Guillermo Arriaga García
Métodos Numéricos 2013

Primero veamos el escalar de $\mathrm{g^T Dg}$ con g=[x,y,z]$^{\mathrm{T}}$

$$\begin{bmatrix} x & y & z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & d_4 & d_5 \\ d_4 & d_2 & d_6 \\ d_5 & d_6 & d_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x & y & z \end{bmatrix} \begin{bmatrix} xd_1 + yd_4 + zd_5 \\ xd_4 + yd_2 + zd_6 \\ xd_5 + yd_6 + zd_3 \end{bmatrix}$$
$$= x^2d_1 + xyd_4 + xzd_5 + xyd_4 + y^2d_2 + yzd_6 + xzd_5 + yzd_6 + z^2d_3$$
$$= x^2d_1 + y^2d_2 + z^2d_3 + 2xyd_4 + 2xzd_5 + 2yzd_6$$

Así, para i=1,...,6. se tiene que $\mathrm{g_i^T Dg_i} = x_i^2d_1 + y_i^2d_2 + z_i^2d_3 + 2x_iy_id_4 + 2x_iz_id_5 + 2y_iz_id_6$

Además, tenemos para esos valores de i que $0 = \frac{1}{b}\ln(\frac{S_i}{S_0}) + \mathrm{g_i^T Dg_i} + error$ un error que puede no ser cero por el redondeo de los datos con que se cuenta y porque se daría una D fija para las eis ecuaciones.

Se buscan las entradas de D que minimicen el error cuadrático de las seis ecuaciones:

$$\sum_{i=1}^{6}\left(\frac{1}{b}\ln(\frac{S_i}{S_0}) + x_i^2d_1 + y_i^2d_2 + z_i^2d_3 + 2x_iy_id_4 + 2x_iz_id_5 + 2y_iz_id_6\right)^2 =: f(d_1,...,d_6)$$

que es nuestra **función a minimizar (a)**.

Las ecuaciones normales serán las siguientes:

Sea g una funcion tal que $f(d_1,...,d_6) = \sum_{i=1}^{6}(g(d_1,...,d_6))^2$.

$$\frac{\partial}{\partial d_1}f = \sum_{i=1}^{6} 2\,(g)\,(x_i^2) = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial d_2}f = \sum_{i=1}^{6} 2\,(g)\,(y_i^2) = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial d_3}f = \sum_{i=1}^{6} 2\,(g)\,(z_i^2) = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial d_4}f = \sum_{i=1}^{6} 4\,(g)\,(x_iy_i) = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial d_5}f = \sum_{i=1}^{6} 4\,(g)\,(x_iz_i) = 0$$
$$\frac{\partial}{\partial d_6}f = \sum_{i=1}^{6} 4\,(g)\,(y_iz_i) = 0$$

Concediendo que $\sum = \sum_{i=1}^{6}$,
que $a_i = \frac{-1}{b}\ln(\frac{S_i}{S_0})$,
quitando las constantes 2 , 4
realizando los productos y luego las sumas,
nos quedan nuestras seis ecuaciones normales:

$$\sum x_i^2a_i = d_1\sum x_i^4 + d_2\sum x_i^2y_i^2 + d_3\sum x_i^2z_i^2 + d_4\sum 2x_i^3y_i + d_5\sum 2x_i^3z_i + d_6\sum 2x_i^2y_iz_i$$
$$\sum y_i^2a_i = d_1\sum x_i^2y_i^2 + d_2\sum y_i^4 + d_3\sum y_i^2z_i^2 + d_4\sum 2x_iy_i^3 + d_5\sum 2x_iy_i^2z_i + d_6\sum 2y_i^3z_i$$
$$\sum z_i^2a_i = d_1\sum x_i^2z_i^2 + d_2\sum y_i^2z_i^2 + d_3\sum z_i^4 + d_4\sum 2x_iy_iz_i^2 + d_5\sum 2x_iz_i^3 + d_6\sum 2y_iz_i^3$$
$$\sum x_iy_ia_i = d_1\sum x_i^3y_i + d_2\sum x_iy_i^3 + d_3\sum x_iy_iz_i^2 + d_4\sum 2x_i^2y_i^2 + d_5\sum 2x_i^2y_iz_i + d_6\sum 2x_iy_i^2z_i$$

Tarea 6, El método de Mínimos Cuadrados

Fecha de entrega: Antes del 30 de Septiembre

Sea S_i i=0,2,..,6 un conjunto de 7 mediciones dadas de resonancia magnética, tal q
$\Re$. Sean $\boldsymbol{g}_i$ con i= 1,..,6 un conjunto de seis vectores unitarios dados en $\Re^3$ que defi
direcciones donde se tomaron las medidas $S_1,...,S_6$ (S_0 no tiene una dirección asoci
tal que $\boldsymbol{g}_i = [x_i\ y_i\ z_i]^T$. Sea b una constante de adquisición dada $b = 1000$.

Sea la incógnita del problema (el valor que queremos encontrar dado todo lo anterio
una matriz simétrica de dimensiones 3x3 denominada $\boldsymbol{D}$, de tal forma que las incógn
son las 6 entradas de la matriz $\boldsymbol{D}$ como sigue:

d_1	d_4	d_5
d_4	d_2	d_6
d_5	d_6	d_3

El modelo que se sabe de como se generan los datos es el siguiente.

$$S_i = S_0 \exp(-b\, g_i^T \mathbf{D}\, g_i) \qquad \text{para } i=1,...,6 \ ,$$

de tal forma que el resultado del producto $g_i^T \mathbf{D}\, g_i$ es un escalar.

El modelo se puede reescribir de tal forma que las derivadas del la función a minimi
mínimos cuadrados sean lineales en d_i:

$$\ln(S_i/S_0) = -b\, g_i^T \mathbf{D}\, g_i \qquad \text{para } i=1,...,6$$

a) Definir la función a minimizar para el planteamiento de mínimos cuadrados.

b) Deducir la matriz y los 2 vectores del sistema **Ax**=**b** de mínimos cuadrados que s
obtiene del conjunto de ecuaciones normales una vez que se han calculado las
derivadas parciales con respecto a d_i de la funcion del inciso a).

$\sum x_i z_i a_i = d_1 \sum x_i^3 z_i + d_2 \sum x_i y_i^2 z_i + d_3 \sum x_i z_i^3 + d_4 \sum 2x_i^2 y_i z_i + d_5 \sum 2x_i^2 z_i^2 + d_6 \sum 2x_i y_i z_i^2$

$\sum y_i z_i a_i = d_1 \sum x_i^2 y_i z_i + d_2 \sum y_i^3 z_i + d_3 \sum y_i z_i^3 + d_4 \sum 2x_i y_i^2 z_i + d_5 \sum 2x_i y_i z_i^2 + d_6 \sum 2y_i^2 z_i^2$

Por lo que el **sistema normal AX=B** es **(b)**:

$$A = \begin{bmatrix} \sum x_i^4 & \sum x_i^2 y_i^2 & \sum x_i^2 z_i^2 & \sum 2x_i^3 y_i & \sum 2x_i^3 z_i & \sum 2x_i^2 y_i z_i \\ \sum x_i^2 y_i^2 & \sum y_i^4 & \sum y_i^2 z_i^2 & \sum 2x_i y_i^3 & \sum 2x_i y_i^2 z_i & \sum 2y_i^3 z_i \\ \sum x_i^2 z_i^2 & \sum y_i^2 z_i^2 & \sum z_i^4 & \sum 2x_i y_i z_i^2 & \sum 2x_i z_i^3 & \sum 2y_i z_i^3 \\ \sum x_i^3 y_i & \sum x_i y_i^3 & \sum x_i y_i z_i^2 & \sum 2x_i^2 y_i^2 & \sum 2x_i^2 y_i z_i & \sum 2x_i y_i^2 z_i \\ \sum x_i^3 z_i & \sum x_i y_i^2 z_i & \sum x_i z_i^3 & \sum 2x_i^2 y_i z_i & \sum 2x_i^2 z_i^2 & \sum 2x_i y_i z_i^2 \\ \sum x_i^2 y_i z_i & \sum y_i^3 z_i & \sum y_i z_i^3 & \sum 2x_i y_i^2 z_i & \sum 2x_i y_i z_i^2 & \sum 2y_i^2 z_i^2 \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ d_4 \\ d_5 \\ d_6 \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} \sum \frac{-1}{b} x_i^2 \ln(\frac{S_i}{S_0}) \\ \sum \frac{-1}{b} y_i^2 \ln(\frac{S_i}{S_0}) \\ \sum \frac{-1}{b} z_i^2 \ln(\frac{S_i}{S_0}) \\ \sum \frac{-1}{b} x_i y_i \ln(\frac{S_i}{S_0}) \\ \sum \frac{-1}{b} x_i z_i \ln(\frac{S_i}{S_0}) \\ \sum \frac{-1}{b} y_i z_i \ln(\frac{S_i}{S_0}) \end{bmatrix} \qquad \sum = \sum_{i=1}^{6}$$