

3.1 CONSIDERACIONES

GENERALES SOBRE LOS P.I.
EXPLICITOS Y NO EXPLICITOS

REPRESENTAREMOS FORMALMENTE
EL MODELO MATEMÁTICO DEL
SISTEMA POR UN OPERADOR

$$A(x, y)$$

$$A(x, y) \otimes x = y$$

$$A(x, y) \otimes f(x) = g(y)$$

AL OPERADOR $A(\cdot)$ LE LLAMABAMOS
CORRESPONDENCIA, APLICACIÓN,
MAPPING, etc

EN CUALQUIER CASO, PARA NOSOTROS

$A(x, y)$ ES CONOCIDO

PROCESO DIRECTO SINTESIS

$$A(x, y) \otimes x = y$$

$$A(x, y) \otimes f(x) = g(y)$$

PROCESO INVERSO

$$A(x, y), y \longrightarrow x$$

$$A(x, y), g(y) \longrightarrow f(x)$$

OPERADOR DE CARACTER MATEMÁTICO

SUPONDREMOS SIEMPRE QUE

SABEMOS RESOLVER EL PROBLEMA

DIRECTO: SINTESIS

DADA UNA SERIE DE VALORES DE LOS
PARÁMETROS $\{x_k\}$ O UNA $f(x)$

SABEMOS CALCULAR LOS CORRESPON-
DIENTES VALORES DE LAS VARIABLES
 $\{y_k\}$ O $f(y)$

ESTE P.D. PUEDE SER

- FACILMENTE REALIZABLE
- DIFILMENTE REALIZABLE

PERO LO SABEMOS HACER

AHORA, DE ACUERDO CON LA CLASIFICACIÓN QUE ACABAMOS DE HACER PARA LOS MODELOS DE SISTEMAS: OPERADOR **A** (SIEMPRE MATEMÁTICO), PODREMOS HACERNOS ALGUNA IDEA DE COMO SERA EL **P.I.** ASOCIADO.

ESTO NOS PERMITIRA UNA PRIMERA CLASIFICACIÓN DE LOS PROBLEMAS INVERSOS.

DISCUTIREMOS PRIMERAMENTE LA DIFERENCIA QUE PUEDE HABER ENTRE LOS PROBLEMAS PLANTEADOS EN EL CAMPO DE LA MATEMÁTICA PURA Y LOS PROBLEMAS QUE SE PLANTEAN EN EL CAMPO DE LAS CIENCIAS FÍSICO-NATURALES.

A

PROBLEMAS MATEMÁTICOS PUROS

POR DEFINICIÓN EL OPERADOR (X, Y)

ES MATEMÁTICAMENTE EXPLÍCITO

LA RESOLUCIÓN DEL P.D.

ES INMEDIATA: MATEMÁTICAMENTE
REALIZABLE

AUNQUE PUEDE SER MUY DIFÍCIL

EL CORRESPONDIENTE P.T.

SERÁ EXPLÍCITO

AUNQUE, EN LA MAYORÍA DE LOS
CASOS DIFÍCILMENTE REALIZABLE.

MUCHAS VECES EN MATEMÁTICA

mejor MUCHAS VECES CIERTOS
MATEMÁTICOS

CONSIDERAN SOLAMENTE COMO
RESOLUCIÓN DE UN P.I.

UNA SOLUCIÓN ANALÍTICA

PARTIENDO DE DATOS: VARIABLES
Y FUNCIONES

MATEMÁTICAMENTE EXACTOS

SOLUCIONES ANALÍTICAS NO SE
ENCUENTRAN PARA CASI NINGÚN
PROBLEMA FÍSICO - NATURAL

DATOS MATEMÁTICAMENTE EXACTOS
NO SE TIENEN NUNCA EN
LA REALIDAD

PARECE LÓGICO DESARROLLAR
MÉTODOS APROXIMADOS

MÉTODOS APROXIMADOS
PARA RESOLVER PROBLEMAS INTRINSECAMENTE
MATEMÁTICOS

A VECES ANALÍTICOS

A VECES NUMÉRICOS

EN EL PRIMER CASO PODRÍA PENSARSE
EN OBTENER UNA SOLUCIÓN ANALÍTICA
PURA, COMO UN PROCESO LÍMITE!

Caso de los desarrollos
en serie.

AUN ACEPTANDO ESTE TIPO DE
MÉTODOS APROXIMADOS

MUCHOS MATEMÁTICOS

NO CONSIDERAN LA POSIBILIDAD DE
QUE LOS DATOS SEAN NO EXACTOS,

PERO EN LA NATURALEZA

INCLUSO PARA AQUELLOS SISTEMAS QUE
SE FORMULAN COMO MATEMATICAMENTE
EXPLICITOS

Y TALES QUE SU CORRESPONDIENTE P.T.
TIENE SOLUCIÓN ANALÍTICA

LOS DATOS NUNCA SERÁN
MATEMATICAMENTE PRECISOS

LUEGO SI SE TRATA DE UN PROBLEMA
DE ~~MATEMATICA APLICABLE~~

TE NEMOS QUE ACEPTAR QUE LOS
~~DATOS~~ PUEDAN SER ~~APROXIMADOS~~ :

QUE PUEDAN PRESENTARSE EN FORMA
NUMÉRICA EN UNA TABLA

Para muchos matemáticos estos
problemas no exactos dejan
de ser considerados.

Pero para el resto de la humanidad
son la más útiles.

PERO PRECISAMENTE,
ES EN ESTE PUNTO DONDE APARECE
~~LA GRAN DIFICULTAD DE LOS~~
~~PROBLEMAS INVERSOS~~

de la que hablaremos mucho
durante el curso:

PUEDE OCURRIR
SUELE OCURRIR

QUE APLICANDO UNOS DATOS
APROXIMADOS A UNA SOLUCION
ANALITICA, PODEMOS (GENERALMENTE
OCURRE) OBTENER RESULTADOS
NUMERICOS ABERRANTES.

ENTONCES, ~~A PESAR DE DISPONER DE~~
~~SOLUCIONES ANALITICAS,~~

NOS VEMOS OBLIGADOS A BUSCAR
MÉTODOS NUMÉRICOS DE INVERSIÓN
QUE NOS PERMITAN OBTENER
RESULTADOS NUMÉRICOS CON UNA
CIERTA GARANTÍA, CUANDO SE DISPONE
DE DATOS NUMÉRICOS (NATURALES), QUE
ES LO QUE SUELE OCURRIR CASI SIEMPRE.

NO OBSTANTE

LAS SOLUCIONES ANALÍTICAS
DE AQUELLOS (muy pocos) P.I.
PARA LOS QUE SE DISPONE

NOS PUEDEN AYUDAR MUCHO A
ENCONTRAR MÉTODOS NUMÉRICOS
ESPECÍFICOS PARA TRATAR EL
PROBLEMA EN CUESTION

Esto es fundamental.

PENSEMOS QUE EN CIENCIAS
FÍSICO-NATURALES, todos ~~los~~
~~DATOS~~ que se disponen ~~SON~~
~~NUMÉRICOS~~ (no necesariamente
exactos).

EN EL PEOR DE LOS CASOS
PODEMOS CONSIDERAR ESOS POCOS
PROBLEMAS QUE TIENEN SOLUCIONES
ANALÍTICAS. COMO **BANCOS DE**
PRUEBAS PARA ESTUDIAR
MÉTODOS NUMÉRICOS DE
RESOLUCION.

When the spaces involved in (1.32) are infinite-dimensional a direct numerical treatment is generally not possible. The problem must be recast in the more suitable form

$$T_n x_n = y_n \quad (1.33)$$

where $x_n \in X_n$, $y_n \in Y_n$, and X_n and Y_n are finite-dimensional spaces. This process is called *discretization*. Since (1.32) and (1.33) are not equivalent, discretization introduces an error. Furthermore, the discretized problem usually cannot be solved exactly, and further error arises from the limitations of the computational procedure. These two sources combine to cause the overall error in the final result.

— *Computational errors* are due to the fact that the process required to solve (1.33) cannot be carried out exactly. The fact that arithmetic operations can be performed only with limited precision introduces the problem of *round-off error*. While it is easy to discuss the behavior of round-off error in each particular operation, its cumulative effect on a lengthy sequence of calculations is hard to predict. The most extensive analysis of round-off error is given in J. H. Wilkinson's classic treatment (Wilkinson, 1963), but a comprehensive and universally useful theory has not yet emerged. We will therefore not pursue this subject, and instead refer the interested reader to Wilkinson's work.

There may be other sources of computational error; for instance, the solution of (1.33) may call for an infinite iteration process, so that some error will be introduced by stopping after a finite number of steps. This is much easier to analyze, as will be seen from specific examples to be discussed.

— *Discretization errors* arise because we replace an infinite or continuous process by a finite one. Discretization usually depends on one or more parameters, represented by n in (1.33). For example, in the numerical evaluation of a definite integral (a continuous process) by numerical quadrature (a finite summation), n might represent the number of quadrature points. In studying the discretization error we need to investigate the relation of the true solution (say x) of (1.32) to the approximate solution x_n of (1.33). It is reasonable to require that a numerical method be capable of yielding, at least in the absence of computational errors, arbitrarily accurate answers, obtainable by making the discretization sufficiently fine (which we will denote by $n \rightarrow \infty$). In other words, we expect the approximate solution to converge to the true solution or

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|x - x_n\| = 0.$$

A method which gives a sequence of approximations converging to the true answer is called a *convergent approximation method*.

EJEMPLO

SISTEMA A : CÁLCULO DEL SENO DE UN ANGULO X

$$\text{SEN } X = y$$

P.I. SOLUCIÓN TEÓRICA : MATEMÁTICAMENTE EXACTA, SI y ES UNA VARIABLE MATEMÁTICAMENTE EXACTA :

$$X = \text{ARC SEN } y$$

PERO SI DISPONEMOS DE UN VALOR CONCRETO y_k DE y [MATEMÁTICAMENTE EXACTO, O NUMERICAMENTE APROXIMADO]

NECESITAREMOS DE UNA EXPRESIÓN OPERATIVA DE

$\text{ARC SEN } \dots$

TAL EXPRESIÓN VIENE DADA POR UNA SERIE QUE EQUIVALE A UNA INVERSIÓN APROXIMADA

INCLUSO SI y PRESENTA UN CIERTO ERROR Δy , ES RELATIVAMENTE SENCILLO ENCONTRAR EL ERROR QUE APARECERA EN LA INVERSIÓN PARA EL CORRESPONDIENTE VALOR DE X .

EJEMPLO

$$A \cdot \bar{x} = \bar{y}$$

P.D. LA PROPIA DEFINICIÓN DEL PRODUCTO DE UNA **MATRIZ A** POR UN VECTOR \bar{x}

P.I. A PRIORI FACTIBLE (INMEDIATO)

TEÓRICAMENTE: $\bar{x} = A^{-1} \cdot \bar{y}$

A^{-1} MATRIZ INVERSA

EXISTEN REGLAS TEÓRICO-PRACTICAS PARA CALCULARLA. SÓLO EN MUY POCOS PROBLEMAS EXISTEN INVERSIONES ANALÍTICAS.

POR LO TANTO, EN LA PRACTICA SERA SIEMPRE UNA INVERSIÓN APROXIMADA.

HAY CASOS DE INVERSIÓN IMPOSIBLE:
NO EXISTE A^{-1}

SE TRATA DEL P.I. TÍPICO

PUEDE OCURRIR, SOBRE TODO SI LAS DIMENSIONES DEL PROBLEMA SON GRANDES, QUE EL MÉTODO TEÓRICO-PRACTICO DE CALCULAR A^{-1} NO SEA VIABLE EN LA PRACTICA

ENTONCES HABRÁ QUE APLICAR
OTRAS FORMAS PARA RESOLVER
EL P.I. FORMAS DEL TIPO DE LAS
QUE SE DESARROLLARÁN PARA TRATAR
LOS PROBLEMAS NO EXPLÍCITOS
que veremos después.

EJEMPLO
ABEL

$$\sigma(s) = \int_s^R \rho(r) \frac{2r dr}{\sqrt{r^2 - s^2}}$$

CAMBIO $s^2 \rightarrow y$ $r^2 \rightarrow x$

$$\sigma(y) = \int_y^{x_0} \rho(x) \frac{dx}{\sqrt{x-y}}$$

x_0 : MAXIMO VALOR DE x $x_0 = R^2$
 PUEDE SER 1 ó ∞

EL MAXIMO VALOR DE y
 SUELE COINCIDIR CON x_0 (1 ó ∞)

$\sigma(x_0) = 0$ como $\sqrt{y-x_0}$

integral de una rectante dentro de un círculo

SOLUCION

$$\int_z^{x_0} dy \frac{\sigma(y)}{\sqrt{y-z}} = \int_z^{x_0} \frac{dy}{\sqrt{y-z}} \int_y^{x_0} \rho(x) \frac{dx}{\sqrt{x-y}}$$

$$= \int_z^{x_0} dx \rho(x) \int_z^x \frac{dy}{\sqrt{y-z} \sqrt{x-y}}$$

PERO, SOBRE TODO
ESTE EJEMPLO NOS SIRVE PARA
INTRODUCIR (LUEGO LO ESTUDIAREMOS
CON MAS DETALLE) UNA DIFICULTAD
TÍPICA DE LOS P.I. :

EN MUCHÍSIMAS SITUACIONES;
MUCHOS OPERADORES MATRICIALES A
aunque el P.D. se pueda hacer
en la práctica numérica sin
ninguna dificultad

EL P.I. , INCLUSO SI SE PUEDE HACER
ES INESTABLE

A UNA INDETERMINACIÓN RELATIVA
 $\Delta y/y$ EN LOS DATOS

LE CORRESPONDE UNA INDETERMINACIÓN
RELATIVA $\Delta x/x$ EN EL RESULTADO
QUE PUEDE SER EXTRAORDINARIAMENTE
MAS GRANDE (RESULTADOS ABERRANTES)
OJO CON LOS DATOS NO EXACTOS

$$\int_z^{x_0} dy \frac{\sigma(y)}{\sqrt{y-z}} =$$

CAMBIO $y \rightarrow t$

$$y = z + t(x-z)$$

$$= \int_z^{x_0} dx \rho(x) \frac{\cancel{(x-z)}}{\cancel{\sqrt{x-z}} \sqrt{x-z}} \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{t} \sqrt{1-t}}$$

$$= \int_z^{x_0} dx \rho(x) \pi$$

$$\rho(x) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{dx} \int_x^{x_0} dy \frac{\sigma(y)}{\sqrt{y-x}}$$

$$= -\frac{1}{\pi} \int_x^{x_0} dy \frac{\frac{d\sigma(y)}{dy}}{\sqrt{y-x}}$$

DE DONDE, DERIVANDO

$$f(z) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{dz} \int_z^1 \frac{g(\eta)}{\sqrt{1-\eta}} d\eta$$

ES LA EXPRESIÓN ANALÍTICA: MATEMÁTICAMENTE EXACTA, DE LA FORMA INVERSA DE LA TRANSFORMADA DE ABEL.

Se puede escribir en otros términos.

$$f(z) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{dz} \int_z^1 g(\eta) d\sqrt{1-\eta}$$

$$= -\frac{2}{\pi} \frac{d}{dz} \left\{ \sqrt{1-z} g(z=1) - \int_z^1 \sqrt{1-\eta} \frac{d}{d\eta} g(\eta) d\eta \right\}$$

$$= \frac{1}{\pi} \left\{ \frac{g(z=1)}{\sqrt{1-z}} - \int_z^1 \frac{\frac{d}{d\eta} g(\eta)}{\sqrt{1-\eta}} d\eta \right\}$$

TENEMOS PUES LA EXPRESIÓN CORRECTA PARA UN MATEMÁTICO

DESGRACIADAMENTE EXISTEN MUY POCAS TRANSFORMADAS INTEGRALES QUE SE PUEDAN INVERTIR TEÓRICAMENTE.

PERO, TAMBIÉN DESGRACIADAMENTE,
UNA INVERSIÓN COMO LA ANTERIOR
NOS SIRVE DE MUY POCO EN
LA PRACTICA.

SÍ LOS DATOS $g(y)$ NO SON
MATEMÁTICAMENTE EXACTOS

Y SI NO PODEMOS HACER $\frac{d}{dy} g(y)$
MATEMÁTICAMENTE EXACTA

EMPLERAR LA FORMULA ANTERIOR
PUEDE CONDUCIR A RESULTADOS
MATEMÁTICAMENTE CATASTRÓFICOS

HABRÁ QUE DESARROLLAR METODOS
NUMERICOS QUE EVITEN TAL
POSIBILIDAD.

ES RELATIVAMENTE FACIL
ENCONTRARLOS

LA EXPRESIÓN ANALÍTICA ANTERIOR
SIRVE, PRECISAMENTE, PARA
ENCONTRAR METODOS NUMERICOS
ESPECÍFICOS PARA TRATAR ESTE P.E.

LOS DATOS NATURALES NO SON
NUNCA DATOS EXACTOS

PROBLEMAS QUE SE
PLANTEAN EN EL CAMPO
DE LAS CIENCIAS
FÍSICO-NATURALES

PROBLEMAS QUE SE PLANTEAN
EN EL CAMPO DE LAS
CIENCIAS FÍSICO-NATURALES

EL OPERADOR $A(x, y)$
ES MATEMÁTICAMENTE CONOCIDO;
EXPLÍCITO EN TÉRMINOS
DE ECUACIONES FÍSICO-
MATEMÁTICAS.

EL QUE PODAMOS DESCRIBIR EL
PROBLEMA POR MEDIO DE UN
OPERADOR MATEMÁTICAMENTE
EXPLÍCITO, SUPONE YA UNA
CIERTA APROXIMACIÓN EN LA
DESCRIPCIÓN DE UN SISTEMA
NATURAL

PERO ESTA ES INHERENTE
EN CUALQUIER DISCIPLINA
CIENTÍFICA CUANDO QUEREMOS
DESCRIBIR UN SISTEMA NATURAL
EN TÉRMINOS CONOCIDOS:
MATEMÁTICOS PARA NOSOTROS.

AL HABLAR DE MODELOS VIMOS QUE
EXISTIAN SISTEMAS RELATIVAMENTE
SIMPLES QUE PERMITIAN SER REPRESENTADOS
POR MODELOS MATEMÁTICOS
SIN NINGUNA APROXIMACION

Y QUE CONDUCIAN A OPERADORES
INTEGRALES RELATIVAMENTE SIMPLES

Ejemplo DETERMINACION DE LA
DENSIDAD ESPACIAL $\rho(r)$, DE UN
SISTEMA CON GEOMETRIA ESFERICA
CONOCIDA LA DENSIDAD DE COLUMNA
OBSERVADA $\sigma(R)$

$$\sigma(R) = \int_R^1 \frac{2\tau \rho(\tau)}{\sqrt{\tau^2 - R^2}} d\tau \quad \text{ABEL}$$

EL P.D. "SINTESIS" ES FACILMENTE
REALIZABLE

EL P.I. APARECE CLARAMENTE
EN TERMINOS EXPLICITOS

VEIAMOS TAMBIÉN QUE MUCHOS
PROBLEMAS FÁCILES DE CONCEBIR
FÍSICAMENTE NO SE DEJAN MODELIZAR
MATEMÁTICAMENTE DE UNA MANERA
EXPLÍCITA

PERO QUE ESTO ÚLTIMO SE
LOGRA MEDIANTE GRANDES SIMPLIFICA
CIONES (que pueden proporcionar
resultados muy útiles)

TOMO GRAFÍA ELÉCTRICA DE SUELOS.

COMO CONSECUENCIA DE ESAS
SIMPLIFICACIONES EL OPERADOR
 $A(\cdot)$ RESULTA MUY SIMPLE

EL **P.D.** "SÍNTESIS" ES FACILMENTE
REALIZABLE

EL **P.I.** APARECE CLARAMENTE EN
TÉRMINOS EXPLÍCITOS:
INVERSIÓN DE UN SISTEMA LINEAL
DE ECUACIONES ALGEBRAICAS.

EN MUCHOS CASOS ES RELATIVAMENTE
POSIBLE EL HACER UNA DESCRIPCIÓN
FÍSICO-MATEMÁTICA DE UN SISTEMA
NATURAL EN TÉRMINOS MÁS
CORRECTOS : SIN GRANDES SIMPLIFICA
CIONES

EN EL CASO DE LAS ATMÓSFERAS
ESTELARES, CON UNA BUENA APROXI
MACIÓN FÍSICA, SE PUEDE GENERAR
UN SISTEMA DE ECUACIONES
MATEMÁTICAS QUE DESCRIBEN
BASTANTE BIEN EL FENÓMENO
EN ESTUDIO

EL **P.D.** "SÍNTESIS" PRESENTA
DIFICULTADES : NECESITA DE
PROTOCOLOS MATEMÁTICO-NUMÉ
RICOS DE UNA CIERTA ESPECIALI
ZACIÓN.

EL CORRESPONDIENTE **P.I.** : DETER
MINAR LOS PARÁMETROS DEL MODELO
DE UN OBJETO OBSERVADO NO SE
PUEDE PLANTEAR DE UNA FORMA
EXPLÍCITA.

EN ALGUNOS CASOS INTERMEDIOS
DE BASTANTE INTERÉS, EL MODELO
O EL OPERADOR $A(x, y)$ ES TAL
QUE EL CORRESPONDIENTE

P.D. "SINTESIS" ES RELATIVAMENTE
REALIZABLE DENTRO DE UN
CIERTO GRADO DE FACILIDAD,

PERO PUEDE OCURRIR QUE EL

P.I. SEA NO EXPLICITO Y NO
PODAMOS EMPLEAR TÉCNICAS
ESPECÍFICAS PARA RESOLVERLO

ESTOS CASOS MERECEAN UNA ATENCIÓN
ESPECIAL

PROBLEMAS QUE SE PLANTEAN
EN EL CAMPO DE LAS CIENCIAS
FISICO-NATURALES.

* SISTEMAS RELATIVAMENTE SIMPLES

⇒ MODELOS MATEMATICOS SIN
NINGUNA APROXIMACION ⇒

OPERADORES RELATIVAMENTE
SIMPLES

EJEMP. DETERMINACION DE LA DENSIDAD
ESPACIAL $\rho(x)$ EN FUNCION DE LA
DENSIDAD DE COLUMNA $\sigma(r)$

P.D. SINTESIS

FACILMENTE REALIZABLE

P.I. SE PLANTEA FACILMENTE
EN TERMINOS EXPLICITOS

EN ALGUNOS CASOS INTERMEDIOS
DE BASTANTE INTERES,
EL MODELO O EL OPERADOR $A(x, y)$
ES TAL QUE EL

P.D. "SINTEISIS" ES RELATIVAMENTE
REALIZABLE DENTRO DE UN
CIERTO GRADO DE FACILIDAD

PERO PUEDE OCURRIR QUE EL

P.I. SEA NO EXPLICITO Y NO
PODAMOS EMPLEAR TECNICAS
ESPECIFICAS PARA RESOLVERLO,

PROBLEMAS INVERSOJ

EXPLICITOS

ADMITEN UN PROCESO DIRECTO DE INVERSION

(DIRECTO = STRAIGHT FORWARD)

AUNQUE EL PROCESO DE INVERSION SEA (PARA ESTE TIPO DE PROBLEMAS) DETERMINISTA

LO ES CONCEPTUALMENTE :

PUEDE SER UN PROCESO MUY INESTABLE, Y PUEDEN APARECER PROBLEMAS SI LOS DATOS NO SON MATEMATICAMENTE CORRECTOS

Y LOS DATOS EN UN PROBLEMA NATURAL TENDRÁN ERRORES SIEMPRE

GENERALMENTE SE TRATA DE SISTEMAS FISICO-MATEMÁTICOS BASTANTE SIMPLES

EN ALGUNOS CASOS (EJEMP. ATMÓSFERAS ESTELARES) ES POSIBLE HACER UNA DESCRIPCIÓN FÍSICO-MATEMÁTICA: **MODELO** EN TÉRMINOS BASTANTE CORRECTOS: SIN GRANDES SIMPLIFICACIONES, PERO...

EL P.D. "SÍNTESIS" PRESENTA DIFICULTADES: NECESITA DE PROTOCOLOS MATEMÁTICO-NUMÉRICOS DE UNA CIERTA ESPECIALIZACIÓN

EL CORRESPONDIENTE P.I.: DETERMINAR LOS PARÁMETROS DE UN MODELO DE UN OBJETO OBSERVADO NO SE PUEDE PLANTEAR DE UNA FORMA EXPLÍCITA.

SISTEMAS COMPLICADOS

PROBLEMAS INVERSOS

NO EXPLICITOS

NO ES POSIBLE EL INTENTAR
PLANTEAR EL PROCESO INVERSO
DE UNA MANERA DIRECTA =
STRAIGHT FORWARDLY

ES POSIBLE DISEÑAR ESTRATEGIAS
DE INVERSIÓN

SERÁN MÁS PRÓXIMAS A LAS
QUE SE UTILIZAN EN EL CAMPO DE
~~DE~~ ANALISIS DE SISTEMAS

QUE DE LAS QUE SE UTILIZAN EN
EL CAMPO DEL DETERMINISMO
MATEMÁTICO

TENDRÁN UNA COMPONENTE
HEURÍSTICA MAYOR Y SERÁ
MUCHO MENOR LA CALIDAD DE
LOS RESULTADOS EN LO QUE
CONCIERNE AL DETERMINISMO.

ADEMÁS TENDREMOS QUE RECONOCER
QUE NO PODREMOS DETERMINAR TODO
LO QUE SE NOS PODRÍA OCURRIR
LÓGICAMENTE

DE TODAS FORMAS HEMOS DE SER CONSCIENTES QUE ESTA CLASIFICACION, SÓLO PUEDE CONSIDERARSE COMO UNA INTRODUCCION EXCESIVAMENTE SIMPLIFICADA, PARA UN CURSO RÁPIDO. LA PROPIA NATURALEZA PUEDE, EN TODO MOMENTO, MOSTRARNOS PROBLEMAS QUE NO SE ADAPTAN A ESTE CUADRO MUY SIMPLIFICADO.

ADOPTADA LA CLASIFICACION ESTE CURSO SE DEDICA PRINCIPALMENTE AL ESTUDIO DE **LOS P.I. EXPLICITOS**

NO OBSTANTE DEDICAREMOS A CONTINUACION UNA LECCION PARA ANALIZAR SOMERAMENTE **LOS P.I. NO EXPLICITOS.**

ACEPTANDO QUE CON MAYOR O MENOR DIFICULTAD PODEMOS TRATAR LOS **P.D.**

Trataremos muy brevemente de comentar como se plantea el P.I. en aquellos sistemas que son físicos y matemáticamente tan complicados que, aunque sepan

- generalmente con mucha dificultad también -

resolver el Problema

Direcho a decir:

SINTETIZAR el conjunto \bar{Y} de valores Y_k (o de funciones) de las variables que identificamos con las observaciones

A PARTIR del conjunto \bar{X} de valores X_k (o de funciones) de los parámetros que intervienen en el sistema

EL PLANEO DEL PROBLEMA INVERSO
CORRESPONDIENTE ES IMPOSIBLE
DE UNA MANERA EXPLICITA

PROBLEMAS FACILES DE CONCEBIR
FISICAMENTE PERO QUE POR SU
NATURALEZA ES IMPOSIBLE EL
ENCONTRAR UN MODELO MATEMA-
TICAMENTE EXACTO

NECESIDAD DE GRANDES SIMPLIFI-
CIONES:

↳ TOMOGRAFIA ELECTRICA
DE SUELOS
↳ COMO CONSECUENCIA

EL MODELO/OPERADOR MATEMATICO
RESULTA MUY SIMPLE

P.D. SINTESIS RESULTA FACILMENTE
REALIZABLE

P.I. APARECE CLARAMENTE EN
TERMINOS EXPLICITOS.

EXISTEN SISTEMAS

RELATIVAMENTE SIMPLES

RELATIVAMENTE COMPLICADOS

QUE DAN LUGAR A PROBLEMAS INVERJOS

RELATIVAMENTE EXPLICITOS

RELATIVAMENTE NO EXPLICITOS

PARA LOS CUALES NO EXISTE UN
MÉTODO DE INVERSIÓN DIRECTO

PERO SE PUEDE DISEÑAR UN
PROCESO ITERATIVO CONVERGENTE

QUE NOS LLEVA A SU SOLUCIÓN
(al menos con una precisión
impuesta "a priori")

Y DENTRO DE UN GRADO MUY
ALTO DE DETERMINISMO
MATEMÁTICO

QUIZAS LO MÁS IMPORTANTE DE
LAS CONSIDERACIONES QUE VAMOS A
EXPONER AQUÍ

PARA TRATAR ITERATIVAMENTE
AQUELLOS P.I. NO EXPLÍCITOS
PERO PARA LOS CUALES EL
CORRESPONDIENTE P.D. SE PUEDE
TRATAR

ES QUE LAS TÉCNICAS (O ALGUNAS
TÉCNICAS) QUE AQUÍ DESARROLLEMOS
SERÁN TAMBIÉN VÁLIDAS
(E INCLUSO ÓPTIMAS)

PARA TRATAR P.I. EXPLÍCITOS
EN LOS CUALES OTROS MÉTODOS
PUEDEN RESULTAR INESTABLES.

3.2. P.I. NO EXPLICITOS

~~3.2~~ FUNCIONES DE TRANSFERENCIA

A VECES SE PUEDEN ENCONTRAR
COMBINACIONES (lineales o no) DE
DIFERENTES MEDIDAS

TALES QUE

DICHAS COMBINACIONES DEPENDEN
(O DEPENDEN PRACTICAMENTE) DE
UN SOLO PARÁMETRO O DE
COMBINACIONES SIMPLES DE DOS O
TRES PARÁMETROS

ELLO NOS PERMITE DIAGNOSTICAR
DIRECTAMENTE EL VALOR DE
ESE PARÁMETRO O EL DE ESA
COMBINACION SIMPLE DE ELLOS

DICHAS COMBINACIONES CON LAS
FUNCIONES DE TRANSFERENCIA

SE UTILIZAN TANTO EN \overline{PI}
EXPLICITOS COMO NO-EXPLICITOS

En lo que concierne a PI
NO-EXPLÍCITOS, en nuestra profesión
es relativamente fácil de encontrar
FUNCIONES DE TRANSFERENCIA
A PARTIR DE OBSERVACIONES
ESPECTROSCÓPICAS Y FOTOMÉTRICAS
ESTELARES

tales que permiten determinar
el valor de las FUNCIONES
FUENTE (\Rightarrow TEMPERATURA) por
diferente puntos: "profundidades
ópticas" de una ATMÓSFERA ESTELAR

En lo que concierne a PI
EXPLÍCITOS, tales combinaciones de
medidas son la base del
MÉTODOS DE GILBER-BACKUS
(que veremos más tarde), es el
MÉTODOS QUE SE UTILIZA EN
SISMOLÓGIA SOLAR Y ESTELAR

3.3

PROBLEMAS INVERSOS

NO EXPLÍCITOS

ITERACIONES

(TECNICAS ITERATIVAS

AUTOCORRECTORAS

MÉTHODES NUMÉRIQUES DANS LES PROBLÈMES D'EXTRÊMUM

Le présent livre passe complètement sous silence les méthodes de résolution de la vaste classe importante de problèmes d'extrémum mal posés, méthodes élaborées par A. Tikhonov et son école.

Les algorithmes que le lecteur trouvera dans les pages ci-dessous sont de nature itérative. Cela signifie qu'on construit une suite finie ou infinie de points x_k , $k = 0, 1, \dots$, dont on peut dire qu'elle converge dans un sens ou dans un autre vers la solution du problème de minimisation

En choisissant les algorithmes à examiner dans le présent livre, les auteurs sont essentiellement partis du critère de précision du résultat et de celui de vitesse de convergence du processus itératif.

Même en restant dans ce cadre étroit, on ne peut cependant ordonner univoquement tous les algorithmes ni en indiquer le meilleur et le pire. Le fait est qu'on obtient les estimations de la vitesse de convergence pour des classes de problèmes, non pas pour des problèmes isolés, et un algorithme mauvais pour une vaste classe peut s'avérer efficace pour une autre, plus restreinte. Le calculateur doit donc posséder tout un arsenal d'algorithmes pour être en mesure de faire face à chaque problème proposé.

On a également à tenir compte de la façon dont on réalise une grande rapidité de convergence. Dans la pratique, même le calcul de dérivées premières d'une fonction s'avère souvent ardu et celui de dérivées secondes inextricable. Les auteurs ont donc insisté sur des algorithmes qui exigent le calcul des seules dérivées premières ou des valeurs de la fonction.

Les méthodes itératives sont intéressantes pour plusieurs raisons.

D'abord, comme elles procèdent par améliorations successives, on peut s'arrêter lorsque la précision est jugée satisfaisante. Ceci peut se produire bien avant que la solution ne soit trouvée. Une solution "acceptable" peut donc être obtenue à un faible coût.

Ensuite, elles permettent de tirer parti d'une bonne approximation initiale.

3. 3. 1 - ~~2~~

Técnicas de inversión Tip
POWER y ERROE (FIT)

PLANTEAREMOS NUESTRO ANALISIS EN LOS
TERMINOS DEL ESQUEMA QUE VIMOS EN EL Cap 1

ESPACIO F : FORMADO POR LOS ELEMENTOS
 $\{x_i\} = (x_1, x_2, \dots, x_{np})$ QUE CONSTITUYEN
CADA CONJUNTO PARTICULAR DE VALORES
DE LOS PARAMETROS DE ESTADO

ESPACIO G : FORMADO POR LOS ELEMENTOS
 $\{y_j\} = (y_1, y_2, \dots, y_{nv})$ QUE CONSTITUYEN
CADA CONJUNTO PARTICULAR DE VALORES
DE LAS VARIABLES

SI, VIA P.D. LOGRAMOS ESTUDIAR
BIEN LA ASOCIACION ENTRE CADA
ELEMENTO $\{x_i\}$ DEL ESPACIO F,
Y CADA ELEMENTO $\{y_j\}$ DEL ESPACIO
G

Y PODEMOS EXCLUIR MEDIANTE
CIERTAS HIPOTESIS EXTERNAS LOS
CASOS EN LOS CUALES NO HAY
BIUNIVOCIDAD, ES DECIR, LOS CASOS
EN LOS QUE SE PRESENTA UNA BIFURCACION

PODREMOS ADMITIR! (SI ESTA
ASOCIACIÓN HA SIDO BIEN ESTUDIADA)

QUE RESOLVEREMOS EL P.I.

ADMITIENDO QUE A CADA CONJUNTO
PARTICULAR DE VALORES DE LAS
VARIABLES $\{y_j\}_x$

SE LE PUEDE ASOCIAR
COMO SOLUCIÓN DEL CORRESPONDIENTE P.I.

AQUEL CONJUNTO $\{x_i\}_x$ DE
VALORES DE LOS PARÁMETROS

QUE EN EL TRATAMIENTO DEL
CORRESPONDIENTE P.D.

GENERARÍA EL CONJUNTO PARTICULAR
DE VALORES $\{y_j\}_x$: DATO DE NUESTRO
P.I. DE PARTIDA

CLARO QUE PARA ELLO NECESITAREMOS

- BIEN TANTEOS
- BIEN DISPONER EN FORMA DE TABLAS
O DE GRAFICOS DE LAS RELACIONES
ENTRE TODOS LOS ELEMENTOS $\{x_i\}_x$
DEL ESPACIO F Y TODOS LOS ELEMENTOS
 $\{y_j\}_x$ DEL ESPACIO G .

LA PRIMERA CONCLUSIÓN ES QUE PODEMOS CONSIDERAR ESA CORRESPONDENCIA ENTRE LOS ELEMENTOS DEL ESPACIO F Y LOS DEL ESPACIO G COMO UN FIT DE LAS OBSERVACIONES

$$dY \in G \leftrightarrow g(\eta)$$

Dados valores ~~observados~~ x_k al conjunto X de los parámetros, intentar encontrar

VIA PRUEBA Y ERROR (CORRECIÓN)

el conjunto de valores η_k que disponemos para las variables observadas.

EVIDENTEMENTE, aunque se encuentre un conjunto X_k de valores de los parámetros que satisficga nuestra pretensión de simular el conjunto η_k observado, dentro de un grado de precisión requerido

EXISTIRÁ UN ALTO GRADO DE INDETERMINISMO

Pero, a veces, no se puede hacer otra cosa.

Los valores dados a los parámetros η_k corresponden solamente a un criterio de la calidad del ajuste entre los resultados y las observaciones.

PERO

Tales procesos de PRUEBA y ERROR pueden automatizarse mejorando la velocidad del resultado, analizando la calidad de cada conexión:

PROPORCION Y DIRECCION en el cambio de los valores del resultado Y en cada proceso

Se puede optimizar el número de ellas. (*)

Pero no dejarse de educar, por ello, le misma crítica.

Y la misma justificación: no se puede hacer otra cosa,

por mucho que el proceso sea automático

(*) METODOS QUE UTILIZAN EL MÁXIMO GRADIENTE DE CORRECCIÓN etc

Siguen siendo métodos en los cuales la elección de los valores de los parámetros se hace con criterios de ajuste matemáticos (calidad y rapidez de convergencia) independientemente de la FÍSICA DEL PROBLEMA.

SE TRAYA DE UN FIT DE LOS
PARÁMETROS, QUE SATISFACE,
MEDIANTE UNA SÍNTESIS, A LAS
OBSERVACIONES.

3.3.2

Optimización de los
procesos de "fit"

EN UNA SEGUNDA ETAPA SE PUEDE IR UN POCO MÁS LEJOS QUE UN PROCESO DE AJUSTE (FIT) DE OBSERVACIONES

Aunque acabe siendo más o menos el mismo tipo de ajuste

TAMPOCO SERÁ UN ESTUDIO MUY DETERMINISTA

Naturalmente todo lo que podamos avanzar en este punto, será bajo el punto de vista del problema directo. Pero quizá podamos obtener alguna conclusión que, como "receta de cocina" puede utilizarse en el sentido del PROBLEMA INVERSO

EN REALIDAD SE TRATA DE OPTIMIZAR LAS PRUEBAS DE ACUERDO A LO QUE SE APRENDE, VIA TEORIA DE SISTEMAS, CON LOS ERRORES OBTENIDOS.

EL METODO SERÁ ALGO MEJOR QUE EL DEL "MAXIMO GRADIENTE DE CORRECCION": SE TRATA DE CONSIGNAS DE LA TEORIA DE SISTEMAS.

Hemos dicho que podemos TRATAR
COMO TAL, LA SOLUCIÓN DEL P.F. si la
asociación entre los elementos x_i y
del espacio F y los elementos y_j del
espacio G ha sido bien estudiada.

LO IDEAL SERÍA ESTABLECER UNA
CORRESPONDENCIA BIUNIVOCAL entre los
elementos de ambos espacios.

Pero evidentemente esto sería resolver
directamente el problema y partiendo
de que es imposible.

EN PRIMER LUGAR es muy interesante
tratar de saber cuanta información se
recupera, y cuanta se destruye, en
el proceso de medida de valores ~~de~~ de los
parámetros, cuando se resuelven las
ecuaciones. Es decir, hay que saber
cuanta información de lo que pudieran
tener los valores x_i de los parámetros,
se puede recuperar en los valores y_j
de las "observaciones sintéticas", cuando
se hace el PROBLEMA DIRECTO.

Aislaremos unos puntos de este estudio,

P.D. COMO LABORATORIO

PARA ESTUDIAR ESTA ASOCIACIÓN

INDEPENDENCIA OPERATIVA DE LOS VALORES DE LOS PARÁMETROS

Frente a las ecuaciones físico-matemáticas que describen nuestro sistema

- Los efectos particulares de algunos (toda) parámetros x_k (datos en el P.D.)

pueden ser los mismos sobre la respuesta - variable - o, al menos, sobre ciertas características de esta variable.

Si es así, será muy difícil diagnosticar valores particulares de los parámetros

Tal pérdida de información (asociada a una imposibilidad de recuperarla en el estudio del P.T.), puede ser teórica y Práctica

- Teórica porque los parámetros intervienen en una forma matemática en la que necesariamente interviene una pérdida de información o Eje.

$$x^2 = 4$$

Para los valores $x = -2$ y $x = 2$

Se recupera el mismo valor, $\gamma = 1$, vale la variable γ .

Existe una BIFURCACION en el P.F.

Práctica: la intervención de alguna característica - o de todas - de algún parámetro, puede desaparecer en la práctica numérica. Será luego muy difícil recuperarlo cuando se trate del P.F.

MUY IMPORTANTE

El P.D. nos permitirá, pues, saber, mediante repetidos ensayos, cuáles son las características de los resultados ~~YK~~ si las $K17$ - que se pueden asociar (una o varias / teórica o prácticamente) al comportamiento: valor y variación de cada parámetro específico. ~~XK~~

OPTIMIZACION DEL TIPO Y VALOR DE LAS VARIABLES EN VISTA DEL PROCESO DE DIAGNOSTICO P.F.

Las variables, muestras variable observadas, van a ser los datos para ~~trabaja~~ el P.F.: encontrar el valor de los parámetros de estado del sistema.

Pero muchas veces disponemos de más información - más valores de las variables - que lo necesaria (o, algunos, lo sabemos). Nos interesaría tener algún criterio para saber cual es la más representativa.

VAMOS, PUES, A DISCUTIR AQUI SOBRE LA POSIBILIDAD DE SABER CUANTAS, Y CUALES, VARIABLES OBSERVADAS SON OPTIMAS PARA, EN EL PROCESO DEL P.F., DETERMINAR EL VALOR DE LOS PARAMETROS DEL SISTEMA.

ORTOGONALIDAD

Aunque varias variables o combinaciones de ellas sean técnicamente independientes

puede ocurrir que, en la práctica contengan la misma información sobre los valores de los parámetros

bien en todas las regiones de los ejes F_1 y G , o bien en algunas regiones parciales de ellos

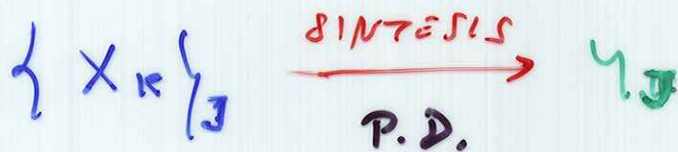
HAY QUE ESTAR PREPARADOS PARA NO DUPLICAR ECUACIONES QUE, AUN SIENDO APARENTEMENTE DIFERENTES SEAN EN LA PRACTICA IGUALES (al menos en alguna región)

TENEMOS QUE INTENTAR QUE A LA HORA DE TRABAJAR, NUESTRAS VARIABLES :
LAS VARIABLES DE TRABAJO SEAN COMBINACIONES DE LAS VARIABLES OBSERVADAS DIRECTAMENTE,
SEAN ORTOGONALES

LAS VARIABLES, Y EL TRATAMIENTO MATEMATICO CORRESPONDIENTE

SENSIBILIDAD EN LA RELACIÓN ENTRE PARAMETROS Y VARIABLES

ES MUY INTERANTE ESTUDIAR
VIA P.D. LA PROPAGACIÓN DE LAS
VARIACIONES RELATIVAS $\Delta X_k / X_k$ DE
TODOS Y CADA UNO DE LOS
PARAMETROS X_k QUE INFLUYEN
SOBRE TODOS Y CADA UNO DE LAS
VARIABLES Y_j , SOBRE LAS
VARIACIONES RELATIVAS $\Delta Y_j / Y_j$ DE
ESTAS ÚLTIMAS (VARIABLES)



ESTUDIAR

$$\frac{\Delta X_k}{X_k} \longrightarrow \frac{\Delta Y_j}{Y_j}$$

debido a ΔX_k

PARA CADA UNA
DE LAS $\{ X_k \}_J$

SI PARA TODO y_j Y TODOS LOS Δx_k

$$\frac{\frac{\Delta y_j}{y_j}}{\frac{\Delta x_k}{x_k}}$$

SON GRANDES

EL P.D. SERÁ BASTANTE IMPREDICIBLE
PERO EL P.I. SERÁ BASTANTE ESTABLE
PERO SI

$$\frac{\frac{\Delta y_j}{y_j}}{\frac{\Delta x_k}{x_k}}$$

SON PEQUEÑOS

EL SERÁ MUY INESTABLE:

LIGERAS VARIACIONES (RELATIVAS)
DE LOS DATOS y_j (DATOS PARA
EL P.I.) CONDUZCAN A MUY GRANDES
VARIACIONES EN LOS VALORES DE
LOS PARÁMETROS.

Acabamos de ver que, mediante el estudio del P.D. podemos disponer (y medir) de un criterio bastante importante:

LA SENSIBILIDAD DE LOS VALORES DE LAS VARIABLES CON RESPECTO A VARIACIONES DE LOS VALORES DE LOS PARÁMETROS, DEBIERA SER LO MAS GRANDE POSIBLE.

A veces no se logra que la sensibilidad de las variables observadas que disponemos, satisfaga por el criterio anterior.

PERO SI SE PUEDE LOGRAR CON COMBINACIONES DE ELLAS

Es decir, considerando el P.D. como un laboratorio podemos (quizás) encontrar combinaciones de las variables (de ellas y de funciones de ellas, etc), que sean óptimas para datos, para tratar el P.D.

Esta combinación se podría (si se logra encontrarla) considerar como nuevas variables más significativas.

SELECTIVIDAD DE LAS VARIABLES

Mediante el P.D. considerado como
Indicativo

SE PUEDE INTENTAR SELECCIONAR
UNA (UNAS) Y_j VARIABLE (VARIABLES)
O COMBINACIONES DE ELLAS,
QUE DEPENDA SÓLO DE UN PARAMETRO X_k

(Si no es en todo el espacio G
y en todo el espacio F , respectivos,
al menos en algún subespacio de
ellos)

ESTO FACILITARA EXTRAORDINARIAMENTE
EL DIAGNOSTICO DE LOS VALORES
DE ESTE PARAMETRO

CONCLUSION PARCIAL

No siempre una selección teórica
(suponiendo que sepan formular el P.D.) de combinaciones de las
variables y_j que - teóricamente - son
observable,

es posible en la práctica
y incluso si los valores de esas
variable, hace poder participar
en un tratamiento matemático
determinista

requerir una precisión alta,

BAJO EL PUNTO DE VISTA DE LA SENSIBILIDAD

LA PRACTICA REAL PUEDE IMPEDIR
OBSERVAR UNA VARIABLE TEORICAMENTE
OPTIMA, u , OBSERVARLA CON UNA
PRECISION TEORICAMENTE OPTIMA

ESTE PUNTO ES CRUCIAL
EN TODO TRATAMIENTO DEL P.D.,
INCLUSO EN LOS SISTEMAS
SIMPLES Y EXPLICITOS

CRITERIOS PARA LA ELECCIÓN DE LAS VARIABLES EN VISTA DEL PROCESO DE DETERMINACIÓN DE LOS VALORES DE LOS PARÁMETROS

ORTOGONALIDAD ENTRE LAS VARIABLES O COMBINACIONES DE ELLAS, PARA QUE DIFERENTES COMBINACIONES (O VARIABLES AISLADAS) NO CONDUZCAN A LOS MISMOS VALORES DE LOS MISMOS PARÁMETROS

SELECTIVIDAD: SELECCIONAR UNA VARIABLE - O UN CONJUNTO DE ELLAS - QUE DEPENDAN SÓLO DE UN PARÁMETRO

SENSIBILIDAD

$\frac{\Delta X_k}{\Delta \gamma_k}$ pequeño
 ideal para el P.I.
 grande
 bueno para el P.D.

SE PUEDEN ESTUDIAR VIA P.D.
P.D. \equiv LABORATORIO

NO OBSTANTE, EN LA PRACTICA PROFESIONAL
SE PUEDE, EN MUCHOS PROBLEMAS
ENCONTRAR COMBINACIONES DE LAS
VARIABLES: γ_k , $g_k(x)$

QUE PRACTICAMENTE DEPENDEN
SOLAMENTE DE UN PARÁMETRO
 x_k , $f_k(x)$.

"SELECTIVIDAD"

(AL MENOS EN CIERTAS REGIONES
DE SUS VALORES POSIBLES: ESPACIOS
 F Y G)

ESTO PERMITIRÁ UN DIAGNÓSTICO
RELATIVAMENTE CÓMODO DEL
VALOR DE ESTE PARÁMETRO,

3.3 - 3

Técnicas iterativas ; rz
perturbaciones

TECNICAS ITERATIVAS VIA PERTURBACIONES

Se trata de invertir el problema

$$g(y) = A(x, y) \otimes f(x)$$

ES DECIR, ENCONTRAR LA FUNCION

$f_k(x)$ QUE CORRESPONDE A UNA FUNCION

$g_k(y)$ DADA.

EN EL QUE SABEMOS RESOLVER EL P.D.

ES DECIR ENCONTRAR LA FUNCION $g_j(y)$

QUE CORRESPONDE A UNA FUNCION $f_j(x)$ DADA.

$$P.D. \quad A(x, y) \otimes f_j(x) = g_j(y)$$

PERO EN EL QUE, POR COMPLEJIDAD DE LA ESTRUCTURA MATEMATICA DEL OPERADOR $A(x, y)$, NO SABEMOS HACER LA INVERSION DIRECTA

Aquí volvemos a la idea de sustituir nuestro problema por otro similar, pero de fácil inversión, PERO: cuya solución: ~~APROXIMADA PARA NUESTRO PROBLEMA~~, pueda ser CORREGIDA para ser SOLUCION DE ESTE ULTIMO

ADMITAMOS QUE SABLEMOS ENCONTRAR
UN PROBLEMA ANALOGO FISICAMENTE
AL NUESTRO, PERO QUE TENIENDO MENOS
PRETENSIONES FISICAS (AUN CONSERVANDO
LAS FUNDAMENTALES) SEA MAS FACIL
DE TRATAR MATEMATICAMENTE.

SEA $A^*(x, y)$ UN OPERADOR
PROXIMO FISICA Y MATEMATICAMENTE
A NUESTRO OPERADOR INICIAL $A(x, y)$
PERO TAL QUE TENGA UNA INVERSION
RELATIVAMENTE INMEDIATA

es decir que puede encontrarse
sin muchas dificultades la funcion
 $f_k(x)$ que corresponde a cualquier
funcion dada $g_k(y)$ en la ecuacion

$$g_k(y) = A^*(x, y) \otimes f(x)$$

ENTONCES,

Partiendo de los datos $q(y)$
INVERTIMOS (más o menos pedantemente)

$$q(y) = A^*(x, y) \otimes f(x)$$

para obtener UNA SOLUCIÓN $f_0(x)$ EXACTA
ADVI Y APROXIMADA PARA
NUESTRO PROBLEMA GENERAL

A PROXIMEMOS AHORA LA ECUACION
DE PARTIDA EN LA FORMA

$$q(y) = A^*(x, y) \otimes f(x) + [A(x, y) - A^*(x, y)] \otimes f_0(x)$$

SE TRATA DE UNA ESPECIE DE
CORRECCION AL OPERADOR $A^*(x, y)$
PARA QUE SE APROXIME MAS AL
OPERADOR DADO $A(x, y)$, TENIENDO
EN CUENTA LA SOLUCION ANTERIOR

SE RA

$$q(y) - [A(x, y) - A^*(x, y)] \otimes f_0(x) = A^*(x, y) \otimes f(x)$$

POR CONSTRUCCION

$$A^*(x, y) \otimes f_0(x) = q(y)$$

Y COMO SABEMOS HACER EL PD
CON EL OPERADOR CORRECTO $A(x, y)$
PODEMOS CALCULAR $g_2(y)$:

$$A(x, y) \otimes f_0(x) = g_0(y)$$

CON LO CUAL LA ECUACIÓN APROXIMADA
A LA GENERAL DE PARTIDA

$$g^1(y) \equiv 2g(y) - g_0(y) = A^*(x, y) \otimes f(x)$$

QUE ES EXACTAMENTE LA ECUACION
CON EL OPERADOR APROXIMADO $A^*(x, y)$
FACIL DE INVERTIR

SÓLO QUE CON UNOS NUEVOS DATOS $g^1(y)$

RESOLVEMOS. INVERTIMOS (CUAL O MUY
FÁCILMENTE) PARA OBTENER UNA SOLUCION
 $f_1(x)$ EXACTA AQUI PERO APROXIMADA
PARA NUESTRO PROBLEMA GENERAL,
PERO PARA ESTE PROBLEMA DE
PARTIDA ES MAS CORRECTA QUE $f_0(x)$

APROXIMEMOS AHORA LA ECUACION DE
PARTIDA EN LA FORMA

$$g(y) = A^*(x, y) \otimes f(x) + [A(x, y) - A^*(x, y)] \otimes f_1(x)$$

A MEDIDA QUE $f_1(x)$ SE APROXIME
A LA FUNCION $f(x)$ REQUERIDA, ESTA
ECUACION APROXIMADA Y LA ECUACION
CORRECTA SERA LA MISMA

PERO

$$g_1(y) - [A(x, y) - \hat{A}^*(x, y)] \otimes f_1(x) = \hat{A}^*(x, y) \otimes f(x)$$

DONDE

$$\hat{A}^*(x, y) \otimes f_1(x) = g_1'(y) \equiv 2g_1(y) - g_0(y)$$

POD CONSTRUCCION

Y COMO SABEMOS HACER EL P.D. CON
EL OPERADOR CORRECTO $A(x, y)$ CALCULA-
REMOS (MAS O MENOS FACILMENTE) $g_1(y)$

$$A(x, y) \otimes f_1(x) = g_1(y)$$

~~CON LO CUAL LA ECUACION APROXIMADA
A LA GENERAL DE PARTIDA~~

$$g_2(y) \equiv 3g_1(y) - g_0(y) - g_1(y) = \hat{A}^*(x, y) \otimes f(x)$$

QUE ES EXACTAMENTE LA ECUACION CON
EL OPERADOR APROXIMADO $\hat{A}^*(x, y)$

FACIL DE INVERTIR,

SOLO QUE CON UNOS NUEVOS DATOS $g_2(y)$

RESOLVEMOS: INVERTIMOS (MÁS O MENOS
fácilmente) para obtener UNA SOLUCIÓN
 $f_2(x)$ EXACTA AQUÍ, PERO APROXIMADA
PARA NUESTRO PROBLEMA DE PARTIDA
PERO PARA ESTE PROBLEMA DE PARTIDA
ES MÁS CORRECTA QUE $f_1(x)$

Y ASÍ SUCCESIVAMENTE

EL MÉTODO CONSISTE EN CONSTRUIR
UN OPERADOR APROXIMADO $A^*(x, y)$
AL NATURAL $A(x, y)$ PERO
SOLAMENTE CUANDO ACTUAN SOBRE
FUNCIONES PRÓXIMAS A LA SOLUCIÓN
(HIPOTÉTICA) DEL PROBLEMA $f(x)$,
QUE CORRESPONDE A LOS DATOS $Q_j(x_j)$

LA CORRECCIÓN DEL OPERADOR
ES ADITIVA: PARA LA APROXIMACIÓN
DE ORDEN $k+1$

$$A(x, y) \otimes f(x) \approx A^*(x, y) \otimes f(x) \\ + [A(x, y) - A^*(x, y)] \otimes f_k(x)$$

EN CIERTO MODO EQUIVALE A
MODIFICAR LOS DATOS OBSERVADOS
PARA QUE

LA SOLUCION (QUE SABEMOS OBTENER)
DEL OPERADOR APROXIMADO CON
LOS DATOS MODIFICADOS

SEA LA MISMA

QUE LA SOLUCION (QUE NO SABEMOS
OBTENER) DEL OPERADOR DE PARTIDA
CON LOS DATOS NATURALES

3.8.4

SISTEMAS NO LINEALES:

OPTIMIZACIÓN ITERATIVA

SE TRATA DE UN CASO PARTICULAR
DE SISTEMAS CUYO P.D. PUEDE NO
SER EXCESIVAMENTE COMPLICADO

PERO LA INVERSION DIRECTA
ES IMPOSIBLE

SE PUEDEN DESARROLLAR TECNICAS
ITERATIVAS

PARAMETROS $\{a_k\}$

DIFERENTES REALIZACIONES: MEDIDAS

QUE REPRESENTAREMOS CON DIFERENTES X_i

- DIFERENTES PUNTOS DEL ESPACIO X_i
- DIFERENTES MOMENTOS X_i
- DIFERENTES TEMPERATURAS X_i - O
CUALQUIERA OTRA PROPIEDAD

PERO SIEMPRE CON LOS MISMOS
PARAMETROS $\{a_k\}$

MODELO MATEMATICO

$$y = f(x; \{a_k\})$$

DISPONEMOS DE LAS MEDIDAS

$$\underline{y_i = f(x_i; \{a_k\})}$$

LA INVERSIÓN DIRECTA DE ESTE
SISTEMA

$$y_i \equiv y(x_i; \{Q_r\})$$

PARA OBTENER

EL CONJUNTO DE PARÁMETROS $\{Q_r\}$

A PARTIR DE UN CONJUNTO DE
MEDIDAS $\{y_i\}$

NO ES POSIBLE, DEBIDO A LA
NO LINEALIDAD DEL SISTEMA

Nonlinear Models

We now consider fitting when the model depends *nonlinearly* on the set of M unknown parameters $a_k, k = 1, 2, \dots, M$. We use the same approach as in previous sections, namely to define a χ^2 merit function and determine best-fit parameters by its minimization. With nonlinear dependences, however, the minimization must proceed iteratively. Given trial values for the parameters, we develop a procedure that improves the trial solution. The procedure is then repeated until χ^2 stops (or effectively stops) decreasing.

How is this problem different from the general nonlinear function minimization problem already dealt with in Chapter 10? Superficially, not at all: Sufficiently close to the minimum, we expect the χ^2 function to be well approximated by a quadratic form, which we can write as

$$\chi^2(\mathbf{a}) \approx \gamma - \mathbf{d} \cdot \mathbf{a} + \frac{1}{2} \mathbf{a} \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{a}$$

where \mathbf{d} is an M -vector and \mathbf{D} is an $M \times M$ matrix.

The model to be fitted is

$$y = y(x; \mathbf{a})$$

and the χ^2 merit function is

$$\chi^2(\mathbf{a}) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y_i - y(x_i; \mathbf{a})}{\sigma_i} \right]^2$$

EN REALIDAD $\mathbf{a} \equiv \bar{\mathbf{a}}$ NO ES UN VECTOR: SE TRATA DEL CONJUNTO DE PARÁMETROS $\{a_k\}$

$$y_i = y(x_i; \theta_k, \gamma)$$

NO ES UN SISTEMA LINEAL:

DESARROLLEMOS PARABOLICAMENTE

$$x^2(\theta_k, \gamma)$$

AL REDEDOR DE UNOS VALORES
DE TRABAJO (TRIAL)

$$\theta_k^0, \gamma$$

PRECEDENTES DE ~~UNA~~ ETAPA
ITERATIVA ANTERIOR

The gradient of χ^2 with respect to the parameters \mathbf{a} , which will be zero at the χ^2 minimum, has components

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} = -2 \sum_{i=1}^N \frac{[y_i - y(x_i; \mathbf{a})]}{\sigma_i^2} \frac{\partial y(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_k} \quad k = 1, 2, \dots, M$$

Taking an additional partial derivative gives

$$\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_k \partial a_l} = 2 \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \left[\frac{\partial y(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_k} \frac{\partial y(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_l} - [y_i - y(x_i; \mathbf{a})] \frac{\partial^2 y(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_l \partial a_k} \right]$$

LA FUNCION

$$y(x; \mathbf{a}, b)$$

ASI COMO LAS ANTERIORES
DERIVADAS SUYAS

SE PUEDEN CALCULAR FACILMENTE
PARA LOS VALORES DE LOS
PARÁMETROS \mathbf{a}^0 Y CORRESPONDIENTES
A LA SOLUCIÓN DE TRABAJO.

EN PARTICULAR:

$$\chi^2(\mathbf{a}^0) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y_i - y(x_i, \mathbf{a}^0)}{\sigma_i} \right]^2$$

$$\chi^2(\{a_k\}) = \sum_{i=1}^N \left[\chi^2(\{a_{ik}^0\}) + \sum_k \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial a_{ik}} \right)_{a_{ik}^0} (a_{ik} - a_{ik}^0) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_k \sum_e \left(\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_{ik} \partial a_{ie}} \right)_{a_{ik}^0, a_{ie}^0} (a_{ik} - a_{ik}^0)(a_{ie} - a_{ie}^0) \right]$$

o bien

$$\chi^2(\{a_k\}) = \sum_{i=1}^N \chi^2(\{a_{ik}^0\}) + \sum_k \delta_k \sum_i \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial a_{ik}} \right)_{a_{ik}^0} \\ + \sum_k \delta_k \sum_e \sum_i \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_{ik} \partial a_{ie}} \right)_{a_{ik}^0, a_{ie}^0}$$

$$\delta_k \equiv (a_k - a_k^0)$$

$$\delta_e \equiv (a_e - a_e^0)$$

LOS COEFICIENTES SON FACILES
DE CALCULAR PARA CADA a_{ik}^0, a_{ie}^0

MINIMIZAMOS AQUÍ

$$\chi^2(\{a_k\}) =$$

$$\sum_i \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} \right)_{a_i^0} + 2 \sum_e \delta e = \sum_i \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_k \partial a_l} \right)_{a_i^0} \delta a_i$$

SISTEMA LINEAL

$$\sum_e \left[\sum_i \left(\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_k \partial a_l} \right)_{a_i^0} \right] \delta e = - \left[\sum_i \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} \right)_{a_i^0} \right]$$

DE DONDE SE DEDUCEN LAS δe

rewritten as the set of linear equations

This equation can be

$$\sum_{l=1}^M \alpha_{kl} \delta a_l = \beta_k$$

This set is solved for the increments δa_l that, added to the current approximation, give the next approximation. In the context of least-squares, the matrix $[\alpha]$, equal to one-half times the Hessian matrix, is usually called the *curvature matrix*.

Note that the components α_{kl} of the Hessian matrix (15.5.7) depend both on the first derivatives and on the second derivatives of the basis functions with respect to their parameters. Some treatments proceed to ignore the second derivative without comment. We will ignore it also, but only *after* a few comments.

Second derivatives occur because the gradient (15.5.6) already has a dependence on $\partial y / \partial a_k$, so the next derivative simply must contain terms involving $\partial^2 y / \partial a_l \partial a_k$. The second derivative term can be dismissed when it is zero (as in the linear case of equation 15.4.8), or small enough to be negligible when compared to the term involving the first derivative. It also has an additional possibility of being ignorably small in practice: The term multiplying the second derivative in equation (15.5.7) is $[y_i - y(x_i; \mathbf{a})]$. For a successful model, this term should just be the random measurement error of each point. This error can have either sign, and should in general be uncorrelated with the model. Therefore, the second derivative terms tend to cancel out when summed over i .

Inclusion of the second-derivative term can in fact be destabilizing if the model fits badly or is contaminated by outlier points that are unlikely to be offset by compensating points of opposite sign. From this point on, we will always use as the definition of α_{kl} the formula

$$\alpha_{kl} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \left[\frac{\partial y(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_k} \frac{\partial y(x_i; \mathbf{a})}{\partial a_l} \right] \quad (15.5.11)$$

This expression more closely resembles its linear cousin (15.4.8). You should understand that minor (or even major) fiddling with $[\alpha]$ has no effect at all on what final set of parameters \mathbf{a} is reached, but affects only the iterative route that is taken in getting there. The condition at the χ^2 minimum, that $\beta_k = 0$ for all k , is independent of how $[\alpha]$ is defined.

Levenberg-Marquardt Method

Marquardt [1] has put forth an elegant method, related to an earlier suggestion of Levenberg, for varying smoothly between the extremes of the inverse-Hessian method (15.5.9) and the steepest descent method (15.5.10). The latter method is used far from the minimum, switching continuously to the former as the minimum is approached. This *Levenberg-Marquardt method* (also called *Marquardt method*) works very well in practice and has become the standard of nonlinear least-squares routines.

The method is based on two elementary, but important, insights. Consider the “constant” in equation (15.5.10). What should it be, even in order of magnitude? What sets its scale? There is no information about the answer in the gradient. That tells only the slope, not how far that slope extends. Marquardt’s first insight is that the components of the Hessian matrix, even if they are not usable in any precise fashion, give *some* information about the order-of-magnitude scale of the problem.

The quantity χ^2 is nondimensional, i.e., is a pure number; this is evident from its definition (15.5.5). On the other hand, β_k has the dimensions of $1/a_k$, which may well be dimensional, i.e., have units like cm^{-1} , or kilowatt-hours, or whatever. (In fact, each component of β_k can have different dimensions!) The constant of proportionality between β_k and δa_k must therefore have the dimensions of a_k^2 . Scan the components of $[\alpha]$ and you see that there is only one obvious quantity with these dimensions, and that is $1/\alpha_{kk}$, the reciprocal of the diagonal element. So that must set the scale of the constant. But that scale might itself be too big. So let’s divide the constant by some (nondimensional) fudge factor λ , with the possibility of setting $\lambda \gg 1$ to cut down the step. In other words, replace equation (15.5.10) by

$$\delta a_l = \frac{1}{\lambda \alpha_{ll}} \beta_l \quad \text{or} \quad \lambda \alpha_{ll} \delta a_l = \beta_l \quad (15.5.12)$$

It is necessary that α_{ll} be positive, but this is guaranteed by definition (15.5.11) — another reason for adopting that equation.

Marquardt’s second insight is that equations (15.5.12) and (15.5.9) can be combined if we define a new matrix α' by the following prescription

$$\begin{aligned} \alpha'_{jj} &\equiv \alpha_{jj}(1 + \lambda) \\ \alpha'_{jk} &\equiv \alpha_{jk} \quad (j \neq k) \end{aligned} \quad (15.5.13)$$

and then replace both (15.5.12) and (15.5.9) by

$$\sum_{l=1}^M \alpha'_{kl} \delta a_l = \beta_k \quad (15.5.14)$$

When λ is very large, the matrix α' is forced into being *diagonally dominant*, so equation (15.5.14) goes over to be identical to (15.5.12). On the other hand, as λ approaches zero, equation (15.5.14) goes over to (15.5.9).

Given an initial guess for the set of fitted parameters \mathbf{a} , the recommended Marquardt recipe is as follows:

- Compute $\chi^2(\mathbf{a})$.
- Pick a modest value for λ , say $\lambda = 0.001$.
- (†) Solve the linear equations (15.5.14) for $\delta\mathbf{a}$ and evaluate $\chi^2(\mathbf{a} + \delta\mathbf{a})$.
- If $\chi^2(\mathbf{a} + \delta\mathbf{a}) \geq \chi^2(\mathbf{a})$, *increase* λ by a factor of 10 (or any other substantial factor) and go back to (†).
- If $\chi^2(\mathbf{a} + \delta\mathbf{a}) < \chi^2(\mathbf{a})$, *decrease* λ by a factor of 10, update the trial solution $\mathbf{a} \leftarrow \mathbf{a} + \delta\mathbf{a}$, and go back to (†).

Also necessary is a condition for stopping. Iterating to convergence (to machine accuracy or to the roundoff limit) is generally wasteful and unnecessary since the minimum is at best only a statistical estimate of the parameters \mathbf{a} . As we will see in §15.6, a change in the parameters that changes χ^2 by an amount $\ll 1$ is *never* statistically meaningful.

Furthermore, it is not uncommon to find the parameters wandering around near the minimum in a flat valley of complicated topology. The reason is that Marquardt's method generalizes the method of normal equations (§15.4), hence has the same problem as that method with regard to near-degeneracy of the minimum. Outright failure by a zero pivot is possible, but unlikely. More often, a small pivot will generate a large correction which is then rejected, the value of λ being then increased. For sufficiently large λ the matrix $[\alpha']$ is positive definite and can have no small pivots. Thus the method does tend to stay away from zero pivots, but at the cost of a tendency to wander around doing steepest descent in very un-steep degenerate valleys.

These considerations suggest that, in practice, one might as well stop iterating on the first or second occasion that χ^2 decreases by a negligible amount, say either less than 0.01 absolutely or (in case roundoff prevents that being reached) some fractional amount like 10^{-3} . Don't stop after a step where χ^2 *increases*: That only shows that λ has not yet adjusted itself optimally.

Once the acceptable minimum has been found, one wants to set $\lambda = 0$ and compute the matrix

$$[C] \equiv [\alpha]^{-1} \quad (15.5.15)$$

which, as before, is the estimated covariance matrix of the standard errors in the fitted parameters \mathbf{a} (see next section).

More Advanced Methods for Nonlinear Least Squares

The Levenberg-Marquardt algorithm can be implemented as a model-trust region method for minimization (see §9.7 and ref. [2]) applied to the special case of a least squares function. A code of this kind due to Moré [3] can be found in MINPACK [4]. Another algorithm for nonlinear least-squares keeps the second-derivative term we dropped in the Levenberg-Marquardt method whenever it would be better to do so. These methods are called “full Newton-type” methods and are reputed to be more robust than Levenberg-Marquardt, but more complex. One implementation is the code NL2SOL [5].

CITED REFERENCES AND FURTHER READING:

- Bevington, P.R. 1969, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences* (New York: McGraw-Hill), Chapter 11.
- Marquardt, D.W. 1963, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, vol. 11, pp. 431–441. [1]
- Jacobs, D.A.H. (ed.) 1977, *The State of the Art in Numerical Analysis* (London: Academic Press), Chapter III.2 (by J.E. Dennis).
- Dennis, J.E., and Schnabel, R.B. 1983, *Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall). [2]
- Moré, J.J. 1977, in *Numerical Analysis*, Lecture Notes in Mathematics, vol. 630, G.A. Watson, ed. (Berlin: Springer-Verlag), pp. 105–116. [3]
- Moré, J.J., Garbow, B.S., and Hillstom, K.E. 1980, *User Guide for MINPACK-1*, Argonne National Laboratory Report ANL-80-74. [4]
- Dennis, J.E., Gay, D.M, and Welsch, R.E. 1981, *ACM Transactions on Mathematical Software*, vol. 7, pp. 348–368; *op. cit.*, pp. 369–383. [5].

Stable Iterative Methods for the Inversion of Geophysical Data

D. L. B. Jupp and K. Vozoff

(Received 1974 September 26)

Summary

Interpretation of earth electrical measurements can often be assisted by inversion, which is a non-linear model-fitting problem in these cases. Iterative methods are normally used, and the solution is defined by 'best fit' in the sense of generalized least-squares.

The inverse problems we describe are ill-posed. That is, small changes in the data can lead to large changes in both the solution and in the iterative process that finds the solution. Through an analysis of the problem, based on local linearization, we define a class of methods that stabilize the iteration, and provide a robust solution. These methods are seen as generalizations of the well-known Singular Value Truncation and Marquardt Methods of iterative inversion.

Here, and in a companion paper, we give examples illustrating the successful application of the method to ill-posed problems relating to the resistivity of the Earth.

1. Introduction

In this paper we present an analysis of the solution to a number of geophysical inverse problems. We also provide a reference for the companion paper (Joint Inversion of Geophysical Data, Vozoff & Jupp 1975), where the results are applied to some specific examples.

Solutions to geophysical inverse problems are generally non-unique (Backus & Gilbert 1967, 1968, 1970), and it is usual to reduce the non-uniqueness by restricting the complexity of the Earth models. The mathematical problem that arises is commonly ill-posed (unstable) in the sense that small changes in the data lead to large changes in the solution. The solution methods must take careful account of this inherent problem.

In the companion paper, and the example given in Section 3 we have data in the form of apparent resistivity measurements for both magnetotelluric (MT), and Direct Current (DC) survey methods. The restricted class of earth models consists of horizontally layered, isotropic media, with constant resistivity in each layer. The simplified inverse problem is, in this case, to find the layer resistivities and thicknesses that best fit the observed data.

The analysis of the problem is not, however, restricted to layered models, but applies to any geophysical inverse problem in which the partial derivatives of the (predicted) data with respect to the (unknown) model parameters can be calculated.

Interpretation of Inaccurate, Insufficient and Inconsistent Data

D. D. Jackson

(Received 1972 January 27)*

Summary

Many problems in physical science involve the estimation of a number of unknown parameters which bear a linear or quasi-linear relationship to a set of experimental data. The data may be contaminated by random errors, insufficient to determine the unknowns, redundant, or all of the above. This paper presents a method of optimizing the conclusions from such a data set. The problem is formulated as an ill-posed matrix equation, and general criteria are established for constructing an 'inverse' matrix. The 'solution' to the problem is defined in terms of a set of generalized eigenvectors of the matrix, and may be chosen to optimize the resolution provided by the data, the expected error in the solution, the fit to the data, the proximity of the solution to an arbitrary function, or any combination of the above. The classical 'least-squares' solution is discussed as a special case.

1. Formulation of the problem

Suppose that we wish to determine a set of unknown parameters x_j , $j = 1, \dots, m$ from a set of data y_i , $i = 1, \dots, n$ where y_i are each functionally related to the x_j in a known way. That is

$$\begin{aligned} y_1 &= A_1(x_1, \dots, x_m) \\ &\vdots \\ y_n &= A_n(x_1, \dots, x_m). \end{aligned}$$

Such a set of equations may arise by approximation of a continuous relationship $y(\eta) = A[\eta, x(\xi)]$ by a discrete representation, letting $y_i = y(\eta_i)$, $x_j = x(\xi_j)$; or by expansion of the continuous functions $y(\eta)$ and $x(\xi)$ in terms of appropriate sets of orthogonal functions, in which case y_i and x_j represent expansion coefficients (See Table 1 for notation conventions.)

If the functions $A_i(x_j)$ are linear in x_j , we may write the problem in matrix form

$$y_i = A_{ij} x_j \quad (1a)$$

or

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax}. \quad (1b)$$

* Received in original form 1971 October 29.

Confidence Limits on Estimated Model Parameters

Several times already in this chapter we have made statements about the standard errors, or uncertainties, in a set of M estimated parameters \mathbf{a} . We have given some formulas for computing standard deviations or variances of individual parameters (equations 15.2.9, 15.4.15, 15.4.19), as well as some formulas for covariances between pairs of parameters (equation 15.2.10; remark following equation 15.4.15; equation 15.4.20; equation 15.5.15).

In this section, we want to be more explicit regarding the precise meaning of these quantitative uncertainties, and to give further information about how quantitative confidence limits on fitted parameters can be estimated. The subject can get somewhat technical, and even somewhat confusing, so we will try to make precise statements, even when they must be offered without proof.

Figure 15.6.1 shows the conceptual scheme of an experiment that “measures” a set of parameters. There is some underlying true set of parameters \mathbf{a}_{true} that are known to Mother Nature but hidden from the experimenter. These true parameters are statistically realized, along with random measurement errors, as a measured data set, which we will symbolize as $\mathcal{D}_{(0)}$. The data set $\mathcal{D}_{(0)}$ is known to the experimenter. He or she fits the data to a model by χ^2 minimization or some other technique, and obtains measured, i.e., fitted, values for the parameters, which we here denote $\mathbf{a}_{(0)}$.

Because measurement errors have a random component, $\mathcal{D}_{(0)}$ is not a unique realization of the true parameters \mathbf{a}_{true} . Rather, there are infinitely many other realizations of the true parameters as “hypothetical data sets” each of which *could* have been the one measured, but happened not to be. Let us symbolize these by $\mathcal{D}_{(1)}, \mathcal{D}_{(2)}, \dots$. Each one, had it been realized, would have given a slightly different set of fitted parameters, $\mathbf{a}_{(1)}, \mathbf{a}_{(2)}, \dots$, respectively. These parameter sets $\mathbf{a}_{(i)}$ therefore occur with some probability distribution in the M -dimensional space of all possible parameter sets \mathbf{a} . The actual measured set $\mathbf{a}_{(0)}$ is one member drawn from this distribution.

Even more interesting than the probability distribution of $\mathbf{a}_{(i)}$ would be the distribution of the difference $\mathbf{a}_{(i)} - \mathbf{a}_{\text{true}}$. This distribution differs from the former one by a translation that puts Mother Nature’s true value at the origin. If we knew *this* distribution, we would know everything that there is to know about the quantitative uncertainties in our experimental measurement $\mathbf{a}_{(0)}$.

So the name of the game is to find some way of estimating or approximating the probability distribution of $\mathbf{a}_{(i)} - \mathbf{a}_{\text{true}}$ without knowing \mathbf{a}_{true} and without having available to us an infinite universe of hypothetical data sets.

Monte Carlo Simulation of Synthetic Data Sets

Although the measured parameter set $\mathbf{a}_{(0)}$ is not the true one, let us consider a fictitious world in which it *was* the true one. Since we hope that our measured parameters are not *too* wrong, we hope that that fictitious world is not too different from the actual world with parameters \mathbf{a}_{true} . In particular, let us hope — no, let us *assume* — that the shape of the probability distribution $\mathbf{a}_{(i)} - \mathbf{a}_{(0)}$ in the fictitious world is the same, or very nearly the same, as the shape of the probability distribution

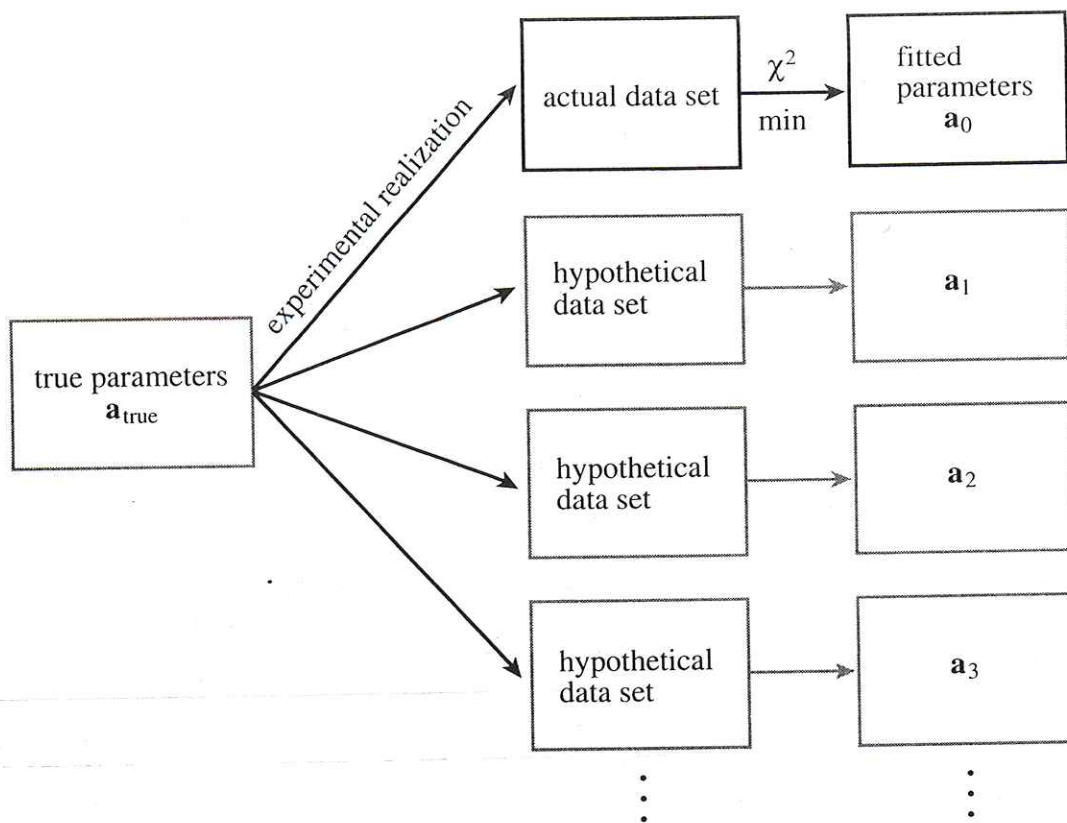


Figure 15.6.1. A statistical universe of data sets from an underlying model. True parameters \mathbf{a}_{true} are realized in a data set, from which fitted (observed) parameters \mathbf{a}_0 are obtained. If the experiment were repeated many times, new data sets and new values of the fitted parameters would be obtained.

$\mathbf{a}_{(i)} - \mathbf{a}_{\text{true}}$ in the real world. Notice that we are not assuming that $\mathbf{a}_{(0)}$ and \mathbf{a}_{true} are equal; they are certainly not. We are only assuming that the way in which random errors enter the experiment and data analysis does not vary rapidly as a function of \mathbf{a}_{true} , so that $\mathbf{a}_{(0)}$ can serve as a reasonable surrogate.

Now, often, the distribution of $\mathbf{a}_{(i)} - \mathbf{a}_{(0)}$ in the fictitious world is within our power to calculate (see Figure 15.6.2). If we know something about the process that generated our data, given an assumed set of parameters $\mathbf{a}_{(0)}$, then we can usually figure out how to *simulate* our own sets of “synthetic” realizations of these parameters as “synthetic data sets.” The procedure is to draw random numbers from appropriate distributions (cf. §7.2–§7.3) so as to mimic our best understanding of the underlying process and measurement errors in our apparatus. With such random draws, we construct data sets with exactly the same numbers of measured points, and precisely the same values of all control (independent) variables, as our actual data set $\mathcal{D}_{(0)}$. Let us call these simulated data sets $\mathcal{D}_{(1)}^S, \mathcal{D}_{(2)}^S, \dots$. By construction these are supposed to have exactly the same statistical relationship to $\mathbf{a}_{(0)}$ as the $\mathcal{D}_{(i)}$ ’s have to \mathbf{a}_{true} . (For the case where you don’t know enough about what you are measuring to do a credible job of simulating it, see below.)

Next, for each $\mathcal{D}_{(j)}^S$, perform exactly the same procedure for estimation of parameters, e.g., χ^2 minimization, as was performed on the actual data to get the parameters $\mathbf{a}_{(0)}$, giving simulated measured parameters $\mathbf{a}_{(1)}^S, \mathbf{a}_{(2)}^S, \dots$. Each simulated measured parameter set yields a point $\mathbf{a}_{(i)}^S - \mathbf{a}_{(0)}$. Simulate enough data sets and enough derived simulated measured parameters, and you map out the desired probability distribution in M dimensions.

In fact, the ability to do *Monte Carlo simulations* in this fashion has revo-

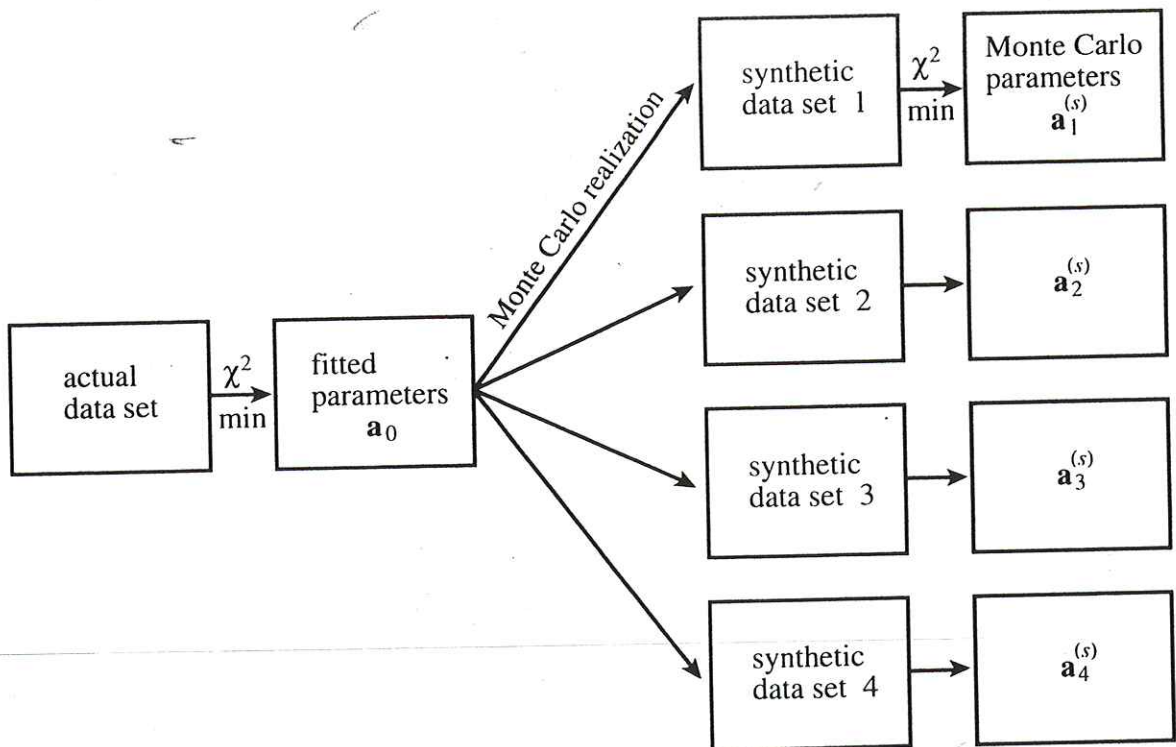


Figure 15.6.2. Monte Carlo simulation of an experiment. The fitted parameters from an actual experiment are used as surrogates for the true parameters. Computer-generated random numbers are used to simulate many synthetic data sets. Each of these is analyzed to obtain its fitted parameters. The distribution of these fitted parameters around the (known) surrogate true parameters is thus studied.

lutionized many fields of modern experimental science. Not only is one able to characterize the errors of parameter estimation in a very precise way; one can also try out on the computer different methods of parameter estimation, or different data reduction techniques, and seek to minimize the uncertainty of the result according to any desired criteria. Offered the choice between mastery of a five-foot shelf of analytical statistics books and middling ability at performing statistical Monte Carlo simulations, we would surely choose to have the latter skill.

9.3.5

TECNICAS ITERATIVAS

ESPECÍFICAS

(DE PROBLEMAS ESPECÍFICOS)

TECNICAS ITERATIVAS PARA PROBLEMAS ESPECIFICOS

LA FORMA FISICA DE CIERTOS
SISTEMAS SUGIERE TRATAMIENTOS
ESPECIFICOS QUE SON MUY UTILES
PARA RESOLVER LOS CORRESPONDIENTES
PROBLEMAS INVERSIOS

En el seno de la atmósfera estelar la temperatura de un elemento de volumen del gas resulta del balance entre la energía absorbida y la energía emitida por él. En equilibrio radiativo vale energía correspondiente a la potencia de radiación, y, de principio podemos poner la energía absorbida E_a .

La condición de equilibrio se escribirá matemáticamente como

$$\int_0^\infty d\nu a_\nu B_\nu(T) = E_a$$

donde el primer miembro representa la energía emitida por el elemento del gas a todas las frecuencias:

a_ν es el coeficiente de absorción (que puede depender de la temperatura)
 $B_\nu(T)$ es la función de Planck.

En ordenes por simplicidad a_ν considero independiente de T

El DATO considerado, es la energía absorbida E_a

el primer miembro represente
un operador RELATIVAMENTE SIMPLE
QUE ACTUA SOBRE EL ESCALAR
TEMPERATURA T

De la "inversión" de esta "ecuación
operacional" deberemos obtener el valor
de T

ES IMPOSIBLE CONCEBIR UNA
INVERSION DIRECTA: NO SERA' PUES
UN P.T. ESTRICTAMENTE EXPLICITO

PERO ES CONCEBIBLE EL DISEÑAR
UNA ESTRATEGIA ITERATIVA QUE
PERMITIRA DETERMINISTICAMENTE
EL PROCESO DE INVERSION

En realidad hay varias, y, bajo
el punto de vista profesional: ASTROFISICO,
mejor le pare el 4 por algunos de
ellas.

PROBLEMA

DATOS : E_a : energía absorbida.

a_ν coeficiente de absorción

CALCULAR LA TEMPERATURA T de

$$\int_0^\infty d\nu a_\nu B_\nu(T) = E_a$$

$B_\nu(T)$ función de Planck

$$\int_0^\infty B_\nu(T) d\nu = B(T) = \frac{\sigma}{\pi} T^4 = 1.80469 \cdot 10^{-5} T^4$$

ESTRATEGIAS ITERATIVAS

- (A) LINEARIZACIÓN DE $B_\nu(T)$
ALREDEDOR DE UNA TEMPERATURA T_0
CONOCIDA (supuestamente próxima
de lo que queremos obtener)

T_0 puede ser la solución obtenida
en la etapa ~~del~~ proceso iterativo
anterior a lo que estamos trabajando.

$$B_\nu(T) \approx B_\nu(T_0) + \left(\frac{dB_\nu(T)}{dT} \right)_{T_0} (T - T_0)$$

$$\left(\frac{dB_\nu(T)}{dT} \right) = B_\nu(T) \frac{e^{-\frac{h\nu}{kT}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}} \frac{h\nu}{kT} \frac{1}{T}$$

Entonces

$$E_c = \int_0^{\infty} d\nu a_{\nu} B_{\nu}(T) \approx \int_0^{\infty} d\nu a_{\nu} B_{\nu}(T_0) + \left[\int_0^{\infty} d\nu a_{\nu} \left(\frac{dB_{\nu}(T)}{dT} \right) \right] (T - T_0)$$

luego

$$T = T_0 + \frac{E_c - \int_0^{\infty} d\nu a_{\nu} B_{\nu}(T_0)}{\int_0^{\infty} d\nu a_{\nu} \left(\frac{dB_{\nu}(T)}{dT} \right)_{T_0}}$$

Se calcula así un nuevo valor de la temperatura T

Se repite el proceso tantas veces como sea necesario

MUCHOS RIESGOS:

En realidad se trata de una infinidad de funciones de T , según el valor del parámetro ν : frecuencia

$B_{\nu}(T)$ ES UNA FUNCIÓN DE DISTRIBUCIÓN

Para unos valores del parámetro ν la linealización de $B_{\nu}(T)$ alrededor de T_0 puede ser bastante correcta. Para otros valores de ν SERA CATASTRÓFICA

(B) FACTORIZACION DE $B_v(\tau)$

$$\beta_{T_0}(\nu) \equiv \frac{B_v(\tau_0)}{B(\tau_0)}$$

$$B(\tau) = \int_0^\infty d\nu c_\nu B_v(\tau) \approx \frac{\sigma}{\pi} \tau^4$$

SE UTILIZA COMO

$$B_v(\tau) = \beta_{T_0}(\nu) B(\tau)$$

$$B(\tau) = \frac{\sigma}{\pi} \tau^4$$

ENTONCES

$$E_a = \int_0^\infty d\nu c_\nu B_v(\tau) = B(\tau) \int_0^\infty d\nu c_\nu \beta_{T_0}(\nu)$$

$$B(\tau) = \frac{\sigma}{\pi} \tau^4 = \frac{E_a}{\int_0^\infty d\nu c_\nu \beta_{T_0}(\nu)}$$

MUCHO MAS ESTABLE

(C) RESOLUCION DIRECTA DE LA ECUACION TRANSCENDENTE

$$\int_0^\infty d\nu c_\nu B_v(\tau) = E_a$$

Puede ser, aunque un poco pesada, la mejor solución para muchos casos y PROBLEMAS NUMERICOS

HABRA QUE ACOSTUMBRARSE A ELLO