

Alma Mater Studiorum · Università di Bologna

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI

Corso di Laurea Specialistica in Matematica

**METODI NUMERICI PER
L'IDENTIFICAZIONE DI PARAMETRI
IN PROBLEMI DIFFERENZIALI**

Tesi di Laurea in Metodi Numerici II

**Relatore:
Chiar.ma Prof.ssa
ELENA LOLI PICCOLOMINI**

**Presentata da:
AMEDEO ELMI**

**Correlatore:
Chiar.ma Prof.ssa
FABIANA ZAMA**

Sessione III

Anno Accademico 2009 - 2010

Indice

| | |
|---|------------|
| Introduzione | vii |
| 1 Il problema dei minimi quadrati | 1 |
| 1.1 Richiami sulla minimizzazione | 1 |
| 1.2 I metodi di discesa | 2 |
| 1.3 Il metodo di Newton per l'ottimizzazione | 5 |
| 1.4 Il problema dei minimi quadrati e il metodo di Gauss-Newton | 7 |
| 2 Il metodo alle differenze finite per BVP lineari del II ordine | 11 |
| 2.1 Il metodo alle differenze finite | 11 |
| 2.2 Condizioni al bordo di Dirichlet | 12 |
| 2.3 Condizioni al bordo miste di Robin | 14 |
| 2.4 Altre condizioni al bordo miste | 17 |
| 3 Identificazione dei parametri per BVP lineari del II ordine | 23 |
| 3.1 Il problema di identificazione dei parametri | 23 |
| 3.2 Implementazione della ricerca dei parametri ottimali | 27 |
| 4 Test numerici | 33 |
| 4.1 Primi esempi numerici | 33 |
| 4.1.1 Primo test | 35 |
| 4.1.2 Secondo test | 38 |
| 4.1.3 Terzo test | 42 |
| 4.1.4 Quarto test | 45 |
| 4.2 Un'equazione di convezione-diffusione-reazione stazionaria . . | 47 |
| 4.3 Conclusioni | 51 |
| Bibliografia | 53 |

Elenco delle tabelle

| | | |
|------|---|----|
| 4.1 | Identificazione dei parametri per il problema (1D). | 36 |
| 4.2 | Identificazione dei parametri per il problema (1R). | 36 |
| 4.3 | Identificazione dei parametri per il problema (2D). | 37 |
| 4.4 | Identificazione dei parametri per il problema (2R). | 37 |
| 4.5 | Identificazione dei parametri per il problema (2DR). | 38 |
| 4.6 | Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (1D) al variare di N . | 42 |
| 4.7 | Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (1R) al variare di N . | 43 |
| 4.8 | Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (2D) al variare di N . | 43 |
| 4.9 | Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (2R) al variare di N . | 44 |
| 4.10 | Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (2DR) al variare di N . | 44 |
| 4.11 | Identificazione dei parametri con aggiunta di rumore sulle misure per il problema (2D) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (-1, 4)$. | 46 |
| 4.12 | Identificazione dei parametri per il problema (CDR). | 49 |
| 4.13 | Identificazione dei parametri con aggiunta di rumore sulle misure per il problema (CDR). | 50 |

Elenco delle figure

| | | |
|-----|--|----|
| 4.1 | Linee di livello del residuo per (1R) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$ | 39 |
| 4.2 | Superficie del residuo per (1R) intorno a $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$ | 40 |
| 4.3 | Linee di livello del residuo per (2DR) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$ | 41 |
| 4.4 | Superficie del residuo per (2DR) intorno a $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$ | 41 |

Introduzione

Se molti dei problemi matematici hanno lo scopo di calcolare la soluzione nota una serie di dati (*problemi diretti*) oppure di risalire ai dati stessi a partire dalla soluzione (*problemi inversi*), vi è un'altra grande classe di problemi noti come *problemi di identificazione*. In particolare, viene chiamato **problema di identificazione dei parametri** un problema in cui si è a conoscenza (almeno parzialmente) dei dati e della soluzione; inoltre, è nota la forma generale del problema diretto che produce la soluzione a partire dai dati in possesso. Risultano, tuttavia, incogniti alcuni parametri che compaiono nel problema diretto: la risoluzione del problema di identificazione dei parametri avviene, dunque, determinando i valori esatti di tali parametri incogniti.

In questa tesi viene affrontato un problema di identificazione dei parametri del tipo seguente. Risultano note alcune misure sperimentali (x_i, \hat{y}_i) , $i = 1, \dots, K$. Si è a conoscenza del fatto che il fenomeno che produce queste misure può essere descritto come soluzione di una classe di problemi ai limiti per un'equazione differenziale lineare ordinaria del II ordine. Sono incogniti due parametri p e q che compaiono nei coefficienti dell'equazione differenziale. Si cerca, quindi, di trovare precisi valori \hat{p} e \hat{q} tali che, una volta inseriti nell'equazione differenziale, sia prodotta dal problema ai limiti una soluzione \hat{y} che sia in accordo con le misure sperimentali, quindi tale che $\hat{y}(x_i) = \hat{y}_i$ ($i = 1, \dots, K$).

Nella tesi viene affrontato un possibile approccio algoritmico alla ricerca dei parametri (\hat{p}, \hat{q}) . Precisamente, il problema dell'identificazione dei parametri viene ricondotto ad un problema dei minimi quadrati non lineari. Nel primo capitolo della trattazione viene, quindi, affrontata la risoluzione numerica dei problemi dei minimi quadrati non lineari, necessaria per l'implementazione del procedimento di identificazione. Infatti, vengono descritti i metodi iterativi di discesa per la minimizzazione e, in particolare, viene

presentato il metodo di Gauss-Newton.

Il secondo capitolo è dedicato all'illustrazione di un metodo di risoluzione numerica di problemi ai limiti per equazioni lineari del II ordine, nel caso in cui siano assegnate come condizioni al bordo le condizioni di Dirichlet, le condizioni di Robin o altre condizioni miste. Questo metodo consiste in una discretizzazione ottenuta approssimando le derivate alle differenze finite e permette di determinare la soluzione numerica del problema ai limiti risolvendo un sistema associato di equazioni algebriche lineari.

Nel terzo capitolo viene spiegato in che modo è possibile trasformare il problema di identificazione in un problema di ottimizzazione. Inoltre, viene descritto dettagliatamente l'algoritmo di ricerca dei parametri. Questo algoritmo viene costruito sulla base dei metodi numerici costruiti nei capitoli precedenti. Infatti, questo procedimento numerico coniuga, in particolare, il metodo di discesa di Gauss-Newton con il procedimento di discretizzazione alle differenze dei problemi ai limiti. Nell'implementazione di questo metodo numerico si assume che sia possibile, grazie agli esperimenti, ottenere una stima, sia pure inaccurata, dei parametri da determinare, dal momento che l'algoritmo di ricerca necessita di una coppia di parametri iniziale.

Il quarto capitolo, infine, è dedicato alla sperimentazione del procedimento di identificazione dei parametri su particolari esempi numerici e alla discussione dei risultati ottenuti. Da questa parte della trattazione si deduce la necessità di analizzare accuratamente non solo il metodo numerico, ma anche lo specifico test che viene condotto. Infatti, si possono riscontrare diversi comportamenti dell'algoritmo a seconda del particolare esperimento numerico in esame.

Capitolo 1

Il problema dei minimi quadrati

1.1 Richiami sulla minimizzazione

La **minimizzazione** non vincolata studia i metodi di ottimizzazione che hanno lo scopo di determinare i punti di minimo locale e/o dei punti di minimo globale di una generica funzione a valori reali.

In particolare, ci concentriamo sulla minimizzazione delle funzioni della forma $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Richiamiamo sinteticamente le seguenti definizioni per tale classe di funzioni.

Definizione 1.1.1. *Sia data la funzione $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.*

- (i) un **punto di minimo locale** di F è un punto $x^* \in \mathbb{R}^n$ per cui $\exists \delta > 0$ tale che $F(x^*) \leq F(x) \forall x \in \mathbb{R}^n$ con $\|x^* - x\|_2 < \delta$;
- (i') un **punto di minimo locale stretto** di F è un punto $x^* \in \mathbb{R}^n$ per cui $\exists \delta > 0$ tale che $F(x^*) < F(x) \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{x^*\}$ con $\|x^* - x\|_2 < \delta$;
- (ii) un **punto di minimo globale** di F è un punto $x^* \in \mathbb{R}^n$ tale che $F(x^*) \leq F(x) \forall x \in \mathbb{R}^n$;
- (ii') un **punto di minimo globale stretto** di F è un punto $x^* \in \mathbb{R}^n$ tale che $F(x^*) < F(x) \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{x^*\}$.

Qualora la funzione $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ soddisfi determinate condizioni, sussistono alcuni risultati di esistenza ed unicità dei minimi locali. E' opportuno ricordare anzitutto la definizione seguente.

Definizione 1.1.2. Se $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ è una funzione differenziabile e $x^* \in \mathbb{R}^n$ è un punto di minimo locale di F , allora x^* è un **punto stazionario** (o **critico**), ovvero $\nabla F(x^*) = 0$.

Richiamiamo i seguenti asserti fondamentali che permettono di ricondurre la minimizzazione alla ricerca di punti critici.

Definizione 1.1.3. Sia data la funzione $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$.

- (i) Se $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ è di classe C^2 e $x^* \in \mathbb{R}^n$ è un punto di minimo locale di F , allora x^* è un punto stazionario, quindi $\nabla F(x^*) = 0$, e la matrice Hessiana di F $\mathcal{H}_F(x^*)$ è simmetrica semidefinita positiva, cioè $\mathcal{H}_F(x^*)^T = \mathcal{H}_F(x^*)$ e $(\mathcal{H}_F(x^*)\xi)^T \xi \geq 0$, $\forall \xi \in \mathbb{R}^n$.
- (ii) Se $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ è di classe C^2 , x^* è un punto stazionario, ovvero $\nabla F(x^*) = 0$, e la matrice Hessiana di F $\mathcal{H}_F(x^*)$ è simmetrica definita positiva, cioè $\mathcal{H}_F(x^*)^T = \mathcal{H}_F(x^*)$ e $(\mathcal{H}_F(x^*)\xi)^T \xi > 0$, $\forall \xi \in \mathbb{R}^n$, allora $x^* \in \mathbb{R}^n$ è un punto di minimo locale stretto di F .

1.2 I metodi di discesa

Uno dei modi possibili per risolvere i problemi di minimizzazione non vincolata (per funzioni sufficientemente regolari) è costituito dai **metodi di discesa** (o **degli spostamenti lineari**). Essi costituiscono una classe di procedimenti iterativi in cui, partendo da un punto iniziale $x_0 \in \mathbb{R}^n$, viene generata una successione di punti x_0, x_1, x_2, \dots mediante la seguente regola di iterazione:

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.1)$$

α_k è un parametro positivo chiamato *lunghezza del passo*.

Il vettore p_k è una *direzione di discesa* per la funzione obiettivo F da minimizzare, cioè soddisfa la condizione di decrescita:

$$F(x_k + \alpha_k p_k) = F(x_{k+1}) < F(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

(per α_k sufficientemente ridotto).

$p_k \nabla F(x_k)^T < 0$ è una condizione sufficiente affinché p_k sia una direzione di discesa, essendo F almeno di classe C^1 (infatti, sviluppando F in serie di Taylor, si ottiene: $F(x_k + \alpha_k p_k) = F(x_k) + \alpha_k p_k \nabla F(x_k)^T + O(\alpha_k^2)$).

In base alla scelta della direzione p_k , si ottengono diversi metodi di discesa. Ad esempio, il *metodo della discesa ripida* (o *del gradiente*) coincide con la scelta dell'opposto del gradiente della funzione obiettivo da minimizzare, cioè $p_k = -\nabla F(x_k)$.

La lunghezza del passo α_k deve essere scelta opportunamente in modo tale che sia garantita la convergenza della successione degli iterati. La condizione di decrescita $F(x_k + \alpha_k p_k) = F(x_{k+1}) < F(x_k)$ non risulta sufficiente.¹ Una delle possibili opzioni è offerta dalle *condizioni di Wolfe*, che consistono nel determinare il parametro α_k tale che:

$$\begin{cases} F(x_k + \alpha p_k) \leq F(x_k) + c_1 \alpha p_k \nabla F(x_k)^T \\ p_k \nabla F(x_k + \alpha p_k)^T \geq c_2 p_k \nabla F(x_k)^T \end{cases} \quad (1.2)$$

con $0 < c_1 < c_2 < 1$. Nella pratica, c_1 viene scelta come una costante piuttosto piccola, tipicamente $c_1 = 10^{-4}$.

La seconda disuguaglianza è detta *condizione della curvatura* e impedisce che la lunghezza del passo risulti eccessivamente ridotta.

La prima disuguaglianza è nota come *regola di Armijo* e assicura che α_k sia sufficientemente piccolo affinché $F(x_k + \alpha_k p_k)$ sia minore della sua approssimazione lineare $F(x_k) + \alpha_k p_k \nabla F(x_k)^T$.

E' possibile dimostrare² il seguente risultato che assicura che, qualora la funzione obiettivo F sia sufficientemente regolare e inferiormente limitata, esistono parametri α_k che soddisfano le due condizioni di Wolfe.

Lemma 1.2.1. *Sia data la successione degli iterati $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$. Sia $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una funzione di classe C^1 inferiormente limitata sulla retta $\{x_k + \alpha p_k | \alpha > 0\}$. Sia p_k una direzione di discesa di F in x_k e siano date le costanti $0 < c_1 < c_2 < 1$. Allora esistono degli intervalli di lunghezza del passo che soddisfano le condizioni di Wolfe 1.2 (per tali valori di c_1 e c_2).*

Le due condizioni di Wolfe hanno spesso un eccessivo costo computazionale. D'altra parte, la sola regola di Armijo non è sufficiente. Infatti, essa non garantisce che la lunghezza del passo non diventi eccessivamente ridotta. Tuttavia, se viene introdotta una tecnica di *backtracking*, allora tale condizione è sufficiente per assicurare la convergenza. Tale tecnica consiste, ricorrendo ad un ciclo condizionale, nel ridurre ripetutamente la lunghezza del passo α_k di un fattore $\rho < 1$ (cioè nel porre $\alpha_k \leftarrow \rho \alpha_k$) finché non

¹Cfr. [8], §3.1.

²Cfr. [8], Lemma 3.1.

viene soddisfatta la regola di Armijo. Precisamente un tipico algoritmo di backtracking ha la struttura seguente.

Algoritmo di backtracking

1. Fissare $\bar{\alpha} > 0$, $\rho, c_1 \in (0, 1)$.
2. Porre $\alpha_k = \bar{\alpha}$.
3. Ripetere finché $F(x_{k+1}) \leq F(x_k) + c_1 \alpha_k p_k \nabla F(x_k)^T$

$$\begin{cases} \alpha_k \leftarrow \rho \alpha_k; \\ x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k; \\ \text{calcolare } F(x_{k+1}); \end{cases}$$
4. Scegliere α_k come lunghezza del passo.

Nella pratica si sceglie quasi sempre di partire da 1 come lunghezza del passo iniziale e di fissare $\rho = 1/2$.

Per i metodi di discesa con lunghezza del passo che soddisfi le condizioni di Wolfe è possibile dimostrare³ il seguente risultato fondamentale di convergenza.

Teorema di Zoutendijk. *Sia dato un metodo di discesa con lunghezza del passo α_k che soddisfa le due condizioni di Wolfe 1.2. Supponiamo che tale metodo abbia p_k come direzione di discesa. Sia $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ una funzione limitata inferiormente in \mathbb{R}^n e di classe C^1 su un aperto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ contenente l'insieme di livello $\mathcal{L} = \{x \in D \mid F(x) \leq F(x_0)\}$, ove x_0 è un iterato iniziale assegnato. Supponiamo, inoltre, che il gradiente ∇F sia una funzione Lipschitziana su D (cioè tale che $\exists L > 0$ costante per cui $\|\nabla F(x) - \nabla F(z)\|_2 \leq L\|x - z\|_2, \forall x, z \in D$). Allora, essendo:*

$$\cos \theta_k = \frac{-p_k \nabla F(x_k)^T}{\|p_k\|_2 \|\nabla F(x_k)\|_2},$$

abbiamo:

$$\sum_{k \geq 0} \cos^2 \theta_k \|\nabla F(x_k)\|_2^2 < \infty$$

e quindi:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla F(x_k)\|_2 = 0.$$

³Cfr. [8], Theorem 3.2.

Sussiste un risultato analogo nel caso in cui la lunghezza del passo soddisfi la regola di Armijo e sia controllata dalla tecnica di backtracking.⁴

Dal momento che i metodi di discesa sono procedimenti iterativi, per la loro implementazione è necessario fissare un criterio di arresto per terminare le iterazioni. In genere, la scelta è abbastanza arbitraria; comunemente, viene adottato uno dei seguenti criteri di arresto:

- $\|\nabla F(x_k)\|_2 \leq \epsilon$ o $\frac{\|\nabla F(x_k)\|_2}{\|\nabla F(x_0)\|_2} \leq \epsilon$;
- $\|p_k\|_2 \leq \epsilon$;
- $\|x_{k+1} - x_k\|_2 \leq \epsilon_1$ o $|F(x_{k+1}) - F(x_k)| \leq \epsilon_2$.

1.3 Il metodo di Newton per l'ottimizzazione

Il **metodo di Newton** per l'ottimizzazione è un algoritmo di discesa per la minimizzazione di una funzione $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ sufficientemente regolare (almeno di classe C^2) tale che la direzione di ricerca p_k viene generata risolvendo il sistema di equazioni lineari:

$$\mathcal{H}_F(x_k)p_k = -\nabla F(x_k). \quad (1.3)$$

p_k risulta in effetti una direzione di discesa nel caso in cui $\mathcal{H}_F(x_k)$ sia definita positiva. In particolare, la direzione di Newton è ottenuta considerando il seguente sviluppo di Taylor di F :

$$F(x_k + p) \simeq L(p) = F(x_k) + p^T \nabla F(x_k) + \frac{1}{2} p^T \mathcal{H}_F(x_k) p$$

La direzione di ricerca di Newton è il vettore p_k che minimizza $L(p)$. Osserviamo che risulta:

$$\begin{cases} \nabla L(p) = \nabla F(x_k) + \mathcal{H}_F(x_k)p \\ \mathcal{H}_L(p) = \mathcal{H}_F(x_k) \end{cases}.$$

⁴Cfr. [5], Theorem 11.7.

Dunque, $\mathcal{H}_L(p)$ è simmetrica definita positiva. Questo implica che $L(p)$ ha un unico punto di minimo p_k , che può essere ottenuto risolvendo le equazioni $\nabla L(p) = 0$, ovvero proprio:

$$\mathcal{H}_F(x_k)p_k = -\nabla F(x_k). \quad (1.4)$$

Nel caso del metodo di Newton, è sufficiente scegliere come lunghezza del passo semplicemente $\alpha_k = 1$, $\forall k \geq 0$. Infatti, si può dimostrare⁵ il seguente risultato, che garantisce a questa condizione la convergenza locale del metodo.

Teorema 1.3.1. *Sia F una funzione di classe C^2 . Supponiamo che l'Hessiana \mathcal{H}_F sia una funzione Lipschitziana in un intorno di un punto x^* tale che $\nabla F(x^*) = 0$ e che \mathcal{H}_F sia definita positiva (e quindi che sia di minimo locale per F). Dato il procedimento iterativo $x_{k+1} = x_k + p_k$, con p_k direzione di discesa di Newton, abbiamo:*

- se l'iterato iniziale x_0 è sufficientemente vicino a x^* , allora la successione degli iterati converge a x^* ;
- il tasso di convergenza della successione degli iterati $\{x_k\}_{k \geq 1}$ è quadratico⁶;
- la successione delle norme dei gradienti $\{\nabla F(x_k)\}_{k \geq 1}$ converge quadraticamente a 0.

Sebbene sussistano questi risultati di convergenza, il costo computazionale del metodo di Newton è generalmente elevato. Infatti, a ogni passo iterativo, è necessario determinare l'Hessiana e risolvere un sistema di n equazioni lineari in n incognite. Quindi, per determinate classi di problemi, conviene ricorrere a opportune varianti.

⁵Cfr. [8], Theorem 3.7.

⁶Si dice che una successione di punti di \mathbb{R}^n $\{x_k\}_{k \geq 1}$ ha un tasso di convergenza r se esiste una costante C tale che:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1}\|_2}{(\|x_k\|_2)^r} = C.$$

In particolare, se $r = 1$ si parla di convergenza lineare, se $r = 2$ si parla di convergenza quadratica.

1.4 Il problema dei minimi quadrati e il metodo di Gauss-Newton

Il **problema dei minimi quadrati** (non lineari) è un problema di ottimizzazione non vincolata; infatti, consiste nella ricerca di un (eventuale) punto di minimo locale di una funzione $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ della forma:

$$F(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m [f_i(x)]^2, \quad (1.5)$$

con $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$, funzioni assegnate e $m \geq n$.

Supponiamo che le funzioni f_i siano almeno di classe C^2 (e di conseguenza anche la funzione F).

Notiamo che, posto $\mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, $\mathbf{f}(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))^T$ la funzione F può essere riscritta nella forma:

$$F(x) = \frac{1}{2} \|\mathbf{f}(x)\|_2^2 = \frac{1}{2} \mathbf{f}(x)^T \mathbf{f}(x).$$

Inoltre, essendo $J_{\mathbf{f}}(x)$ la matrice Jacobiana:

$$(J_{\mathbf{f}}(x)_{i,j}) = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}(x) \right),$$

abbiamo:

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla F(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x) \nabla f_i(x) = J_{\mathbf{f}}(x)^T \mathbf{f}(x) \\ \mathcal{H}_F(x) = \sum_{i=1}^m \nabla f_i(x) \nabla f_i(x)^T + \sum_{i=1}^m f_i(x) \mathcal{H}_{f_i}(x) = \\ = J_{\mathbf{f}}(x)^T J_{\mathbf{f}}(x) + \sum_{i=1}^m f_i(x) \mathcal{H}_{f_i}(x) \end{array} \right.$$

Un approccio comune ed efficace per risolvere numericamente il problema ai minimi quadrati viene offerto dal **metodo di Gauss-Newton**.

Il metodo di Gauss-Newton è un metodo di discesa che utilizza la direzione di ricerca p_k , generata risolvendo le equazioni:

$$J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k) p_k = -J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k). \quad (1.6)$$

Questa direzione è ottenuta effettuando lo sviluppo in serie di Taylor di $\mathbf{f}(x)$ in un intorno di x_k :

$$\mathbf{f}(x_k + p) \approx \boldsymbol{\ell}(p) = \mathbf{f}(x_k) + J_{\mathbf{f}}(x_k)p$$

e sostituendo tale espressione in F :

$$\begin{aligned} F(x_k + p) &\approx L(p) = \frac{1}{2}\boldsymbol{\ell}(p)^T \boldsymbol{\ell}(p) = \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{f}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k) + p^T J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k) + \frac{1}{2}p^T J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k)p = \\ &= F(x_k) + p^T J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k) + \frac{1}{2}p^T J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k)p. \end{aligned}$$

La direzione di ricerca di Gauss-Newton è il vettore p_k che minimizza $L(p)$. Osserviamo che risulta:

$$\begin{cases} \nabla L(p) = J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k) + J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k)p \\ \mathcal{H}_L(p) = J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k) \end{cases}.$$

Dunque, $\mathcal{H}_L(p)$ è simmetrica e, se $J_{\mathbf{f}}(x_k)$ ha rango massimo, è definita positiva. Questo implica che $L(p)$ ha un unico punto di minimo p_k , che può essere ottenuto risolvendo le equazioni $\nabla L(p) = 0$, ovvero:

$$J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k)p_k = -J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k). \quad (1.7)$$

Se $J_{\mathbf{f}}(x_k)$ ha rango massimo e $\nabla F(x_k) \neq 0$, p_k risulta una direzione di discesa. Infatti:

$$p_k^T \nabla F(x_k) = p_k^T J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k) = -p_k^T J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k)p_k = -\|J_{\mathbf{f}}(x_k)p_k\|_2^2 < 0$$

(la disuguaglianza è stretta poiché $J_{\mathbf{f}}(x_k)p_k = 0$ se $J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k) = \nabla F(x_k) = 0$).

Il procedimento di Gauss-Newton può essere visto anche come una modificazione del metodo di Newton per l'ottimizzazione.

Se nel metodo di Newton la direzione di ricerca p_k viene generata risolvendo le equazioni $\mathcal{H}_F(x_k)p_k = -\nabla F(x_k)$, cioè, nel caso del problema dei minimi quadrati, risolvendo:

$$\left[J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k) + \sum_{i=1}^m f_i(x_k) \mathcal{H}_{f_i}(x_k) \right] p_k = -J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k),$$

nel procedimento di Gauss-Newton si ricorre in pratica all'approssimazione:

$$\mathcal{H}_F(x_k) \approx J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k).$$

Una tale approssimazione consente un risparmio di risorse computazionali; d'altra parte, l'accuratezza e la velocità di convergenza sono simili a quelle offerte dal metodo di Newton se il termine $J_{\mathbf{f}}(x_k)^T J_{\mathbf{f}}(x_k)$ è molto più significativo della somma $\sum_{i=1}^m f_i(x_k) \mathcal{H}_{f_i}(x_k)$. In effetti, una condizione sufficiente affinché ciò si verifichi è data quando le f_i sono ridotte o sono funzioni quasi lineari (cioè le $\|\nabla f_i\|$ sono piccole).

Per il metodo di Gauss-Newton citiamo il seguente particolare risultato di convergenza.⁷

Teorema 1.4.1. *Sia $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $F(x) = \frac{1}{2} \|\mathbf{f}(x)\|_2^2$ una funzione quadratica. Supponiamo che F sia Lipschitziana su un aperto $D \subseteq \mathbb{R}^n$ contenente l'insieme di livello $\mathcal{L} = \{x \in D \mid F(x) \leq F(x_0)\}$, ove x_0 è un punto iniziale assegnato. Supponiamo, inoltre, che la Jacobiana $J_{\mathbf{f}}$ sia tale che esiste una costante $\gamma > 0$ per cui, $\forall x \in D$, $\|J_{\mathbf{f}}(x)z\|_2 \geq \gamma \|z\|_2$, $\forall z \in \mathbb{R}^n$. Allora, se gli iterati $\{x_k\}$ vengono generati dal metodo di Gauss-Newton con punto iniziale x_0 e lunghezza del passo determinata mediante le condizioni di Wolfe 1.2, abbiamo:*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} J_{\mathbf{f}}(x_k)^T \mathbf{f}(x_k) = 0$$

⁷Crf. [8], Theorem 10.1.

Capitolo 2

Il metodo alle differenze finite per BVP lineari del II ordine

2.1 Il metodo alle differenze finite

Consideriamo la seguente classe di problemi per equazioni differenziali lineari ordinarie con condizioni al contorno:

$$\begin{cases} -cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & a < x < b \\ a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha \\ b_0y(b) + b_1y'(b) = \beta \end{cases}, \quad (2.1)$$

essendo p, q, r funzioni continue su $[a, b]$ con $q(x) > 0, \forall x \in [a, b]$ e con $c > 0, a, b, \alpha, \beta, a_0, b_0, a_1, b_1 \in \mathbb{R}, a_0, b_0, a_1, b_1 \geq 0$ e $a_0 + b_0 \neq 0$.

In particolare, poiché le funzioni p e q sono continue su $[a, b]$, notiamo che esistono delle costanti positive P^*, Q^* e Q_* tali che, $\forall x \in [a, b], |p(x)| \leq P^*$ e $0 < Q_* \leq q(x) \leq Q^*$.

A tali condizioni è possibile provare che questo tipo di problemi ammette una e una sola soluzione analitica.¹

Un modo possibile per risolvere questo tipo di problemi numericamente è offerto dal **metodo alle differenze finite**. Questo procedimento consente di approssimare opportunamente le derivate mediante le differenze finite

¹Cfr. [6], §1.2.

(in particolare, approssimiamo le derivate prime e le derivate seconde alle differenze finite centrali²).

2.2 Condizioni al bordo di Dirichlet

Descriviamo prima il caso in cui le condizioni al contorno siano tali che $a_0 = b_0 = 1$ e $a_1 = b_1 = 0$ (**condizioni di Dirichlet**), cioè il seguente tipo di problemi:

$$\begin{cases} -cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & a < x < b \\ y(a) = \alpha, & y(b) = \beta \end{cases}, \quad (2.2)$$

(con p, q, r continue su $[a, b]$, $q(x) > 0$, $\forall x \in [a, b]$, con $c > 0$ e $a, b, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$).

Definiamo una partizione uniforme $\{x_0, \dots, x_{N+1}\}$ dell'intervallo $[a, b]$, cioè della forma:

$$x_j = a + jh, \quad j = 0, \dots, N+1, \quad h = \frac{b-a}{N+1}.$$

Discretizziamo l'equazione differenziale del problema ai limiti in esame $-cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x)$ sui punti della partizione dell'intervallo (per semplificare la notazione, da qui in seguito scriveremo y_i in luogo di $y(x_i)$). Le derivate che compaiono nell'equazione vengono sostituite con le approssimazioni alle differenze finite centrali:

$$-c \left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \right) + p(x_i) \left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right) + q(x_i)y_i = r(x_i),$$

$$i = 1, \dots, N.$$

²Se $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ è una funzione sufficientemente regolare, l'approssimazione alle differenze finite centrali della derivata prima in $x_0 \in [a, b]$ $f'(x_0)$ risulta:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}.$$

L'approssimazione alle differenze finite centrali della derivata seconda $f''(x_0)$ risulta:

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}.$$

Riscritta in forma più esplicita, l'equazione diventa:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{h}{2c}p(x_i) - 1\right) y_{i-1} + \left(\frac{h^2}{c}q(x_i) + 2\right) y_i + \\ + \left(\frac{h}{2c}p(x_i) - 1\right) y_{i+1} = \frac{h^2}{c}r(x_i), \\ i = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Effettuando le sostituzioni:

$$\begin{cases} \underline{a}_i = -\frac{h}{2c}p(x_i) - 1 \\ \underline{b}_i = \frac{h^2}{c}q(x_i) + 2 \\ \underline{c}_i = \frac{h}{2c}p(x_i) - 1, \\ r_i = \frac{h^2}{c}r(x_i), \quad i = 1, \dots, N \end{cases}$$

e aggiungendo le condizioni al bordo con una notazione opportuna, ovvero $y_0 = \alpha$, $y_{N+1} = \beta$, otteniamo complessivamente:

$$\begin{cases} \underline{a}_i y_{i-1} + \underline{b}_i y_i + \underline{c}_i y_{i+1} = r_i, & i = 1, \dots, N, \\ y_0 = \alpha, \quad y_{N+1} = \beta \end{cases}. \quad (2.3)$$

In forma matriciale questo sistema diventa:

$$\mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{r}, \quad (2.4)$$

con:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \underline{b}_1 & \underline{c}_1 & & & & & \\ \underline{a}_2 & \underline{b}_2 & \underline{c}_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \underline{a}_{N-1} & \underline{b}_{N-1} & \underline{c}_{N-1} & \\ & & & & \underline{a}_N & \underline{b}_N & \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} r_1 - \underline{a}_1 \alpha \\ r_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ r_{N-1} \\ r_N - \underline{c}_N \beta \end{pmatrix}.$$

E' possibile dimostrare l'esistenza e l'unicità della soluzione di questo sistema tridiagonale (e conseguentemente della soluzione del problema ai limiti in esame).³

³Cfr. [6], §3.1.

2.3 Condizioni al bordo miste di Robin

Descriviamo un secondo caso in cui le condizioni al contorno siano tali che $a_0, b_0 \geq 0$ e $a_1, b_1 > 0$ (**condizioni di Robin**), ovvero la seguente classe di problemi:

$$\begin{cases} -cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & a < x < b \\ a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha \\ b_0y(b) + b_1y'(b) = \beta \end{cases}, \quad (2.5)$$

(con p, q, r continue su $[a, b]$ con $q(x) > 0, \forall x \in [a, b], c > 0$ e $a, b, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$).

Dopo aver individuato una partizione uniforme $\{x_0, \dots, x_{N+1}\}$ dell'intervallo $[a, b]$ della forma:

$$x_j = a + jh, \quad j = 0, \dots, N+1, \quad h = \frac{b-a}{N+1},$$

in questo caso è opportuno articolare l'approccio alle differenze finite in maniera diversa.

Precisamente, le condizioni al bordo vengono approssimate nel modo seguente:

$$\begin{cases} a_0y_0 - a_1\frac{y_1 - y_{-1}}{2h} = \alpha \\ b_0y_{N+1} + b_1\frac{y_{N+2} - y_N}{2h} = \beta \end{cases},$$

dove y_{-1} e y_{N+2} sono due valori di y corrispondenti rispettivamente ai punti esterni all'intervallo $[a, b]$ $x_{-1} = x_0 - h$ e $x_{N+2} = x_{N+1} + h$.

Riscrivendo in forma più esplicita, otteniamo:

$$\begin{cases} y_{-1} = y_1 + \frac{2h}{a_1}(\alpha - a_0y_0) \\ y_{N+2} = y_N + \frac{2h}{b_1}(\beta - b_0y_{N+1}) \end{cases}. \quad (2.6)$$

In modo analogo al caso precedente, viene discretizzata l'equazione differenziale del problema ai limiti $-cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x)$ sui punti della partizione dell'intervallo. Le derivate che compaiono nell'equazione vengono ancora sostituite con le approssimazioni alle differenze finite centrali:

$$-c \left(\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \right) + p(x_i) \left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \right) + q(x_i)y_i = r(x_i),$$

$$i = 0, \dots, N + 1$$

Riscritta in forma più esplicita, l'equazione diventa:

$$\left(-\frac{h}{2c}p(x_i) - 1 \right) y_{i-1} + \left(\frac{h^2}{c}q(x_i) + 2 \right) y_i +$$

$$+ \left(\frac{h}{2c}p(x_i) - 1 \right) y_{i+1} = \frac{h^2}{c}r(x_i),$$

$$i = 0, \dots, N + 1.$$

Per semplificare la notazione, è opportuno adoperare le seguenti sostituzioni:

$$\begin{cases} P_i = \frac{h}{2c}p(x_i) \\ Q_i = \frac{h^2}{c}q(x_i) \\ R_i = \frac{h^2}{c}r(x_i), \quad i = 0, \dots, N + 1 \end{cases}.$$

In questo modo, la discretizzazione dell'equazione differenziale del problema ai limiti diventa:

$$(-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 0, \dots, N + 1.$$

In particolare, per $i = 0$ e $i = N + 1$, abbiamo:

$$\begin{cases} (-P_0 - 1)y_{-1} + (Q_0 + 2)y_0 + (P_0 - 1)y_1 = R_0 \\ (-P_{N+1} - 1)y_N + (Q_{N+1} + 2)y_{N+1} + (P_{N+1} - 1)y_{N+2} = R_{N+1} \end{cases}.$$

Sostituendo le espressioni 2.6 di y_{-1} e y_{N+2} nelle equazioni precedenti (rispettivamente, in quella corrispondente a $i = 0$ e in quella corrispondente a $i = N + 1$), otteniamo:

$$\begin{cases} \left(Q_0 + 2 - \frac{2ha_0}{a_1}(-P_0 - 1) \right) y_0 - 2y_1 = R_0 - \frac{2h\alpha}{a_1}(-P_0 - 1) \\ -2y_N + \left(Q_{N+1} + 2 - \frac{2hb_0}{b_1}(P_{N+1} - 1) \right) y_{N+1} = R_{N+1} - \frac{2h\beta}{b_1}(P_{N+1} - 1) \end{cases}.$$

In definitiva, ricaviamo il sistema lineare:

$$\begin{cases} \left(Q_0 + 2 - \frac{2ha_0}{a_1}(-P_0 - 1) \right) y_0 - 2y_1 = R_0 - \frac{2h\alpha}{a_1}(-P_0 - 1) \\ (-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 1, \dots, N \\ -2y_N + \left(Q_{N+1} + 2 - \frac{2hb_0}{b_1}(P_{N+1} - 1) \right) y_{N+1} = R_{N+1} - \frac{2h\beta}{b_1}(P_{N+1} - 1) \end{cases} .$$

Effettuando la nuova sostituzione:

$$\begin{cases} \tilde{b}_0 = Q_0 + 2 - \frac{2ha_0}{a_1}(-P_0 - 1), \quad \tilde{c}_0 = -2, \quad \tilde{R}_0 = R_0 - \frac{2h\alpha}{a_1}(-P_0 - 1) \\ \underline{a}_i = -P_i - 1, \quad \underline{b}_i = Q_i + 2, \quad \underline{c}_i = P_i - 1, \quad i = 1, \dots, N \\ \tilde{a}_{N+1} = -2, \quad \tilde{b}_{N+1} = Q_{N+1} + 2 - \frac{2hb_0}{b_1}(P_{N+1} - 1), \\ \tilde{R}_{N+1} = R_{N+1} - \frac{2h\beta}{b_1}(P_{N+1} - 1) \end{cases} .$$

possiamo scrivere il sistema suddetto nella forma:

$$\begin{cases} \tilde{b}_0 y_0 + \tilde{c}_0 y_1 = \tilde{R}_0 \\ \underline{a}_i y_{i-1} + \underline{b}_i y_i + \underline{c}_i y_{i+1} = R_i, \quad i = 1, \dots, N, \\ \tilde{a}_{N+1} y_N + \tilde{b}_{N+1} y_{N+1} = \tilde{R}_{N+1} \end{cases} \quad (2.7)$$

quindi in forma matriciale:

$$\mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{r}, \quad (2.8)$$

con:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \tilde{b}_0 & \tilde{c}_0 & & & & & \\ \underline{a}_1 & \underline{b}_1 & \underline{c}_1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \underline{a}_N & \underline{b}_N & \underline{c}_N & \\ & & & \tilde{a}_{N+1} & \tilde{b}_{N+1} & & \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_N \\ y_{N+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} \tilde{R}_0 \\ R_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ R_N \\ \tilde{R}_{N+1} \end{pmatrix} .$$

Come nel caso precedentemente discusso, sussistono risultati che provano l'esistenza e l'unicità della soluzione di questo sistema lineare.

2.4 Altre condizioni al bordo miste

Descriviamo altri due casi in cui le condizioni al contorno siano tali che $a_0 \geq 0$, $b_0 = 0$, $a_1 > 0$ e $b_1 = 1$ oppure $a_0 = 1$, $b_0 \geq 0$, $a_1 = 0$ e $b_1 > 0$ cioè, rispettivamente, i seguenti tipi di problemi:

(i) *condizioni al bordo di Robin-Dirichlet:*

$$\begin{cases} -cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & a < x < b \\ a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha \\ y(b) = \beta \end{cases} \quad (2.9)$$

(ii) *condizioni al bordo di Dirichlet-Robin:*

$$\begin{cases} -cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x), & a < x < b \\ y(a) = \alpha \\ b_0y(b) + b_1y'(b) = \beta \end{cases} \quad (2.10)$$

(p, q, r sono continue su $[a, b]$ con $q(x) > 0$, $\forall x \in [a, b]$ e $c > 0$ e $a, b, \alpha, \beta \in \mathbb{R}$).

Come nei casi precedenti, viene individuata anzitutto una partizione uniforme $\{x_0, \dots, x_{N+1}\}$ dell'intervallo $[a, b]$ della forma:

$$x_j = a + jh, \quad j = 0, \dots, N+1, \quad h = \frac{b-a}{N+1}.$$

Il procedimento di risoluzione numerica si basa sullo stesso approccio presentato nel caso in cui siano date delle condizioni di Robin. Vi sono alcune differenze tra le eventualità (i) e (ii), perciò discutiamo i due diversi casi separatamente.

(i) Le condizioni al bordo vengono approssimate nel modo seguente:

$$\begin{cases} a_0y_0 - a_1 \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} = \alpha, \\ y_{N+1} = \beta \end{cases},$$

dove y_{-1} è un valore di y corrispondente al punto $x_{-1} = x_0 - h$ esterno all'intervallo $[a, b]$.

Riscrivendo in forma più esplicita, otteniamo:

$$\begin{cases} y_{-1} = y_1 + \frac{2h}{a_1}(\alpha - a_0y_0) \\ y_{N+1} = \beta \end{cases}. \quad (2.11)$$

Anche in questo caso l'approssimazione alle differenze finite centrali dell'equazione $-cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x)$ sui punti della partizione dell'intervallo risulta:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{h}{2c}p(x_i) - 1\right) y_{i-1} + \left(\frac{h^2}{c}q(x_i) + 2\right) y_i + \\ + \left(\frac{h}{2c}p(x_i) - 1\right) y_{i+1} = \frac{h^2}{c}r(x_i), \\ i = 0, \dots, N. \end{aligned}$$

Adoperando ancora le seguenti sostituzioni:

$$\begin{cases} P_i = \frac{h}{2c}p(x_i) \\ Q_i = \frac{h^2}{c}q(x_i) \\ R_i = \frac{h^2}{c}r(x_i), \quad i = 0, \dots, N \end{cases},$$

la discretizzazione dell'equazione differenziale diventa:

$$(-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 0, \dots, N.$$

In particolare, per $i = 0$, otteniamo:

$$(-P_0 - 1)y_{-1} + (Q_0 + 2)y_0 + (P_0 - 1)y_1 = R_0.$$

Sostituendo l'espressione 2.11 di y_{-1} nell'equazione precedente, abbiamo:

$$\left(Q_0 + 2 - \frac{2ha_0}{a_1}(-P_0 - 1)\right) y_0 - 2y_1 = R_0 - \frac{2h\alpha}{a_1}(-P_0 - 1).$$

In definitiva, ricaviamo il sistema lineare:

$$\begin{cases} \left(Q_0 + 2 - \frac{2ha_0}{a_1}(-P_0 - 1)\right) y_0 - 2y_1 = R_0 - \frac{2h\alpha}{a_1}(-P_0 - 1) \\ (-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 1, \dots, N \end{cases},$$

ovvero:

$$\begin{cases} \left(Q_0 + 2 - \frac{2ha_0}{a_1}(-P_0 - 1)\right) y_0 - 2y_1 = R_0 - \frac{2h\alpha}{a_1}(-P_0 - 1) \\ (-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 1, \dots, N - 1 \\ (-P_N - 1)y_{N-1} + (Q_N + 2)y_N = R_N - (P_N - 1)\beta \end{cases}.$$

Effettuando la nuova sostituzione:

$$\begin{cases} \tilde{b}_0 = Q_0 + 2 - \frac{2ha_0}{a_1}(-P_0 - 1), & \tilde{c}_0 = -2, & \tilde{R}_0 = R_0 - \frac{2h\alpha}{a_1}(-P_0 - 1) \\ \underline{a}_i = -P_i - 1, & \underline{b}_i = Q_i + 2, & \underline{c}_i = P_i - 1, & i = 1, \dots, N \\ \tilde{R}_N = R_N - \underline{c}_N\beta \end{cases},$$

possiamo scrivere il sistema suddetto nella forma:

$$\begin{cases} \tilde{b}_0 y_0 + \tilde{c}_0 y_1 = \tilde{R}_0 \\ \underline{a}_i y_{i-1} + \underline{b}_i y_i + \underline{c}_i y_{i+1} = R_i, & i = 1, \dots, N-1, \\ \underline{a}_N y_{N-1} + \underline{b}_N y_N = \tilde{R}_N \end{cases}, \quad (2.12)$$

quindi in forma matriciale:

$$\mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{r}, \quad (2.13)$$

con:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \tilde{b}_0 & \tilde{c}_0 & & & & & & & & & \\ \underline{a}_1 & \underline{b}_1 & \underline{c}_1 & & & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & & \underline{a}_{N-1} & \underline{b}_{N-1} & \underline{c}_{N-1} & & & & \\ & & & & & \underline{a}_N & \underline{b}_N & & & & \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} \tilde{R}_0 \\ R_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ R_{N-1} \\ \tilde{R}_N \end{pmatrix}.$$

(ii) Le condizioni al bordo vengono approssimate nel modo seguente:

$$\begin{cases} y_0 = \alpha \\ b_0 y_{N+1} + b_1 \frac{y_{N+2} - y_N}{2h} = \beta, \end{cases}$$

dove y_{N+2} è un valore di y corrispondente al punto $x_{N+2} = x_{N+1} + h$ esterno all'intervallo $[a, b]$.

Riscrivendo in forma più esplicita, otteniamo:

$$\begin{cases} y_0 = \alpha \\ y_{N+2} = y_N + \frac{2h}{b_1}(\beta - b_0 y_{N+1}). \end{cases} \quad (2.14)$$

Come nei casi precedenti, con le approssimazioni alle differenze finite centrali l'equazione differenziale $-cy''(x) + p(x)y'(x) + q(x)y(x) = r(x)$ diventa:

$$\begin{aligned} \left(-\frac{h}{2c}p(x_i) - 1\right) y_{i-1} + \left(\frac{h^2}{c}q(x_i) + 2\right) y_i + \\ + \left(\frac{h}{2c}p(x_i) - 1\right) y_{i+1} = \frac{h^2}{c}r(x_i), \\ i = 1, \dots, N + 1. \end{aligned}$$

Effettuando le consuete sostituzioni:

$$\begin{cases} P_i = \frac{h}{2c}p(x_i) \\ Q_i = \frac{h^2}{c}q(x_i) \\ R_i = \frac{h^2}{c}r(x_i), \quad i = 1, \dots, N + 1 \end{cases},$$

la discretizzazione dell'equazione differenziale diventa:

$$(-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 1, \dots, N + 1.$$

In particolare, per $i = N + 1$, otteniamo:

$$(-P_{N+2} - 1)y_N + (Q_{N+1} + 2)y_{N+1} + (P_{N+1} - 1)y_{N+2} = R_{N+1}.$$

Ponendo l'espressione 2.14 di y_{N+2} nell'equazione precedente, abbiamo:

$$-2y_N + \left(Q_{N+1} + 2 - \frac{2hb_0}{b_1}(P_{N+1} - 1)\right) y_{N+1} = R_{N+1} - \frac{2h\beta}{b_1}(P_{N+1} - 1).$$

In definitiva, ricaviamo il sistema lineare:

$$\begin{cases} (-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 1, \dots, N \\ -2y_N + \left(Q_{N+1} + 2 - \frac{2hb_0}{b_1}(P_{N+1} - 1)\right) y_{N+1} = R_{N+1} - \frac{2h\beta}{b_1}(P_{N+1} - 1), \end{cases}$$

ovvero:

$$\begin{cases} (-P_1 - 1)y_0 + (Q_1 + 2)y_1 = R_1 - (P_1 - 1)y_2 \\ (-P_i - 1)y_{i-1} + (Q_i + 2)y_i + (P_i - 1)y_{i+1} = R_i, \quad i = 2, \dots, N \\ -2y_N + \left(Q_{N+1} + 2 - \frac{2hb_0}{b_1}(P_{N+1} - 1)\right) y_{N+1} = R_{N+1} - \frac{2h\beta}{b_1}(P_{N+1} - 1) \end{cases}.$$

Effettuando la nuova sostituzione:

$$\begin{cases} \underline{a}_i = -P_i - 1, \quad \underline{b}_i = Q_i + 2, \quad \underline{c}_i = P_i - 1, \quad i = 1, \dots, N \\ \tilde{R}_1 = R_1 - \underline{a}_1 \alpha \\ \tilde{a}_{N+1} = -2, \quad \tilde{b}_{N+1} = 2 + Q_{N+1} - \frac{2hb_0}{b_1}(P_{N+1} - 1), \\ \tilde{R}_{N+1} = R_{N+1} - \frac{2h\beta}{b_1}(P_{N+1} - 1) \end{cases} .$$

possiamo scrivere il sistema suddetto nella forma:

$$\begin{cases} \underline{b}_1 y_1 + \underline{c}_1 y_2 = \tilde{R}_1 \\ \underline{a}_i y_{i-1} + \underline{b}_i y_i + \underline{c}_i y_{i+1} = R_i, \quad i = 2, \dots, N, \\ \tilde{a}_{N+1} y_N + \tilde{b}_{N+1} y_{N+1} = \tilde{R}_{N+1} \end{cases} \quad (2.15)$$

quindi in forma matriciale:

$$\mathbf{A} \mathbf{y} = \mathbf{r}, \quad (2.16)$$

con:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \underline{b}_1 & \underline{c}_1 & & & & & \\ \underline{a}_2 & \underline{b}_2 & \underline{c}_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \underline{a}_N & \underline{b}_N & \underline{c}_N & \\ & & & \tilde{a}_{N+1} & \tilde{b}_{N+1} & & \end{pmatrix}, \quad \mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ y_N \\ y_{N+1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} \tilde{R}_1 \\ R_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ R_N \\ \tilde{R}_{N+1} \end{pmatrix}.$$

Anche nei due casi appena illustrati sussistono risultati che garantiscono l'esistenza e l'unicità della soluzione del sistema lineare ottenuto.

In ciascuno dei casi, in definitiva, un approccio alle differenze finite per la risoluzione numerica di un problema ai limiti conduce alla risoluzione di un sistema lineare tridiagonale. La soluzione di tale sistema consiste nel vettore che ha come componenti le approssimazioni di ciascuno dei valori che la soluzione esatta y del problema ai limiti assume nei punti della discretizzazione dell'intervallo.

Il passo conclusivo del metodo alle differenze consiste nella risoluzione del sistema lineare tridiagonale. La risoluzione di questa categoria di sistemi lineari può essere affrontata con un metodo numerico adeguato, come metodi di risoluzione iterativi o specifici metodi diretti quali l'algoritmo di Thomas.⁴

⁴Cfr. [9], Capitoli 3 - 4.

Capitolo 3

Identificazione dei parametri per BVP lineari del II ordine

3.1 Il problema di identificazione dei parametri

Supponiamo di studiare un determinato fenomeno evolutivo mediante una serie di osservazioni sperimentali, grazie alle quali risultano note alcune misure $\hat{z}_1, \dots, \hat{z}_K$ appartenenti ad un dato insieme, che denotiamo come lo spazio delle osservazioni Z .

Supponiamo, inoltre, che il comportamento del fenomeno sia descritto da una funzione reale di variabile reale $\hat{y} : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ sufficientemente regolare, precisamente almeno di classe $C^2([a, b], \mathbb{R})$, ma che non sia possibile determinare analiticamente tale funzione. Per le nostre ipotesi, sono note unicamente le misure $\hat{z}_1, \dots, \hat{z}_K \in Z$, $K \geq 1$. Nel caso dei nostri esempi numerici, prendiamo in considerazione esclusivamente il caso in cui queste ultime siano $\hat{z}_1 = \hat{y}(x_1), \dots, \hat{z}_K = \hat{y}(x_K)$, con $x_1, \dots, x_K \in [a, b] \subseteq \mathbb{R}$; quindi, in tal caso, $Z \subseteq \mathbb{R}$.¹

Assumiamo che il fenomeno in esame appartenga ad una nota classe di problemi; in particolare, supponiamo che la funzione \hat{y} corrispondente sia l'unica soluzione di un problema ai limiti per un'equazione differenziale ordinaria. Per le nostre ipotesi, precisamente, la funzione \hat{y} soddisfa le seguenti condizioni al contorno miste ed è soluzione analitica della seguente equazione

¹Diversamente, ad esempio, potrebbe sussistere il caso in cui $K = 1$ e $\hat{z}_1 = g(\hat{y})$, con g funzione reale tale che $\hat{z}_1 \in Z \subseteq L^2([a, b], \mathbb{R})$.

lineare del primo ordine:

$$\begin{cases} -cy''(x) + \pi_1(\hat{p}(x), \hat{q}(x))y'(x) + \pi_2(\hat{p}(x), \hat{q}(x))y(x) = r(x) \\ a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha, \\ b_0y(b) + b_1y'(b) = \beta \end{cases} \quad a < x < b, \quad (3.1)$$

essendo π_1, π_2 funzioni continue su \mathbb{R}^2 (a valori in \mathbb{R}), r funzione continua su $[a, b]$, $c > 0$, $a, b, \alpha, \beta, a_0, b_0, a_1, b_1 \in \mathbb{R}$, $a_0, b_0, a_1, b_1 \geq 0$ e $a_0 + b_0 \neq 0$. Inoltre, \hat{p} e \hat{q} sono funzioni continue su $[a, b]$ e $\pi_2(\hat{p}(x), \hat{q}(x)) > 0, \forall x \in [a, b]$;² o, più formalmente, (\hat{p}, \hat{q}) è una coppia che appartiene all'insieme di parametri:

$$PQ = \{(p, q) \in (C([a, b]))^2 \mid \pi_2(p(x), q(x)) > 0, \forall x \in [a, b]\} \quad (3.2)$$

in modo tale che il problema 3.1 abbia \hat{y} come (unica) soluzione.³

La coppia (\hat{p}, \hat{q}) non è nota a priori; al contrario, si cerca proprio di risalire ad essa, essendo note le misure sperimentali. Il problema, dunque, noto come **identificazione dei parametri**, non consiste nello stimare direttamente l'andamento della funzione \hat{y} , ma nel cercare un insieme $\widetilde{PQ} \subseteq PQ$ di coppie di parametri ammissibili (p^*, q^*) tali che i corrispondenti problemi ai limiti:

$$\begin{cases} -cy''(x) + \pi_1(p^*(x), q^*(x))y'(x) + \pi_2(p^*(x), q^*(x))y(x) = r(x) \\ a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha, \\ b_0y(b) + b_1y'(b) = \beta \end{cases} \quad a < x < b, \quad (3.3)$$

(sempre con π_1, π_2 continue su \mathbb{R} , $\pi_2(p^*(x), q^*(x)) > 0, \forall x \in [a, b]$, r continua su $[a, b]$, con $c > 0$, con $a, b, \alpha, \beta, a_0, b_0, a_1, b_1 \in \mathbb{R}$, $a_0, b_0, a_1, b_1 \geq 0$ e $a_0 + b_0 \neq 0$) abbiano \hat{y} come (unica) soluzione.

E' opportuno sottolineare che l'insieme ammissibile \widetilde{PQ} non è vuoto, poiché banalmente contiene la coppia di parametri (\hat{p}, \hat{q}) .⁴ Tuttavia, non è garantita alcuna condizione di unicità, né in generale risulta agevole stimare quante coppie di parametri ammissibili sussistano complessivamente (*problema di identificabilità dei parametri*).

Un possibile approccio all'identificazione dei parametri consiste nel ricorso alla teoria dell'ottimizzazione. Precisamente, si prova a ricondurre la ricerca

²A condizioni di questo genere, la teoria delle equazioni differenziali garantisce l'esistenza e l'unicità della soluzione analitica, come visto in precedenza.

³Negli esempi numerici che mostriamo le funzioni π_1 e π_2 sono molto elementari. In molti casi abbiamo soltanto $\pi_1(s, t) = s$ e $\pi_2(s, t) = t \forall s, t \in \mathbb{R}$ e quindi l'equazione differenziale in esame è della forma: $-cy''(x) + \hat{p}(x)y'(x) + \hat{q}(x)y(x) = r(x)$.

⁴Nella realtà questa assunzione è decisamente restrittiva. Essa si basa sull'ipotesi, che raramente si riscontra nei problemi concreti, secondo cui la funzione \hat{y} sia effettivamente soluzione di un problema ai limiti.

di una coppia di parametri ammissibile ad un problema di minimo. A questo scopo, introduciamo il seguente generico funzionale, che chiamiamo *operatore di osservazione*:

$$\mathcal{C} : C^2([a, b], \mathbb{R}) \times PQ \rightarrow Z^K, \quad \mathcal{C} = \mathcal{C}(y, (p, q)), \quad (3.4)$$

che soddisfa la proprietà: $\mathcal{C}(\hat{y}, (p^*, q^*)) = \hat{\mathbf{z}} = (\hat{z}_1, \dots, \hat{z}_K)$.

Una volta ristretto il funzionale $\mathcal{C}(y, (p, q))$ alle funzioni y che risolvono il problema ai limiti:

$$\begin{cases} -cy''(x) + \pi_1(p(x), q(x))y'(x) + \pi_2(p(x), q(x))y(x) = r(x) \\ a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha, \\ b_0y(b) + b_1y'(b) = \beta \end{cases} \quad a < x < b$$

(π_1, π_2 continue su \mathbb{R} , $\pi_2(p(x), q(x)) > 0$, $\forall x \in [a, b]$, r continua su $[a, b]$, $c > 0$, $a, b, \alpha, \beta, a_0, b_0, a_1, b_1 \in \mathbb{R}$, $a_0, b_0, a_1, b_1 \geq 0$ e $a_0 + b_0 \neq 0$), è possibile considerare \mathcal{C} unicamente come funzione dei parametri (p, q) .⁵ Quindi, per semplicità di notazione, scriviamo unicamente $\mathcal{C}(p, q)$ in luogo di $\mathcal{C}(y, (p, q))$.

Notiamo che la proprietà $\mathcal{C}(p^*, q^*) = \hat{\mathbf{z}} = (\hat{z}_1, \dots, \hat{z}_K)$ è equivalente a:

$$(p^*, q^*) = \arg \min_{(p, q) \in PQ} \|\mathcal{C}(p, q) - \hat{\mathbf{z}}\|^2, \quad (3.5)$$

dove $\|\cdot\|$ è una norma di uno spazio contenente l'insieme Z^K scelta opportunamente.

Il problema di identificazione dei parametri viene, dunque, ricondotto ad un problema di minimi quadrati, in quanto si cerca il minimo:

$$\min_{(p, q) \in PQ} \|\mathcal{C}(p, q) - \hat{\mathbf{z}}\|^2.$$

Come affermato sopra, negli esempi numerici, consideriamo esclusivamente il caso in cui le misure siano della forma $\hat{z}_1 = \hat{y}(x_1), \dots, \hat{z}_K = \hat{y}(x_K)$, con $x_1, \dots, x_K \in [a, b] \subseteq \mathbb{R}$. Dunque, in tal caso, risulta naturale scegliere, come operatore di osservazione, la funzione che alla coppia di parametri (p, q) associa il vettore ottenuto dalla soluzione y del problema ai limiti con tali parametri $\mathbf{y}(p, q) = (y(x_1)(p, q), \dots, y(x_K)(p, q)) \in \mathbb{R}^K$ e, come norma da minimizzare, la norma euclidea in \mathbb{R}^K .

Quindi, nelle nostre prove numeriche, essendo note le misure sperimentali $\hat{\mathbf{z}} = (\hat{y}(x_1), \dots, \hat{y}(x_K))$ (con $x_1, \dots, x_K \in [a, b] \subseteq \mathbb{R}$), cerchiamo di determinare

⁵In questo modo, infatti, la funzione y certamente è dipendente dalla coppia di parametri (p, q) .

la coppia di parametri ottimale che soddisfi la seguente condizione di minimo:

$$\min_{(p,q) \in PQ} \|\mathbf{y}(p, q) - \hat{\mathbf{z}}\|_2^2 = \min_{(p,q) \in PQ} \sum_{i=1}^K [y(x_i)(p, q) - \hat{y}(x_i)]^2. \quad (3.6)$$

Qualora il modello sperimentale offra la possibilità di rendere più restrittive le condizioni sulla generica coppia di parametri (p, q) , è opportuno restringere conseguentemente l'insieme PQ . Ad esempio, nei nostri test numerici, per semplicità, ci restringiamo al caso in cui le coppie di parametri (p, q) siano funzioni costanti; così, è possibile considerare come insieme di coppie di parametri semplicemente:

$$PQ = \{(p, q) \in \mathbb{R}^2 \mid \pi_2(p, q) > 0\}. \quad (3.7)$$

In definitiva, dunque, i nostri problemi di identificazione di parametri vengono direttamente ricondotti a problemi di minimi quadrati. Questi ultimi vengono risolti numericamente nei test ricorrendo ai metodi di minimizzazione iterativi descritti in precedenza. Ricorriamo precisamente ad un opportuno adattamento del metodo di Gauss-Newton con scelta del passo secondo la regola di Armijo (con tecnica di backtracking) allo scopo di risalire ad un'adeguata approssimazione di una coppia di parametri ottimale.

Nelle nostre prove si assume che sia comunque nota a priori la coppia di parametri ottimale. Ciò non corrisponde chiaramente ai reali problemi di identificazione (dal momento che la coppia di parametri è essa stessa il dato incognito da determinare). Tuttavia, generalmente, nei problemi concreti, grazie alle verifiche sperimentali, è possibile fissare un intorno opportuno in cui effettuare la ricerca dei parametri ottimali.

Dal punto di vista dei possibili risultati numerici che si riscontrano nei problemi di identificazione dei parametri, è opportuno aggiungere che, anche nei casi più semplici, la ricerca dei parametri ottimali è estremamente delicata. Infatti, sul risultato finale influiscono diversi errori, tra cui quelli dovuti all'approssimazione delle misure effettuate, quelli dovuti al calcolo della soluzione numerica del problema ai limiti ad ogni passo iterativo e quelli dovuti al metodo iterativo stesso.

3.2 Implementazione della ricerca dei parametri ottimali

Ricordiamo che, per i nostri esperimenti, come affermato in precedenza, i parametri sono semplicemente costanti. Per le ipotesi, è noto il vettore delle misure sperimentali $\hat{\mathbf{z}} = (\hat{y}(x_1), \dots, \hat{y}(x_K))$, con $x_1, \dots, x_K \in [a, b]$. Il problema ai limiti del quale cerchiamo i parametri ottimali ha la forma seguente:

$$\begin{cases} -cy''(x) + \pi_1(p, q)y'(x) + \pi_2(p, q)y(x) = r(x) \\ a_0y(a) - a_1y'(a) = \alpha, \\ b_0y(b) + b_1y'(b) = \beta \end{cases} \quad a < x < b \quad (3.8)$$

(con π_1, π_2 continue su \mathbb{R}^2 , $\pi_2 > 0$ su \mathbb{R}^2 , $p, q \in \mathbb{R}^2$, r continua su $[a, b]$, con $c > 0$, $a, b, \alpha, \beta, a_0, b_0, a_1, b_1 \in \mathbb{R}$, $a_0, b_0, a_1, b_1 \geq 0$ e $a_0 + b_0 \neq 0$).

Questo problema ai limiti viene risolto numericamente mediante il metodo alle differenze centrali descritto nel capitolo precedente, determinando una soluzione:

$$\mathbf{u}(p, q) = (u(\xi_0)(p, q), \dots, u(\xi_{N+1})(p, q)) \in \mathbb{R}^{N+2},$$

essendo gli ξ_j i nodi della discretizzazione dell'intervallo:

$$\xi_j = a + jh, \quad j = 0, \dots, N+1, \quad h = \frac{b-a}{N+1}.$$

Vengono, poi, ottenuti tramite interpolazione lineare i valori della soluzione numerica nei punti x_i ($i = 1, \dots, K$) delle misure. Precisamente, definiamo la funzione Π_u che interpola i valori $u(\xi_j)(p, q)$ ($j = 0, \dots, N+1$) nei punti x_i ($i = 1, \dots, K$) in modo tale da avere:

$$\underline{\mathbf{u}}(p, q) = (\underline{u}(x_1)(p, q), \dots, \underline{u}(x_K)(p, q)),$$

con $\underline{u}(x_i)(p, q) = \Pi_u(\mathbf{u}(p, q))(x_i)$, $i = 1, \dots, K$.

Pertanto, la funzione obiettivo da minimizzare che prendiamo in considerazione è della forma:

$$F(p, q) = \|\mathbf{f}(p, q)\|_2^2 = \|\underline{\mathbf{u}}(p, q) - \hat{\mathbf{z}}\|_2^2 = \sum_{i=1}^K [\underline{u}(x_i)(p, q) - \hat{z}_i]^2. \quad (3.9)$$

Descriviamo ora dal punto di vista algoritmico come si sviluppa per i nostri test il procedimento di ricerca dei parametri ottimali.

In pratica, viene applicato opportunamente il metodo di Gauss-Newton alla funzione obiettivo da minimizzare $F(p, q)$.

Di conseguenza, il procedimento consiste in un ciclo condizionale in cui la coppia di parametri viene aggiornata secondo il metodo di Gauss-Newton con regola di Armijo per la lunghezza del passo. La direzione di discesa è, così, ottenuta secondo la formula:

$$J(p, q)^T J(p, q)(h_p, h_q)^T = -J(p, q)^T \mathbf{f}(p, q)^T, \quad (3.10)$$

ove $J(p, q)$ è la matrice Jacobiana:

$$J(p, q) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{u}(p, q)^T}{\partial p} & \frac{\partial \mathbf{u}(p, q)^T}{\partial q} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Nell'implementazione la Jacobiana viene sostituita dall'approssimazione alle differenze finite in avanti⁶ (con un incremento $\delta = 0.01$):

$$J(p, q) \simeq \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{u}(p + \delta, q)^T - \mathbf{u}(p, q)^T}{\delta} & \frac{\mathbf{u}(p, q + \delta)^T - \mathbf{u}(p, q)^T}{\delta} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Descriviamo più precisamente come si sviluppano i passaggi dell'algoritmo di ricerca dei parametri ottimali per i nostri test numerici.

1. Scelta delle costanti e dei dati iniziali.

(a) Scelta della categoria di problema ai limiti.

Vengono prefissati i coefficienti dell'equazione differenziale e i valori al bordo per il problema 3.8.

(b) Scelta del vettore delle misure $\hat{\mathbf{z}}$.

Le misure vengono fornite dai test sperimentali.

⁶Se $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ è una funzione sufficientemente regolare, l'approssimazione alle differenze finite in avanti della derivata prima in $x_0 \in [a, b]$ $f'(x_0)$ risulta:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

- (c) Scelta del numero N di nodi di discretizzazione dell'intervallo su cui è definito il problema ai limiti.
Le soluzioni numeriche dei problemi ai limiti vengono calcolate nella maniera descritta su un numero prefissato N di nodi di discretizzazione equispaziati.
- (d) Scelta della coppia di parametri iniziali (p_0, q_0) .
Se il modello sperimentale offre dei dati che inducono la scelta di una coppia di parametri iniziale, viene fissata tale coppia. Diversamente, si effettuano più tentativi casuali: a seconda dei risultati che si ottengono, si può così effettuare una stima qualitativa dell'intorno di convergenza.

2. Esecuzione di un ciclo condizionale.

Vengono ripetute ciclicamente le istruzioni seguenti partendo dalla coppia di parametri iniziali (p_0, q_0) finché non risulta soddisfatto il criterio

$$\text{di arresto}^7: \begin{cases} \|(p_{k+1}, q_{k+1}) - (p_k, q_k)\|_2 \leq \epsilon \\ |F(p_{k+1}, q_{k+1}) - F(p_k, q_k)| \leq \epsilon \end{cases}$$

- (a) Soluzione numerica del problema ai limiti sui nodi di discretizzazione corrispondente a (p_k, q_k) .
Si ottiene il vettore $\mathbf{u}(p_k, q_k) \in \mathbb{R}^{N+2}$, soluzione numerica calcolata nei nodi di discretizzazione del problema 3.8 con scelta dei parametri (p_k, q_k) .
- (b) Interpolazione della soluzione numerica corrispondente a (p_k, q_k) sui punti delle misure.
Si procede all'interpolazione del vettore $\mathbf{u}(p_k, q_k)$ e si ottiene il vettore $\mathbf{u}(p_k, q_k) \in \mathbb{R}^K$, soluzione numerica calcolata nei punti delle misure.
- (c) Soluzioni numeriche del problema ai limiti sui nodi di discretizzazione corrispondenti rispettivamente a $(p_k + \delta, q_k)$ e a $(p_k, q_k + \delta)$, fissato $\delta = 0.01$.
Si ottengono i vettori $\mathbf{u}(p_k + \delta, q_k), \mathbf{u}(p_k, q_k + \delta) \in \mathbb{R}^{N+2}$, soluzioni numeriche del problema 3.8 calcolate nei nodi di discretizzazione con scelta dei parametri rispettivamente $(p_k + \delta, q_k)$ e $(p_k, q_k + \delta)$.

⁷Nei nostri test numerici fissiamo $\epsilon = 1e-6$.

(d) Interpolazione delle soluzioni numeriche corrispondenti rispettivamente a $(p_k + \delta, q_k)$ e a $(p_k, q_k + \delta)$ sui punti delle misure.

Si procede all'interpolazione dei vettori $\mathbf{u}(p_k + \delta, q_k)$ e $\mathbf{u}(p_k, q_k + \delta)$ e si ottengono i vettori $\underline{\mathbf{u}}(p_k + \delta, q_k), \underline{\mathbf{u}}(p_k, q_k + \delta) \in \mathbb{R}^K$, soluzioni numeriche calcolate nei punti delle misure.

(e) Calcolo del residuo.

Si effettua il calcolo della funzione residuo F da minimizzare e della funzione \mathbf{f} in (p_k, q_k) :

$$F(p_k, q_k) = \|\mathbf{f}(p_k, q_k)\|_2^2 = \|\underline{\mathbf{u}}(p_k, q_k) - \hat{\mathbf{z}}\|_2^2. \quad (3.13)$$

(f) Calcolo dell'approssimazione della matrice Jacobiana della funzione residuo.

L'approssimazione della Jacobiana, effettuata con le differenze finite in avanti, risulta (come da 3.12):

$$\begin{aligned} J(p_k, q_k) &\simeq \\ &\simeq \left(\frac{\underline{\mathbf{u}}(p_k + \delta, q_k)^T - \underline{\mathbf{u}}(p_k, q_k)^T}{\delta} \quad \underline{\mathbf{u}}(p_k, q_k + \delta)^T - \underline{\mathbf{u}}(p_k, q_k)^T \right). \end{aligned} \quad (3.14)$$

(g) Calcolo della direzione di ricerca di Gauss-Newton.

Viene calcolata la soluzione del sistema lineare:

$$J(p_k, q_k)J(p_k, q_k)^T (h_{pk}, h_{qk})^T = -J(p_k, q_k)^T \mathbf{f}(p_k, q_k)^T \quad (3.15)$$

mediante l'algoritmo di Thomas⁸. Diversamente, potrebbe essere scelto un qualunque altro efficiente metodo di risoluzione di sistemi di equazioni lineari, tenendo conto che generalmente il sistema 3.15 è mal condizionato.

⁸L'algoritmo di Thomas è un metodo di risoluzione specifico per sistemi tridiagonali (cfr. [9], §3.7). Quindi, non garantisce certamente che il sistema 3.15 venga risolto in maniera molto accurata. D'altra parte, non è necessario risolvere il sistema 3.15 con estrema precisione per ottenere un'adeguata direzione di discesa nel nostro algoritmo di ricerca dei parametri. Inoltre, con l'algoritmo di Thomas la risoluzione del sistema 3.15 avviene in maniera abbastanza efficiente.

- (h) Aggiornamento della coppia di parametri.
 Si aggiorna la coppia di parametri determinando la lunghezza del passo α_k secondo la regola di Armijo con tecnica di backtracking (fissate le costanti $\bar{\alpha} > 0$ e $\rho, c_1 \in (0, 1)$):

$$\left\{ \begin{array}{l} \alpha_k = \bar{\alpha}; \\ \text{Ripetere finché} \\ F(p_{k+1}, q_{k+1}) \leq F(p_k, q_k) + c_1 \alpha_k (h_{pk}, h_{qk}) \cdot \nabla F(p_k, q_k) : \\ \left\{ \begin{array}{l} \alpha_k \leftarrow \rho \alpha_k; \\ (p_{k+1}, q_{k+1}) = (p_k, q_k) + \alpha_k (h_{pk}, h_{qk}); \\ \text{calcolare } F(p_{k+1}, q_{k+1}) \text{ come nei punti 2.a - 2.e.} \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (3.16)$$

3. Determinazione dell'output.
 Vengono ritornati i seguenti dati di output.

- (a) l'approssimazione della coppia di parametri ottimale;
 (b) il numero di iterazioni compiute nel ciclo condizionale (comprensivo del numero dei passi effettuati per applicare la regola di Armijo).

Per concludere, esponiamo nella pagina seguente lo schema della procedura appena spiegata allo scopo di mettere in evidenza la struttura dell'algoritmo di identificazione dei parametri.

Algoritmo di identificazione dei parametri

1. Dati di input:
 - 1.1 problema 3.8;
 - 1.2 $x_1, \dots, x_K \in [a, b]$, $\hat{\mathbf{z}} = (\hat{y}(x_1), \dots, \hat{y}(x_K))$;
 - 1.3 $N \geq 0$;
 - 1.4 $k = 0$, $k_{\text{tot}} = 0$;
 - 1.5 (p_0, q_0) .
2. Ripetere finché $\begin{cases} \|(p_{k+1}, q_{k+1}) - (p_k, q_k)\|_2 \leq \epsilon \\ |F(p_{k+1}, q_{k+1}) - F(p_k, q_k)| \leq \epsilon \end{cases}$:
 - 2.1 calcolare $\mathbf{u}(p_k, q_k) \in \mathbb{R}^{N+2}$ da 3.8 per $(p, q) = (p_k, q_k)$;
 - 2.2 interpolare $\mathbb{R}^K \ni \underline{\mathbf{u}}(p_k, q_k) = \Pi_u(\mathbf{u}(p_k, q_k))$;
 - 2.3 calcolare $\mathbf{u}(p_k + \delta, q_k) \in \mathbb{R}^{N+2}$ da 3.8 per $(p, q) = (p_k + \delta, q_k)$;
 - 2.4 calcolare $\mathbf{u}(p_k, q_k + \delta) \in \mathbb{R}^{N+2}$ da 3.8 per $(p, q) = (p_k, q_k + \delta)$;
 - 2.5 interpolare $\mathbb{R}^K \ni \underline{\mathbf{u}}(p_k + \delta, q_k) = \Pi_u(\mathbf{u}(p_k + \delta, q_k))$;
 - 2.6 interpolare $\mathbb{R}^K \ni \underline{\mathbf{u}}(p_k, q_k + \delta) = \Pi_u(\mathbf{u}(p_k, q_k + \delta))$;
 - 2.7 calcolare $J(p_k, q_k)$ con 3.14;
 - 2.8 calcolare (h_{pk}, h_{qk}) risolvendo 3.15 con l'algoritmo di Thomas;
 - 2.9 $\begin{cases} \alpha_k = \bar{\alpha}; \\ \text{ripetere finché} \\ F(p_{k+1}, q_{k+1}) \leq F(p_k, q_k) + c_1 \alpha_k (h_{pk}, h_{qk}) \cdot \nabla F(p_k, q_k) : \\ \begin{cases} \alpha_k \leftarrow \rho \alpha_k; \\ (p_{k+1}, q_{k+1}) = (p_k, q_k) + \alpha_k (h_{pk}, h_{qk}); \\ \text{eseguire i punti 2.1 - 2.6 con } (p_{k+1}, q_{k+1}); \\ k_{\text{tot}} \leftarrow k_{\text{tot}} + 1; \end{cases} \end{cases}$
 - 2.10 $k \leftarrow k + 1$;
3. Dati di output:
 - 3.1 (p_k, q_k) ;
 - 3.2 k, k_{tot} .

Capitolo 4

Test numerici

Applichiamo il procedimento di identificazione dei parametri ottimali che abbiamo descritto ad alcuni problemi test facendo uso dell'ambiente di calcolo MATLAB.

4.1 Primi esempi numerici

Consideriamo inizialmente degli esperimenti su problemi ai limiti molto semplici allo scopo di esaminare concretamente l'algoritmo di ricerca dei parametri ottimali. Questi problemi sono costruiti ad hoc in modo tale che i risultati numerici non risultino eccessivamente critici. In questo modo, possiamo concentrare l'attenzione prevalentemente sul funzionamento della procedura di identificazione dei parametri.

Indichiamo sinteticamente i problemi ai limiti che prendiamo in considerazione.

1. (a) Cerchiamo la coppia di parametri ottimali $(\hat{p}, \hat{q}) \in \mathbb{R}^2$, $\hat{q} > 0$ tra le possibili coppie $(p, q) \in \mathbb{R}^2$ tali che il problema ai limiti con condizioni al bordo di Dirichlet:

$$\begin{cases} -y''(x) + \hat{p}y'(x) + \hat{q}y(x) = r(x), & 0 < x < 1 \\ y(0) = 0 \\ y(1) = \sin(1) \end{cases} \quad (1D)$$

abbia $\hat{y}(x) = \sin(x)$ come soluzione esatta.

- (b) Cerchiamo la coppia di parametri ottimali $(\hat{p}, \hat{q}) \in \mathbb{R}^2$, $\hat{q} > 0$ tra le possibili coppie $(p, q) \in \mathbb{R}^2$ tali che il problema ai limiti con condizioni al bordo di Robin:

$$\begin{cases} -y''(x) + \hat{p}y'(x) + \hat{q}y(x) = r(x), & 0 < x < 1 \\ y(0) - y'(0) = -1 \\ y(1) + y'(1) = \sin(1) + \cos(1) \end{cases}, \quad (1R)$$

abbia $\hat{y}(x) = \sin(x)$ come soluzione esatta.

Per entrambi gli esempi, supponiamo che le misure sperimentali siano della forma:

$$(x_1, \hat{y}(x_1)) = (x_1, \sin(x_1)), (x_2, \hat{y}(x_2)) = (x_2, \sin(x_2)), \dots \\ \dots (x_K, \hat{y}(x_K)) = (x_K, \sin(x_K)),$$

ove x_1, \dots, x_K sono punti equispaziati sull'intervallo $[0, 1]$ (prenderemo precisamente $K = 9$ e $x_1 = 0.1, x_2 = 0.2, \dots, x_9 = 0.9$) e che il termine noto $r(x)$ sia della forma:

$$r(x) = (\hat{p} + 1) \sin(x) + \hat{q} \cos(x),$$

essendo $\hat{p} + 1$ e \hat{q} forniti come dati numerici.

2. (a) Cerchiamo la coppia di parametri ottimali $(\hat{p}, \hat{q}) \in \mathbb{R}^2$, $\hat{q} > 0$ tra le possibili coppie $(p, q) \in \mathbb{R}^2$ tali che il problema ai limiti con condizioni al bordo di Dirichlet:

$$\begin{cases} -y''(x) + \hat{p}y'(x) + \hat{q}y(x) = r(x), & 1 < x < 2 \\ y(1) = 0 \\ y(2) = \log(2) \end{cases}, \quad (2D)$$

abbia $\hat{y}(x) = \log(x)$ come soluzione esatta.

- (b) Cerchiamo la coppia di parametri ottimali $(\hat{p}, \hat{q}) \in \mathbb{R}^2$, $\hat{q} > 0$ tra le possibili coppie $(p, q) \in \mathbb{R}^2$ tali che il problema ai limiti con condizioni al bordo di Robin:

$$\begin{cases} -y''(x) + \hat{p}y'(x) + \hat{q}y(x) = r(x), & 1 < x < 2 \\ y(1) - y'(1) = -1 \\ y(2) + y'(2) = \log(2) + \frac{1}{2} \end{cases}, \quad (2R)$$

abbia $\hat{y}(x) = \log(x)$ come soluzione esatta.

- (c) Cerchiamo la coppia di parametri ottimali $(\hat{p}, \hat{q}) \in \mathbb{R}^2$, $\hat{q} > 0$ tra le possibili coppie $(p, q) \in \mathbb{R}^2$ tali che il problema ai limiti con condizioni al bordo miste di Dirichlet-Robin:

$$\begin{cases} -y''(x) + \hat{p}y'(x) + \hat{q}y(x) = r(x), & 1 < x < 2 \\ y(1) = 0 \\ y(2) + y'(2) = \log(2) + \frac{1}{2} \end{cases}, \quad (2DR)$$

abbia $\hat{y}(x) = \log(x)$ come soluzione esatta.

Per tutti e tre gli esempi, supponiamo che le misure sperimentali siano della forma:

$$\begin{aligned} (x_1, \hat{y}(x_1)) = (x_1, \log(x_1)), \quad (x_2, \hat{y}(x_2)) = (x_2, \log(x_2)), \dots \\ \dots (x_K, \hat{y}(x_K)) = (x_K, \log(x_K)), \end{aligned}$$

ove x_1, \dots, x_K sono punti equispaziati sull'intervallo $[1, 2]$ (prenderemo precisamente $K = 9$ e $x_1 = 1.1, x_2 = 1.2, \dots, x_9 = 1.9$) e che il termine noto $r(x)$ sia della forma:

$$r(x) = \frac{1}{x^2} + \frac{\hat{p}}{x} + \hat{q} \log(x),$$

essendo \hat{p} e \hat{q} forniti come dati numerici.

Se non diversamente specificato, nella risoluzione numerica di ciascun problema ai limiti costruito nei passaggi dell'algorithmo di identificazione dei parametri, fissiamo a $N = 200$ il numero di nodi di discretizzazione equispaziati sull'intervallo.

4.1.1 Primo test

Come primo esperimento, per ciascuna delle classi di problemi che abbiamo illustrato, proviamo a scegliere in maniera pseudocasuale i parametri ottimali. Una volta compiuta una di queste scelte, analizziamo gli errori e il costo computazionale delle operazioni richieste per approssimare i valori esatti. Testiamo diverse coppie di parametri iniziali, anch'essi generati in modo pseudocasuale.

Riportiamo in opportune tabelle alcune prove significative (gran parte delle prove non riportate non offrono un quadro diverso da quanto evince dai dati che menzioniamo).

| Parametri iniziali (p_0, q_0) | Distanza tra (p_0, q_0) e (\hat{p}, \hat{q}) in $\ \cdot\ _2$ | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto rispetto a (\hat{p}, \hat{q}) | Num. totale di passi |
|--|---|--|----------------------------|
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (2.300046, 0.177658) | | | |
| (1.862922, 1.349360) | 1.250585 | 4.268895e-5 | 4 |
| (7.640973, 2.273517) | 5.737432 | 4.223686e-5 | 8 |
| (1.589713, 7.597933) | 7.454197 | 4.198124e-5 | 6 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (-1.343150, 0.064869) | | | |
| (-3.188727, 2.847029) | 3.338647 | 7.834637e-5 | 5 |
| (-2.151047, 5.393848) | 5.389871 | 1.393743e-4 | 5 |
| (1.966453, -5.291311) | 6.296200 | 8.264544e-5 | 6 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (9.241853, 4.642376) | | | |
| (7.377677, 6.716371) | 2.788657 | 8.416607e-6 | 4 |
| (10.408587, 12.541083) | 7.984412 | 8.422022e-6 | 5 |
| (-0.087024, 11.045180) | 1.131476e+1 | 8.683816e-6 | 6 |

Tabella 4.1: Identificazione dei parametri per il problema (1D).

| Parametri iniziali (p_0, q_0) | Distanza tra (p_0, q_0) e (\hat{p}, \hat{q}) in $\ \cdot\ _2$ | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto rispetto a (\hat{p}, \hat{q}) | Num. totale di passi |
|--|---|--|----------------------------|
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (-2.480791, 1.758467) | | | |
| (-3.527271, 4.216510) | 2.671535 | 9.920352e-6 | 5 |
| (-5.157491, 9.445040) | 8.139295 | 9.837165e-6 | 7 |
| (-7.665794, 9.051084) | 8.947989 | 1.008605e-5 | 6 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (5.515812, 6.695043) | | | |
| (1.740696, 5.207747) | 4.057530 | 1.508340e-5 | 6 |
| (2.102871, 3.677932) | 4.555340 | 1.513066e-5 | 6 |
| (1.145764, 12.017984) | 6.887018 | 1.510033e-5 | 6 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (9.460039, 1.022994) | | | |
| (11.621935, 0.564618) | 2.209955 | 4.285876e-5 | 5 |
| (3.288090, -1.332848) | 6.606281 | 4.286201e-5 | 8 |
| (-0.094140, 2.159012) | 9.621480 | 4.285715e-5 | 8 |

Tabella 4.2: Identificazione dei parametri per il problema (1R).

| Parametri iniziali (p_0, q_0) | Distanza tra (p_0, q_0) e (\hat{p}, \hat{q}) in $\ \cdot\ _2$ | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto rispetto a (\hat{p}, \hat{q}) | Num. totale di passi |
|--|---|--|----------------------------|
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (2.645852, 0.924089) | | | |
| (3.459641, 4.986661) | 4.143276 | 2.298311e-4 | 5 |
| (-2.377330, -1.098379) | 5.415048 | 3.810636e-5 | 6 |
| (11.420444, 0.835610) | 8.775037 | 1.259320e-4 | 10 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (-0.894866, 3.857526) | | | |
| (-2.405955, 3.627220) | 1.528538 | 5.825402e-5 | 5 |
| (3.966428, 5.825034) | 5.244356 | 5.864717e-5 | 13 |
| (-9.722192, 12.042164) | 1.203786e+1 | 6.711218e-5 | 7 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (-6.045270, 1.630313) | | | |
| (-4.065019, 0.459049) | 2.300707 | 4.535189e-5 | 5 |
| (-12.513423, -3.162911) | 8.050590 | 5.371764e-5 | 6 |
| (-3.915950, 13.031253) | 1.159808e+1 | 4.506231e-5 | 8 |

Tabella 4.3: Identificazione dei parametri per il problema (2D).

| Parametri iniziali (p_0, q_0) | Distanza tra (p_0, q_0) e (\hat{p}, \hat{q}) in $\ \cdot\ _2$ | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto rispetto a (\hat{p}, \hat{q}) | Num. totale di passi |
|--|---|--|----------------------------|
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (0.728795, 0.086632) | | | |
| (-2.904859, 1.451363) | 3.881486 | 1.906686e-5 | 7 |
| (-3.711177, 4.477465) | 6.244420 | 1.800703e-5 | 10 |
| (-2.741897, 10.101425) | 1.059914e+1 | 1.334114e-5 | 9 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (2.443863, 3.534856) | | | |
| (6.154150, 2.041894) | 3.999395 | 1.256552e-5 | 7 |
| (-4.338446, 9.830634) | 9.254001 | 1.155827e-5 | 10 |
| (-2.226331, 14.422251) | 1.184677e+1 | 1.913976e-5 | 8 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (-3.659464, 5.542490) | | | |
| (-2.739011, 8.037768) | 2.659632 | 3.191521e-5 | 5 |
| (-1.611993, 12.614087) | 7.362039 | 3.106079e-5 | 6 |
| (6.716466, 3.954622) | 1.049673e+1 | 3.299019e-5 | 10 |

Tabella 4.4: Identificazione dei parametri per il problema (2R).

| Parametri iniziali (p_0, q_0) | Distanza tra (p_0, q_0) e (\hat{p}, \hat{q}) in $\ \cdot\ _2$ | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto rispetto a (\hat{p}, \hat{q}) | Num. totale di passi |
|--|---|--|----------------------------|
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (3.145962, 2.725837) | | | |
| (6.254671, 2.174707) | 3.157184 | 1.372162e-4 | 6 |
| (6.490406, 10.160671) | 8.152427 | 1.356865e-4 | 6 |
| (-6.863048, 2.319263) | 1.001726e+1 | 1.364570e-4 | 7 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (-0.141692, 5.144739) | | | |
| (-3.324485, 3.554695) | 3.557866 | 8.364473e-5 | 6 |
| (-1.797578, -2.483387) | 7.805784 | 8.428715e-5 | 9 |
| (-11.193516, 8.500618) | 1.155010e+1 | 8.399785e-5 | 7 |
| Parametri esatti: (\hat{p}, \hat{q}) = (-9.192740, 0.785166) | | | |
| (-9.508563, 1.311312) | 6.136561e-1 | 3.594008e-5 | 4 |
| (-14.968502, 0.921402) | 5.777368 | 3.591900e-5 | 6 |
| (-17.711386, 5.631460) | 9.800709 | 3.598823e-5 | 7 |

Tabella 4.5: Identificazione dei parametri per il problema (2DR).

Analizzando i dati mostrati, notiamo che non vi sono profonde differenze né in termini di errori né in termini di costi computazionali qualora l'algoritmo venga applicato ad uno dei problemi con una determinata coppia di parametri ottimali piuttosto che un'altra. Questa particolarità deriva certamente non soltanto dall'efficienza dell'algoritmo, ma soprattutto dalla semplicità dei problemi test che prendiamo in considerazione.

Questa tendenziale omogeneità di comportamento al variare delle coppie di parametri ottimali (\hat{p}, \hat{q}) ci permette di trarre conclusioni generali qualitativamente valide anche limitandoci a sperimentare un numero molto ridotto di coppie ottimali.

4.1.2 Secondo test

Effettuiamo ora un nuovo esperimento che nasce dall'osservazione dei dati mostrati nelle tabelle precedenti. Infatti, notiamo che nei nostri problemi test non vi sono in genere problemi di convergenza del procedimento di identificazione dei parametri: anche se la distanza tra la coppia di parametri iniziale e la coppia ottimale risulta elevata, quasi sempre l'algoritmo conduce ad un'adeguata approssimazione dei valori esatti. Di conseguenza, siamo interessati ad evidenziare i casi particolari in cui, invece, la procedura iterativa fallisce. Supponiamo di esaminare uno dei nostri problemi test con i parametri otti-

mali fissati. Proviamo a ricostruire numericamente la superficie $s = F(p, q)$ ottenuta dalla funzione residuo al variare di (p, q) :

$$F(p, q) = \|\mathbf{f}(p, q)\|_2^2 = \|\mathbf{u}(p, q) - \hat{\mathbf{z}}\|_2^2$$

(con le notazioni utilizzate in precedenza).

I risultati numerici dovrebbero confermare, in genere, il seguente comportamento. Se assegniamo una coppia di parametri iniziali (p_0, q_0) in cui il corrispondente valore $s_0 = F(p_0, q_0)$ è elevato, dovrebbe sussistere una ridotta probabilità di convergenza ai valori esatti. Viceversa, se s_0 non è di grandi dimensioni, quasi in ogni caso l'algoritmo dovrebbe terminare con successo.

Svolgiamo il seguente test: dato il problema (1R) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$, disegniamo alcune linee di livello della superficie ottenuta dalla funzione residuo. Segniamo nello stesso grafico (p, q) alcune coppie (p_0, q_0) (generate in modo pseudocasuale). Eseguiamo il procedimento di identificazione dei parametri con tali (p_0, q_0) come coppie iniziali. Tracciamo un punto o un quadrato nel caso in cui rispettivamente l'algoritmo abbia successo oppure fallisca (supponiamo che l'algoritmo abbia successo qualora si ottenga un'approssimazione della coppia dei parametri esatti al più dell'ordine di $1e-2$).

Riportiamo anche il grafico della superficie del residuo in un intorno relativamente ridotto di $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$.

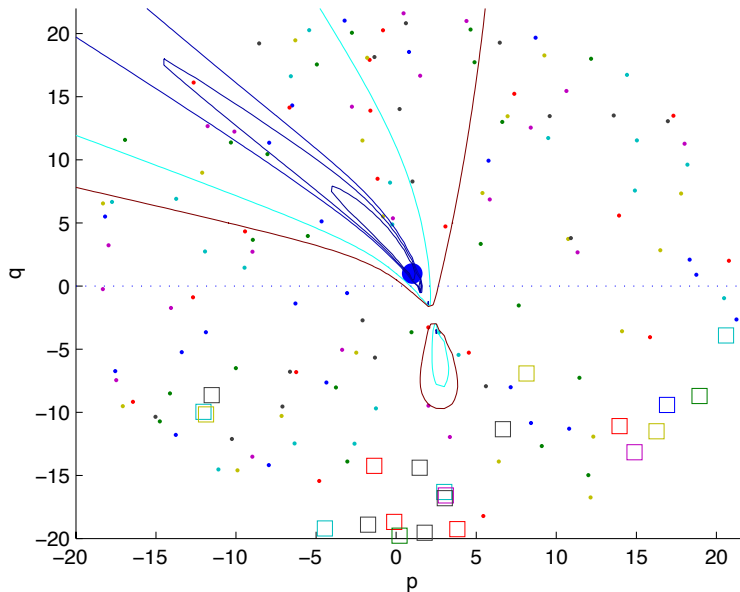


Figura 4.1: Linee di livello del residuo per (1R) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$.

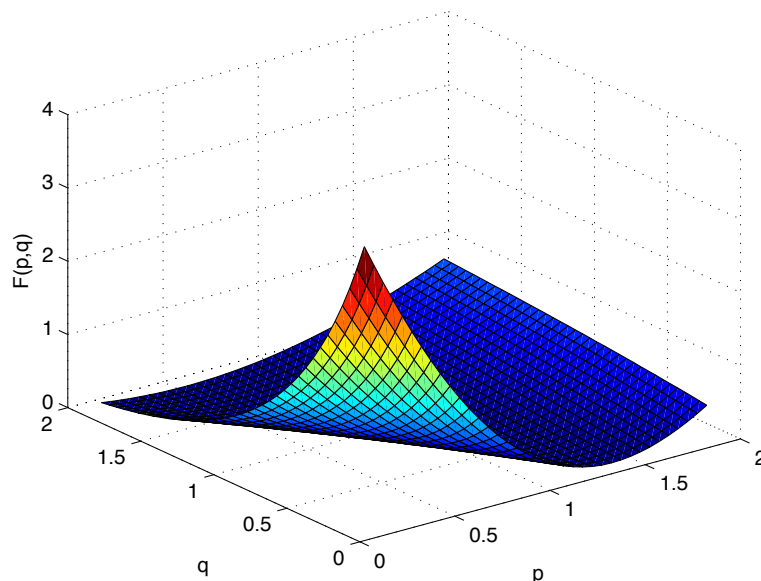


Figura 4.2: Superficie del residuo per (1R) intorno a $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$.

Nel grafico 4.1 prendiamo in considerazione come possibili coppie di parametri iniziali (p_0, q_0) anche quelle con $q_0 \leq 0$: in tali casi, come visto in precedenza, i risultati teorici non garantiscono la risoluzione dei problemi ai limiti costruiti nel corso dell'identificazione dei parametri. Notiamo anche che, da quanto si deduce dalle linee di livello, la superficie del residuo in quella regione viene disegnata dal calcolatore come estremamente irregolare.¹ Nella regione dei (p, q) con $q > 0$, invece, come mostrato dal grafico 4.2, la superficie ha un andamento perfettamente regolare.

In molti dei casi in cui $q_0 \leq 0$ notiamo che l'algoritmo di identificazione fallisce. D'altra parte, osserviamo che, in parecchi altri, l'algoritmo termina comunque con successo (in modo particolare quando i parametri iniziali non si discostano eccessivamente da quelli esatti). Quando $q_0 > 0$, invece, l'algoritmo applicato al problema test in esame permette di approssimare i parametri ottimali anche se la coppia iniziale (p_0, q_0) risulta molto distante dai valori esatti e il residuo corrispondente $F(p_0, q_0)$ è notevolmente elevato.

Ripetiamo il test sul problema (2DR) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$, riportando anche in questo caso i grafici delle linee di livello e della superficie intorno a (\hat{p}, \hat{q}) .

¹In effetti, il residuo $F(p, q)$ viene calcolato risolvendo un problema ai limiti con parametri (p, q) le cui garanzie di convergenza decadono per $q \leq 0$.

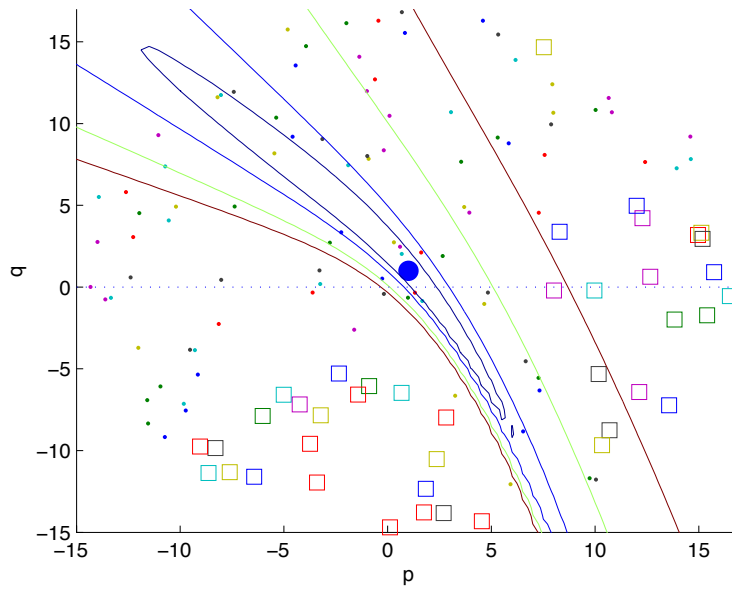


Figura 4.3: Linee di livello del residuo per (2DR) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$.

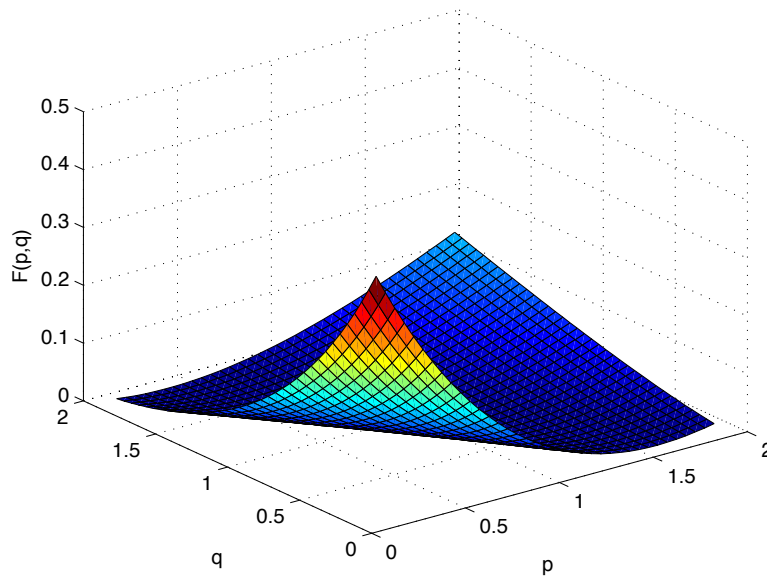


Figura 4.4: Superficie del residuo per (2DR) intorno a $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$.

La superficie del residuo intorno a $(\hat{p}, \hat{q}) = (1, 1)$ ha un andamento simile al caso precedente. Tuttavia, per $q \leq 0$, $F(p, q)$, osservando le linee di livello, sembra mantenere un certo grado di regolarità.

Per questo particolare tipo di problema notiamo che, se il residuo corrispondente ai parametri iniziali scelti (p_0, q_0) non è abbastanza ridotto, l'algoritmo di identificazione spesso fallisce.

Dal confronto tra le osservazioni qualitative che possiamo trarre da questi ultimi due test si deduce che le garanzie di convergenza dell'algoritmo di identificazione possono variare notevolmente a seconda del problema in esame.

4.1.3 Terzo test

Descriviamo un nuovo test su ciascuno dei problemi ai limiti illustrati, fissando in ogni caso come coppia di parametri ottimali $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$. Nelle prove precedenti abbiamo fissato a $N=200$ il numero di nodi di discretizzazione per la risoluzione dei problemi ai limiti generati nel procedimento di identificazione. Proviamo a variare il numero N per studiare i risultati che comporta la scelta di N in termini di errori, costi computazionali e tempi di esecuzione². Per ogni problema riportiamo i risultati ottenuti in una tabella.

| Num. N di nodi di discr. | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto risp. a $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ | Num. totale di passi | Tempo di esecuzione |
|---|--|----------------------|---------------------|
| $(p_0, q_0) = (3.699590, 6.461646)$ (4.516161 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 3.400233e-3 | 5 | 0.0141 |
| 50 | 5.664596e-4 | 5 | 0.0172 |
| 200 | 9.081991e-6 | 5 | 0.0344 |
| 500 | 2.616196e-5 | 5 | 0.0734 |
| $(p_0, q_0) = (4.509697, 9.023235)$ (7.183663 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 3.452471e-3 | 6 | 0.0172 |
| 50 | 6.156194e-4 | 6 | 0.0219 |
| 200 | 5.586713e-5 | 6 | 0.0453 |
| 500 | 2.302407e-5 | 6 | 0.0906 |
| $(p_0, q_0) = (13.249485, 3.916816)$ (1.042718e+1 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 3.432623e-3 | 10 | 0.0250 |
| 50 | 5.944790e-4 | 10 | 0.0328 |
| 200 | 3.862773e-5 | 14 | 0.0828 |
| 500 | 5.784483e-6 | 14 | 0.1672 |

Tabella 4.6: Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (1D) al variare di N .

²Stimiamo questi tempi facendo riferimento al comando MATLAB `cputime`.

| Num. N di nodi di discr. | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto risp. a $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ | Num. totale di passi | Tempo di esecuzione |
|---|--|----------------------|---------------------|
| $(p_0, q_0) = (3.699590, 6.461646)$ (4.516161 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.418954e-3 | 6 | 0.0172 |
| 50 | 2.342937e-4 | 6 | 0.0219 |
| 200 | 1.525267e-5 | 6 | 0.0422 |
| 500 | 2.855538e-6 | 6 | 0.0781 |
| $(p_0, q_0) = (4.509697, 9.023235)$ (7.183663 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.418528e-3 | 7 | 0.0187 |
| 50 | 2.338879e-4 | 7 | 0.0250 |
| 200 | 1.483985e-5 | 7 | 0.0500 |
| 500 | 2.390076e-6 | 7 | 0.1031 |
| $(p_0, q_0) = (13.249485, 3.916816)$ (1.042718e+1 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.418560e-3 | 8 | 0.0234 |
| 50 | 2.339238e-4 | 8 | 0.0297 |
| 200 | 1.487662e-5 | 8 | 0.0656 |
| 500 | 2.426893e-6 | 8 | 0.1328 |

Tabella 4.7: Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (1R) al variare di N .

| Num. N di nodi di discr. | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto risp. a $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ | Num. totale di passi | Tempo di esecuzione |
|---|--|----------------------|---------------------|
| $(p_0, q_0) = (3.699590, 6.461646)$ (4.516161 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.223388e-2 | 5 | 0.0156 |
| 50 | 2.093565e-3 | 5 | 0.0172 |
| 200 | 1.386290e-4 | 5 | 0.0359 |
| 500 | 2.531884e-5 | 5 | 0.0719 |
| $(p_0, q_0) = (4.509697, 9.023235)$ (7.183663 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.223326e-2 | 6 | 0.0156 |
| 50 | 2.100550e-3 | 6 | 0.0187 |
| 200 | 1.471639e-4 | 6 | 0.0391 |
| 500 | 3.402889e-5 | 6 | 0.0766 |
| $(p_0, q_0) = (13.249485, 3.916816)$ (1.042718e+1 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.222904e-2 | 12 | 0.0297 |
| 50 | 2.090468e-3 | 10 | 0.0359 |
| 200 | 1.337291e-4 | 10 | 0.0703 |
| 500 | 2.031753e-5 | 10 | 0.1375 |

Tabella 4.8: Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (2D) al variare di N .

| Num. N di nodi di discr. | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto risp. a $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ | Num. totale di passi | Tempo di esecuzione |
|---|---|-------------------------|------------------------|
| $(p_0, q_0) = (3.699590, 6.461646)$ (4.516161 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.058202e-3 | 6 | 0.0234 |
| 50 | 1.735274e-4 | 6 | 0.0234 |
| 200 | 1.041883e-5 | 6 | 0.0422 |
| 500 | 1.175215e-6 | 6 | 0.0797 |
| $(p_0, q_0) = (4.509697, 9.023235)$ (7.183663 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.057517e-3 | 6 | 0.0172 |
| 50 | 1.728234e-4 | 6 | 0.0187 |
| 200 | 9.732412e-6 | 6 | 0.0375 |
| 500 | 8.684351e-7 | 6 | 0.0797 |
| $(p_0, q_0) = (13.249485, 3.916816)$ (1.042718e+1 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.057124e-3 | 10 | 0.0281 |
| 50 | 1.724764e-4 | 10 | 0.0344 |
| 200 | 9.388301e-6 | 10 | 0.0641 |
| 500 | 4.986738e-7 | 10 | 0.1266 |

Tabella 4.9: Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (2R) al variare di N .

| Num. N di nodi di discr. | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto risp. a $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ | Num. totale di passi | Tempo di esecuzione |
|---|---|-------------------------|------------------------|
| $(p_0, q_0) = (3.699590, 6.461646)$ (4.516161 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.206681e-2 | 6 | 0.0187 |
| 50 | 2.059431e-3 | 6 | 0.0203 |
| 200 | 1.334742e-4 | 6 | 0.0406 |
| 500 | 2.191039e-5 | 6 | 0.0813 |
| $(p_0, q_0) = (4.509697, 9.023235)$ (7.183663 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.209201e-2 | 5 | 0.0141 |
| 50 | 2.082997e-3 | 5 | 0.0141 |
| 200 | 1.568383e-4 | 5 | 0.0359 |
| 500 | 4.551373e-5 | 5 | 0.0641 |
| $(p_0, q_0) = (13.249485, 3.916816)$ (1.042718e+1 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 20 | 1.202639e-2 | 12 | 0.0297 |
| 50 | 2.030381e-3 | 12 | 0.0391 |
| 200 | 1.061492e-4 | 12 | 0.0750 |
| 500 | 6.475276e-6 | 12 | 0.1516 |

Tabella 4.10: Identificazione di $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ per (2DR) al variare di N .

Dalle tabelle si deduce che, quanto maggiore è il numero N di nodi, tanto è più accurata l'approssimazione dei parametri ottimali. Osservando i tempi di esecuzione si nota, d'altra parte, che ad un aumento del numero dei nodi corrisponde un tempo di esecuzione dei passi algoritmici più elevato. Questo fenomeno è dovuto al fatto che ogni matrice ottenuta moltiplicando la Jacobiana generata in ogni singolo passo per la sua trasposta ha dimensioni pari a $O(N^2)$; di conseguenza, un maggior numero di nodi comporta la risoluzione numerica di sistemi di equazioni lineari di dimensioni più elevate.

4.1.4 Quarto test

Generalmente, i dati sperimentali, a causa degli errori di misurazione legati agli strumenti di osservazione e alle condizioni in cui vengono effettuate le prove, non risultano esatti. Infatti, essi vengono forniti solitamente con un certo grado di incertezza.

Proviamo a riprodurre gli errori sperimentali perturbando il vettore delle misure esatto $(\hat{y}(x_1), \dots, \hat{y}(x_K))$: aggiungiamo un vettore $\delta \cdot (u_1, \dots, u_K)$, con (u_1, \dots, u_K) vettore casuale di norma 1 e δ un numero reale positivo di dimensioni molto ridotte. Sostituiamo il vettore delle misure esatto con il vettore $(\hat{y}(x_1), \dots, \hat{y}(x_K)) + \delta \cdot (u_1, \dots, u_K)$. In questo modo abbiamo effettuato una perturbazione sulle misure con un rumore casuale di ordine pari a δ . Siamo interessati a vedere come l'algoritmo di identificazione dei parametri è in grado di approssimare i parametri ottimali nonostante la perturbazione sulle misure.

A titolo di esempio, applichiamo l'esperimento descritto al problema (2D) con parametri ottimali $(\hat{p}, \hat{q}) = (-1, 4)$ e riportiamo i dati ottenuti nella tabella della pagina seguente.

Esaminando questa tabella si deduce che l'introduzione di rumore nelle misure non produce notevoli cambiamenti in termini di costi computazionali, ma comporta un errore di approssimazione dei parametri ottimali più elevato. Quindi, l'algoritmo di identificazione sembra procedere alla ricerca di una coppia di parametri ottimali perturbata che differisce in modo trascurabile dalla reale coppia ottimale soltanto se il rumore nelle misure è estremamente ridotto. Da quanto risulta dal nostro test, dunque, l'introduzione di rumore deve essere affrontata con attenzione in quanto può portare alla determinazione di parametri ottimali notevolmente differenti da quelli esatti.

| Rumore δ | Errore in $\ \cdot\ _2$ ottenuto risp. a $(\hat{p}, \hat{q}) = (3, 2)$ | Num. totale di passi | Num. di cond. medio delle Jac. * Jac. trasposte |
|--|---|-------------------------|--|
| $(p_0, q_0) = (-5, 4.6)$ (4.044750 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (-1, 4)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 0 | 5.006965e-5 | 5 | 3.159753 |
| 1e-5 | 1.976566e-4 | 5 | 3.159611 |
| 1e-4 | 1.532853e-3 | 5 | 3.158333 |
| 1e-3 | 1.487034e-2 | 5 | 3.145595 |
| 1e-2 | 1.465887e-1 | 5 | 3.022031 |
| 1e-1 | 1.319388 | 5 | 2.080422 |
| $(p_0, q_0) = (3.5, 9.8)$ (7.340981 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (-1, 4)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 0 | 5.980486e-5 | 16 | 2.748993e+3 |
| 1e-5 | 2.080229e-4 | 16 | 2.748935e+3 |
| 1e-4 | 1.542507e-3 | 16 | 2.748413e+3 |
| 1e-3 | 1.487421e-2 | 16 | 2.743259e+3 |
| 1e-2 | 1.465902e-1 | 15 | 2.704411e+3 |
| 1e-1 | 1.316915 | 17 | 3.743832e+3 |
| $(p_0, q_0) = (5.4, 12.2)$ (1.040192e+1 dist. da $(\hat{p}, \hat{q}) = (-1, 4)$ in $\ \cdot\ _2$) | | | |
| 0 | 5.734062e-5 | 40 | 1.122571e+3 |
| 1e-5 | 2.056829e-4 | 40 | 1.122772e+3 |
| 1e-4 | 1.540634e-3 | 40 | 1.124578e+3 |
| 1e-3 | 1.487413e-2 | 40 | 1.142902e+3 |
| 1e-2 | 1.465181e-1 | 41 | 1.360545e+3 |
| 1e-1 | 1.317686 | 34 | 2.991485e+3 |

Tabella 4.11: Identificazione dei parametri con aggiunta di rumore sulle misure per il problema (2D) con $(\hat{p}, \hat{q}) = (-1, 4)$.

4.2 Un'equazione di convezione - diffusione - reazione stazionaria

Consideriamo la seguente classe di equazioni alle derivate parziali, note in genere come *equazioni di convezione-diffusione-reazione*:

$$\frac{\partial y(t, \mathbf{x})}{\partial t} + \tilde{\beta} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} y(t, \mathbf{x}) - \operatorname{div}(D(t, \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} y(t, \mathbf{x})) + s(y(t, \mathbf{x})) = f(t, \mathbf{x}). \quad (4.1)$$

Queste equazioni sono spesso associate a modelli di moti collettivi di particelle comuni in molti processi di diffusione chimici e biologici.

In genere, nelle equazioni, $y(t, \mathbf{x})$ rappresenta la concentrazione delle particelle in (t, \mathbf{x}) ($t \geq 0, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, ove $n = 1, 2, 3$). $-D(t, \mathbf{x}) \nabla_{\mathbf{x}} y(t, \mathbf{x})$ è il flusso di particelle in (t, \mathbf{x}) (numero di particelle che attraversano un unità di area in \mathbf{x} per unità di tempo), mentre il fattore di proporzionalità $D(t, \mathbf{x})$ è il coefficiente di diffusione. $\tilde{\beta} \in \mathbb{R}^n$ ($n = 1, 2, 3$) è il vettore, supposto costante, che rappresenta la velocità relativa al movimento di massa nel mezzo in cui avviene il processo di diffusione. Infine, $s(y)$ è un termine di reazione e la presenza di $f(t, \mathbf{x})$ modella l'eventualità in cui la quantità di particelle che diffonde possa essere aggiunta o rimossa.

Concentriamo l'attenzione sull'equazione stazionaria associata:

$$\tilde{\beta} \cdot \nabla y(\mathbf{x}) - \operatorname{div}(D(\mathbf{x}) \nabla y(\mathbf{x})) + s(y(\mathbf{x})) = f(\mathbf{x}).$$

Supponiamo che $\mathbf{x} \in \Omega$, con Ω dominio di \mathbb{R}^n ($n = 1, 2, 3$) e che $s(y)$ sia un termine di reazione di tipo Arrhenius, cioè della forma:

$$s(y(\mathbf{x})) = A \exp\left(-\frac{E}{d - y(\mathbf{x})}\right) y(\mathbf{x})(c - y(\mathbf{x})), \quad (4.2)$$

ove $A, E, c, d \in \mathbb{R}$ sono costanti.

Supponiamo, inoltre, che siano assegnate la condizione al bordo di Dirichlet $y = \hat{y}$ su un sottoinsieme $\Gamma \subset \partial\Omega$ e la condizione al bordo di Neumann $\partial_n y = 0$ su $\partial\Omega \setminus \Gamma$.

Il problema che esaminiamo consiste nello stimare la coppia di parametri $(\hat{p}, \hat{q}) = (\tilde{\beta}, \log(A))$ essendo note alcune misure sperimentali effettuate sulla soluzione y (di conseguenza esplicitiamo la dipendenza di s anche da A).

Concentriamo l'attenzione esclusivamente sul caso unidimensionale; otteniamo, così, l'equazione differenziale ordinaria del secondo ordine:

$$\tilde{\beta} \frac{\partial y(x)}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial y(x)}{\partial x} \right) + s(A, y(x)) = f(x).$$

Supponiamo, inoltre, che D sia un coefficiente costante e che $f \equiv 1$; in questo modo l'equazione diventa:

$$-Dy''(x) + \tilde{\beta}y'(x) + s(A, y(x)) = 1.$$

In definitiva, otteniamo un problema ai limiti della forma seguente:

$$\begin{cases} -Dy''(x) + \tilde{\beta}y'(x) + s(A, y(x)) = 1 \\ y(a) = y_a \\ y'(b) = 0, \end{cases} \quad a < x < b. \quad (4.3)$$

Per semplificare ulteriormente il problema ai limiti da esaminare, sostituiamo il termine $s(A, y(x))$ con la sua linearizzazione ottenuta dallo sviluppo di MacLaurin arrestato al primo ordine. Essendo:

$$s(A, z) = \left(\frac{\partial s(A, 0)}{\partial z} \right) z + o(z^2) = A c e^{-E/d} z + o(z^2),$$

il problema ai limiti a questo punto diventa lineare:

$$\begin{cases} -Dy''(x) + \tilde{\beta}y'(x) + A c e^{-E/d} y(x) = 1 \\ y(a) = y_a \\ y'(b) = 0, \end{cases} \quad a < x < b. \quad (\text{CDR})$$

Di conseguenza, possiamo sperimentare il procedimento già descritto di identificazione dei parametri.

Effettuiamo degli esperimenti numerici nel caso in cui le costanti valgano rispettivamente $D = 1e-6$, $c = y_a = 0.2$, $d = 0.24$, $a = 0$, $b = 0.035$. Fissiamo, inoltre, a $N = 800$ il numero di nodi di discretizzazione su cui risolvere numericamente i problemi ai limiti generati nel corso della procedura di identificazione dei parametri.

Supponiamo che i parametri ottimali valgano:

$$(\hat{p}, \hat{q}) = (\tilde{\beta}, \log(A)) = (0.2, 6.9).$$

Generiamo il vettore delle misure nel modo seguente. Risolviamo il problema ai limiti con i parametri esatti e selezioniamo come misure sperimentali alcuni punti $(x_i, y(x_i))$ della soluzione discretizzata ottenuta (per le nostre prove, scegliamo comunque gli x_i come punti opportunamente equispaziati sull'intervallo $[0, 0.035]$).

Testiamo l'algoritmo di identificazione dei parametri variando la coppia di parametri iniziali $(p_0, q_0) = (\tilde{\beta}_0, \log(A_0))$ e riportiamo i risultati ottenuti nella tabella seguente.

| $(\tilde{\beta}_0, \log(A_0))$ | $ \tilde{\beta} - \tilde{\beta}_0 $ | $ \log(A/A_0) $ | Errore ass. di $\tilde{\beta}$ ottenuto | Errore ass. di $\log(A)$ ottenuto |
|--------------------------------|-------------------------------------|-----------------|---|---|
| (0.194576,6.717326) | 5.424090e-3 | 1.826737e-1 | 5.424034e-3 | 1.551857e-7 |
| (0.168122,6.673981) | 3.187804e-2 | 2.260189e-1 | 3.187851e-2 | 9.353445e-7 |
| (0.146813,7.099761) | 5.318725e-2 | 1.997611e-1 | 5.318740e-2 | 5.767828e-7 |
| (0.123793,6.810031) | 7.620715e-2 | 8.996920e-2 | 7.620711e-2 | 8.590190e-8 |
| (0.142802,7.465652) | 5.719827e-2 | 5.656524e-1 | 5.720056e-2 | 1.393276e-5 |
| (0.327415,6.094038) | 1.274152e-1 | 8.059624e-1 | 1.274150e-1 | 9.441343e-7 |
| (0.140402,8.497508) | 5.959793e-2 | 1.597508 | 5.960056e-2 | 7.241684e-6 |
| (0.160955,5.135796) | 3.904477e-2 | 1.764204 | 3.904465e-2 | 3.726845e-7 |
| (0.400490,7.686753) | 2.004901e-1 | 7.867528e-1 | 2.004900e-1 | 6.308887e-7 |
| (-0.043748,6.550052) | 2.437476e-1 | 3.499482e-1 | 2.437488e-1 | 4.429898e-6 |
| (0.409744,5.228958) | 2.097444e-1 | 1.671042 | 2.097442e-1 | 1.001845e-6 |
| (-0.065358,5.694053) | 2.653579e-1 | 1.205947 | 2.653636e-1 | 1.611533e-5 |
| (0.147253,10.379231) | 5.274667e-2 | 3.479231 | 5.274851e-2 | 4.014089e-6 |
| (0.389740,3.829295) | 1.897400e-1 | 3.070705 | 5.755994 | 4.404577 |
| (0.608746,6.827876) | 4.087464e-1 | 7.212427e-2 | 4.087454e-1 | 1.071729e-5 |
| (-0.221362,7.818151) | 4.213621e-1 | 9.181510e-1 | 4.213622e-1 | 8.048884e-7 |
| (0.307131,11.253938) | 1.071308e-1 | 4.353938 | 1.071299e-1 | 2.016664e-6 |
| (0.017964,11.175784) | 1.820359e-1 | 4.275784 | 8.753891e-2 | 4.275758 |
| (0.194222,11.873636) | 5.777542e-3 | 4.973636 | 4.662268 | 3.902931 |
| (0.029192,11.805034) | 1.708083e-1 | 4.905034 | 1.708097e-1 | 3.092063e-6 |

Tabella 4.12: Identificazione dei parametri per il problema (CDR).

Dalla tabella si deduce che l'approssimazione del parametro $\tilde{\beta}$ risulta particolarmente delicata, diversamente da $\log(A)$ al quale, quando l'algoritmo di identificazione ha successo, ci si avvicina con notevole accuratezza.

Concludiamo i nostri test numerici provando a perturbare il vettore delle misure $y(x_i)$ con un rumore casuale procedendo come nell'esperimento del paragrafo precedente. Confrontiamo i risultati provando come coppie di parametri iniziali alcune di quelle esaminate nella tabella appena mostrata.

| Rumore δ | Errore ass. di $\tilde{\beta}$ ottenuto | Errore ass. di $\log(A)$ ottenuto |
|---|---|---|
| $(\tilde{\beta}_0, \log(A_0)) = (0.194576, 6.717326)$ | | |
| 0 | 5.424034e-003 | 1.551857e-007 |
| 1e-4 | 5.294506e-003 | 9.088981e-004 |
| 1e-3 | 4.140706e-003 | 9.052467e-003 |
| 1e-2 | 6.644706e-003 | 8.818271e-002 |
| 1e-1 | 6.786507e-002 | 6.907566e-001 |
| $(\tilde{\beta}_0, \log(A_0)) = (0.168122, 6.673981)$ | | |
| 0 | 3.187851e-002 | 9.353445e-007 |
| 1e-4 | 3.174897e-002 | 9.078525e-004 |
| 1e-3 | 3.059165e-002 | 9.061982e-003 |
| 1e-2 | 1.981114e-002 | 8.819512e-002 |
| 1e-1 | 4.140538e-002 | 6.907966e-001 |
| $(\tilde{\beta}_0, \log(A_0)) = (0.146813, 7.099761)$ | | |
| 0 | 5.318740e-002 | 5.767828e-007 |
| 1e-4 | 5.305788e-002 | 9.081690e-004 |
| 1e-3 | 5.190067e-002 | 9.062007e-003 |
| 1e-2 | 4.112078e-002 | 8.819699e-002 |
| 1e-1 | 2.009627e-002 | 6.907883e-001 |

Tabella 4.13: Identificazione dei parametri con aggiunta di rumore sulle misure per il problema (CDR).

Osservando questa tabella è interessante notare che l'aggiunta del rumore ha conseguenze negative soprattutto sulla convergenza del parametro $\log(A)$, mentre l'approssimazione di $\tilde{\beta}$, come già notato in precedenza, risulta in ogni caso particolarmente critica.

4.3 Conclusioni

Dai test effettuati sui problemi discussi nella prima parte del capitolo si possono trarre alcune interessanti osservazioni, molte delle quali trovano sostanzialmente una conferma anche nelle prove effettuate sul problema (CDR).

Nel primo test, si analizza la caratteristica dei particolari problemi ai limiti in esame: il valore dei parametri ottimali non sembra influire in modo rilevante sull'efficienza e sulla precisione dell'algoritmo di identificazione.

Il secondo test evidenzia il fatto che generalmente è opportuno esaminare in ogni caso la superficie ottenuta dal residuo $F(p, q)$ per tentare una stima qualitativa di un intorno in cui sia garantita la convergenza dei parametri.

Dal terzo e dal quarto test, infine, si deduce che la scelta del numero di nodi di discretizzazione dell'intervallo e l'entità dell'eventuale rumore presente nei dati sperimentali sono elementi che influiscono in maniera non trascurabile sulla convergenza e sui costi computazionali dell'algoritmo di identificazione.

Tuttavia, gli esperimenti svolti mettono anche in luce il fatto che l'applicazione dell'algoritmo di identificazione dei parametri può essere spesso delicata; in particolare, il successo nell'approssimazione dei parametri ottimali dipende notevolmente dallo specifico problema che viene preso in esame.

Bibliografia

- [1] H. T. Banks, K. Kunisch, *Estimation techniques for distributed parameter systems*, Birkhäuser, Boston, 1989
- [2] R. Becker, M. Braack, B. Vexler, *Numerical parameter estimation for chemical models in multidimensional reactive flows*, Combustion Theory and Modelling, Vol. 8, Nr. 4, p. 661-682, Bristol, 2004
<http://www-m1.mathematik.tu-muenchen.de/foswiki/pub/M1/Lehrstuhl/BorisVexlerPublicPapers/BeckerBraackVexler2004.pdf>
- [3] V. Comincioli, *Biomatematica: interazioni tra le scienze della vita e la matematica*, Università degli Studi di Pavia, 2004
<http://www.multimediacampus.it/download/biomatematica1.pdf>
- [4] P. E. Frandsen, K. Jonasson, H.B. Nielsen, O. Tingleff, *Unconstrained optimization*, IMM - Informatics and Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, 2004
http://www2.imm.dtu.dk/pubdb/views/edoc_download.php/3217/pdf/imm3217.pdf
- [5] I. Griva, S. G. Nash, A. Sofer, *Linear and nonlinear optimization*, SIAM - Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2009
- [6] H. B. Keller, *Numerical methods for two-point boundary-value problems*, Blaisdell, Waltham, 1968
- [7] K. Madsen, H. B. Nielsen, O. Tingleff, *Methods for non-linear least squares problems*, Informatics and Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, 2004
http://www2.imm.dtu.dk/pubdb/views/edoc_download.php/3215/pdf/imm3215.pdf
- [8] J. Nocedal, S. J. Wright, *Numerical optimization*, Springer-Verlag, New York, 1999

- [9] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri, *Matematica numerica*, Springer-Verlag, Milano, 2008
- [10] A. Quarteroni, F. Saleri, *Introduzione al calcolo scientifico*, Springer-Verlag, Milano, 2006

Ringraziamenti

Un ringraziamento particolare va alla Prof.ssa Loli Piccolomini e alla Prof.ssa Zama, delle quali disponibilità e cortesia non sono inferiori alla competenza (benché sia una frase fatta, è la verità).

Ringrazio, inoltre, quelle persone (compresi molti di quelli che potrebbero leggere questa pagina) che, più o meno consapevolmente, meritano di ricevere la frase *grazie a tutti*.

Dedico questa tesi alla mia famiglia, in modo particolare a mia madre, che mi ha sempre esortato a non farmi cadere le braccia, e a mio padre, che mi guarda contento da lassù.