

Univerza v Ljubljani  
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



## 7. naloga Razdelčni in nelinearni modeli

MIHA SRDINŠEK

### Povzetek

*Gre za nelinearno prilagajanje krivuljam.*

# I. FERMAKOLOŠKI MODEL IZ 6. NALOGE

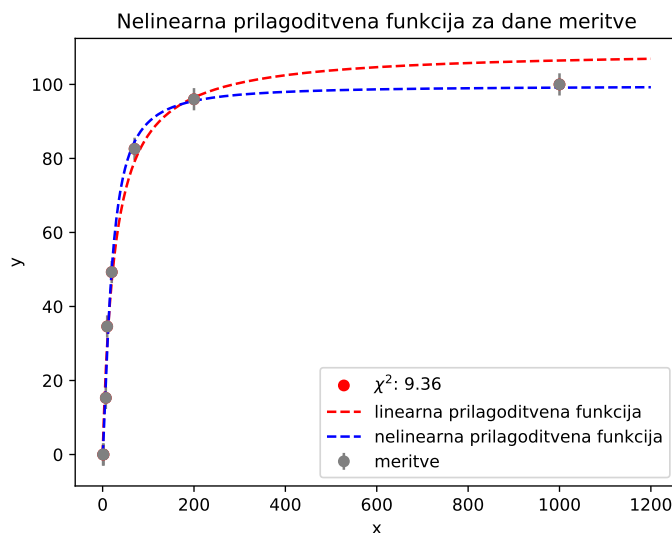
Model, ki smo ga že obravnavali v 6. nalogi, razširimo z novim parametrom  $p$ .

$$y = \frac{y_0 x^p}{x^p + a^p} \quad (1)$$

Če to sedaj vstavimo v zelo preprosto funkcijo, ki deluje na osnovi Levenberg-Marquardt algoritma in pri tem za začetno točko uganemo parametre ugotovljene v prejšnji 6. nalogi. Rezultat je

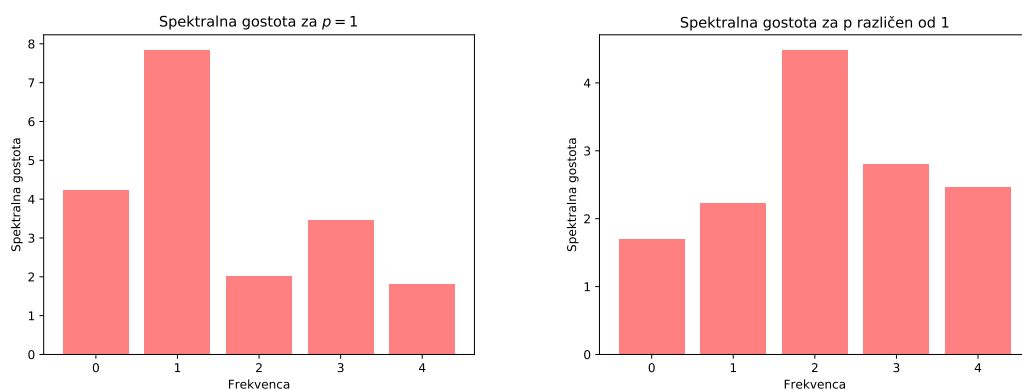
$$y_0 = 99,60560099, \quad a = 19,76741145 \quad \text{in} \quad p = 1,36410438. \quad (2)$$

Prilagoditvena funkcija in  $\chi^2$  so prikazani na sliki 1, skupaj s prilagoditveno funkcijo, ki smo jo dobili v prejšnji nalogi.



**Slika 1:** Slika prikazuje prilagoditveno funkcijo in podatke, ki se jim prilagaja.

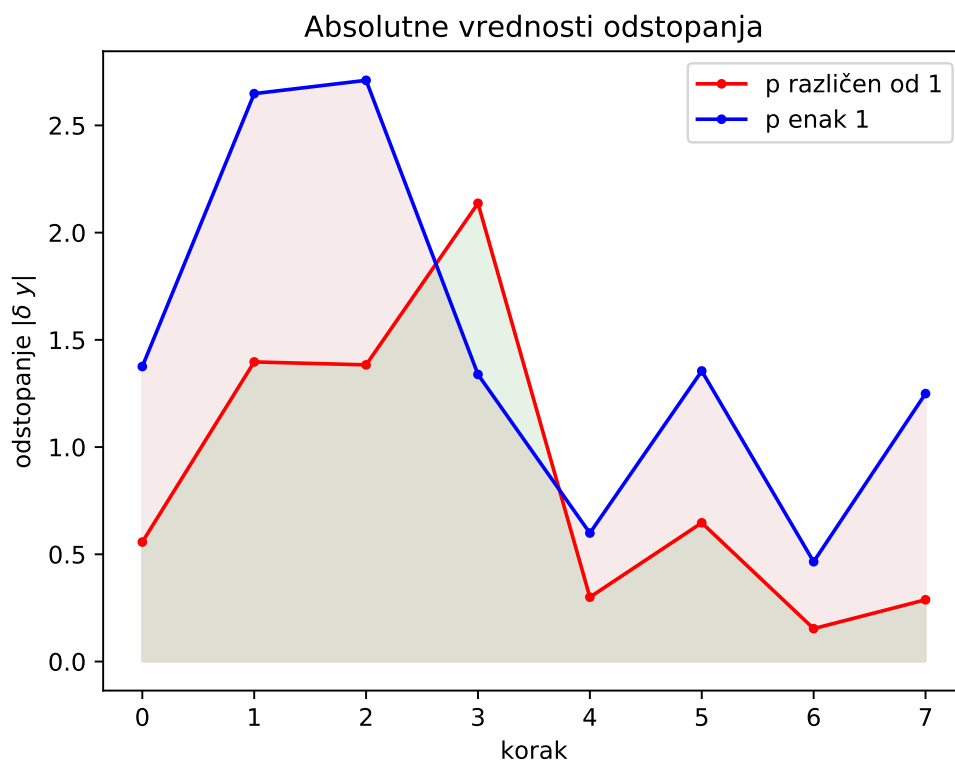
Kot pa lahko vidimo na sliki, je reducirani  $\chi^2$  sedaj višji od tistega pri prejšnjem prilagajanju, ko je znašal  $\chi^2 = 4,7$ . Ker zaupam nalogodajalcu, da je uvedba parametra  $p \neq 1$ , bom pogledal kako se spreminja spektralna gostota residulov. Če namreč ugotovim, da so sedaj napake bolj gausovsko porazdeljene, bo ta novi fit imel večjo veljavo. Zato si pogledamo spektralni gostoti, ki smo ju pridobili s pomočjo fourijejeve transformacije na slikah



**Slika 2:** Sliki prikazujeta spektralni gostoti residualov za obe prilegajoči funkciji.

Vidimo, da so v primeru, ko  $p \neq 1$  residuali bolj gaussovsko razporejeni, kot v primeru, ko je  $p = 1$ . Na podlagi tega sklepamo, da je prilegajoča funkcija z  $p \neq 1$  bolj fizikalna od prve.

Pogledmao si lahko še eno lastnost - sliko absolutne napake za oba modela. Iz tega bomo lahko razbrali, če nek model vso napako nefizikalno prerazporedi na nek korak, ali enakomerno zmanjša napako tekom vseh korakov. Slika 3 nam jasno prikazuje, da je z napakami model  $p \neq 1$  dosti bolj varčen, saj so skoraj povsod nižje od prejšnjega modela. To je še en argument v prid tega drugega modela.



**Slika 3**

## II. MODEL LEDVIC

Najprej si mislimo, da imamo le en kompartment za katerega lahko zapišemo enačbe

$$\frac{dm}{V} = -\frac{\epsilon\phi}{V}c(t)dt = dc, \quad (3)$$

iz katerih dobimo rešitev za koncentracijo, ki eksponentno pojema s časom. Meritve potrjujejo, da koncentracija pojema in to na videz eksponentno. Če vstavimo v algoritem model

$$c(t) = c_0 \exp^{-\lambda t}, \quad (\lambda = \frac{\epsilon\phi}{V}) \quad (4)$$

dobimo rešitev za parametre

$$c_0 = 10507,5794 \quad in \quad \lambda = 0,00104164423. \quad (5)$$

V nalogi dobimo namig, da se splača prišteti še neko neznano konstanto, zato jo prištejemo in dobimo nove parametre prilagoditvene funkcije

$$c_0 = 10324,4577, \quad \lambda = 2915,13849 \quad in \quad konstanta = 2613,13770. \quad (6)$$

To nas ne zadovolji in zato poskusimo še s tretjim namigom - odvisnost ni eksponentna ampak eksponent od korena, oziroma, če zaišemo z enačbo:

$$c(t) = c_0 \exp^{-\lambda\sqrt{t}} \quad (7)$$

Zato prilagodimo še tako funkcijo podatkom in dobimo

$$c_0 = 14015,6320 \quad in \quad \lambda = 0,0426833199, \quad (8)$$

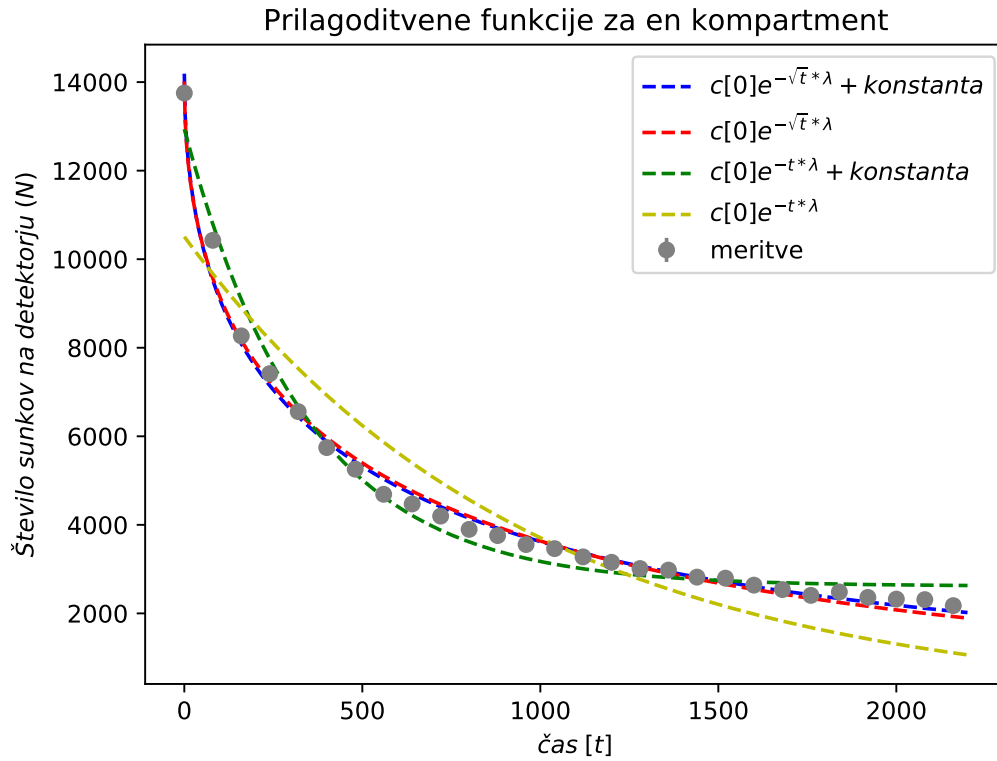
oziroma, če prištejemo še neznano konstanto

$$c_0 = 13720,6507, \quad \lambda = 0,0465103708 \quad in \quad konstanta = 469,550308. \quad (9)$$

Vsi ti rezultati so pregledno prikazani v tabeli II, v kateri vidimo, da smo z vsakim korakom zmanjšali odstopanje prilagoditvene funkcije od dejanskih meritev.

Parametri za različne prilagoditvene funkcije				
Model	$\frac{\chi^2}{m-n}$	$c_0$	$\lambda$	konstanta
$c_0 \exp^{-\lambda t}$	$1 \cdot 10^6$	10508	0,00104	/
$c_0 \exp^{-\lambda t} + konstanta$	$1,2 \cdot 10^5$	10324	2915	2613
$c_0 \exp^{-\lambda\sqrt{t}}$	$7 \cdot 10^4$	14016	0,0427	/
$c_0 \exp^{-\lambda\sqrt{t}} + konstanta$	$6,6 \cdot 10^4$	13721	0,0465	470

Vse te prilagoditvene funkcije so prikazane na sliki 4.



**Slika 4:** Izrisane rešitve za parametre podane v tabeli II

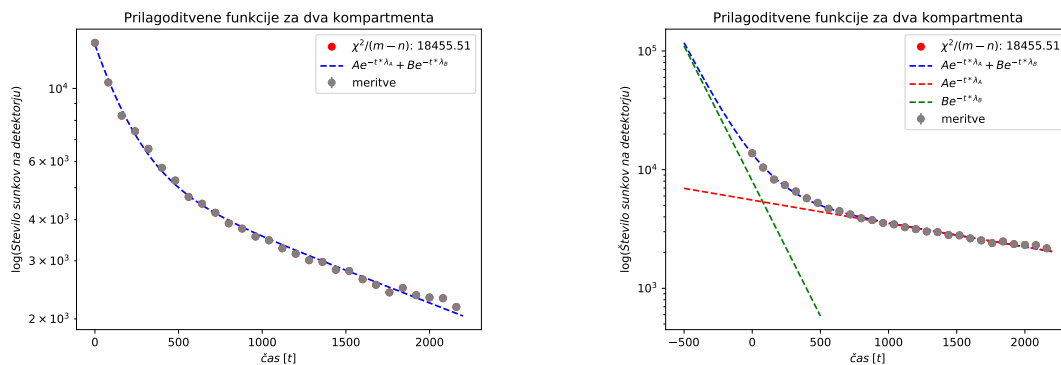
Sedaj preidemo na izboljššan model, kjer predpostavimo, da imamo dva kompartmenta. To pomeni da zapišemo sistem dveh diferencialnih enačb

$$\dot{c}_1(t) = -\lambda c_1 - K_1(c_1 - c_2) \quad \dot{c}_2(t) = K_2(c_1 - c_2), \quad (10)$$

ki ima rešitev

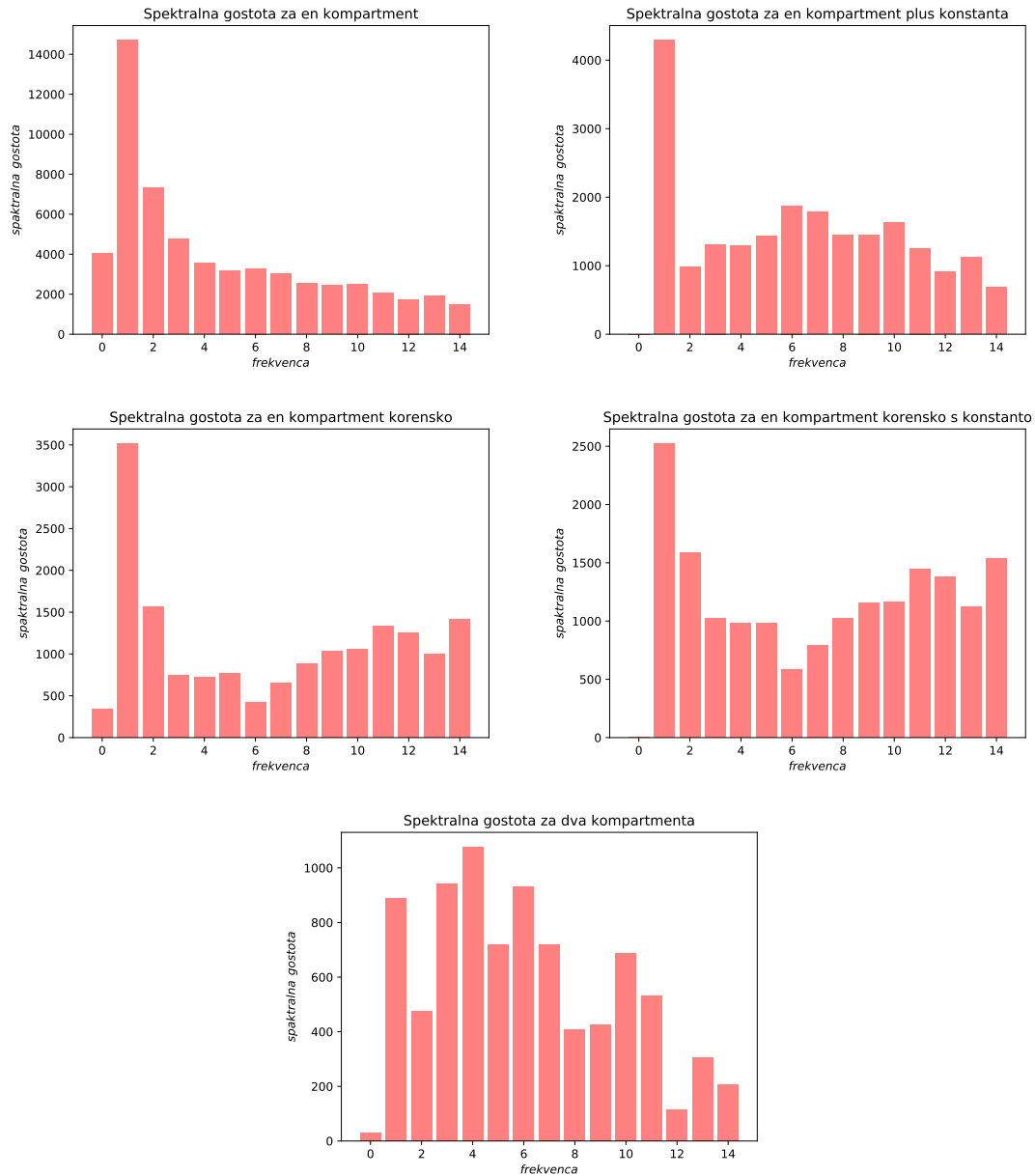
$$c(t) = A \exp^{-\lambda_A t} + B \exp^{-\lambda_B t}, \quad (11)$$

pri čemer so  $A, B, \lambda_A$  in  $\lambda_B$  parametri, ki jih bomo prilagajali danim podatkom. Rešitev je izrisana na desni sliki 5 in ima  $\chi^2$  približno šeskrat manjši od prejšnjih prilagoditvenih funkcij.



**Slika 5:** Na levi sliki je prikazana prilagoditvena funkcija, pri čemer je y os v logaritemski skali, na desni pa sta prikazana še oba eksponentna člena vsote posebej.

Izrišimo si še pri tej nalogi spektralne gostote residualov. Vidimo jih lahko na slikah 6, a nam žal ne povedo toliko o prilagoditvenih funkcijah. Vidimo, da so residuali precej razmetani in da je pri z enim kompartmentom prevladujoča zelo nizka frekvenca. Poradelitev najbolj podobna normalni je vidna na liki 6 desno zgoraj. Tudi spekter spodaj, za dva kompartmenta je rahlo noralen, zato bi mogoče tu spet dali temu modelu kanček večjo veljavo.



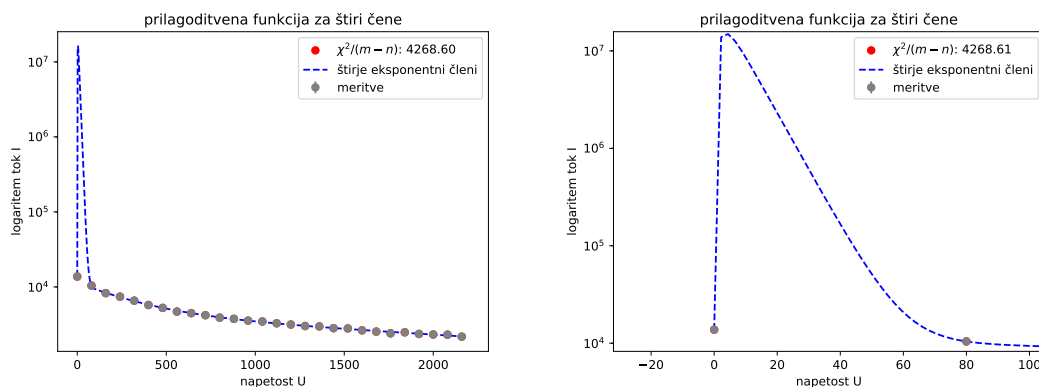
Slika 6

Brez nekega izpeljevanja bom naivno sklepal, da z dodajanjem kompartmentov zgolj prištevamo nove in nove eksponentne člene, zato lahko zapišemo

$$c_n(t) = \sum_{i=1}^n c_i \exp^{-\lambda_i t}, \quad (12)$$

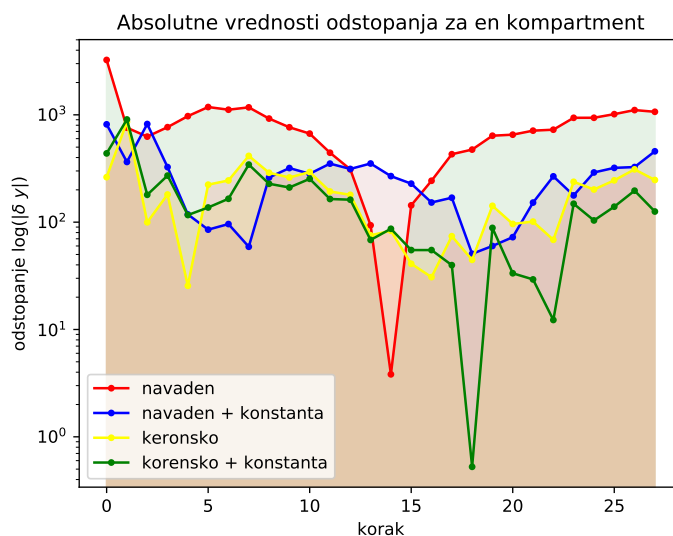
kjer dobimo za  $n$  kompartmentov  $2n$  parametrov. To sem potem poskušal izrisati, vendar sem

imel težave. Zanimala me je namreč odvisnost  $\chi^2$  od števila  $n$ . V glavnem nisem opazil, da bi se z zviševanjem  $n$  kaj bistveno zniževala vrednost  $\chi^2$ . Zato sem izrisal zgolj prilagoditveno funkcijo za  $n = 4$  in dobil zelo slab rezultat. Lahko da je imel moj algoritem kakšno hibo, ampak zgodilo se je to, da je prilagoditvena funkcija blizu ničle poskočila in ustvarila veliko napako, kot vidimo na slikah.



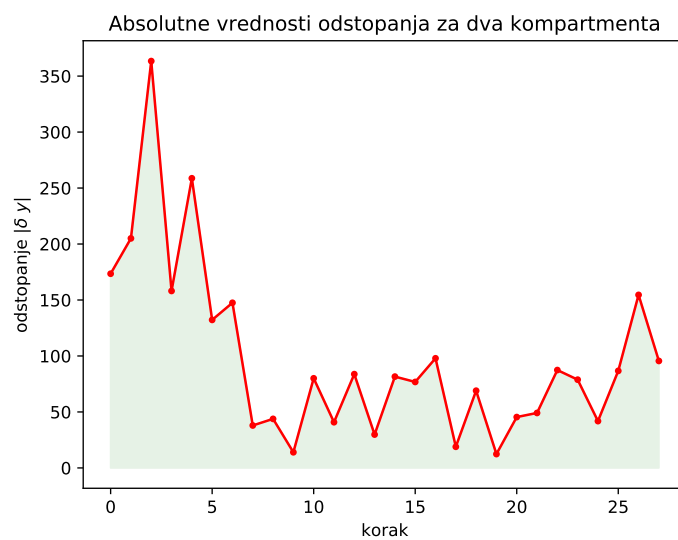
**Slika 7:** Sliki prikazujeta prilagoditveno funkcijo za  $n = 4$ , pri čemer je desna slika zgolj povečava tega skoka.  $y$  os je v logaritemski skali.

Poglejmo si raje še grafe absolutnih napak za vse zgoraj opisane modele, ki so prikazani na slikah 8 in 9.

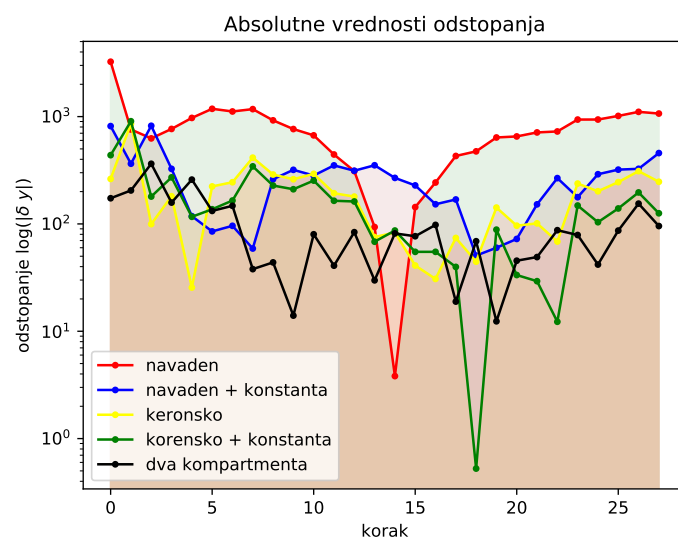


**Slika 8**

Ker vidimo, da ima model z dvema kompartmenta skoraj povsod manjšo napako, nas zanima kako izgleda v primerjavi z ostalimi napakami, zato si pogledamo kar vse skupaj na enem grafu na sliki 10, kjer vidimo da je res model z dvema kompartmenta dosti boljši, saj so napake skoraj ves čas pri približno isti vrednosti in večino časa nižje od ostalih. Tako lahko zaključimo, da je model dveh kompartmentov dober približek delovanju ledvic.



Slika 9



Slika 10



### III. KOROZIJA

Parametri korozije se določajo iz  $U - I$  diagramov med kovino in korozivnim elektrolitom. Modelski nastavek lahko v najpreprostejši obliki zapišemo kot

$$I = I_0 \left[ \exp \frac{U}{U_a} - \exp^{-\frac{U}{U_c}} \right]. \quad (13)$$

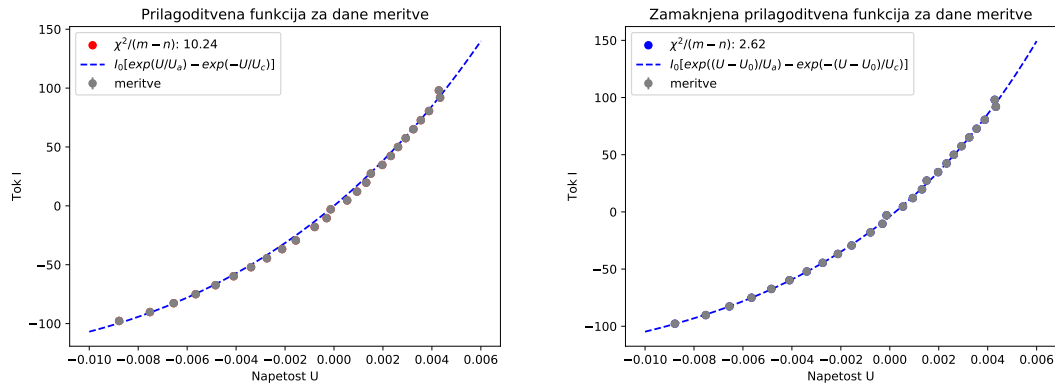
Če tak model prilagajamo meritvam dobimo vrednosti za parametre

$$I_0 = 4885,04921, \quad U_a = 0,0197828665 \quad \text{in} \quad U_c = -0,0212829769, \quad (14)$$

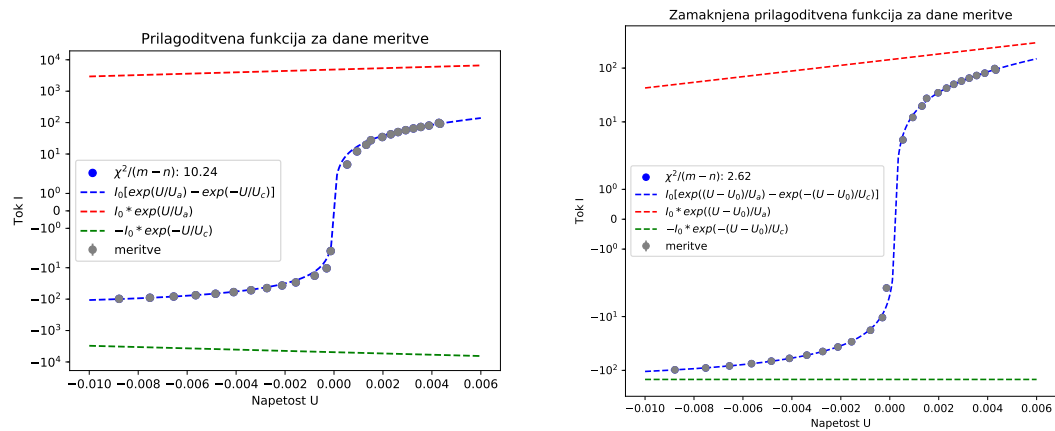
za katere je pripadajoči  $\chi^2 = 10,24$ . Meritve ne gredo čisto čez izhodišče, zato si zamislimo še nastavek  $U \rightarrow (U - U_0)$ , ki nam da naslednje vrednosti parametrov

$$I_0 = 147,458868, \quad U_a = 0,00825290487, \quad U_c = 2057069,76 \quad \text{in} \quad U_0 = 0,000226486537 \quad (15)$$

ki jim pripada  $\chi^2 = 2,62$ . Ta nastavek je bil torej zelo koristen, saj sedaj prilagajoča funkcija le malo odstopa od danih meritev.

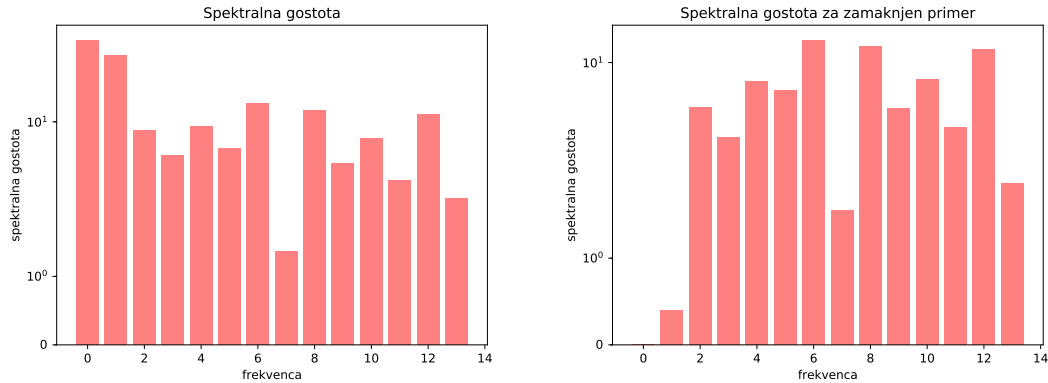


Slika 11: Sliki prikazujeta prilagajoče funkcije.



Slika 12: Sliki prikazujeta prilagajoče funkcije v logaritemski y skali in eksponentna člena v vsoti.

Tudi tu lahko izrišemo spektralne gostote in tako kot prejšnjič, nam ne bodo povedale nič preveč zanimivega. Opazimo le, da v zamakljenem primeru porazdelitev izgleda kanček, ampak res samo kanček, bolj normalna.



Slika 13: Sliki prikazujeta spektralni gostoti residualov za oba primera.

Lahko pa si mislimo, da razvijemo eksponente v vrsto in dobimo linearno prilagoditveno funkcijo.

$$I = \alpha U + \beta U^2 + \gamma U^3 + \dots \quad (16)$$

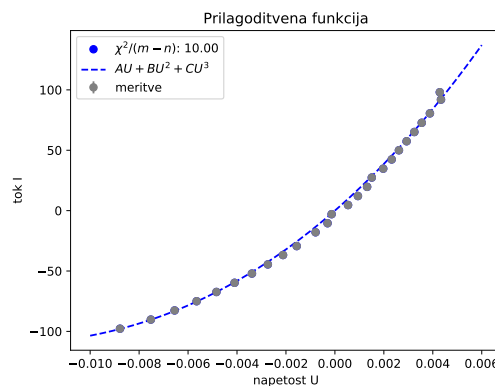
je recimo razvoj do tretjega člena, pri čemer velja

$$\frac{1}{U_a} = +\frac{\beta}{\alpha} - \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha} - \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^2}, \quad \frac{1}{U_c} = -\frac{\beta}{\alpha} - \sqrt{\frac{6\gamma}{\alpha} - \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^2} \quad (17)$$

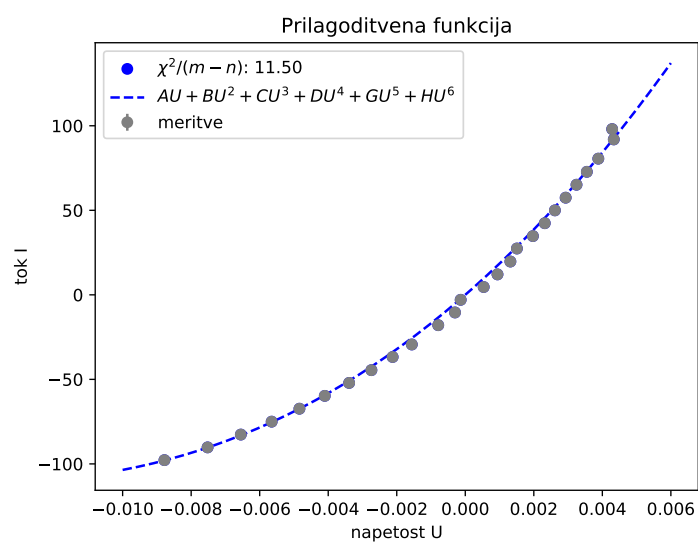
in

$$I_0 = \frac{A}{\sqrt{24\frac{\gamma}{\alpha} - \left(\frac{2\beta}{\alpha}\right)^2}} \quad (18)$$

Taka prilagoditvena funkcija je prikazana na sliki 14, kjer vidimo, da je že pri razvoju do treh členov prilagoditvena funkcija zelo dobra - primerljiva s tisto ki ni zamaknjena. Pravzaprav je boljša. Pri razvoju do višjih redov pa meni pridejo vse višje vrednosti  $\chi^2$ , kot vidimo na sliki 15, zato te metode ne priporočam. Poleg tega pa tudi sistem enačb za konstante začne postajati tako zapleten, da s tem porabimo že preveč časa. Za višje redove je sistem morda celo analitično nerešljiv, saj dobimo vse višje potence za člene  $U_a$  in  $U_c$ .



Slika 14



Slika 15