Luščenje modelskih parametrov

Miha Čančula

16. november 2011

1 Splošno

Nalog sem lotil se z Levenberg-Marquardtovim algoritmom. Gnuplot ima ga vgrajen'ga, prav tako tudi Octave. Za vsak primer sem oba uporabil, nato pa primerjal. Malo med njima razlike, drugi ima eno prednost: več argumentov mu damo, več informacij nam vrne. Kdaj konvergenco ustavi, lahko sem natančno nastavil, malo izboljšal na ta način prilagoditve dobroto.

"Goodness of fit", sem prebral, da s χ na kvadrat je izražen, treba ga le še deliti s številom prostostnih je stopenj. Reče tedaj se temù, da je χ^2 reduciran. Fit je najboljši takrat, ko blizu je vrednosti ena.

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{f(x_i, \mathbf{p}) - y_i}{\sigma_i} \right)^2 \tag{1}$$

$$\chi_{red}^2 = \frac{\chi^2}{N - n} \tag{2}$$

Veliki N v tem primeru število je naših meritev, mali pa n je število prostih parametrov fit-a. σ od i je napaka, ki bla je z nalogo podana, f pa je funkcija naša, odvisna od x in parametrov.

2 Farmakološki model

2.1 Parameter p

V model kar iz naloge prejšnje parameter p še dodamo. Legla bo bolje k podatkom, izboljšana naša napoved. Žal pa zgubili smo s tem linearnost, grši problem je, Levenberg-Marquardt edino je upanje k hitri rešitvi.

2.2 Statistična upravičenost

Smisla kaj dosti pa nima, da si problem bi zapletli, več spremenljivk pridodali, če n'bene od njih ni koristi. Smiselnost nov'ga modela zato χ -kvadrat bo ocenil. Ker spremeni se število neznank, ga še reduciram.

2.3 Rezultati

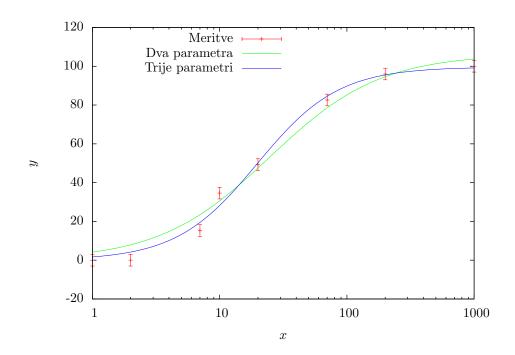
V prvem primeru je fajn, saj prav vse so napake enake, formula za izračun dobrote je bolj enostavna. Vse sem račune po dvakrat naredil, saj dva 'mam modela, eden je s fiksnim p, ena, a v drugem je p spremenljivka. Vsakič je naš algoritem proste parametre vrnil, vrednosti njih optimalne podane so v prvi tabeli.

Model	y_0	a	p	χ^2_{red}
Dva parametra	106 ± 5	25 ± 4	1	3,67
Trije parametri	100 ± 4	20 ± 2	$1,4 \pm 0,2$	1,87

Tabela 1: Primerjava med modeloma z dvema oz. tremi spremenljivkami.

Vidi se z zgornje tabele, da nov parameter pomaga, fit-a dobroto izboljša, blizu enici jo pahne. Ampak pozoren pogled še to pridobitev razkrije: bližje je y_0 zdaj pričakovani stotici.

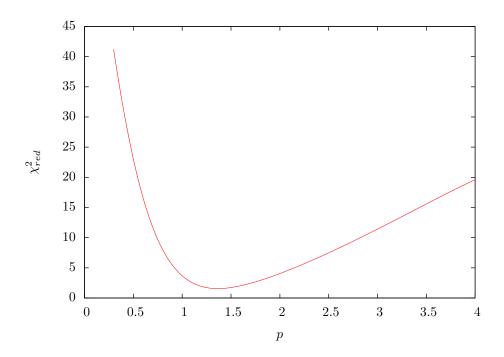
Lažjo predstavo da graf, pod katerim enica se skriva. Modra se črta na videz že bolje ujema s podatki. Prednost le-te pred zeleno je vidna predvsem pri robovih.



Slika 1: Primerjava med modeloma z dvema oz. tremi spremenljivkami.

2.4 Odvisnost od p

Kaj pa če p-ja ne bí prilagajali v našem računu, vseeno pa ne bi prav vedno natančno enici enak bil? Dal sem mu vrednosti razne, od četrtine do štiri, gledal sem kaj se godilo je z mero za fita dobroto.



Slika 2: Odvisnost χ^2_{red} od fiksnega parametra p

3 Ledvice

Isti postopek kot prej, še tu bomo uporabili, vse kar se res spremeni je funkcija testna modela. Druge so tudi napake, razpade zdaj štejemo jeder, σ je spet enostavna, koren je števila razpadov. Vse je ostalo kot prej, kriterij dobrote obdržimo.

3.1 Modeli

Trije so takšni modeli, ki sem jih v nalogi preverjal, Dva sta razdelčna, kjer kri v posode zapremo, eden pa tak, da je caš v eksponentu celo pod korenom.

$$f_1(t) = A \exp(-\lambda t) \tag{3}$$

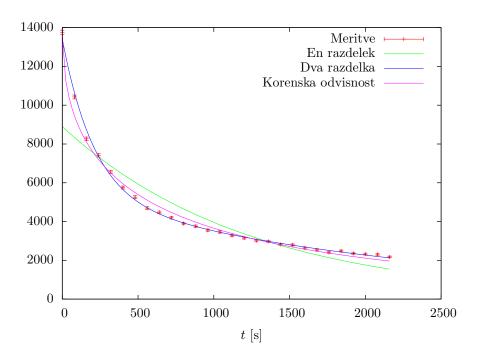
$$f_2(t) = A \exp(-\lambda_1 t) + B \exp(-\lambda_2 t) \tag{4}$$

$$f_3(t) = A \exp(-\lambda \sqrt{t - t_0}) \tag{5}$$

Zadnji model je poseben, saj važen je čas na začetku. Kdaj smo meritve začeli, poskusil sem s fitom dognati, dal spremenljivko sem zraven, t_0 , da ta čas sem izluščil.

3.2 Rezultati

Slika sledeča pokaže, da najboljš' model je tadrugi. Tisti s krvjo v dveh posodah, ki 'mata različne volumne.



Slika 3: Modeli čistilnosti ledvic.

Koliko res pridobimo, ko drugo posodo dodamo? "Goodness" se vidno izboljša, kar petdesetkrat je zdaj manjša. Daleč najboljši model je tisti s prekatoma dvema, tisti model, ki korene ima, po dobroti je v sredi.

Model	χ^2_{red}	
En razdelek	156,0	
Dva razdelka	3,0	
Korenska odvisnost	14,4	

Tabela 2: Statistična upravičenost modelov čistilnosti ledvic.

V tretjem modelu nastopa še čas ob začetku meritve, prva meritev v tabeli ob času t_0 je nar'jena. Najboljši fit sem dobil, če blizu ničle ta čas bil. Večja od njega bila je napaka, približno stotina.

$$t_0 = 1, 5 \cdot 10^{-5} \pm 9 \cdot 10^{-3} \tag{6}$$

4 Korozija

Tretjič postopek spet isti na novih podatkih nar'dimo. Trik pa je nov v tem primeru, da začetni približki so težji. Več sem poskusil jih, gledal sem kdaj χ^2 je najmanjši.

Merske napake sedaj eksplicitno niso podane. Vemo da so le v toku, in vse so med sabo enake. Tok je izmerjen na pet decimalk, to oceni napako. Dobra verjetno bo vrednosti, deset z minus peto potenco. Same dobrote ne mor'mo podati, a z njun'ga razmerja, vidimo ko'lko koristi popravek U_0 nam prinese.

Model	I_0 [nA]	$U_a [mV]$	$U_c [mV]$	$U_0 [\mathrm{mV}]$	χ^2_{red}
Brez popravka	2.6 ± 0.4	140 ± 25	74 ± 7	0	408
S popravkom	$3,2 \pm 0,2$	200 ± 24	77 ± 3	-4.6 ± 0.4	68

Tabela 3: Optimalni parametri in dobrota prilagoditve za oba modela prevodnosti korozivnega stika

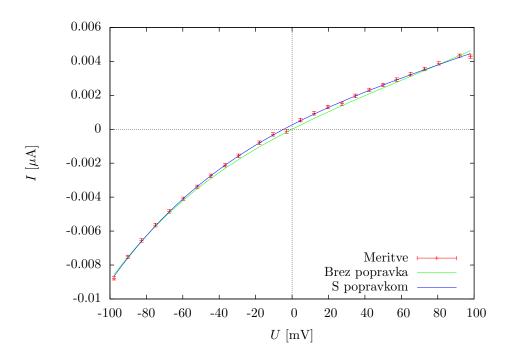
Drugi model 'ma dobroto, ki dosti je boljša od prve, ampak še vedno velika, daleč od ciljne enice.

Merske napake ocena, je zgornja očitno premajhna.

Če bi napako z deset pomnožili, morda bi b'lo bolje. s sto bi dobroto delil, kvadrat v njej napake nastopa.

Naš pa model te meritve opisal bi skor' idealno.

Tako napako sem tudi narisal, na sliki poslednji.



Slika 4: U-I diagram med kovino in korozivnim elektrolitom

Tudi na sliki se vidi, da točke ne grejo skoz' ničlo. Črta zelena pokriva meritve kar dobro na koncih, blizu sredine pa njeno odstopanje res je moteče. Ostri pogled na ta graf potrjuje koristnost popravka.