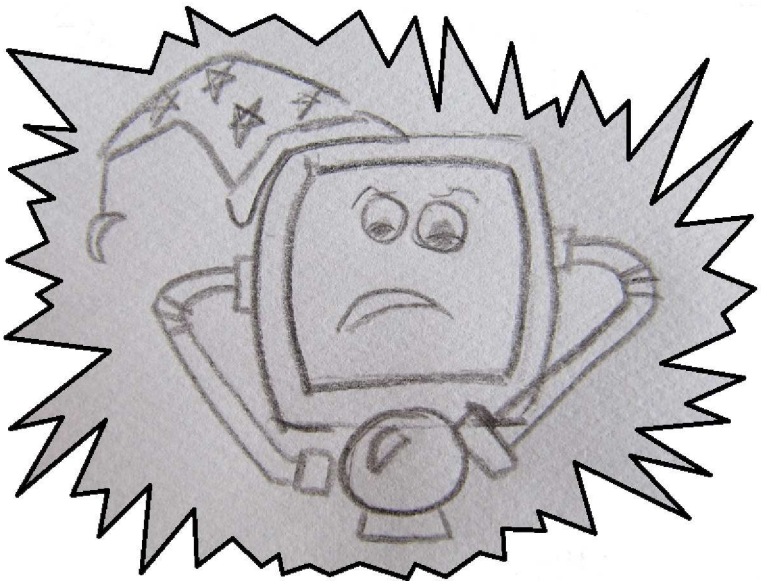
Fabio Marcuzzi

Analisi dei Dati mediante Modelli Matematici

Metodi numerici ed applicazioni a problemi di identificazione di modelli dai dati sperimentali, misura indiretta, predizione e stima dello stato



Prefazione

In questo libro tratteremo un insieme fondamentale di metodi numerici per l'analisi dei dati, che fanno uso esplicito di modelli matematici esplicativi del fenomeno che ha generato i dati. In generale, i metodi quantitativi per l'analisi di dati numerici sono algoritmi di calcolo numerico, implementati per essere eseguiti dal processore adatto all'applicazione specifica: dalla workstation al microcontrollore embedded.

Negli ultimi tempi, l'elaborazione numerica dei dati è diventata pervasiva nelle attività quotidiane, sia professionali che personali (*consumer*). Essa è presente in vari tipi di applicazioni, effettuate da microprocessori residenti: in computers utilizzati per progettare beni materiali e strumenti di ogni genere, per effettuare analisi di mercato o test di laboratorio; nei sistemi elettronici di bordo negli aerei, nelle automobili, nelle apparecchiature domestiche, nella telefonia, nei motori di ricerca in internet, nei video-giochi ecc.

In generale, la presenza di un modello matematico di supporto all'algoritmo di elaborazione numerica permette a quest'ultimo di dare un risultato molto più aderente alla situazione specifica in cui esso sta operando. In questo modo si rendono possibili operazioni di predizione, stima, misura indiretta, ovvero la creazione di informazioni specifiche e non direttamente presenti nei dati di partenza.

In questo libro vengono presentati i metodi numerici fondamentali per l'analisi delle sequenze di dati nel dominio del tempo e della frequenza (e cenni ai metodi per l'analisi multi-risoluzione), per la soluzione di problemi di stima (usualmente ai minimi quadrati) di parametri lineari e nonlineari, per l'identificazione di modelli di ordine ridotto da collezioni di dati sperimentali e per la riduzione di modelli di dettaglio per via algebrica, ed un'introduzione ai metodi di regolarizzazione di problemi fortemente mal-condizionati o mal-posti, che sovente appaiono nella risoluzione numerica di problemi inversi. L'enfasi è posta, in particolare, sul fornire una certa visione dell'utilizzo di alcuni metodi numerici fondamentali in algoritmi più complessi di analisi dei dati e loro applicazioni. In particolare, viene mostrato come pochi metodi numerici fondamentali stiano alla base di molteplici e disparate applicazioni. Il materiale del libro è utilizzato nelle lezioni del corso di *Metodi Numerici per l'Analisi dei Dati*, tenuto

dall'autore ed inserito nel Corso di Laurea Magistrale in Matematica dell'Università di Padova, ma seguito anche da un discreto numero di studenti e dottorandi di ingegneria e delle scienze applicate. Il libro è rivolto a questo contesto multi-disciplinare, che è una parte importante della matematica applicata.

Il libro contiene una breve trattazione teorica, la descrizione in dettaglio degli algoritmi numerici, esempi ed implementazioni dei metodi numerici presentati ed alcune applicazioni, prevalentemente di problemi inversi nella meccanica computazionale, ma anche qualche esempio nel campo socio-economico. Il materiale è proposto in forma cartacea nelle sue parti fondamentali, ed in forma digitale sul web per quanto riguarda approfondimenti, esercizi, spiegazioni (es. mediante filmati), applicazioni ed implementazioni software. Il materiale sul web è ad accesso riservato al possessore di una copia del libro ed è frequentemente aggiornato: il lettore può quindi seguire i contenuti relativi ad una materia in costante e rapida evoluzione senza dover comprarsi necessariamente n edizioni successive del libro. Per accedere al materiale sul web è necessario registrarsi alla pagina web *http://www.math.unipd.it/∼marcuzzi/MNAD.html*
.

Pordenone e Padova, Settembre 2011

Fabio Marcuzzi
marcuzzi@math.unipd.it

L'autore intende devolvere i diritti derivanti dalla commercializzazione del presente libro alla cooperativa sociale ARCA (Allevamento Ricerca con Animali, http://www.arca.coop/): è una cooperativa di tibo B che è rivolta alla comunità allargata ed offre servizi di Pet Teraphy ed Onoterapia alle persone svantaggiate (bambini in situazioni di disagio, anziani, giovani dei centri per i disturbi alimentari, ecc.). Inoltre, il personale dipendente della cooperativa, addetto all'addestramento degli animali (cani razza Labrador ed asinelli) è diversamente abile ed a loro, la cooperativa, offre una opportunità di lavoro responsabile che li rende realmente autonomi (attualmente ARCA ha quattro dipendenti, tre sono portatori di handicap). Il suo buon funzionamento è garantito dal volontariato creatosi attorno. Per saperne di più: http://www.arca.coop/

L'immagine di copertina è stata realizzata da un bambino e raffigura scherzosamente le previsioni al computer come una magia, ma è stata scelta per il senso di creatività che in realtà questo disegno ispira (il mago sembra più un artista modellatore). La creatività è un ingrediente fondamentale per la matematica applicata, sia alle scienze che all'ingegneria. E' attribuita al matematico Henri Poincaré la frase: "Creatività è unire elementi esistenti con connessioni nuove, che siano utili".

Indice

Prefazione **0**

I Segnali e sistemi **1**

1 Dati quantitativi **5**

1.1 Origine e proprieta' dei dati 5

1.2 Sequenze di Dati, Segnali a tempo discreto e Serie storiche 6

1.3 Campionamento di segnali continui 9

1.4 Aleatorietá nei Dati 9

2 Modelli matematici **13**

2.1 Modelli di regressione (statici) 14

2.1.1 Modello lineare standard 14

2.1.2 Modello lineare generalizzato (Gauss-Markov) 15

2.1.3 Modello lineare con errori nelle variabili 15

2.1.4 Modello non-lineare *perceptron* 16

2.1.5 Modello non-lineare *multi-layer neural network* 16

2.1.6 Modello non-lineare *kernel-based* 18

2.2 Modelli di auto-regressione (sistemi dinamici) 19

2.2.1 Modello lineare DLTI e convoluzione discreta 19

2.2.2 Modello lineare ARMA ed equazioni alle differenze 21

2.2.2.1 Modello ARMA stocastico 24

2.2.3 Modello lineare con variabili di stato (*state-space model*) 24

2.2.3.1 Modello state-space stocastico 27

2.2.4 Modello non-lineare *kernel-based* con variabili di stato 27

3 Analisi quantitative **29**
3.1 Filtraggio digitale 29
3.2 Previsione 29
3.3 Identificazione e stima di parametri 30
3.4 Inversione o deconvoluzione 31

II Analisi mediante modelli non parametrici **33**

4 Analisi nel dominio dei dati **37**
4.1 Correlazione e Covarianza di Segnali Discreti 37
4.1.1 Aleatorietà nei Dati 38
4.1.2 Stima dell'aspettazione 38
4.2 Principal Component Analysis (PCA) 39
4.2.1 Calcolo delle componenti principali 39
4.3 Canonical Correlation Analysis (CCA) 40
4.4 Kernel PCA 42
4.4.1 Formulazione duale della PCA 42
4.5 Compressed sensing 43

5 Analisi di Fourier nel discreto **45**
5.1 Rappresentazione dei Segnali Discreti mediante DFT 45
5.1.1 Sequenze di Dati Periodiche di Durata Illimitata 45
5.1.2 Sequenze di Dati Aperiodiche di Durata Illimitata 47
5.1.3 Sequenze di Dati di Durata Limitata 48
5.1.4 Sequenze di Dati ad Energia Infinita 48
5.2 Rappresentazione dei Sistemi DLTI mediante DFT 49
5.2.1 Risposta in Frequenza di un Sistema DLTI 49
5.2.2 Trasformata z e Funzione di Trasferimento 50
5.3 Calcolo della DFT: algoritmo della Fast Fourier Transform (FFT) . . 51
5.3.1 Algoritmo della FFT per segnali mono-dimensionali 51
5.3.1.1 Una semplice riduzione del numero di operazioni . . . 53
5.3.1.2 Il calcolo *sul posto* 53
5.3.1.3 La gestione degli indici 53

5.3.2 Utilizzo in pratica della DFT 54
5.3.2.1 Rappresentazione grafica della DFT 54
5.3.2.2 Il problema del *leakage* e la finestratura dei dati . . . 54
5.3.2.3 il problema dell'effetto *picket fence* e la tecnica di *zero-padding* 55
5.3.2.4 Risoluzione in frequenza 55
5.3.2.5 Presenza di rumore nei dati 56
5.3.3 Stima dello Spettro di Potenza di un Segnale 56
5.3.4 La DFT e l'algoritmo FFT per segnali bi-dimensionali 59

6 Analisi tempo-frequenza 61
6.1 Short-Time Fourier Transform (STFT) 61
6.2 La Trasformata Wavelet 62
6.2.1 Le wavelets di Haar 63
6.2.2 Le wavelets della Daubechies [10] 64
6.2.3 Le *Coiflets* 65
6.2.4 Conservazione e compattamento dell'energia 65
6.2.5 Interpretazione della trasformata wavelet come banco di filtri [27] 65
6.2.6 Analisi in frequenza delle wavelets 66

III Analisi mediante modelli parametrici 67

7 Algebra lineare numerica 71
7.1 La fattorizzazione QR 71
7.1.1 Con il metodo di Gram-Schmidt 72
7.1.2 Con le trasformazioni di Householder 72
7.1.3 Analisi all'indietro dell'errore 73
7.1.4 Formulazione ricorsiva della fattorizzazione QR 74
7.1.5 Trasformazioni di Givens 75
7.2 La Singular Value Decomposition (SVD) 77
7.2.1 Intepretazione geometrica della SVD 77
7.2.2 Rilevanza della SVD nel calcolo numerico 78
7.2.3 Calcolo della SVD 79
7.2.4 Pseudo-inversa di una matrice 81

7.2.5 Analisi di sistemi lineari con la SVD 82
7.3 Metodi numerici per il problema dei minimi quadrati lineari standard 83
7.3.1 Metodo delle Equazioni Normali 84
7.3.2 Caratterizzazione della soluzione ai minimi quadrati 84
7.3.3 Metodo con la Fattorizzazione QR 85
7.3.4 Metodo con la SVD 85
7.3.5 Scelta dell'algoritmo più adatto 85
7.3.5.1 Effetto della presenza di rumore nei dati 86
7.4 Metodi numerici per il problema dei minimi quadrati totali (Total Least Squares) 87

8 Regolarizzazione di problemi mal-condizionati o mal-posti 89
8.1 Analisi ai valori singolari del malcondizionamento di una matrice A . . 90
8.2 La SVD Troncata 91
8.2.1 Soluzione di problemi ai minimi quadrati mal-condizionati o mal-posti 91
8.2.2 Scelta dell'indice di troncamento 93
8.3 Il metodo di Tikhonov 94
8.4 Il metodo iterativo di Landweber 95

9 Riduzione d'ordine del modello 97
9.1 Riduzione di modelli lineari statici: PCA 97
9.2 Riduzione di modelli DLTI nella rappresentazione *state-space* 98
9.2.1 Troncamento previo bilanciamento 99
9.2.2 Troncamento modale 100
9.3 Proper Orthogonal Decomposition (POD) 101

10 Identificazione di modelli lineari 105
10.1 Identificazione di modelli lineari statici 105
10.1.1 Stima dei parametri del modello lineare standard 105
10.1.2 Stima dei parametri del modello lineare generalizzato 106
10.1.3 Stima di parametri tempo-varianti 107
10.1.4 Determinazione dell'ordine del modello dai dati sperimentali . 107
10.2 Identificazione di sistemi DLTI da dati privi di rumore 108
10.2.1 Caso di risposta al campione unitario e rappresentazione ARMA 109

10.2.2 Caso di risposta al campione unitario e rappresentazione *State-Space* . . . 111

10.2.3 *Eccitazione persistente* . . . 111

10.2.4 Caso di coppie ingresso/uscita qualsiasi e rappresentazione ARMA 112

10.2.5 Caso di coppie ingresso/uscita qualsiasi e rappresentazione *state-space* . . . 113

10.3 Identificazione di modelli DLTI da dati con rumore . . . 114

10.3.1 Analisi dei valori singolari e presenza di rumore nei dati . . . 114

10.3.2 Determinazione dell'ordine di un modello ARX . . . 114

10.3.2.1 L'analisi dei valori singolari . . . 115

10.3.2.2 Criteri di parsimonia . . . 115

10.4 Analisi parametrica di *serie storiche* . . . 115

11 Identificazione di modelli nonlineari 119

11.1 Stima di parametri nonlineari in modelli DLTI . . . 119

11.1.1 Metodi numerici per il problema dei minimi quadrati nonlineari 121

11.1.1.1 Metodo di Newton . . . 121

11.1.1.2 Metodo di Gauss-Newton . . . 122

11.1.1.3 Il metodo di Levenberg-Marquardt . . . 123

11.1.2 Malcondizionamento e regolarizzazione delle stime . . . 124

11.1.3 Presenza di rumore nelle equazioni del modello e nei dati sperimentali . . . 125

11.1.3.1 Rumore di modello . . . 125

11.1.3.2 Rumore di misura . . . 126

11.2 Apprendimento di una rete neurale . . . 126

11.2.1 Il *perceptron* e la separazione mediante iperpiani . . . 126

11.2.2 L'algoritmo di *back-propagation* . . . 127

11.2.3 Procedura di apprendimento . . . 130

11.2.4 *Momentum Algorithm* . . . 131

11.3 Metodi kernel . . . 132

11.3.1 Identificazione di modelli nonlineari statici . . . 132

11.3.2 Support Vector Machines . . . 132

12 Stima dello stato di sistemi dinamici **133**

12.1 Stima ricorsiva dello stato di modelli DLTI nella rappresentazione *state-space* . . . 133

12.1.1 costruzione dell'osservatore . . . 134

12.1.2 Stima dello stato in presenza di rumore di modello e di misura: il Filtro di Kalman . . . 135

12.1.2.1 Equazioni del filtro di Kalman . . . 135

12.1.2.2 Accordo sperimentale del filtro . . . 135

12.1.2.3 Implementazioni Square-Root del filtro di Kalman . . . 136

12.2 Stima dello stato iniziale in sistemi evolutivi nonlineari . . . 137

12.2.1 Discretizzazione nel tempo . . . 138

12.2.2 Stima delle condizioni iniziali (stato iniziale) . . . 138

12.2.3 Il metodo del modello aggiunto . . . 139

12.2.4 Procedura di ottimizzazione con il modello aggiunto . . . 142

IV Problemi inversi ed applicazioni **143**

13 Problemi inversi in meccanica computazionale **147**

13.1 Scelta del modello numerico . . . 147

13.2 Modelli a parametri concentrati . . . 148

13.3 Modelli a parametri distribuiti . . . 148

13.3.1 Relazioni tra modello geometrico ed algebrico del sistema . . . 148

13.4 Rappresentazione in forma nello spazio degli stati (*state-space*) . . . 148

13.5 Modelli misti a parametri concentrati e distribuiti . . . 149

13.6 Il controllo non-distruttivo dei materiali . . . 149

13.6.1 Scelta del metodo numerico di analisi dei dati . . . 150

13.7 *Model-based fault-detection* per i sistemi di controllo *fault-tolerant* . . . 151

14 Applicazioni **153**

14.1 Stima della corrosione mediante termografie . . . 153

14.2 Essicazione a controllo temperometrico . . . 153

14.3 Stima delle forze di contatto tra due corpi in movimento relativo . . . 154

14.4 Controllo adattativo di un sistema a corpi rigidi . . . 154

14.5 Stima del peso di corpi in rotazione . . . 154

14.6 Tomografia a vibrazioni elastiche: la geosonda 155
14.7 Modellazione state-space di dati relativi al mercato immobiliare 155

A Analisi dei sistemi DLTI *state-space* **157**
A.1 Analisi modale 158
A.2 Raggiungibilità 159
A.3 Osservabilità 159

B Soluzione numerica di problemi differenziali evolutivi **163**
B.1 Fenomeni diffusivi 163
B.2 Fenomeni di trasporto e propagazione di onde 165
B.3 Soluzione numerica delle equazioni della dinamica di un sistema meccanico elastico lineare 165
B.3.1 Integrazione nel tempo 165
B.3.2 Metodi per sistemi di equazioni differenziali del primo ordine nel tempo 166
B.3.2.1 Eulero esplicito (forward Euler, $\theta = 0$) 167
B.3.2.2 Eulero implicito (backward Euler, $\theta = 1$) 167
B.3.2.3 Crank-Nicholson ($\theta = \frac{1}{2}$) 167

C Linguaggi di programmazione per il calcolo numerico **169**
C.1 Criteri di scelta del linguaggio 169
C.2 Introduzione a Python 170
C.2.1 Sviluppo di programmi in Python 170
C.2.2 Documentazione su Python 171
C.2.3 Moduli aggiuntivi per il calcolo scientifico 171
C.2.4 Modalità di esecuzione dei programmi scritti in Python 172
C.2.5 Presentazione sintetica del linguaggio 172