

G. DI COLA * S. SEATZU (**)

Identificazione numerica di parametri in equazioni differenziali ordinarie (**)

1 - Introduzione

Sia

$$(1.1) \quad x' = f(t, x; \mathbf{u}), \quad x(t_0) = x_0 \quad t \in [t_0, t_f]$$

un'equazione differenziale ordinaria (ODE) con condizione iniziale, nella quale \mathbf{u} rappresenta un vettore incognito di scalari (parametri concentrati) o di funzioni (parametri distribuiti).

Assegnato allora un vettore $\tilde{\mathbf{x}}$ di osservazioni in $n+1$ punti $\{t_1, \dots, t_n\}$ di $[t_0, t_f]$ si deve valutare \mathbf{u} in modo che la relativa soluzione della (1.1) sia in buon accordo con $\tilde{\mathbf{x}}$.

Questo tipo di problema si presenta in numerosi settori tra loro molto diversi: per un survey sulle applicazioni e suoi metodi risolutivi si veda ad esempio [10].

Il metodo proposto in questo lavoro, come risulta dal contesto, è validamente applicabile soltanto quando:

(i) si ha una ragionevole conoscenza del livello di noise sui dati;

(ii) figura un solo parametro distribuito, diversamente intervengono complicazioni numeriche tali da rendere i risultati poco attendibili;

(*) Indirizzo dagli A.A.: G. DI COLA, Dipartimento di Matematica, Università di Parma, 43100 Parma, Italy; S. SEATZU, Dipartimento di Matematica, Università di Cagliari, 09100 Cagliari, Italy.

(**) Lavoro eseguito nell'ambito del « Centro Interuniversitario di Analisi Numerica e Matematica Computazionale ». — Ricevuto: 28-IX-1984.

(iii) è noto da informazioni a priori che, qualora \mathbf{u} rappresenta un parametro distribuito, \mathbf{u} è almeno una funzione continua in $[t_0, t_f]$.

Il procedimento risolutivo di uso più frequente è basato sul « metodo dei valori iniziali » [1]: utilizzando una stima iniziale di \mathbf{u} si minimizza (con un procedimento iterativo) il residuo integrato

$$(1.2) \quad R_I(\mathbf{u}) = \sum_1^n w_i \{x(t_i; \mathbf{u}) - \tilde{x}_i\}^2 \quad w_i \in \mathbb{R}^+,$$

dove $x(t; \mathbf{u})$ è la soluzione della ODE (1.1) relativa ad \mathbf{u} e w_i è il peso dell' i -esimo scarto quadratico.

Questo approccio tuttavia pur portando in molti casi a buoni risultati, presenta le seguenti notevoli limitazioni [17]:

(a) La soluzione della ODE (1.1) può essere molto sensibile al valore iniziale; se questo non è esatto, può risultare molto difficile ottenere una valida integrazione della (1.1).

(b) È richiesta una stima iniziale di \mathbf{u} non molto distante dalla effettiva, diversamente la successione generata può non convergere.

(c) Vi è un notevole lavoro computazionale da svolgere, perchè ad ogni iterazione si deve risolvere completamente l'equazione (1.1) con i nuovi valori di \mathbf{u} .

(d) Quando la f è lineare in \mathbf{u} , il metodo non presenta alcuna semplificazione.

L'osservazione (c) è nell'ipotesi che $R_I(\mathbf{u})$ venga minimizzata con un metodo diretto; se si ricorre al metodo del gradiente, ad ogni iterazione si debbono risolvere l'equazione (1.1) e la sua aggiunta.

Questi inconvenienti possono essere ridimensionati e talvolta eliminati seguendo il procedimento di regolarizzazione successivamente descritto.

Quando la (1.1) è costituita da un sistema di ODE con parametri concentrati, il metodo si può facilmente adattare. Dal punto di vista risolutivo un dato essenziale è rappresentato dal numero di parametri da identificare: risulta sostanzialmente indifferente la loro appartenenza ad una sola equazione o ad un sistema di equazioni. In presenza di parametri distribuiti le difficoltà crescono, indipendentemente dal fatto che la (1.1) sia un'equazione o un sistema.

Infatti dal punto di vista numerico (come risulta in 3) ogni parametro distribuito richiede la identificazione di un vettore di scalari che può essere di non piccola dimensione.

2 - Parametri concentrati

Sia da identificare nella (1.1) il vettore

$$(2.1) \quad \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_m)^T \quad m \geq 1.$$

Allo scopo sia assegnato un vettore $\tilde{\mathbf{x}}$ di osservazioni mediante la relazione

$$(2.2) \quad \tilde{x}_i = x(t_i) + \varepsilon_i \quad i = 1, \dots, n, \quad n > m,$$

dove gli $\{\varepsilon_i\}_1^n$ rappresentano valori di variabili aleatorie indipendenti, normalmente distribuite, con

$$(2.2)' \quad E[\varepsilon_i] = 0, \quad E[\varepsilon_i^2] = \sigma^2 \quad i = 1, \dots, n.$$

Supposta nota la varianza σ^2 sui dati, il metodo proposto si articola come segue:

A - Si approssima la soluzione della ODE (1.1) mediante la spline cubica di regolarizzazione \tilde{s} , associata al vettore $\tilde{\mathbf{x}}$ con varianza σ^2 ed al dato iniziale x_0 .

Per la costruzione della \tilde{s} si rinvia a 4.

B - Si minimizza in \mathbb{R}^m il residuo differenziale

$$(2.3) \quad R_D(\mathbf{p}) = \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \{\tilde{s}'(t) - f(t, \tilde{s}(t); \mathbf{p})\}^2 dt.$$

La giustificazione alla minimizzazione di $R_D(\mathbf{p})$ in \mathbb{R}^m è dovuta essenzialmente alle seguenti considerazioni:

(j) La ODE (1.1) può essere vista come una restrizione deterministica di una ODE stocastica del tipo

$$x'(t) = f(t, x; \mathbf{u}) + \eta(t) \quad x(t_0) = x_0, \quad t \in [t_0, t_f]$$

dove, per le ipotesi (2.2), (2.2)', $E[\eta(t)] = 0$ ed $E[\eta^2(t)] = \sigma^2 \quad \forall t \in [t_0, t_f]$.

(jj) Il processo di smoothing mediante splines è stabile, in quanto costituisce un procedimento di regolarizzazione alla Tikhonov. Questo è ben evidenziato dalle proprietà di convergenza in media integrale di \tilde{s} ed \tilde{s}' ad x ed x' , quando x è una funzione smooth ed i suoi valori nodali sono del tipo (2.2)-(2.2)' [11], [13].

Da notare che nelle fasi A e B la validità della stima iniziale non è molto rilevante, dato che essa interviene soltanto nella costruzione della spline di regolarizzazione. Il valore x_0 viene considerato alla stregua degli altri valori osservati $\{\tilde{x}_i\}_1^n$, non essendovi in generale nelle applicazioni nessun motivo che giustifichi l'ipotesi di una sua maggiore attendibilità.

C - Indicati con $\tilde{\mathbf{p}}$ il vettore di minimizzazione ottenuto e con $x(t; \tilde{\mathbf{p}})$ la corrispondente soluzione della (1.1), si considera il residuo integrato

$$(2.4) \quad R_r(\tilde{\mathbf{p}}) = \frac{1}{n} \sum_1^n \{x(t_i, \tilde{\mathbf{p}}) - \tilde{x}_i\}^2.$$

Se $R_r(\tilde{\mathbf{p}}) \simeq \sigma^2$ si assume $\tilde{\mathbf{p}}$ come valida approssimazione del vettore da identificare.

Se invece si ritiene $R_r(\tilde{\mathbf{p}})$ eccessivamente maggiore di σ^2 ($R_r(\tilde{\mathbf{p}}) \gg \sigma^2$), si considera $\tilde{\mathbf{p}}$ una approssimazione iniziale valida per minimizzare iterativamente il residuo regolarizzato

$$(2.5) \quad R(\mathbf{p}; \varrho) = \int_{t_0}^{t_f} \{x(t; \mathbf{p}) - \tilde{s}(t)\}^2 dt + \varrho \|\mathbf{p}\|_2^2,$$

dove ϱ è prefissato in \mathbb{R}^+ .

L'introduzione di \tilde{s} nella (2.5) è motivata dalle suddette proprietà di convergenza integrale della smoothing spline alla funzione smooth da ricostruire.

Nella minimizzazione di $R(\mathbf{p}; \varrho)$ il peso del termine stabilizzante viene ottimizzato empiricamente, nel tentativo di fare in modo che nel corrispondente minimizzatore $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}(\hat{\varrho})$ risulti $R_r(\hat{\mathbf{p}}) \simeq \sigma^2$.

L'idea di usare le splines nell'identificazione di parametri concentrati in ODE non è nuova; in particolare essa è stata sviluppata e sperimentata in [17] con il ricorso a tecniche interattive.

Oss 2.1. La funzione $R(\mathbf{p}; \varrho)$, prefissato ϱ in \mathbb{R}^+ , possiede minimo globale in un insieme limitato di \mathbb{R}^m . Infatti $R(\mathbf{p}; \varrho)$ è una funzione continua, definita positiva con $\lim_{\|\mathbf{p}\| \rightarrow \infty} R(\mathbf{p}; \varrho) = \infty$.

Tuttavia non sempre esiste in \mathbb{R}^m un solo punto di minimo globale.

Il secondo addendo in $R(\mathbf{p}; \varrho)$ pur non comportando l'unicità del minimo globale è utile, in quanto stabilizza l'algoritmo iterativo di minimizzazione.

Una condizione sufficiente a garantire in \mathbb{R}^m l'unicità del minimo globale per $R(\mathbf{p}; \varrho)$ è soddisfatta quando la (1.1) è del tipo seguente

$$(2.6) \quad x'(t) = f(t)x(t) + \beta g(t) + \gamma h(t) \quad x(t_0) = x_0, \quad t \in [t_0, t_f],$$

con f, g, h funzioni continue in $[t_0, t_f]$ e $\mathbf{p} = (\beta, \gamma)$ vettore da identificare.

In tale situazione, particolare ma molto importante nelle applicazioni, $R(\mathbf{p}; \varrho)$ risulta infatti strettamente convessa in \mathbb{R}^m .

In generale non è detto che esista un valore $\hat{\varrho}$ di ϱ tale che nel corrispondente minimizzatore $\hat{\mathbf{p}}$ di $R(\mathbf{p}; \hat{\varrho})$ risulti $R_I(\hat{\mathbf{p}}) \simeq \sigma^2$.

Tale possibilità dipende essenzialmente dalla regolarità della soluzione $\tilde{\mathbf{x}}$ della (1.1), dalla posizione e numero dei dati $\{\tilde{x}_i\}_1^n$ e dal relativo livello di noise.

3 - Parametri distribuiti

Sia da identificare in $[t_0, t_r]$ il parametro distribuito u , sotto le ipotesi di regolarità già introdotte per la funzione u e per il vettore $\tilde{\mathbf{x}}$ delle osservazioni.

Il metodo proposto si articola allora nelle seguenti fasi.

A' - Si procede come nella fase A.

B' - Decomposto l'intervallo $[t_0, t_r]$ mediante un vettore $\boldsymbol{\tau} = (\tau_1, \dots, \tau_k)^\tau$, siano $S_{4,\boldsymbol{\tau}}$ il corrispondente spazio delle splines cubiche e $\{B_1, \dots, B_k; k = k' + 2\}$ una sua base di B -splines normalizzate.

Per le proprietà e gli aspetti computazionali si vedano [3], [14].

Posto allora

$$(3.1) \quad u(t) = \sum_1^k q_i B_i(t) \quad \mathbf{q} = (q_1, \dots, q_k)^\tau,$$

si minimizza il residuo differenziale $R_D(\mathbf{q})$, partendo con k molto piccolo ed incrementandone il valore fintanto che si notano sensibili riduzioni dei relativi minimi. Sia $\hat{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^{\hat{k}}$ il vettore così ottenuto.

La giustificazione alla minimizzazione di $R_D(\mathbf{q})$ è basata sulle proprietà di approssimazione di una funzione smooth in $S_{4,\boldsymbol{\tau}}$, oltre che sulle considerazioni già introdotte al punto B.

C' - Si valuta il residuo integrato $R_I(\hat{\mathbf{q}})$. Se $R_I(\hat{\mathbf{q}}) \simeq \sigma^2$, si ritiene $\hat{\mathbf{q}}$ una buona caratterizzazione del parametro u che si assume nella forma (3.1); diversamente $\hat{\mathbf{q}}$ viene utilizzato come stima iniziale per la minimizzazione di $R(\mathbf{q}; \varrho)$.

Oss. 3.1. Assegnato $\varrho \in \mathbb{R}^+$, il funzionale $R(u; \varrho)$ possiede un solo minimo in $L_2[t_0, t_r]$ quando la (1.1) si presenta nella forma seguente

$$(3.2) \quad x'(t) = \alpha(t)x(t) + \beta(t)u(t), \quad x(t_0) = x_0, \quad t \in [t_0, t_r]$$

con α, β funzioni assegnate e continue.

Infatti in tale situazione $R(u; \varrho)$, qualunque sia $\varrho \in \mathbb{R}^+$, risulta continuo, positivo e strettamente convesso.

Oss. 3.2. La spline regolarizzante \bar{s} viene rappresentata con una spline cubica naturale, nonostante l'ordine di approssimazione delle spline cubiche complete sia superiore, perchè mancano informazioni sulla x' in $\{t_0, t_f\}$.

Tali difficoltà non si presentano nella approssimazione del parametro u , per cui tale funzione viene approssimata nello spazio completo $S_{4,\tau}$.

Oss. 3.3. Quando la ODE presenta parametri concentrati oltre uno distribuito, il metodo descritto è immediatamente adattabile. Basterà infatti approssimare u in $S_{4,\tau}$ ed identificare oltre il vettore caratterizzante u anche quello dei parametri concentrati.

Le stesse considerazioni valgono quando la (1.1) costituisce un sistema di ODE con un parametro concentrato ed alcuni parametri scalari.

4 - Dettagli sul metodo

Costruzione della smoothing spline.

Indicato con $\hat{t} = (t_0, t_1, \dots, t_n)^x$ il vettore delle ascisse del dato iniziale e dei punti di osservazione, sia $S_{4,\hat{t}}^*$ lo spazio relativo delle spline cubiche naturali.

Sia inoltre $\{M_0, M_1, \dots, M_n\}$ una sua base di B-splines [7]. Di conseguenza ogni spline $s \in S_{4,\hat{t}}^*$ si può esprimere come

$$(4.1) \quad s(t) = \sum_0^n \alpha_i M_i(t) \quad t \in [t_0, t_f].$$

Posti allora $H^2[t_0, t_f] = \{f: f, f' \in AC[t_0, t_f], f'' \in L_2[t_0, t_f]\}$, $\tilde{x}_0 = x_0$ e prefissato δ in \mathbb{R}^+ , si considera in $H^2[t_0, t_f]$ il funzionale

$$(4.2) \quad J_H(x; \delta) = F(x) + \delta G(x), \quad \text{dove}$$

$$(4.2) \quad F(x) = \frac{1}{n+1} \sum_0^n \{x(t_i) - \tilde{x}_i^2\}^2, \quad G(x) = \int_{t_0}^{t_f} \{x''(t)\}^2 dt.$$

Il minimizzatore di $J_H(x; \delta)$ in $H^2(t_0, t_f]$ è una spline $s_\delta \in S_{4,\hat{t}}$ [12].

Tenuto conto della (4.1) la minimizzazione di $J_{\mathbf{H}}(x; \delta)$ in $H^2[t_0, t_f]$ è allora riconducibile a quella di

$$(4.3) \quad J(\alpha; \delta) = \frac{1}{n^*} \|M\alpha - \hat{\mathbf{x}}\|^2 + \delta \alpha^T \Omega \alpha, \quad \text{essendo}$$

$$(4.3)' \quad n^* = n+1, \quad \|\cdot\| = \|\cdot\|_2, \quad \alpha = (\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n)^T, \quad \hat{\mathbf{x}} = (x_0, \tilde{x}_1, \dots, \tilde{x}_n)^T = (x_0, \tilde{\mathbf{x}}^T)^T$$

$$\text{e, per } i, j = 0, 1, \dots, n, \quad (M)_{ij} = M_j(t_i), \quad (\Omega)_{ij} = \int_{t_0}^{t_f} M_j''(t) M_i''(t) dt.$$

Quando la decomposizione di $[t_0, t_f]$ è uniforme, la matrice Ω può essere assegnata analiticamente con grande facilità; in ogni caso si tratta di una matrice simmetrica semidefinita positiva a banda ($(\Omega)_{ij} = 0$ per $[i-j] \geq 3$), facilmente ottenibile con una formula di quadratura composta avente precisione algebrica 2.

Per la proprietà di minimo supporto delle B -splines, anche la matrice M è a banda con la stessa ampiezza di Ω . Prefissato δ in \mathbb{R}^+ , essendo $N(M) \cap N(\Omega) = \{0\}$, esiste un solo minimizzatore $\hat{\alpha}_\delta$ di $J(\alpha; \delta)$ così definito

$$(4.4) \quad \hat{\alpha}_\delta = A(\delta) \hat{\mathbf{x}}, \quad A(\delta) = (M^T M + n^* \delta \Omega)^{-1} M^T.$$

Noto σ^2 , in base al metodo proposto da Mallows [8], [2], la scelta ottimale di δ è rappresentata dal minimizzatore in \mathbb{R}^+ della funzione

$$(4.5) \quad V(\delta) = \frac{1}{n^*} \|(I - MA(\delta)) \hat{\mathbf{x}}\|^2 - \frac{\sigma^2}{n^*} \text{Tr}(I - MA(\delta))^2 + \frac{\sigma^2}{n^*} \text{Tr}(MA(\delta))^2.$$

Pertanto la smoothing spline \tilde{s} è univocamente caratterizzata dalla soluzione del seguente problema

$$(4.6) \quad \text{minimizzare } J(\alpha; \tilde{\delta}) \text{ in } \mathbb{R}^{n+1}, \text{ essendo } \tilde{\delta} \text{ il minimizzatore di } V(\delta).$$

Il problema (4.6) può essere agevolmente risolto mediante un uso opportuno della «generalized singular value decomposition» (GSVD) [16].

Allo scopo si osserva preliminarmente che la matrice Ω (simmetrica e semidefinitiva positiva) si può esprimere (Choleski) nella forma

$$(4.7) \quad \Omega = H^T H \quad \text{con } H \text{ triangolare.}$$

Per la GSVD [16] esistono due matrici ortogonali U, V ed una non singolare X per cui

$$(4.8) \quad U^T M X = D', \quad V^T H X = D'',$$

essendo D', D'' matrici diagonali.

Poichè la matrice M è ben condizionata, si dimostra [6] che lo è anche la X .

Utilizzando adeguatamente la (4.8), $J(\alpha; \delta)$ e $V(\delta)$ possono essere trasformate nel modo seguente

$$(4.9)' \quad \mathcal{J}(\beta; \delta) = \frac{1}{n^*} \|D'\beta - \hat{y}\|^2 + \delta \|D''\beta\|^2,$$

$$(4.9)'' \quad \beta = X^{-1}\alpha, \quad \hat{y} = U^x \hat{x};$$

$$(4.10)' \quad V(\delta) = \frac{1}{n^*} \|(I - D'D(\delta))\hat{y}\|^2 - \frac{\sigma^2}{n^*} \text{Tr}(I - D'D(\delta))^2 + \frac{\sigma^2}{n^*} \text{Tr}(D'(\delta))^2,$$

$$(4.10)'' \quad D(\delta) = (D'^2 + n^* \delta D''^2)^{-1} D'.$$

Le (4.9)-(4.10) consentono una facile risoluzione del problema (4.6).

Infatti, ottenute le matrici D' , D'' , essendo $D(\delta)$ diagonale, si calcola facilmente $\tilde{\delta}$; successivamente si minimizza immediatamente $\mathcal{J}(\beta; \tilde{\delta})$ ottenendo

$$(4.11) \quad \tilde{\beta} = \beta_{\tilde{\delta}} = D(\tilde{\delta})\hat{y}, \quad \tilde{\alpha} = \alpha_{\tilde{\delta}} = X\tilde{\beta}.$$

Il vettore $\tilde{\alpha}$ così ottenuto, in base alla (4.1), caratterizza completamente la smoothing spline \tilde{s} .

Il metodo esposto è conveniente soprattutto quando si debbono considerare più situazioni sperimentali corrispondenti alle stesse ascisse di osservazione.

In tal caso infatti le matrici D' , D'' restano invariate e le valutazioni successive sono tutte numericamente precise e pochissimo onerose.

Minimizzazione del residuo differenziale.

Generalmente, il numero degli scalari da determinare è molto piccolo quando \mathbf{u} è un vettore e non è notevole (pur essendo in generale maggiore) quando \mathbf{u} è un parametro distribuito.

Di conseguenza nel primo caso si può minimizzare $R_p(\mathbf{u})$ risolvendo il sistema normale relativo, nel secondo mediante il metodo QR.

È importante rilevare che, in entrambe le suddette situazioni non è necessaria alcuna stima iniziale di \mathbf{u} .

Se la f è lineare in alcuni parametri e non lineare in altri, è da preferirsi il metodo della separabilità o della proiezione variabile [6].

Minimizzazione del residuo regolarizzato.

Per minimizzare $R(\mathbf{u}; \varrho)$, pur non disponendo di alcuna dimostrazione sulla vantaggiosità della scelta operata, si è utilizzato il metodo del gradiente

$$\mathbf{u}^{(i+1)} = \mathbf{u}^{(i)} - \varrho_i \text{grad } R(\mathbf{u}^{(i)}; \varrho) \quad i = 0, 1, \dots,$$

con ϱ_i stimato empiricamente per semplicità computazionale.

Il calcolo del gradiente nei vari iterati è stato effettuato mediante la risoluzione ad ogni passo dell'equazione aggiunta oltre che dell'equazione di stato.

Esempio.

$$x' = \alpha x(t - \tau) - \beta x(t), \quad x(t_0) = x_0, \quad t \in [t_0, t_f],$$

con τ prefissato in \mathbb{R}^+ , $x(t) = 0$ per $t < t_0$ e $\mathbf{p} = (\alpha, \beta)^T$ vettore da identificare.

Dopo alcune trasformazioni si trova

$$\frac{1}{2} \frac{\partial R}{\partial \alpha} = \int_{t_0}^{t_f} \lambda(t) x(t - \tau) dt + \varrho \alpha, \quad \frac{1}{2} \frac{\partial R}{\partial \beta} = - \int_{t_0}^{t_f} \lambda(t) x(t) dt + \varrho \beta,$$

essendo

$$\lambda'(t) + \alpha \lambda(t + \tau) - \beta \lambda(t) + (x - \delta)(t) = 0, \quad \lambda(t) = 0 \quad \text{per } t \geq t_f,$$

$$\text{grad } R(\mathbf{p}; \varrho) = \left(\frac{\partial R}{\partial \alpha}, \frac{\partial R}{\partial \beta} \right)^T.$$

5 - Applicazioni numeriche

5.1 - La biodegradazione di una sostanza organica in un liquido può essere descritta dalla seguente ODE [4]

$$(5.1) \quad C' = -vC/(k + C) \quad C(0) = C_0,$$

dove C è la concentrazione della sostanza organica, v la velocità di decadimento e k la costante di Michaelis. Nella (5.1) $\mathbf{u} = (v, k)^T$ rappresenta il vettore da identificare.

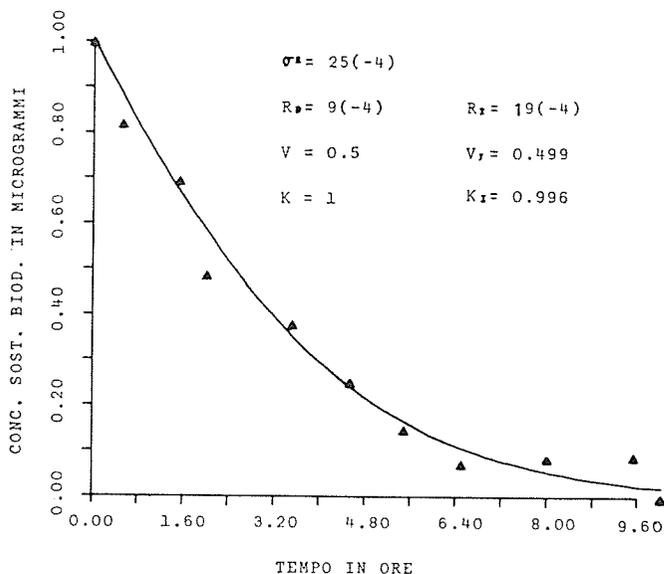


Fig. 1

I dati sperimentati dalla Fig. 1 sono stati ottenuti aggiungendo un rumore bianco con $\sigma^2 = 25(-4)$ alla soluzione della (5.1) con $v = 0.5$, $k = 1$, $C_0 = 1$. La curva tracciata rappresenta la soluzione della (5.1) relativa ai parametri identificati V_I, C_I .

Per $\sigma^2 < 25(-4)$ la curva esatta (corrispondente a $\sigma^2 = 0$) e quella identificata sono molto vicine; per $\sigma^2 \ll 25(-4)$ sono praticamente indistinguibili.

5.2 - La dinamica di una popolazione a due stadi è descritta [15] dall'equazione con ritardo

$$(5.2) \quad N'(t) = \alpha N(t - \tau) - \beta N(t),$$

$$N(t_0) = N_0 \quad t \in [t_0, t_f] \quad \tau \in \mathbb{R}^+, \quad N(t) = 0 \quad t < t_0.$$

Nella (5.2) N indica la densità della popolazione, α il tasso di reclutamento, β il tasso di mortalità e γ il tempo di sviluppo. Il vettore da identificare è $\mathbf{u} = (\alpha, \beta)^T$.

In questo caso si è considerata la varianza σ^2 nell'intervallo $[0, 25]$ che corrisponde, tenuto conto della diversa entità delle grandezze, ad un livello di inquinamento dei dati analogo al precedente.

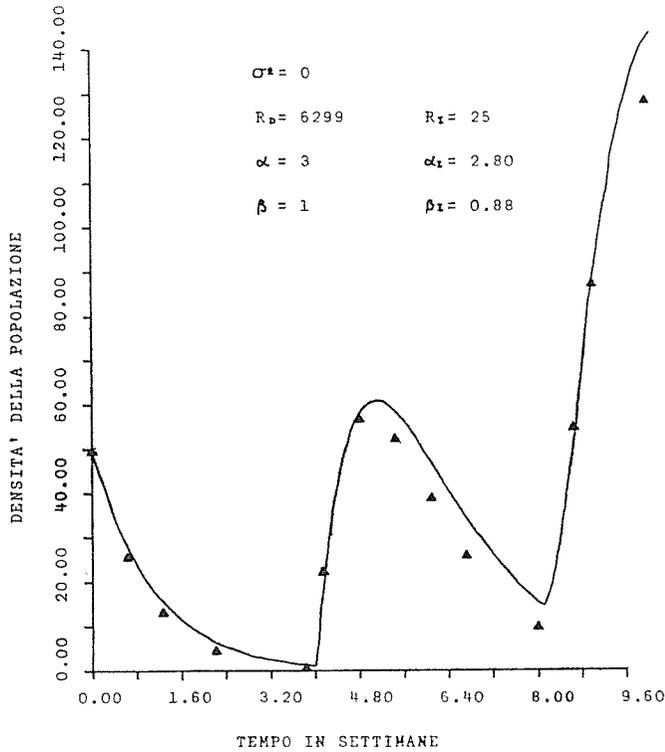


Fig. 2

I dati sperimentali delle Figure 2, 3 sono stati ottenuti risolvendo la (5.2) con $\alpha = 3$, $\beta = 1$, $N_0 = 50$, $\tau = 4$; quelli delle Figure 4, 5 contengono un noise bianco aggiuntivo con $\sigma^2 = 25$.

Nelle Figure 2, 4 e 3, 5 le curve di identificazione costituiscono le soluzioni della ODE (5.2) relative ai parametri α_I, β_I identificati rispettivamente con la minimizzazione del residuo differenziale e di quello regolarizzato.

5.3 - L'equazione (5.2) è stata trasformata, con l'aggiunta di un parametro variabile, nella seguente

$$(5.3) \quad \begin{aligned} N'(t) &= \alpha N(t - \tau) - (\beta + u(t))N(t), \\ N(t_0) &= N_0, \quad N(t) = 0 \quad t < t_0. \end{aligned}$$

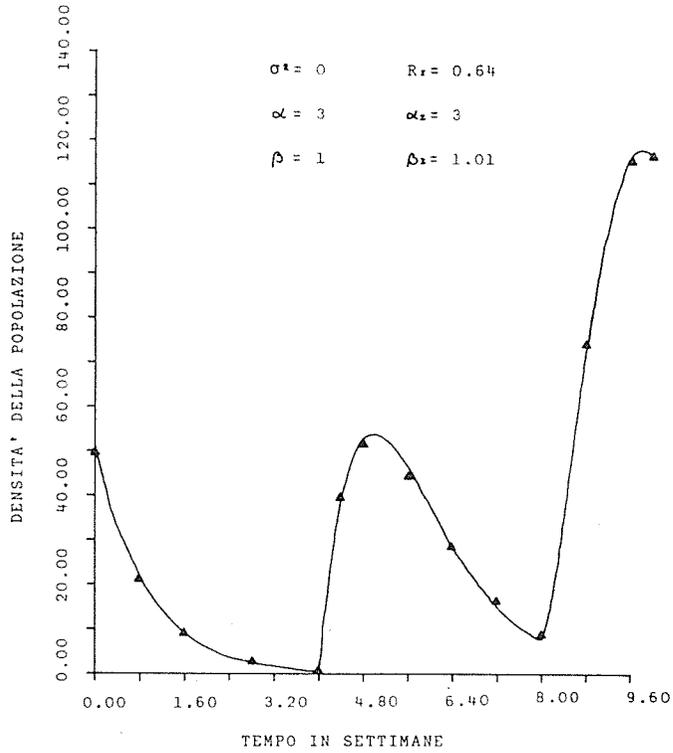


Fig. 3

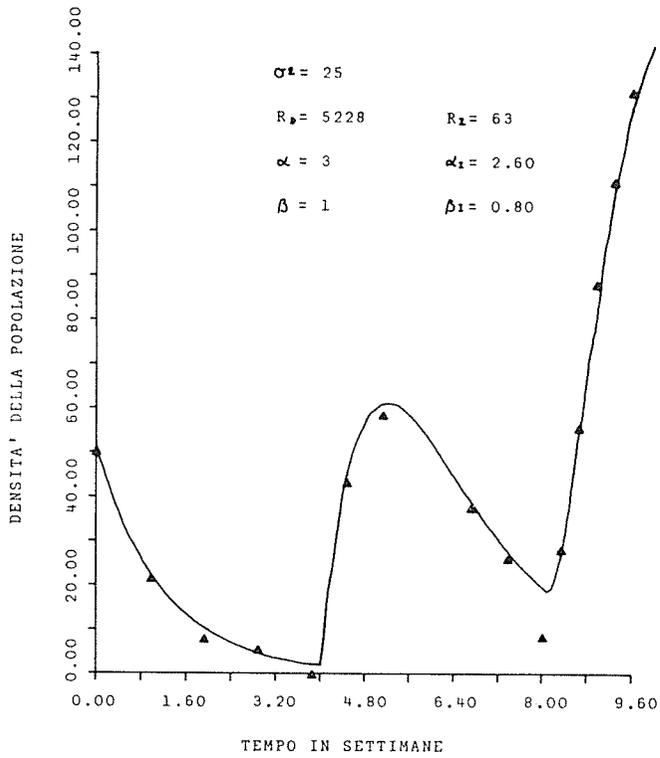


Fig. 4

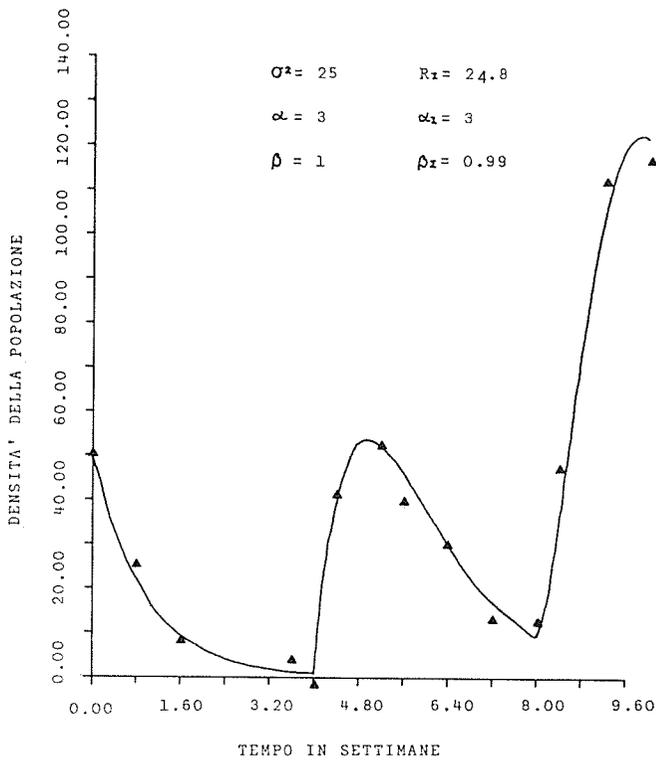


Fig. 5

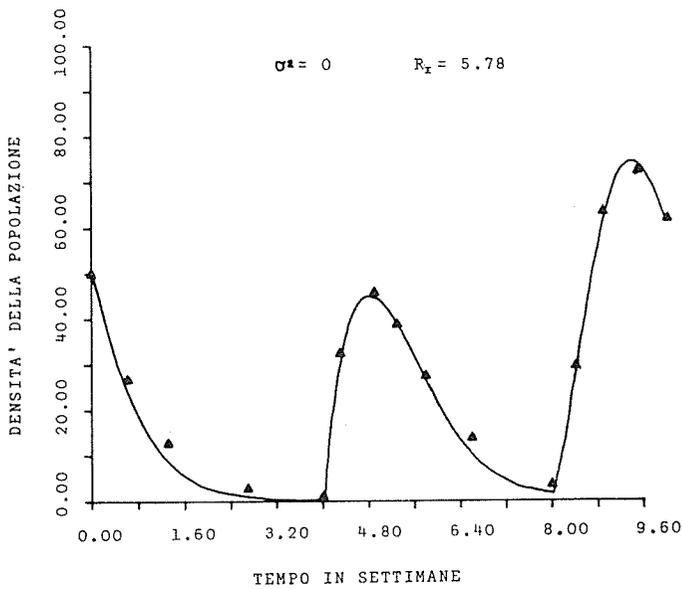


Fig. 6

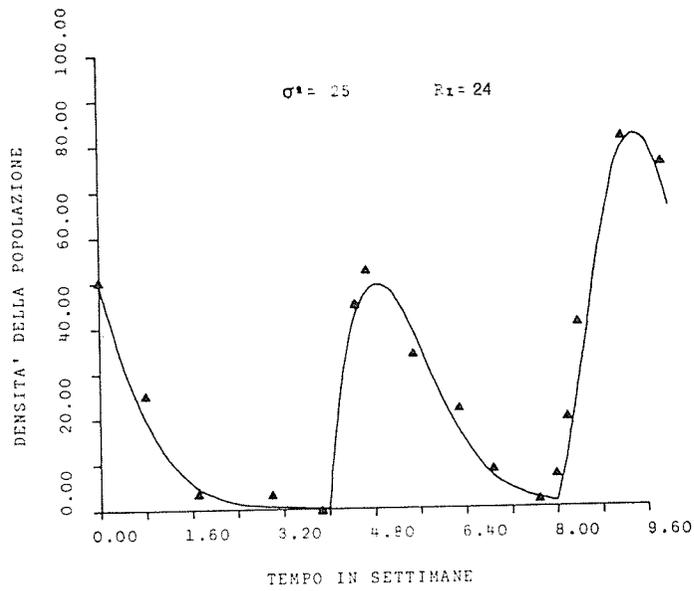


Fig. 7

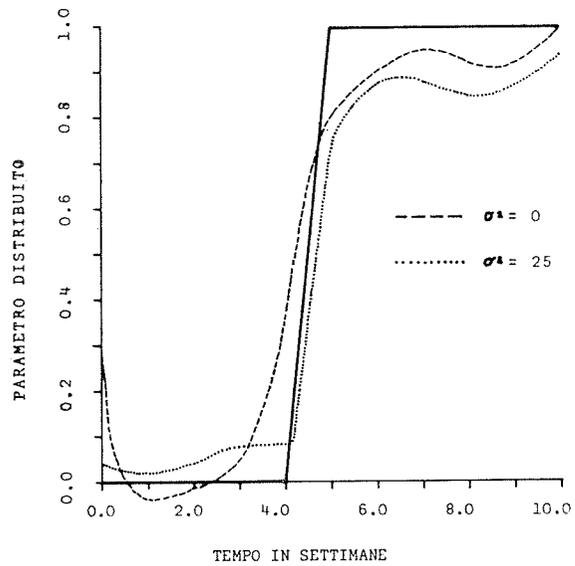


Fig. 8

I dati sperimentali delle Figure 6, 7 corrispondono a soluzioni della (5.3) senza e con noise relative ad $\alpha = 3$, $\beta = 1$, $N_0 = 50$, $\tau = 4$ ed $u(t) = 0$ per $0 < t \leq 4$, $u(t) = (t - 4)$ per $4 < t \leq 5$, $u(t) = 1$ per $5 < t \leq 10$.

Il termine aggiuntivo svolge una funzione di abbattimento dei valori della popolazione.

Nella Fig. 8 sono stati riportati con un tratto continuo il grafico del parametro distribuito u ; con una curva tratteggiata il grafico identificato con $\sigma^2 = 0$; con una curva punteggiata il parametro identificato con $\sigma^2 = 25$

Oss. 5.1. L'equazione di stato e la sua aggiunta sono state risolte con il metodo di Eulero-Cauchy, usando un minicomputer PDP 1134.

I valori R_i riportati nelle figure possono essere ridotti, a parità di condizioni sperimentali, soltanto se si aumenta la precisione del computer.

Diversamente, dopo una rapida convergenza ai valori indicati, si ha oscillazione intorno agli stessi.

Oss. 5.2. Nel problema di cinetica considerato non è stato necessario passare alla 3^a fase del procedimento.

Tale passaggio si è invece reso indispensabile nella identificazione del modello di dinamica di una popolazione.

Il differente comportamento è quasi certamente dovuto al fatto che, mentre nel primo caso la soluzione della ODE possiede derivata continua, nel secondo la soluzione ha due punti angolosi.

I residui R_p ed R_r sono risultati dello stesso ordine quando non è stato necessario passare alla 3^a fase; diversamente R_p è risultato notevolmente superiore ad R_r .

In entrambi i problemi e nelle diverse situazioni esaminate il parametro di regolarizzazione è risultato dell'ordine di 10^{-3} .

Questo fatto rappresenta una verifica sperimentale dell'importanza del termine stabilizzante nel residuo $R(\mathbf{u}; \varrho)$.

Bibliografia

- [1] Y. BARD, *Nonlinear parameter estimation*, Academic Press, New York 1974.
- [2] P. CRAVEN and G. WAHBA, *Smoothing noisy data with spline functions*, Numer. Math. **37** (1979), 377-403.
- [3] C. DE BOOR, *A practical guide to splines*, Springer-Verlag, New York 1979.
- [4] G. DI COLA, A. PAGANUZZI e F. PARRINI, *Modelli matematici di alcuni processi ecologici in ambiente fluviale*, Quaderno C.N.R. AQ/2/25 (1983), 87-112.

- [5] G. H. GOLUB and V. PEREYRA, *The differentiation of pseudo-inverses and non-linear least squares problems whose variable separate*, SIAM J. Numer. Anal. **10** (1973), 413-432.
- [6] L. GUERRI and S. SEATZU, *Some properties of the regularized solution of ill-conditioned linear systems*, Boll. Un. Mat. Ital. (6) **3-B** (1984), 1-16
- [7] T. LYCHE and L. L. SCHUMAKER, *Computation of smoothing and interpolating natural splines via local bases*, SIAM J. Numer. Anal. **10** (1973), 1027-1038.
- [8] C. L. MALLOWS, *Some comments on Cp*, Technometrics **15** (1971), 451-454.
- [9] C. G. PAIGE and M. A. SAUNDERS, *Towards a generalized singular value decomposition*, SIAM J. Numer. Anal. **18** (1982), 398-405.
- [10] M. P. POLIS and R. E. GOODSON, *Parameter identification in distributed systems: a synthesizing overview*, Proceedings of the IEEE **64** (1976), 45-61.
- [11] D. RAGOZIN, *Error bounds for derivative estimates based on spline smoothing of exact or noisy data*, Report from Department of Mathematics, University of Washington at Seattle, 1982.
- [12] C. REINSCH, *Smoothing by spline functions*, Numer. Math. **10** (1967), 177-183.
- [13] J. RICE and M. ROSENBLATT, *Integrated mean squared error of a smoothing spline*, J. Approx. Theory **13** (1981), 353-369.
- [14] L. L. SCHUMAKER, *Spline functions: basic theory*, J. Wiley, New York 1980.
- [15] K. P. TOGNETTI and A. MAZANOV, *A two-stage population model*, Math. Biosciences **8** (1970), 371-378.
- [16] C. F. VAN LOAN, *Generalizing the singular value decomposition*, SIAM J. Numer. Anal. **13** (1976), 76-83.
- [17] J. M. VARAH, *A spline least squares method for numerical parameter estimation in differential equations*, SIAM J. Sci. Statist. Comput. **3** (1982), 28-46.

Summary

A method for estimating the numerical parameters in ordinary differential equations based on splines is presented. It comprises three stages, the first two of which are easy to implement whereas the third calls for considerable computational effort. However, by resorting to a control test, the final stage can often be avoided. When this is not possible the first two are used to obtain an initial estimate effective for starting off a minimization procedure aimed at parameter identification.

* * *