

Errores: ¿Cómo identificar los errores?

" $f \sim \chi^2$ "  $\leftarrow$  MSE es una función tipo  $\chi^2$

$$\chi_{\text{OBS}}^2 - \chi_{\text{OPT}}^2 \leq e_{\text{TOLERANCIA}}$$

$$\chi_{\text{OBS}}^2 - \chi_{\text{OPT}}^2 \approx \sum_{j,k} H_{jk} \Delta x_j \Delta x_k$$

$$\text{Con } \Delta x_j = \underline{\chi_{j,\text{OBS}} - \chi_{j,\text{OPT}}}$$

$$\Rightarrow (\Delta x)^2 = (\chi_{\text{OBS}}^2 - \chi_{\text{OPT}}^2) \sum_{j,k} (H^{-1})_{jk} \frac{\partial \chi}{\partial x_j} \frac{\partial \chi}{\partial x_k}$$

$$(\Delta x)^2 \leq e_{\text{TOL}} \underbrace{\sum_{j,k} (H^{-1})_{jk} \frac{\partial \chi}{\partial x_j} \frac{\partial \chi}{\partial x_k}}_{\sum_{j,k} (\Delta x_j \Delta x_k) \frac{\partial \chi}{\partial x_j} \frac{\partial \chi}{\partial x_k}}$$

$$\boxed{\rightarrow \Delta x_j^2 = e_{\text{TOL}} (H^{-1})_{jj}}$$

Scipy se define como:

$$\frac{f_{k+1} - f_k}{\max(f_{k+1}, f_k, 1)} < e \quad \text{o Tolerancia relativa.}$$

$$\Rightarrow \underline{e_{\text{TOL}} = e \cdot \max(f_{k+1}, f_k, 1)}$$

# PCH o Análisis de Componentes Principales

Reformulamos el problema original

$A \cdot X = B$ ;  $A_{m \times n}$  con  $m \gg n$  siendo  $m$  el # de observaciones y  $n$  el # de parámetros,  $\{p_1, p_2, \dots\}$

$$A = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \dots & x_{mn} \end{pmatrix}$$

"pesos"

$$X = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix}$$
$$B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

Lo ideal es describir linealmente

$p_1 x_1 + p_2 x_2 + \dots + p_n x_n = b$  con  $\{x_1, x_2, \dots, x_n; b\}$  observaciones

$\Rightarrow$  encontrar los pesos.

Sabemos que para la minimización,

$$X_{OPT} = \underbrace{(A^T A)^{-1}}_{\text{Escalares, etc.}} A^T B ; \quad L(X; A, B) = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^m (b_j - \hat{b}_j)^2 \quad \text{con } b_j = \sum_{k=1}^n x_{jk} p_k$$

¿Qué es  $\frac{1}{m} A^T A$ ? Es la matriz de covarianza.

$$S = \frac{1}{m} A^T A ; \quad S_{jk} = E(x_j x_k) = \sigma_{jk}^2 + \mu_j \mu_k$$

¿Cuál es el principio o la idea? Encontrar un conjunto de variables  $\{y_i\}$  del que maximicen la varianza... ¿Por qué?

Si "normalizo" mi conjunto de muestras... i.e.  $\tilde{x}_j = (x_j - \mu_j) / \sigma_j$

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} (x_{11} - \bar{x}_1)/\sigma_1 & (x_{12} - \bar{x}_2)/\sigma_2 & \dots & (x_{1n} - \bar{x}_n)/\sigma_n \\ (x_{21} - \bar{x}_1)/\sigma_1 & (x_{22} - \bar{x}_2)/\sigma_2 & \dots & (x_{2n} - \bar{x}_n)/\sigma_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (x_{m1} - \bar{x}_1)/\sigma_1 & (x_{m2} - \bar{x}_2)/\sigma_2 & \dots & (x_{mn} - \bar{x}_n)/\sigma_n \end{pmatrix}$$

$$E(\tilde{x}_j) = 0$$

$$\text{Var}(\tilde{x}_j) = 1$$

Entonces

$$\tilde{S} = \frac{1}{m} \tilde{A}^T A = \begin{pmatrix} \tilde{\sigma}_1^2 & \Delta_1 \Delta_2 & \dots & \Delta_1 \Delta_n \\ \Delta_2 \Delta_1 & \tilde{\sigma}_2^2 & \dots & \Delta_2 \Delta_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta_n \Delta_1 & \Delta_n \Delta_2 & \dots & \tilde{\sigma}_n^2 \end{pmatrix}$$

; la matriz de las derivaciones en cada variable.

Tiene varias propiedades:

- ① Def. Positiva
- ② Autovalores, todos Reales positivos;  $\lambda > 0$
- ③ Vectores propios son ortonormales
- ④ Si un Hessiano es PDM entonces la función es cóncava
- ⑤ Simétrica
- ⑥ Det. es positivo
- ⑦ ¡Es una matriz de rotación!

Entre otras...

$$\tilde{S} = \hat{O} \lambda \hat{O}^T$$

$$\text{con } \hat{O} = \begin{pmatrix} \hat{q}_1 & \hat{q}_2 & \dots & \hat{q}_n \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

$\hat{q}_j$  Rotaciones con Varianza  $\lambda_j$

¿Quién va a ser mi componente principal?

- ①  $\text{Max}\{\lambda_j\}$  y  $\hat{q}_k$  asociado la combinación de "parámetros"
- ② El siguiente max ... su resultado
- ⋮
- ③ Escoger el # que yo considere óptimo.