

# Naključna števila in obdelava podatkov

Sebastijan Peljhan

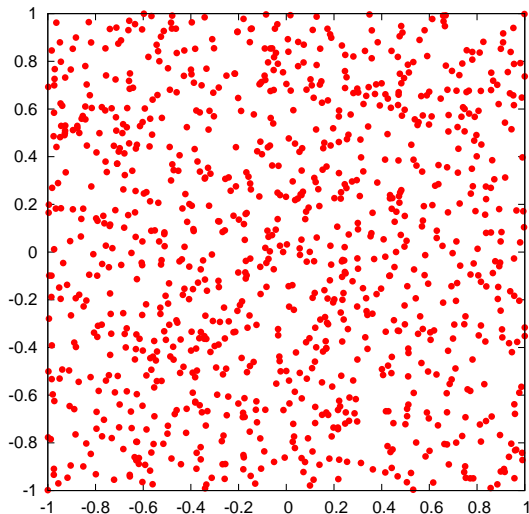
20. oktober 2009

# Koncept metode

Generiramo naključno  
točko:

$$x = \text{rand}$$

$$y = \text{rand}$$



# Koncept metode

Generiramo naključno  
točko:

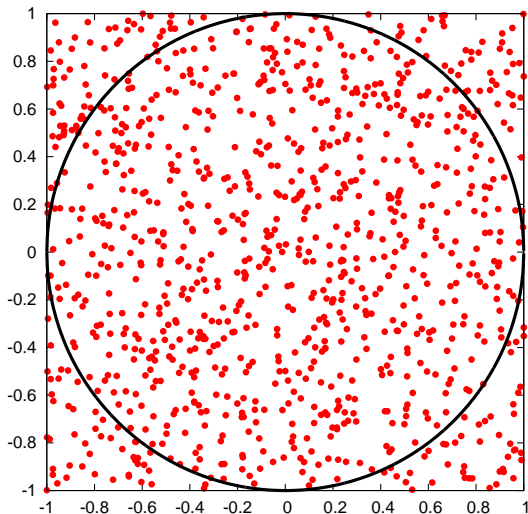
$$x = \text{rand}$$

$$y = \text{rand}$$

Izberemo pogoje:

$$x^2 + y^2 \leq 1$$

Za vsako naključno  
izbrano točko ugotovimo,  
ali jim ustreza ali ne.



# Tehtanje in štetje

Površina – poiščemo razmerje med površino kvadrata in včrtanega kroga.

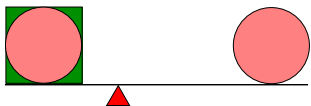


$$R = \frac{n_{\text{zadetkov}}}{n_{\text{strelov}}}$$

$$A_{\text{kroga}} = R \times A_{\text{kvadrata}}$$

# Tehtanje in štetje

Površina – poiščemo razmerje med površino kvadrata in včrtanega kroga.



$$R = \frac{n_{\text{zadetkov}}}{n_{\text{strelav}}}$$

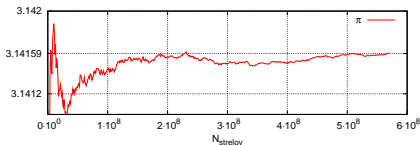
$$A_{\text{kroga}} = R \times A_{\text{kvadrata}}$$

## Število $\pi$

$$A_{\text{kroga}} = \pi r^2; \quad r = 1$$

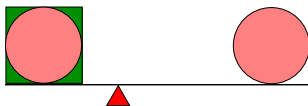
$$\pi = A_{\text{kroga}} = R \times A_{\text{kvadrata}}$$

Kdaj bomo zadovoljni z rezultatom?



# Tehtanje in štetje

Površina – poiščemo razmerje med površino kvadrata in včrtanega kroga.



$$R = \frac{n_{\text{zadetkov}}}{n_{\text{strelav}}}$$

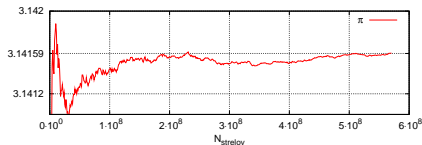
$$A_{\text{kroga}} = R \times A_{\text{kvadrata}}$$

## Število $\pi$

$$A_{\text{kroga}} = \pi r^2; \quad r = 1$$

$$\pi = A_{\text{kroga}} = R \times A_{\text{kvadrata}}$$

Kdaj bomo zadovoljni z rezultatom?



$$|\pi - \pi_{\text{pravi}}| \leq \text{izbran kriterij}$$

# Reševanje diferencialnih enačb

Kemijska kinetika reakcije  $A \rightarrow B \rightarrow C$

Rešujemo:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k_1[A]; \quad \frac{d[B]}{dt} = k_1[A] - k_3[B]; \quad \frac{d[C]}{dt} = k_3[B]$$

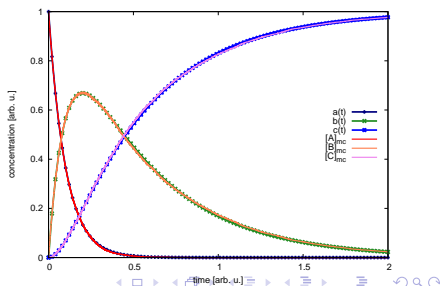
Analitični način – rešitev:

$$[A] = e^{-k_1 t}$$

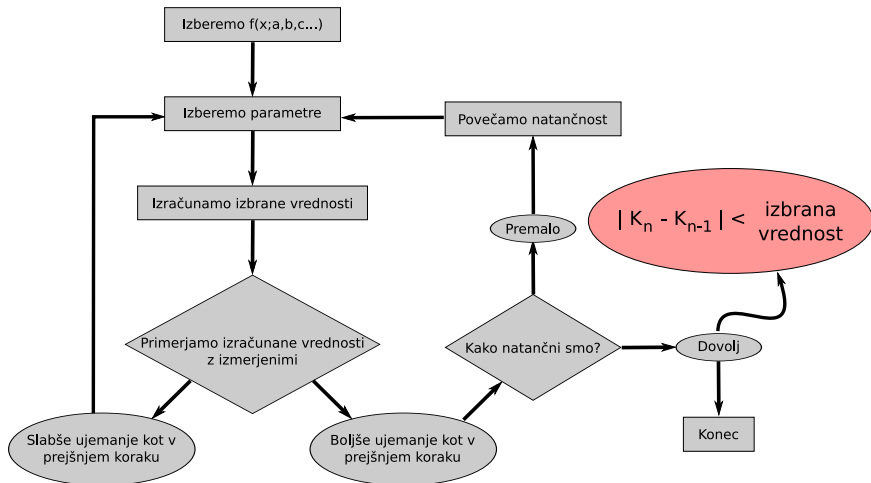
$$[B] = k_1 \frac{(e^{-k_1 t} - e^{-k_3 t})}{k_3 - k_1}$$

$$[C] = 1 + \frac{k_1 e^{-k_3 t} - k_3 e^{-k_1 t}}{k_3 - k_1}$$

Monte Carlo metoda



## Fitanje podatkov – shema



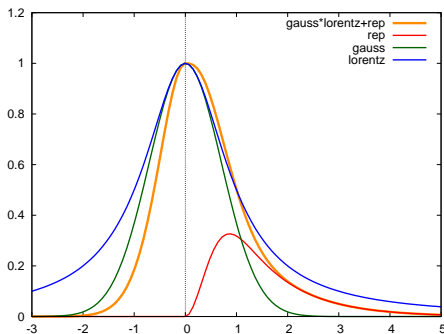


# Oblika XPS vrhov

$XPS_{vrh} = \text{gaussov vrh} \times \text{lorentzov vrh} + \text{rep}$

$$f(x) = \{G_b + T_b\}h$$

$$= \left\{ \frac{e^{[-(1-g)(\ln 2)(x-x_0)^2/w^2]}}{[1 + g(x-x_0)^2/w^2]} + ae^{-b(x-x_0)}[1 - e^{-c(x-x_0)^2}]\theta(x-x_0) \right\}h$$



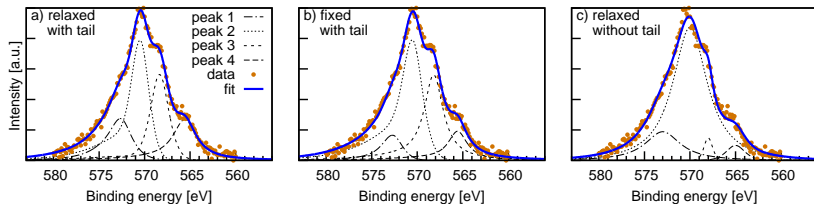
Vsak XPS spekter je sestavljen iz štirih vrhov.

Za vsak vrh prilagajamo parametre  $a, b, c, g, h, x_0$  in  $w$

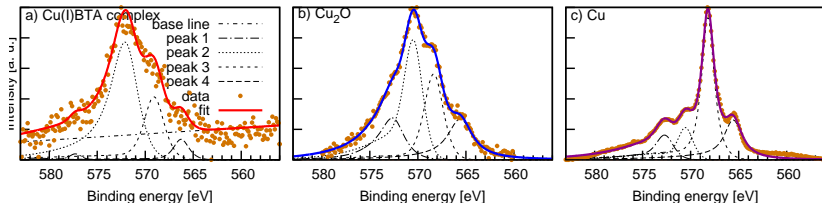
Kriterij za kvaliteto ujemanja: RMSE (root mean square error)

# XPS vrhovi posameznih komponent

Test z različnimi oblikami vrhov:



XPS spektri posameznih komponent:



# Sestavljeni XPS spektri

Vsak sestavljen XPS spekter lahko predstavimo kot linerano kombinacijo spektralnih prispevkov posameznih komponent:

$$XPS = \sum_{i=1}^n x_i \times X_i$$

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1$$

Radi bi določili  $x_i$ .

# XPS spektri izbranih vzorcev

Vzamemo spektre posameznih komponent in jih prilagodimo sestavljenim spektrom:

