



Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko in fiziko

Oddelek za fiziko

6. naloga: Luščenje modelskih parametrov: linearni model

POROČILO PRI PREDMETU MODELSKA ANALIZA 1

2015/2016

Avtor:
Klemen RAHNE
28152028

21. oktober 2016

1 Odziv tkiva

V farmakologiji merimo odziv tkiva na reagent. V stacionarnem stanju odziv (y - vezava reagenta v odvisnosti od koncentracije reagenta - x) opišemo:

$$y = \frac{y_0 x}{x + a}, \quad (1.1)$$

kjer je y_0 nasičeni odziv tkiva in a koncentracija potrebna za odziv, ki je enaka polovici nasičenega. Ker zgornja enačba ni linearna jo preoblikujemo v linearno s transformacijo spremenljivk:

$$u = \frac{1}{y} \quad ; \quad v = \frac{1}{x}$$

Parametra k in n določimo tako, da mora biti odstopanje modelske funkcije od podatkov minimalno. V matematičnem zapisu:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{u_i - kv_i - n}{\sigma_i} \right)^2 = MIN \quad (1.2)$$

kjer smo vsako merilno točko utežili s velikostjo njene napake σ_i (točka, ki ima večjo napako, naj bo manj pomembna). Minimum zgornje enačbe se lahko reši na dva načina: analitično in numerično. Pri numerični metodi je postopek podoben kot pri nelinearni minimizacije, kjer smo iskali parametre, ki nam dajo minimum poljubne funkcije. Analitično reševanje je mogoče le za ti. linearno regresijo, kjer lahko zgornji problem zapišemo v matrično obliko.

$$\vec{a} = A\vec{b} \quad (1.3)$$

V matriki A so shranjene vrednosti spremenljivke v_i in v vektorju \vec{b} sta elementa ravno koeficienta k in n v obliki:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & v_1 \\ 1 & v_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & v_N \end{bmatrix} \quad ; \quad b = \begin{bmatrix} n \\ k \end{bmatrix}$$

medtem, ko je v vektorju \vec{a} zapisana spremenljivka u_i :

$$a = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix}$$

Nadaljujemo, tako da vstavimo v minimizacijsko funkcijo matrično enačbo in jo odvajamo po vektorju \vec{b} in odvod enačimo z 0. Tako dobimo rešitev za vektor \vec{b} :

$$\vec{b} = (A^T W A)^{-1} A^T W \vec{a} \quad (1.4)$$

kjer je matrika W utežna matrika, dimenzije $N \times N$, ki ima je naslednje oblike:

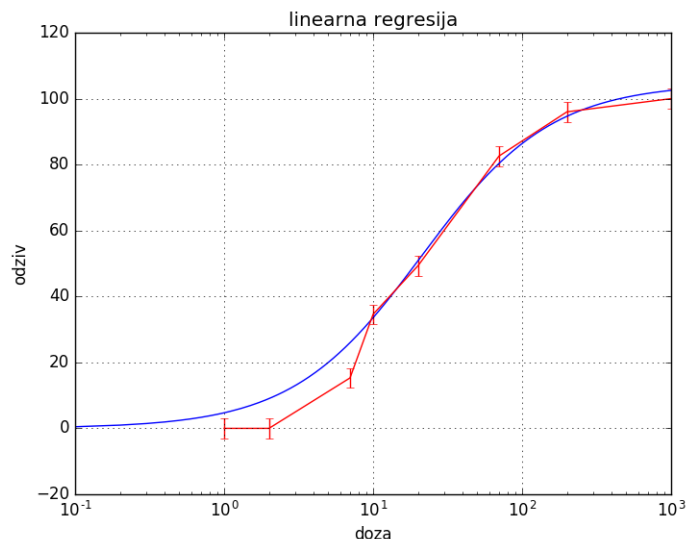
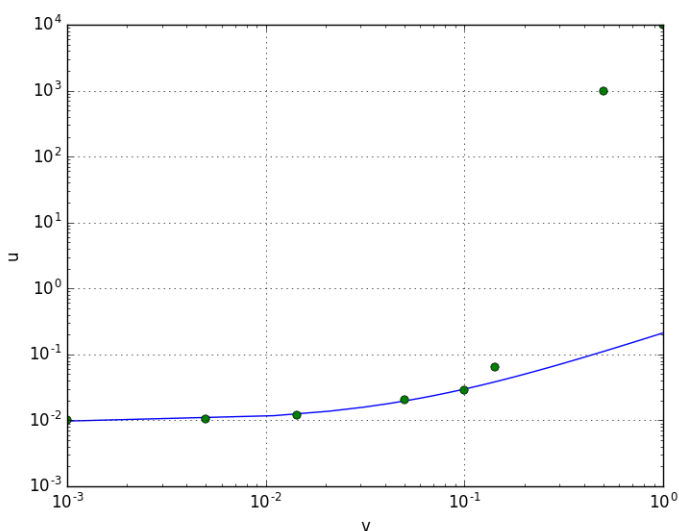
$$W = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_1^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_2^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\sigma_N^2} \end{bmatrix}$$

Napake posameznega parametra in njihove korelacije dobimo iz matrike:

$$M = (A^T W A)^{-1} \quad (1.5)$$

Za podatke iz datoteke **farmakoloski.dat** dobimo naslednje vrednosti za koeficientov:

linearno prilagajanje		
	vrednost	napaka
y_0	104.7	± 2.5
a	21.2	± 1.9
χ^2	23.6	



Slika 1.1: Grafični prikaz rešitve. Na levi je linearna regresija na transformiranih podatkih, vendar sta obe osi v logaritemski skali. Na desni je prikaz meritev in njihova prilagoditvena funkcija.

2 Toplotna prevodnost jekla

Imamo meritve toplotne prevodnosti jekla v odvisnosti od temperature in moči grelca:

$T[^\circ\text{F}]$	$P[\text{W}]$	$\lambda[\text{Btu/h ft } ^\circ\text{F}]$	$T[^\circ\text{F}]$	$P[\text{W}]$	$\lambda[\text{Btu/h ft } ^\circ\text{F}]$
100	545	41.60	90	276	42.345
161	602	37.7875	149	275	39.5375
227	538	36.4975	206	274	37.3525
270	550	35.785	247	274	36.36
362	522	34.53	352	272	33.915

s podanimi napakami za meritve prevodnosti: 0.28 za levo tabelo in 0.16 za desno tabelo. Ker ne poznamo modela, ki bi nam opisal odvisnost prevodnosti od moči in temperature, opišemo prevodnost kot potenčno odvisnot oz. polinomsko.

2.1 Osnovne potence

Opis prevodnosti začnemo z preprostim polinomskim modelom:

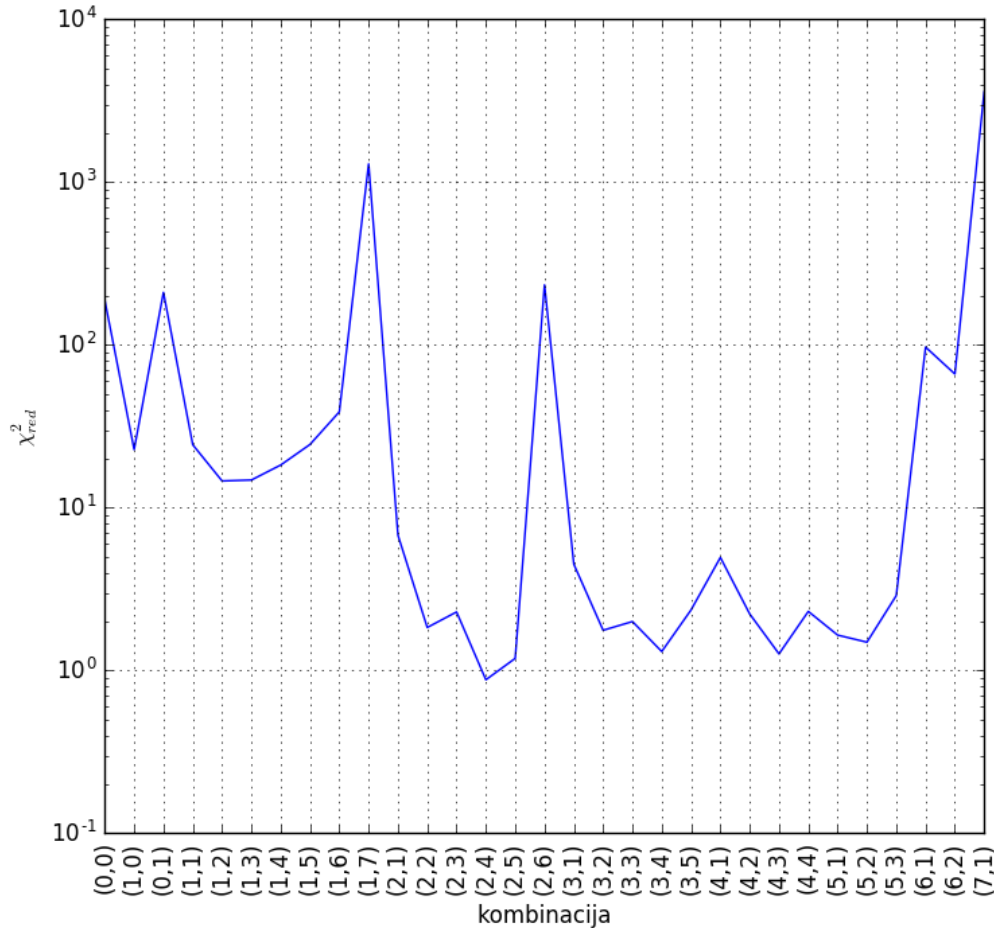
$$\lambda(T, P) = a_0 + \sum_{i=0}^n a_i T^i + \sum_{j=0}^m b_j P^j$$

pri čemer mora biti vsota $n + m$ manjša od 9, saj z desetimi merilnimi točkami lahko določimo največ devet modelskih koeficientov. Ponovno lahko zgornjo enačbo zapišemo v matrično obliko, saj so relacije med koeficienti in prevodnostjo linearne. Ponovno iščemo minimum funkcije 1.2 in za reševanje koeficientov uporabimo enačbo 1.4. Ker ne vemo katera stopnja polinoma je optimalna poskusimo vse možnosti, pri čemer gresta n in m od nič do $n + m < 9$. Sedaj moramo vrednosti χ^2 primerno normalizirati, saj z vpeljavo dodatnih modelskih parametrov boljše opišemo naše meritve. Najlažje je

uvesti dodatni parameter χ_{red}^2 , ki ga določimo:

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

kjer je N število merilnih točk in M število modelskih parametrov.



Slika 2.1: Grafični prikaz vrednosti χ_{red}^2 , v primerjavi s kombinacijo n, m (temperatura, moč). Opazimo zelo velike skoke vrednosti χ_{red}^2 med posameznimi kombinacijami potenc. Vidimo, da model pri m med 2 in 4 χ_{red}^2 ne skače veliko, medtem ko za n pa χ_{red}^2 se stabilizira od 2 naprej. Iz grafa opazimo najboljše model z $n = 2$ in $m = 4$.

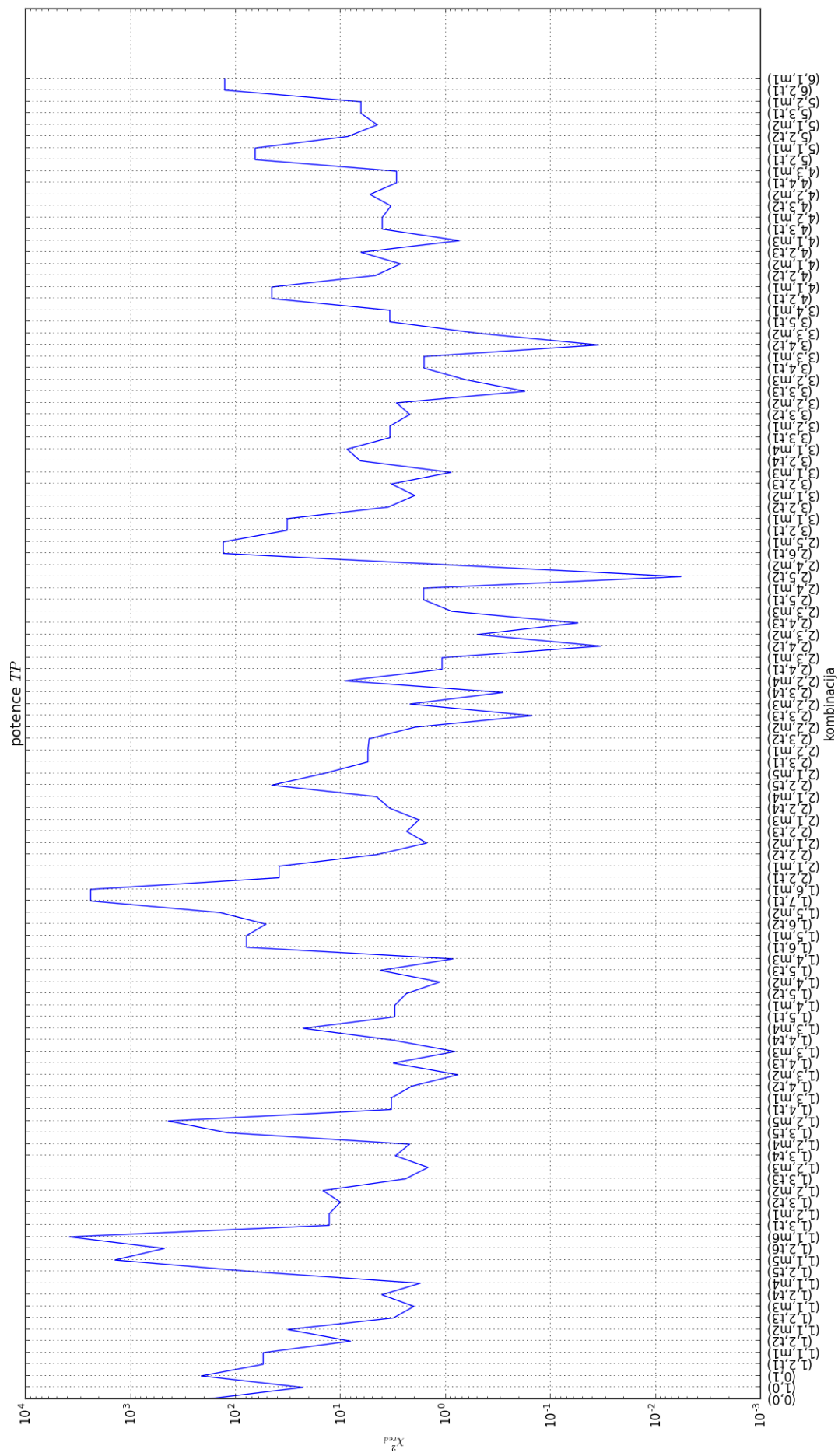
2.2 Potence $TP, \frac{T}{P}$

Predpostavimo, da zgornji model ne opiše dovolj dobro oz. imamo neposredno odvisnost moči in temperature. Sedaj uporabimo, dodatne člene $T^i P^j, \frac{T^i}{P^j}$ k opisu modela prevodnosti:

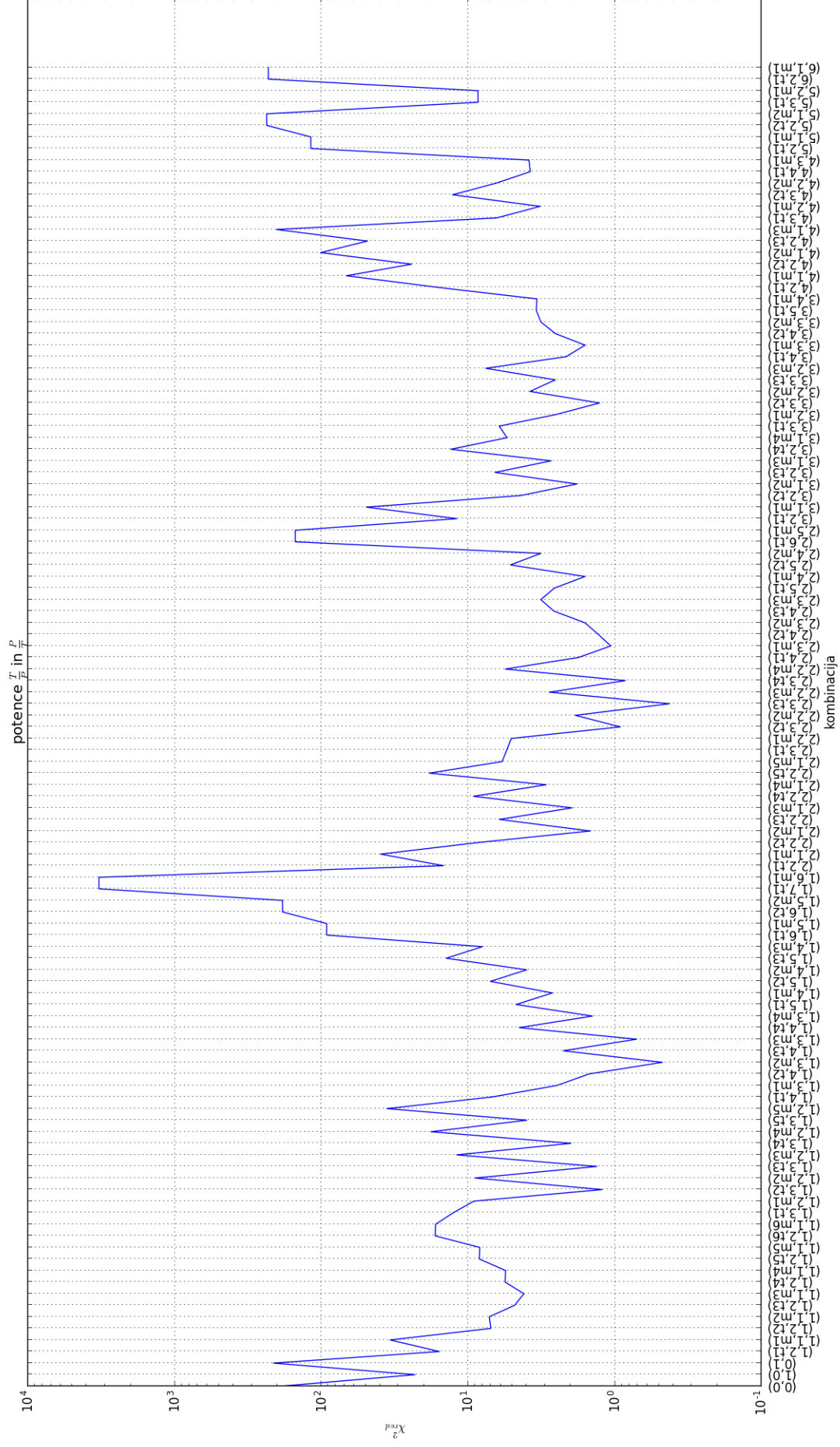
$$\lambda(T, P) = a_0 + \sum_{i=0}^n a_i T^i + \sum_{j=0}^m b_j P^j + c_k T P^k$$

$$\lambda(T, P) = a_0 + \sum_{i=0}^n a_i T^i + \sum_{j=0}^m b_j P^j + c_k P T^k$$

Za uporabo ulomka oz. členov $\frac{T}{P}$, smo pri zgornjih dveh enačbah potence dodatnega člena negirali. Na naslednji strani je prikaz zgornjih dveh enačb, naslednja stran pa ko smo potence dodatnega člena negirali.



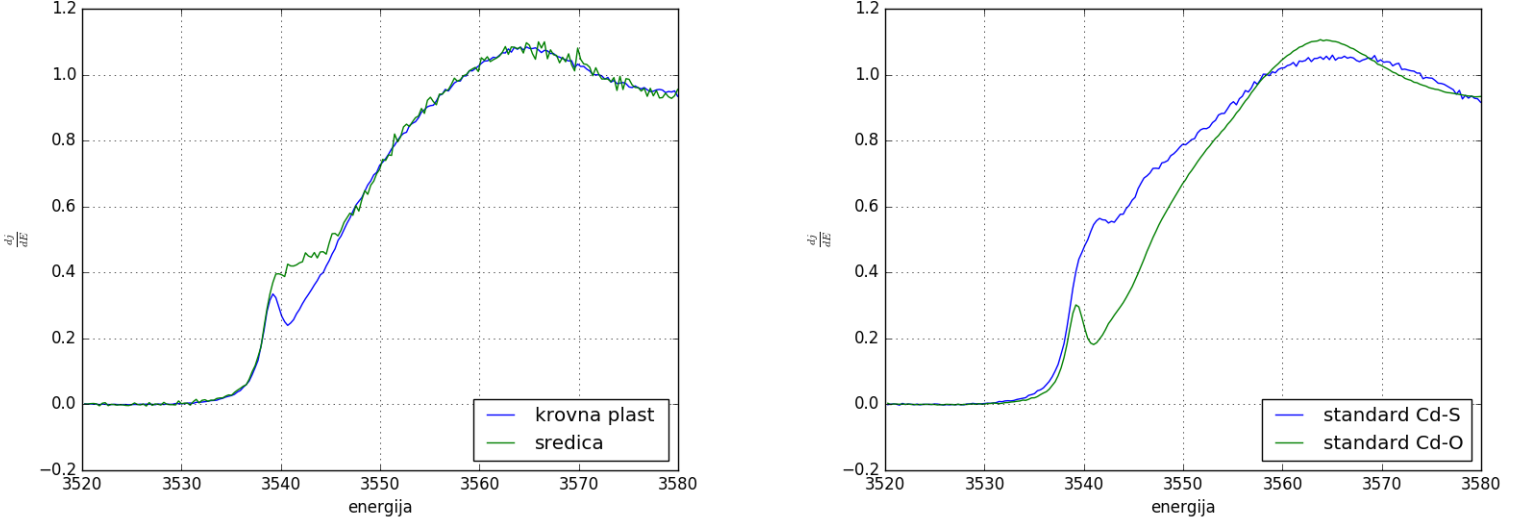
Slika 2.2: V prejšnjem poglavju, kjer smo imeli le osnovne potence moči in temperature, je χ^2_{red} imel vrednost 0.877 pri najbolšem modelu. Tokrat opazimo, da imajo vrednosti χ^2_{red} veliko večji razpon. Imamo pa 16 kombinacij, ki boljše opišejo kot model z osnovnimi potencami. Občutno najboljše opiše model (χ^2_{red} je v tem primeru 0.00569 in je za dva velikostna razreda manjša), ki ima osnovno potence temperature 2, moči 5 ter dodatni člen PT^2 .



Slika 2.3: Z vpeljavo členov $\frac{T}{P}$ in $\frac{P}{T_i}$ dobimo od najboljšega osnovnega modela le 4 boljše modele, ki pa niso občutno boljši od osnovnega modela.

3 Profil rentgenskih robov

Imamo profila absorpcije rentgenskih žarkov izoliranih sten iz krovne plasti in sredice listov rastline *C. Thlaspi*. Zanima nas razmerje med vezi Cd-O in Cd-S v obeh profilih. Za obliko profila absorpcije rentgenskih žarkov uporabimo standarde, ki smo jih dobili iz GSH za Cd-S in iz pektinoma za Cd-O.



Slika 3.1: Na levem grafu imamo meritve absorpcije rentgenskih žarkov na dveh različnih vzorcih lista. Iz standardov, ki ga ponazarja desni graf moramo določiti odstotno razmerje vezi Cd-O in Cd-S v vzorcema.

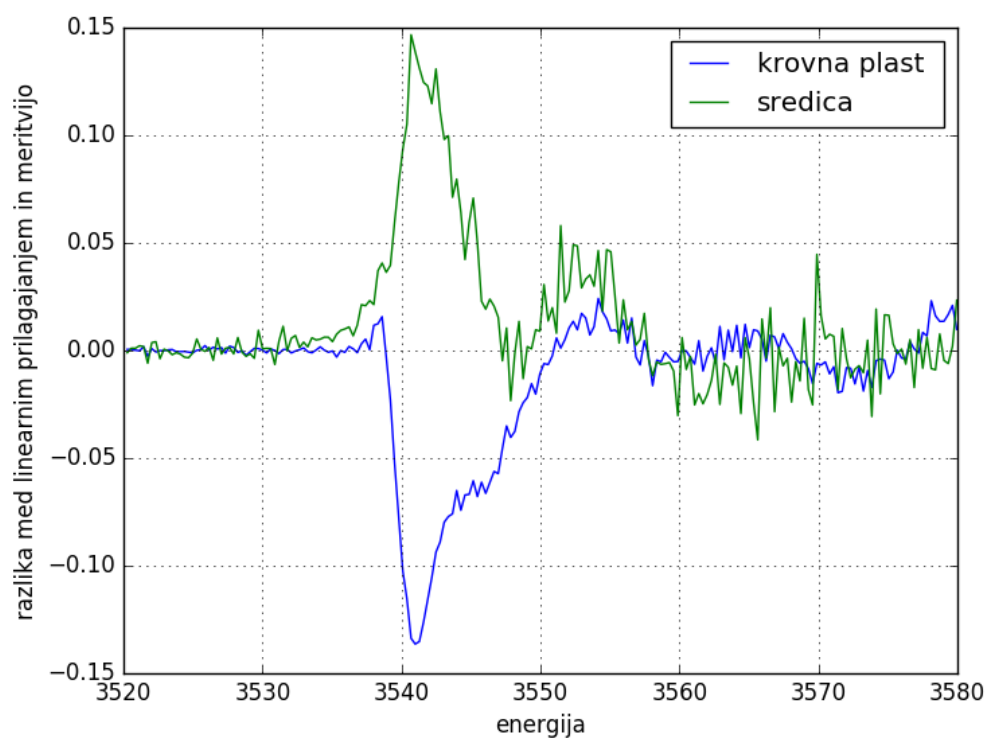
najprej moramo določiti koliko je posameznih vezi v vzorcu. To najlažje določimo tako da je rezultat meritev linearna kombinacija standardov:

$$\begin{aligned} \left. \frac{dI}{dE} \right|_1 &= a_1 S_1 + a_2 S_2 \\ \left. \frac{dI}{dE} \right|_2 &= b_1 S_1 + b_2 S_2 \end{aligned} \quad (3.1)$$

kjer je $\frac{dI}{dE}$ meritve absorpcije rentgenskih žarkov, S meritev absorpcije na standardu ter koeficienti a , b do neznanega faktorja število vezi danega standarda. Ponovno zgornji enačbi lahko preoblikujemo v matrično obliko in rešujemo kot v zgornjih nalogah. Za odstotno razmerje v posameznem vzorcu delimo prvi koeficient z drugim.

	vrednost	napaka
a_1	0.2727	0.009
a_2	0.7301	0.009
$r_1 = \frac{a_1}{a_2}$	0.3735	0.013
b_1	0.5544	0.012
b_2	0.4459	0.013
$r_2 = \frac{b_1}{b_2}$	1.243	0.036

Oglejmo si že absolutno razliko med linearnim prilagajanjem in meritvami.



Slika 3.2: Če pogledamo vrednosti koeficientov vidimo, da so napake velike nekaj procentov (do max 5%), kar nam lahko pove, da bo je to dobro prilagajanje. Sedaj pa si oglejmo razliko med prilagojeno krivuljo in meritvami. Opazimo za oba vzorca opazno odstopanje pri enaki energiji. Če pogledamo standarde, opazimo da je največje odstopanje ravno v lokalnem minimumu standardov. Torej bo potrebno naš model še bolje izpopolniti. Ena možnost je, da pri meritvi sredice lista poskušamo zgladiti meritev, vendar to še vedno ne bo odstranilo izrazitega vrha. Naslednja možnost in najverjetnejša, je da je potrebno k standardom upoštevati še nek dodaten člen.