

**Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**

---

# Solução de um Problema Inverso em Dinâmica Populacional através de Inferência Bayesiana e os Métodos Luus-Jaakola e Gauss-Newton

Maiquison dos Santos Friguis<sup>1</sup>

Instituto Federal Fluminense, Campus Cabo Frio, Cabo Frio, RJ

Diego Campos Knupp<sup>2</sup>

Luiz Alberto Silva Abreu<sup>3</sup>

Antônio José da Silva Neto<sup>4</sup>

Departamento de Engenharia Mecânica e Energia, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ

**Resumo.** Neste trabalho é proposto o estudo da dinâmica de evolução de uma população na presença de armadilhas locais. O problema direto é resolvido com a Técnica de Transformada Integral Generalizada, oferecendo uma solução de baixo custo computacional. O problema inverso de estimativa de parâmetros é formulado através da abordagem Bayesiana, definindo-se a função objetivo de *Maximum a Posteriori*. A principal contribuição é a proposta de hibridização entre os métodos Luus-Jaakola e Gauss-Newton. Os resultados obtidos mostram que a abordagem é capaz de reduzir a influência das estimativas iniciais dos parâmetros.

**Palavras-chave.** Dinâmica Populacional, Transformada Integral, Inferência Bayesiana

## 1 Introdução

A compreensão da dinâmica de populações que atuam como vetores de doenças é de extrema importância [3,5]. Modelos que descrevem essas populações podem ser formulados pela equação da difusão considerando mecanismos de controle e taxas de natalidade e mortalidade logísticas. Considerando que as equações que governam este problema são tipicamente não-lineares, optou-se pela Técnica da Transformada Integral Generalizada [1] para a solução do problema direto. Esta escolha possibilitou a proposta de uma solução de baixa ordem, reduzindo drasticamente o custo computacional. O problema inverso foi formulado por meio de inferência Bayesiana, definindo-se a função objetivo da *Maximum a Posteriori*, cuja minimização foi realizada com uma hibridização entre o método estocástico de Luus-Jaakola [4] e o método determinístico de Gauss-Newton [2], com o objetivo de aliar a relativa independência da estimativa inicial que os métodos estocásticos possuem, evitando estagnação em mínimos locais, com a rápida convergência do método de Gauss-Newton.

---

<sup>1</sup>maiquison@hotmail.com

<sup>2</sup>diegoknupp@iprj.uerj.br

<sup>3</sup>luiz.abreu@iprj.uerj.br

<sup>4</sup>ajsneto@iprj.uerj.br

## 2 Formulação Matemática e Solução do Problema Direto

Considere que uma população com densidade  $u$  localizada em um domínio unidimensional é governada pela lei de Fick com coeficiente de dispersão  $D$ . Considere ainda que o atraso no tempo de reprodução é  $\tau$ , a taxa de morte prematura é dada por  $\mu$  e a taxas de natalidade e mortalidade são dadas, respectivamente, por  $b(u)$  e  $d(u)$ . A equação que governa este fenômeno é dada por [5]:

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) + e^{-\mu\tau} b(u) - d(u) - \sum_{j=1}^{N_{cs}} B_j u(x_j, t) \delta(x - x_j) \quad (1)$$

para  $0 < x < L$  e  $t > 0$ , onde  $x_j$  representa a localização de cada armadilha com intensidade  $B_j$  com número total dado por  $N_{cs}$ ,  $\delta(x - x_j)$  é a função Delta de Dirac e a condição inicial é dada por:

$$u(x, t) = u_0(x, t), \quad -\tau \leq t \leq 0 \quad (2)$$

juntamente com as condições de contorno, dadas por:

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=L} = 0 \quad (3)$$

As taxas logísticas de nascimento e morte,  $b(u)$  e  $d(u)$ , são:

$$b(u) = \frac{u(x, t - \tau)}{K + Cu(x, t - \tau)}, \quad d(u) = \frac{Pu^2(x, t)}{K + Cu(x, t - \tau)} \quad (4)$$

onde  $P$ ,  $K$  e  $C$  são parâmetros do modelo de crescimento logístico.

Seguindo o formalismo da Técnica de Transformada Integral Generalizada [1], pode-se definir o seguinte par Transformada-Inversa:

$$\text{Transformada : } \bar{u}_i(t) = \int_0^L u(x, t) \tilde{\psi}_i(x) dx \quad (5)$$

$$\text{Inversa : } u(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_i(x) \bar{u}_i(t)$$

onde as autofunções normalizadas  $\tilde{\psi}_i(x)$  são encontradas pela normalização de autofunções geradas pela solução do problema de autovalor diferencial de Sturm-Liouville, obtido pela aplicação da técnica de separação de variáveis à versão homogênea linear do problema original [1].

Com a aplicação do operador  $\int_0^L (\cdot) \tilde{\psi}_i(x) dx$  ao problema original, o seguinte sistema transformado é obtido:

$$\frac{d\bar{u}_i(t)}{dt} + \lambda_i^2 \bar{u}_i(t) = \bar{g}_i(t, \mathbf{u}) \quad (6)$$

onde  $\lambda_i$  são os autovalores associados às autofunções  $\tilde{\psi}_i(x)$ , e:

$$\mathbf{u} = (\bar{u}_1, \bar{u}_2, \dots, \bar{u}_N) \quad (7)$$

$$\bar{g}_i(t, \mathbf{u}) = \bar{g}_{i,1}(t, \mathbf{u}) + \bar{g}_{i,2}(t, \mathbf{u}) + \bar{g}_{i,3}(t, \mathbf{u}) \tag{8}$$

onde:

$$\bar{g}_{i,1} = \int_0^L \frac{\tilde{\psi}_i(x) e^{-\mu\tau} \sum_{j=1}^N \bar{u}_j(t-\tau) \tilde{\psi}_j(x)}{K + C \sum_{j=1}^N \bar{u}_j(t-\tau) \tilde{\psi}_j(x)} dx \tag{9}$$

$$\bar{g}_{i,2} = \int_0^L \frac{\tilde{\psi}_i(x) P \left( \sum_{j=1}^N \bar{u}_j(t) \tilde{\psi}_j(x) \right)^2}{K + C \sum_{j=1}^N \bar{u}_j(t) \tilde{\psi}_j(x)} dx \tag{10}$$

$$\bar{g}_{i,3} = \sum_{k=1}^{N_{cs}} B_k \tilde{\psi}_i(x_k) \left( \sum_{j=1}^N \bar{u}_j(t) \tilde{\psi}_j(x_k) \right) \tag{11}$$

A condição inicial transformada é dada por:

$$\bar{u}_i(t) = \int_0^L \tilde{\psi}_i(x) u_0(x, t) dx, \quad -\tau \leq t \leq 0, \quad i = 1, \dots, N \tag{12}$$

O sistema infinito acoplado obtido é truncado em uma ordem  $N$  e solucionado numericamente através da rotina `NDSolve` do software *Mathematica*, com controle automático dos erros absoluto e relativo. Com a finalidade de reduzir o custo computacional associado à solução do problema direto, foi feita a redução dos limites superiores dos somatórios presentes nas Eqs. (9-11) para uma ordem  $N_R < N$ , com o número de termos alto o suficiente para alcançar a precisão desejada.

### 3 Formulação e Solução do Problema Inverso

Para investigar a solução do problema inverso relativo à estimativa de um vetor de parâmetros  $\mathbf{P}$  necessita-se de um conjunto de dados experimentais  $\mathbf{Y}$ . Na ausência desses dados experimentais reais, neste trabalho é simulado um conjunto de dados utilizando a solução do problema direto com adição de ruído modelado por uma distribuição normal, como segue:

$$Y_i = U_i(\mathbf{P}) + \epsilon_i, \quad \epsilon_i \sim N(0, \sigma_\epsilon), \quad i = 1, 2, \dots, N_d \tag{13}$$

Neste trabalho considera-se  $\sigma_\epsilon = 0,002$ . Como a prática de usar o mesmo modelo para simular os dados experimentais e resolver o problema inverso é conhecida como crime inverso [2], de forma a atenuar os seus efeitos os dados experimentais foram obtidos utilizando um modelo com alta ordem de truncamento, com  $N_R = N$ .

Fundamentalmente, abordagens estatísticas para solução de problemas inversos buscam a utilização de toda informação disponível *a priori* sobre os parâmetros a serem estimados, reduzindo assim suas incertezas associadas. As técnicas estatísticas de solução de problemas inversos são baseadas nos seguintes princípios: (i) todas as variáveis do problema são modeladas como aleatórias; (ii) a aleatoriedade descreve o grau de informação; (iii) as informações são codificadas como distribuições de probabilidade; (iv) a solução do problema inverso é a distribuição a posteriori. Considerando conhecida a informação a priori sobre os parâmetros  $\mathbf{P}$  a distribuição de probabilidade a posteriori pode ser calculada pelo teorema de Bayes [2];

A distribuição a posteriori pode ser explorada de diversas formas [2]. Neste trabalho será buscada a estimativa que maximize a posteriori através da definição da função objetivo conhecida como *Maximum a Posteriori* (MAP) [2]. Considerando que os erros em relação aos dados experimentais são aditivos, não correlacionados, e têm uma distribuição normal com média zero, o desvio padrão constante, a priori e a verossimilhança podem ser modeladas, respectivamente, por [2]:

$$\pi(\mathbf{P}) = (2\pi)^{-N_p/2} |\mathbf{V}|^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} (\mathbf{P} - \mu)^T \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{P} - \mu) \right] \quad (14)$$

$$\pi(\mathbf{Y}|\mathbf{P}) = (2\pi)^{-N_d/2} |\mathbf{W}|^{-1/2} \exp \left[ -\frac{1}{2} \mathbf{R}^T \mathbf{W}^{-1} \mathbf{R} \right] \quad (15)$$

onde  $N_p$  é o número de parâmetros,  $\mathbf{V}$  é a matriz de covariância,  $\mu$  é média a priori,  $N_d$  é o número de dados experimentais,  $\mathbf{W}$  é a matriz de covariância dos erros em relação aos dados experimentais e  $\mathbf{R}$  é o vetor residual, que tem seus elementos dados por:

$$R_i = Y_i - U_i(\mathbf{P}), \quad i = 1, 2, \dots, N_d \quad (16)$$

onde  $\mathbf{U}(\mathbf{P})$  é o vetor contendo as densidades populacionais nas coordenadas espaciais e temporais de obtenção dos dados experimentais, dadas pela solução do problema direto em relação aos parâmetros estimados  $\mathbf{P}$ . Substituindo as Eqs. (14) e (15) no teorema de Bayes, obtém-se:

$$\ln [\pi(\mathbf{P}|\mathbf{Y})] \propto -\frac{1}{2} [(N_p - N_d) \ln 2\pi + \ln |\mathbf{W}|^{-1} + \ln |\mathbf{V}|^{-1} + Q_{MAP}(\mathbf{P})] \quad (17)$$

onde

$$Q_{MAP} = \mathbf{R}^T \mathbf{W} \mathbf{R} + (\mu - \mathbf{P})^T \mathbf{V}^{-1} (\mu - \mathbf{P}) \quad (18)$$

é conhecida como a função objetivo *Maximum a Posteriori* (MAP).

A minimização da função objetivo MAP é realizada utilizando o método estocástico de Luus-Jaakola [4] e o método determinístico de Gauss-Newton [2], com o objetivo de aliar a relativa independência de escolha da estimativa inicial, característica dos métodos estocásticos, com a rápida convergência, característica dos métodos determinísticos.

## 4 Resultados e Discussões

Baseando-se no trabalho [5] foram utilizados os valores da Tabela 1 para os parâmetros do modelo, como caso teste. Na Tabela 2 é apresentado o comportamento da solução do problema direto considerando a presença de armadilhas com intensidade constante  $B_j$ ,  $j = 1, \dots, N_{cs}$ , posicionadas em  $x_1 = 0, 2$ ,  $x_2 = 0, 4$ ,  $x_3 = 0, 6$  e  $x_4 = 0, 8$ . Os resultados apresentados foram calculados com  $M = 150$  sub-regiões na integração semi-analítica. Nestes resultados pode-se notar uma boa convergência, de três dígitos significativos para  $N < 150$  na solução completa e dois dígitos significativos na solução de baixa ordem com  $N_R = 1$ . Além disso, é observada uma concordância de dois dígitos significativos entre a solução de baixa ordem e a solução completa em  $x = 0, 2$  e  $x = 0, 4$ , e um dígito

significativo em  $x = 0,5$ . Ainda, observando-se a Figura 1 pode-se perceber uma boa aderência entre a solução de baixa ordem e a solução completa, especialmente nos pontos centrais do domínio. Ressalta-se que com a solução de baixa ordem uma redução de tempo computacional de 95% é alcançada.

Tabela 1: Parâmetros para solução do problema direto.

$D$	$P$	$K$	$C$	$B$	$\mu$	$\tau$	$L$	$u_0(x, t)$
0,0001	0,005	1	0,5	0,001	0,0	10	1	1

Tabela 2: Convergência da solução do problema direto ( $t = 50$ ).

$N$	Reduzido			Sem Redução		
	$x = 0,2$	$x = 0,4$	$x = 0,5$	$x = 0,2$	$x = 0,4$	$x = 0,5$
90	0,711859	0,705561	0,878131	0,715047	0,709826	0,879428
120	0,710362	0,704094	0,879055	0,700174	0,694910	0,862890
150	0,709483	0,703233	0,878877	0,699298	0,694049	0,862718

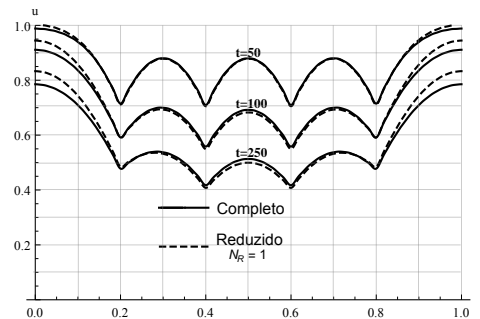


Figura 1: Perfil de densidade para diferentes tempos.

Na solução do problema inverso considerou-se, para obtenção dos dados experimentais, sensores posicionados em  $x = 0,3$  e  $x = 0,4$  e o vetor de parâmetros  $\mathbf{P} = \{D, P, K, B\}$  deve ser estimado. Na minimização da função objetivo MAP considerou-se uma estimativa inicial arbitrária, afastada da solução esperada, como ponto de partida para o método de Luus-Jaakola, modelado com os seguintes parâmetros:  $n_{ext} = 20$ ,  $n_{int} = 30$  e  $\epsilon = 0,1$ . Estes resultados são apresentados na Tabela 3, juntamente com os intervalos de confiança de 99%, aproximados por:

$$\hat{P}_i - 2,576\sigma_{\hat{P}_i} \leq P_i \leq \hat{P}_i + 2,576\sigma_{\hat{P}_i}, \quad \sigma_{\hat{P}_i} = \sqrt{[(\mathbf{J}^T \mathbf{W}^{-1} \mathbf{J} + \mathbf{V}^{-1})^{-1}]_{i,i}} \quad (19)$$

onde  $\hat{P}_i$  e  $\sigma_{\hat{P}_i}$  correspondem respectivamente à estimativa e ao desvio padrão do parâmetro.

Outra grandeza apresentada na Tabela 3 é a medida relativa do intervalo de confiança de cada parâmetro (CI%), calculada como:

$$CI_i = \frac{\hat{P}_i^+ - \hat{P}_i^-}{\hat{P}_i} \times 100\% \quad (20)$$

A estimativa obtida com o método de Luus-Jaakola é então empregada como estimativa inicial para o método determinístico de Gauss-Newton, e os resultados são apresentados na Tabela 4. Nestes resultados observa-se que o método de Luus-Jaakola, Tabela 3, não foi capaz de identificar intervalos de confiança corretos para os parâmetros. Entretanto, as estimativas obtidas serviram de boas estimativas iniciais para o procedimento iterativo de Gauss-Newton, Tabela 4. Apesar de estimativas próximas aos valores esperados terem sido obtidas, verifica-se que o valor exato dos parâmetros não se encontra dentro do intervalo de confiança estimado. Isto pode ser explicado pela solução de baixa ordem empregada, ou pela não-linearidade do modelo, que pode tornar o emprego da Eq. (19) pouco preciso na estimativa dos intervalos de confiança. Na Figura 2(a) pode-se observar o ajuste entre os dados experimentais e a predição do modelo utilizando tanto as estimativas do método de Luus-Jaakola, quanto as estimativas após o refinamento (Gauss-Newton). Os resíduos apresentados na Figura 2(b) são pequenos, especialmente para a solução após o refinamento, confirmando o bom ajuste. Certa autocorrelação (assinatura) é observada no resíduo, resultado do emprego da solução de baixa ordem.

Tabela 3: Resultados Luus-Jaakola.

Parâm.	Ext.	Interv. de Busca	Est. Inicial	Est.	Interv. de Conf.	CI Estim. %
$D \times 10^4$	1	[0, 4]	2,0	3,07650	[2, 99750, 3, 15550]	15,81
$P \times 10^3$	5	[0, 10]	8,7	8,33759	[8, 18287, 8, 49230]	6,19
K	1	[0, 4]	2,0	2,05129	[2, 00649, 2, 09609]	8,96
$B \times 10^3$	1	[0, 4]	2,0	2,09392	[2, 04757, 2, 14028]	9,27

Tabela 4: Resultados Gauss-Newton.

Parâm.s	Ext.	Inicial	Estimado	IC	CI %
$D \times 10^4$	1	3,07650	0,98255	[0, 96460, 0, 10005]	3,59
$P \times 10^3$	5	8,33759	4,30013	[4, 27095, 4, 32931]	1,17
K	1	2,05129	0,76183	[0, 74979, 0, 77386]	2,41
$B \times 10^3$	1	2,09392	0,76957	[0, 75679, 0, 78235]	2,56

## 5 Conclusões

Neste trabalho foi empregado o método híbrido GITT para a solução de um problema não linear de dinâmica populacional, reduzindo significativamente o custo computacional

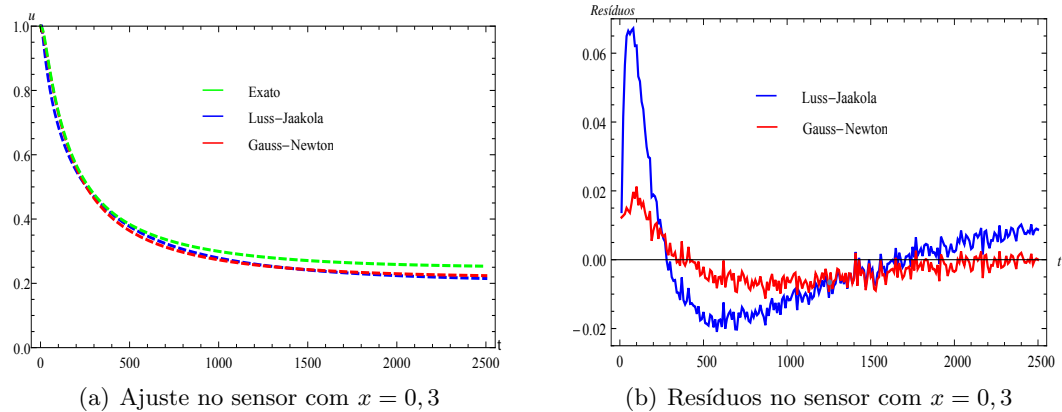


Figura 2: Ajuste e Resíduos.

e permitindo a análise inversa através de inferência Bayesiana. Na minimização da função objetivo MAP foi proposta uma hibridização entre os métodos Luus-Jaakola e Gauss-Newton, reduzindo a sensibilidade da estimativa inicial dos parâmetros.

## Agradecimentos

Os autores agradecem pelo suporte fornecido pelas agências FAPERJ, CAPES e CNPq.

## Referências

- [1] R. M. Cotta. *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*. CRC Press, Boca Raton, 1993.
- [2] J. P. Kaipio and E. Somersalo. *Statistical and Computational Methods for Inverse Problems*. Springer-Verlag, New York, 2004.
- [3] D.C. Knupp, W. F. Sacco and A. J. Silva Neto. Direct and inverse analysis of diffusive logistic population evolution with time delay and impulsive culling via integral transforms and hybrid optimization, *Applied Mathematics and Computation*, 250:105–120, 2015.
- [4] R. Luus and T. H. I. Jaakola. Optimization by direct search and systematic reduction of the size of search region, *AIChE Journal*, 19:760–766, 1973.
- [5] R. E. White. Populations with impulsive culling: control and identification, *International Journal of Computer Mathematics*, 86:2143–2164, 2009.