

# Matematisk optimering av kemiska system

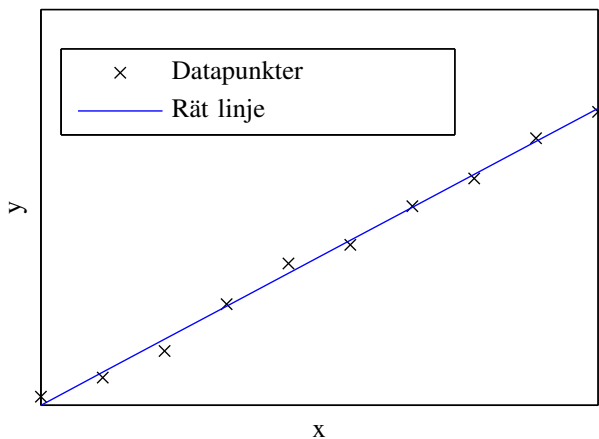
Edvard Johansson, David Petersson

Inom hjärnforskning önskar man ta reda på värdet för olika kemiska parametrar. Här beskrivs en metod som med ren matematik kan beräkna de optimala parametervärdena. Den bakomliggande kemin gav upphov till speciella matematiska egenskaper. Med hjälp av en egenutvecklad sats kunde det då visas att metoden alltid hittar den lösning som är bäst enligt den så kallade maxnormen.

Koncentrationer av kemiska ämnen kan beräknas med matematiska funktioner. Dessa funktioner innehåller parametrar med okända värden som man vill finna. Om man i detta fall lyckas bestämma parametervärdena kan man få ökad förståelse för hur vissa delar av hjärnan fungerar. Förhoppningsvis kan man då behandla vissa neurologiska sjukdomar, exempelvis Parkinsons sjukdom, mer effektivt.

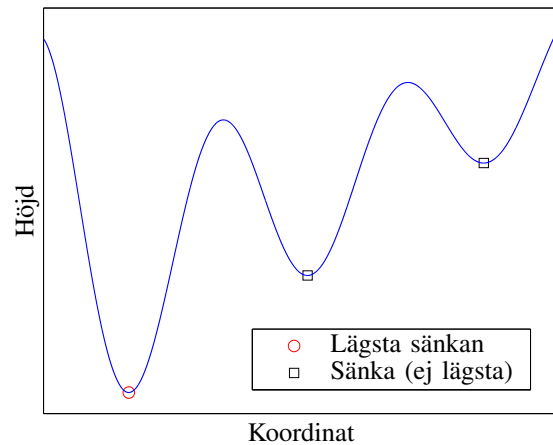
För att försöka hitta parametervärdena använde vi kurvanpassning. Kurvanpassning går ut på att hitta det eller de parametervärden som får en viss matematisk kurva att passa så bra som möjligt till mätvärden som finns tillgängliga från till exempel ett experiment. Då det alltid förekommer mätfel går det tyvärr inte att göra anpassningen perfekt, se exempel i Figur 1. De flesta av punkterna kommer inte att ligga exakt på kurvan. För att kunna hitta en bra kurva måste man därför först bestämma hur man ska avgöra vad som är en bra anpassning till mätpunkterna. Detta gör man ofta med hjälp av en *norm*. En norm ger ett värde baserat på en serie av *många* värden så att dessa kan utvärderas, ungefär som att ett slutbetyg är ett värde för en samling av *många* betyg. Vid kurvanpassning kan en norm vara att lägga ihop alla avstånd mellan kurvan och punkterna. Sedan ska denna summa av avstånd minimeras för att erhålla en bra anpassning. I det här projektet var *maxnormen* i fokus. Maxnormen går ut på att minimera det maximala avståndet någon punkt har till kurvan.

Kurvanpassning till mätpunkter för en rät linje



Figur 1. Hur man än gör går det inte att få en rät linje att gå igenom alla mätpunkterna i figuren ovan. En rät linje beskrivs av formeln  $y = k \cdot x + m$ . Parametrarna som kan bestämmas vid kurvanpassning för en linje är därför  $k$  och  $m$ .

Illustration av sänkor



Figur 2. Det kan finnas många sänkor i en skog, och för en matematisk funktion. Alla behöver dock inte vara lika djupa.

För att få sin kurva så välanpassad som möjligt försöker man alltså minimera någon norm. Att minimera en norm är i regel inte särskilt enkelt. Problemet ligger i att försöka hitta det absolut lägsta värdet bland oändligt många. Man får på något sätt leta så gott man kan efter ett minimalt värde. Det kan jämföras med att leta efter den lägsta punkten i en skog. Ett sätt kan vara att leta efter ett ställe där det lutar uppåt åt vilket håll man än tittar. Då hittas en sänka. Ungefär så här gör man inom matematiken, och oftast är det inte så svårt att hitta en sänka. Problemet är att det skulle kunna finnas andra sänkor som är ännu djupare, se Figur 2, men genom att utveckla en matematisk sats lyckades vi bevisa att för just våra funktioner fanns det bara en enda sänka, om maxnormen användes. Om en sänka hittades, så visste vi alltså säkert att det minimala värdet var funnet.

Då vi visste att det bara fanns en sänka, kunde vi skriva ett matematiskt program som hittade den. För att beskriva programmet kommer skogsanalogin fortsatt att användas. Programmet startades med att en höjd över havet angavs. Därefter försökte det hitta någon punkt som befann sig på lägre höjd än denna angivna höjd. Lyckades detta så startades programmet om för en lägre höjd. Ibland angavs en önskad höjd som var lägre än den lägsta punkten som fanns i skogen. Då kunde programmet så klart inte hitta någon punkt och en högre höjd fick anges. Programmet fortsatte testa olika höjder tills den absolut lägsta möjliga höjden hittades, alltså det minimala värdet. Punkten som hittades var då den absolut lägsta punkten och dess koordinater var de optimala parametervärdena.

Det går tyvärr inte att säga att maxnormen skulle vara den bästa normen. Kanske är någon annan norm bättre i det här fallet, men med andra normer riskerar man att det finns många sänkor och det är lätt att fastna i någon som inte är den lägsta. Den stora fördelen är alltså att när vårt program ger oss parametervärden, så är det faktiskt de absolut bästa, enligt maxnormen.