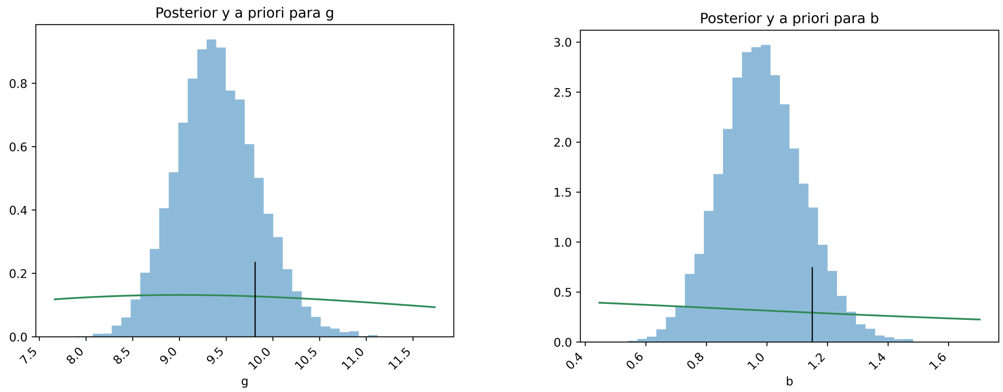


Figura 3.9: Distribución predictiva del modelo gravitatorio para los valores de tiempo de 0.2s y 0.7s.

Más aún, para ejemplificar la distribución predictiva, considere dos valores fijos de t y tomese cortes verticales de la distribución predictiva. En la Fig. 3.9 nos muestra



(a) Posterior para g. **(b)** Posterior para b.

Figura 3.7: Distribución posterior (azul) y distribución a priori (verde) para el parámetros g y b del modelo gravitatorio.

para el tiempo $t = 0.2s$ y $t = 0.7s$ la distribución de probabilidad de la posición de la partícula afectada por la gravedad en ese momento de tiempo.

Simulación del modelo logístico

En el modelo gravitacional tenemos un ejemplo de simulación del problema inverso donde las unidades de los parámetros difieren por un orden de magnitud a lo sumo, ya que las estimaciones del parámetro g es aproximadamente 10 veces más grande que las estimaciones del parámetro b en el sistema de unidades métrico decimal. Por tanto, es de interés trabajar un modelo cuyas estimaciones de los parámetros tengan un amplio margen de diferencia. El modelo logístico con la parametrización dada en (3.11) el parámetro θ_2 difiere en seis ordenes de magnitud respecto al parámetro θ_1 [2]. En secciones posteriores retomaremos algunos comentarios respecto a esta clase de modelos.

Siguiendo la metodología ordinario para la resolución del problema inverso en el modelo, con la base de datos simuladas del mismo considerando $\theta_1 = 0.001$ y $\theta_2 = 1000$ con un ruido gaussiano aditivo de desviación estándar $\sigma = 30$ graficado en la Fig. 3.10.

[2]Para una población suficientemente grande y con una moderada tasa de crecimiento.

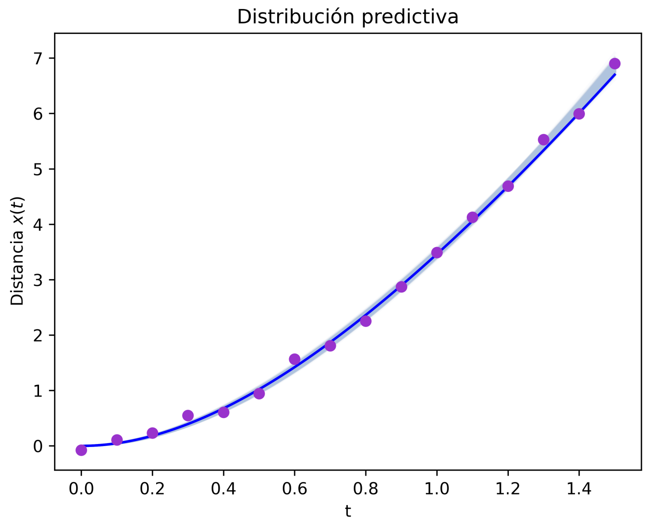


Figura 3.8: Distribución predictiva para el modelo gravitatorio

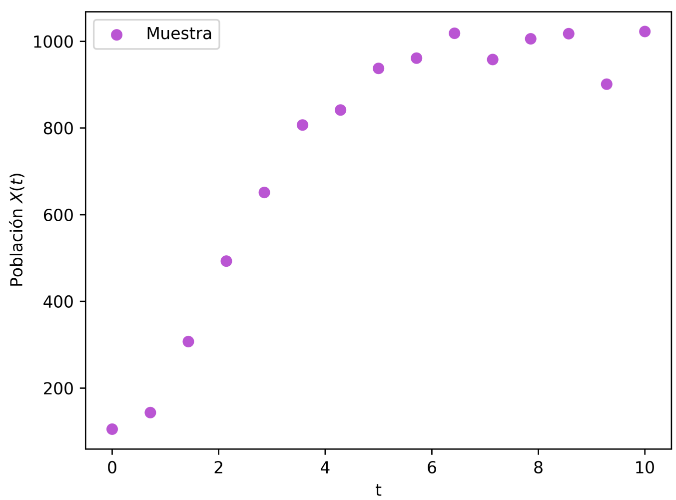


Figura 3.10: Muestra **y** para el modelo logístico.

Posteriormente, definamos las constantes (3.17) de las distribuciones gamma a priori. Seleccionemos las constantes semejantes a las simuladas (fines ilustrativos), cuyas graficas se muestran en la Fig. 3.11

De esta forma, análogo al modelo gravitacional, generamos una cadena con la implementación del algoritmo Metropolis-Hastings dado por Christen y Fox (2010) con $T = 600,000$ iteraciones y un burn in de 20,000 estados. La distribución posterior,

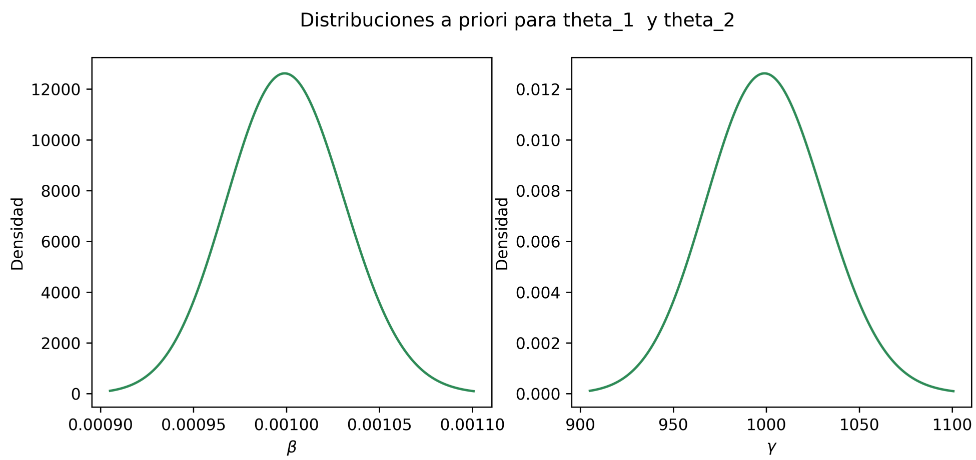


Figura 3.11: Distribuciones a priori para θ_1 y θ_2

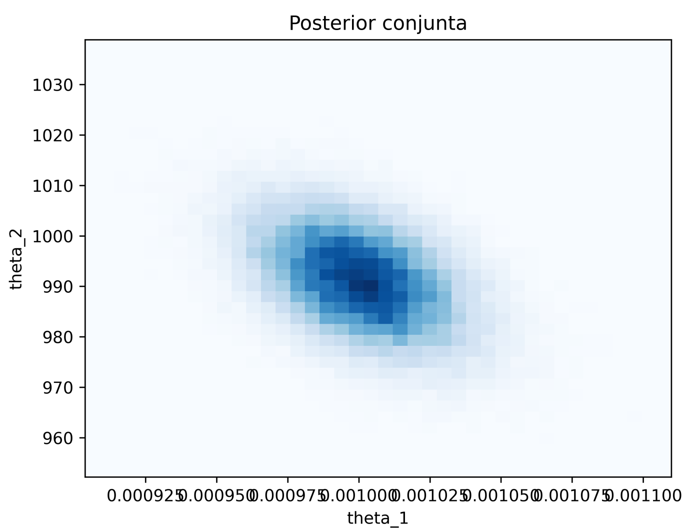
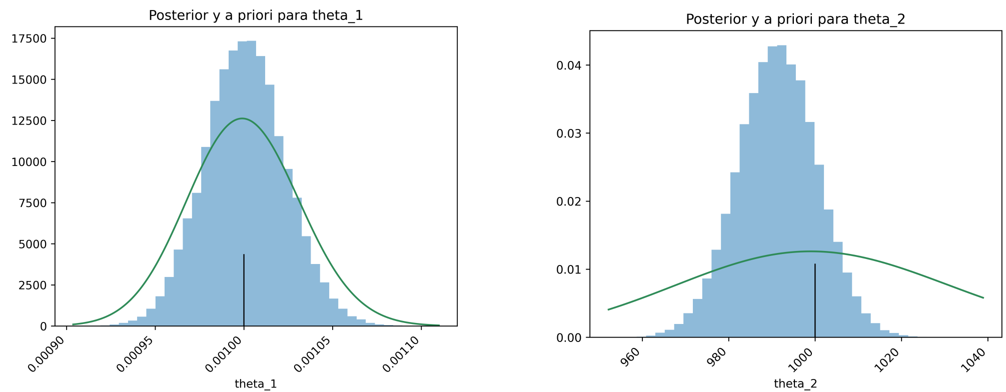


Figura 3.12: Posterior conjunta para el modelo logístico.

Fig. 3.12, muestra una forma acampanada ligeramente simétrica con una sutil correlación negativa entre parámetros. Las distribución marginal para θ_1 y θ_2 se muestran en la Fig. 3.13a y 3.13b.

Finalmente, el análisis concluye con la distribución predictiva dada por el forward map tomando estimaciones puntuales de la distribución posterior, en la Fig. 3.14 notamos que la distribución tiene una varianza mayor que en el modelo gravitacional, además de observar que la trayectoria de partida (azul oscuro) se encuentra incluida en la predicción dada por el problema inverso.



(a) Posterior para θ_1.

(b) Posterior para θ_2.

Figura 3.13: Distribución posterior (azul) y distribución a priori (verde) para el parámetros θ_1 y θ_2 del modelo logístico.

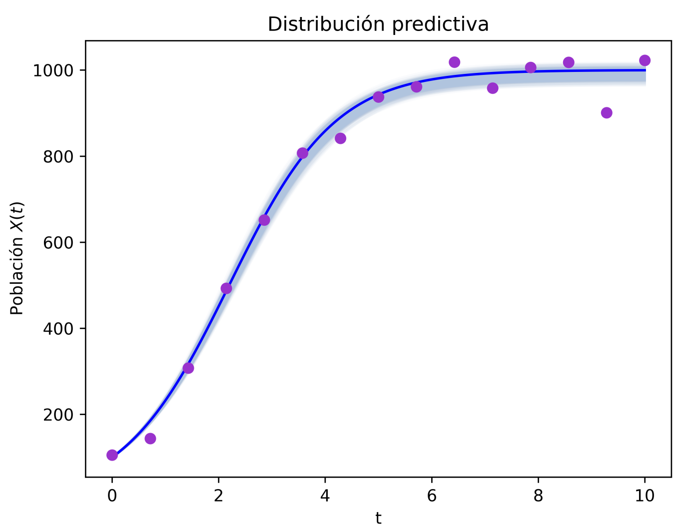


Figura 3.14: Distribución predictiva para el modelo logístico.

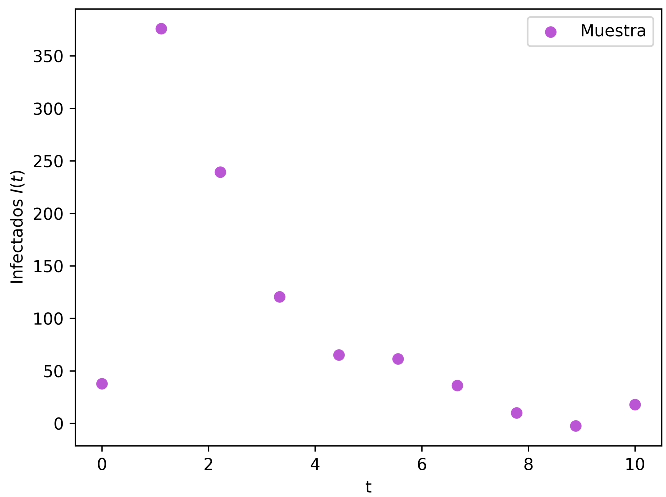


Figura 3.15: Muestra $\mathbf{y}$ del modelo SIR.

Simulación del modelo SIR

Para el modelo epidemiólogico tomamos una muestra de $n = 10$ observaciones de infectados en una población cerrada a lo largo del tiempo. Al igual que los modelos previos, dichas observaciones son simulaciones del forward map con ruido gaussiano. En la Fig. 3.15 vemos la grafica de la muestra de infectados, notamos que tienen un rápido crecimiento para después decaer suavemente.

Para abordar el problema inverso establezcamos los parámetros que se desea hacer inferencia. El espacio parametral se conforma por $\theta = (\beta, \gamma)$ donde $\beta > 0$ es la tasa de infección y $\gamma > 0$ es la tasa de recuperación dados en (3.12). Nuevamente como se trata de parámetros positivos usamos la distribución a priori (3.17). Podemos rescatar un conocimiento a priori sobre su distribución previo a los datos (Weiss (2013)). La elección considera para las distribuciones gamma a priori son mostradas en la Fig. 3.16.

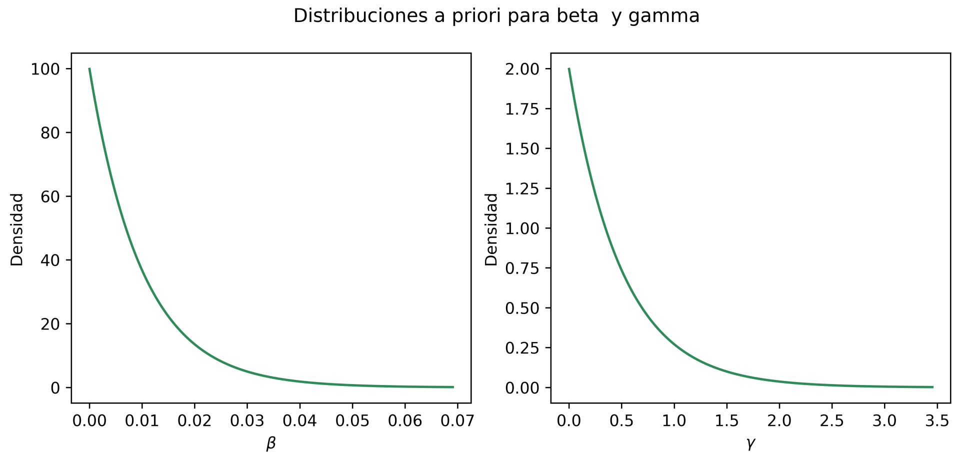


Figura 3.16: Distribuciones marginal a priori para el parámetro β (izquierda) y γ (derecha).

Análogamente a los modelos previos, una vez obtenida la forma funcional de la distribución posterior, usando el algoritmo Metropolis-Hastings para una cadena de tamaño $T = 600,000$. La distribución posterior dada se muestra en la Fig. 3.17 que muestra una forma de media luna concentrada en el borde izquierdo.

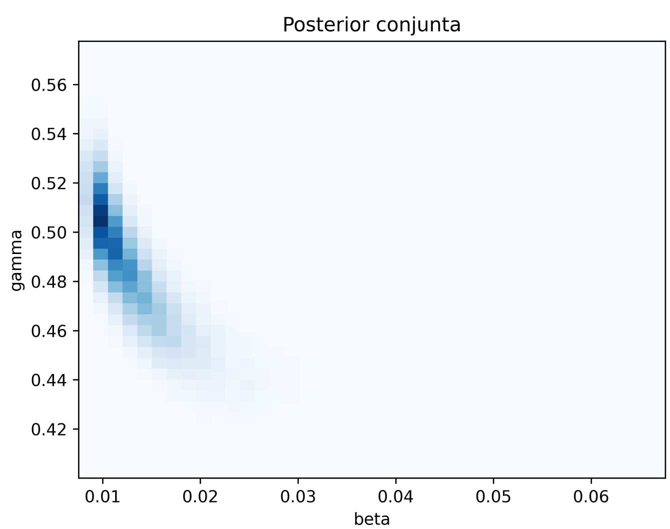
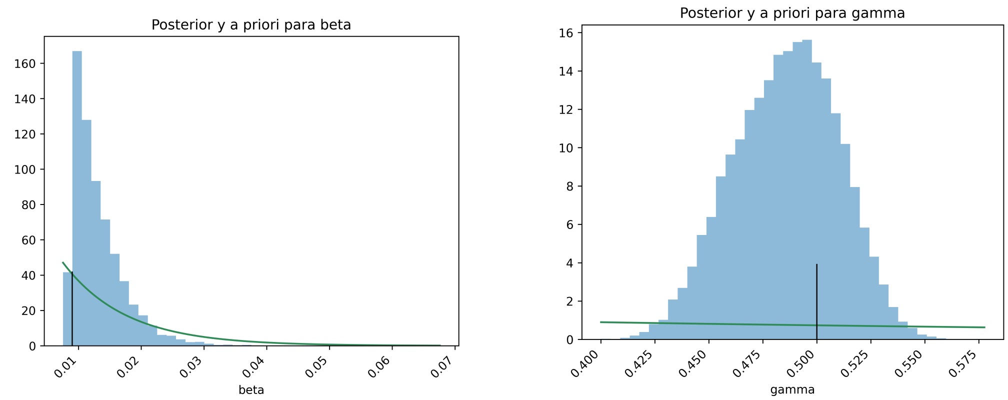


Figura 3.17: Distribución posterior conjunta para el modelo SIR.

Para observar la distribución para cada parámetro se toma la distribución marginal, respectivamente. Observemos de la Fig. 3.18a y Fig. 3.18b la distribución de β se aglomera en valores cercanos a cero, mientras que para γ tenemos bastante diferencia respecto a la distribución a priori.



(a) Posterior para β.

(b) Posterior para γ.

Figura 3.18: Distribución posterior (azul) y distribución a priori (verde) para el parámetros β y γ del modelo SIR.

Tomando realizaciones $\theta_j = (\beta_j, \gamma_j)$ de la distribución posterior para luego calcular $F(\theta_j)$ nos da la distribución vista para la cantidad de infectados en tiempo arbitrario dado por el modelo SIR. Tal gráfico dado en Fig. 3.19 vemos que el modelo (azul fuerte) se encuentra incluido en las distribuciones de infectados.

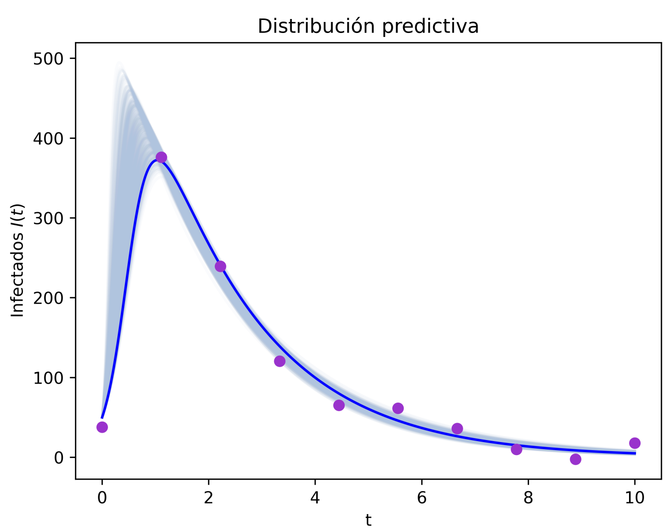


Figura 3.19: Distribución predictiva para el modelo SIR.

3.3. Simulación con forward map aproximado

Capítulo 4

Conclusiones y trabajo futuro

Las aproximaciones de la distribución posterior dadas por las aproximaciones del forward map son en general útiles y simples de manejar. En cada uno de los tres modelos estudiados se llego a que existe una aproximación decente con un menor tiempo de ejecución. Sin embargo, aunque es cierto que comparaciones uno a uno el método aproximado es mejor en tiempo de ejecución, debe de considerarse también el tiempo en conjunto necesario para conocer la mejor aproximación. Puesto que se realizaron los experimentos del forward map con la misma cantidad de vecinos y número de puntos en enmallado, y además encontramos que en cada uno de ellos se obtuvo una aproximación buena con la malla de tamaño 50x50 con 3 vecinos, suponemos que esto sucede en una amplia gamma de modelos. Así, al analizar un nuevo modelo, tomamos simplemente la aproximación mencionada esperando una mejora sustancial del tiempo de ejecución.

Existen varias maneras de implementar un mejor algoritmo, una de ellas considerada a futuro es la creación de mallas no rectangulares, que además se vaya construyendo de forma adaptativa, esto quiere decir que se deje correr la cadena del algoritmo Metropolis-Hastings de forma ordinaria una cantidad fija de iteraciones y en cada paso se construya la malla. Esto con la idea de que los puntos de la discretización que son poco probables no se vean sobre-representados.

Referencias

Alonso, M., y Finn, E. J. (1970). Física: Volumen i: Mecánica.

Apostol, T. M. (1991). *Calculus, volume 1*. John Wiley & Sons.

Apostol, T. M. (2019). *Calculus ii: cálculo con funciones de varias variables y álgebra lineal, con aplicaciones para ecuaciones diferenciales y probabilidad*. Reverté.

Berger, J. O. (2013). *Statistical decision theory and bayesian analysis*. Springer Science & Business Media.

Capistrán, M. A., Capella, A., y Christen, J. A. (2020). Forecasting hospital demand during covid-19 pandemic outbreaks. *arXiv preprint arXiv:2006.01873*.

Casella, G., y Berger, R. (2024). *Statistical inference*. CRC Press.

Christen, J. A., y Fox, C. (2010). A general purpose sampling algorithm for continuous distributions (the t-walk).

Dobson, A. J., y Barnett, A. G. (2018). *An introduction to generalized linear models*. Chapman and Hall/CRC.

Galaviz, A. (2023). *A physics-based surrogate model in inverse problem* (PhD thesis). Centro de Investigación en Matemáticas, Guanajuato, Guanajuato. (Available at https://www.cimat.mx/Aplicaciones/biblioteca/TD/Pub/)

Griffiths, D. F., y Higham, D. J. (2010). *Numerical methods for ordinary differential equations: initial value problems* (Vol. 5). Springer.

Jiménez Bedolla, J. C. (2022). *Métodos numéricos usando python*. Universidad Nacional Autónoma de México.

Kelley, W. G. (2010). *The theory of differential equations*. Springer.

Mathews, J., y Fink, K. (2000). *Métodos numéricos*. Madrid: Prentice Hall.

Mengersen, K. L., y Tweedie, R. L. (1996). Rates of convergence of the hastings and metropolis algorithms. *The annals of Statistics*, *24*(1), 101–121.

Norris, J. R. (1998). *Markov chains* (n.º 2). Cambridge university press.

Robert, C. P., Casella, G., y Casella, G. (1999). *Monte carlo statistical methods* (Vol. 2). Springer.

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.

Tarantola, A. (2005). *Inverse problem theory and methods for model parameter estimation.* SIAM.

Van der Vaart, A. W. (2000). *Asymptotic statistics* (Vol. 3). Cambridge university press.

Wasserman, L. (2006). *All of nonparametric statistics.* Springer Science & Business Media.

Wasserman, L. (2013). *All of statistics: a concise course in statistical inference.* Springer Science & Business Media.

Weiss, H. H. (2013). The sir model and the foundations of public health. *Materials matematics*, 0001–17.

Zill, D. G., Cullen, M. R., Hernández, A. E. G., y López, E. F. (2002). *Ecuaciones diferenciales con problemas de valores en la frontera* (Vol. 1). Thomson.

Apéndice A

Anexo