

MODELOS DE MALLA BASADOS EN ESTIMADORES (A,U,Θ)

A. A. Legrá Lobaina

Instituto Superior Minero Metalúrgico de Moa, Holguín, Cuba

alegra@ismm.edu.cu

Presentado 15/11/2016 - Aceptado 23/06/2017

DOI: 10.15628/holos.2017.5351

RESUMO

Estimador Puntual Lineal Generalizado para la obtención de modelos de malla.

Se presenta una definición de modelos de malla donde sus nodos se obtienen mediante estimadores puntuales a partir de un conjunto finito de datos geométricos cuyas abscisas pertenecen a R^n y cuyas ordenadas son números reales. El concepto de estimador (A,U,Θ) es explicado y se especifican sus características básicas, destacándose su esencia generalizadora y sistémica. Se

identifican los estimadores de las clases $U\Theta$ y ΘU y se muestran casos particulares de estimadores conocidos tales como las Funciones de Base Radial, UPD, Interpoladores de Lagrange, Kriging e Inverso de una Potencia de la Distancia. Finalmente se ilustra en un ejemplo el cálculo del error de estimación del método UPD usando la fórmula de la varianza del error de estimación que presenta la Geoestadística para el Kriging Universal.

PALAVRAS-CHAVE: Modelos de malla, Estimador (A,U,Θ), Función de Base Radial, Interpolador de Lagrange, Kriging.

MESH MODELS BASED ON (A,U,Θ) ESTIMATORS

ABSTRACT

Punctual Generalized Linear Estimator for obtaining mesh models.

A definition of mesh models is presented where their nodes are obtained by punctual estimators from a finite set of geometric data whose abscissas belong to R^n and whose ordinates are real numbers. The concept of estimator (A,U,Θ) is explained and its basic characteristics are specified, emphasizing its

generalizing and systemic essence. The estimators of the classes $U\Theta$ and ΘU are identified and it is shown particular cases of known estimators such as the Radial Base Functions, UPD, Lagrange Interpolators, Kriging and Inverse Distance Power. Finally the estimation error calculus of the UPD method is illustrated in an example by using the formula of error variance introduced by the Universal Kriging Estimator of Geostatistics.

KEYWORDS: Mesh models, Estimator (A,U,Θ), Radial Basis Function, Lagrange interpolator, Kriging

1 INTRODUCCIÓN

Cualquier tecnología tiene como objetivo principal dar servicios y fabricar objetos y su propósito estratégico es comprender y modificar la realidad objetiva para satisfacer las necesidades del hombre; en este sentido se trata de un proceso de búsqueda sistemática de soluciones óptimas para problemas prácticos. Este proceso contempla, entre otras: actividades investigativas, industriales, económicas, culturales, cognitivas, de gestión y valorativas, que manifiestan la compleja interrelación entre los objetos y procesos que la componen.

Para lograr que una tecnología sea óptima (eficaz y eficiente respecto a la solución de los problemas que pretende resolver) es necesario conocer suficientemente los objetos y procesos que la componen. Este conocimiento solo puede ser obtenido mediante investigaciones científico-tecnológicas y generalmente se gestiona mediante modelos matemáticos de objetos y procesos tecnológicos (OPT) en el contexto de las diversas ramas de las ingenierías.

El estudio de estos procesos comienza con observación y medición de sus magnitudes físicas y evoluciona hacia la caracterización de todas sus magnitudes significativas así como las interrelaciones determinísticas y probabilísticas de interés. Cada uno de estos estudios implica la utilización de métodos y modelos matemáticos. Los resultados obtenidos permiten establecer bajo qué condiciones la tecnología resolverá eficazmente el problema práctico planteado y será eficiente su gestión.

Entre los modelos matemáticos más usados en el estudio de OPT están aquellos que presuponen que existe algún tipo de relación Causa-Efecto entre el comportamiento de magnitudes que describen el estado de las propiedades del OPT. Estas relaciones pueden ser de tres tipos: determinísticas, probabilísticas o mixtas, sin que esta precisión afecte lo que se plantea a continuación.

Sea un proceso que ocurre al implementar cierta tecnología y considere que cierta magnitud procesual está representada por la variable U y otras n magnitudes del proceso están representadas por las variables x_1, x_2, \dots, x_n . En este contexto, a partir de los datos, información y conocimiento disponibles, puede ser considerada la hipótesis gnoseológica: **Existe una relación causa-efecto entre el conjunto de las magnitudes x_1, x_2, \dots, x_n y la magnitud U** de manera que se convierten en tareas importantes:

- Conocer qué valores toma U para ciertos valores de las variables x_1, x_2, \dots, x_n .
- Conocer cuales valores de x_1, x_2, \dots, x_n , causan que U tome cierto valor que se conoce.

Para iniciar estos estudios deben ser caracterizadas cada una de estas variables y las relaciones entre ellas. Un caso relativamente simple es aquel donde las variables U y x_1, x_2, \dots, x_n son numéricas y la relación entre ellas se puede expresar formalmente mediante una función matemática (Bronshtein, 2007) que en el lenguaje de esta ciencia se escribe: $U=F(x_1; x_2; \dots; x_n)$.

Es conveniente denominar coordenada P al conjunto de valores $(x_1; x_2; \dots; x_n)$ de las magnitudes causales del proceso, entonces se escribe cada coordenada como $P=(x_1; x_2; \dots; x_n)$ y se emplea la notación $U=F(P)$ que describe matemáticamente el vínculo real entre U y x_1, x_2, \dots, x_n . Se dice que U es la variable dependiente y que x_1, \dots, x_n son las variables independientes.

No siempre es posible describir formalmente a F debido a las complejidades inherentes a la realidad objetiva y a la falta de datos, información y conocimiento sobre cada magnitud y sus interrelaciones. Por tanto, en buena parte de los casos de estudio hay que conformarse con una función matemática f que sea suficientemente representativa de F para los fines del estudio que se realiza. Para obtener f hay dos caminos principales que frecuentemente se combinan:

- Plantear una expresión $U=f(P)$ a partir del conocimiento empírico y teórico establecido.
- Asumir a $U=f(P)$ como un estimador puntual que permite obtener los nodos de un Modelo de Mallas que caracteriza a $U=F(P)$.

El objetivo del presente trabajo es sistematizar el conocimiento sobre los estimadores puntuales del tipo (A,U,Θ) que generan nodos de modelos de mallas.

2 MODELOS DE MALLA

Sea un conjunto de m puntos: $V=\{(P_i;U_i): \text{donde } P_i \in R^n \text{ y } U_i \in R\}$ tal que se cumple que si dos puntos son distintos entonces sus coordenadas son diferentes; al conjunto de coordenadas de los puntos de V se le denomina H .

Cada pareja de coordenadas $\{P_t;P_s\}$ que pueda vincularse mediante una relación binaria R_D sobre el conjunto H , definirá una conexión denominada $D_{ts}=[P_t,P_s,R_D]$. Se denomina Malla-D al conjunto de todas las conexiones que puedan ser establecidas entre puntos de H . A cada uno de los puntos que forman parte de una conexión se llama Nodo.

Análogamente se denomina Malla-M al conjunto de parejas de puntos tomados de V que puedan vincularse mediante la relación binaria R_M en una conexión $M_{ts}=[(P_t;U_t),(P_s;U_s),R_M]$.

Las conexiones entre coordenadas pueden ser hiper-curvas: $R_D = [X_{f_1}(t); X_{f_2}(t); \dots; X_{f_n}(t)]$, donde el parámetro real $t \in [a;b]$ y, además $X_{f_1}(t), \dots, X_{f_n}(t)$ son las funciones que generan las coordenadas de los puntos de la conexión. Esta última es una hiper-recta cuando tiene la forma: $R_D = [\alpha_1 t + \beta_1; \alpha_2 t + \beta_2; \dots; \alpha_n t + \beta_n]$ donde los coeficientes de los tipos α y β son números reales.

De manera semejante, las conexiones entre puntos de V pueden ser hiper-curvas de expresión $R_M = [X_{f_1}(t); X_{f_2}(t); \dots; X_{f_n}(t); U_f(t)]$, donde $X_{f_1}, \dots, X_{f_n}, U_f$ son las funciones que generan las coordenadas de los puntos de la conexión. Se pueden tomar estas conexiones como hiper-rectas: $R_M = [\alpha_1 t + \beta_1; \alpha_2 t + \beta_2; \dots; \alpha_n t + \beta_n; \alpha_u t + \beta_u]$.

Sean los puntos de la Tabla 1 que ejemplifica un conjunto que contiene 4 puntos:

Tabla 1: Un ejemplo de 4 puntos para $n=2$

X_1	X_2	U
0	0	1
1	0	1
0	1	1
1	1	2

En la Figura 1.a se ilustra una Malla-D de tipo triangular obtenida para las cuatro coordenadas de la Tabla 1, donde R_D conecta con rectas a las parejas de puntos. En este caso las conexiones solo se intersectan en los nodos comunes y la intersección entre dos triángulos colindantes es la frontera común; cuando dos triángulos no colindan la frontera es un conjunto vacío de puntos. Una malla que cumple esta propiedad se dice que es Simple y en caso contrario se dice No Simple.

En la Figura 1.b se muestra una Malla-M obtenida a partir de los puntos de la Tabla 1. Esta malla también tiene la característica de ser simple. Nótese que R_M define las conexiones posibles entre cada pareja de puntos de V como segmentos de rectas 3D cuyas proyecciones en el plano XY son las conexiones de la Malla-D.

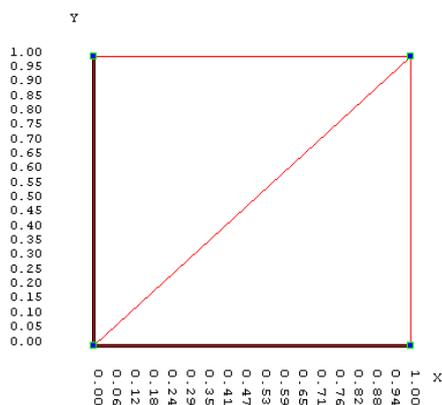
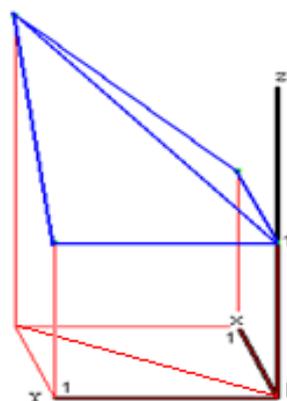


Figura 1: a. Malla-D Simple triangular (rojo).



b. Malla-M Simple triangular (azul)

La Figura 2.a muestra una Malla-D No Simple donde todos las coordenadas se interconectan (Malla-D Completa). La Figura 2.b muestra una Malla-M Simple de proyección rectangular donde las conexiones son rectas 3D. La relación R_M define las conexiones posibles entre cada pareja de puntos de V como segmentos de rectas del espacio geométrico de tres dimensiones cuyas proyecciones en el plano XY conforman rectángulos disjuntos dos a dos excepto en sus fronteras comunes.

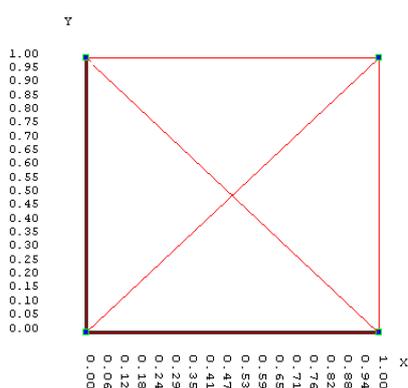
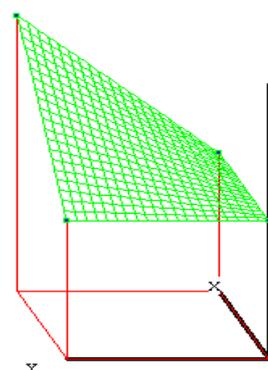


Figura 2: a. Malla-D triangular Completa.



b. Malla-M rectangular

Resumiendo, un Modelo de Malla puede definirse de la siguiente forma:

Sean $x_i, i=1, \dots, n$ las variables independientes componentes de la coordenada P ; y sea U la variable dependiente en una relación $U=F(P)$ donde la expresión F es desconocida pero se conoce su dominio $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$.

Sea f un modelo de F basado en el conocimiento disponible acerca de las relaciones entre U y P y sea un conjunto H que contiene r puntos distintos de R^n tales que pertenezcan a Ω . Supóngase que para cada punto de H con coordenadas P_k se puede obtener la estimación $U_k=f(P_k)$ de manera que se genera el conjunto V formado por los r puntos $(P_k;U_k)$.

Sea R_M una relación que conecta parejas de puntos de V y supóngase que a ciertas parejas de estos puntos $\{(P_t;U_t),(P_s;U_s)\}$ le corresponde una conexión $M_{ts}=[(P_t;U_t),(P_s;U_s)]$ que modela localmente el comportamiento de F en el espacio entre ambos puntos.

Entonces, al conjunto Malla- M de estas conexiones se le denomina **Modelo de Malla** de la relación $U=F(P)$.

Cuando $n=2$ los modelos de malla triangulares simples se obtienen relacionando parejas de puntos cuyas proyecciones en el plano XY son vértices de una triangulación de Delaunay (Chen y Xu, 2004). Si un triángulo de Delaunay del plano XY tienen las coordenadas no colineales P_1, P_2 y P_3 entonces los puntos del espacio XYU : $(P_1;U_1), (P_2;U_2)$ y $(P_3;U_3)$ definen un plano del espacio.

Para obtener una malla simple de proyección rectangular se siguen los siguientes pasos:

- Sobre el rango de x_1 se toman k_1+1 valores diferentes entre sí y sobre el rango de x_2 se toman k_2+1 valores diferentes entre sí de manera que: $x_{10}=x_{1\min}, x_{1k_1}=x_{1\max}, x_{20}=x_{2\min}, x_{2k_2}=x_{2\max}$.
- Cada una de las $r=(k_1+1)\times(k_2+1)$ coordenadas del conjunto H deberá construirse como una combinación de los valores ordenados de x_1 y de los valores ordenados de x_2 .
- Los rectángulos se estructuran con vértices $P_1=(x_{1i}; x_{2j}), P_2=(x_{1i+1}; x_{2j}), P_3=(x_{1i+1}; x_{2j+1}), P_4=(x_{1i}; x_{2j+1})$ donde $i=0,\dots,k_1$ y $j=0,\dots,k_2$. Nótese que la superficie definida por los puntos $(P_1;U_1), (P_2;U_2), (P_3;U_3)$ y $(P_4;U_4)$ no necesariamente son coplanares.

Los modelos de malla son muy útiles para el estudio del comportamiento de U bajo los diversos escenarios que puedan ser definidos por los cambios de comportamientos de las componentes de P en diferentes contextos geométricos, hiper-geométricos y no geométricos pero para que el Modelo de Malla sea un representante eficaz de F debe cumplirse que:

- Los datos disponibles acerca de P y de U en Ω aporten información y conocimiento capaces de acercar suficientemente las estimaciones $f(P)$ a los valores reales $U=F(P)$.
- Las propiedades funcionales del estimador f deben ser coherentes con las propiedades funcionales de F de manera que se conserven las propiedades del OPT.
- El conjunto H debe ser suficientemente denso y bien distribuido respecto a las características del comportamiento local y general de U en Ω .
- El modelo de malla seleccionado sobre H debe ser simple, robusto (responde adecuadamente a las variaciones de las coordenadas) y representativo.

El primer elemento está relacionado con la práctica del muestreo (Miller, 2005) que es esencialmente la acción de medir los valores reales U_i en un conjunto G bien seleccionado de m puntos de coordenadas P_i . En estos casos a W , formado por los puntos $(P_i;U_i)$, se le denomina Datos y constituye la fuente principal de información sobre el comportamiento real, local y general, de U en el dominio Ω .

A partir de los puntos de W , el estimador f obtiene los puntos de V y estos son los nodos de la Malla- M que modela a $U=F(P)$. El estimador f debe escogerse cuidadosamente porque debe poseer propiedades funcionales que garanticen entre otras cosas que V sea:

- Exacto. O sea: para cualquier dato $(P_k;U_k)$ se cumple que $f(P_k)=U_k$
- Acotado. O sea: si se estima en cualquier coordenada $P \in \Omega$, el resultado $f(P)$ pertenece al dominio definido por los datos U_k
- Óptimo respecto a propiedades, forma y topología (Victoria, 2006) y (Vidal, 2012).

3 ESTIMADORES (A,U,Θ)

Entre las diversas formas de tomar el estimador f está la que define la estimación como una combinación lineal (CL) de algunos o todos los datos de W y de valores relacionados con las coordenadas P_e del punto donde se quiere estimar $U_e=f(P_e)$.

Si se establece previamente cierta función Θ (o conjunto de funciones) que relaciona coordenadas de puntos, la intuición y la práctica han evidenciado que para definir al estimador f como una CL se tienen, entre otras, los siguientes modos:

- El valor estimado es una combinación lineal de ciertas relaciones Θ_{ei} entre las coordenadas P_e y las coordenadas de los datos de W :

$$U_e = \sum_{i=1}^m L_i \Theta_{ei} \quad (1)$$

- El valor U_e es una combinación lineal de los valores de U para los datos de W :

$$U_e = \sum_{i=1}^m \lambda_i U_i \quad (2)$$

Por supuesto, se necesita conocer los correspondientes valores de los coeficientes L_i y λ_i ($i=1,2,\dots,m$) y para ello deben tenerse en cuenta los datos conocidos, es decir: W y por supuesto las coordenadas P_e . Esto se concreta fácilmente para el caso que **f es un estimador exacto**, o sea que para cualquier dato $(P_i;U_i)$ de W se cumple que $f(P_i)=U_i$.

A partir de este momento supóngase que al menos una de las cotas U_k es diferente de 0 (porque si todos los valores de U_k son nulos entonces la modelación es trivial). Ahora evalúese la ecuación (1) para todos los puntos de W ; se obtienen las ecuaciones:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m L_i \Theta_{1i} = U_1 \\ \sum_{i=1}^m L_i \Theta_{2i} = U_2 \\ \dots \\ \sum_{i=1}^m L_i \Theta_{mi} = U_m \end{cases} \quad (3)$$

Que se puede escribir matricialmente como:

$$\begin{bmatrix} \Theta_{11} & \Theta_{12} & \dots & \Theta_{1m} \\ \Theta_{21} & \Theta_{22} & \dots & \Theta_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Theta_{m1} & \Theta_{m2} & \dots & \Theta_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \dots \\ L_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \dots \\ U_m \end{bmatrix} = [U_W] \quad (4)$$

Equivalente al sistema $[A][L]=[U_W]$, cuya solución es el vector (columna): $[L] = [A]^{-1}[U_W]$.

Entonces se puede escribir la ecuación (1) en forma de un producto consecutivo, primero producto de matrices y luego producto escalar de vectores:

$$\mathbf{U}_e = [L][\Theta_e] = [A]^{-1}[U_W] \bullet [\Theta_e] \quad (5)$$

Donde los elementos de $[\Theta_e]$ son: $\Theta_{e1}, \Theta_{e2}, \dots, \Theta_{em}$ y los elementos de $[U_W]$ son los valores conocidos de U según los datos de W . Nótese que $[L]$ y $[\Theta_e]$ son matrices columnas de m filas y en la práctica el producto $[L] \bullet [\Theta_e]$ se calcula como el producto escalar usual de vectores. Las matrices $[A]$, $[A]^{-1}$, $[A_T]$, $[A_T]^{-1}$ son cuadradas del mismo orden y siempre deberá cumplirse que el orden de todas las matrices y los vectores que intervienen en estos modelos, sea el mismo para que puedan ser realizados los productos descritos.

Es imprescindible puntualizar que para que exista la inversa de la matriz $[A]$ cuyos elementos se obtienen mediante cierta función Θ , son necesarios algunos requerimientos que en este trabajo no serán tratados.

La expresión Θ_{ij} puede definirse de varias maneras. En este contexto se presentan dos que pueden considerarse las de mayor uso:

$$a. \quad \Theta_{ij} = \xi(P_i; P_j) \quad (6)$$

Donde ξ es una única función real (función base) que opera sobre las coordenadas P_i y P_j . Un ejemplo de amplio uso es la distancia euclidiana que será definida más adelante.

$$b. \quad \Theta_{ij} = \psi_i(P_j) \quad (7)$$

Donde ψ_i es una función de un conjunto de funciones dadas (Base de Funciones) que se evalúa en el punto P_j .

Si se denomina a $[A_T]=[A]^T$ a la transpuesta de la matriz $[A]$ entonces, aplicando la relación de dualidad del producto escalar de vectores (Trujillo, 2001), se demuestra que se cumple que: $[A]^{-1} [U_W] \bullet [\Theta_e] = [A_T]^{-1} [\Theta_e] \bullet [U_W]$. Ahora se puede calcular:

$$\mathbf{U}_e = [A_T]^{-1} [\Theta_e] \bullet [U_W] \quad (8)$$

Asumiendo el vector $[\lambda_e] = [A_T]^{-1}[\Theta_e]$, entonces se tiene que $[A_T][\lambda_e]=[\Theta_e]$ equivalente a:

$$\begin{bmatrix} \Theta_{11} & \Theta_{12} & \dots & \Theta_{1m} \\ \Theta_{21} & \Theta_{22} & \dots & \Theta_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Theta_{m1} & \Theta_{m2} & \dots & \Theta_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \lambda_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Theta_{e1} \\ \Theta_{e2} \\ \dots \\ \Theta_{em} \end{bmatrix} \quad (9)$$

Y por tanto se obtiene (2): $U_e = [\lambda_e] \bullet [U_W] = \sum_{i=1}^m \lambda_i U_i$.

Queda demostrado que (1) y (2) conducen al mismo resultado si se calcula $[L] = [A]^{-1}[U_w]$ y $[\lambda_e] = [A_T]^{-1}[\Theta_e]$. Nótese que si la matriz $[A]^{-1}$ es simétrica, el resultado obtenido por (5) y (8) no cambia al intercambiar a los vectores $[U_w]$ y $[\Theta_e]$ en cualquiera de esas ecuaciones tal como ha mostrado Trujillo (2001). Es importante saber que los resultados de las ecuaciones (5) y (8) no cambian si las expresiones Θ_{ei} son sustituidas por Θ_{ie} y las expresiones Θ_{ij} son sustituidas por Θ_{ji} .

El estimador (5) tiene la característica de que cuando los valores $U_i=C$, son constantes y diferentes de 0, las estimaciones U_e no son idénticamente iguales a C como es de esperarse. Por

ejemplo, supóngase que: $W=\{(P_1;C), (P_2;C)\}$, $[A^{-1}] = \begin{bmatrix} 0 & f \\ f & 0 \end{bmatrix}$ y $[\Theta_e] = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix}$. Entonces:

$$U_e = \begin{bmatrix} 0 & f \\ f & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ C \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix} = C f (d_1 + d_2) \text{ que es una expresión variable respecto a } d_1 \text{ y } d_2 \text{ lo cual}$$

contradice lo que la intuición nos indica acerca de que el valor de U_e debiera ser C.

Para resolver esta situación puede suponerse que si a los datos U_i se les hace una traslación $Z_i=U_i-C$ y luego se aplica la fórmula (5) entonces basta sumar C a este resultado para obtener una estimación correcta. Para el ejemplo que se analiza:

$$U_e = [A]^{-1}[Z] \bullet [\Theta_e] + C = \begin{bmatrix} 0 & f \\ f & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix} + C = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \end{bmatrix} + C = 0 + C = C$$

En este procedimiento al valor C se le llama Deriva o Desplazamiento del estimador y puede ser generalizado como se verá en el próximo tópico.

4 ESTIMADORES (A,U,Θ) CON DERIVAS

Sea una función real $\varepsilon(P)$ que se denomina Deriva o Desplazamiento de la variable U la cual puede ser establecida de antemano o determinarse de manera que cumpla ciertas condiciones prefijadas. Para modelos geométricos simples se asume generalmente como un polinomio de grado pequeño que asocia un número real a cada coordenada P.

En general, cuando la deriva es conocida, se definen las dos ecuaciones generales (equivalentes) de los nuevos estimadores (A,U,Θ):

$$\begin{cases} U_e = [A]^{-1}[U] \bullet [\Theta_e] + \varepsilon(P_e) \\ U_e = [A_T]^{-1}[\Theta_e] \bullet [U] + \varepsilon(P_e) \end{cases} \quad (10)$$

Estas matrices y vectores se definen como sigue:

$$[A] = \begin{bmatrix} \Theta_{11} & \Theta_{12} & \dots & \Theta_{1m} \\ \Theta_{21} & \Theta_{22} & \dots & \Theta_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Theta_{m1} & \Theta_{m2} & \dots & \Theta_{mm} \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$[U] = \begin{bmatrix} U_1 - \varepsilon(P_1) \\ U_2 - \varepsilon(P_2) \\ \dots \\ U_m - \varepsilon(P_m) \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$[\Theta_e] = \begin{bmatrix} \Theta_{e1} \\ \Theta_{e2} \\ \dots \\ \Theta_{em} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Nótese que la ecuación (13) es de la forma $[\Theta_{ei}]$ y esta es la razón de que $[A]$ tenga la forma de la ecuación (11); si (13) cambia a la forma $[\Theta_{ie}]$ entonces deberá sustituirse en la matriz $[A]$ cada elemento Θ_{ij} por Θ_{ji} . Cuando la función Θ es simétrica (Bronshtein, 2007) entonces $\Theta_{ij} = \Theta_{ji}$ y por tanto los elementos de (11) y (13) pueden escribirse en cualquier orden de subíndices.

Es importante destacar que la matriz $[A]$, a la que puede denominarse Núcleo del Estimador, facilita el uso de la información conocida acerca de la distribución geométrica de los puntos de coordenadas P_i (o acerca de cualquier otro aspecto de utilidad). De manera análoga el vector $[\Theta_e]$ contiene información acerca de la relación entre las coordenadas del punto a estimar y las coordenadas de los puntos de W .

Para estimar el valor U_e a partir de los valores de W y de la coordenada P_e , se denomina Estimador (A,U,Θ) a aquel que calcula a U_e como la combinación algebraica definida en una de las ecuaciones de (10).

Estos estimadores pueden ser globales (usan en cada estimación todos los datos disponibles en W) o locales (solo se utilizan algunos de los datos disponibles en W) y en este último caso la estimación solo usa los datos más relevantes y además el proceso de cálculo es más eficiente respecto al uso de tiempo y de recursos computacionales. Sin embargo, si se realizan estimaciones locales, pudieran obviarse datos con información significativa.

5 CLASE DE LOS ESTIMADORES AU Θ O BREVEMENTE: CLASE U Θ

A esta clase pertenecen todos los estimadores que se escriben en la forma:

$$U_e = [A]^{-1}[U] \cdot [\Theta_e] + \varepsilon(P_e) \quad (14)$$

Sea el vector $[L]=[A]^{-1}[U]$ entonces cuando $\varepsilon(P)$ es conocida, se puede escribir directamente: $U_e = [L] \cdot [\Theta_e] + \varepsilon(P_e)$ que finalmente queda:

$$U_e = \sum_{i=1}^m L_i \Theta_{ei} + \varepsilon(P_e) \quad (15)$$

Cuando $\varepsilon(P)$ es desconocida, entonces la ecuación (14) se escribe:

$$U_e = [A]^{-1}([U_W] - [\varepsilon]) \cdot [\Theta_e] + \varepsilon(P_e) \quad (16)$$

$$\text{Tal que: } [\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon(P_1) \\ \varepsilon(P_2) \\ \dots \\ \varepsilon(P_m) \end{bmatrix} \quad (17)$$

También puede escribirse (16) como:

$$U_e = [L] \cdot [\Theta_e] + \varepsilon(P_e) \quad (18)$$

Donde $[L]$ y $\varepsilon(P)$ deberán ser determinados simultáneamente.

Con fines prácticos supóngase que la deriva tiene la forma:

$$\varepsilon(P) = \sum_{k=1}^t b_k \theta_k(P) = \begin{bmatrix} b_1 \\ \dots \\ b_t \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \theta_1(P) \\ \dots \\ \theta_t(P) \end{bmatrix} = [b] \cdot [\theta(P)] \quad (19)$$

Tal que las funciones $\theta_k(P)$ son conocidas y linealmente independientes, además los coeficientes b_k son desconocidos en este momento.

Para encontrar los valores de $[L]$ y de $[b]$ se obtiene un sistema de m ecuaciones al evaluar en (18) las coordenadas P_i y la ordenada U_i de cada punto de W .

$$\begin{cases} L_1\Theta_{11} + L_2\Theta_{12} + \dots + L_m\Theta_{1m} + b_1\theta_1(P_1) + \dots + b_t\theta_t(P_1) = U_1 \\ L_1\Theta_{21} + L_2\Theta_{22} + \dots + L_m\Theta_{2m} + b_1\theta_1(P_2) + \dots + b_t\theta_t(P_2) = U_2 \\ \dots \\ L_1\Theta_{m1} + L_2\Theta_{m2} + \dots + L_m\Theta_{mm} + b_1\theta_1(P_m) + \dots + b_t\theta_t(P_m) = U_m \end{cases} \quad (20)$$

Que se escribe en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \Theta_{11} & \Theta_{12} & \dots & \Theta_{1m} & \theta_1(P_1) & \theta_1(P_1) & \dots & \theta_t(P_1) \\ \Theta_{21} & \Theta_{22} & \dots & \Theta_{2m} & \theta_1(P_2) & \theta_2(P_2) & \dots & \theta_t(P_2) \\ \dots & \dots \\ \Theta_{m1} & \Theta_{m2} & \dots & \Theta_{mm} & \theta_1(P_m) & \theta_2(P_m) & \dots & \theta_t(P_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \dots \\ L_m \\ b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_t \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \dots \\ U_m \end{bmatrix} \Leftrightarrow [A \quad \theta_{mt}] \begin{bmatrix} L \\ b \end{bmatrix} = [U_w]$$

De la ecuación (16) se obtiene que:

$$U_e = [A]^{-1}[U_w] \cdot [\Theta_e] - [A]^{-1}[\varepsilon] \cdot [\Theta_e] + \varepsilon(P_e)$$

Dado que $[U_w]$ no es un vector idénticamente nulo, entonces existe un vector $[U_i]$ tal que $[U_w] \cdot [U_i] = 1$ y se cumple que: $[A]^{-1}[\varepsilon] \cdot [\Theta_e] = [A]^{-1}[\varepsilon] \cdot [\Theta_e] \cdot [U_w] \cdot [U_i]$.

Por ser conmutativo y asociativo el producto escalar entre vectores y aplicando la relación de dualidad mencionada, se deducen las igualdades: $[A]^{-1}[\varepsilon] \cdot [\Theta_e] \cdot [U_w] \cdot [U_i] = [\varepsilon] \cdot ([A]^{-1}[\Theta_e]) \cdot [U_w] \cdot [U_i] = [\varepsilon] \cdot [\Theta_e] \cdot ([A]^{-1}[U_w]) \cdot [U_i] = [\varepsilon] \cdot [\Theta_e] \cdot [L] \cdot [U_i] = [L] \cdot [\varepsilon] \cdot [\Theta_e] \cdot [U_i]$. A partir de esta última expresión se propone que:

$$[L] \cdot [\varepsilon] = 0 \quad (21)$$

Que se escribe:

$$\begin{bmatrix} L_1 \\ \dots \\ L_m \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^t b_k \theta_k(P_1) \\ \dots \\ \sum_{k=1}^t b_k \theta_k(P_m) \end{bmatrix} = 0$$

Y esto es cierto cuando se cumple simultáneamente que:

$$\begin{cases} L_1 \theta_1(P_1) + L_2 \theta_1(P_2) + \dots + L_m \theta_1(P_m) = 0 \\ L_1 \theta_2(P_1) + L_2 \theta_2(P_2) + \dots + L_m \theta_2(P_m) = 0 \\ \dots \\ L_1 \theta_t(P_1) + L_2 \theta_t(P_2) + \dots + L_m \theta_t(P_m) = 0 \end{cases} \quad (22)$$

Que se escribe en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \theta_1(P_1) & \theta_1(P_2) & \dots & \theta_1(P_m) \\ \theta_2(P_1) & \theta_2(P_2) & \dots & \theta_2(P_m) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \theta_t(P_1) & \theta_t(P_2) & \dots & \theta_t(P_m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_1 \\ L_2 \\ \dots \\ L_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix} \Leftrightarrow [\theta_{tm}] [L] = [0]$$

A partir de (20) y (22) se obtiene (23) donde se describe un sistema de ecuaciones lineales cuadrado de orden $m+t$ que permite obtener simultáneamente los elementos de $[L]$ y los coeficientes del modelo de deriva.

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^m L_i \Theta_{ij} + \sum_{k=1}^t b_k \theta_k(P_j) = U_j \\ \sum_{i=1}^m L_i \theta_h(P_i) = 0 \\ j = 1, 2, \dots, m \\ h = 1, 2, \dots, t \end{cases}$$

Que en forma matricial se escribe:

$$[A_+][L_+] = [U_{W+}] \Leftrightarrow \begin{bmatrix} A & \theta_{mt} \\ \theta_{tm} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_W \\ 0 \end{bmatrix} \quad (23)$$

Resolviendo el sistema (23) ahora se tiene:

$$U_e = \begin{bmatrix} A & \theta_{mt} \\ \theta_{tm} & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} U_W \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Theta_{e1} \\ \dots \\ \Theta_{em} \\ \theta_1(P_e) \\ \dots \\ \theta_t(P_e) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} L \\ b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Theta_e \\ \theta_e \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^m L_i \Theta_{ei} + \sum_{k=1}^t b_k \theta_k(P_e) \quad (24)$$

6 CLASE DE LOS ESTIMADORES AOU O BREVEMENTE: CLASE OU

A esta clase pertenecen todos los estimadores que tienen la forma:

$$U_e = [A_T]^{-1} [\Theta_e] \cdot [U] + \varepsilon(P_e) \quad (25)$$

Se define el vector $[\lambda_e] = [A_T]^{-1} [\Theta_e]$ como la solución del sistema de ecuaciones lineales:

$$[A_T][\lambda_e] = [\Theta_e] \quad (26)$$

Cuando $\varepsilon(P)$ es conocida se puede escribir:

$$U_e = [\lambda_e] \cdot [U] + \varepsilon(P_e) \quad (27)$$

Y esta expresión para estimar U_e también se formaliza de la forma:

$$U_e = \varepsilon(P_e) + \sum_{i=1}^m \lambda_i (U_i - \varepsilon(P_i)) \quad (28)$$

Cuando $\varepsilon(P)$ es desconocida, entonces la ecuación (27) se escribe como: $\varepsilon(P_e) = U_e - [\lambda_e] \cdot [U]$ que es equivalente a: $\varepsilon(P_e) = U_e - [\lambda_e] \cdot ([U_w] - [\varepsilon])$.

Y finalmente queda la ecuación: $\varepsilon(P_e) = U_e - [\lambda_e] \cdot [U_w] + [\lambda_e] \cdot [\varepsilon]$.

Aceptando que se cumple la condición:

$$[\lambda_e] \cdot [\varepsilon] = \varepsilon(P_e) \quad (29)$$

Entonces queda establecido que:

$$U_e = [\lambda_e] \cdot [U_w] \quad (30)$$

En particular, si la deriva se describe por (19) entonces para obtener los vectores $[\lambda_e]$ y $[b]$ (específicos para cada estimación) se necesita un sistema que los relacione simultáneamente. En este caso el sistema (26) se generaliza transformando convenientemente el sistema (23), es decir: se toma la transpuesta del sistema (23) y el vector independiente se define teniendo en cuenta (9) y (29). El sistema queda expresado:

$$[A_{T+}][\lambda_{e+}] = [\Theta_{e+}] \Leftrightarrow \begin{bmatrix} A_T & \theta_{mt} \\ \theta_{tm} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_e \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Theta_e \\ \theta_e \end{bmatrix}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^m \lambda_i \Theta_{ji} + \sum_{k=1}^t b_k \theta_k(P_j) = \Theta_{ej} \\ \sum_{i=1}^m \lambda_i \theta_h(P_i) = \theta_h(P_e) \\ j = 1, 2, \dots, m \\ h = 1, 2, \dots, t \end{array} \right. \quad (31)$$

El valor estimado se obtiene mediante la expresión dual:

$$U_e = \begin{bmatrix} A_T & \theta_{mt} \\ \theta_{tm} & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Theta_e \\ \theta_e \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_W \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_e \\ b \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_W \\ 0 \end{bmatrix} = [\lambda_e] \cdot [U_W] = \sum_{i=1}^m \lambda_i U_i \quad (32)$$

Es muy importante reconocer que las clases $U\Theta$ y ΘU conducen a resultados semejantes pero también es relevante saber que tanto el sistema (23) como el sistema (31) pueden ser simplificados o enriquecidos para adaptar las características de las soluciones $[L]$ ó $[\lambda_e]$ y de la deriva $\varepsilon(P)$ al contexto del problema específico a resolver.

7 EJEMPLOS DE ESTIMADORES $U\Theta$

Para construir un estimador $U\Theta$ tal que $\Theta_{ij}=\xi(P_i;P_j)$ se debe identificar una función ξ que, a partir de las coordenadas de dos puntos, proporcione un número real; además debe ser garantizada la existencia de la inversa de la matriz $[A]$ para los puntos del conjunto W (en ese caso se dice que ξ es W -Factible).

Por ejemplo:

- Para $n=2$ puede definirse: $\Theta_{ij} = \xi(P_i;P_j) = (ax_{1i}^c + bx_{1j}^d)(ex_{2i}^g + fx_{2j}^h)$, donde a, b, c, d, e, f, g, h son constantes reales.

Para los datos de la Tabla 1 se obtienen diversas superficies en dependencia de los valores de los parámetros a, b, c, d, e, f, g, h del modelo y del uso electivo de las ecuaciones (15) y (16).

- Si se toma $\Theta(P_i;P_j) = (2X_{1i}+X_{1j})(X_{2i}+3X_{2j})$ y donde $\varepsilon=0$, usando (15) se obtiene el vector $L=(5/6;-1/3;-1/3;1/3)$ y la ecuación $U=X_1X_2+1$.

En la Figura 3.a se muestra, a partir de su modelo de malla, el comportamiento geométrico de este paraboloides hiperbólico. Nótese que Θ no es simétrica.

- Si se toma $\Theta(P_i;P_j)=(X_{1i}+X_{1j})^2(X_{2i}+X_{2j})^3$ y $\varepsilon=0$, se obtiene el vector $L=(22;-3;-7;1)$ y la ecuación: $U = X_1^2(13X_2^3-6X_2^2-6X_2-2)-2X_1(6X_2^3-3X_2^2-3X_2-1)+(-6X_2^3+3X_2^2+3X_2+1)$.

En la Figura 3.b se muestra, mediante un modelo de malla, el comportamiento geométrico de esta función polinómica en X_1 y X_2 .

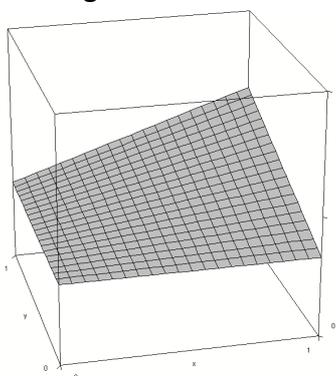
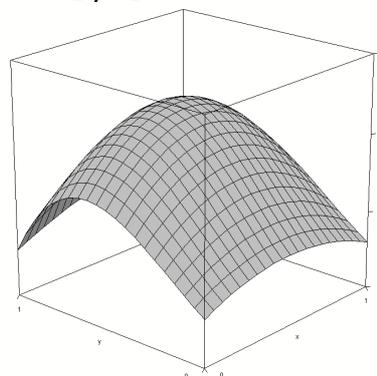


Figura 3: a. $U=X_1X_2+1$



b. $U=X_1^2(13X_2^3-6X_2^2-6X_2-2)-2X_1(6X_2^3-3X_2^2-3X_2-1)+(-6X_2^3+3X_2^2+3X_2+1)$

La Figura 3 corrobora el hecho de que para un conjunto de datos W pueden obtenerse diversos modelos de malla con comportamientos muy diferentes que obedecen a las características del estimador seleccionado.

- Para $n > 0$ usualmente se considera la distancia euclidiana: $\xi(P_i; P_j) = d(P_i; P_j) = d_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_{ik} - x_{jk})^2}$; en particular: $d_{ie} = \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_{ik} - x_{ek})^2}$. Entre los estimadores U_Θ que utilizan esta función ξ está el denominado como: Funciones de Base Radial (FBR).

7.1 Estimador FBR

Resumiendo lo explicado por Baxter (1992), Mcdonalda (2007) y Sánchez-Torres y Branch (2009) este método se basa en suponer que para el número real $R \geq 0$, denominado radio, la estimación U_e en el punto P_e se obtiene mediante la ecuación siguiente:

$$U_e = \sum_{i=1}^m L_i \Theta(d_{ie}; R) + \varepsilon(P_e) \quad (33)$$

Donde $\Theta_{ij} = \Theta(d_{ij}^2 + R^2)$ es simétrica y se denomina FBR.

Algunas FBR son las siguientes:

- Multicuadrática: $\Theta(d; R) = (d^2 + R^2)^q$ con $q > 0$ y $q \neq k$, $k \in \mathbb{N}$
- Inversa Multicuadrática: $\Theta(d; R) = (d^2 + R^2)^q$ con $q < 0$
- Multilogarítmica: $\Theta(d; R) = \log(d^2 + R^2)$
- Spline Cúbico Natural: $\Theta(d; R) = (d^2 + R^2)^{3/2}$. Caso particular de Multicuadrática.
- Spline de placa delgada: $\Theta(d; R) = (d^2 + R^2) \log(d^2 + R^2)$
- Gaussiana: $\Theta(d; a) = e^{-ad^2}$ con el parámetro a real y mayor que 0.

La función $\varepsilon(P)$ puede tomarse de diversas maneras. Una de ellas es definirla como un polinomio en P . Este polinomio puede establecerse de antemano teniendo en cuenta las características particulares del proceso que se modela, por ejemplo: $\varepsilon(P) = \varepsilon_0 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m U_i$. En otras ocasiones $\varepsilon(P)$ se determina mediante el sistema de la ecuación (23).

En el contexto de las FBR a las ecuaciones de (22) se les llama Condiciones de Contracción debido a que en ese caso la norma de $[L]$ se reduce, o también: Condiciones de Ortogonalidad debido a que la condición (21) indica que $[L]$ y $[\varepsilon]$ son vectores ortogonales entre sí.

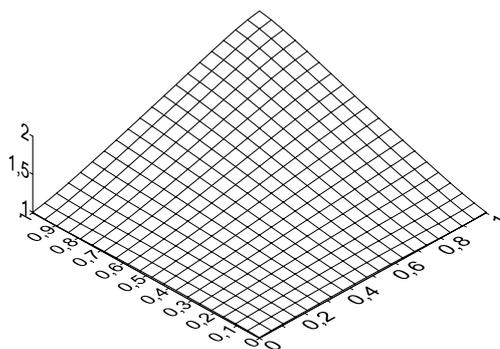


Figura 4: Modelo de Malla rectangular obtenido mediante FBR Multicuadrática

En la Figura 4 se muestra un modelo de malla para los datos de la Tabla 1 usando FBR con $R=0,02$, función Multicuadrática con $q=0,5$ y $\varepsilon=0$.

7.2 Estimador UPD (donde $\Theta = PD$ denomina la potencia de la distancia)

Sea \mathbf{d} la distancia euclidiana suavizada: $d_{ij} = \sqrt{(x_{i1} - x_{j1})^2 + \dots + (x_{in} - x_{jn})^2 + \delta^2}$ donde se designa factor de suavización al parámetro $\delta \in \mathbb{R}$. La distancia suavizada entre el punto P_i y el punto $P_e=(x_{e1}; \dots; x_{en})$ se define por: $d_{ie} = \sqrt{(x_{i1} - x_{e1})^2 + \dots + (x_{in} - x_{en})^2 + \delta^2}$.

Dados los datos W , se define $\Theta_{ij} = d_{ij}^q$ y $\Theta_{ie} = d_{ie}^q$. El valor de $q \neq 0$ debe garantizar la existencia de la inversa de $[A]$. La estimación se realiza mediante la ecuación (Legrá, 2016):

$$U_e = f_{\text{UPD}}(P_e; q; \delta; \varepsilon) = \sum_{i=1}^m L_i d_{P_e P_i}^q + \varepsilon(P_e) \quad (34)$$

El UPD es un caso particular del modelo multicuadrático generalizado del método de FBR pero en este contexto se considera una familia de estimadores basada en las variaciones de sus parámetros q , δ y $\varepsilon(P)$ y con ello se quieren destacar sus potencialidades metodológicas respecto a la búsqueda de modelos de mallas óptimos respecto a los requerimientos de cada caso.

En la Figura 5.a se muestra el modelo de malla rectangular utilizando el estimador UPD con parámetros $q=5$, $\delta=0,5$ y $\varepsilon=1$. Se determinó $[L] = [0,1491159576031; -0,03803160094395; 0,03803160094395; 0,0168845526444]$, su norma euclidiana es $\|L\| = 0,159416003809541$.

En la Figura 5.b se muestra un modelo de malla rectangular utilizando el estimador UPD con parámetros $q=5$, $\delta=0,5$ pero en este caso fueron calculados según la ecuación (23) el vector $[L] = [0,06051592803385; -0,06051592803385; -0,06051592803385; 0,06051592803385]$ y la deriva $\varepsilon=0,75+0,5 x_1 + 0,5 x_2$; se obtuvo $\|L\| = 0,121031856067689$.

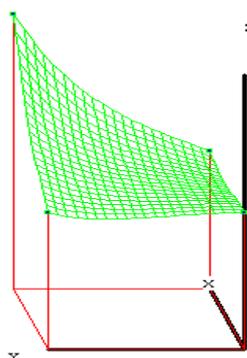
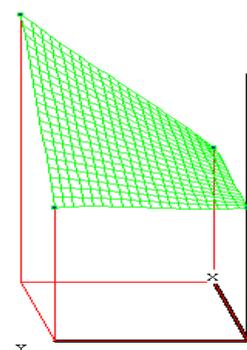


Figura 5: a. Malla-M según UPD, $\varepsilon=1$



b. Malla-M según UPD, ε es un plano

7.3 Estimador m-Funcional

Para construir estos estimadores $U\Theta$ debe escogerse un conjunto de m funciones $T_W = \{\psi_1(P); \psi_2(P); \dots; \psi_m(P)\}$ tal que para el conjunto W :

- Puedan ser calculados los elementos $\Theta_{ij} = \psi_j(P_i)$ y $\Theta_{ej} = \psi_j(P_e)$ de las matrices $[A]$ y $[\Theta_e]$.
- Exista la matriz $[A]^{-1}$

En ese caso se dice que el conjunto T_W es **W-Factible** y la ecuación (14) queda:

$$U_e = \begin{bmatrix} \Psi_1(P_1) & \dots & \Psi_m(P_1) \\ \Psi_1(P_2) & \dots & \Psi_m(P_2) \\ \dots & \dots & \dots \\ \Psi_1(P_m) & \dots & \Psi_m(P_m) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} U_1 - \varepsilon(P_1) \\ U_2 - \varepsilon(P_2) \\ \dots \\ U_m - \varepsilon(P_m) \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} \Psi_1(P_e) \\ \Psi_2(P_e) \\ \dots \\ \Psi_m(P_e) \end{bmatrix} + \varepsilon(P_e) \quad (35)$$

Para cualquier valor $n > 0$, la diversidad de mallas posibles está garantizada por la diversidad de conjuntos T_W que se pueden obtener tal que sean W -factibles. Hay casos notables:

7.3.1 Polinomios

Cada función $\psi_i(P)$ es un polinomio que depende de las variables x_1, x_2, \dots, x_n . Por ejemplo para $n=1$ se considera el conjunto $T_W = \{1; x; x^2; \dots; x^m\}$ que es W -Factible si las coordenadas de todos los puntos de W son diferentes entre sí; $[A]$ es denominada Matriz de Vandermonde (no es simétrica) y el estimador es equivalente al Interpolador de Lagrange (KINCAID y CHENEY, 1991).

Un ejemplo interesante, que muestra las potencialidades de este enfoque, es tomar para los datos de la Tabla 1 las funciones $\psi_1(P) = x_1^2$, $\psi_2(P) = x_2^2$, $\psi_3(P) = x_1 x_2$, $\psi_4(P) = x_2$ y la deriva $\varepsilon(P) = b_1 + b_2 x_1$. En este caso se resuelve el sistema (23) sustituyendo adecuadamente la matriz $[A]$ y se calculan los resultados: $[L] = [-1; 1; 1; -1;]$ y además: $b_1 = b_2 = 1$, de manera que la ecuación para realizar cualquier estimación puntual es: $U = -x_1^2 + x_2^2 + x_1 x_2 - x_2 + 1 + x_1$. En la figura 6.a se muestra el modelo de malla correspondiente.

Si se selecciona: $\psi_1(P) = 1$, $\psi_2(P) = x_1^2$, $\psi_3(P) = x_2$, $\psi_4(P) = x_1 x_2$ y la deriva $\varepsilon(P) = 0$ entonces se obtiene el resultado: $U = 1 + x_1 x_2$ que ya se ha mostrado gráficamente en la Figura 3.a.

7.3.2 Trigonómicas

Se puede tomar un subconjunto finito de $T_W = \{1; \sin(v(P)); \cos(v(P)); \sin(2v(P)); \cos(2v(P)); \dots\}$. Por ejemplo, para los datos de la Tabla 1 se puede asumir:

$$d = v(P) = 0,95x_1 + 1,05x_2$$

$$\psi_1(P) = \sin(d)$$

$$\psi_2(P) = \sin(2d)$$

$$\psi_3(P) = \sin(3d)$$

$$\psi_4(P) = \sin(4d)$$

$$\varepsilon(P) = b_1.$$

El estimador obtenido es:

$$U = 1 + 0,8131974320158 \sin(d) - 1,2609493922397 \sin(2d) +$$

$$0,8959162954508 \sin(3d) - 0,44816433522698 \sin(4d)$$

En la Figura 6.b se visualiza el modelo de malla correspondiente a este estimador m-Funcional trigonométrico

7.3.3 Exponenciales

Pueden obtenerse modelos sobre conjuntos tales como: $T_W = \{1; e^{-v(P)}; e^{-2v(P)}; \dots; e^{-(m-1)v(P)}\}$.

Para los datos de la Tabla 1 se puede definir:

$$d = v(P) = 0,95x_1 + 1,05x_2$$

$$\psi_1(P) = 1$$

$$\psi_2(P) = e^{-d}$$

$$\psi_3(P) = e^{-2d}$$

$$\psi_4(P) = e^{-3d}$$

$$\varepsilon(P) = 0.$$

Y se obtiene el estimador:

$$U = 3,90103789049 - \\ 18,69243375729 e^{-d} + \\ 37,22732758475 e^{-2d} - \\ 21,43593171796 e^{-3d}$$

El comportamiento del modelo de malla se visualiza en la Figura 6.c.

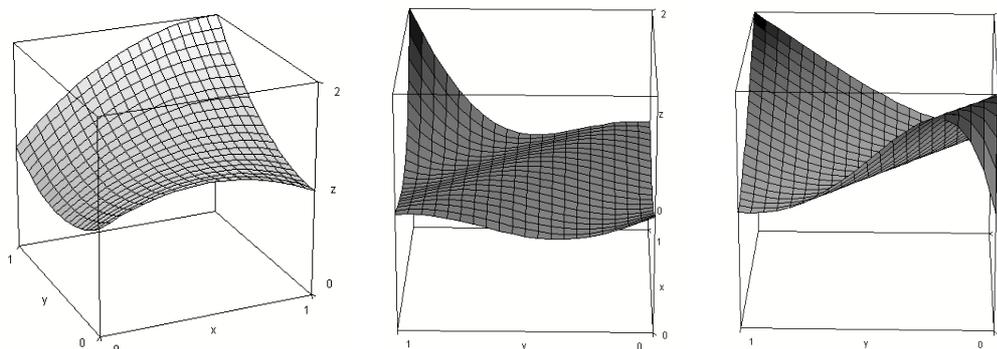


Figura 6: Estimador m-Funcional

a. Tipo Lagrange

b. Tipo trigonométrico

c. Tipo exponencial

Aunque a primera vista parezcan extraños, no deben descartarse los casos donde T_W esté formado por funciones de diversos tipos porque para cada realidad modelada, la malla de datos debe ser el mejor reflejo posible de esa realidad.

8 EJEMPLOS DE ESTIMADORES OU

8.1 Kriging puntual

En el contexto de la Geoestadística se pueden definir (Clark y Harper, 2007) y (Oliver, 2010) varios tipos de estimadores de Kriging Puntual. Para analizar algunos serán considerados los siguientes conceptos:

- $\mu = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m U_i$ es la media aritmética de los valores U_i .

- $\sigma^2 = \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (U_i - \mu)^2$ es la varianza de los datos U_i .
- $C(d)$ es una función de la distancia euclidiana d entre puntos. Se denomina Covarianza.
- $\gamma(d)$ es una función de la distancia euclidiana d entre puntos. Modela la variabilidad de U en función de la distancia d y se denomina Semivariograma. De existir ambas funciones se cumple que: $\gamma(d) = \sigma^2 - C(d)$.

8.1.1 Kriging Simple: Existe $C(d)$ y se conoce μ .

Se establece que:

- $\varepsilon(P) = \mu$
- $\Theta(d) = C(d)$ y por tanto $\Theta_{ij} = C(d_{ij})$. Se trata de una función simétrica.

Para estimar U_e en cada coordenada P_e se usa la ecuación $U_e = \mu + \sum_{i=1}^m \lambda_i (U_i - \mu)$ donde los valores de λ_i se obtienen al resolver la ecuación matricial: $[\lambda_e] = [A_T]^{-1} [\Theta_e]$.

Los estudiosos de la Geoestadística han propuesto (Clark y Harper, 2007) que la varianza del error de estimación está dado en este caso por:

$$\sigma_e = \sigma^2 - \sum_{i=1}^m \lambda_i C(d_{ei}) \quad (36)$$

Esta magnitud se puede escribir en forma matricial como: $\sigma_e = \sigma^2 - [\lambda_e] \bullet [\Theta_e]$ o también:

$$\sigma_e^2 = \sigma^2 - [A]^{-1} [\Theta_e] \bullet [\Theta_e] \quad (37)$$

8.1.2 Ordinario: Existe $\gamma(d)$ y no se conoce $\varepsilon(P) = C$

Se toma $\Theta(d) = \gamma(d)$ por tanto: $\Theta_{ij} = \gamma(d_{ij})$. Para obtener los valores de λ_i y el valor de C_e (específicos para cada estimación U_e) debe ser resuelto el sistema:

$$\begin{bmatrix} \gamma(d_{11}) & \gamma(d_{12}) & \dots & \gamma(d_{1m}) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & 1 \\ \gamma(d_{m1}) & \gamma(d_{m2}) & \dots & \gamma(d_{mm}) & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \dots \\ \lambda_m \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(d_{e1}) \\ \dots \\ \gamma(d_{em}) \\ 1 \end{bmatrix}$$

En el contexto de la Geoestadística, al requisito $\sum_{i=1}^m \lambda_i = 1$ se le llama Condición Universal.

Para estimar U_e en una coordenada dada P_e se usa la ecuación $U_e = \sum_{i=1}^m \lambda_i U_i$. El error de la varianza de estimación está dada por $\sigma_{e\lambda}^2 = \sum_{i=1}^m \lambda_i \gamma(d_{ei}) + C_e$ que de manera general se puede escribir:

$$\sigma_{e\lambda}^2 = [A]^{-1} [\Theta_e] \bullet [\Theta_e] + \varepsilon_\lambda(P_e) \quad (38)$$

8.1.3 Kriging Universal: Existe $\gamma(d)$ y no se conoce $\varepsilon(P)$ según la forma (22)

Se toma $\Theta(d)=\gamma(d)$ y es simétrica: $\Theta_{ij}=\gamma(d_{ij})$. Para obtener los valores de λ_i y de b_k se resuelve el sistema (31) y las estimaciones se obtienen según (32). El error de la varianza de estimación está dado por:

$$\sigma_e^2 = \sum_{i=1}^m \lambda_i \gamma(d_{ei}) + \sum_{k=1}^t b_k \theta_k(P_e) \quad \text{que se escribe igual que la ecuación (38).}$$

En la Figura 7.a se muestra en ejemplo de Kriging Ordinario para los datos de la Tabla 1 y con semivariograma lineal con Efecto Pepita: $\gamma(d) = 0,1 + 0,3d$.

Ha de destacarse que el Análisis Variográfico es un importante conjunto de técnicas para obtener semivariogramas que reflejen la variabilidad de U con respecto a las distancias entre las coordenadas de los datos. En los textos de Geoestadística al estimador Kriging se le denomina BLUE (Best Linear Unbiased Estimator) debido a que minimiza la magnitud Varianza de Error de Estimación σ_e^2 .

8.2 Inverso de una Potencia de la Distancia (IPD)

Puesto que la matriz [A] debe reflejar conocimiento útil acerca de la información que contienen las coordenadas P_i entonces pueden escribirse los elementos de esta matriz de manera que informen de una manera simple acerca de la relación geométrica de cada punto P_i con el punto P_e tomando $\Theta(d)=\frac{1}{d^q}$, $q>0$. Para este estimador, la matriz [A] incluye información sobre las coordenadas de los datos y también de la coordenada P_e del punto donde se estima.

$$[A] = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^m \Theta_{ek} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_{k=1}^m \Theta_{ek} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \sum_{k=1}^m \Theta_{ek} \end{bmatrix} = [A_T] \quad (39)$$

Asumiendo la notación $d_i^k = d_{ei}^k$ y definiendo:

$$\lambda_i = \frac{\left(\frac{1}{d_i^q}\right)}{\sum_{k=1}^m \left(\frac{1}{d_k^q}\right)} \quad (40)$$

Se obtiene el estimador IPD (Babak y Deutsch, 2008):

$$U_e = \frac{\left(\frac{1}{d_1^q}\right)}{\sum_{k=1}^m \left(\frac{1}{d_k^q}\right)} U_1 + \frac{\left(\frac{1}{d_2^q}\right)}{\sum_{k=1}^m \left(\frac{1}{d_k^q}\right)} U_2 + \dots + \frac{\left(\frac{1}{d_m^q}\right)}{\sum_{k=1}^m \left(\frac{1}{d_k^q}\right)} U_m = \frac{\sum_{i=1}^m \left(\frac{1}{d_i^q}\right) U_i}{\sum_{k=1}^m \left(\frac{1}{d_k^q}\right)} \quad (41)$$

Esta forma de presentar al estimador IPD tiene la insuficiencia de que no existe $[A]^{-1}$ cuando P_e coincide con cualquiera de las coordenadas P_i ; sin embargo, simplificando la expresión (41), se obtiene una expresión que elude la insuficiencia señalada:

$$U_e = \frac{\sum_{i=1}^m \left[\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^m (d_j^q) \right] U_i}{\sum_{i=1}^m \left[\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^m (d_j^q) \right]_i} \quad (42)$$

En la Figura 7.b se muestra un ejemplo de Inverso de Potencia de la Distancia para los datos de la Tabla 1 y potencia $q=2$.

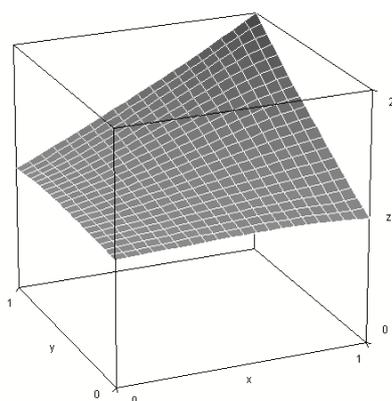
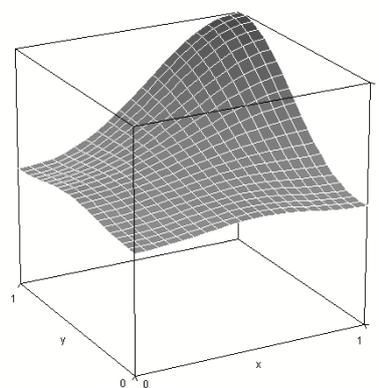


Figura 7: a. Malla-M según Kriging Ordinario



b. Malla-M según IPD ($q=2$)

9 UN COMENTARIO ACERCA DEL ERROR DE ESTIMACIÓN

Existen teorías específicas en las cuales se definen los conceptos y algoritmos de algunos estimadores AU Θ que se han analizado en este trabajo y en ciertos casos se proponen ecuaciones para calcular algún tipo de error de estimación. Muchas de estas expresiones tienen un marcado sentido exclusivo respecto al estimador en cuestión y en ocasiones solo proporcionan acotaciones del error que no son útiles a la hora de utilizarlas en la toma de decisiones prácticas.

Entre las formas posibles de calcular el error de una estimación se destaca la ecuación (38) que establece una fórmula para obtener la varianza del error de estimación para el caso de Kriging con semivariogramas. En el futuro será de interés estudiar si esta fórmula puede ser extendida al estimador IPD y a cualquier otro estimador ΘU que tenga definido Θ_{ij} en una de las formas explicadas en el tópico 3. También pudieran deducirse fórmulas análogas para algunos estimadores U Θ .

En el caso del estimador UPD (y otros semejantes de la familia FBR) queda fácilmente establecida operacionalmente la expresión (40) sin que esto signifique que su resultado es válido:

$$\sigma_{eL}^2 = [A_T]^{-1} [\Theta_e] \bullet [\Theta_e] + \epsilon_\lambda(P_e) \quad (40)$$

Como ejemplo, para los datos de la Tabla 1, para $P_e=(0,3;0,7)$ se calculan los valores U_e y σ_e^2 para un estimador UPD con $q=1$, $\delta=0$ y $\epsilon(P)=b_1 + b_2 x_1 + b_3 x_2$.

En la práctica se obtienen la matriz $[A_+]^{-1}=[A_{T+}]^{-1}$ que tiene los siguientes elementos:

$$\begin{bmatrix} -0,426776695 & 0,426776695 & 0,426776695 & -0,426776695 & 0,75 & -0,5 & -0,5 \\ 0,426776695 & -0,426776695 & -0,426776695 & 0,426776695 & 0,25 & -0,5 & 0,5 \\ 0,426776695 & -0,426776695 & -0,426776695 & 0,426776695 & 0,25 & 0,5 & -0,5 \\ -0,426776695 & 0,426776695 & 0,426776695 & -0,426776695 & -0,25 & 0,5 & 0,5 \\ 0,75 & 0,25 & 0,25 & -0,25 & -0,146446609 & -0,707106781 & -0,707106781 \\ -0,5 & -0,5 & 0,5 & 0,5 & -0,707106781 & 1,414213562 & 0 \\ -0,5 & 0,5 & -0,5 & 0,5 & -0,707106781 & 0 & 1,414213562 \end{bmatrix}$$

Se calcula el vector:

$$\begin{aligned} [L_+] &= [A_+]^{-1}[U_{W+}] \\ &= [A_+]^{-1} [1; 1; 1; 2; 0; 0; 0] \\ &= [-0,4267766951; 0,4267766948; 0,4267766951; -0,4267766951; 0,75; 0,5; 0,5] \end{aligned}$$

A partir de este resultado pueden escribirse el vector [L] y la deriva $\varepsilon(P)$:

$$[L] = [-0,4267766951; 0,4267766948; 0,4267766951; -0,4267766951]$$

$$\varepsilon(P) = 0,75+0,5 x_1 +0,5 x_2.$$

Para calcular P_e se obtiene:

$$[\Theta_{e+}] = [0,7615773105; 0,4242640687; 0,9899494936; 0,7615773105; 1; 0,3; 0,7].$$

Ahora se calcula la estimación UPD en P_e mediante la expresión (34):

$$U_e = [L_+] \cdot [\Theta_{e+}] = 1,203506495$$

Este resultado también puede obtenerse usando la fórmula (32) válida para Kriging Universal. Asumiendo que d es la distancia euclidiana usual, que $\gamma(d)=d$ y considerando el vector:

$$[\Theta_{e+}] = [0,7615773105; 0,4242640687; 0,9899494936; 0,7615773105; 1; 0,3; 0,7]$$

Se calcula:

$$\begin{aligned} [\lambda_{e+}] &= [A_{T+}]^{-1}[\Theta_{e+}] \\ &= [0,203506495; 0,496494; 0,096494; 0,203506495; -0,119211; -3,26 \cdot 10^{-10}; -2,42 \cdot 10^{-10}] \end{aligned}$$

De donde se infiere que:

$$[\lambda_e] = [0,2035064951; 0,4964935047; 0,096493505; 0,2035064951]$$

Ahora se computa:

$$\begin{aligned} U_e &= [\lambda_e] \cdot [U] \\ &= [0,2035064951; 0,4964935047; 0,096493505; 0,2035064951] \cdot [1, 1, 1, 2] \\ &= 1,203506495 \end{aligned}$$

Para calcular el valor de σ_{eL}^2 se utiliza la ecuación (38). Primero se calcula:

$$\begin{aligned} [A_T]^{-1}[\Theta_e] \cdot [\Theta_e] &= [\lambda_e] \cdot [\Theta_e] \\ &= [0,203506495; 0,49649351; 0,09649351; 0,203506495] \cdot \\ &\quad [0,76157731; 0,424264069; 0,989949494; 0,761577315] \end{aligned}$$

$$= 0,6161399092$$

Ahora se calcula:

$$\varepsilon_{\lambda}(P_e) = [-0; 11921134; -3,26 \cdot 10^{-10}; -2,42 \cdot 10^{-10}] \cdot [1; 0,3; 0,7] = -0,1192113446$$

$$\sigma_{eL}^2 = 0,6161399092 - 0,1192113446 = 0,4969285646$$

También se puede calcular directamente σ_{eL}^2 si se obtiene el producto:

$$\sigma_{eL}^2 = [A_{T+}]^{-1} [\Theta_{e+}] \cdot [\Theta_{e+}] = 0,4969285645$$

Como error de estimación puede asumirse el valor:

$$\sigma_{eL} = \sqrt{\sigma_{eL}^2} = \sqrt{0,4969285645} = 0,7049316027$$

J. K. Yamamoto (2000) ha propuesto otra significativa formulación para aproximar el error de estimación por Kriging la cual ha denominado Varianza de Interpolación: $S_e^2 = \sum_{i=1}^m \lambda_i (U_i - U_e)^2$

donde debe cumplirse que $\lambda_i \geq 0$ y la Condición Universal. A partir de esta expresión se puede escribir la forma general: $S_e^2 = [\lambda_e] \cdot [U_{DC}] = [A_T]^{-1} [\theta_e] \cdot [U_{DC}]$ donde los elementos del vector $[U_{DC}]$ son de la forma $(U_i - U_e)^2$.

La validez de estas ecuaciones deberá ser estudiada para cualquier estimador de las clases ΘU y ΘU incluyendo variantes que sean útiles en los casos en que: algunos valores de λ_i sean negativos, o no se cumpla la Condición Universal, o la función Θ no sea un semivariograma autorizado (Oliver, 2010). En particular, para el ejemplo UPD que se analiza, la fórmula de J.K. Yamamoto es válida y su valor es $S_e^2 = 0,1620916015$ de manera que $S_e = 0,4026060127$.

10 CONCLUSIONES

Se ha establecido una definición de modelos de malla donde la búsqueda de sus nodos está basada en la aplicación de estimadores puntuales a partir de un conjunto finito de datos $(P_i; U_i)$ cuyas abscisas pertenecen a R^n y cuyas ordenadas son números reales.

Ha sido explicado el concepto de estimador (A, U, Θ) y sus características básicas, argumentándose su esencia generalizadora y sistémica. Se especifican las clases $U\Theta$ y ΘU así como la relación que puede establecerse entre ellos, especialmente cuando el Núcleo del Estimador es simétrico. La validez y utilidad de este enfoque se ilustra mediante casos particulares de estos estimadores donde se ejemplifica la práctica algorítmica de algunos de ellos.

Se propone el estudio de generalizaciones del uso de la Varianza de Estimación del Kriging Universal y de la Varianza de Interpolación de Yamamoto para calcular el error de estimación para otros estimadores de las clases $U\Theta$ y ΘU . Se ha ilustrado el beneficio de esta tarea con un ejemplo de cálculo práctico del error de estimación del estimador UPD.

11 REFERENCIAS

BABAK, O. y DEUTSCH, C. 2008: "Statistical approach to inverse distance interpolation". Stochastic Environmental Research and Risk Assessment 23(5): 543-553.

- BAXTER, B. 1992: "The Interpolation Theory of Radial Basis Functions". PhD Thesis, University of Cambridge. [consultado: 8 de Marzo de 2015]. Disponible en: <http://arxiv.org/pdf/1006.2443v1>
- BRONSHTEN, I. N.; SEMENDYAYEV, K. A.; MUSIOL, G. y MÜHLIG, H. 2007: "Handbook of Mathematics". Springer-Verlag, Berlin, 1163 p. ISBN: 978-3-540-72121-5
- CHEN, Long y XU, Jin-Chao. 2004: "Optimal Delaunay Triangulations". Journal Computations Mathematics, 22(2) pp. 299-308. [consultado: 21 de Noviembre de 2015]. Disponible en: <http://www.wias.berlin.de/people/si/course/files/chenxu04optdt.pdf>
- CLARK, I. y HARPER, W. 2007: "Practical geostatistics". Second Edition, Ecosse North America Llc, publishers. Kinkos, Westerville, Ohio USA, 318 p.
- KINCAID, D. y CHENEY, W. 1991: "Numerical analysis mathematics of scientific computing". Brooks/Cole Publishing Company Pacific Grove, California USA, 690 p.
- LEGRÁ LOBAINA, A. A.; LAMORÚ REYES, A. y CALA HINOJOSA, A. 2016: "Evaluación de modelos de variables geo-tecnológicas en un bloque de un yacimiento laterítico cubano: Quinta parte: Optimización combinatoria del Método UPD". Minería y Geología, 32(4). ISSN: 1993-8012.
- MCDONALDA, D. B.; GRANTHAMA, W. J.; TABORB, W. L. y MURPHYC, M. J. 2007: "Global and local optimization using radial basis function response surface models". Applied Mathematical Modelling, 31(10), pp. 2095–2110, October. [consultado: 11 de agosto de 2015]. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2006.08.008>
- MILLER, I.; FREUND, J. & JOHNSON, R. 2005: "Probabilidades y Estadísticas para ingenieros". Volumen I y II de la Cuarta Edición. Prentice-Hall Hispanoamericana S.A., México, 624 p. ISBN: 0-13-712-761-8
- OLIVER, M. 2010: "The Variogram and Kriging" in Handbook of Applied Spatial Analysis. Springer Berlin Heidelberg, p. 319-352. ISBN: 978-3-642-03647-7. DOI: 10.1007/978-3-642-03647-7_17
- SÁNCHEZ-TORRES, G. & BRANCH, J. W. 2009: "Un procedimiento geométrico para la reconstrucción de superficies mediante funciones de base radial de soporte compacto". Revista Facultad Ingeniería de la Universidad de Antioquia, (48):119-129. ISSN: 0120-6230.
- TRUJILLO CODORNIÚ, R. A.; LORES VIDAL, M. y RASÚA LÓPEZ, M. 2001: "Algoritmo eficiente para procesos de estimación geoestadísticos". Revista Minería y Geología, 18(3-4): 73-75. ISSN: 0258-5979. [consultado: 16 de Diciembre de 2015]. Disponible en: <http://revista.ismm.edu.cu/index.php/revistamg/article/download/220/204>.
- VIDAL, V; WOLF, C. y DUPONT, F. 2012: "Combinatorial mesh optimization". The Visual Computer 28(5) pp. 511-525. ISSN 0178-2789. [consultado: 9 de Abril de 2015]. Disponible en: <http://liris.cnrs.fr/Documents/Liris-5258.pdf>
- VICTORIA NICOLÁS, M. 2006: "Optimización de forma y topología con malla fija y algoritmos genéticos". PhD Thesis, Universidad Politécnica de Cartagena [consultado: 17 de Septiembre de 2015]. Disponible en: <http://www.upct.es/~deyc/tesis/tesisMVN.pdf>
- YAMAMOTO, J. K. 2000: "An Alternative Measure of the Reliability of Ordinary Kriging Estimates". Mathematical Geology, 2000, 32(4): p. 489-509. DOI:10.1023/A:1007577916868