

Modelos sustitutos basados en la física en problemas inversos

Anel M. Galaviz Cuen, J. Andrés Christen y Antonio Capella.

anel.galaviz, jac a cimat.mx y capella a im.unam.mx



Departamento de Probabilidad y Estadística, Centro de Investigación en Matemáticas

Resumen

En este trabajo se analiza un modelo sustituto para Forward Maps computacionalmente costos para facilitar, de hecho, hacer capaz la inferencia sobre un parámetro involucrado en una ecuación diferencial parcial elíptica.

Introducción

Los problemas de UQ bayesiana se pueden resumir de manera somera sobre el problema de inferir θ en

$$y_i = G_i(\theta) + \epsilon_i \quad \text{con } \epsilon_i \sim N(0, \sigma^2), \quad (1)$$

en nuestro caso la función enlace $G : \Theta \rightarrow \mathbb{R}^m$ es la composición de dos operadores: el Forward Map $\mathcal{F} : \Theta \rightarrow \mathcal{V}$ donde \mathcal{V} es un espacio de Sobolev y así obtenemos la solución de una PDE elíptica y del operador observación $\mathcal{H} : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}^m$, es decir, en nuestro caso G se compone por

$$\theta \xrightarrow{\mathcal{F}} u_\theta \xrightarrow{\mathcal{H}} \{u_\theta(x_1), u_\theta(x_2), \dots, u_\theta(x_m)\},$$

y para obtener G_i basta con considerar $\mathcal{H}_i : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$, como $\mathcal{H}_i(u_\theta) = u_\theta(x_i)$. La verosimilitud resultante es muy costosa de evaluar dado que comúnmente se requiere un método numérico complejo para resolver el sistema de PED's para obtener $\mathcal{F}(\theta)$. En esta investigación buscamos modelos sustitutos (*surrogate*) $\mathcal{F}'(\theta)$, computacionalmente accesibles, para hacer posible la inferencia de θ .

Modelo Sustituto

Sean $u_{\theta_1}, \dots, u_{\theta_n}$ soluciones de una PDE elíptica. Esta PDE depende de un parámetro θ , entonces su forma débil nos dice que

$$\mathcal{A}_{\theta_i}(u_{\theta_i}, v) = \mathcal{L}(v) \quad \forall v \in \mathcal{V}, \quad \text{para } i = 1, \dots, n$$

donde \mathcal{V} es un espacio de Sobolev. Suponemos que existe una constante $K > 0$ tal que

$$\sup_{v \in \mathcal{V}, \|v\|_{\mathcal{V}} \leq 1} |\mathcal{A}_\theta(u, v) - \mathcal{A}_{\theta'}(u, v)| \leq KG_{\theta'}(\theta) F_{\theta'}(u). \quad (2)$$

Nuestra propuesta es un Forward Map sustituto $\mathcal{F}' : \Theta \rightarrow \mathcal{V}$ tal que

$$\mathcal{F}'(\theta) \rightarrow \hat{u}_\theta = \sum_{i=1}^n \alpha_i u_{\theta_i}$$

con $\alpha_i \geq 0$ y $\sum \alpha_i = 1$. Entonces

$$\begin{aligned} \sup_{v \in \mathcal{V}, \|v\|_{\mathcal{V}} \leq 1} |\mathcal{A}_\theta(\hat{u}_\theta, v) - \mathcal{L}(v)| &\leq \sup_{v \in \mathcal{V}, \|v\|_{\mathcal{V}} \leq 1} \sum_{i=1}^n |\alpha_i| |\mathcal{A}_\theta(u_{\theta_i}, v) - \mathcal{L}(v)| \\ &\leq \sum_{i=1}^n |\alpha_i| KG_{\theta_i}(\theta) F_{\theta_i}(u), \end{aligned}$$

al normalizar obtenemos entonces

$$|\alpha_i(\theta)| = \frac{1}{G_{\theta_i}(\theta) F_{\theta_i}(u) \left(\sum_{j=1}^n \frac{1}{G_{\theta_j}(\theta) F_{\theta_j}(u)} \right)},$$

y por definición $\alpha_i(\theta_i) = 1$ y $\alpha_i(\theta_j) = 0$ para $j \neq i$ con $i = 1, \dots, n$. Así

$$\sup_{v \in \mathcal{V}, \|v\|_{\mathcal{V}} \leq 1} |\mathcal{A}_\theta(\hat{u}_\theta, v) - \mathcal{L}(v)| \leq \frac{K}{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \frac{1}{G_{\theta_j}(\theta) F_{\theta_j}(u)}} = C(n). \quad (3)$$

Con lo anterior podemos acotar el error de nuestro modelo sustituto.

Teorema

Si \hat{u}_θ es una solución sustituta de u_θ de un problema con PDE elíptica con forma bilineal $\mathcal{A}_\theta(u, v)$ coercitiva con constante de coercitividad c_θ . Entonces

$$\|\hat{u}_\theta - u_\theta\|_{\mathcal{V}} \leq C(n)/c_\theta.$$

Problema inverso en la tomografía de impedancia eléctricas

Sea $B \subset \mathbb{R}^2$ el círculo unitario, nuestro problema es

$$\text{div}(\lambda_\rho \nabla u) = 0 \quad \text{en } B, \quad \lambda_\rho \frac{\partial u}{\partial n} = f \quad \text{en } \partial B. \quad (4)$$

con $R = 0.85$ y función de conductividad

$$\lambda_\rho(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } R < |x| < 1, \\ 1 + \rho & \text{si } |x| < R. \end{cases}$$

Tenemos una solución analítica u_ρ para el problema (4). Ahora, el objetivo es inferir el parámetro ρ suponiendo que no conocemos la solución u_ρ . Se implementó el algoritmo MCMC t-walk (Christen and Fox (2010)) para obtener una muestra de la posterior con $\rho = 2.25$ el valor verdadero. Se toma como a priori $\rho \sim U(0, 10)$ y para construir nuestro modelo se tomaron n valores de ρ equidistantes en el dominio. Se presenta una tabla de comparaciones en tiempos de ejecución para la construcción de nuestro modelo utilizando FreeFem

n	a)	b)	c)
n = 5	4.539 min	29.7 min	0.570 hrs
n = 10	7.465 min	32.9 min	0.672 hrs
n = 25	25.268 min	33.2 min	0.974 hrs
n = 100	73.520 min	35.1 min	1.810 hrs

Cuadro 1: n es el número de soluciones en el modelo sustituto. a) es el tiempo requerido para construir el modelo. b) es el tiempo requerido en el MCMC. c) es el tiempo total requerido.

Para hacer una comparación, para hacer 1 millón de iteración en el algoritmo MCMC sin usar nuestro modelo, tomaría aproximadamente **532.291** días. Finalmente se presentan los histogramas de cada modelo.

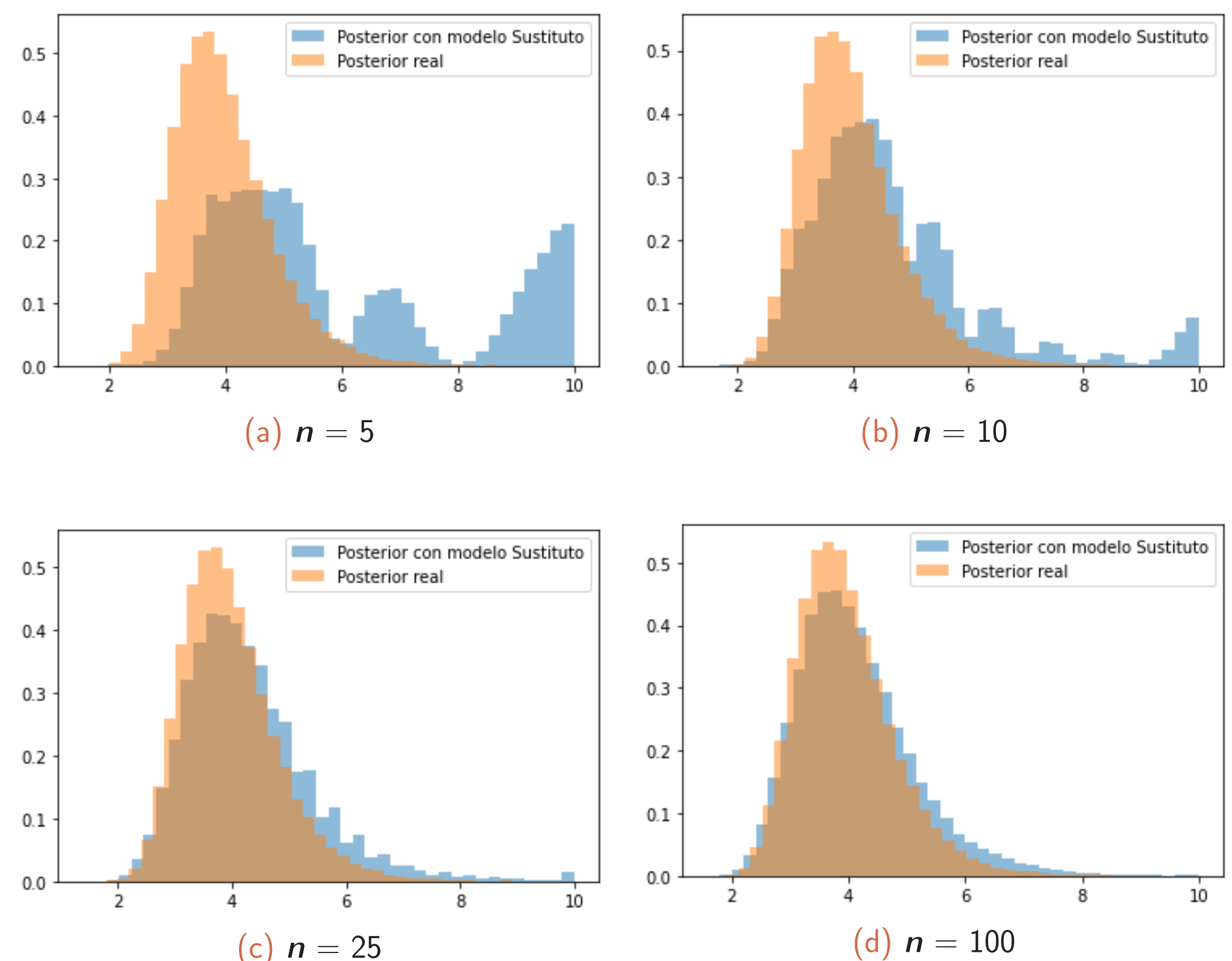


Figura 1: Histogramas de la posterior con 1 millón de iteraciones.

Discusión y Conclusiones

- Actualmente se tienen modelos sustitutos alternos ya estudiados (Asher (2015) y Deveney et al. (2019)), pero en este trabajo presentamos uno nuevo y sus ventajas.
- La elección de los elementos $\theta_1, \dots, \theta_n$ para la construcción del modelo sustituto pueden ser tomados con un diseño secuencial (Christen (2011)).
- El modelo sustituto está fuertemente basado en la desigualdad (2).
- A diferencia de otros modelos, nuestro modelo está basado en la física del problema, ya que se busca mantener la ley de conservación que representa la forma variacional en (3).

Referencias

- Asher, M. J.; Croke, B. F. W. J. A. J. P. L. J. M. (2015). A review of surrogate models and their application to groundwater modeling. *Water Resources Research*, 51:5957–5973.
- Christen, J. Andrés; Sansó, B. (2011). Advances in the sequential design of computer experiments based on active learning. *Communication in Statistics-Theory and Methods*, 40:4467–4483.
- Christen, J. A. and Fox, C. (2010). A general purpose sampling algorithm for continuous distributions (the t-walk). *Bayesian Analysis*, 5(2):263 – 281.
- Deveney, T., Mueller, E., and Shardlow, T. (2019). A deep surrogate approach to efficient bayesian inversion in pde and integral equation models.