107: Razdelčni in nelinearni modeli

Peter Rupnik

3. december 2018

1 Prva naloga

1.1 Naloga

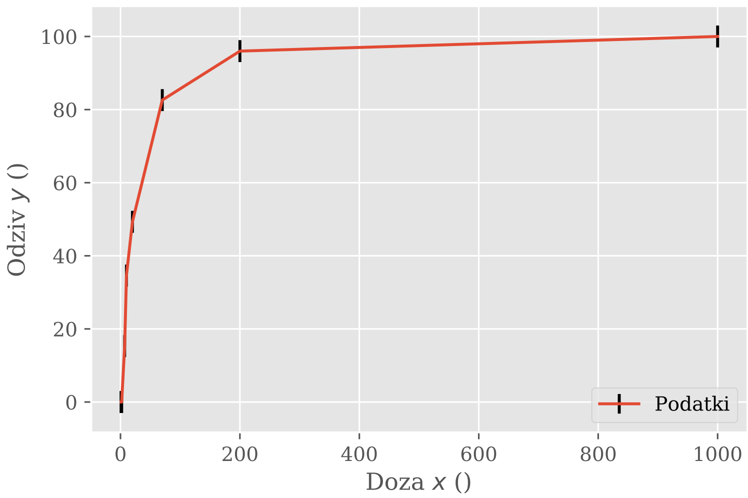
Farmakološki model iz Naloge 6 lahko razširimo z vpeljavo novega parametra p,

$$y = \frac{y_0 x^p}{x^p + a^p}.$$

Modelski parametri sedaj nastopajo nelinearno. Določi vrednosti parametrov y_0, a in p. Razišči statistično upravičenost dodatnega parametra.

1.2 Tipanje problema

Uvozil sem podatke in jih ponovno narisal za osvežitev spomina. Najdemo jih na sliki 1.



Slika 1: Originalni podatki, ki jih bomo modelirali.

Naslednji korak je bil priprava modelske funkcije, ki sprejme neodvisno spremenljivko x in vektor parametrov $\vec{a} = [y_0, a, p]$.

Namesto definiranja svoje funkcije za izračun χ^2 bi lahko verjetno uporabil že vgrajeno funkcijo `chisquare` iz modula `scipy.stats`, ki sprejme vektor izmerjenih $[y_i]$, vektor izračunanih – modeliranih $[f(x_i; \vec{a})]$ in število parametrov in vrne vrednost statistike χ^2

in p-vrednost, a sem se odločil, da jo zaradi transparentnosti definiram sam, da bom točno vedel, kaj dela ‘under the hood’[1].

1.3 Luščenje parametrov z vgrajeno metodo curve_fit

Prvi poskus je luščenje parametrov z metodo `scipy.optimize.curve_fit` po Levenberg-Marquardtovem algoritmu.

Rezultati pri fitanju s podano funkcijo so sledeči:

Optimalni parametri: $y_0 = 99.60 \pm 3.53$, $a = 19.76 \pm 2.28$, $p = 1.364 \pm 0.177$.

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 12.47198151 & 5.69578245 & -0.37246253 \\ 5.69578245 & 5.21499918 & -0.23513917 \\ -0.37246253 & -0.23513917 & 0.03127586 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1. & 0.70625013 & -0.59636239 \\ 0.70625013 & 1. & -0.58222822 \\ -0.59636239 & -0.58222822 & 1. \end{bmatrix}$$

reduciran Hi-kvadrat: $\chi^2_{\mathrm{red.}} = 3.118$

1.4 Primerjava z dvoparametrično modelsko funkcijo

Isti postopek sem ponovil tudi za model iz prejšnje naloge, torej kjer v modelski funkciji fiksiramo parameter $p = 1$.

Optimalni parametri: $y_0 = 106.31 \pm 4.76$, $a = 24.7625 \pm 4.16$.

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 22.64732839 & 13.22026102 \\ 13.22026102 & 17.33688045 \end{bmatrix}$$

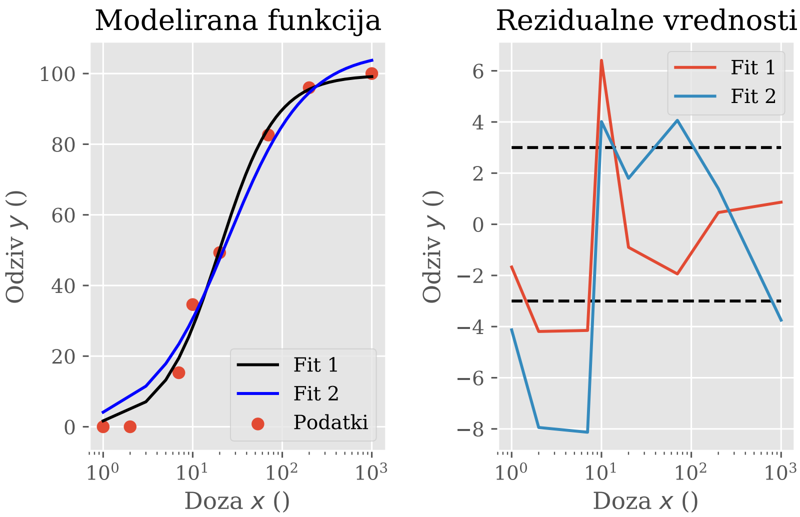
Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1. & 0.66718468 \\ 0.66718468 & 1. \end{bmatrix}$$

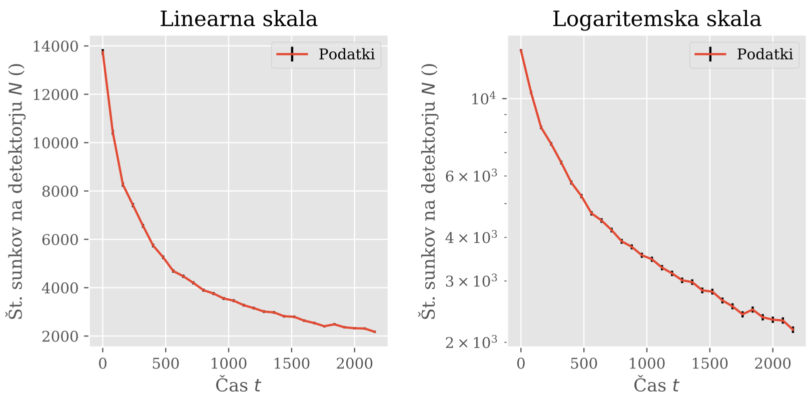
reduciran Hi-kvadrat: $\chi^2_{\mathrm{red.}} = 11.007$

S primerjavo obeh $\chi^2_{\mathrm{red.}}$ zatrdim, da je dodaten parameter p v modelski funkciji upravičen. Poigraval sem se tudi z drugimi optimizacijskimi algoritmi, a dajo nerazločljivo podobne rezultate.

[1] Hiter skok na Wikipedio pokaže, da si težko do gotovosti prepričan, o katerem izmed ducatov χ^2 testov, statistik, distribucij, funkcionalov. . . sploh teče beseda.



Slika 2: Primerjava obeh modelskih funkcij v logaritemskem merilu na vodoravni osi, da bolj enakomerno pokrijemo območje doze. [LEVO Podatki in obe modelski funkciji, *Fit 1* z dodanim potenčnim parametrom p in *Fit 2* brez njega. Optično se zdi, da se prvi fit bolje prilega našim podatkom. To potrjuje tudi reducirana statistika $\chi^2_{\text{red.}}$. [DESNO Rezidualne vrednosti $y_i - f(x_i; \vec{a})$. S črtkano črto je označena negotovost odziva ± 3. Obe liniji opletata okrog ničle, za odkrivanje kakšnih sistematičnih napak ali pomanjkljivih modelov pa imamo premalo podatkov.



Slika 3: Vhodni podatki v različnih merilih in s pripisano statistično negotovostjo, kot bi jo pričakovali po Poissonovi porazdelitvi. Z malo domišljije desni graf izgleda kot lomljenka dveh premic, najprej strmejše, nato pa se v kolenu pri približno $t = 700$ prevesi v položnejšo.

2 Druga naloga

2.1 Naloga

Poišči najboljšo vrednost za čistilnost ledvic iz kliničnih podatkov v datoteki `ledvice.dat` z uporabo enorazdelčnega in dvorazdelčnega modela ter primerjaj rezultate. Ali je dodatek aditivne konstante ("ozadje" pri štetju razpadov) statistično upravičen? Poskusiš lahko tudi s funkcijo $\exp(-\lambda\sqrt{t})$, ki jo izvedemo iz bolj zapletenih modelov.

Pri dvorazdelčnem modelu lahko za začetni približek vzameš eksponentni konstanti v razmerju $1 : 10$.

Spremenljivka t v podatkih je čas na sredi vsakega merilnega intervala.[2]

2.2 Tipanje problema

Prva misel, ki pade študentu Jedrske tehnike na pamet ob nalogi z radiofarmaki je, da bi veljalo korigirati zaznano število sunkov zaradi njihovega razpadanja. V to smer nisem šel, predvsem zaradi pomanjkanja podatkov; nimamo recimo enot na časovni osi, niti ne vemo, ali je *hipuran* markiran z ^{131}I z razpolovnim časom 8 dni ali ^{123}I z razpolovnim časom 13 ur. Druga ideja, bržčas bolj produktivno usmerjena, je pripis statistične napake k podatkom: zaradi nedeterministične narave radioaktivnega razpada je negotovost izmerjenega števila sunkov enaka korenu izmerjenega števila.

Uvozil sem podatke in jih pogledal najprej v linearnem, nato pa še v logaritmičnem merilu, nakar sem poskusil še s trikom prof. Širce, nagnil zaslon skoraj do vodoravnice in zrl vzdolž njega, da bi opazil morebitna kolena in gležnje. V linearnem merilu se zdijo podatki zašumljeno eksponentno pojemanje, v logaritemskem bi pričakovali premico, a oblika še vedno spominja na eksponentno padanje, medtem ko pri triku prof. Širce ni videti ničesar, ker postane pri tako topih kotih LCD zaslon čisto črn... Uvoženi podatki so prikazani na sliki 3.

[2] To razumem kot potrditev, da premikanje v času ni potrebno, torej se mi ni treba ukvarjati s tem, ali je časovna koordinata začetek štetja sunkov ali konec in lahko podatke direktno obdelujem.

2.3 Postopek

Najprej sem si definiral nekaj modelskih funkcij in pripravil 'mašinerijo' za lažjo obdelavo, med drugim funkcije za izračun statistike χ^2, pretvarjanje kovariančne matrike v korelacijsko in formatiranje matrik v LaTeX format.

Tako izmerjene sunke kot časovno koordinato bom normiral, saj nimamo podanih enot, normirane količine pa so prikladnejše za fitanje, saj uporabljena metoda uporabi vrednost 1 za vse parametre. Ker sem definiral mnogo modelskih funkcij z različnim številom parametrov, je podajanje začetnih približkov za vsako modelsko funkcijo posebej zamudno, zato je normalizacija spremenljivk lažji pristop.

Uporabljene modelske funkcije in rezultati fitanja z njimi:

Eksponentna funkcija:

$$f(x;\ \vec{a}) = A \cdot e^{-\frac{x}{\tau}},$$

Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [0.6467, 0.5716]\,,$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & -0.809 \\ -0.809 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 2029.266$

Dvorazdelčna eksponentna funkcija:

$$f(x;\ \vec{a}) = A \cdot e^{-\frac{x}{\tau_1}} + B \cdot e^{-\frac{x}{\tau_2}}$$

Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [1.160, 0.571, -0.514, 0.571]\,,$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & -0.0704 & -1.0 & -0.107 \\ -0.0698 & 1.0 & 0.0698 & 0.999 \\ -1.0 & 0.0704 & 1.0 & 0.107 \\ -0.106 & 0.999 & 0.106 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 1014.633$

Eksponentna funkcija z ozadjem:

$$f(x;\ \vec{a}) = A \cdot e^{-\frac{x}{\tau}} + c$$

Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [-2207.532, -5602.314, 2208.027]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} -4.22e+12 & -1.07e+13 & 4.22e+12 \\ -1.07e+13 & -2.71e+13 & 1.07e+13 \\ 4.22e+12 & 1.07e+13 & -4.22e+12 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 2663.281$

Dvorazdelčna eksponentna z ozadjem:

$$f(x;\ \vec{a}) = A \cdot e^{-\frac{x}{\tau_1}} + B \cdot e^{-\frac{x}{\tau_2}} + c$$

Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [0.4432,\ 0.0665,\ 0.4155,\ 0.3738,\ 0.1339,\ ]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.00103 & 0.000156 & -0.000772 & 0.00115 & -0.000224 \\ 0.000156 & 3.85e-05 & -0.000149 & 0.000199 & -3.64e-05 \\ -0.000772 & -0.000149 & 0.000673 & -0.000921 & 0.000168 \\ 0.00115 & 0.000199 & -0.000921 & 0.00152 & -0.000313 \\ -0.000224 & -3.64e-05 & 0.000168 & -0.000313 & 6.95e-05 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.784 & -0.928 & 0.923 & -0.838 \\ 0.784 & 1.0 & -0.923 & 0.82 & -0.704 \\ -0.928 & -0.923 & 1.0 & -0.91 & 0.776 \\ 0.923 & 0.82 & -0.91 & 1.0 & -0.962 \\ -0.838 & -0.704 & 0.776 & -0.962 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 7.988$

Dvorazdelčna s korenskim časovnim členom

$$f(x;\ \vec{a}) = A \cdot e^{-\frac{x}{\tau_1}} + B \cdot e^{-\frac{\sqrt{t}}{\tau_2}}$$

Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [-1.525,\ 2.571,\ 2.556,\ 1.321,\ ]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.764 & -0.9 & -0.757 & -0.446 \\ -0.9 & 1.08 & 0.89 & 0.529 \\ -0.757 & 0.89 & 0.749 & 0.441 \\ -0.446 & 0.529 & 0.441 & 0.261 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & -0.993 & -1.0 & -0.998 \\ -0.993 & 1.0 & 0.991 & 0.998 \\ -1.0 & 0.991 & 1.0 & 0.997 \\ -0.998 & 0.998 & 0.997 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 29.576$

Dvorazdelčna s korenskim časovnim členom in ozadjem

$$f(x;\ \vec{a}) = A \cdot e^{-\frac{x}{\tau_1}} + B \cdot e^{-\frac{\sqrt{x}}{\tau_2}} + c$$

Optimalni parametri:

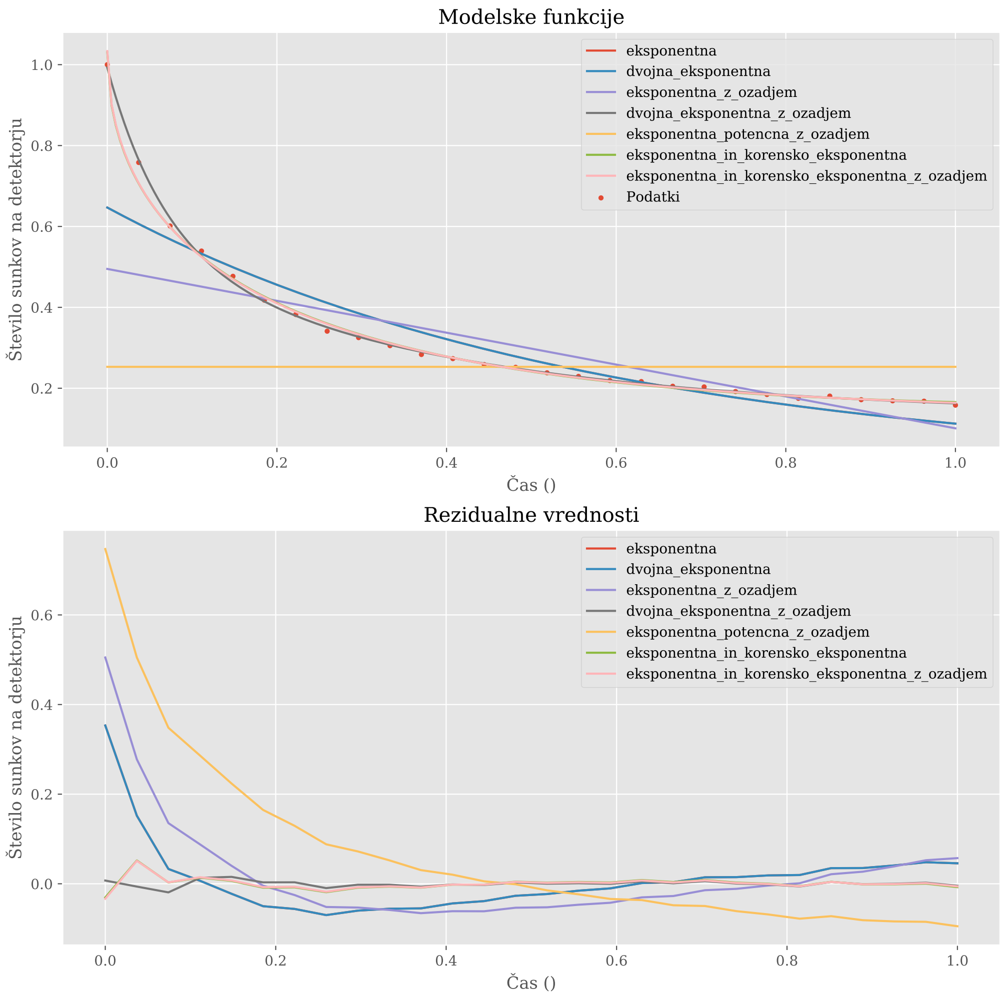
$$\vec{a} = [-3.757, 3.005, 493.894, 254.986, -489.103]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} -60.4 & 26.3 & 1.21e+06 & 6.27e+05 & -1.21e+06 \\ 26.3 & -11.2 & -5.35e+05 & -2.76e+05 & 5.35e+05 \\ 1.21e+06 & -5.35e+05 & -2.43e+10 & -1.25e+10 & 2.43e+10 \\ 6.27e+05 & -2.76e+05 & -1.25e+10 & -6.47e+09 & 1.25e+10 \\ -1.21e+06 & 5.35e+05 & 2.43e+10 & 1.25e+10 & -2.43e+10 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 22.29$

Že po statistiki χ^2 je razvidno, da so nekateri fiti boljši, nekateri slabši. Nekateri so naravnost ničvredni, drugi imajo visoke korelacijske koeficiente med parametri, spet drugi pa popisujejo nefizikalna dogajanja, kot je denimo negativno ozadje. Fite najdemo na sliki 4. V nadaljevanju bom poskusil izboljšati vse fite.



Slika 4: Primerjava fitov z originalnimi podatki po normalizaciji. [Zgoraj] direktna primerjava, [spodaj] reziduali.

2.4 Izboljšava fitov

Nekatere (predvsem enostavnejše) modelske funkcije lepo popišejo dogajanje, ponujene optimalne parametre pa sem uporabil kot prve točke iteracije v procesu iskanja optimalnih parametrov bolj kompliciranih modelskih funkcij.

Dvorazdelčna eksponentna brez ozadja: Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [0.59456958, 0.09741286, 0.38037372, 1.11060453]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 7.62e-05 & 4.72e-06 & -3.62e-05 & 0.000166 \\ 4.72e-06 & 7.85e-06 & -1.65e-05 & 6.92e-05 \\ -3.62e-05 & -1.65e-05 & 5.1e-05 & -0.000225 \\ 0.000166 & 6.92e-05 & -0.000225 & 0.00106 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.193 & -0.581 & 0.584 \\ 0.193 & 1.0 & -0.826 & 0.76 \\ -0.581 & -0.826 & 1.0 & -0.968 \\ 0.584 & 0.76 & -0.968 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\mathrm{red.}} = 18.147$

Komentar:

Opazimo lahko, da nam je samo z boljšim začetnim približkom uspelo izboljšati fit; na to namiguje zmanjšanje statistike χ^2 za **dva velikostna reda**, morda še bolj pa vidimo naš uspeh v tem, da smo prej popolnoma (anti)korelirane parametre sedaj razsklopili, zato lahko pričakujemo, da taka modelska funkcija s temi parametri bolj verno opisuje dejansko fizikalno ozadje meritev.

Eksponentna z ozadjem Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [0.71464855, 0.18486063, 0.17728857]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 2.99e-05 & -6.92e-06 & 6.25e-07 \\ -6.92e-06 & 5.15e-06 & -2.09e-06 \\ 6.25e-07 & -2.09e-06 & 1.73e-06 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & -0.558 & 0.0868 \\ -0.558 & 1.0 & -0.699 \\ 0.0868 & -0.699 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\mathrm{red.}} = 173.762$

Komentar: Občutno izboljšanje statistike χ^2, tudi ponujeni optimalni parametri so smiselni (t.j. pozitivni in pričakovanih velikostnih redov). Če pogledamo residualne vrednosti, vidimo, da zelo odstopa od želenega nekoreliranega Gaussovskega šuma, kar nakazuje na to, da imamo v podatkih bogatejšo dinamiko, kot jo zmore popisati naš model.

Dvorazdelčna eksponentna z ozadjem: Pri perturbaciji parametrov v eksponentu[3] za več kot 2 velikostna reda opazim, da zamajam stabilnost algoritma, poslabša se χ^2 in residualne vrednosti korelirano opletajo okrog ničle. Boljše rešitve, kot jo je algoritem našel že v prvo, ne najdem.

Eksponentna potenčna z ozadjem: te funkcije zaradi slabega izplena nisem vključil v prvoten seznam. Z malce bolj preciznim ugibanjem pa sem uspel najti precej dobre parametre.

$$f(x;\,\vec{a}) = A \cdot e^{-\frac{(x)^p}{\tau}} + c$$

Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [0.87274326, 0.15981841, 0.66086386, 0.13518254]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.000103 & -1.2e-05 & -0.000108 & -2.52e-05 \\ -1.2e-05 & 1e-05 & 4.1e-06 & -5.43e-06 \\ -0.000108 & 4.1e-06 & 0.000183 & 4.63e-05 \\ -2.52e-05 & -5.43e-06 & 4.63e-05 & 1.71e-05 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & -0.372 & -0.787 & -0.6 \\ -0.372 & 1.0 & 0.0956 & -0.414 \\ -0.787 & 0.0956 & 1.0 & 0.827 \\ -0.6 & -0.414 & 0.827 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\mathrm{red.}} = 13.701$

Dvorazdelčna eksponentna funkcija s korenskim časom: Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [0.36138267, 0.10954628, 0.63947151, 0.71895297]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.000354 & 3.13e-05 & -0.000371 & 0.000355 \\ 3.13e-05 & 1.54e-05 & -5.34e-05 & 4.61e-05 \\ -0.000371 & -5.34e-05 & 0.000448 & -0.000425 \\ 0.000355 & 4.61e-05 & -0.000425 & 0.000413 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.423 & -0.931 & 0.928 \\ 0.423 & 1.0 & -0.642 & 0.578 \\ -0.931 & -0.642 & 1.0 & -0.989 \\ 0.928 & 0.578 & -0.989 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\mathrm{red.}} = 7.357$

Komentar: Dosežem nov minimalen χ^2, za izhodiščne parametre sem uporabil parametre dvorazdelčne eksponentne modelske funkcije brez ozadja. Rezidualne vrednosti izgledajo take, kot bi jih pričakovali, na videz nekorelirano raztresene semtertja okrog ničle.

[3] Skalirnih parametrov A in B ne perturbiram, ker je optimizacija pri množenju s konstanto enostavnejša kot pa pri iskanju parametrov, ki nastopajo v eksponentu na potenco (-1).

Dvorazdelčna eksponentna funkcija s korenskim časom in ozadjem Optimalni parametri:

$$\vec{a} = [0.35788149, 0.11005208, 0.63932613, 0.70640701, 0.00406244]\,,$$

Kovariančna matrika:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} 0.0011 & -7.69e-05 & -0.000366 & 0.00294 & -0.000838 \\ -7.69e-05 & 3.16e-05 & -5.61e-05 & -0.000337 & 0.000124 \\ -0.000366 & -5.61e-05 & 0.000462 & -0.000368 & -1.81e-05 \\ 0.00294 & -0.000337 & -0.000368 & 0.0095 & -0.00295 \\ -0.000838 & 0.000124 & -1.81e-05 & -0.00295 & 0.000957 \end{bmatrix}$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & -0.413 & -0.515 & 0.91 & -0.818 \\ -0.413 & 1.0 & -0.464 & -0.615 & 0.711 \\ -0.515 & -0.464 & 1.0 & -0.175 & -0.0272 \\ 0.91 & -0.615 & -0.175 & 1.0 & -0.979 \\ -0.818 & 0.711 & -0.0272 & -0.979 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\mathrm{red.}} = 5.882$

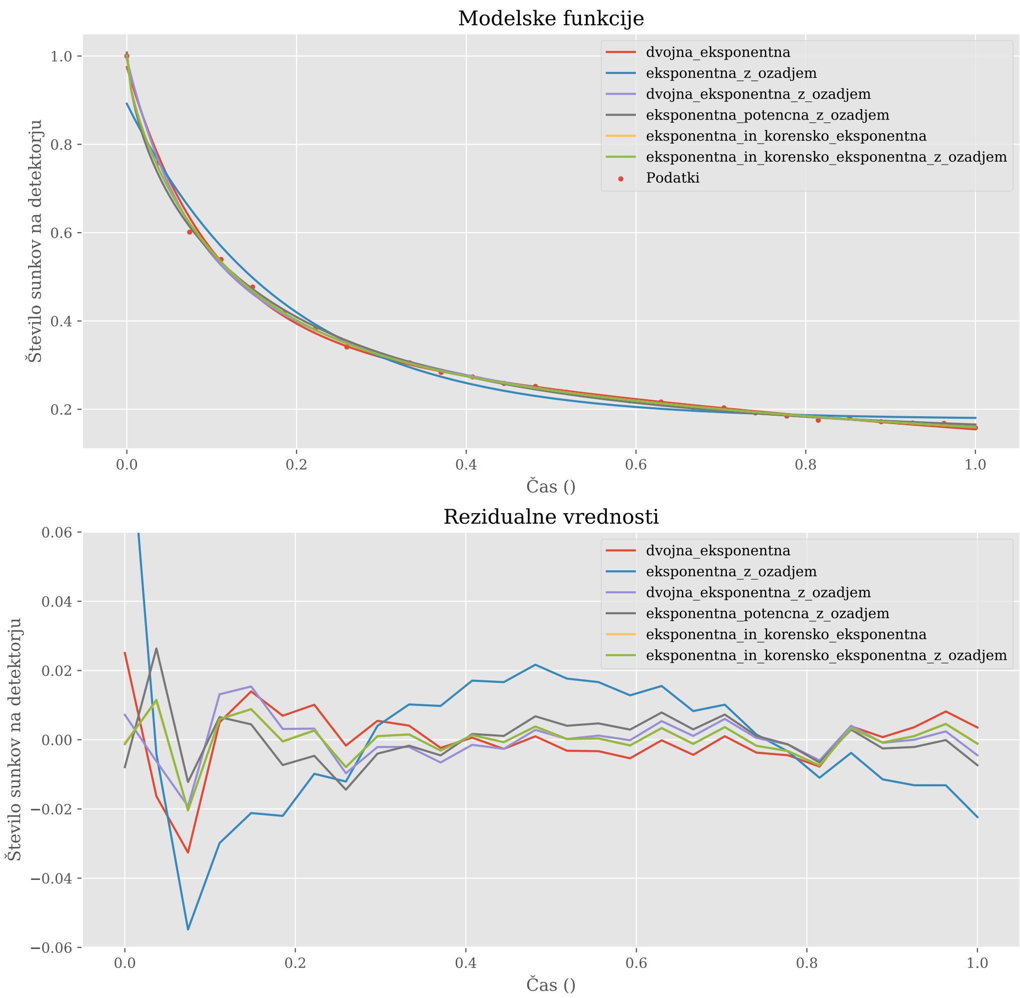
Komentar: dodaten konstanten člen se vsekakor obrestuje, spet smo zmanjšali χ^2 in našli najboljše parametre do sedaj.

Z vsem, kar sem se naučil, sem popravil začetne uganjene parametre za vsako funkcijo posebej. Napravil sem slovar, v katerega sem jih zapakiral pod ime pripadajoče funkcije, kar mi je omogočilo, da sem se čez vse funkcije še vedno zapeljal z zanko in mi izračunov in risanja ni bilo treba izvajati ročno.

Izboljšani fiti so prikazani na grafu 5.

2.5 Opomba

Pri večih kovariančnih matrikah v zgornjih odstavkih bo pozorno oko zapazilo negativne elemente, kar je skregano z definicijo in intuicijo. Razlog je v tem, da metode za izračun kovariančne matrike računajo $\left(H^{\mathrm{T}}H\right)^{-1}$, kjer je H aproksimirana Hessova matrika, kar bi moralo biti pozitivno definitno v eksaktni aritmetiki. Zaradi zaokroževanja pa numerično temu ni vedno tako. V praksi to pomeni, da je za neko kombinacijo parametrov kovarianca neskončno velika, kar preprečuje njeno oceno. Za primer lahko vzamemo eksponentno modelsko funkcijo $A \cdot \exp(-\frac{x}{\tau})$, očitno je, da bo za primer $A = 0$ parameter τ izrojen, kar moti izračun kovariančne matrike.



Slika 5: Vse modelske funkcije razen naivno preproste eksponentne brez ozadja, ki je dajala daleč najslabše rezultate, zato sem jo iz pedagoških vzgibov izbrisal s seznama. [Zgoraj:] fiti z novoodkritimi optimalnimi parametri in originalni podatki, [spodaj:] razlike med podatki in fiti.

3 Tretja naloga

3.1 Naloga

Parametre korozije določajo iz U—I diagrama med kovino in korozivnim elektrolitom. Modelski nastavek lahko v najpreprostejši obliki zapišemo

$$I = I_0 \left[\exp\left(\frac{U}{U_a}\right) - \exp\left(-\frac{U}{U_c}\right) \right].$$

Določi parametre I_0, U_a in U_c iz meritev v tabeli. Podatki so na voljo v datoteki `korozija.txt`.

Merska napaka v toku je konstantna, napetosti privzamemo za točne. Ujemanje lahko izboljšamo, če dodamo v nastavek še popravek $U \mapsto (U - U_0)$, ker meritve ne gredo točno skozi izhodišče.

3.2 Uvoz in vizualizacija podatkov

Uvozil sem podatke z `np.loadtxt` in jih na hitro narisal. Kot kaže, so podatki dokaj lepa krivulja, zato pričakujem lepo ujemanje s fitanimi krivuljami.

Merske napake nimamo podane, vemo pa, da je konstantna. Zaradi tega jo lahko izvzamemo iz enačb za izračun statistike χ^2, vendar pa na koncu ne bomo mogli povedati ničesar o napaki naših optimalnih parametrov.

Sprva sem z opazovanjem podatkov in ugibanjem iskal najboljši začetni približek za osnovni model, torej brez premika izhodišča napetosti. Bolj kot statistiko χ^2 sem opazoval potek modelske funkcije z optimiziranimi parametri, saj je zaradi majhnih vhodnih podatkov χ^2 tudi pri očitno napačnem fitu majhen. Vedel sem, da naj bo začetni približek za I_0 majhen, saj lahko to vidimo pri vrednosti okrog $U = 0$, prav tako pa lahko ocenim, da bosta vrednosti U_a in U_c reda velikosti maksimalne napetosti iz podatkov, saj nastopata v ulomku, vemo pa tudi, da se na celem območju tok spremeni za približno faktor 10, to je $e^{\text{red velikosti } 1}$. Kmalu sem našel rešitev, ki optično ustreza poteku podatkov. Ponujene optimalne parametre sem uporabil tudi pri iskanju optimalnih parametrov za premaknjeno modelsko funkcijo.

3.3 Rezultati

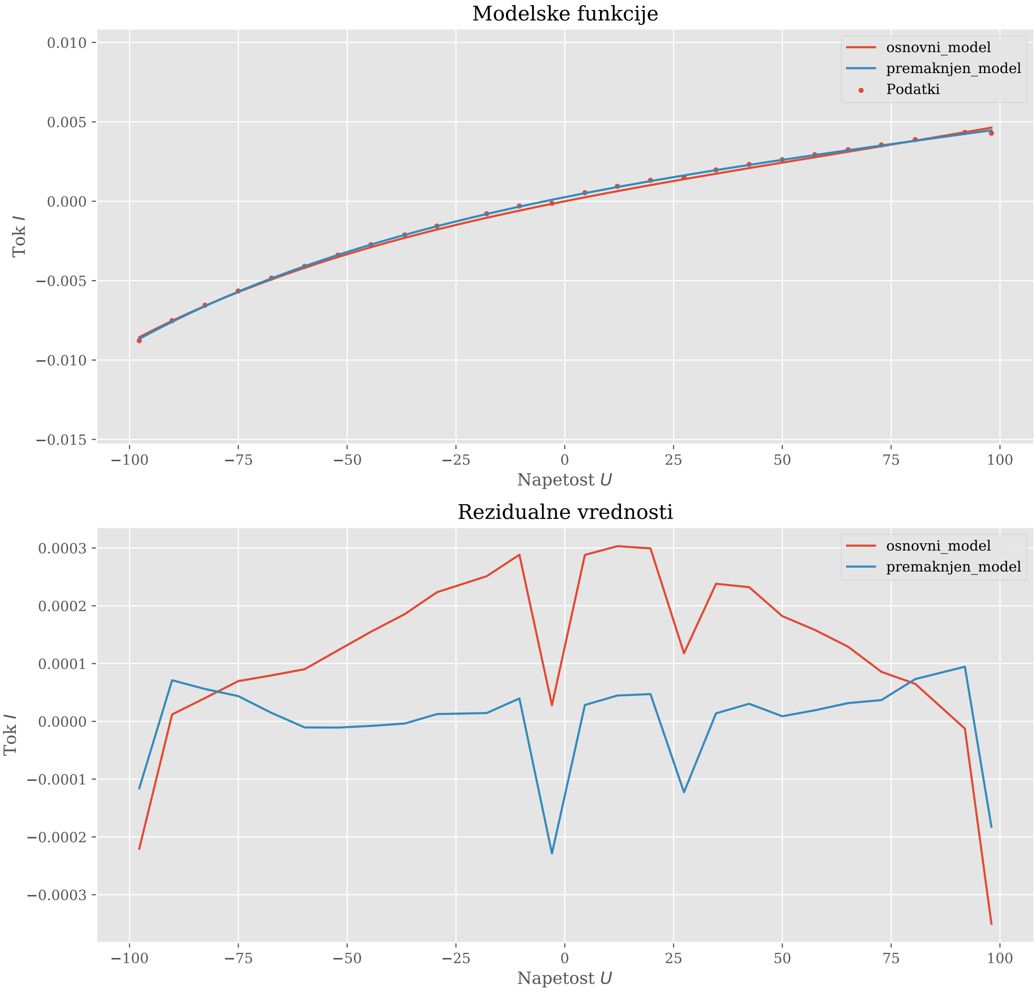
Osnovna funkcija: Za optimalne parametre dobim:

$$\begin{bmatrix} I_0 \\ U_a \\ U_c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.6317e-03 \\ 1.3870e+02 \\ 7.4012e+01 \end{bmatrix},$$

namesto kovariančne pa podajam korelacijsko matriko, saj so kovariance med parametri zaradi neznane negotovosti vhodnih podatkov nepomembne:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.986 & 0.994 \\ 0.986 & 1.0 & 0.974 \\ 0.994 & 0.974 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 3.13e-07$



Slika 6: Obe modelski funkciji (funkcija kot podana v navodilih in funkcija s premikom izhodišča napetosti). [Zgoraj:] optimalni modelski funkciji in vhodni podatki. Na videz sta obe modelski funkciji dobri, vendar je s spodnjega grafa razvidno, da je ena sistematično boljša od druge. [Spodaj:] razlike med podatki in fitoma. Z grafa rezidualnih vrednosti je očitno, da imamo nekaj *outlierjev*.

Funkcija s premaknjenim izhodiščem: Optimalni parametri:

$$\begin{bmatrix} I_0 \\ U_a \\ U_c \\ U_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.15226e-03 \\ 1.97990e+02 \\ 7.66118e+01 \\ -4.60851e+00 \end{bmatrix},$$

Korelacijska matrika:

$$\varrho = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.986 & 0.984 & -0.184 \\ 0.986 & 1.0 & 0.949 & -0.278 \\ 0.984 & 0.949 & 1.0 & -0.0289 \\ -0.184 & -0.278 & -0.0289 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$\chi^2_{\text{red.}} = 3.74e-08$

3.4 Razprava

Kot vidimo, se zdi premik izhodišča upravičen, saj zniža reducirano χ^2 za red velikosti. Preko vrednosti χ^2 bi lahko, če bi želeli, ocenili negotovosti v vhodnih podatkih ter negotovosti parametrov. Skrb vzbuja visoka korelacija med parametri I_0, U_a in U_c pri obeh modelskih funkcijah. Spet velja, da zaradi nelinearnosti funkcije dobimo kombinacije, ki izrodijo posamezne parametre. Z *mindsetom* predhodnje naloge bi nas lahko zamikalo reči, da lahko spričo visoke korelacije pomečem kakšen visoko-koreliran parameter ven in tako oskubim modelsko funkcijo nepotrebne navlake, vendar v tem primeru zaradi nelinearnosti temu ni tako. Poskusil sem s fitanjem troparametrične funkcije (I_0, U_a, in ozadje), a niti daleč nisem uspel izboljšati χ^2, niti nisem dosegel optičnega ujemanja.