Curso 1: Teoría de inversión y programación en Python

H. Sánchez-Reyes

ISTerre, Université de Grenoble Alpes, France
IRD - UGA-ISTerre BQR Project

¡Gracias por la bienvenida!

7-18 de Agosto de 2023
Lima, Perú

Recordando algebra lineal

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Vectores:

$$v = [2, 4, 5] \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Vectores:

$$v = [2, 4, 5] \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$$

¿Cuál es la dimensión de estos vectores?

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Vectores:

$$v = [2, 4, 5] \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$$

¿Cuál es la dimensión de estos vectores?

$$v = [2, 4, 5]_{1\times 3} \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}_{3\times 1}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Vectores:

$$v = [2, 4, 5] \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$$

¿Cuál es la dimensión de estos vectores?

$$v = [2, 4, 5]_{1\times 3} \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}_{3\times 1}$$

También definimos los transpuestos:

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Vectores:

$$v = [2, 4, 5] \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$$

¿Cuál es la dimensión de estos vectores?

$$v = [2, 4, 5]_{1\times 3} \qquad \text{or,} \qquad n = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}_{3\times 1}$$

También definimos los transpuestos:

$$v^T = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 5 \end{bmatrix}_{3\times 1} \qquad \text{or,} \qquad n^T = [1, 5, 7]_{1\times 3}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Matrices con definiciones importantes

Identidad:

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Matrices con definiciones importantes

Identidad: $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Matrices con definiciones importantes

Identidad: $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ Simétricas:

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Matrices con definiciones importantes

$$\text{Identidad:} \quad I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \text{Simétricas:} \quad X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix} \quad \text{si}, x_{ij} = x_{ji}$$

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Matrices con definiciones importantes

Identidad: $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ Simétricas: $X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix}$ si, $x_{ij} = x_{ji}$

Invertible:

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Matrices con definiciones importantes

Identidad: $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ Simétricas: $X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix}$ si, $x_{ij} = x_{ji}$

Invertible: si, $\det(M) > 0$ entonces, M^{-1} existe, tal que

$$M^{-1}M = I = MM^{-1}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Matrix:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 2 & 7 & 2 \\ 5 & 3 & 8 \end{bmatrix}_{3\times 3}$$

Matrices con definiciones importantes

Identidad: $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ Simétricas: $X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix}$ si, $x_{ij} = x_{ji}$

Invertible: si, $\det(M) > 0$ entonces, M^{-1} existe, tal que

$$M^{-1}M = I = MM^{-1}$$

$$\underbrace{M^{-1}}_{pre-multiplicar} \quad M = I = M \quad \underbrace{M^{-1}}_{post-multiplicar}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Sumas (y restas):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ and } \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \text{ then}$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{M} + \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1+1 & 0+0 & 2-1 \\ 0+0 & 1+2 & 0+0 \\ 2-1 & 0+0 & 1+3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Sumas (y restas):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ and } \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \text{ then}$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{M} + \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1+1 & 0+0 & 2-1 \\ 0+0 & 1+2 & 0+0 \\ 2-1 & 0+0 & 1+3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

es decir, $S_{ij} = M_{ij} + N_{ij}$ y $D_{ij} = M_{ij} - N_{ij}$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Sumas (y restas):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ and } \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \text{ then}$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{M} + \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1+1 & 0+0 & 2-1 \\ 0+0 & 1+2 & 0+0 \\ 2-1 & 0+0 & 1+3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

es decir, $S_{ij} = M_{ij} + N_{ij}$ y $D_{ij} = M_{ij} - N_{ij}$

Multiplicaciones:

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Sumas (y restas):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ and } \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \text{ then}$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{M} + \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1+1 & 0+0 & 2-1 \\ 0+0 & 1+2 & 0+0 \\ 2-1 & 0+0 & 1+3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

es decir, $S_{ij} = M_{ij} + N_{ij}$ y $D_{ij} = M_{ij} - N_{ij}$

Multiplicaciones:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{1\times1+1\times2+2\times1+2\times2} & 1\times2+1\times1+2\times2+2\times1 \\ 2\times1+2\times2+3\times1+3\times2 & 2\times2+2\times1+3\times2+3\times1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{9} & 9 \\ 15 & 15 \end{pmatrix}$$

Vectores, matrices, elementos y operaciones básicas

Sumas (y restas):

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ and } \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 3 \end{bmatrix} \text{ then}$$

$$\mathbf{S} = \mathbf{M} + \mathbf{N} = \begin{bmatrix} 1+1 & 0+0 & 2-1 \\ 0+0 & 1+2 & 0+0 \\ 2-1 & 0+0 & 1+3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

es decir, $S_{ij} = M_{ij} + N_{ij}$ y $D_{ij} = M_{ij} - N_{ij}$

Multiplicaciones:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 3 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \\ 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\times1+1\times2+2\times1+2\times2 & 1\times2+1\times1+2\times2+2\times1 \\ 2\times1+2\times2+3\times1+3\times2 & 2\times2+2\times1+3\times2+3\times1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 9 \\ 15 & 15 \end{pmatrix}$$

es decir,

$$P_{ij} = \sum_{k=1}^{K} M_{ik} N_{kj}$$

Determinante:

Determinante:

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\cdots\sum_{q=1}^{N} e^{ijk\ldots q} M_{1i} M_{2j} M_{3k} \ldots M_{Nq}$$

siendo $e^{ijk\ldots q} + 1$ cuando (i, j, k, ... , q) son permutations pares de (1, 2, 3, ... , N), y -1 cuando son permutaciones impares, y cero en otro caso.

Determinante:

$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\cdots\sum_{q=1}^{N} e^{ijk\ldots q} M_{1i} M_{2j} M_{3k} \ldots M_{Nq}$$

siendo $e^{ijk\ldots q} + 1$ cuando (i, j, k, ... , q) son permutations pares de (1, 2, 3, ... , N), y -1 cuando son permutaciones impares, y cero en otro caso.

$$\det \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = ad - bc$$

Más in Menke (2018)

I. Problema directo / Forward problem

II. Problema inverso / Inverse problem

III. Problema lineal / Linear problem

IV. Problema no-lineal / Non-linear problem

Podemos encontrar m^{est} que minimice $L = m^T m = \sum {m_i}^2$, sujeto a la condición límite de mínimo error $e = d - Gm = 0$. Este problema se puede fácilmente resolver con el método de los multiplicadores de Lagrange. Sólo se requiere minimar la función:

$$\phi(m) = L + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i e_i = \sum_{i=1}^{M} m_i^2 + \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \left[d_i - \sum_{j=1}^{M} G_{ij} m_j \right] \tag{1}$$

Para solucionar este problema de minimización, derivamos la ecuación e igualamos a cero,

$$\frac{\partial \phi}{\partial m_q} = \sum_{i=1}^{M} 2 \frac{\partial m_i}{\partial m_q} m_i - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \sum_{j=1}^{M} G_{ij} \frac{\partial m_j}{\partial m_q} = 2m_q - \sum_{i=1}^{N} \lambda_i G_{iq} \tag{2}$$

e igualando a cero,

$$2m = G^T \lambda \tag{3}$$

Dicha ecuación, $2m = G^T\lambda$, debe ser resulta junto con la ecuación que conocemos $Gm = d$. Sustituyendo la primera ecuación en la segunda, obtenemos que

$$m^{est} = G^T(GG^T)^{-1}d \tag{4}$$

Idealmente, otra posibilidad sería que nos gustaría clasificar los parámetros del modelo desconocidos en dos grupos: aquellos que están sobredeterminados y aquellos que están indeterminados. Para lograr esto, necesitamos formar un nuevo conjunto de parámetros del modelo que sean combinaciones lineales de los anteriores.

Por ejemplo, querríamos realizar esta partición a partir de una ecuación arbitraria $Gm = d \quad \rightarrow G'm' = d'$, donde m' se divide en una parte superior m'^o que está sobredeterminada y una parte inferior m'^u que está indeterminada:

$$\begin{bmatrix} G'^o & 0 \\ 0 & G'^u \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m'^o \\ m'^u \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d'^o \\ d'^u \end{bmatrix} \tag{5}$$

En lugar de dividir m en partes, supongamos que determinamos una solución que minimiza alguna combinación ϕ del error de predicción y la longitud de la solución para los parámetros del modelo no divididos:

$$\phi(m) = E + \epsilon^2 L = e^T e + \epsilon^2 m^T m \tag{6}$$

donde el factor de ponderación ϵ^2 determina la importancia relativa que se le da al error de predicción y la longitud de la solución. Si ϵ se hace lo suficientemente grande, este procedimiento claramente minimizará la parte indeterminada de la solución. Desafortunadamente, también tiende a minimizar la parte sobredeterminada de la solución. Como resultado, la solución no minimizará el error de predicción y no se obtendrá una muy buena estimación de los verdaderos parámetros del modelo que se busca. Si ϵ es igual a cero, se minimizará el error de predicción, pero no se proporcionará información previa para distinguir los parámetros del modelo indeterminados.

Sin embargo, puede ser posible encontrar algún valor de compromiso para ϵ que minimice aproximadamente E y al mismo tiempo minimice aproximadamente la longitud de la parte indeterminada de la solución. No existe un método simple para determinar qué valor de ϵ debe ser (sin resolver el problema dividido); este debe ser determinado mediante prueba y error. Al minimizar $\phi(m)$ con respecto a los parámetros del modelo de una manera exactamente análoga a la derivación de mínimos cuadrados, obtenemos:

$$[G^T G + \epsilon^2 I]m^{est} = G^T d \tag{7}$$

lo cuál nos lleva a que

$$m^{est} = [G^T G + \epsilon^2 I]^{-1} G^T d. \tag{8}$$

Normas de medición del ajuste

Norma L_1:

$$||\mathbf{e}||_1 = \left[\sum_i |e_i|^1\right]$$

Norma L_2:

$$||\mathbf{e}||_2 = \left[\sum_i |e_i|^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

Norma L_n:

$$||\mathbf{e}||_n = \left[\sum_i |e_i|^n\right]^{\frac{1}{n}}$$

References

Menke, W. (2018). *Geophysical data analysis: Discrete inverse theory*. Academic press.