

**UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID**

**FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS**

Departamento de Arquitectura de Computadores y Automática



**TRABAJO DE FIN DE GRADO**

Código TFG: ACA07

Control de sistemas multiagente y sus aplicaciones

Control of multi-agent systems and their applications

Supervisores: Lía García Pérez, Juan Jiménez

**Juan Bosco Román Camacho**

Grado en Física

Curso académico 2023-2024

Convocatoria XXXX

# Búsqueda de máximos globales mediante Kriging con un sistema multiagente.

Global extremum seeking by Kriging with a multi-agent system

## Resumen:

Encontrar el máximo de cualquier distribución en el mundo físico es un problema de gran interés hoy en día. Desde encontrar fugas de petróleo en el océano a fuentes de radiación en zonas contaminadas. Es muy valioso entender estos comportamientos desde el punto de vista de los sistemas multiagente. Para ello es necesario medir un número suficiente de puntos, eligiéndolos de la manera más estratégicamente posible para lograr la mayor eficiencia. Medir con suficiente precisión magnitudes en un terreno impredecible se puede resolver mediante el uso de un enjambre de agentes, simples y con una capacidad de movimiento y comunicación muy limitada, contando con un alto número de ellos como ventaja. Además, pueden ser muy pequeños y capaces de comunicarse localmente en entornos donde es difícil la comunicación a larga distancia, consiguiendo a pesar de ello un comportamiento global organizado y eficiente

## Abstract:

Finding the maximum of any distribution in the physical world is a problem of great interest nowadays. From detecting oil leaks in the ocean to identifying sources of radiation in contaminated areas, understanding these behaviors from a multi-agent systems perspective is highly valuable. Achieving this requires measuring a sufficient number of points, strategically selected to maximize efficiency. Precisely measuring magnitudes in unpredictable terrain can be addressed by employing a swarm of agents, simple in design with limited movement and communication capabilities, yet advantageous in their high numbers. Furthermore, these agents can be small and capable of local communication in environments where long-distance communication is challenging, still achieving organized and efficient global behavior.

INCLUIR AQUÍ la Declaración Responsable sobre Autoría y Uso Ético de Herramientas de Inteligencia Artificial

El documento se puede descargar en la página web: <https://fisicas.ucm.es/tfg-gradofisica>

Y en <https://fisicas.ucm.es/file/declaracion-responsable-sobre-autoria-y-uso-etico-de-ia?ver>

*Nota: el título extendido (si procede), el resumen y el abstract deben estar en una misma página y su extensión no debe superar una página. Tamaño mínimo 11pto.*

*Extensión máxima 20 páginas sin contar portada, contraportada y declaración responsable (sí se incluye índice, introducción, conclusiones y bibliografía)*

## **Declaración Responsable sobre Autoría y Uso Ético de Herramientas de Inteligencia Artificial (IA)**

Yo, **APELLIDOS Y NOMBRE**

Con DNI/NIE/PASAPORTE:

declaro de manera responsable que el/la presente:

- ☐ Trabajo de Fin de Grado (TFG)
- ☐ Trabajo de Fin de Máster (TFM)
- ☐ Tesis Doctoral

Titulado/a

### **CAMPO PARA TÍTULO**

es el resultado de mi trabajo intelectual personal y creativo, y ha sido elaborado de acuerdo con los principios éticos y las normas de integridad vigentes en la comunidad académica y, más específicamente, en la Universidad Complutense de Madrid.

Soy, pues, autor del material aquí incluido y, cuando no ha sido así y he tomado el material de otra fuente, lo he citado o bien he declarado su procedencia de forma clara -incluidas, en su caso, herramientas de inteligencia artificial-. Las ideas y aportaciones principales incluidas en este trabajo, y que acreditan la adquisición de competencias, son mías y no proceden de otras fuentes o han sido reescritas usando material de otras fuentes.

Asimismo, aseguro que los datos y recursos utilizados son legítimos, verificables y han sido obtenidos de fuentes confiables y autorizadas. Además, he tomado medidas para garantizar la confidencialidad y privacidad de los datos utilizados, evitando cualquier tipo de sesgo o discriminación injusta en el tratamiento de la información.

En Madrid a **FECHA**

**FIRMA**

# 1 Índice

2	Introducción.....	4
3	Formulación del problema.....	5
4	El cerebro de los agentes: Estimador kriging .....	5
4.1	Métodos de interpolación espacial: Enfoque bayesiano vs enfoque no bayesiano.....	5
4.2	Campo aleatorio gaussiano.....	6
4.3	kriging.....	6
4.4	Kriging ordinario .....	7
4.5	Requisitos de consistencia: Marginalización y condicionamiento.....	7
4.6	Optimización de los parámetros de la función de covarianza.....	11
4.7	Distribución posterior .....	9
4.8	kriging simple y universal .....	10
4.9	Optimización de parámetros compleja usada en el paper .....	12
5	Método de selección de puntos de muestreo .....	13
5.1	Método 1 .....	13
5.2	Método 2 .....	14
6	Ley de control .....	15
7	Implementación del modelo y algoritmo .....	16
8	Condiciones de simulación .....	18
9	Resultados y comparación .....	19
9.1	Resultados en una dimensión.....	19
9.2	Resultados en dos dimensiones .....	22

## 2 Introducción

El objetivo de este trabajo es encontrar el máximo global de un campo desconocido utilizando un Sistema Multiagente. Cada agente puede moverse según una dinámica individual especificada para realizar mediciones con las que calcula un modelo Kriging, que es un método de interpolación que, partiendo de una suposición previa sobre la covarianza del campo estimado, proporciona la mejor

predicción lineal no sesgada junto con su incertidumbre de estimación, de manera que cada agente explora el campo sólo en áreas con incertidumbre alta, mejorando la estimación actual del máximo global y ganando criterio para proceder con la búsqueda del máximo global a partir del modelo interpolado. Otros métodos se centran sólo en la ineficiente exploración completa del campo o en la escalada del gradiente que puede detenerse en un máximo local.

### 3 Formulación del problema

considérese un campo escalar desconocido, continuo y estacionario  $\phi$  definido sobre el espacio compacto  $D \subset \mathbb{R}^m$  cuyo máximo global está asociado a un único argumento. El objetivo es encontrar dicho máximo usando una flota de  $N$  agentes idénticos con coordenadas espaciales contenidas en  $D$ . El agente queda indexado por las variables  $i, j \in 1 \dots N$  y el instante de tiempo por  $k$  ( $t_k$ ). Los agentes tienen la capacidad de:

1. Medir el campo para cada tiempo  $t$ :  $y_i(t_k) = y(\mathbf{x}_i) = \phi(\mathbf{x}_i) + w_i$  donde  $w_i$  es ruido gaussiano con media nula y varianza  $\sigma_w^2$  conocida.
2. No medir, siendo  $\mathcal{M}(t_k)$  el set de agentes que miden en  $t_k$
3. Moverse siguiendo la dinámica:  $M\ddot{\mathbf{x}}_i + C(\mathbf{x}_i, \dot{\mathbf{x}}_i)\dot{\mathbf{x}}_i = \mathbf{u}_i$  siendo  $C(\mathbf{x}_i, \dot{\mathbf{x}}_i)$ ,  $M$  constantes y  $\mathbf{u}_i$  la función de control, que incluye evasión de colisiones entre agentes.
4. Comunicarse con su subconjunto de vecinos  $\mathcal{N}_i(t_k) = \{j \mid \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\| \leq r\}$  (agentes  $j$  a un radio  $r$ , que es la distancia máxima de comunicación)
5. Guardar datos en memoria  $S_i(t_k) = \bigcup_{l=0}^k \{[y_j(t_l), \mathbf{x}_j(t_l)] \mid j \in \mathcal{N}_i(t_l) \cap \mathcal{M}(t_l)\}$  información (medida + posición) recibida por vecinos que han medido en todos los tiempos hasta el actual
6. Realizar un kriging (modelo de interpolación espacial  $\hat{\phi}$ ) en cada instante tiempo en base a los datos de su memoria  $S_i(t_k)$  y encontrar su máximo:

$$\hat{\mathbf{x}}_M^i(t_k) = \arg \max_{\mathbf{x} \in D} \{\hat{\phi}_{i,k}(\mathbf{x})\}$$

## 4 El cerebro de los agentes: Estimador kriging

### 4.1 Métodos de interpolación espacial: Enfoque bayesiano vs enfoque frecuentista

En los enfoques no bayesianos, el mejor modelo predictivo se encuentra minimizando la discrepancia entre las predicciones del modelo y los valores reales observados, es decir, valorando a **posteriori**, las consecuencias de tomar decisiones específicas basadas en las predicciones del modelo en relación con el estado verdadero de la naturaleza.

the prior information we have about the process and the information about the process contained in the data. They are combined using Bayes' theorem.

Por el contrario, en el enfoque bayesiano se expresa **a priori** la creencia de cómo se espera que las mediciones ruidosas se desvíen de la verdadera función subyacente libre de ruido (mediante la correcta elección de la media y función de covarianza) antes de observar los datos, actualizando la incertidumbre en función de la evidencia observada mediante el teorema de Bayes: la evidencia restringe el espacio de posibilidades. La principal ventaja de este enfoque es que permite obtener la incertidumbre asociada a cada punto extrapolado, a diferencia de las regresiones u otros métodos no bayesianos. Al proporcionar esta estimación de la incertidumbre, el método permite una evaluación más precisa de la exactitud de los resultados obtenidos.

## 4.2 Campo aleatorio gaussiano

### 4.3 kriging

El kriging (Matheron 1963, aunque recibe su nombre del ingeniero minero sudafricano Danie G. Krige.) utiliza las relaciones entre las ubicaciones de los datos y sus valores para proporcionar la **mejor predicción lineal no sesgada**, asumiendo principalmente:

1) **Distribución normal** e isotrópica de las propiedades de los datos (**campo gaussiano aleatorio**).

2) **Autocorrelación espacial**. El kriging funciona asumiendo que la variación espacial se puede descomponer en tres componentes principales:

- a) Variación determinística o tendencia general predominante que puede deberse a gradientes topográficos, gradientes hidráulicos, variaciones en la intensidad de la fuente, entre otros factores.
- b) Variación aleatoria espacialmente correlacionada: fluctuaciones aleatorias correlacionadas espacialmente. Los valores de los datos cercanos entre ellos están más correlacionados que los valores entre datos más distantes
- c) Variación espacialmente no correlacionada (ruido): Esta variación representa el error o la variabilidad no explicada por la tendencia o la variación espacialmente correlacionada.

3) **Estacionariedad**: la distribución conjunta de probabilidad no varía en todo el espacio de estudio. (que la media y la varianza de los valores son constantes en todo el campo espacial, por lo tanto los parámetros de la función de covarianza son iguales en todos los puntos). La suposición de estacionariedad se puede relajar a menudo en aplicaciones relevantes en meteorología, donde existen variaciones generales deterministas, como que la temperatura pueda aumentar generalmente hacia el sur. Es esencial detectar y comprender estas tendencias antes de ejecutar el kriging.

Existen varias formas de kriging que permiten relajar esta última suposición:

- a) Kriging Ordinario: Supone media constante desconocida y datos sin tendencia.

- b) Kriging Simple: Supone media constante y conocida, siendo más potente que el kriging ordinario.
- c) Kriging Universal: relaja la suposición de estacionariedad al permitir que la media (y no la varianza) de los valores difiera de manera determinística siguiendo una tendencia predominante.

## 4.4 Kriging ordinario

Un Kriging (también denominado proceso gaussiano)  $f(\mathbf{x})$  queda completamente definido por su función media  $m(\mathbf{x})$  y función de covarianza  $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  definidas como:

$$m(\mathbf{x}) = \mathbb{E}[f(\mathbf{x})] \quad (2.13)$$

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \mathbb{E}[(f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x}))(f(\mathbf{x}') - m(\mathbf{x}'))] \quad (2.13)$$

Enconces se puede escribir:

$$f(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \quad (2.14)$$

Primeramente se elige la función media como 0 ([kriging ordinario](#)), aunque más adelante se generalizará a el caso general. La variable aleatoria representa el valor de  $f(\mathbf{x})$  en la localización  $\mathbf{x}$ . En la práctica se terndrán pares  $(\mathbf{x}_i, y_i)$  y se puede escribir  $f_i \triangleq f(\mathbf{x}_i)$ .

## 4.5 Requisitos de consistencia: Marginalización y condicionamiento.

Un proceso gaussiano se define como un conjunto de variables aleatorias gaussianas. Esto implica un requisito de consistencia que en este contexto se refiere a la condición de que cualquier subconjunto finito de variables aleatorias seleccionadas de dicho proceso siga siendo gaussiano.

Las distribuciones gaussianas tienen la propiedad algebraica de ser cerradas bajo el condicionamiento y la marginalización. Las distribuciones resultantes de estas operaciones también son gaussianas.

En particular considérese una distribución de probabilidad normal  $P(X, Y)$  con  $X, Y$  vectores de variables aleatorias representando subconjuntos de la variable original.

$$P_{X,Y} = \begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}(\mu, \Sigma) = \mathcal{N}\left(\begin{bmatrix} \mu_X \\ \mu_Y \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \Sigma_{XX} & \Sigma_{XY} \\ \Sigma_{YX} & \Sigma_{YY} \end{bmatrix}\right)$$

Mediante la marginalización podemos obtener información parcial de la distribución multivariable:

$$X \sim \mathcal{N}(\mu_X, \Sigma_{XX}) \quad Y \sim \mathcal{N}(\mu_Y, \Sigma_{YY})$$

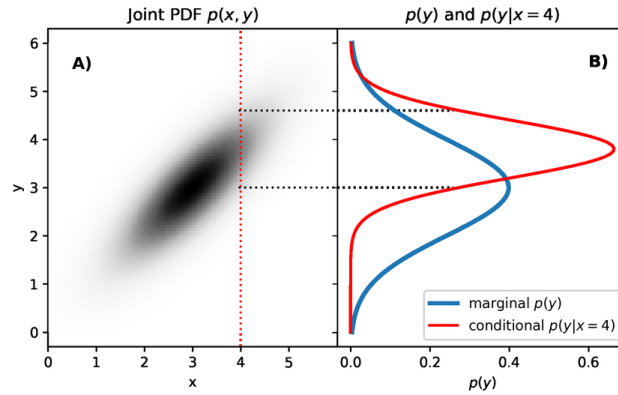
En otras palabras, la distribución de subconjunto no se ve afectada por el estudio del conjunto. Marginalizar es proyectar la distribución conjunta sobre una de las dimensiones. En decir, cada distribución  $X$  e  $Y$  solo depende de su correspondiente entrada en  $\mu$  y  $\Sigma$ . La operación se realiza como:

$$p_X(x) = \int_y p_{X,Y}(x,y)dy = \int_y p_{X|Y}(x|y)p_Y(y)dy$$

Otra operación importante para los procesos gaussianos es la condicionamiento. Se utiliza para determinar la probabilidad de una variable en función de otra variable. Al igual que la marginalización, esta operación también es cerrada y produce una distribución gaussiana modificada. Esta operación es fundamental para los procesos gaussianos ya que permite la inferencia bayesiana, de la cual hablaremos en la próxima sección. El condicionamiento se define por:

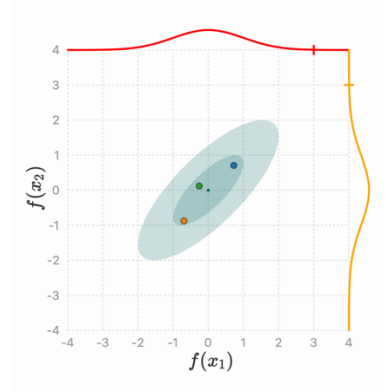
$$X | Y \sim \mathcal{N}(\mu_X + \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}(Y - \mu_Y), \Sigma_{XX} - \Sigma_{XY}\Sigma_{YY}^{-1}\Sigma_{YX})$$

$$Y | X \sim \mathcal{N}(\mu_Y + \Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}(X - \mu_X), \Sigma_{YY} - \Sigma_{YX}\Sigma_{XX}^{-1}\Sigma_{XY})$$



Entonces  $f(\mathbf{x})$  y  $f(\mathbf{x}')$  componen conjuntamente una gaussiana con media nula y matriz de covarianza  $f(\mathbf{x})^\top \Sigma_p f(\mathbf{x}')$ . En el caso general  $f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_n)$  se corresponden con un número de inputs  $n$  que forman una gaussiana  $n - dimensional$ .

$$\text{cov}(f(x_1), f(x_2)) = \begin{pmatrix} 0.998 & 0.769 \\ 0.769 & 0.998 \end{pmatrix}$$



La función de covarianza especifica la covarianza entre pares de variables aleatorias. En este caso la función de covarianza más general y versátil tendrá la forma de una gaussiana:

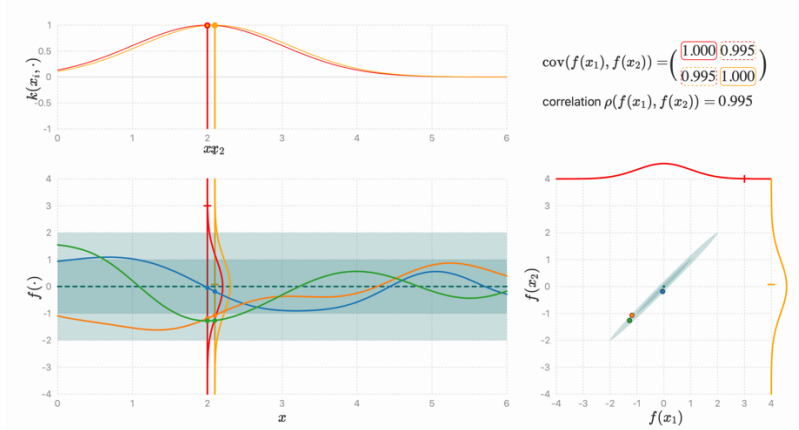


$$\text{cov} \left( f(\mathbf{x}_p), f(\mathbf{x}_q) \right) = k(\mathbf{x}_p, \mathbf{x}_q) = \exp \left( -\frac{1}{2} (|\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q|/\ell)^2 \right) \quad \ell > 0 \quad (2.16)$$

$\ell$  marca la longitud característica del proceso. Nótese que la covarianza entre los inputs está en función de los outputs. Para esta función de covarianza en particular, observamos que la covarianza es casi unitaria entre variables cuyas entradas correspondientes están muy cerca, y disminuye a medida que aumenta la distancia en el espacio de entrada.

Una vez especificada la función de covarianza y optimizados sus parámetros (ver sección) se construye la distribución  $f(\mathbf{x}) \sim \mathcal{N}(0, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}'))$ , que es una distribución de funciones. Podemos extraer muestras de la distribución de funciones evaluadas en cualquier número de puntos. Si elegimos un número de puntos  $X_*$  y se escribe la matriz de covarianza  $K$  (a partir de la función de covarianza) elemento a elemento, podemos generar un vector gaussiano aleatorio y graficar los valores generados en función de los inputs.

$$\mathbf{f}_* \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, K(X_*, X_*)) \quad (2.17)$$



## 4.6 Distribución posterior

Hasta ahora no se han incluido los datos medidos (evidencia). Para incorporar la información que aportan las medidas consideramos primeramente el caso de medidas sin ruido  $\{(\mathbf{x}_i, f_i) \mid i = 1, \dots, n\}$ . The joint joint prior distribution of the training outputs,  $\mathbf{f}$ , and the test outputs  $\mathbf{f}_*$  according to the prior is

$$\begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{f}_* \end{bmatrix} \sim \mathcal{N} \left( \mathbf{0}, \begin{bmatrix} K(X, X) & K(X, X_*) \\ K(X_*, X) & K(X_*, X_*) \end{bmatrix} \right) \quad (2.18)$$

Se tienen  $n$  medidas y  $n_*$  puntos de test.  $K(X, X_*)$  es la matriz de covarianza  $n \times n_*$  entre medidas y puntos test. De igual forma se tienen  $K(X, X)$ ,  $K(X_*, X_*)$  and  $K(X_*, X)$ . Para obtener la distribución posterior de funciones se debe restringir la prior conjunta para que contenga solo funciones que pasan por los puntos de medidas. Esto se hace **condicionando** la distribución gaussiana conjunta prior a las medidas:

$$\mathbf{f}_* | X_*, X, \mathbf{f} \sim \mathcal{N}(\bar{\mathbf{f}}_*, \text{cov}(\mathbf{f}_*)) , \text{ where} \quad (2.22)$$

$$\bar{\mathbf{f}}_* \triangleq \mathbb{E}[\mathbf{f}_* | X, \mathbf{f}, X_*] = K(X_*, X)K(X, X)^{-1}\mathbf{f} \quad (2.23)$$

$$\text{cov}(\mathbf{f}_*) = K(X_*, X_*) - K(X_*, X)K(X, X)^{-1}K(X, X_*) \quad (2.24)$$

Se pueden generar tantos valores de  $\mathbf{f}_*$  (correspondientes a puntos de test  $X_*$ ) como se deseen evaluando la media y función de covarianza y generando vectores a partir de la distribución posterior.

Para incluir ruido  $y = f(\mathbf{x}) + \varepsilon$  tal que  $\varepsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma_n^2)$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y} \\ \mathbf{f}_* \end{bmatrix} \sim \mathcal{N}\left(\mathbf{0}, \begin{bmatrix} K(X, X) + \sigma_n^2 I & K(X, X_*) \\ K(X_*, X) & K(X_*, X_*) \end{bmatrix}\right) \quad (2.21)$$

De igual forma que anteriormente se obtiene:

$$\mathbf{f}_* | X, \mathbf{y}, X_* \sim \mathcal{N}(\bar{\mathbf{f}}_*, \text{cov}(\mathbf{f}_*)) , \text{ where} \quad (2.22)$$

$$\bar{\mathbf{f}}_* \triangleq \mathbb{E}[\mathbf{f}_* | X, \mathbf{y}, X_*] = K(X_*, X)[K(X, X) + \sigma_n^2 I]^{-1}\mathbf{y} \quad (2.23)$$

$$\text{cov}(\mathbf{f}_*) = K(X_*, X_*) - K(X_*, X)[K(X, X) + \sigma_n^2 I]^{-1}K(X, X_*) \quad (2.24)$$

## 4.7 kriging simple y universal

Para incluir una función media determinada  $m(\mathbf{x})$  simplemente se substraen su valor a las medidas ([kriging simple](#)):

$$\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{y} - \mathbf{m}(X)$$

$$f(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \quad (2.37)$$

Entonces  $\text{cov}(\mathbf{f}_*)$  no varía pero la media predictiva  $\bar{\mathbf{f}}_*$  queda:

$$\bar{\mathbf{f}}_* = \mathbf{m}(X_*) + K(X_*, X)K_y^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{m}(X)) \quad (2.38)$$

Donde  $K_y = K + \sigma_n^2 I$ ,

Sin embargo, en la práctica a menudo puede ser difícil especificar una función de media fija. En el mundo real, la media solo se puede conocer si hay repeticiones del fenómeno, como ocurre con los procesos espacio-temporales, o cuando el número de datos es tan grande que permite estimar la media casi a la perfección.

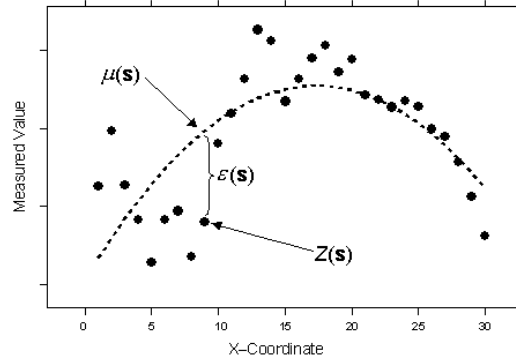
En muchos casos puede ser más conveniente especificar algunas funciones de base fijas, como la regresión polinómica de la función de media estocástica, cuyos coeficientes,  $\beta$  se infieren a partir de los datos. Esto es el kriging universal. Consideremos.

$$g(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \mathbf{h}(\mathbf{x})^\top \beta, \text{ donde } f(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(0, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')) \quad (2.39)$$

Donde  $f(\mathbf{x})$  es un proceso gaussiano con media nula encargada de trazar la correlación espacial de los datos.  $\mathbf{h}(\mathbf{x})$  son funciones base y  $\beta$  parámetros, encargados de representar la variabilidad

global o tendencia de los datos. Los datos medidos siguen una tendencia cercana a un modelo lineal global con sus errores modelados con el PG. Con los datos medidos se optimizan los parámetros  $\beta$  junto con los parámetros de la función de covarianza.

Para ilustrar, el kriging universal asume el modelo:  $Z(s) = \mu(s) + \epsilon(s)$ , En el siguiente ejemplo se tiene:



<https://pro.arcgis.com/en/pro-app/latest/help/analysis/geostatistical-analyst/understanding-universal-kriging.htm>

Un polinomio de segundo orden es la tendencia representada por una línea discontinua, que es  $\mu(s)$  y se modela con  $\mathbf{h}(\mathbf{x})^\top \beta = \mathbf{x}^2 \beta$ . Sustrayendo el polinomio de segundo orden a los datos originales, se obtienen los errores,  $\epsilon(s)$ , que se asumen autocorrelacionados y aleatorios con media 0 y por tanto pueden ser modelados por kriging ordinario  $f(\mathbf{x})$ .

De esta manera se combina un modelo frecuentista o determinista (tendencia), que modela cualquier tendencia espacial en los datos en el kriging universal, con un modelo estocástico (kriging ordinario) que modela la variabilidad espacial de los datos. Se podría haber usado cualquier otra función de base, como una tendencia lineal, un polinomio cúbico. Se realiza una regresión con las coordenadas espaciales como variables explicativas. Sin embargo, en lugar de asumir que los errores  $\epsilon(s)$  son independientes, se modelan como autocorrelacionados.

#### 4.8 Optimización de los parámetros de la función de covarianza

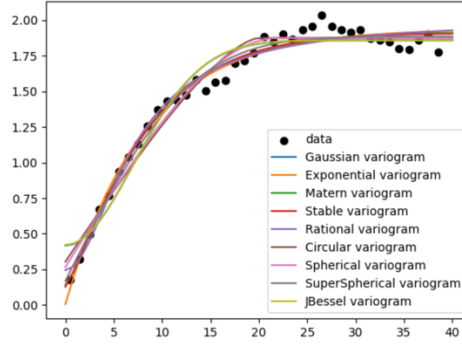
Existen diversas técnicas para optimizar los (hiper)parámetros de la función de covarianza que incluyen mínimos cuadrados, máxima verosimilitud y métodos bayesianos. La más simple y la que se usará es realizar una regresión lineal de mínimos cuadrados con la función de covarianza (o inverso del semivariograma) a los valores de las correlaciones de pares puntos medidos separados por determinadas distancias. La correlación entre puntos se calcula como:

$$C(x, y) := \text{cov}(Z(x), Z(y)) = \mathbb{E}[(Z(x) - \mathbb{E}[Z(x)])(Z(y) - \mathbb{E}[Z(y)])].$$

Para obtener la correlación con la separación entre los puntos  $h$  como única variable:

$$C(h) = C(0, h) = C(x, x + h)$$

De manera visualmente que se obtiene:



**Otra forma** es La función de verosimilitud en este caso cuantifica la probabilidad de obtener los datos observados bajo diferentes configuraciones de los parámetros del proceso gaussiano. Al ajustar los parámetros del modelo para maximizar esta función de verosimilitud, podemos encontrar la configuración más probable de los parámetros dados los datos observados, lo que nos permite realizar inferencias sobre el proceso subyacente que genera los datos.

#### 4.9 Optimización de parámetros compleja usada en el paper

**La forma demasiado compleja que en realidad no uso en mi código, (yo hago un ajuste al variograma directamente):** tomar el prior de  $\beta$  como gaussiano y realizar un proceso gaussiano con los parámetros:

En el contexto de los procesos gaussianos, "integrar" parámetros se refiere al proceso de marginalizar ciertos parámetros para obtener una distribución sobre los parámetros de interés.

En la regresión de procesos gaussianos, por ejemplo, hay hiperparámetros que controlan la suavidad o escala de longitud de la función del kernel, como el parámetro de escala de longitud. En lugar de fijar estos parámetros a valores específicos, podemos tratarlos como variables aleatorias con sus propias distribuciones.

Al integrar estos hiperparámetros, esencialmente promediamos todos los posibles valores de estos parámetros de acuerdo con sus distribuciones, lo que nos permite obtener un modelo más robusto y flexible que no sea demasiado sensible a la elección de hiperparámetros.

Entonces, "integrar estos parámetros" en los procesos gaussianos se refiere a incorporar su incertidumbre en el modelo considerando todos los posibles valores de estos parámetros en lugar de fijarlos a valores específicos.

Alternatively, if we take the prior on  $\beta$  to be Gaussian,  $\beta \sim \mathcal{N}(\mathbf{b}, B)$ , we can also integrate out these parameters. Following O'Hagan [1978] we obtain another GP

$$g(\mathbf{x}) \sim \mathcal{GP}(\mathbf{h}(\mathbf{x})^\top \mathbf{b}, k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') + \mathbf{h}(\mathbf{x})^\top B \mathbf{h}(\mathbf{x}')) \quad (2.40)$$

now with an added contribution in the covariance function caused by the uncertainty in the parameters of the mean. Predictions are made by plugging the mean and covariance functions of  $g(\mathbf{x})$  into eq. (2.39) and eq. (2.24). After rearranging, we obtain

$$\bar{\mathbf{g}}(X_*) = H_*^\top \bar{\boldsymbol{\beta}} + K_*^\top K_y^{-1}(\mathbf{y} - H^\top \bar{\boldsymbol{\beta}}) = \bar{\mathbf{f}}(X_*) + R^\top \bar{\boldsymbol{\beta}} \quad (2.41)$$

$$\text{cov}(\mathbf{g}_*) = \text{cov}(\mathbf{f}_*) + R^\top (B^{-1} + HK_y^{-1}H^\top)^{-1}R \quad (2.41)$$

where the  $H$  matrix collects the  $\mathbf{h}(\mathbf{x})$  vectors for all training (and  $H_*$  all test) cases,  $\bar{\boldsymbol{\beta}} = (B^{-1} + HK_y^{-1}H^\top)^{-1}(HK_y^{-1}\mathbf{y} + B^{-1}\mathbf{b})$ , and  $R = H_* - HK_y^{-1}K_*$ . Notice the nice interpretation of the mean expression, eq. (2.41) top line:  $\bar{\boldsymbol{\beta}}$  is the mean of the global linear model parameters, being a compromise between the data term and prior, and the predictive mean is simply the mean linear output plus what the GP model predicts from the residuals. The covariance is the sum of the usual covariance term and a new non-negative contribution.

Exploring the limit of the above expressions as the prior on the  $\boldsymbol{\beta}$  parameter becomes vague,  $B^{-1} \rightarrow O$  (where  $O$  is the matrix of zeros), we obtain a predictive distribution which is independent of  $\mathbf{b}$

$$\bar{\mathbf{g}}(X_*) = \bar{\mathbf{f}}(X_*) + R^\top \bar{\boldsymbol{\beta}}$$

where the limiting  $\bar{\boldsymbol{\beta}} = (HK_y^{-1}H^\top)^{-1}HK_y^{-1}\mathbf{y}$ . Notice that predictions under the limit  $B^{-1} \rightarrow O$  should not be implemented naïvely by plugging the modified covariance function from eq. (2.40) into the standard prediction equations, since the entries of the covariance function tend to infinity, thus making it unsuitable for numerical implementation. Instead eq. (2.42) must be used. Even if the non-limiting case is of interest, eq. (2.41) is numerically preferable to a direct implementation based on eq. (2.40), since the global linear part will often add some very large eigenvalues to the covariance matrix, affecting its condition number.

## 5 Método de selección de puntos de muestreo

Los agentes solo toman medidas cuando han llegado a su punto de muestreo. Una vez allí retransmiten la medida a sus vecinos. Cada agente actualiza su modelo del campo solo cuando ha recibido información nueva (de un vecino que llegado a su respectivo punto de muestreo). Los agentes añaden la información recibida a su memoria  $S_i(t_k)$  aumentando su conocimiento del campo con el tiempo. Así puede ser que un agente recalcule su siguiente punto de muestreo  $\mathbf{x}_{k+1}$  sin haber llegado al anterior  $\mathbf{x}_k$ . De esta forma minimiza el número de mediciones necesarias.

Para lograr la máxima eficiencia, la selección de puntos de muestreo no debe ser arbitraria. Cada agente debe ser capaz de especificar su siguiente punto de muestreo en base a su memoria, teniendo en cuenta las restricciones de su dinámica. Un correcto método de elección de siguientes puntos de muestreo distribuye la carga de exploración entre los agentes

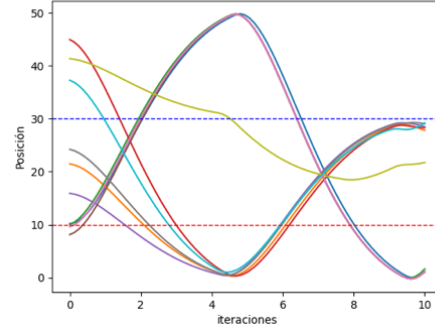
### 5.1 Método 1

El primer método es el más simple. El siguiente punto de búsqueda es el valor máximo del campo modelado  $\hat{\phi}_{i,k}$  por el agente  $i$  en el tiempo  $t_k$

$$\mathbf{x}_i^d(t_k) = \arg \max_{\mathbf{x} \in D} \{\hat{\phi}_{i,k}(\mathbf{x})\}$$

Este método tiene como principal desventaja que el siguiente punto de muestreo será igual para grupos de agentes vecinos entre ellos de manera que convergen rápidamente formando grupos que son efectivamente como un solo agente al aportar toda la misma información. Cuando se dan estas

agrupaciones de puntos se rompe la homogeneidad en la distribución de las medidas y el modelo puede ser de pésima calidad.



## 5.2 Método 2

El segundo método es más sofisticado e intenta distribuir mejor la carga de búsqueda. Supongamos que la estimación del máximo de  $\phi$  realizada por el agente  $i$  en el tiempo  $t_k$  es:

$$f_{\max}^i(t_k) = \max_{\mathbf{x} \in S_i(t_k)} \{\hat{\phi}_{i,k}(\mathbf{x})\}$$

La técnica propuesta, inspirada en (19), consiste en seleccionar el siguiente punto de muestreo para el agente  $i$  como:

$$\mathbf{x}_i^d(t_k) = \arg \min_{\mathbf{x} \in D} \{J_i^{(k)}(\mathbf{x})\}$$

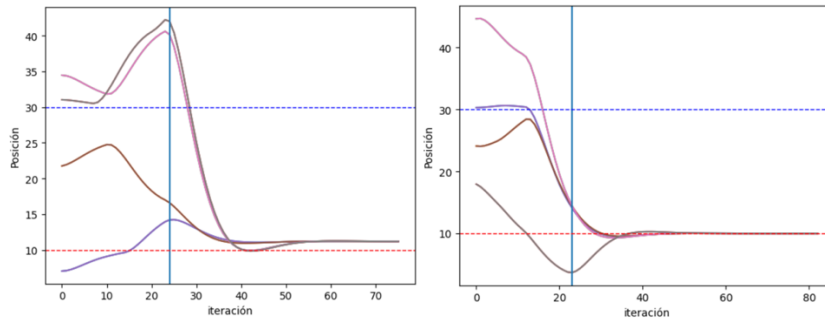
Con la siguiente condición que restringe el subconjunto de  $D$  que potencialmente contiene el máximo:

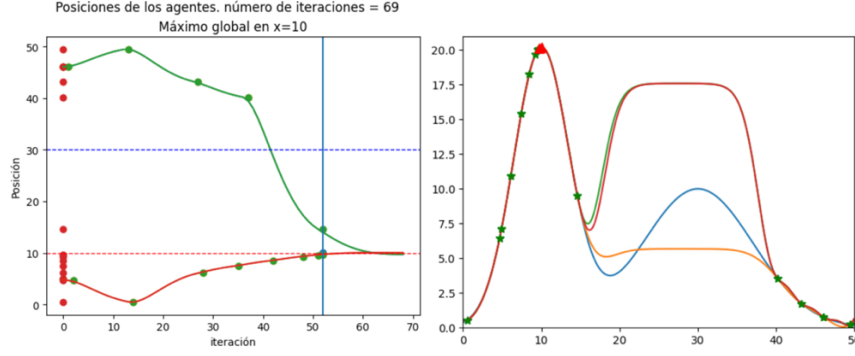
$$\hat{\phi}_{i,k}(\mathbf{x}) + b\sigma_{\phi,i,k}(\mathbf{x}) > f_{\max}^i(t_k)$$

Siendo  $b$  un parámetro llamado ‘curiosidad’ pues de su valor depende la relevancia de las regiones con mayor incertidumbre

$$J_i^{(k)}(\mathbf{x}) = \|\mathbf{x}_i(t_k) - \mathbf{x}\|^2 - \sum_{j \in \mathcal{N}_i(t_k)} \alpha \|\mathbf{x}_j(t_k) - \mathbf{x}\|^2$$

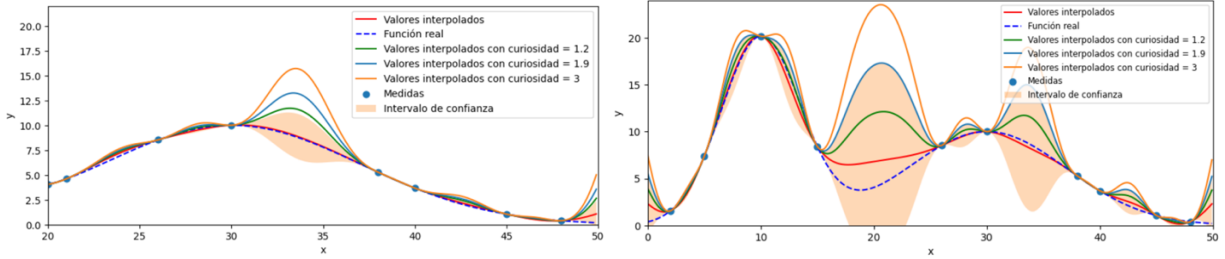
$\alpha$  y  $b$  son dos parámetros positivos





En las siguientes gráficas se observa como al aumentar el parámetro de curiosidad  $b$  las más regiones pasan a cumplir la condición:

$$\hat{\phi}_{i,k}(\mathbf{x}) + b\sigma_{\phi,i,k}(\mathbf{x}) > f_{\max}^i(t_k)$$



Así se busca un siguiente punto de muestreo lo suficientemente cerca a la posición actual del agente  $\mathbf{x}_i(t_k)$  y lo suficientemente lejos de las posiciones de otros agentes vecinos  $\mathbf{x}_j(t_k), j \in \mathcal{N}_i(t_k)$ . **La convergencia al máximo no está garantizada con éste método.** Si uno de los agentes se genera espontáneamente muy cerca del máximo, puede empezar a realizar medidas muy juntas y el modelo explota

## 6 Ley de control

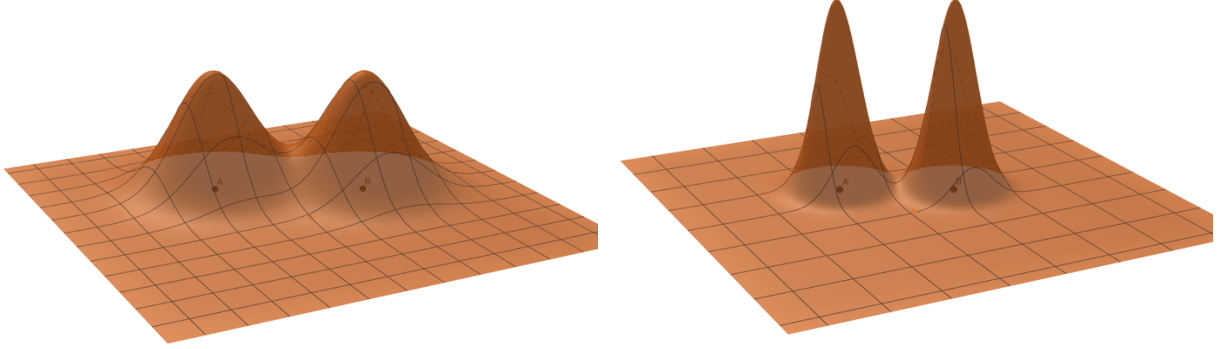
Cuando un agente calcula su siguiente punto de muestreo  $\mathbf{x}_i^d(t_k)$ , debe modificar su trayectoria para llegar a dicho punto y tomar una medida allí. Cada agente se mueve hacia  $\mathbf{x}_i^d$  con velocidad terminal  $\dot{\mathbf{x}}_i^d$ , evitando colisionar con otros agentes. Esto se consigue usando la ley de control:

$$\mathbf{u}_i = C(\mathbf{x}_i, \dot{\mathbf{x}}_i)\dot{\mathbf{x}}_i - k_3(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_i^d) + 2k_2 \sum_{j=1}^N (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \frac{1}{q} \exp \left( -\frac{(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T (\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)}{q} \right) - k_1(\dot{\mathbf{x}}_i - \dot{\mathbf{x}}_i^d)$$

Donde  $k_1, k_2, k_3, q$  son parámetros positivos.

Esta ley de control se puede entender como un potencial experimentado por los agentes centrado en  $\mathbf{x}_i^d$ . El término con  $k_3$  es el de mayor importancia, pues controla la atracción de los agentes hacia el pozo del potencial. El término con  $k_1$  define un potencial de velocidades, es decir, una velocidad terminal. El término con  $k_2$  define un potencial de repulsión gaussiano, de manera que

podemos interpretar  $q$  como la desviación típica, que en este caso controla la anchura del potencial de repulsión. La suma a todos los vecinos hace que las gaussianas se superpongan correctamente, como se ve a continuación:



Que hace el prefactor  $(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)$  ???

La ley de control lleva a los agentes asintóticamente a la posición deseada  $\mathbf{x}_i^d(t_k)$  con velocidad nula  $\dot{\mathbf{x}}_i^d(t_k) = 0$ , El agente toma la medida cuando  $\|\mathbf{x}_i(t_k) - \mathbf{x}_i^d(t_k)\| < \epsilon$ . Es importante que el agente llegue al punto de muestreo con velocidad nula pues modela la posible tardanza de medición, por ejemplo que el agente deba realizar una perforación en la roca. Es importante que los agentes tengan velocidad terminal para que no llegue un agente al siguiente punto de muestreo antes que otro que estaba más lejos

## 7 Implementación del modelo y algoritmo

La implementación del modelo de kriging se hará mediante la librería de python pykrige. Como a priori, no se conoce si existe una tendencia general útil en los datos, se usará kriging ordinario. Kriging universal se puede implementar fácilmente. El modelo de kriging se resuelve mediante la librería de python orientada a geoestadística Pykrige. Incluye algunas diferencias superficiales con la teoría expuesta hasta ahora.

---

**Algorithm 1** Maximum seeking Algorithm

---

```

for every time instant  $t_k$  do
  for each agent  $i$  do
    if  $\mathbf{x}_i(t_k) = \mathbf{x}_i^d(t_k)$  then
      Acquire a measurement  $y_i$  at  $\mathbf{x}_i(t_k)$  (2)
      Broadcast  $\{y_i, \mathbf{x}_i(t_k)\}$  to neighbors  $j \in \mathcal{N}_i(t_k)$ 
      Update  $S_i(t_k)$ 
    end if
    if  $S_i(t_k) \neq S_i(t_{k-1})$  then
      Update the Kriging model (17) and (18)
      Solve (22) to find  $\mathbf{x}_i^d(t_k)$ 
    else
       $\mathbf{x}_i^d(t_k) = \mathbf{x}_i^d(t_{k-1})$ 
    end if
    Compute the control input  $\mathbf{u}_i(t_k)$  (24)
  end for
end for

```



En geoestadística se usa la noción de variograma, que no es más que una modificación de la función de covarianza para hacerla más versátil para de manera que se tiene:

$$e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{|\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q|}{\ell}\right)^2} = e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{d}{\ell}\right)^2} \rightarrow p \cdot \left(1 - e^{-\frac{d^2}{\left(\frac{4}{7}r\right)^2}}\right) + n$$

$d$  = distancias para las que calcular el variograma

$p$  = partial sill (psill = sill - nugget)

$r$  = range

$n$  = nugget