

# **Efecto de Distintos Tipos de Perturbación Sobre la Regularización de Problemas Mal Condicionados**

por

Mauricio Andrés Osorio Lema

Trabajo presentado como requisito parcial  
para optar al Título de

Magister en Matemáticas

Director: Carlos E. Mejía S.

Universidad Nacional de Colombia  
Sede Medellín

Facultad de Ciencias

Escuela de Matemáticas

Septiembre 2003

Este trabajo ha sido apoyado por la Dirección Nacional de Investigaciones de la Universidad Nacional de Colombia, Proyecto Código DI00C1236

# Resumen

En este trabajo se estudia el efecto que distintos tipos de perturbación tienen sobre los métodos de selección automática de parámetros y el consiguiente resultado en la regularización por molificación, de problemas mal condicionados. Para ello se introduce el concepto de Ruido no Blanco, entre los que se destacan el Movimiento Browniano Fraccional (fBm), el ruido  $1/f$  (o Pink Noise) y el ruido de Cauchy, y se mencionan algunas de las estrategias existentes para simularlos numéricamente. Posteriormente se hace una exposición de la implementación del método de la molificación y el efecto regularizante que ésta tiene sobre problemas mal condicionados, como el problema de la diferenciación numérica y el problema inverso de conducción de calor (IHCP). Finalmente se estudia por medio de ejemplos, el efecto que sobre la molificación tiene el agregar un ruido determinado (tanto blanco, como no blanco) a un conjunto de datos exactos y realizar la selección del parámetro de molificación usando  $L$ -Curva, Validación Cruzada Generalizada (GCV) y discrepancia. En la implementación de los dos primeros procedimientos de selección automática de parámetros no se requiere conocimiento alguno sobre el máximo nivel de perturbaciones en los datos.

# Contenido

Introducción	viii
<b>1 RUIDOS NO BLANCOS</b>	<b>1</b>
1.1 Introducción	1
1.2 Definición	1
1.3 Movimiento Browniano Fraccional y Ruido Fraccional Gaussiano	2
1.3.1 Definición	2
1.3.2 Métodos de Simulación	4
1.3.2.1 Métodos Exactos	4
1.3.2.2 Métodos Aproximados	5
1.4 Ruido $1/f$	6
1.4.1 Definición	6
1.4.2 Simulación del Ruido $1/f$	7
1.5 Ruido de Cauchy	7
<b>2 MOLIFICACIÓN</b>	<b>9</b>
2.1 Introducción	9
2.2 Definición	10
2.3 Consistencia y Estabilidad de la Molificación	10

2.4	Molificación Discreta . . . . .	11
2.4.1	Cálculo de la Molificación Discreta . . . . .	12
2.4.2	Extensión de los datos . . . . .	14
2.5	Selección del parámetro de Molificación . . . . .	17
2.5.1	El Principio de Discrepancia . . . . .	18
2.5.2	$L - Curva$ : . . . . .	18
2.5.3	Validación Cruzada Generalizada (GCV) . . . . .	20
2.6	Regularización, selección automática de parámetros y tipo de ruido. . .	21
<b>3</b>	<b>APLICACIONES</b>	<b>23</b>
3.1	Primera Derivada . . . . .	23
3.1.1	Diferenciación Discreta . . . . .	24
3.2	Problema Inverso de Conducción de Calor, unidimensional . . . . .	25
3.2.1	Formulación del problema . . . . .	26
3.2.2	Problema Estabilizado . . . . .	27
3.2.3	Aproximación por Diferencias Finitas . . . . .	27
<b>4</b>	<b>EJEMPLOS NUMÉRICOS</b>	<b>30</b>
4.1	Introducción . . . . .	30
4.2	Ejemplos de Diferenciación Numérica . . . . .	31
4.2.1	Ejemplo 1 . . . . .	31
4.2.2	Ejemplo 2 . . . . .	32
4.2.3	Ejemplo 3 . . . . .	32
4.2.4	Tablas . . . . .	33
4.2.5	Gráficos . . . . .	36

4.3	<b>Ejemplos del Problema Inverso de Conducción de Calor (IHCP) uni-</b>	
	<b>dimensional:</b> . . . . .	45
4.3.1	<b>Ejemplo 1</b> . . . . .	45
4.3.2	<b>Ejemplo 2</b> . . . . .	47
4.3.3	<b>Tablas</b> . . . . .	48
4.3.4	<b>Gráficas:</b> . . . . .	49
	<b>Bibliografía</b>	<b>56</b>

# Agradecimientos

Quisiera agradecer a todas aquellas personas que de una u otra forma, colaboraron en la realización de este trabajo:

- A Carlos Mejía S., por su certera labor como asesor de este trabajo y por su constante apoyo e interés por el buen desarrollo del mismo.
- A mi novia Jilsan, quien siempre estuvo brindándome sus fuerzas en los momentos en los que más lo necesitaba.
- A la Universidad Nacional y en especial a la Escuela y el Posgrado de Matemáticas, porque no sólo me brindaron la posibilidad de llevar a cabo mis estudios de maestría, sino que también me ofrecieron la oportunidad de desarrollar mi gusto por la actividad docente.

# Introducción

Los problemas mal condicionados fueron definidos por Hadamard a comienzos del siglo anterior, y desde entonces ha crecido el interés de un buen número de investigadores, en muy diversas áreas, en su estudio, comprensión y solución. Día a día, los investigadores (incluyendo aquellos que trabajan con matemática aplicada) tratan de reproducir de una manera adecuada, algunos procesos presentados en campos como la ingeniería, medicina, física, biología, etc., formando incluso grupos multidisciplinarios.

En todos los problemas mal condicionados es común contar con un conjunto de datos  $y^\varepsilon$  que son el producto de mediciones del dato exacto  $y$ , y que tienen perturbaciones (ruidos) de las que generalmente no se conoce su magnitud, y en la mayoría de los casos tampoco su tipo.

Y dada la alta frecuencia de la aparición de este tipo de problemas, se ha hecho necesario diseñar técnicas que estimen sus soluciones con un adecuado grado de confiabilidad. Estos son los llamados métodos de regularización [10], [23], entre los cuales podemos encontrar métodos tan conocidos como el método de Tikhonov y otros de más reciente difusión, como es el método de molificación. En todos estos es común encontrar un parámetro  $\alpha$  que tiene como fin, garantizar que la solución calculada esté cercana a la solución exacta (es decir, aquella que tendría el problema sin perturbaciones). Sin embargo, surge el interrogante: ¿Cómo encontrar  $\alpha$ ?, lo que obliga a la aparición de los métodos de selección de parámetros, como un proceso intermedio de muchos de los métodos de regularización, y que en la mayoría de casos consiste en procesos estadísticos que buscan minimizar el error.

La selección automática de parámetros de regularización es tema actual de investigación. Lo deseable es que los métodos se puedan implementar sin conocimiento del máximo nivel de ruido en los datos. Este objetivo lo cumplen dos de los procedimientos que consideramos aquí, la  $L - Curva$  y la Validación Cruzada Generalizada (GCV) [10], [16], [25], [26]. El tercer método que consideramos, llamado Método de Discrepancia, [9], [10], [23], requiere de dicha información para poderse implementar. Esto se debe, probablemente a que es el primero en aparecer, hacia 1963.

Si se hace una revisión de muchos de los más importantes trabajos realizados sobre regularización de problemas mal condicionados (por ejemplo, [10], [12], [23]), se puede encontrar que sus autores siempre agregan a una cierta función (generalmente discreta y que correspondería al caso ideal de datos sin ruido), un ruido proveniente de una distribución normal con media cero y varianza constante, que es lo que comúnmente se define como ruido blanco [8]. Sin



embargo, la naturaleza se comporta de muy diversas formas, y el ruido blanco, aunque común, no es el único tipo de ruido presente en la toma de datos. En campos tan diversos como la meteorología, telecomunicaciones, mediciones de tiempo [8], electrónica, en casi toda la música [4], etc. es muy común encontrar ruidos (o perturbaciones) que debido a sus características, no encajan dentro del concepto de ruido blanco. Estos son los llamados *Ruidos No Blancos* y forman un amplio campo, entre los que cabe resaltar el Movimiento Browniano Fraccional, el ruido  $1/f$  y el ruido de Cauchy.

Es importante anotar que Hansen en [11], al hablar sobre las bondades de la  $L - curva$ , menciona como una de las principales, que funciona bien aún en el caso de ruidos no blancos, mientras GCV parece no hacerlo bien. Sin embargo, lo muestra usando el método de Tikhonov y agregando a datos exactos una perturbación simulada que, aunque no es un ruido blanco, tampoco corresponde a alguna de las perturbaciones mencionadas anteriormente y que se presentan en la vida diaria.

En el presente trabajo se estudia el efecto que distintos tipos de ruidos, tanto blancos como no blancos, de los que se presentan con mayor frecuencia en la naturaleza, tienen sobre la regularización de problemas mal condicionados. Para ello usaremos el método de Molificación, que se ha probado como una excelente técnica regularizante y que día a día se perfecciona y amplía su campo de acción. Se ha venido utilizando con éxito en problemas tan diversos y difíciles como: *Diferenciación Numérica* [14], *Problema Inverso de Conducción de Calor* [7], *Identificación Numérica de Coeficientes de Difusividad, la ecuación integral de Abel, etc.* Lo anterior permite extender los resultados existentes, no sólo sobre molificación sino sobre regularización en general, donde sólo se trabaja con ruidos blancos.

El desarrollo del trabajo se hace en cuatro capítulos. En el primero de ellos se introduce el concepto de *Ruido no Blanco* y se mencionan algunas de las técnicas que permiten simularlos. En el segundo capítulo se define la molificación y se discute la implementación de los distintos métodos de selección automática del parámetro de molificación, que nos interesa y, además, se muestra la escasa información que se tiene sobre el efecto del tipo de perturbación sobre la selección del parámetro de regularización y, por consiguiente sobre la regularización misma. En el tercer capítulo, se presentan dos problemas mal condicionados, que utilizaremos en el estudio del efecto del tipo de perturbación, sobre la molificación; estos son: El problema de la diferenciación numérica y el Problema Inverso de Conducción de Calor. Aquí mostramos teoremas de consistencia y estabilidad. Finalmente, en el capítulo cuatro se muestran los resultados numéricos obtenidos con cinco ejemplos, con el fin de apreciar el efecto que se está estudiando. Todos estos ejemplos son resueltos con la ayuda de rutinas propias desarrolladas en MATLAB 6.0.

# Capítulo 1

## RUIDOS NO BLANCOS

### 1.1 Introducción

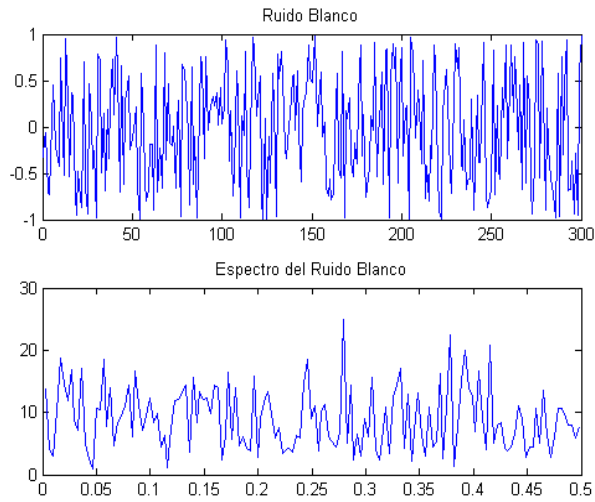
En la naturaleza es común encontrar fenómenos que sin necesidad de ser muy complejos o extraños, no se pueden modelar teniendo en cuenta el concepto de ruido blanco.

En este capítulo se introduce el concepto de Ruido no Blanco y se muestran varios tipos de estos, junto con la manera de simularlos numéricamente. No se pretende agotar el campo de los ruidos no blancos pues, como se podrá deducir, existe una gran cantidad de estos, así que sólo se mostrarán algunos de los más importantes y que se presentan con frecuencia en varios fenómenos físicos.

### 1.2 Definición

El tipo más simple de ruido es el ruido blanco, en el cual el valor de la señal en cualquier tiempo es aleatorio, con media cero y varianza constante. Generalmente, conforma una distribución normal, en la que el presente es completamente independiente del pasado. Puede obtenerse como la derivada (en sentido distribucional), de un movimiento browniano [8]. Es el tipo de ruido que se acostumbra usar en las simulaciones de regularización de problemas mal

condicionados. (Ver figura 1)



*Figura 1. Ruido Blanco*

Por otro lado, los ruidos no blancos, son aquellos ruidos que aunque pueden poseer media cero (o constante), su varianza no es constante. En este tipo de ruidos el presente y el pasado están correlacionados, es decir, la historia es importante [4]. Además, generalmente no conforman una distribución normal. A este tipo de ruidos también se les acostumbra denominar errores correlacionados.

## 1.3 Movimiento Browniano Fraccional y Ruido Fraccional Gaussiano

### 1.3.1 Definición

Mandelbrot y Van Ness introducen el concepto de movimiento fraccional browniano (fBm) como una generalización del movimiento browniano. El fBm es un proceso estocástico gaussiano de media cero no estacionario, es decir, sus principales propiedades estadísticas dependen del tiempo [24]. Depende de un parámetro  $H$  en el rango  $0 < H < 1$ , llamado parámetro de Hurst.

Los casos en los que  $H \neq 1/2$  son propiamente fraccionales, si  $H = 1/2$  estaremos en el caso del movimiento browniano tradicional. El carácter no estacionario del fBm es revelado por la estructura de su función de covarianza:

$$r(s, t) = \frac{\sigma^2}{2} \left( |t|^{2H} + |s|^{2H} - |t - s|^{2H} \right) \quad s, t \geq 0$$

valores crecientes de  $H$  hacen que sus variaciones sean más suaves, mientras que los gráficos se hacen más escarpados cuando  $H$  se aproxima a cero [3],[24] (ver figura 2). Además, en su espectro de frecuencias se puede notar la presencia de altas frecuencias.

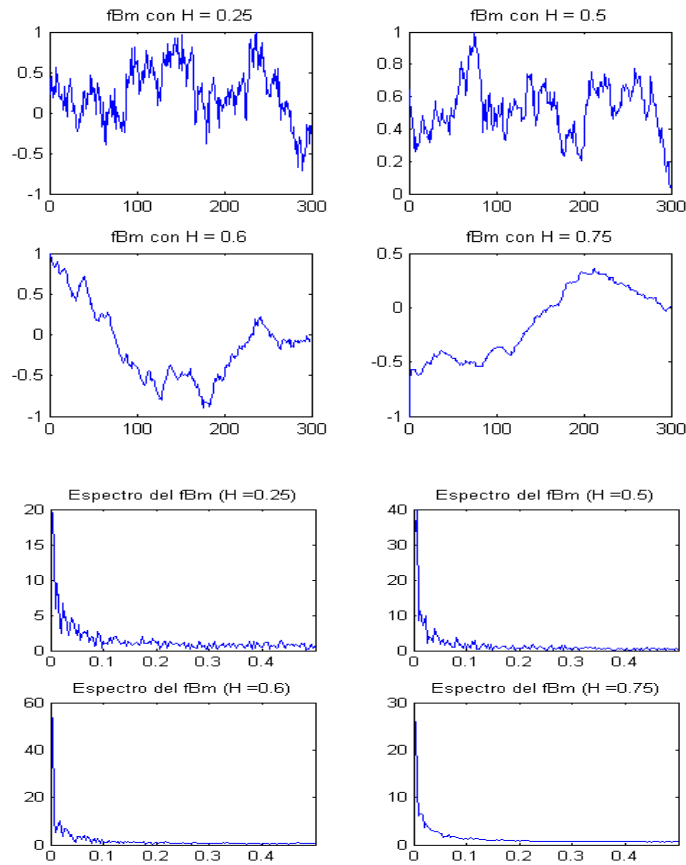


Figura 2. fBm para distintos valores de  $H$ , y su correspondiente espectro.

Estrictamente hablando, el fBm no posee derivada tradicional (sólo en sentido distribucional). Es por esto que se introduce una versión suavizada del fBm, al integrarlo sobre un intervalo arbitrariamente pequeño. Desde el punto de vista práctico la función original y la versión suavizada son indistinguibles. El suavizamiento remueve las variaciones de alta frecuencia del fBm y genera una función derivable que Mandelbrot y Van Ness denominaron ruido fraccional Gaussiano (fGn) [24].

El fBm se presenta muy comunmente, en varios fenómenos naturales. Se ha utilizado con mucho éxito para modelar patrones de lluvias, líneas costeras, nubes y otros fenómenos meteorológicos. Igualmente, se ha encontrado con mucha frecuencia en el campo de las telecomunicaciones, en especial en el tráfico de internet ([3], [4]).

Se pueden encontrar en la literatura, varios métodos utilizados para simularlo:

### 1.3.2 Métodos de Simulación

#### 1.3.2.1 Métodos Exactos

Existen varios métodos exactos que permiten simular un fBm [5], entre estos tenemos:

- El Método de Cholesky: Es un método recursivo que hace uso de la descomposición de Cholesky de la matriz de covarianza. Esto significa que la matriz de covarianza  $\Gamma(n)$  puede ser escrita en la forma  $L(n)L(n)'$ , donde  $L(n)$  es una matriz  $(n+1) \times (n+1)$  triangular inferior y  $L(n)'$  es su transpuesta. Tal descomposición existe siempre y cuando la matriz de covarianza sea una matriz simétrica definida positiva.

Denotemos  $V(n) = (V_i)_{i=0, \dots, n}$  un vector columna de  $(n+1)$  variables aleatorias normales de media cero y varianza uno. Se puede demostrar que

$$X(n) = L(n)V(n)$$

es un vector columna de  $(n+1)$  variables aleatorias que comprenden un fBm.

Como puede apreciarse, es un método bastante fácil de implementar en Matlab, pero tiene la desventaja de ser muy lento debido al cálculo intermedio de la descomposición de Cholesky, y su almacenamiento en memoria. La figura 2 fue generada usando este método en Matlab.

- El Método de Hosking y el Método de Wood y Chan, son otros métodos exactos para simular un fBm, el primero de estos es similar al método de la descomposición de Cholesky, mientras el segundo es un método novedoso que hace uso de la transformada rápida de Fourier para simular de una manera rápida un fBm (ver [5]).

### 1.3.2.2 Métodos Aproximados

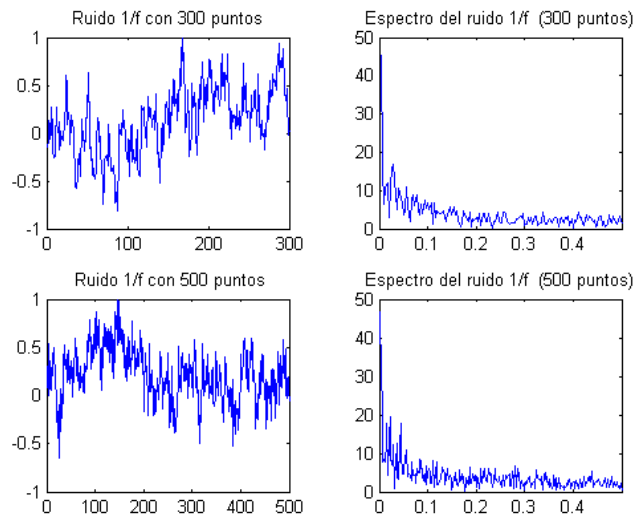
Existen una gran cantidad de métodos que permiten simular de una manera aproximada un fBm, la mayor parte de estos tienen la ventaja de requerir mucho menos tiempo de cómputo que los métodos exactos. Entre los métodos aproximados tenemos (ver [5], [24]):

- Método de representación estocástica.
- Procesos de paquetes agregados.
- Desplazamiento aleatorio del punto medio.
- Simulación espectral.
- Método de Paxson.
- Método de la matriz circulante aproximada.
- Simulación basada en ondas.

## 1.4 Ruido 1/f

### 1.4.1 Definición

Fue descubierto por el físico estadounidense Richard F. Voss. El ruido 1/f es un proceso aleatorio con variaciones más suaves que el ruido blanco, pero más acusadas que el movimiento browniano [20] (ver figura 3). De hecho, no existen modelos matemáticos simples capaces de reproducir el ruido 1/f. Se agrupan también con el nombre genérico de ruidos 1/f todos aquellos procesos aleatorios con densidades espectrales de la forma  $1/f^\beta$ , con  $0.5 < \beta < 1.5$ , de donde recibe su nombre [4]. Su espectro de frecuencias, muestra la presencia de altas frecuencias.



*Figura 3. Ruido 1/f y su correspondiente espectro*

A pesar de las dificultades teóricas que aún rodean la comprensión del ruido 1/f, cada vez se constata más su presencia en los procesos dinámicos aleatorios de la naturaleza. Estadísticas realizadas sobre fenómenos tan variados como las crecidas del río Nilo, las incertidumbres en la medición del tiempo por un reloj atómico o la variación de las manchas solares, parecen obedecer a densidades espectrales de tipo 1/f [8].

En casi todos los componentes electrónicos, desde las resistencias de carbón a los tubos de

vacío y en los semiconductores, se encuentra también presente el ruido  $1/f$ . El físico japonés T. Musha ha detectado la presencia de ruido  $1/f$  en las fluctuaciones de tráfico en autopistas. El ruido  $1/f$  desempeña un papel fundamental en el sistema sensorial humano. Se ha descubierto que las oscilaciones de las notas en todo tipo de melodías gratas al oído humano, desde la música clásica hasta la música moderna, tienen densidad espectral del tipo  $1/f$  [8].

### 1.4.2 Simulación del Ruido $1/f$

En [17], se reportan dos métodos publicados para simular un ruido de tipo  $1/f$ . Uno de los métodos utiliza un generador MLS, mientras el otro utiliza un proceso de filtrado adecuado, para transformar un ruido blanco en un ruido  $1/f$  (por este método fue obtenida la figura 3). Sin embargo, es posible utilizar un fBm para generar un ruido  $1/f$ , principalmente debido a que el espectro de potencia del fBm es de la forma  $1/f^{2H+1}$ , así que cuando  $H$  tiende a cero el fBm se hace cercano al ruido  $1/f$ .

## 1.5 Ruido de Cauchy

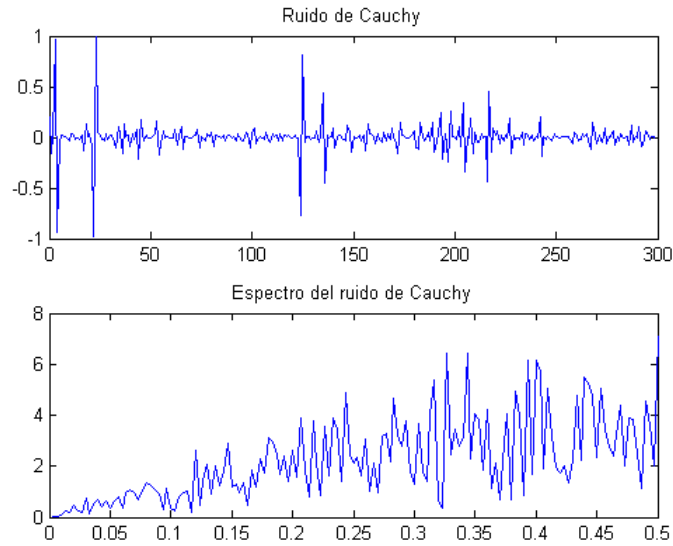
Como su nombre lo indica, el ruido de Cauchy se caracteriza por provenir de la distribución del mismo nombre, aparecida por primera vez en un artículo de Cauchy en 1853. Esta distribución de probabilidad, está definida por la función de densidad de probabilidad

$$f(x) = \frac{1}{\pi(1+x^2)}$$

y se caracteriza por no poseer ni media ni varianza definida, puesto que las integrales que las definen no existen, lo que permite incluir al ruido de Cauchy dentro del grupo de los ruidos no blancos (ver figura 4). Además, se caracteriza porque su espectro de frecuencias exhibe



preferencias por las bajas frecuencias.



*Figura 4. Ruido de Cauchy su correspondiente espectro*

Este tipo de ruidos se presenta con bastante frecuencia en la música y otros fenómenos sonoros, así como en las mediciones hechas de las emisiones de una fuente radioactiva [13].

Su simulación es bastante fácil bien sea a partir de la ecuación que define su función de densidad de probabilidad, o a partir de dos variables aleatorias normales estándar (es decir, con media cero y varianza uno). Se puede demostrar que si  $N1$  y  $N2$  son dos variables aleatorias normales estándar, entonces el cociente  $C = N1/N2$  tiene la distribución de Cauchy estándar [13]. Así se construyó la figura 3.

# Capítulo 2

## MOLIFICACIÓN

### 2.1 Introducción

Muchos problemas de importancia práctica, caen en el campo de los problemas inversos y mal condicionados, y los algoritmos de regularización son cruciales para resolverlos. El método de molificación se ha probado como un método apropiado para suavizar datos ruidosos y calcular soluciones aproximadas de problemas inversos y problemas mal condicionados ([19], [22], [23], [18]). Este método consiste en un proceso de filtrado que es apropiado para la regularización de una gran variedad de problemas, entre los que se tienen la diferenciación numérica, el problema inverso del calor, la identificación de coeficientes, la ecuación integral de Abel, la recuperación de superficies y la estimación de gradientes, los cuales fueron tratados por Murio y colaboradores en una buena cantidad de artículos ([1], [19], [22], [23], [21]).

En este capítulo se define la molificación para funciones con dominio en todo el eje real, posteriormente se define para funciones discretas y se verifica que en ambos casos se satisfacen los resultados clásicos de consistencia y estabilidad de la molificación. Para funciones discretas, implementamos un procedimiento de extensión de datos que permite molificar en todo el dominio de la función. Finalmente se discuten los métodos GCV, discrepancia y  $L - curva$ , para la selección automática del parámetro de molificación.

En todos los casos se supone que se cuenta con una versión aproximada de los datos, que han sido sometidos a un ruido que puede ser o no blanco, lo cual no afecta la teoría de molificación, pero puede afectar los procesos de selección automática de parámetros, como se mostrará en el último capítulo.

## 2.2 Definición

Sea  $p > 0, \delta > 0$  y  $A_p = \left( \int_{-p}^p \exp(-s^2) ds \right)^{-1}$ . La  $\delta$ -molificación de una función integrable está basada en la convolución con el kernel

$$\rho_{\delta,p}(t) = \begin{cases} A_p \delta^{-1} \exp\left(\frac{-t^2}{\delta^2}\right), & |t| < p\delta \\ 0, & |t| \geq p\delta \end{cases}$$

el  $\delta$ -molificador  $\rho_{\delta,p}$  es una función  $C^\infty(-p\delta, p\delta)$ , no negativa, que se hace cero fuera del intervalo  $(-p\delta, p\delta)$  y que satisface la condición

$$\begin{aligned} \int_{-p\delta}^{p\delta} \rho_{\delta,p}(t) dt &= \int_{-p\delta}^{p\delta} A_p \delta^{-1} \exp\left(\frac{-t^2}{\delta^2}\right) dt \\ &= A_p \delta^{-1} \int_{-p\delta}^{p\delta} \exp\left(\frac{-t^2}{\delta^2}\right) dt \\ &= A_p \delta^{-1} \left( \delta (A_p)^{-1} \right) \\ &= 1 \end{aligned}$$

Sea  $I = [a, b]$  y  $I_\delta = [a + p\delta, b - p\delta]$ . El intervalo  $I_\delta$  es no vacío cuando  $p < (b - a) / 2\delta$ . Un valor adecuado para  $p$  es  $p = 3$  [22].

Si  $f$  es integrable en  $I$ , definimos su  $\delta$ -molificación en  $I_\delta$  por la convolución

$$\begin{aligned} J_\delta f(t) &= \int_a^b \rho_\delta(t - s) f(s) ds \\ &= \int_{-p\delta}^{p\delta} \rho_\delta(s) f(t - s) ds \end{aligned}$$

La  $\delta$ -molificación de una función integrable satisface las conocidas condiciones de consistencia y estabilidad.

## 2.3 Consistencia y Estabilidad de la Molificación

**Teorema 2.3.1** (*Consistencia*):

Si  $f$  es uniformemente Lipschitz en  $I$ , con constante de Lipschitz  $L$ , entonces existe una constante  $C$  tal que

$$\|J_\delta f - f\|_{\infty, I_\delta} \leq C\delta$$

**Prueba.** Ver [18], [22] ■

**Teorema 2.3.2** (*Estabilidad*): Si  $f$  y  $f^\varepsilon$  son integrables sobre  $I$  y  $\|f - f^\varepsilon\|_{\infty, I} \leq \varepsilon$ , entonces

$$\|J_\delta f - J_\delta f^\varepsilon\|_{\infty, I_\delta} \leq \varepsilon$$

**Prueba.** Ver [18], [22] ■

## 2.4 Molificación Discreta

Para definir la  $\delta$ -molificación de una función discreta, consideremos  $n$  diferentes números en  $I$ , digamos  $t_1, t_2, \dots, t_n$ , y definamos  $\Delta t = \max_{1 \leq i \leq n-1} |t_{i+1} - t_i|$ . Además fijemos  $s_0 = a$ ,  $s_n = b$  y para  $j = 1, 2, \dots, n-1$ ,  $s_j = (1/2)(t_j + t_{j+1})$ . Sea  $G = \{g_j\}_{j=1}^n$ , la versión discreta de una función  $g$ , definida por  $g(t_i) = g_i$  en el conjunto  $K = \{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ . La  $\delta$ -molificación de  $G$ , está definida como

$$g_\delta(t) = \sum_{j=1}^n \left( \int_{s_{j-1}}^{s_j} \rho_\delta(t-s) ds \right) g_j$$

Los siguientes teoremas muestran que la  $\delta$ -molificación discreta también satisface condiciones de consistencia y estabilidad.

**Teorema 2.4.1** (*Consistencia de la molificación discreta*). Si  $g$  es uniformemente Lipschitz en  $I$ , con constante de Lipschitz  $L$ , entonces existe una constante  $C$ , tal que

$$\|g_\delta - g\|_{\infty, I_\delta} \leq C(\delta + \Delta t)$$

donde  $g_\delta$  es la  $\delta$ -molificación discreta de  $G = \{g_j\}_{j=1}^n$ , la versión discreta de  $g$ , definida por  $g(t_i) = g_i$ .

**Prueba.** Ver [18], [22] ■

En las mayoría de las aplicaciones, los únicos datos disponibles son una versión discreta y perturbada de  $g$ , denotada  $G^\varepsilon = \left\{g_j^\varepsilon\right\}_{j=1}^n$ , que satisface  $\|G - G^\varepsilon\|_{\infty, K} \leq \varepsilon$ .

**Teorema 2.4.2** (*Estabilidad de la molificación discreta*). Si las funciones discretas  $G$  y  $G^\varepsilon$  satisfacen  $\|G - G^\varepsilon\|_{\infty, K} \leq \varepsilon$ , entonces:

$$\|g_\delta^\varepsilon - g_\delta\|_{\infty, I_\delta} \leq \varepsilon$$

**Prueba.** Ver [22]. ■

**Teorema 2.4.3** (*Convergencia numérica de la molificación discreta*). Si  $g$  es uniformemente Lipschitz en  $I$ , con constante de Lipschitz  $L$ , y las funciones discretas  $G$  y  $G^\varepsilon$  satisfacen  $\|G - G^\varepsilon\|_{\infty, K} \leq \varepsilon$ , entonces hay una constante  $C$ , tal que

$$\|g_\delta^\varepsilon - g\|_{\infty, I_\delta} \leq C(\varepsilon + \delta + \Delta t)$$

**Prueba.** La prueba se sigue de los teoremas anteriores y de la desigualdad triangular

$$\|g_\delta^\varepsilon - g\|_{\infty, I_\delta} \leq \|g_\delta^\varepsilon - g_\delta\|_{\infty, I_\delta} + \|g_\delta - g\|_{\infty, I_\delta}$$

■

### 2.4.1 Cálculo de la Molificación Discreta

Trabajaremos con una malla uniforme con  $\Delta t = t_{j+1} - t_j$  para todo  $j \in \mathbb{Z}$ . En muchos casos, dada una función discreta  $G = \{g_j\}_{j=1}^m$ , necesitamos sólo evaluar  $J_\delta g(t_i)$  para algún  $i$ . Esto puede ser hecho de la siguiente manera:

Sea  $\tilde{g}(t) = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} g_j \chi_{[s_{j-1}, s_j)}(x)$ , entonces

$$\begin{aligned} J_\delta G(t_i) &= J_\delta \tilde{g}(t_j) \\ &= \int_{t_i - p\delta}^{t_i + p\delta} \rho_\delta(t_i - y) \tilde{g}(y) dy \\ &= \int_{-p\delta}^{p\delta} \rho_\delta(-y) \tilde{g}(t_i + y) dy \end{aligned}$$

Sea  $\eta$  el entero tal que

$$(\eta - 1) \Delta t \leq p\delta \leq \eta \Delta t$$

Entonces  $\eta = \lfloor p \frac{\delta}{\Delta t} \rfloor + 1$ . Donde  $\lfloor \quad \rfloor$  representa la función parte entera.

Obsérvese que esto indica que en el cálculo de  $J_\delta G(t_i)$  están involucrados a lo más  $\eta$  datos a la izquierda de  $t_i$ ,  $\eta$  datos a la derecha de  $t_i$  y, por supuesto, el dato en  $t_i$ . Para aprovechar esto, definamos  $x_{j,i} = s_{i+j} - t_i$ , para  $-\eta - 1 \leq j \leq \eta$ . Entonces:

$$J_\delta G(t_i) = \sum_{j=-\eta}^{\eta} \int_{x_{j-1,i}}^{x_{j,i}} \rho_\delta(-y) \tilde{g}(t_i + y) dy \quad (2.1)$$

$$= \sum_{j=-\eta}^{\eta} \left( \int_{x_{j-1,i}}^{x_{j,i}} \rho_\delta(-y) dy \right) g_{i+j} \quad (2.2)$$

pues si:  $x_{j-1,i} \leq y < x_{j,i}$ , entonces:  $s_{i+j-1} - t_i \leq y < s_{i+j} - t_i$ , de donde:  $s_{i+j-1} \leq y + t_i < s_{i+j}$ , lo que implica que:  $\tilde{g}(t_i + y) = g_{i+j}$ .

Ahora, teniendo en cuenta que  $t_i = t_0 + i\Delta t$  y que  $s_i = t_0 + (i + \frac{1}{2}) \Delta t$ , entonces:

$$\begin{aligned} x_{j,i} &= s_{i+j} - t_i \\ &= t_0 + \left(i + j + \frac{1}{2}\right) \Delta t - t_0 - i\Delta t \\ &= \left(j + \frac{1}{2}\right) \Delta t := U_j \end{aligned}$$

Así que los límites de integración en (2.1) son independientes de  $i$  y obtenemos:

$$J_\delta G(t_i) = \sum_{j=-\eta}^{\eta} W_j g_{i+j} \quad (2.3)$$

donde,

$$W_j = \int_{U_{j-1}}^{U_j} \rho_\delta(-y) dy$$

de donde se puede calcular la molificación discreta.

## 2.4.2 Extensión de los datos

Obsérvese que para  $m$  valores de  $g$ , la fórmula anterior es aplicable sólo para  $i = \eta + 1, \dots, m - \eta$ . Así que para los demás valores de  $i$  es necesario hacer una extensión de los datos de  $g$ , de alguna manera.

Lo que se prefiere es extender  $g$ , a una función  $g^*$ , que satisfaga:  $\|J_\delta(g^*) - g\|_2$  es mínimo en  $[b - p\delta, b]$  [18]. Sin pérdida de generalidad trabajaremos con  $p = 3$ . Si se asigna de antemano una forma especial a la extensión, un polinomio por ejemplo, los cálculos se facilitan. Para polinomios lineales la única solución, en el extremo derecho, está dada por el siguiente teorema:

### Teorema 2.4.4 (Extensión)

Suponga que  $f$  es una función de variable y valor real, de cuadrado integrable en  $[a, b]$ . Existen constantes  $c$  y  $d$  tales que si  $f(t)$  es extendida al hacer  $f(t) = ct + d$ , para toda  $t \in [b, b + 3\delta]$ , entonces

$$\|J_\delta(f) - f\|_2^2$$

es mínimo en  $[b - 3\delta, b]$ . Para la norma definida por

$$\|f\|_2 = \left( \int_{b-3\delta}^b [f(t)]^2 dt \right)^{1/2}$$

**Prueba.** La función de varias variables

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(c, d) &= \|J_\delta(f) - f\|_2^2 \\ &= \int_{b-3\delta}^b \left[ \left( \int_{-\infty}^{\infty} \rho_\delta(s) f(t-s) ds \right) - f(t) \right]^2 dt \\ &\quad \int_{b-3\delta}^b \left[ \int_a^b \rho_\delta(t-s) f(s) ds + \int_b^{b+3\delta} (ct+d) \rho_\delta(t-s) - f(t) \right]^2 dt, \end{aligned}$$

alcanza su mínimo valor cuando:  $\nabla \mathcal{F}(c, d) = 0$ , lo cual ocurre en:

$$c = \frac{RM' - MN'}{NN' - RR'} \qquad d = \frac{MR' - NM'}{NN' - RR'} \qquad \text{donde:}$$

$$\begin{aligned} M &= \int_{b-3\delta}^b \left[ \int_a^b \rho_\delta(t-s) f(s) ds - f(t) \right] \left[ \int_b^{b+3\delta} \rho_\delta(t-s) ds \right] dt \\ M' &= \int_{b-3\delta}^b \left[ \int_a^b \rho_\delta(t-s) f(s) ds - f(t) \right] \left[ \int_b^{b+3\delta} s \rho_\delta(t-s) ds \right] dt \\ N &= \int_{b-3\delta}^b \left[ \int_b^{b+3\delta} s \rho_\delta(t-s) ds \right] \left[ \int_b^{b+3\delta} \rho_\delta(t-s) ds \right] dt = N' \\ R &= \int_{b-3\delta}^b \left[ \int_b^{b+3\delta} \rho_\delta(t-s) ds \right]^2 dt \\ R' &= \int_{b-3\delta}^b \left[ \int_b^{b+3\delta} s \rho_\delta(t-s) ds \right]^2 dt \end{aligned}$$

■

Un teorema similar se cumple en el extremo izquierdo del intervalo.

Según lo anterior, podemos encontrar dos funciones  $g^{**}, g^*$  que extienden a la función  $\tilde{g}$  a la izquierda y a la derecha del intervalo, respectivamente.

Después de hacer la extensión de los datos, podemos definir el vector:

$$G_{ext}^\varepsilon = [g_{-\eta}^{**}, g_{-\eta+1}^{**}, \dots, g_{-1}^{**}, g_1^\varepsilon, g_2^\varepsilon, \dots, g_{m-1}^\varepsilon, g_m^\varepsilon, g_1^*, \dots, g_{\eta-1}^*, g_\eta^*]$$

Ahora, teniendo en cuenta lo anterior y la expresión (2.3), tenemos, para:

$$\begin{aligned} g_i &= g_i^\varepsilon & i &= 1, 2, \dots, m \\ g_{-i} &= g_{-i-1}^{**} & i &= 0, 1, \dots, \eta - 1 \\ g_i &= g_{i-m}^* & i &= m + 1, m + 2, \dots, m + \eta \end{aligned}$$



el sistema:

$$\begin{aligned}
J_\delta G^\varepsilon(t_1) &= g_\delta^\varepsilon(x_1) = W_{-\eta}g_{-\eta+1} + W_{-\eta+1}g_{-\eta+2} + \dots + W_0g_1 + \dots + W_\eta g_{\eta+1} \\
J_\delta G^\varepsilon(t_2) &= g_\delta^\varepsilon(x_2) = W_{-\eta}g_{-\eta+2} + W_{-\eta+1}g_{-\eta+3} + \dots + W_0g_2 + \dots + W_\eta g_{\eta+2} \\
&\vdots \\
J_\delta G^\varepsilon(t_\eta) &= g_\delta^\varepsilon(x_\eta) = W_{-\eta}g_0 + W_{-\eta+1}g_1 + \dots + W_0g_\eta + \dots + W_\eta g_{2\eta} \\
J_\delta G^\varepsilon(t_{\eta+1}) &= g_\delta^\varepsilon(x_{\eta+1}) = W_{-\eta}g_1 + W_{-\eta+1}g_2 + \dots + W_0g_{\eta+1} + \dots + W_\eta g_{2\eta+1} \\
&\vdots \\
J_\delta G^\varepsilon(t_{m-\eta}) &= g_\delta^\varepsilon(x_{m-\eta}) = W_{-\eta}g_{-2\eta+m} + W_{-\eta+1}g_{-2\eta+m+1} + \dots + W_0g_{m-\eta} + \dots + W_\eta g_m \\
J_\delta G^\varepsilon(t_{m-\eta+1}) &= g_\delta^\varepsilon(x_{m-\eta+1}) = W_{-\eta}g_{-2\eta+m+1} + W_{-\eta+1}g_{-2\eta+m+2} + \dots + W_\eta g_{m+1} \\
&\vdots \\
J_\delta G^\varepsilon(t_m) &= g_\delta^\varepsilon(x_m) = W_{-\eta}g_{m-\eta} + W_{-\eta+1}g_{m-\eta+1} + \dots + W_0g_m + \dots + W_\eta g_{m+\eta}
\end{aligned}$$

o en forma matricial:

$$\left[ \begin{array}{cccccccccccc}
W_{-\eta} & W_{-\eta+1} & W_{-\eta+2} & \dots & W_0 & W_1 & \dots & W_\eta & 0 & 0 & \dots & 0 \\
0 & W_{-\eta} & & \dots & W_{-1} & W_0 & \dots & W_{\eta-1} & W_\eta & 0 & \dots & 0 \\
0 & 0 & W_{-\eta} & \dots & W_{-2} & W_{-1} & \dots & W_{\eta-2} & W_{\eta-1} & W_\eta & \dots & 0 \\
\vdots & & & & & & & & & & & \\
0 & 0 & 0 & \dots & W_{-\eta+1} & W_{-\eta+2} & \dots & W_1 & W_2 & W_3 & \dots & W_\eta & \dots & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & W_{-\eta} & W_{-\eta+1} & \dots & W_0 & W_1 & W_2 & \dots & W_{\eta-1} & \dots & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & W_{-\eta} & \dots & W_{-1} & W_0 & W_1 & \dots & W_{\eta-2} & \dots & 0 \\
\vdots & & & & & & & & & & & & & \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & & & & & & \dots & W_{\eta-1} & W_\eta & \dots & 0
\end{array} \right]_{m \times (m+2\eta)}$$

$$* \begin{bmatrix} g_{-\eta}^{**} \\ g_{-\eta+1}^{**} \\ \vdots \\ g_{-1}^{**} \\ g_1^\varepsilon \\ \vdots \\ g_m^\varepsilon \\ \vdots \\ g_{\eta-1}^* \\ g_\eta^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_\delta^\varepsilon(t_1) \\ g_\delta^\varepsilon(t_2) \\ \vdots \\ g_\delta^\varepsilon(t_\eta) \\ g_\delta^\varepsilon(t_{\eta+1}) \\ \vdots \\ g_\delta^\varepsilon(t_{m-\eta}) \\ \vdots \\ g_\delta^\varepsilon(t_{m-1}) \\ g_\delta^\varepsilon(t_m) \end{bmatrix}$$

Es decir, obtenemos la molificación en la forma:

$$A_\delta G_{ext}^\varepsilon = g_\delta^\varepsilon$$

con  $A_\delta$ , la matriz circulante  $(m \times (m + 2\eta))$  que se mostró más arriba, donde la primera fila está dada por

$$(A_\delta)_{1j} = \begin{cases} W_{-\eta+j-1}, & j = 1, 2, \dots, 2\eta + 1 \\ 0, & j = 2\eta + 2, \dots, 2\eta + m \end{cases}$$

De donde se puede notar que el número de ceros en la primera fila (y por tanto en todas) es  $m + 2\eta - (2\eta + 1) = m - 1$ .

## 2.5 Selección del parámetro de Molificación

Ningún método de regularización (incluido el método de molificación) es completo sin un método para elegir el parámetro de regularización. Para problemas discretos mal condicionados, la elección del parámetro de regularización es una tarea complicada pues tanto el error de la perturbación como el error en la regularización, afectan la elección del parámetro de regularización [10].

Los métodos de selección de parámetros pueden ser divididos en dos clases, dependiendo del conocimiento o no del nivel máximo de ruido  $\varepsilon$ . Las dos clases pueden ser caracterizados como:

- Métodos basados en el conocimiento, o una buena estimación de  $\varepsilon$ .
- Métodos que no requieren un conocimiento previo de  $\varepsilon$ , pero que en lugar de esto buscan extraer esta información de los datos dados.

### 2.5.1 El Principio de Discrepancia

El método más importante basado en el conocimiento de  $\varepsilon$  es el principio de discrepancia, usualmente atribuido a Morosov. Si el problema mal condicionado es consistente, la idea es simplemente elegir el parámetro de regularización  $\delta$  tal que la norma residual es igual a una cota  $\eta_\varepsilon$  fijada a priori para  $\varepsilon$ . Es decir:

$$\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|_\infty = \eta_\varepsilon \quad \text{donde} \quad \varepsilon \leq \eta_\varepsilon$$

lo cual se puede resolver por un método como el de bisección [23].

### 2.5.2 $L - Curva$ :

La  $L - Curva$  no es más que un gráfico paramétrico en el que se muestra el comportamiento de  $\|g_\delta^\varepsilon\|$  (norma de la solución regularizada), con respecto a la norma del residual  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$ . El principio de la  $L - Curva$  es bastante intuitivo y responde directamente a la meta de los métodos de estimación. Para apreciar ésto, nótese que conforme el valor del parámetro  $\delta$  decae a cero, el valor de la norma del residual  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$  también decae a cero, pero  $\|g_\delta^\varepsilon\|$  puede crecer indefinidamente conforme  $\delta$  decrece (debido al error de perturbación); ahora, cuando  $\delta$  crece, el error de regularización decae y con él  $\|g_\delta^\varepsilon\|$ , pero en tal caso  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$  se incrementaría

debido al error de estimación. Por tanto, si se pretende conseguir un balance entre el error de perturbación y el de regularización, una forma razonable de buscarlo es procurar un balance entre  $\|g_\delta^\varepsilon\|$  y  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$ , lo cual es la meta de la *L-curva*. Lo anterior puede ser concluído a partir de la expresión:

$$\underbrace{\|g - g_\delta^\varepsilon\|}_{err.estim} \leq \underbrace{\|g - g^\varepsilon\|}_{err.perturb.} + \underbrace{\|g^\varepsilon - g_\delta^\varepsilon\|}_{err.regular.}$$

El análisis hecho, obliga a que el gráfico de  $\|g_\delta^\varepsilon\|$  contra  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$  tienda a tomar forma vertical cerca al origen y una forma horizontal conforme  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$  crece. Ésta es la razón del nombre de *L-Curva*. Para acentuar tal apariencia, la *L-Curva* suele graficarse en escala *Log-Log*.

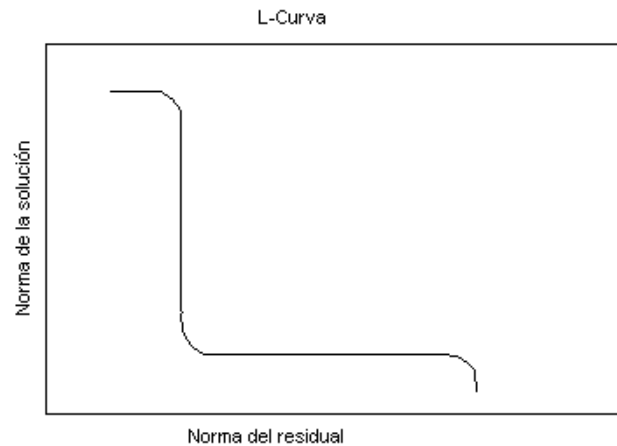


Figura 4. Forma típica de la *L-Curva*

El uso de la *L-Curva* para la selección del parámetro, obedece al hecho de que el valor de  $\delta$  que corresponde al punto en el que el gráfico cambia de forma vertical a horizontal, es decir, la esquina de la *L*, está cercano al valor óptimo del parámetro de regularización ([6], [11], [9]).

El empleo de la  $L - Curva$  como método de selección del parámetro de Molificación, nos obliga a considerar  $\|g_\delta^\varepsilon\|$  como función de  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$  y llevar a cabo la selección del parámetro, como se mencionó más arriba. La estrategia consiste en generar una  $L - Curva$  discreta en un intervalo permitido de valores de  $\delta$ , se construye entonces una función Spline que la interpole y se busca en ella el punto de máxima curvatura. Encontrado el punto, conseguimos un subintervalo en la  $L - Curva$  que lo contenga. Podemos hacer entonces un refinamiento de la  $L - Curva$  añadiendo puntos en este subintervalo y escogemos el punto que maximice la curvatura. El valor de  $\delta$  asociado a este punto, corresponde al valor óptimo buscado (ver [7], [12], [16]).

Por último, cabe anotar que en algunas aplicaciones donde es necesaria alguna aproximación lineal, por ejemplo de la derivada de una función discreta  $g^\varepsilon$  (que sea obtenida mediante el producto  $Lg^\varepsilon$ , con  $L$  matriz que genera la aproximación correspondiente), suele construirse la  $L - Curva$  como un gráfico  $\|L(g_\delta^\varepsilon)\|$  contra  $\|g_\delta^\varepsilon - g^\varepsilon\|$ .

### 2.5.3 Validación Cruzada Generalizada (GCV)

Dado  $g_\varepsilon \in \mathbb{R}^m$  y  $\delta > 0$ , en la sección anterior vimos que podemos extender los datos a un vector  $G_{ext}^\varepsilon \in \mathbb{R}^{m+2\eta}$  y construir una matriz  $A_\delta \in \mathbb{R}_{m \times (m+2\eta)}$  tal que  $A_\delta G_{ext}^\varepsilon = g_\delta^\varepsilon$ , donde  $g_\delta^\varepsilon \in \mathbb{R}^m$  corresponde al vector de datos molificados. Entonces, ante el problema de escoger un adecuado valor para el parámetro de molificación  $\delta$ , para un cierto  $g_\varepsilon \in \mathbb{R}^m$ , podemos implementar el método de Validación Cruzada Generalizada (GCV) [26], y tomar como valor del parámetro de molificación, el minimizador del funcional:

$$gcv(\delta) = \frac{\|(I - A_\delta^T A_\delta) G_{ext}^\varepsilon\|_2^2}{[Traza(I - A_\delta^T A_\delta)]^2}$$

donde los elementos de la matriz  $I_{(m+2\eta) \times (m+2\eta)}$  son:

$$I_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{otra parte} \end{cases}$$

Este mínimo puede encontrarse mediante procedimientos como la Búsqueda de la Sección Aurea (*Golden Section Search*) y es, en general, una tarea difícil dada la forma de la curva

que comúnmente se obtiene.

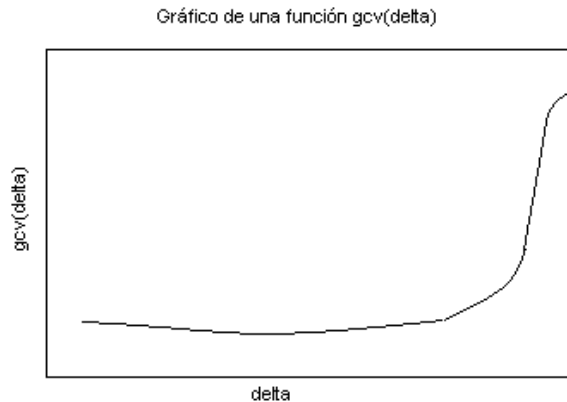


Figura 5. Forma típica de la función  $gcv$

## 2.6 Regularización, selección automática de parámetros y tipo de ruido.

En todas las referencias existentes sobre molificación (al igual que otros tipos de métodos de regularización), al realizar su implementación numérica se ha supuesto que el tipo de perturbación corresponde a un ruido blanco. Así que no se encuentra información disponible acerca de la relación entre ésta y el tipo de ruido.

Por su lado Hansen en [11], quien no usa molificación, al hablar sobre las bondades de la  $L$ -curva y trabajando con el método de regularización de Tikhonov, menciona como una de sus principales ventajas, que muchas veces funciona bien aún en la presencia de errores correlacionados (ruido no blanco), mientras que el método de la GCV no funciona adecuadamente. Aparentemente, GCV falla ante la presencia de ruidos no blancos y elige un parámetro de regularización demasiado pequeño que sólo filtra el ruido blanco, mientras la  $L$ -curva permite filtrar también ruidos no blancos.

La diferencia esencial entre GCV y  $L$ -curva es que este último es capaz de reconocer ruidos

no blancos, mientras que el método de GCV puede fallar en esto. Esto se debe esencialmente a que el criterio de la  $L - curva$  combina información de la norma del residual con la de la norma de la solución, mientras que el método de GCV sólo toma información de la norma del residual [25].

Por otro lado, se puede esperar que el método de GCV no funcione adecuadamente debido a que la deducción hecha por Golub et al. en [26] supone de antemano que se está ante la presencia de una perturbación causada por un ruido blanco. Esta dificultad ha sido estudiada y corregida en la última década por varios autores ([2], [27], [15]) quienes han modificado el método tradicional presentado por Wahba para que pueda admitir ruidos no blancos; sin embargo, este estudio ha sido netamente estadístico y aún no se cuenta con información del uso de estas modificaciones en el campo de la regularización.

Finalmente, cabe esperar que el principio de discrepancia funcione de manera adecuada ya que para este método sólo importa el conocimiento de la magnitud de la perturbación y no su tipo [10].

# Capítulo 3

## APLICACIONES

### 3.1 Primera Derivada

En [23], Murio muestra que el problema de diferenciación numérica es un problema mal condicionado y emplea el método de Molificación con el fin de estabilizar el problema, sometido a un ruido blanco. Posteriormente, Murio, Mejía y Zhan usan el método de Molificación en la solución de este problema, adicionando un procedimiento de selección automática de parámetros, pero también suponiendo la presencia de un ruido blanco.

En esta sección, se mostrará la capacidad de la molificación para el mejoramiento de datos, con el fin de enfrentar el problema de la diferenciación de datos con perturbaciones. Se empezará mostrando los resultados de consistencia y estabilidad del procedimiento para funciones definidas en todo el eje real y luego, se discute el caso de la diferenciación discreta. En todos los casos el ruido (con cota  $\varepsilon$ ), puede ser o no blanco.

**Teorema 3.1.1** (*Estabilidad*):

Si  $f$  y  $f^\varepsilon$  son integrables sobre  $I$  y  $\|f - f^\varepsilon\|_{\infty, I} \leq \varepsilon$ , entonces existe una constante  $C$  tal que:

$$\|(J_\delta f)' - (J_\delta f^\varepsilon)'\|_{\infty, I_\delta} \leq C \frac{\varepsilon}{\delta}$$

**Prueba.** [23], [1] ■

**Teorema 3.1.2** (*Consistencia*):



Si  $f'$  es integrable sobre  $I$ , y uniformemente Lipschitz sobre  $I$ , entonces existe una constante  $C$  tal que

$$\|(J_\delta f)' - f'\|_{\infty, I_\delta} \leq C\delta$$

**Prueba.** El resultado es inmediato a partir de la consistencia de la molificación, y del hecho que

$$\frac{d}{dx} J_\delta f = \frac{d}{dx} (\rho_\delta * f) = \rho_\delta * \left( \frac{d}{dx} f \right) = J_\delta \left( \frac{d}{dx} f \right)$$

■

### 3.1.1 Diferenciación Discreta

Ahora estudiamos el problema de aproximar la derivada de funciones discretas definidas sobre un conjunto  $K = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ . Con este fin, sea  $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  uniformemente Lipschitz, diferenciable y con derivada uniformemente Lipschitz sobre  $\mathbb{R}$ . Sea  $G = \{g_j\}_{j=1}^n$ , la versión discreta de  $g$ , definida por  $g(x_i) = g_i$ .

Para la diferenciación discreta, tenemos los siguientes resultados:

**Teorema 3.1.3** (*Estabilidad de la molificación discreta*). Si  $G^\varepsilon$  es una función discreta definida sobre  $K$  y tal que  $\|G - G^\varepsilon\|_{\infty, K} \leq \varepsilon$ , entonces existe una constante  $C$  tal que:

$$\left\| \frac{d}{dx} J_\delta G^\varepsilon - \frac{d}{dx} g \right\|_{\infty, I_\delta} \leq C \left( \delta + \frac{\varepsilon}{\delta} + \frac{\Delta x}{\delta} \right)$$

**Prueba.** [23], [1] ■

Así que el problema de encontrar  $g'(x)$  puede cambiarse por el de encontrar  $\frac{d}{dx} J_\delta G^\varepsilon(x) = (g_\delta^\varepsilon)'(x)$ , el cual puede resolverse utilizando esquemas de diferencias finitas para estimar la derivada en el intervalo deseado. Obsérvese que si la malla está uniformemente espaciada, con un espaciamento  $h$ , podemos emplear la aproximación de diferencias centradas:

$$\frac{d}{dx} J_\delta G^\varepsilon(x_j) \approx \frac{J_\delta G^\varepsilon(x_{j+1}) - J_\delta G^\varepsilon(x_{j-1}))}{2h}$$

que denotaremos  $D_0(J_\delta G^\varepsilon)$ .

Con el fin de mostrar la conveniencia de la utilización de este esquema, tenemos el siguiente teorema:

**Teorema 3.1.4 :** *Si  $g \in C^2(\mathbb{R})$  con  $g''$  acotada por una constante  $M$  y uniformemente Lipschitz sobre  $\mathbb{R}$ , entonces existe una constante  $C$  tal que:*

$$\|D_0(J_\delta G^\varepsilon) - g'\|_{\infty, I_\delta} \leq C \left\{ \frac{h}{2} [(\varepsilon + h) \delta^{-2} + \delta] + \delta + (\varepsilon + h) \delta^{-1} \right\}$$

**Prueba.** [1] ■

Este último teorema muestra la inmensa necesidad de elegir adecuadamente el parámetro de molificación  $\delta$ , y nos enseña que no es necesario simplemente hacerlo cercano a cero.

## 3.2 Problema Inverso de Conducción de Calor, unidimensional

El problema de conducción de calor clásico, en el que son conocidos el flujo de calor o la temperatura en la superficie del cuerpo, como función del tiempo, y se calcula la distribución de temperatura en el interior del cuerpo, es un problema directo. Sin embargo, en muchas situaciones de transferencia de calor es necesario estimar la temperatura y/o el flujo de calor en la superficie de un objeto, a partir de medidas realizadas de la temperatura en el interior del mismo. Este último es el llamado problema inverso de conducción de calor (IHCP, por sus siglas en inglés). El IHCP se encuentra frecuentemente en la determinación de constantes térmicas de algunos procesos, en la determinación del calentamiento aerodinámico en túneles de viento, diseño de calorímetros, etc.

En múltiples referencias ([23], [21], [19]), se muestra que el problema inverso del calor es un problema altamente mal condicionado, inclusive más que el problema de diferenciación numérica. En esta sección emplearemos el método de molificación con el fin de estabilizar el problema y hallar una buena aproximación a la distribución de temperatura y/o el flujo de calor

en la superficie de un cuerpo, para el caso unidimensional en un cuerpo simétrico finito. En toda la sección se supone que todas las funciones son  $L^2(-\infty, \infty)$  al definir las como iguales a cero para  $t < 0$ . Además, para efectos de nuestro estudio, el ruido adicionado a los datos puede o no ser blanco.

### 3.2.1 Formulación del problema

Consideremos un IHCP unidimensional, en el cual se desea conocer la temperatura y el flujo de calor,  $f(t)$  y  $q(t)$ , en el extremo izquierdo ( $x = 0$ ), contando con medidas aproximadas de la temperatura y el flujo de calor,  $F(t)$  y  $Q(t)$ , en el lado derecho ( $x = 1$ ). En cantidades adimensionales, el IHCP normalizado se puede describir matemáticamente de la siguiente manera:

La temperatura desconocida  $u(x, t)$ , satisface:

$$\begin{aligned}
 u_{xx} &= u_t, & 0 < x < 1, t > 0 & \tag{3.1} \\
 u(1, t) &= F(t), & t > 0, & \\
 u_x(1, t) &= Q(t), & t > 0, & \\
 u(0, t) &= f(t), & t > 0, & \text{(desconocida)} & \tag{3.2} \\
 u_x(0, t) &= q(t), & t > 0, & \text{(desconocida)} \\
 u(x, 0) &= \beta(x), & 0 \leq x \leq 1. &
 \end{aligned}$$

donde deseamos estimar  $f(t)$  y  $q(t)$  y sólo contamos con medidas aproximadas de  $F(t)$  y  $Q(t)$ , que denotamos  $F^\varepsilon(t)$  y  $Q^\varepsilon(t)$ , que corresponden a versiones perturbadas de las funciones exactas, al agregar un ruido que no tiene que ser blanco, y que satisfacen:

$$\|F - F^\varepsilon\|_{L^2} \leq \varepsilon \quad \text{y} \quad \|Q - Q^\varepsilon\|_{L^2} \leq \varepsilon$$

Murio en [23], muestra que el problema anterior es altamente mal condicionado.

### 3.2.2 Problema Estabilizado

El método de Molificación estabiliza el problema (3.1), intentando reconstruir las molificaciones  $J_\delta f$  y  $J_\delta q$  de las funciones  $f$  y  $q$ , en un tiempo  $t$ . Obtenemos el siguiente problema asociado:

Encontrar  $J_\delta f^\varepsilon(t) = J_\delta u(0, t)$  y  $J_\delta q^\varepsilon(t) = J_\delta u_x(0, t)$  en algún tiempo  $t$  de interés y para algún  $\delta > 0$ , dado que  $J_\delta u(x, t)$  satisface:

$$J_\delta u_{xx} = (J_\delta u)_t \quad 0 < x < 1, t > 0 \quad (3.3)$$

$$J_\delta u(1, t) = J_\delta F^\varepsilon(t) \quad t > 0 \quad (3.4)$$

$$J_\delta u_x(1, t) = J_\delta Q^\varepsilon(t) \quad t > 0$$

En [23], Murio demuestra el siguiente teorema:

**Teorema 3.2.1** : *Asuma que  $\|F - F^\varepsilon\|_{L^2} \leq \varepsilon$  y  $\|Q - Q^\varepsilon\|_{L^2} \leq \varepsilon$ . Entonces:*

1. El problema (3.3) es formalmente estable con respecto a perturbaciones en los datos.
2. Si la temperatura y el flujo de calor  $f(t)$  y  $q(t)$ , tienen primera derivada uniformemente acotada en algún intervalo finito del tipo  $I = [0, T]$ , es decir, si existe una constante  $M$  tal que  $\|f'\|_I \leq M$  y  $\|q'\|_I \leq M$ , entonces existen constantes  $C_1$  y  $C_2$  tales que:

$$\begin{aligned} \|f - J_\delta f^\varepsilon\|_I &\leq C_1(M, \delta, \varepsilon) = \frac{M\delta}{2} + \varepsilon \exp\left[(2\delta)^{-2/3}\right] \\ \|q - J_\delta q^\varepsilon\|_I &\leq C_1(M, \delta, \varepsilon) = \frac{M\delta}{2} + 2\varepsilon \exp\left[(2\delta)^{-2/3}\right] \end{aligned}$$

**Prueba.** Ver [23] ■

### 3.2.3 Aproximación por Diferencias Finitas

Sin pérdida de generalidad, intentamos reconstruir la temperatura de frontera  $J_\delta f^\varepsilon$  y el flujo de calor  $J_\delta q^\varepsilon$  en el intervalo de tiempo  $I = [0, 1]$ . Para ello consideremos una malla uniforme en el

plano  $(x, t)$ , dada por:  $\{(x_s, t_j) / x_s = sh, t_j = jk; s = 0, 1, 2, \dots, N; Nh = 1; j = 0, 1, 2, \dots, M; Mk = P\}$ , donde  $P$  depende de  $h$  y  $k$  en una forma que se precisará posteriormente.

Notemos primero que la ecuación diferencial  $J_\delta u_{xx} = (J_\delta u)_t$  es de segundo orden en espacio y para su solución por medio de un esquema de diferencias finitas atrás en espacio, necesitamos dos condiciones iniciales en la frontera  $x = 1$ . Estas dos condiciones están dadas por el conocimiento de la temperatura molificada  $J_\delta u(1, t) = J_\delta F^\varepsilon(t)$  y el flujo de calor molificado  $J_\delta u_x(1, t) = J_\delta Q^\varepsilon(t)$ .

Introduciendo las nuevas variables:  $v = J_\delta u$  y  $w = \partial v / \partial x$ , el sistema (3.3) es equivalente a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial x} &= \frac{\partial v}{\partial t} & 0 < x < 1, t > 0 \\ w &= \frac{\partial v}{\partial x} & 0 < x < 1, t > 0 \\ v(1, t) &= J_\delta F^\varepsilon & t > 0 \\ w(1, t) &= J_\delta Q^\varepsilon & t > 0 \\ v(0, t) &= J_\delta f^\varepsilon & t > 0 \\ w(0, t) &= J_\delta q^\varepsilon & t > 0 \end{aligned}$$

Ahora, si denotamos:

$$V_s^j = v(x_s, t_j) \quad \text{y} \quad W_s^j = w(x_s, t_j) \quad 0 \leq s \leq N, 0 \leq j \leq M$$

entonces:

$$\begin{aligned} V_N^j &= J_\delta F^\varepsilon(t_j), & W_N^j &= J_\delta Q^\varepsilon(t_j), & 0 \leq j \leq M \\ V_s^0 &= 0 & 0 \leq s \leq N \end{aligned}$$

y podemos usar el esquema de diferencias finitas estable, atrás en espacio y central en tiempo,

con el cual obtenemos:

$$\begin{aligned}\frac{W_s^j - W_{s-1}^j}{h} &= \frac{V_s^{j+1} - V_s^{j-1}}{2k} \\ W_{s-1}^j &= \frac{V_s^j - V_{s-1}^j}{h} \quad 1 \leq s \leq N, 1 \leq j \leq M-1\end{aligned}$$

Para este esquema se tiene un error de truncamiento  $O(h^2 + k^2)$  para la temperatura molificada y  $O(h + k^2)$  para el flujo de calor molificado.

El sistema discreto asociado a (3.3) está dado por:

$$\begin{aligned}W_{s-1}^j &= W_s^j - \frac{h}{2k} (V_s^{j+1} - V_s^{j-1}) \\ V_{s-1}^j &= V_s^j - hW_{s-1}^j \quad s = N, N-1, \dots, 1 \quad j = 1, 2, \dots, M-N+s-1 \\ V_N^j &= J_\delta F^\varepsilon(t_j), \quad j = 1, 2, \dots, M \\ W_N^j &= J_\delta Q^\varepsilon(t_j), \quad j = 1, 2, \dots, M\end{aligned}$$

Se puede observar que debido a que marchamos hacia atrás en espacio, en cada paso debemos bajar la estimación de la temperatura interior del punto más alto en el tiempo anterior. Así, como deseamos estimar  $V_j^0$  y  $W_j^0$  en los puntos de la malla después de  $N$  iteraciones, la longitud mínima del intervalo inicial de tiempo, debe satisfacer la condición  $Mk - Nk = 1$ , de donde:  $P = Mk = 1 + k/h$ .

Finalmente sólo resta anotar que se puede demostrar que el esquema de diferencias finitas anterior es consistente e incondicionalmente estable. Ver [23]

# Capítulo 4

## EJEMPLOS NUMÉRICOS

### 4.1 Introducción

En este capítulo se presentan algunos ejemplos de la aplicación del método de molificación, para la regularización de problemas mal condicionados sometidos a distintos tipos de perturbación. Se tratan distintos ejemplos de la Diferenciación Numérica y el Problema Inverso de Conducción de Calor unidimensional (IHCP). Para la Diferenciación Numérica, se muestran tres funciones similares a las trabajadas por otros autores ([22], [19]) y que se consideran particularmente difíciles. Posteriormente, para el IHCP trabajaremos con dos problemas clásicos en los que recuperaremos el flujo de calor y la temperatura en la frontera izquierda de un sólido simétrico finito.

En todos los casos se dispone de datos perturbados, obtenidos al discretizar una función  $g$  definida en un intervalo  $[a, b]$ , en  $m$  puntos igualmente espaciados, y se agrega un nivel de ruido acotado por  $\varepsilon > 0$ , que para cada ejemplo puede ser un ruido blanco, un movimiento browniano fraccional (con  $H = 1/2, H < 1/2$  y  $H > 1/2$ ), un ruido  $1/f$  o un ruido de Cauchy. Así obtenemos la versión discreta y perturbada de  $g$ , definida como:  $G^\varepsilon(x_i) = g(x_i) + \varepsilon_i$  para  $i = 1, 2, \dots, m$  y tal que  $|\varepsilon_i| \leq \varepsilon$ . El nivel máximo de ruido,  $\varepsilon$ , se ingresa a las rutinas en función de la norma infinito y sólo es necesario conocerlo para aplicar el principio de discrepancia.

En todos los ejemplos se usa el método de molificación para regularizar los problemas, como se explicó en el capítulo anterior y se usan los métodos de discrepancia,  $L$ -curva y GCV para la selección automática del parámetro de molificación. En el caso de la  $L$ -curva, se muestran tres maneras distintas de selección, la primera de ellas, denotada  $lc0$ , consiste en el gráfico de  $\|y_\delta\|$  vs  $\|y_\delta - y\|$ ; la segunda, denotada  $lc1$ , consiste en el gráfico de  $\|L_1 y_\delta\|$  vs  $\|y_\delta - y\|$ , donde

$L_1 y_\delta$  representa una aproximación a la primera derivada de  $y_\delta$  obtenida por diferencias finitas centradas; y finalmente, el tercero, denotado  $lc2$ , consiste en el gráfico de  $\|L_2 y_\delta\|$  vs  $\|y_\delta - y\|$ , donde  $L_2 y_\delta$  es la aproximación lineal de la segunda derivada de  $y_\delta$  obtenida por diferencias finitas.

Además, en cada caso se muestran los resultados tanto en forma gráfica como por medio de tablas, donde se ve el error relativo cometido en la recuperación, expresado como:

$$Error = \frac{\|y_{calc} - y_{exact}\|_2}{\|y_{exact}\|_2}$$

o el error absoluto:

$$Error = \|y_{calc} - y_{exact}\|_2$$

donde:  $y_{calc}$  corresponde a la solución aproximada obtenida por el método de modificación,  $y_{exact}$  es la solución real que se conoce sólo para fines de comparación y la norma  $\|\cdot\|_2$  se define como

$$\|y\|_2 = \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_i|^2 \right)^{1/2}$$

Finalmente, es importante señalar que todas las rutinas empleadas para la solución de los ejemplos, son rutinas propias desarrolladas en MATLAB 6.0 y se encuentran disponibles en [www.unalmed.edu.co/~cemejia](http://www.unalmed.edu.co/~cemejia).

## 4.2 Ejemplos de Diferenciación Numérica

### 4.2.1 Ejemplo 1

Queremos estimar la derivada de la función que define un pulso triangular diferenciable a trozos

$$y = \begin{cases} 0 & \text{si } 4 \leq x < 4.5 \\ 4x - 18 & \text{si } 4.5 \leq x < 5 \\ -4x + 22 & \text{si } 5 \leq x < 5.5 \\ 0 & \text{si } 5.5 \leq x < 6 \end{cases}$$



lo cual es particularmente difícil por dos razones: Primero, se contradice la suposición de diferenciabilidad de la función sin perturbar, hecha al definir el método de Molificación. Además, posee la dificultad adicional que debido a que la función se anula en los extremos, la molificación en esta zona hace uso exclusivamente de la información de la perturbación.

### 4.2.2 Ejemplo 2

En este ejemplo, queremos estimar la derivada de la función:

$$Y = \begin{cases} 0 & \text{si } 1 \leq x < 3/2 \\ \frac{1}{2} \left( (2x - 4) (1 - (2x - 4)^2)^{1/2} + \arcsin(2x - 4) \right) + \frac{\pi}{4} & \text{si } 3/2 \leq x < 4/2 \\ \left( \frac{1}{2} \left( (2x - 4) (1 - (2x - 4)^2)^{1/2} + \arcsin(2x - 4) \right) + \frac{\pi}{4} \right) & \text{si } 2 \leq x < 5/2 \\ \quad \quad \quad * \exp \left( - (2x - 4)^2 \right) & \\ \frac{\pi}{2} \exp \left( - (2x - 4)^2 \right) & \text{si } 5/2 \leq x < 3 \end{cases}$$

la cual tiene el inconveniente de poseer segunda derivada no acotada, lo cual no está de acuerdo con los requisitos exigidos en el capítulo anterior, para el método de molificación. Además se hace cero en el intervalo  $[1, 3/2]$ , lo que constituye una dificultad adicional en esta zona.

### 4.2.3 Ejemplo 3

Se trata de la aproximación exponencial de un pulso instantáneo. La función es:

$$y = \exp \left( -50 (x - 2.5)^2 \right), \quad x \in [2, 3]$$

Esta función, a pesar de poseer derivadas de cualquier orden, presenta la dificultad de volverse casi nula cerca de los extremos del intervalo, así que los datos molificados corresponden en su mayoría a la contribución hecha por el ruido más que por la función misma, lo cual constituye un reto para cualquier método de regularización.

#### 4.2.4 Tablas

Para cada ejemplo, las siguientes tablas muestran los errores relativos (en norma dos) cometidos, en la recuperación de la derivada, usando diferentes métodos de selección de parámetros y diferentes tipos de ruidos en los datos iniciales. Este ruido se presenta en norma infinito y se elige teniendo en cuenta la norma 2 ponderada de la función que se desea derivar, así:

$$\text{ejemplo 1} : \|y\|_{2,pond} = 0.8148$$

$$\text{ejemplo 2} : \|y\|_{2,pond} = 0.5049$$

$$\text{ejemplo 3} : \|y\|_{2,pond} = 0.4195$$

por lo tanto, se eligen unos niveles de ruido en los datos de 0.05 y 0.1, que corresponden a niveles bajo y alto respectivamente.

Tabla 1. Ejemplo 1, con  $n = 239$  y error inicial: 0.05

Tipo de ruido	lc0	lc1	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	15.25%	12.21%	9.87%	10.11%	16.20%
	$\delta = 0.0504$	$\delta = 0.0400$	$\delta = 0.0327$	$\delta = 0.0254$	$\delta = 0.0676$
fBm (H = 0.3)	19.24%	14.15%	12.17%	16.20%	18.22%
	$\delta = 0.0335$	$\delta = 0.0327$	$\delta = 0.0301$	$\delta = 0.0200$	$\delta = 0.0790$
fBm (H = 0.5)	18.79%	16.25%	11.91%	15.51%	19.25%
	$\delta = 0.0198$	$\delta = 0.0201$	$\delta = 0.0297$	$\delta = 0.0200$	$\delta = 0.0591$
fBm (H = 0.7)	17.53%	15.22%	12.01%	16.62%	17.15%
	$\delta = 0.0183$	$\delta = 0.0210$	$\delta = 0.0281$	$\delta = 0.0200$	$\delta = 0.0597$
Ruido 1/f	21.07%	17.24%	14.26%	26.06%	17.18%
	$\delta = 0.0191$	$\delta = 0.0257$	$\delta = 0.0299$	$\delta = 0.0104$	$\delta = 0.0767$
Ruido de Cauchy	11.25%	10.05%	9.91%	13.26%	17.08%
	$\delta = 0.0267$	$\delta = 0.0278$	$\delta = 0.0291$	$\delta = 0.0235$	$\delta = 0.0767$

Tabla 2. Ejemplo 1, con  $n = 239$  y error inicial: 0.1

Tipo de ruido	lc0	lc1	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	39.10%	38.24%	29.32%	21.13%	23.87%
	$\delta = 0.0211$	$\delta = 0.0388$	$\delta = 0.0721$	$\delta = 0.0801$	$\delta = 0.1001$
fBm (H = 0.3)	28.94%	30.98%	23.37%	35.52%	28.57%
	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.0452$	$\delta = 0.0287$	$\delta = 0.0105$	$\delta = 0.0124$
fBm (H = 0.5)	22.78%	23.86%	19.26%	32.87%	23.84%
	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.0160$	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.0146$
fBm (H = 0.7)	13.80%	31.01%	22.04%	34.57%	21.57%
	$\delta = 0.0940$	$\delta = 0.0570$	$\delta = 0.0752$	$\delta = 0.0210$	$\delta = 0.0792$
Ruido 1/f	32.26%	30.54%	26.90%	38.47%	22.15%
	$\delta = 0.0298$	$\delta = 0.0325$	$\delta = 0.0535$	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.0716$
Ruido de Cauchy	16.04%	14.81%	18.72%	15.10%	15.03%
	$\delta = 0.03725$	$\delta = 0.0390$	$\delta = 0.0340$	$\delta = 0.0351$	$\delta = 0.0351$

Tabla 3. Ejemplo 2, con  $n = 209$  y error inicial: 0.05

Tipo de ruido	lc0	lc1	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	16.62%	14.42%	10.81%	10.01%	14.72%
	$\delta = 0.0904$	$\delta = 0.0891$	$\delta = 0.0850$	$\delta = 0.0509$	$\delta = 0.1457$
fBm (H = 0.3)	16.71%	19.60%	9.69%	31.07%	16.87%
	$\delta = 0.0158$	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.0226$	$\delta = 0.0116$	$\delta = 0.1548$
fBm (H = 0.5)	18.47%	18.41%	9.24%	29.98%	16.46%
	$\delta = 0.0201$	$\delta = 0.0201$	$\delta = 0.0308$	$\delta = 0.0109$	$\delta = 0.1601$
fBm (H = 0.7)	19.33%	19.22%	9.15%	30.57%	16.03%
	$\delta = 0.0249$	$\delta = 0.0249$	$\delta = 0.0364$	$\delta = 0.0111$	$\delta = 0.1581$
Ruido 1/f	20.77%	21.52%	9.42%	32.63%	16.17%
	$\delta = 0.0430$	$\delta = 0.0286$	$\delta = 0.0700$	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.1548$
Ruido de Cauchy	5.95%	5.54%	3.41%	11.01%	15.90%
	$\delta = 0.0190$	$\delta = 0.0190$	$\delta = 0.0382$	$\delta = 0.0368$	$\delta = 0.1548$

Tabla 4. Ejemplo 2, con  $n = 209$  y error inicial: 0.1

Tipo de ruido	lc0	lc1	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	20.91%	15.26%	18.56%	17.23%	20.94%
	$\delta = 0.0251$	$\delta = 0.0601$	$\delta = 0.0538$	$\delta = 0.0574$	$\delta = 0.2094$
fBm (H = 0.3)	18.42%	24.81%	19.58%	45.87%	23.76%
	$\delta = 0.0400$	$\delta = 0.0311$	$\delta = 0.0355$	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.2376$
fBm (H = 0.5)	17.17%	16.23%	16.27%	43.52%	25.47%
	$\delta = 0.0298$	$\delta = 0.06262$	$\delta = 0.0273$	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.2185$
fBm (H = 0.7)	19.85%	20.53%	17.29%	41.39%	24.89%
	$\delta = 0.0269$	$\delta = 0.0215$	$\delta = 0.0315$	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.2241$
Ruido 1/f	22.76%	23.47%	21.64%	46.15%	23.27%
	$\delta = 0.0571$	$\delta = 0.0527$	$\delta = 0.0676$	$\delta = 0.010$	$\delta = 0.2373$
Ruido de Cauchy	12.85%	12.11%	10.93%	12.35%	23.73%
	$\delta = 0.0350$	$\delta = 0.0355$	$\delta = 0.0340$	$\delta = 0.033$	$\delta = 0.2373$

Tabla 5. Ejemplo 3, con  $n = 139$  y error inicial: 0.05

Tipo de ruido	lc0	lc1	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	15.59%	13.60%	10.53%	10.66%	13.09%
	$\delta = 0.0190$	$\delta = 0.0234$	$\delta = 0.0469$	$\delta = 0.0240$	$\delta = 0.0565$
fBm (H = 0.3)	18.64%	15.76%	14.65%	15.34%	15.37%
	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.200$	$\delta = 0.0363$	$\delta = 0.0411$	$\delta = 0.0594$
fBm (H = 0.5)	17.99%	15.91%	14.01%	15.47%	16.01%
	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.0187$	$\delta = 0.0301$	$\delta = 0.0387$	$\delta = 0.0541$
fBm (H = 0.7)	18.01%	14.01%	13.64%	14.91%	15.87%
	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.0251$	$\delta = 0.0326$	$\delta = 0.0400$	$\delta = 0.0567$
Ruido 1/f	24.23%	16.98%	10.77%	16.16%	16.13%
	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.0137$	$\delta = 0.0250$	$\delta = 0.0401$	$\delta = 0.0599$
Ruido de Cauchy	9.44%	6.13%	3.67%	3.57%	14.96%
	$\delta = 0.0105$	$\delta = 0.0150$	$\delta = 0.0190$	$\delta = 0.0211$	$\delta = 0.0594$

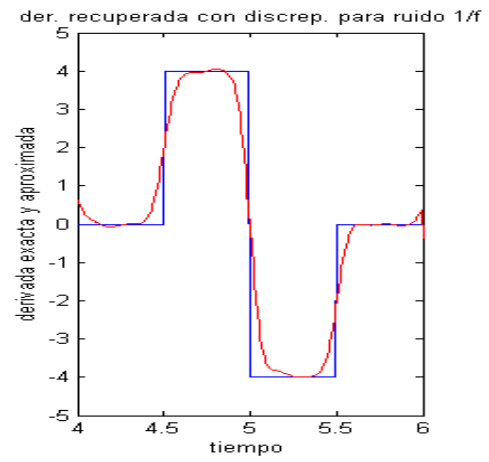
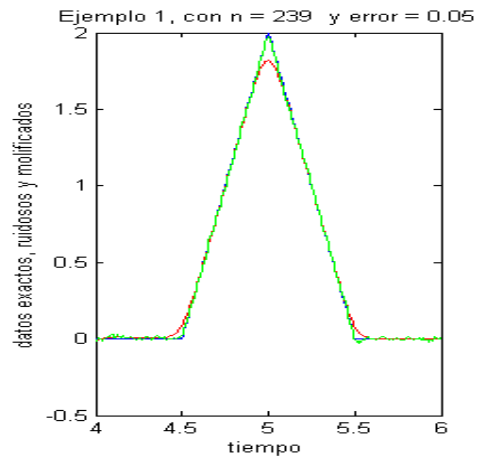
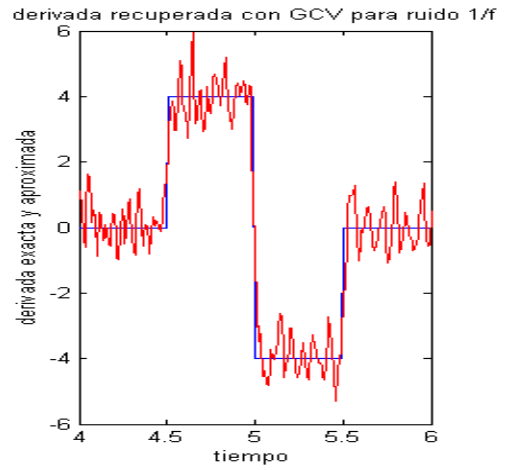
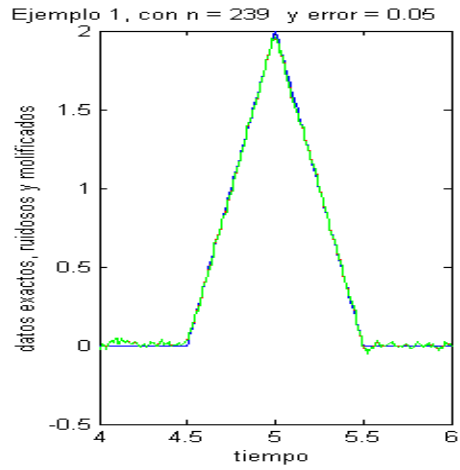
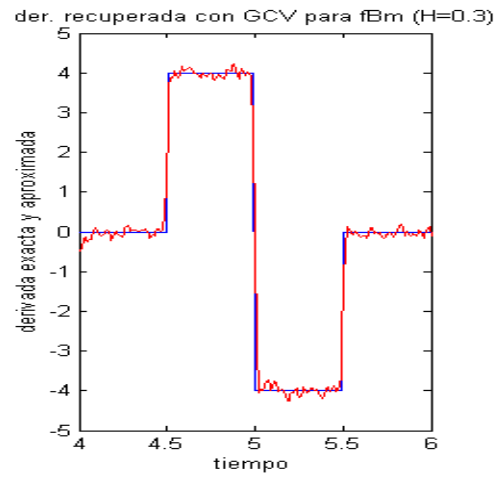
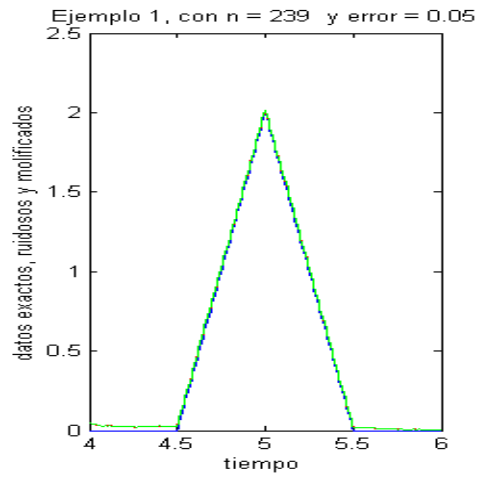
Tabla 6. Ejemplo 3, con  $n = 139$  y error inicial: 0.1

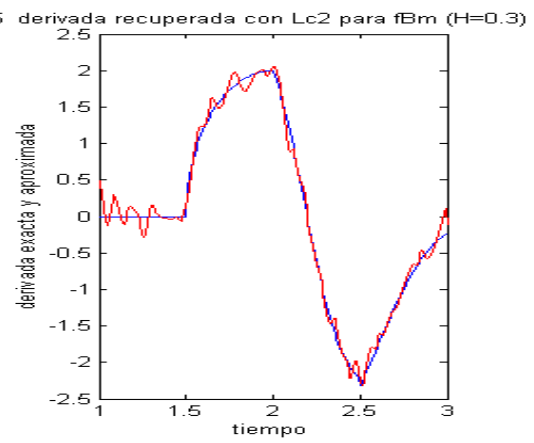
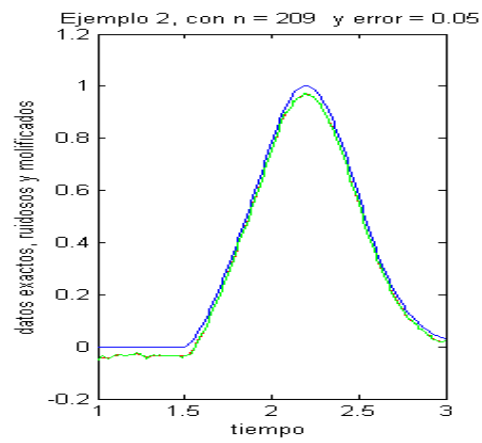
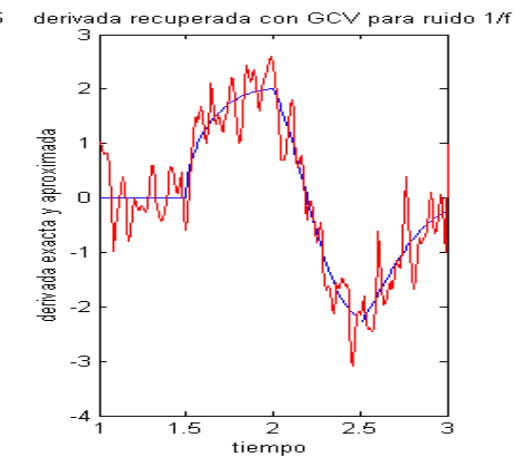
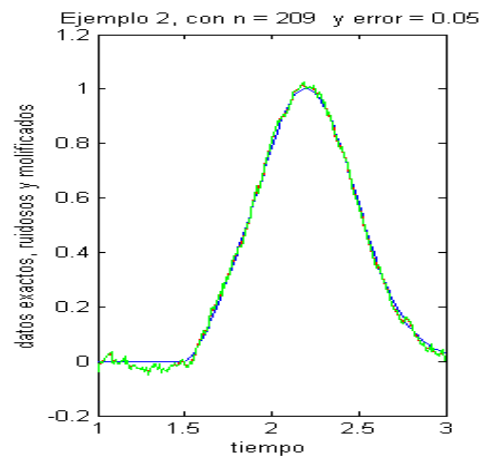
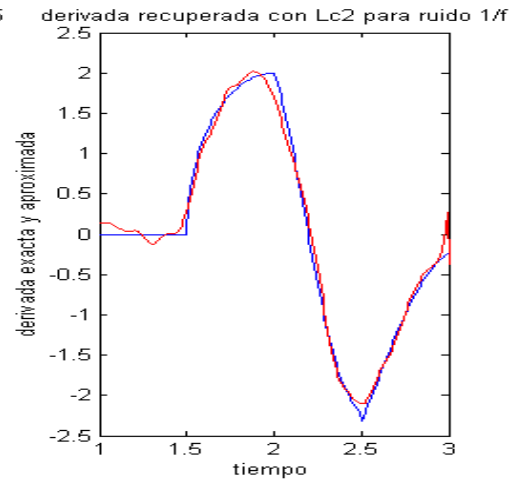
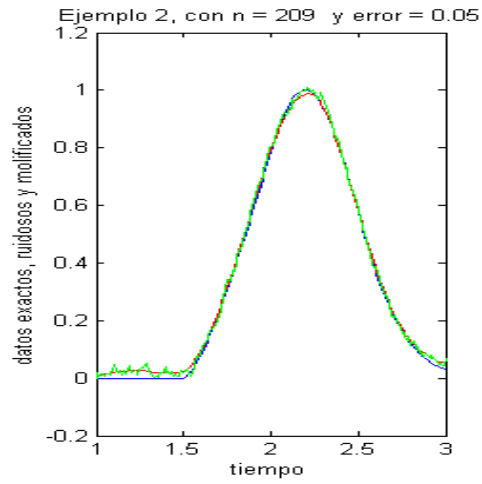
Tipo de ruido	lc0	lc1	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	17.90%	12.21%	14.76%	13.09%	22.42%
	$\delta = 0.0550$	$\delta = 0.0689$	$\delta = 0.0610$	$\delta = 0.0654$	$\delta = 0.1102$
fBm (H = 0.3)	33.13%	25.08%	24.14%	41.48%	28.79%
	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.0172$	$\delta = 0.0190$	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.1205$
fBm (H = 0.5)	29.85%	24.12%	21.83%	38.42%	26.41%
	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.0120$	$\delta = 0.0161$	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.1340$
fBm (H = 0.7)	31.26%	25.73%	23.91%	36.54%	26.84%
	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.0184$	$\delta = 0.0201$	$\delta = 0.0110$	$\delta = 0.1890$
Ruido 1/f	36.08%	27.71%	17.59%	44.18%	21.97%
	$\delta = 0.0127$	$\delta = 0.0289$	$\delta = 0.0340$	$\delta = 0.0100$	$\delta = 0.1330$
Ruido de Cauchy	10.65%	7.94%	6.79%	5.08%	18.53%
	$\delta = 0.0139$	$\delta = 0.0220$	$\delta = 0.0334$	$\delta = 0.0283$	$\delta = 0.1285$

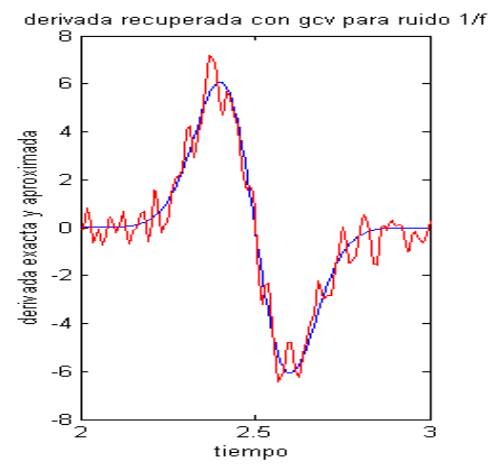
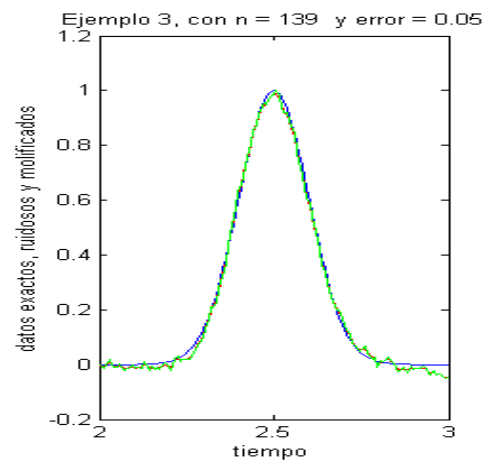
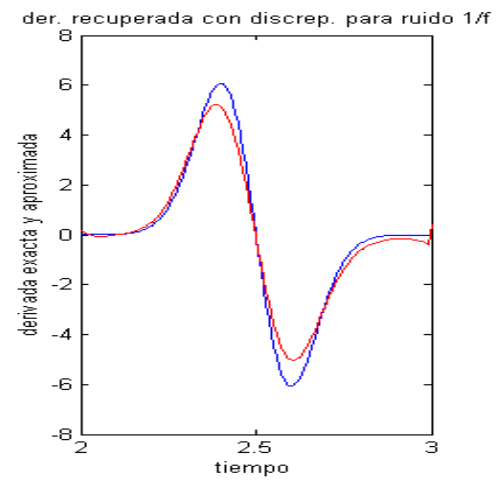
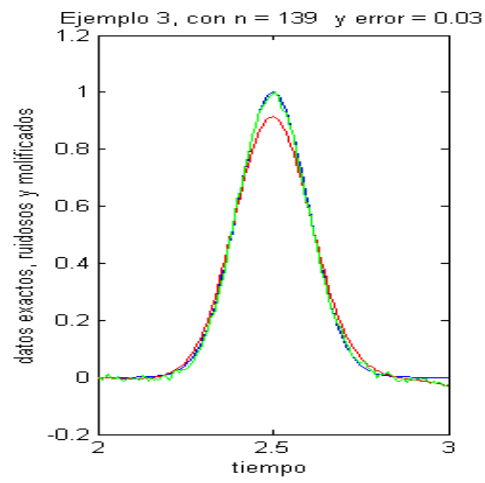
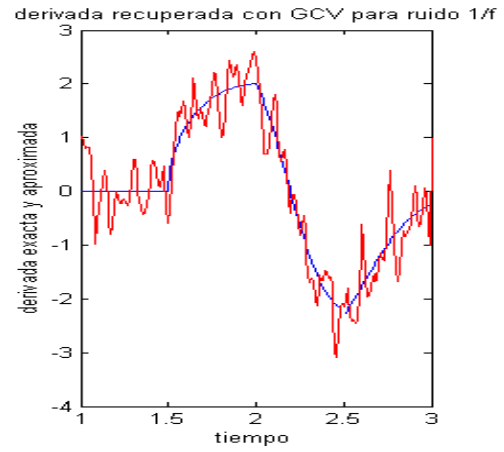
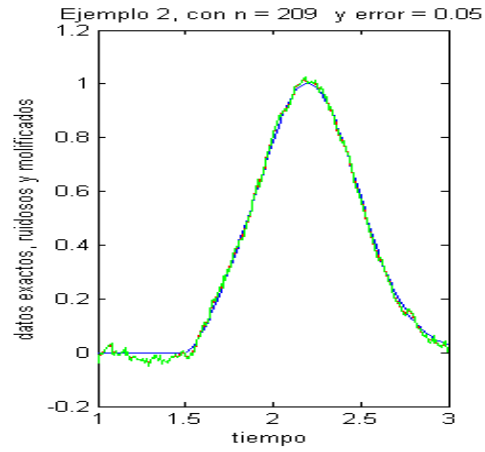
#### 4.2.5 Gráficos

Para cada caso, se muestran algunos de los gráficos obtenidos en la recuperación de la derivada, que permiten observar el efecto del tipo de ruido sobre la regularización por molificación y la selección del parámetro de molificación. Se omiten muchas de las gráficas, pues se consideran innecesarias dada la información consignada en las tablas.

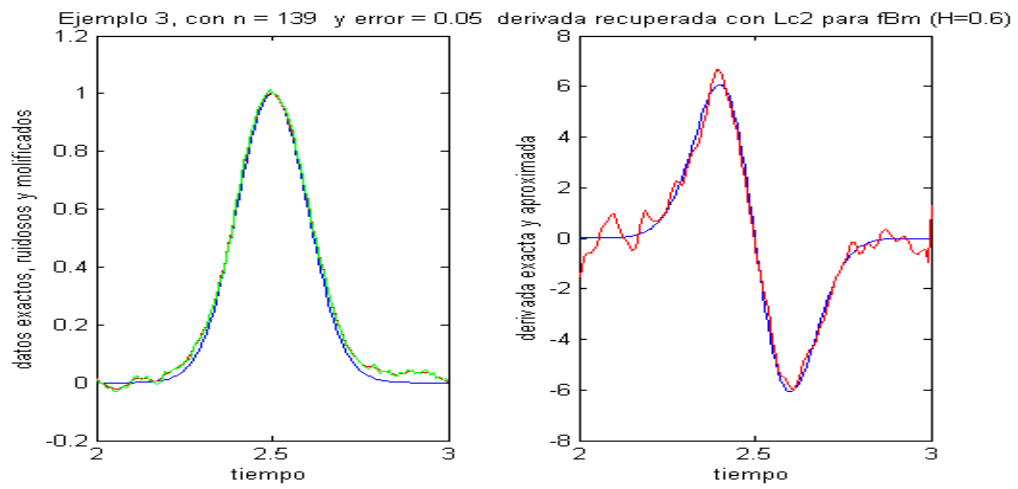
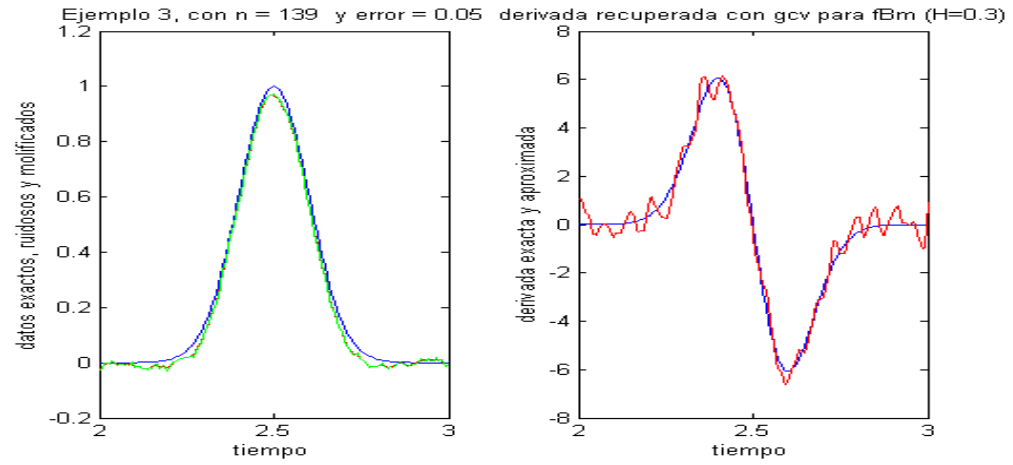
- Para  $\varepsilon = 0.05$



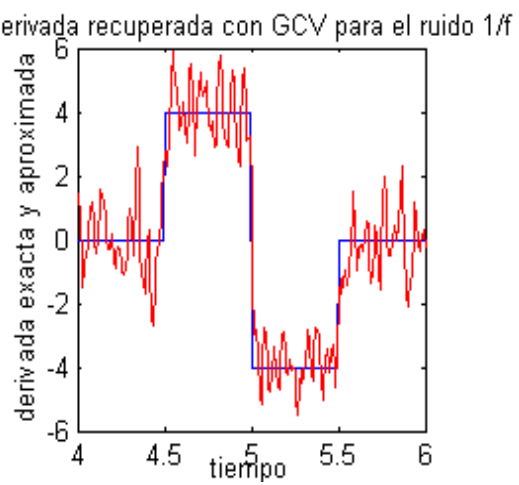
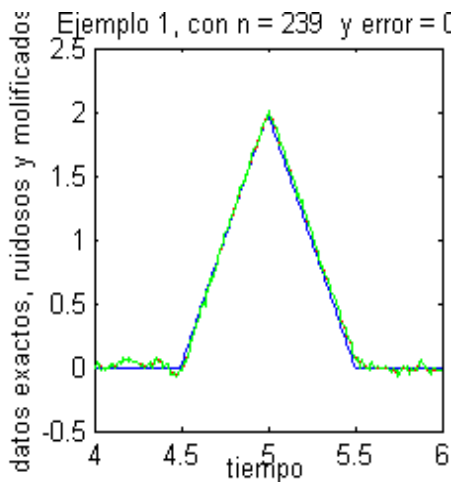
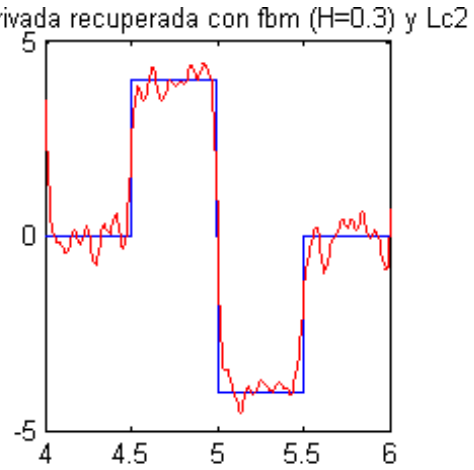
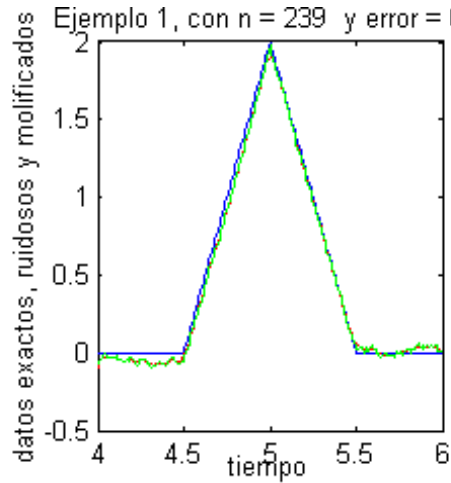
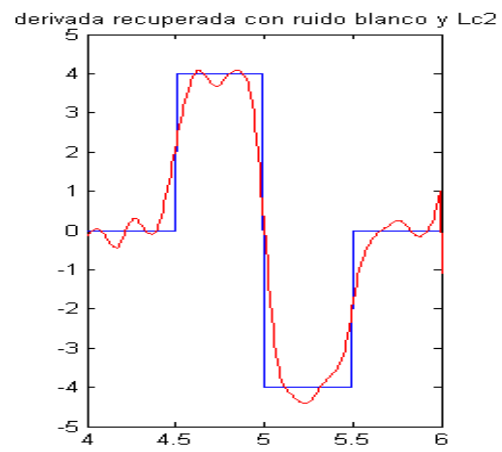
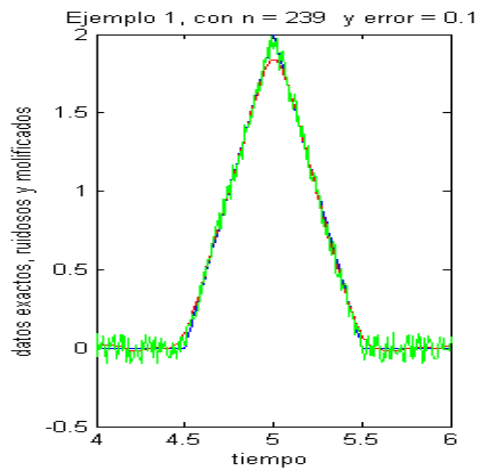


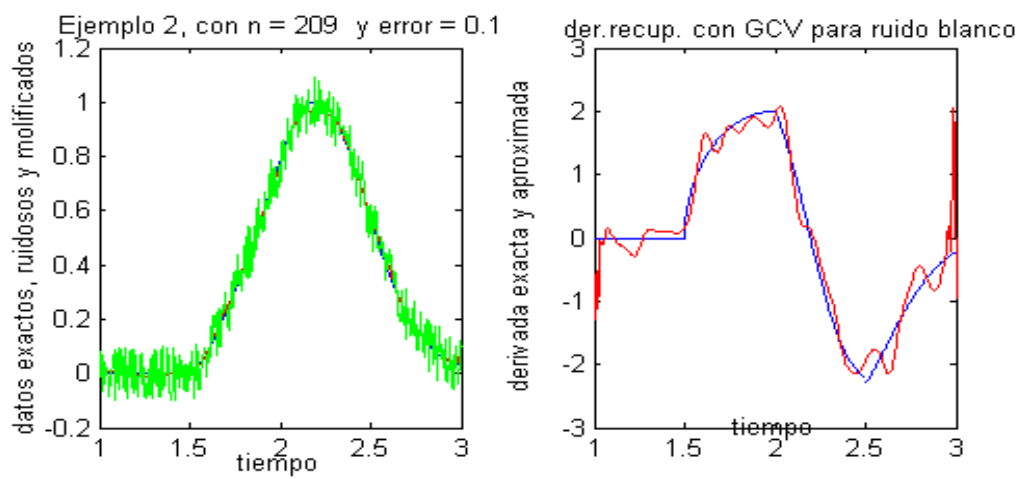
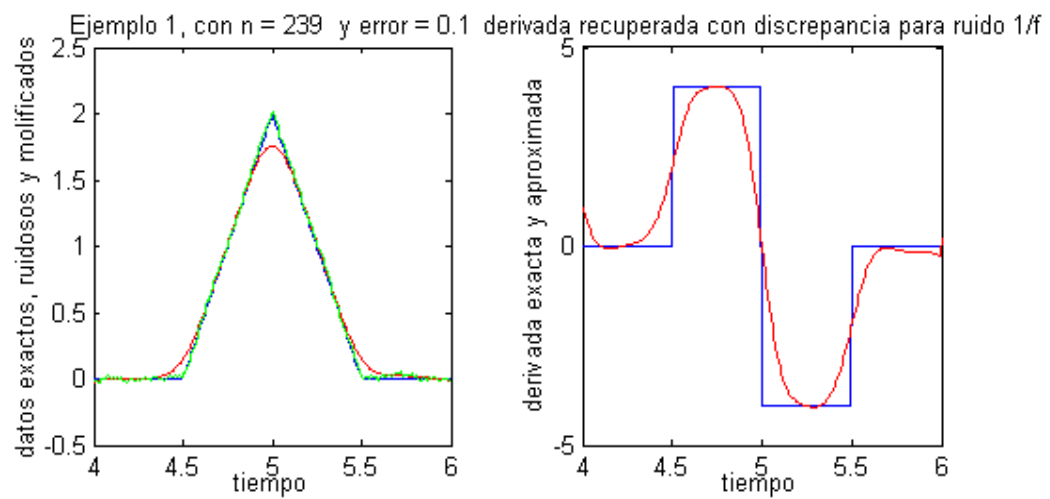
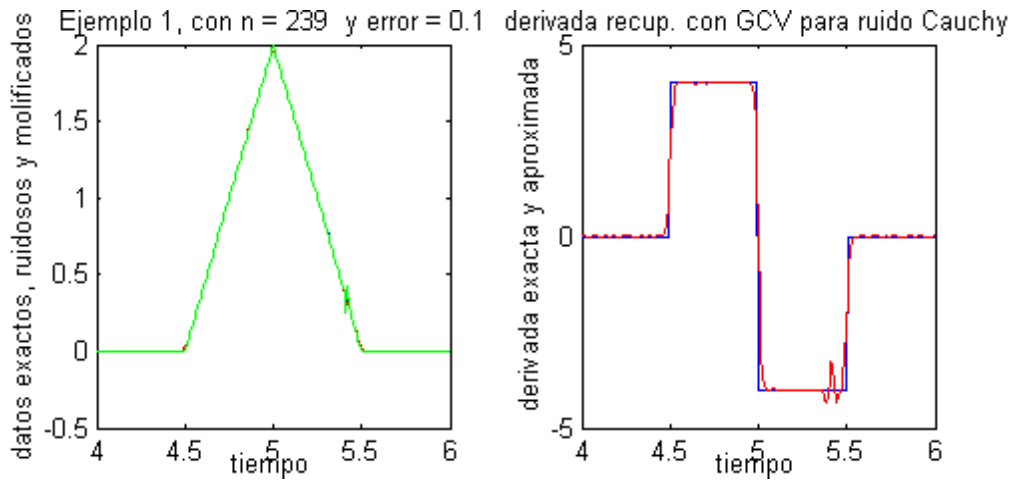


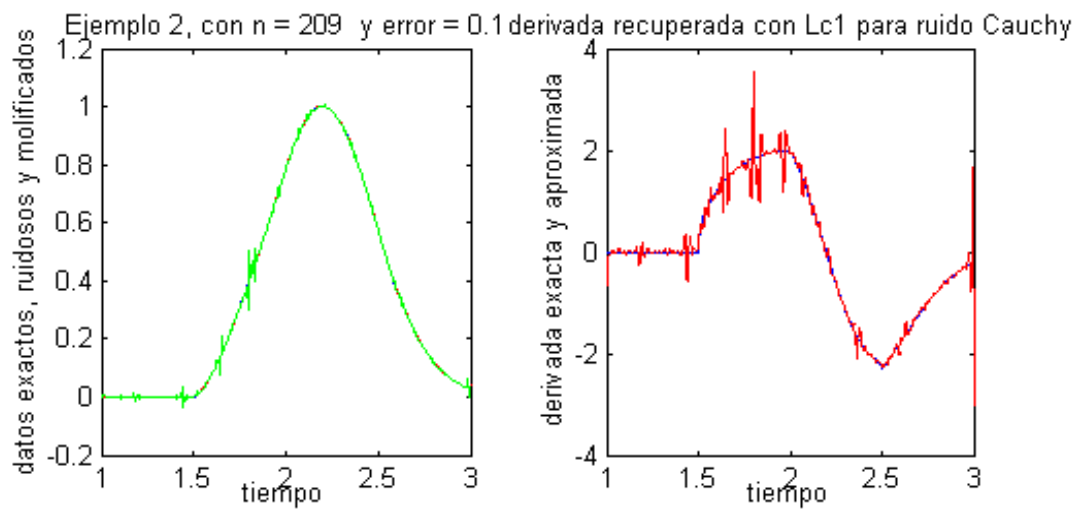
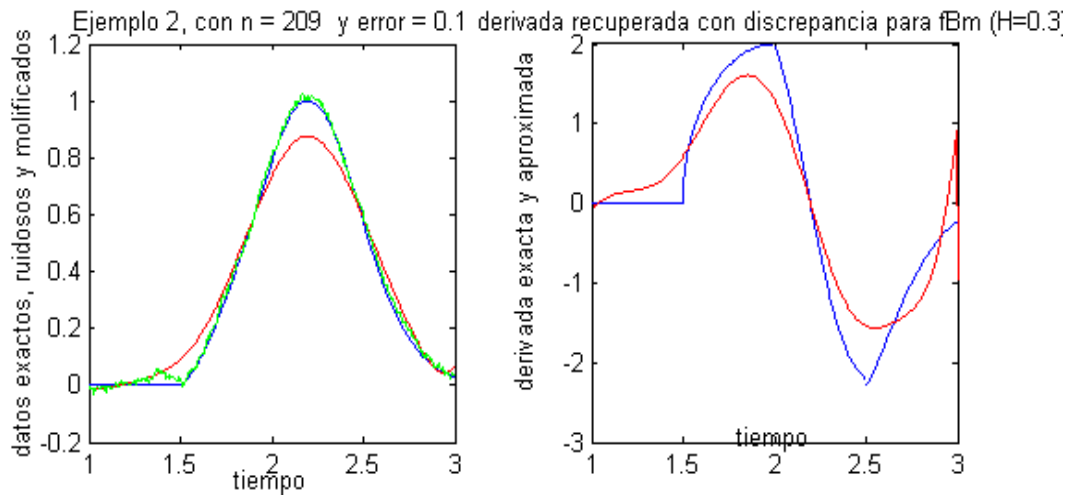
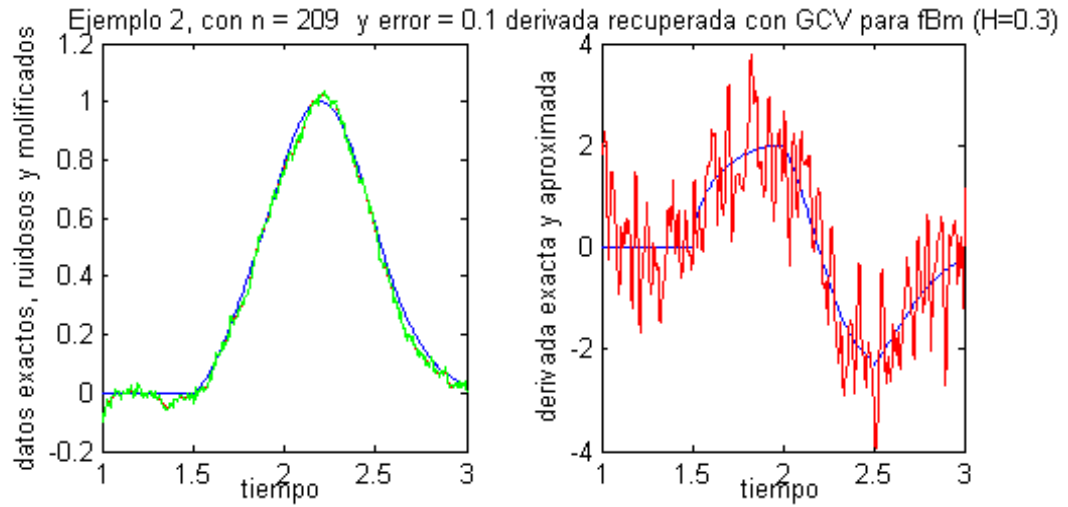


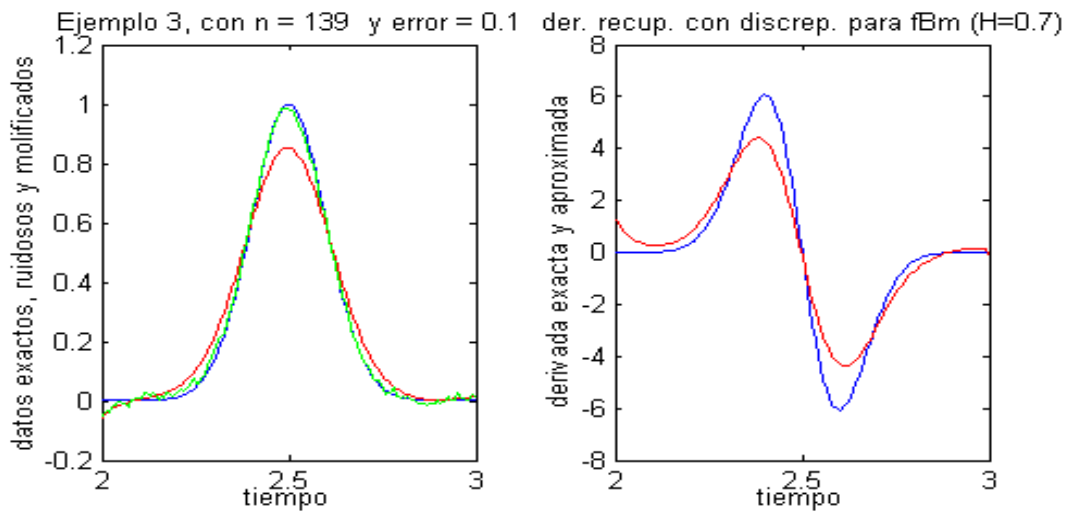
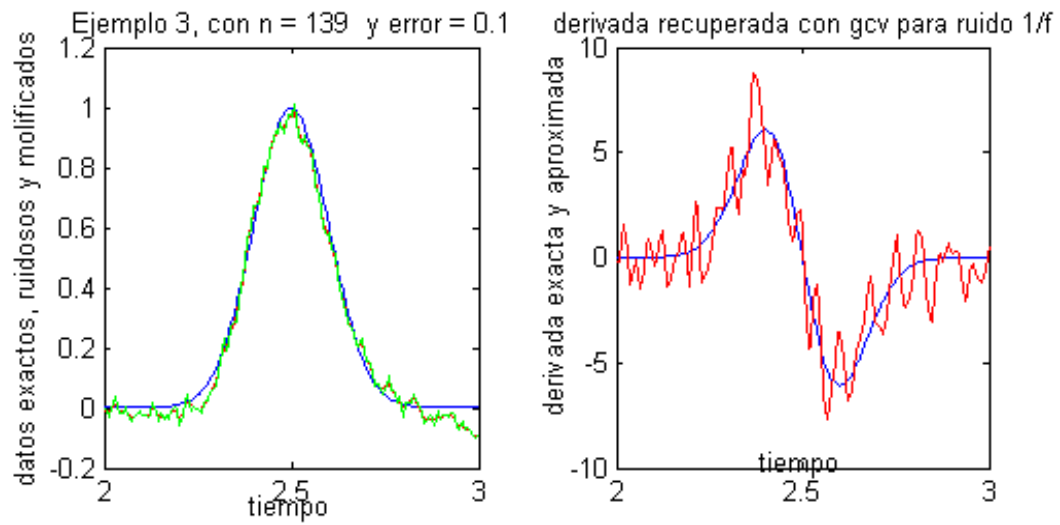
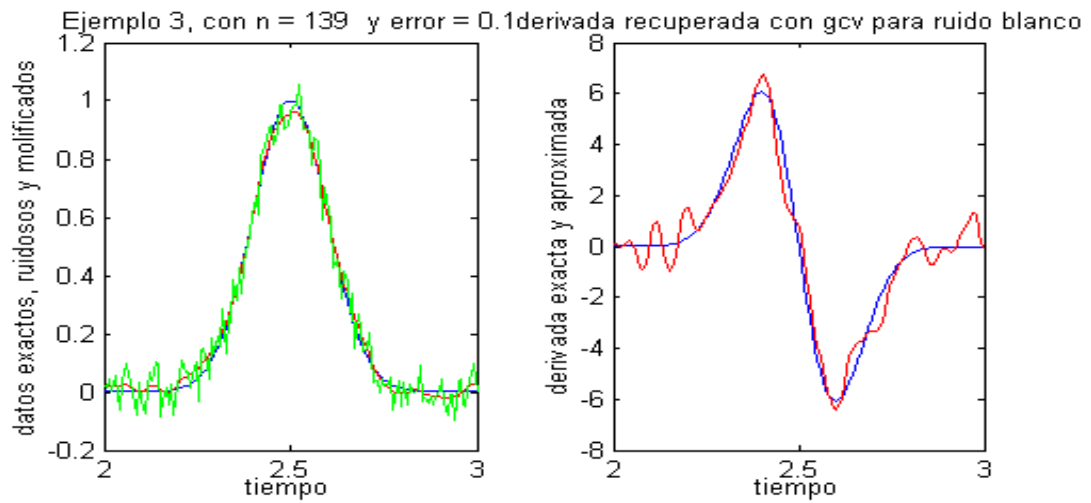


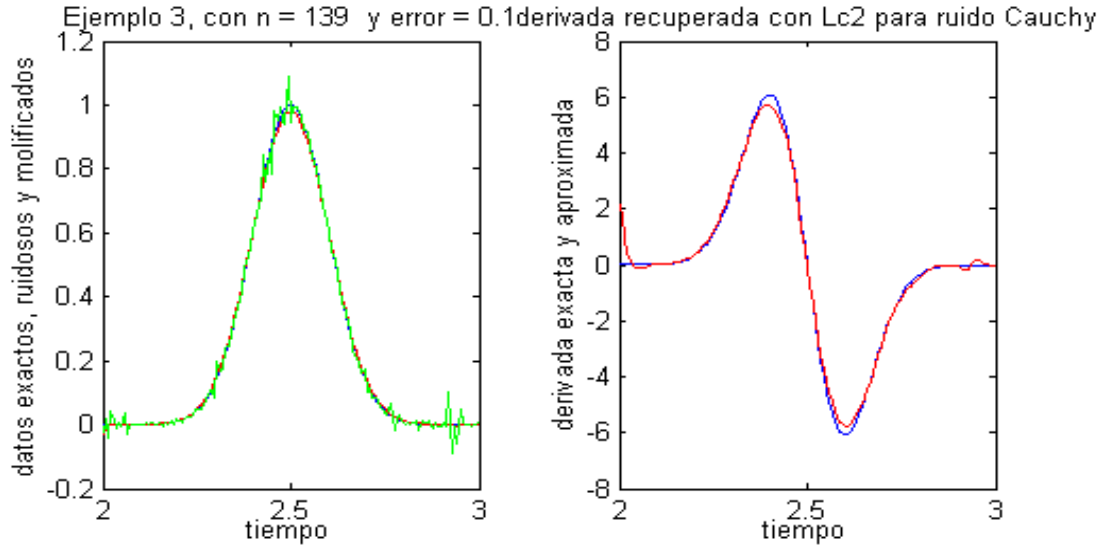
- Para  $\varepsilon = 0.1$











### 4.3 Ejemplos del Problema Inverso de Conducción de Calor (IHCP) unidimensional:

#### 4.3.1 Ejemplo 1

En este ejemplo, se estima el flujo de calor ( $q(t)$ ) y la temperatura ( $f(t)$ ), en la frontera  $x = 0$ , para el IHCP:

$$u_{xx}(x, t) = u_t(x, t), \quad 0 < x < 1, t > 0 \quad (4.1)$$

$$u(1, t) = F(t), \quad t > 0,$$

$$u_x(1, t) = Q(t), \quad t > 0,$$

$$u(0, t) = f(t), \quad t > 0, \quad (\text{desconocida}) \quad (4.2)$$

$$u_x(0, t) = -q(t), \quad t > 0, \quad (\text{desconocida})$$

$$u(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1.$$

donde la temperatura  $F(t)$  y el flujo de calor  $Q(t)$ , están dados por:

$$\begin{aligned} u(1, t) &= F(t) = \tilde{F}(t - 0.2) - \tilde{F}(t - 0.6) \\ u_x(1, t) &= Q(t) = \tilde{Q}(t - 0.2) - \tilde{Q}(t - 0.6) \end{aligned}$$

con:

$$\begin{aligned} \tilde{F}(t) &= \begin{cases} -2\sqrt{\frac{t}{\pi}} \exp \frac{-1}{4t} + \operatorname{erfc} \frac{1}{2\sqrt{t}}, & t > 0 \\ 0, & t \leq 0 \end{cases} \\ \tilde{Q}(t) &= \begin{cases} \operatorname{erfc} \frac{1}{2\sqrt{t}}, & t > 0 \\ 0, & t \leq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Se sabe que la solución exacta para este problema es:

$$\begin{aligned} u_x(x, t) &= \begin{cases} 0, & t \leq 0.2 \\ \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{t-0.2}} \right) & 0.2 \leq t \leq 0.6 \\ \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{t-0.2}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{t-0.6}} \right) & t \geq 0.6 \end{cases} \\ u_x(x, t) &= \begin{cases} 0, & t \leq 0.2 \\ s(0.2), & 0.2 \leq t \leq 0.6 \\ s(0.2) - s(0.6) & t \geq 0.6 \end{cases} \\ \text{donde: } s(z) &= -\frac{2\sqrt{t-z}}{\sqrt{\pi}} \exp \left( -\frac{x^2}{4(t-z)} \right) + x \operatorname{erfc} \left( \frac{x}{2\sqrt{t-z}} \right) \end{aligned}$$

En este ejemplo consideraremos que sólo disponemos de aproximaciones de  $F(t)$  y  $Q(t)$ , dadas por:

$$\begin{aligned} F^\varepsilon(t_i) &= F(t_i) + \varepsilon_i \\ Q^\varepsilon(t_i) &= Q(t_i) + \varepsilon_i \end{aligned}$$

donde  $\varepsilon_i$  corresponde a un ruido, que puede ser blanco, fBm, 1/f o Cauchy.

### 4.3.2 Ejemplo 2

Se trata de reconstruir una temperatura  $f(t)$  de valor 1, para  $0.2 \leq t \leq 0.6$  y de valor 0 para otros  $t$ . Los datos exactos para el IHCP, se obtienen al solucionar el problema directo:

$$\begin{aligned} u_{xx}(x, t) &= u_t(x, t), & 0 < x < 1, t > 0 \\ u(1, t) &= 0, & t > 0, \\ u(0, t) &= 1, & t > 0, \\ u(x, 0) &= 0, & 0 \leq x \leq 1. \end{aligned}$$

Cuya solución es:

$$u(x, t) = \begin{cases} (1-x) + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \exp[-(n\pi)^2 t] \sin n\pi(1-x), & t > 0 \\ 0, & t \leq 0 \end{cases}$$

de donde:

$$u_x(x, t) = \begin{cases} \left\{ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp[-(n\pi)^2 t] \cos n\pi(1-x) \right\}, & t > 0 \\ 0, & t \leq 0 \end{cases}$$

Así que los datos exactos para el IHCP son:

$$\begin{aligned} F(t) &= u(1, t) = 0 \\ Q(t) &= u_x(1, t - 0.2) - u_x(1, t - 0.6) \end{aligned}$$

y determinaremos la temperatura  $f(t)$  en  $x = 0$ . Para ello suponemos que sólo contamos con versiones aproximadas:

$$\begin{aligned} F^\varepsilon(t_i) &= F(t_i) + \varepsilon_i \\ Q^\varepsilon(t_i) &= Q(t_i) + \varepsilon_i \end{aligned}$$

de la temperatura y el flujo de calor en la frontera derecha.



### 4.3.3 Tablas

En esta sección se muestran los errores (en norma dos), cometidos al estimar la temperatura y/o el flujo de calor, para los ejemplos de IHCP. Para ambos ejemplos los errores se muestran relativos y en norma 2 ponderada. En todos los casos se supone que los datos (temperatura y flujo de calor en la frontera derecha del sólido) se encuentran perturbados por distintos tipos de ruidos, con una magnitud máxima  $\varepsilon = 0.005$ .

Tabla 7. Estimación de la temperatura en  $x=0$ . Ejemplo 1

*Error en los datos: 0.005*

Tipo de ruido	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	5.79%	5.82%	9.03%
fBm (H = 0.6)	6.33%	19.5%	7.94%
Ruido 1/f	6.25%	13.54%	8.23%

Tabla 8. Estimación del flux de calor en  $x=0$ . Ejemplo 1

*Error en los datos: 0.005*

Tipo de ruido	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	13.258%	14.262%	19.752%
fBm (H = 0.6)	12.352%	22.233%	18.182%
Ruido 1/f	11.926%	36.688%	17.362%

Tabla 9. Estimación de la temperatura en  $x=0$ . Ejemplo 2

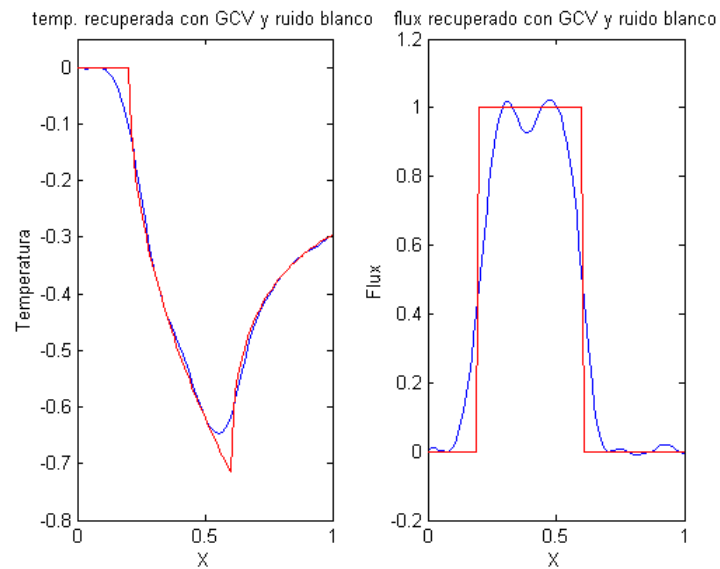
Error en los datos: 0.005

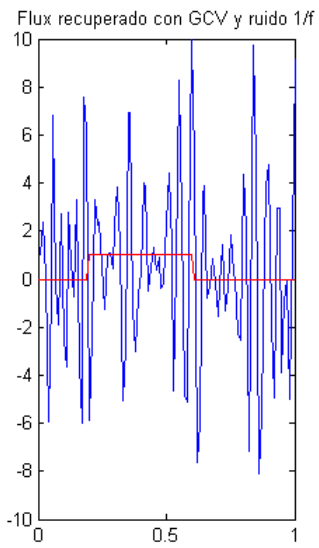
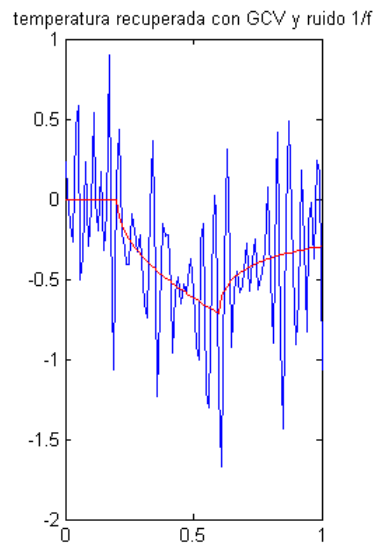
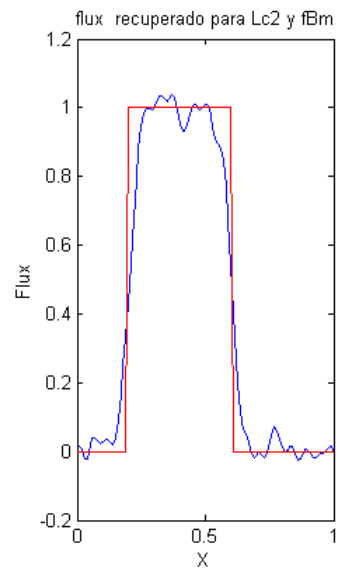
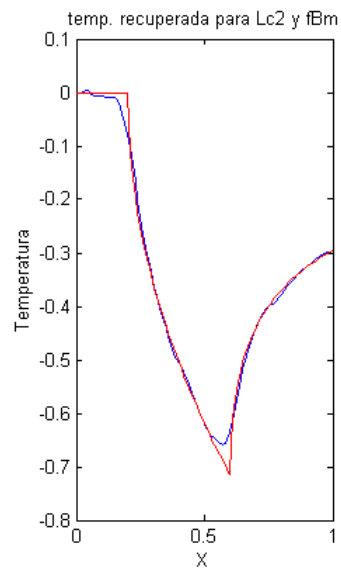
Tipo de ruido	lc2	GCV	Discrepancia
Ruido blanco	3.289%	4.252%	8.991%
fBm (H = 0.6)	4.256%	18.256%	7.948%
Ruido 1/f	5.159%	20.587%	9.001%

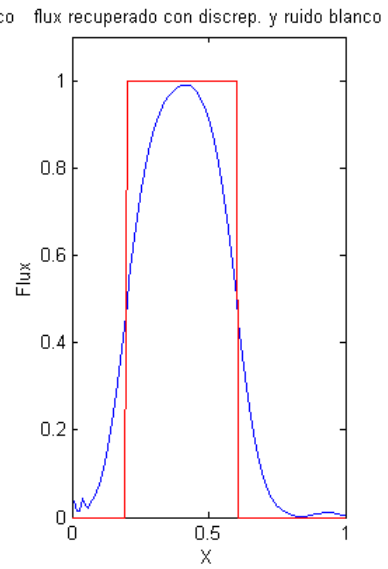
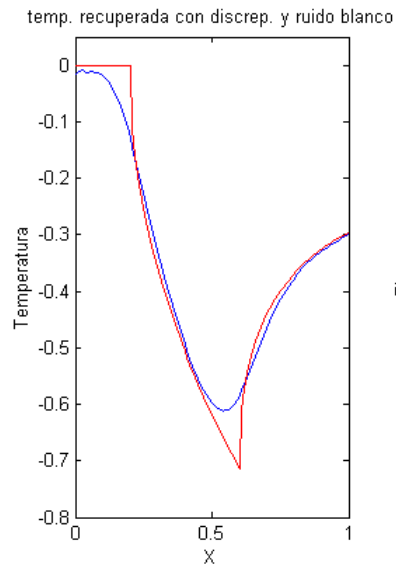
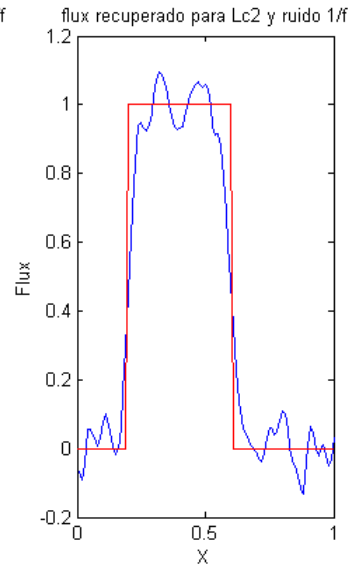
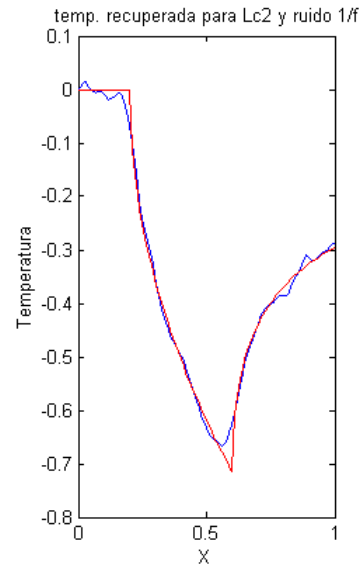
#### 4.3.4 Gráficas:

A continuación se muestran algunas de las gráficas obtenidas para el IHCP, con el fin de poder observar el efecto del tipo de ruido sobre la regularización:

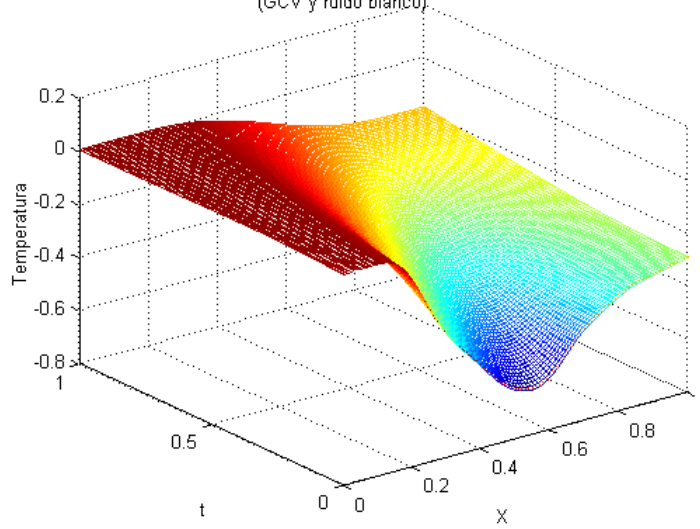
- Para el ejemplo 1:



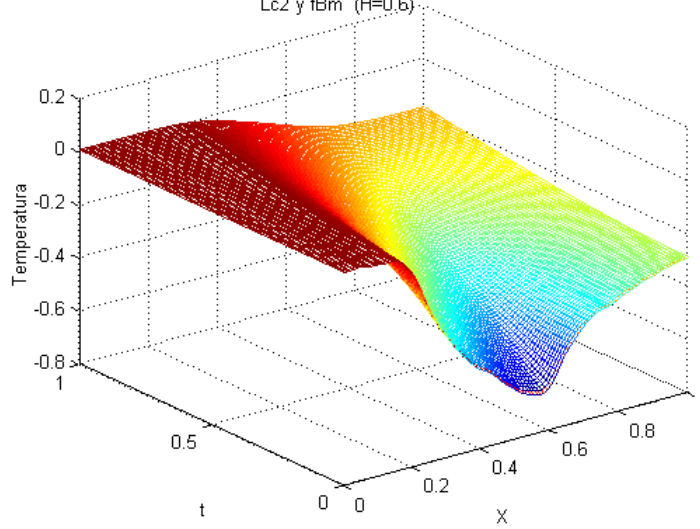




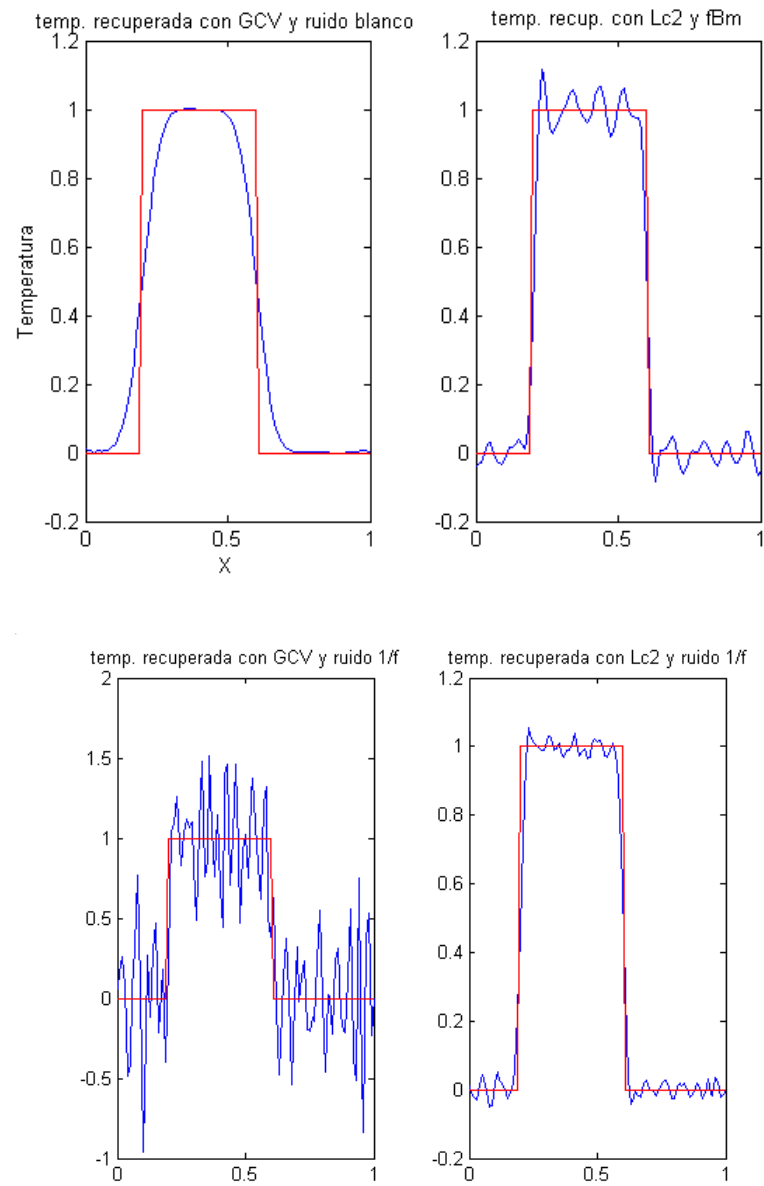
Temperatura recuperada para  $0 \leq x \leq 1$   
(GCV y ruido blanco).

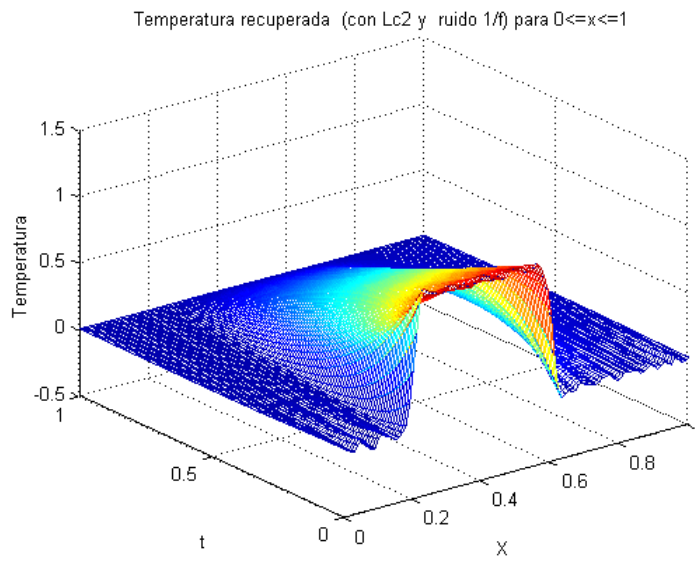
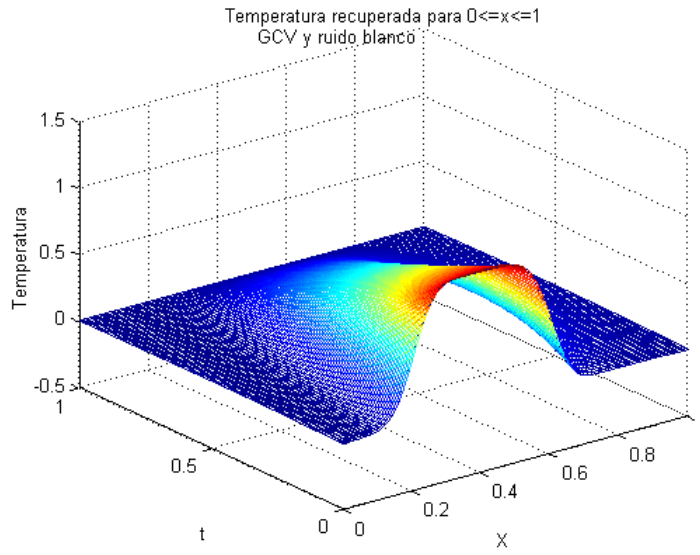


Temperatura recuperada para  $0 \leq x \leq 1$   
Lc2 y fBm ( $H=0,6$ ).



- Para el ejemplo 2:





# Conclusiones

A partir de los resultados numéricos mostrados en el último capítulo, se pueden concluir varias cosas:

- Los mejores resultados obtenidos tanto para la diferenciación discreta como para el IHCP, en el caso de los ruidos no blancos, se obtienen cuando se trabaja con  $Lc2$  como método para la selección automática de parámetros.
- El método empleado para extender las funciones, permitió que la molificación trabajara de manera adecuada en los bordes, presentando menos desviaciones que las observadas a partir de otros métodos.
- La presencia de ruidos no blancos influye de manera considerable en los métodos de regularización, en especial en la selección del parámetro de regularización.
- Por el principio de discrepancia generalmente se obtienen parámetros de regularización que sobresuavizan la solución y que, por lo tanto, conllevan a un error relativo alto. Esto sucede tanto para ruido blanco como no blanco.
- Se pudo observar que GCV no elige un parámetro de molificación adecuado, ante la presencia de ruidos  $1/f$  y  $fBm$ , en especial cuando el nivel máximo de ruido es considerable. La falla de GCV consiste en elegir un parámetro demasiado pequeño, como se menciona en [12].
- Finalmente, sólo resta concluir que el ruido de Cauchy, aunque se encuentra dentro del grupo de los ruidos no blancos, no afecta demasiado la estimación del parámetro de molificación, posiblemente debido a que no presenta grandes oscilaciones, es decir, el nivel máximo de ruido se alcanza en muy pocos puntos..



# Bibliografía

- [1] C. D. ACOSTA, *La molificación como estimador lineal*, Tesis de Maestría, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, 2000.
- [2] N. S. ALTMAN, *Kernel smoothing of data with correlated errors*, Journal of the American Statistical Association, 85 (1990), pp. 749–759.
- [3] S. ASMUSSEN, *Stochastic simulation with a view towards stochastic processes*, University of Aarhus, Denmark. Disponible vía internet en: <http://www.maphysto.dk/cgi-bin/w3-mysql/publications/genericpublication.html?publ=89>, (1999).
- [4] G. DENK AND D. MEINTRUP, *Transient noise simulation: Modeling and simulation of 1/f-noise*, Disponible vía internet en: <http://www.unibw-muenchen.de/campus/ET1/MaPr/Mitarbeiter/>, (2000).
- [5] T. DIEKER, *Simulation of Fractional Brownian Motion*, Master’s Thesis, Free University, Amsterdam, 2002.
- [6] L. ELDEN, *A note on the computation of the generalized cross-validation function for ill-conditioned least squares problems*, BIT, 29 (1984), pp. 467–472.
- [7] V. GUERRA AND V. HERNÁNDEZ, *Numerical aspects in locating the corner of the l-curve*, in Approximation, Optimization and Mathematical Economics, M. Lassonde, ed., Physica-Verlag, 2001, pp. 121–131.
- [8] M. GUZMAN AND M. MARTÍN, *Estructuras Fractales y sus Aplicaciones*, Editorial Labor, Barcelona, 1993.

- [9] P. C. HANSEN, *Regularization tools: a matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems*, Numerical Algorithms, disponible en <http://www.imm.dtu.dk/pch>, 6 (1994), pp. 1–35.
- [10] —, *Rank-Deficient and Discrete Ill-Posed Problems*, SIAM, 1998.
- [11] —, *Analysis of discrete ill-posed problems by means of the l-curve*, SIAM Review, 34 (2001), pp. 561–580.
- [12] P. C. HANSEN AND D. P. O’LEARY, *The use of the l-curve in the regularization of discrete ill-posed problems*, SIAM J. Sci. Comput., 14 (2001), pp. 1487–1503.
- [13] K. M. HANSON AND D. WOLF, *Estimators for the cauchy distribution*, in Maximum Entropy and Bayesian Methods, G. R. Heidbreder ed., 1996, pp. 255–263.
- [14] D. HAO AND H. REINCHART, *Stable numerical fractional differentiation by mollification*, Numer. Funct. Anal. and Optimiz., 15 (1994), pp. 635–659.
- [15] J. D. HART, *Kernel regression estimation with time series errors*, Journal of the Royal Statistical Society. Series B, 53 (1991), pp. 173–187.
- [16] M. F. HUTCHINSON, *Smoothing noisy data with spline functions*, Numer. Math., 47 (1985), pp. 99–106.
- [17] D. MCCLAIN, *Numerical simulation of pink noise*, Disponible vía internet en: <http://www.rockefeller.edu/wli/1fnoise/mcclain01.pdf>, (2001).
- [18] C. E. MEJÍA AND D. MURIO, *Mollified hyperbolic method for coefficient identification problems*, Computers Math. Applic., 26 (1993), pp. 1–12.
- [19] —, *Numerical solution of generalized ihcp by discrete mollification*, Computers Math. Applic., 32 (1996), pp. 33–50.
- [20] E. MILOTTI, *1/f-noise: A pedagogical review*, Dipartimento di Fisica, Università di Udine. Disponible vía internet en: <http://arxiv.org/pdf/physics/0204033>, (2000).

- [21] D. MURIO, *The space marching solution of the inverse heat conduction problem and the identification of the initial temperature distribution*, Computers Math. Applic., 25 (1993), pp. 55–63.
- [22] D. MURIO, C. E. MEJÍA, AND S. ZHAN, *Discrete mollification and numerical differentiation*, Computers Math. Applic., 35 (1998), pp. 1–16.
- [23] D. A. MURIO, *The Mollification Method and the Numerical Solution of Ill-Posed Problems*, John Wiley, 1993.
- [24] D. P. RESTREPO, *Análisis de Registros de Porosidad y su Aplicación al Modelamiento Fractal de un Yacimiento*, Tesis de Maestría, Universidad Nacional de Colombia, Medellín, 2000.
- [25] G. WAHBA, *Spline models for observational data*, Regional Conference Series in Applied Mathematics. SIAM, 59 (1990).
- [26] G. WAHBA, G. GOLUB, AND M. HEATH, *Generalized cross validation as a method for choosing a good ridge parameter*, Technometrics, 21 (1979), pp. 215–223.
- [27] Y. WANG, *Smoothing spline models with correlated random errors*, Department of Statistics, University of Wisconsin. Technical Report No. 966, (1996).