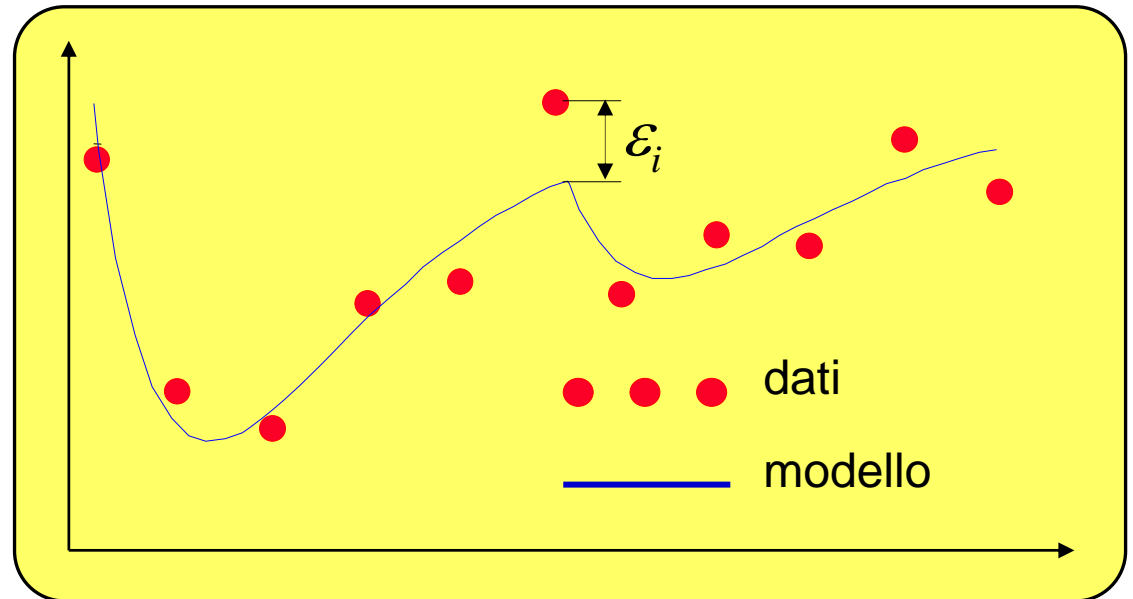


CALIBRAZIONE PARAMETRICA DI MODELLI DINAMICI

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



$$\sum_i \varepsilon_i^2 \rightarrow \min$$

Posizione del problema di calibrazione

Dato il sistema dinamico

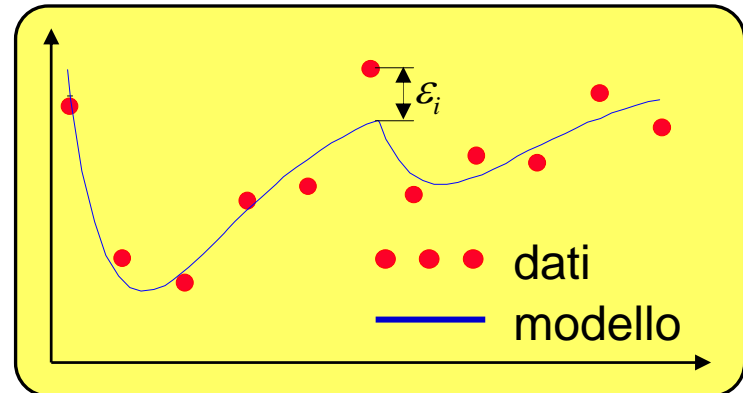
$$\begin{cases} \frac{dx}{dt} = f(x, u_{exp}, P) & x \in \mathbb{R}^n \\ y = g(x, u_{exp}, P) & y \in \mathbb{R}^q \end{cases} \quad P \in \mathbb{R}^{n_p}$$

ed il funzionale di errore
$$E(P) = \sum_{k=1}^N (y_k(P) - y_k^{exp})^T Q_k (y_k(P) - y_k^{exp})$$

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 $E(P)$, sono quelli che lo rendono minimo

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



Minimizzazione del funzionale di errore

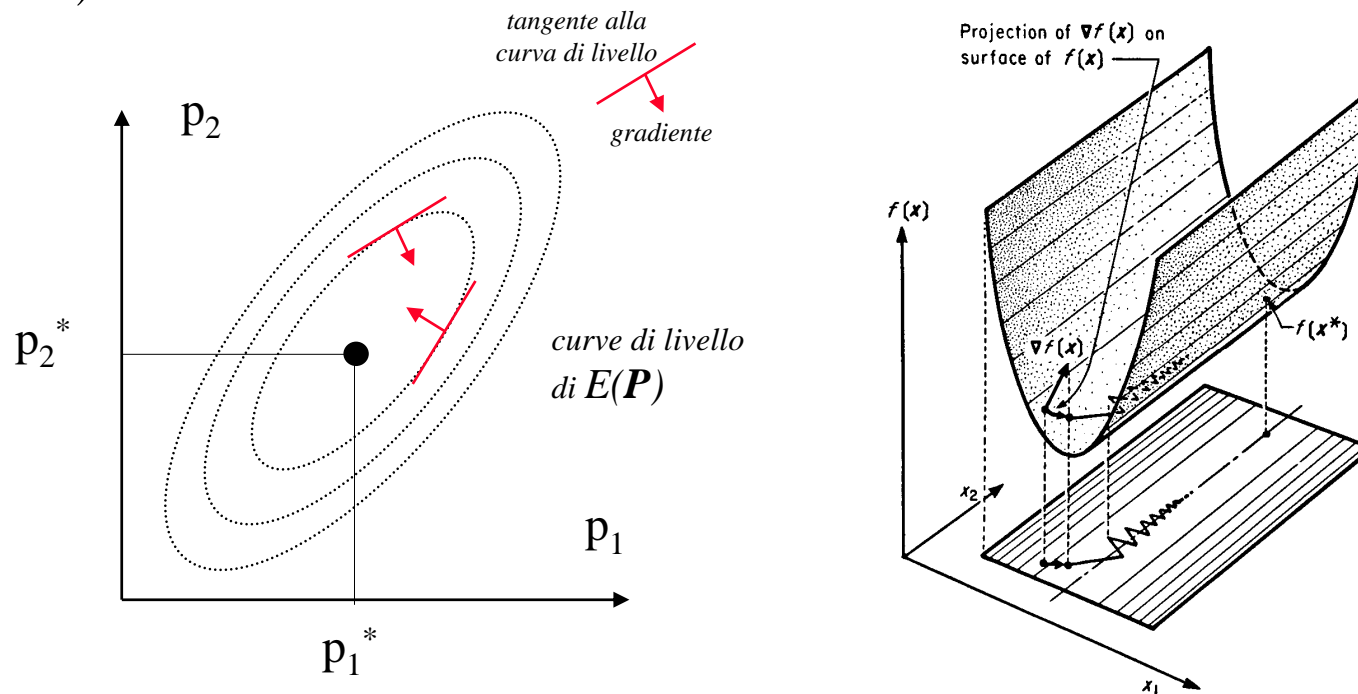
- Il problema della stima parametrica è riconducibile ad un problema di ottimizzazione

$$\min_{\mathbf{P}} E(\mathbf{P}) = \sum_{k=1}^N (y_k(\mathbf{P}) - y_k)^T \mathbf{Q}_k (y_k(\mathbf{P}) - y_k) \quad \text{con il vincolo} \quad \begin{cases} \frac{dx}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_{exp}, \mathbf{P}) \\ y(\mathbf{P}) = \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_{exp}, \mathbf{P}) \end{cases}$$

- Trattandosi di sistemi **dinamici**, la soluzione analitica non è quasi mai disponibile e perciò non sono applicabili i metodi basati sul gradiente
- Si ricorre allora a metodi di ricerca diretta (*search methods*) che si basano su una conoscenza *per punti* di $E(\mathbf{P})$.
- L'algoritmo di ricerca più efficiente è *metodo del semplice*: si procede verso il minimo valutando la funzione $E(\mathbf{P})$ in un numero finito di punti disposti a reticolo (i vertici del semplice) scartando ad ogni passo il punto peggiore, nel quale la funzione è massima, e sostituendolo con un nuovo punto che si ritiene più vicino all'ottimo cercato.

Problemi di convergenza dei metodi “gradiente”

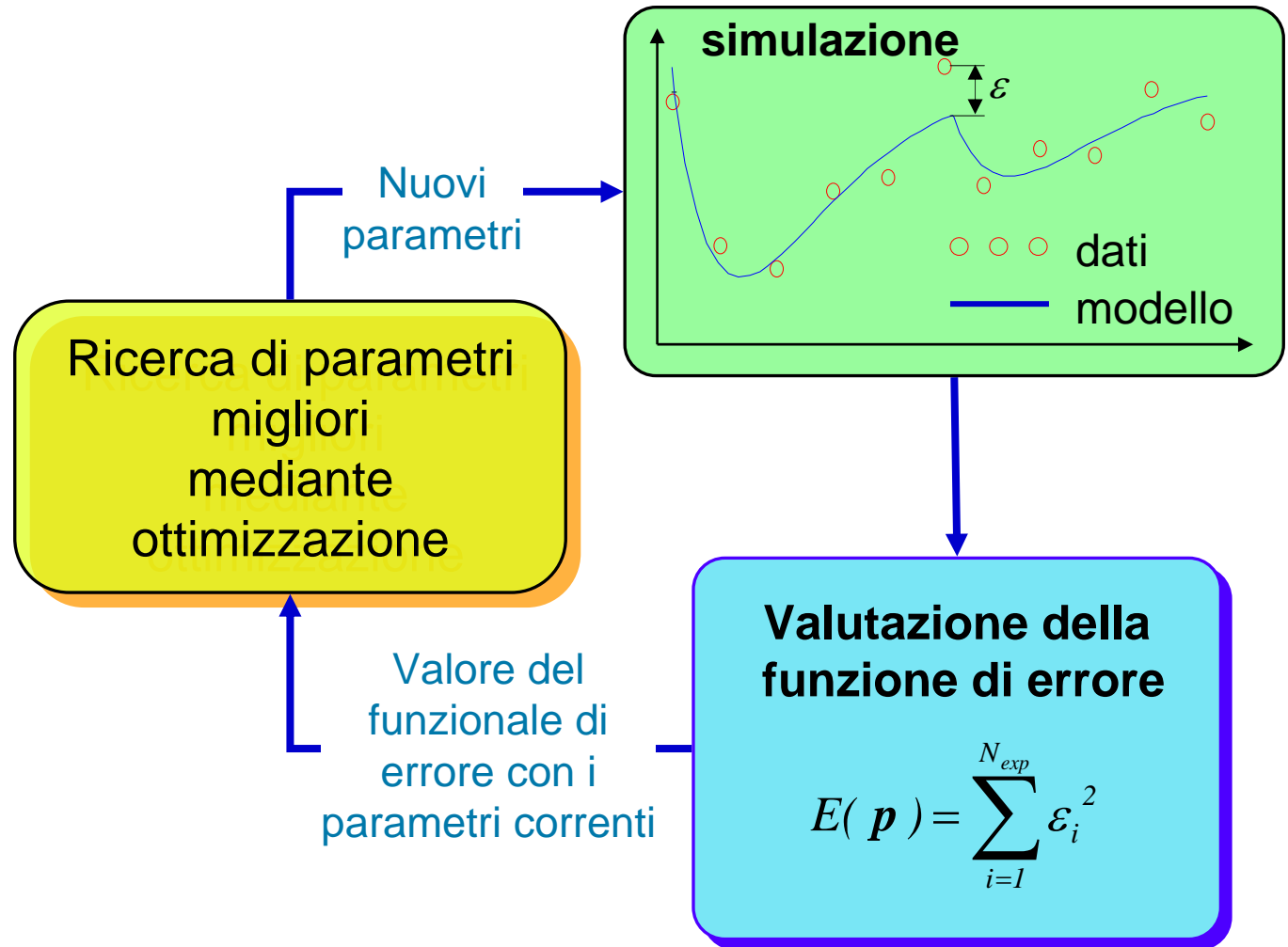
- 👉 I parametri dei modelli dinamici sono spesso correlati fra loro: le loro variazioni si influenzano reciprocamente
- 👉 Ciò implica che la forma del funzionale di errore $E(\mathbf{P})$ sia di tipo allungato (*a valle stretta*)



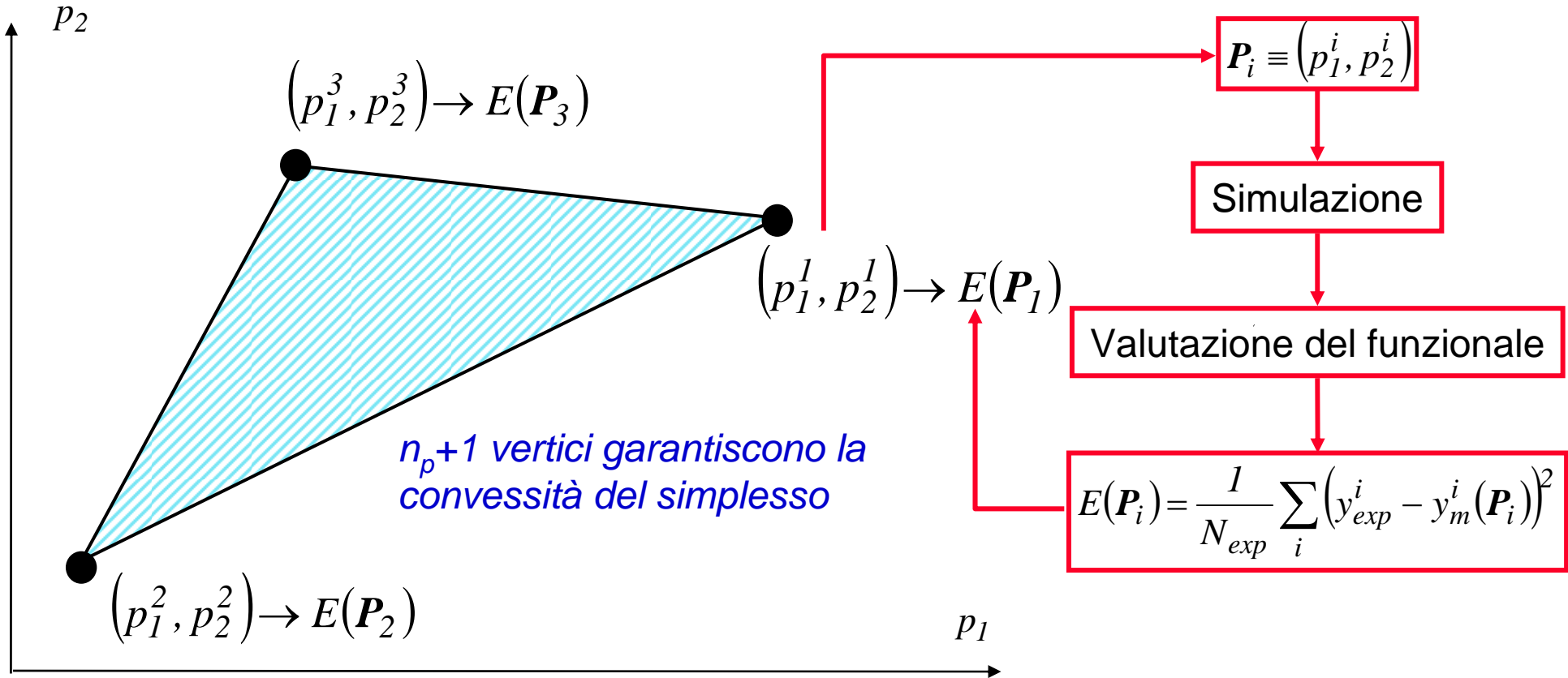
- 👉 In questa situazione i metodi gradiente falliscono perché proiettano la ricerca ortogonalmente alla curva di livello, con effetto di “rimbalzo”

Soluzione iterativa al problema della calibrazione

- ❑ Per ogni valore dei parametri si effettua una simulazione
- ❑ Si valuta l'errore fra l'uscita del modello e i dati sperimentali
- ❑ Si cambiano i parametri in modo da ridurre questo errore
- ❑ Il processo di aggiustamento dei parametri è controllato da un algoritmo di ottimizzazione



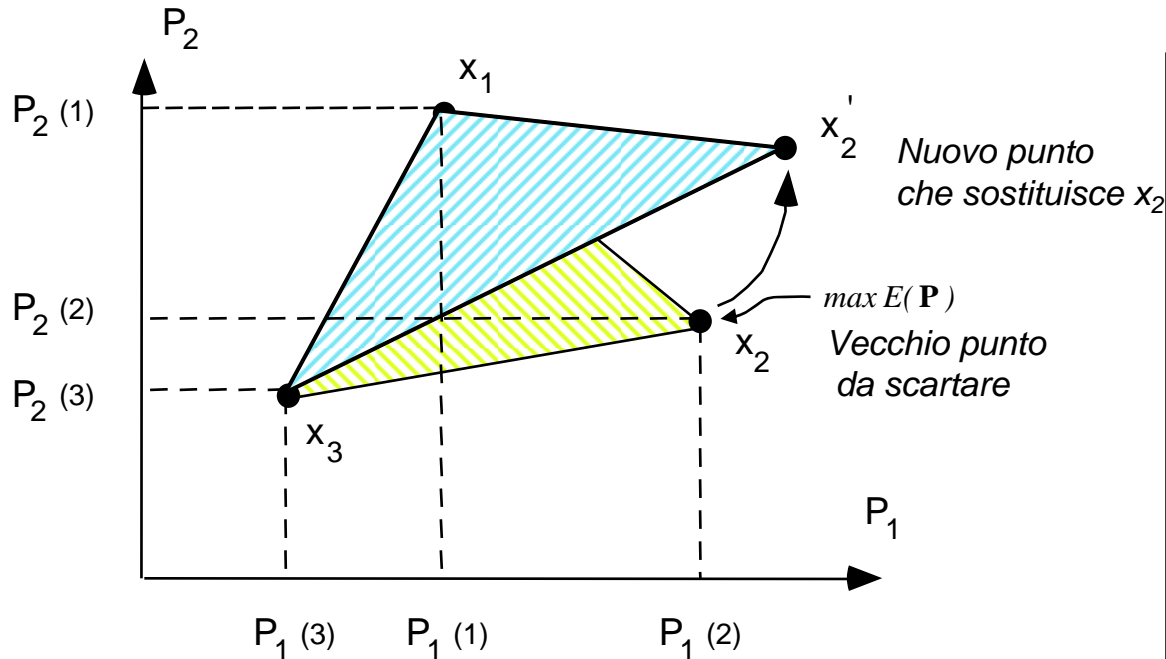
Il Simpleso flessibile



A ciascuno dei $n_p + 1$ vertici corrispondono altrettante n_p -uple di parametri. Per ciascuna di esse si valuta il funzionale di errore $E(\mathbf{P})$. In tal modo i vertici possono venir classificati in funzione del valore di $E(\mathbf{P})$

$$\text{Esempio : } E(\mathbf{P}_2) > E(\mathbf{P}_1) > E(\mathbf{P}_3) \Rightarrow \mathbf{P}_2 = \mathbf{P}_{max}$$

Il Simpleso flessibile



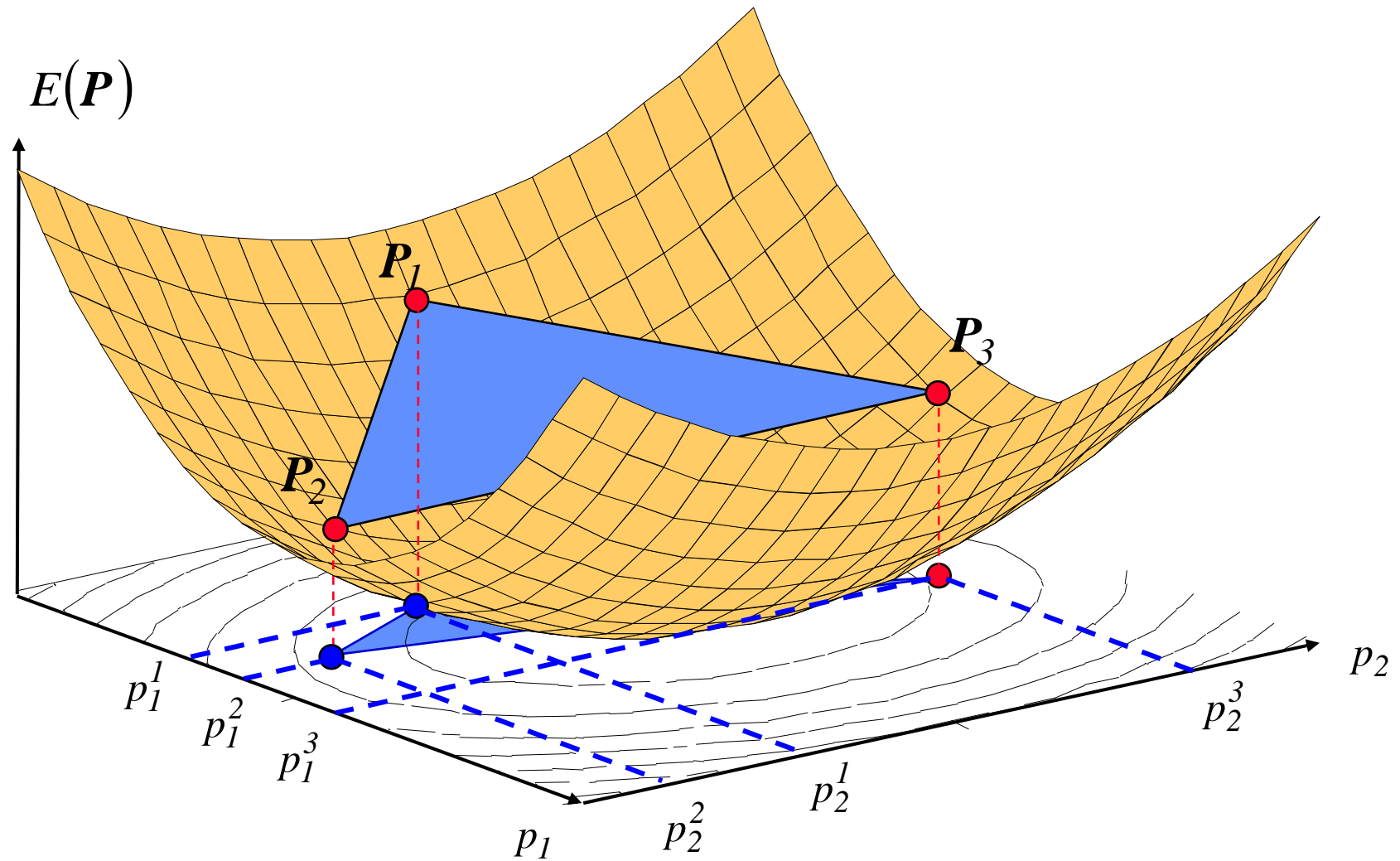
Simpleso Flessibile

Metodo di ricerca del minimo senza uso del gradiente (niente derivate)

La ricerca si basa su successive valutazioni del funzionale nei punti che formano i vertici del simpleso

- Il simpleso ha $n_p + 1$ vertici, se n_p è il numero di parametri
- Il funzionale di errore viene valutato in corrispondenza dei vertici del simpleso
- Ad ogni interazione il punto peggiore viene scartato e sostituito con uno che si ritiene migliore
- Come scegliere il nuovo punto perché sia “migliore” del precedente?

Disposizione del semplice rispetto al funzionale di errore



Definizioni sul Simpleso

☞ Dato un Simpleso in \mathfrak{R}^{n_p} avente n_p+1 vertici

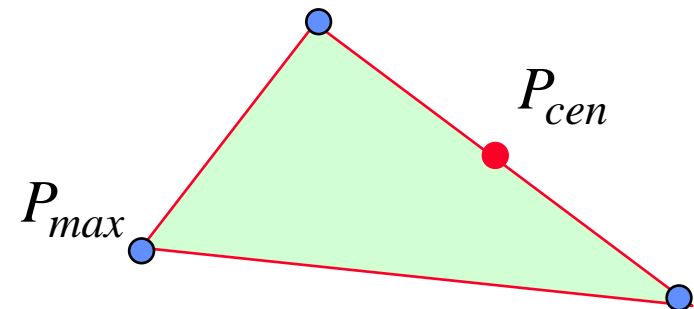
$$\mathbf{P} \equiv \left\{ \mathbf{P}_1, \mathbf{P}_2, \mathbf{P}_3, \dots, \mathbf{P}_{n_p+1} \right\} \quad \mathbf{P}_i \in \mathfrak{R}^{n_p} \quad (i = 1, 2, \dots, n_p + 1)$$

☞ Si definiscono il punto peggiore (\mathbf{P}_{max}) e migliore (\mathbf{P}_{min}) come

$$\mathbf{P}_{max} = \arg \left[\max_{\mathbf{P}} \{ E(\mathbf{P}) \} \right] \quad \mathbf{P}_{min} = \arg \left[\min_{\mathbf{P}} \{ E(\mathbf{P}) \} \right]$$

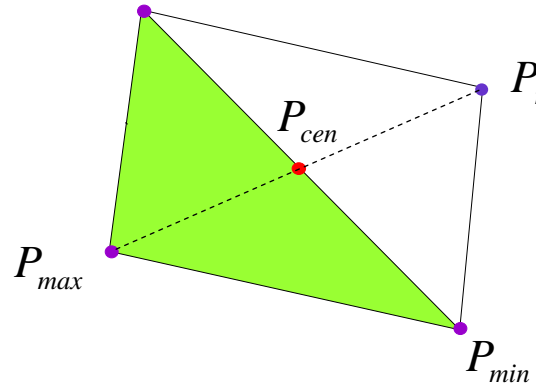
☞ ed il **Centroide** \mathbf{P}_{cen} calcolato come baricentro di tutti i punti *escluso* \mathbf{P}_{max}

$$\mathbf{P}_{cen} = \frac{1}{n_p} \left[\left(\sum_{i=1}^{n_p+1} \mathbf{P}_i \right) - \mathbf{P}_{max} \right]$$



Operazioni sul semplice

■ P_{new}



Riflessione

$$E(P_r) < E(P_{min})$$

Espansione

$$E(P_{exp}) < E(P_r) \Rightarrow P_{new} = P_{exp}$$

$$E(P_{exp}) > E(P_r) \Rightarrow P_{new} = P_r$$

$$E(P_{max}) > E(P_r) > E(P_{min})$$

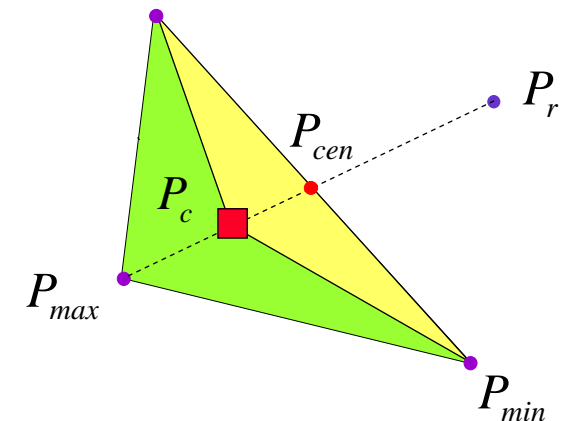
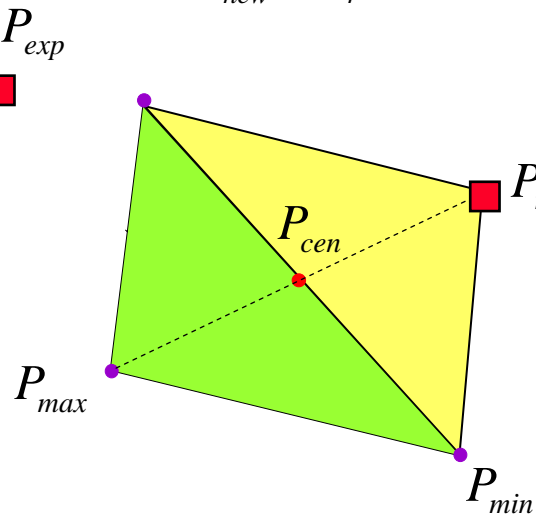
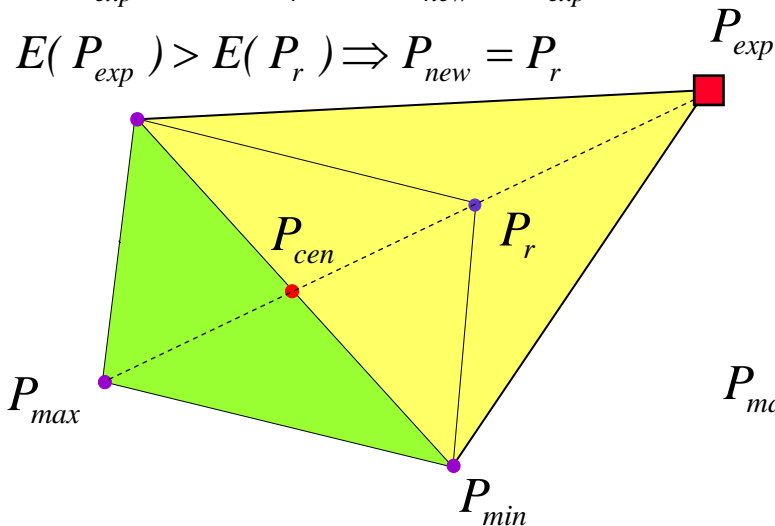
Riflessione

$$P_{new} = P_r$$

$$E(P_r) > E(P_{max})$$

Contrazione

$$P_{new} = P_c$$



Operazioni di deformazione del semplice

RIFLESSIONE

$$P_r = P_{cen} + \alpha(P_{cen} - P_{max}) \quad \alpha > 0$$

$$E(P_{exp}) < E(P_r) \Rightarrow P_{new} = P_{exp}$$

Decisioni:

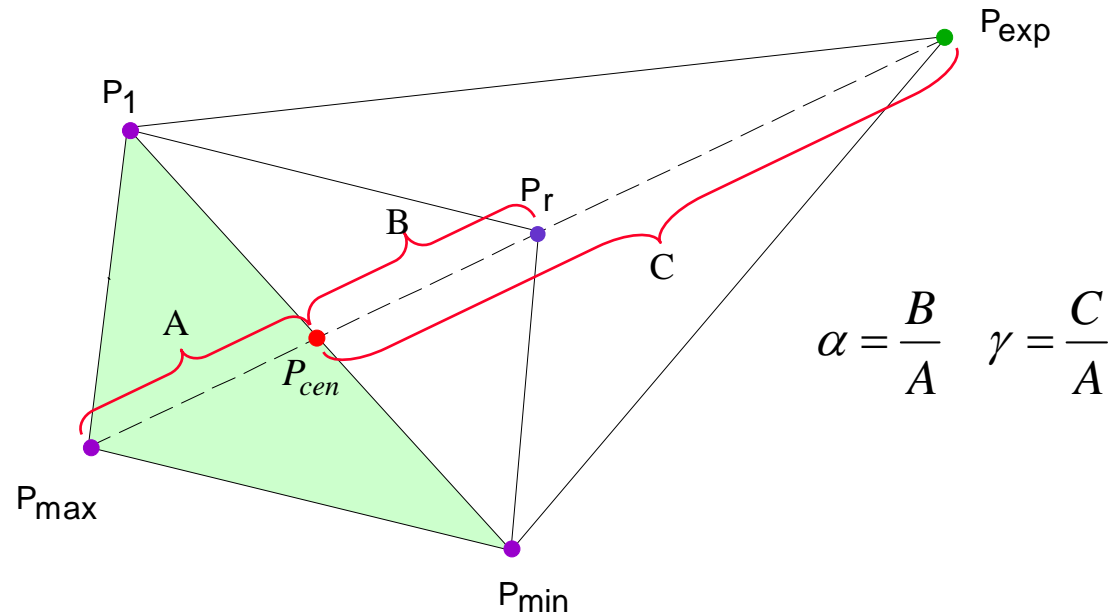
$$E(P_{exp}) > E(P_r) \Rightarrow P_{new} = P_r$$

ESPANSIONE

$$P_{exp} = P_{cen} + \gamma(P_r - P_{cen}) \quad \gamma > 1$$

La riflessione ha carattere “esplorativo” ed avviene ad ogni iterazione, mentre l’espansione si effettua solo in caso di successo della riflessione.

In generale α e β sono fissati



Operazioni di deformazione del semplice

CONTRAZIONE

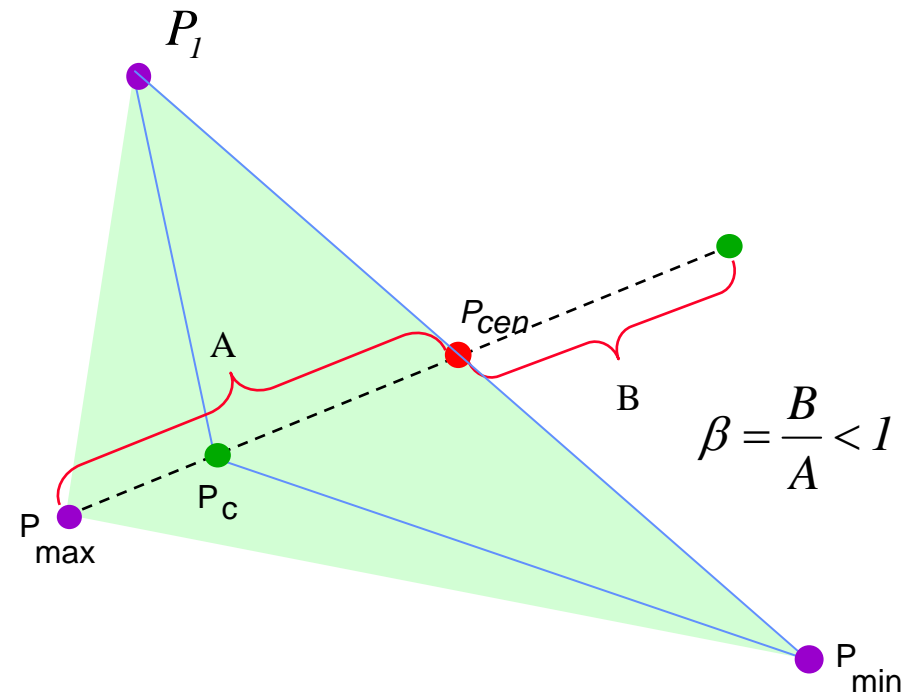
$$\text{Se } E(P_r) > E(P_{max})$$

La riflessione non indica un miglioramento lungo la direzione di ricerca “esterna”, si cerca all’interno del Semplice

$$P_c = P_{cen} + \beta(P_r - P_{cen})$$

$$0 < \beta < 1$$

$$\text{se } E(P_c) < E(P_{max}) \Rightarrow P_c \rightarrow P_{max}$$



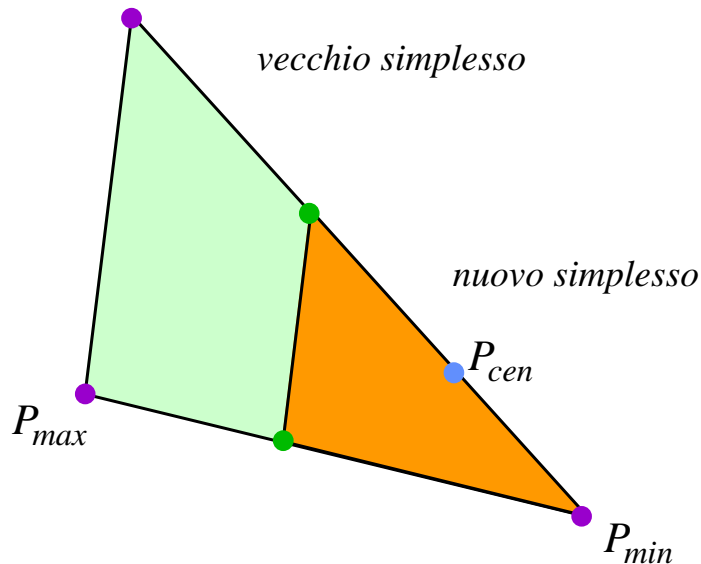
Operazioni di deformazione del semplice

RIDUZIONE

$$se \ E(P_c) \geq E(P_{max})$$

Si riduce la dimensione complessiva del semplice
diminuendo tutte le distanze fra i vertici

$$P_i^{nuovo} = P_i^{vecchio} + \delta(P_i^{vecchio} - P_{min}) \quad i = 1, 2, \dots, n_p + 1 \quad i \neq min$$



Criterio di Arresto:
Piattezza del Semplice

$$\varepsilon_{toll} \geq \Delta E = \frac{1}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p+1} [E(P_i) - E(P_{cen})]^2$$

Operazioni sul Simpleso

☞ **Riflessione:** ricerca del nuovo punto lungo la direzione della congiungente \mathbf{P}_{\max} con il centroide \mathbf{P}_{cen} .

$$P_r = P_{\text{cen}} + \alpha(P_{\text{cen}} - P_{\text{max}}) \quad \alpha > 0$$

☞ **Espansione:** Se $E(\mathbf{P}_r) < E(\mathbf{P}_{\min})$ si espande fino a

$$P_{\text{exp}} = P_{\text{cen}} + \gamma(P_r - P_{\text{cen}}) \quad \gamma > 1$$

☞ **Contrazione:** Se invece $E(\mathbf{P}_r) > E(\mathbf{P}_{\max})$ viene effettuata una *contrazione* cercando il nuovo punto all'interno del simpleso

$$P_c = P_{\text{cen}} + \beta(P_r - P_{\text{cen}}) \quad 0 < \beta < 1$$

☞ **Riduzione:** Si riducono tutte le distanze fra i vertici escluso \mathbf{P}_{\min}

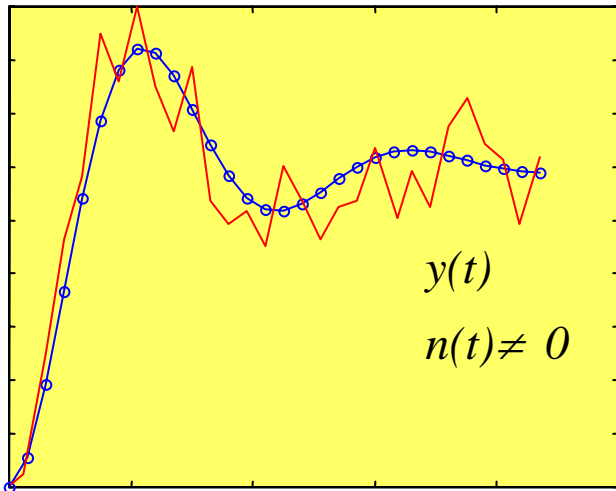
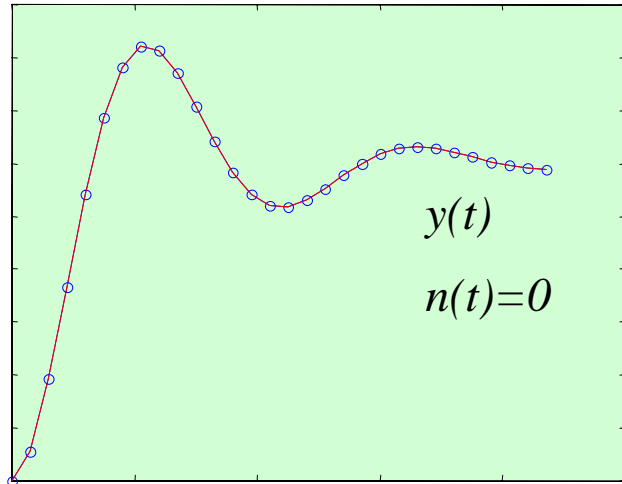
$$P_i = P_i + 0.5(P_i - P_{\min})$$

Criterio di arresto del simplesso

- ✎ Non si può arrestare la ricerca ad un valore predefinito perché il valore $E(P_{opt})$ non è ben definibile a priori
- ✎ Si suppone che la ricerca debba terminare quando il simplesso si trova “in piano”, cioè quando tutti i vertici hanno *circa* lo stesso valore di $E(P)$
- ✎ Il criterio di arresto si basa su un test di “piattezza” del simplesso: tutti i vertici hanno lo stesso valore di $E(P)$ a meno di una tolleranza ε

$$\varepsilon \geq \frac{1}{n_p} \sum_{\substack{i=n_p+1 \\ i \neq \max}}^{n_p+1} \|E(\mathbf{P}_i) - E(\mathbf{P}_{cen})\|^2$$

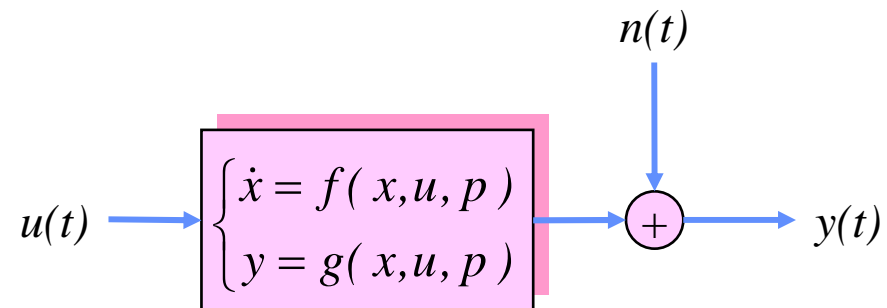
Variabilità del minimo dell'errore di calibrazione



Modello perfetto & $\sigma^2 = 0$



$$E(P_{opt}) = 0$$

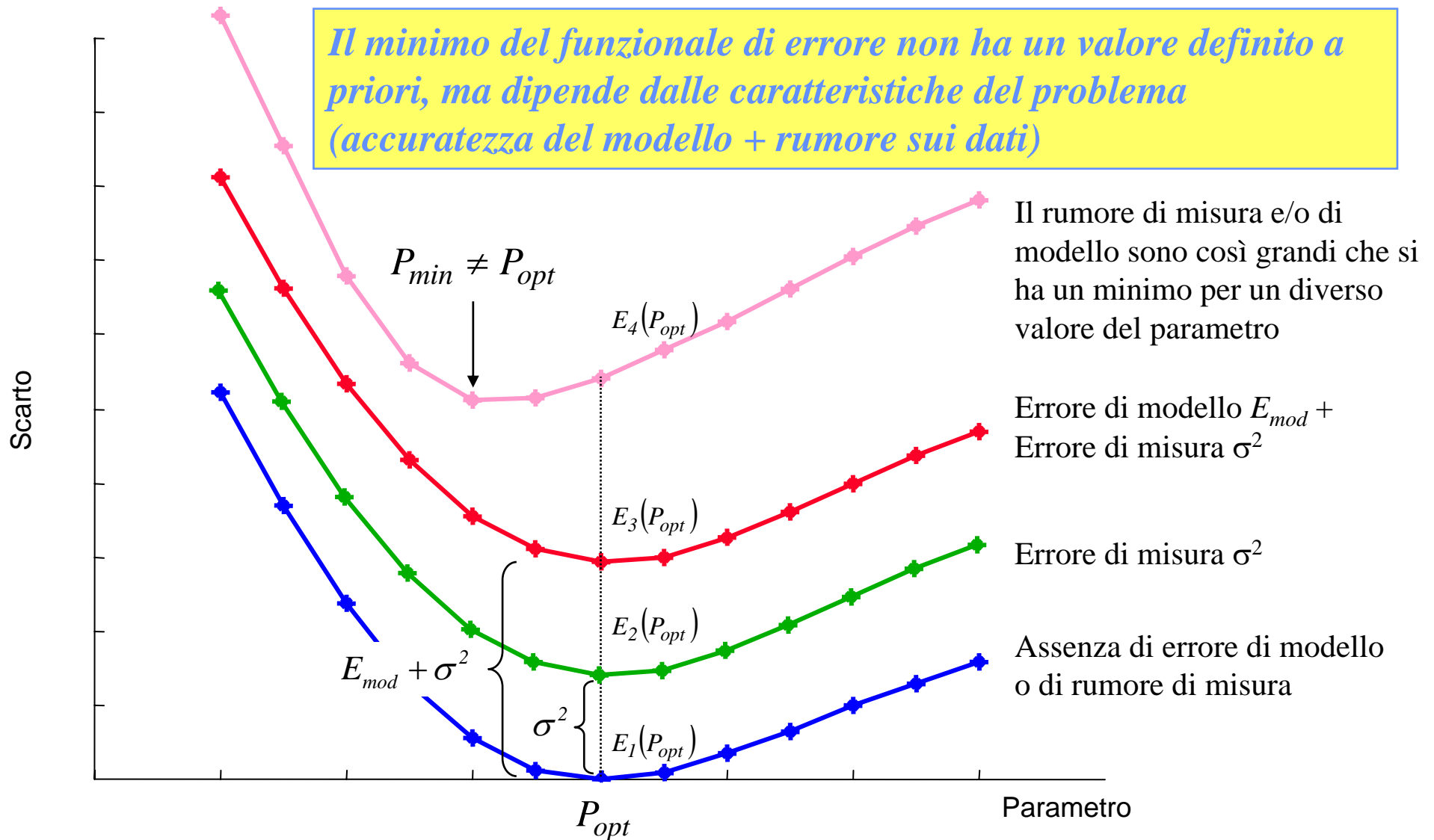


Modello imperfetto e/o $\sigma^2 > 0$



$$E(P_{opt}) = E_{mod} + \sigma^2$$

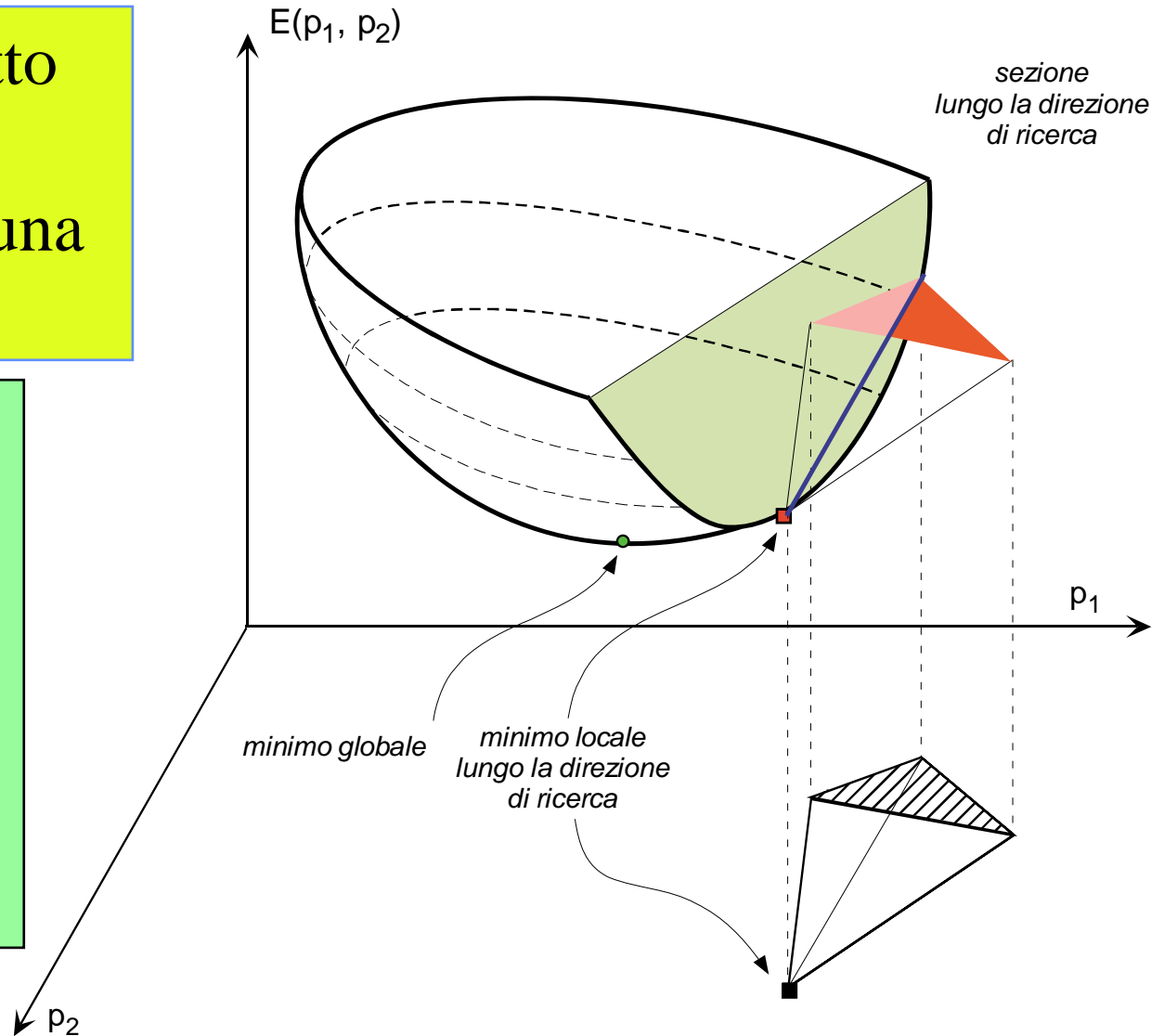
Criterio di arresto



Espansione ottimizzata

Miglioramento rispetto al caso “classico”: perché espandere di una quantità fissa ?

L'espansione non è più a lunghezza fissa, ma viene spinta fino a determinare il minimo locale lungo la direzione di riflessione



Vantaggi dell'espansione ottimizzata

Maggiore robustezza numerica

- ⇒ Si riesce a trattare problemi con alta “curvatura” (differente ordine di grandezza dei parametri)

Minor numero di espansioni

- ⇒ Ogni espansione determina il minimo locale in una sola iterazione

Minor numero di valutazioni del funzionale

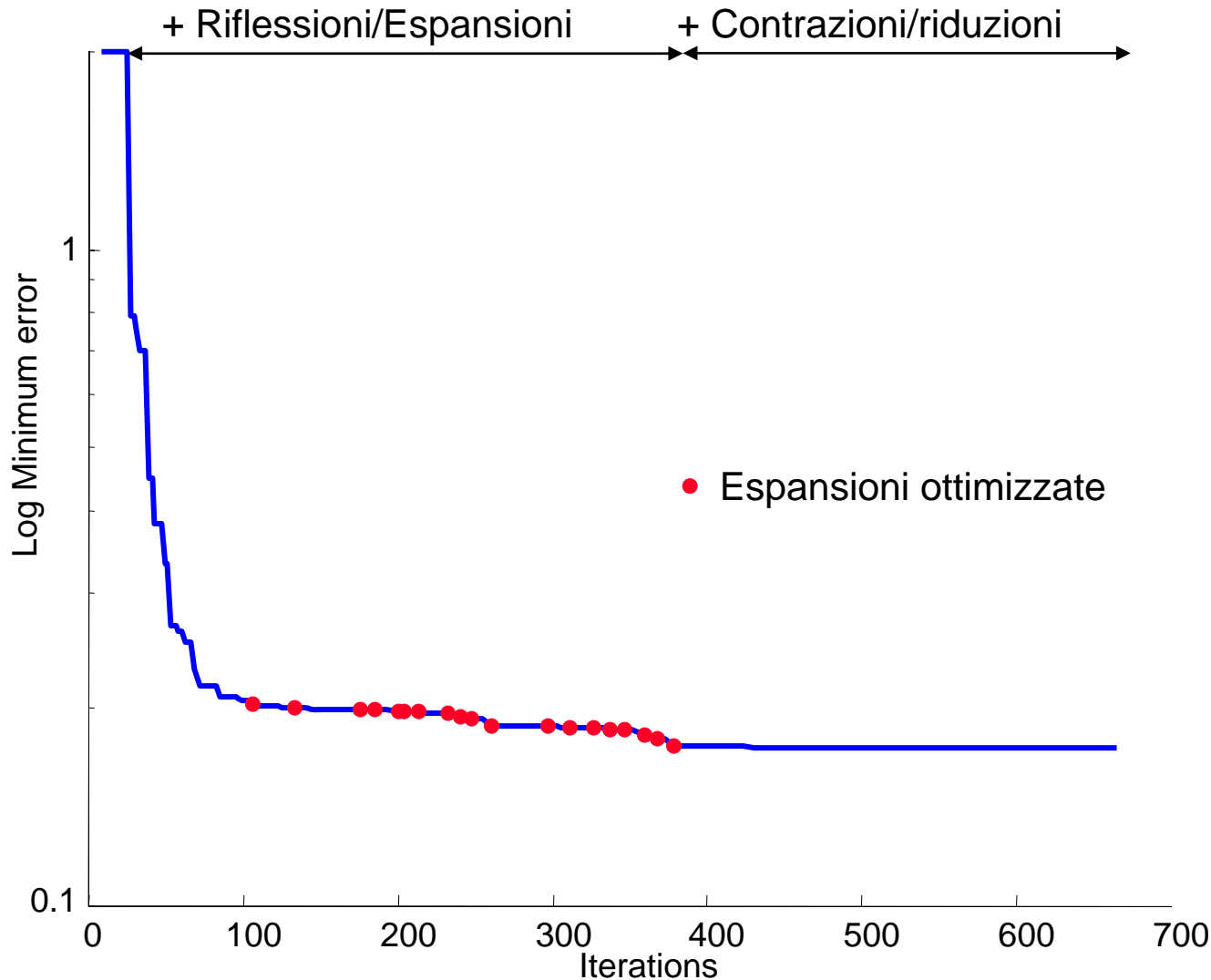
- ⇒ Nel caso di sistemi dinamici ogni valutazione richiede una simulazione, che può essere computazionalmente molto impegnativa

Maggiore efficienza nel caso di “valle stretta”

- ⇒ Questo è quasi sempre il caso per i sistemi biologici o ecologici, data la correlazione fra parametri

Migliore individuazione della direzione di ricerca al fondo della valle

Convergenza



Nella parte iniziale della ricerca prevalgono le **riflessioni/espansioni** perché il semplice è ampio ed esplora una porzione ampia dello spazio.

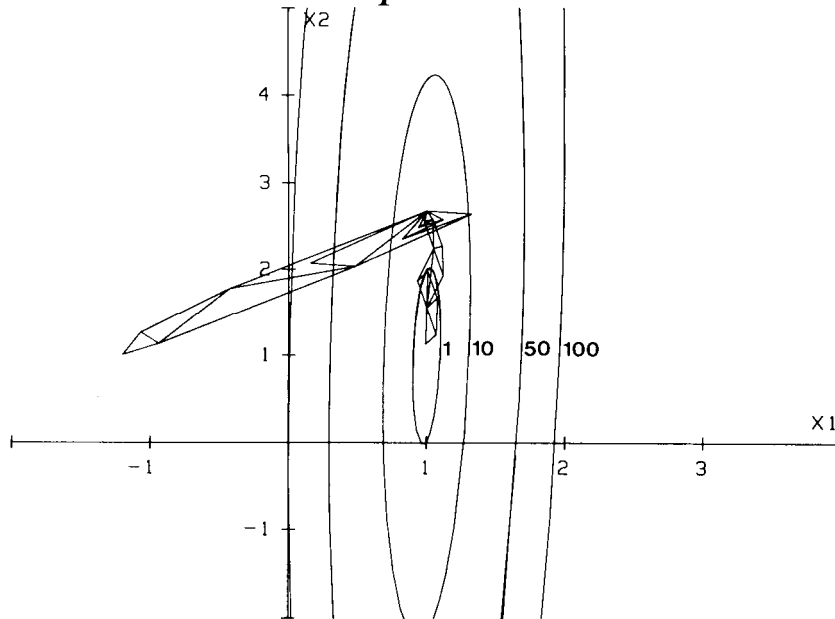
Nella parte finale, quando la zona del minimo è stata individuata, prevalgono le **contrazioni/riduzioni** per migliorare la precisione.

Paragone fra i due metodi di ricerca

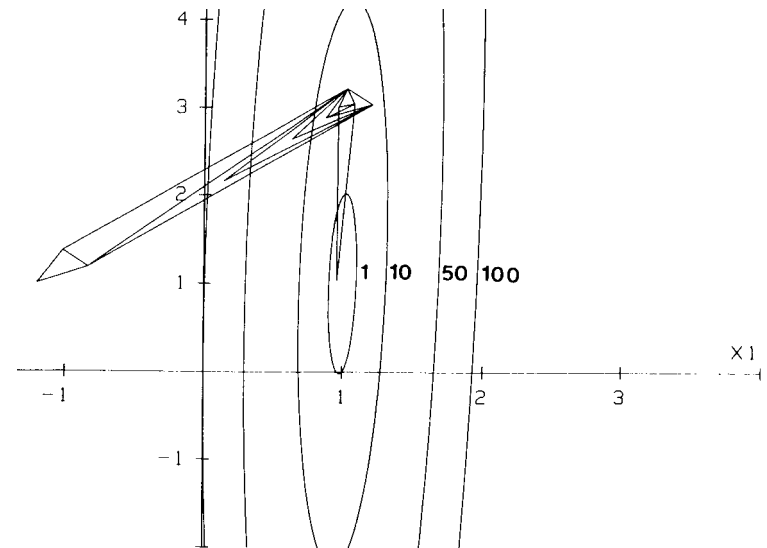
funzione di test

$$f(x_1, x_2) = (x_2 - x_1^2)^2 + (1 - x_1)^2$$

Il sempliceso ottimizzato tende ad individuare più rapidamente la “valle” in cui giace il minimo

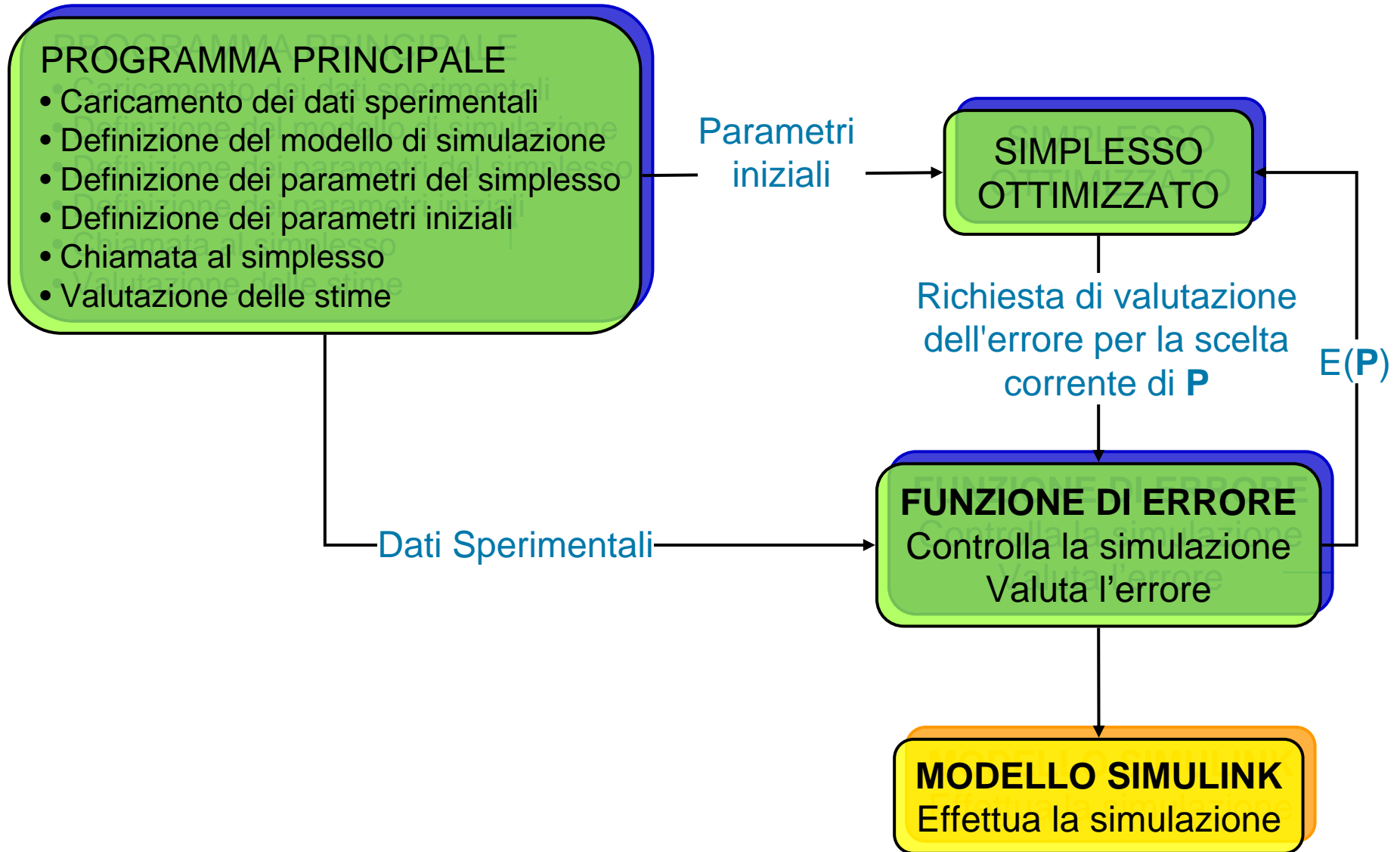


Simpleso di base

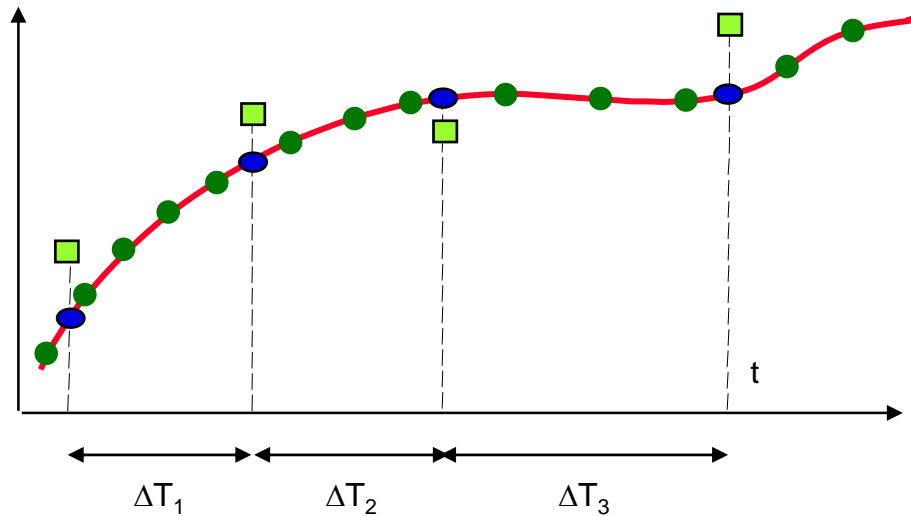


Simpleso ottimizzato

Organizzazione del software per la calibrazione



Sincronizzazione fra dati sperimentali e simulazione



■ ■ ■ Punti sperimentali
● ● ● Punti ottenuti dalla simulazione `yout`
● ● ● Punti interpolati `ys`

In generale, per esigenze di accuratezza numerica la routine di integrazione pone $\Delta T_1 \neq \Delta T_2 \neq \Delta T_3$

Dichiarazione global →

```
function scarto = FERR(Par)
global texp, Data_sperim 'nomi dei parametri in Simulink',
etc.....
```

Opzioni per la simulazione →

```
Yo=Par(...)
opt=simset('solver','ode23s','reltol',1e-4,'InitialState',yo);
[t,x,y]=sim('Nome_Modello',[0 tfin],opt);
% tsim tempo della simulazione
% yout Uscita simulata
```

Simulazione →

Interpolazione →

```
ys=interp1(tsim,yout,texp);
```

Calcolo dell'errore →

```
dd=Data_sperim-ys;
scarto=sum(dd.^2);
```

Istanti di campionamento delle misure
 Uscita della simulazione

Esempio di stima parametrica: cinetica di Monod

- 👉 La cinetica di Monod è molto utilizzata, ma non è semplice identificare i suoi parametri a causa della forma nonlineare della cinetica e delle conseguenti correlazioni fra parametri

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} X \\ \frac{dX}{dt} = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} X - b_H X \end{cases}$$

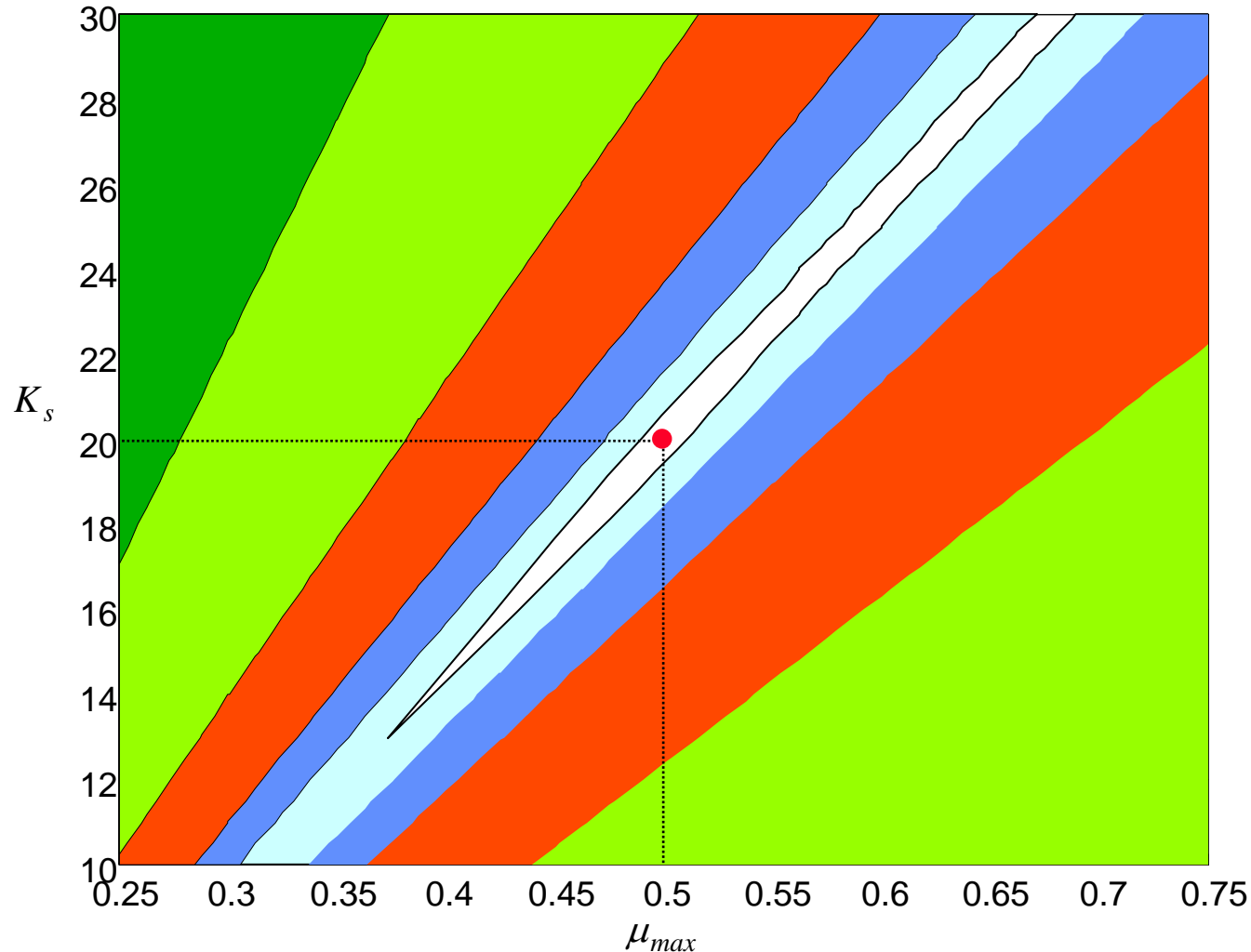
- 👉 Supponendo di disporre di dati (s, x) rumorosi (σ_S, σ_X) di ambedue gli stati $(S$ e $X)$ si vogliono stimare i quattro parametri.

$$E(\mu_{max}, K_s, Y, b_H) = \sum_k \frac{1}{\sigma_S^2} (s_k - S_k)^2 + \sum_k \frac{1}{\sigma_X^2} (x_k - X_k)^2$$

- 👉 Dalle curve di livello già si sa che esiste una forte correlazione fra μ_{max} e K_s
- 👉 Per prima cosa si valuta la sensibilità del funzionale E al rumore, poi si attiva una ricerca numerica con il semplice

Correlazione della coppia μ_{\max} , K_s

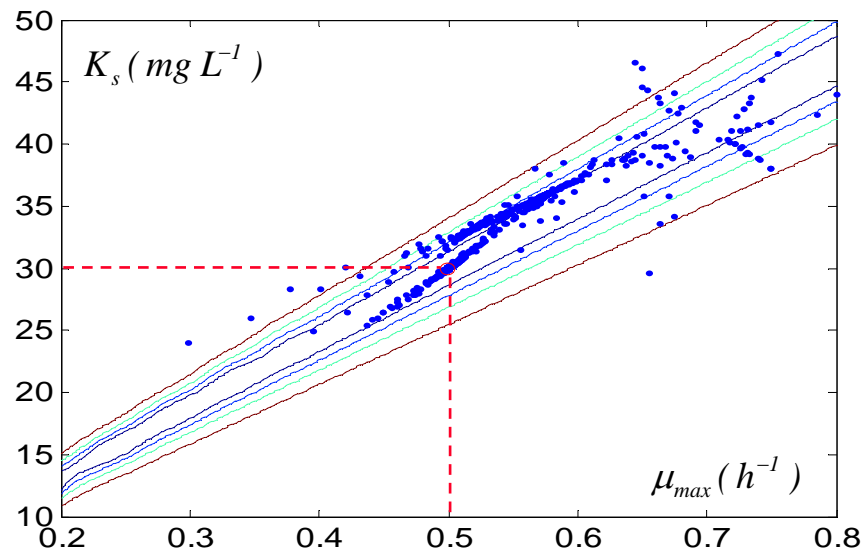
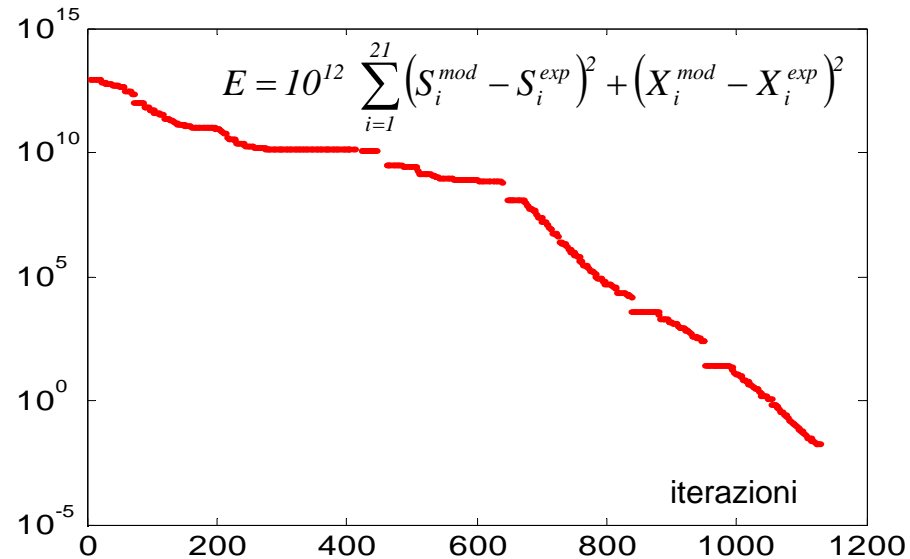
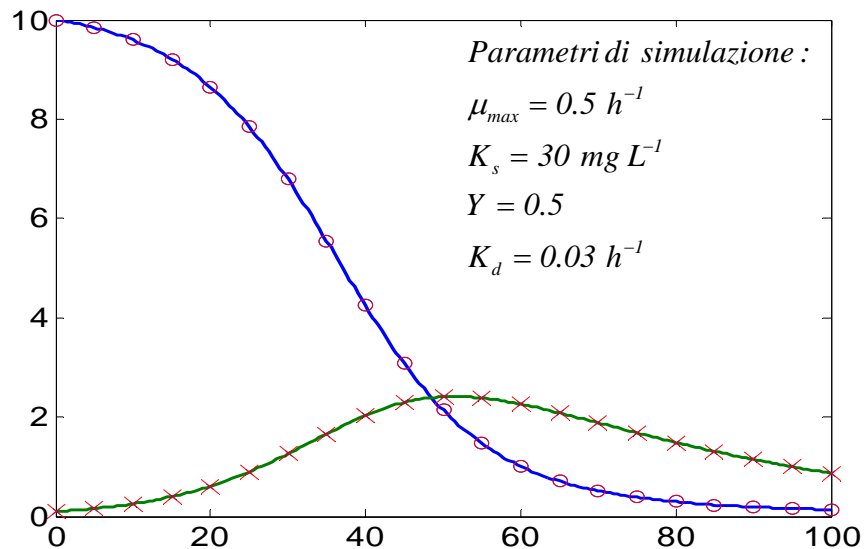
Linee di livello per $E(P) = 1, 10, 50, 250, 1000, 2000$



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

Ciò implica maggiori difficoltà di stima.

Calibrazione del modello di Monod

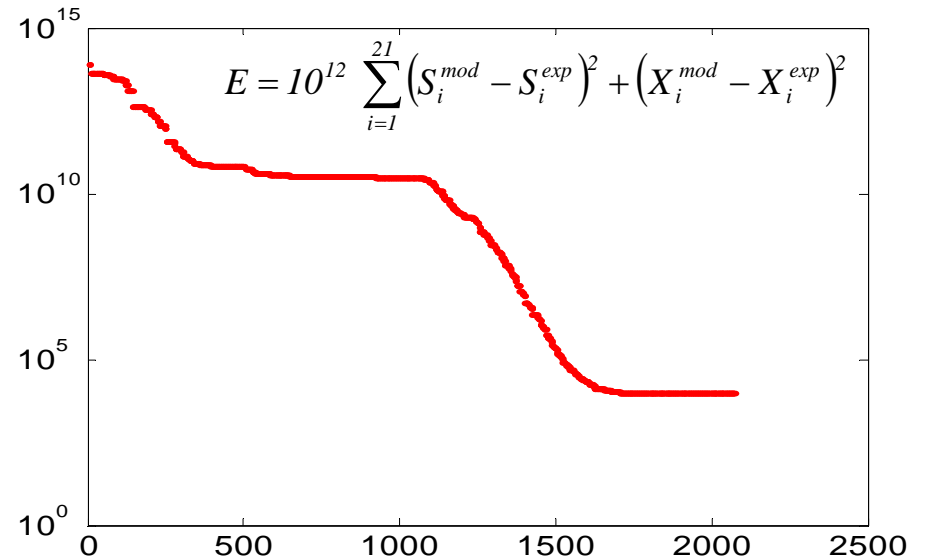
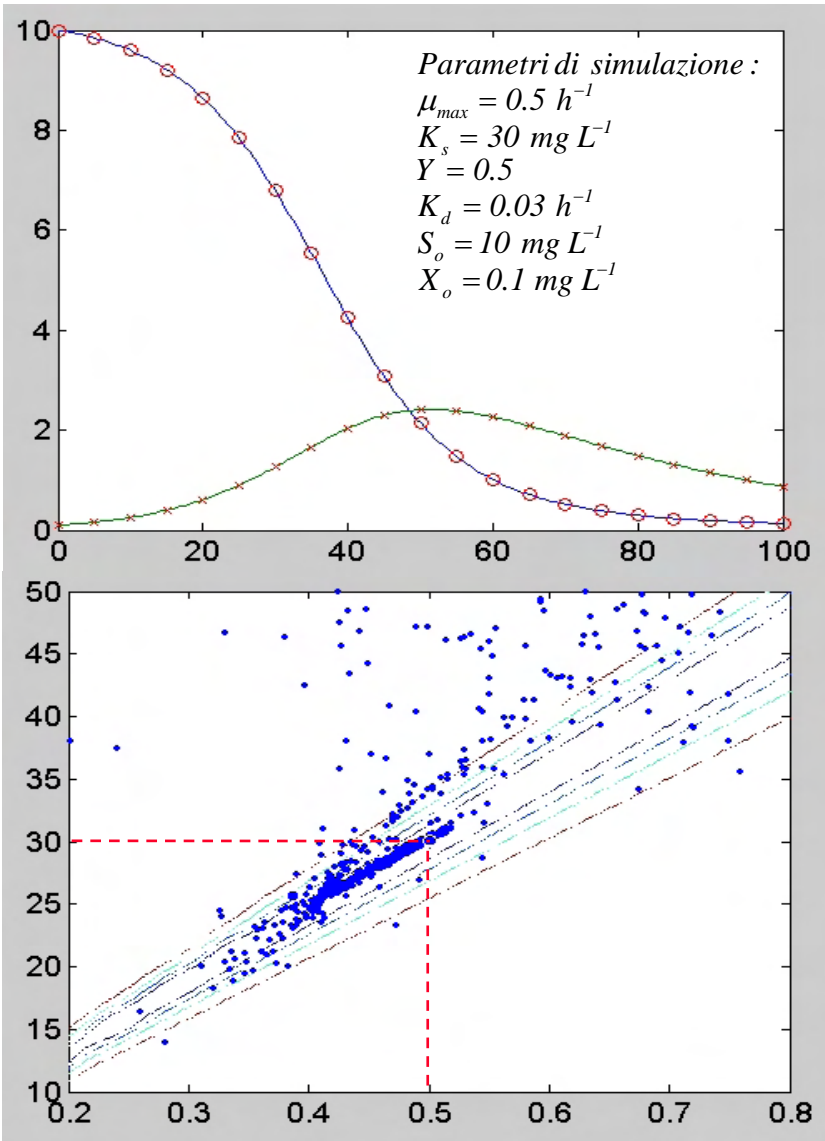


Numero riflessioni : 46
 Numero espansioni : 32
 Numero espansioni ottimizzate : 14
 Numero contrazioni : 471
 Numero riduzioni : 0
 Parametri stimati:

Ks = 30
 Mu = 0.5
 Y = 0.5
 Kd = 0.03

*****;

Stima congiunta Parametri - Condizioni iniziali











Numero riflessioni : 110
 Numero espansioni : 59
 Numero espansioni ottimizzate : 27
 Numero contrazioni : 874
 Numero riduzioni : 0

Parametri stimati:

Ks = 30.0103
 Mu = 0.500148
 Y = 0.499996
 Kd = 0.0299994
 So = 9.99998
 Xo = 0.0999869

*****;

Bibliografia

-  Himmelblau D.M., *Applied nonlinear programming*, McGraw-Hill, 1972.
-  Press, W. H., Flannery B.P., Teukolsky, Vetterling W.T., *Numerical Recipes, the art of Scientific computing*, Cambridge University Press, 1985.
-  Richter O., Söndgerath D., *Parameter estimation in ecology*, VCH, 1990.
-  Seber G.A.F., Wild C.J., *Nonlinear regression*, Wiley, 1989.
-  Marsili-Libelli S., Castelli M., An adaptive search method for numerical optimization, *Appl. Math and Comp.*, **23**: 341 - 357 (1987).
-  Dochain, D. e Vanrolleghem P. Dynamical modelling and estimation in wastewater treatment processes. IWA PUBL. 2001.
-  Marsili-Libelli S., Parameter estimation of ecological models, *Ecological Modelling*, **62**: 233 - 258 (1992).
-  Marsili-Libelli S., Guerrizio S., Checchi N., Confidence regions of estimated parameters for ecological systems. *Ecological Modelling*, **165**: 127 - 146 (2003).