

Modelska analiza I

Naloga 106

17. 11. 2022



6. naloga – Luščenje modelskih parametrov in razdelčni modeli

- V farmakologiji merijo odziv tkiv na različne reagente. Za večino teh pojavov lahko privzamemo, da gre za reakcijo, kjer spremljamo vezavo molekul reagenta X na receptorje Y v tkivu.

$$Y + X \rightleftharpoons Y^*$$

V stacionarnem stanju dobimo zvezo

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

Iz merskih podatkov v datoteki `farmakoloski.dat`¹ določi parametra y_0 in a , kjer pomeni y_0 nasičeni odziv tkiva in a koncentracijo, potrebno za odziv, ki je enak polovici nasičenega. Napaka v meritvi odziva je v vsem področju enaka trem enotam. Zvezo lahko lineariziramo. Pazi, kako se pri tem transformirajo napake.

Določi še parametre razširjenega nelinearnega modela

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

in statistično upravičenost vpeljave dodatnega parametra p .

- Pošči najboljšo vrednost za čistilnost ledvic iz kliničnih podatkov v datoteki `ledvice.dat` z uporabo enorazdelčnega in dvorazdelčnega modela ter primerjaj rezultate. Pri dvorazdelčnem modelu lahko za začetni približek vzameš eksponentni konstanti v razmerju 1:10. Ali je dodatek aditivne konstante (“ozadje” pri štetju razpadov) statistično upravičen? Poskusиш lahko tudi s funkcijo $\exp(-\lambda\sqrt{t})$, ki jo izvedemo iz bolj zapletenih modelov.

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

- Za uporabo visokoločljivostnega magnetnega spektromетra potrebujemo preslikavo, ki iz izmerjenih količin rekonstruira parametre trajektorije delcev, potrebne za izračun energije in drugih kinematičnih količin. V datoteki `thtg-xfp-thfp.dat` najdete kalibracijske podatke s stolpcem ϑ_{tg} (disperzijski kot na tarči v stopinjah) ter x_{fp} (položaj v goriščni ravnini v milimetrih) in ϑ_{fp} (kot v goriščni ravnini v stopinjah). Natančnosti meritev kotov so velikostnega reda miliradianov, položajev pa okrog milimetra. Sestavi varčni model za preslikavo

$$(x_{fp}, \vartheta_{fp}) \mapsto \vartheta_{tg}.$$

Uporabiš lahko na primer najnižje potence x_{fp} in ϑ_{fp} ali pa kakšne druge funkcije teh dveh spremenljivk.

Za izbiro relevantnih členov lahko uporabiš SVD razcep in reducirani χ^2 .

Izmerke y_i v točkah x_i z mersko napako σ_i , $i = 1, \dots, N$, želimo opisati s funkcijo $y = y(x, \mathbf{a})$. Modelske parametre $\mathbf{a} = \{a_1, \dots, a_M\}$ določimo tako, da bo funkcional χ^2 minimalen

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left[\frac{y_i - y(x_i, \mathbf{a})}{\sigma_i} \right]^2.$$

Če je funkcionalna zveza $y(x_i, \mathbf{a})$ linearna v parametrih \mathbf{a} , lahko funkcional minimiziramo bodisi z reševanjem normalnega sistema, razširjenega sistema, ali uporabe katere izmed metod za računanje psevdoinverza pravokotne matrike, kot je na primer razcep *SVD*.

Slošne nelinearne probleme rešujemo z uporabo numeričnih minimizacijskih metod, od katerih je posebej robustna *Levenberg-Marquardtova metoda*. V *Numerical Recipes* je na voljo v funkciji `mrgmin`, ki kliče pomožne rutine `mrgcof`, `gaussj` in `covsrt`. V `scipy.optimize` je treba nastaviti `method='lm'`. Podobno jo lahko izberemo v Mathematici in v matlabu.

¹<http://predmeti.fmf.uni-lj.si/modelska/podatki/>

Naloga 1:

- Linearni fit
- Nelinearni fit ($p=1, p \neq 1$)
- Interpretacija χ^2
- Drugi modeli?
- Residuali
- Konvolujej med parametri
- Error band, Konfidencijalne elipse
- Problem $\sigma \text{ ka } \gamma \rightarrow 0$.

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Oddelek za fiziko

Luščenje modelskih parametrov in razdelčni modeli

Modelska analiza 1,
Fizika, 2. stopnja, 1. letnik

Avtor: Kevin Jaksetič, vpisna številka: 28222050

Mentorja: prof. dr. Simon Širca, doc. dr. Miha Mihovilovič

Študijsko leto 2022/2023

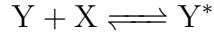
Naloge: Farmakologija, Čistilnost ledvic, Magnetni spektrometer

Kazalo

1 Farmakologija	2
1.1 Linearni model	2
1.2 Nelinearni model	6
1.3 Primerjava linearnega in nelinearnega modela	7
2 Čistilnost ledvic - razdelčni modeli	8
2.1 Enorazdelčni model	9
2.1.1 Z dodanim ozadjem	10
2.2 Dvorazdelčni model	11
2.2.1 Z dodanim ozadjem	12
2.3 Primerjava uporabljenih modelnih funkcij	13
2.4 Neuspešen poskus z modelno funkcijo	14
3 Magnetni spektrometer	15
3.1 Korelacijske matrike	19

1 Farmakologija

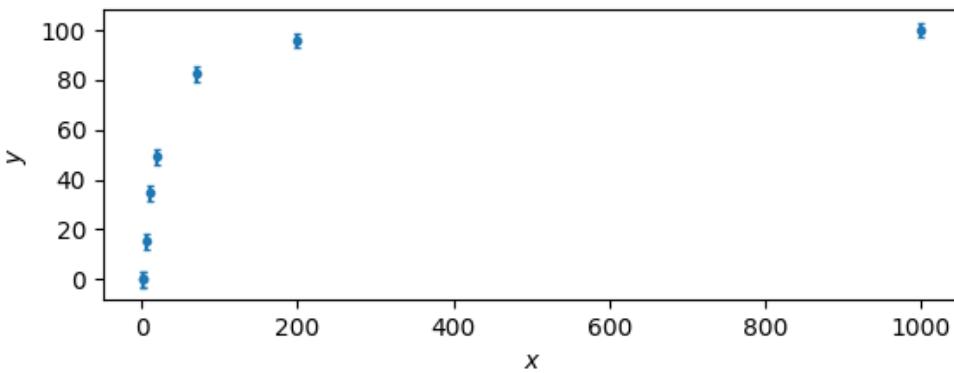
V farmakologiji merijo odziv tkiv na različne reagente. Za večino teh pojavov lahko privzamemo, da gre za reakcijo, kjer spremljamo vezavo molekul reagenta X na receptorje Y v tkivu.



Za reševanje naloge smo dobili podatke (x_i, y_i, σ_i) , kjer je σ_i merska napaka y_i . Podani so v tabeli na sliki [1] ter prikazani na grafu na isti sliki.

Merski podatki (x_i, y_i)

x_i	y_i	σ_i
1.0	0.0001	3.0
2.0	0.001	3.0
7.0	15.3	3.0
10.0	34.6	3.0
20.0	49.3	3.0
70.0	82.6	3.0
200.0	96.0	3.0
1000.0	100.0	3.0



Slika 1: Merski podatki, ki jih imamo na voljo. Vsi y_i imajo enako absolutno napako.

1.1 Linearni model

V stacionarnem stanju dobimo zvezo

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

kjer je y_0 nasičeni odziv tkiva in a koncentracija, potrebna za odziv, ki je enak polovici nasičenega. Zvezo lahko lineariziramo kot

$$f(x) = \frac{1}{y(x)} = \frac{1}{y_0} + \frac{a}{y_0} \frac{1}{x} \equiv a_1 + a_2 \frac{1}{x} , \quad (2)$$

pri čemer se seveda transformirajo tudi napake, in sicer kot

$$\frac{1}{y_i \pm \sigma_i} \approx \frac{1}{y_i} \pm \frac{\sigma_i}{y_i^2} \equiv \frac{1}{y_i} \pm \tilde{\sigma}_i . \quad (3)$$

Naš cilj je poiskati parametre a_1 in a_2 tako, da se bo funkcija $f(x)$ čim bolje prilegala meritvam. Kot mero za dobro prileganje bomo vzeli tako imenovani χ^2 , ki se v splošnem glasi

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - f(x_i, \mathbf{a}))^2}{\sigma_i^2} , \quad (4)$$

ki je kvadrat odstopanja modela od izmerkov, obtežen z variancami izmerkov. Pri tem je \mathbf{a} vektor parametrov. Iščemo minimalno odstopanje modela od meritev, torej zahtevamo

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = 0 , \quad \forall j . \quad (5)$$

Kot vidimo iz enačbe (2), nam je uspelo $f(x)$ zapisati v obliki

$$f(x, \mathbf{a}) = \sum_{j=1}^M a_j \phi_j(x) . \quad (6)$$

Zahtega vodi v matrično enačbo

$$A\mathbf{a} = \mathbf{b} , \quad (7)$$

kjer sta

$$A_{kj} = \sum_{i=1}^N \frac{\phi_j(x_i) \phi_k(x_i)}{\sigma_i^2} , \quad (8)$$

$$b_j = \sum_{i=1}^N \frac{y_i \phi_j(x_i)}{\sigma_i^2} . \quad (9)$$

V našem konkretnem primeru velja $\phi_1(x) = 1$ in $\phi_2(x) = \frac{1}{x}$, y_i pa moramo zamenjati z $1/y_i$. Matrični elementi so tako

$$A_{11} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\tilde{\sigma}_i^2} = N \frac{1}{\tilde{\sigma}_i^2} , \quad (10)$$

$$A_{12} = A_{21} = \sum_{i=1}^N \frac{1/x_i}{\tilde{\sigma}_i^2} , \quad (11)$$

$$A_{22} = \sum_{i=1}^N \frac{1/x_i^2}{\tilde{\sigma}_i^2} , \quad (12)$$

$$b_1 = \sum_{i=1}^N \frac{1/y_i}{\tilde{\sigma}_i^2} , \quad (13)$$

$$b_2 = \sum_{i=1}^N \frac{1/(y_i x_i)}{\tilde{\sigma}_i^2} . \quad (14)$$

Kovariančna matrika je v splošnem

$$\text{cov}[a_j, a_k] = (A^{-1})_{jk} = (A^{-1})_{kj}, \quad (15)$$

korelacijski koeficient pa

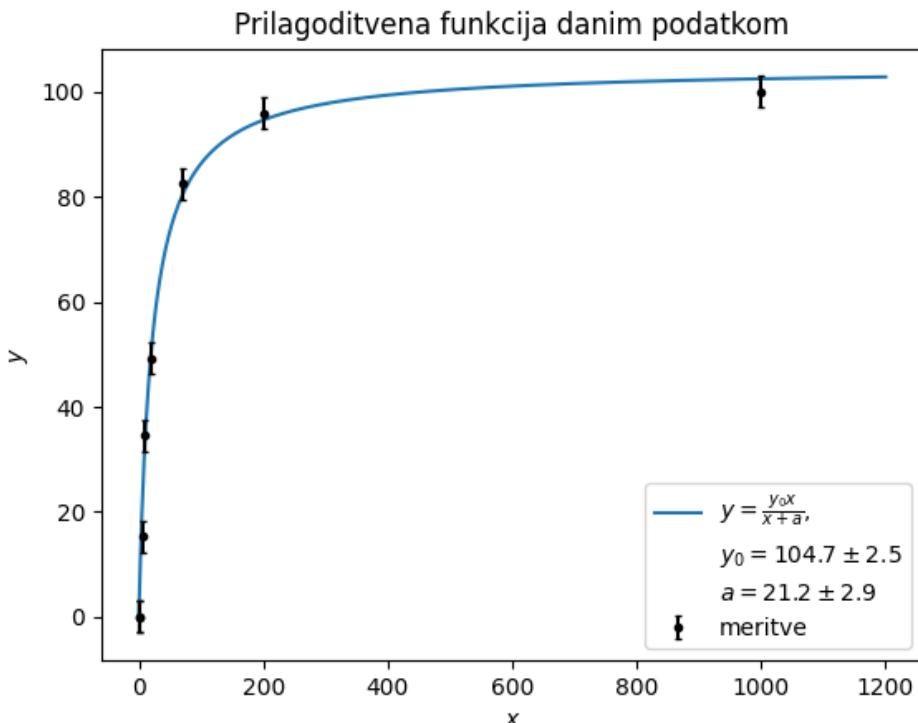
$$\rho = \frac{\text{cov}[a_j, a_k]}{\sqrt{\text{var}[a_j]\text{var}[a_k]}}, \quad (16)$$

pri čemer velja

$$\text{var}[a_j] = \text{cov}[a_j, a_j] = (A^{-1})_{jj}. \quad (17)$$

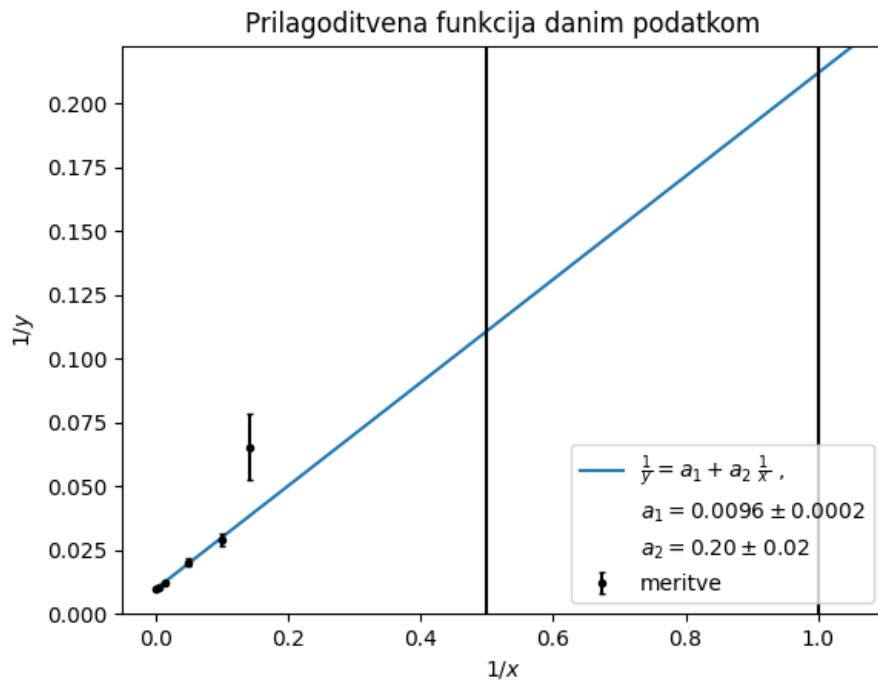
Tako lahko izvemo tudi napako v oceni parametrov ter korelacijo med njimi.

Vrnimo se k našemu konkretnemu primeru. Na spodnjih prikazih lahko vidimo prilagoditveno funkcijo danim podatkom.

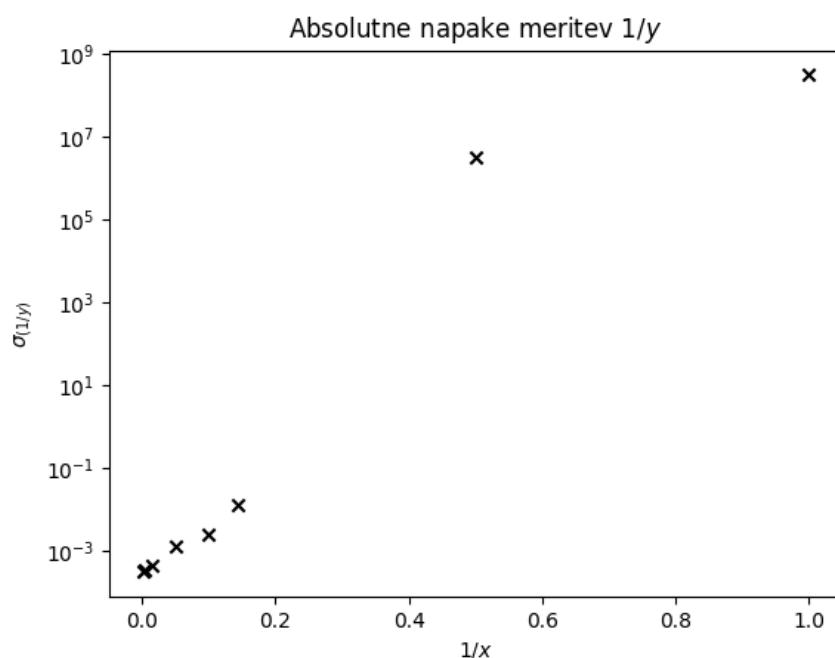


Slika 2: Prilagoditvena funkcija za dane podatke. Na grafu ni videti, da imamo v okolici $x = 0$ v resnici dve meritvi, ki sta blizu skupaj. To lahko vidimo iz tabele na sliki 1

Izračunana parametra prilagoditvene funkcije sta podana na zgornjem prikazu. Zanjo velja $\chi^2 = 26$ oziroma pomembnejše, $\frac{\chi^2}{N-M} = 4.3$, za dobre modele pa je ta vrednost značilno malo nad 1. Zaželjene so torej izboljšave. Za modelsko funkcijo lineariziranega problema (premica, ki smo jo računali, prikazana je na sliki 3) je $\chi^2 = 6.24$, oziroma je reducirani χ^2 : $\frac{\chi^2}{N-M} = 1.04$. Vrednost je boljša kot za nelineariziran problem, vendar je do tega verjetno prišlo zaradi transformacije prostora in napak.



Slika 3: Linearizirana prilagoditvena funkcija za dane podatke, ki smo jo računali z našo metodo. Zadnji dve napaki sta ogromni, zato merski točki nista bili zelo upoštevani.



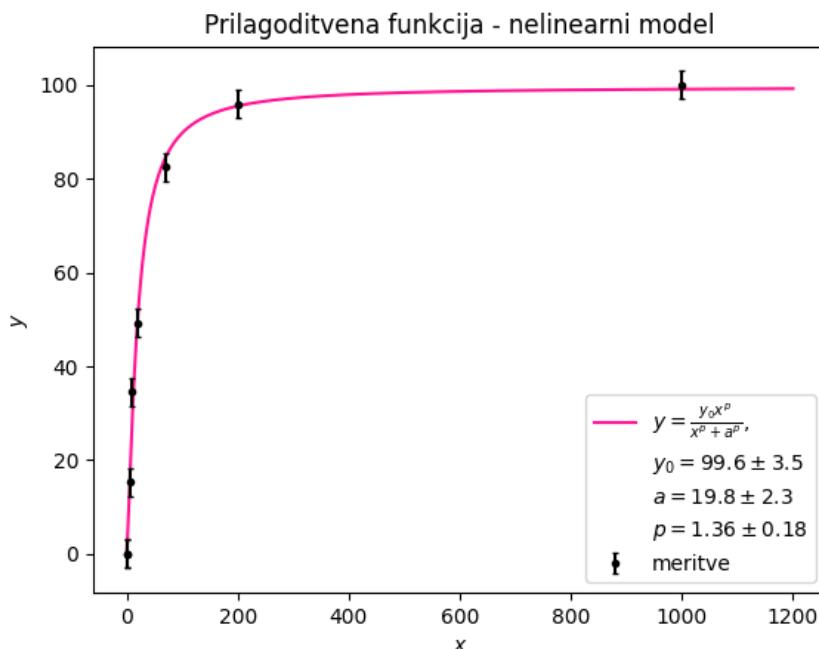
Slika 4: Absolutne napake meritev $1/y$.

1.2 Nelinearni model

Modelska funkcija tukaj je

$$y = \frac{y_0 x^p}{x^p + a^p} , \quad (18)$$

kar pomeni, da imamo sedaj opravka z enim parametrom več. Kot mero odstopanja še vedno uporabljamo χ^2 , vendar je sedaj $f(x_i, \mathbf{a})$ iz definicije 4 nelinearna funkcija parametrov \mathbf{a} . Problem rešujemo z metodo *Levenberg-Marquardt*. To je tudi privzeta metoda funkcije `curve_fit` iz *Pythonovega* modula `scipy.optimize`. Na sliki 5 je prikazana izračunana krivulja z najboljšim ujemanjem.



Slika 5: Prilagoditvena funkcija za izbrani nelinearni model.

Za to nelinearno modelno funkcijo smo dobili boljše ujemanje kot pri linearini od prej,

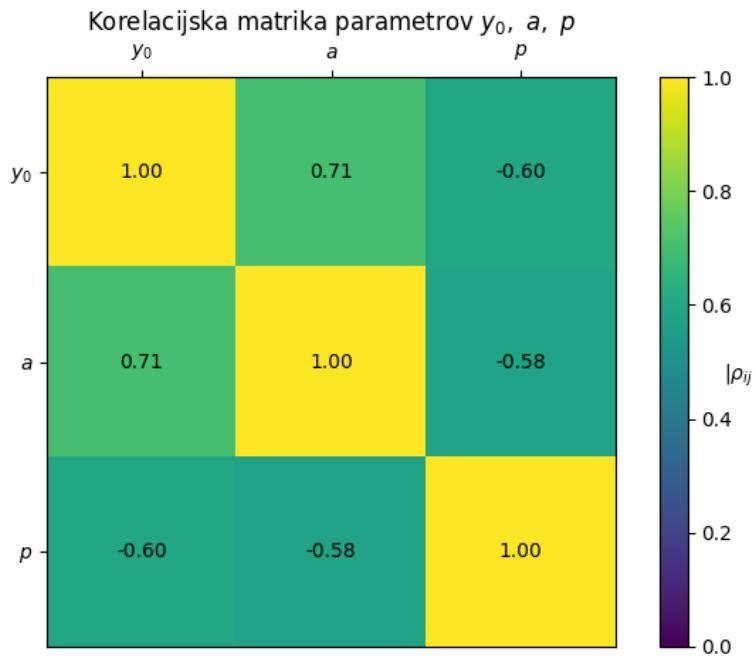
$$\chi^2 = 9.36 ,$$

oziroma

$$\frac{\chi^2}{N - M} = 1.87 ,$$

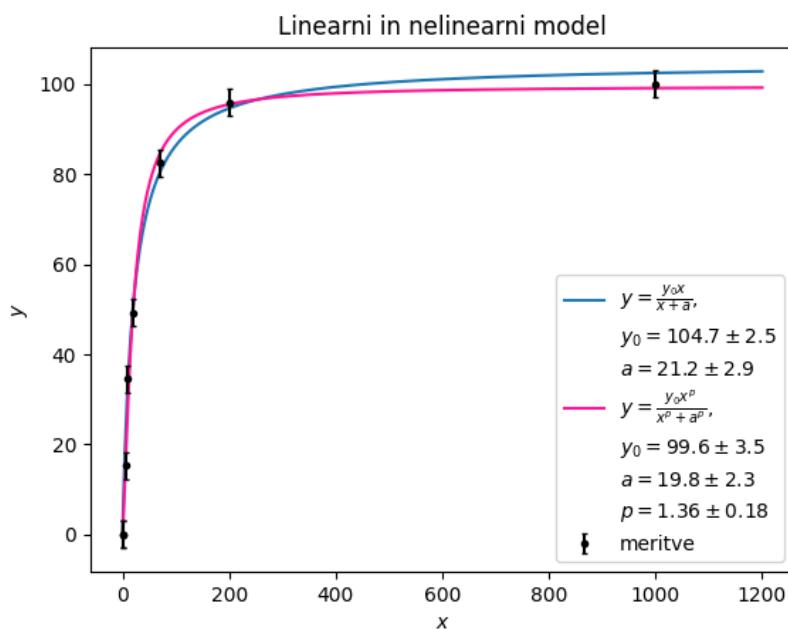
kar pove, da je model že kar spoden.

Poglejmo si še korelacije med parametri y_0 , a in p . Na sliki 6 je prikazana njihova korelacijska matrika.



Slika 6: Koreacijska matrika parametrov y_0 , a in p . Z barvo so označene absolutne vrednosti matričnih elementov, na sliki pa so podane tudi pravilno predznačene vrednosti.

1.3 Primerjava linearnega in nelinearnega modela



Slika 7: Primerjava uporabljenih modelov.

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

NALOGA 6: LUŠČENJE MODELSKIH PARAMETROV IN RAZDELČNI MODELI

MODELSKA ANALIZA 1

DANA KOCIJANČIČ
VPISNA ŠTEVILKA: 28222068

PREDAVATELJ: PROF. DR. SIMON ŠIRCA
ASISTENT: DOC. DR. MIHA MIHOVILOVIČ

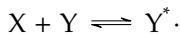
Uvod

Naša naloga je prilagajanje funkcij izmerjenim vrednostim in določanje parametrov prilagojenih funkcij. Obravnavali bomo model vezave reagenta na receptor v tkivu, delovanje ledvic in rekonstrukcijo trajektorije delcev v magnetnem spektrometru. Pri reševanju si bomo pomagali z modulom v *Pythonu* `scipy.optimize`. Ustreznost prilagojene funkcije $f(x_i, \mathbf{a})$ s parametri \mathbf{a} bomo preverjali s testom χ^2 , ki ga izvedemo s funkcionalom

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

Vezava reagenta na receptorje v tkivu

Zanima nas vezava reagenta X na receptorje v tkivu Y. Proces opisuje kemijska reakcija:



V stacionarnem stanju dobimo zvezo

$$y = \frac{y_0 x}{x + a},$$

ki jo bomo poimenovali $f_1(x)$. Uporabili bomo merske podatke v datoteki `farmakoloski.dat` in določili parametra y_0 in a . Zvezo lahko tudi lineariziramo.

$$f_0(x) = \frac{1}{y} = \frac{1}{y_0} + \frac{a}{y_0 x} = a_1 + a_2 \frac{1}{x},$$

kjer smo uvedli $a_1 = \frac{1}{y_0}$ in $a_2 = \frac{a}{y_0}$. Pazljivi moramo biti še pri transformaciji napak

$$y_i \pm \sigma_i \rightarrow \frac{1}{y_i} \pm \tilde{\sigma}_i,$$

kjer je

$$\tilde{\sigma}_i = \frac{\sigma_i}{y_i^2}.$$

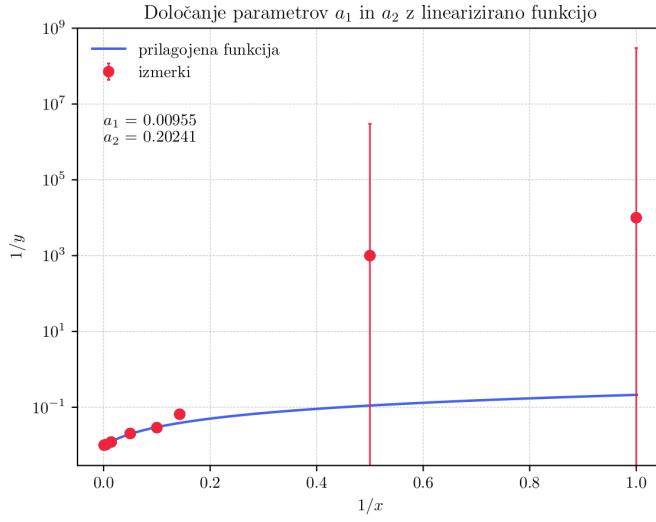
S prilaganjem linearizirane funkcije določimo parametra a_1 in a_2 . Rezultat je prikazan na sliki 1. Napake izgledajo zelo velike, a so tudi vrednosti funkcij po transformaciji ustrezno večje. Če želimo določita naša prvotna parametra y_0 in a , moramo ponovno izvesti transformacijo. Veljajo naslednje zvezne:

$$\begin{aligned} y_0 &= \frac{1}{a_1} \\ \sigma_{y_0} &= \frac{\sigma_1}{a_1} y_0 \\ a &= \frac{a_2}{a_1} \\ \sigma_a &= a \left(\left(\frac{\sigma_1}{a_1} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_2}{a_2} \right)^2 - 2\rho_{12} \left(\frac{\sigma_1}{a_1} \right) \left(\frac{\sigma_2}{a_2} \right) \right)^{1/2} \end{aligned}$$

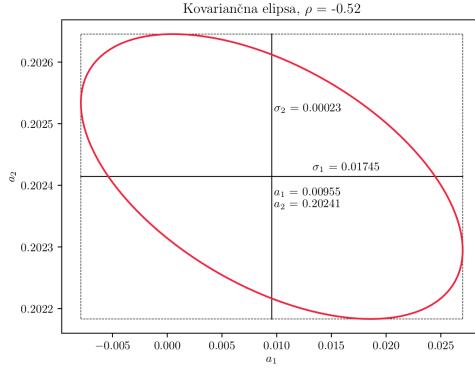
Rezultati so prikazani v tabeli 1. Za dobljeno rešitev narišemo še kovariančno elipso in kovariančno matriko. Matrika nam da podatke o vseh variankah in kovariankah, točke na elipsi pa ustrezajo parametrom, ki dajo enako verjetne rezultate prilaganja krivulje. Iz slike 2 lahko

Tabela 1: Izluščeni parametri in vrednost χ^2 za funkcijo f_0 .

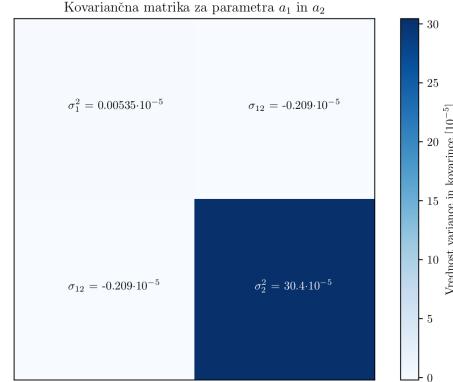
$a_1 \pm \sigma_1$	$a_2 \pm \sigma_2$	ρ_{12}	χ^2	$y_0 \pm \sigma_{y_0}$	$a \pm \sigma_a$
$(9.55 \pm 0.23) \cdot 10^{-3}$	0.202 ± 0.017	-0.52	1.04	104.7 ± 2.5	21.19 ± 0.02



Slika 1: Z modelsko funkcijo f_0 izluščimo parametra $a_1 = (9.55 \pm 0.23) \cdot 10^{-3}$ in $a_2 = 0.202 \pm 0.017$



Slika 2: Kovariančna matrika, ki ustreza prilagajanju funkcije f_0 obratnim vrednostim izmerkov $\frac{1}{y_i}$.

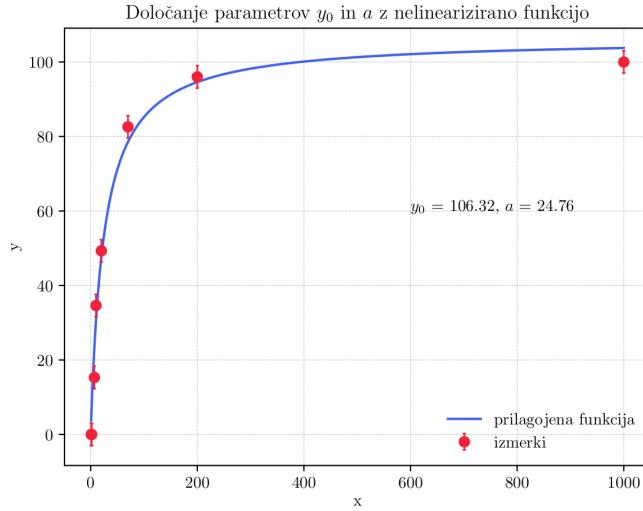


Slika 3: Kovariančna matrika, ki vsebuje variance in kovarianc parameterov a_1 in a_2 .

razberemo, da je korelacijski koeficient negativen, na kar nakazuje nagnjenost elipse. Iz slike 3 vidimo, da velja $\sigma_2^2 \gg \sigma_1^2$, kar je pričakovano, saj je tudi $a_2 \gg a_1$.

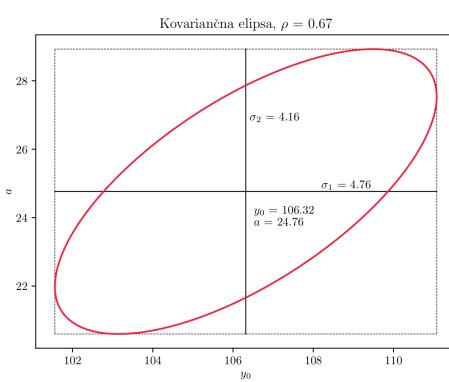
Iz tabele 1 lahko preberemo tudi vrednost testa χ^2 , ki je 1.04. Dobljen χ^2 je zelo blizu številu 1, ki ga želimo pri tem testu doseči. Na tem mestu pojasnimo, da smo v resnici računali vrednost reduciranega $\chi^2 \rightarrow \frac{\chi^2}{N-M}$, kjer je N število meritev, M pa število parametrov modelske funkcije.

Preverimo, kakšni so rezultati, če funkcije ne lineariziramo. Za naslednji model vzamemo funkcijo f_1 . V tem primeru se ne rabimo ukvarjati s transformacijami. Prilagojena funkcija f_1 , ki jo dobimo je prikazana na sliki 4. Izluščimo tudi iskana parametra $y_0 = 106.3 \pm 4.8$ in $a = 24.8 \pm 4.2$. Napaki obeh parametrov sta znatno večji od tistih v prejšnjem primeru. Tudi χ^2 test nam pokaže, da se funkcijo, če se le da, splača linearizirati. Iz tabele 2 preberemo, da vrednost χ^2 za funkcijo f_1 znaša 3.67. Pogledamo si lahko tudi pripadajočo kovariančno matriko in kovariančno elipso, ki

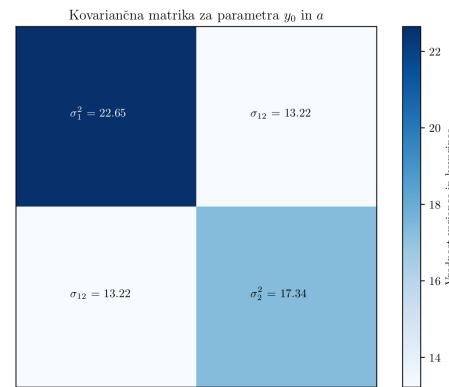


Slika 4: Prileganje modelske funkcije f_1 izmerkom.

ju prikazujeta sliki 5 in 6. Razberemo lahko, da sta parametra a in y_0 korelirana, saj je koeficient korelacije $\rho = 0.67$ in je večji od nič. V nasprotju s prejšnjim primerom opazimo, da sta si tokrat σ_1 in σ_2 , ki pripadata y_0 in a , po velikosti bolj podobna.



Slika 5: Prikaz kovariančne matrike za funkcijo f_1 in parametra y_0 ter a .



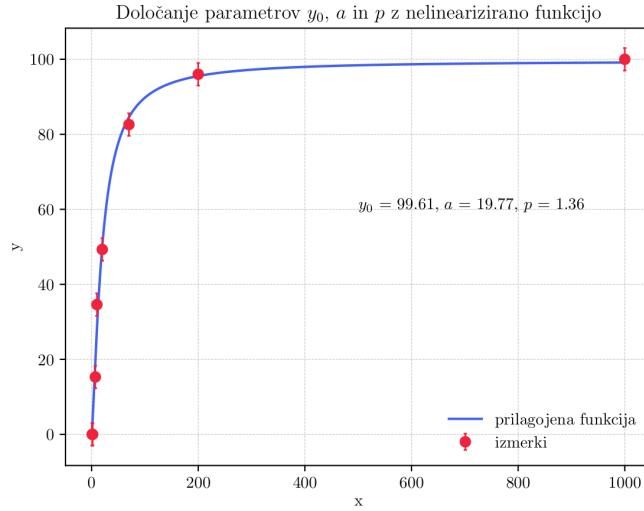
Slika 6: Kovariančna matrika za parametra y_0 in a .

Ker smo se pri testu χ^2 tokrat slabše odrezali, poskusimo rezultat izboljšati tudi za primer, ko ne uporabimo linearizacije. Poskusimo s funkcijo

$$f_2(x) = y = \frac{y_0 x^p}{x^p + a^p}.$$

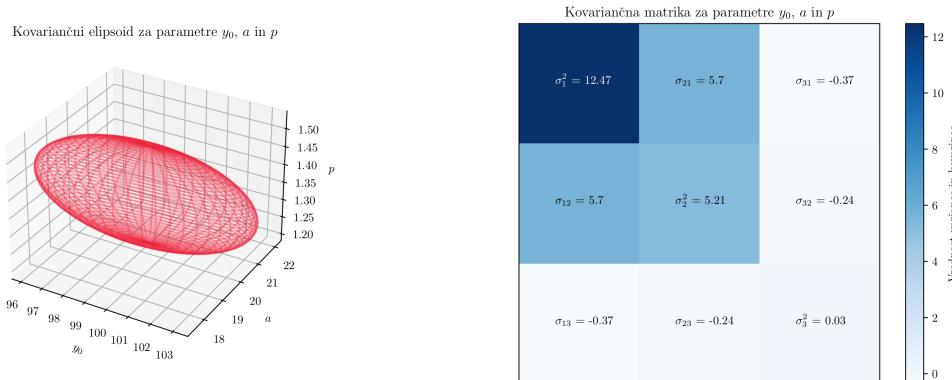
Tokrat v funkciji nastopajo trije parametri y_0, a in p . Rezultat prilagajanja f_2 izmerkom je prikazan

na sliki 7. Že s prostim očesom se da videti, da se funkcija bolje ujema z izmerki kot na sliki 4. Parametri, ki jih dobimo, so zapisani v tabeli 2 in se po velikostnem redu ujemajo s parametromi y_0 in a v prejšnjem primeru. Opazimo tudi, da se parameter p ne razlikuje dosti od 1. To je vrednost, ki bi ustrezala funkciji f_1 . Z dodatnim parametrom izboljšamo tudi rezultat testa χ^2 , ki zdaj znaša 1.87. Iz tega lahko sklepamo, da je dodaten parameter v primeru, ko funkcije ne lineariziramo, upravičen.



Slika 7: Ujemanje prilagojene funkcije f_2 z izmerki.

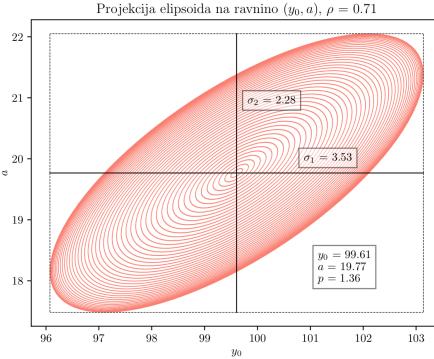
Ker imamo v funkciji f_2 tri parametre postaneta bolj zanimivi tudi kovariančni matrika in elipsa. Matrika je zdaj velikost 3×3 , elipsa pa se iz dvodimenzionalnega lika spremeni v tridimenzionalni elipsoid. Elipsoid je prikazan na sliki 8. Zaradi boljše nazornosti ga bomo v nadaljevanju preslikali na vse tri ravnine. To nam bo pomagalo videti koreliranost posameznega para parametrov. Iz kovariančne matrike na sliki 9 lahko razberemo, da se v primerjavi s funkcijo f_1 zmanjšata napaki parametrov y_0 in a , σ_1 in σ_2 .



Slika 8: Kovariančni elipsoid za parametre y_0 , a in p .

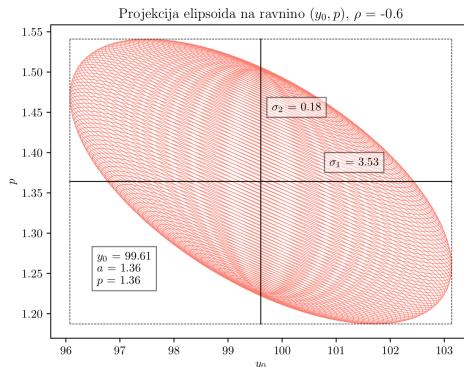
Slika 9: Kovariančna matrika za parametre y_0 , a in p .

Zdaj pa si poglejmo preslikave elipsoida na posamezna ravnine. Na sliki 10 je elipsoid preslikan na ravnino parametrov y_0 in a . Opazimo, da sta še vedno korelirana, njun koreacijski koeficient pa znaša $\rho = 0.71$. To je precej podobno kot v prejšnjem primeru, ko je znašal $\rho = 0.67$. Ponovimo postopek in elipsoid preslikamo na ravnini (y_0, p) in (a, p) . Rezultata prikazujeta sliki

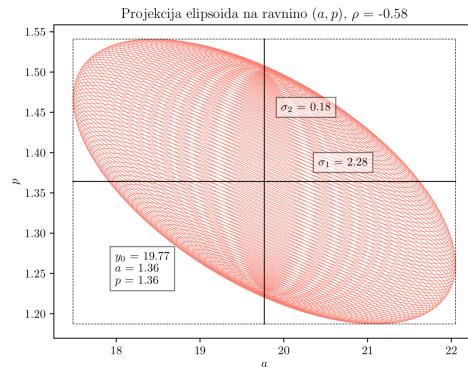


Slika 10: Projekcija kovariančnega elipsoida na ravnino (y_0, a) .

11 in 12] Opazimo, da sta tokrat koreacijska koeficiente negativna in oba znašata približno -0.6.



Slika 11: Projekcija kovariančnega elipsoida na ravnino (y_0, p) . Koreacijski koeficient je enak $\rho = -0.60$.



Slika 12: Projekcija kovariančnega elipsoida na ravnino (a, p) . Koreacijski koeficient je enak $\rho = -0.58$.

Tabela 2: Primerjava modelskih funkcij f_1 in f_2 .

	$y_0 \pm \sigma_{y_0}$	$a \pm \sigma_{y_0}$	$p \pm \sigma_p$	$\rho_{y_0 a}$	$\rho_{y_0 p}$	$\rho_{p a}$	χ^2
f_1	106.3 ± 4.8	24.8 ± 4.2	/	0.67	/	/	3.67
f_2	99.6 ± 3.5	19.8 ± 2.3	1.36 ± 0.18	0.71	-0.60	-0.58	1.87

Nalogen 2:

- Polimerjara A^2
- Residuals
- Upravnost dodatnih prostostnih stopenj.
- Kvalitije med parametri
- Errorbay;
- Odnosnost fiks od zvezdnih pogojev.

Delovanje ledvic

Iščemo najboljšo vrednost za čistilnost ledvic, ki jo bomo modelirali z različnimi funkcijami. Uporabili bomo podatke iz datoteke `ledvice.dat`, za napako izmerjenega števila sunkov N pa vzamemo \sqrt{N} . Analizirali bomo nekaj različnih modelskih funkcij.

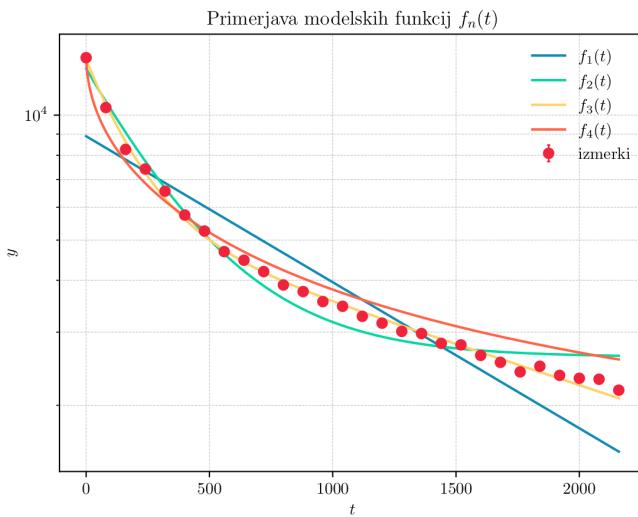
$$f_1(t) = Ae^{-at}$$

$$f_2(t) = Ae^{-at} + C$$

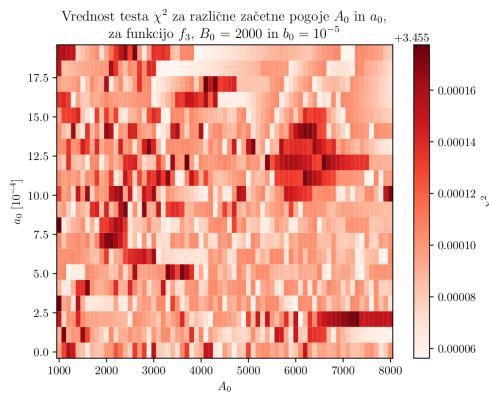
$$f_3(t) = Ae^{-at} + Be^{-bt}$$

$$f_4(t) = Ae^{-a\sqrt{t}} + Be^{-b\sqrt{t}}$$

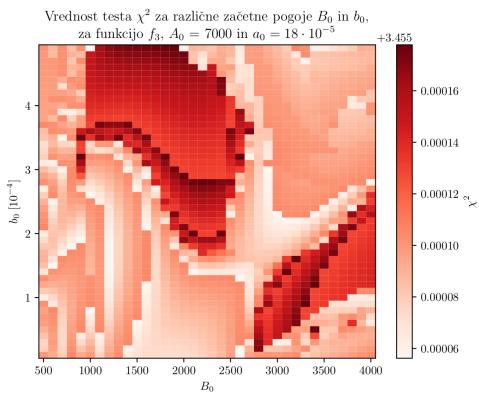
Rezultate prilagajanj vseh modelskih funkcij meritvam predstavlja slika 13. Na podlagi te slike se odločimo, da najboljše prileganje meritvam predstavlja funkcija f_3 , zato jo v nadaljevanju podrobneje analizirajmo.



Slika 13: Primerjava prileganja modelskih funkcij izmerkom.



Slika 14: Odvisnost χ^2 za različne začetne približke parametrov A in a .



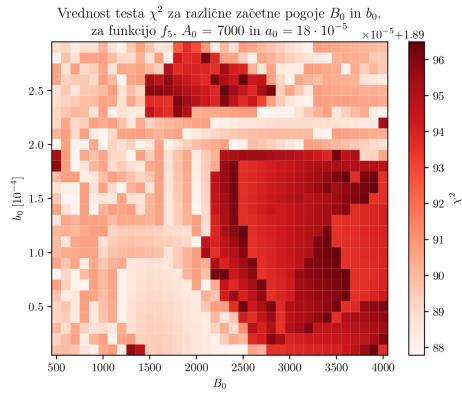
Slika 15: Odvisnost χ^2 za različne začetne približke parametrov B in b .

Pri preizkušanju modelskih funkcij smo lahko opazili, da na rezultat prilagajanja močno vpliva vrednost začetnega približka. Tako dobimo idejo, da bi poskusili prileganje meritvam izboljšati z variranjem začetnega približka. Za mero ustreznosti modela ponovno vzamemo reducirani χ^2 . Slike 14 in 15 prikazujeta vrednost χ^2 v odvisnosti od začetnih približkov za parametre A , a , B in b . Kljub velikim obetom, poskus ni obrodil sadov, saj je vrednost χ^2 v vseh primerih enaka 3.455, razlike pa se poznajo šele na četrti decimalki. Slike 14 in 15 sta zanimivi tudi, ker izgledajo vrednosti χ^2 na prvi popolnoma naključne, na drugi pa se kaže neka struktura.

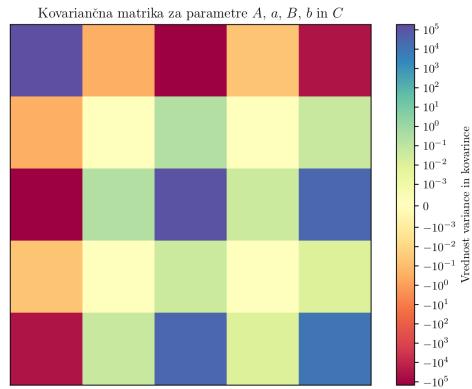
Ker z vrednostjo $\chi^2 = 3.455$ nismo zadovoljni, poskušajmo našo funkcijo še malo popraviti. Funkciji f_3 dodamo konstanto in zapišemo:

$$f_5(x) = Ae^{-at} + Be^{-bt} + C.$$

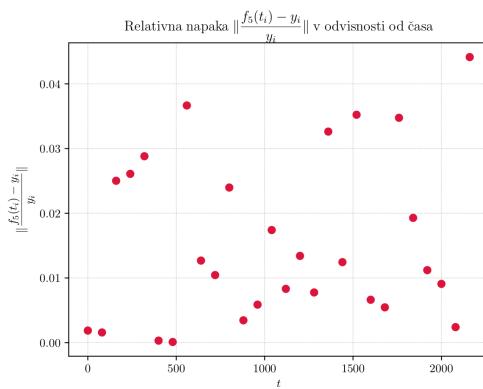
Vrednosti χ^2 za f_5 in različne začetne približke parametrov B in b so prikazane na sliki 16. Z variranjem začetnih približkov ponovno nismo veliko pridobili. Vrednost χ^2 zdaj znaša 1.89, kar je precej boljše kot pri funkciji f_3 . Slika 17 prikazuje kovariančno matriko. Opazimo, da se razteza čez veliko velikostnih redov, vendar so si tudi parametri A , a , B , b in C med seboj zelo različni. Vrednosti parametrov in njihovih napak predstavlja tabela 3.



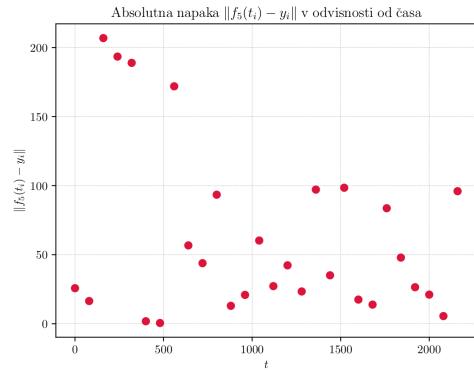
Slika 16: Vrednosti χ^2 za različne vrednosti začetnih približkov parametrov B in b . Za začetni približek parametra C smo vzeli $C_0 = 2000$.



Slika 17: Kovariančna matrika za parametre A , a , B , b in C .



Slika 18: Relativna napaka prilagojene funkcije f_5 glede na meritve.

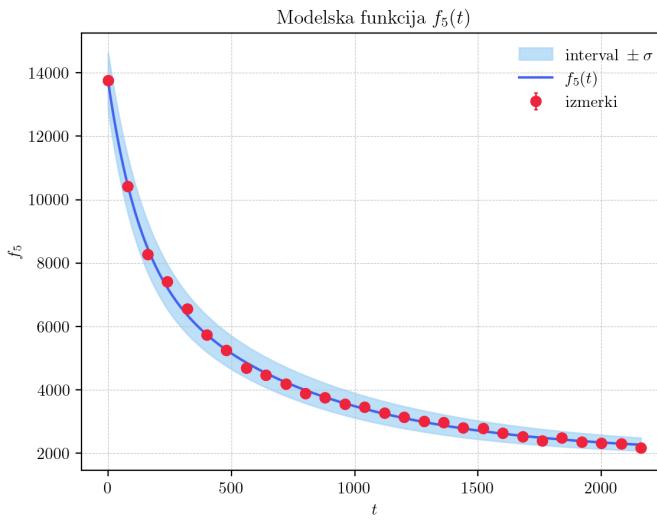


Slika 19: Absolutna napaka prilagojene funkcije f_5 glede na meritve.

Poglejmo si odstopanja prilagojene funkcije f_5 od izmerjenih vrednosti. Relativne napake so prikazane na sliki 18, absolutne pa na sliki 19. Relativne napake so večje pri manjših vrednostih funkcije, absolutne pa pri večjih, kar je bilo tudi pričakovano. Maksimalna absolutna napaka je okoli 200, vse relativne pa so manjše od 5%. Za konec smo s sliko 20 prikazali prilagojeno funkcijo f_5 .

Tabela 3: Rezultati prilagajanja modelskih funkcij f_3 in f_5 .

	$A \pm \sigma_A$	$a \pm \sigma_a$	$B \pm \sigma_B$	$b \pm \sigma_b$	$C \pm \sigma_C$	χ^2
f_3	8033.1 ± 211.7	$(5.24 \pm 0.26) \cdot 10^{-3}$	5546.4 ± 264.1	$(4.5 \pm 0.3) \cdot 10^{-4}$	/	3.46
f_5	5445.3 ± 432.2	$(8.12 \pm 0.75) \cdot 10^{-3}$	6294.0 ± 358.5	$(1.44 \pm 0.13) \cdot 10^{-3}$	1988.0 ± 103.4	1.89



Slika 20: Primerjava prilagojene funkcije f_5 z izmerki.

Magnetni spektrometer

Iščemo preslikavo, ki iz izmerjenih količin rekonstruira trajektorije delcev. Podatke dobimo v datoteki `tthg-xfp-thfp.dat`, za reševanje pa bomo uporabili racep na singularne vrednosti (SVD). Zanima nas

$$(x_{fp}, \vartheta_{fp}) \rightarrow \vartheta_{tg}.$$

Naj bo naša modelska funkcija oblike

$$\vartheta_{tg}(x_{fp}, \vartheta_{fp}) = \sum_{i=0}^{n_1-1} \sum_{j=0}^{n_2-1} a_{ij} x_{fp}^i \vartheta_{fp}^j. \quad (1)$$

Sistem zapišemo v matrični obliki

$$A\mathbf{a} = \mathbf{y},$$

kjer je A matrika z vsemi kombinacijami potenc spremenljivk x_{fp} in ϑ_{fp} , ki ustrezajo modelski funkciji ϑ_{tg} in so po vrsticah izvrednotene v posameznih merskih točkah (x_{fp}, ϑ_{fp}) . Vektor \mathbf{a}

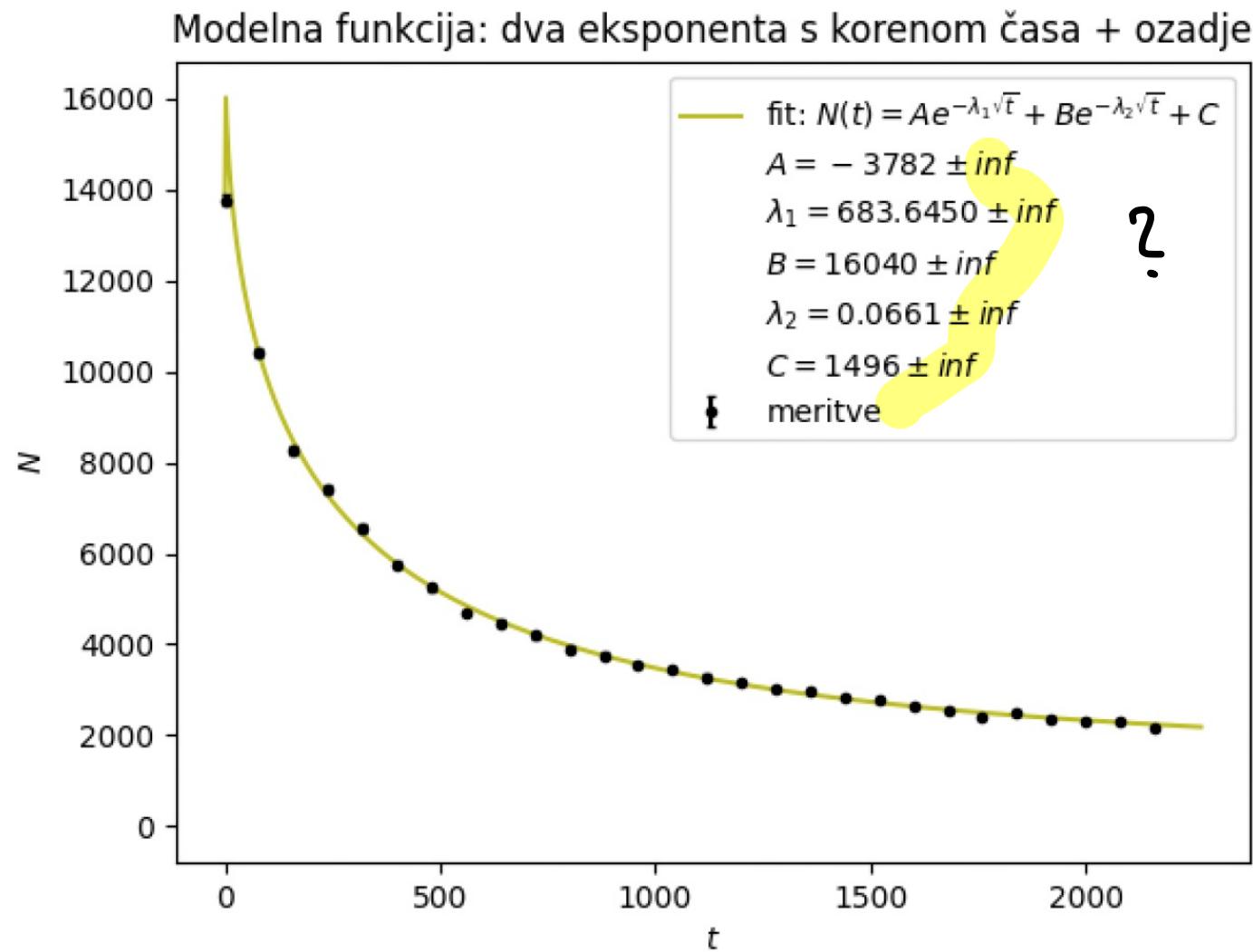
Fedja Čeplak Menclu (Glej PDF)

Čistilnost ledvic

Cilj te naloge je bilo določiti najboljšo vrednost za čistilnost ledvic. Na podatke sem prilegal nekaj različnih eksponentnih funkcij, katerih fiti so vidni na slikah 12-18:

$$\begin{aligned}y_1(t) &= Ce^{-\lambda t} \\y_2(t) &= Ce^{-\lambda t} + B \\y_3(t) &= C_1 e^{-\lambda_1 t} + C_2 e^{-\lambda_2 t} \\y_4(t) &= C_1 e^{-\lambda_1 t} + C_2 e^{-\lambda_2 t} + B \\y_5(t) &= C_1 e^{-\lambda_1 t} + C_2 e^{-\lambda_2 t} + C_3 e^{-\lambda_3 t} \\y_6(t) &= C_1 e^{-\lambda_1 t} + C_2 e^{-\lambda_2 t} + C_3 e^{-\lambda_3 t} + C_4 e^{-\lambda_4 t} \\y_7(t) &= C_1 e^{-\lambda_1 \sqrt{t}}\end{aligned}\tag{2}$$

Keruvn Jakšetič



Slika 14: Nesmiselni rezultat, ki sem ga dobil pri reševanju problema. Vidimo, da je program izvrge tudi neskončne napake v parametrih.

Naloga 3:

- SVD vs drugi množstvenočrnični delovanji
- Odvisnost rezultata od izbranih prečnih parametrov
- Drugi (nelinearni) načini delovanja
- Prikaz rezultatorjev ne osmijo konvolcij
- Vrednosti parametrov z napakom
- Potencialna + meritvena
- Konvergenčni parametri
- Lajšanje parametrov

Blaž Levpušček

3 Magnetni spektrometer

Potrebujemo preslikavo, ki iz izmerjenih količin rekonstruira parametre trajektorije delcev, potrebne za izračun energije in drugih kinematičnih količin. Imamo kalibracijske podatke θ_{tg} (disperzijski kot na tarči), x_{fp} (položaj v goriščni ravnini) in θ_{fp} (kot v goriščni ravnini). Sestavimo modelov preslikave $(x_{fp}, \theta_{fp}) \rightarrow \theta_{tg}$ z več potencami x in θ .

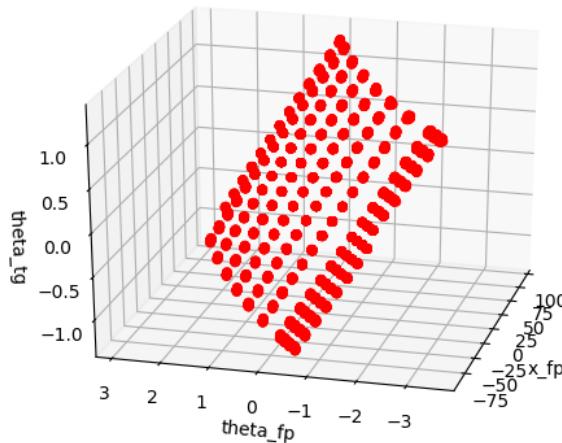
$$\theta_{tg} = \vec{x} \cdot \vec{a}^T$$

$$\vec{x} = (1, x, x^2, x^3, \theta, x\theta, x^2\theta, x^3\theta, \theta^2, x\theta^2, x^2\theta^2, x^3\theta^2, \theta^3, x\theta^3, x^2\theta^3, x^3\theta^3)$$
$$\vec{a}^T = (a_0, a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6, a_7, a_8, a_9, a_{10}, a_{11}, a_{12}, a_{13}, a_{14}, a_{15})^T$$

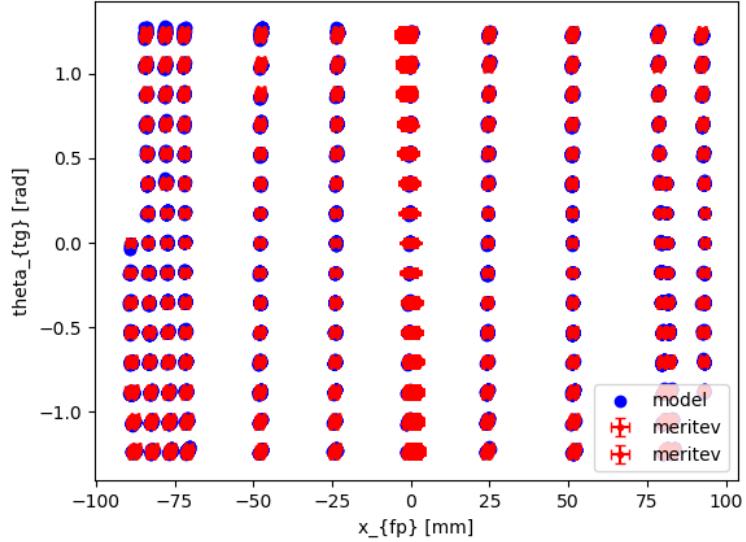
Ker imamo veliko število meritve in predefiniran sistem enačb bomo uporabili SVD. Matriko A bomo zapisali kot $A = UWV^T$, kjer je W diagonalna z vrednostmi w_i . Vektor \vec{a} potem lahko zapišemo kot

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^M \left(\frac{\vec{U}_i \vec{b}}{w_i} \right) \vec{V}_i.$$

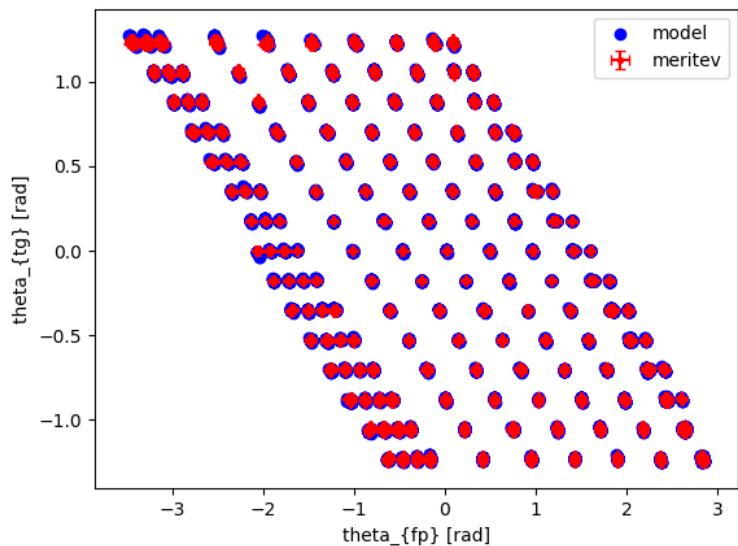
\vec{U}_i in \vec{V}_i sta i -ta stolpca matrik U in V.



Slika 19: Na grafu so prikazane meritve v 3D.

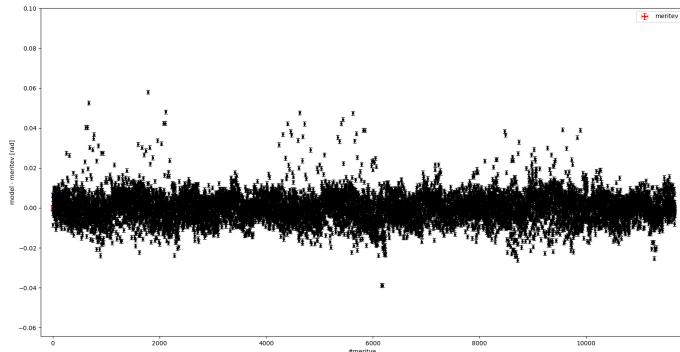


Slika 20: Na grafu so prikazane meritve in model.

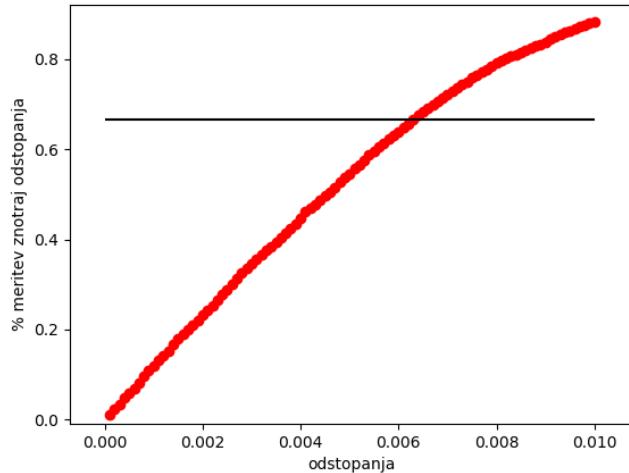


Slika 21: Na grafu so prikazane meritve in model.

Na grafih 20 in 21 so prikazane meritve in naš model. Na prvi pogled izgleda, da je ujemanje dokaj dobro. Poglejmo si residume.



Slika 22: Na grafu so prikazani residui.

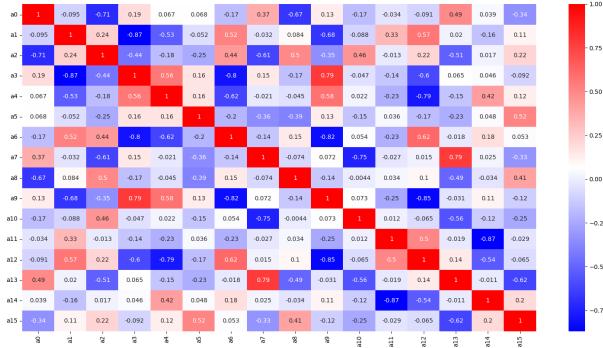


Slika 23: Na grafu je prikazano kolikšen del meritev za koliko odstopa od modela.

Na grafu 22 vidimo, za koliko se naš model razlikuje od meritev. Na grafu 23 vidimo, da će bi hoteli, da je ta model "dober", sepravi, da se $1/3$ meritev od modela razlikuje za vsaj 2σ , potem bi morala biti napaka meritev kota θ_{tg} okoli $0,003$ rad.

Vrednost χ^2 sedaj definiramo kot $\chi^2 = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\theta_{tg,i} - Ax_i}{\sigma_i} \right)^2$. Ker imamo okoli 11500 meritev pričakujemo, da bo vrednost χ^2 temu podobna. Izračunana vrednost χ^2 je 63977, kar je sicer pravilnega reda velikosti, ampak še vedno 5-6x več kot bi bilo optimalno.

Poglejmo si še korelacijsko matriko vrednosti a_i , ki jo lahko vidimo na grafu 24. Samo 5 koeficientov je med seboj koreliranih za več kot $\rho = 0,8$.



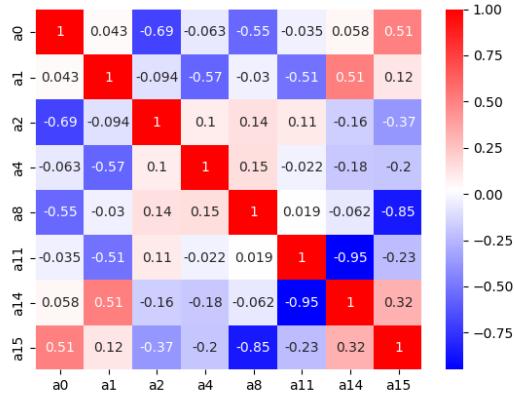
Slika 24: Na grafu so prikazane korelacije med modelskimi koeficienti a_i

Poizkusimo sedaj odstraniti najbolj korelirane koeficiente. Skupno korelacijsko koeficiente a_i izračunamo kot $\rho_t(i) = \sum_j \rho(i, j) - 1$. Če to storimo za vse koeficiente vidimo, da je ρ_t večji od $|1|$ za koeficiente a_3, a_9, a_{10}, a_{13} . Če te koeficiente odstranimo iz modela dobimo vrednost za $\chi^2 = 97553$, kar je za 52% kot s prejšnjim modelom. Korelacijska matrika na grafu 25 pa zgleda manj korelirana.



Slika 25: Na grafu so prikazane korelacije med modelskimi koeficienti a_i

Ta postopek ponovimo še enkrat. Tokrat izločimo koeficiente a_5, a_6, a_7, a_{11} . Dobimo $\chi^2 = 234899$ in korelacijsko matriko 26.



Slika 26: Na grafu so prikazane korelacije med modelskimi koeficienti a_i

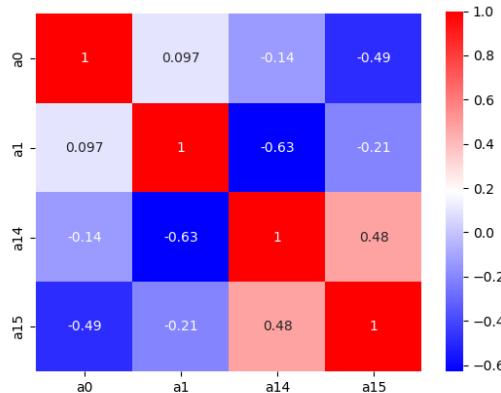
Če ta postopek še nekajkrat ponovimo, pridemo na koncu do modela

$$\theta_{tg} = \vec{x} \cdot \vec{a}^T$$

$$\vec{x} = (1, x, x^2\theta^3, x^3\theta^3)$$

$$\vec{a}^T = (a_0, a_1, a_{14}, a_{15})^T.$$

Vrednost $\chi^2 = 393981342$ je prevelika, da bi bil takšen model uporaben. Korelacijska matrika pa je prikazana na grafu 27. Lahko zaključimo, da ni najbolje odstranjevati člene v modelu glede na takšno definicijo ρ_t kot smo si jo mi izbrali in v takšni meri.



Slika 27: Na grafu so prikazane korelacije med modelskimi koeficienti a_i

Črtanje Perkona

lastnost	$Ae^{-\lambda_1 t} + Be^{-\lambda_2 t}$	$Ae^{-\lambda_1 \sqrt{t}} + Be^{-\lambda_2 \sqrt{t}}$
$A[10^3]$	8.0 ± 0.2	14.2 ± 0.2
B	$(5.5 \pm 0.2) \cdot 10^3$	0.3 ± 2
λ_1	$(5.2 \pm 0.3) \cdot 10^{-3}$	$(4.4 \pm 0.1) \cdot 10^{-2}$
λ_2	$(4.5 \pm 0.3) \cdot 10^{-4}$	-0.2 ± 0.1
$\rho(A, B)$	-0.81	0.33
$\rho(A, \lambda_1)$	-0.51	0.74
$\rho(A, \lambda_2)$	-0.79	0.31
$\rho(B, \lambda_1)$	0.84	0.71
$\rho(B, \lambda_2)$	0.95	0.99
$\rho(\lambda_1, \lambda_2)$	0.76	0.69
χ^2	11	34

Tabela 4: Prikaz parametrov, njihovih varianc in korelacijskih koeficientov.

Kot smo predvidevali iz grafa, linearja odvisnost v času predstavlja bolši model kot korenska odvisnost. Opazimo tudi, da sta parametra B in λ_2 močno korelirana v obeh primerih. Korensko odvisnost v času bi morali zavreči, saj je koeficient $\lambda_2 < 0$, kar pomeni, da bi za $t \rightarrow \infty$ rešitev divergirala.

Opomba: Pri izračunu vrednosti funkcionala sem upošteval napake izmerkov $\sigma = 200$. Glede na vrednost funkcionala so te napake očitno rahlo precenjene, saj je bilo opravljenih 28 izmerkov $\Rightarrow \chi^2 \approx 28 - 4 = 24$.

3 Magnetni spektrometer

Za uporabo visokoločljivostnega magnetnega spektrometra potrebujemo preslikavo, ki iz izmerjenih količin rekonstruira parametre trajektorije delcev, potrebne za izračun energije in drugih kinematičnih količin. Iščemo torej preslikavo

$$(x_{fp}, \theta_{fp}) \mapsto \theta_{tg},$$

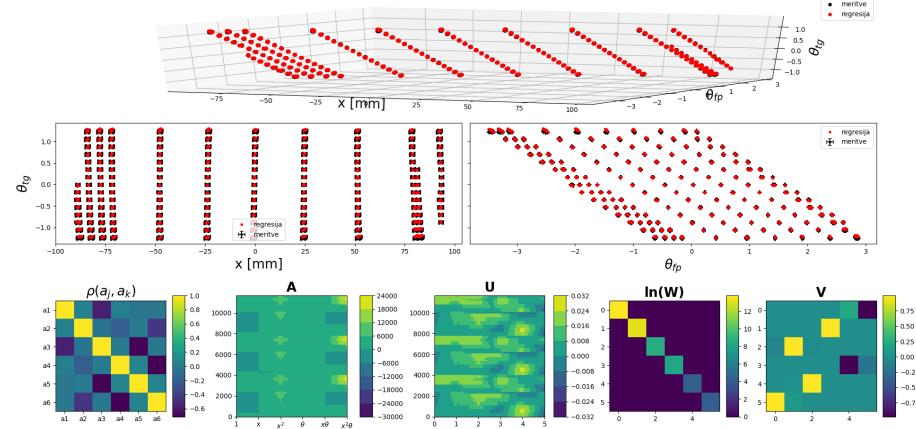
kjer so x_{fp} položaj v goriščni ravnini, θ_{fp} kot v goriščni ravnini in θ_{tg} disperzijski kot na tarči. Zaradi velikega aštevila podatkov in parametrov moramo takšno nalogo reševati s SVD razcepom. To je razcep oblike $A = UWV^T$, kjer je W diagonalna matrika. Takšen razcep preprosto storimo z numpy-evo vgrajeno funkcijo `numpy.linalg.svd`. Potrebno je določiti le matriko A iz danih podatkov. Minimizacijo funkcionala dosežemo z enačbo za optimalne parameterje

$$\mathbf{a} = \sum_i^M \frac{\mathbf{U}_i \cdot \mathbf{b}}{W_{ii}} V_i.$$

Najprej si oglejmo rešitev za 6 parametrov, kjer položaj razvijemo do drugega reda, kot v goriščni ravnini pa do prvega reda

$$\theta_{tg} = a_1 + a_2 x + a_3 x^2 + (a_4 + a_5 x + a_6 x^2) \theta.$$

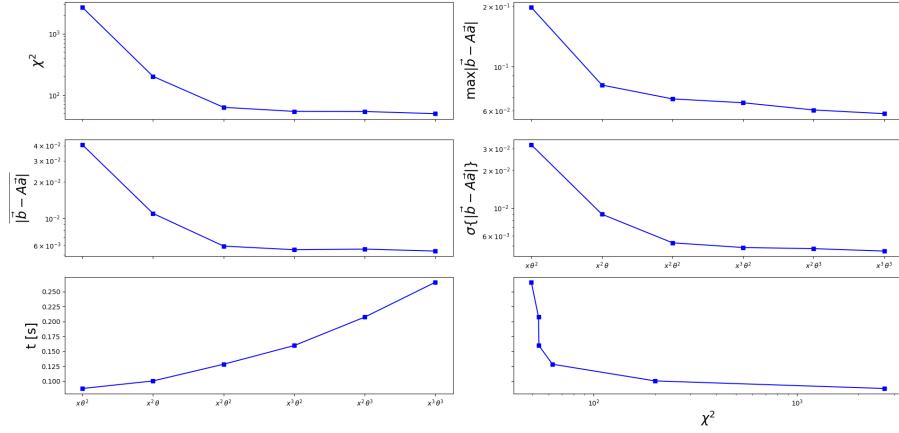
Želimo torej določiti optimalno vrednost parametrov a_i . Rezultate prikazuje slika 7.



Slika 7: Prikaz meritov in regresije v treh dimenzijah (zgoraj) ter dveh dimenzijah (sredina). V spodnji vrstici pa so prikazane posamezne relevantne matrike.

Opazimo, da se naš model, vsaj na prvi pogled, relativno dobro ujema z dejanskimi meritvami. Nekateri parametri so sicer nekoliko bolj korelirani, a je model vseeno zadovoljiv. Za napake sem uporabil 10^{-3} radiana za kot in 1 mm za premik. Vrednost funkcionala normirana na razliko meritov in število parametrov je $\chi^2 \approx 201$. To pomeni, da so napake nekoliko podcenjene. Ustrezna napaka za takšen model je nekje 3 – 4 miliradiane.

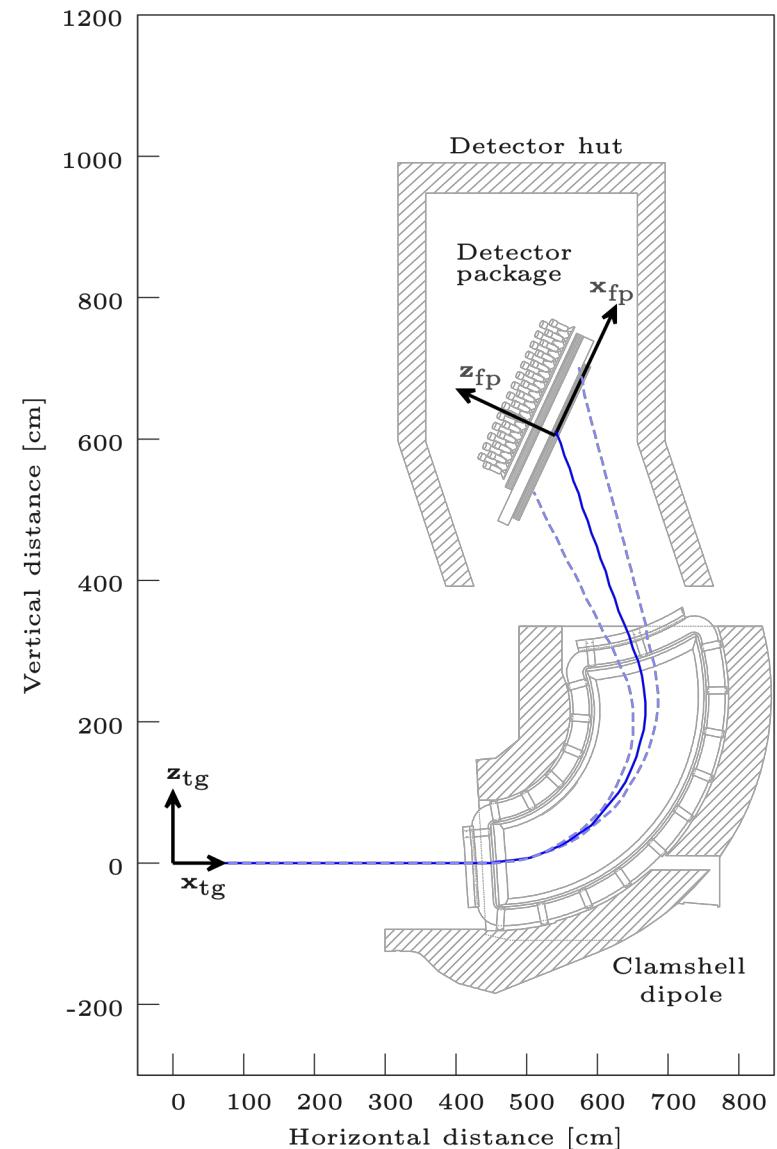
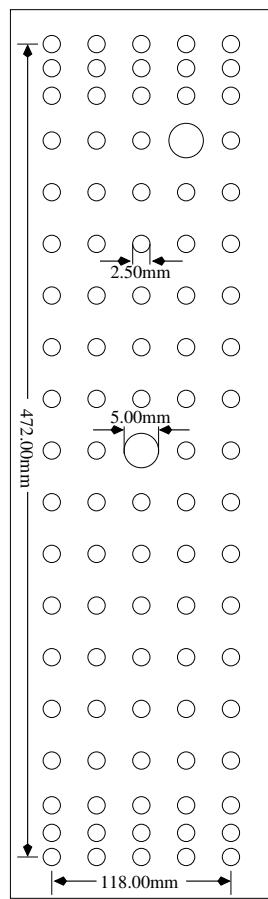
Za konec si oglejmo še natančnost v odvisnosti od števila parametrov (slika 8).



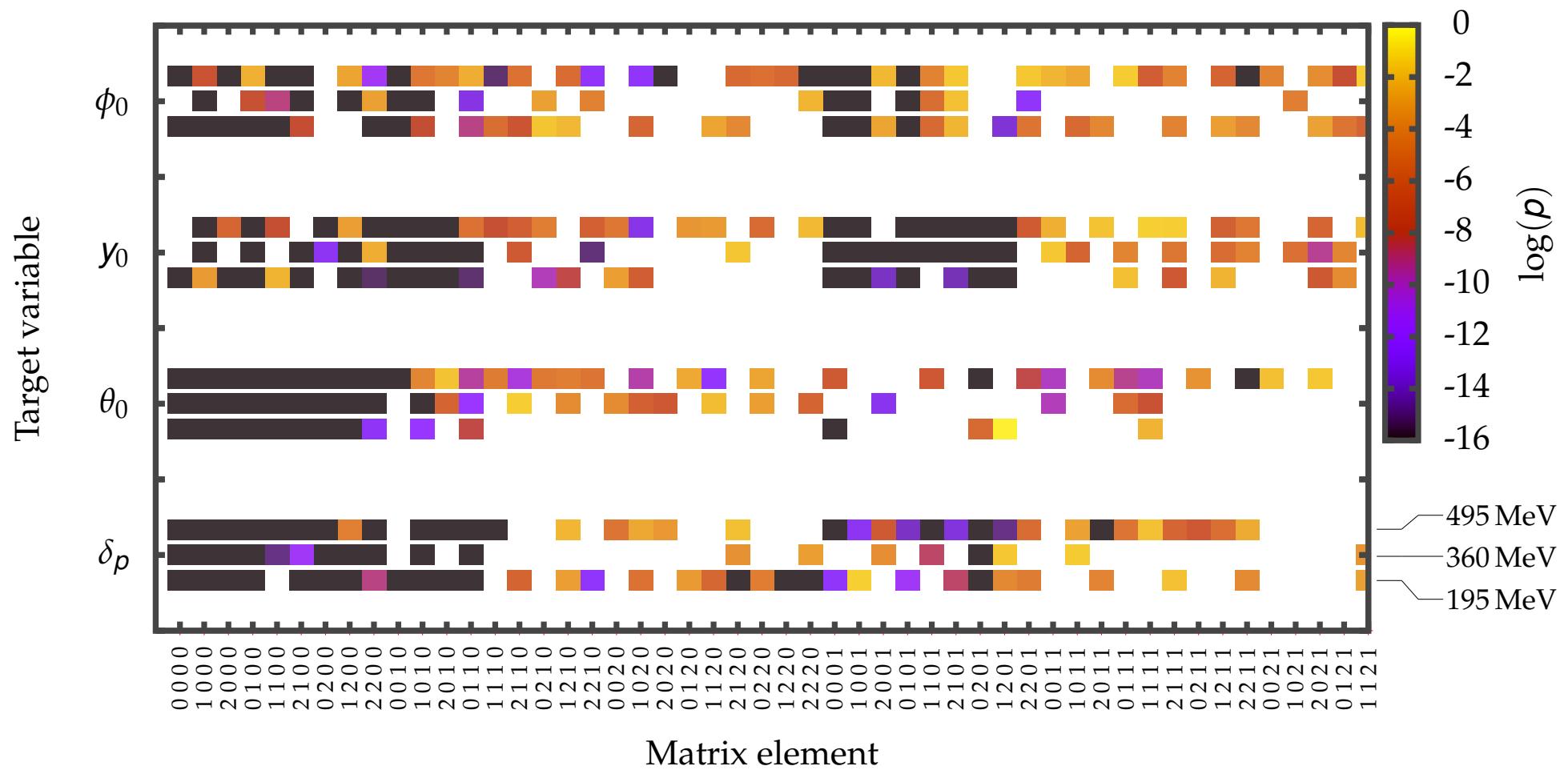
Slika 8: Spreminjanje funkcionala (levo zgoraj), največje absolutne napake (desno zgoraj), povprečne napake (levo sredina) in razpršenosti napak (desno sredina) v odvisnosti od števila parametrov. Na spodnjih dveh grafih pa je prikazana časovna zahtevnost.

Opazimo, da se napaka očitno manjša z večanjem števila parametrov in počasi konvergira. Še posebej velika je za model, kjer upoštevamo le premike v prvem redu razvoja. Časovna zahtevnost se pričakovano povečuje, vendar so ti časi zelo kratki, torej je algoritom zelo hiter.

Spektrometer v Mainzu



Transportna matrika



Izdelana optika

