



# Modelska Analiza 1

## 7. naloga - Razdelčni in nelinearni modeli

Avtor: Matic Lubej  
Asistent: dr. Simon Čopar  
Predavatelj: prof. dr. Alojz Kodre

Ljubljana, 27.11.2013

---

### Naloga:

Pri tej nalogi smo nadgradili znanje iz prejšnjega poročila tako, da smo se spoznali še z nelinearno metodo. Na tak način smo razširili nabor funkcij, s katerimi znamo opisati meritve. V vseh delih naloge smo preverili kvaliteto prilagajanja modelske funkcije in izračunali vrednosti parametrov ter njihove napake. V prvem delu smo razširili že znan model odziva tkiva iz prejšnje naloge, v drugem delu smo raziskovali čistilnost ledvic z različnimi razdelčnimi modeli, pri tretjem delu pa smo določili parametre korozije, kjer smo nelinearen fit primerjali tudi z potenčno vrsto preko linearne fita.

## Del I

# Odziv tkiva

## 1 Naloga in metoda

Farmakološki model iz prejšnje naloge lahko sedaj razširimo z vpeljavo novega parametra  $p$  :

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

Modelski parametri so že prej nastopali nelinearno, vendar takrat smo lahko problem linearizirali, v tem primeru pa v splošnem ne moremo. Z uporabo ukaza `NonlinearModelFit[]` iz matematičnega orodja Mathematica, lahko napravimo nelinearno prilagajanje podatkom. V vseh primerih sem uporabil metodo Levenberg-Marquardt. Z uporabo reduciranega testa  $\chi_{red}^2$  lahko različne metode med seboj primerjamo. Reducirani  $\chi_{red}^2$  dobimo tako, da navadnega delimo s številom prostostnih stopenj  $N - p - 1$ , kjer je  $N$  število izmerkov,  $p$  pa število parametrov v modelu:

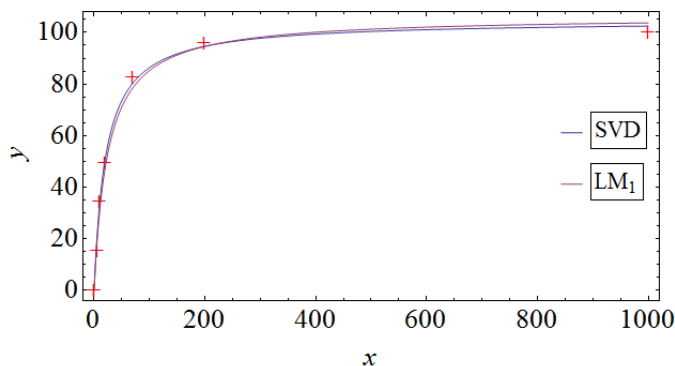
$$\chi_{red}^2 = \frac{\chi^2}{N - p - 1} = \frac{1}{N - p - 1} \sum_i \frac{(y_i - y_{e,i})^2}{\sigma_i^2}.$$

Če ima reducirani test vrednost  $\ll 1$ , je model zelo verjetno „pre-prilagojen“, kar pomeni, da se podatkom dobro prilaga, ni pa model zato nujno smiseln. Po drugi strani nam vrednost  $\gg 1$  pove, da je modelska funkcija slaba in se slabo prilagaja podatkom. Idealno iščemo vrednost  $\sim 1$ , ki ponavadi da najbolj smiselne rezultate.

## 2 Primerjava

### 2.1 Nelinearen fit brez dodatnega parametra

Nelinearen fit je boljši od linearnega tudi v primeru, ko dodatnega parametra  $p$  ne upoštevamo:



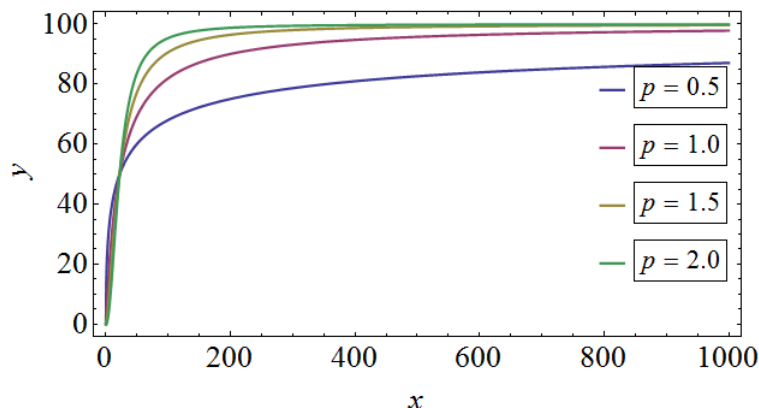
Vidimo, da je prilaganje res malce boljše, vendar ne veliko. Naivno bi pričakovali, da se prilagoditvena krivulja brez dodatnega parametra ne bi nič boljše prilagala podatkom od tiste krivulje, ki jo dobimo iz linearnega modela, vendar je potrebno upoštevati, da ta model v tej obliki nima linearne oblike. Poglejmo si tabelo vrednosti reduciranih  $\chi_{red}^2$  :

Količina	Metoda	Vrednost
$\chi_{red}^2$	SVD	5.21534
	LM	4.40285

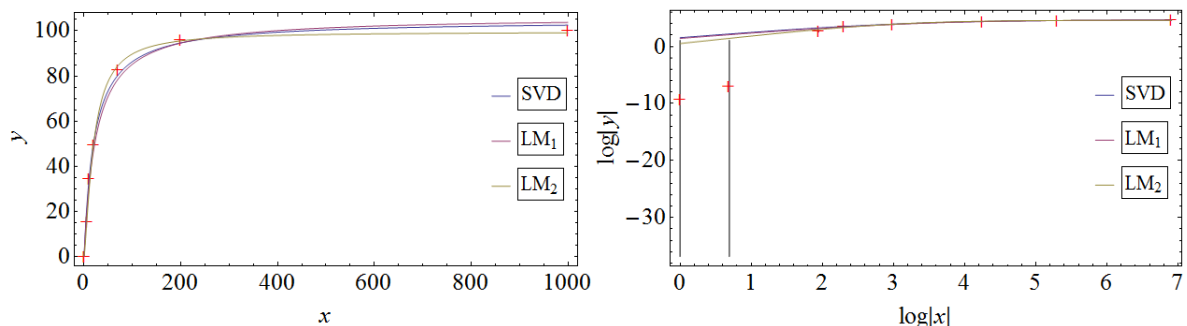
Res se vrednosti minimalno razlikujeta, čeprav pa po drugi strani sama vrednost testa ni tako grozno velika, kar pomeni, da sta oba fita kar dobra.

## 2.2 Nelinearen fit z dodatnim parametrom

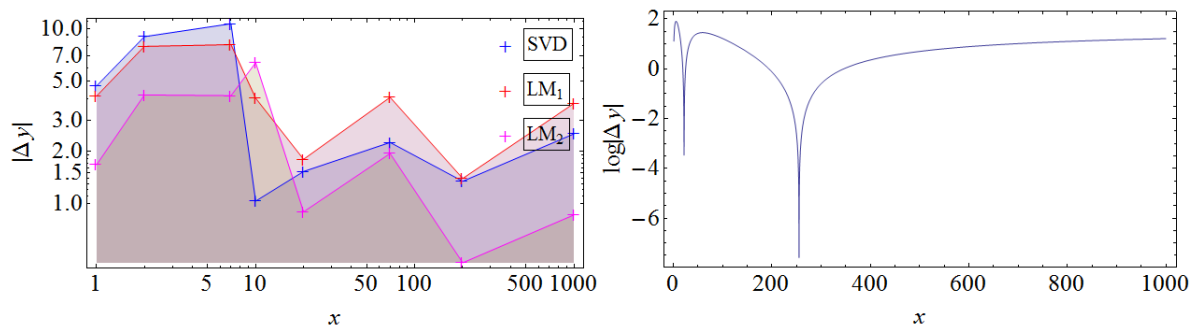
Preden naredimo fit, si oglejmo, kaj različni parametri  $p$  sploh predstavljajo:



Parameter  $p$  v nekem smislu predstavlja hitrost nasičenja odziva tkiva, kjer se odziv nasiči hitreje pri večji vrednosti  $p$ . Verjetno s takšnim modelom upoštevamo, če so v telesu za takšno tkivo prisotni še kakšni drugi procesi, ali kaj podobnega. Nelinearen model nam v tem primeru da najboljši rezultat:



Razlika je v navadni in logaritemski skali precej očitna, še bolj pa se vidi, če si ogledamo kar razlike raznih metod:



Leva slika zgoraj predstavlja razlike merskih podatkov od modela za vse tri metode. Razlike sem tu in povsod drugod med seboj povezal, da se lažje ločijo ene od drugih. Vidimo, da je v povprečju najboljši nelinearni model, kjer upoštevamo dodatni parameter, najslabši model je linearni model, kjer  $p$  ni bil upoštevan, nelinearni model brez parametra  $p$  pa je vmes, kjer se nagiba bolj k linearnemu. Desna slika prikazuje logaritem absolutne razlike med prvo in zadnjo metodo. Vidimo, da se najbolj razlikujeta na začetku in na koncu, dvakrat pa se tudi sekata. Za konec si oglejmo še tabelo parametrov in primerjavo reduciranih  $\chi_{red}^2$ :

Količina	Metoda	Vrednost	Napaka
$a$	LM <sub>2</sub>	19.7674	±2.28365
$y_0$		99.6056	±3.53158
$p$		1.3641	±0.176849
$\chi_{red}^2$	SVD	5.21534	/
	LM <sub>1</sub>	4.40285	/
	LM <sub>2</sub>	2.3392	/

Vidimo, da imajo parametri nekoliko drugačne vrednosti kot prej, še sploh parameter  $p$ .  $\chi_{red}^2$  se najbolj ujema v zadnjem primeru, kot bi tudi sicer pričakovali. Zaključimo, da je dodatni parameter  $p$  statistično uporavičen, takšen model pa ima tudi večjo fizikalno smiselnost.

## Del II

# Čistilnost ledvic

## 1 Naloga

Iz danih kliničnih podatkov smo morali najti najboljšo vrednost za čistilnost ledvic. Uporabil sem različne razdelčne modele in jih med seboj primerjal. Podatki predstavljajo število detektiranih žarkov  $\gamma$ , ki so bili izsevani iz telesa bolnika. Z razdelčnim modelom aproksimiramo delovanje ledvic, ki so rezervoar krvi, ki se neprestano filtrira. Enačbo za opis časovne odvisnosti neke snovi v krvi, ki jo ledvice filtrirajo, lahko za enorazdelčni model zapišemo kot:

$$c' = -\frac{\phi\eta}{V}c, \quad (2)$$

kjer  $\phi$  predstavlja pretok krvi skozi ledvice,  $\eta$  predstavlja parameter filtracije,  $V$  pa je volumen ledvic. Ko takšno enačbo integriramo dobimo eksponentno enačbo:

$$c(t) = c_0 e^{-\lambda t}. \quad (3)$$

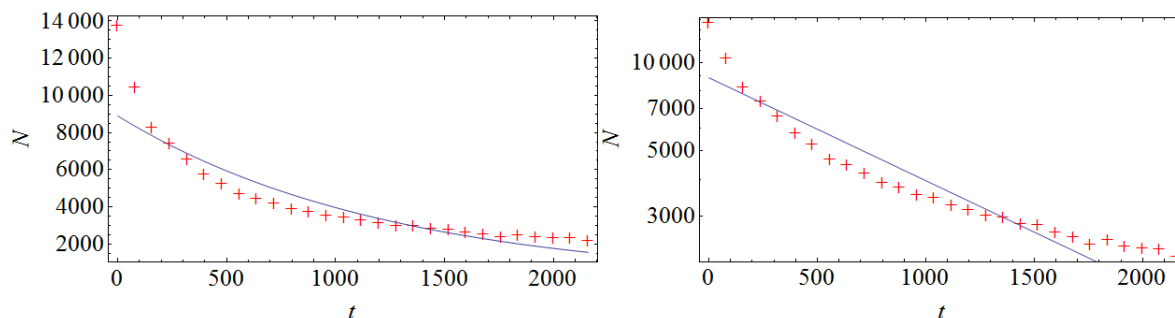
Stvari pa niso vedno tako enostavne, da se bi jih dalo opisati le z enorazdelčnim modelom. V splošnem lahko razdelčne modele sestavljamo in povezujejo skupaj, v čemer je pravi čar razdelčnih modelov. Pri čistilnosti ledvic je smiselno upoštevati 2 razdelčna modela, saj se snovi nabirajo in filtrirajo še v drugih delih telesa in to ne nujno z isto hitrostjo. V primeru takšnega modela dobimo sistem diferencialnih enačb, ki so med sabo povezani. Rešitev takšnega modela ni nič drugega kot vsota dveh eksponentnih funkcij:

$$\begin{aligned} c_1(t) &= A e^{-\lambda_1 t} + B e^{-\lambda_2 t}, \\ c_2(t) &= C e^{-\lambda_3 t} + D e^{-\lambda_4 t}. \end{aligned} \quad (4)$$

Na koncu lahko upoštevamo tudi konstanten prispevek, kar je fizikalno zelo smiselno, saj imamo neprestano prisoten vpliv sevanja ozadja iz okolice. Različne modele lahko ponovno primerjamo med seboj glede na vrednost reduciranega  $\chi_{red}^2$ . Oglejmo si različne modele in njihovo točnost pri prileganju podatkom.

## 2 Eno-razdelčni model

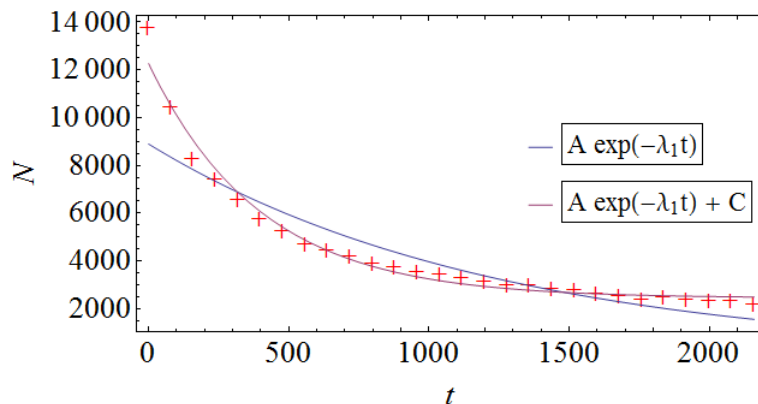
Kot je opisano zgoraj, imamo tu za modelsko funkcijo navaden eksponent z dvema parametroma iz enačbe (3). Poglejmo si rezultat nelinearnega prilagajanja:



Fit je očitno zelo slab, kar pove tudi vrednost  $\chi_{red}^2 = 162.341$ , ki je nesprejemljivo velik. Neprileganje se še bolje vidi v logaritemski skali, kjer takšnega prizora pri fitanju premice nismo veseli.

### 2.1 Eno-razdelčni model s konstantnim prispevkom

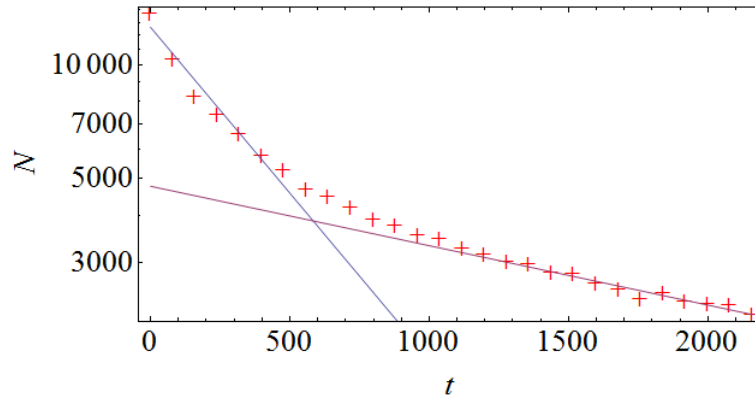
Eksponentna funkcija hitro limitira k vrednosti 0, kar pa ni vedno realna situacija, še sploh če imamo opravka s sevanjem. Poskusimo sedaj z modelsko funkcijo  $y = Ae^{-\lambda_1 t} + C$ :



Ujemanje je v tem primeru že precej boljše, čeprav pa z vrednostjo testa  $\chi_{red}^2 = 21.7202$  še nismo zadovoljni zato s preizkušanjem različnim modelom ne bomo odnehali.

## 3 Dvo-razdelčni model

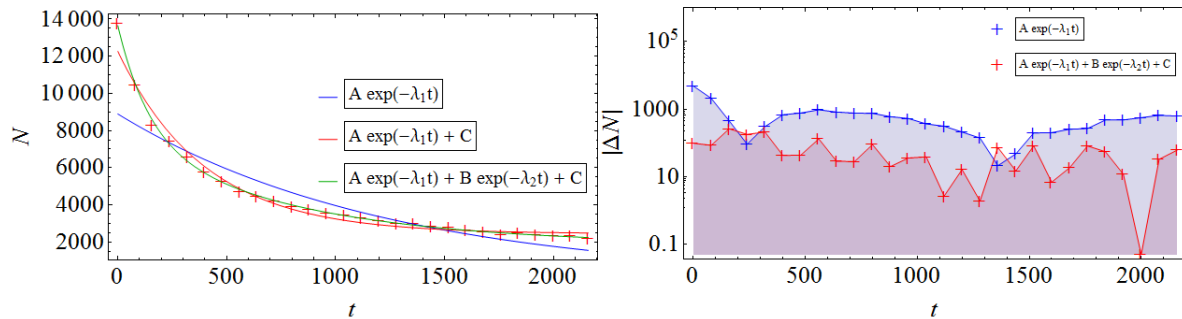
Preverimo rešitve še za model iz enačbe (4), ki, kot smo omenili, predstavlja model, kjer imamo poleg ledvic kot rezarvoarja še drug rezervoar, kjer časovna odvisnost koncentracije pada z različno hitrostjo. Če pogledamo graf iz razdelka 1 v logaritemski skali, vidimo, da se trend izmerkov „zlomi“. To je bolj očitno, če obema zlomljenima deloma prilagodimo svoj eksponent:



Vidimo, da oba eksponenta skupaj dobro opišeta dogajanje, vendar le na svojem območju. Vsota njih je torej dober model, ki nam da vrednost reduciranega testa  $\chi_{red}^2 = 3.15591$ , kar pa je že za faktor 50 boljše od našega prvega modela.

### 3.1 Dvo-razdelčni model s konstantnim prispevkom

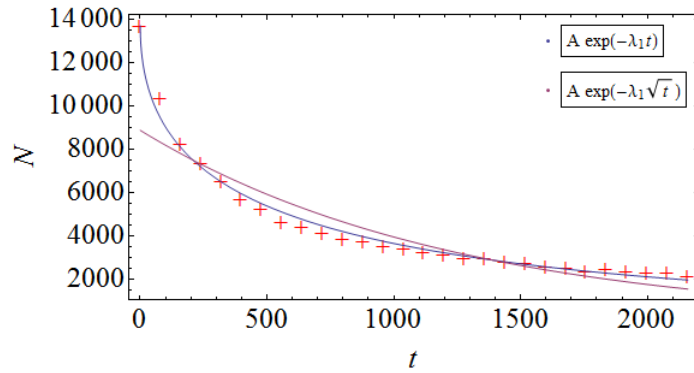
Seveda se tudi v tem primeru spodobi upoštevati konstantno ozadje zaradi sevanja iz okolja. Z dodanim konstantnim prispevkom dobimo rešitev:



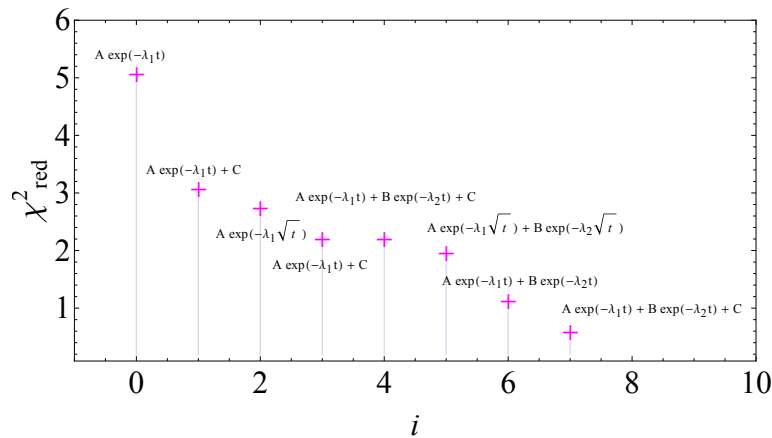
V tem primeru dobimo najboljši model za prileganje našim podatkom, ki pa je z vrednostjo  $\chi_{red}^2 = 1.81546$  še vedno smiseln in ni pre-prilagojen. Leva slika zgoraj prikazuje tri različne modele, desna pa njihove napake. Pri napakah je najbolj očitno, da je zadnji model najboljši, saj ima vspovsod nižjo napako, ki je bolj kot ne stohastično porazdeljena, med tem ko je na primer napaka prvega modela največja, opaziti pa je nek trend velikosti napake v odvisnosti od časa.

## 4 Korenska časovna odvisnost

Navodilo naloge predlaga, da poskusimo še prilagajanje s funkcijo  $e^{-\lambda\sqrt{t}}$ , ki jo sicer dobimo iz bolj zapletenih modelov. Kot smo videli na prejšnjih primerih, naši podatki ne padajo ravno po eksponentnem zakonu, ker ima porazdelitev predebele repe. S korensko časovno odvisnostjo bi znala biti naša nova prilagoditvena funkcija boljše, saj koren povzroči počasnejše padanje eksponenta. Oglejmo si primerjavo fitov med enorazdelčnima modeloma z odvisnostjo  $t$  in  $\sqrt{t}$  v eksponentu:

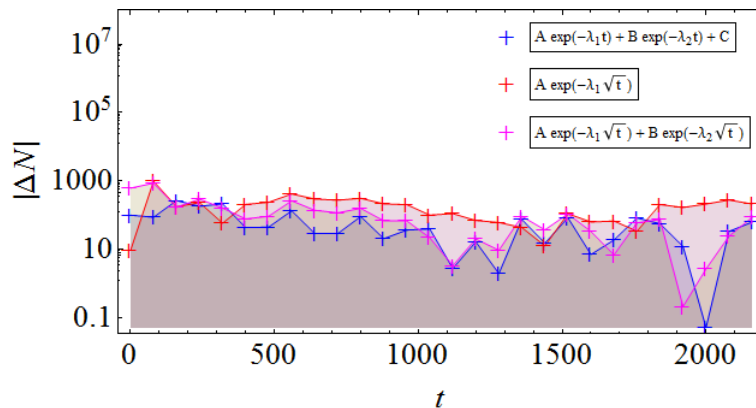


Korenska časovna odvisnost že v samem začetku boljše opiše časovno odvisnost podatkov, kar lahko dokažemo tudi z vrednostjo  $\chi_{red}^2 = 15.625$ , ki je veliko manjši kot v primeru navadne časovne odvisnosti v eksponentu. Ostale vrednosti  $\chi_{red}^2$ , si lahko ogledamo v naslednjem grafu, ki je malo bolj informativen kot pa krivulje in vrednosti parametrov:



Vidimo, da je v primeru časovne korenske odvisnosti najmanj natančen model z enim eksponentom, najbolj natančen pa model z dvema eksponentoma brez konstante z vrednostjo  $\chi_{red}^2 = 7.14921$ , kar je malo drugače kot bi pričakovali po dosedanem vzorcu. Kljub temu pa je še vedno vse druge modele prekosi model  $Ae^{-\lambda_1 t} + Be^{-\lambda_2 t} + C$  s parametri, ki so prikazani spodaj. Poleg parametrov je priložena tudi slika napak eno- in dvo-razdelčnega modela s korensko časovno odvisnostjo ter ravno omenjenega najbolj natančnega modela:

Parameter	Vrednost	Napaka
$A$	6096	$\pm 335$
$B$	0.0070	$\pm 0.0005$
$\lambda_1$	5715	$\pm 271$
$\lambda_2$	0.0012	$\pm 0.0001$
$C$	1843	$\pm 87$



Zaključimo torej, da je ozadje statistično upravičeno in da se podatkom najbolj prilega vsota eksponentov s konstanto, pri čemer je fizikalna smiselnost še vedno ohranjena.

## 5 Čistilnost ledvic

Sedaj smo določili optimalni model za naše podatke, metoda pa nam je vrnila optimalne parametre za opis teh podatkov. Še vedno pa ne vemo nič o čistilnosti ledvic, ki nas že od vsega začetka zanima. Če ignoriramo ozadje, se naš diferencialne enačbe za naš dvorazdelčni model glasijo:

$$\dot{c}_1(t) = -\eta c_1 - \Phi(c_1 - c_2), \quad (5)$$

$$\dot{c}_2(t) = \Phi(c_1 - c_2), \quad (6)$$

kjer  $\eta$  predstavlja čistilnost ledvic,  $\Phi$  pa pretok v telesu iz enega rezervoarja v drugega. Enačbi lahko rešimo, pri čemer nas zanima le  $c_1(t)$ , ki se glasi:

$$c_1(t) = A e^{-\lambda_1 t} + B e^{-\lambda_2 t}, \quad (7)$$

$$A = -\frac{\eta C_1}{2\sqrt{\eta^2 + 4\Phi^2}} + \frac{\Phi C_2}{\sqrt{\eta^2 + 4\Phi^2}} + \frac{C_1}{2}$$

$$B = \frac{\eta C_1}{2\sqrt{\eta^2 + 4\Phi^2}} - \frac{\Phi C_2}{\sqrt{\eta^2 + 4\Phi^2}} + \frac{C_1}{2}$$

$$\lambda_1 = -\frac{1}{2} \left( \sqrt{\eta^2 + 4\Phi^2} - \eta - 2\Phi \right)$$

$$\lambda_2 = -\frac{1}{2} \left( -\sqrt{\eta^2 + 4\Phi^2} - \eta - 2\Phi \right)$$

kjer sta pridobimo konstanti  $C$  in  $D$  na račun integracije. Imamo torej štiri parametre, ki so povezane z izrazi, ki vsebujejo skupaj štiri neznanke. To je seveda rešljiv sistem. Konstanto smo lahko ignorirali zato, ker je njen izvor zunanji. Lahko jo sicer dodamo k enačbi (7), vendar s tem dobimo trivialno enačbo, saj sta si konstanti enaki. Če ta sistem enačb rešimo, dobimo:

Količina	Vrednost	Napaka
$\eta$	0.00093	$\pm 0.00025$
$\Phi$	0.00211676	
$C_1$	13408.4	
$C_2$	52.653	



## Del III

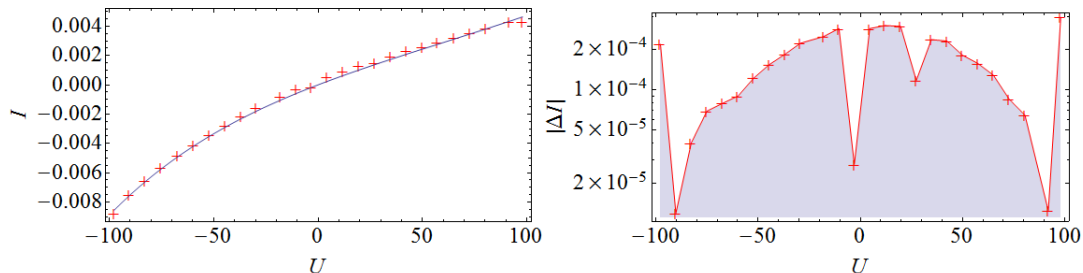
# Parametri korozije

## 1 Naloga

Prametere korozije določajo iz diagrama  $U - I$ , med kovino in in korozivnim elektrolitom. Modelski nastavek lahko v najpreprostejši obliki zapišemo kot:

$$I = I_0 \left[ e^{\frac{U}{U_a}} - e^{-\frac{U}{U_c}} \right]. \quad (8)$$

S prilagajanjem modelske funkcije podatkom smo v tem delu naloge morali določiti parametre  $I_0$ ,  $U_a$  in  $U_c$ . Čeprav merskih napak nimamo podanih, navdilo naloge pravi, da je le-ta konstantna za vse merske podatke. Tako kot v prejšnjih delih naloge smo tudi tu uporabili funkcijo `NonlinearModelFit[]` iz nabora funkcij, ki jih ponuja matematično orodje Mathematica. Oglejmo si kar najbolj osnovne rezultate, ki nam jih da takšna rešitev:



Na prvi pogled fit izgleda zadovoljiv, saj se rezultatom lepo prilega, o reduciranemu  $\chi_{red}^2$  pa ne moremo kaj veliko reči, ker ne poznamo velikosti napake. V tem primeru sem se odločil, da bom kot količino, ki opisuje kvaliteto prilagajanja funkcije podatkom, opisal kar s količino  $\sigma^2 \cdot \chi_{red}^2$ , kar lahko storimo, saj je napaka konstantna za vse merske točke. Tako dobimo vrednost:

$$\sigma^2 \cdot \chi_{red}^2 = 4.26599 \times 10^{-8}, \quad (9)$$

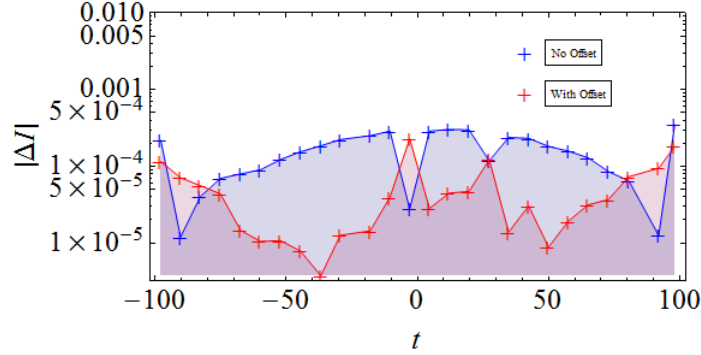
kar pa ni najbolj informativen podatek, saj ga ne moremo z ničemer primerjati.

## 2 Premik

Bolj pomemben je graf napak zgoraj desno. Kot vemo, so napake okoli dobrega fita porazdeljene naključno, kar pa v tem primeru zelo težko rečemo. Ker meritve očitno ne gredo točno skozi ihodišče, lahko meritve izboljšamo, če v modelsko funkcijo dodamo popravek:

$$U \longrightarrow (U - U_0). \quad (10)$$

S tako definirano funkcijo res dobimo izboljššan model, kar tudi dokazuje graf odmikov v odvisnosti od  $U$  :



V tem primeru lahko brez skrbi trdimo, da so napake naključno razporejene, medtem ko tega prej nismo mogli trditi. Izboljšava se nam kaže v produktu  $\sigma^2 \cdot \chi_{red}^2$ , ki v tem primeru znaša

$$\sigma^2 \cdot \chi_{red}^2 = 7.13321 \times 10^{-9}, \quad (11)$$

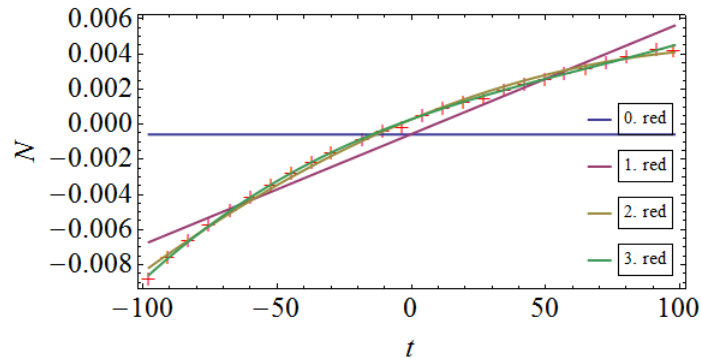
kar je za okoli faktor 6 boljše.

### 3 Potenčni razvoj

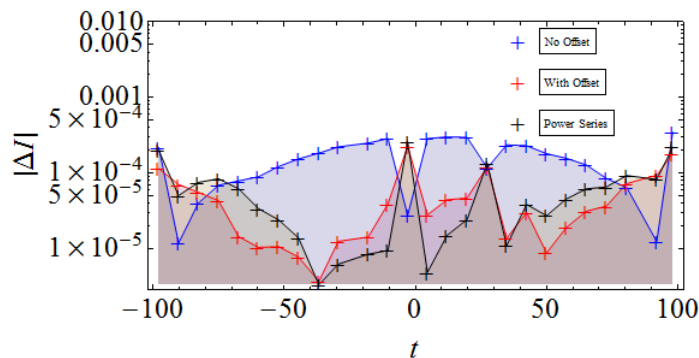
Tako kot pri prejšnjem poročilu, se lahko tu pretvarjamo, da funkcije, ki opisuje  $I(U)$  ne poznamo. V tem primeru se zopet poslužimo potenčnega razvoja:

$$I = a_0 + a_1 U + a_2 U^2 + \dots \quad (12)$$

Ker s številom podatkov praktično nismo omejeni, lahko vključimo kar velike potence, vendar to ni smiselno, saj s tem manjšamo natančnost parametrov, po drugi strani pa funkcije nima tako kompleksne oblike, zato bo zelo verjetno prvih nekaj redov zadostovalo. Potrebno je komentirati, da lahko parametre takšnih funkcij dobimo tudi na nam že poznan način, in sicer z linearnimi metodami. Naslednji graf prikazuje fitanje modelskih funkcij, ki vključujejo člene z različnimi potencami:



Enostavno je prepoznati funkcije z različnimi potencami, kmalu pa tudi opazimo, da se razlike med njimi manjšajo, ko se večja potencia. Ker 4. red ne doprinese več veliko novega, se odločimo, da obdržimo člene do vključno 3. reda. Takšen model ima  $\sigma^2 \cdot \chi_{red}^2 = 1.08393 \times 10^{-8}$ , kar je slabše kot naša modelska funkcija s premikom, vendar boljše kot brez premika. Oglejmo si še enkrat vse napake na kupu:



Iz grafa napak težko ocenimo, katera od najboljših dveh metod je bolj natančna, je pa pri obeh lepo videti naključno porazdelitev, za razliko od prve metode.

## 4 Ocena napake

Sedaj lahko še povemo nekaj o oceni napake  $\sigma$ , kjer smo že na začetku predpostavili, da je napaka za vse meritve enaka. Dve najbolj pomembni točki pri prilagajanju funkcij sta, da imamo napake porazdeljene naključno, in da imamo vrednost  $\chi_{red}^2 \sim 1$ . Prvi pogoj je v drugem razdelku tega dela izpolnjen, drugi pa ne, ker, kot smo omenili, nimamo podanih napak. Vendar lahko, glede na relativno velikost napak, njihovo obliko porazdelitve in na podlagi metode ostrega očesa, sklenemo, da je fit v splošnem zadovoljiv, zato mu pripišemo optimalno vrednost  $\chi_{red}^2 = 1$ . Na podlagi tega lahko sedaj ocenimo velikost t.i. optimalne napake:

$$\sigma = \sqrt{\frac{(\sigma^2 \cdot \chi_{red}^2)}{\chi_{red}^2}} = 8.45 \times 10^{-5}. \quad (13)$$

S takšno oceno dobimo skrajni vrednosti relativnih napak:

$$\delta I_{max} \approx 60 \%, \quad \delta I_{min} \approx 1 \%, \quad (14)$$

kar so povsem sprejemljive velikosti relativnih napak, če upoštevamo, da imamo nekatere vrednosti  $I$  izmerjene zelo blizu ničle. Sedaj lahko poleg vrednosti parametrov podamo tudi njihove ocenjene napake, ki so podane v naslednji tabeli:

Količina	Vrednost	Napaka
$I_0$	0.0032	$\pm 0.00025$
$U_0$	197.99	$\pm 24.55$
$U_a$	76.61	$\pm 3.54$
$U_c$	-4.61	$\pm 0.43$