

Cuantificación de incertidumbre bayesiana aproximada en problemas inversos de ODE

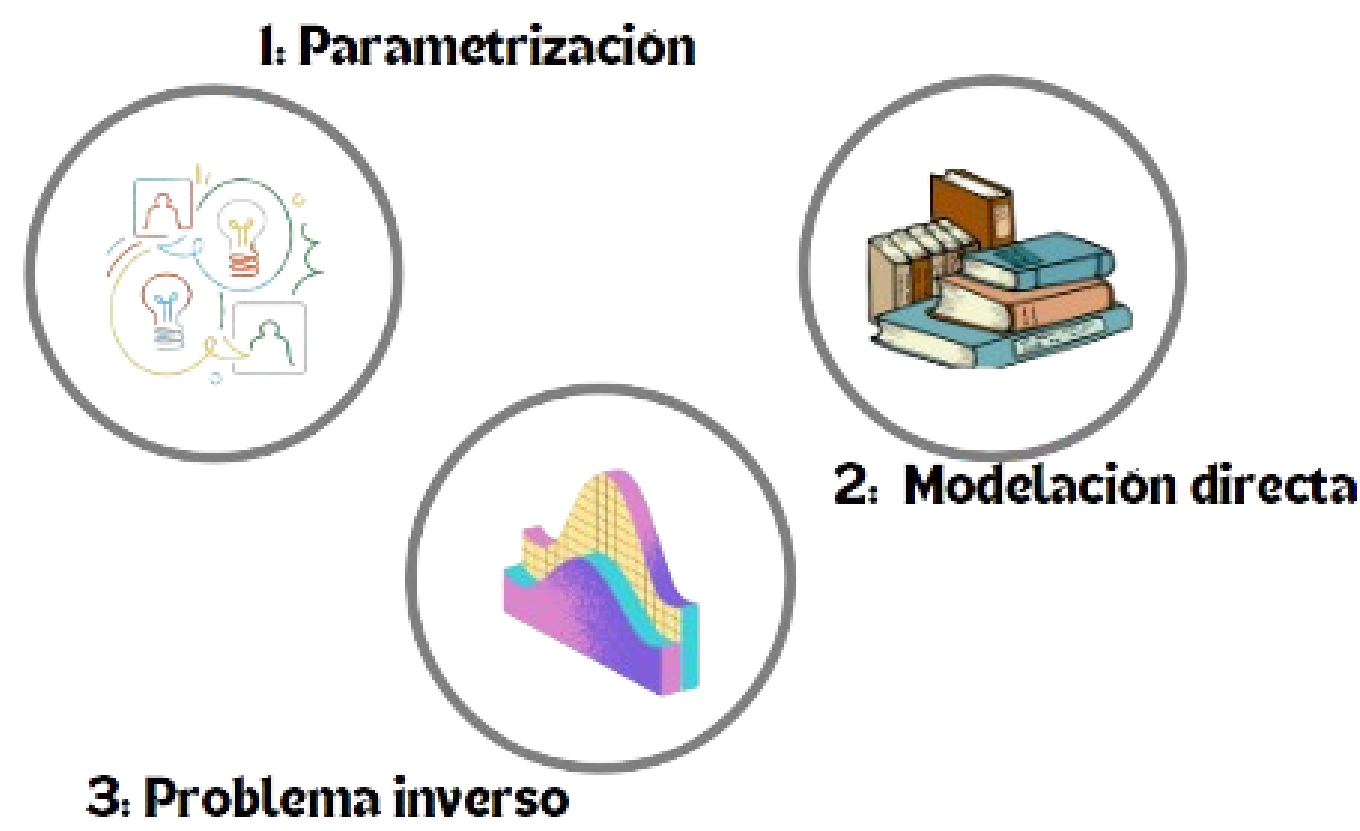
César Isaí García Cornejo Asesor: Dr. José Andrés Christen Gracia

Centro de Investigación en Matemáticas, CIMAT, A.C.



¿Qué es el problema inverso?

En una amplia gama de disciplinas se utilizan modelos que pretenden describir algún fenómeno. La inmensa mayoría de estos son modelos matemáticos, teniendo relaciones entre variables expresadas por ecuaciones dependientes de ciertos parámetros. El tipo de modelos considerados son aquellos cuyas variables se pueden expresar ya sea en una forma funcional o en forma de ecuación diferencial ordinaria (ODE).



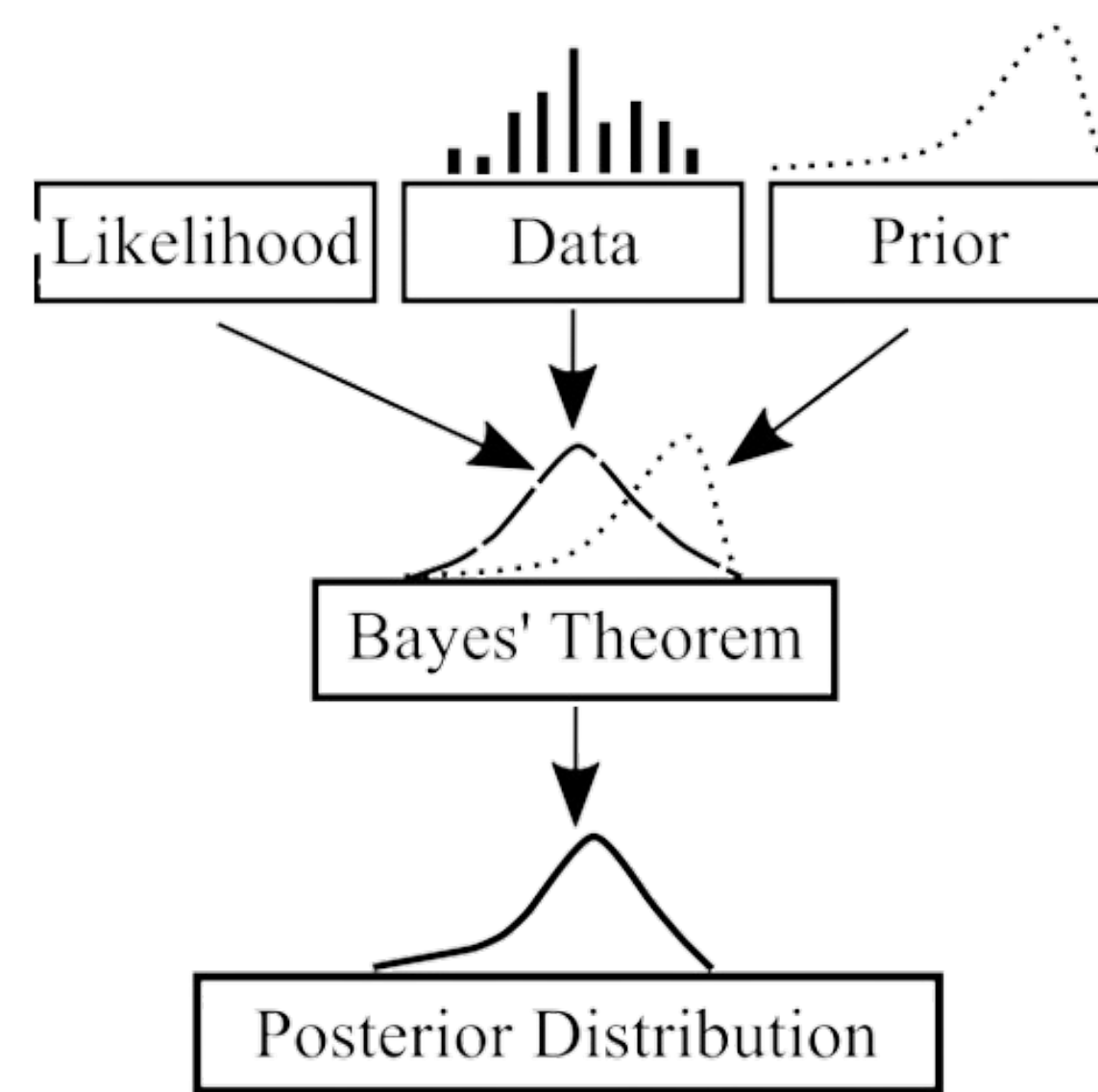
El tratamiento del **problema inverso** se aborda con estadística bayesiana sobre los parámetros. Nos interesa cuantificar la incertidumbre de los parámetros dada una muestra del modelo de interés. La metodología usual considera muestrear de la distribución posterior de los parámetros con MCMC. El inconveniente de usar algoritmos de MCMC es que a cada paso que da la cadena, se debe de calcular una solución numérica de la ODE del modelo, que para modelos suficientemente complejos puede tardar una considerable cantidad de tiempo para obtener la cuantificación de la incertidumbre deseada. Es aquí que la trascendencia del proyecto radica en obtener una **propuesta aproximada de la distribución posterior** siguiendo cierta discretización de los parámetros, donde se buscarán criterios para la convergencia de la posterior aproximada a la posterior teórica.

Enfoque bayesiano

El problema directo consiste en obtener trayectorias de observables que corresponde a un modelo con parámetros $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_d)$

$$\theta \mapsto y(t) = F(\theta)$$

donde el modelo para la observable $y(t)$ se considera que satisface una ecuación diferencial ordinaria. Decimos que $F(\theta)$ es el **forward map** del modelo. Consideremos que tenemos una muestra y_i a ciertos tiempos t_i .



La distribución considerada para los errores:

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

con ε_i independientes.

Distribución posterior

Salvo una constante, la distribución posterior con el forward map ordinario es

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

Modelos considerados

La metodología propuesta se aplicó enteramente en tres modelos.

1. **Modelo gravitatorio:** Para el modelo de **caída gravitatoria sujeto a fricción**, la trayectoria es la distancia recorrida $x(t)$ dado por

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

donde g, b son parámetros del modelo.

2. **Crecimiento logístico:** El modelo logístico describe el crecimiento poblacional con recursos finitos a lo largo del tiempo

$$\frac{dX(t)}{dt} = \theta_1 X (\theta_2 - X)$$

3. **Modelo epidemiológico:** En el modelo epidemiológico **SIR** la cantidad de susceptibles (S), infectados (I) y recuperados (R) se rige por

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= -\beta S \cdot I \\ \frac{dI}{dt} &= \beta S \cdot I - \gamma I \\ \frac{dR}{dt} &= \gamma I \end{aligned}$$

con β y γ parámetros del modelo.

Aplicación al modelo epidemiológico

Dada observaciones de infección, ¿que podemos inferir de los parámetros?

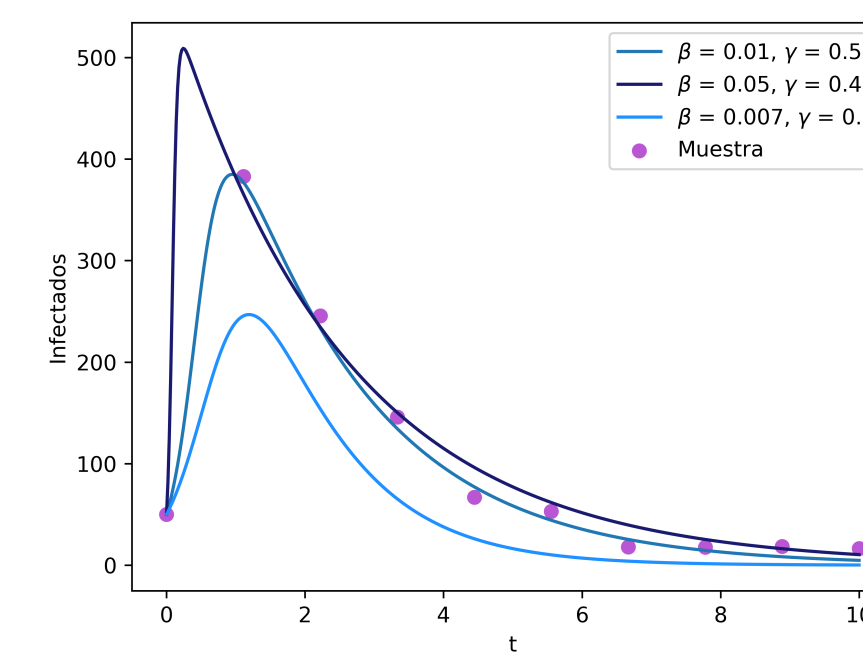


Figure 1. Muestra de cantidad de personas infectadas (morado) y trayectorias variadas del modelo SIR (azules).

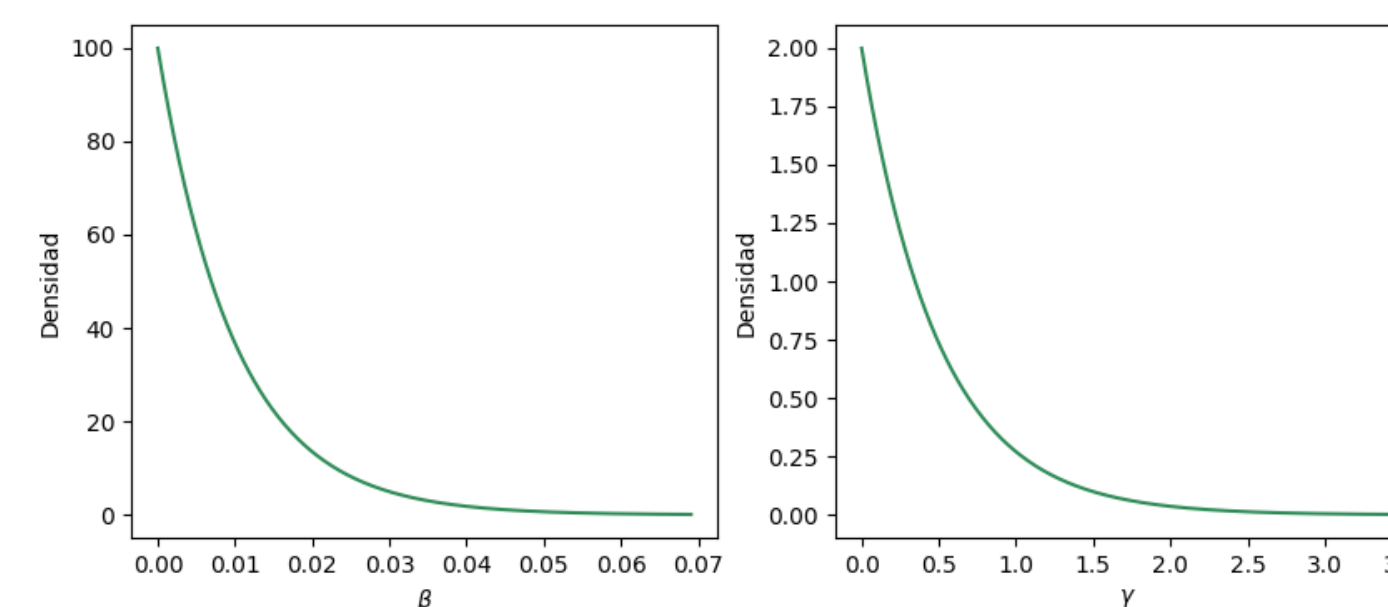


Figure 2. Distribución a priori para β y γ .

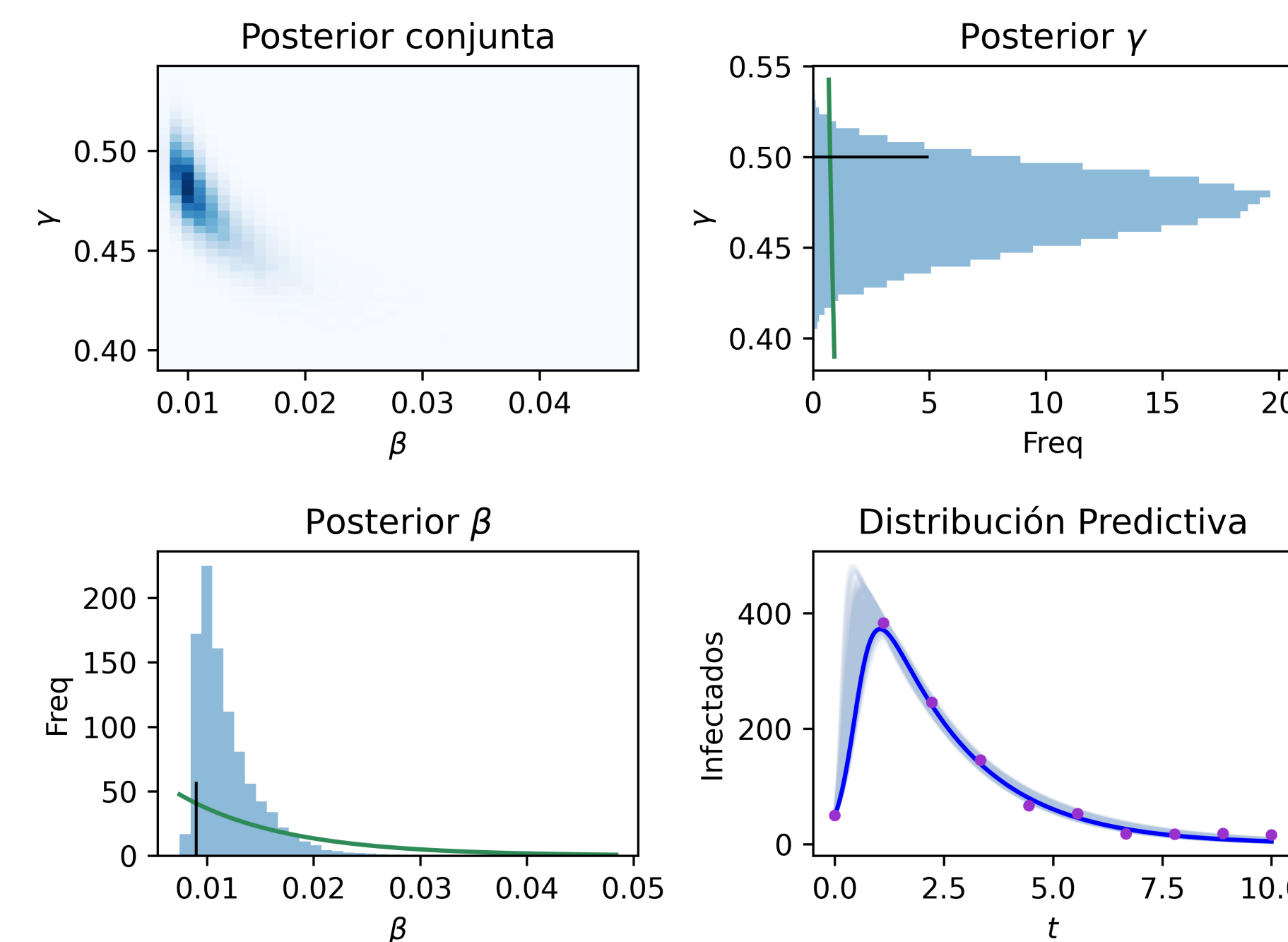
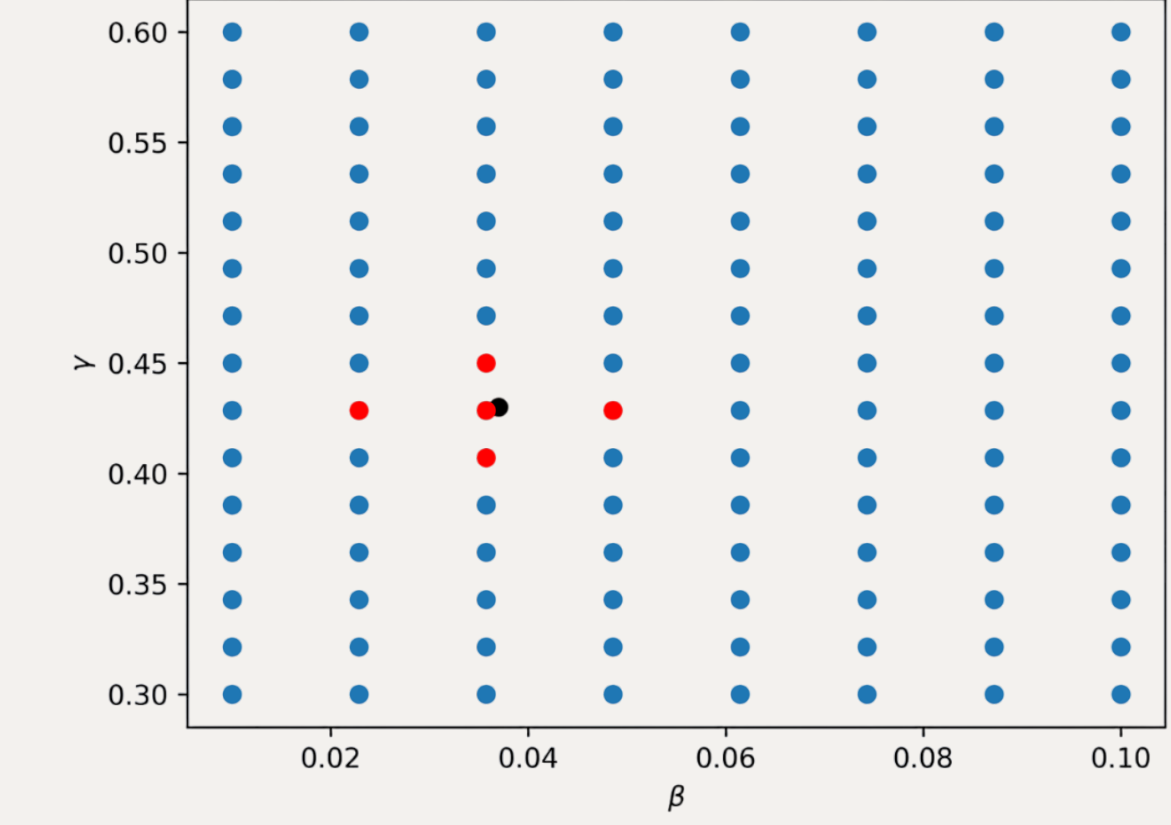


Figure 3. Superior izquierdo: distribución posterior conjunta. Superior derecho: distribución posterior marginal para γ . Inferior izquierdo: distribución posterior marginal para β . Inferior derecho: distribución predictiva del modelo SIR.

Forward aproximado

Se propone un forward map aproximado $F_\theta^*(t)$ discretizando el espacio en una malla y que además dependa de una vecindad de los k vecinos más cercanos.



Convergencia

El forward map aproximado genera una distribución posterior aproximada $\pi^*(\beta, \gamma | \mathbf{y})$. Se busca un forward map aproximado en una malla no muy fina con pocos vecinos cercanos tal que

$$\pi(\beta, \gamma | \mathbf{y}) \approx \pi^*(\beta, \gamma | \mathbf{y})$$

Notese que para un vecino $m = 1$ es claro que $F_\theta^* \rightarrow F_\theta$ a medida que la malla se hace cada vez más fina.

Experimentos

El tiempo de ejecución para el forward map ordinario fue de **12 m 44s**. Los tiempos de ejecución para el forward map aproximado son

Malla	10 x 10	15 x 15	30 x 30	50 x 50
5 vecinos	5m 43s	5m 36s	5m 11s	5m 15s
8 vecinos	5m 06s	5m 41s	5m 11s	5m 15s

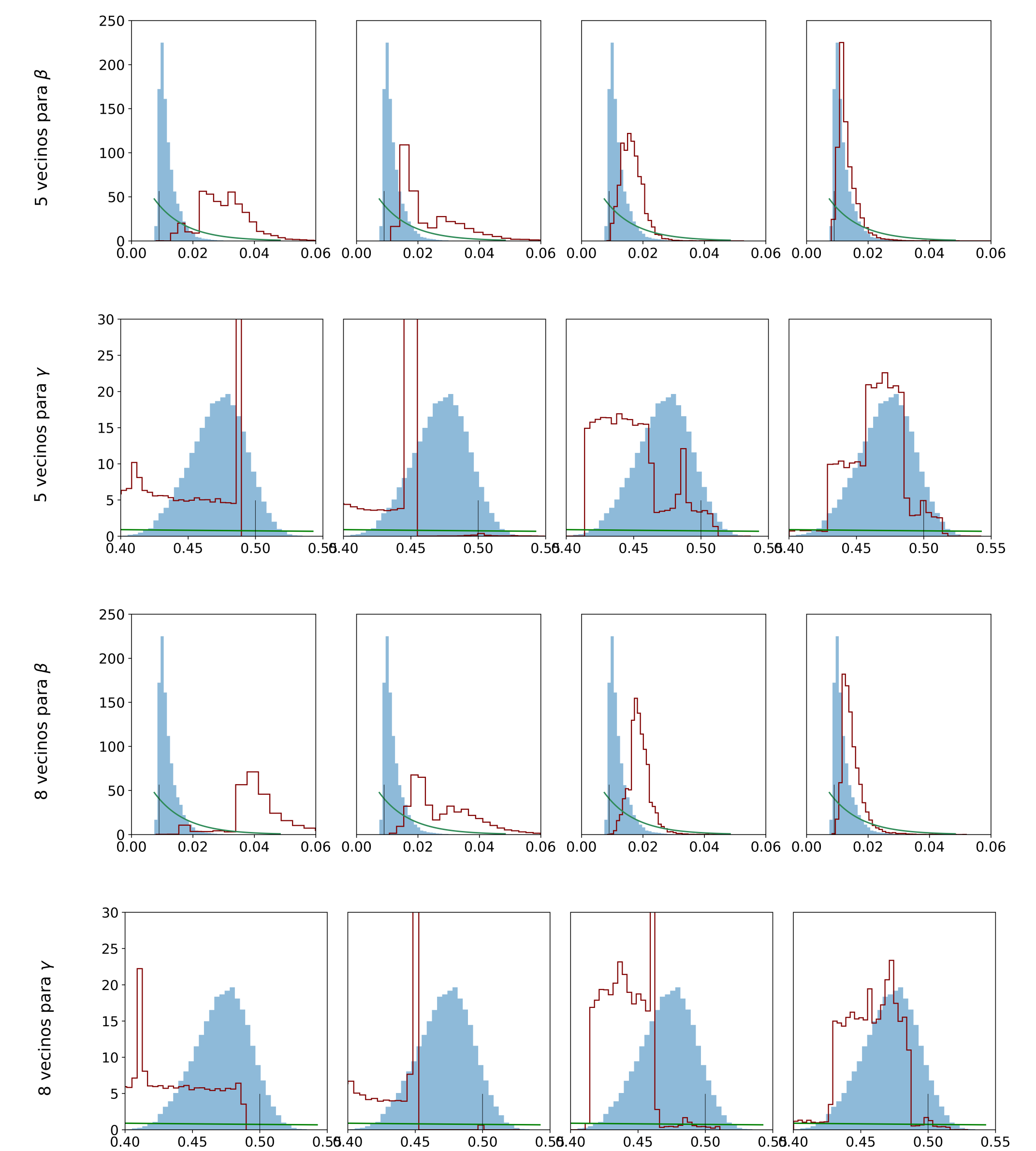


Figure 4. Distribuciones posteriores con el forward map ordinario (azul), distribuciones posteriores con forward map aproximado (rojo) y distribuciones a priori (verde) para 5 y 8 vecinos y para cada mallas mas finas de izquierda a derecha.