Protocolo de Tesis

Cuantificación de incertidumbre bayesiana aproximada en problemas inversos de ODE

César Isaí García Cornejo
Asesor: Dr. José Andrés Christen Gracia

CIMAT

Introducción

Introducción

Los modelos que pretendan describir los fenómenos naturales deben ser causales, respetando orden entre causa y efecto.

Típicamente, los modelos matemáticos precisan de condiciones iniciales o parámetros para caracterizar la unicidad en su solución. Tales parámetros se conocen como parámetros del modelo y se interpretan como causas del fenómeno modelado. Mientras que la solución del modelo se interpreta como la predicción del fenómeno, que se asocia a los efectos.

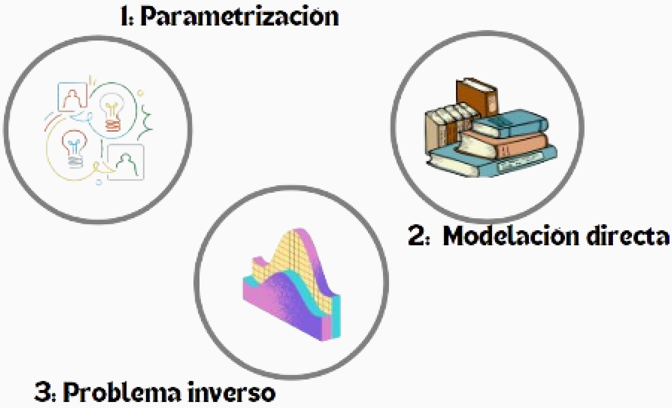
Introducción

El proceso anteriormente descrito se llama problema directo o *forward problem* ya que sigue la dirección de causalidad. Sin embargo, es interesante también el problema inverso, dada ciertas observaciones de las cualidades de un fenómeno (efectos), **¿es posible calcular las causas del modelo que rige el fenómeno?**

Antecedentes

Sistema físico

Estudio de un sistema físico:



Forward map

El problema directo:

Predecir los valores de las observables físicos $\mathbf{d}$ que corresponde a un modelo $\boldsymbol{\theta}$

$$\boldsymbol{\theta} \quad \mapsto \quad \mathbf{d} = \mathbf{F}(\boldsymbol{\theta})$$

Incertidumbre de las mediciones e imperfecciones del modelo [2].

Ejemplos

Resorte sujeto a fricción
Sea $x(t)$ la posición

$$m\ddot{x} = -kx + b\dot{x}$$

Forward map

$$\theta = (k, b) \quad \mapsto \quad F(\theta) = x(t)$$

Caída sujeto a fricción
Sea $x(t)$ la posición

$$m\ddot{x} = g - b\dot{x}$$

Forward map

$$\theta = (g, b) \quad \mapsto \quad F(\theta) = x(t)$$

Crecimiento poblacional
Sea $P(t)$ el tamaño de población

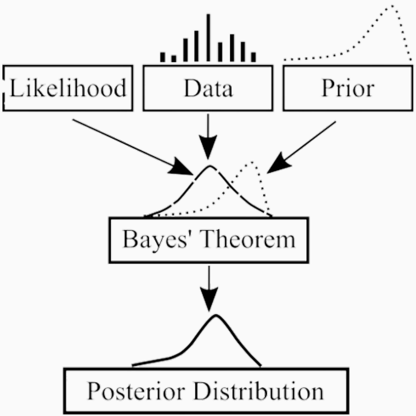
$$\frac{dP}{dt} = rP\left(1 - \frac{P}{K}\right)$$

Forward map

$$\theta = (r, K) \quad \mapsto \quad F(\theta) = P(t)$$

La distribución posterior

$$\pi(\theta|x^n) \propto \mathcal{L}(\theta|x^n)\pi(\theta)$$



Incertidumbre en los errores

Procedimiento:

- **Observaciones:** $(x_1, t_1), (x_2, t_2), \cdots, (x_n, t_n)$
- Cuantificar el error mediante la relación

$$x_i = F_\theta(t_i) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \ldots, n$$

- Un supuesto convencional sobre los errores

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

Inferencia

Distribución posterior

$$
\begin{aligned}
\pi(\theta|x^n) &\propto \mathcal{L}(\theta|x^n)\pi_\Theta(\theta) \\
&\left[\propto \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\left(x_i - F_\theta(t_i)\right)^2\right)\right]\pi_\Theta(\theta) \\
&\propto \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{n/2} exp\left(\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}\left(x_i - F_\theta(t_i)\right)^2\right)\pi_\Theta(\theta)
\end{aligned}
$$

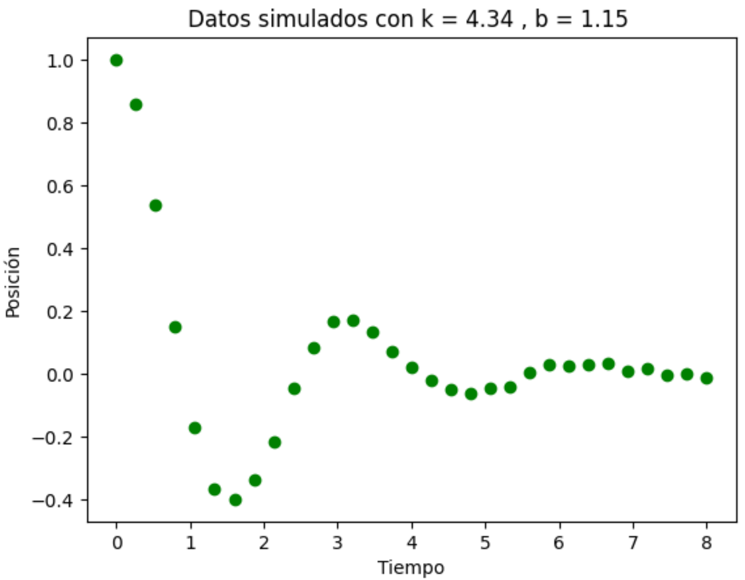
donde $\theta = (\theta_1, ..., \theta_m)$.

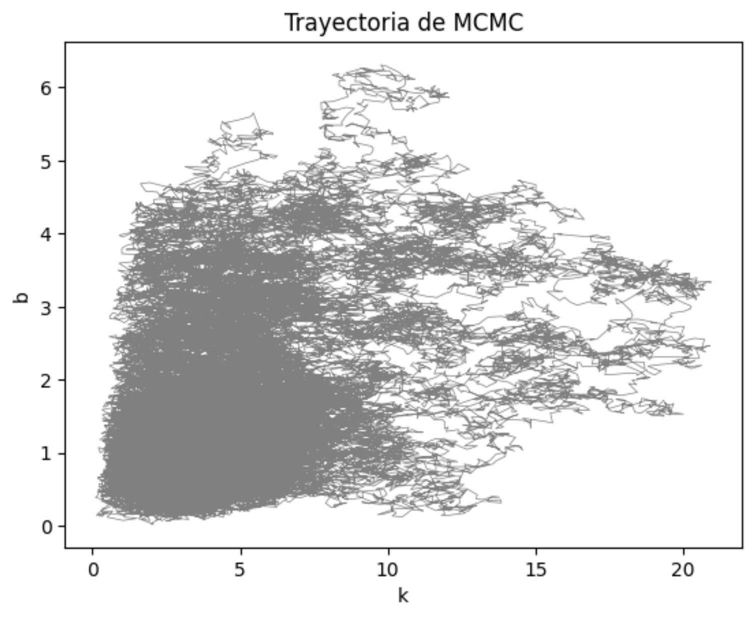
Simular por métodos Monte Carlo

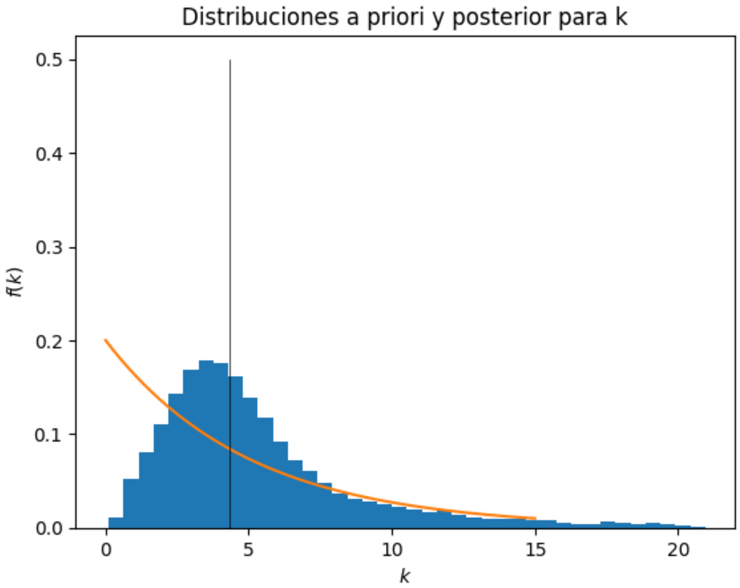
- Se simula por MCMC Metropolis-Hastings [1].

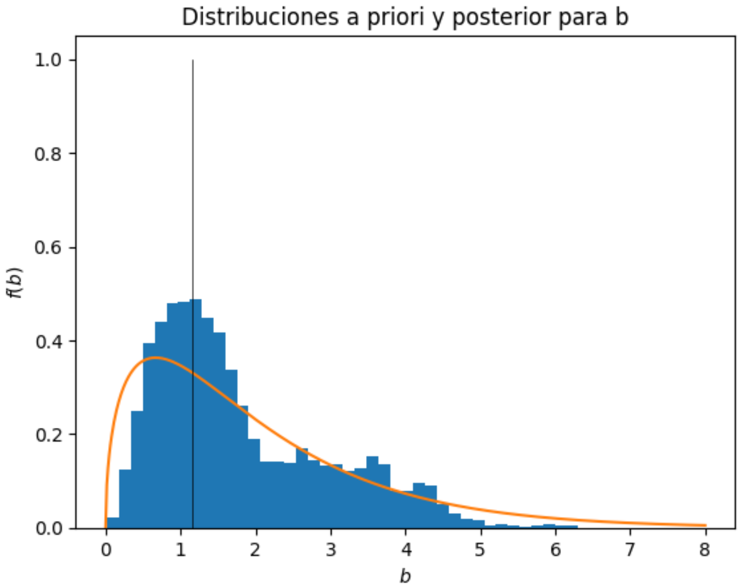
Ejemplo

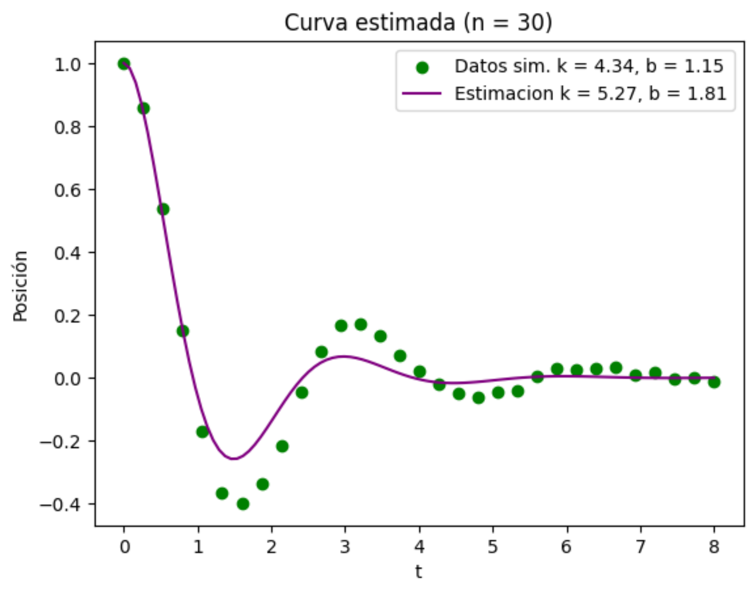
Resorte sujeto a fricción




Trayectoria de MCMC
b
k
0
1
2
3
4
5
6
0
5
10
15
20


Distribuciones a priori y posterior para k
f(k)
k
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0
5
10
15
20


Distribuciones a priori y posterior para b
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
f(b)
0
1
2
3
4
5
6
7
8
b

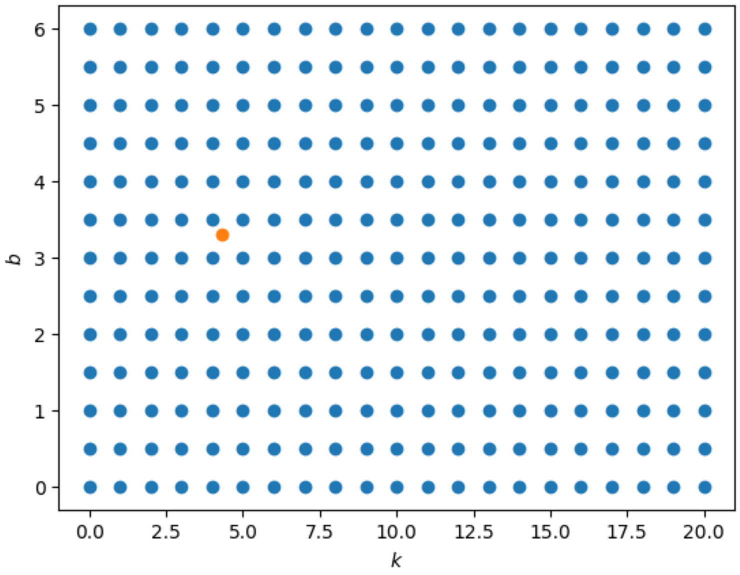

Curva estimada (n = 30)
Datos sim. k = 4.34, b = 1.15
Estimacion k = 5.27, b = 1.81
Posición
t
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
0
1
2
3
4
5
6
7
8

Objetivos

Objetivos

A pesar de que el análisis previo nos permite obtener estimaciones bastante precisas para el problema inverso. Sin embargo, son **computacionalmente pesadas**, esto debido a que a cada paso en la cadena requiere que se solucione el problema forward, es decir, se resuelven ecuaciones diferenciales tantas veces como se deje correr la cadena.

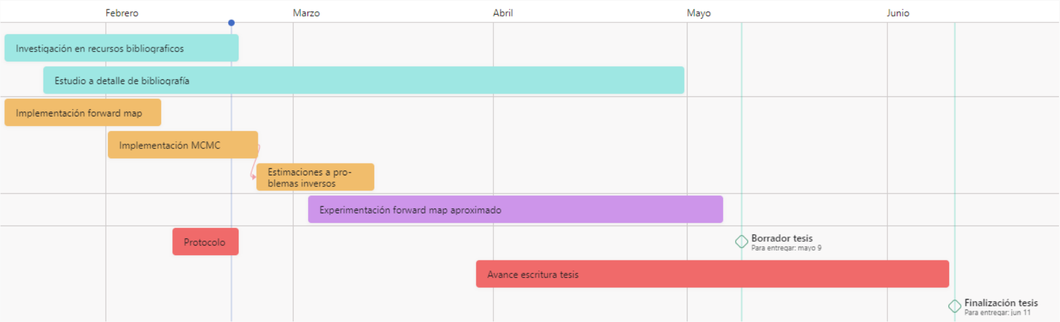
- Se desea encontrar una especie de *interpolación* para solo solucionar una cantidad pequeña de veces el problema forward y para cada punto en el espacio de parámetros se pueda aproximar la solución en función de las soluciones con parámetros cercanos.



6
5
4
3
2
1
0
b
0.0
2.5
5.0
7.5
10.0
12.5
15.0
17.5
20.0
k

Plan de trabajo

Plan de trabajo



Referencias

C. P. Robert, G. Casella, and G. Casella.
***Monte Carlo statistical methods*, volume 2.**
Springer, 1999.

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