

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

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.

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

Estudio de un sistema físico:

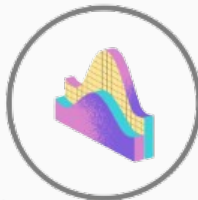
1: Parametrización



2: Modelación directa



3: Problema inverso



El problema directo:

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

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

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

Ejemplos

Resorte sujeto a fricción

Sea $x(t)$ la posición

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

Caída sujeto a fricción

Sea $x(t)$ la posición

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

Crecimiento poblacional

Sea $P(t)$ el tamaño de población

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

Forward map

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

Forward map

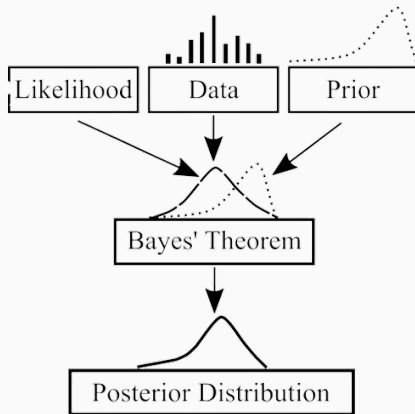
$$\theta = (g, b) \mapsto F(\theta) = x(t)$$

Forward map

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

La distribución posterior

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



Procedimiento:

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

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

- Un supuesto convencional sobre los errores

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

Distribución posterior

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

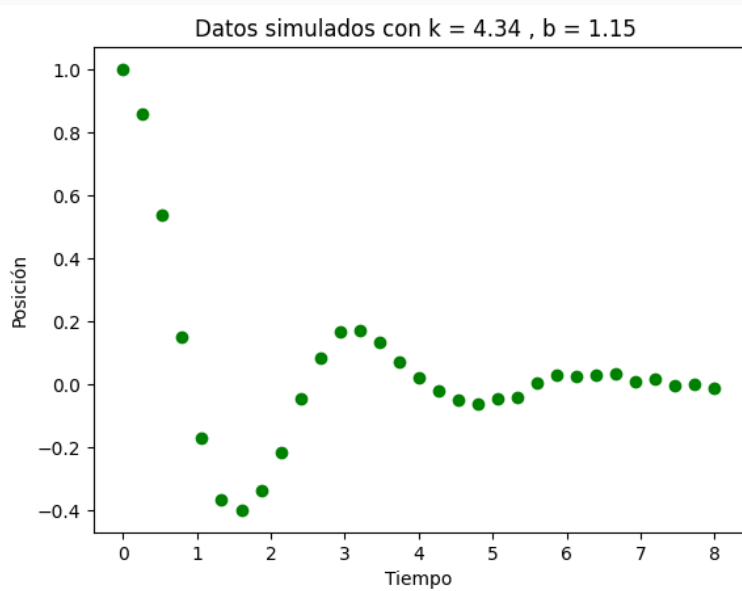
donde $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_m)$.

Simular por métodos Monte Carlo

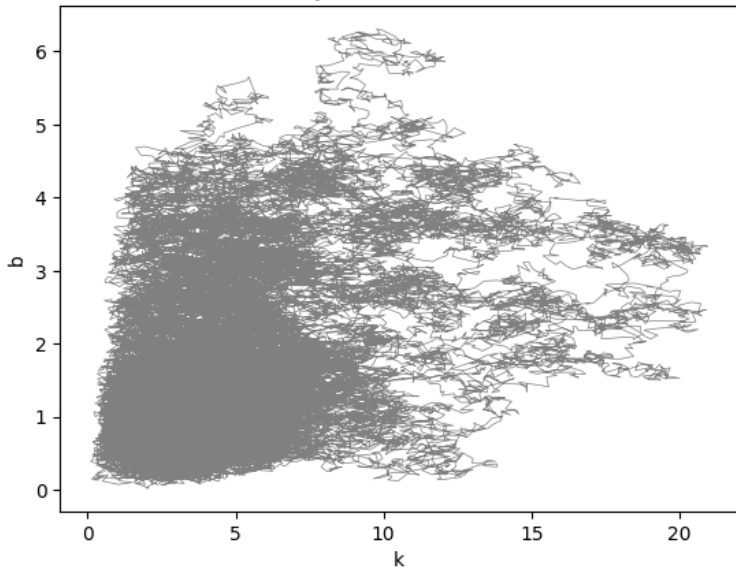
- Se simula por MCMC Metropolis-Hastings [1].

Ejemplo

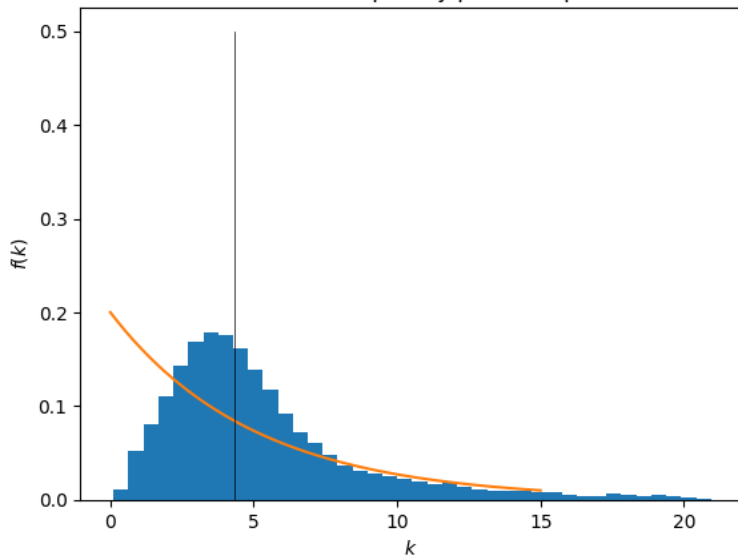
Resorte sujeto a fricción



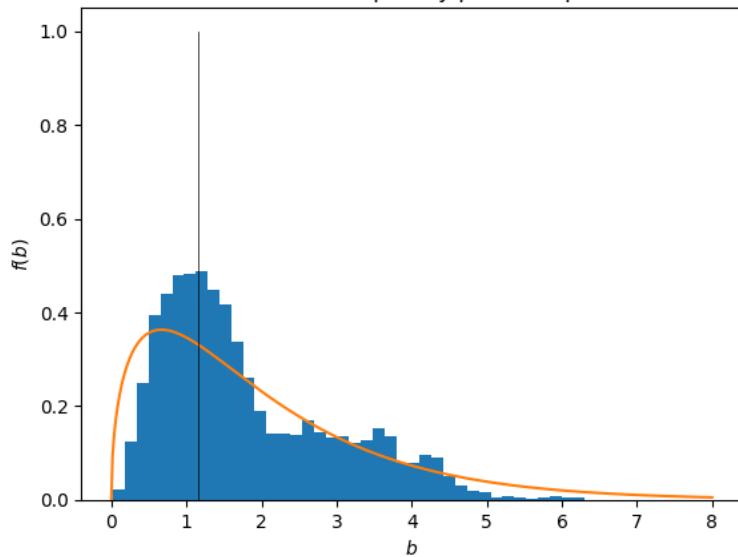
Trayectoria de MCMC



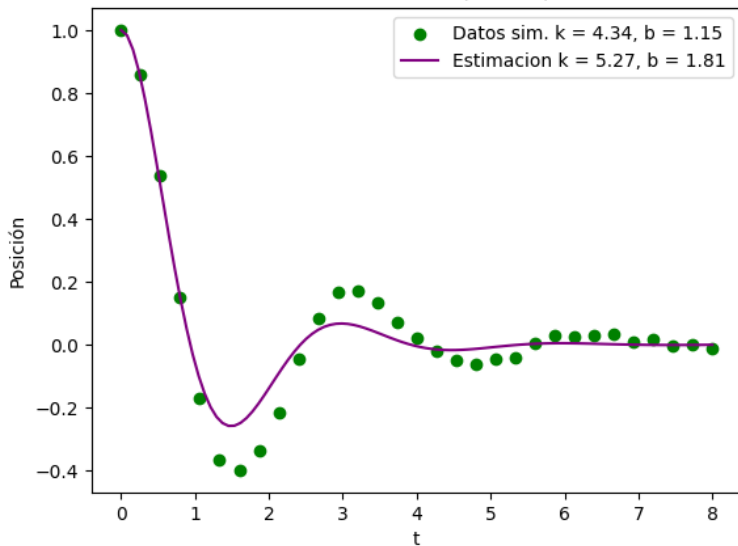
Distribuciones a priori y posterior para k



Distribuciones a priori y posterior para b



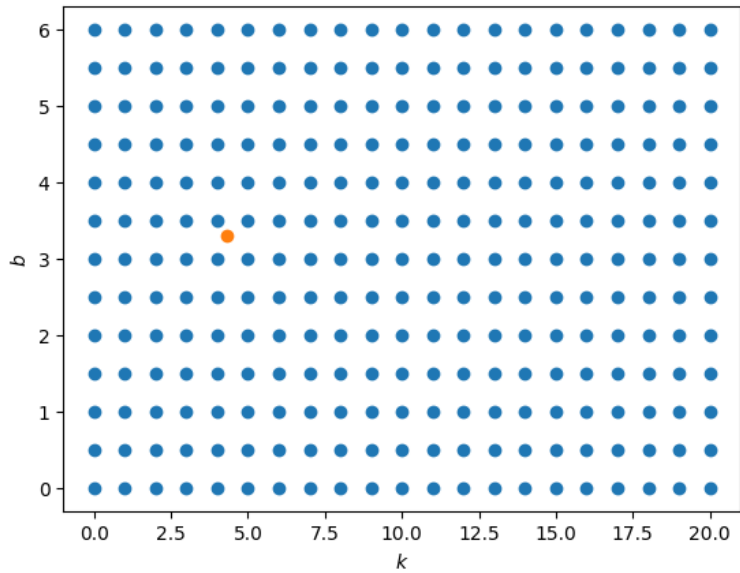
Curva estimada ($n = 30$)



Objetivos

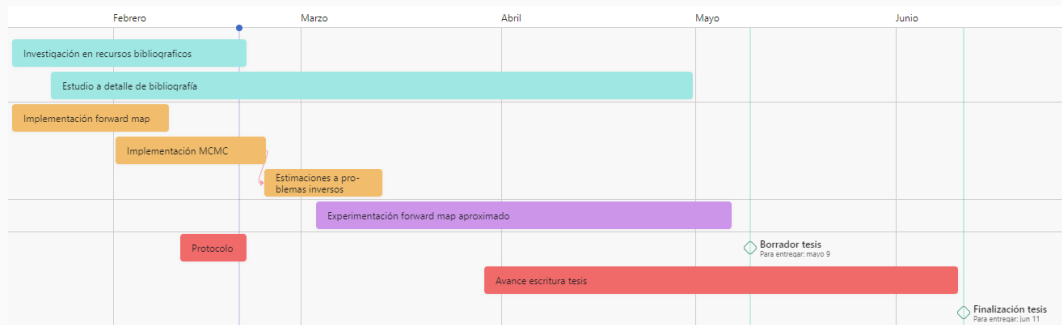
A pesar de que el análisis previo nos permite obtener estimaciones bastante precisas para el problema inverso. Sin embargo, son **computacionalmente pesadas**, esto debido a que a cada paso en la cadena requiere que se solucione el problema forward, es decir, se resuelven ecuaciones diferenciales tantas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



Plan de trabajo

Plan de trabajo





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.