Elementos de Cálculo Numérico/Cálculo Numérico

Clase 12

Primer Cuatrimestre 2021

Ajuste de parámetros

Dada una tabla

x	x_1	x_2	$\dots$	x_N
y	y_1	y_2	$\dots$	y_N

Ajuste de parámetros

Dada una tabla

x	x_1	x_2	$\dots$	x_N
y	y_1	y_2	$\dots$	y_N

Buscamos $f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p)$ que ajuste con el menor error

Ajuste de parámetros

Dada una tabla

x	x_1	x_2	$\dots$	x_N
y	y_1	y_2	$\dots$	y_N

Buscamos $f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p)$ que ajuste con el menor error

El número de parámetros no depende del número de datos:

Ajuste de parámetros

Dada una tabla

x	x_1	x_2	$\dots$	x_N
y	y_1	y_2	$\dots$	y_N

Buscamos $f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p)$ que ajuste con el menor error

El número de parámetros no depende del número de datos: $p \ll N$

Ajuste de parámetros

Dada una tabla

x	x_1	x_2	$\dots$	x_N
y	y_1	y_2	$\dots$	y_N

Buscamos $f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p)$ que ajuste con el menor error

El número de parámetros no depende del número de datos: $p \ll N$

El error se define

$$S(\alpha_1, \dots, \alpha_p) = \frac{1}{2}(r_1^2 + \cdots + r_N^2) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(y_j - f(x_j; \alpha_1, \dots, \alpha_p))^2$$

Ajuste de parámetros

Dada una tabla

x	x_1	x_2	$\dots$	x_N
y	y_1	y_2	$\dots$	y_N

Buscamos $f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_p)$ que ajuste con el menor error

El número de parámetros no depende del número de datos: $p \ll N$

El error se define

$$S(\alpha_1, \dots, \alpha_p) = \frac{1}{2}(r_1^2 + \cdots + r_N^2) = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(y_j - f(x_j; \alpha_1, \dots, \alpha_p))^2$$

Residuo: $r_j = y_j - f(x_j; \alpha_1, \dots, \alpha_p)$

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)
- Se conoce la ley que relaciona x e y:

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)
- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases:

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)

- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases: P, T

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)

- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases: P, T
  - Ley de Ohm:

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)
- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases: P, T
  - Ley de Ohm: V, I

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)

- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases: P, T
  - Ley de Ohm: V, I
  - Ley de Planck:

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)

- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases: P, T
  - Ley de Ohm: V, I
  - Ley de Planck: I, ν

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)
- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases: P, T
  - Ley de Ohm: V, I
  - Ley de Planck: I, ν
  - Desintegración radiactiva:

Ajuste de parámetros

- No queremos que $f(x)$ sea complicada (polinomio de grado muy alto)
- Se conoce la ley que relaciona x e y:
  - Ecuación de estado de los gases: P, T
  - Ley de Ohm: V, I
  - Ley de Planck: I, ν
  - Desintegración radiactiva: N, t

Modelo lineal

Se propone:

Modelo lineal

Se propone: $y = \alpha + \beta x$

Modelo lineal

Se propone: $y = \alpha + \beta x$

$$\begin{cases} y_1 = \alpha + \beta x_1 \\ y_2 = \alpha + \beta x_2 \\ \vdots \\ y_N = \alpha + \beta x_N \end{cases}$$

Modelo lineal

Se propone: $y = \alpha + \beta x$

$$\begin{cases} y_1 = \alpha + \beta x_1 \\ y_2 = \alpha + \beta x_2 \\ \vdots \\ y_N = \alpha + \beta x_N \end{cases}$$

Con dos valores obtenemos α, β

Modelo lineal

Se propone: $y = \alpha + \beta x$

$$\begin{cases} y_1 = \alpha + \beta x_1 \\ y_2 = \alpha + \beta x_2 \\ \vdots \\ y_N = \alpha + \beta x_N \end{cases}$$

Con dos valores obtenemos α, β

Si $N > 2$ el sistema es sobredeterminado

Modelo lineal

Se propone: $y = \alpha + \beta x$

$$\begin{cases} y_1 = \alpha + \beta x_1 \\ y_2 = \alpha + \beta x_2 \\ \vdots \\ y_N = \alpha + \beta x_N \end{cases}$$

Con dos valores obtenemos α, β

Si $N > 2$ el sistema es sobredeterminado (más ecuaciones que incógnitas)

Modelo lineal

Se propone: $y = \alpha + \beta x$

$$\begin{cases} y_1 = \alpha + \beta x_1 \\ y_2 = \alpha + \beta x_2 \\ \vdots \\ y_N = \alpha + \beta x_N \end{cases}$$

Con dos valores obtenemos α, β

Si $N > 2$ el sistema es sobredeterminado (más ecuaciones que incógnitas)

En general no tiene solución

Modelo lineal

Se propone: $y = \alpha + \beta x$

$$\begin{cases} y_1 = \alpha + \beta x_1 \\ y_2 = \alpha + \beta x_2 \\ \vdots \\ y_N = \alpha + \beta x_N \end{cases}$$

Con dos valores obtenemos α, β

Si $N > 2$ el sistema es sobredeterminado (más ecuaciones que incógnitas)

En general no tiene solución, buscamos la solución con mínimo error

Modelo lineal: mínimo error

Error en función de los parámetros

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} (y_j - \alpha - \beta\, x_j)^2$$

Modelo lineal: mínimo error

Error en función de los parámetros

$$S(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} (y_j - \alpha - \beta\, x_j)^2$$

En el mínimo las derivadas parciales son nulas

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha}(\alpha, \beta) = -\sum_{j=1}^{N} (y_j - \alpha - \beta\, x_j) = -\sum_{j=1}^{N} y_j + \alpha N + \beta \sum_{j=1}^{N} x_j$$

$$\frac{\partial S}{\partial \beta}(\alpha, \beta) = -\sum_{j=1}^{N} (y_j - \alpha - \beta\, x_j)\, x_j = -\sum_{j=1}^{N} y_j x_j + \alpha \sum_{j=1}^{N} x_j + \beta \sum_{j=1}^{N} x_j^2$$

Ecuaciones normales

De $\dfrac{\partial S}{\partial \alpha}(\alpha, \beta) = 0$ y $\dfrac{\partial S}{\partial \beta}(\alpha, \beta) = 0$ despejamos

Ecuaciones normales

De $\dfrac{\partial S}{\partial \alpha}(\alpha, \beta) = 0$ y $\dfrac{\partial S}{\partial \beta}(\alpha, \beta) = 0$ despejamos

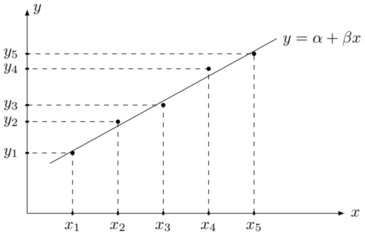
$$\begin{cases} \sum\limits_{j=1}^{N} y_j = \alpha\, N + \beta \sum\limits_{j=1}^{N} x_j \\ \\ \sum\limits_{j=1}^{N} y_j\, x_j = \alpha \sum\limits_{j=1}^{N} x_j + \beta \sum\limits_{j=1}^{N} x_j^2 \end{cases}$$

Modelo lineal: ejemplo

x	y
1	2.657 07
2	4.042 18
3	4.768 12
4	6.366 85
5	7.034 01

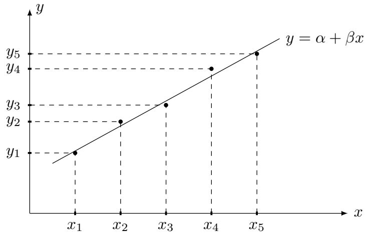
Modelo lineal: ejemplo

x	y
1	2.657 07
2	4.042 18
3	4.768 12
4	6.366 85
5	7.034 01



Modelo lineal: ejemplo

x	y
1	2.657 07
2	4.042 18
3	4.768 12
4	6.366 85
5	7.034 01

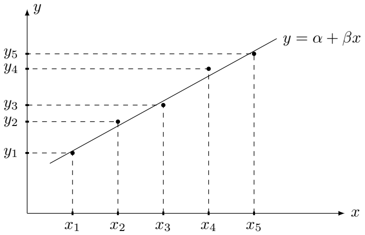


Ecuaciones normales

$$\begin{cases} 24.8682 = 5\alpha + 15\beta \\ 85.6833 = 15\alpha + 55\beta \end{cases}$$

Modelo lineal: ejemplo

x	y
1	2.657 07
2	4.042 18
3	4.768 12
4	6.366 85
5	7.034 01



Ecuaciones normales

$$\begin{cases} 24.8682 = 5\alpha + 15\beta \\ 85.6833 = 15\alpha + 55\beta \end{cases}$$

Parámetros: $\alpha = 1.65008$, $\beta = 1.10786$, $S \cong 0.095$

Linealización

En muchas casos de interés la relación $y = f(x; k, b)$ no es lineal

Linealización

En muchas casos de interés la relación $y = f(x;k,b)$ no es lineal

A veces podemos tomar nuevas variables $X = g(x)$, $Y = h(y)$

$$Y = \alpha + \beta X$$

Linealización

En muchas casos de interés la relación $y = f(x; k, b)$ no es lineal

A veces podemos tomar nuevas variables $X = g(x)$, $Y = h(y)$

$$Y = \alpha + \beta X$$

Ejemplos de linealización:

Modelo	Transformación		
	$Y = h(y)$	$X = g(x)$	$Y = \alpha + \beta\, X$
Exponencial: $y = k\, e^{bx}$	$Y = \ln(y)$	$X = x$	$Y = \ln(k) + b\, X$
Potencia: $y = k\, x^b$	$Y = \ln(y)$	$X = \ln(x)$	$Y = \ln(k) + b\, X$
Logarítmica: $y = k + b\, \ln(x)$	$Y = y$	$X = \ln(x)$	$Y = k + b\, X$
Hiperbólico: $y = k\, x/(b + x)$	$Y = 1/y$	$X = 1/x$	$Y = 1/k + b/k\, X$

Linealización: tercera ley de Kepler

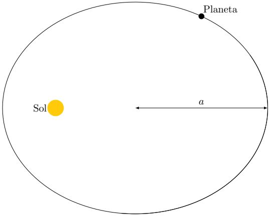
Relación potencial entre el período orbital (año) τ y el semieje mayor de su órbita a

$$\tau = k\, a^b$$

Linealización: tercera ley de Kepler

Relación potencial entre el período orbital (año) τ y el semieje mayor de su órbita a

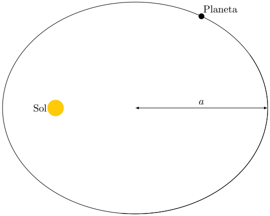
$$\tau = k\, a^b$$



Linealización: tercera ley de Kepler

Relación potencial entre el período orbital (año) τ y el semieje mayor de su órbita a

$$\tau = k\, a^b$$



Planeta	a (m)	τ (d)
Mercurio	$5.790\,922\,70 \times 10^{10}$	$8.796\,934 \times 10^{1}$
Venus	$1.082\,094\,75 \times 10^{11}$	$2.247\,010 \times 10^{2}$
Tierra	$1.495\,982\,62 \times 10^{11}$	$3.652\,570 \times 10^{2}$
Marte	$2.279\,388\,24 \times 10^{11}$	$6.869\,601 \times 10^{2}$
Júpiter	$7.783\,408\,21 \times 10^{11}$	$4.335\,355 \times 10^{3}$
Saturno	$1.426\,666\,42 \times 10^{12}$	$1.075\,774 \times 10^{4}$
Urano	$2.870\,658\,19 \times 10^{12}$	$3.079\,910 \times 10^{4}$
Neptuno	$4.498\,396\,44 \times 10^{12}$	$6.022\,490 \times 10^{4}$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\,a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$
- $A = \ln(a)$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$
- $A = \ln(a)$
- $\alpha = \ln(k)$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$
- $A = \ln(a)$
- $\alpha = \ln(k)$
- $b = \beta$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$
- $A = \ln(a)$
- $\alpha = \ln(k)$
- $b = \beta$

Las ecuaciones normales son

$$\begin{cases} 61.3237 = 8.0\,\alpha + 215.260\, b \\ 1677.42 = 215.260\,\alpha + 5810.35\, b \end{cases}$$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$
- $A = \ln(a)$
- $\alpha = \ln(k)$
- $b = \beta$

Las ecuaciones normales son

$$\begin{cases} 61.3237 = 8.0\,\alpha + 215.260\,b \\ 1677.42 = 215.260\,\alpha + 5810.35\,b \end{cases}$$

Solución $\alpha = -32.7041$ y $b = 1.500\,31$, es decir

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$
- $A = \ln(a)$
- $\alpha = \ln(k)$
- $b = \beta$

Las ecuaciones normales son

$$\begin{cases} 61.3237 = 8.0\,\alpha + 215.260\, b \\ 1677.42 = 215.260\,\alpha + 5810.35\, b \end{cases}$$

Solución $\alpha = -32.7041$ y $b = 1.500\,31$, es decir

$$\tau = 6.263\,17 \times 10^{-15} a^{1.500\,31}$$

Linealización: tercera ley de Kepler

La tercera ley de Kepler $\tau = k\, a^b$

Se trasforma en $T = \alpha + \beta A$

- $T = \ln(\tau)$
- $A = \ln(a)$
- $\alpha = \ln(k)$
- $b = \beta$

Las ecuaciones normales son

$$\begin{cases} 61.3237 = 8.0\,\alpha + 215.260\, b \\ 1677.42 = 215.260\,\alpha + 5810.35\, b \end{cases}$$

Solución $\alpha = -32.7041$ y $b = 1.500\,31$, es decir

$$\tau = 6.263\,17 \times 10^{-15} a^{1.500\,31} \qquad \tau = 6.311\,83 \times 10^{-15} a^{1.5}$$

Mínimos cuadrados generalizados

Modelo no lineal: $\hat{y}_j = f(x_j; k, b)$ donde k, b son los parámetros óptimos:

Mínimos cuadrados generalizados

Modelo no lineal: $\hat{y}_j = f(x_j; k, b)$ donde k, b son los parámetros óptimos:

$$\min S_N = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(y_j - \hat{y}_j)^2$$

Mínimos cuadrados generalizados

Modelo no lineal: $\hat{y}_j = f(x_j; k, b)$ donde k, b son los parámetros óptimos:

$$\text{mín}\, S_N = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} (y_j - \hat{y}_j)^2$$

Si $X = g(x)$ e $Y = h(y)$ entonces

$$Y_j - \hat{Y}_j = h(y_j) - h(\hat{y}_j) \cong h'(y_j)\,(y_j - \hat{y}_j)$$

Mínimos cuadrados generalizados

Modelo no lineal: $\hat{y}_j = f(x_j; k, b)$ donde k, b son los parámetros óptimos:

$$\text{mín}\, S_N = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(y_j - \hat{y}_j)^2$$

Si $X = g(x)$ e $Y = h(y)$ entonces

$$Y_j - \hat{Y}_j = h(y_j) - h(\hat{y}_j) \cong h'(y_j)\,(y_j - \hat{y}_j)$$

Vale la aproximación

$$S_N \cong \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{h'(y_j)^2}\left(Y_j - \hat{Y}_j\right)^2$$

Mínimos cuadrados generalizados

Planteamos $\hat{Y}_j = \alpha + \beta\, X_j$ donde α, β minimiza

Mínimos cuadrados generalizados

Planteamos $\hat{Y}_j = \alpha + \beta\, X_j$ donde α, β minimiza

$$S_G = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{h'(y_j)^2} (Y_j - \alpha - \beta\, X_j)^2$$

Mínimos cuadrados generalizados

Planteamos $\hat{Y}_j = \alpha + \beta\, X_j$ donde α, β minimiza

$$S_G = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{h'(y_j)^2} (Y_j - \alpha - \beta\, X_j)^2$$

donde $Y_j = h(y_j)$ y $X_j = g(x_j)$

Mínimos cuadrados generalizados

Planteamos $\hat{Y}_j = \alpha + \beta\, X_j$ donde α, β minimiza

$$S_G = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{h'(y_j)^2}(Y_j - \alpha - \beta\, X_j)^2$$

donde $Y_j = h(y_j)$ y $X_j = g(x_j)$

Planteando $\dfrac{\partial S_G}{\partial \alpha} = 0, \dfrac{\partial S_G}{\partial \beta} = 0$

$$\sum_{j=1}^{N} \frac{Y_j}{h'(y_j)^2} = \alpha \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{h'(y_j)^2} + \beta \sum_{j=1}^{N} \frac{X_j}{h'(y_j)^2}$$
$$\sum_{j=1}^{N} \frac{X_j\, Y_j}{h'(y_j)^2} = \alpha \sum_{j=1}^{N} \frac{X_j}{h'(y_j)^2} + \beta \sum_{j=1}^{N} \frac{X_j^2}{h'(y_j)^2}$$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo exponencial $y = k\,e^{b\,x}$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo exponencial $y = k\,e^{b\,x}$

x	y	$\ln(y)$	x	y	$\ln(y)$
0.068 005	1.816 13	0.596 71	1.110 41	9.0719	2.205 18
0.251 188	1.850 42	0.615 41	1.296 46	12.6341	2.536 40
0.293 132	1.458 38	0.377 33	1.326 62	13.8117	2.625 52
0.559 454	3.399 98	1.223 77	1.524 57	20.1724	3.004 32
0.667 651	3.160 39	1.150 70	1.651 31	27.8109	3.325 43
0.710 296	5.287 71	1.665 39	1.801 58	37.2007	3.616 33
0.955 559	6.373 66	1.852 17	1.974 99	51.1806	3.935 36
0.962 632	6.811 48	1.918 61	1.979 86	52.8378	3.967 23

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo exponencial $y = k\,e^{b\,x}$

x	y	$\ln(y)$	x	y	$\ln(y)$
0.068 005	1.816 13	0.596 71	1.110 41	9.0719	2.205 18
0.251 188	1.850 42	0.615 41	1.296 46	12.6341	2.536 40
0.293 132	1.458 38	0.377 33	1.326 62	13.8117	2.625 52
0.559 454	3.399 98	1.223 77	1.524 57	20.1724	3.004 32
0.667 651	3.160 39	1.150 70	1.651 31	27.8109	3.325 43
0.710 296	5.287 71	1.665 39	1.801 58	37.2007	3.616 33
0.955 559	6.373 66	1.852 17	1.974 99	51.1806	3.935 36
0.962 632	6.811 48	1.918 61	1.979 86	52.8378	3.967 23

Linealización: $Y = \ln(y), X = x, \alpha = \ln(k), \beta = b$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal:

$$S_L = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{16}(\ln(y_j) - \alpha_L - \beta_L\, x_j)^2$$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal:

$$S_L = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} (\ln(y_j) - \alpha_L - \beta_L \, x_j)^2$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} 34.6158 = 16.0 \, \alpha_L + 17.1337 \, \beta_L \\ 47.9919 = 17.1337 \, \alpha_L + 24.0476 \, \beta_L \end{cases}$$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal:

$$S_L = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{16}(\ln(y_j) - \alpha_L - \beta_L\, x_j)^2$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} 34.6158 = 16.0\,\alpha_L + 17.1337\,\beta_L \\ 47.9919 = 17.1337\,\alpha_L + 24.0476\,\beta_L \end{cases}$$

Parámetros: $\alpha_L = 0.111283, \beta_L = 1.91642$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal:

$$S_L = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{16}(\ln(y_j) - \alpha_L - \beta_L\, x_j)^2$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} 34.6158 = 16.0\,\alpha_L + 17.1337\,\beta_L \\ 47.9919 = 17.1337\,\alpha_L + 24.0476\,\beta_L \end{cases}$$

Parámetros: $\alpha_L = 0.111283, \beta_L = 1.91642$

Modelo: $y = 1.11771\, e^{1.91642\, x}$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal generalizado: $1/h'(y)^2 = y^2$

$$S_G = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{16} y_j^2 \left(\ln(y_j) - \alpha_G - \beta_G\, x_j\right)^2$$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal generalizado: $1/h'(y)^2 = y^2$

$$S_G = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} y_j^2 \left(\ln(y_j) - \alpha_G - \beta_G\, x_j\right)^2$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} 31\,512.0 = 8553.6\, \alpha_G + 15\,761.2\, \beta_G \\ 59\,012.9 = 15\,761.2\, \alpha_G + 29\,515.6\, \beta_G \end{cases}$$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal generalizado: $1/h'(y)^2 = y^2$

$$S_G = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} y_j^2 \left(\ln(y_j) - \alpha_G - \beta_G\, x_j\right)^2$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} 31\,512.0 = 8553.6\,\alpha_G + 15\,761.2\,\beta_G \\ 59\,012.9 = 15\,761.2\,\alpha_G + 29\,515.6\,\beta_G \end{cases}$$

Parámetros: $\alpha_G = -4.011\,17 \times 10^{-3}, \beta_G = 2.00152$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Modelo lineal generalizado: $1/h'(y)^2 = y^2$

$$S_G = \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{16} y_j^2\,(\ln(y_j) - \alpha_G - \beta_G\,x_j)^2$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} 31\,512.0 = 8553.6\,\alpha_G + 15\,761.2\,\beta_G \\ 59\,012.9 = 15\,761.2\,\alpha_G + 29\,515.6\,\beta_G \end{cases}$$

Parámetros: $\alpha_G = -4.011\,17 \times 10^{-3}, \beta_G = 2.00152$

Modelo: $y = 0.995997\,e^{2.00152\,x}$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Comparación usando S_N

$$S_N(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} \left(y_j - e^{\alpha + \beta\, x_j} \right)^2$$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Comparación usando S_N

$$S_N(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} \left(y_j - e^{\alpha + \beta\, x_j} \right)^2$$

$S_N(\alpha_L, \beta_L) = 11.54$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Comparación usando S_N

$$S_N(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} \left(y_j - e^{\alpha + \beta\, x_j} \right)^2$$

$S_N(\alpha_L, \beta_L) = 11.54 \quad S_N(\alpha_G, \beta_G) = 2.73$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

Comparación usando S_N

$$S_N(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} \left(y_j - e^{\alpha + \beta\, x_j} \right)^2$$

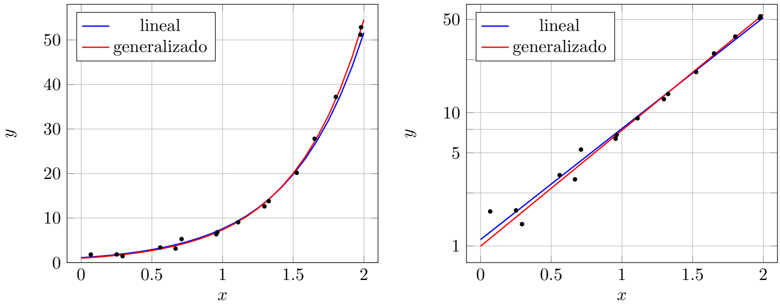
$S_N(\alpha_L, \beta_L) = 11.54$ $S_N(\alpha_G, \beta_G) = 2.73$ $S_N(\alpha_N, \beta_N) = 2.69$

Mínimos cuadrados generalizados: ejemplo

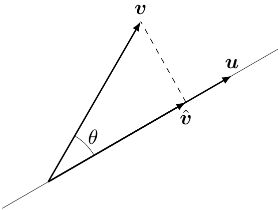
Comparación usando S_N

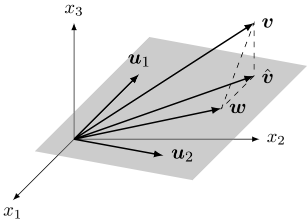
$$S_N(\alpha, \beta) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{16} \left(y_j - e^{\alpha + \beta\, x_j} \right)^2$$

$S_N(\alpha_L, \beta_L) = 11.54 \quad S_N(\alpha_G, \beta_G) = 2.73 \quad S_N(\alpha_N, \beta_N) = 2.69$



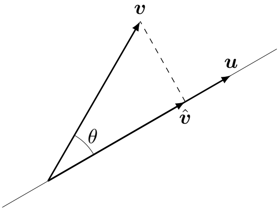
Proyección ortogonal

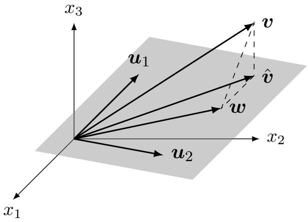




- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1$

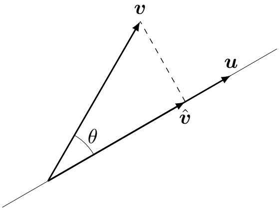
Proyección ortogonal

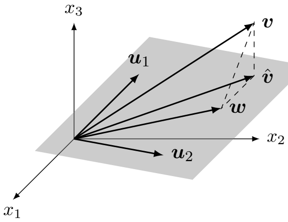




- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_1 = 0$

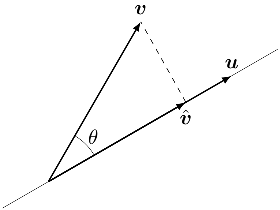
Proyección ortogonal

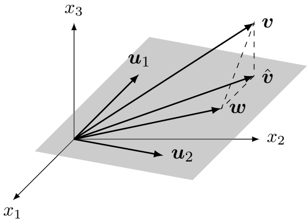




- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_1 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_1 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_1$

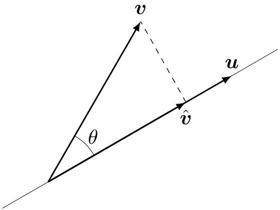
Proyección ortogonal

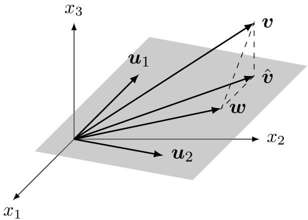




- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_1 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_1 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_1$
- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_2$

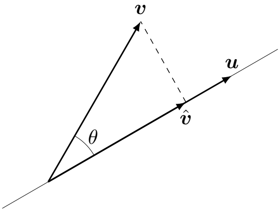
Proyección ortogonal

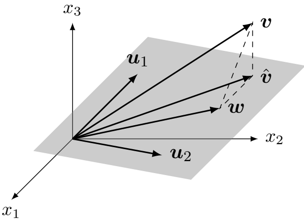




- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_1 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_1 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_1$
- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_2 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_2 = 0$

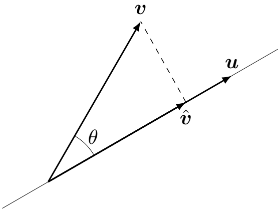
Proyección ortogonal

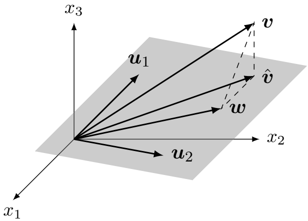




- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_1 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_1 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_1$
- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_2 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_2 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_2 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_2$

Proyección ortogonal

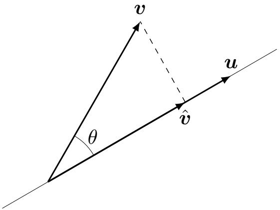


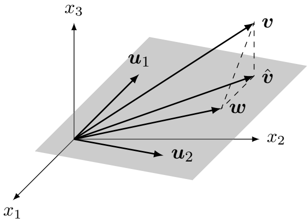


- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_1 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_1 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_1$
- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_2 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_2 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_2 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_2$

- $\hat{\boldsymbol{v}} = \alpha\, \boldsymbol{u}_1 + \beta\, \boldsymbol{u}_2$

Proyección ortogonal





- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_1 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_1 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_1 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_1$
- $\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}} \perp \boldsymbol{u}_2 \quad \Longrightarrow (\boldsymbol{v} - \hat{\boldsymbol{v}}).\boldsymbol{u}_2 = 0 \quad \Longrightarrow \boldsymbol{v}.\boldsymbol{u}_2 = \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_2$
- $\hat{\boldsymbol{v}} = \alpha\, \boldsymbol{u}_1 + \beta\, \boldsymbol{u}_2 \quad \Longrightarrow \begin{cases} \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_1 = \alpha\, \boldsymbol{u}_1.\boldsymbol{u}_1 + \beta\, \boldsymbol{u}_1.\boldsymbol{u}_2 \\ \hat{\boldsymbol{v}}.\boldsymbol{u}_2 = \alpha\, \boldsymbol{u}_1.\boldsymbol{u}_2 + \beta\, \boldsymbol{u}_2.\boldsymbol{u}_2 \end{cases}$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$\mathbf{1} = (1 \dots 1)$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$$\mathbf{1} = (1 \ldots 1) \qquad \boldsymbol{x} = (x_1 \ldots x_N)$$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$$\mathbf{1} = (1 \dots 1) \quad \boldsymbol{x} = (x_1 \dots x_N) \quad \boldsymbol{y} = (y_1 \dots y_N)$$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$\mathbf{1} = (1 \dots 1) \quad \boldsymbol{x} = (x_1 \dots x_N) \quad \boldsymbol{y} = (y_1 \dots y_N)$

- $N = \sum_{j=1}^{N} 1 = \mathbf{1}.\mathbf{1}$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$$\mathbf{1} = (1 \dots 1) \quad \boldsymbol{x} = (x_1 \dots x_N) \quad \boldsymbol{y} = (y_1 \dots y_N)$$

- $N = \sum_{j=1}^{N} 1 = \mathbf{1}.\mathbf{1}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{x}$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$$\mathbf{1} = (1 \ldots 1) \qquad \boldsymbol{x} = (x_1 \ldots x_N) \qquad \boldsymbol{y} = (y_1 \ldots y_N)$$

- $N = \sum_{j=1}^{N} 1 = \mathbf{1}.\mathbf{1}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j^2 = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{x}$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$$\mathbf{1} = (1 \dots 1) \qquad \boldsymbol{x} = (x_1 \dots x_N) \qquad \boldsymbol{y} = (y_1 \dots y_N)$$

- $N = \sum_{j=1}^{N} 1 = \mathbf{1}.\mathbf{1}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j^2 = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} y_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{y}$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$\mathbf{1} = (1 \dots 1) \quad \boldsymbol{x} = (x_1 \dots x_N) \quad \boldsymbol{y} = (y_1 \dots y_N)$

- $N = \sum_{j=1}^{N} 1 = \mathbf{1}.\mathbf{1}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j^2 = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} y_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{y}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j\, y_j = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{y}$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$$\mathbf{1} = (1 \ldots 1) \qquad \boldsymbol{x} = (x_1 \ldots x_N) \qquad \boldsymbol{y} = (y_1 \ldots y_N)$$

- $N = \sum_{j=1}^{N} 1 = \mathbf{1}.\mathbf{1}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j^2 = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} y_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{y}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j\, y_j = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{y}$

Ecuaciones normales

$$\begin{cases} \mathbf{1}.\boldsymbol{y} = \alpha\, \mathbf{1}.\mathbf{1} + \beta\, \mathbf{1}.\boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{x}.\boldsymbol{y} = \alpha\, \mathbf{1}.\boldsymbol{x} + \beta\, \boldsymbol{x}.\boldsymbol{x} \end{cases}$$

Definimos los vectores: $\mathbf{1}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^N$

$$\mathbf{1} = (1 \dots 1) \qquad \boldsymbol{x} = (x_1 \dots x_N) \qquad \boldsymbol{y} = (y_1 \dots y_N)$$

- $N = \sum_{j=1}^{N} 1 = \mathbf{1}.\mathbf{1}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j^2 = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{x}$
- $\sum_{j=1}^{N} y_j = \mathbf{1}.\boldsymbol{y}$
- $\sum_{j=1}^{N} x_j\, y_j = \boldsymbol{x}.\boldsymbol{y}$

Ecuaciones normales

$$\begin{cases} \mathbf{1}.\boldsymbol{y} = \alpha\, \mathbf{1}.\mathbf{1} + \beta\, \mathbf{1}.\boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{x}.\boldsymbol{y} = \alpha\, \mathbf{1}.\boldsymbol{x} + \beta\, \boldsymbol{x}.\boldsymbol{x} \end{cases}$$

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{N} y_j = \alpha\, N + \beta \sum_{j=1}^{N} x_j \\ \sum_{j=1}^{N} x_j\, y_j = \alpha \sum_{j=1}^{N} x_j + \beta \sum_{j=1}^{N} x_j^2 \end{cases}$$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}}$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \Longrightarrow S = \dfrac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \Longrightarrow S = \dfrac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2$

Para $\boldsymbol{w} = \gamma\,\mathbf{1} + \delta\,\boldsymbol{x}$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \Longrightarrow S = \dfrac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2$

Para $\boldsymbol{w} = \gamma\,\mathbf{1} + \delta\,\boldsymbol{x} \Longrightarrow \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w} = (\alpha - \gamma)\,\mathbf{1} + (\beta - \delta)\,\boldsymbol{x}$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \Longrightarrow S = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2$

Para $\boldsymbol{w} = \gamma\,\mathbf{1} + \delta\,\boldsymbol{x} \Longrightarrow \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w} = (\alpha - \gamma)\,\mathbf{1} + (\beta - \delta)\,\boldsymbol{x}$

$\boldsymbol{r} \perp (\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w})$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \Longrightarrow S = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2$

Para $\boldsymbol{w} = \gamma\,\mathbf{1} + \delta\,\boldsymbol{x} \Longrightarrow \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w} = (\alpha - \gamma)\,\mathbf{1} + (\beta - \delta)\,\boldsymbol{x}$

$\boldsymbol{r} \perp (\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w})$

$$\frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r} + \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2 + \frac{1}{2}\,\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{r}.(\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w})$$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \Longrightarrow S = \dfrac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2$

Para $\boldsymbol{w} = \gamma\,\mathbf{1} + \delta\,\boldsymbol{x} \Longrightarrow \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w} = (\alpha - \gamma)\,\mathbf{1} + (\beta - \delta)\,\boldsymbol{x}$

$\boldsymbol{r} \perp (\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w})$

$$\frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r} + \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2 + \frac{1}{2}\,\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{r}.(\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w})$$

Como $\boldsymbol{r}.(\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}) = 0$

Mejor aproximación

Si $\hat{\boldsymbol{y}} = \alpha\,\mathbf{1} + \beta\,\boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} \Longrightarrow S = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2$

Para $\boldsymbol{w} = \gamma\,\mathbf{1} + \delta\,\boldsymbol{x} \Longrightarrow \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w} = (\alpha - \gamma)\,\mathbf{1} + (\beta - \delta)\,\boldsymbol{x}$

$\boldsymbol{r} \perp (\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w})$

$$\frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r} + \hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{r}\|^2 + \frac{1}{2}\,\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 + \boldsymbol{r}.(\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w})$$

Como $\boldsymbol{r}.(\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}) = 0$

$$\frac{1}{2}\,\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2 = S + \frac{1}{2}\,\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 \geq S$$

Coeficiente de determinación

Si $\tilde{y} = k\, y + \mu$ (cambio de unidades) $\tilde{y} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}\, x$

Coeficiente de determinación

Si $\tilde{y} = k\,y + \mu$ (cambio de unidades) $\tilde{y} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}\,x$

- $\tilde{\alpha} = k\,\alpha + \mu$

Coeficiente de determinación

Si $\tilde{y} = k\,y + \mu$ (cambio de unidades) $\tilde{y} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}\,x$

- $\tilde{\alpha} = k\,\alpha + \mu$
- $\tilde{\beta} = k\,\beta$

Coeficiente de determinación

Si $\tilde{y} = k\,y + \mu$ (cambio de unidades) $\tilde{y} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}\,x$

- $\tilde{\alpha} = k\,\alpha + \mu$
- $\tilde{\beta} = k\,\beta$
- $\tilde{S} = k^2\,S$

Coeficiente de determinación

Si $\tilde{y} = k\,y + \mu$ (cambio de unidades) $\tilde{y} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}\,x$

- $\tilde{\alpha} = k\,\alpha + \mu$
- $\tilde{\beta} = k\,\beta$
- $\tilde{S} = k^2\,S$

Coeficiente de determinación

Si $\tilde{y} = k\, y + \mu$ (cambio de unidades) $\tilde{y} = \tilde{\alpha} + \tilde{\beta}\, x$

- $\tilde{\alpha} = k\, \alpha + \mu$
- $\tilde{\beta} = k\, \beta$
- $\tilde{S} = k^2\, S$

Promedios:

- $\overline{y} = \dfrac{1}{N} \displaystyle\sum_{j=1}^{N} y_j$
- $\overline{\tilde{y}} = \dfrac{1}{N} \displaystyle\sum_{j=1}^{N} \tilde{y}_j = \dfrac{1}{N} \displaystyle\sum_{j=1}^{N} (k\, y_j + \mu) = k\, \overline{y} + \mu$

Coeficiente de determinación

Queremos una medida de bondad del ajuste que sea invariante

$$S = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\|^2 - \frac{1}{2}\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\|^2\left(1-\frac{\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\|^2}{\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\|^2}\right)$$

Coeficiente de determinación

Queremos una medida de bondad del ajuste que sea invariante

$$S = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2 - \frac{1}{2}\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2 = \frac{1}{2}\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2 \left(1 - \frac{\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2}{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2}\right)$$

Si $\boldsymbol{w} = \overline{y}\,\mathbf{1}$

Coeficiente de determinación

Queremos una medida de bondad del ajuste que sea invariante

$$S = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2 - \frac{1}{2}\left\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\right\|^2 = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2\left(1-\frac{\left\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\right\|^2}{\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2}\right)$$

Si $\boldsymbol{w} = \overline{y}\,\mathbf{1}$

- $\tilde{\boldsymbol{y}} = k\,\boldsymbol{y} + \mu\mathbf{1}$

Coeficiente de determinación

Queremos una medida de bondad del ajuste que sea invariante

$$S = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\right\|^2 - \frac{1}{2}\left\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\right\|^2 = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\right\|^2 \left(1 - \frac{\left\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\right\|^2}{\left\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\right\|^2}\right)$$

Si $\boldsymbol{w} = \overline{y}\,\mathbf{1}$

- $\tilde{\boldsymbol{y}} = k\,\boldsymbol{y} + \mu\mathbf{1}$
- $\hat{\tilde{\boldsymbol{y}}} = k\,\hat{\boldsymbol{y}} + \mu\,\mathbf{1}$

Coeficiente de determinación

Queremos una medida de bondad del ajuste que sea invariante

$$S = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2 - \frac{1}{2}\left\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\right\|^2 = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2\left(1-\frac{\left\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\right\|^2}{\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2}\right)$$

Si $\boldsymbol{w} = \overline{y}\,\mathbf{1}$

- $\tilde{\boldsymbol{y}} = k\,\boldsymbol{y} + \mu\mathbf{1}$
- $\tilde{\hat{\boldsymbol{y}}} = k\,\hat{\boldsymbol{y}} + \mu\,\mathbf{1}$
- $\tilde{\boldsymbol{w}} = (k\,\overline{y} + \mu)\,\mathbf{1}$

Coeficiente de determinación

Queremos una medida de bondad del ajuste que sea invariante

$$S = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2 - \frac{1}{2}\left\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\right\|^2 = \frac{1}{2}\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2\left(1-\frac{\left\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\right\|^2}{\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2}\right)$$

Si $\boldsymbol{w} = \overline{y}\,\mathbf{1}$

- $\tilde{\boldsymbol{y}} = k\,\boldsymbol{y} + \mu\mathbf{1}$
- $\hat{\tilde{\boldsymbol{y}}} = k\,\hat{\boldsymbol{y}} + \mu\,\mathbf{1}$
- $\tilde{\boldsymbol{w}} = (k\,\overline{y} + \mu)\,\mathbf{1}$

$$\frac{\left\|\hat{\tilde{\boldsymbol{y}}}-\tilde{\boldsymbol{w}}\right\|^2}{\left\|\tilde{\boldsymbol{y}}-\tilde{\boldsymbol{w}}\right\|^2} = \frac{\left\|\hat{\boldsymbol{y}}-\boldsymbol{w}\right\|^2}{\left\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{w}\right\|^2}$$

Coeficiente de determinación

Definimos

$$R^2 = \frac{\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2}{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2} = \frac{\sum_{j=1}^{N} (\hat{y}_j - \overline{y})^2}{\sum_{j=1}^{N} (y_j - \overline{y})^2}$$

Coeficiente de determinación

Definimos

$$R^2 = \frac{\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2}{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2} = \frac{\sum_{j=1}^{N} (\hat{y}_j - \overline{y})^2}{\sum_{j=1}^{N} (y_j - \overline{y})^2}$$

$0 \leq R^2 \leq 1$

Coeficiente de determinación

Definimos

$$R^2 = \frac{\|\hat{\boldsymbol{y}} - \boldsymbol{w}\|^2}{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{w}\|^2} = \frac{\sum_{j=1}^{N} (\hat{y}_j - \overline{y})^2}{\sum_{j=1}^{N} (y_j - \overline{y})^2}$$

$0 \leq R^2 \leq 1$

R^2 cercano a uno $\Longrightarrow$ el ajuste es bueno

Coeficiente de determinación: ejemplo

Temperatura ($^\circ$C) de fusión del hielo para distinta presiones (MPa)

Coeficiente de determinación: ejemplo

Temperatura (°C) de fusión del hielo para distinta presiones (MPa)

Presión	Temp	Presión	Temp	Presión	Temp
6.1×10^{-4}	0.01	2.0×10^{1}	-1.54	9.0×10^{1}	-7.91
1.0×10^{-1}	0.003	3.0×10^{1}	-2.36	1.0×10^{2}	-8.94
1.0	-0.064	4.0×10^{1}	-3.21	1.2×10^{2}	-11.09
2.0	-0.14	5.0×10^{1}	-4.09	1.4×10^{2}	-13.35
5.0	-0.37	6.0×10^{1}	-5.00	1.6×10^{2}	-15.73
1.0×10^{1}	-0.75	7.0×10^{1}	-5.94	1.8×10^{2}	-18.22
1.5×10^{1}	-1.14	8.0×10^{1}	-6.91	2.0×10^{2}	-20.83

Coeficiente de determinación: ejemplo

Ecuaciones normales:

Coeficiente de determinación: ejemplo

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} -1.2757 \times 10^2 = \ \ 21\,\alpha + 1.3731 \times 10^2\,\beta, \\ -1.6498 \times 10^3 = 1.3731 \times 10^2\,\alpha + 1.7075 \times 10^3\,\beta, \end{cases}$$

Coeficiente de determinación: ejemplo

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} -1.2757 \times 10^2 = \ \ 21\,\alpha + 1.3731 \times 10^2\,\beta, \\ -1.6498 \times 10^3 = 1.3731 \times 10^2\,\alpha + 1.7075 \times 10^3\,\beta, \end{cases}$$

Parámetros $\alpha = 0.5116$, $\beta = -1.007$

Coeficiente de determinación: ejemplo

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} -1.2757 \times 10^2 = \ \ 21\,\alpha + 1.3731 \times 10^2\,\beta, \\ -1.6498 \times 10^3 = 1.3731 \times 10^2\,\alpha + 1.7075 \times 10^3\,\beta, \end{cases}$$

Parámetros $\alpha = 0.5116$, $\beta = -1.007$ $\qquad S = 2.71$, $R^2 = 0.993$

Coeficiente de determinación: ejemplo

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} -1.2757 \times 10^2 = \ 21\,\alpha + 1.3731 \times 10^2\,\beta, \\ -1.6498 \times 10^3 = 1.3731 \times 10^2\,\alpha + 1.7075 \times 10^3\,\beta, \end{cases}$$

Parámetros $\alpha = 0.5116$, $\beta = -1.007$ $\qquad S = 2.71$, $R^2 = 0.993$

En grados Fahrenheit: $T\,(°\mathrm{F}) = 32 + 1.8\,T\,(°\mathrm{C})$

Coeficiente de determinación: ejemplo

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} -1.2757 \times 10^2 = \quad 21\,\alpha + 1.3731 \times 10^2\,\beta, \\ -1.6498 \times 10^3 = 1.3731 \times 10^2\,\alpha + 1.7075 \times 10^3\,\beta, \end{cases}$$

Parámetros $\alpha = 0.5116$, $\beta = -1.007$ $\qquad S = 2.71$, $R^2 = 0.993$

En grados Fahrenheit: $T\,(°\mathrm{F}) = 32 + 1.8\,T\,(°\mathrm{C})$

Parámetros $\alpha = 32.920$, $\beta = -1.813$

Coeficiente de determinación: ejemplo

Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} -1.2757 \times 10^2 = \ \ 21\,\alpha + 1.3731 \times 10^2\,\beta, \\ -1.6498 \times 10^3 = 1.3731 \times 10^2\,\alpha + 1.7075 \times 10^3\,\beta, \end{cases}$$

Parámetros $\alpha = 0.5116$, $\beta = -1.007$ $\qquad S = 2.71$, $R^2 = 0.993$

En grados Fahrenheit: $T\,(°\mathrm{F}) = 32 + 1.8\,T\,(°\mathrm{C})$

Parámetros $\alpha = 32.920$, $\beta = -1.813$ $\qquad S = 8.77$, $R^2 = 0.993$

Coeficiente de determinación: ejemplo

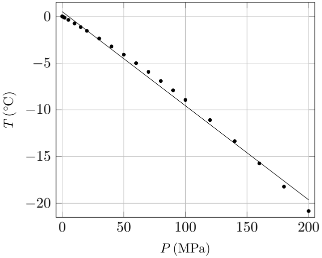
Ecuaciones normales:

$$\begin{cases} -1.2757 \times 10^2 = \ \ 21\,\alpha + 1.3731 \times 10^2\,\beta, \\ -1.6498 \times 10^3 = 1.3731 \times 10^2\,\alpha + 1.7075 \times 10^3\,\beta, \end{cases}$$

Parámetros $\alpha = 0.5116$, $\beta = -1.007$ $\qquad S = 2.71$, $R^2 = 0.993$

En grados Fahrenheit: $T\,(°\mathrm{F}) = 32 + 1.8\,T\,(°\mathrm{C})$

Parámetros $\alpha = 32.920$, $\beta = -1.813$ $\qquad S = 8.77$, $R^2 = 0.993$



Mínimos cuadrados para suma de funciones

Modelo suma de funciones:

$$y = f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_m) = \alpha_1 \, \phi_1(x) + \cdots + \alpha_m \, \phi_m(x)$$

Mínimos cuadrados para suma de funciones

Modelo suma de funciones:

$$y = f(x; \alpha_1, \dots, \alpha_m) = \alpha_1 \, \phi_1(x) + \cdots + \alpha_m \, \phi_m(x)$$

Elección de los parámetros

$$S(\alpha_1, \dots, \alpha_m) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} (y_j - \hat{y}_j)^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} (y_j - f(x_j; \alpha_1, \dots, \alpha_m))^2$$

Mínimos cuadrados para suma de funciones

Modelo suma de funciones:

$$y = f(x; \alpha_1, \ldots, \alpha_m) = \alpha_1 \, \phi_1(x) + \cdots + \alpha_m \, \phi_m(x)$$

Elección de los parámetros

$$S(\alpha_1, \ldots, \alpha_m) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} (y_j - \hat{y}_j)^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} (y_j - f(x_j; \alpha_1, \ldots, \alpha_m))^2$$

Derivando

$$0 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_1} = \sum_{j=1}^{N} (y_j - \hat{y}_j) \, \phi_1(x_j) = \sum_{j=1}^{N} (y_j - f(x_j; \alpha_1, \ldots, \alpha_m)) \, \phi_1(x_j)$$

$$\vdots$$

$$0 = \frac{\partial S}{\partial \alpha_m} = \sum_{j=1}^{N} (y_j - \hat{y}_j) \, \phi_m(x_j) = \sum_{j=1}^{N} (y_j - f(x_j; \alpha_1, \ldots, \alpha_m)) \, \phi_m(x_j)$$

Ecuaciones normales

Las ecuaciones normales

$$\sum_{j=1}^{N} \phi_1(x_j)\, y_j = \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} \phi_1(x_j)\, \phi_1(x_j) + \cdots + \alpha_m \sum_{j=1}^{N} \phi_1(x_j)\, \phi_m(x_j)$$

$$\sum_{j=1}^{N} \phi_2(x_j)\, y_j = \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} \phi_2(x_j)\, \phi_1(x_j) + \cdots + \alpha_m \sum_{j=1}^{N} \phi_2(x_j)\, \phi_m(x_j)$$

$$\vdots$$

$$\sum_{j=1}^{N} \phi_m(x_j)\, y_j = \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} \phi_m(x_j)\, \phi_1(x_j) + \cdots + \alpha_m \sum_{j=1}^{N} \phi_m(x_j)\, \phi_m(x_j)$$

Ecuaciones normales

Definimos la matriz $\Phi \in \mathbb{R}^{N\times m}$

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \cdots & \phi_m(x_N) \end{pmatrix}$$

Ecuaciones normales

Definimos la matriz $\Phi \in \mathbb{R}^{N\times m}$

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \cdots & \phi_m(x_N) \end{pmatrix}$$

Las ecuaciones normales en forma matricial

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y} = \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi. \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix}$$

Ecuaciones normales

Definimos la matriz $\Phi \in \mathbb{R}^{N\times m}$

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \cdots & \phi_m(x_N) \end{pmatrix}$$

Las ecuaciones normales en forma matricial

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y} = \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi. \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix}$$

Si $\operatorname{rg}(\Phi) = m \Longrightarrow \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi$ es definida positiva

Ecuaciones normales

Definimos la matriz $\Phi \in \mathbb{R}^{N\times m}$

$$\Phi = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_N) & \cdots & \phi_m(x_N) \end{pmatrix}$$

Las ecuaciones normales en forma matricial

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y} = \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi.\begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{pmatrix}$$

Si $\mathrm{rg}(\Phi) = m \Longrightarrow \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi$ es definida positiva (en particular es inversible)

Modelo polinomial

Modelo polinomial de grado k

$$y = f(x; \alpha_0, \ldots, \alpha_k) = \alpha_0 + \alpha_1\, x + \cdots + \alpha_k\, x^k$$

Modelo polinomial

Modelo polinomial de grado k

$$y = f(x;\alpha_0,\ldots,\alpha_k) = \alpha_0 + \alpha_1\, x + \cdots + \alpha_k\, x^k$$

Ecuaciones normales:

$$\sum_{j=1}^{N} y_j = \alpha_0\, N + \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} x_j + \cdots + \alpha_k \sum_{j=1}^{N} x_j^k$$

$$\sum_{j=1}^{N} x_j\, y_j = \alpha_0 \sum_{j=1}^{N} x_j + \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} x_j^2 + \cdots + \alpha_k \sum_{j=1}^{N} x_j^{k+1}$$

$$\vdots$$

$$\sum_{j=1}^{N} x_j^k\, y_j = \alpha_0 \sum_{j=1}^{N} x_j^k + \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} x_j^{k+1} + \cdots + \alpha_k \sum_{j=1}^{N} x_j^{2\,k}$$

Modelo polinomial

La matriz $\Phi \in \mathbb{R}^{N\times(k+1)}$

$$\Phi = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^k \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \dots & x_N^k \end{pmatrix}$$

tiene rango completo $(\mathrm{rg}(\Phi) = k+1\ )$ si $x_i \neq x_i$ para $i \neq j$

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi.\begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_p \end{pmatrix}$$

Modelo polinomial

La matriz $\Phi \in \mathbb{R}^{N\times(k+1)}$

$$\Phi = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^k \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^k \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \dots & x_N^k \end{pmatrix}$$

tiene rango completo $(\mathrm{rg}(\Phi) = k+1\ )$ si $x_i \neq x_i$ para $i \neq j$

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi.\begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \vdots \\ \alpha_p \end{pmatrix}$$

Para $0 \leq q, r \leq k$

$$\left(\Phi^{\mathrm{T}}.\Phi\right)_{q,r} = \sum_{j=1}^{N} x_j^{q+r}$$

Modelo polinomial: ejemplo

Ecuación de estado de un gas ideal (para un mol): $pV = RT$

Modelo polinomial: ejemplo

Ecuación de estado de un gas ideal (para un mol): $pV = RT$

Constante universal de los gases ideales: $R = 8.314\,472\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$

Modelo polinomial: ejemplo

Ecuación de estado de un gas ideal (para un mol): $p\,V = R\,T$

Constante universal de los gases ideales: $R = 8.314\,472\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$

$$Z = \frac{p\,V}{R\,T} \equiv 1$$

Modelo polinomial: ejemplo

Ecuación de estado de un gas ideal (para un mol): $pV = RT$

Constante universal de los gases ideales: $R = 8.314\,472\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$

$$Z = \frac{pV}{RT} \equiv 1$$

Para el gas neón y altas densidades

Modelo polinomial: ejemplo

Ecuación de estado de un gas ideal (para un mol): $pV = RT$

Constante universal de los gases ideales: $R = 8.314\,472\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$

$$Z = \frac{pV}{RT} \equiv 1$$

Para el gas neón y altas densidades (bajas temperaturas y altas presiones)

Modelo polinomial: ejemplo

Ecuación de estado de un gas ideal (para un mol): $pV = RT$

Constante universal de los gases ideales: $R = 8.314\,472\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$

$$Z = \frac{pV}{RT} \equiv 1$$

Para el gas neón y altas densidades (bajas temperaturas y altas presiones)

$$Z = Z(p, T)$$

Modelo polinomial: ejemplo

Ecuación de estado de un gas ideal (para un mol): $pV = RT$

Constante universal de los gases ideales: $R = 8.314\,472\,\mathrm{J\,mol^{-1}\,K^{-1}}$

$$Z = \frac{pV}{RT} \equiv 1$$

Para el gas neón y altas densidades (bajas temperaturas y altas presiones)

$$Z = Z(p, T)$$

Streett, W. B., *Pressure-volume-temperature data for neon from 80-130.deg.K and pressures to 2000 atmospheres*, Journal of Chemical & Engineering Data, vol 16 (3), pag. 289-292, 1971.

Modelo polinomial: ejemplo

Pressure-Volume-Temperature Data for Neon from 80–130° K and Pressures to 2000 Atmospheres

WILLIAM B. STREETT
Science Research Laboratory and Department of Chemistry,
United States Military Academy, West Point, N. Y. 10996

The gas expansion method has been used in an experimental study of the equation of state of neon, at temperatures from 80–130° K, and at pressures to 2000 atm. The isotherms have been fitted to polynomial equations, and these have been used to calculate values of the dimensionless ratio, Z ($Z = PV/RT$), and isothermal compressibility at regular intervals of pressure. The results are compared to published data at pressures below 300 atm.

Modelo polinomial: ejemplo

Para $T = 100\,\mathrm{K}$ (Tabla I)

p (Pa)	Z	p (Pa)	Z
1.43178×10^7	1.02397	6.25105×10^7	1.76259
1.73278×10^7	1.05236	6.59553×10^7	1.82034
2.11782×10^7	1.09705	6.94002×10^7	1.87800
2.47187×10^7	1.14461	7.62899×10^7	1.99251
2.81212×10^7	1.19388	8.31794×10^7	2.10623
3.15105×10^7	1.24590	9.00695×10^7	2.21883
3.49548×10^7	1.30104	9.69603×10^7	2.33030
3.83990×10^7	1.35725	1.03851×10^8	2.44045
4.18432×10^7	1.41425	1.10741×10^8	2.54983
4.52876×10^7	1.47168	1.24523×10^8	2.76554
4.87322×10^7	1.52974	1.38307×10^8	2.97811
5.21766×10^7	1.58802	1.58983×10^8	3.29010
5.56212×10^7	1.64641	1.79661×10^8	3.59627
5.90658×10^7	1.70455	2.07235×10^8	3.99717

Modelo polinomial: ejemplo

Para $k = 5$

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\Phi = \begin{pmatrix} 28.000 & 20.809 & 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 \\ 20.809 & 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 \\ 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 \\ 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 \\ 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 & 996.022 \\ 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 & 996.022 & 1954.655 \end{pmatrix}$$

Modelo polinomial: ejemplo

Para $k = 5$

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\Phi = \begin{pmatrix} 28.000 & 20.809 & 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 \\ 20.809 & 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 \\ 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 \\ 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 \\ 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 & 996.022 \\ 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 & 996.022 & 1954.655 \end{pmatrix}$$

Los parámetros son: $\alpha_0 = 0.888004, \alpha_1 = 0.598849, \alpha_2 = 2.37705,$
$\alpha_3 = -2.33492, \alpha_4 = 1.01936, \alpha_5 = -0.166439$

Modelo polinomial: ejemplo

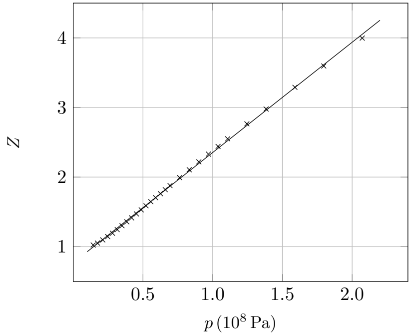
Para $k = 5$

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\Phi = \begin{pmatrix} 28.000 & 20.809 & 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 \\ 20.809 & 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 \\ 22.304 & 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 \\ 30.287 & 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 \\ 47.396 & 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 & 996.022 \\ 80.756 & 145.087 & 269.859 & 514.033 & 996.022 & 1954.655 \end{pmatrix}$$

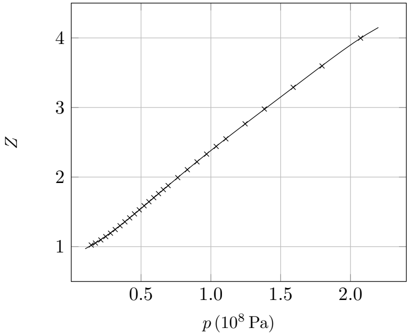
Los parámetros son: $\alpha_0 = 0.888004, \alpha_1 = 0.598849, \alpha_2 = 2.37705,$ $\alpha_3 = -2.33492, \alpha_4 = 1.01936, \alpha_5 = -0.166439$

$$\begin{aligned} Z =& 0.888 + 0.598\,882\,x + 2.376\,95\,x^2 - 2.334\,79\,x^3 \\ & + 1.019\,29\,x^4 - 0.166\,425\,x^5 \end{aligned}$$

Modelo polinomial: ejemplo



(a) Para $k = 1$, $S = 1.127 \times 10^{-2}$



(b) Para $k = 5$, $S = 2.748 \times 10^{-4}$.

Modelo polinomial: ejemplo

Table II. Coefficients for Neon Isotherms

$(Z = A + BP + CP^2 + DP^3 + EP^4 + FP^5 + GP^6 + HP^7 + IP^8 + JP^9 + KP^{10})$

	Temperature, $^\circ$K				
	80°	90°	100°	110°	130°
Maximum deviation	0.388×10^{-3}	0.371×10^{-3}	0.327×10^{-3}	0.391×10^{-3}	0.517×10^{-3}
Standard deviation	0.102×10^{-3}	0.098×10^{-3}	0.089×10^{-3}	0.150×10^{-3}	0.194×10^{-3}
A	0.983225	1.04852	1.02477	1.01592	1.01003
$B \times 10^{-4}$	−25.5356	−24.7680	−11.9687	−5.51171	0.0827598
$C \times 10^{-5}$	2.38491	2.11535	1.12765	0.685546	0.381871
$D \times 10^{-8}$	−6.70334	−5.89678	−2.40663	−1.10273	−0.645753
$E \times 10^{-11}$	11.8679	10.6380	3.02046	0.585743	0.601496
$F \times 10^{-14}$	−13.8895	−12.9732	−2.08344	0.978473	−0.121170
$G \times 10^{-17}$	10.8345	10.7772	0.411159	−2.22031	−0.416927
$H \times 10^{-20}$	−5.53135	−6.00484	0.493488	2.01589	0.537341
$I \times 10^{-23}$	1.75542	2.14493	−0.425900	−0.991489	−0.305891
$J \times 10^{-27}$	−3.08854	−4.43397	1.37049	2.58557	0.871834
$K \times 10^{-31}$	2.23443	4.02882	−1.66046	−2.80475	−1.00664

Modelo lineal

Consideramos

$$y = \alpha_0 + \alpha_1\, x_1 + \alpha_2\, x_2 + \cdots + \alpha_p\, x_p$$

Modelo lineal

Consideramos

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 \, x_1 + \alpha_2 \, x_2 + \cdots + \alpha_p \, x_p$$

A partir de N mediciones de las variables

x_1	x_2	$\ldots$	x_p	y
$x_{1,1}$	$x_{1,2}$	$\ldots$	$x_{1,p}$	y_1
$x_{2,1}$	$x_{2,2}$	$\ldots$	$x_{2,p}$	y_2
$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$	$\vdots$
$x_{N,1}$	$x_{N,2}$	$\ldots$	$x_{N,p}$	y_N

Modelo lineal

Definimos los vectores $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^N$:

Modelo lineal

Definimos los vectores $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^N$:

$$\boldsymbol{x}_0 = (1 \ldots 1)$$

Modelo lineal

Definimos los vectores $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^N$:

$$\boldsymbol{x}_0 = (1 \ldots 1)$$

$$\boldsymbol{x}_1 = (x_{11} \ldots x_{N1})$$

Modelo lineal

Definimos los vectores $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^N$:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{x}_0 &= (1 \ldots 1) \\
\boldsymbol{x}_1 &= (x_{11} \ldots x_{N1}) \\
&\vdots \\
\boldsymbol{x}_p &= (x_{1p} \ldots x_{Np})^{\mathrm{T}}
\end{aligned}$$

Modelo lineal

Definimos los vectores $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^N$:

$$\boldsymbol{x}_0 = (1 \ldots 1)$$

$$\boldsymbol{x}_1 = (x_{11} \ldots x_{N1})$$

$$\vdots$$

$$\boldsymbol{x}_p = (x_{1p} \ldots x_{Np})^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{y} = (y_1 \ldots y_N)$$

Modelo lineal

Definimos los vectores $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_p \in \mathbb{R}^N$:

$$\boldsymbol{x}_0 = (1 \ldots 1)$$

$$\boldsymbol{x}_1 = (x_{11} \ldots x_{N1})$$

$$\vdots$$

$$\boldsymbol{x}_p = (x_{1p} \ldots x_{Np})^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{y} = (y_1 \ldots y_N)$$

Tomamos la matriz $\Phi \in \mathbb{R}^{N\times(p+1)}$

$$\Phi = \begin{pmatrix} 1 & x_{1,1} & \ldots & x_{1,p} \\ 1 & x_{2,1} & \ldots & x_{2,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{N,1} & \ldots & x_{N,p} \end{pmatrix}$$

Modelo lineal

Ecuaciones normales:

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y} = \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi.\boldsymbol{\alpha}$$

Modelo lineal

Ecuaciones normales:

$$\Phi^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y} = \Phi^{\mathrm{T}}.\Phi.\boldsymbol{\alpha}$$

Como sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{N} y_j &= \alpha_0\, N + \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} x_{j,1} + \cdots + \alpha_p \sum_{j=1}^{N} x_{j,p} \\
\sum_{j=1}^{N} x_{j,1}\, y_j &= \alpha_0 \sum_{j=1}^{N} x_{j,1} + \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} x_{j,1}^2 + \cdots + \alpha_p \sum_{j=1}^{N} x_{j,1}\, x_{j,p} \\
&\vdots \\
\sum_{j=1}^{N} x_{j,p}\, y_j &= \alpha_0 \sum_{j=1}^{N} x_{j,p} + \alpha_1 \sum_{j=1}^{N} x_{j,p}\, x_{j,1} + \cdots + \alpha_p \sum_{j=1}^{N} x_{j,p}^2
\end{aligned}$$

Modelo lineal: ejemplo

Tabla de datos:

n	x_1	x_2	x_3	y
1	0.146	0.287	14.458	−26.608
2	−0.108	7.031	14.428	−26.594
3	−0.160	−2.236	14.615	−27.559
4	0.006	4.022	14.639	−27.053
5	0.144	−5.107	14.574	−27.142
6	0.008	−5.486	14.598	−27.481
7	−0.176	−2.852	14.539	−27.627
8	0.191	6.584	14.606	−26.464
9	−0.033	−8.975	14.522	−27.559
10	−0.190	−8.862	14.478	−27.834

Modelo lineal: ejemplo

Modelo:

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3$$

Modelo lineal: ejemplo

Modelo:

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{pmatrix} -271.920 \\ 5.115 \\ 446.130 \\ -3955.300 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10.000 & -0.172 & -15.594 & 145.460 \\ -0.172 & 0.184 & 2.627 & -2.483 \\ -15.594 & 2.627 & 337.430 & -226.650 \\ 145.460 & -2.483 & -226.650 & 2115.800 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

Modelo lineal: ejemplo

Modelo:

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{pmatrix} -271.920 \\ 5.115 \\ 446.130 \\ -3955.300 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10.000 & -0.172 & -15.594 & 145.460 \\ -0.172 & 0.184 & 2.627 & -2.483 \\ -15.594 & 2.627 & 337.430 & -226.650 \\ 145.460 & -2.483 & -226.650 & 2115.800 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

Solución: $\alpha_0 = 2.486, \alpha_1 = 1.880, \alpha_2 = 0.058, \alpha_3 = -2.032$

Modelo lineal: ejemplo

Modelo:

$$y = \alpha_0 + \alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2 + \alpha_3 x_3$$

Ecuaciones normales:

$$\begin{pmatrix} -271.920 \\ 5.115 \\ 446.130 \\ -3955.300 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10.000 & -0.172 & -15.594 & 145.460 \\ -0.172 & 0.184 & 2.627 & -2.483 \\ -15.594 & 2.627 & 337.430 & -226.650 \\ 145.460 & -2.483 & -226.650 & 2115.800 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix}$$

Solución: $\alpha_0 = 2.486, \alpha_1 = 1.880, \alpha_2 = 0.058, \alpha_3 = -2.032$

$$y = 2.486 + 1.880\, x_1 + 0.058\, x_2 - 2.032\, x_3$$

Modelo lineal: normalización de datos

Si $\boldsymbol{x}_1 = (100.2 \;\; 99.3 \;\; \ldots \;\; 101.0)$

Modelo lineal: normalización de datos

Si $\boldsymbol{x}_1 = (100.2 \;\; 99.3 \;\; \ldots \;\; 101.0)$ $\qquad x_1 \cong 100$

Modelo lineal: normalización de datos

Si $\boldsymbol{x}_1 = (100.2 \;\; 99.3 \;\; \ldots \;\; 101.0) \qquad\quad x_1 \cong 100$

Si definimos

Modelo lineal: normalización de datos

Si $\boldsymbol{x}_1 = (100.2 \;\; 99.3 \;\; \ldots \;\; 101.0)$ $\qquad x_1 \cong 100$

Si definimos

- $\bar{x}_1 = \dfrac{x_{1,1} + x_{2,1} + \ldots + x_{N,1}}{N}$

Modelo lineal: normalización de datos

Si $\boldsymbol{x}_1 = (100.2 \;\; 99.3 \;\; \ldots \;\; 101.0)$ $\qquad x_1 \cong 100$

Si definimos

- $\bar{x}_1 = \dfrac{x_{1,1} + x_{2,1} + \ldots + x_{N,1}}{N}$
- $\sigma_1 = \left(\dfrac{(x_{1,1} - \bar{x}_1)^2 + (x_{2,1} - \bar{x}_1)^2 + \cdots + (x_{N,1} - \bar{x}_1)^2}{N} \right)^{1/2}$

Modelo lineal: normalización de datos

Si $\boldsymbol{x}_1 = (100.2 \ \ 99.3 \ \ \ldots \ \ 101.0)$ $\qquad x_1 \cong 100$

Si definimos

- $\bar{x}_1 = \dfrac{x_{1,1} + x_{2,1} + \ldots + x_{N,1}}{N}$
- $\sigma_1 = \left(\dfrac{(x_{1,1} - \bar{x}_1)^2 + (x_{2,1} - \bar{x}_1)^2 + \cdots + (x_{N,1} - \bar{x}_1)^2}{N} \right)^{1/2}$
- $x^*_{j,1} = \dfrac{x_{j,1} - \bar{x}_1}{\sigma_1}$

Proponemos

$$y = \beta_0 + \beta_1 \, x^*_1 + \cdots + \beta_p \, x^*_p,$$

Ecuaciones normales

Dada $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \subseteq \mathbb{R}^{m}$

Ecuaciones normales

Dada $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \subseteq \mathbb{R}^{m}$

Como $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y}$

Ecuaciones normales

Dada $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \subseteq \mathbb{R}^{m}$

Como $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y}$

$$\mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{m} : \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = 0, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}\} = \mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}})$$

Ecuaciones normales

Dada $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \subseteq \mathbb{R}^{m}$

Como $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y}$

$$\mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{m} : \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = 0, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}\} = \mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}})$$

$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2 \in \mathrm{Ran}(\mathrm{A}) \oplus \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp}$

Ecuaciones normales

Dada $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \subseteq \mathbb{R}^{m}$

Como $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y}$

$$\mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{m} : \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = 0, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}\} = \mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}})$$

$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2 \in \mathrm{Ran}(\mathrm{A}) \oplus \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \Longrightarrow \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}_1$

Ecuaciones normales

Dada $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \subseteq \mathbb{R}^{m}$

Como $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y}$

$$\mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{m} : \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = 0, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}\} = \mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}})$$

$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2 \in \mathrm{Ran}(\mathrm{A}) \oplus \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \Longrightarrow \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}_1$

$\boldsymbol{b}_1 = \mathrm{A}.\boldsymbol{x}$

Ecuaciones normales

Dada $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}}) = \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \subseteq \mathbb{R}^{m}$

Como $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{y}$

$$\mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} = \{\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^{m} : \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = 0, \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\mathrm{n}}\} = \mathrm{Nu}(\mathrm{A}^{\mathrm{T}})$$

$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}_1 + \boldsymbol{b}_2 \in \mathrm{Ran}(\mathrm{A}) \oplus \mathrm{Ran}(\mathrm{A})^{\perp} \Longrightarrow \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}_1$

$\boldsymbol{b}_1 = \mathrm{A}.\boldsymbol{x} \Longrightarrow \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}_1 = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x}$

Descomposición en valores singulares

Proposición

Sea $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, *existen matrices* $\mathrm{V} \in \mathbb{R}^{m\times m}, \mathrm{U} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ *ortogonales y* $\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ *con* $\Sigma_{ij} = 0$ *si* $i \neq j$ *y* $\Sigma_{ii} \geq 0$, *que verifican* $\mathrm{A} = \mathrm{V}.\Sigma.\mathrm{U}^{\mathrm{T}}$.

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ base ortonormal de autovectores de B

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ base ortonormal de autovectores de B

autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \geq 0$

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ base ortonormal de autovectores de B

autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \geq 0$

$\lambda_1, \ldots, \lambda_k > 0$ y $\lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n = 0$

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ base ortonormal de autovectores de B

autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \geq 0$

$\lambda_1, \ldots, \lambda_k > 0$ y $\lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n = 0$

$\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k\}$ base ortonormal de $\mathrm{Ran}\,(\mathrm{A})$

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ base ortonormal de autovectores de B

autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \geq 0$

$\lambda_1, \ldots, \lambda_k > 0$ y $\lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n = 0$

$\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k\}$ base ortonormal de $\mathrm{Ran}\,(\mathrm{A})$, $\boldsymbol{v}_j = \lambda_j^{-1/2}\mathrm{A}\boldsymbol{u}_j$

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ base ortonormal de autovectores de B

autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \geq 0$

$\lambda_1, \ldots, \lambda_k > 0$ y $\lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n = 0$

$\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k\}$ base ortonormal de $\mathrm{Ran}\,(\mathrm{A})$, $\boldsymbol{v}_j = \lambda_j^{-1/2} \mathrm{A} \boldsymbol{u}_j$

$\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_m\}$ base ortonormal de $\mathbb{R}^m$

Demostración

Sea $\mathrm{B} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\mathrm{B} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}$

B es simétrica y semidefinida positiva

$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n\}$ base ortonormal de autovectores de B

autovalores $\lambda_1, \ldots, \lambda_n \geq 0$

$\lambda_1, \ldots, \lambda_k > 0$ y $\lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n = 0$

$\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_k\}$ base ortonormal de $\mathrm{Ran}\,(\mathrm{A})$, $\boldsymbol{v}_j = \lambda_j^{-1/2}\mathrm{A}\boldsymbol{u}_j$

$\{\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_m\}$ base ortonormal de $\mathbb{R}^m$

$V = (\boldsymbol{v}_1 \ldots \boldsymbol{v}_m) \in \mathbb{R}^{m\times m}$

Demostración

$$\Sigma = \left(\begin{array}{c|c} \Lambda^{1/2} & 0_{k\times(n-k)} \\ \hline 0_{(m-k)\times k} & 0_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right)$$

Demostración

$$\Sigma = \left(\begin{array}{c|c} \Lambda^{1/2} & 0_{k\times(n-k)} \\ \hline 0_{(m-k)\times k} & 0_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right)$$

$$\Lambda^{1/2} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{1/2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{1/2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_k^{1/2} \end{pmatrix}$$

Demostración

$$\Sigma = \left(\begin{array}{c|c} \Lambda^{1/2} & 0_{k\times(n-k)} \\ \hline 0_{(m-k)\times k} & 0_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right)$$

$$\Lambda^{1/2} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{1/2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{1/2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_k^{1/2} \end{pmatrix}$$

En forma matricial: $\mathrm{A.U} = \mathrm{V}.\Sigma$

Demostración

$$\Sigma = \left(\begin{array}{c|c} \Lambda^{1/2} & 0_{k\times(n-k)} \\ \hline 0_{(m-k)\times k} & 0_{(m-k)\times(n-k)} \end{array}\right)$$

$$\Lambda^{1/2} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{1/2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{1/2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_k^{1/2} \end{pmatrix}$$

En forma matricial: $\mathrm{A.U} = \mathrm{V.}\Sigma \Longrightarrow \mathrm{A} = \mathrm{V.}\Sigma\mathrm{.A}^{\mathrm{T}}$

Ejemplo

$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & \frac{111}{65} \\ -\frac{6}{5} & -\frac{4}{65} \end{pmatrix}$$

Ejemplo

$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & \frac{111}{65} \\ -\frac{6}{5} & -\frac{4}{65} \end{pmatrix}$$

$$A^T.A = \begin{pmatrix} \frac{52}{25} & \frac{36}{25} \\ \frac{36}{25} & \frac{73}{25} \end{pmatrix}$$

Ejemplo

$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & \frac{111}{65} \\ -\frac{6}{5} & -\frac{4}{65} \end{pmatrix}$$

$$A^T.A = \begin{pmatrix} \frac{52}{25} & \frac{36}{25} \\ \frac{36}{25} & \frac{73}{25} \end{pmatrix}$$

autovalores: $\lambda_1 = 4,\ \lambda_2 = 1$

Ejemplo

$A \in \mathbb{R}^{2\times 2}$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{4}{5} & \frac{111}{65} \\ -\frac{6}{5} & -\frac{4}{65} \end{pmatrix}$$

$$A^T.A = \begin{pmatrix} \frac{52}{25} & \frac{36}{25} \\ \frac{36}{25} & \frac{73}{25} \end{pmatrix}$$

autovalores: $\lambda_1 = 4,\ \lambda_2 = 1$

autovectores: $\boldsymbol{u}_1 = (3/5\ \ 4/5)$, $\boldsymbol{u}_2 = (-4/5\ \ 3/5)$

Ejemplo

$$\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1^{-1/2} \mathrm{A}.\boldsymbol{u}_1 = (12/13 \quad -5/13)$$

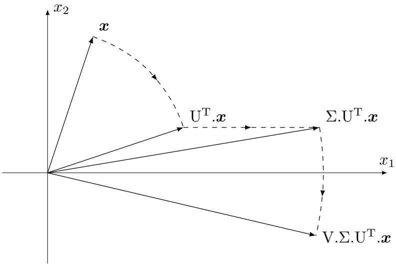
$$\boldsymbol{v}_2 = \lambda_2^{-1/2} \mathrm{A}.\boldsymbol{u}_2 = (5/13 \;\; 12/13)$$

Ejemplo

$$\boldsymbol{v}_1 = \lambda_1^{-1/2} \mathrm{A}.\boldsymbol{u}_1 = (12/13 \quad -5/13)$$

$$\boldsymbol{v}_2 = \lambda_2^{-1/2} \mathrm{A}.\boldsymbol{u}_2 = (5/13 \quad 12/13)$$

$$\mathrm{V} = \begin{pmatrix} \frac{12}{13} & \frac{5}{13} \\ -\frac{5}{13} & \frac{12}{13} \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathrm{U}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}$$



Mínimos cuadrados

Dado $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ y $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ hallar $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

Mínimos cuadrados

Dado $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ $(m \geq n)$ y $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ hallar $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

$$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \min \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$$

Ecuaciones normales

$$\mathrm{A}^T.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}$$

Mínimos cuadrados

Dado $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ y $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ hallar $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

$$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \text{mín}\,\|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$$

Ecuaciones normales

$$\mathrm{A}^T.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}$$

Si $\mathrm{A} = \mathrm{V}.\Sigma.\mathrm{U}^{\mathrm{T}}$ y $\boldsymbol{y} = \mathrm{U}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{x}$

$$\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} \Longleftrightarrow \Sigma.\boldsymbol{y} = \mathrm{V}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}$$

Mínimos cuadrados

Dado $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $(m \geq n)$ y $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$ hallar $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$

$$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \min \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$$

Ecuaciones normales

$$\mathrm{A}^T.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}$$

Si $\mathrm{A} = \mathrm{V}.\Sigma.\mathrm{U}^{\mathrm{T}}$ y $\boldsymbol{y} = \mathrm{U}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{x}$

$$\mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\mathrm{A}.\boldsymbol{x} = \mathrm{A}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} \Longleftrightarrow \Sigma.\boldsymbol{y} = \mathrm{V}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b}$$

$\|\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{y}\|$, $\mathrm{Nu}(\Sigma) = \{(0, \ldots, 0, y_{k+1}, \ldots, y_n)\}$

Mínimos cuadrados

Buscamos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

Mínimos cuadrados

Buscamos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \text{mín}\, \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$$

Mínimos cuadrados

Buscamos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \text{mín}\, \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$ y mínimo $\|\boldsymbol{x}\|$

Mínimos cuadrados

Buscamos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \min \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$ y mínimo $\|\boldsymbol{x}\|$

$\boldsymbol{x} = \mathrm{U}.\boldsymbol{y}$ donde $\boldsymbol{y} = \Sigma^+.\mathrm{V}^\mathrm{T}.\boldsymbol{b}$

Mínimos cuadrados

Buscamos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \min \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$ y mínimo $\|\boldsymbol{x}\|$

$\boldsymbol{x} = \mathrm{U}.\boldsymbol{y}$ donde $\boldsymbol{y} = \Sigma^{+}.\mathrm{V}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} \Longrightarrow \boldsymbol{x} = U.\Sigma^{+}.\mathrm{V}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} = \mathrm{A}^{+}.\boldsymbol{b}$

Mínimos cuadrados

Buscamos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \min \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$ y mínimo $\|\boldsymbol{x}\|$

$\boldsymbol{x} = \mathrm{U}.\boldsymbol{y}$ donde $\boldsymbol{y} = \Sigma^+.\mathrm{V}^\mathrm{T}.\boldsymbol{b} \Longrightarrow \boldsymbol{x} = U.\Sigma^+.\mathrm{V}^\mathrm{T}.\boldsymbol{b} = \mathrm{A}^+.\boldsymbol{b}$

$$\Sigma^+ = \left(\begin{array}{c|c} \Lambda^{-1/2} & 0_{k\times(m-k)} \\ \hline 0_{(n-k)\times k} & 0_{(n-k)\times(m-k)} \end{array}\right)$$

Mínimos cuadrados

Buscamos $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ tal que:

$\|\mathrm{A}.\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\| = \min \|\mathrm{A}.\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|$ y mínimo $\|\boldsymbol{x}\|$

$\boldsymbol{x} = \mathrm{U}.\boldsymbol{y}$ donde $\boldsymbol{y} = \Sigma^{+}.\mathrm{V}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} \Longrightarrow \boldsymbol{x} = U.\Sigma^{+}.\mathrm{V}^{\mathrm{T}}.\boldsymbol{b} = \mathrm{A}^{+}.\boldsymbol{b}$

$$\Sigma^{+} = \left(\begin{array}{c|c} \Lambda^{-1/2} & 0_{k\times(m-k)} \\ \hline 0_{(n-k)\times k} & 0_{(n-k)\times(m-k)} \end{array}\right)$$

$$\Lambda^{-1/2} = \begin{pmatrix} \lambda_1^{-1/2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2^{-1/2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_k^{-1/2} \end{pmatrix}$$