REVISTA INVESTIGACIÓN OPERACIONAL VOL., 32 , NO. 1, 67-89, 2011

Novedades de software/New softwares

UNA PRESENTACION DE LOS MINIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS, Y EN PARTICULAR, PARA FUNCIONES VECTORIALES

Jorge Lemagne Pérez[1]
Departamento de Matemática Aplicada Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana

ABSTRACT
In this communication, a critical bibliographical survey on discrete least squares (LS) presentation is firstly made, and especially of data fitting (DF).
Afterwards, to help to overcome part of the limitations and deficiencies that were shown in the bibliography, a formal presentation of generalized least squares (GLS, in general non linear by default) is made, and very especially of DF for vector valued functions (VVF); the corresponding non linear system of equations, extension of the well known normal equations, is derived. From there, some particular cases are obtained, for example, when the function is real valued, and when the approximation is linear. This second example is just linear generalized least squares (LGLS).

KEY WORDS: Data fitting, least squares, multivariate methods, normal equations, Generalized least squares

MSC: 65F30

RESUMEN
En esta comunicación se hace, primeramente, una revisión crítica de cómo se presenta el tema de mínimos cuadrados (MC, se sobrentiende discretos) en la bibliografía existente, y en particular, del ajuste de datos (AD).
Posteriormente, para contribuir a superar parte de las limitaciones y deficiencias señaladas en la revisión bibliográfica, se hace una exposición formal del problema de mínimos cuadrados generalizados (MCG, se sobrentiende no lineales en general), y muy en especial del AD para funciones vectoriales (FV); se deduce el sistema no lineal de ecuaciones correspondiente, extensión del conocido sistema de ecuaciones normales. A partir de ahí se deducen algunos casos particulares, entre ellos, cuando la función toma valores reales, y cuando la función de aproximación es lineal, o sea mínimos cuadrados generalizados lineales (MCGL).

1. INTRODUCCION. UNA REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA CRÍTICA SOBRE MÍNIMOS CUADRADOS

Por su importancia, los MC son tratados con gran frecuencia en numerosas publicaciones científicas y técnicas. Es necesario señalar que el problema de MC es conocido bajo diferentes nombres en varias ramas; por ejemplo, en Estadística se le llama análisis de regresión, y en Ingeniería, estimación de parámetros, filtraje o identificación de procesos.

De acuerdo con los objetivos de la presente investigación, resulta conveniente hacer – en primer lugar – una revisión crítica de diferentes presentaciones de este tema, y específicamente sobre AD. Dentro de la bibliografía existente, se consultaron no menos de 140 publicaciones (vea 9).

Primeramente nos referiremos al problema de AD mediante MCP, después se aborda MCG para funciones que toman valores escalares, y posteriormente MCG para FV, culminando de esta manera con el caso general en que se quieran aproximar funciones

$$f:\Re^p \to \Re^q,\; p \ge 1,\; q \ge 1. \tag{1.1}$$

A partir de toda esta panorámica se destacan las limitaciones de los enfoques en las publicaciones, incluyendo un breve ejemplo práctico para resaltar dichas insuficiencias.

[1] lemagne@matcom.uh.cu

El software existente sobre MCG será analizado en una publicación posterior.

1.1.Ajuste de datos mediante mínimos cuadrados ponderados

Aquí podemos suponer, sin pérdida de generalidad, que $q = 1$.

En particular, el caso lineal es clásico dentro del Análisis Numérico, no presenta dificultades (desde el punto de vista teórico), y existen programas para computadoras que lo resuelven. Es abundante la bibliografía donde el problema de MC se trata a lo sumo con ese enfoque, pero tomando $p = 1$; véase por ejemplo las obras de Berezin [1971], Gautschi [1997], Gill et al [1990], González [1983], Guerra et al [1987], Isaacson y Keller [1971], Kincaid et al [1995], Ralston [1965], Sastre [1988] y Volkov [1990]; en la inmensa mayoría de los casos se considera la función de peso como la constante 1, lo que lo convierte en un problema de mínimos cuadrados ordinarios (MCO).

Específicamente González y Guerra sólo consideran ajustes mediante rectas, e Isaacson y Keller mediante polinomios y polinomios trigonométricos.

Otros casos más generales son menos estudiados:

1. El caso no lineal no aparece tratado con tanta frecuencia en la bibliografía:
Aquí incluiremos las publicaciones de Tellinghuisen [2005] y Rufino et al [2005].
Un clásico como Forsythe et al [1972] hace una breve incursión cuando $p = 1$ y señala que se limitará a la aproximación de funciones de una variable real, ya que la teoría de la aproximación de funciones de varias variables no está bien desarrollada. Carleton parte de que $p = 1$. Se considera fundamentalmente el caso lineal, pues el no lineal apenas se estudia. Koroliuk [1981] se limita a formular el problema. Es interesante señalar que Bolshakov [1989] en caso necesario linealiza el problema mediante serie de Taylor. Raíces [1986] considera de manera restringida el orden de la aproximación, aunque posteriormente sí hace el desarrollo general para deducir el sistema no lineal de ecuaciones que hay que resolver. El libro de Motulski y Christopoulos [2003] está orientado a los investigadores y es muy práctico; la regresión múltiple sólo la trata ligeramente. En Mahata [2003] se exploran propiedades estadísticas asintóticas de los estimados obtenidos mediante mínimos cuadrados no lineales separables.

2. El caso lineal $p \geq 1$, naturalmente aparece más tratado, pero sin la suficiente generalidad y sistematización:
Forsythe et al casi sólo menciona la regresión múltiple y no profundiza en ella. En Linares [1986] y Suárez [1988] aparecen algunos casos de aproximación lineal multivariada, pero esto no se enfoca deductivamente a partir de una aproximación lineal general (con p variables independientes). Cué, Castell, [1987], Cué et al [1985] aunque consideran funciones de regresión más generales que los dos autores anteriores, tampoco las enfocan como casos particulares de aproximación lineal general.
En Tamayo [1984] sí aparece un análisis bastante general de este caso, pero no se dice explícitamente que se trabaja con funciones de $\Re^p$ en $\Re$, ni se expresa la matriz del sistema de ecuaciones normales en términos de los productos escalares generalizados a este tipo de funciones. Tampoco se estudian las propiedades de dicho sistema de ecuaciones lineales. Keller [2002] y Stanford [2000] tratan el caso particular de MCO, a partir directamente de los elementos de la matriz del sistema sobredeterminado, y por tanto no necesitan tomar en cuenta a p. Hager [1988], Koroliuk [1981], Lawson [1995] y Wilkinson [1971] también consideran MCO, pero sin hacer referencia explícita alguna a función empírica. Entonces, como primera conclusión, podemos afirmar que la mayor parte de la bibliografía sobre el tema aborda MCO o MCP, pero inclusive dentro de cada variante, no se hace un análisis lo suficientemente general. La abundancia de información sobre esos tópicos específicamente, se justifica en parte por el hecho que son los más sencillos y donde los métodos computacionales son más eficientes.

1.2. Ajuste de datos mediante mínimos cuadrados generalizados

Según Schwetlick [1991], “la estimación no lineal de parámetros es tanto interesante matemáticamente como útil en la práctica, y muchos resultados nuevos pueden esperarse en el futuro.”

En CAC-2002 se dice que “Aunque la incertidumbre en las mediciones es parte esencial de las mediciones químicas, la mayoría de los métodos multivariados de calibración ignoran este factor importante, al suponer implícitamente error uniforme no correlacionado o intentar acomodar el comportamiento del error durante el pre-procesamiento rutinario.”

Smith [1993] afirma:

“…, existen formulaciones de este método (mínimos cuadrados) más avanzadas y menos frecuentemente consideradas que merecen tomarse en cuenta. Estas ofrecen posibilidades para la manipulación y utilización de datos, que en general no son apreciadas adecuadamente por la comunidad científica. En particular, es posible considerar problemas no lineales, incluir datos ponderados y correlacionados, permitir la existencia de información previa acerca de los parámetros buscados,…”

A partir de la lectura de los párrafos anteriores, resulta comprensible que haya relativamente muchas menos publicaciones sobre MCG (como dijimos, se sobrentiende no lineales en general).

Según Reilly [1998] hasta el momento no existe una definición *universal* de MCG. En su opinión, podría interpretarse como una extensión de la aplicación de los MC a un problema más general que el caso más sencillo en que los errores tienen media constante, varianza constante y no están correlacionados, en otras palabras, una extensión hacia lo que ocurre en la realidad.

Esa falta de definición universal de MCG constituye una de las dificultades para la realización de esta investigación.

No obstante, posteriormente daremos una definición rigurosa de MCG.

En Arras [2003] se hace una aplicación de los MC. Con respecto a los MCG, sólo se menciona su utilización, sin incursionar en los detalles matemáticos. Dicha aplicación está orientada al campo de la Robótica y en la misma se utilizan coordenadas polares para obtener finalmente fórmulas cerradas de los valores de los parámetros óptimos. Por tanto, su enfoque difiere del de esta comunicación. No se menciona explícitamente ningún software específico para resolver los problemas numéricos.

En general, las publicaciones incluidas en este grupo consideran MCG, pero no trabajan con FV, pues consideran $q = 1$. Además, la mayoría considera aproximaciones lineales (MCGL), y en algunos casos se incluye una breve nota para no lineales.

1.3. Caso de MCG

Aquí podemos incluir a Marsily et al [2000], y Davidson y MacKinnon [1999]. IAEA [2003] hace sólo una referencia a los MCG.Milton et al [2006] constituye una aplicación de los MCG a un problema de calibración.
Bultheel et al [2001] construyen una matriz de pesos que es diagonal por bloques. Madsen y Nielsen [2005] hacen sólo una breve incursión a los MCG a partir de propiedades de la matriz de varianza y covarianza; posteriormente incluyen la restricción que la misma tiene que ser definida positiva. La función de aproximación puede ser no lineal, y en este caso se utilizan algoritmos del tipo Gauss-Newton, basados en linealizaciones sucesivas. No se mencionan funciones vectoriales empíricas. En Eisenberg y McLaughlin [2001] el procedimiento para la estimación está basado en un enfoque bayesiano de los MCG. Los parámetros y estados estimados son considerados funciones aleatorias del espacio y/o del tiempo con distribuciones previas o esperadas.
Similarmente, tanto en IAEA [2007] como en Smith [1993] se explican los fundamentos del método de MC desde ese mismo punto de vista; en ambas se utiliza un modelo que ha sido linealizado. En Smith aparece un programa para MCG[2].

[2] En una futura publicación, se comentará más al respecto.

1.4. Caso de MCGL

La tesis de Van Donkelaar [2000] (un enfoque flexible de la parametrización lineal) utiliza un procedimiento similar al de los MCG. IAEA [2004] y Thisted [1988] estudian los MCGL para $q=1$. Safi y White [2006] hacen una comparación entre MCO y MCG, ambos lineales; no consideran funciones vectoriales empíricas.
García [1995] los trata muy brevemente utilizando función experimental; similarmente Nathan [2002], pero con mayor amplitud. Chatterjee y Hadi [2006] en un capítulo especial tratan el caso en que los errores están correlacionados, pero los datos que se ajustan son escalares y esto se hace mediante modelos lineales. En Hengl [2007] sólo se hace referencia a los MCG lineales, y aún así se plantea que "…Ningún sistema GIS (Geographical Information System) incluye todo acerca de modelos generalizados lineales,..." Hart y Matt [1996] tiene una breve nota al respecto. El software al cual hace referencia es para MCO lineales, por lo que habría que reformular el problema previamente. En Ngo [2006], la estimación de los parámetros desconocidos se realiza utilizando el método estándar de máxima verosimilitud. Se consideran funciones vectoriales, pero mediante un modelo lineal, siendo independientes las mediciones de diferentes individuos. Además, se exige que la matriz de covarianza de cada individuo (correspondiente a mediciones repetidas) sea definida positiva.
Desde el punto de vista conceptual, Lindegren [2006] considera que en los MC no lineales la matriz de covarianza es diagonal y que los MCG son lineales. Robison-Cox [1998] y Ripley [1998] no toman en cuenta que la matriz V de varianza y covarianza pudiera ser singular. Tanto Hengl et al [2004] como Qin [2006] se refieren a los MCG lineales considerando la expresión matricial del vector óptimo de parámetros, donde se exige que la matriz de covarianza sea no singular; no se utilizan funciones vectoriales. A manera de resumen, en general las publicaciones incluidas en este subepígrafe consideran MCG, pero no trabajan con FV. Además, la mayoría se refiere a aproximaciones lineales, y en algunos casos se incluye una breve nota para no lineales.

1.5. Ajuste de datos mediante mínimos cuadrados generalizados para funciones vectoriales

Continuando con este orden descendente en abundancia bibliográfica, llegamos al extremo cuando queremos incursionar en AD mediante MCG para FV (abreviadamente AD_MCG_FV, principal objetivo nuestro), sobre todo cuando buscamos una *formulación* de este problema.

Existen aplicaciones donde es necesario trabajar con funciones f del tipo (1.1). Podría pensarse en la descomposición de f en funciones $f_L:\Re^p \to \Re$, $L=1,\ldots,q$ (cada L denota una característica distinta) para analizar cada f_L independientemente (de manera univariada con respecto a las variables dependientes). Sin embargo, este principio no es directamente aplicable a los MCG, por las correlaciones existentes entre las distintas características.

Nota: De ahora en adelante, cuando hablemos de característica, se sobreentiende que es con respecto a las variables dependientes.

Hagamos también aquí una incursión a las publicaciones relacionadas con este tópico:

En Carpenter y Kenward [2007] se hace brevemente una aplicación de los MCG al análisis multivariado.
Sobre series de tiempo: En su caso más complejo, las series de tiempo permiten la modelación simultánea de múltiples series dependientes. Este problema es al mismo tiempo poco frecuente y costoso, por lo que resulta natural desarrollar métodos para contribuir a automatizar el proceso (Forecasting [1997, (2)]). (La citada publicación no añade nada más sobre este caso múltiple). Pourahmadi [2002] trata algo sobre series de tiempo, pero con modelos lineales. Gallant [2000] supuestamente formula el problema de MCG a partir de una suma de formas cuadráticas, y no de una forma cuadrática, como haremos nosotros. En realidad, la formulación corresponde al AD_MCG_FV y no al problema general de MCG. Después brevemente sólo da una idea introductoria de cómo se podrían deducir las propiedades principales. Debemos señalar que, en la transformación al caso univariado, la vectorización se hace de manera informal; además la matriz de varianza y covarianza se toma de manera bastante restringida (sobre este último aspecto volveremos después). Además de Gallant, Cué et al [1985], Marangoni [1999], Multiresponse [2003] y Saha [2003] también abordan la aproximación con multirespuestas. Cué et al tratan sólo el caso lineal, y consideran un vector de parámetros para cada característica, lo que no corresponde con el enfoque de esta investigación. Marangoni sólo se refiere

a la formación de la matriz de varianza y covarianza. Multiresponse minimiza $\left|E^T E\right|$, donde E es la matriz error en la aproximación. Saha hace una breve explicación del modelo multirespuestas no lineal, sin introducir MC. A continuación pasa al modelo multirespuestas lineal, y da el estimador que coincide con la solución de MCGL.

2. LIMITACIONES QUE PUEDEN EXISTIR EN LA MATRIZ DE VARIANZA Y COVARIANZA

En Gallant, Cué et al, Marangoni, Multiresponse y Saha, (publicaciones todas referenciadas en el epígrafe anterior), la matriz de varianza y covarianza V tiene la forma:

$$V = \Sigma \otimes I \tag{2.1}$$

Esto trae como consecuencia 2 restricciones:

1. Se consideran correlaciones *sólo* entre características de una misma observación o "individuo". (R1)
2. Dadas 2 características determinadas, las covarianzas correspondientes a cada uno de los individuos son todas *iguales*.

En algunos problemas las restricciones anteriores, (R1) y (R2) podrían constituir una seria limitación. Consideremos el siguiente ejemplo de Meteorología:

En (1.1) hagamos $p = 3$, $q = 4$, y $f(x, \quad y, \quad z) = (P, \quad v_x, \quad v_y, \quad v_z)$, donde x, y, z, son las coordenadas de un punto de la atmósfera; P, v_x, v_y, v_z, denotan respectivamente la presión y las componentes de la velocidad del viento en cada uno de los ejes cartesianos, todos correspondientes al punto de la atmósfera en cuestión.

Se sabe ─ por ejemplo ─ que la velocidad del viento apunta hacia el lugar de menor presión; por tanto entre puntos distintos de la atmósfera existen correlaciones entre P y las componentes del viento.

Las consideraciones anteriores nos hacen buscar un modelo más general que el multivariado correspondiente a (2.1).

3. LIMITACIONES GENERALES

Al tomar en consideración los aspectos expuestos en los epígrafes anteriores con respecto a la bibliografía sobre MC, y más específicamente AD, podemos señalar como conclusión las siguientes limitaciones:

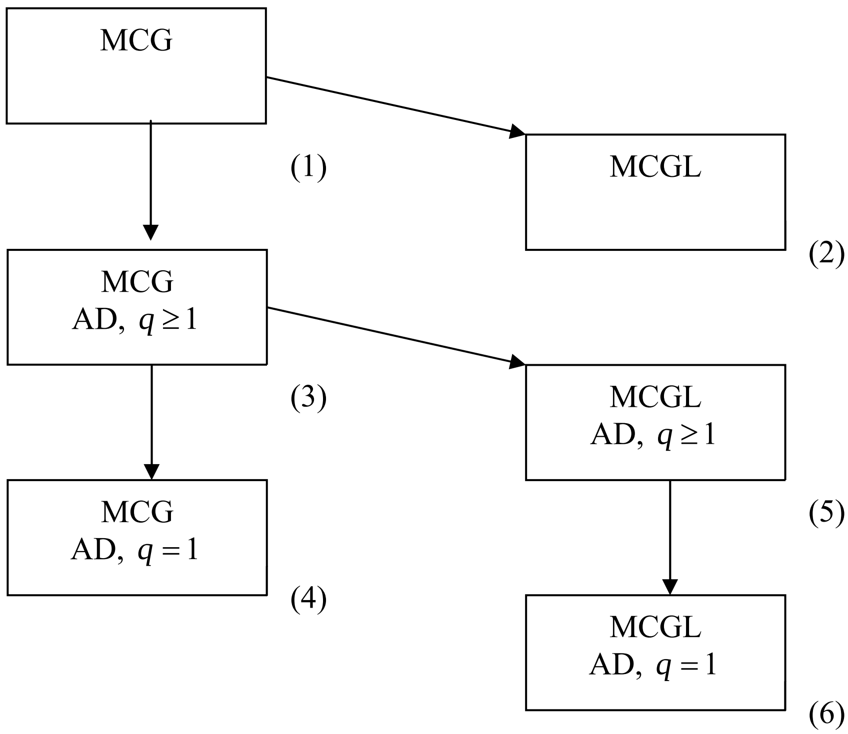
1. En las publicaciones donde se presenta el modelo multirespuestas con algún grado de formalidad, generalmente existen las restricciones (R1) y (R2), y se supone que V es definida positiva (sin admitir singularidad).
2. Existe una tendencia a considerar AD sólo para funciones que toman valores escalares, o sea $q = 1$. Si bien es cierto que cuando $q > 1$ puede hacerse una conversión del problema a MCO, el caso general $q \geq 1$ necesita una *formulación propia como problema de origen*, e inclusive hay algunas aplicaciones que lo requieren.
3. No existe una formalización del AD con el suficiente grado de generalidad, es decir del AD_MCG_FV. Es más, con frecuencia (véase Gallant, Thisted, Davidson y MacKinnon poner el año o el número de orden) el problema más general de MCG se reduce ─ lamentablemente ─ al de AD.
4. No existe tampoco un enfoque deductivo y orgánico del problema, es decir desde lo más general hasta casos particulares más conocidos. En este sentido la información se encuentra bastante dispersa.
5. No es costumbre considerar que este problema general es además parte del Análisis Numérico y que es posible darle un enfoque natural dentro de esta disciplina también.

4. ¿POR QUE UNA PRESENTACION?

La presentación que haremos aquí tiene pues como objetivo contribuir a superar las limitaciones y deficiencias señaladas en el epígrafe anterior.[3]

Para comprender mejor los pasos que se han seguido en la misma, véase el diagrama que aparece más abajo; la enumeración de los bloques corresponde con el orden de los pasos, el final de cada flecha es un caso particular deducido en el trabajo a partir del comienzo de la flecha.

Para cada bloque se ha hecho la formulación del problema correspondiente y la deducción del sistema de ecuaciones que resulta de plantear la condición necesaria de mínimo local.



Los casos más elementales, correspondientes a MCO y MCP fueron tratados en las publicaciones de Lemagne [2000] y [2001] respectivamente, y por lo tanto no serán abordados aquí. Ambas comunicaciones sirvieron de base para el desarrollo de esta investigación.

De acuerdo con el § 3, a través de la presentación llegaremos a nuevos resultados utilizando algunos ya conocidos pero que aparecen en la bibliografía de manera dispersa e informal.

5. MINIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS

5.1 Caso no lineal en general

Sea $r_k : \Re^{n+1} \to \Re$, función no lineal (se sobreentiende en general), $k = 0,\ldots,N$,

$$c \in \Re^{n+1}\text{, y denotaremos este vector como } c = (c_j)_{j=0,\ldots,n} \tag{5.1}$$

[3] Recordemos también que el software existente sobre MCG será analizado en una publicación posterior.

Consideremos ahora la función vectorial

$$r(c) = \left(r_k(c)\right)_{k=0,\ldots,N} \ , \tag{5.2}$$

y la matriz $W = \left(w_{ik}\right)_{i,k=0,\ldots,N}$, que supondremos que es simétrica y definida no negativa.

Se quiere entonces:

$$\text{minimizar}\, E(c) \ : \ E(c) = r^T(c) W r(c) \tag{5.3}$$

Los parámetros c_j deben ser determinados para alcanzar dicho objetivo.

El problema anteriormente formulado es el de **MCG**.

Nota: En general, basta que todas las r_k estén definidas en un cierto conjunto $S \subseteq \Re^{n+1}$, acorde con la definición más general de función *parcial*, aunque en la práctica matemática común es costumbre trabajar con funciones totales o aplicaciones.

Debido a la descomposición de Cholesky de W (Hart y Matt [1996]), en (5.3) efectivamente se minimiza una suma de cuadrados.

En algunas ocasiones – para abreviar – suprimiremos la c .

En la bibliografía consultada no aparece ninguna demostración de la condición necesaria de mínimo local. Sin embargo, apliquemos el siguiente resultado brindado por Scales [1985] para derivar funciones cuadráticas de varias variables; estas son de la forma:

$$F(x) = \tfrac{1}{2} x^T A x + b^T x + c$$

De acuerdo con la obra citada, el gradiente de la función anterior es

$$g(x) = Ax + b$$

En primer lugar, hagamos $b = 0$, $c = 0$. Entonces

$$\frac{\partial F}{\partial x_j} = a_{j\bullet} \cdot x$$

Hagamos además $x = r$, $A = W$, $E = 2F$, y apliquemos regla de la cadena:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E}{\partial c_j} &= \sum_{k=0}^{N} \frac{\partial E}{\partial r_k} \cdot \frac{\partial r_k}{\partial c_j} \\
&= 2 \sum_{k=0}^{N} w_{k\bullet} \cdot r \cdot \frac{\partial r_k}{\partial c_j} \\
&= 2 \left[\sum_{k=0}^{N} \frac{\partial r_k}{\partial c_j} w_{k\bullet} \right] r \\
&= 2 \left[\frac{\partial r}{\partial c_j}^T \cdot W \right] r = 0
\end{aligned}$$

Como j varía entre 0 y n , resulta que:

$$J^T(c)Wr(c)=0 \quad : \quad J(c)=\left(\frac{\partial}{\partial c_j} r_k(c)\right)_{\substack{k=0,\dots,N \\ j=0,\dots,n}} \tag{5.4}$$

es la matriz jacobiana de $r(c)$. ■

$J(c)$ es una matriz de $N+1$ filas y $n+1$ columnas. Observe además que r es ortogonal a cada columna de WJ, por lo que llamaremos al sistema anterior sistema de ecuaciones normales (SEN). El mismo se ha definido aquí de una manera más general que la usual, pues es costumbre restringir la definición a $r(c)$ lineal y $W=I$.

5.2 Mínimos cuadrados generalizados lineales

En (5.1) supongamos que las $r_k(c)$ son funciones lineales, o sea:

$$r_k(c)=b_k-\sum_{m=0}^{n} a_{km}c_m\,, \tag{5.5}$$

donde los a_{km} y los b_k son números conocidos.

Sea

$$A=\left(a_{km}\right)_{\substack{k=0,\dots,N \\ m=0,\dots,n}}$$

Entonces

$$r_k(c)=b_k-a_{k\bullet}\cdot c$$

Sustituyendo en (5.2)

$$r(c)=\left(b_k\right)_{k=0,\dots,N}-\left(a_{k\bullet}\right)_{k=0,\dots,N}\cdot c$$

Haciendo $b=\left(b_k\right)_{k=0,\dots,N}$, tenemos que

$$r=b-Ac \tag{5.6}$$

Luego, nuestro problema consiste en

$$\text{minimizar}\left(b-Ac\right)^T W\left(b-Ac\right)$$

El SEN correspondiente se obtiene a partir de (5.4) y (5.5):

$$J(c)=\left(-a_{kj}\right)_{\substack{k=0,\dots,N \\ j=0,\dots,n}}=-A$$

Aplicando (5.6), el SEN es:

$$A^T W\left[b-Ac\right]=0\,,$$

o equivalentemente

$$A^T WAc=A^T Wb \tag{5.7}$$

Como puede verse, la matriz de este sistema es simétrica y definida no negativa. ■

Es significativo señalar que en este epígrafe sobre MCG y su caso particular MCGL, no hay que hacer (de manera contraria a lo que suele encontrarse en la bibliografía) referencia alguna a función experimental. Esta referencia comienza a partir del próximo epígrafe:

6. AJUSTE DE DATOS MEDIANTE MINIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS PARA FUNCIONES VECTORIALES

6.1 Formulación del problema

Sea $f:\Re^p \to \Re^q$, una función desconocida en la práctica $(p \geq 1,\, q \geq 1)$; $x_k \in \Re^p$; $f_k \in \Re^q$ y se conoce empíricamente, siendo f_k una aproximación al vector desconocido $f(x_k)$, $(k = 0,\ldots,N)$. $F:\Re^p \to \Re^q$ es una función de aproximación a f, $F(x) = F(x;\ c)$ donde c fue definido en (5.1).

De acuerdo con el párrafo anterior, sea f_{kL} la componente L-ésima del vector f_k. Además, por ser F una función de $\Re^p$ en $\Re^q$, esta puede descomponerse en las funciones $F_L:\Re^p \to \Re$, $L = 1,\ldots,q$. Adoptemos las notaciones:

$$r_{kL}(c) = f_{kL} - F_L(x_k;c) \tag{6.1}$$

$$R_L(c) = \left(r_{kL}(c)\right)_{k=0,\ldots,N} \tag{6.2}$$

Ahora hagamos

$$r = \begin{pmatrix} R_1(c) \\ R_2(c) \\ \vdots \\ R_q(c) \end{pmatrix}$$

y sea W una matriz cuadrada de orden $(N+1)\,q$, simétrica y definida no negativa.

Entonces, el problema de **AD mediante MCG para FV** (abreviadamente AD_MCG_FV) consiste en, con las suposiciones anteriores, realizar (5.3).

Observe que $r_{kL}(c)$ representa la desviación de la aproximación $F_L(x_k;c)$ con respecto al dato empírico f_{kL}, y además que cada $R_L(c)$ es un vector columna de $N+1$ elementos.

De manera similar a lo señalado en la nota del § 5.1, f y F pueden ser funciones parciales definidas totalmente sobre el mismo conjunto.

6.2 Sistema de ecuaciones normales

Para la formulación anterior vimos que se realizó una partición del vector columna r. Con el fin de obtener la forma particular de (5.4), y posteriormente profundizar en cómo definir la matriz W, realizaremos también particiones de J y de W:

$$J = \begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ \vdots \\ J_q \end{pmatrix} = \left(J_L\right)_{L=1,\ldots,q}$$

Cada J_L es la matriz jacobiana de R_L, y tiene $N+1$ filas y $n+1$ columnas. Por (6.2):

$$J_L(c) = \left(\frac{\partial}{\partial c_j} r_{kL}(c)\right)_{\substack{k=0,\ldots,N \\ j=0,\ldots,n}} \tag{6.3}$$

$$W=\begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & \cdots & W_{1q} \\ W_{21} & W_{22} & \cdots & W_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{q1} & W_{q2} & \cdots & W_{qq} \end{pmatrix} = \left(W_{LH}\right)_{\substack{L=1,\dots,q \\ H=1,\dots,q}} \tag{6.4}$$

Cada W_{LH} es un bloque cuadrado de orden $N+1$, y por ser W simétrica se cumple que

$$W_{HL}=W_{LH}{}^{T} \tag{6.5}$$

Sustituyendo en (5.4), tenemos que:

$$\left[\left(J_L\right)_{L=1,\dots,q}\right]^T \left(W_{LH}\right)_{\substack{L=1,\dots,q \\ H=1,\dots,q}} \left(R_H\right)_{H=1,\dots,q} = 0$$

$$\left[\left(J_L{}^T\right)_{L=1,\dots,q}\right]^T \left(\sum_{H=1}^{q} W_{LH}\, R_H\right)_{L=1,\dots,q} = 0$$

$$\sum_{L=1}^{q}\left[J_L{}^T \sum_{H=1}^{q} W_{LH}\, R_H\right]=0 \tag{6.6}$$

$$\sum_{L=1}^{q}\sum_{H=1}^{q} J_L{}^T W_{LH}\, R_H = 0\ , \tag{6.7}$$

que puede interpretarse como una versión por bloques del SEN (5.4).

Este sistema también puede escribirse así:

$$\sum_{L=1}^{q} J_L{}^T W_{LL}\, R_L + \sum_{\substack{L,H=1 \\ H<L}}^{q} J_L{}^T W_{LH}\, R_H + \sum_{\substack{L,H=1 \\ H>L}}^{q} J_L{}^T W_{LH}\, R_H = 0$$

Al aplicar (6.5):

$$\sum_{L=1}^{q} J_L{}^T W_{LL}\, R_L + \sum_{\substack{L,H=1 \\ H<L}}^{q} J_L{}^T W_{LH}\, R_H + \sum_{\substack{H,L=1 \\ L>H}}^{q} J_H{}^T W_{LH}{}^T\, R_L = 0$$

$$\sum_{L=1}^{q} J_L{}^T W_{LL}\, R_L + \sum_{\substack{L,H=1 \\ H<L}}^{q} \left[J_L{}^T W_{LH}\, R_H + J_H{}^T W_{LH}{}^T\, R_L\right] = 0 \tag{6.8}$$

En esta última versión del SEN, con respecto a la estructura por bloques (6.4) de W, sólo intervienen los bloques de la diagonal y los que están por debajo de ella.

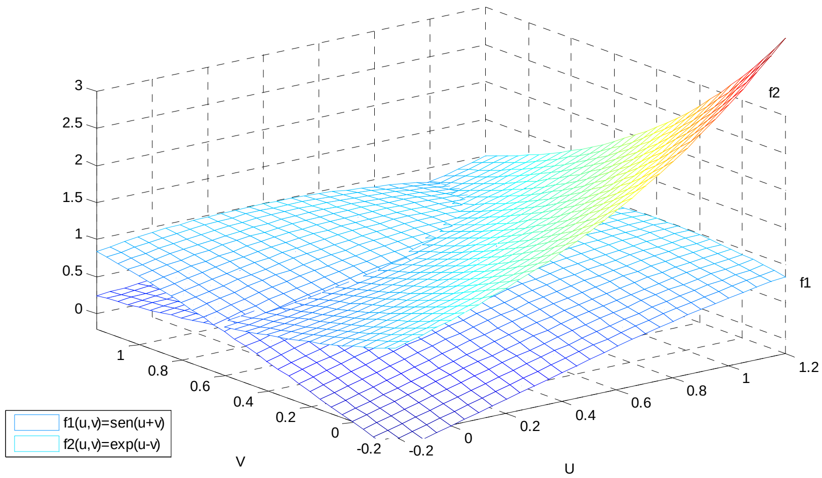
Si W es diagonal por bloques, desaparece la segunda sumatoria.
En la bibliografía consultada no aparece reflejado ningún planteamiento del SEN cuando se realiza AD_MCG_FV.

6.3 EJEMPLO[4]

Sea

$$f:\Re^2 \to \Re^2\ ;\quad f(u,v)=\left(sen(u+v), e^{u-v}\right)$$

[4] Este sencillo ejemplo es un tanto idealizado, pero ilustra convenientemente los anteriores desarrollos matemáticos.



De esta función se han extraído los valores siguientes:

(u,v)		$f(u,v)$	
0	0	0	1
0	1	$sen(1)$	e^{-1}
1	0	$sen(1)$	e

Considere ahora

$$F(u,v;c_0,c_1)=\left(c_0\ sen(u+v),\ e^{c_1(u-v)}\right)$$

con

$$W=\begin{pmatrix}4&0&1&1&0&1\\0&1&0&0&1&0\\1&0&2&0&0&1\\1&0&0&2&0&1\\0&1&0&0&1&0\\1&0&1&1&0&4\end{pmatrix}$$

de tal manera que realice AD_MCG_FV (en este ejemplo W es definida no negativa, pero singular). Por supuesto, al resolver este problema debe obtenerse aproximadamente $c_0=1$; $c_1=1$. Veremos lo que sucede.

En este caso

$$p=2;\quad q=2;\quad N=2\ ;\quad n=1\ .$$

Denotemos $s=\mathrm{sen}(1)$. De acuerdo con (6.8), el SEN correspondiente es:

$$\begin{pmatrix}-3s^2-se^{-1}-se+3s^2c_0+se^{-c_1}+se^{c_1}\\ se^{-c_1}-sc_0e^{-c_1}+e^{-c_1-1}-e^{-2c_1}-se^{c_1}+sc_0e^{c_1}-4e^{c_1+1}+4e^{2c_1}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}$$

Con el cambio de variable $y = e^{c_1}$, el sistema anterior es equivalente a:

$$c_0 = \frac{1}{3s}\left[3s + e^{-1} + e - \frac{1}{y} - y\right]$$

$$-2e + \left(2 - e^2\right)y + \left(1 - 11e^2\right)y^3 + 11e\,y^4 = 0$$

Obviamente $y = e$ es raíz de la segunda ecuación; pero por la regla de los signos de Descartes, esta no tiene más raíces positivas. Por lo tanto, el sistema sólo se satisface para $c_0 = 1$; $c_1 = 1$. ■

6.4 CALCULO DE LA MATRIZ W

Aunque en la definición de AD_MCG_FV puede tomarse libremente cualquier W que cumpla las condiciones generales especificadas, en la práctica es usual hacer $W = V^+$, o sea la pseudoinversa de V (Gill et al [1990]), donde V es la matriz de varianza y covarianza de las observaciones.

Para formar la matriz V, consideramos una partición similar a la que hicimos con W, es decir:

$$V = \left(V_{LH}\right)_{\substack{L=1,\ldots,q \\ H=1,\ldots,q}}$$

donde V_{LH} es un bloque cuadrado de orden $N+1$ **.**

Dentro de V_{LH}, el elemento de posición (k, j) es la covarianza entre el valor de la característica L en la observación o "individuo" k, y el valor de la característica H del individuo j ; $k, j = 0, \ldots, N$.

7. ALGUNOS CASOS PARTICULARES

7.1 AJUSTE DE DATOS MEDIANTE MINIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS PARA FUNCIONES QUE TOMAN VALORES ESCALARES

En este caso, $q = 1$, f_k es un escalar, y para cada x_k y cada c, $F(x_k; c)$ también lo es.

R_1 es sencillamente r (o sea, el residual tal como se conoce comúnmente).

W es una matriz simétrica y definida no negativa de orden $N+1$.

Nuestro problema particular consiste entonces, con estas especificaciones, en (5.3). Para hallar el SEN, notemos que en cada una de las sumatorias de (6.6) queda un solo sumando, y los índices L y H pueden eliminarse:

$$J_1^T W_{11} R_1 = 0$$

$$J^T W\, r = 0 \quad ,$$

lo que naturalmente concuerda con la ecuación general (5.4).

Podría parecer que a partir de este último caso, más frecuentemente utilizado, puede llegarse mediante alguna reformulación al AD_MCG_FV, del § 6.1 (para $q > 1$). En general no es así, pues habría que tener más de una F_L, y cada una de ellas debe ser evaluada en todos los x_k, mientras que aquí disponemos a tal efecto de *una sola* F_L.

Conclusión: *En general, desde el punto de vista de formulación del problema, no basta trabajar con funciones que tomen valores escalares. El AD_MCG_FV no es – por tanto – un problema trivial, y requiere formalización propia.*

7.2 AJUSTE DE DATOS MEDIANTE MINIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS LINEALES PARA FUNCIONES VECTORIALES

Supongamos ahora que en la formulación de AD_MCG_FV, hacemos $q \geq 1$ y además supongamos que F depende linealmente de los parámetros c_m , o sea que

$$F(x;c) = \sum_{m=0}^{n} c_m \, \phi_m(x) \;,\; x \in \Re^p \tag{7.1}$$

para una familia de funciones $\{\phi_m(x)\}_{m=0,\dots n}$ prefijada, $\phi_m : \Re^p \to \Re^q$. Note que esta es una generalización de la manera en que usualmente se utiliza la dependencia lineal.

A continuación, nuestro objetivo inmediato será sustituir en la ecuación vectorial (6.7), para llegar al SEN correspondiente:

Como ϕ_m puede descomponerse en q funciones $\phi_{mL} : \Re^p \to \Re$, se tiene, a partir de (7.1) que

$$F_L(x_k\,;c) = \sum_{m=0}^{n} c_m \, \phi_{mL}(x_k) \;\;,\; L = 1,\dots,q \tag{7.2}$$

y sustituyendo en (6.1)

$$r_{kL}(c) = f_{kL} - \sum_{m=0}^{n} c_m \phi_{mL}\,(x_k)$$

$$\frac{\partial}{\partial c_j} r_{kL}(c) = -\phi_{jL}(x_k)$$

Entonces, de acuerdo con (6.3):

$$[J_L(c)]^T = \left(-\phi_{jL}(x_k)\right)_{\substack{j=0,\dots,n\\ k=0,\dots,N}}$$

Por otra parte, a partir de (6.2) se tiene que

$$R_L(c) = \left(f_{kL} - \sum_{m=0}^{n} c_m \, \phi_{mL}\,(x_k) \right)_{k=0,\dots,N}$$

Aplicando las 2 igualdades anteriores, el sumando L -ésimo en el miembro izquierdo de (6.7) es

$$\sum_{H=1}^{q} \left[\left(-\phi_{jL}(x_k)\right)_{\substack{j=0,\dots,n\\ k=0,\dots,N}} W_{LH} \left(f_{kH} - \sum_{m=0}^{n} c_m \, \phi_{mH}\,(x_k) \right)_{k=0,\dots,N} \right] =$$

$$\sum_{H=1}^{q} \left[\left(-\phi_{jL}(x_k)\right)_{\substack{j=0,\dots,n\\ k=0,\dots,N}} W_{LH} \left\{ f_{\bullet H} - \sum_{m=0}^{n} c_m \left(\phi_{mH}\,(x_k)\right)_{k=0,\dots,N} \right\} \right] =$$

$$\sum_{H=1}^{q} \left[\left(-\phi_{jL}(x_k)\right)_{\substack{j=0,\dots,n\\ k=0,\dots,N}} W_{LH}\, f_{\bullet H} + \sum_{m=0}^{n} \left(\phi_{jL}(x_k)\right)_{\substack{j=0,\dots,n\\ k=0,\dots,N}} W_{LH} c_m \left(\phi_{mH}\,(x_k)\right)_{k=0,\dots,N} \right]$$

Para 2 vectores columnas a , b $\left(a \in \Re^{N+1},\, b \in \Re^{N+1}\right)$ introduzcamos la siguiente notación:

$$\left\langle a^T, b \right\rangle_{LH} = a^T W_{LH}\, b \tag{7.3}$$

Este número no corresponde, en general, a producto escalar.

De acuerdo con lo anterior, nuestro sumando L-ésimo es

$$\sum_{H=1}^{q}\left[-\left(\left\langle \phi_{jL}(\bullet)^{T},\, f_{\bullet H}\right\rangle_{LH}\right)_{j=0,\ldots,n}+\sum_{m=0}^{n}\left(\left\langle \phi_{jL}(\bullet)^{T},\phi_{mH}(\bullet)\right\rangle_{LH}\right)_{j=0,\ldots,n} c_m\right]$$

Al sumar en (6.7) para toda L se obtiene:

$$\sum_{L=1}^{q}\sum_{H=1}^{q}\sum_{m=0}^{n}\left(\left\langle \phi_{jL}(\bullet)^{T},\phi_{mH}(\bullet)\right\rangle_{LH}\right)_{j=0,\ldots,n} c_m=\sum_{L=1}^{q}\sum_{H=1}^{q}\left(\left\langle \phi_{jL}(\bullet)^{T},\, f_{\bullet H}\right\rangle_{LH}\right)_{j=0,\ldots,n}$$

Hagamos

$$B_{LH}=\left(\left\langle \phi_{jL}(\bullet)^{T},\phi_{mH}(\bullet)\right\rangle_{LH}\right)_{\substack{j=0,\ldots,n\\ m=0,\ldots,n}} \tag{7.4}$$

$$s_{LH}=\left(\left\langle \phi_{jL}(\bullet)^{T},\, f_{\bullet H}\right\rangle_{LH}\right)_{j=0,\ldots,n}$$

Entonces

$$\left[\sum_{L=1}^{q}\sum_{H=1}^{q}B_{LH}\right]c=\sum_{L=1}^{q}\sum_{H=1}^{q}s_{LH}$$

Si denotamos ambas sumatorias dobles como B y s, respectivamente, tendremos:

$$Bc=s \tag{7.5}$$

que es un sistema lineal de $n+1$ ecuaciones con $n+1$ incógnitas, generalización del conocido SEN para MC lineales.

Puede probarse que:

$${B_{HL}}^{T}=B_{LH} \tag{7.6}$$

En efecto, por (7.4)

$$\begin{aligned}{B_{HL}}^{T} &=\left[\left(\left\langle \phi_{jH}(\bullet)^{T},\phi_{mL}(\bullet)\right\rangle_{HL}\right)_{\substack{j=0,\ldots,n\\ m=0,\ldots,n}}\right]^{T}\\
&=\left(\left\langle \phi_{mH}(\bullet)^{T},\phi_{jL}(\bullet)\right\rangle_{HL}\right)_{\substack{j=0,\ldots,n\\ m=0,\ldots,n}}\\
&=\left(\phi_{mH}(\bullet)^{T}W_{HL}\,\phi_{jL}(\bullet)\right)_{\substack{j=0,\ldots,n\\ m=0,\ldots,n}} \qquad \text{por (7.3)}\\
&=\left(\phi_{jL}(\bullet)^{T}W_{LH}\,\phi_{mH}(\bullet)\right)_{\substack{j=0,\ldots,n\\ m=0,\ldots,n}} \qquad \text{por (6.5)}\\
&=B_{LH}\end{aligned}$$

lo que demuestra (7.6) . ■

De acuerdo con esto, observemos que

$$B=\sum_{L=1}^{q}B_{LL}+\sum_{L=1}^{q}\sum_{H=1}^{L-1}B_{LH}+\sum_{H=1}^{q}\sum_{L=H+1}^{q}{B_{LH}}^{T}$$

$$= \sum_{L=1}^{q} B_{LL} + \sum_{\substack{L,H \\ H<L}} \left[B_{LH} + B_{LH}{}^{T} \right] \tag{7.7}$$

Entonces para formar el SEN (7.5), sólo hay que calcular $\dfrac{q(q+1)}{2}$ matrices B_{LH} , en vez de q^2. Además (7.7) puede aplicarse para comprobar – por ejemplo – que B es simétrica, ya que es suma de matrices simétricas. Esta conclusión concuerda con el resultado más general consistente en la simetría de la matriz en (5.7)[5].

7.3 AJUSTE DE DATOS MEDIANTE MINIMOS CUADRADOS GENERALIZADOS LINEALES PARA FUNCIONES QUE TOMAN VALORES ESCALARES

En este caso $q = 1$, y se tiene que $\phi_m : \Re^p \to \Re$, por lo que para cada x_k y cada c, $F(x_k ; c)$ es un escalar.

En (7.5), B se reduce a:

$$B = \left(\phi_j (\bullet)^T W \, \phi_m (\bullet) \right)_{\substack{j=0,\dots,n \\ m=0,\dots,n}}$$

$$= \left[\left(\left(\phi_j (\bullet)^T W \, \phi_m (\bullet) \right)_{j=0,\dots,n} \right)_{m=0,\dots,n} \right]^T \qquad ,$$

donde T indica que los vectores columnas se disponen de izquierda a derecha “en fila”.

$$B = \left[\left(\left(\phi_j (\bullet)^T \right)_{j=0,\dots,n} W \, \phi_m (\bullet) \right)_{m=0,\dots,n} \right]^T$$

Hagamos $A = \left(\phi_m \left(x_k \right) \right)_{\substack{k=0,\dots,N \\ m=0,\dots,n}}$. Entonces:

$$B = \left[\left(A^T W \, \phi_m (\bullet) \right)_{m=0,\dots,n} \right]^T$$

$$= A^T W \left[\left(\phi_m (\bullet) \right)_{m=0,\dots,n} \right]^T$$

$$B = A^T W A \tag{7.8}$$

Por otra parte, para el lado derecho s , se tiene que

$$s = \left(\phi_j (\bullet)^T W \; f_\bullet \right)_{j=0,\dots,n}$$

$$= \left(\phi_j (\bullet)^T \right)_{j=0,\dots,n} W \; f_\bullet$$

$$= A^T W \; f_\bullet$$

y haciendo $b = f_\bullet$, tenemos que

$$s = A^T W \, b \tag{7.9}$$

A partir de (7.8) y (7.9) se observa la correspondencia con (5.7). ■

En toda la bibliografía consultada tampoco aparecen desarrollos ni resultados similares a los presentados aquí en el caso lineal.

---

[5] Y precisamente por (5.7), también podemos afirmar que B es definida no negativa.

8. CONCLUSIONES

De acuerdo con los objetivos planteados inicialmente:

1. Se ha realizado aquí una presentación formalizada del problema de MCG, y especialmente del AD_MCG_FV, justificándose la necesidad de la misma.
2. El problema se ha enfocado de manera orgánica y deductiva, desde lo más general hasta casos particulares más conocidos; en cada uno de ellos se realizó la formulación correspondiente y se dedujo el SEN. En particular, esto se hizo para el AD_MCG_FV no lineales y lineales; en este ultimo caso se demostraron algunas de sus propiedades, y se extendió la definición o utilización de dependencia lineal para funciones vectoriales.
3. En general, la matriz V de varianza y covarianza (o su pseudoinversa W) puede ser cualquier matriz simétrica y definida no negativa (no necesariamente definida positiva).
4. El enfoque que se ha seguido es similar al que hace el Análisis Numérico en casos particulares más conocidos. En este sentido se rompe con la tradición, ya que no es costumbre tratar el AD_MCG_FV dentro de dicha disciplina.

En un futuro artículo se presentará una implementación computacional del AD_MCG_FV.

RECEIVED NOVEMBER 2008
REVISED SEPTEMBER 2010

REFERENCIAS

[1] ALZOLA, C. and HARRELL, F. (2002): An Introduction to S and the Hmisc and Design Libraries**.** http://hesweb1.med.virginia.edu/biostat/s/doc/splus.pdf.

[2] ARMENTANO, M. G. (2001): Cuadrados mínimos con peso variable: Teoría y Aplicaciones, **Memorias del VI Simposio de Matemática en la Conferencia Internacional CIMAF'2001**, ISBN: 959-7056-13-5.

[3] ARRAS, K. O. (2003): Feature-Based Robot Navigation in known and unknown environments, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, http://www.informatik.uni-freiburg.de/~arras/papers/arrasThesis.pdf.

[4] BARNET, V. (editor) (1981): **Interpreting multivariate data**, John Wiley & Sons, N. York.

[5] BASKIN, R. M.: (2005): Dealing with missing survey data in longitudinal analysis**,** Proceedings of Statistics Canada Symposium**,** http://www.statcan.ca/english/freepub/11-522-XIE/2005001/9467.pdf.

[6] BELLMAN, R. (1995): **Introduction to Matrix Analysis**. SIAM, Philadelphia.

[7] BEREZIN, I. S. and ZHIDKOV, N. P. (1971): **Computing Methods**, Edición Revolucionaria, La Habana.

[8] BOIZÁN, M. A. (1984): **Optimización,** Editorial Oriente, Santiago de Cuba

[9] BOLSHAKOV, V. y GAIDÁYEV, P. (1989): **Teoría de la elaboración matemática de mediciones geodésicas,** Editorial MIR Moscú.

[10] BULTHEEL, A., VAN BAREL, M., ROLAIN, Y. and PINTELON, R. (2001): **Numerically robust transfer function modeling from noisy frequency domain data,** http://www.cs.kuleuven.ac.be/cwis/research/nalag/papers/ade/rolain/ieee.pdf.

[11] BURDEN, R. I. y FAIRES, J. D. (1985): **Análisis Numérico**, Grupo Editorial Iberoamericana *CAC-2002*, http://software.eigenvector.com/CAC2002/docs/CAC_Program_Web.pdf.

[12] CARPENTER, J. R. and KENWARD, M. G. (2007): **Missing data in randomised controlled trials – a practical guide,** http://www.pcpoh.bham.ac.uk/publichealth/methodology/docs/invitations/Final_Report_RM04_JH17_mk.pdf .

[13] CHATTERJEE, S. and HADI, A. S. (2006): **Regression analysis by example**, 4th edition, Wiley Series In Probability and Statistics, Hoboken, New Jersey.

[14] CHUANG, Y. (2001): **Neighborhood Influences on Adolescent Cigarette and Alcohol Use**, http://www.sph.unc.edu/familymatters/YCC_Dissertation.html.

[15] CONTE, S. D. and DE BOOR, C. (1980): **Elementary Numerical Analysis: An Algorithmic Approach**, Third Edition

[16] CUÉ, J. L., CASTELL, E. y HERNÁNDEZ, J. M. (1987): **Estadística,** ENPES, La Habana.

[17] CUÉ, J. L., HERNÁNDEZ, N. y CASTELL, E. (1985): **Modelo Lineal y sus aplicaciones**, Editorial Pueblo y Educación, La Habana.

[18] CULLAGH, P. M. and NELDER, J. A. (1989): **Generalized Linear Models**, Chapman&Hall, N. York.

[19] CHAPRA, S. C. y CANALE, R. P. (1999): **Métodos numéricos para ingenieros**,Mc. Graw, N. York.

[20] DANÍLINA, N. I., DUBRÓVSKAYA, N. S., KVASHÁ, O. P. y SMIRNOV, G. L. (1990): **Matemática de Cálculo**, Editorial MIR Moscú.

[21] DAVIDSON, R. and MACKINNON, J. (1999): **Generalized Least Squares and Related Topics,** http://russell.cnrs-mrs.fr/Fondements/chp07big.pdf.

[22] DRAPER, N. and SMITH, H. (1966): **Applied Regression Analysis**, John Wiley & Sons, Inc., N. York.

[23] EISENBERG, F. and MCLAUGHLIN, D. B. (2001): **Development of a Data Evaluation/Decision Support System for Remediation of Subsurface Contamination,** http://www.epa.gov/ada/download/reports/epa_600_r01_044.pdf .

[24] ELLNER, S. P., and GUCKENHEIMER, J. (2006): **Dynamic Models in Biology**, http://press.princeton.edu/chapters/s9_8124.pdf.

[25] EPA (2002): **Preliminary Organophosphorus Pesticide Cumulative Risk Assessment,** Environmental Protection Agency, http://www.epa.gov/opp00001/cumulative/rra-op/III_B_1.pdf.

[26] FORECASTING SYSTEMS INC., AUTOMATIC (1997): **Discussion of regression as a particular case of a transferfunction**, http://www.autobox.com/t1c8.html.

[27] FORECASTING SYSTEMS INC., AUTOMATIC (1997): **Understanding and identification of Arima models**, http://www.autobox.com/t1a13a.html.

[28]FORSYTHE, G. E., MALCOLM, M. A. and MOLER, C. B. (1972**): Computer Methods for Mathematical Computations,** Computer Science Department, Stanford University, Stanford.

[30] FOURER, R. (2003): **Nonlinear Programming Frequently Asked Questions**, http://www.unix.mcs.anl.gov/otc/Guide/faq/nonlinear-programming-faq.html

[31] FOX, J. (2005): **CRAN Task View: Statistics for the Social Sciences**, http://www.fordham.edu/economics/vinod/CRAN%20Task%20View.doc

[32] GALACTIC INDUSTRIES CORPORATION (2000): **Peakfitting, Levenberg-Marquardt Method,** http://www.galactic.com/default.asp.

[33] GALLANT, A. R. (2000): **Nonlinear Statistical Models,** Department of Economics, University of North Carolina, http://www.unc.edu/~arg/econ275/lectures/ch5sld4.ps.

[34] GARCIA, O. (1995): **"Regression", Appendix B,** in Apuntes de Mensura Forestal-Estática, Universidad Austral de Chile, Facultad de Ciencias Forestales, http://web.unbc.ca/~garcia/unpub/regress.pdf.

[35] GAUTSCHI, W. (1997): **Numerical Analysis: An Introduction**, Birkhäuser Boston.

[36] GILL, P. E., MURRAY, W. and WRIGHT, M. H. (1990**): Numerical Linear Algebra and Optimization**, **Volume 1**, Addison-Wesley, N. York.

[37] GÓMEZ, A. y ALVAREZ, L. (1987): **Métodos numéricos del álgebra lineal**, Editorial Academia, La Habana.

[38] GÓMEZ, A. y ALVAREZ, L. (1991): **Métodos numéricos del análisis matemático,** Editorial Academia, La Habana .

[39] GONZÁLEZ, A. (1983): **Errores y mediciones**, Editorial Científico-Técnica, La Habana.

[40] GROSSE, E. (1999): **Generalized Least Squares Fit by Orthogonal Polynomials,** http://www.netlib.org/tomspdf/296.pdf.txt .

[41] GUERRA, C., MENÉNDEZ, E., BARRERO, R. y EGAÑA, E. (1987): **Estadística,** Editorial Pueblo y Educación, La Habana.

[42] HAGER, W. W. (1988): **Applied Numerical Linear Algebra**, Prentice Hall. N. York.

[43] HÄMMERLIN, G. K., HOFFMANNN, H. (1992): **Numerische Mathematik**, **3. Auflage**, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.

[44] HART, W. and MATT, W. (1996): **Constrained and Unconstrained Least Squares Fitting**, CERNLIB, Geneva, Switzerland, http://www.aquila.infn.it/calcolo/documentazione/cern/cernlib.ps.

[45] HENGL, T. (2007): **A Practical Guide to Geostatistical Mapping of Environmental Variables**, Institute for Environment and Sustainability, http://eusoils.jrc.it/ESDB_Archive/eusoils_docs/other/EUR22904en.pdf.

[46] HENGL, T., HEUVELINK, G. and STEIN, A. (2004): **A generic framework for spatial prediction of soil variables based on regression-kriging,** http://www.itc.nl/library/Papers_2004/peer_jrnl/stein_gen.pdf .

[47] HILLIER, J., MAKOWSKI, D. and ANDRIEU, B. (2005): **Maximum Likelihood Inference and Bootstrap Methods for Plant Organ Growth via Multi-phase Kinetic Models and their Application to Maize**, Annals of Botany 96: 137-148, 2005, http://aob.oxfordjournals.org/cgi/reprint/96/1/137.

[48] HINTZE, J. L. (2007): **NCSS User's Guide III, Regression and Curve Fitting**, Kaysville, Utah, http://itchy.icw.com/ncss/NCSSUG3.pdf.

[49] HYAMS, D. (2003): **CurveExpert 1.3,** http://s91928265.onlinehome.us/curveexpert/downloads/cxptw138.zip.

[50] IAEA (2003): **Evaluated Nuclear Data for Th-U Fuel Cycle**, International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria, http://www-nds.iaea.org/reports-new/indc-reports/indc-nds/indc-nds-0447.pdf.

[51] IAEA (2004): **Summary Report of the Second Research Co-ordination Meeting on Improvement of the Standard Cross Sections for Light Elements**, http://www-nds.indcentre.org.in/reports-new/indc-reports/indcnds/indc-nds-0453.pdf.

[52] IAEA (2007): **International Evaluation of Neutron Cross-Section Standards**, International Atomic Energy Agency, Vienna, http://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/Pub1291_web.pdf.

[53] **INSIGHTFUL CORPORATION** (2007): **S-Plus® 8 Function Guide, Seattle**, Washington, http://www.insightful.com/support/splus80win/functionguide.pdf.

[54] ISAACSON, E. and KELLER, H. B. (1971): **Analysis of Numerical Methods**, Edición Revolucionaria, La Habana.

[55] KELLER, F. (2002): **Linear Models**, Connectionist and Statistical Language Processing, Computerlinguistik, Universität des Saarlandes, http://www.coli.uni-sb.de/~crocker/courses/learning/lecture12.pdf.

[56] KHINDANOVA, I., RACHEV, S. and SCHWARTZ, E. (1998): **Stable Modeling of Value at Risk**, http://symposium.wiwi.uni-karlsruhe.de/8thpapers/khindanova.ps.

[57] KINCAID, D., CHENEY, W. and CHENEY, E. W. (1995): **Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing,** 2nd edition, Brooks/Cole Pub. Co., Boston

[58] KOROLIUK, V. S. (1981): **Manual de la teoría de probabilidades y estadística matemática**, Editorial MIR, Moscú.

[59] KUDRIAVTSEV, V. A. y DEMIDOVICH, B. P. (1989): **Breve Curso de Matemáticas Superiores**, Editorial MIR, Moscú.

[60] LAWSON, CH. L. and HANSON, R. J. (1995): **Solving Least Squares Problems**, SIAM, Philadelphia .

[61] LEBEDEV, V. I. (1997): **An Introduction to Functional Analysis in Computational Mathematics**, Birkhäuser, Boston.

[62] LEMAGNE, J. (2000): **Ajuste de datos para funciones vectoriales** (Tesis de maestría), Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana.

[63] LEMAGNE, J., (2001): **Ajuste lineal de datos para funciones vectoriales**, Memorias del VI Simposio de Matemática en la Conferencia Internacional CIMAF'2001, ISBN: 959-7056-13-5.

[64] LEVENBERG-MARQUARDT METHOD (1996): http://www-fp.mcs.anl.gov/otc/Guide/OptWeb/continuos/unconstrained/nonlinearls/

[65] LEWIN-KOH, N. (2005): **[R] Correct variance for prediction intervals from nlme and gnls objects,** http://tolstoy.newcastle.edu.au/R/help/

[66] LIN, S., GUAN, B. T. and CHANG, T. (2008): Fitting Photosynthesis Irradiance Response Curves with Nonlinear Mixed-effects Models, **Taiwan J. For Sci** 23, 55-69.
.
[67] LINARES, G., ACOSTA, L. y SISTACHS, V. (1986): **Estadística multivariada**, ENPES. La Habana.

[68] LINDEGREN, L. (2006): **Statistics for astronomers,** http://www.astro.lu.se/~lennart/statistics5.pdf .

[69] LIU, X. (2007): **Robustness, Complexity, Validation and Risk**, California Institute of Technology,

http://etd.caltech.edu/etd/available/etd-05272007-214755/unrestricted/XinThesis.pdf.

[70] LOHNINGER, H. (2008): **DataLab, Version 2.599**, http://www.lohninger.com/datalab/en_download.html.

[71] LUCCIO, F., MARZOLLO, A. and SERAFINI, P. (editors) (1993): **Mathematics of Computing**, International Centre for Mechanical Sciences, Udine, Italy.

[72] LUENBERGER, D. G. (1969): **Optimization by vector space methods**, John Wiley & Sons, N. York.

[73] MADSEN, K. and NIELSEN, H. B. (2005): **Supplementary Notes for 02611 Optimization and Data Fitting**, http://www2.imm.dtu.dk/courses/02611/SN05b.pdf.

[74] MAHATA, K. (2003): **Estimation Using Low Rank Signal Models**, Phd. Thesis Uppsala University, Sweden, http://www.diva-portal.org/diva/getDocument?urn_nbn_se_uu_diva-3844-1__fulltext.pdf.

[75] MARANGONI, F. (1999): **Covariance matrix of a multivariate non linear regression model**, http://www.eco.rug.nl/gauss/gauss99/msg00783.html.

[76] MARSILY, G. D., DELHOMME, J. P., COUDRAIN-RIBSTEIN, A. and LAVENUE, A. M. (2000): **Four Decades of Inverse Problems in Hydrogeology,** http://www.cea.fr/conferences/invhydro2002_fic/deMarsily.PDF

[77] MARTINEZ, J. L. (1997**): Approximation by Penalized Least Squares**, http://www.matcuer.unam.mx/~martinez/Ponencias/Approximation_by_penalized_least_squares/Documents.html.

[78] MATH LEAGUE MULTIMEDIA (2001): **Using Data and Statistics**, http://www.mathleague.com/help/data/data.htm.

[79] MATHWORKS INC. (2003): Curve Fitting Toolbox**,** http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/curvefit/curvefit.shtml.

[80] MATHWORKS INC. (2003): Matlab, http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/techdoc/matlab.shtml.

[81] MATHWORKS INC. (2003): Optimization Toolbox, http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/optim/optim.shtml

[82] MATHWORKS INC. (2003): Statistics Toolbox, http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/toolbox/stats/stats.shtml.

[83] MATHWORKS INC.,(2004): Model-Based Calibration Toolbox, Model Browser User's Guide, Version 2, Natick, MA, http://biounder.kaist.ac.kr/board/bx/docs/matlabman/mbcmodel.pdf.

[84] MEYER, K. (2007): WOMBAT – A tool for mixed model analyses in quantitative genetics by restricted maximum likelihood (REML), http://www.pubmedcentral.nih.gov/articlerender.fcgi?artid=2064953.

[85] MILTON, M. J. T., HARRIS, P. M., SMITH, I. M., BROWN, A. S. and GOODY, B. A. (2006): Implementation of a generalized least-squares method for determining calibration curves from data with general uncertainty structures, http://www.iop.org/EJ/article/0026-1394/43/4/S17/met6_4_s17.pdf.

[86] MORE, J. J. and WRIGHT, S. J. (1993): Optimization Software Guide, http://www.siam.org/newbook/moread.ps.

[87] MOTULSKY, H. and CHRISTOPOULOS, A. (2003): Fitting Models to Biological Data using Linear

and Nonlinear Regression, http://www.graphpad.com/manuals/RegressionBook.pdf .

[88] MULTIRESPONSE PARAMETER ESTIMATION (2003): Statistics 824 – Spring 1995, http://www.stat.wisc.edu/p/stat/course/st824-bates/public/slides/NRAIA4_sem.ps.

[89] MUSSIO, L., NOCERA, R. and POLI, D. (1999): Spatial-Temporal Modeling, http://www.photogrammetry.ethz.ch/general/persons/daniela_pub/1999_pechino.pdf.

[90] NAKAMURA, S. (1997): **Análisis numérico y visualización gráfica con MATLAB**, Prentice-Hall Hispanoamericana, S. A, México.

[91] NATHAN, G. (2002): Approaches to the Analysis of Complex Survey Data http://millenniumindicators.un.org/unsd/HHsurveys/ch19draft.pdf.

[92] NGO Y. (2006): Marginal regression model using inverse probability weights for handling dropouts missing at random in longitudinal data, http://www2.math.su.se/matstat/reports/serieb/2006/rep3/report.pdf.

[93] NONLINEAR LEAST SQUARES (1996), http://www-fp.mcs.anl.gov/otc/Guide/OptWeb/continuos/unconstrained/nonlinearls/index.html .

[94] NONLINEAR LEAST SQUARES CURVE FITTER (2000) http://members.aol.com/johnp71/nonlin.html .

[95] OLLILA, E. (2002): Sign and rank covariance matrices with applications to multivariate analysis, http://www.math.jyu.fi/research/reports/rep85.ps.

[96] PINHEIRO, J., BATES, D., DEBROY, S. and SARKAR, D. (2008): The Nlme Package, The R Core Team, http://cran.r-project.org/web/packages/nlme/nlme.pdf

[97] POURAHMADI, M. (2002): Regression Modeling of the Covariance Matrix of Longitudinal Data, NIU/UC, http://www.math.niu.edu/~pourahm/talk.pdf.

[98] QIN, X. (2006): Traffic flow modeling with real-time data for on-line network traffic estimation and prediction, (Phd thesis University of Maryland), https://drum.umd.edu/dspace/bitstream/1903/3628/1/umi-umd-3495.pdf.

[99] R (2008): **The Comprehensive R Archive Network**, http://cran.r-project.org/doc/

[100] RAÍCES, O. (1986): **Método unificado de los mínimos cuadrados**, Edit. Científico-Técnica, URSS.

[101] RALSTON, A. (1965): **A First Course in Numerical Analysis**, McGraw-Hill, N.York.

[102] REILLY, D. (1998): Re: Generalized Least Squares. What is it?, http://www.autobox.com/t1a18.html.

[103] RICCI, V. (2006): Principali tecniche di regressione con R, http://cran.r-project.org/doc/contrib/Ricci --regression-it.pdf

[104] RIPLEY, B. (1998): Re: Generalized least squared model with known covariance matrix, University of Oxford, UK, http://www.math.yorku.ca/Who/Faculty/Monette/S-news/0084.html.

[105] ROBISON-COX, J. (1998): Re: Generalized least squared model with known covariance matrix, Montana State University, US, http://www.math.yorku.ca/Who/Faculty/Monette/S-news/0078.html.

[106] RUFINO, M. M., STELZENMÜLLER, V., MAYNOU, F. and ZAUKE, G. (2005): Assessing the performance of linear geostatistical tools applied to artificial fisheries data, Institut de Ciències del Mar, Barcelona, Spain, www.elsevier.com/locate/fishres.

[107] SAFI, S. and WHITE, A. (2006): The Efficiency of OLS In The Presence Of Auto-Correlated Disturbances in Regression Models, **Journal of Modern Applied Statistical Methods**, 5, 107-117.

[108] SAHA, S. (2003): Designs for Multiresponse models, http://www.stat.ufl.edu/~ssaha/AdvancedDesignReport.pdf.

[109] SAMARSKI, A. A. (1986): **Introducción a los métodos numéricos**, Editorial MIR Moscú.

[110] SAS (2008): SAS/STAT® 9.2 User's Guide, SAS Institute Inc., http://support.sas.com.

[111] SAS ONLINEDOC™: VERSION 8 (1999): The MODEL Procedure, http://frontpage.bus.lsu.edu/academics/economics/faculty/chill/personal/econ7631/sasco de/chap14ets.pdf.

[112] SASTRE, L. y MANSILLA, R. (1988): **Modelación matemática de sistemas biológicos**, Editorial CENIC, La Habana.

[113] SCALES, L. E. (1985): **Introduction to Non-Linear Optimization,** Springer-Verlag New York.

[114] SCIENTIFIC SOFTWARE INTERNATIONAL (2003): Lisrel, http://www.ssicentral.com/lisrel/mainlis.htm.

[115] SCHENDEL, U. (1984): **Introduction to numerical methods for parallel computer**s, Ellis Horwood Limited, Boston.

[116] SCHWETLICK, H. (1991): **Nonlinear Parameter Estimation: Models, Criteria and Algorithms**, http://www.math.tu-dresden.de/~schwetli/papers/nlpe_dundee.ps.

[117] SEARLE, S. R. (1971): **Linear Models**, John Wiley & Sons, N. York.

[118] SHERROD, P. H. (2003): NLREG, Nonlinear Regression Analysis Program, http://www.nlreg.com/NLREG.pdf.

[119] SMITH D. (2005): Analyzing Large Data Sets with S-PLUS® 7 Enterprise Developer, Insightful Corporation, http://www.hearne.com.au/attachments/S-Plus%207%20Technical%20Paper.pdf.

[120] SMITH, D. L. (1993): A Least-Squares Computational "Tool Kit", Argonne National Laboratory, Illinois, http://www.osti.gov/energycitations/servlets/purl/10176638-uUIhTq/10176638.PDF.

[121] STANFORD EXPLORATION PROJECT (2000): Multivariate least squares, http://sep.stanford.edu/sep/prof/gee/lsq/paper_html/node7.html#SECTION00120000000000000000.

[122] STRUCTURAL EQUATION MODELING (2002), http://www2.uta.edu/sswmindel/S6341/Class Lecture Sup/SEM/Principles of SEM.pdf-

[123] SUÁREZ, M. (1988): **Matemática Numérica (Continuación**), Editorial Pueblo y Educación, La Habana.

[124] TAMAYO, M. H. y BORGES, M. A. (1984): **Métodos numéricos en ecuaciones diferenciales y ajuste de curvas,** Editorial Pueblo y Educación, La Habana.

[125] TELLINGHUISEN, J. (2005): Statistical error in isothermal titration calorimetry: Variance function estimation from generalized least squares, www.elsevier.com/locate/yabio.

[126] THISTED, R. (1988) **Elements of Statistical Computing, Numerical computation**, Chapman and Hall, London.

[127] TORUNCHA, R. y VALDIVIESO, M., (1987): **Mínimos cuadrados no lineales** (Trabajo de diploma), Facultad de Matemática-Cibernética, Universidad de La Habana.

[128] TURNER, H. and FIRTH, D. (2007): Generalized nonlinear models in R: An overview of the gnm package,
http://www.ncrm.ac.uk/research/outputs/publications/WorkingPapers/2007/0607_overview_of_the_gnm_package.pdf.

[129] UCLA (no aparece fecha pon la de tu consulta): Stat Consulting Support Policies for R, http://www.ats.uda.edu/stat/r/StatConsultingSupportR.htm.

[130] VAN DONKELAAR, E. T. (2000): Improvement of efficiency in identification and model predictive Control of industrial processes, A flexible linear parametrization approach, http://www.dcsc.tudelft.nl/Research/PublicationFiles/publication-5739.pdf.

[131] VINOD, H. D. (no aparece fechaidem) : Notes on R Language for Statistical Computing, www.fordham.edu/economics/vinod/r-lang.doc.

[132] VOLKOV, E. A. (1990): **Métodos Numéricos**, Editorial Mir Moscú

[133] WIKIMEDIA FOUNDATION (2008): Feasible generalized least squares, http://en.wikipedia.org/wiki/Feasible_Generalized_Least_Squares

[134] WIKIMEDIA FOUNDATION (2008): Least squares, http://en.wikipedia.org/wiki/Least_squares.

[135] WILKINSON, J. H. and REINSCH, C. (1971): **Linear Algebra**, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg.

[136] ZANELLA, A., BOARI, G. and ZAPPA, D. (2000): Multivariate Models and Methods in Technology, htttp://www.dms.unina.it/sis2003/Lavori/Zanella.pdf.

[137] ZOONEKYND, V. (2007): Regression, http://zoonek2.free.fr/UNIX/48_R/09.html