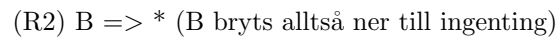


Facit till Dugga 2, 2011-02-03

Uppgift 1

Fråga:

Betrakta följande två reaktioner R1 och R2



a) Skriv upp diff-ekvationerna för koncentrationen av de två ämnena A och B antagandes irreversibla reaktioner och massverkans lag.

b) Skriv upp diff-ekvationerna när R1 styrs av ett mättat hastighets-uttryck

c) Lägg till övriga ekvationer som behövs för få en fullständig simulerbar tillstånds-form som kan jämföras med mätdata: initialvärden, parameter-värden och mätekvation. Antag att man kan mäta en signal som är proportionellt mot koncentrationen av B

Svar: a)

$$d/dt([A]) = -k_1[A]$$

$$d/dt([B]) = k_1[A] - k_2[B]$$

b)

$$d/dt([A]) = -k_1[A]/(K_m + [A])$$

$$d/dt([B]) = k_1[A]/(K_m + [A]) - k_2[B]$$

$$c) k_1 = k_2 = k = 3, A(0) = 1, B(0) = 0, y = k[B]$$

Uppgift 2

Fråga:

a) Vad är den tänkbara svagheten med att använda resultatet från en enskild simulering som prediktion att använda för planering av nya experiment? Antag normala systembiologiska omständigheter, dvs en stor modell och en begränsad mängd data med icke-försumbart mätbrus.

b) Varför har inte core-prediktioner denna svaghet, och hur får man fram dessa i praktiken?

c) Vad är input och output till en optimerings-funktion? (markera om du talar om en vanlig eller en modifierad optimeringsfunktion)

Svar:

a) Att parametrarna inte är unikt bestämda, och att prediktionerna därför bara är av karaktären "det skulle kunna vara så här, men också på något annat sätt" Kommentar: Här kan man också svara överanpassning, (detta problem löses också av core-prediktioner)

b) Core prediktioner bestäms som gemensamma egenskaper hos alla acceptabla parametrar, och är därför av karaktären "om modellen och mätdata är rätt så måste denna prediktion vara uppfylld"

c) Input: kostfunktion och startgissning, Output: optimal parameter (vanlig), lista med acceptabla parametrar (modifierad) Kommentar: Vissa globala optimeringsalgoritmer klarar sig utan startgissning, så det måste strängt taget inte vara med.

Uppgift 3

Fråga:

a) Nämn ett exempel på en situation när en modell skulle förkastas av ett chi-två test men inte av ett vithets-(whiteness)test

b) Vad är slutsatsen om man förkastar ett likelihood ratio test?

c) Vad är slutsatsen om man inte förkastar ett chi-två test?

Svar:

a) Om residualerna är stora men okorrelerade

b) Att den ena modellen är signifikant bättre än den andra

c) Ingenting, mer än att modellen är godkänd tillsvidare