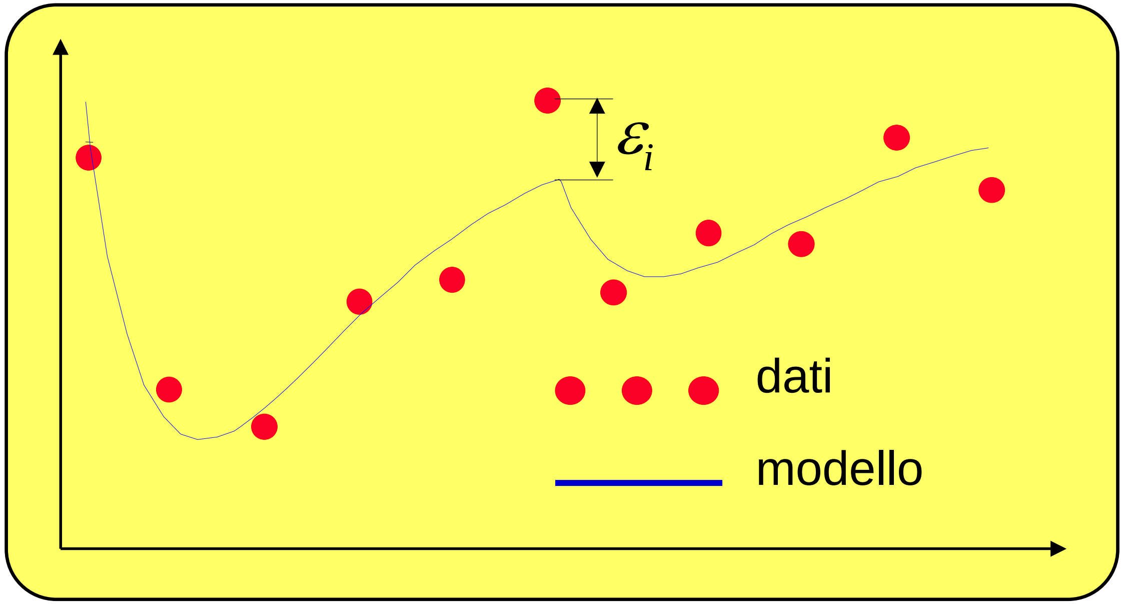
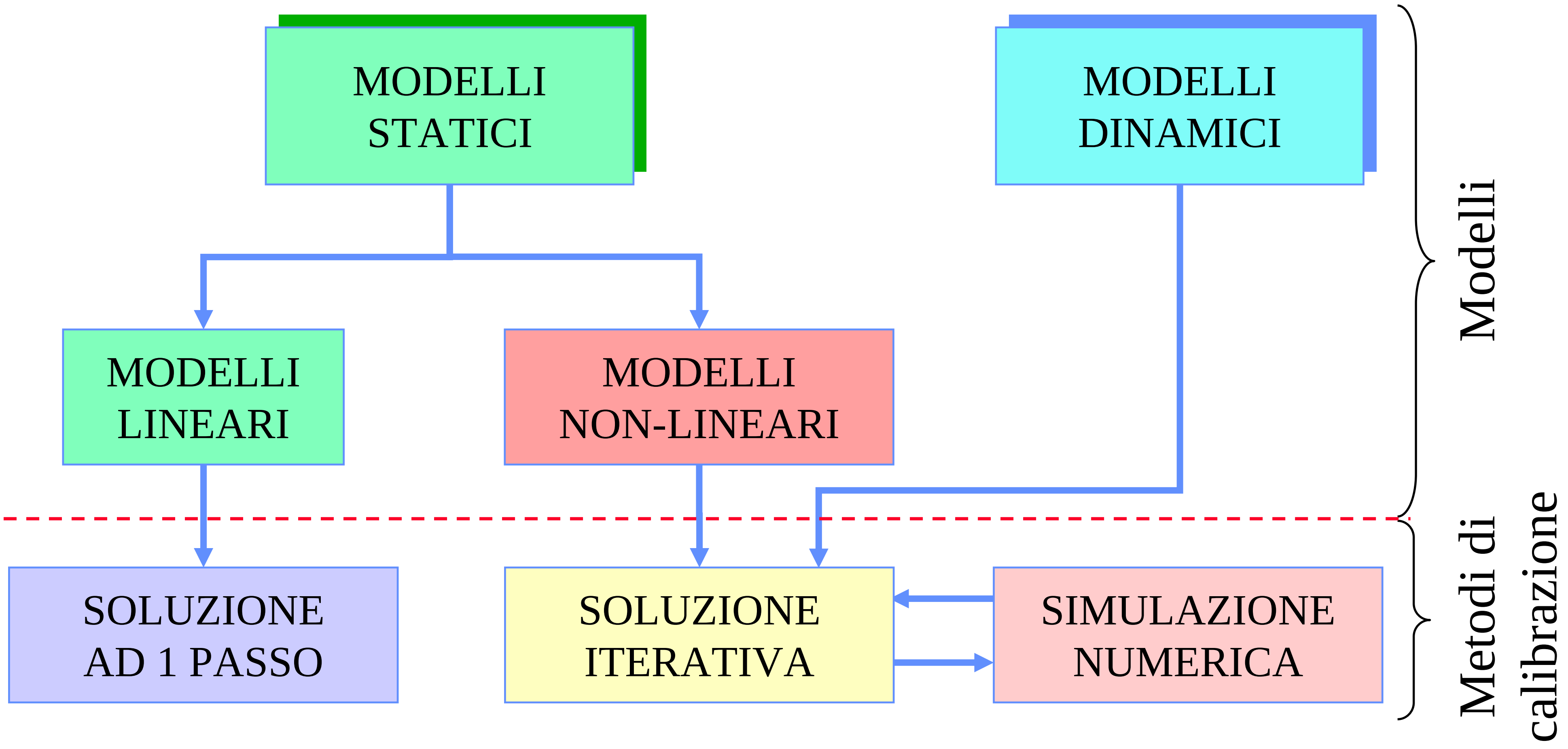
# CALIBRAZIONE PARAMETRICA DI MODELLI DINAMICI

Determinare i valori numerici dei parametri del modello in modo da minimizzare la differenza fra la sua risposta ed i dati sperimentali

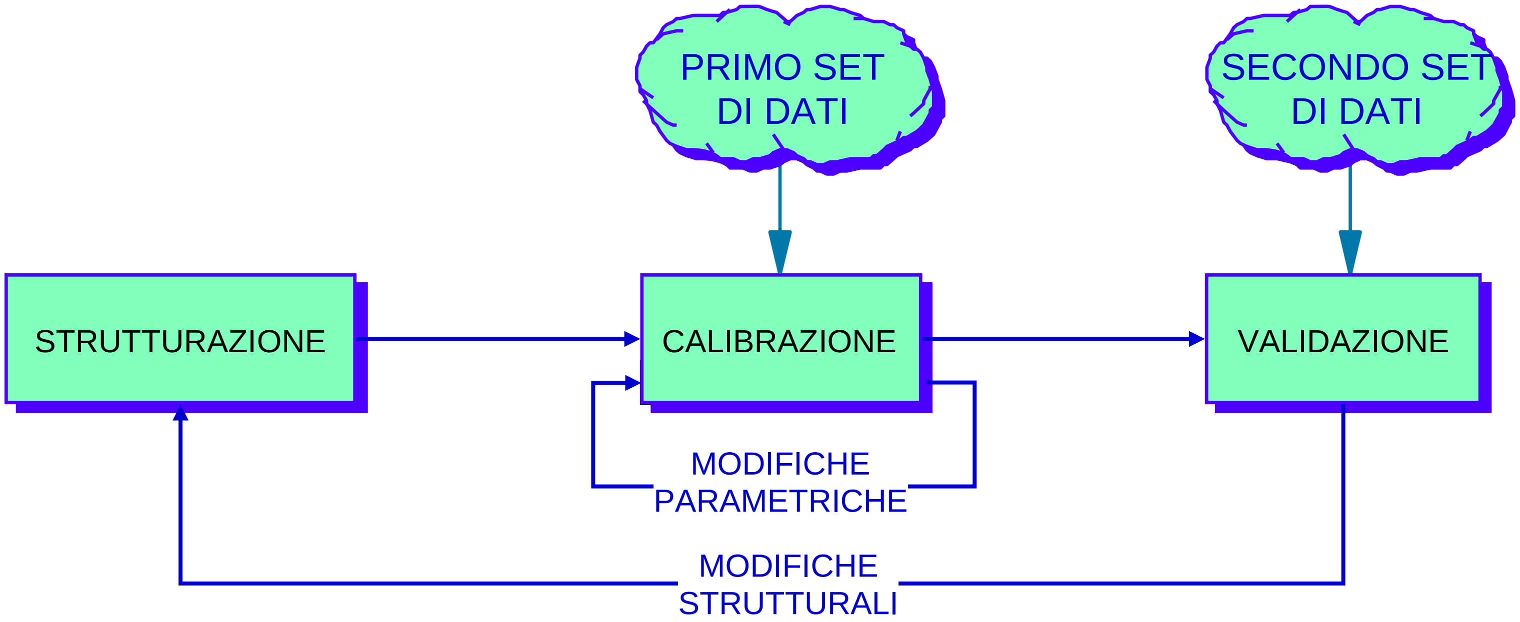



$$\sum_i \varepsilon_i^{\,2} \rightarrow min$$

# Metodi di calibrazione dei vari tipi di modelli



# Calibrazione parametrica come processo iterativo




Il processo si compone di tre stadi:

- Si sceglie una struttura per il modello
- Si calibrano i valori dei parametri rispetto ad un primo set di dati
- Si valida questa scelta con un secondo set di dati *indipendenti*

# Posizione del problema di calibrazione

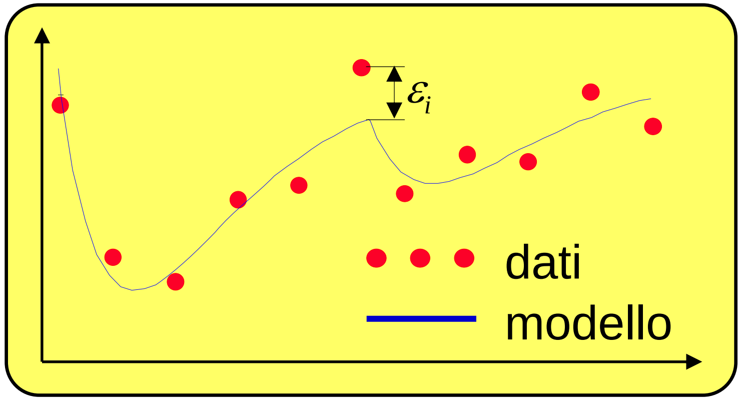
Dato il sistema dinamico $\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\,\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_{exp},\boldsymbol{P}\,) & \boldsymbol{x} \in \Re^{n} \\ y = \boldsymbol{g}(\,\boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_{exp},\boldsymbol{P}\,) & \boldsymbol{y} \in \Re^{q} \end{cases}$ $\quad \boldsymbol{P} \in \Re^{n_p}$

ed il funzionale di errore $E(\,\boldsymbol{P}\,) = \sum_{k=1}^{N} \left( y_k(\,\boldsymbol{P}\,) - y_k^{exp} \right)^T \boldsymbol{Q}_k \left( y_k(\,\boldsymbol{P}\,) - y_k^{exp} \right)$

$\boldsymbol{Q}_k$ è una sequenza di matrici quadrate $q \times q$ che contengono informazioni sugli errori di misura

i parametri "ottimi" nel senso definito dal funzionale $E(\boldsymbol{P})$, sono quelli che lo rendono minimo

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{P}} = arg\ \ min\, E(\,\boldsymbol{P}\,)}$$



# A proposito del funzionale di errore $E(\boldsymbol{P})$

- Dicesi *funzionale* e non *funzione* perché è una misura *cumulativa*, che implica una sommatoria estesa all'insieme delle misure $\{k\}$
- Nella sua forma più generale, si considera che l'uscita abbia $q$ componenti. La matrice $\boldsymbol{Q}_k \in R^{qxq}$ rappresenta l'importanza da dare a ciascuna componente $(1,\ldots,q)$ in ciascuna misura all'istante $k$

$$E(\boldsymbol{P}) = \sum_{k=1}^{N} \left( y_k(\boldsymbol{P}) - y_k \right)^T \boldsymbol{Q}_k \left( y_k(\boldsymbol{P}) - y_k \right)$$

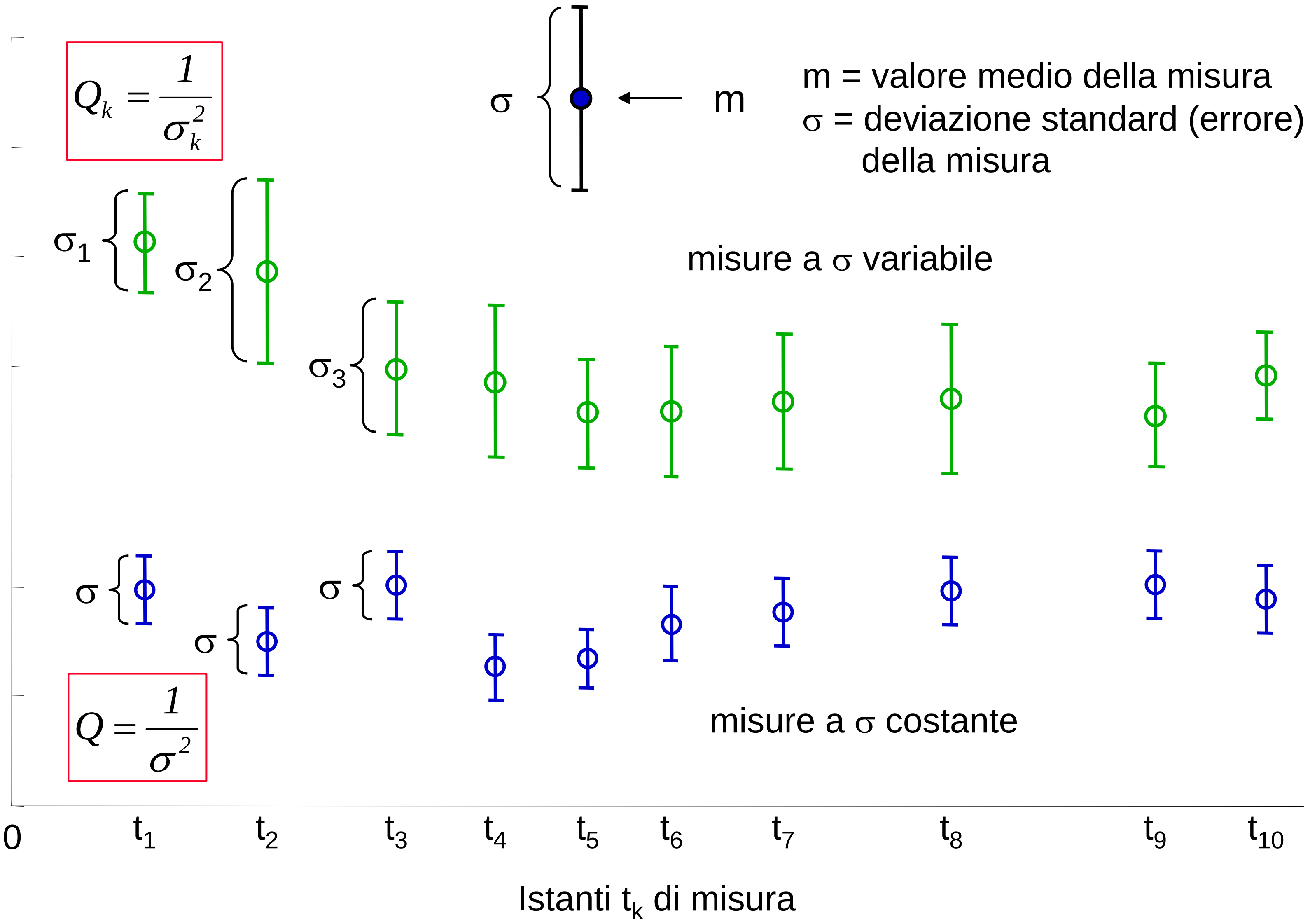
- La matrice $\boldsymbol{Q}_k$ contiene informazioni sugli errori di misura. Per misure incorrelate fra loro, essa è una matrice diagonale proporzionale ai reciproci delle varianze

$$\boldsymbol{Q}_k = diag\left( \frac{1}{\sigma_1^2}, \frac{1}{\sigma_2^2}, \ldots, \frac{1}{\sigma_q^2} \right)_k$$

- In mancanza di informazioni sugli errori si pone $\boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$
- Se il sistema ha una sola uscita il funzionale si riduce a

$$E(\boldsymbol{P}) = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{\sigma_k^2} \left( y_k(\boldsymbol{P}) - y_k \right)^2$$

# A proposito di $Q_k$ : possibili scelte



# $Q_k$ per sistemi a più uscite

- Sistemi in cui i rumori di misura delle varie uscite sono incorrelati, perché l'errore di misura di una uscita è indipendente da quello sulle altre uscite
  - La $\boldsymbol{Q}_k$ è **diagonale** qxq se q è il numero di uscite
  - E'  il caso più frequente
  - Spesso si ***assume*** che gli errori fra uscite diverse siano indipendenti

$$\boldsymbol{Q}_k = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2(k)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2(k)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sigma_q^2(k)} \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{Q}_k \in \Re^{q\times q}$$

- Sistemi con errori di misura correlati hanno una matrice $\boldsymbol{Q}_k$ con elementi fuori diagonale non nulli, proporzionali alla correlazione degli errori di misura
  - Caso meno frequente
  - Richiede la determinazione delle correlazioni (non facile)

$$\boldsymbol{Q}_k = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2(k)} & \frac{1}{\rho_{12}^2} & \dots & \frac{1}{\rho_{1q}^2} \\ \frac{1}{\rho_{21}^2} & \frac{1}{\sigma_2^2(k)} & \dots & \frac{1}{\rho_{2q}^2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{1}{\rho_{q1}^2} & \frac{1}{\rho_{q2}^2} & \dots & \frac{1}{\sigma_q^2(k)} \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{Q}_k \in \Re^{q\times q}$$

# Sequenza di calibrazione

- ***Raccolta dati, loro validazione e valutazione dell'accuratezza***
  - Scartare dati "pazzi" o presi in condizioni non valide
  - Valutare l'errore di misura per costruirsi una sequenza di matrici $Q_k$ adeguate
- ***Analisi di sensitività parametrica:*** determinare quanto la risposta del modello è sensibile alle variazioni parametriche
  - Fare una *"classifica"* ordinando i parametri in ordine decrescente per sensitività
  - Decidere il *sottoinsieme* di parametri da stimare (più sono e peggio è…..)
- ***Ottimizzazione numerica:*** utilizzare dei metodi numerici per cercare il minimo del funzionale $E(\mathbf{P})$
  - Si deve usare un metodo a ricerca diretta, eventualmente preceduto da un genetico
- ***Validazione della stima:*** valutare quanto ci si può fidare dei risultati
  - *Test sulla risposta:* Valutare quanto il modello "spiega" i dati usati per la calibrazione ed eventualmente anche altri indipendenti
  - *Test sui parametri:*
    - Matrice di covarianza dei parametri
    - Limiti di confidenza delle stime
    - Test di tipo "Lack-of-fit"

# Sensitività parametrica

## *Rapporto fra variazione di ciascun parametro e variazione delle uscite*

$$S_{p_i}^{y} \equiv \lim_{\Delta p_i \to 0} \frac{\Delta \mathbf{y}}{\Delta p_i} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial p_i}$$

### ☞ *Sensitività statica*

- Influenza delle variazioni di un parametro sulla risposta del modello
- Si fissa il valore “nominale” di un parametro $p_i^{nom}$ e si calcola la corrispondente traiettoria $y_j^{nom} \mid j = 1,\dots,N$ dove può essere $j \neq k$ con $k$ = indice delle misure
- Per ogni valore del parametro perturbato $p_i^{pert}$ si ottiene una traiettoria perturbata $y_j^{pert} \mid j = 1,\dots,N$ con la quale si valuta la funzione di errore

$$\Delta E = \sum_j \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)^T \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)$$

Nota: manca la matrice **Q** perché si indaga su una proprietà del modello indipendente dai dati

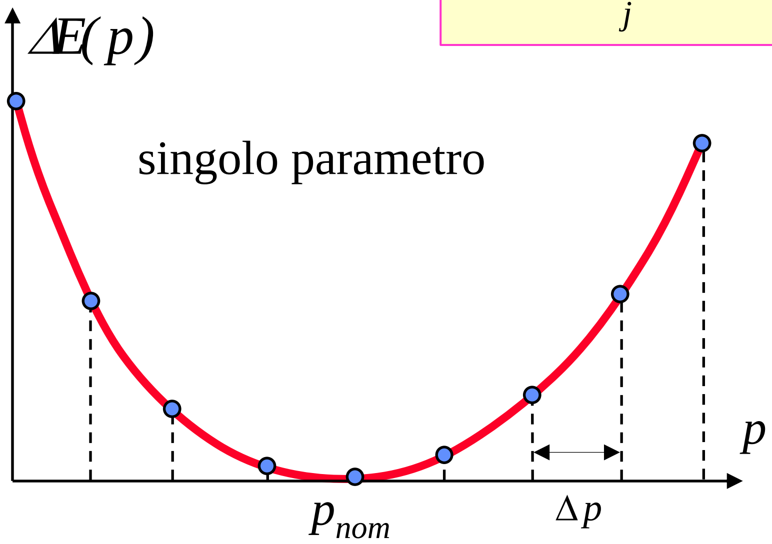
### ☞ *Sensitività dinamica*

- Data una certa evoluzione del sistema (*esperimento*), permette di valutare come ciascun parametro influenza tale evoluzione
- Utile per programmare l’esperimento in modo da ottenere dati ottimali per la calibrazione
- Stabilisce un collegamento fra sensitività e precisione di calibrazione

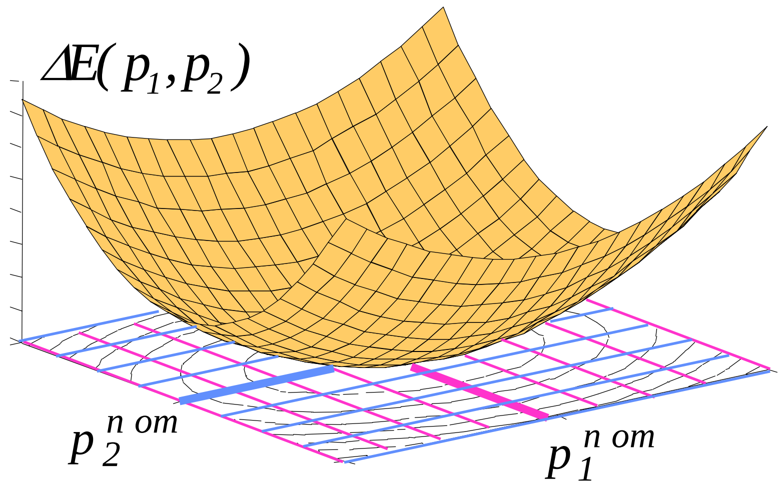
# Sensitività Statica

- Si assume un'evoluzione del sistema di particolare interesse come traiettoria nominale $y^{nom}$, ottenuta con il valore nominale del parametro $p_{nom}$
- Dando al parametro $p$ incrementi $\Delta p$ intorno a $p_{nom}$ si ottiene l'insieme di traiettorie perturbate $y^{pert}$
- Si valuta lo scostamento fra la traiettoria nominale e ciascuna delle perturbate come somma delle differenze al quadrato, calcolate in un certo insieme di istanti della traiettoria

$$\Delta E = \sum_j \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)^T \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)$$



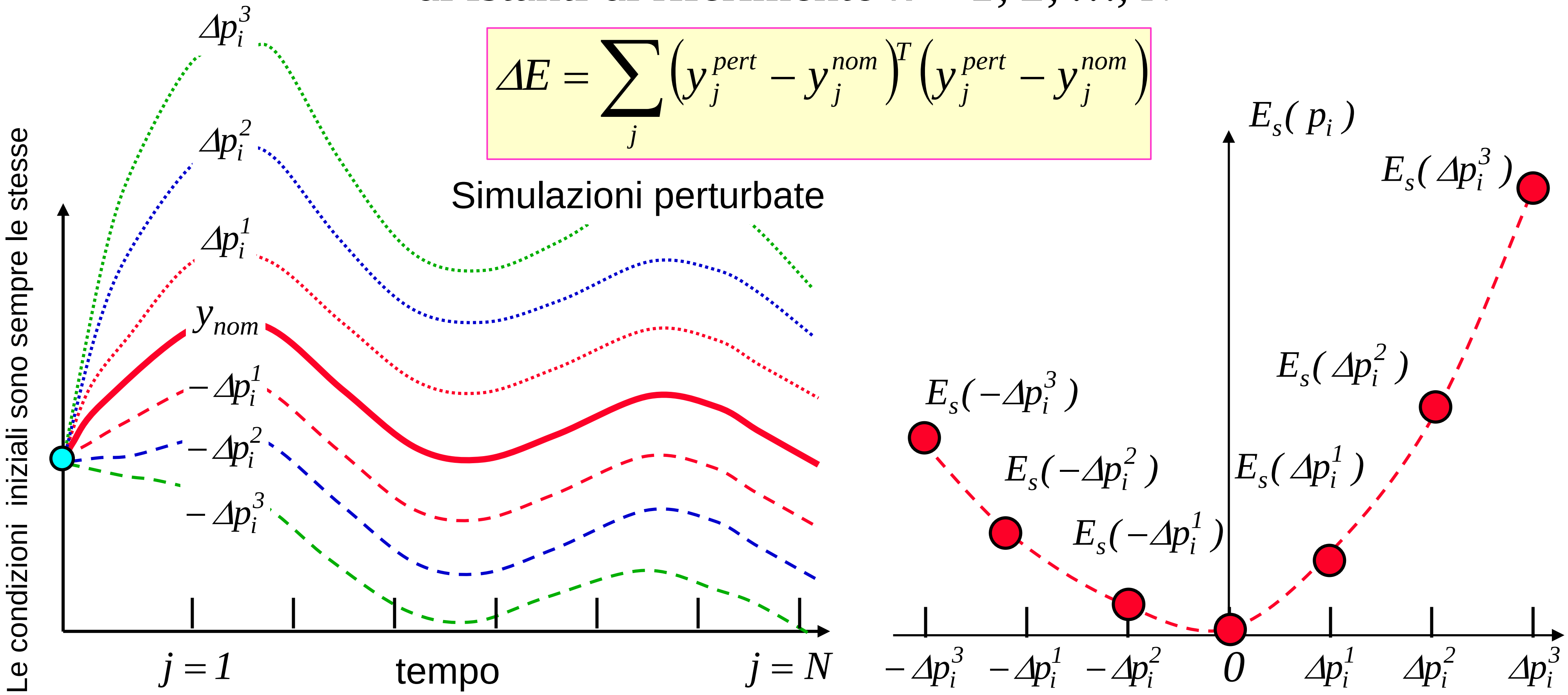

coppia di parametri



# Costruzione pratica della sensitività statica

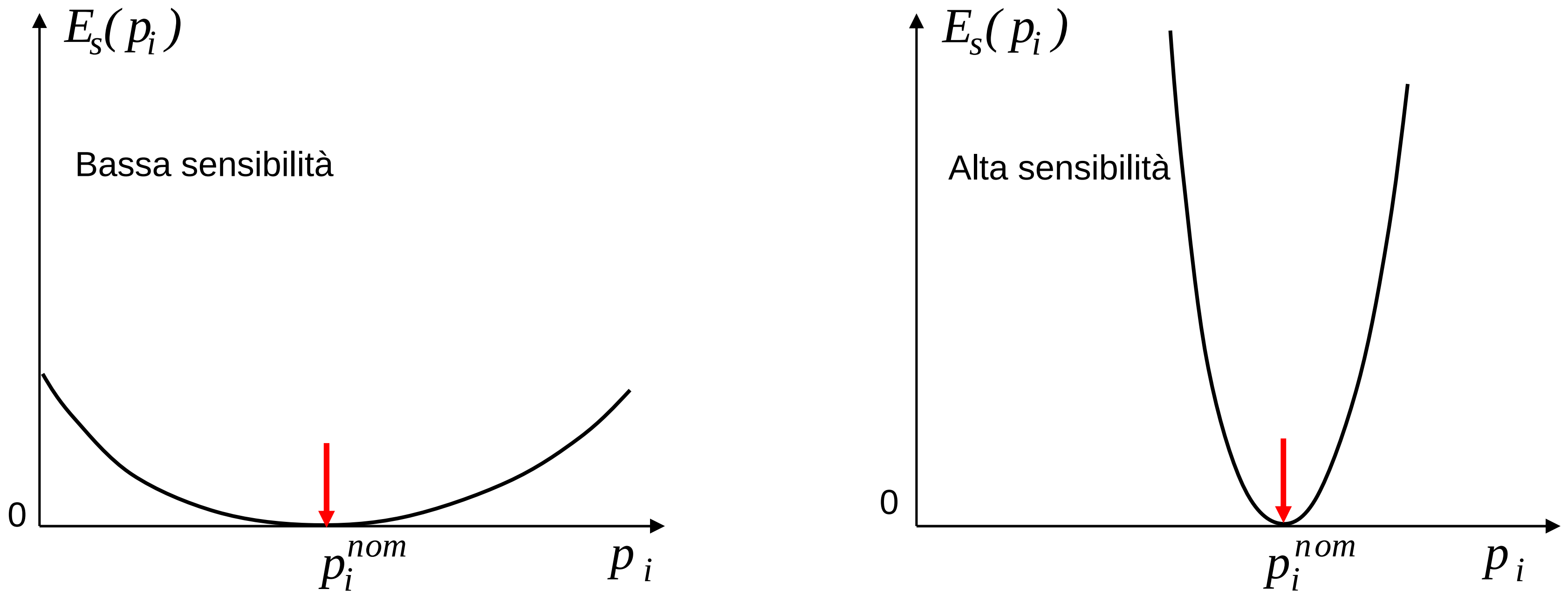
Scelto il parametro di interesse $p_i$, si effettuano diverse simulazioni con $p_i$ variato e per ciascuna si valuta la variazione $E_s(p_i)$ in un insieme di istanti di riferimento $k = 1, 2, \ldots, N$

$$\Delta E = \sum_j \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)^T \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)$$



# Valutazione della sensitività statica

$$\Delta E = \sum_j \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)^T \left(y_j^{pert} - y_j^{nom}\right)$$




La forma della curva di sensitività dà informazioni sull'influenza che il parametro ha sul modello: Una curva larga indica una bassa sensitività: per grandi variazioni di $p_i$, l'uscita varia di poco; mentre una curva stretta indica che piccole variazioni di $p_i$ hanno una grande influenza sull'uscita

# Esempio: Sensitività statica di Monod

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y}\mu_{max}\frac{S}{K_s + S}X$$

$$\frac{dX}{dt} = \mu_{max}\frac{S}{K_s + S}X - K_d X$$

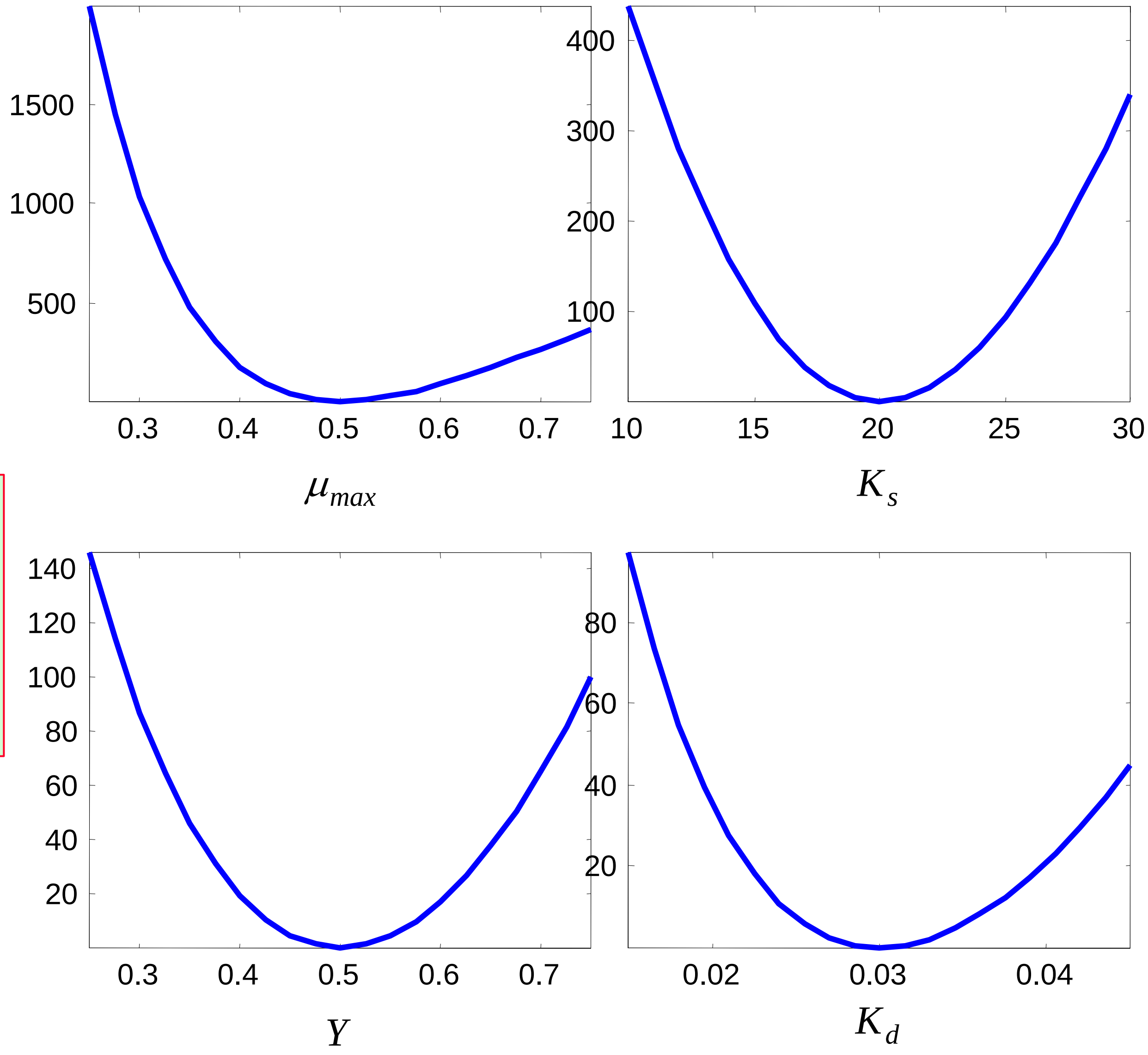
Vettore dei parametri

$$\boldsymbol{P} = \left[\mu_{max} \quad K_s \quad Y \quad K_d\right]$$

Funzione di errore

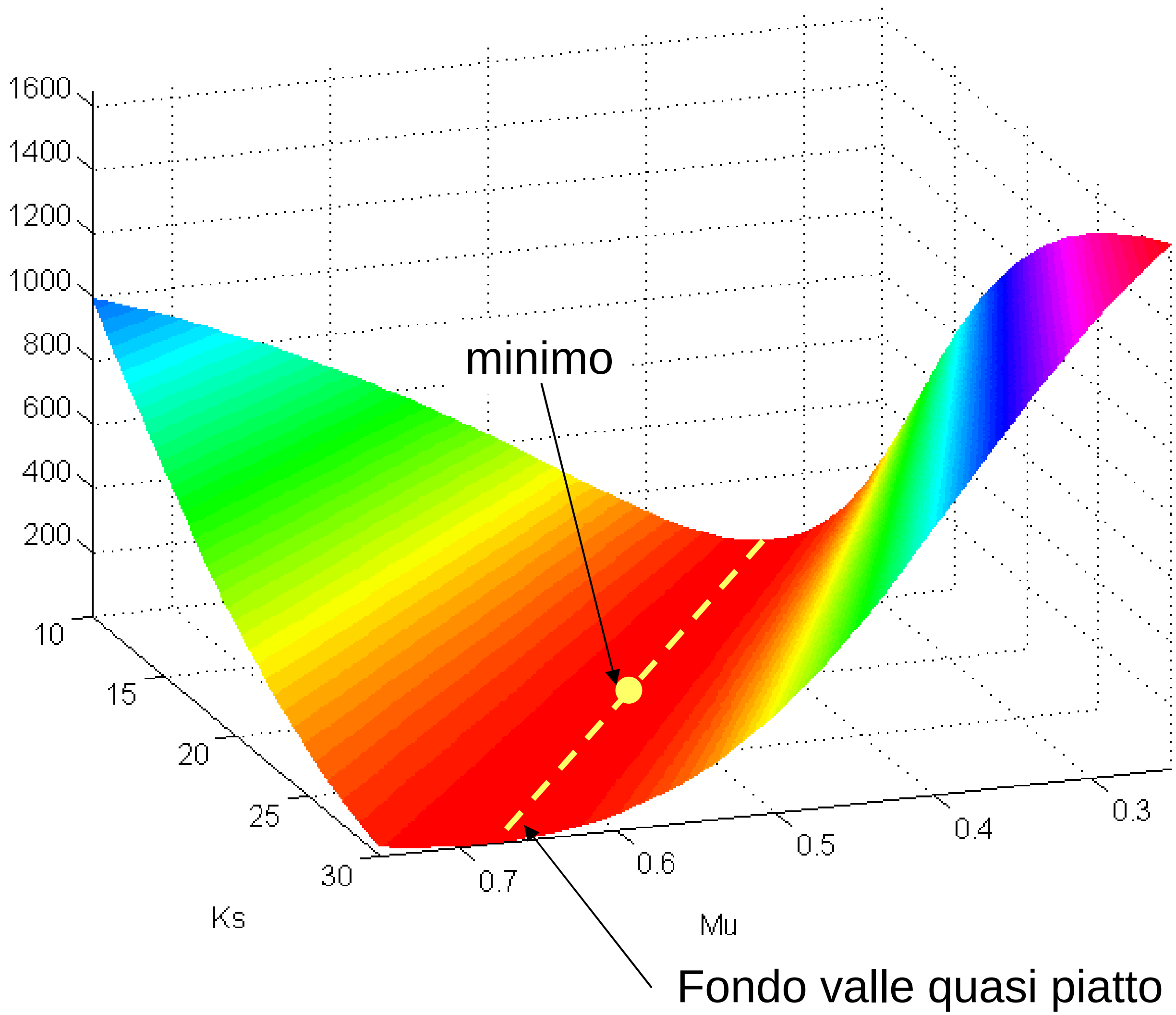
$$\Delta E(\boldsymbol{P}) = \sum_i \left(S_i^{pert} - S_i^{nom}\right)^2 + \sum_i \left(X_i^{pert} - X_i^{nom}\right)^2$$

Le curve di sensitività sono ottenute variando un solo parametro alla volta, mantenendo gli altri ai valori nominali.



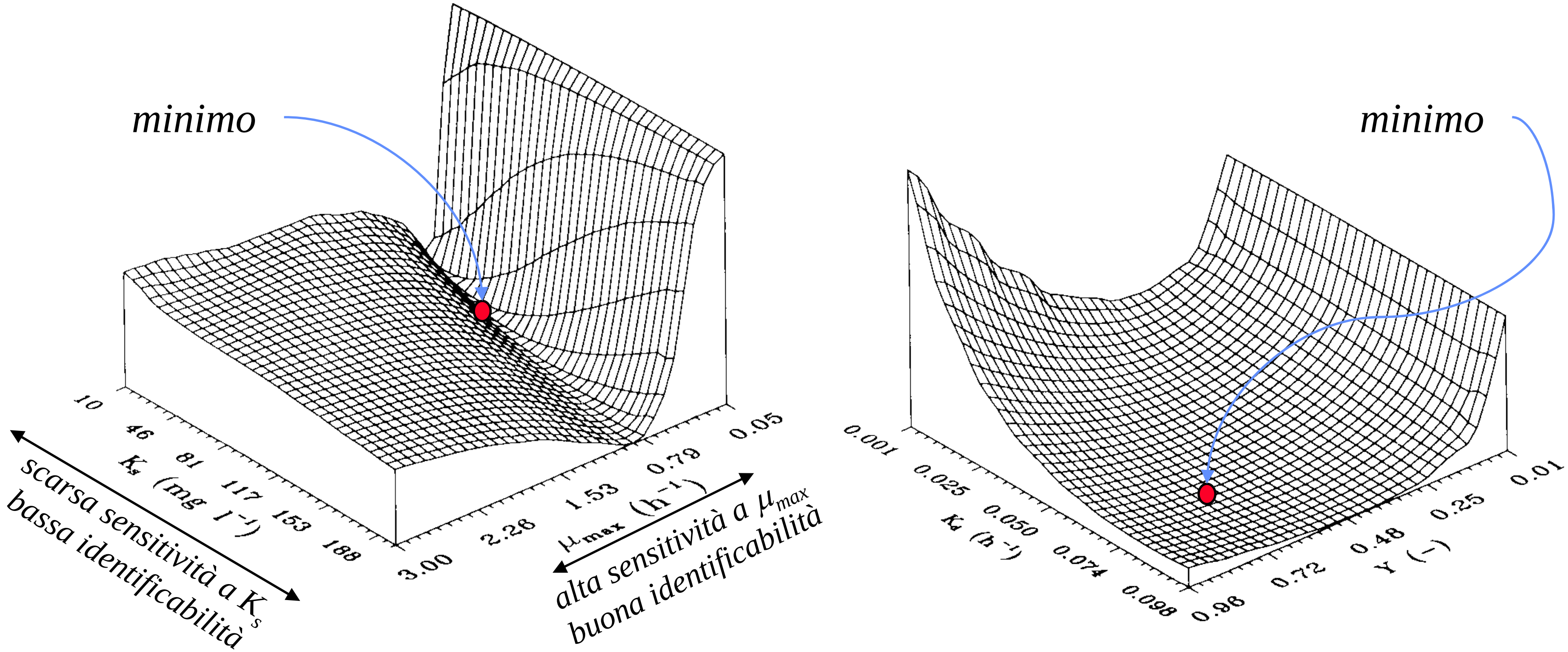
# Sensitività statica della coppia $\mu_{max}$, $K_s$

Lo studio di questa superficie è molto importante perché dà un'idea della difficoltà numerica nella ricerca del minimo e della correlazione (mutua influenza) dei parametri.



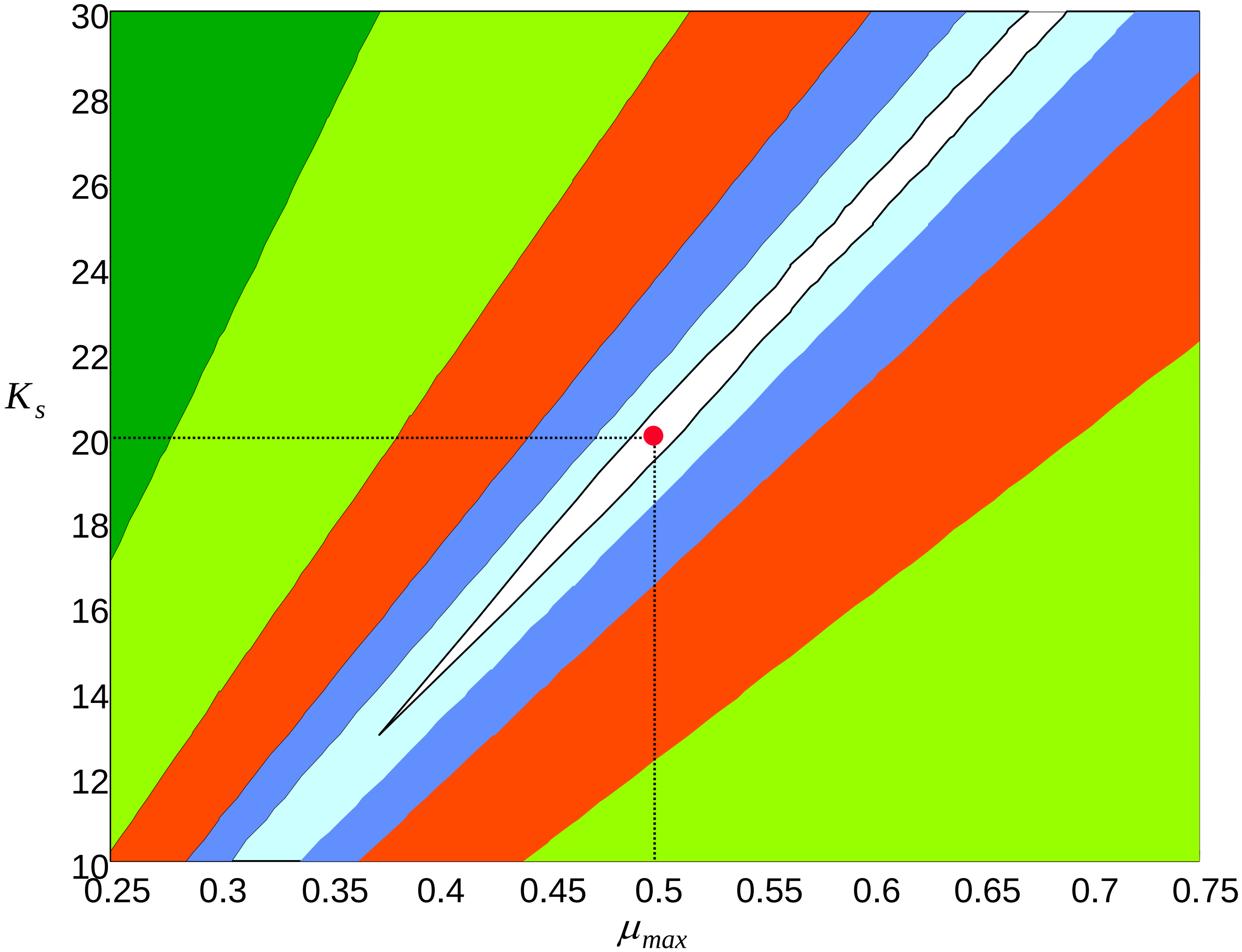
# Forma di *E(**P**)* nel caso di Monod

- A causa della correlazione fra parametri, il minimo del funzionale di errore E(P) nel sottospazio ($\mu_{max}$, $K_s$) si trova al fondo di una “valle” molto stretta
- Questo può creare problemi numerici, perciò è necessario usare metodi di ricerca capaci di superare il problema della “valle stretta”
- Al contrario questo problema non esiste per la coppia ($K_d$, Y)



# Sensitività statica di Monod alla coppia $\mu_{max}$, $K_s$

Linee di livello per ΔE(P) = 1, 10, 50, 250, 1000, 2000



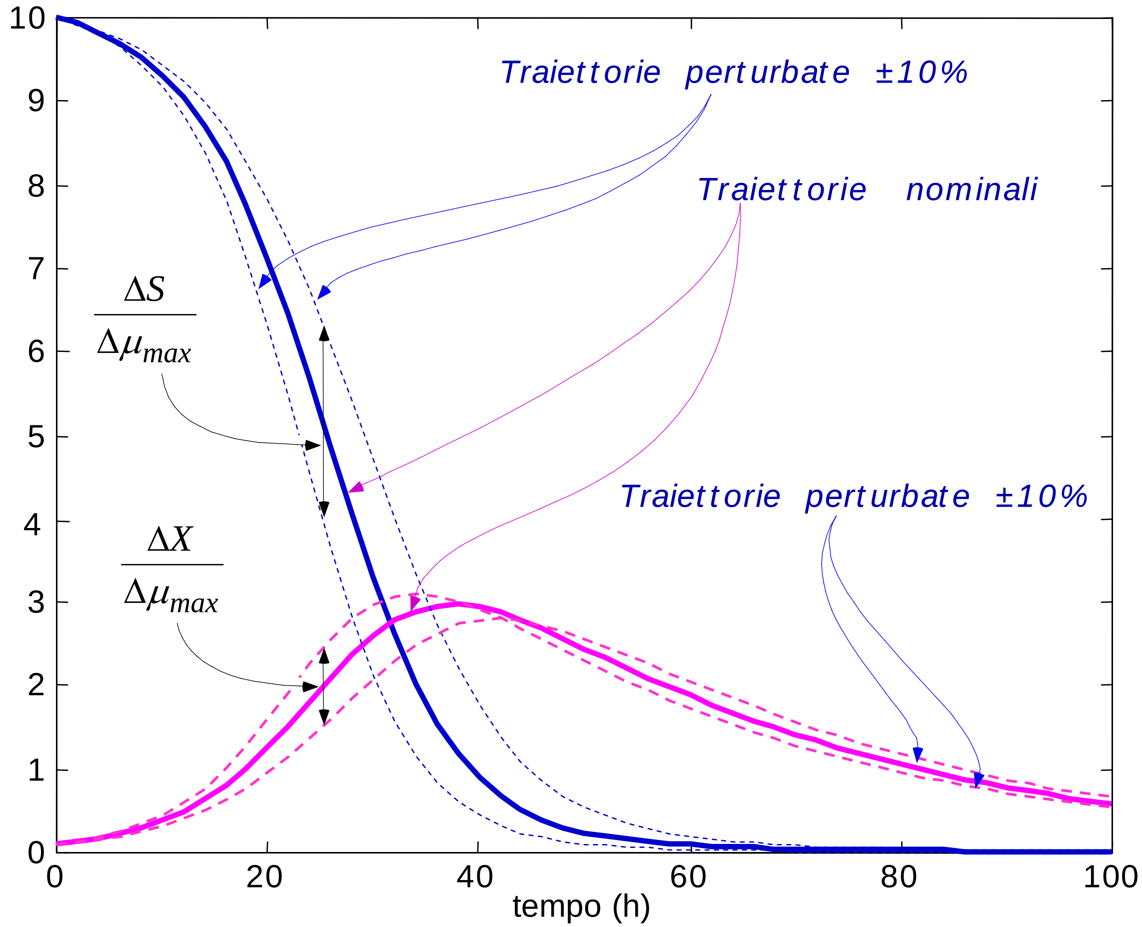

Le curve di livello strette ed allungate indicano una forte ***correlazione*** fra parametri.

Ciò implica maggiori difficoltà di stima.

# Altro aspetto della sensitività statica: fasce di tolleranza

Dando un'unica variazione ad un parametro (ad es. ±10% del nominale), si può vedere di quanto la risposta si discosta da quella nominale

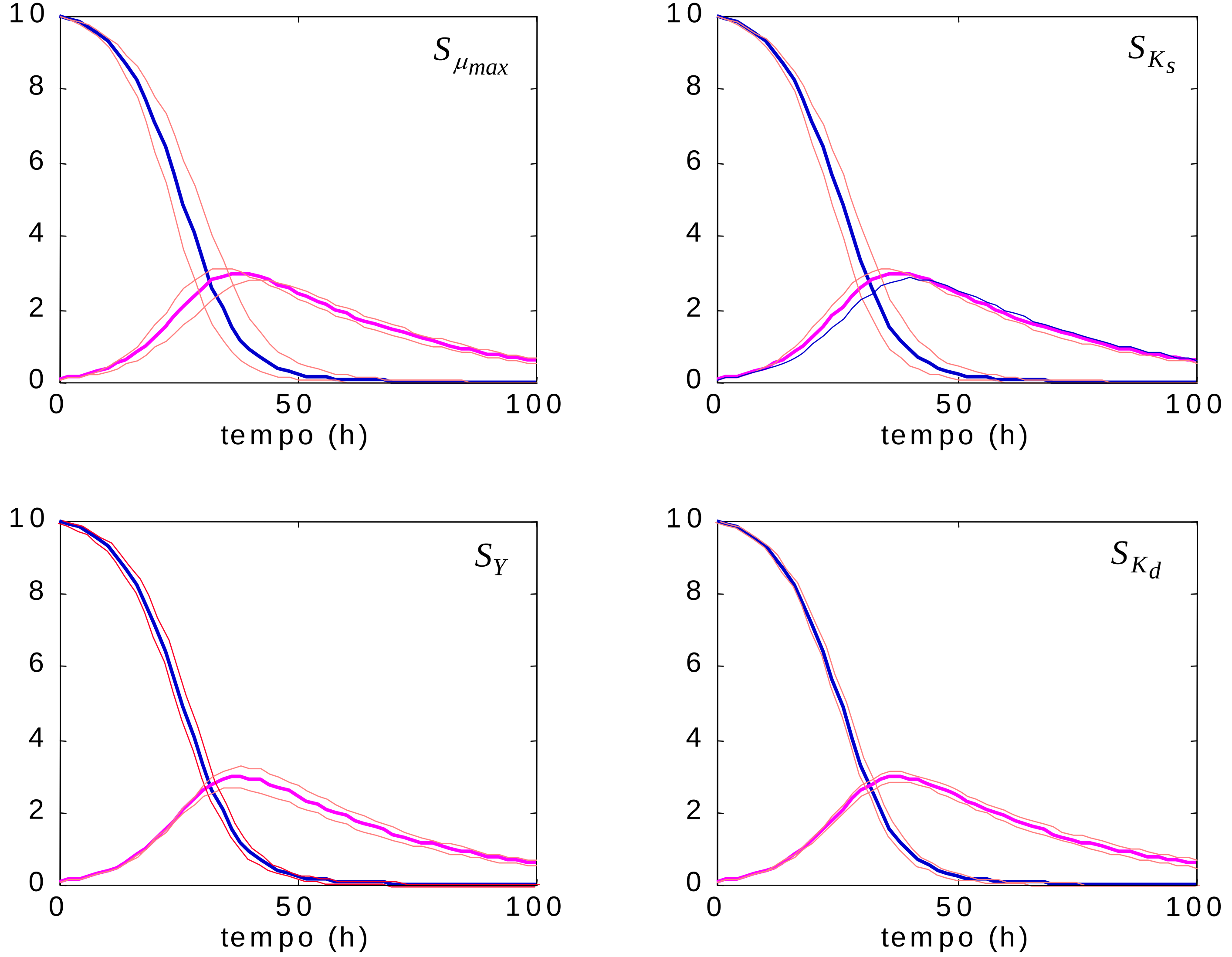
Ciò può essere utile quando si deve confrontare il modello con dati rumorosi e vedere se la variazione parametrica porta la traiettoria ad includere più o meno dati sperimentali



# Fasce di tolleranza del modello di Monod alle variazioni parametriche ±10%

Nel caso di cinetica di Monod, si possono valutare le fasce di tolleranza ai 4 parametri del modello

Gli scostamenti rispetto alle traiettorie nominali danno un'idea di quanto il comportamento del modello è influenzato dalle variazioni del parametro



# Sensitività dinamica (alle traiettorie)

- ☞ Dato un ***esperimento*** (traiettoria percorsa dal sistema), si vuole vedere in quali istanti ogni parametro ha la massima influenza
- ☞ Diversamente dalla sensitività statica, si esegue una sola simulazione, associando al modello un meccanismo che genera le sensitività dinamiche
- ☞ Esse sono in numero pari al prodotti uscite x parametri $(q \times n_p)$
- ☞ I dati raccolti negli istanti in cui la sensitività dinamica ad un dato parametro è alta garantiscono una buona identificabilità di quel parametro
- ☞ Perciò la sensitività dinamica è utile per progettare la raccolta dati, in modo da avere una buona identificabilità dei parametri.

# Sensitività Dinamica (o alle traiettorie)

Variazione *incrementale* della traiettoria rispetto alla variazione *incrementale* del parametro $p_i$ lungo una traiettoria

$$S_{p_i}^{\boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial p_i} \quad \textit{tenendo conto che} \quad \begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, p_i) \\ \boldsymbol{y} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, p_i) \end{cases}$$

Derivando rispetto al tempo

$$\frac{d}{dt} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial p_i} = \frac{\partial}{\partial p_i}\left(\frac{d\boldsymbol{x}}{dt}\right) = \frac{\partial}{\partial p_i} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, p_i) = \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial p_i} + \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial p_i}$$

Si ottiene la dinamica *(lineare)* della sensitività alla traiettoria

$$\dot{\boldsymbol{S}}_{p_i}^{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{J}_n \cdot \boldsymbol{S}_{p_i}^{\boldsymbol{x}} + \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial p_i} \qquad con \quad \boldsymbol{J}_n = \left.\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{X}}\right|_{\boldsymbol{x}_{nom}} = Jacobiano$$

# Considerazioni sulla sensitività

- Il sistema dinamico che genera le funzioni di sensitività rispetto al parametro $p_i$ è *lineare*, in quanto l'analisi è definita *localmente*, intorno alla traiettoria *nominale* $\mathbf{X}_n$ ottenuta per $p_i = p_{io}$
- La sua dinamica è determinata dallo Jacobiano $\mathbf{J}_n$ definito lungo la traiettoria *nominale* dello stato, cioè ottenuta come evoluzione del sistema quando i parametri sono mantenuti al loro valore *nominale*

$$\mathbf{J}_n = \mathbf{J}_n\left(\mathbf{X}_n, p_{i_n}\right)$$

- Per ottenere le traiettorie di sensitività è necessario risolvere *in parallelo* due modelli:
  - il modello originario che fornisce l'evoluzione *nominale* dello stato $\mathbf{X}_n$
  - il modello che genera le traiettorie di sensitività $S_p$ è lineare

$$\dot{\mathbf{X}}_n = \mathbf{f}\left(\mathbf{X}_n, \mathbf{U}_n, p_{i_n}\right)$$

$$\boxed{\dot{\boldsymbol{S}}_{p_i}^{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{J}_n \cdot \boldsymbol{S}_{p_i}^{\boldsymbol{x}} + \frac{\partial f}{\partial p_i} \qquad \boldsymbol{S}_{p_i}^{x}(0) = \boldsymbol{0}}$$

# Sensitività alle condizioni iniziali

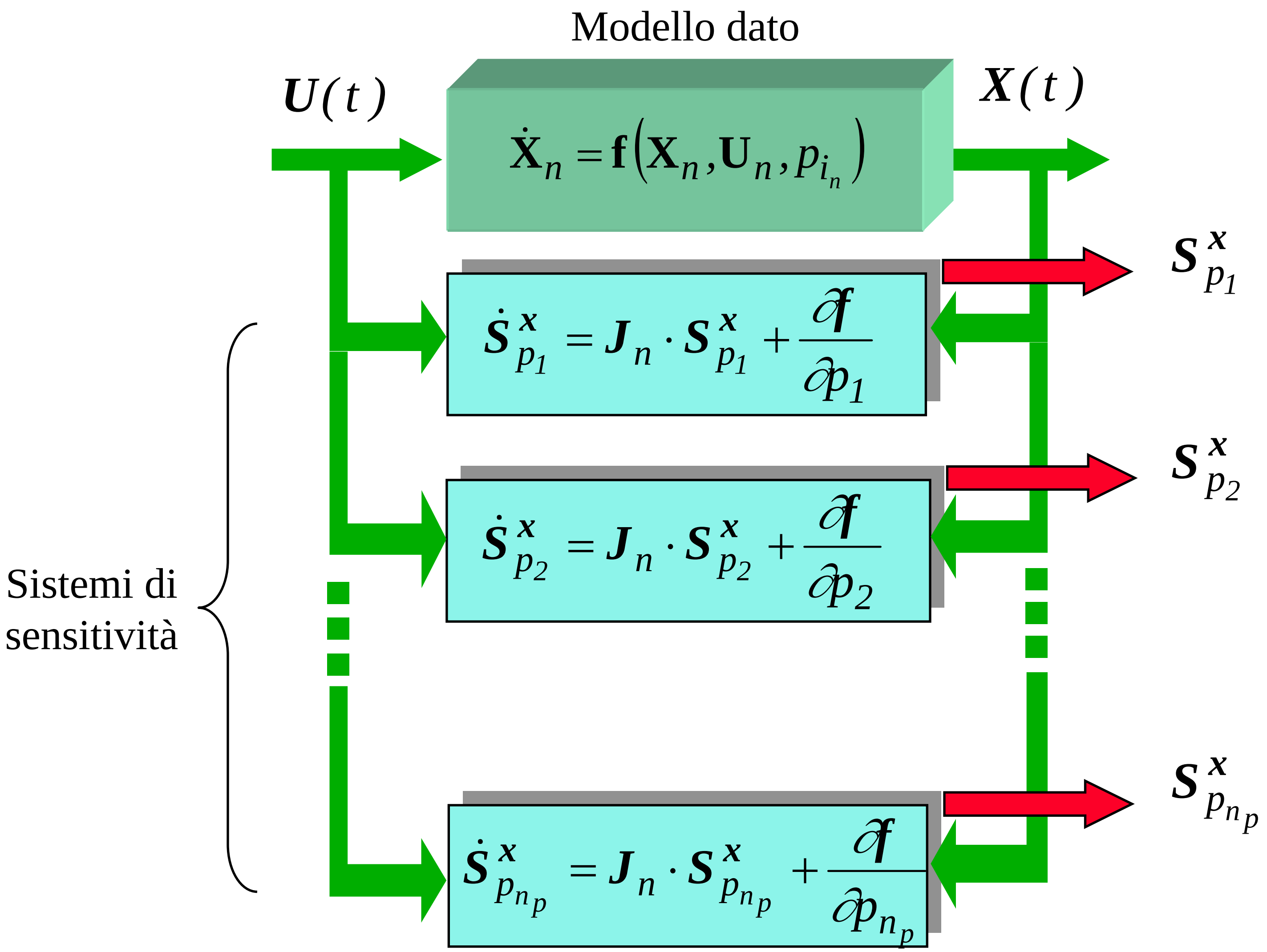
Con considerazioni del tutto analoghe si può anche definire la sensitività *dinamica* alle condizioni iniziali $\mathbf{X}(t_o)$ con la semplificazione che non dipendendo $\mathbf{X}(t_o)$ da alcun parametro, il sistema associato di sensitività comprende solamente lo jacobiano

$$\mathbf{S}_{\mathbf{X}_o}^{\mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{X}_o}$$

$$\dot{\mathbf{S}}_{\mathbf{X}_o}^{\mathbf{X}} = \left.\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{X}}\right|_{\mathbf{X}_{nom}} \mathbf{S}_{\mathbf{X}_o}^{\mathbf{X}} = \mathbf{J}_n \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{X}_o}^{\mathbf{X}}$$

$$\textit{con condizioni iniziali} \quad \left.\mathbf{S}_{\mathbf{X}_o}^{\mathbf{X}}\right|_{t=o} = \mathbf{I}$$

# Generazione delle sensitività dinamiche



# Sensitività del modello di Monod

Fatte le seguenti posizioni sullo stato ed i parametri

$$\begin{cases} \dfrac{dS}{dt} = -\dfrac{1}{Y}\dfrac{\mu_{max}S}{K_s+S}X = f_1(S,X) \\ \dfrac{dX}{dt} = \dfrac{\mu_{max}S}{K_s+S}X - K_d X = f_2(S,X) \end{cases} \qquad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} S \\ X \end{bmatrix} \quad \mathbf{P} = \begin{bmatrix} \mu_{max} \\ K_s \\ Y \\ K_d \end{bmatrix}$$

Si calcolano le matrici che formano il sistema di sensitività

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial S} & \dfrac{\partial f_1}{\partial X} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial S} & \dfrac{\partial f_2}{\partial X} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & -\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} \\ \dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & \dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} - K_d \end{bmatrix}$$

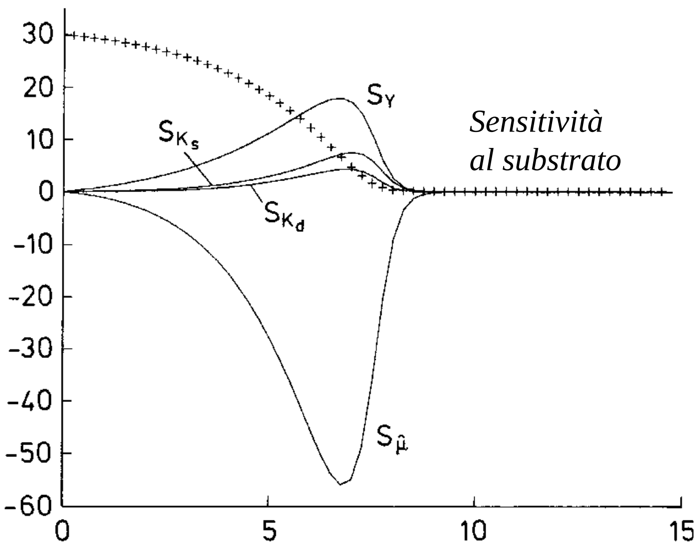
$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{P}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial \mu_{max}} & \dfrac{\partial f_1}{\partial K_s} & \dfrac{\partial f_1}{\partial Y} & \dfrac{\partial f_1}{\partial K_d} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial \mu_{max}} & \dfrac{\partial f_2}{\partial K_s} & \dfrac{\partial f_2}{\partial Y} & \dfrac{\partial f_2}{\partial K_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{X\cdot S}{K_s+S} & \dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot X\cdot S}{(K_s+S)^2} & \dfrac{1}{Y^2}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot X\cdot S}{K_s+S} & 0 \\ \dfrac{X\cdot S}{K_s+S} & \dfrac{-\mu_{max}\cdot X\cdot S}{(K_s+S)^2} & 0 & -X \end{bmatrix}$$

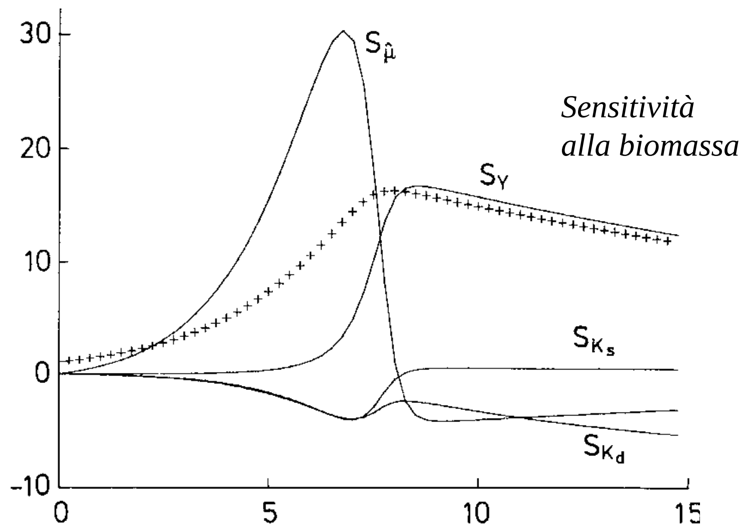
# Sensitività del modello di Monod

## Si ottengono 8 funzioni di sensitività : 2 stati x 4 parametri

Per ottenere l'evoluzione di ciascuna coppia ($S_s$, $S_x$) si deve comporre il sistema associato di sensitività utilizzando per intero lo Jacobiano e la colonna della matrice degli ingressi che si riferisce al parametro di interesse, ad es. nel caso di sensitività a $K_s$, si usa la seconda colonna

$$\begin{bmatrix}\dot S^{S}_{k_s}\\ \dot S^{X}_{K_s}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{Y}\cdot\frac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & -\frac{1}{Y}\cdot\frac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} \\ \frac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & \frac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S}-K_d\end{bmatrix}\times\begin{bmatrix}S^{S}_{k_s}\\ S^{X}_{K_s}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\frac{1}{Y}\cdot\frac{\mu_{max}\cdot X\cdot S}{(K_s+S)^2}\\ \frac{-\mu_{max}\cdot X\cdot S}{(K_s+S)^2}\end{bmatrix}$$



# Sistema di Sensibilità per Monod

***Sistemi per generare le traiettorie di sensitività***

***Sensitività ai vari parametri***

***Modello per generare la traiettoria nominale***

$$
\begin{cases}
\dfrac{dS}{dt} = -\dfrac{1}{Y}\dfrac{\mu_{max}S}{K_s+S}X \\[2ex]
\dfrac{dX}{dt} = \dfrac{\mu_{max}S}{K_s+S}X - K_d X
\end{cases}
$$

$$(S, X)$$

$$
\begin{bmatrix} \dot S^S_{\mu max} \\ \dot S^X_{\mu max} \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix}
-\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & -\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} \\[2ex]
\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & \dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} - K_d
\end{bmatrix}
\times
\begin{bmatrix} S^S_{\mu max} \\ S^X_{\mu max} \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix}
-\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{X\cdot S}{K_s+S} \\[2ex]
\dfrac{X\cdot S}{K_s+S}
\end{bmatrix}
\longrightarrow
\begin{bmatrix} S^S_{\mu max} \\ S^X_{\mu max} \end{bmatrix}
$$

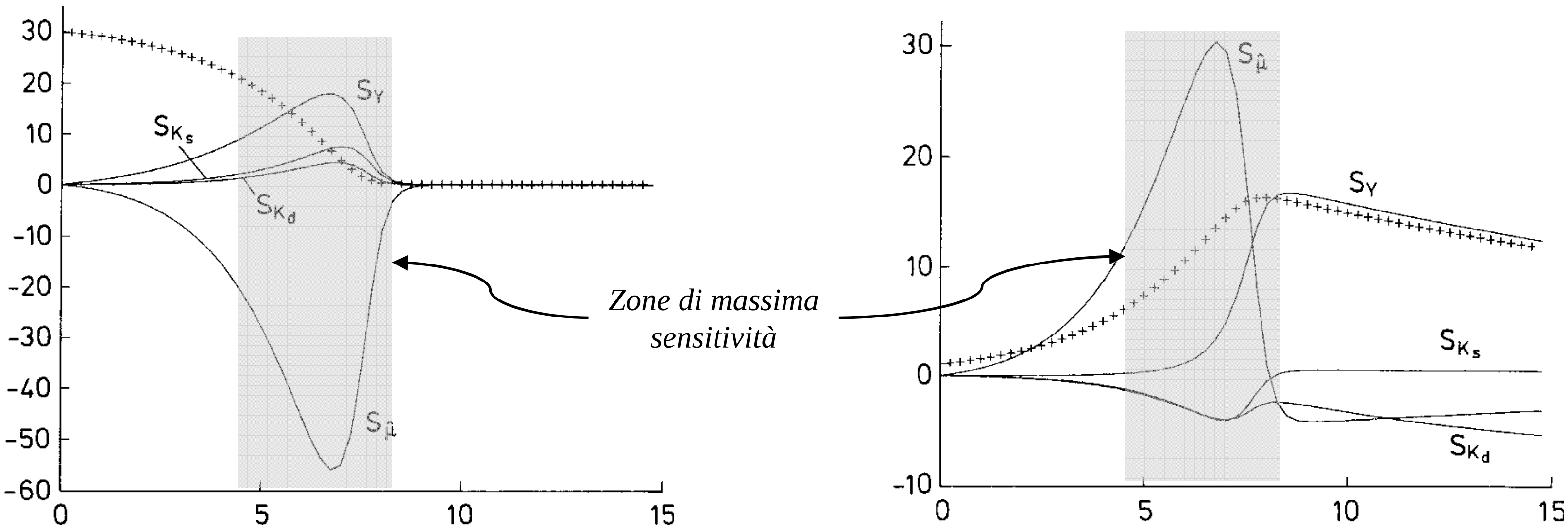
$$
\begin{bmatrix} \dot S^S_{k_s} \\ \dot S^X_{K_s} \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix}
-\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & -\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} \\[2ex]
\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & \dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} - K_d
\end{bmatrix}
\times
\begin{bmatrix} S^S_{K_s} \\ S^X_{K_s} \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix}
\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot X\cdot S}{(K_s+S)^2} \\[2ex]
\dfrac{-\mu_{max}\cdot X\cdot S}{(K_s+S)^2}
\end{bmatrix}
\longrightarrow
\begin{bmatrix} S^S_{K_s} \\ S^X_{K_s} \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{bmatrix} \dot S^S_{Y} \\ \dot S^X_{Y} \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix}
-\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & -\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} \\[2ex]
\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & \dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} - K_d
\end{bmatrix}
\times
\begin{bmatrix} S^S_{Y} \\ S^X_{Y} \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix}
\dfrac{1}{Y^2}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot X\cdot S}{K_s+S} \\[2ex]
0
\end{bmatrix}
\longrightarrow
\begin{bmatrix} S^S_{Y} \\ S^X_{Y} \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{bmatrix} \dot S^S_{K_d} \\ \dot S^X_{K_d} \end{bmatrix} =
\begin{bmatrix}
-\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & -\dfrac{1}{Y}\cdot\dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} \\[2ex]
\dfrac{K_s}{(K_s+S)^2}\cdot X & \dfrac{\mu_{max}\cdot S}{K_s+S} - K_d
\end{bmatrix}
\times
\begin{bmatrix} S^S_{K_d} \\ S^X_{K_d} \end{bmatrix}
+
\begin{bmatrix}
0 \\ -X
\end{bmatrix}
\longrightarrow
\begin{bmatrix} S^S_{K_d} \\ S^X_{K_d} \end{bmatrix}
$$

# Considerazioni sulla sensitività

- La sensitività a $\mu_{max}$ è massima quando si sta per raggiungere la massima densità di biomassa, perciò le misure relative a questo periodo danno il massimo di informazione per la stima di $\mu_{max}$
- Durante la fase di decadimento endogeno le sensitività del substrato a tutti i parametri tende a zero, perché questa variabile tende a zero
- La sensitività della biomassa rispetto a Y e $K_s$ durante la fase endogena è diversa da zero, perciò i dati raccolti durante questa fase sono significativi
- Le sensitività di ambedue gli stati a $K_s$ sono modeste: ciò implica che la stima di questo parametro è difficile



# Sensitività dinamica approssimata (incrementale)

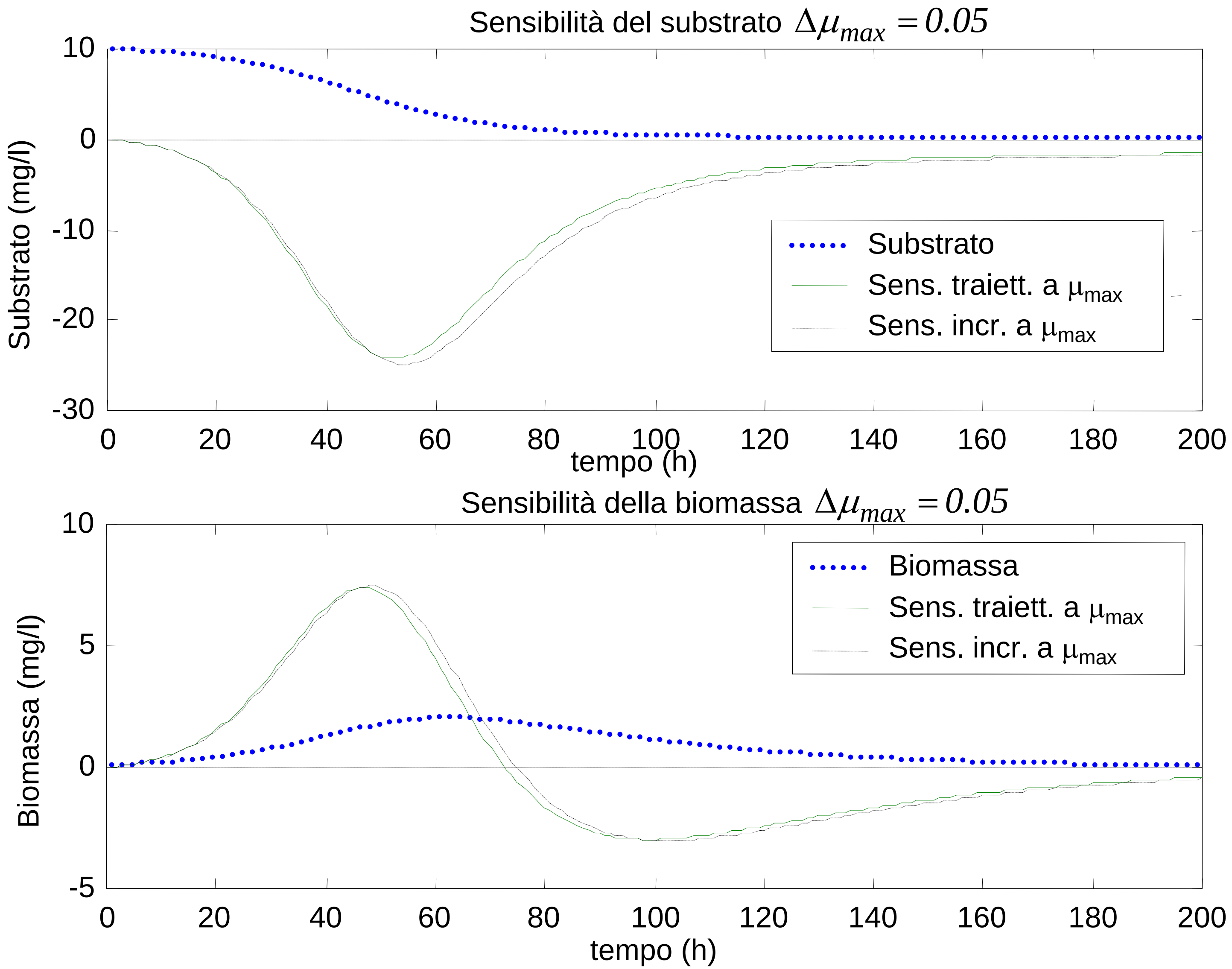
- Il calcolo del sistema di sensitività richiede lo sviluppo di numerose derivate formali
- Questo può essere evitato se si rilassa la condizione $\Delta p_i \to 0$
- Si effettuano 2 simulazioni:
  - Condizioni nominali $p_o \to y_{nom}$
  - Condizioni perturbate $p_o(1+\delta) \to y_{pert}$
- Si calcola la sensitività come

$$\boxed{S_p^y = \frac{y_{pert} - y_{nom}}{\delta * p_o}}$$

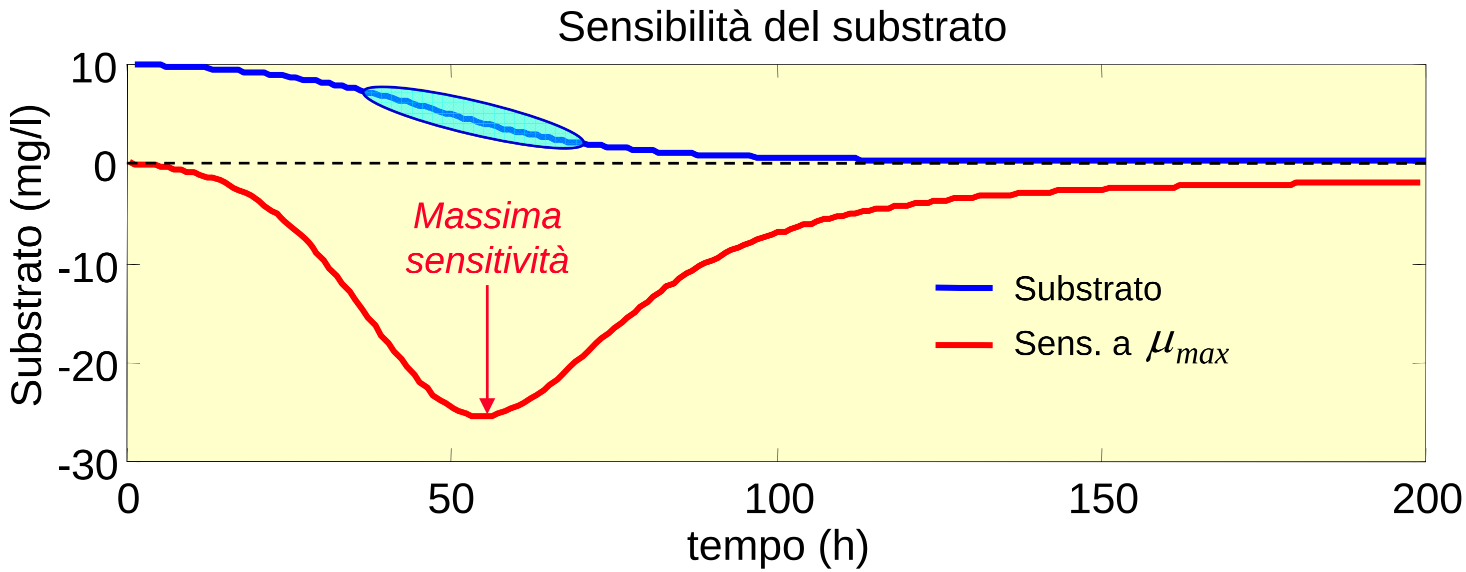
- Se lo scostamento del parametro dal valore nominale è sufficiente piccolo rispetto a questo valore, si approssima bene la sensitività “teorica” ottenuta analiticamente

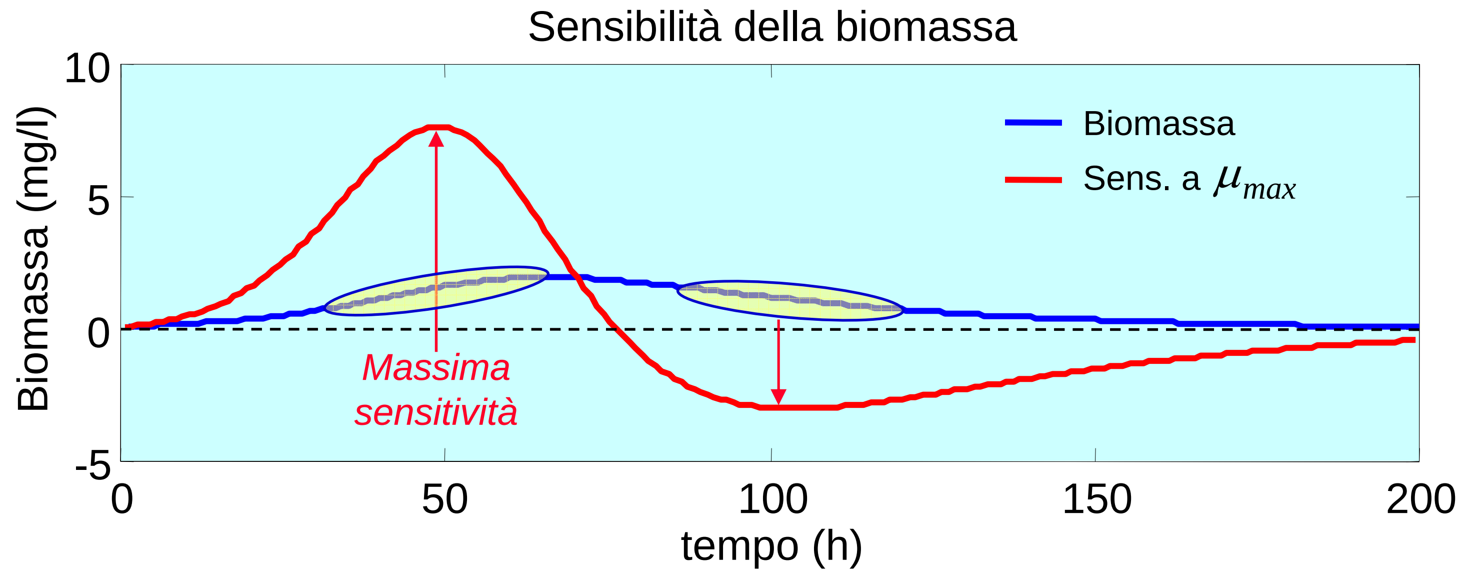
# Paragone fra le funzioni di sensitività

Le due sensitività coincidono se la variazione del parametro è molto piccola, ad es. $\delta \cong 0.001$ altrimenti la differenza può essere rilevante



# Sensitività dinamica di Monod



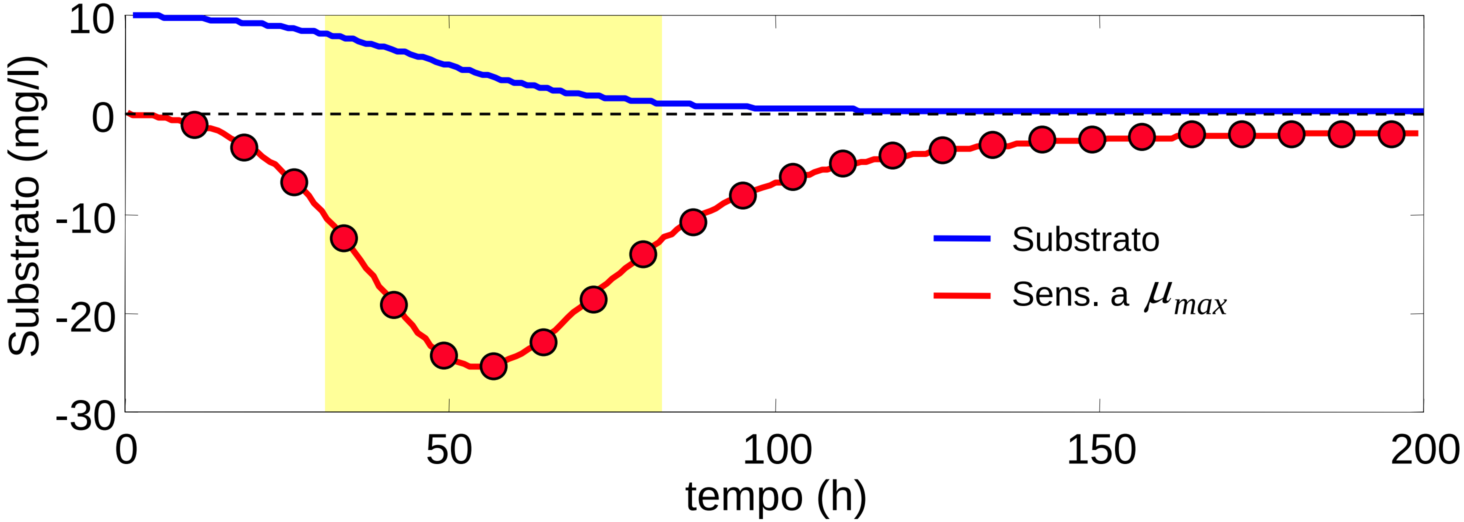

I dati nelle regioni in colore sono quelli migliori per identificare $\mu_{max}$

# Classifica delle sensitività

- Per classificare i parametri in funzione delle sensitività, si introduce un fattore di sensitività del tipo

$$S_{p_i} = \sqrt{\sum_q \left( \sum_k S_{p_i}^y(k) \right)^2}$$

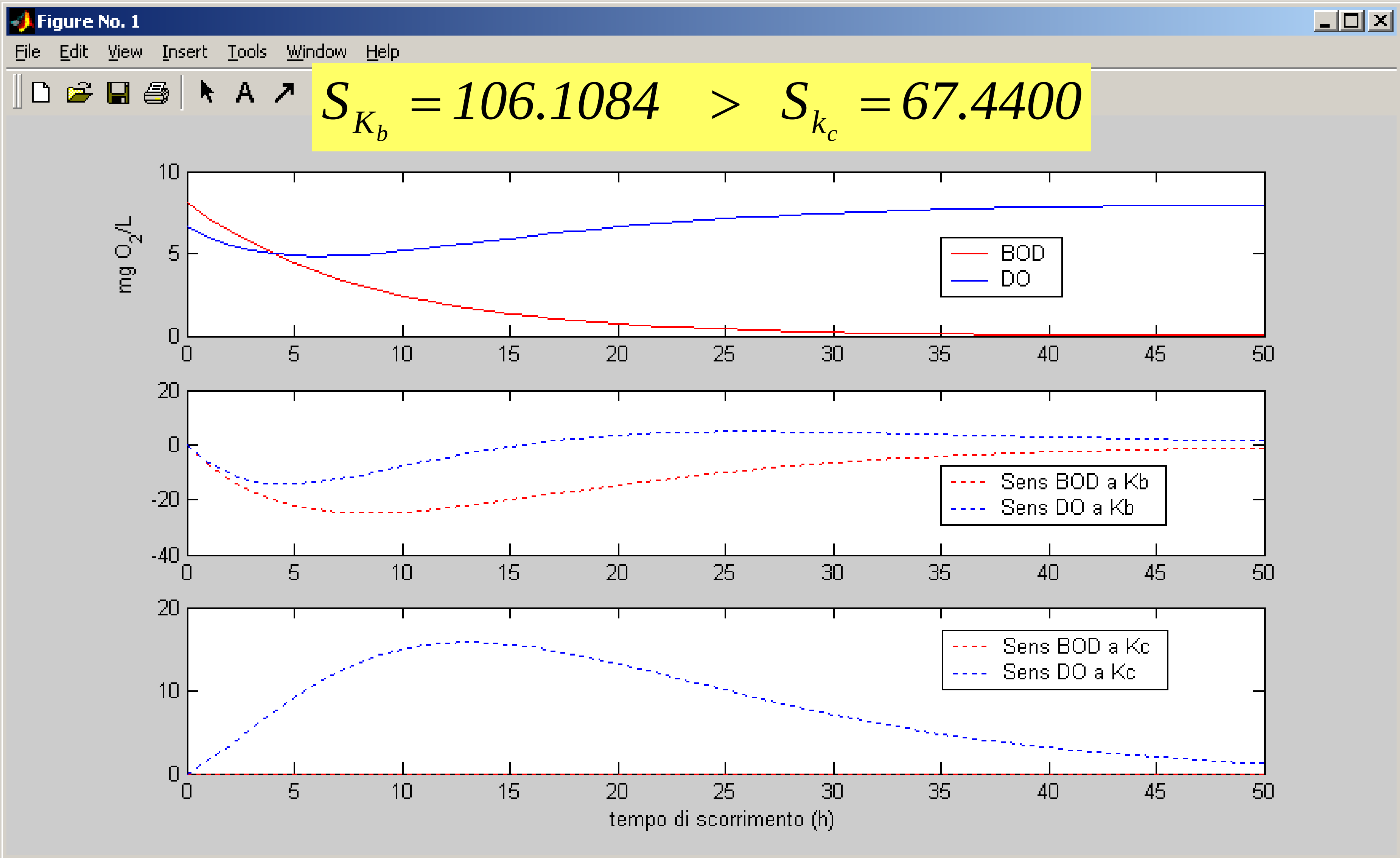
dove $k$ è esteso ai punti usati per il calcolo della sommatoria lungo la traiettoria di sensitività




- La sensitività totale S permette di classificare i parametri, in modo da porre maggiore attenzione nella scelta (nella calibrazione) di quelli più "critici".

# Sensitività del modello di Streeter & Phelps

$$S_{K_b} = 106.1084 \quad > \quad S_{k_c} = 67.4400$$



# Esempi di classifiche di sensitività

**Modello di Streeter & Phelps**

$$S_{K_b} = 106.1084$$
$$S_{k_c} = 67.4400$$

*Domanda:* si può definire un criterio per decidere e che punto "tagliare" la classifica di sensitività ovvero quanti parametri stimare?
*Risposta:* Si, si può decidere in base alla matrice di Fisher (vedi + avanti)

**Modello di Monod**

$$S_{K_d} = 3838.153$$
$$S_Y = 717.264$$
$$S_{\mu_{max}} = 699.479$$
$$S_{K_d} = 7.664$$

**Modello ASM3**

| Kinetic and stoichiometric parameters | Description | Value | Sensitivity $S_p$ |
|---|---|---|---|
| $\mu_{ns}$ (*) | Max growth rate of $X_{ns}$ | 0.756 | $1.96 \times 10^6$ |
| $\mu_{nb}$ (°) | Max growth rate of $X_{nb}$ | 1.048 | $1.47 \times 10^6$ |
| $\mu_H$ | Heterotrophic max growth | 1 | $0.73 \times 10^6$ |
| $K_{NO3}$ | Saturation constant for $X_{ns}$ | 0.5 | $1.23 \times 10^5$ |
| $K_{A,O2}$ | Saturation constant for $S_{O2}$ of $X_A$ | 0.5 | $1.14 \times 10^5$ |
| $K_{O2}$ | Saturation constant for $S_{O2}$ | 0.1 | $0.89 \times 10^5$ |
| $k_{STO}$ | Storage rate constant | 7.38 | $0.78 \times 10^5$ |
| $A_{NOX}$ | Anoxic reduction factor | 0.63 | $0.63 \times 10^5$ |
| $K_{NOX}$ | Saturation constant for $S_{NOX}$ | 0.5 | $0.46 \times 10^5$ |
| $K_{NO2}$ | Saturation constant for $X_{ns}$ | 0.5 | $1.47 \times 10^4$ |
| $K_S$ | Saturation constant for $S_S$ | 3 | $0.72 \times 10^4$ |
| $K_{STO}$ | Saturation constant for $X_{STO}$ | 1 | $1.42 \times 10^3$ |
| . . . | . . . | . . . | . . . |

# Sensitivity summary

## Sensitività statica

***Indica come varia l'uscita del modello al variare di ciascun parametro***

- ☞ Dipende solo dal modello
- ☞ Permette di ***classificare i parametri*** in funzione della loro influenza sull'uscita del modello
- ☞ Dà informazione sulla forma del funzionale di errore
- ☞ Permette di valutare le eventuali ***difficoltà numeriche*** che incontrerà il simplesso nel raggiungere il minimo.

## Sensitività dinamica

***Per un dato esperimento indica in quali istanti ciascun parametro influenza maggiormente l'uscita del modello***

- ☞ Dipende dal modello e dall'esperimento
- ☞ Permette di progettare esperimenti dai quali si estrae la massima informazione sui parametri ***(esperimenti ottimi)***
- ☞ Per uno stesso modello, cambiando condizioni sperimentali si ottengono ***diverse*** sensitività dinamiche.