Bollettino Unione Matematica Italiana

Sezione A – La Matematica nella Società e nella Cultura

Gabriella Margaria

Applicazioni dell'algebra differenziale all'identificabilità strutturale di modelli non lineari

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Serie 8, Vol. **3-A**—*La Matematica nella Società e nella Cultura* (2000), n.3, p. 379–382.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=BUMI_2000_8_3A_3_379_0>

Bollettino dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2000.

Bollettino U. M. I.
La Matematica nella Società e nella Cultura
Serie 8, Vol. III-A, Dicembre 2000, 379-382

Applicazioni dell'algebra differenziale all'identificabilità strutturale di modelli non lineari.

Gabriella Margaria

1. – Introduzione.

L'identificabilità strutturale è una condizione necessaria per la stima dei parametri ignoti di un modello basata sui dati effettivi di input-output e le tecniche utilizzabili per determinarla differiscono a seconda che il modello sia o non sia lineare. Infatti molti dei metodi noti nel caso di sistemi lineari (si veda [9]) non sono applicabili al caso di modelli non lineari. Nella tesi si studiano i modelli non lineari definiti dalle equazioni

$$(1) \qquad \begin{cases} x'(t, p) = f(x(t, p), u(t), p) \\ y(t, p) \;\;= g(x(t, p), p) \\ x(0, p) \;= x_0(p) \end{cases}$$

dove $x(t, p) \in \mathbf{R}^n$, $u(t) \in \mathbf{R}^s$ ed $y(t, p) \in \mathbf{R}^m$ sono rispettivamente le variabili di stato, le funzioni input e le osservazioni, e dove ciascuna componente dei vettori f e g è un polinomio nelle variabili indicate. Il vettore dei parametri è $p \in \Omega \subseteq \mathbf{R}^l$ e $x_0(p)$ è il vettore delle condizioni iniziali. Tali sistemi trovano applicazione nei modelli compartimentali [9].

Una definizione classica di identificabilità strutturale è la seguente. Si consideri la funzione di input-output, $\mathcal{C}_p^{x_0(p)}: u(\cdot) \mapsto y(\cdot, p)$. I parametri p and $\overline{p}$ si dicono equivalenti, $p \sim \overline{p}$, se e solo se $\mathcal{C}_p^{x_0(p)}(u) = \mathcal{C}_{\overline{p}}^{x_0(\overline{p})}(u)$ per tutti gli $u \in \mathcal{U} \subseteq \mathbf{R}^s$. Il modello (1) si dice globalmente identificabile in p se $p \sim \overline{p}$ per tutti i $\overline{p} \in \Omega$ implica $p = \overline{p}$ e si dice localmente identificabile in p se esiste, rispetto alla topologia euclidea, un aperto W, $p \in W \subseteq \Omega$ tale che $p \sim \overline{p}$ per tutti i $\overline{p} \in W$ implica $p = \overline{p}$. Altrimenti il modello (1) è non identificabile in p (si veda [9]). Una equivalente definizione di identifiabilità, in termini algebrici, viene data in seguito.

Negli ultimi anni, l'algebra differenziale ed in particolare il metodo degli insiemi caratteristici sono stati applicati allo studio dei sistemi dinamici. Una breve introduzione è contenuta nella sezione 2. L'algoritmo per il calcolo di insiemi caratteristici è implementato nel pacchetto *diffalg* di Maple [1] per anelli differenziali e nel pacchetto *charset* [10] per anelli commutativi. In sistemi complessi, come ad esempio il *two-strain model* (modello che descrive la trasmissione di due speci di un germe patogeno), non è stato possible calcolare l'insieme caratteristico usando *diffalg*. Nella tesi si fornisce un alternativo algoritmo, implentato in

Maple e basato sul pacchetto *charset*, che si utilizza per determinare l'identificabilità dei parametri di alcuni modelli di tipo (1) presenti in letteratura.

Un'altro metodo possibile per modelli non lineari, il metodo della serie di Taylor (*Taylor series approach*) [7], esamina le derivate delle osservazioni calcolate in $t = 0$ ed è spiegato nella sezione 3. Aumentando l'ordine di derivazione si ottengono espressioni sempre più complesse. Il problema è quindi conoscere a priori il numero minimo di derivate che è necessario considerare. Sono noti alcune maggiorazioni per sistemi lineari ed omogenei. Nella tesi si utilizza il metodo degli insiemi caratteristici per determinare una maggiorazione al numero massimo di derivate delle osservazioni indipendente dalla linearità o dalla omogeneità del vettore f.

I sistemi di tipo (1) non coprono tutta la gamma di modelli di interesse pratico, per esempio ci sono i modelli con frazioni, dove le componenti dei vettori f o g sono frazioni di polinomi. Questi modelli si possono trasformare in un sistema polinomiale se si introducono nuove variabili di stato, una per ogni frazione, e si riscrive il modello (si veda [3]).

2. – Insiemi caratteristici.

Per una introduzione all'algebra differenziale si veda [8]. L'anello differenziale $\mathbf{R}\{x_1, \ldots, x_n\}$ è l'anello nelle indeterminate $x_1, x_1', \ldots, x_n, x_n', \ldots$ dotato della usuale operazione di derivazione. Un *ranking* delle variabili $(x_1, \ldots, x_n)$ è un ordinamento totale dell'insieme di tutte le derivate $x_i^{(j)}$ tale che $x_i^{(j)} < x_i^{(j+k)}$ e $x_i^{(m)} < x_j^{(l)}$ implica $x_i^{(m+k)} < x_j^{(l+k)}$. Per brevità di notazione si indica con $x < y$ il *ranking*

$$x_1 < \ldots < x_n < y_1 < \ldots < y_m < x_1' < \ldots < x_n' < y_1' < \ldots$$

e con $x \ll y$ il *ranking*

$$x_1 < \ldots < x_n < x_1' < \ldots < y_1 < \ldots < y_m < y_1' < \ldots .$$

Dato un *ranking* ed un polinomio differenziale f in $\mathbf{R}\{x_1, \ldots, x_n\}$, il *leader* v di f è la derivata che in f ha ordine più alto rispetto al *ranking*. Il polinomio differenziale f si può scrivere come polinomio in v nel modo sequente $f = \sum_{i=0}^{d} I_i v^i$, dove d è il grado di v in f. Dati due polinomi differenziali f e g, g è parzialmente ridotto rispetto a f se in g non compare alcuna derivata di v ed è ridotto rispetto a f se il grado di v in g è minore di d. Un insieme di polinomi differenziali $\mathcal{A}$ si dice *autoridotto* se $\mathcal{A} \cap \mathbf{R} = \emptyset$ ed ogni polinomio in $\mathcal{A}$ è ridotto rispetto a tutti gli altri elementi. Un sottoinsieme $\mathcal{A}$ di un insieme E è un *insieme caratteristico* se E non contiene alcun elemento ridotto rispetto a $\mathcal{A}$.

Dato il sistema (1) è naturale considerare l'ideale differenziale I in $\mathbf{R}\{u, x, y, p\}$ generato dai seguenti polinomi differenziali

$$x'(t, p) - f(t, x, p, u),\ p',\ y(t, p) - g(t, x, p, u) \tag{2}$$

dove si aggiungono i polinomi differenziali p' per l'ipotesi di parametri indipendenti dal tempo.

Si può formulare l'identificabilità strutturale come segue (si veda [4]). Il vettore p è *localmente identificabile* se, per ogni parametro p_i, $i = 1, \ldots, l$, esiste nell'ideale I un polinomio differenziale nelle variabili p_i, u, y che non contiene derivate di p_i. Il vettore p è *globalmente identificabile* se per ogni i, $i = 1, \ldots, l$ esiste nell'ideale I un polinomio differenziale in p_i, u, y che sia lineare in p_i e privo di derivate di p_i.

Il problema dell'identificabilità equivale, come è noto [6], a trovare un insieme caratteristico dell'ideale differenziale I rispetto ad un opportuno *ranking*. Sia

$$A_1(u, y, p), \ldots, A_m(u, y, p), p_1', \ldots, p_l', C_1(u, y, p, x), \ldots, C_n(u, y, p, x) \tag{3}$$

un insieme caratteristico rispetto al *ranking* $u \ll y < p \ll x$. I polinomi differenziali A_j possono essere considerati come polinomi aventi coefficienti in $\mathbf{R}(p)$. I coefficienti di A_j, polinomi (o frazioni) nei parametri, sono le quantità che si possono misurare e che permettono di determinare l'identificabilità dei parametri.

L'ideale differenziale I è, in particolare, un ideale polinomiale generato da un numero infinito di polinomi costituito dall'insieme (2) *e tutte le sue derivate. L'algoritmo proposto, implementato in Maple, calcola iterativamente insiemi caratteristici di opportuni ideali contenuti in I, dove gli ideali contenuti in I sono generati dai polinomi in* (2) *e loro derivate fino ad un certo ordine.*

3. – Il metodo delle serie di Taylor.

Il metodo delle serie di Taylor è basato sullo sviluppo in serie di Taylor delle variabili osservate y intorno al punto $t = 0$:

$$y_i(t) = y_i(0) + t y_i'(0) + \frac{t^2}{2!} y_i^{(2)}(0) + \ldots .$$

Le derivate successive $y_i^{(j)}(0)$ sono misurabili e forniscono informazioni sul vettore dei parametri p. L'idea è studiare la possibilità di determinare il vettore dei parametri p dalla conoscenza di ogni termine della serie di Taylor, cioè le soluzioni rispetto a p del sistema dei polinomi $y_i^{(j)}(0)$ per j intero positivo. Il vettore dei parametri p è non identificabile se si hanno infinite soluzioni, è localmente identificabile se il numero di soluzioni è finito ed è globalmente identificabile se esiste un'unica soluzione. Ad ogni passo di derivazione l'equazione che si ottiene è sempre più complicata. Il problema principale è determinare il numero di derivate successive di $y(t, p)$ necessario e sufficiente per l'analisi dell'identificabilità. Secondo Chappell et al. [2], sono note le seguenti maggiorazioni: $2n - 1$ per sistemi lineari e $(q^{2n} - 1)/(q - 1)$ per sistemi omogenei, dove q è il grado di omogeneità.

In questa tesi si dimostra che il calcolo di un opportuno insieme caratteristico fornisce una maggiorazione al numero di derivate che non dipende dalla *funzione f ma che è applicabile ad ogni sistema di tipo* (1). *In particolare, per una sola osservazione* ($m = 1$), *si prova che è sufficiente considerare le prime* $n + 1$ *derivate di y.* L'algoritmo, implementato in Maple, si riduce al calcolo di un opportuno insieme caratteristico. Lo studio dell'identificabilità con il metodo degli insiemi caratteristici e con il metodo delle serie di Taylor di alcuni modelli polinomiali ed alcuni modelli con frazioni conclude la tesi.

Le ricerche in corso vertono sulle applicazioni dei metodi di algebra differenziale ad alcuni modelli biologici con frazioni ([3], [5]) e al *multi-strain model* (modello che descrive la trasmissione di molte speci di uno stesso germe patogeno) in collaborazione con M. J. Chappell (Warwick University), G. Pistone (Politecnico di Torino), E. Riccomagno (Eurandom Eindhoven), L. White e H. P. Wynn (Warwick University).

BIBLIOGRAFIA

[1] Boulier F., Lazard D., Ollivier F. e Petitot M., *Computing representation for radicals of finitely generated differential ideal*, Technical Report, Laboratoire d'Informatique Fondamentale de Lille (1999).

[2] Chappel M.J., Godfrey K.R. e Vajda S., *Global identifiability of parameters of non linear systems with specified inputs: A comparison of methods*, Mathematical Biosciences, **102** (1990), 41-73.

[3] Chappel M.J., Margaria G., Riccomagno E. e Wynn H.P., *Differential algebra methods for the study of the structural identifiability of biological rational polynomial models*, Submitted to Mathematical Biosciences

[4] Fliess M. e Glad S.T., *An algebraic approach to linear and non linear control*, In Trentelman H.L. e Willems J.C., editors, *Essays on Control: Perspectives in the Theory and its applications*, **14** (1993).

[5] Margaria G., *Application of Differential Algebra to the Identifiability of Nonlinear Models*, Proceedings IFAC Symposium on Modelling and Control in Biomedical Systems, 30 marzo-1 aprile 2000.

[6] Ollivier F., *Generalised standard bases with applications to control*, ECC91 European Control Conference, **1** (1991), 170-176.

[7] Pohjanpalo H., *System identifiability based on the power series expansion of the solution*, Mathematical Biosciences, **41** (1978), 21-33.

[8] Ritt J.F., *Differential algebra*, American Mathematical Society (1950)

[9] Walter E., *Identifiability of State Space Models*, Springer-Verlag (1982).

[10] Wang D., *An implementation of the characteristic set method in Maple*, In Wang D. e Pfalzgraf J., editors, *Automated practical reasoning: algebraic approaches* (1995), 187-201.

Dipartimento di Matematica, Politecnico di Torino
e-mail: margaria@calvino.polito.it
Dottorato in matematica (sede amministrativa: Università di Genova) - Ciclo XI
Direttore di ricerca: Prof. Giovanni Pistone, Politecnico di Torino