

waterloopkundig laboratorium
delft hydraulics laboratory

parameterschatting in een stelsel gewone
niet-lineaire differentiaalvergelijkingen
van de eerste orde

AFGEHANDELD

verslag wiskundig onderzoek

R 870

juli 1976

parameterschatting in een stelsel gewone
niet-lineaire differentiaalvergelijkingen
van de eerste orde

verslag wiskundig onderzoek

R 870

juli 1976

INHOUD

NOTATIES

	blz.
<u>1</u> <u>Inleiding</u>	1
<u>2</u> <u>Quasi-linearisering</u>	3
2.1 Afleiding van het iteratieproces	3
2.2 Representatie van functies	7
2.3 Convergentie en convergentiegebied	17
<u>3</u> <u>Het verwerken van de meetgegevens</u>	25
3.1 Het invoeren van nieuwe differentiaalvergelijkingen voor de parameters	25
3.2 Differentiaalvergelijkingen met tussenvoorwaarden	27
3.3 Superpositie van oplossingen	29
<u>4</u> <u>Een toepassing van de methode</u>	34
4.1 De vergelijkingen van Lotka-Volterra; schalen	34
4.2 Vergroting van het convergentiegebied met bisectie	44
<u>5</u> <u>Samenvatting en conclusies</u>	47

LITERATUUR

NOTATIES

a	parameter
a_1	groeisnelheid prooi
b	parameter
b_1	sterftesnelheid jager
c	parameter
$c_1 \dots c_n$	coëfficiënten
d	afstand tussen $x^{(k)}$ en $x^{(k+1)}$
f	vectorfunctie voor de rechterleden
g	vectorfunctie
h	rijvector uit J
h_0	constante
h_1	constante
i	index dimensie
j	index dimensie
k	index iteratie
l	index iteratie
m	aantal roosterpunten
n	aantal differentiaalvergelijkingen
n_0	oorspronkelijk aantal differentiaalvergelijkingen
$p_1 \dots p_s$	parameters
q	aantal gegeven beginvoorwaarden
r	index roosterpunten
s	aantal onbekende parameters
t	dimensieloze tijd
t_0	begintijdstip
t_f	eindtijdstip
t_{ij}	meetpunt
t_r	roosterpunt
u	oplossing homogene differentiaalvergelijking
v	verschilvector $x^{(k+1)} - x^{(k)}$; in §3.3 oplossing homogene differentiaalvergelijking
w	oplossing homogene differentiaalvergelijking
x	vectorfunctie voor de onafhankelijke variabelen
x_0	beginvector
\tilde{x}	benadering voor x
z	oplossing homogene differentiaalvergelijking

NOTATIES (vervolg)

C, C_1, C_2	constanten
H	functionaalmatrix voor de tweede afgeleiden
J	functionaalmatrix van Jacobi
K	natuurlijk getal
L	Lipschitz constante
L_i	constante voor norm eerste afgeleide
M	aantal onbekenden
M_i	constante voor norm tweede afgeleide
P	polynoom
QL	quasi-linearisering
QUALIP	naam van FORTRAN-programma
\mathbb{R}^n	n-dimensionale reële vectorruimte
S	gebied in (x,t)-vlak
T	getransponeerde
U	concentratie prooi
V	concentratie jager
X_0	(n \times n \times m)-matrix voor functiewaarden u,v,w,z
X_1	(n \times m)-matrix voor functiewaarden ϕ
ZQL	naam van FORTRAN-programma waarin bisectie wordt toegepast
α, β	coëfficiënten
δ	restterm bij lineaire interpolatie
ϵ	nauwkeurigheid
ρ	variabele
τ	tijd in sec
τ_0	karakteristieke tijdschaal
Δt	roosterafstand
ξ	fout in iteratie met rangnummer k+1
ξ_1, ξ_2	functies
θ	functie tussen $x^{(k+1)}$ en $x^{(k)}$
ϕ	particuliere oplossing van de differentiaalvergelijking
$\ \cdot\ $	uniforme norm
(.)	verwijzing naar formule
.	verwijzing naar literatuur

1 Inleiding

Het dynamische gedrag van een ecosysteem kan wat betreft biotische en abiotische kenmerken op verschillende wijzen beschreven worden. Een wiskundig model is een van de manieren waarop de grootte van de populaties en de concentratie van de in het ecosysteem aanwezige stoffen als functie van de tijd beschreven kan worden. In dit onderzoek wordt aandacht besteed aan één aspect van een bepaalde klasse van deterministische wiskundige modellen, en wel de klasse van de stelsels gekoppelde gewone niet-lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste orde. Met deze modellen kan de continue groei beschreven worden van populaties die op een bepaalde wijze invloed op elkaar uitoefenen, zoals dat bijvoorbeeld het geval is bij jager-prooi relaties.

Het te onderzoeken aspect is het bepalen van in de bovengenoemde stelsels differentiaalvergelijkingen voorkomende onbekende en niet direct voor metingen toegankelijke constante parameters met behulp van metingen die verricht zijn aan de afhankelijke variabelen op willekeurige tijdstippen. Door het invoeren van nieuwe differentiaalvergelijkingen voor de parameters wordt het probleem van het schatten van parameters gereduceerd tot het oplossen van een stelsel differentiaalvergelijkingen met meetgegevens als tussenvoorwaarden. Een bijkomende moeilijkheid is het feit dat er in de praktijk zelden of nooit sprake zal zijn van de voor een routinematige numerieke aanpak vereiste beschikbaarheid van beginvoorwaarden voor alle onafhankelijke variabelen op een zelfde tijdstip $t = t_0$.

In hoofdstuk 2 wordt de methode van de quasi-linearisering ingevoerd. De methode berust op de gegeneraliseerde reeks van Taylor waarmee het gegeven niet-lineaire stelsel omgezet kan worden in een stelsel gewone lineaire differentiaalvergelijkingen. Via successieve oplossingen van dit lineaire stelsel wordt de oplossing van het niet-lineaire stelsel differentiaalvergelijkingen bepaald. Verder wordt onderzocht hoe de onafhankelijke variabelen als functie van de tijd geïnterpoleerd moeten worden. Op summiere wijze worden enkele aspecten betreffende de convergentie van het proces behandeld.

In hoofdstuk 3 wordt besproken hoe de waarnemingen die gedaan zijn aan een of meer van de onafhankelijke variabelen worden gebruikt om de onbekende parameters en beginvoorwaarden te berekenen. Omdat het stelsel differentiaalvergelijkingen gelineariseerd is kan het beginsel van superpositie van oplossingen

toegepast worden. In het huidige stadium van het onderzoek wordt verondersteld dat het aantal waarnemingen juist gelijk is aan de som van het aantal te schatten parameters en het aantal ontbrekende beginvoorwaarden.

Tenslotte wordt in hoofdstuk 4 een numerieke uitwerking van een parameterschatting gegeven. Als voorbeeld is een stelsel Lotka-Volterra vergelijkingen met twee ontbrekende parameters en twee ontbrekende beginvoorwaarden gekozen. Aan deze vergelijkingen wordt ook het schalen van de tijd en van de onafhankelijke variabelen gedemonstreerd. Er wordt geprobeerd een op bisectie gebaseerd proces te ontwikkelen waarbij het niet meer nodig is om van te voren beginschattingen voor het verloop van de onbekende functies te geven.

De conclusies en aanbevelingen voor verder onderzoek staan in hoofdstuk 5.

Het initiatief voor het onderzoek naar het bepalen van parameters in stelsels differentiaalvergelijkingen is afkomstig van ir. J.H.G. Verhagen.

Het onderzoek werd verricht door ir. K.D. Maiwald in het kader van de opdracht ecologisch modelonderzoek R 870 van de Rijkswaterstaat, Deltadienst, afdeling milieu-onderzoek.

2 Quasi-linearisering

2.1 Afleiding van het iteratieproces

Voorlopig wordt het stelsel gewone niet-lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste-orde

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n, t), \quad t \in [0, t_f], \quad i=1, 2, \dots, n \quad (1)$$

met de beginvoorwaarden

$$x_i(t_0) = x_{i0}, \quad t_0 \in [0, t_f], \quad i=1, 2, \dots, n, \quad (2)$$

beschouwd. Het is veelal eenvoudiger om het bovenstaande stelsel in vector-notatie te schrijven. Hiervoor wordt de volgende notatie in de reële n-dimensionale vectorruimte \mathbb{R}^n met nog nader te specificeren norm $\|\cdot\|$ ingevoerd:

$$x = x(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))^T$$

$$f(x, t) = (f_1(x, t), f_2(x, t), \dots, f_n(x, t))^T,$$

zodat het stelsel differentiaalvergelijkingen geschreven kan worden als

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t), \quad t \in [0, t_f] \quad (3)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad t_0 \in [0, t_f]. \quad (4)$$

Uit de literatuur [5] wordt zonder bewijs een stelling over de existentie en eenduidigheid van de oplossing van (3) met gegeven beginvoorwaarden (4) aangehaald:

Stelling 1: Stel de vectorfunctie f is op de balk

$$S := \{(x, t) \mid x \in \mathbb{R}^n, 0 \leq t \leq t_f\},$$

met t_f eindig, gedefinieerd en continu.

Stel bovendien dat er een constante L bestaat, met

$$\|f(x_1, t) - f(x_2, t)\| \leq L \|x_1 - x_2\|$$

voor alle $t \in [0, t_f]$ en alle $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n$ (Lipschitzvoorwaarde).

Dan bestaat er voor iedere $t_0 \in [0, t_f]$ en iedere $x_0 \in \mathbb{R}^n$ precies één vectorfunctie $x(t)$ waarvoor geldt:

1. $x(t)$ is continu en differentieerbaar voor iedere $t_0 \in [0, t_f]$.
2. $\frac{dx}{dt} = f(x, t)$ voor $t \in [0, t_f]$.
3. $x(t_0) = x_0$. \square

Aan de Lipschitzvoorwaarde is zeker voldaan als de partiële afgeleiden

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j}, t \in [0, t_f], i, j=1, 2, \dots, n \quad (5)$$

bestaan, continu zijn en eindig zijn. In het vervolg worden alleen functies f beschouwd die voldoen aan deze laatste voorwaarde.

Met de methode van de quasi-linearisering (QL-methode) wordt nu een reeks benaderingen $x^{(0)}(t), x^{(1)}(t), \dots, x^{(k)}(t), \dots$ gegenereerd zodanig dat $x^{(k)}(t)$ voor toenemende k (k geheel) steeds beter gaat lijken op de oplossing $x(t)$, met andere woorden zodanig dat

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)}(t) = x(t), t \in [0, t_f]. \quad (6)$$

Een eerste vraag is dan natuurlijk: Hoe moet een dergelijke reeks successieve benaderingen geconstrueerd worden? Een direct daarop aansluitende vraag is dan: Convergeert de reeks vectorfuncties $\{x^{(k)}(t)\}, k=0, 1, \dots$ naar de oplossing $x(t)$, dat wil zeggen is er voldaan aan (6)?

Een derde minder belangrijke vraag is dan: Als het proces convergeert, hoe snel convergeert het dan? Op de twee laatste vragen wordt in §2.3 verder ingegaan. Wat de eerste vraag betreft: De QL-methode lijkt veel op de uit de numerieke analyse bekende methode van Newton voor het iteratief bepalen van nulpunten van reële functies en is evenals deze methode gebaseerd op de generaliseerde reeks van Taylor. Stel

$$x^{(k)}(t) \in \mathbb{R}^n, k=0, 1, \dots, t \in [0, t_f]$$

is een gegeven vectorfunctie die in de omgeving van de gezochte oplossing

$x(t) \in \mathbb{R}^n$ ligt. De functie $x^{(k)}(t)$ voldoet in het algemeen niet aan de differentiaalvergelijking (3), maar wordt zo gekozen dat voldaan is aan de beginvoorwaarde (4), zodat

$$x^{(k)}(0) = x_0, \quad k=0,1,\dots$$

Zonder afbreuk te doen aan de algemeenheid is hier en in het vervolg gekozen $t_0 = 0$. De essentie van de QL-methode is nu dat de vectorfunctie $f(x,t)$ in de omgeving van "het punt" $x^{(k)}(t) \in \mathbb{R}^n, k=0,1,\dots$, ontwikkeld wordt in een reeks van Taylor naar x voor alle $t \in [0, t_f]$, zodat geldt

$$f_i(x,t) = f_i(x^{(k)},t) + h_i(x^{(k)},t)(x-x^{(k)}) + \frac{1}{2}(x-x^{(k)})^T H_i(x^{(k)},t)(x-x^{(k)}) + \dots \quad (7)$$

•

$$i=1,2,\dots,n, \quad k=0,1,\dots$$

waarbij $h_i(x^{(k)},t)$ de i -de rijvector uit de functionaalmatrix van Jacobi, $J(x^{(k)},t)$, is.

$$J(x^{(k)},t) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} (x^{(k)},t) \quad (8)$$

$$H_i(x^{(k)},t) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n^2} \end{pmatrix} (x^{(k)},t) \quad (9)$$

Nodig voor de ontwikkeling (7) is dat de partiële afgeleiden in (8) en (9)

bestaan en eindig zijn voor alle $t \in [0, t_f]$. Omdat $x(t)$ zelf aan de differentiaalvergelijking (3) voldoet, dat wil zeggen

$$f(x, t) = \frac{dx}{dt}, t \in [0, t_f],$$

is de reeks van Taylor (7) in vectornotatie ook te schrijven als

$$\frac{dx}{dt} = f(x^{(k)}, t) + J(x^{(k)}, t)(x - x^{(k)}) + \text{hogere orde termen} \quad (10)$$

voor $k=0, 1, \dots$, $t \in [0, t_f]$. De tweede-orde term uit (7) is hierbij niet meer expliciet uitgeschreven.

Er wordt nu een nieuwe functie $x^{(k+1)}(t) \in \mathbb{R}^n$ gedefinieerd als oplossing van het volgende stelsel gewone lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste orde:

$$\frac{dx^{(k+1)}}{dt} = f(x^{(k)}, t) + J(x^{(k)}, t)(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \quad (11)$$

met beginvoorwaarden

$$x^{(k+1)}(0) = x_0 \quad (12)$$

met $k=0, 1, \dots$, $t \in [0, t_f]$. Dit lineaire stelsel (11) is ontstaan door in vergelijking (10) $x(t)$ te vervangen door $x^{(k+1)}(t)$ en de tweede- en hogere-orde termen in de reeks van Taylor weg te laten. De lineariteit van (11) is gemakkelijk in te zien. Er wordt hierbij nog op gewezen dat de vectorfunctie $x^{(k)}(t)$ in het rechterlid van (11) bekend verondersteld moet worden.

Hiermee is de eerste vraag, namelijk het hoe van het genereren van een rij vectorfuncties $\{x^{(k)}(t)\}$, $k=0, 1, \dots$ beantwoord. Het proces voor het bepalen van de successieve approximaties verloopt dan als volgt:

1^e stap: $k = 0$. Kies een beginschatting $x^{(0)}(t)$, $t \in [0, t_f]$.

2^e stap: Bepaal $x^{(1)}(t)$ via het oplossen van het lineaire stelsel differentiaalvergelijkingen (11) met beginvoorwaarden (12). Dit zal in het algemeen numeriek moeten gebeuren omdat de coëfficiënten in (11) tijds-

afhankelijk zijn. Op de numerieke aspecten van de integratie wordt in een latere paragraaf nader ingegaan.

3^e en volgende stappen:

Verhoog k met 1. Iedere nieuwe $x^{(k+1)}(t)$ wordt via integratie van (11) voor $t \in [0, t_f]$ bepaald, waarbij de vorige $x^{(k)}(t)$ in het rechterlid is gesubstitueerd. Het proces wordt afgebroken als $x^{(k+1)}(t)$ en $x^{(k)}(t)$ op $[0, t_f]$ voldoende dicht bij elkaar liggen. Dit laatste wordt, samen met andere met convergentie verband houdende problemen, nader in paragraaf 2.3 besproken.

Wat is er nu eigenlijk verdiend?

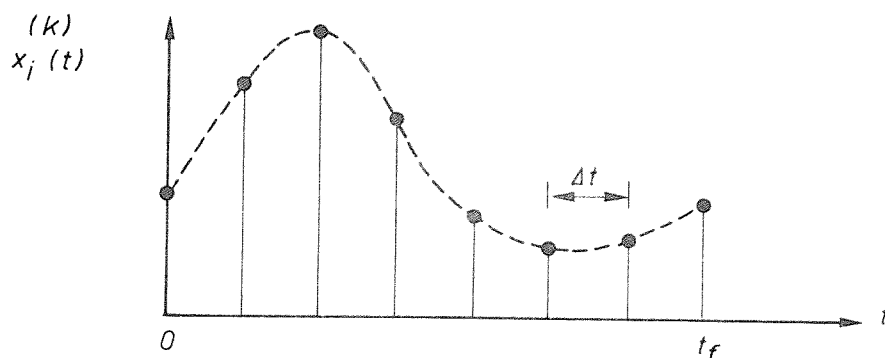
In plaats van het eenmalig oplossen van een stelsel niet-lineaire differentiaalvergelijkingen (4) moet een vooralsnog onbekend aantal keren een lineair stelsel differentiaalvergelijkingen (11) opgelost worden. Indien we alleen met een beginwaardeprobleem te maken hadden was dit in numeriek opzicht bepaald geen vooruitgang omdat in principe met numerieke standaard-subroutines een niet-lineair beginwaardeprobleem niet moeilijker op te lossen is dan een lineair beginwaardeprobleem. Zoals in hoofdstuk 3 zal blijken zit de winst hierin dat bij een lineair stelsel het superpositieprincipe toegepast kan worden, waarmee ook niet-beginwaardeproblemen (randwaarde- of tussenwaardeproblemen) aan te pakken zijn.

2.2 Representatie van functies

De initiële beginschatting $x^{(0)}(t)$ en de verdere benaderingen $x^{(k)}(t)$, $k=1,2,\dots$ moeten op een of andere wijze op het interval $[0, t_f]$ gerepresenteerd worden. Hiervoor worden op het beschouwde interval m ($m \geq 2$) equidistante basispunten $\{t_r\}$ gekozen, zodanig dat

$$t_r = (r-1)\Delta t, \quad \Delta t = \frac{t_f}{m-1}, \quad r=1,2,\dots,m. \quad (13)$$

In de basispunten zijn de functiewaarden $x^{(k)}(t_r)$ bekend. $k=0,1,\dots, r=1,2,\dots,m$. Zie figuur 1.



Figuur 1 Schets van de i-de component van de vectorfunctie $x^{(k)}(t)$

Voor het numeriek oplossen van het lineaire stelsel differentiaalvergelijkingen (11) wordt gebruik gemaakt van de integratieroutine RKGS met voorgescreven nauwkeurigheid en zelfkiezende stapgrootte. De integratieroutine is gebaseerd op een vierde-orde methode van Runge-Kutta, zie [2].

Vanwege de zelfkiezende stapgrootte van de integratieroutine moet het rechterlid van (11), en daarvoor dus ook $x^{(k)}(t)$, in ieder punt van het interval $[0, t_f]$ via interpolatie berekend kunnen worden. In de literatuur [1], [2] en [5] wordt geen enkele aandacht besteed aan deze interpolatie, grotendeels terecht zoals achteraf zal blijken.

Voor het lopende onderzoek is slechts een greep gedaan uit de uitgebreide klasse interpolerende functies; de volgende functies zijn voor de interpolatie onderzocht:

- spline functies
- lineaire functies.

De achtergrond voor het gebruik van spline-interpolatie is het idee dat de functies $x^{(k)}(t)$, $k=0,1,\dots,t \in [0, t_f]$ "glad" verlopen, en juist bij spline functies zijn hogere afgeleiden, ook in de toevallig gekozen basispunten, continu. In het hierna gegeven voorbeeld zijn derde-graads splines gebruikt zodat ook de eerste en tweede afgeleiden van de interpolerende functies in de basispunten continu zijn. Ook een hogere graads polynoominterpolatie door de basispunten heeft dit voordeel, maar daarbij treden juist weer grote verschillen op tussen de basispunten. Op grond van de uitgebreide literatuur op het

gebied van interpolatie wordt de voorkeur gegeven aan derdegraads spline-interpolatie. Een nadeel van het gebruik van splines is de grotere hoeveelheid rekenwerk die met het bepalen van de coëfficiënten van de spline functies gemoeid is.

Lineaire functies daarentegen zijn als interpolerende functie tussen twee basispunten zeer gemakkelijk te berekenen, maar benaderen een glad verlopende functie in het algemeen minder goed, onder andere heeft de interpolerende functie een knik in ieder basispunt. Om een keus te maken tussen de twee beschouwde interpolerende functies wordt in plaats van een theoretische afleiding te geven een eenvoudig voorbeeld nagerekend. Dit voorbeeld is echter wel zo relevant voor de verwachte klasse van problemen dat de conclusie, mits voldoende evident, ook voor andere soortgelijke problemen bruikbaar is.

Voorbeeld: Zij gegeven het stelsel niet-lineaire differentiaalvergelijkingen

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= x_1(1-x_2) \\ \frac{dx_2}{dt} &= -\frac{1}{2} x_2(1-x_1) \end{aligned} \right\} t \in [0,10] \quad (14)$$

met beginvoorwaarden

$$\begin{aligned} x_1(0) &= 1 \\ x_2(0) &= \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (15)$$

De oplossing van dit stelsel is niet analytisch te geven, maar kan numeriek willekeurig dicht benaderd worden. Volgens [6] is de oplossing periodiek met periode $2\pi/\sqrt{\frac{1}{2}} = 8.886$.

Met de in §2.1 besproken QL-methode is het beginwaardeprobleem (14, 15) zowel met spline-interpolatie als met lineaire interpolatie voor verschillende waarden van m , het aantal basispunten, opgelost. Voor de spline-interpolatie is de tweede afgeleide aan de randen ($t = 0$, $t = t_f$) nul gesteld. In alle gevallen is als integratieroutine RKGS met voldoende grote nauwkeurigheid toegepast. Als beginschatting $x^{(0)}(t)$ is telkens een constante functie genomen, en wel

$$\begin{aligned} x_1^{(0)}(t_r) &= 1, & t_r &= (r-1)\Delta t, & r &= 1, 2, \dots, m, & \Delta t &= 10/(m-1) \\ x_2^{(0)}(t_r) &= \frac{1}{2}, & & \text{idem.} & & & \end{aligned}$$

De resultaten zijn in de onderstaande tabel samengevat:

type interpolatie	aantal basispunten m	aantal iteraties k	max. abs. fout in		benodigde rekestijd
			$x_1^{(k)}(t_r)$	$x_2^{(k)}(t_r)$	
lineair	6	15	0.027 492	0.012 189	1.1
	11	16	0.004 046	0.001 503	1.7
	21	14	0.000 259	0.000 102	2.7
	51	17	0.000 007	0.000 003	5.8
spline (3e graads)	6	12	0.021 493	0.014 407	3.3
	11	12	0.000 347	0.000 154	10.0
	21	13	0.000 003	0.000 002	20.7
	51	17	0.000 001	0.000 001	100.1

Tabel 1 Fouten en rekestijden bij lineaire- en bij spline-interpolatie

Toelichting:

- 1) Het benodigde aantal iteraties k is zodanig dat na k iteraties de vectorfuncties $x^{(k)}(t_r)$ en $x^{(k+1)}(t_r)$ voor alle kentallen in zes cijfers na de komma overeenstemmen in de basispunten $\{t_r | t_r = (r-1)\Delta t\}$.
- 2) De vermelde maximale absolute fout is gedefinieerd door

$$\max_{r=1,2,\dots,m} |x_i^{(k)}(t_r) - x_i(t_r)| \quad i=1,2, \quad t_r = (r-1)\Delta t$$

waarbij $x(t)$ een met voldoende nauwkeurigheid bepaalde numerieke oplossing van het beginwaardeprobleem (14, 15) is.

- 3) De benodigde rekestijd is CPU-tijd, uitgedrukt in willekeurige eenheden, voor de vereiste k iteraties bij m gegeven basispunten.

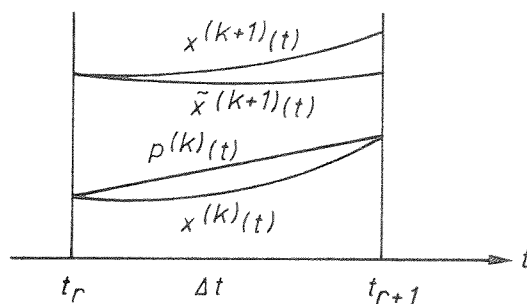
Conclusie : ● voor kleine m zijn spline-interpolatie en lineaire interpolatie even nauwkeurig
 ● voor grote m is spline-interpolatie veel nauwkeuriger
 ● de nauwkeurigheid neemt in beide gevallen sterk toe met toenemende m
 ● lineaire interpolatie is veel sneller en vraagt minder geheugenruimte (het laatste blijkt overigens niet uit tabel 1

maar is verklaarbaar uit de noodzaak de spline-coëfficiënten over het gehele interval in het geheugen op te slaan).

Advies : ● gelet op nauwkeurigheid en rekentijd is (voor dit en soortgelijke gevallen) lineaire interpolatie sterk te prefereren boven spline-interpolatie. Voor de keuze van het aantal roosterpunten m wordt verwezen naar §4.1.

Post scriptum : ● indien door omstandigheden, bijvoorbeeld op discrete tijdstippen gemeten grootheden in het rechterlid van de differentiaalvergelijkingen, m niet voldoende groot gekozen kan worden, wordt spline-interpolatie weer aantrekkelijk omdat dan de hoogste nauwkeurigheid bereikt kan worden.

Tenslotte wordt voor de lineaire interpolatie voor een eenvoudig geval ($n = 1$) een afschatting van de fout gegeven die in $x^{(k+1)}(t)$ ontstaat door de voorgaande iteratie $x^{(k)}(t)$ op het interval $[t_r, t_{r+1}]$ door een interpolerende functie $P^{(k)}(t)$ te benaderen. Zie figuur 2.



Figuur 2 Invloed van de interpolatie

Zij $x^{(k+1)}(t)$ de oplossing van de lineaire differentiaalvergelijking (11) met beginvoorwaarde $x^{(k+1)}(t_r)$ die ontstaat door gebruik van de correcte waarde van $x^{(k)}(t)$ op het interval $[t_r, t_{r+1}]$. Zij verder $\tilde{x}^{(k+1)}(t)$ op $[t_r, t_{r+1}]$ de oplossing van (11), met dezelfde beginvoorwaarde, die ontstaat door in het rechterlid van (11) $x^{(k)}(t)$ te vervangen door een interpolatiepolynoom $P^{(k)}(t)$. Het maximale absolute verschil

$$\| \tilde{x}^{(k+1)} - x^{(k+1)} \| \stackrel{\text{def}}{=} \max_{t \in [t_r, t_{r+1}]} | \tilde{x}^{(k+1)}(t) - x^{(k+1)}(t) |$$

is dan een maat voor de fout die ontstaat ten gevolge van het interpoleren. Zoals uit het bovenstaande volgt geldt dus

$$\frac{dx^{(k+1)}}{dt} = f(x^{(k)}, t) + J(x^{(k)}, t)(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \quad t \in [t_r, t_{r+1}] \quad (16)$$

$$\frac{d\tilde{x}^{(k+1)}}{dt} = f(P^{(k)}, t) + J(P^{(k)}, t)(\tilde{x}^{(k+1)} - P^{(k)}) \quad t \in [t_r, t_{r+1}] \quad (17)$$

met beginvoorwaarden $x^{(k+1)}(t_r) = \tilde{x}^{(k+1)}(t_r)$.

Aftrekken van (16) en (17) geeft de differentiaalvergelijking

$$\frac{d(\tilde{x}^{(k+1)} - x^{(k+1)})}{dt} = f(P^{(k)}, t) - f(x^{(k)}, t) + J(P^{(k)}, t)(\tilde{x}^{(k+1)} - P^{(k)}) - J(x^{(k)}, t)(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \quad (18)$$

met beginvoorwaarde $\tilde{x}^{(k+1)}(t_r) - x^{(k+1)}(t_r) = 0$.

De functies $f(P^{(k)}, t)$ en $J(P^{(k)}, t)$ worden om "het punt" $x^{(k)}(t)$ in een reeks van Taylor ontwikkeld:

$$f(P^{(k)}, t) = f(x^{(k)}, t) + (P^{(k)} - x^{(k)}) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x^{(k)}, t)} + \dots \quad (19)$$

Omdat een een-dimensionale vectorfunctie gekozen is geldt

$$J(x^{(k)}, t) = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x^{(k)}, t)}$$

zodat

$$J(P^{(k)}, t) = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x^{(k)}, t)} + (P^{(k)} - x^{(k)}) \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{(x^{(k)}, t)} + \dots \quad (20)$$

Substitutie van de ontwikkelingen (19) en (20) in de differentiaalvergelijking (18) geeft na weglaten van hogere-orde termen

$$\begin{aligned} \frac{d(\tilde{x}^{(k+1)} - x^{(k+1)})}{dt} &= (\tilde{x}^{(k+1)} - x^{(k+1)}) \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x^{(k)}, t)} + \\ &\delta(\tilde{x}^{(k+1)} - p^{(k)}) \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{(x^{(k)}, t)} \end{aligned} \quad (21)$$

waarbij geldt $\delta = p^{(k)} - x^{(k)}$ en $\tilde{x}^{(k+1)}(t_r) - x^{(k+1)}(t_r) = 0$.

Zonder deze differentiaalvergelijking analytisch op te lossen is het mogelijk om de fout $\|\tilde{x}^{(k+1)} - x^{(k+1)}\|$ af te schatten. Hiervoor wordt de differentiaalvergelijking geschreven als

$$\frac{d\xi}{dt} = c_1 \xi + c_2 \delta \quad (22)$$

$$\xi(t_r) = 0, \quad t \in [t_r, t_{r+1}]$$

met $\xi = \xi(t) = \tilde{x}^{(k+1)} - x^{(k+1)}$

$$c_1 = c_1(t) = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(x^{(k)}, t)}$$

$$c_2 = c_2(t) = (\tilde{x}^{(k+1)} - p^{(k)}) \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{(x^{(k)}, t)}$$

Vergelijking (22) is ook te schrijven als integraalvergelijking

$$\xi(t) = \underset{\underset{0}{\parallel}}{\xi(t_r)} + \int_{t_r}^t (c_1 \xi + c_2 \delta) d\tau \quad t \in [t_r, t_{r+1}]$$

De vergelijking is in deze vorm geschikt om $\xi(t)$ af te schatten, immers

$$\begin{aligned}
 |\xi(t)| &\leq \int_{t_r}^t |c_1 \xi + c_2 \delta| d\tau \leq \int_{t_r}^t (|c_1 \xi| + |c_2 \delta|) d\tau \\
 &\leq C_1 \int_{t_r}^t \max_{\tau \in [t_r, t_{r+1}]} |\xi| d\tau + C_2 \int_{t_r}^t \max_{\tau \in [t_r, t_{r+1}]} |\delta| d\tau
 \end{aligned}$$

met

$$C_1 = \max_{t \in [t_r, t_{r+1}]} |c_1(t)| = \left\| \frac{\partial f}{\partial x} \right\|$$

$$C_2 = \max_{t \in [t_r, t_{r+1}]} |c_2(t)| = \left\| \tilde{x}^{(n+1)} - p^{(n)} \right\| \left\| \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right\|$$

dus

$$|\xi(t)| \leq \Delta t (C_1 \|\xi\| + C_2 \|\delta\|).$$

Als de absolute waarde van $\xi(t)$ overal kleiner is dan het rechterlid geldt dat ook de maximale absolute waarde kleiner is, dus

$$\max_{t \in [t_r, t_{r+1}]} |\xi(t)| = \|\xi\| \leq \Delta t (C_1 \|\xi\| + C_2 \|\delta\|)$$

$$\|\xi\| \leq \frac{\Delta t C_2 \|\delta\|}{1 - C_1 \Delta t} \quad (23)$$

De restterm bij lineaire interpolatie is gemakkelijk met een reeks van Taylor af te schatten:

$$\|\delta\| \leq \frac{\Delta t^2}{2!} \left\| \frac{d^2 x^{(k)}}{dt^2} \right\|.$$

Substitutie hiervan in (23) geeft tenslotte de afschatting

$$\|\xi\| \leq \frac{\frac{1}{2} \Delta t^3 c_2 \left\| \frac{d^2 x^{(k)}}{dt^2} \right\|}{1 - c_1 \Delta t} = O(\Delta t^3) \quad (24)$$

Het is overigens wel mogelijk de afschatting (23) voor $\|\xi\|$ iets te verfijnen. Hiervoor wordt (22) in gesloten vorm analytisch opgelost via de substitutie

$$\xi(t) = \xi_1(t) \cdot \xi_2(t), \quad t \in [t_r, t_{r+1}]$$

waardoor de differentiaalvergelijking (22) overgaat in

$$\xi_2 \frac{d\xi_1}{dt} + \xi_1 \frac{d\xi_2}{dt} = c_1 \xi_1 \xi_2 + c_2 \delta$$

of

$$\xi_2 \left(\frac{d\xi_1}{dt} - c_1 \xi_1 \right) + \xi_1 \frac{d\xi_2}{dt} - c_2 \delta = 0.$$

Nu is $\xi_1(t)$ zo te kiezen dat de uitdrukking tussen haakjes verdwijnt, dus

$$\frac{d\xi_1}{dt} - c_1 \xi_1 = 0 \rightarrow$$

$$\xi_1(t) = \text{constante}_1 \cdot e^{\int_{t_r}^t c_1(\tau) d\tau}, \quad t \in [t_r, t_{r+1}]$$

Dan geldt dus ook dat

$$\xi_1 \frac{d\xi_2}{dt} - c_2 \delta = 0 \rightarrow$$

$$\xi_2(t) = \frac{1}{\text{constante}_1} \int_{t_r}^t c_2(\tau) \delta(\tau) e^{-\int_{t_r}^{\tau} c_1(\rho) d\rho} d\tau + \text{constante}_2, \quad t \in [t_r, t_{r+1}]$$

De oplossing $\xi(t) = \xi_1(t) \xi_2(t)$ met beginvoorwaarde $\xi(t_r) = 0$ is dus

$$\xi(t) = e^{\int_{t_r}^t c_1(\tau) d\tau} \int_{t_r}^t c_2(\tau) \delta(\tau) e^{-\int_{t_r}^{\tau} c_1(\rho) d\rho} d\tau, \quad t \in [t_r, t_{r+1}]$$

De waarde van $\|\xi\|$ is hiermee gemakkelijk af te schatten, immers

$$|\xi(t)| \leq e^{\int_{t_r}^t c_1(\tau) d\tau} \int_{t_r}^t |c_2(\tau)| \cdot |\delta(\tau)| \cdot 1 d\tau \quad t \in [t_r, t_{r+1}]$$

$$\leq e^{C_1 \Delta t} \cdot \Delta t \cdot C_2 \|\delta\|$$

dus ook $\|\xi\| \leq e^{C_1 \Delta t} \cdot \Delta t \cdot C_2 \|\delta\|$ (23a)

$$\leq e^{C_1 \Delta t} \frac{1}{2} \Delta t^3 C_2 \|\delta\|$$
 (24a)

Voor $0 \leq C_1 \Delta t < 1$ geldt dat

$$e^{C_1 \Delta t} \leq \frac{1}{1 - C_1 \Delta t} \text{ (reeksontwikkeling!)}$$

zodat afschatting (24a) inderdaad een verscherping is van (24).

De waarde van $\|\xi\|$ kan voor grote m , (kleine tijdstap Δt) willekeurig klein gemaakt worden, waarmee voor het eenvoudige geval $n = 1$ een lineaire interpolatie de convergentie in de zin

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \tilde{x}^{(k+i)}(t) = x^{(k+i)}(t) \quad k=0,1,\dots, \quad t \in [t_r, t_{r+1}], \quad r=1,2,\dots,m-1$$

bewezen is. Voor de praktijk betekent het resultaat (24) ruwweg dat door verdubbeling van het aantal basispunten de fouten ten gevolge van lineaire interpolatie een factor 8 afnemen.

Voor meer-dimensionale vectorfuncties ($n > 1$) is het bewijs in principe op dezelfde wijze te leveren. Een kleine analyse van de in tabel 1 gegeven resul-

taten laat zien dat de fouten bij lineaire interpolatie zich ook bij het gegeven twee-dimensionale voorbeeld als $O(\Delta t^3)$ gedragen.

2.3 Convergentie en convergentiegebied

Voor het onderzoek van de convergentie van de QL-methode worden twee achtereenvolgende iteratiestappen beschouwd:

$$\frac{dx^{(k+1)}}{dt} = f(x^{(k)}, t) + J(x^{(k)}, t)(x^{(k+1)} - x^{(k)}), \quad t \in [0, t_f], \quad k=0, 1, \dots \quad (25)$$

$$\frac{dx^{(k)}}{dt} = f(x^{(k-1)}, t) + J(x^{(k-1)}, t)(x^{(k)} - x^{(k-1)}), \quad t \in [0, t_f], \quad k=1, 2, \dots \quad (26)$$

Aftrekken van (25) en (26) geeft voor de i -de component

$$\begin{aligned} \frac{dv_i^{(k)}}{dt} = & f_i(x^{(k)}, t) - f_i(x^{(k-1)}, t) + h_i(x^{(k)}, t)v^{(k)} - \\ & h_i(x^{(k-1)}, t)v^{(k-1)}, \quad i=1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (27)$$

De verschilvector $v^{(k)}$ is hierbij gedefinieerd als

$$v^{(k)} = v^{(k)}(t) = x^{(k+1)}(t) - x^{(k)}(t), \quad k=0, 1, \dots, \quad t \in [0, t_f]$$

Het lineaire stelsel differentiaalvergelijkingen (27) heeft de beginvoorwaarden

$$v^{(k)}(0) = 0 \quad \text{omdat} \quad x^{(k+1)}(0) = x^{(k)}(0) = x_0, \quad k=0, 1, \dots$$

In vergelijking (27) wordt de tweede afgeleide geïntroduceerd via de reeks van Taylor

$$f_i(x^{(k)}, t) = f_i(x^{(k-1)}, t) + h_i(x^{(k-1)}, t)v^{(k-1)} + \frac{1}{2}(v^{(k-1)})^T H_i(\theta, t)v^{(k-1)}$$

(28)

waarbij volgens de middelwaardstelling $\theta(t)$ ergens tussen $x^{(k+1)}(t)$ en $x^{(k)}(t)$ ligt, nauwkeuriger gezegd dat $\theta_i(t)$ tussen $x_i^{(k+1)}(t)$ en $x_i^{(k)}(t)$ ligt voor alle $t \in [0, t_f]$, $k=0,1,\dots$, $i=1,2,\dots,n$.

Substitutie van reeksontwikkeling (28) in de differentiaalvergelijking (27) geeft

$$\frac{dv_i^{(k)}}{dt} = h_i(x^{(k)}, t)v^{(k)} + \frac{1}{2}(v^{(k-1)})^T H_i(\theta, t)v^{(k-1)} \quad (29)$$

Deze differentiaalvergelijking is niet expliciet analytisch oplosbaar. Door omzetting in een integraalvergelijking

$$v_i^{(k)}(t) = \int_0^t \{h_i(x^{(k)}, \tau)v^{(k)} + \frac{1}{2}(v^{(k-1)})^T H_i(\theta, \tau)v^{(k-1)}\} d\tau, t \in [0, t_f] \quad (30)$$

is het echter wel mogelijk om een indruk te krijgen van de grootte van $v^{(k)}$. Immers uit (30) volgt direct

$$|v_i^{(k)}(t)| \leq \int_0^t \{ |h_i(x^{(k)}, \tau)v^{(k)}| + \frac{1}{2} |(v^{(k-1)})^T H_i(\theta, \tau)v^{(k-1)}| \} d\tau \quad (31)$$

De termen in het rechterlid van (31) worden afzonderlijk gemajoreerd.

$$\begin{aligned} \int_0^t |h_i v^{(k)}| d\tau &= \int_0^t \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_1} v_1^{(k)} + \dots + \frac{\partial f_i}{\partial x_n} v_n^{(k)} \right| d\tau \quad t \in [0, t_f] \quad (32) \\ &\leq \int_0^t \left\{ \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_1} \right| |v_1^{(k)}| + \dots + \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \right| |v_n^{(k)}| \right\} d\tau \\ &\leq \int_0^{t_f} \left\{ \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_1} \right| |v_1^{(k)}| + \dots + \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \right| |v_n^{(k)}| \right\} d\tau \leq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &\leq \int_0^{t_f} \left\{ \max_{t \in [0, t_f]} \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_1} \right| \max_{t \in [0, t_f]} |v_1^{(k)}| + \dots + \right. \\
 &\quad \left. \max_{t \in [0, t_f]} \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_n} \right| \max_{t \in [0, t_f]} |v_n^{(k)}| \right\} d\tau \\
 &\leq nt_f L_i \|v^{(k)}\| \tag{33}
 \end{aligned}$$

met $L_i = \left\| \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right\| = \max_{j=1,2,\dots,n} \max_{t \in [0, t_f]} \left| \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \right| (x^{(k)}, t) \quad i, j=1, 2, \dots, n$

$$\|v^{(k)}\| = \max_{i=1,2,\dots,n} \max_{t \in [0, t_f]} |v_i^{(k)}(t)|. \quad k=0, 1, \dots$$

Evenzo geldt

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \int_0^t |(v^{(k-1)})^T H_i(\theta, t) v^{(k-1)}| d\tau &\leq \frac{1}{2} \int_0^t \left\{ \left| \frac{\partial^2 f_i}{\partial x^2} \right| |v_1^{(k-1)}|^2 + \dots + \right. \\
 &\quad \left. \left| \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_n^2} \right| |v_n^{(k-1)}|^2 + \right. \\
 &\quad \left. 2 \left| \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_2} \right| |v_1^{(k-1)}| |v_2^{(k-1)}| + \dots + \right. \\
 &\quad \left. 2 \left| \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_1 \partial x_n} \right| |v_1^{(k-1)}| |v_n^{(k-1)}| + \dots \right\} d\tau \\
 &\leq \frac{1}{2} nt_f M_i \|v^{(k-1)}\|^2 \tag{34}
 \end{aligned}$$

$$\text{met } M_i = \max_{j,r=1,2,\dots,n} \max_{t \in [0,t_f]} \left| \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_r} \right|(\theta, t) \quad i=1,2,\dots,n.$$

Substitutie van de afgeschatte integralen (33) en (34) in (31) geeft

$$|v_i^{(k)}(t)| \leq nt_f (L_i \|v^{(k)}\| + \frac{1}{2} M_i \|v^{(k-1)}\|^2), \quad t \in [0,t_f], \quad k=1,2,\dots, \\ i=1,\dots,n.$$

Dan geldt ook dat

$$\max_{t \in [0,t_f]} |v_i^{(k)}(t)| \leq nt_f (L_i \|v^{(k)}\| + \frac{1}{2} M_i \|v^{(k-1)}\|^2) \quad i=1,2,\dots,n \\ \leq nt_f (\|J\| \|v^{(k)}\| + \frac{1}{2} \|H\| \|v^{(k-1)}\|^2) \quad i=1,2,\dots,n \quad (35)$$

$$\text{met } \|J\| = \max_{i=1,\dots,n} L_i, \quad \|H\| = \max_{i=1,\dots,n} M_i.$$

Het linkerlid van de ongelijkheid (35) is kleiner dan het rechterlid voor iedere i , dus ook voor de waarde van i waarbij het linkerlid maximaal is, dat wil zeggen

$$\max_{i=1,\dots,n} \max_{t \in [0,t_f]} |v_i^{(k)}(t)| \stackrel{\text{def}}{=} \|v^{(k)}\| \leq nt_f (\|J\| \|v^{(k)}\| + \frac{1}{2} \|H\| \|v^{(k-1)}\|^2)$$

of

$$\|v^{(k)}\| \leq c \|v^{(k-1)}\|^2 \quad k=1,2,\dots \quad (36)$$

$$\text{met } c = \frac{\frac{1}{2} nt_f \|H\|}{1 - nt_f \|J\|}.$$

Uit (26) volgt dat het proces, indien het convergeert, quadratisch convergeert. Op grond van dezelfde formule zijn twee kwalitatieve uitspraken ten aanzien van een (goede) convergentie te doen, namelijk dat bij gegeven normen voor de eerste en tweede afgeleiden $\|J\|$ en $\|H\|$

- de lengte van het interval t_f en
- het aantal vergelijkingen n

zo klein mogelijk gekozen moeten worden. Voor quantitative uitspraken is de foutenafschatting (36) niet bruikbaar omdat de in het voorgaande gemaakte afschattingen erg grof zijn.

Tenslotte wordt in deze paragraaf een schatting gemaakt van de fout die ontstaat als het proces na k iteratiestappen wordt afgebroken. Formeel is de vraagstelling als volgt:

Gegeven: $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq C \|x^{(k)} - x^{(k-1)}\|^2$ (quadratische convergentie)

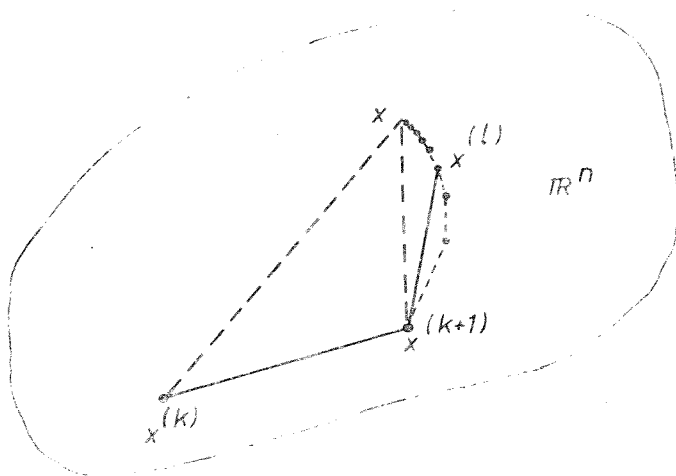
$$\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \epsilon \quad (\text{afbreekcriterium}) \quad (37)$$

dat wil zeggen het verschil tussen de k -de en de $k+1$ -ste benadering is kleiner geworden dan een van tevoren opgegeven nauwkeurigheid ϵ .

Gevraagd: Een schatting te geven van de afstand $\|x^{(k+1)} - x\|$ tot de werkelijke oplossing $x(t)$, waarbij

$$x = x(t) = \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} .$$

Oplossing: Beschouw $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|$, $1 \geq k$, $k=0,1,\dots$ en laat zien dat $\{x^{(k)}\}$ een Cauchy-rij is. Zie figuur 3.



Figuur 3 Cauchy-rij in \mathbb{R}^n

Volgens de driehoeksongelijkheid geldt

$$\begin{aligned} \left\| \underset{-X}{(1+1)}_{-X}^{(k)} \right\| &\leq \left\| \underset{-X}{(1+1)}_{-X}^{(1)} \right\| + \left\| \underset{-X}{(1)}_{-X}^{(k)} \right\| \\ &\leq \left\| \underset{-X}{(1+1)}_{-X}^{(1)} \right\| + \left\| \underset{-X}{(1)}_{-X}^{(1-1)} \right\| + \dots + \left\| \underset{-X}{(k+1)}_{-X}^{(k)} \right\| \quad (38) \end{aligned}$$

Volgens het afbreekcriterium (37) geldt vanaf zekere k

$$\left\| \underset{-X}{(k+1)}_{-X}^{(k)} \right\| \leq \varepsilon,$$

dus geldt met (36) ook

$$\begin{aligned} \left\| \underset{-X}{(k+2)}_{-X}^{(k+1)} \right\| &\leq C\varepsilon^2 \\ \left\| \underset{-X}{(k+3)}_{-X}^{(k+2)} \right\| &\leq C(C\varepsilon^2)^2 = C^3\varepsilon^4 \\ &\vdots \\ \left\| \underset{-X}{(1+1)}_{-X}^{(1)} \right\| &\leq \dots \frac{1}{C}(C\varepsilon)^{2^{1-k}} \end{aligned}$$

Optellen van deze termen en substitutie in (38) geeft

$$\left\| \underset{-X}{(1+1)}_{-X}^{(k)} \right\| \leq \varepsilon(1+h_1+h_1^3+h_1^7+\dots+h_1^{2^{1-k}}) \quad (39)$$

met $h_1 = C\varepsilon$.

Voor deze reeks is geen somformule bekend, de som kan echter gemajoreerd worden door 1) oneindig veel termen te nemen

2) de som vervolgens te majoreren door de som van een oneindig voortlopende meetkundige reeks.

$$\begin{aligned} \left\| \underset{-X}{(1+1)}_{-X}^{(k)} \right\| &\leq \varepsilon(1+h_1+h_1^3+h_1^7+\dots+h_1^{2^k}+\dots) \\ &\leq \varepsilon(1+h_1+h_1^2+h_1^3+\dots+h_1^k+\dots) \\ &\leq \varepsilon \frac{1}{1-h_1} = \frac{\varepsilon}{1-C\varepsilon} \quad (40) \end{aligned}$$

Verder geldt

$$\begin{aligned} \|x^{(1)} - x^{(0)}\| &\leq \varepsilon^{(0)} \\ \|x^{(2)} - x^{(1)}\| &\leq C(\varepsilon^{(0)})^2 \\ &\vdots \\ \|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| &\leq C^{2^{k-1}} (\varepsilon^{(0)})^{2^k} \quad (37) \quad \varepsilon \end{aligned}$$

zodat (40) geschreven kan worden als

$$\|x^{(1+k)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon^{(0)} \frac{h_0^{2^k - 1}}{1 - h_0^{2^k}} \quad (h_0 = C\varepsilon^{(0)}) \quad (41)$$

Met de eis

$$0 \leq h_0 = C\varepsilon^{(0)} \leq 1 \quad (42)$$

is het rechterlid van (41) voor toenemende k willekeurig klein te maken. Dus voor voldoende grote $k \geq K(\varepsilon)$ is het rechterlid kleiner dan een van tevoren voorgeschreven getal $\varepsilon \rightarrow \{x^{(k)}\}$ is een Cauchy-rij, met andere woorden de limiet $x(t)$ bestaat. Uit (41) volgt dan ook nog de schatting van de afstand tussen x en $x^{(k)}$, immers

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|x^{(1+k)} - x^{(k)}\| = \|x - x^{(k)}\| \leq \varepsilon^{(0)} \frac{h_0^{2^k - 1}}{1 - h_0^{2^k}} = \frac{\varepsilon}{1 - h_0^{2^k}}.$$

Voor grote waarden van k geldt dus bij benadering dat de werkelijke fout

$$\|x - x^{(k)}\| \leq \varepsilon \quad (43)$$

is, als voor de afbrekfout gegeven is $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| \leq \varepsilon$.

Hiermee wordt het convergentie-onderzoek voor de QL-methode afgesloten.

Samenvattend kan gezegd worden:

- kleine waarden van n en t_f verbeteren de convergentiesnelheid
- het proces is niet globaal convergent, dat wil zeggen het convergeert niet bij iedere willekeurige startvector $x^{(0)}$

- het is niet mogelijk het convergentiegebied aan te geven. Het convergentiegebied is dat deel van \mathbb{R}^n waarin $x^{(0)}$ moet liggen om tot een convergent proces te komen
- als het proces convergeert dan convergeert het quadratisch
- als de limiet bestaat dan is voor voldoende grote k de afstand tussen de twee laatste iteraties ongeveer gelijk aan de resterende afstand tot die limiet.

3 Het verwerken van de meetgegevens

3.1 Het invoeren van nieuwe differentiaalvergelijkingen voor de parameters

Stel in het stelsel gewone niet-lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste orde

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t), \quad x(t) \in \mathbb{R}^{n_0}, \quad t \in [0, t_f] \quad (44)$$

komen in het rechterlid de s onbekende en constante parameters (p_1, p_2, \dots, p_s) voor, dat wil zeggen dat het stelsel te schrijven is als

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_{n_0}, p_1, p_2, \dots, p_s, t), \quad i=1, 2, \dots, n_0, \quad t \in [0, t_f] \quad (45)$$

Voor de onbekende parameters worden dan s nieuwe onafhankelijke variabelen geïntroduceerd:

$$x_{n_0+j} = p_j, \quad j=1, 2, \dots, s.$$

Omdat de parameters constant verondersteld zijn geldt uiteraard

$$\frac{dx_{n_0+j}}{dt} = 0, \quad j=1, 2, \dots, s.$$

Het stelsel (45) kan nu geschreven worden als een nieuw stelsel

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n, t) \quad i=1, 2, \dots, n$$

waarin dus geen onbekende parameters meer voorkomen, hetgeen dan wel gaat ten koste van een groter aantal differentiaalvergelijkingen. Ter illustratie van het voorgaande wordt voor $n_0 = 2$, $s = 3$ een eenvoudig voorbeeld gegeven.

Stel

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= (p_1 t + p_2)x_1 + a_1 x_1 x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= b x_2 + p_3 x_1 x_2 \end{aligned} \right\} t \in [0, t_f] ,$$

waarin (a, b) bekende en (p₁, p₂, p₃) onbekende parameters zijn.

Substitueer

$$x_3 = p_1$$

$$x_4 = p_2$$

$$x_5 = p_3$$

waardoor een nieuw stelsel differentiaalvergelijkingen ontstaat waarin geen onbekende parameters meer voorkomen,

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= (x_3 t + x_4)x_1 + a x_1 x_2 \\ \frac{dx_2}{dt} &= b x_2 + x_5 x_1 x_2 \\ \frac{dx_3}{dt} &= 0 \\ \frac{dx_4}{dt} &= 0 \\ \frac{dx_5}{dt} &= 0 \end{aligned} \right\} t \in [0, t_f] .$$

Hierbij moet opgemerkt worden dat een van oorsprong lineair stelsel differentiaalvergelijkingen door het invoeren van nieuwe afhankelijke variabelen voor de parameters in het algemeen in een niet-lineair stelsel zal overgaan. Als voorbeeld wordt verwezen naar de bovenstaande substitutie waarbij de lineaire uitdrukking (p₁t+p₂)x₁ is vervangen door de niet-lineaire term (x₃t+x₄)x₁.

3.2 Differentiaalvergelijkingen met tussenvoorwaarden

Na het invoeren van nieuwe differentiaalvergelijkingen van de onbekende parameters wordt verder uitsluitend het stelsel (3)

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t), \quad x(t) \in \mathbb{R}^n, \quad t \in [0, t_f]$$

beschouwd. Zoals reeds in §2.1 is aangehaald bestaat er een stelling die onder zekere voorwaarden een eenduidige oplossing bij gegeven beginvoorwaarden (4) garandeert. Er kan bij de parameterbepaling echter niet van een beginwaardenprobleem worden uitgegaan. Immers tenminste voor de uit de onbekende parameters afkomstige differentiaalvergelijkingen zijn zeker geen beginvoorwaarden aanwezig.

Echter ook van de functies $\{x_1(t), x_2(t), \dots, x_{n_0}(t)\}$ kunnen beginvoorwaarden ontbreken. Zonder afbreuk te doen aan de algemeenheid kan gesteld worden dat van de functies $\{x_1(t), x_2(t), \dots, x_q(t)\}$ beginvoorwaarden $\{x_1(0), x_2(0), \dots, x_q(0)\}$ gegeven zijn, waarbij $1 \leq q \leq n_0$. De waarde van q is minstens 1 omdat het tijdstip van de eerste waarneming aan een der functies per definitie samenvalt met $t = 0$. Bij gebrek aan voldoende beginvoorwaarden is het stelsel differentiaalvergelijkingen (3) echter niet eenduidig oplosbaar! Om een eenduidige oplossing te verkrijgen wordt nu een voldoende groot aantal tussenvoorwaarden bekend verondersteld. Tussenvoorwaarden zijn gegeven (gemeten) functiewaarden op willekeurige tijdstippen op het interval $[0, t_f]$, waarbij de volgende notatie wordt gebruikt:

$$\begin{aligned} x_i(t_{ij}) &= j\text{-de waarneming aan de } i\text{-de functie, } j=0, 1, \dots, m_i, \quad i=1, 2, \dots, n. \\ m_i &= \text{aantal waarnemingen dat gedaan is aan } x_i(t), \text{ als } m_i = 0 \text{ is er} \\ &\quad \text{geen enkele waarneming aan de } i\text{-de functie gedaan.} \\ M &= \text{het aantal ontbrekende beginvoorwaarden; } M = n - q. \end{aligned}$$

Er zijn nu drie gevallen te onderscheiden:

- (I) $\sum_i m_i > M$: Een overbepaald systeem; meer waarnemingen dan onbekenden
- (II) $\sum_i m_i < M$: Een onderbepaald systeem; minder waarnemingen dan onbekenden
- (III) $\sum_i m_i = M$: Een bepaald systeem; evenveel waarnemingen als onbekenden.

Met onbekenden zijn hier bedoeld de ontbrekende beginvoorwaarden inclusief de onbekende parameters. Hoe de waarnemingen over de verschillende functies $x_1(t) \dots x_{n_0}(t)$ zijn verdeeld is hierbij niet van belang. Het ene uiterste is dat alle waarnemingen aan één functie zijn gedaan en geen enkele aan de resterende $n_0 - 1$ functies, het andere uiterste is het geval dat aan alle functies evenveel of vrijwel evenveel waarnemingen zijn verricht. Ook hoe de beschikbare waarnemingen aan een bepaalde functie over het interval $[0, t_f]$ zijn verdeeld is voor de analytische kant van het probleem niet van belang. Zoals later zal blijken is dat wel het geval voor de numerieke aspecten.

Voor een overbepaald systeem (I) moeten methoden uit de regressie-analyse, bijvoorbeeld de methode der kleinste kwadraten, worden toegepast om tot een eenduidig bepaald stelsel te komen. Hierop wordt in het kader van dit verslag niet verder ingegaan.

Voor een onderbepaald systeem (II) bestaan in het algemeen geen eenduidige oplossingen, dit probleem is niet zonder aanvullende informatie op te lossen. Echter ook voor het systeem (III), waarbij het aantal waarnemingen gelijk is aan het aantal onbekenden, is er geen zekerheid dat er een eenduidige oplossing bestaat.

Er zijn namelijk geen voldoende bruikbare stellingen die voor rand- of tussenwaardeproblemen voldoende voorwaarden voor het bestaan en de eenduidigheid van de oplossing geven. Nodige voorwaarde is (III) natuurlijk wel. Dat deze voorwaarde niet voldoende is voor existentie en eenduidigheid kan worden gedemonstreerd aan een eenvoudig voorbeeld:

Het stelsel

$$\frac{dx_1(t)}{dt} = \pi^2 x_2(t)$$

$$\frac{dx_2(t)}{dt} = -x_1(t)$$

met $t \in [0, 1]$ heeft de algemene oplossing

$$x_1(t) = c_1 \cos \pi t + c_2 \sin \pi t$$
$$x_2(t) = \frac{1}{\pi} c_2 \cos \pi t - \frac{1}{\pi} c_1 \sin \pi t$$

waarbij c_1 en c_2 willekeurige reële getallen zijn die uit de tussenvoorwaarden moeten worden bepaald. Als nu de tussenvoorwaarden

$$x_1(0) = 0, x_1(1) = 0 \tag{46}$$

die hier dus samenvallen met randvoorwaarden voor $x_1(t)$, worden gekozen, dan wordt de oplossing

$$\begin{aligned} x_1(t) &= c_2 \sin \pi t \\ x_2(t) &= \frac{1}{\pi} c_2 \cos \pi t, c_2 \text{ willekeurig,} \end{aligned}$$

dat wil zeggen de oplossing is niet eenduidig bepaald, er zijn oneindig veel oplossingen die aan de tussenvoorwaarden (46) voldoen.

Worden daarentegen de tussenvoorwaarden (randvoorwaarden)

$$x_1(0) = 0, x_1(1) = 1 \tag{47}$$

gekozen, dan bestaat er voor geen enkele combinatie van c_1 en c_2 een oplossing die hieraan voldoet. Uit dit eenvoudige voorbeeld moge blijken dat in het algemeen van te voren noch over de existentie noch over de eenduidigheid van de oplossing een uitspraak te doen is.

Het is niet de bedoeling om met dit voorbeeld op tussenvoorwaardeproblemen gebaseerde QL-methoden als onbruikbaar terzijde te schuiven. Het voorbeeld heeft wel nut in die zin dat de later verkregen numerieke oplossingen met de nodige aandacht op aspecten van existentie en eenduidigheid moeten worden bekeken. Als methode hiervoor lijkt een gevoeligheidsanalyse een geschikt middel. Aan de ene kant kleine variaties van de waarnemingen en inspectie van de gevonden parameters en beginvoorwaarden, aan de andere kant kleine variaties van de gevonden parameters en beginvoorwaarden en inspectie van de daarmee gesimuleerde waarnemingen. Grote verstoringen duiden dan op zijn minst in de richting van een slecht gesteld, of zelfs niet eenduidig oplosbaar probleem.

3.3 Superpositie van oplossingen

Voor het oplossen van stelsels gewone differentiaalvergelijkingen, ook voor niet-lineaire, met gegeven beginvoorwaarden, zijn uitstekende numerieke in-

tegratieroutines beschikbaar, zoals het vierde-orde Runge-Kutta integratieprogramma RKGS [2].

Voor rand- of tussenvoorwaarden zijn deze routines echter niet direct bruikbaar. Voor randwaardeproblemen zijn er wel methoden als "multiple shooting", differentiemethoden of methoden uit de variatierekening, voor geen van alle zijn echter standaard subroutines zoals die voor beginvoorwaarden beschikbaar. Door nu gebruik te maken van

- quasi-linearisatie
- superpositie van oplossingen

is het mogelijk om met beschikbare standaard integratieroutines voor beginwaardeproblemen het tussenwaardeprobleem

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t), \quad x(t) \in \mathbb{R}^n, \quad t \in [0,1]$$

$$x_i(t_{ij}) \text{ gegeven,} \tag{48}$$

$$t_{ij} \in [0,1], \quad i=1,2,\dots,n, \quad j=0,1,\dots,m_i, \quad \sum_{i=1}^n m_i = n$$

numeriek op te lossen. De hier ingevoerde normering $t \in [0,1]$ is geen beperking, zie §4.1.

Met de in hoofdstuk 2 afgeleide QL-methode wordt het niet-lineaire stelsel differentiaalvergelijkingen (3) omgezet in het iteratief op te lossen lineaire stelsel gekoppelde gewone differentiaalvergelijkingen van de eerste-orde

$$\frac{dx^{(k+1)}}{dt} = f(x^{(k)}, t) + J(x^{(k)}, t)(x^{(k+1)} - x^{(k)}), \quad x^{(k)}(t) \in \mathbb{R}^n,$$

$$t \in [0,1], \quad k=0,1,\dots \tag{49}$$

Dit omzetten in een lineair stelsel is een belangrijke stap in het proces omdat het hierna mogelijk is het superpositieprincipe toe te passen. Er wordt namelijk aangetoond dat via superpositie van lineair onafhankelijke oplossingen van het homogene deel van het stelsel differentiaalvergelijkingen (49) en een particuliere oplossing van (49) een rij vectorfuncties $x^{(k)}(t)$, $k=1,2,\dots$

gegenerereerd kan worden zodanig dat $x^{(k)}(t)$ voor $k=1,2,\dots$ voldoet aan het stelsel differentiaalvergelijkingen (49) én aan de eerder gegeven tussenvoorwaarden

$$x_i^{(k)}(t_{ij}) = x_i(t_{ij}) \quad (50)$$

voor $t_{ij} \in [0,1]$, $i=1,2,\dots,n$, $j=0,1,\dots,m_i$.

Indien de limiet

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)}(t) = x(t), \quad t \in [0,1]$$

bestaat, is $x(t)$ de oplossing van het gestelde tussenwaardeprobleem (48).

Voor iedere k ($k=0,1,\dots$) verloopt de superpositie als volgt:

Zij $u(t) \in \mathbb{R}^n$ de oplossing van de bij (49) behorende homogene vergelijking

$$\frac{du}{dt} = Ju, \quad J = J(x^{(k)}, t), \quad t \in [0,1]$$

met beginvoorwaarde $u(0) = (1,0,\dots,0)^T$.

Stel evenzo dat $v(t) \in \mathbb{R}^n$ de oplossing is van

$$\frac{dv}{dt} = Jv, \quad J = J(x^{(k)}, t), \quad t \in [0,1]$$

met beginvoorwaarde $v(0) = (0,1,0,\dots,0)^T$ en stel tenslotte $z(t) \in \mathbb{R}^n$ is de oplossing van de homogene vergelijking

$$\frac{dz}{dt} = Jz, \quad J = J(x^{(k)}, t), \quad t \in [0,1]$$

met beginvoorwaarde $z(0) = (0,0,\dots,0,1)^T$.

Zij verder $\phi(t) \in \mathbb{R}^n$ een particuliere oplossing van de volledige differentiaalvergelijking (49)

$$\frac{d\phi}{dt} = J\phi + g$$

met $J = J(x^{(k)}, t)$, $g = f(x^{(k)}, t) - J(x^{(k)}, t)x^{(k)}$, $t \in [0, 1]$

bijvoorbeeld verkregen met de beginvoorwaarden $\phi(0) = (1, 1, \dots, 1)^T$.

De $n + 1$ vectorfuncties $u(t), v(t), \dots, z(t)$ en $\phi(t)$ worden als beginwaardeproblemen op het interval $[0, 1]$ numeriek bepaald in de equidistante roosterpunten $\{t_r \mid t_r = (r-1)\Delta t, r=1, 2, \dots, m, \Delta t = 1/m\}$ met behulp van een beschikbare integratieprocedure zoals RKGS. Hierbij doen zich in principe geen moeilijkheden voor, het gaat immers om $n + 1$ gewone beginwaardeproblemen met tijdsafhankelijke coëfficiënten.

Uit de theorie van de gewone differentiaalvergelijkingen is bekend dat nu ook ieder lineair compositum van $u(t), v(t), \dots, z(t)$ en $\phi(t)$ voldoet aan het stelsel differentiaalvergelijkingen (49), dus

$$x^{(k+1)}(t) = c_1 u(t) + c_2 v(t) + \dots + c_n z(t) + \phi(t) \quad t \in [0, 1] \quad (51)$$

waarbij c_1, c_2, \dots, c_n nog nader te bepalen constanten zijn, voldoet eveneens aan (49). Deze constanten worden nu zo bepaald dat voldaan is aan de gegeven tussenwaarden op de tijdstippen $\{t_{ij}\}, i=1, 2, \dots, n, j=0, 1, \dots, m_i$.

Dit laatste levert namelijk juist een stelsel van n lineaire vergelijkingen met n onbekenden

$$c_1 u_i(t_{ij}) + c_2 v_i(t_{ij}) + \dots + c_n z_i(t_{ij}) = x_i^{(k+1)}(t_{ij}) - \phi_i(t_{ij}) \quad (52)$$

waaruit in het algemeen de coëfficiënten c_1, c_2, \dots, c_n kunnen worden bepaald, zodat met behulp van (51) $x^{(k+1)}(t)$ in alle roosterpunten $\{t_r\}$ berekend kan worden. Het oplossen van het lineaire stelsel vergelijkingen (52) kan gebeuren met een standaardprocedure zoals SIMQ, zie [2]. Het stelsel vergelijkingen wordt numeriek slecht oplosbaar als tijdstippen t_{ij} en $t_{i,j+1}$ dicht bij elkaar liggen. Bij glad verlopende oplossingen (u, \dots, z) worden dan immers in de coëfficiëntenmatrix behorend bij het stelsel (52) de rijen

$$(u_i(t_{ij}), \dots, z_i(t_{ij})) \text{ en}$$

$$(u_i(t_{i,j+1}), \dots, z_i(t_{i,j+1}))$$

vrijwel aan elkaar gelijk waardoor de matrix bijna singulier wordt.

Een detailprobleem bij het voorgaande is dat de numerieke functiewaarden voor $u(t)$, $v(t)$, ..., $z(t)$ en $\phi(t)$ slechts in de m roosterpunten $\{t_r\}$ berekend worden zodat de functiewaarden in de gegeven tussenpunten $\{t_{ij}\}$, die in het algemeen niet samenvallen met de roosterpunten, veelal door (lineaire) interpolatie verkregen moeten worden. Een verfijning, die nog niet in het huidige rekenmachineprogramma QUALIP is aangebracht, zou natuurlijk kunnen zijn waar nodig niet-equidistante stap-grootten in de integratieprocedure te nemen zodat behalve in de roosterpunten ook in de meetpunten functiewaarden voor de vectorfuncties u, v, \dots, z en ϕ en dus voor $x^{(k+1)}$ beschikbaar worden.

Het in het voorgaande beschreven proces voor het bepalen van de onbekenden $x_1(0) \dots x_n(0)$ kan tenslotte puntsgewijs als volgt samengevat worden:

- 1) Lineariseer het gegeven niet-lineaire stelsel met de QL-methode.
- 2) Kies een startvector $x^{(0)*}$, $k:=0$.
- 3) Bepaal numeriek n lineair onafhankelijke oplossingen van de homogene vergelijking.
- 4) Bepaal numeriek een particuliere oplossing.
- 5) Bereken de constanten $c_1 \dots c_n$ met behulp van de tussenvoorwaarden.
- 6) Stel de vectorfunctie $x^{(k+1)}$ samen.
- 7) Vergelijk $x^{(k+1)}$ met $x^{(k)}$.
- 8) Indien daarbij niet voldaan is aan een convergentie criterium wordt k met 1 verhoogd en het proces wordt vervolgd bij punt 3, anders wordt het proces beëindigd.

* Op de keuze van de startfunctie $x^{(0)}$ wordt in §4.2 nader ingegaan.

4 Een toepassing van de methode

4.1 De vergelijkingen van Lotka-Volterra; schalen

De QL-methode van het bepalen van parameters via tussenvoorwaarden wordt in dit hoofdstuk gedemonstreerd aan een klassiek deterministisch model voor de beschrijving van de continue groei van één jager met één prooi. Dit in 1926 door Lotka en Volterra ontwikkelde model is niet zo zeer gekozen omdat het op gedetailleerde realistische wijze de groei van jager en prooi beschrijft, maar omdat het de eenvoudigste representant is van het essentieel niet-lineaire gedrag van een jager-prooi relatie. De vergelijkingen van Lotka-Volterra zijn volgens [6]

$$\left. \begin{aligned} \frac{dU}{d\tau} &= U(a_1 - \alpha V) \\ \frac{dV}{d\tau} &= V(-b_1 + \beta U) \end{aligned} \right\} \tau \geq 0 \quad (53)$$

waarin

$U(\tau)$ = concentratie van de prooi in kgm^{-3}

$V(\tau)$ = concentratie van de jager in kgm^{-3}

a_1 = groeisnelheid van de prooi in sec^{-1}

b_1 = sterftesnelheid van de jager in sec^{-1}

α, β = interactie tussen de soorten in $\text{kg}^{-1} \text{m}^3 \text{sec}^{-1}$

τ = tijd in sec

$a_1, b_1, V(0)$ en $U(0)$ worden onbekend verondersteld, α en β zijn bekende parameters.

De bovenstaande vergelijkingen lenen zich niet direct voor numerieke fouten-beschouwingen omdat de voorkomende grootheden niet dimensieloos en niet genormeerd zijn. Het dimensieloos maken en normeren van de in de vergelijkingen voorkomende grootheden wordt hier schalen genoemd. Wat betreft de afhankelijke grootheden, de concentraties van de jager en de prooi, is dit niet zo moeilijk. Er wordt een schatting (\hat{U}_0, \hat{V}_0) gemaakt van de evenwichtsconcentraties U_0 en V_0 . Deze evenwichtsconcentraties worden gevonden door de rechterleden in (53) nul te stellen (de stationaire oplossing)

$$\frac{dU}{d\tau} = 0 \rightarrow V_0 = \frac{a_1}{\alpha}, \quad \frac{dV}{d\tau} = 0 \rightarrow U_0 = \frac{b_1}{\beta} \quad (54)$$

De grootheden \hat{U}_0 en \hat{V}_0 worden karakteristieke schalen voor de concentraties genoemd. Voor de onafhankelijke variabele, de tijd, is het niet zo gemakkelijk een karakteristieke schaal te bepalen. Het is bovendien heel goed mogelijk dat verschillende verschijnselen zich op verschillende tijdschalen afspelen, bijvoorbeeld algen: twee dagen, zooplankton: een week, nutriënten: een maand. In dat geval wordt de karakteristieke tijd van het snelst fluctuerende verschijnsel op $[0,1]$ getransformeerd. Van het gegeven stelsel is echter bekend dat $U(\tau)$ en $V(\tau)$ zich in de tijd op overeenkomstige wijze gedragen, dat wil zeggen eenzelfde tijdschaal hebben. Als karakteristieke tijd wordt hier gedefinieerd een tijd τ_0 zodanig, dat de norm van de eerste afgeleide van de getransformeerde functie gelijk is aan 1. Dit wordt bereikt door de waarde

$$\tau_0 = \left\{ \max_{\tau \geq 0} \left| \frac{d(U/U_0)}{d\tau} \right| \right\}^{-1} \quad (55)$$

voor de tijdschaal te kiezen. Voor τ_0 is natuurlijk slechts een schatting $\hat{\tau}_0$ beschikbaar. Van het oorspronkelijke tijdsdomein $\tau \geq 0$ wordt alleen het deelinterval $\tau \in [0, \tau_0]$ getransformeerd op $t \in [0,1]$ met $t = \tau/\hat{\tau}_0$. Met de transformaties

$$\begin{aligned} x_1 &= U/\hat{U}_0 \\ x_2 &= V/\hat{V}_0 \\ t &= \tau/\hat{\tau}_0 \end{aligned} \quad (56)$$

gaat het gegeven stelsel (53) over in het volgende stelsel differentiaalvergelijkingen met dimensieloos gemaakte en genormeerde grootheden

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= ax_1(1-x_2) \\ \frac{dx_2}{dt} &= -bx_2(1-x_1) \end{aligned} \right\} t \in [0,1] \quad (57)$$

met $a = a_1 \hat{\tau}_0$ en $b = b_1 \hat{\tau}_0$. Voor het stelsel (57) wordt vervolgens in de rest van deze paragraaf een uitgewerkt voorbeeld van de toepassing van de QL-methode gegeven.

Voorbeeld: Zij gegeven het stelsel gewone niet-lineaire differentiaalvergelijkingen (57) met de tussenvoorwaarden

$$\left. \begin{aligned} x_1(0.0) &= 1.200\ 000 \\ x_1(0.3) &= 1.237\ 582 \\ x_1(0.7) &= 0.696\ 611 \\ x_1(1.0) &= 1.062\ 229 \end{aligned} \right\} \quad (58)$$

en gevraagd de bij (57) en (58) behorende waarde voor de beginvoorwaarde $x_2(0)$ en de waarden voor de parameters a en b te bepalen.

De tussenvoorwaarden zijn overigens in 6 decimalen nauwkeurig gesimuleerd door het stelsel differentiaalvergelijkingen (57) met de standaard integratieroutine RKGS voor de waarden

$$\{x_1(0) = 1.2, x_2(0) = 0.5, a = 3, b = 12\} \quad (59)$$

als normaal beginvoorwaardeprobleem op te lossen. De tussenvoorwaarden zijn hierbij netjes verdeeld over het karakteristieke interval $[0,1]$. Er zijn al-
léén tussenvoorwaarden voor $x_1(t)$ genomen, van $x_2(t)$ zijn dus geen tussenvoorwaarden beschikbaar!

Zoals eerder is vermeld worden voor de parameters a en b nieuwe differentiaalvergelijkingen ingevoerd. Met de substituties

$$x_3(t) = a$$

$$x_4(t) = b$$

gaat het stelsel (57) over in het volgende volledige stelsel differentiaalvergelijkingen

$$\left. \begin{aligned} \frac{dx_1}{dt} &= x_1 x_3 (1-x_2) \\ \frac{dx_2}{dt} &= -x_2 x_4 (1-x_1) \\ \frac{dx_3}{dt} &= 0 \\ \frac{dx_4}{dt} &= 0 \end{aligned} \right\} x(t) \in \mathbb{R}^4, t \in [0,1] \quad (60)$$

Het proces voor het bepalen van de onbekenden $\{x_2(0), x_3(0), x_4(0)\}$ wordt nu aan de hand van het in §3.3 gegeven schema stap voor stap nagelopen.

1) Lineariseer het gegeven niet-lineaire stelsel met de QL-methode

De bij het stelsel differentiaalvergelijkingen (60) behorende rechterleden zijn

$$\begin{aligned} f_1(x,t) &= x_1 x_3 (1-x_2) \\ f_2(x,t) &= -x_2 x_4 (1-x_1) \\ f_3(x,t) &= 0 \\ f_4(x,t) &= 0 \end{aligned}$$

Door het bepalen van de partiële afgeleiden $\partial f_i / \partial x_j$ $i=1, \dots, 4$ $j=1, \dots, 4$ volgt hieruit met definitie (8) de bijbehorende matrix van Jacobi

$$J(x,t) = \begin{pmatrix} x_3(1-x_2) & -x_1 x_3 & x_1(1-x_2) & 0 \\ x_2 x_4 & -x_4(1-x_1) & 0 & -x_2(1-x_1) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Het vooraf met de hand differentiëren voor het bepalen van de Jacobiaan kan voor een groot en gecompliceerd stelsel een ernstig bezwaar voor het toepassen van de QL-methode vormen.

Het iteratief op te lossen stelsel gewone lineaire differentiaalvergelijkingen

is, zoals in §2.1 is afgeleid, dan

$$\frac{dx^{(k+1)}}{dt} = f(x^{(k)}, t) + J(x^{(k)}, t)(x^{(k+1)} - x^{(k)})$$

met

$$f(x^{(k)}, t) = \begin{pmatrix} x_1^{(k)} x_3^{(k)} (1-x_2^{(k)}) \\ -x_2^{(k)} x_4^{(k)} (1-x_1^{(k)}) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$J(x^{(k)}, t) = \begin{pmatrix} x_3^{(k)} (1-x_2^{(k)}) & -x_1^{(k)} x_3^{(k)} & x_1^{(k)} (1-x_2^{(k)}) & 0 \\ x_2^{(k)} x_4^{(k)} & -x_4^{(k)} (1-x_1^{(k)}) & 0 & -x_2^{(k)} (1-x_1^{(k)}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

waarbij de functies $x_i^{(k)} = x_i^{(k)}(t)$ voor $i=1,2,3,4$ in de roosterpunten $\{t = t_r \mid t_r = (r-1)\Delta t, r=1,2,\dots,m, \Delta t = 1/m\}$ gegeven zijn voor respectievelijk $k=0,1,\dots$.

Het aantal roosterpunten m moet groot genoeg zijn om op het beschouwde interval $[0,1]$ alle functies $x_i(t)$ $i=1,\dots,4$ voldoende te kunnen representeren. Een veel gebruikte vuistregel in de numerieke wiskunde is dat de roosterafstand Δt zo gekozen moet worden dat de kortste golf in het verschijnsel met circa 10 punten gerepresenteerd wordt. In dit voorbeeld is gekozen $m = 11$. De invloed van m op de nauwkeurigheid is reeds in §2.2 besproken.

2) Kies een startvector $x^{(0)}$, $k:=0$

Bij het bepalen van een nulpunt van een functie met de methode van Newton is het verstandig om de eerste schatting voor het nulpunt zo dicht mogelijk bij het nulpunt te kiezen. Hetzelfde geldt voor de QL-methode, dat wil zeggen er moet geprobeerd worden alle beschikbare kennis over het verloop van de oplossing $x(t)$ reeds in de startvector $x^{(0)}(t)$ te investeren. Voor $x_i^{(0)}(t)$ zijn vier tussenvoorwaarden (58) gegeven; het ligt voor de hand om verder in de roosterpunten $\{t_r\}$ $r=1,\dots,m$ lineair tussen deze waarden te interpoleren, zie

figuur 5. Over het verloop van $x_2^{(o)}(t)$ is verder niets bekend, er is gekozen voor een constante waarde. Deze constante wordt, evenals de constanten voor de initiële keus van $x_3^{(o)}(t)$ en $x_4^{(o)}(t)$, op grond van eventueel aanwezige ervaring zo goed mogelijk gekozen. In het voorbeeld is genomen

$$\left. \begin{array}{l} x_1^{(o)}(t_r) \text{ via lineaire interpolatie tussenvoorwaarden} \\ x_2^{(o)}(t_r) = 1.0 \\ x_3^{(o)}(t_r) = 2.0 \\ x_4^{(o)}(t_r) = 10.00 \end{array} \right\} \text{ in alle basispunten } \{t_r\}$$

3) Bepaal numeriek n lineair onafhankelijke oplossingen van de homogene vergelijking

Achtereenvolgens worden numeriek met de standaard integratieroutine RKGS [2] met zelfkiezende stapgrootte de volgende beginwaardeproblemen opgelost:

$$\begin{array}{ll} du/dt = J(x^{(k)}, t)u & \text{met } u(0) = (1, 0, 0, 0)^T \\ dv/dt = J(x^{(k)}, t)v & \text{met } v(0) = (0, 1, 0, 0)^T \\ dw/dt = J(x^{(k)}, t)w & \text{met } w(0) = (0, 0, 1, 0)^T \\ dz/dt = J(x^{(k)}, t)z & \text{met } z(0) = (0, 0, 0, 1)^T \end{array}$$

De vectorfuncties $\{u(t), v(t), w(t), z(t)\} \in \mathbb{R}^4$ worden in de roosterpunten $\{t_r\}$ in 6 cijfers nauwkeurig berekend en bewaard in de $(n \times n \times m)$ -matrix X_o .

Door Lee [3] wordt een methode genoemd om zo nodig het hiervoor benodigde geheugengebruik te beperken.

4) Bepaal numeriek een particuliere oplossing

Op dezelfde manier als hierboven wordt met RKGS numeriek het beginwaardeprobleem

$$d\phi/dt = f(x^{(k)}, t) + J(x^{(k)}, t)(x^{(k+1)} - x^{(k)}) \text{ met } \phi(0) = (1, 1, 1, 1)^T$$

opgelost. De berekende functiewaarden

$$\phi(t_r) = \begin{pmatrix} \phi_1(t_r) \\ \phi_2(t_r) \\ \phi_3(t_r) \\ \phi_4(t_r) \end{pmatrix}, \quad t_r = (r-1)\Delta t \quad r=1, \dots, m$$

worden in de (nxm)-matrix X_1 opgeborgen.

5) Bereken de constanten $c_1 \dots c_n$ met behulp van de tussenvoorwaarden

Uit het lineaire stelsel van 4 vergelijkingen met 4 onbekenden

$$c_1 u_1(t_{11}) + c_2 v_1(t_{11}) + c_3 w_1(t_{11}) + c_4 z_1(t_{11}) = x_1^{(k)}(t_{11}) - \phi_1(t_{11})$$

$$c_1 u_1(t_{12}) + c_2 v_1(t_{12}) + c_3 w_1(t_{12}) + c_4 z_1(t_{12}) = x_1^{(k)}(t_{12}) - \phi_1(t_{12})$$

$$c_1 u_1(t_{13}) + c_2 v_1(t_{13}) + c_3 w_1(t_{13}) + c_4 z_1(t_{13}) = x_1^{(k)}(t_{13}) - \phi_1(t_{13})$$

$$c_1 u_1(t_{14}) + c_2 v_1(t_{14}) + c_4 w_1(t_{14}) + c_4 z_1(t_{14}) = x_1^{(k)}(t_{14}) - \phi_1(t_{14})$$

met $\{t_{11}=0.0, t_{12}=0.3, t_{13}=0.7, t_{14}=1.0\}$ worden de coëfficiënten c_1, c_2, c_3 en c_4 berekend. Het stelsel lineaire vergelijkingen is opgelost met de standaard subroutine SIMQ, zie [2]. In het geval dat de meetpunten $\{t_{ij}\}$ niet samenvallen met de roosterpunten $\{t_r\}$ worden de benodigde functiewaarden $u(t_{1j}), \dots, \phi(t_{1j})$ $j=1, \dots, 4$ via lineaire interpolatie uit de in de matrices X_0 en X_1 bewaarde roosterwaarden $u(t_r), \dots, \phi(t_r)$ berekend.

6) Stel de vectorfunctie $x^{(k+1)}$ samen

Met formule (51) kan nu in de roosterpunten $\{t_r\}$ de nieuwe benadering $x^{(k+1)}$ worden samengesteld

$$x_i^{(k+1)}(t_r) = c_1 u_i(t_r) + c_2 v_i(t_r) + c_3 w_i(t_r) + c_4 z_i(t_r) + \phi_i(t_r) \quad i=1, 2, 3, 4.$$

7) Vergelijk $x^{(k+1)}$ met $x^{(k)}$

Voor het bepalen van de afstand tussen de vectorfuncties $x^{(k+1)}$ en $x^{(k)}$ worden de volgende grootheden ingevoerd:

$$\begin{aligned}
 d_1 &= \max_{r=1, \dots, m} |x_1^{(k+1)}(t_r) - x_1^{(k)}(t_r)| \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 d_n &= \max_{r=1, \dots, m} |x_n^{(k+1)}(t_r) - x_n^{(k)}(t_r)| .
 \end{aligned}$$

Als afstand is gedefinieerd $\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\| = \max_{i=1, \dots, n} d_i$.

8) Indien daarbij niet voldaan is aan een convergentiecriterium wordt k met 1 verhoogd en het proces wordt vervolgd bij punt 3, anders wordt het proces beëindigd

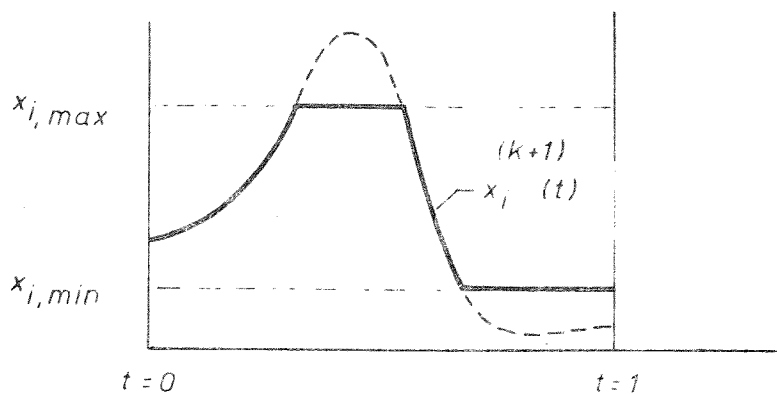
Als convergentiecriterium is gekozen dat voldaan moet zijn aan

$$d_i \leq \varepsilon_i \quad i=1, \dots, n$$

met van te voren opgegeven $\varepsilon_i = 10^{-6}$ ($i=1, \dots, n$). Als voldaan is aan dit convergentiecriterium wordt het resultaat $x^{(k+1)}$ en de bijbehorende waarde van k afgedrukt en het proces wordt beëindigd. Het proces wordt eveneens beëindigd als $k > 20$ zonder dat aan het convergentiecriterium is voldaan.

Er is gebleken dat het nuttig is om in deze stap eveneens te testen op "fysische restricties", dat wil zeggen dat berekende functiewaarden $x^{(k+1)}(t_r)$ die buiten een van te voren opgegeven gebied vallen worden "afgesneden".

Zie figuur 4.



Figuur 4 Afsnijden van niet-acceptabele functiewaarden

In het gegeven voorbeeld zijn de waarden

$$x_{1,\max} = x_{2,\max} = 2$$

$$x_{3,\max} = 4$$

$$x_{4,\min} = x_{2,\min} = x_{3,\min} = x_{4,\min} = 0.01$$

toegepast. Indien niet voldaan is aan het convergentiecriterium en $k \leq 20$ wordt k met 1 verhoogd en teruggesprongen naar punt 3.

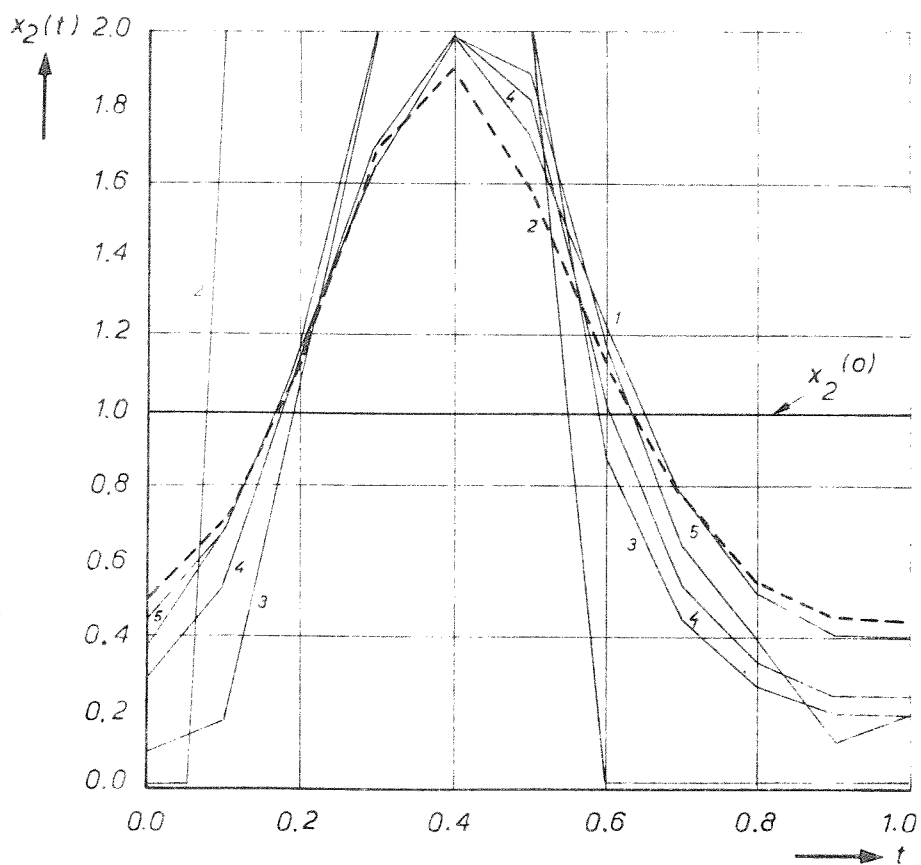
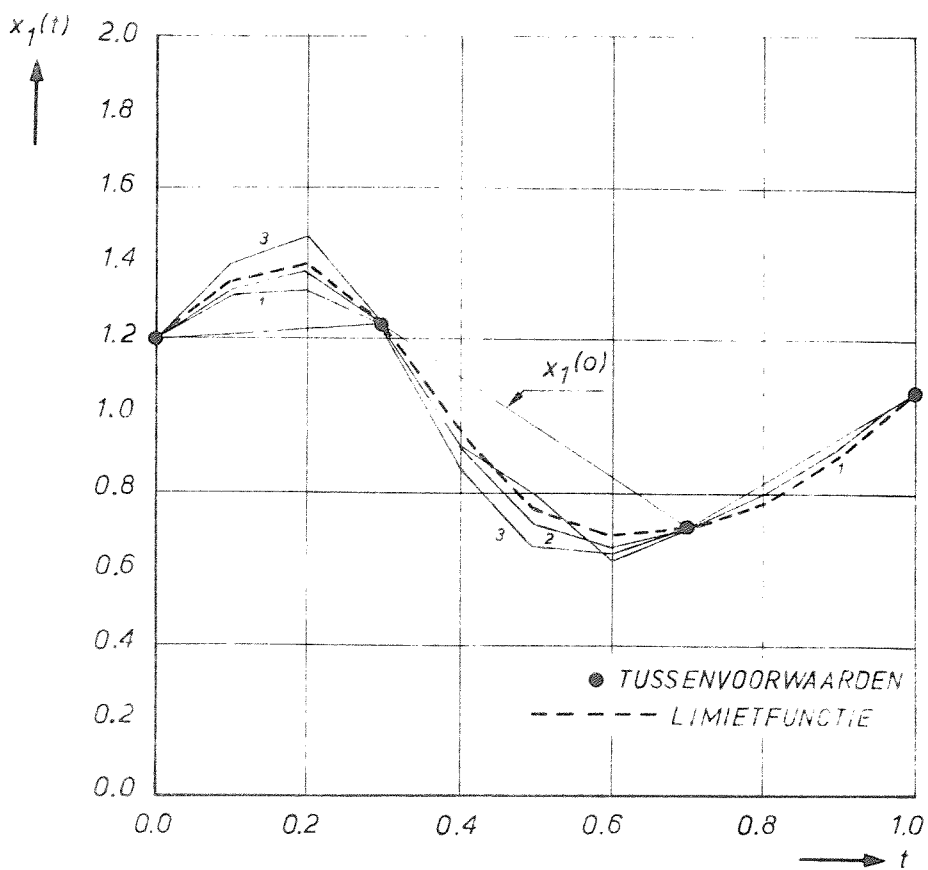
Voor het in het voorgaande beschreven QL-proces is een FORTRAN-programma genaamd QUALIP ontwikkeld waarmee het bovenstaande voorbeeld is uitgewerkt. De resultaten zijn weergegeven in tabel 2 respectievelijk figuur 5. De berekeningen zijn uitgevoerd op de DEC-10 computersysteem van de Landbouwhogeschool Wageningen.

k	$x_2^{(k)}(0)$	$x_3^{(k)}(0)$	$x_4^{(k)}(0)$
0	1,000	2,000	10,000
1	0,387	0,010	16,563
2	0,010	1,033	20,000
3	0,103	1,678	20,000
4	0,303	2,025	18,606
5	0,458	2,608	12,789
6	0,481	2,853	12,633
7	0,500	2,999	11,973
8	0,498	2,987	12,051
9	0,498	2,989	12,042

Tabel 2 Resultaten $x^{(k)}(0)$ van het QL-iteratieproces

De paragraaf wordt afgesloten met een korte discussie van deze resultaten.

Voor het gegeven voorbeeld geldt dat voor $k > 9$ de uitkomsten niet meer veranderen. Dat de voor $k = 9$ gegeven waarden van de onbekenden niet gelijk zijn aan de oorspronkelijke gegevens ($x_2(0) = 0.5$, $x_3 = 3$, $x_4 = 12$) ligt niet



Figuur 5 Verschillende met QUALIP berekende iteraties (voorbeeld §4.1)

aan de rekenmachinenauwkeurigheid maar hangt samen met de gekozen kleine waarde voor het aantal roosterpunten ($m = 11$).

Algemeen kan overigens gesteld worden dat in de literatuur bij gecompliceerde numerieke processen zoals eigenwaardebepaling, zoeken van maxima, quasi-linearisering en dergelijke altijd wel een of meer goed werkende voorbeelden worden gegeven. Dit zegt op zichzelf nog niet zoveel over de algemene toepasbaarheid van zo'n proces. Een bewijs van de algemene geldigheid is zelden te leveren. Dit geldt ook hier.

Op basis van het gegeven voorbeeld zou geconcludeerd kunnen worden dat de QL-methode nog niet zo slecht werkt. Dat is ook inderdaad het geval als men in de buurt van de oplossing komt. (Zie de 5e en volgende iteraties in tabel 2.) In de loop van het onderzoek is echter gebleken dat bij minder gelukkig gekozen startfuncties veelal divergentie optreedt. Hiervan worden geen voorbeelden gegeven. Ook de keus van de restricties kan invloed hebben op het al dan niet convergeren van het proces. (Zie de 1e tot en met 3e iteratie van het gegeven voorbeeld.) Zonder de toegepaste restricties divergeert het iteratieproces in het gegeven voorbeeld.

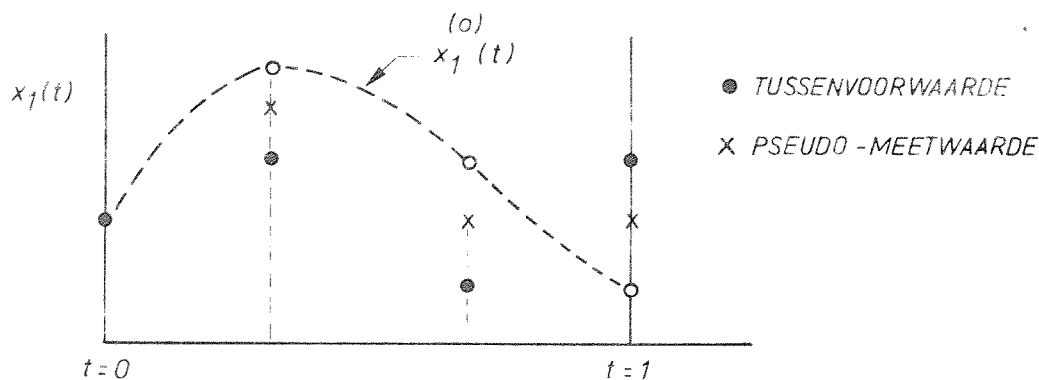
Concluderend kan gezegd worden dat de basis voor het toepassen van de QL-methode nog niet breed is. Het bruikbaarheidsgebied van de methode zal moeten groeien door praktische toepassingen ook op andere differentiaalvergelijkingen en andere configuraties van meetgegevens.

4.2 Vergroting van het convergentiegebied met bisectie

Bij het gebruik van het in §4.1 genoemde programma QUALIP kan zich gemakkelijk een ernstige complicatie voordoen, namelijk dat het proces bij de gekozen startvector niet convergeert. Het manipuleren met andere startvectoren of gewijzigde fysische restricties kan nog wel een uitkomst brengen, er is echter geen "zekere" manier aan te geven waarmee een startvector binnen het convergentiegebied bepaald kan worden. In de literatuur wordt aan dit aspect vrijwel geen aandacht besteed.

Er is veel tijd besteed aan het zoeken naar een zelfstartend globaal convergent proces. Het hiervoor ontwikkelde FORTRAN-programma heet ZQL, de toegepaste methode is gebaseerd op bisectie en wordt hieronder beschreven.

Stel $\{x_1^{(0)}(0), \dots, x_n^{(0)}(0)\}$ is een redelijke schatting voor de onbekenden. Met deze waarden als beginvoorwaarde kan het stelsel niet-lineaire differentiaalvergelijkingen (57) direct numeriek geïntegreerd worden. Het resultaat $x^{(0)}(t)$ zal in het algemeen niet voldoen aan de gegeven tussenvoorwaarden. Was dit namelijk wel het geval dan was het probleem immers opgelost. Stel nu dat met de zo gegenereerde startvector $x^{(0)}(t)$ en de gegeven tussenvoorwaarden het QL-proces niet convergeert. Er worden dan "pseudo-meetwaarden" gegenereerd halverwege $x^{(0)}(t)$ en de gegeven meetwaarden (bisectie), zie figuur 6.



Figuur 6 Het genereren van pseudo-meetwaarden

Deze pseudo-meetwaarden worden als nieuwe tussenvoorwaarden beschouwd en er wordt weer geprobeerd of het QL-proces met de bovengenoemde startvector $x^{(0)}(t)$ en de nieuwe tussenvoorwaarden convergeert. Als het proces divergeert worden met bisectie weer nieuwe pseudo-meetwaarden tussen $x^{(0)}(t)$ en de vorige pseudo-meetwaarden gegenereerd.

De afstand tussen $x^{(0)}(t)$ en de pseudo-meetwaarden gaat op deze manier naar nul zodat er vanaf zekere bisectie convergentie te verwachten is. De dan verkregen benadering $x^{(k)}(t)$ wordt opnieuw als startvector $x^{(0)}(t)$ gebruikt. Deze startvector is iets "beter" dan de voorgaande in die zin dat hij dichterbij de oorspronkelijke tussenvoorwaarden ligt.

In een aantal proefberekeningen is echter gebleken dat deze bisectie ook zeker niet in alle gevallen tot een globaal convergent proces leidt. In de divergente gevallen bleek dat de "gebonden" functies, dat wil zeggen die functies waarvoor tussenvoorwaarden beschikbaar waren wel via bisecties dichterbij de tussenvoorwaarden te brengen waren, de "vrije" functies, dat wil zeggen de

functies zonder tussenvoorwaarden, liepen echter snel weg uit het acceptabel geachte gebied. Voor de oorzaak van dit divergente gedrag is nog geen plausible verklaring gevonden.

In een later stadium van het onderzoek zou eerst moeten worden nagegaan of de moeilijkheden bij het bepalen van een goede startvector met bisectie specifiek zijn voor het gegeven stelsel differentiaalvergelijkingen van Lotka-Volterra dan wel voor de gekozen methode.

5 Samenvatting en conclusies

Met behulp van de reeks van Taylor is een iteratief proces ontwikkeld om een stelsel gekoppelde gewone niet-lineaire differentiaalvergelijkingen van de eerste orde om te zetten in een recursief op te lossen stelsel gekoppelde gewone lineaire differentiaalvergelijkingen. Voor dit quasi-lineariseringsproces zijn enige convergentie-eigenschappen bewezen. Een inherent nadeel blijkt te zijn dat de methode niet globaal convergent is.

Voor het bepalen van onbekende parameters en onbekende beginvoorwaarden uit meetgegevens wordt gebruik gemaakt van superpositie. Hierbij is het aantal meetgegevens even groot als het aantal onbekenden. De methode wordt gedemonstreerd aan een stelsel Lotka-Volterra vergelijkingen. De QL-methode blijkt uitstekend te voldoen mits de beginschattingen voldoende dicht bij de oplossing liggen.

Er zijn twee FORTRAN-programma's ontwikkeld voor het toepassen van de QL-methode, het ene gebaseerd op beginschattingen door de meetpunten, het andere gebaseerd op een in het programma zelf gegenereerde startvector en een bisectie methode om het convergentiegebied te vergroten. Bij toepassing van beide programma's wordt een beroep gedaan op het inzicht in het te beschrijven verschijnsel en de ervaring van de gebruiker om tot een convergente rij benaderingen te komen.

Aanbevolen wordt om het onderzoek af te ronden met het ontwikkelen van de twee volgende programma's voor parameterschatting met quasilinearisering:

1. Een programma toepasbaar voor waarnemingen met meetpunten.
2. Een programma waarin een goede startvector wordt bepaald.

De ontwikkeling van het eerste programma is rechtstreeks realiseerbaar. Als uitgangspunt dient het programma QUALIP. Voorgesteld wordt om een kleinste kwadraten-criterium toe te passen waarbij de gewogen som van de kwadraten van de afwijkingen tussen meetwaarden en oplossing minimaal moet zijn.

Voor het ontwikkelen van het tweede programma moet eerst enig vooronderzoek worden gedaan. Eerst moet worden nagegaan of de gerezen moeilijkheden met bisectie specifiek zijn voor het gekozen stelsel differentiaalvergelijkingen

van Lotka-Volterra. Zo ja, dan moet een andere stelsel differentiaalvergelijkingen, bijvoorbeeld een stelsel met een stabiele limietcyclus, worden beschouwd. Zo neen, moet de methode voor het bepalen van een goede startvector gebaseerd op bisectie worden verworpen. Aanbevolen wordt om daarna een drietal methoden voor het genereren van een voldoende goede startvector voor globale convergentie te onderzoeken en met elkaar te vergelijken. Voorgesteld worden systematische variatie van de parameters, gradiëntenmethode en invariant imbedding. Uit de drie of vier dan beschikbare methoden voor het berekenen van een goede startvector moet tenslotte een keuze voor het definitieve programma voor parameterschatting worden gemaakt.

LITERATUUR

- 1 RICHARD E. BELLMAN and ROBERT E. KALABA.
Quasilinearization and Nonlinear Boundary-Value Problems.
American Elsevier Publishing Company, Inc., New York, 1965.
- 2 IBM System/360 Scientific Subroutine Package
(360A-CM-03X) Version III.
Fourth edition, H20-0205-3, 1968.
- 3 E. STANLEY LEE.
Quasilinearization and Invariant Imbedding.
Academic Press, New York and London, 1968.
- 4 H. STEHFEST.
Modelltheoretische Untersuchungen zur Selbstreinigung von Fließ-
gewässern.
Kernforschungszentrum Karlsruhe.
Institut für Angewandte Systemtechnik und Reaktorphysik, August 1973.
- 5 J. STOER - R. BULIRSCH.
Einführung in die Numerische Mathematik II.
Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1973.
- 6 R.M. MAY.
Stability and complexity in model ecosystems.
Princeton University Press, second edition, Princeton, 1974.

p.o. box 177

delft

the netherlands