

13ª Mostra da Produção Universitária

Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

Estimação de parâmetros utilizando métodos de Aproximação Bayesiana Computacional (ABC)

NEGRET LÓPEZ, Maria Claudia
VELASQUE WERHLI, Adriano
EMMENDORFER RAMOS, Leonardo
mariaclane@gmail.com

Evento: Encontro de Pós-Graduação

Área do conhecimento: Ciências exatas e da Terra: Ciências da Computação

Palavras-chave: aproximação Bayesiana computacional; inferência Bayesiana.

1 INTRODUÇÃO

Este trabalho apresenta o método de Aproximação Bayesiana Computacional (ABC) Rejeição Amostral como uma ferramenta para inferência de parâmetros a partir de um conjunto de dados. Se apresenta um problema simples de estimação da média e variância com a finalidade de aprofundar o conhecimento e a manipulação de algoritmos, analisa-se as características do método. Tendo assim, como objetivo futuro do trabalho estimar os parâmetros de um sistema de equações diferenciais que simula uma rede de genes real com valores desconhecidos e demonstrar assim a efetividade e importância do método ABC no desenvolvimento da investigação científica.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

Os modelos baseados em simulação vem ganhando considerável importância há alguns anos devido ao desenvolvimento computacional. Estes modelos reproduzem sistemas biológicos ou ecológicos (CSILLÉRY, 2010) que ao ser representados por meio de um sistema de equações diferenciais contém diversos parâmetros que devem ser inferidos para seu estudo (TONI, 2009). Os métodos ABC foram criados para resolver problemas de genética de populações (BEAUMONT, 2002), e incorpora todos os aspectos da análise Bayesiana (CSILLÉRY, 2010), apresentando eficiência computacional. Sua utilização ampliou-se devido ao fato de que não se precisa especificar a probabilidade, e por esta razão o método infere um número relevante de parâmetros (CSILLÉRY, 2010). Os métodos ABC são utilizados para estimar distribuições posteriores dos parâmetros baseados em estatísticas resumo (BEAUMONT, 2002). Os métodos ABC mais conhecidos são: ABC Rejeição Amostral (1999); ABC baseado em Cadeias de Markov Monte Carlo - MCMC (2003) e ABC baseado em Sequencial Monte Carlo SMC (2007).

3 MATERIAIS E MÉTODOS (ou PROCEDIMENTO METODOLÓGICO)

A ferramenta utilizada neste trabalho é o Matlab R2013a para desenvolver o algoritmo do método ABC Rejeição Amostral. Os parâmetros a serem estimados neste trabalho vem de um sistema simples, pois o maior interesse é avaliar o método implementado. Inicia-se com um problema onde é conhecido os parâmetros com a finalidade de comparar eficiência e precisão. Neste primeiro momento, começamos

13ª Mostra da Produção Universitária

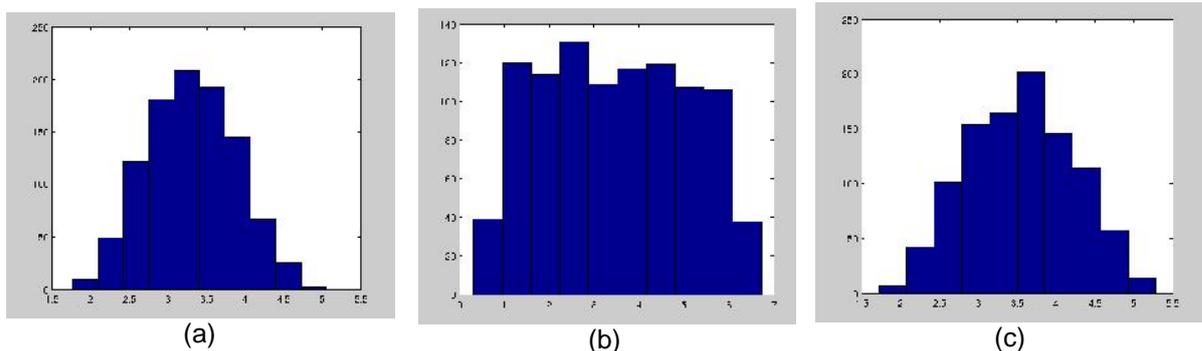
Rio Grande/RS, Brasil, 14 a 17 de outubro de 2014.

com a média e a variância de uma distribuição de probabilidade normal. No andamento do projeto calcularemos os parâmetros correspondentes ao sistema *Lotka-Volterra* (L-V) para validar os algoritmos escolhidos. Sendo assim, os parâmetros desconhecidos serão estimados para um sistema de equações diferenciais multicomplexo.

4 RESULTADOS e DISCUSSÃO

Os resultados obtidos até o presente momento correspondem ao algoritmo ABC Rejeição Amostral para encontrar a média e a variância. Os resultados indicam variabilidade do tempo de execução e na precisão ao mudar a função distância euclidiana ao quadrado (DEQ) entre os dados experimentais e os simulados. Evidencia-se, dado que a distribuição priori foi normal, que a distribuição posterior tivera comportamento normal ao fazer a DEQ cada vez menor. Enquanto utilizar o *Root Mean Squared* (RMS) notou-se incremento na velocidade de execução, assim como maior precisão.

Figura 1 – (a) a distribuição assemelha-se a uma distribuição normal. Média estimada: 3.3070, DEQ < 700 e tempo de execução: 48.6 s. (b) a média estimada 3.4790, DEQ < 1500 e tempo de execução: 5,616 s. (c) média estimada: 3.5536, MSE < 3 e tempo de execução: 2.149 s. Média real: 3.5.



Fonte: Maria Claudia Negret López

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados futuros corresponderam à estimação conjuntamente da média e a variância com ABC Rejeição amostral e ABC SMC. Posteriormente, fará se a estimação dos parâmetros do sistema L-V com ABC SMC e finalmente aplicá se a um sistema de equações diferenciais ordinárias que simula uma rede de genes.

REFERÊNCIAS

BEAUMONT, Mark A; WENYANG Zhang; BALDING, David J. Approximate Bayesian computation in population genetics. **Genetics**, v. 162, n. 4, p. 2025-2035, 2002.

CSILLÉRY, Katalin et al. Approximate Bayesian computation (ABC) in practice. **Trends in ecology & evolution**, v. 25, n. 7, p. 410-418, 2010.

TONI, Tina et al. Approximate Bayesian computation scheme for parameter inference and model selection in dynamical systems. **Journal of the Royal Society Interface**, v. 6, n. 31, p. 187-202, 2009.