

DOKUMENTACE K PROGRAMU ERA 3.0

- regresní algoritmy
- manuál
- sbírka příkladů

OBSAH

Obsah	2
Regresní techniky v programu ERA	4
1. Použité algoritmy a jejich výběr.....	4
1.1. Výpočet účelové funkce	4
1.2. Optimalizační algoritmy pro odhad parametrů.....	4
1.3. Hodnocení spolehlivosti	7
1.3.1. Konfidenční intervaly a korelační koeficienty.....	7
1.3.2. Konfidenční oblast a konfidenční meze	8
1.4. Významnost parametrů	10
1.5. Testy autokorelace	11
2. Koncepce regresního modelu.....	11
2.1.1. Překlad a dynamické připojení modelu.....	12
Obsluha programu ERA 3.0	13
3. Upozornění.....	13
4. Instalace.....	13
5. Použité symboly	13
6. Uživatelské prostředí programu ERA.....	14
6.1. Nabídka menu.....	14
6.1.1. Nabídka File (Soubor)	15
6.1.2. Nabídka Edit (Úpravy).....	15
6.1.3. Nabídka View (Zobrazení).....	15
6.1.4. Nabídka Model	16
6.1.5. Nabídka Compute (Výpočet)	16
6.1.6. Nabídka Tools (Nástroje).....	16
6.2. Panel Nástrojů	17
6.3. Sešit Nastavení	17
6.3.1. Karta Dimension	17
6.3.2. Karta Parameters	17
6.3.3. Karta Flow.....	19
6.4. Hlavní sešit.....	20
6.4.1. Karta Data	20
6.4.2. Karty Model a Source.....	21
6.4.3. Karta Fit Chart.....	22
6.4.4. Karta Parameter Details	22
6.4.5. Karta Covariances	23
6.4.6. Karta Report.....	23
7. Tvorba modelu.....	24
7.1. Zápis modelu	24
7.2. Uložení a kompilace modelu	25
8. Výpočty	26
8.1. Odhad parametrů	26
8.2. Spolehlivost parametrů a korelace	27

8.3. Sekvenční plánování experimentů	27
9. Volby a nastavení	28
Řešené příklady	31
Příklad 1: Jednoduchá nelineární regrese.....	31
Řešení:	31
Příklad 2: Jednoduchá nelineární regrese s diferenciální rovnicí.....	35
Řešení:	35
Příklad 3: Vícenásobná nelineární regrese	37
Řešení:	38
Příklad 4: Víceodezvová nelineární regrese a korelace parametrů	42
Řešení:	43
Příklad 5: Významnost parametrů	46
Řešení:	47
Seznam symbolů.....	50
Latinské symboly	50
Řecké symboly.....	50

REGRESNÍ TECHNIKY V PROGRAMU ERA

Počítačová aplikace pro regresní analýzu ERA (Easy Regression Analysis) byla vyvinuta s cílem poskytnout spolehlivé a uživatelsky jednoduché prostředí pro řešení všech typů regresních úloh, potřebných pro komplexní zpracování experimentálních dat z výzkumu chemické kinetiky. Zároveň byla do aplikace implementována řada funkcí, jejichž využití v aplikovaném výzkumu bude pravděpodobně poněkud omezenější, ale které jsou potřebné pro komplexní studium problému.

1. Použité algoritmy a jejich výběr

Numerické algoritmy byly vybírány především s ohledem na robustnost a spolehlivost aplikace. Rychlost výpočtu byla až sekundárním výběrovým kritériem, ačkoliv rozhodně nebyla opomíjena. Stejná kritéria byla uplatněna i při nastavení a doladění vlastností algoritmu. Uvedené preference vycházejí z filozofie aplikace, která se snaží odstínit uživatele od technických problémů spojených s výpočty a umožnit komplexní vyhodnocení dat sice ne bez základní znalosti regresní analýzy, ale bez požadavků na detailní znalost numerických metod a programování.

1.1. Výpočet účelové funkce

Program ERA podporuje několik účelových funkcí. Základní funkcí je prostý součet čtverců reziduálních odchylek, dále jeho modifikace ve formě váženého součtu. Matice vah nastavuje váhy automaticky na převrácenou hodnotu rozptylu odezvy. Rozptyly odezev jsou v uvedeném případě aproximovány jejich reziduálními rozptyly.

Pro případy s výraznou vzájemnou závislostí chyb v různých odezvách a měřeních s neznámou kovarianční maticí byl implementován Box-Draperův determinant S_{BD} , počítaný podle vztahu

$$S_{BD} = \begin{vmatrix} \sum_{j=1}^{N_E} \Delta y_{1j} \Delta y_{1j} & \cdots & \sum_{j=1}^{N_E} \Delta y_{1j} \Delta y_{N_y j} \\ \vdots & & \vdots \\ \sum_{j=1}^{N_E} \Delta y_{1j} \Delta y_{N_y j} & \cdots & \sum_{j=1}^{N_E} \Delta y_{N_y j} \Delta y_{N_y j} \end{vmatrix} \quad [1]$$

1.2. Optimalizační algoritmy pro odhad parametrů

Při volbě vhodného optimalizačního algoritmu pro extremalizaci účelové funkce bylo třeba vyjít z požadavků na jeho vlastnosti, odvozených od charakteru typicky řešených systémů. Nejdůležitějším požadavkem byla robustnost metody, myšlená především ve smyslu spolehlivé konvergence do globálního minima i z relativně vzdálených počátečních odhadů. Dalšími požadavky byla jednoduchost metody a univerzálnost jejího použití pro odlišné typy modelů. Cílem bylo především nastavení parametrů metody tak, aby byla použitelná na nejrozličnější modely bez úprav a změn nastavení i za cenu mírného snížení rychlosti konvergence. Rychlost metody byla proto až třetím kritériem výběru. Optimalizační algoritmus pro program ERA byl z výše uvedených důvodů hledán ve skupině stochastických optimalizačních metod.

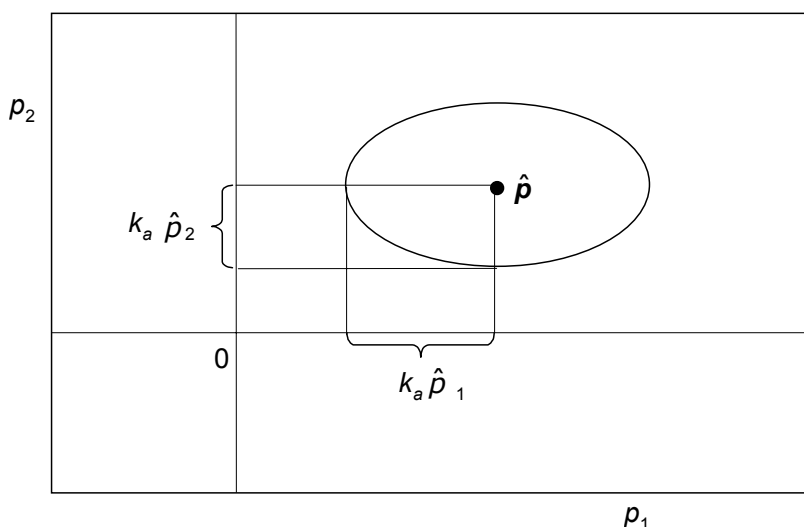
Optimalizační algoritmus ERA

Optimalizační algoritmus ERA je modifikací metody Gaines-Gaddy, která má pro účely odhadu kinetických parametrů nejvyváženější vlastnosti. Hlavní výhodou uvedeného typu metod je vysoká odolnost proti lokálním extrémům při zachování velmi vysoké konvergence do blízkosti globálního optima.

Optimalizační algoritmus programu ERA definuje prohledávanou oblast jako m -rozměrný hyperelipsoid s velikostmi poloos proporcionálními ke složkám nejlepší aproximace vektoru parametrů podle vztahu

$$\mathbf{a} = k_a |\hat{\mathbf{p}}| \quad [2]$$

kde \mathbf{a} je vektor poloos hyperelipsoidu a k_a konstanta úměrnosti (viz. obr. 1). Pro případ odhadu parametrů, které nabývají pouze kladných hodnot (je známo zda je parametr kladný nebo záporný), což platí pro většinu aplikací v kinetice, byla na základě testů stanovena optimální hodnota konstanty $k_a \approx 0.5$. Uvedená hodnota postačuje pro spolehlivou konvergenci do globálního optima a umožňuje vysokou konvergenční rychlost. Pro odhad parametrů s neznámým znaménkem je potřebná hodnota podstatně vyšší ($k_a \approx 4$).



Obr. 1 – Definice prohledávané oblasti algoritmu ERA

Poloha náhodného výběru uvnitř prohledávané oblasti je určena jednotkovým pseudonáhodným směrovým vektorem \mathbf{v} a normalizovanou vzdáleností λ od aproximace $\hat{\mathbf{p}}$. Vzdálenost λ je pseudonáhodné číslo určené vztahem

$$\lambda = r^\omega \quad [3]$$

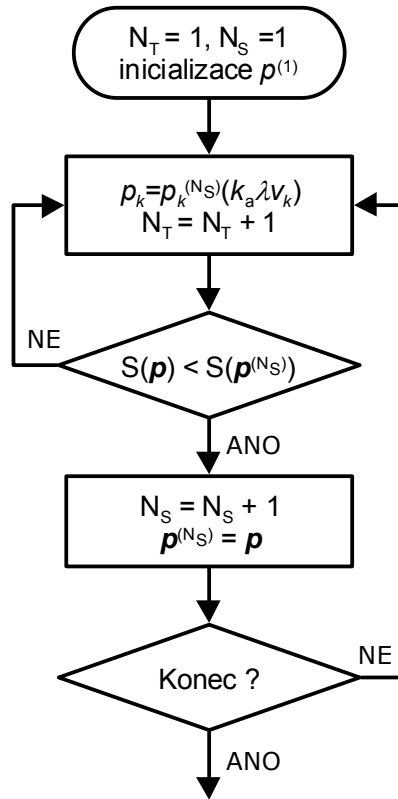
Ze vztahu [3] je patrné, že parametr ω musí být z intervalu $\langle 0;1 \rangle$, aby byly preferovány výběry z okraje prohledávané oblasti a z intervalu $(1;\infty)$ pro preferenci výběrů umístěných blíže k jejímu středu. Plynulý nárůst hodnoty parametru ω je zajištěn jeho výpočtem ze vztahu

$$\omega = \ln \frac{N_T}{N_S} \quad [4]$$

kde N_T představuje celkový počet vyčíslených náhodných výběrů z prohledávané oblasti a N_S počet těch, které byly úspěšné (vedly ke snížení hodnoty účelové funkce). Výslednou iterační formuli pro algoritmus ERA lze pro k -tý parametr shrnout do následujícího vztahu

$$p_k = \hat{p}_k(1 + k_a \lambda v_k) \quad [5]$$

Vývojový diagram optimalizačního algoritmu ERA je znázorněn na obr. 2.



Obr. 2 – Vývojový diagram algoritmu optimalizačního ERA

Algoritmus ERA konverguje spolehlivě a velmi rychle ke globálnímu optimu až do relativní přesnosti pohybující se okolo 0.1 % a poté rychlost konvergence dosti prudce klesá. Protože chyba způsobená nepřesností experimentálních dat je u typicky zpracovávaných systémů podstatně větší než chyba odhadu způsobená předčasně ukončenou optimalizací, je většinou možné ukončit výpočet ještě ve fázi rychlé konvergence. Další možností zlepšení konvergence je použití jiné metody pro jemné dokonvergování. Vzhledem k tomu, že pro tyto účely již není vhodné vybírat ze stochastických metod, byla implementována Nelder-Meadova modifikace simplexové metody, která využívá posledních $m+1$ (kde m je počet odhadovaných parametrů) aproximací pro inicializaci simplexu.

Další výhodou algoritmu je relativně malá velikost prohledávaného okolí v kombinaci s jeho posunem okamžitě po nalezení lepší aproximace. Uvedené vlastnosti jsou velmi vhodné v případě, kdy jsou k dispozici pouze velmi přibližné počáteční odhady některých parametrů. Jiné metody, zejména LJ, vykazují výrazné snížení rychlosti konvergence v případě, kdy je velikost prohledávané oblasti v nějakém směru podstatně menší než její vzdálenost od optima. Zvětšení prohledávané oblasti je nutno obvykle kompenzovat zvýšením počtu výběrů v každém iteračním bloku, takže zvýšení rychlosti konvergence příliš nenapomáhá. Pro zvýšení spolehlivosti konvergence do globálního

optima je významný i způsob zmenšování rozptylu výběrů okolo nejlepší aproximace, místo změny velikosti prohledávané oblasti.

1.3. Hodnocení spolehlivosti

Pro hodnocení spolehlivosti parametrů byl implementován výpočet konfidenčních intervalů a průmětů konfidenční oblasti do parametrických os (konfidenční meze).

1.3.1. Konfidenční intervaly a korelační koeficienty

Konfidenční interval (interval spolehlivosti) $L_\alpha(p_k)$ pro parametr p_k je definován vztahem

$$L_\alpha(p_k) = \langle \hat{p} - \sigma_{p_k}; \hat{p} + \sigma_{p_k} \rangle \quad [6]$$

kde σ_{p_k} představuje směrodatnou odchylku parametru, \hat{p} optimální hodnotu parametru a α zvolenou hladinu významnosti. Směrodatná odchylka parametru je určena z rovnice

$$\sigma_{p_k} = t_\alpha(N_Y N_E - N_P) \sqrt{\sigma_Y^2 \sigma^{kk}} \quad [7]$$

kde t je kritická hodnota Studentova rozdělení pro hladinu významnosti α a $(N_Y N_E - N_P)$ stupňů volnosti a σ^{kk} k -tý diagonální prvek variačně-kovarianční matice parametrů Σ . V praxi obvykle není k dispozici dostatečné množství opakovaných experimentů (jsou-li nějaké) pro určení rozptylu závisle proměnné. Rovněž velice zřídka je možné určit její rozptyl z předchozí zkušenosti, protože je ovlivňován mnoha faktory, závisícími na zkoumaném systému i experimentátorovi. Proto se nejčastěji používá odhad rozptylu z reziduálního rozptylu s_R^2 podle vztahu

$$\sigma_Y^2 \approx s_R^2 = \frac{S_{SRS}^{MIN}}{N_Y N_E - N_P} \quad [8]$$

kde S_{SRS}^{MIN} je součet čtverců reziduálních odchylek v optimu.

Šířka konfidenčního intervalu odhadnutého parametru závisí na příslušném diagonálním prvku kovarianční matice parametrů. Její výpočet používá pouze první derivace modelu podle parametrů, takže vyšší stupeň závislosti modelu na parametrech se do hodnot jejích prvků nepromítne. Šířku konfidenčního intervalu proto neurčuje přímo model, ale jeho aproximace Taylorovými rozvoji prvního stupně v okolí optimálních hodnot parametrů. Proto jsou konfidenční intervaly parametru symetrické, se středem v optimální hodnotě parametru. Z uvedeného způsobu výpočtu a vlastností vyplývají následující omezení pro použití konfidenčních intervalů:

- ✧ Konfidenční interval je schopen přesně indikovat spolehlivost parametru, pokud je model vůči němu lineární.
- ✧ V případě nelineárního modelu je intervalový odhad pouze natolik přesný, nakolik je přesná aproximace modelu Taylorovým rozvojem 1. stupně. Proto konfidenční interval není vhodným kritériem spolehlivosti parametrů, vůči kterým vykazuje model silně nelineární chování.
- ✧ Aproximace Taylorovým rozvojem je tím méně přesná, čím se provádí na širším intervalu. Proto i u poměrně málo nelineárních modelů mohou být konfidenční intervaly značně zkreslené, pokud jsou široké (malé množství dat, nepřesná data).

Konfidenční intervaly se jako kritéria spolehlivosti vyskytují v největší části prací.

Konfidenční intervaly pro jednotlivé parametry se počítají podle explicitních vztahů [6, 7]. Rozptyl závisle proměnných potřebný pro výpočet směrodatné odchylky parametru je

možno dodat jako externí informaci. V opačném případě je odhadnut z hodnoty součtu čtverců reziduálních odchylek podle vztahu [8]. Variačně-kovarianční matice Σ se vypočítá podle vztahu

$$\Sigma = (\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1} \quad [9]$$

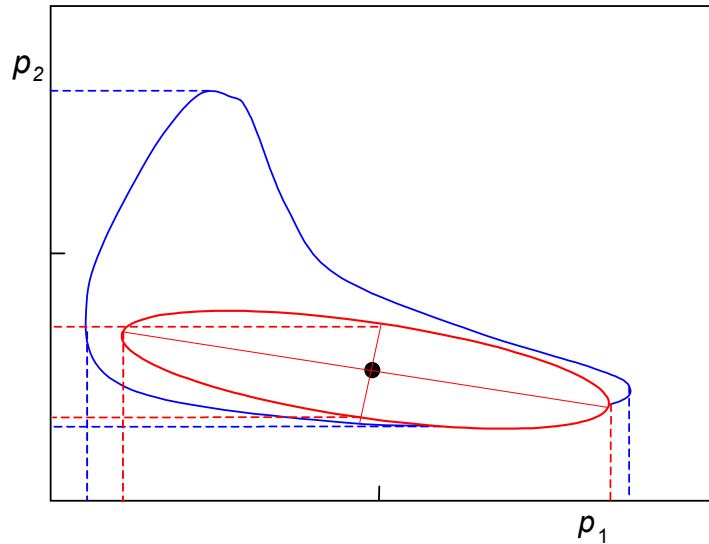
kde \mathbf{J} je Jacobiho matice definovaná vztahem [12]. Variačně-kovarianční matice je čtvercová a symetrická s rozměrem odpovídajícím počtu parametrů. Je možno ji normalizovat tak, aby její diagonální prvky byly jednotkové podle vzorce

$$\rho_{ij} = \frac{\sigma^{ij}}{\sigma^{ii} \sigma^{jj}}; \quad i = 1 \dots m; \quad j = 1 \dots m \quad [10]$$

kde prvky ρ jsou prvky normalizované (korelační) matice \mathbf{R} . Nediagonální prvek korelační matice ρ_{ij} vyjadřuje normalizovanou kovarianci mezi i -tým a j -tým parametrem (korelační koeficient) z intervalu $\langle -1; 1 \rangle$. Nabývá-li korelační koeficient hodnoty 0 parametry p_i a p_j je možno odhadnout s přesností odpovídající kvalitě experimentálních dat. Čím větší je absolutní hodnota korelačního koeficientu, tím menší vliv má změna hodnoty jednoho z parametrů na hodnotu účelové funkce, protože tato změna může být ve větší míře kompenzována změnou hodnoty druhého parametru. V případě, že korelační koeficient nabývá marginální hodnoty z intervalu $\langle -1; 1 \rangle$ jsou parametry zcela korelovány a jejich hodnoty nelze určit separátně.

1.3.2. Konfidenční oblast a konfidenční meze

Konfidenční oblast lze definovat jako takový podprostor v N_p -rozměrném prostoru parametrů, ve kterém se na zvolené hladině významnosti α nalézají skutečné hodnoty parametrů. Konstrukce jejího přibližného tvaru, za předpokladů platných pro výpočet konfidenčních intervalů, vede k N_p -rozměrnému (hyper)elipsoidu se středem v místě, jehož souřadnice odpovídají optimálním hodnotám parametrů. Skutečný tvar konfidenční oblasti se však u nelineárních modelů může od elipsoidu do značné míry lišit, stejně jako jeho velikost. V některých případech může být konfidenční oblast i nekonvexní.



Obr. 3 – Porovnání skutečného tvaru řezu konfidenční oblasti (—) s jeho eliptickou aproximací (—) pro nelineární model. Čárkovaně jsou vyznačeny charakteristické rozměry – konfidenční interval (---) a průmět konfidenční oblasti (---)

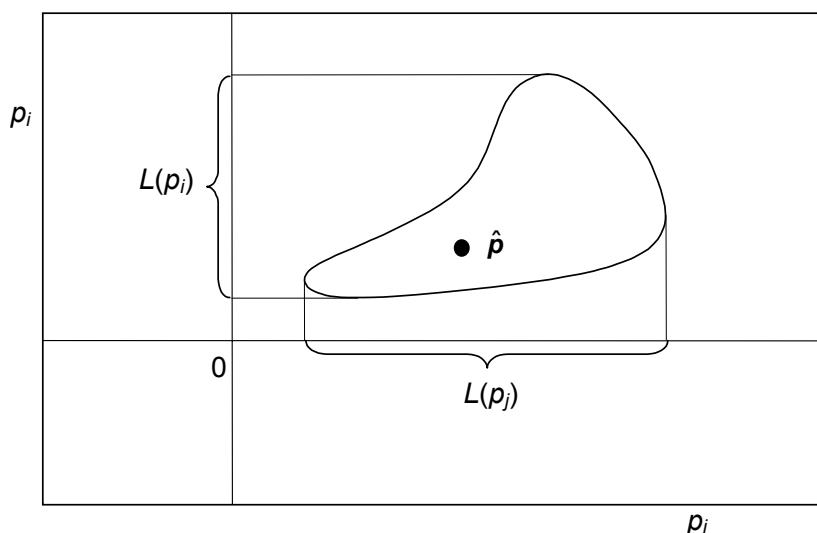
Obrázek 3 ukazuje porovnání dvourozměrného řezu konfidenční oblasti s její eliptickou aproximací pro nelineární model. Charakteristickým rozměrem idealizované konfidenční oblasti jsou délky jejich os, které odpovídají šířkám konfidenčních intervalů [6]. V případě výrazně odlišného tvaru skutečné a idealizované konfidenční oblasti lze použít místo konfidenčních intervalů charakteristické rozměry skutečné konfidenční oblasti. Jsou jimi průměty konfidenční oblasti do parametrických os.

Skutečnou konfidenční oblast je možné definovat jako množinu bodů v parametrickém prostoru, pro které platí nerovnost

$$\frac{S_{SRS}(\mathbf{p}) - S_{SRS}(\hat{\mathbf{p}})}{N_p \sigma_y^2} \leq F_\alpha(N_p, N_Y N_E - N_p) \quad [11]$$

kde F je kritická hodnota Fischerova rozdělení pro hladinu významnosti α a N_p a $N_Y N_E - N_p$ stupňů volnosti. Pro hranici (povrch) konfidenční oblasti platí vztah [11] ve formě rovnosti. Konfidenční oblasti jsou vhodné spíše pro grafickou interpretaci a následné vizuální hodnocení. Jelikož je žádoucí mít k dispozici kritérium intervalové povahy, ale nezatížené nedostatky konfidenčních intervalů, implementuje program ERA velmi důležitou funkci výpočtu konfidenčních mezí.

Konfidenční meze jsou definovány jako průměty obrysu skutečné konfidenční oblasti, zkonstruované pro požadovanou hladinu spolehlivosti podle vztahu [11], do os parametrů. Na rozdíl od intervalů spolehlivosti nemusí být interval určený konfidenčními mezemi symetrický podle optimální hodnoty parametru, jak ukazuje obr. 4.



Obr. 4 – Definice konfidenčních mezí podle skutečné konfidenční oblasti

Výpočet konfidenčních mezí vychází stejně jako v případě konfidenční oblasti ze vztahu [11] pro kritérium věrohodnostního poměru. Protože uvedený vztah platí pro všechny body \mathbf{p} náležící do konfidenční oblasti, je za předpokladu její spojitosti pro určení konfidenčních mezí zapotřebí hledat maximální a minimální hodnoty parametrů, které kritériu vyhovují.

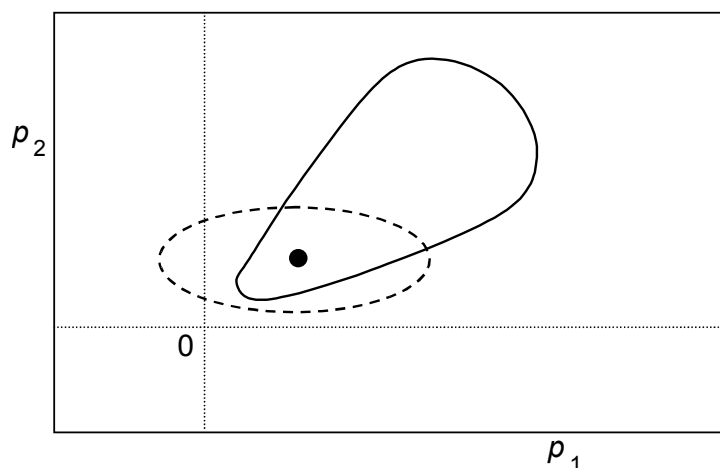
1.4. Významnost parametrů

Vzhledem k omezené přesnosti a množství experimentálních dat se některé parametry mohou ukázat jako statisticky nevýznamné. Rovněž mohou být na uvažované hladině významnosti nevýznamně odlišné od nějaké hodnoty, která svým fyzikálním významem umožňuje zásadní zjednodušení modelu. Typické příklady jsou následující:

- ✧ rychlostní konstanta ≈ 0 (daná reakce neprobíhá významnou rychlostí)
- ✧ řád reakce ≈ 1 (reakci lze aproximovat jako nekatalyzovanou)
- ✧ adsorpční koeficient ≈ 0 (sorpce látky je zanedbatelná)

Nevýznamné parametry je nutno z modelu vyloučit, protože zvýšením stupňů volnosti, případně korelací, mohou výrazně ovlivnit spolehlivost ostatních parametrů.

Parametr je možné považovat za statisticky nevýznamný na uvažované hladině významnosti od dané hodnoty, pokud tato hodnota leží uvnitř jeho intervalového odhadu vypočítaného pro tuto hladinu významnosti. Prostý konfidenční interval pro řadu nelineárních modelů není dostatečně vhodný k testům významnosti pro svou středovou symetrii vzhledem k optimální hodnotě parametru. Typický tvar konfidenční oblasti pro Langmuir-Hinshelwoodovy modely (a pravděpodobně pro řadu dalších modelů, v nichž záporné hodnoty parametrů nemají fyzikální význam) je kapkovitý. Přitom její pološířka v kladném směru je často velmi podstatně větší než ve směru záporném, jak ukazuje obrázek 5.



Obr. 5 – Typický tvar konfidenční oblasti u Langmuir-Hinshelwoodových modelů

Obrázek ukazuje typický případ, kdy konfidenční interval indikuje parametr p_1 jako nevýznamný, ačkoliv je skutečnost reprezentovaná konfidenční oblastí jiná.

1.5. Testy autokorelace

Pro účely testování normality rozložení reziduí existuje řada testových statistik. ERA implementuje autokorelační test založený na Neumannově statistice namísto běžnějšího Durbin-Watsonova testu, protože Neumannova statistika je vhodnější pro případy s menším množstvím měření na jednotlivých odezvách, a proto lépe vyhovuje zaměření aplikace.

2. Koncepce regresního modelu

Povaha kinetických modelů vyžaduje, aby program umožnil práci s modely tvořenými soustavou algebraických a obyčejných diferenciálních rovnic prvního řádu. Přitom používané algebraické rovnice jsou vždy explicitní vzhledem k jedné ze závisle proměnných, stejně jako rovnice diferenciální vzhledem k její derivaci.

Pro řešení soustav obyčejných diferenciálních rovnic byla použita Adams-Moultonova prediktor-korektor metoda. Vzhledem k tomu, že analytické vyjádření derivací účelové funkce a reziduí podle parametrů nemusí být obecně možné (např. v případě, že neexistuje analytický vztah pro výpočet účelové funkce a reziduí, protože diferenciální rovnice v modelu nejsou analyticky řešitelné), provádějí se veškeré nezbytné výpočty derivací numericky, diferenciálními formulí. Počet bodů použitých pro diferenciální formulí a velikost jejího kroku je optimalizována s ohledem na přesnost integrační metody.

Výsledkem řešení modelu je matice \mathbf{Y}_M , která obsahuje hodnoty závisle proměnných vypočítaných modelem pro hodnoty parametrů \mathbf{p} v bodech měření definovaných řádky matice \mathbf{X}_E ,

$$\mathbf{X}_E = \begin{bmatrix} X_{11} & \cdots & X_{1N_x} \\ \vdots & & \vdots \\ X_{N_e1} & \cdots & X_{N_eN_x} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y}_M = \begin{bmatrix} Y_{11} & \cdots & Y_{1N_y} \\ \vdots & & \vdots \\ Y_{N_e1} & \cdots & Y_{N_eN_y} \end{bmatrix}$$

Matice \mathbf{Y}_M po odečtení od matice naměřených hodnot závisle proměnných \mathbf{Y}_E se stejnou strukturou poskytne matici reziduí $\Delta\mathbf{Y}$. Pomocí diferenciálních formulí se též vypočítá Jacobiho matice parciálních derivací reziduí podle regresních parametrů \mathbf{J}

$$\mathbf{J} = \frac{\partial \Delta \mathbf{Y}}{\partial \mathbf{p}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \Delta y_{1,1}}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial \Delta y_{1,1}}{\partial p_{N_p}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \Delta y_{N_e, N_y}}{\partial p_1} & \dots & \frac{\partial \Delta y_{N_e, N_y}}{\partial p_{N_p}} \end{bmatrix} \quad [12]$$

2.1.1. Překlad a dynamické připojení modelu

Rovnice matematického modelu jsou v programu ERA chápány jako funkce (ve smyslu programovacího jazyka), do které se jako vstupní parametry předají vektory nezávisle proměnných, závisle proměnných a parametrů. Funkce vrátí jako výstup nový vektor závisle proměnných, případně jejich derivací, obsahuje-li model diferenciální rovnice. Popsaná funkce přitom není integrální součástí programu, ale překládá se zcela nezávisle na vlastním programu. Výsledkem překladu je knihovna, kterou lze za běhu programu připojit k vlastnímu programu tak, že ten následně může obsaženou funkci používat, jako kdyby byla jeho integrální součástí.

Program ERA 3.0 dále zjednodušuje práci s modely tím, že automaticky provádí nejen překlad a připojení knihovny modelu, ale generuje i její zdrojový kód na základě rovnic zadaných uživatelem, který proto nemusí zadávat nic jiného než vlastní modelové rovnice, případně deklarovat použité pomocné proměnné. Zadávání se provádí v nejjednodušší možné formě prostřednictvím mezisyntaxe. Následující ukázka obsahuje zadání modelu, ze kterého je programem vygenerován výše uvedený zdrojový kód knihovny modelu

```

language = pascal
declar
  r1,r2,r3,ads : Double;
end declar
static
end static
dynamic
  ads := 1 + p[4]*y[1] + p[5]*y[2] + p[6]*y[3];
  r1 := p[1]*p[4]*y[1]/ads;
  r2 := p[2]*p[5]*y[2]/ads;
  r3 := p[3]*p[5]*y[2]/ads;
  dy[1] := -r1 + r3;
  dy[2] := r1 - r2 - r3;
  dy[3] := r2;
end dynamic

```

Program je schopen na základě zadání modelu vygenerovat zdrojový kód v jazyce Pascal. K vlastnímu překladu se poté použije externí překladač, který není součástí instalace programu, programu je při instalaci pouze zadáno jeho umístění na počítači.

OBSLUHA PROGRAMU ERA 3.0

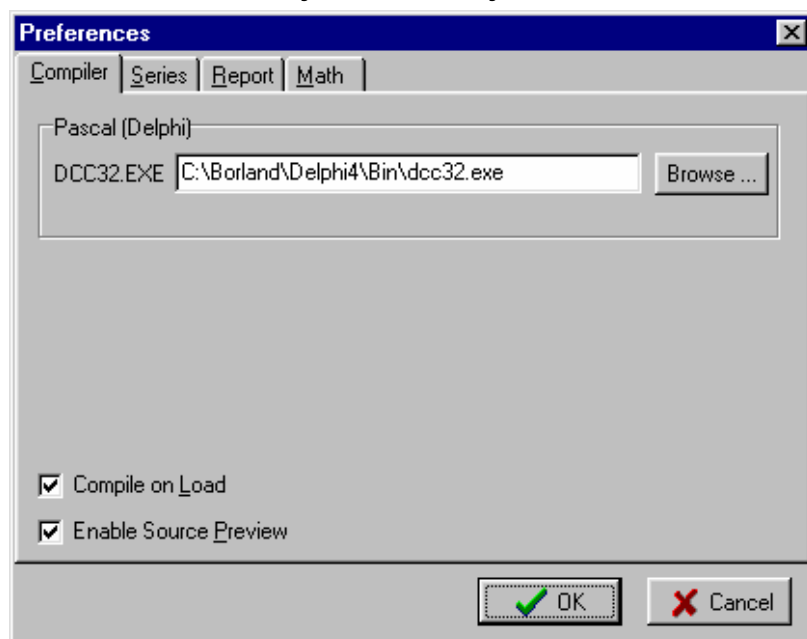
3. Upozornění

ERA 3.0 je podporována na operačních systémech MS Windows 9x/2000/XP. Je distribuována v podobě samorozbalovacího souboru, který obsahuje všechny součásti nutné k provozu programu. Ke kompilaci modelů je zapotřebí externí překladač Borland Delphi, který musí být legálně nainstalován. K provozu postačuje základní verze, která je k dispozici zdarma na <http://www.borland.com>.

4. Instalace

Instalace se provede spuštěním samorozbalovacího instalačního souboru installERA.exe. Cesta pro instalaci, kterou je třeba specifikovat nesmí obsahovat mezery, tj. vyhovuje c:\era\, avšak nikoliv c:\Program Files\era\. Toto omezení je způsobeno použitím externího překladače. Po instalaci lze spustit program era30.exe.

Po prvním spuštění programu je třeba provést následující konfiguraci: V menu *Tools* zvolte *Preferences*. Objeví se následující okno:



Na stránce *Compiler* je třeba nastavit cestu k souboru dcc32.exe. Je-li na daném počítači nainstalována legální verze Borland Delphi, lze nastavit cestu k souboru dcc32.exe umístěném v adresáři do kterého byl instalován program ERA.

5. Použité symboly



Informace podstatná pro uživatele předchozích verzí programů ERA a Shark



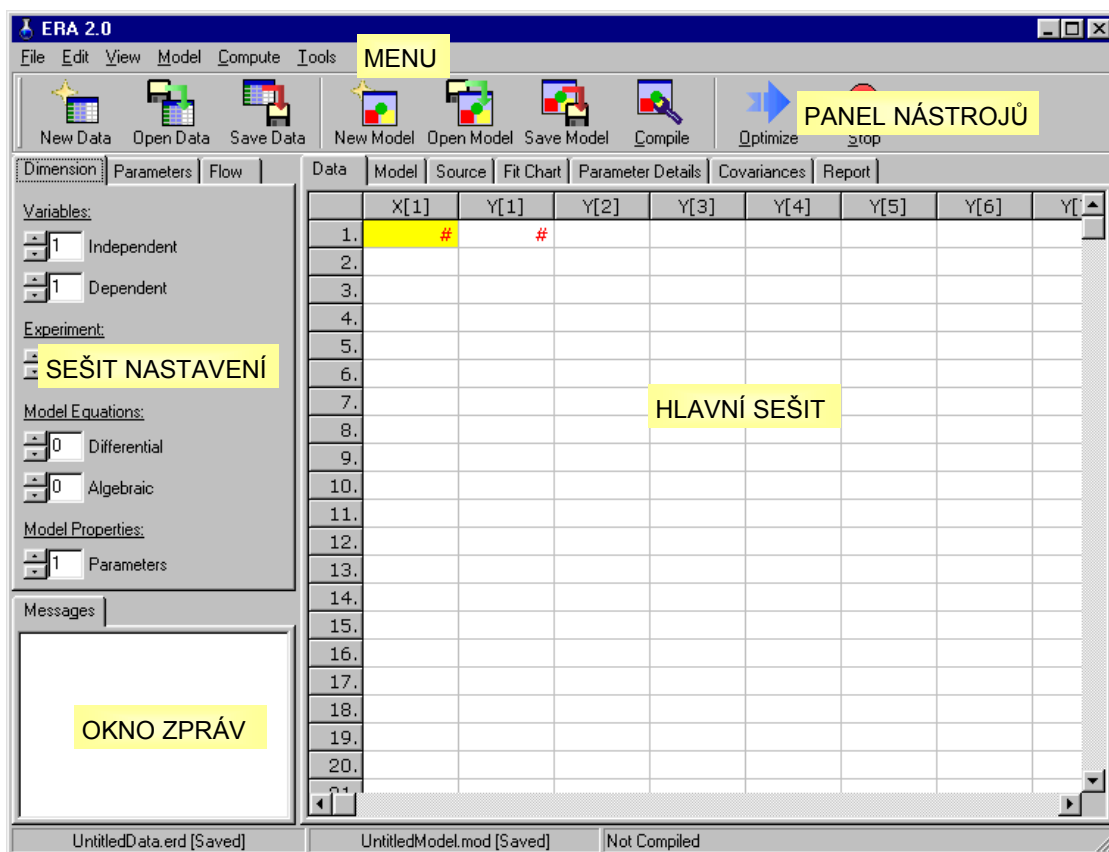
Tip

Důležité upozornění

6. Uživatelské prostředí programu ERA

Základní uživatelské rozhraní je tvořeno obvyklými ovládacími prvky, jako je nabídka menu, panel nástrojů a klávesové zkratky. Všechny funkce jsou dostupné z nabídky menu; vybrané a nejčastěji používané funkce jsou dostupné též ikonami z panelu nástrojů, případně mají přiřazeny klávesové zkratky.

Většina obousměrné komunikace s uživatelem je zajištěna Sešitem nastavení a Hlavním sešitem. Oba mají větší počet stránek, které vždy sdružují ovládací, případně výstupní prvky určené pro určitou funkci, nebo skupinu funkcí programu. Okno zpráv slouží k výpisu takových zpráv v průběhu výpočtů, které nejsou natolik důležité, aby si vynutily přerušování výpočtu a zobrazení běžného dialogu se zprávou.



Obr. 6 – Členění okna aplikace ERA 3.0

6.1. Nabídka menu

Struktura nabídky menu je naznačena na výše uvedeném obrázku. Jednotlivé podnabídky budou popsány v následujících kapitolách



Obr. 7 – Nabídka menu

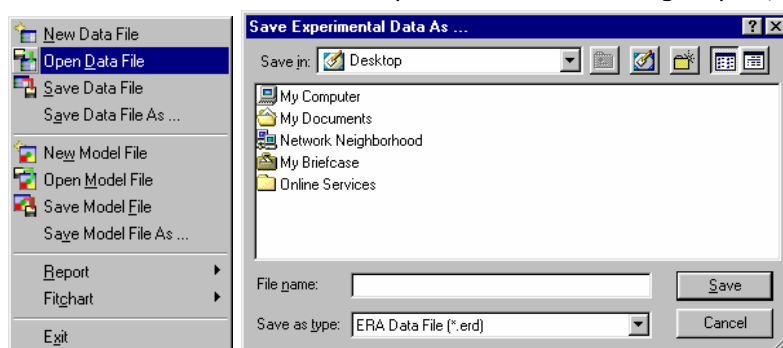
6.1.1. Nabídka File (Soubor)

Nabídka *File* obsahuje příkazy pro práci se soubory dat a matematických modelů. Příkazy *New Data File* a *New Model File* slouží k založení nového souboru experimentálních dat, případně nového modelu. Nově vytvořené soubory jsou nepojmenované.

Uložení souboru s daty či modelem je možné provést příkazy *Save Data File* nebo *Save Model File*. Nebyl-li soubor dosud uložen (jedná se o nově vytvořený soubor), dotáže se program nejdříve na jméno souboru, podobně jako při použití funkcí *Save As...*

Byl-li soubor již dříve uložen a je třeba uložit jeho kopii pod jiným jménem, je možné použít funkce *Save Data File As...* nebo *Save Model File As...* Místo uložení souboru a jeho nové jméno je možno zadat obvyklým způsobem v dialogu *Save As* uvedeném na obrázku níže.

Uložené soubory je možné otevřít příkazy *Open Data File* nebo *Open Model File*. Jméno a umístění souboru se zadává prostřednictvím dialogu *Open*, uvedeném na obrázku.



Obr. 8 – Nabídka soubor (vlevo), dialogové okno pro volbu názvu ukládaného souboru

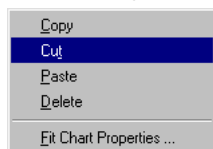
Podnabídka *Report* obsahuje příkazy sloužící k vytváření protokolů. *Report-Preview* slouží k vytvoření náhledu protokolu na stránce *Report* v *Hlavním Sešitě*. Příkazy *Report-Print...* a *Report-Save...* slouží k tisku protokolu, respektive k jeho uložení ve formátu RTF.

Podnabídka *Fitchart* obsahuje příkazy *Export...* a *Print...* První z nich slouží k uložení grafu proložení experimentálních dat modelem do souboru ve formátu EMF (enhanced metafile), druhý k jeho tisku na tiskárně.

Příkaz *Exit* je možno použít k ukončení aplikace.

6.1.2. Nabídka Edit (Úpravy)

Nabídka *Edit* obsahuje funkce pro editaci textu a práci se schránkou *Copy*, *Cut*, *Paste* a *Delete*. Jejich funkcí je kopie, vystřížení, vlepění, resp. smazání textu.

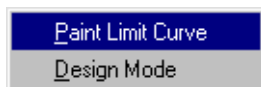


Příkaz *Fitchart Properties...* slouží ke změně nastavení grafu proložení experimentálních bodů.

6.1.3. Nabídka View (Zobrazení)

Nabídka *View* obsahuje dvě volby týkající se nastavení zobrazovaných prvků grafu proložení. Každá z nich může být buď zapnutá nebo vypnutá a tento její stav se přepíná jejím výběrem. *Paint Limit Curve* zapíná zobrazení křivek odpovídajících vybrané

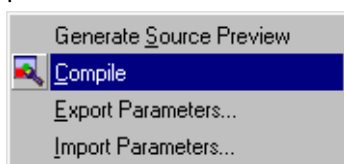
konfidenční mezi. *Design Mode* zapíná zobrazení navrhovaných experimentálních bodů při použití sekvenčního plánování.



Obě popsané funkce se automaticky aktivují po provedení příslušných výpočtů. Protože jejich přímý výběr v menu žádné výpočty neprovádí, jejich vybrání před prvním použitím příslušných výpočtů (viz. dále) nevede k žádnému viditelnému výsledku.

6.1.4. Nabídka Model

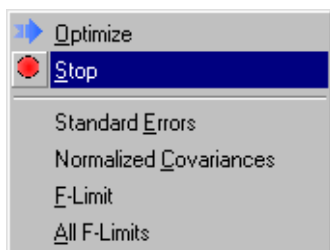
V nabídce *Model* jsou soustředěny povely pro práci s matematickým modelem. Příkaz *Generate Source Preview* vygeneruje zdrojový kód dynamické knihovny v jazyce Pascal nebo C podle zadání modelu na stránce *Model* v hlavním sešitě a umístí jej na stránce *Source*. Příkaz *Compile* provede totéž co příkaz předchozí a navíc výsledný zdrojový kód přeloží.



Příkaz *Export Parameters...* provede export vypočtených hodnot parametrů do souboru, ze kterého je lze zpětně importovat do programu příkazem *Import Parameters...*

6.1.5. Nabídka Compute (Výpočet)

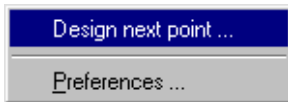
Nabídka *Compute* soustřeďuje aktivní výpočetní funkce programu. Základní funkcí je výpočet optimálních parametrů spouštěný položkou *Optimize*. Optimalizace po spuštění běží, dokud není ukončena příkazem *Stop*.



Funkce *Standard Errors* a *Normalized Covariances* slouží k výpočtu směrodatných odchylek parametrů a matice korelačních koeficientů. Horní i dolní konfidenční meze všech parametrů je možno spočítat po vybrání položky *All-F Limits*. Je též možno vypočítat pouze jedinou specifickou konfidenční mez funkcí *F-Limit*. Přitom musí být na stránce *Parameter Details* v hlavním sešitě vybrána příslušná buňka tabulky.

6.1.6. Nabídka Tools (Nástroje)

Nabídka *Tools* obsahuje přístup k dalším výpočetním nástrojům, utilitám a nastavením. Příkaz *Design Next Point...* zobrazí dialogové okno pro nastavení požadavků pro sekvenční plánování a navrhne optimální polohu dalšího experimentálního bodu (ů). Položka *Preferences...* slouží ke zobrazení okna pro nastavení voleb programu.

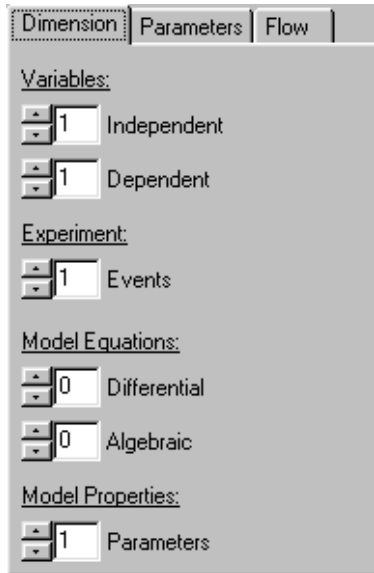


6.2. Panel Nástrojů

Panel nástrojů obsahuje ikony pro rychlý přístup k nejpoužívanějším funkcím. Jak obrázky, tak i popisky na tlačítkách jsou identické s těmi, uvedenými v nabídkách menu.

6.3. Sešit Nastavení

Sešit nastavení obsahuje karty – *Dimension*, *Parameters* a *Flow*. Jejich popis uvedou následující podkapitoly



6.3.1. Karta Dimension

Ovládací prvky na kartě *Dimension* slouží k nastavení rozměrů souboru dat a matematického modelu. Všechny prvky sestávají z editačního políčka, do kterého je možno zadat přímo celočíselnou hodnotu, kterou je případně možno nastavit pomocí dvojice šipek, zobrazených vlevo od políčka.

Sekce *Variables* obsahuje prvky pro nastavení počtu nezávisle (*Independent*) a závisle (*Dependent*) proměnných. Počet experimentálních měření je třeba uvést v poli *Events* v sekci *Experiment*. Počet algebraických a diferenciálních rovnic v modelu je nutno zadat do polí *Differential* a *Algebraic* v sekci *Model Equations*. Pro zadání počtu parametrů v modelu slouží položka *Parameters*.



Počet algebraických a diferenciálních rovnic nezahrnuje pomocné rovnice. Součet obou položek musí odpovídat počtu závisle proměnných.

6.3.2. Karta Parameters

Uvedená karta slouží pro modifikaci hodnot parametrů. Je možné ji využít jak pro nastavení počátečních odhadů, tak i v průběhu výpočtu. Počet řádků, které jsou aktivní, je dán nastavením počtu parametrů na kartě *Dimension*. Hodnoty v levém sloupci tabulky nelze měnit – udávají pořadová čísla parametrů. V pravém sloupci jsou uvedeny hodnoty parametrů.

	Value
1.	1.00000000
2.	1.00000000
3.	1.00000000
4.	1.00000000
5.	1.00000000
6.	1.00000000
7.	1.00000000
8.	
9.	
10.	
11.	
12.	
13.	

Klepnutí levým tlačítkem myši na buňce obsahující hodnotu parametru buňku označí (zobrazí okolo ní tečkovaný rámeček). Poté je možno z klávesnice zadat číselnou hodnotu, která přepíše původní obsah buňky. Editace buňky se ukončí po stisku kláves ↑, ↓, ENTER.

Klepnutí levým tlačítkem na buňce, která je již označená ji přepne do editačního modu, ve kterém je možno obsaženou hodnotu upravit pomocí obvyklých editačních kláves bez toho, aby byla během editace přepsána.

Klepnutím levého tlačítka na buňce s pořadovým číslem parametru přepíná parametr mezi fixovaným a nefixovaným modem. Je-li parametr fixován, zobrazuje se jeho číselná hodnota šedě a v průběhu výpočtu se nemůže měnit.



Číselné hodnoty s plovoucí desetinnou čárkou je třeba zadávat v takovém formátu, v jakém je požaduje systém Windows (v české verzi obvykle desetinná čárka v US tečka). Rovněž je možné pro zadávání použít tzv. vědecký formát (např. 1.256E-7).

6.3.3. Karta Flow

Dimension	Parameters	Flow
Optimization	F-Test	
<u>Objective function:</u> 0.03372714499		
<u>Model Calls:</u>		
Total:	582	
Successful:	145	

Dimension	Parameters	Flow
Optimization	F-Test	
<u>Computation Focus:</u>		
Parameter:	1	Limit: Lower
<u>Limit Objective:</u> 0.05487687550		
<u>Current Objective:</u>		
Min:	0.06053178079	
Descent:	0.0025183	

Karta *Flow* je „stavová“ a slouží pouze k poskytování průběžné informace o průběhu déletrvajícího výpočtu. V závislosti na přepnutí přepínače zobrazuje buď informace o průběhu optimalizace (*Optimize*) nebo o výpočtu konfidenčních mezí (*F-Test*).

V režimu *Optimize* se vypisují postupně dosažené minimální hodnoty účelové funkce (*Objective Function*) a informace o počtu vyčíslení modelu (*Model Calls*) a počtu úspěšných aproximací (*Successful*).

V režimu *F-Test* udává sekce *Computation Focus* číslo parametru pro nějž se právě konfidenční mez počítá a její typ (horní/dolní). Další tři údaje udávají limitní hodnotu účelové funkce podle věrohodnostního kritéria, minimální dosaženou podmíněnou hodnotu účelové funkce a její relativní pokles v posledních aproximacích. Poslední tři hodnoty nemají výraznější význam pro praktickou aplikaci a jsou vhodné pouze pro sledování efektivity algoritmu.

6.4. Hlavní sešit

6.4.1. Karta Data

Data	Model	Source	Fit Chart	Parameter Details	Covariances	Report		
	X[1]	Y[1]	Y[2]	Y[3]	Y[4]	Y[5]	Y[6]	Y[7]
1.	0.00000	1.00000	0.00000	0.00000	0.00000			
2.	2.00000	0.89200	0.08400	0.01200	0.00700			
3.	5.00000	0.65100	0.29500	0.04200	0.02200			
4.	10.0000	0.44600	0.44500	0.05100	0.09600			
5.	20.0000	0.19300	0.54200	0.05800	0.22300			
6.	35.0000	0.06000	#	0.05700	0.43600			
7.	55.0000	0.00100	0.25900	0.02900	0.71100			
8.	90.0000	0.00000	0.02400	0.00000	0.97600			
9.								
10.								
11.								
12.								

Karta data obsahuje seznam naměřených hodnot – experimentální data. Jednotlivá měření se uvádějí v řádcích. Ve sloupcích jsou uvedeny nejprve nezávisle (X) a poté závisle (Y) proměnné. Počet sloupců vyhrazených pro nezávisle proměnné se mění automaticky na jejich počtu nastaveném na kartě *Dimension* v sešitu nastavení. Sloupce a řádky jejichž pořadové číslo je vyšší než nastavený počet závisle proměnných, respektive počet měření jsou neaktivní a nelze do nich zadat žádnou hodnotu. Blok dat nemusí být celistvý a může obsahovat chybějící (neměřené body). Odpovídající buňky jsou značeny symbolem #. Datový editor programu ERA 3.0 je schopen pojmout až 500 řádků experimentálních dat. Každý řádek musí obsahovat jednu až dvacet nezávisle proměnných a jednu až 50 hodnot závisle proměnných.



V případě, že model obsahuje diferenciální rovnice musí být nezávisle proměnná, podle níž se derivuje uvedena v prvním sloupci. Je přitom důležité, aby experimentální body byly podle této proměnné uvedeny vzestupně. Je-li totiž následující bod naměřen při nižší hodnotě X[1] než bod předchozí je pokládán automaticky za počáteční podmínku pro další úsek integrace (což je někdy žádoucí)

6.4.2. Karty *Model* a *Source*

```
language = pascal

declar
  r1, r2, r3, r4, r5 : Double;
end declar

static
end static

dynamic
r5 := y[1] + p[5]*y[2] + p[6]*y[3] + p[7]*y[4];
r1 := p[1]*y[1]/r5;
r2 := p[2]*y[1]/r5;
r3 := p[3]*y[2]*p[5]/r5;
r4 := p[4]*y[3]*p[6]/r5;
dy[1] := -r1 - r2;
dy[2] := r1 - r3;
dy[3] := r2 - r4;
```

Karta *Model* obsahuje jediný editační rámeček, do kterého se zapisuje definice modelu podle syntaxe uvedené v příslušné kapitole tohoto manuálu.

```
Library cinn;

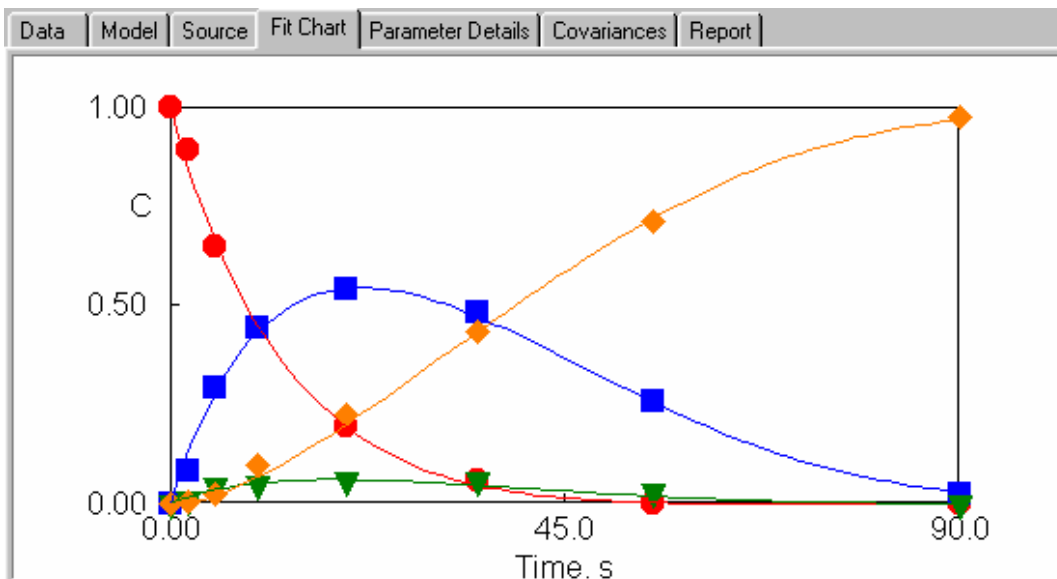
uses Math;

type T20Vector = array[0..20] of Double;
type T50Vector = array[0..50] of Double;
type T20x500Matrix = array[0..500] of T20Vector;
type T50x500Matrix = array[0..500] of T50Vector;
type P20Vector = ^T20Vector;
type P50Vector = ^T50Vector;
type P20x500Matrix = ^T20x500Matrix;
type P50x500Matrix = ^T50x500Matrix;

procedure DynamicEquations(var p,x : P20Vector; var y,dy : P50Vect
var
```

Karta *Source* obsahuje rovněž editační rámeček, ve kterém je zobrazen náhled zdrojového kódu modelu, byl-li předtím vygenerován povely *Generate Source Preview* nebo *Compile*. Uvedená karta slouží pouze pro informaci a její zobrazování lze vypnout v nastavení voleb.

6.4.3. Karta Fit Chart



Karta *Fit Chart* slouží ke zobrazení grafu proložení experimentálních bodů modelem. Graf se zobrazí pouze tehdy, je-li zadán model a sada experimentálních dat. Popisky os a případný nadpis grafu je možno editovat v dialogu vyvolaném příkazem *Fitchart Properties...* Vlastnosti sérií lze nastavit v dialogu voleb. Klepnutí pravého tlačítka na grafu vyvolá kontextové menu, které obsahuje příkazy pro práci z grafem vybrané z hlavního menu programu.

6.4.4. Karta Parameter Details

	Value	Min	Max	Std. Error	Lo F-Limit	Hi F-Lim
1.	0.07416	0.00010	11.0000			
2.	0.00937	0.00010	11.0000			
3.	0.01764	0.00010	11.0000			
4.	0.09934	0.00010	11.0000			
5.	1.29093	0.00010	11.0000			
6.	0.33065	0.00010	11.0000			
7.	0.25891	0.00010	11.0000			
8.						
9.						
10.						
11.						
12.						
13.						

Karta *Parameter Details* obsahuje vstupy a výsledky výpočtů. Má podobu tabulky, v jejích řádcích jsou uvedeny jednotlivé parametry modelu. Sloupce obsahují v pořadí zleva doprava následující údaje – Hodnota, Minimální přípustná hodnota, Maximální přípustná hodnota, Směrodatná odchylka, Dolní konfidenční mez a Horní konfidenční mez. Hodnoty uvedené v prvních třech sloupcích lze měnit, ostatní slouží pouze jako výstupy. V tabulce je možné označit blok a přenést jej do schránky.

6.4.5. Karta Covariances

Data	Model	Source	Fit Chart	Parameter Details	Covariances	Report					
	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.	11.
1.	1.00	-0.20	-0.48	0.50	0.87	-0.52	-0.07				
2.	-0.20	1.00	-0.49	0.02	0.05	0.07	-0.40				
3.	-0.48	-0.49	1.00	-0.75	-0.75	0.68	0.66				
4.	0.50	0.02	-0.75	1.00	0.70	-0.99	-0.25				
5.	0.87	0.05	-0.75	0.70	1.00	-0.69	-0.25				
6.	-0.52	0.07	0.68	-0.99	-0.69	1.00	0.20				
7.	-0.07	-0.40	0.66	-0.25	-0.25	0.20	1.00				
8.											
9.											
10.											
11.											

Covariance matrix determinant = 0.0000353

Karta *Covariances* uvádí výsledky výpočtu korelačních koeficientů mezi parametry ve formě tabulky. Vysoké hodnoty korelací (nad 0.9) jsou zvýrazněny červeně. Celá tabulka odpovídá korelační matici parametrů a hodnota jejího determinantu je uvedena ve spodní části karty. Podobně jako u předchozí karty je možno označit blok buněk a přenést jejich obsah do schránky (např. k následnému vložení do textového editoru).



Po vložení zkopírovaných hodnot do textového editoru MS Word je možné vložené hodnoty převést na tabulku příkazem *Tabulka-Převést text na tabulku*

6.4.6. Karta Report

Data	Model	Source	Fit Chart	Parameter Details	Covariances	Report					

Karta *Report* obsahuje náhled protokolu po jeho vytvoření. Pravé tlačítko myši vyvolá po stisknutí na této kartě kontextové menu, které obsahuje příkazy pro práci s protokolem, vybrané z hlavního menu.

7. Tvorba modelu

Matematický model, jenž má popsat experimentální data je třeba zapsat do editačního rámce na kartě *Model* v hlavním sešitě. Celý proces sestává ze tří kroků – zápis zdrojového textu, uložení modelu a jeho kompilace.

7.1. Zápis modelu

Pro zápis modelu se využívá jazyk Pascal. Z důvodů budoucí kompatibility je na samém počátku zápisu modelu nutné použít jazyk specifikovat:

```
language=pascal
```

Další částí zápisu je deklarační část, ve které je možno definovat pomocné proměnné. Tato část je uvozena a následujícím způsobem:

```
declar  
.  
end declar
```

seznam deklarací uvedený mezi úvodní a konečnou klauzulí musí odpovídat syntaxi jazyka. V jazyce Pascal musí být každá deklarace seznam proměnných oddělených čárkami následovaný dvojtečkou a identifikátorem typu, vše ukončeno středníkem, tedy:

```
a, b, c : Double;
```

Po deklarační části následuje část statického kódu uvozená klauzulí:

```
static  
.  
end static
```

ČÁST STATICKEHO KÓDU obsahuje část kódu modelu, kterou stačí pro dané hodnoty parametrů vyčíslit jednou a není třeba její vyčíslení opakovat zvlášť pro různé hodnoty nezávisle proměnné nebo v jednotlivých krocích integrace diferenciální rovnice. Jedná se např. o změnu hodnoty počáteční podmínky. Pouze v této části má model možnost měnit obsah proměnných, které obsahují experimentální data. Dále navazuje část dynamického kódu uvozená:

```
dynamic  
.  
end dynamic
```

ČÁST DYNAMICKÉHO KÓDU obsahuje vlastní rovnice modelu, které se v případě algebraických rovnic vyčíslují pro každý bod měření a v případě diferenciálních rovnic pro každý krok integrace.

Obě části modelu mohou obsahovat rovnice. Při řešení modelu se nejprve vyčíslí rovnice uvedené v části statické, rovnice uvedené v dynamické části se poté vyčíslují podle potřeby při řešení algebraických či diferenciálních rovnic modelu, tak aby se vypočetly hodnoty všech závisle proměnných v každém bodě měření.



Typické použití statické části je pro modifikaci počáteční podmínky diferenciální rovnice, která je uvedena v experimentálních datech v průběhu výpočtu.



Všechny uvedené části jsou povinné a musí být uvedeny, ale mohou být prázdné.

Kromě lokálních proměnných definovaných v deklarační části je možné používat následující globální proměnné:

✧ Ve statické části:

- ✧ vektory p , x a y jako symboly pro vektory parametrů, nezávisle a závisle proměnných. Index prvku ve vektoru se uvádí v hranatých závorkách, tedy např. $x[1]$.

- ✧ matice x_e a y_e jako symboly pro matice naměřených hodnot nezávisle a závisle proměnných. Matice je definována jako „vektor vektorů“, řádek matice je tedy možné získat uvedením jednoho indexu, např. $x_e[1]$, prvek matice uvedením dvou indexů, např. $x_e[1][1]$. První z indexů představuje číslo měření, druhý číslo závisle/nezávisle proměnné.
 - ✧ V dynamické části:
 - ✧ vektory p , x , y , dy , které reprezentují vektory parametrů, nezávisle proměnných, závisle proměnných a derivací závisle proměnných podle nezávisle proměnné $x[1]$.
- Při psaní rovnic v obou částech je třeba dodržovat syntaktická pravidla použitého jazyka. Každá ze závisle proměnných musí být v dynamické části vyjádřena právě jednou rovnicí explicitně sama, nebo tak musí být vyjádřena její derivace.

Požadavky na matematický model

Matematický model může obsahovat až 20 regresních parametrů. Uvedený počet daleko přesahuje potřeby většiny kinetických modelů a leží přibližně na horní hranici použitelnosti implementovaných regresních algoritmů. Počet rovnic v modelu, ať již se jedná o rovnice diferenciální nebo algebraické není nijak omezen. V modelu musí být každá ze závisle proměnných popsána jednou rovnicí, která explicitně určuje její hodnotu nebo hodnotu její derivace z proměnných a parametrů modelu. Hodnota proměnné nebo její derivace může být explicitně vyjadřována i několika rovnicemi. Potom se uplatňuje sekvenční zpracování modelu. Rovnice se postupně vyčíslují tak, jak jsou zapsány a výsledná hodnota proměnné nebo její derivace je určena až po vyčíslení poslední z těchto rovnic.

Z požadavku na explicitní vyjádření hodnoty závisle proměnné u algebraických rovnic vyplývá, že model nesmí obsahovat algebraické rovnice, které jsou implicitní ke všem obsaženým závisle proměnným. Diferenciální rovnice obsažené v modelu musí být obyčejné, prvního řádu a musí explicitně vyjadřovat hodnotu derivace některé ze závisle proměnných. Protože program v současné verzi nepodporuje parciální diferenciální rovnice, předpokládá se pro zjednodušení syntaxe zápisu, že v derivacích jsou závisle proměnné derivovány podle první nezávisle proměnné.

Výše uvedený požadavek explicitních rovnic je asi nejvýraznější omezení, se kterým je nutno počítat. Vlastní podoba rovnic může být prakticky libovolně složitá, protože může používat libovolné syntaktické prvky programovacího jazyka. Je například možné používat modely s nespojitým řešením nebo modely mix-integer. Navíc je možné v modelu naprogramovat i dodatečné numerické algoritmy, například Newtonovu metodu pro řešení implicitní nelineární algebraické rovnice, jejichž řešení není v modelu podporováno přímo.

7.2. Uložení a kompilace modelu

Po zapsání modelu je nutno jej uložit. Uložený model je dále třeba přeložit příkazem menu *Model-Compile*. Překlad modelu provádí externí překladač a informace o jeho průběhu se zobrazují v nově otevřeném okně

```
C:\WINDOWS\System32\cmd.exe
Temporary batch file generated succesfully
Running Delphi Compiler
Borland Delphi Version 14.0
Copyright (c) 1983,2001 Borland Software Corporation
C:\vera20\ voda\Obr1PCEFO.pas(48)
49 lines, 0.08 seconds, 28296 bytes code, 3145 bytes data.
Finished!
Press any key to continue . . .
```

Jakmile je překlad skončen, titulek uvedeného okna se změní z „eracompile“ na „Finished – eracompile“ nebo „Dokončeno – eracompile“ podle jazykové verze systému. Okno je nutno po prohlédnutí vypsaných zpráv uzavřít **stiskem libovolné klávesy**.

Příklad okna uvedeného na obrázku ukazuje výsledek překladu, který proběhl bez chyb. V případě výskytu syntaktických chyb v modelu, se v uvedeném okně objeví seznam chybových hlášení. V takovém případě je nutné model upravit, znovu uložit a zkompileovat. Po úspěšném dokončení kompilace se model automaticky připojí k programu a po zadání experimentálních dat (nebo jsou-li již zadána) je možno jej použít k výpočtům.

Byl-li potřebný model již dříve vytvořen je možné jej otevřít příkazem *Load model*. I když byl model již dříve přeložen, je nutné před použitím jeho překlad opakovat.



Je-li v nastavení programu zvolena možnost automatického překladu modelu po otevření spustí se překladač automaticky.

8. Výpočty

Pro všechny typy výpočtů popsané v této kapitole se předpokládá, že v programu jsou již zadána experimentální data a vytvořen matematický model.

8.1. Odhad parametrů

Základní funkcí regresního software je odhad parametrů, tedy zjištění jejich optimálních hodnot vzhledem ke existujícím experimentálním datům. Tuto operaci program provádí metodou adaptivního náhodného hledání s použitím součtu čtverců reziduálních odchylek jako účelové funkce.

Odhad optimálních parametrů je možno spustit příkazem *Compute-Optimize*. Odhad parametrů probíhá iterativním způsobem. Postup výpočtu a zlepšování odhadů parametrů je možno sledovat na následujících prvcích uživatelského rozhraní:

- ✧ Karta *Flow* v sešitě nastavení přepnutá do modu *Optimization*
- ✧ Graf proložení experimentálních bodů (aktualizovaný při každé aproximaci)
- ✧ Odhady parametrů na kartách *Parameters* a *Parameter Details* se aktualizují při každé nové aproximaci

Získá-li zobrazená hodnota parametru v průběhu optimalizace červenou barvu, je to známkou toho, že se jeho odhad leží na okraji intervalu vymezeného minimální a

maximální přípustnou hodnotou – jedná se tedy o vázaný extrém. Je-li cílem výpočtu volný extrém je třeba interval přípustných hodnot rozšířit (na kartě *Parameter Details*). Optimalizaci je po dosažení dostatečně přesných odhadů ukončit příkazem *Stop*.

8.2. Spolehlivost parametrů a korelace

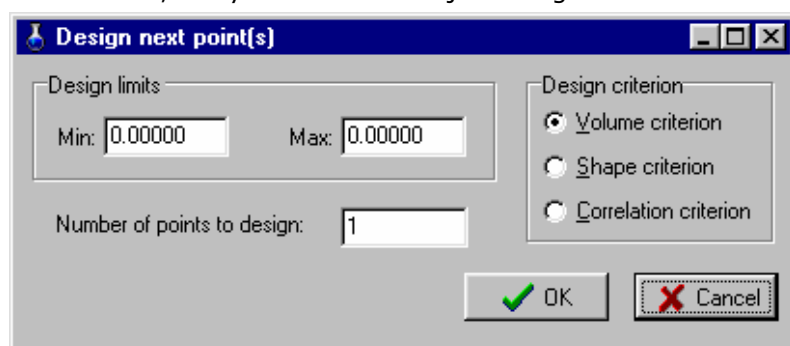
Základním, i když u nelineárních modelů orientačním, údajem o spolehlivosti parametrů jsou jejich směrodatné odchylky. Jejich výpočet se provede příkazem *Compute-Standard Errors* a jejich hodnoty se zobrazí v tabulce *Parameter Details* v hlavním sešitě. Odchylky jsou počítány na hladině významnosti 95 %.

Protože konfidenční intervaly nejsou vzhledem ke své definici příliš vhodné pro použití v silně nelineárních modelech a systémech s malým počtem experimentálních bodů, umožňuje program výpočet konfidenčních mezí (příkazy *F-Limit* nebo *All F-Limits*). Konfidenční meze pracují se skutečnou konfidenční oblastí (jsou jejími průměty do parametrických os), jsou proto obecně nesymetrické podle optimální hodnoty a vhodné k použití bez ohledu na míru nelinearity systému. Jejich výpočet je ve srovnání se konfidenčními intervaly podstatně náročnější. Jeho průběh je indikován údaji na kartě *Flow* sešitu nastavení v modu *F-Limits*. Výpočet je možno přerušit příkazem *Stop*. V případě výpočtu všech konfidenčních mezí najednou (*All F-Limits*) se použitím tohoto příkazu ukončí výpočet aktuální konfidenční meze a začne se počítat další. Pro úplné ukončení výpočtu je proto nutné použít příkaz opakovaně. Výsledky výpočtu se rovněž zobrazí na kartě *Parameter Details*. Vybere-li se buňka v tabulce *Parameter Details*, která již obsahuje vypočtenou hodnotu konfidenční meze, zobrazí příkaz *View-Paint Limit Curve* na grafu proložení kromě optimálního řešení modelu i řešení odpovídající hodnotě konfidenční meze.

Výpočet korelačních koeficientů (normalizovaných kovariancí mezi parametry) se provede po vybrání příkazu *Compute-Covariances*. Výsledky se zobrazí na kartě *Covariances* v hlavním sešitě.

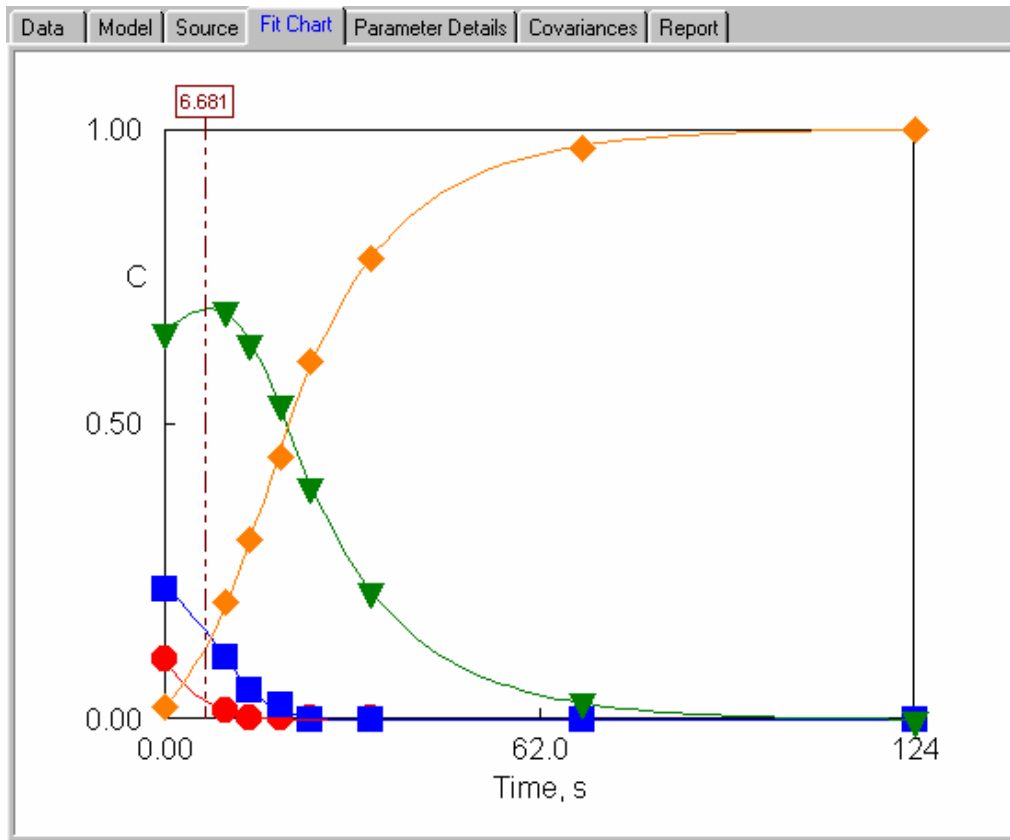
8.3. Sekvenční plánování experimentů

Program obsahuje jednoduchou nadstavbu pro podporu sekvenčního plánování experimentů, tzn. návrh hodnot nezávisle proměnné pro další měření tak, aby jejich efekt na zlepšení vlastností odhadnutých parametrů byl maximální. Pro práci s nadstavbou je nutno do programu zadat již naměřená data a navržený model a provést optimalizaci, poté je možné jednoduše provést návrh dalších experimentálních bodů příkazem *Tools-Design Next Point...*, který zobrazí následující dialog:



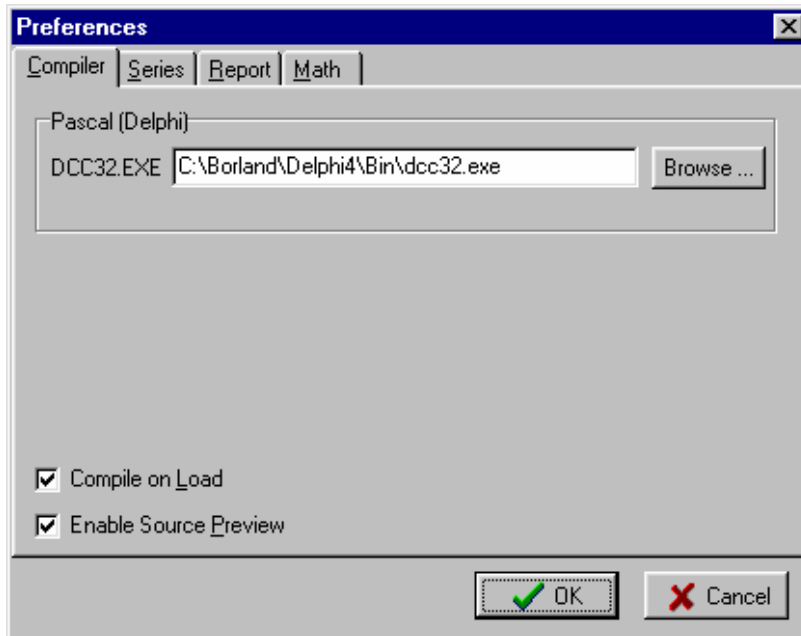
V dialogu je nutno vyplnit požadovaný experimentální interval zadáním minimální (*Min*) a maximální (*Max*) hodnoty nezávisle proměnné přípustné pro měření. Implicitně jsou tyto

hodnoty přednastaveny podle rozsahu již naměřených dat. Dále je třeba nastavit počet bodů, které se mají navrhnout a vybrat kritérium optimality plánu. K dispozici je objemové, tvarové a korelační kritérium. Po potvrzení a proběhnutí výpočtu se výsledky objeví na grafu proložení, jak je naznačeno na následujícím obrázku.

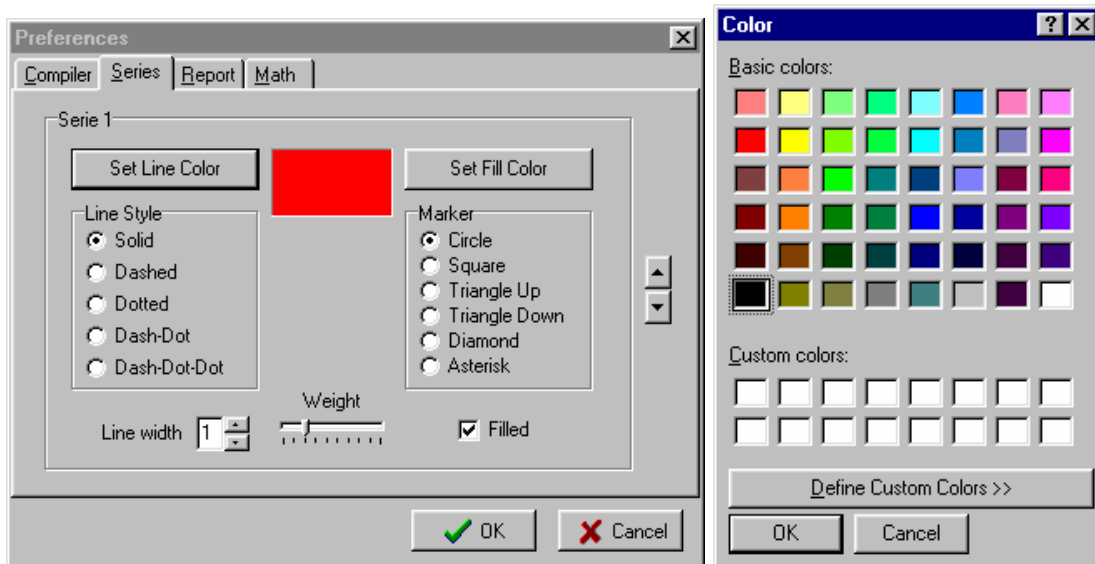


9. Volby a nastavení

Řada funkcí programu a rovněž jeho vzhled jsou silně ovlivněny jeho nastavením. Nastavení uživatelských voleb se provádí v dialogovém okně *Preferences*, které je možno zobrazit příkazem *Tools-Preferences...*

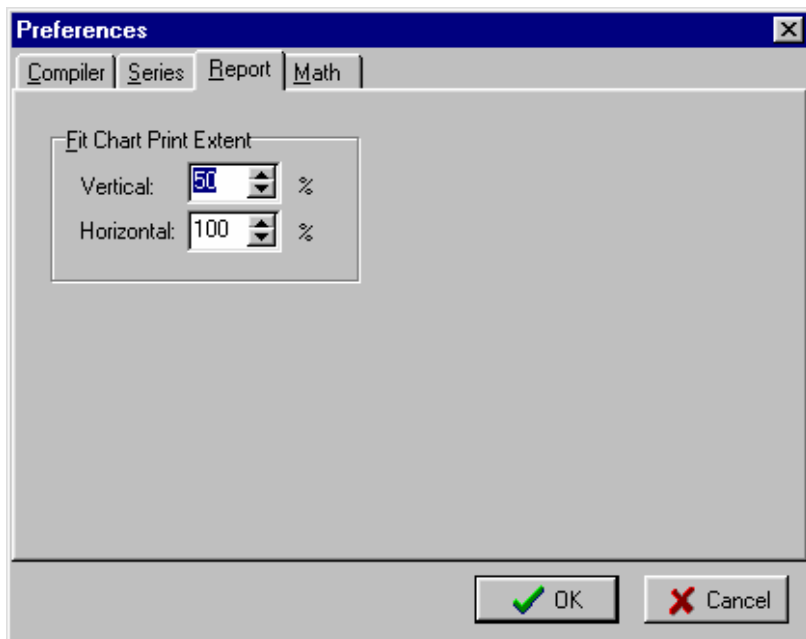


Volby obsažené na první kartě dialogu (*Compiler*) jsou zásadní pro správnou funkci programu. Program pro svou funkci potřebuje překladač jazyka Delphi DCC32.EXE a cesta k němu musí být specifikována v příslušném editačním poli na této stránce. Cestu je možno buď přímo zapsat nebo nalistovat použitím tlačítka *Browse...* Zaškrťovací políčko *Compile on Load* určuje, má-li se po otevření uloženého modelu automaticky spustit překlad. Políčko *Enable Source Preview* určuje, zda se má zobrazovat karta s náhledem zdrojového kódu modelu.



Vlastnosti jednotlivých sérií zobrazovaných na grafu proložení lze nastavit na kartě *Series*. Barvu čáry a výplně značky bodu lze vybrat z dialogu *Color* (na obr. vlevo), po stisknutí tlačítka *Set Line Color*, resp. *Set Fill Color*. Styl čáry a tvar značky je možno zvolit v polích přepínačů *Line Style* a *Marker*. Hodnota uvedená v poli *Line Width* určuje tloušťku čáry, nastavení ukazatele *Weight* určuje velikost značek pro experimentální body a zaškrťovací políčko *Filled* definuje, zda jsou značky prázdné či vyplněné. Číslo právě modifikované série

je uvedeno ve skupinovém rámečku okolo všech výše uvedených ovládacích prvků. Aktuální sérii lze měnit dvojicí šipek na pravém okraji dialogu.



Údaje uvedené na stránce *Report* určují relativní velikost grafu proložení na stránce papíru.

ŘEŠENÉ PŘÍKLADY

PŘÍKLAD 1: JEDNODUCHÁ NELINEÁRNÍ REGRESE

ZADÁNÍ:

Odhadněte optimální hodnotu rychlostní konstanty reakce prvního řádu dané následující rovnicí:

$$c_A = c_{A0}e^{-kt} \quad [13]$$

Použijte data z následující tabulky:

t , min	0	5	10	15	20	25	30
c_A	100	85	61	52	34	25	24

ŘEŠENÍ:

V rámci tohoto jednoduchého příkladu bude vyřešena základní regresní úloha. Vzhledem k tomu, že se jedná o úvodní příklad bude postup řešení doplněn o podrobný postup obsluhy programu ERA, použitý pro jeho řešení. Matematický model definovaný rovnicí [13] je třeba zadat do programu ERA v syntaxi a symbolice popsané v kapitole 7.1. Zápis modelu bude tedy mít následující formu:

```
language=pascal

declar
end declar

static
end static

dynamic
  y[1] := 100*exp(-p[1]*x[1]);
end dynamic
```

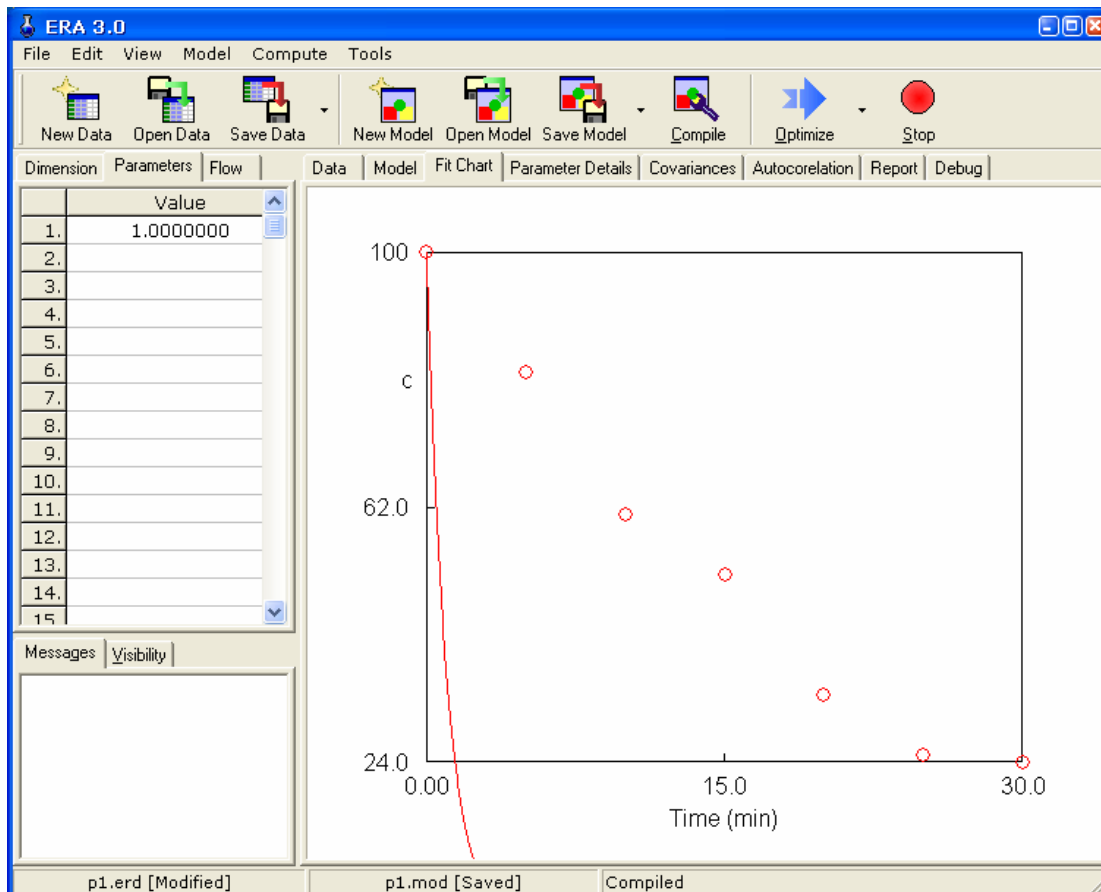
Zápis modelu naznačuje, že řešený problém zahrnuje jednu nezávisle proměnnou (čas, t), jednu závisle proměnnou (koncentrace, c_A) a jeden parametr (rychlostní konstanta, k). Model je tvořen jedinou algebraickou rovnicí a soubor experimentálních dat obsahuje 7 měření. Informace o rozměru řešeného systému je třeba vyplnit do karty *Dimensions* (viz kap. 6.3.1) a data do tabulky dat, jak ukazují následující obrázky.

The screenshot shows the ERA software interface. On the left, there are configuration panels for 'Variables', 'Experiment', 'Model Equations', and 'Model Properties'. The 'Variables' panel shows 1 Independent and 1 Dependent variable. The 'Experiment' panel shows 7 Events. The 'Model Equations' panel shows 0 Differential and 1 Algebraic equation. The 'Model Properties' panel shows 1 Parameter. On the right, a data table is displayed with columns X[1], Y[1], Y[2], and Y[3]. The data points are as follows:

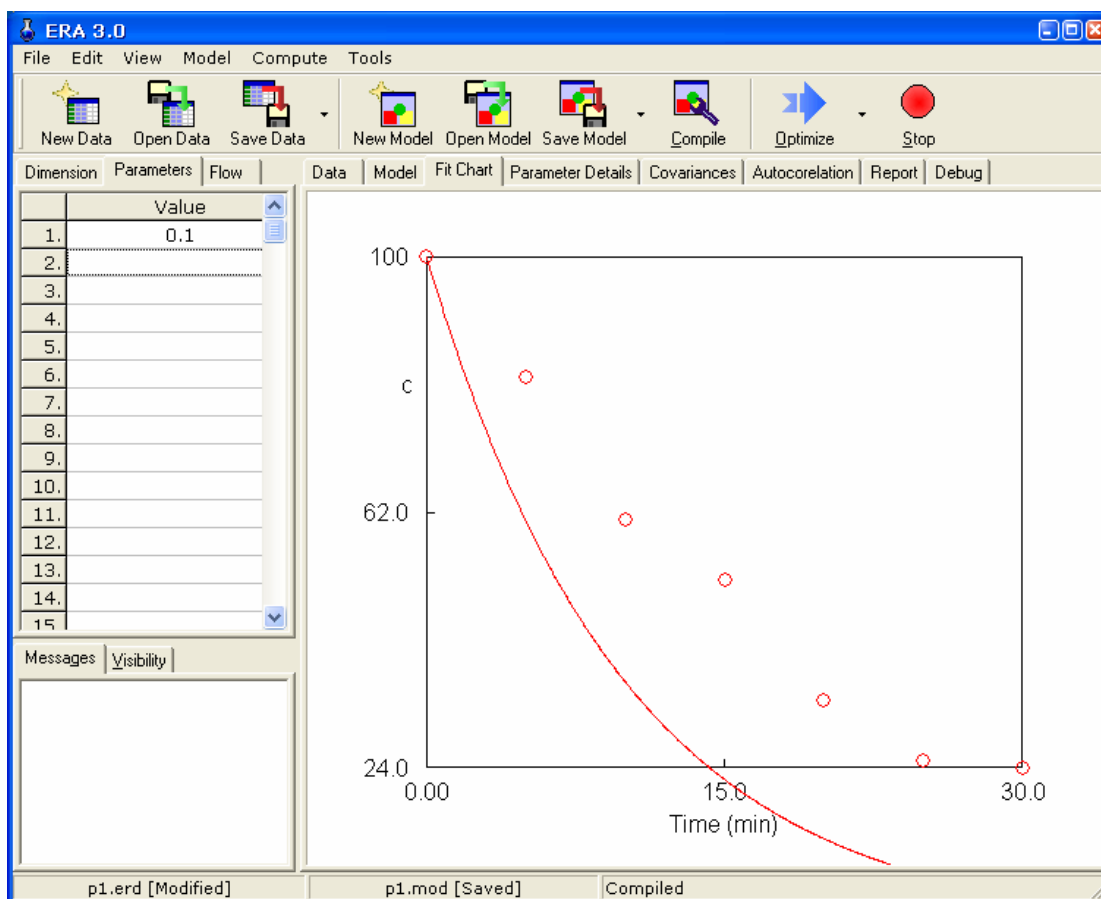
	X[1]	Y[1]	Y[2]	Y[3]
1.	0.00000	100.000		
2.	5.00000	82.0000		
3.	10.0000	61.0000		
4.	15.0000	52.0000		
5.	20.0000	34.0000		
6.	25.0000	25.0000		
7.	30.0000	24.0000		
8.				
9.				
10.				
11.				
12.				

Zadaná data je **možno** uložit do souboru, zatímco model je **nutno** uložit a **zkompilovat** (viz kap. 7.2).

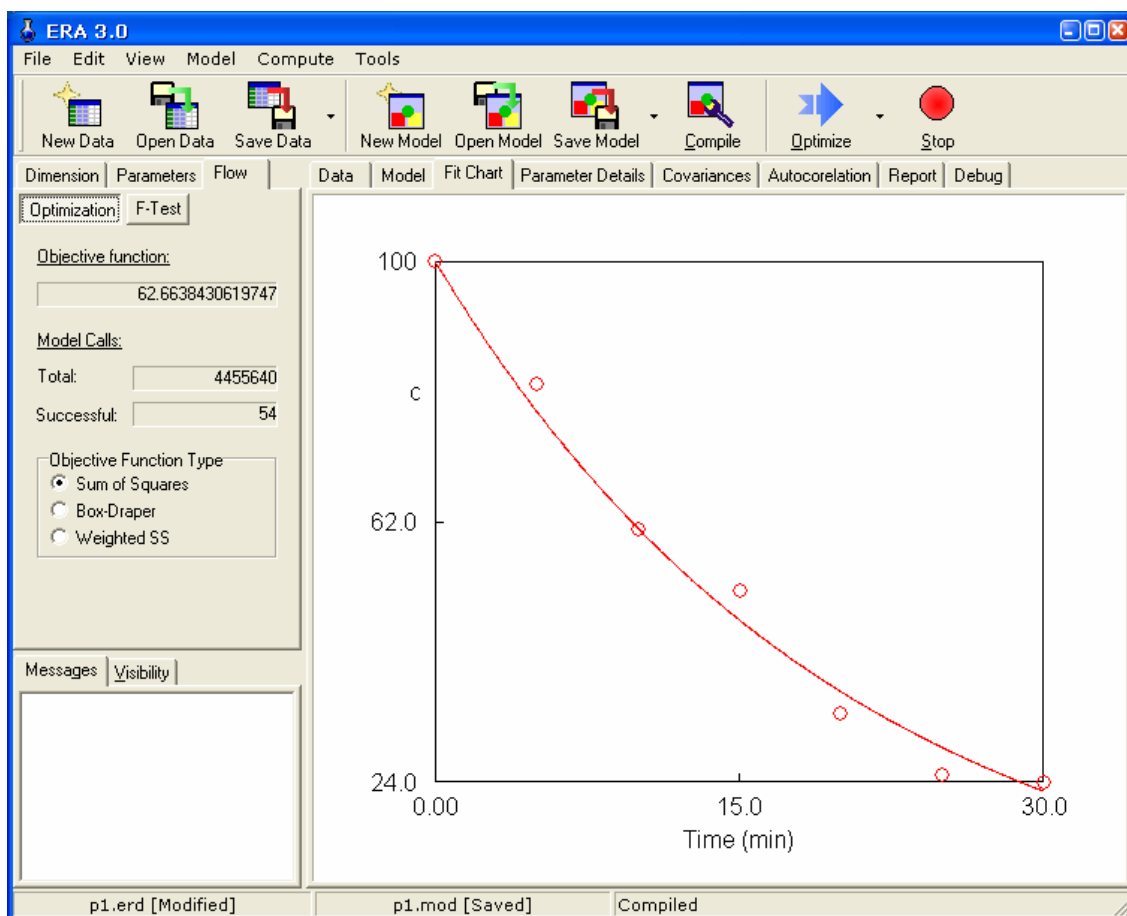
Po specifikaci modelu a experimentálních dat může být účelné přepnout zobrazení sešitu nastavení na kartu *Parameters* a zobrazení hlavního sešitu na kartu *Fitchart* tak, jak je naznačeno na následujícím obrázku.



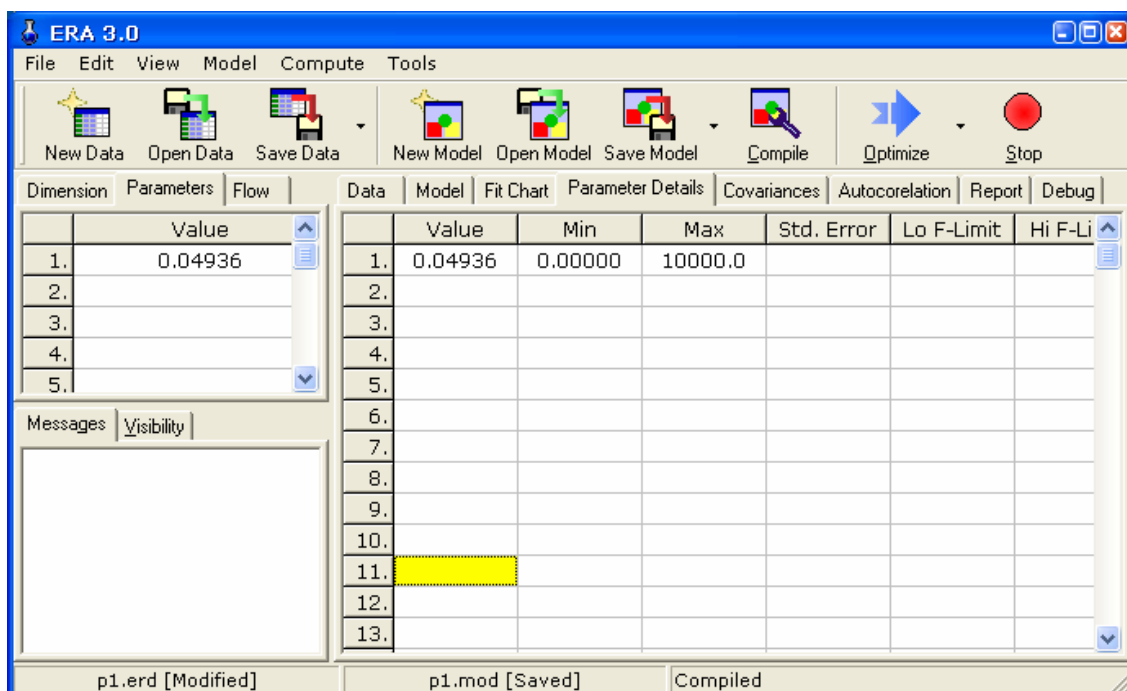
Počáteční nastavené hodnoty parametrů (v tomto případě pouze jediného parametru) jsou uvedeny na kartě *Parameters*. Těmto hodnotám (hodnotě) odpovídá křivka patrná na obrázku v kartě *Fitchart*. Body na obrázku reprezentují zadaná experimentální data. Změníme-li hodnotu parametru, dojde ihned i ke změně grafického znázornění řešení modelu tak, aby odpovídalo aktuální hodnotě parametru. Ukázkou změny zahrnuje následující obrázek



Cílem odhadu optimálních hodnot parametrů (v tomto případě rychlostní konstanty) je nalezení takové jeho hodnoty, která minimalizuje hodnotu účelové funkce – je vzhledem k experimentálním datům nejpravděpodobnější. V programu ERA toho lze dosáhnout spuštěním optimalizace tlačítkem *Optimize* na panelu nástrojů nebo volbou menu *Compute/Optimize*. Optimalizační hodnota poté iteračně mění hodnoty parametrů tak, aby minimalizovala hodnotu účelové funkce. Výpočet je možné kdykoliv ukončit tlačítkem *Stop* na panelu nástrojů a případně znovu spustit opětovným stiskem tlačítka *Optimize*. Tak, jak se v průběhu výpočtu nalézají lepší aproximace řešení, aktualizují se hodnoty parametrů, grafické zobrazení i minimální dosažená hodnota účelové funkce zobrazovaná na kartě *Flow* v sešitu nastavení. Na ní je rovněž možné typ účelové funkce změnit na libovolný typ podle kapitoly 1.1. Poté, co je dosaženo požadované přesnosti aproximace řešení (kdy se již zobrazovaná hodnota účelové funkce nemění nebo se mění jen velmi málo) je třeba výpočet **vždy ukončit** stiskem tlačítka *Stop*. Ukázkou stavu programu po ukončení optimalizace představuje následující obrázek.



Výsledný graf proložení (fitchart) je možné vyexportovat do souboru stiskem pravého tlačítka myši kdekoli na obrázku a výběrem položky *Export* ze zobrazivšího se kontextového menu. Odhadnuté hodnoty parametrů lze nalézt na kartách *Parameters* nebo *Parameter Details* jak znázorňuje následující obrázek.



VÝSLEDEK:

Optimální hodnota rychlostní konstanty k , odhadnutá z experimentálních dat je 0,04936. Pro tuto hodnotu byla dosažena minimální hodnota součtu čtverců reziduálních odchylek $S = 62,66$.

PŘÍKLAD 2: JEDNODUCHÁ NELINEÁRNÍ REGRESE S DIFERENCIÁLNÍ ROVNICÍ

ZADÁNÍ:

Odhadněte optimální hodnotu rychlostní konstanty reakce prvního řádu z dat použitých v předchozím příkladu. Tentokrát jako model použijte diferenciální rovnici:

$$\frac{dc_A}{dt} = -kc_A \quad [14]$$

Zhodnoťte spolehlivost odhadnuté rychlostní konstanty s použitím konfidenčního intervalu a konfidenčních mezí.

ŘEŠENÍ:

Postup první části řešení je velmi podobný předchozímu příkladu. Byl-li soubor experimentálních dat již vytvořen, není nutné zadávat data znovu, ale je možné je tento soubor otevřít volbou menu *File/Open Data File* nebo tlačítkem *Open Data* na panelu nástrojů. Zápis modelu bude mít následující formu:

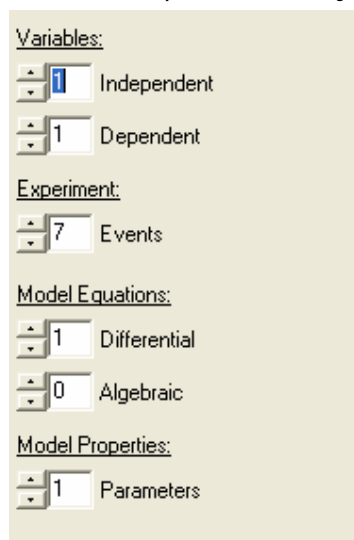
```
language=pascal

declar
end declar

static
end static

dynamic
  dy[1] := -p[1]*y[1];
end dynamic
```

Počáteční podmínka nutná pro řešení diferenciální rovnice se vezme **automaticky z prvního řádku experimentálních dat**. Vzhledem k tomu, že model nyní obsahuje diferenciální rovnici namísto algebraické, je třeba upravit i nastavení na kartě *Dimensions* podle následujícího obrázku.

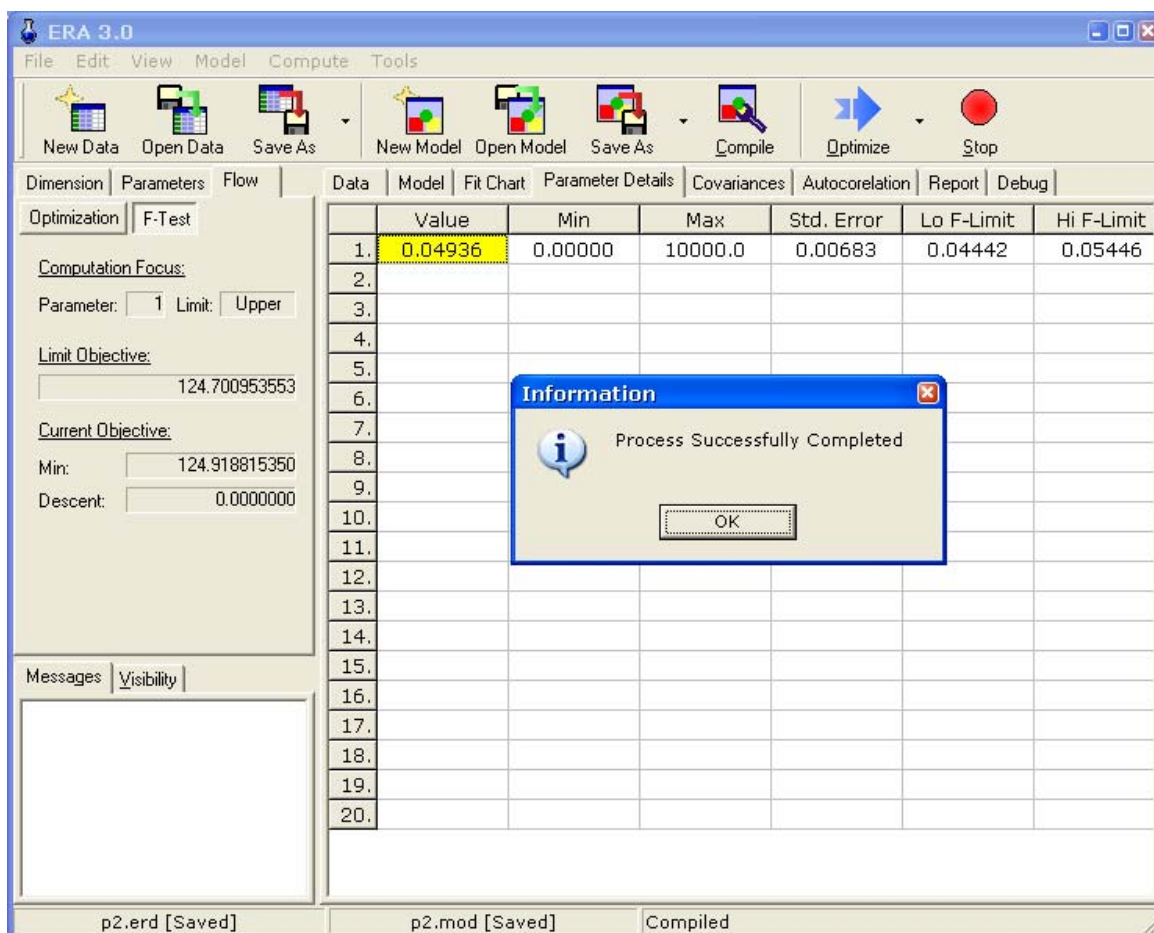


Model je třeba **uložit a zkompilovat** až po nastavení rozměru řešeného problému. Odhad optimální hodnoty parametru je zcela stejný jako v předchozím příkladě a stejné jsou rovněž dosažené výsledky. Není to překvapující protože se jedná o stejná data a stejný model, i když v diferenciálním tvaru.

Po spuštění a zastavení optimalizace můžeme přistoupit k výpočtu intervalových odhadů parametrů pro hodnocení jejich spolehlivosti. Konfidenční interval (viz kap. 1.3.1) spočítáme volbou menu *Compute/Standard Errors*. Výsledky se objeví na kartě *Parameter Details* ve sloupci *Std. Error*. Jedná se o poloviční šířku konfidenčního intervalu, který je tedy podle následujícího obrázku $0,4936 \pm 0,00683$ neboli $\langle 0,4253; 0,5619 \rangle$.

	Value	Min	Max	Std. Error	Lo F-Limit	Hi F-Limit
1.	0.04936	0.00000	10000.0	0.00683		
2.						
3.						
4.						
5.						

Konfidenční meze (viz kap. 1.3.2) lze spočítat volbou menu *Compute/All F-Limits*. Na rozdíl od předchozího výpočtu se jedná o výpočet iterativní, takže může trvat delší dobu. Průběžné výsledky se zobrazují v příslušných sloupcích na kartě *Parameter Details*. Výpočet je ukončen poté, co se objeví zpráva zachycená na následujícím obrázku. Na něm je rovněž vidět, že interval konfidenčních mezí pro rychlostní konstantu je $\langle 0,4442; 0,5446 \rangle$.



VÝSLEDEK:

Optimální hodnota rychlostní konstanty k , odhadnutá z experimentálních dat je 0,04936. Konfidenční interval je $\langle 0,4253; 0,5619 \rangle$, interval konfidenčních mezí $\langle 0,4442; 0,5446 \rangle$.

PŘÍKLAD 3: VÍCENÁSOBNÁ NELINEÁRNÍ REGRESE

ZADÁNÍ:

Ve vsádkovém reaktoru byla sledována jednoduchá reakce 1. řádu $A \rightarrow B$ měřením koncentrace látky A při různých teplotách. Výsledky měření shrnuje tabulka.

t, min	$C_A, \%$		
	T = 303,15 K	T = 313,15 K	T = 323,15 K
0	102,0	98,3	96,9
5	96,0	82,2	61,7
10	83,9	53,8	31,0
20	64,1	38,9	7,6
50	32,8	12,3	1,2
100	17,5	1,4	2,2

Jako model použijte diferenciální rovnici:

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_0 e^{\frac{E(T-T_0)}{RTT_0}} c_A \quad [15]$$

kde k_0 je rychlostní konstanta při teplotě $T_0 = 313,15$ K, E aktivační energie a R plynová konstanta. Odhadněte optimální hodnoty parametrů a vypočítejte jejich intervalové odhady.

ŘEŠENÍ:

Při vícenásobné regresi zkoumáme závislost závisle proměnné na několika nezávisle proměnných současně, v tomto případě na čase a teplotě. Pro správnou funkci programu ERA musíme data uspořádat určitým způsobem. V první řadě je třeba správně nastavit rozměr problému na kartě *Dimensions*.

The screenshot shows the 'Dimensions' configuration window in the ERA software. It contains several sections with dropdown menus and input fields:

- Variables:**
 - Independent: 2
 - Dependent: 1
- Experiment:**
 - Events: 18
- Model Equations:**
 - Differential: 1
 - Algebraic: 0
- Model Properties:**
 - Parameters: 2

Integrace obyčejných diferenciálních rovnic se provádí automaticky podle **první nezávisle proměnné**. Proto v prvním sloupci matice dat musí být čas. Na druhou nezávisle proměnnou – teplotu – zbývá druhý sloupec. Protože model obsahuje diferenciální rovnici, musí být data seskupena podle stejných hodnot nezávisle proměnných kromě proměnné $X[1]$ a v rámci těchto skupin seřazena podle $X[1]$. Důvodem je to, že pro každou skupinu dat je třeba zvolit počáteční podmínku. Pro tento příklad by matice dat měla vypadat následovně:

	X[1]	X[2]	Y[1]	Y[2]	Y[3]	Y[4]	Y[5]
1.	0	303.15	102				
2.	5	303.15	96				
3.	10	303.15	83.9				
4.	20	303.15	64.1				
5.	50	303.15	32.8				
6.	100	303.15	17.5				
7.	0	313.15	98.3				
8.	5	313.15	82.2				
9.	10	313.15	53.8				
10.	20	313.15	38.9				
11.	50	313.15	12.3				
12.	100	313.15	1.4				
13.	0	323.15	96.9				
14.	5	323.15	61.7				
15.	10	323.15	31				
16.	20	323.15	7.6				
17.	50	323.15	1.2				
18.	100	323.15	2.2				
19.							
20.							
21.							

Přepis modelu do syntaxe používané programem ERA představuje následující ukázka:

```

language=pascal

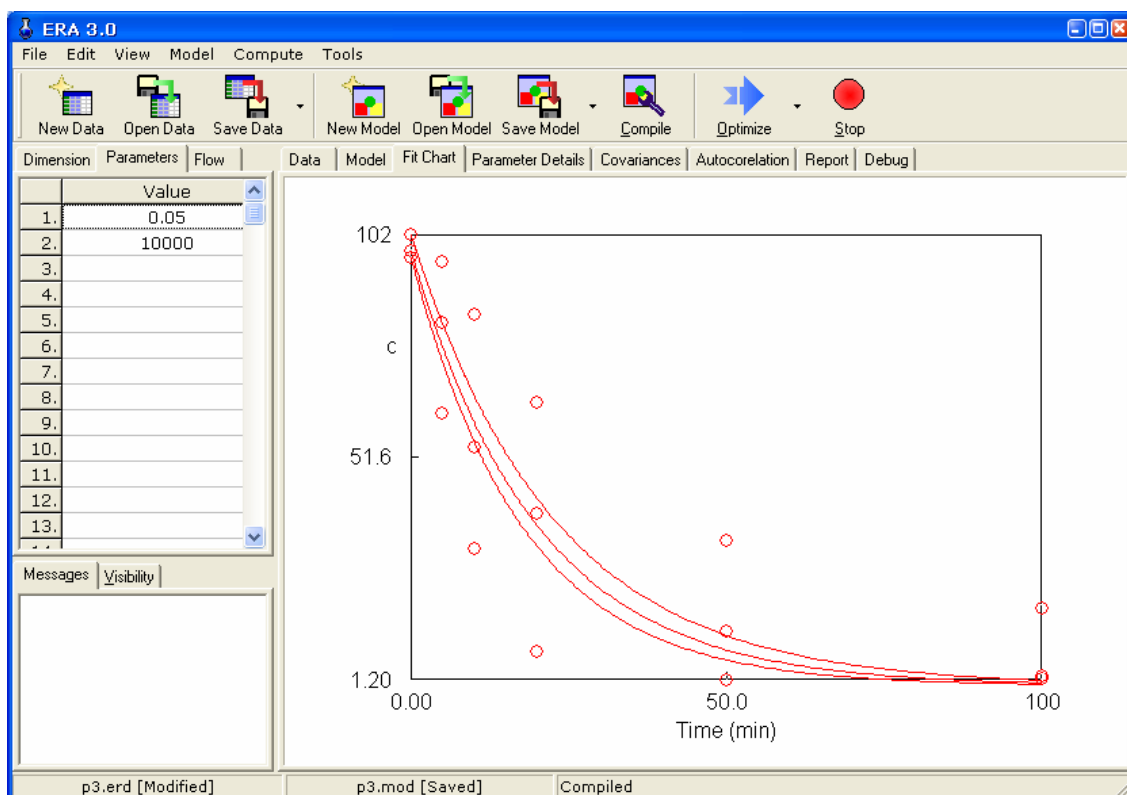
declar
end declar

static
end static

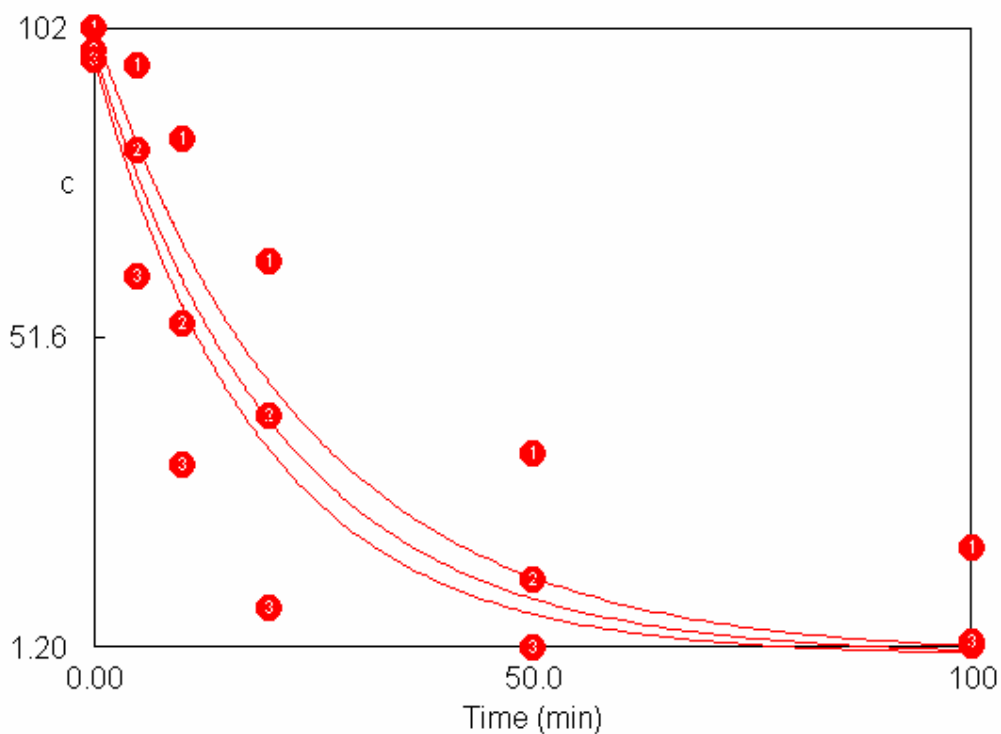
dynamic
  dy[1] := -p[1]*exp(p[2]*(x[2]-313.15)/(8.314*x[2]*313.15))*y[1];
end dynamic

```

Zkusme nyní nastavit počáteční hodnoty parametrů na $p[1]=0,05$ a $p[2]=10000$, a poté se podívat na grafické znázornění experimentálních dat a řešení modelu (viz následující obrázek).



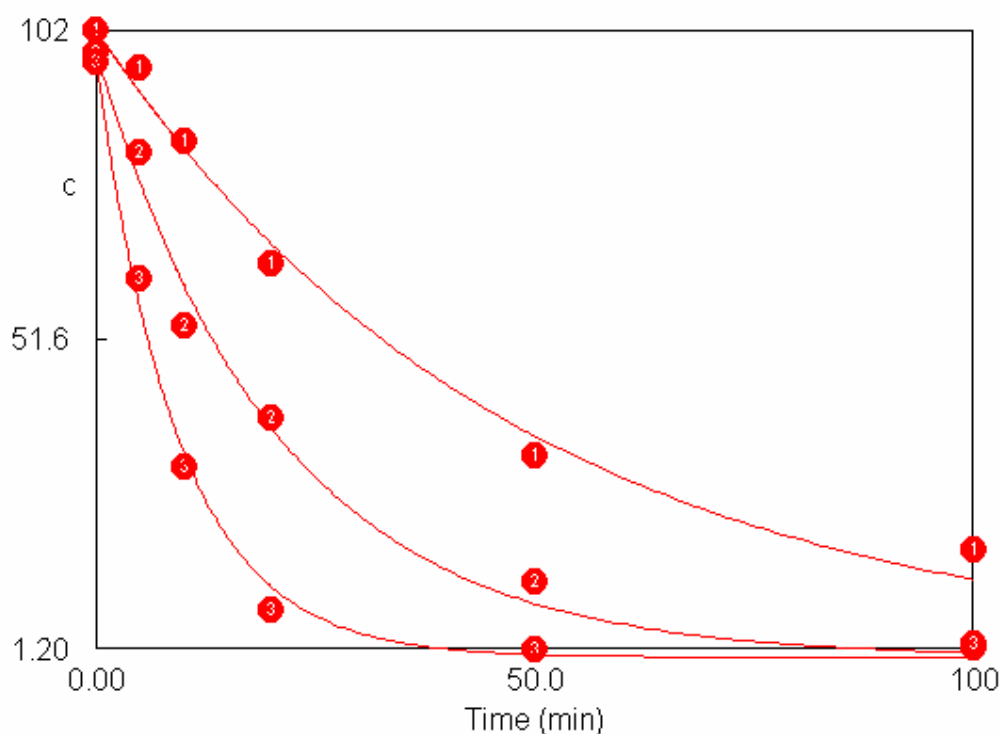
Zde je zřejmé, že program automaticky rozštěpí řešení do 3 větví pro jednotlivé teploty. Není-li zřetelně rozpoznatelné, který bod patří ke které větvi, je možné zapnout funkci číslování větví *Tools/Preferences/Toggles/Show Branch Numbers* (pro správnou funkci je třeba nastavit vyplněné body – viz kap. 6.1.6). Po spuštění dospěje optimalizace do stavu, který zachycuje následující obrázek



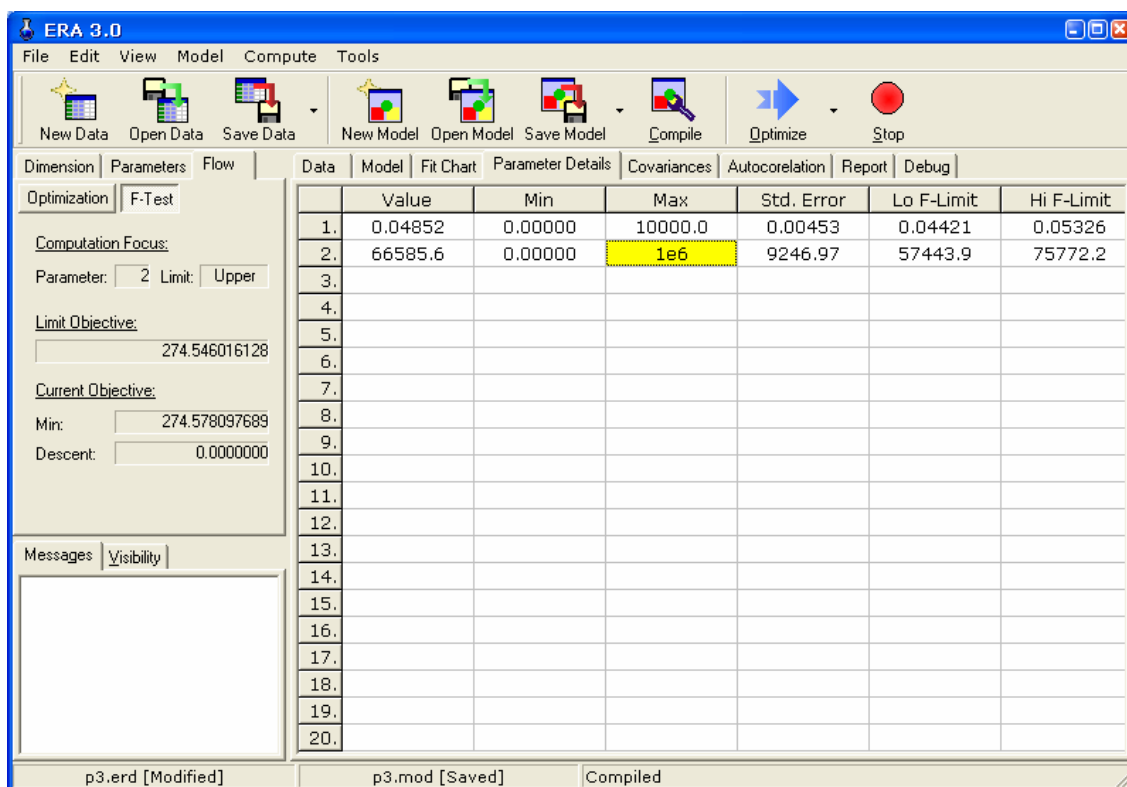
Příčinu předčasného ukončení optimalizace lze nalézt na kartě *Parameter Details* v *hlavním sešitě* (viz obrázek).

Data	Model	Fit Chart	Parameter Details	Covariances	Autocorelation	Report	Debug	
			Value	Min	Max	Std. Error	Lo F-Limit	Hi F-Limit
1.			0.04741	0.00000	10000.0			
2.			10000.0	0.00000	10000.0			
3.								

Hodnota aktivační energie ($p[2]$) zobrazená červeně dosáhla hranice intervalu povolených hodnot, který je pro každý parametr implicitně nastaven na $\langle 0; 10000 \rangle$. K dokončení optimalizace je třeba povolený interval rozšířit, tzn. nastavit horní hranici např. na 10^6 . Poté již optimalizačnímu algoritmu nic nebrání v dosažení optima. Následující obrázek znázorňuje porovnání vypočtených a naměřených dat.



Intervalové odhady se vypočtou příkazy *Compute/Standard Errors* a *Compute/All F-Limits* analogicky jako v předchozím příkladě (viz následující obrázek).



VÝSLEDEK:

Optimální hodnoty rychlostní konstanty k_0 a aktivační energie E odhadnuté z experimentálních dat jsou $0,049 \pm 0,005$ a 67000 ± 9000 (chyba zaokrouhlena na první platné místo a hodnota zaokrouhlena podle řádu chyby). Intervaly konfidenčních mezí jsou $\langle 0,4421; 0,05326 \rangle$ a $\langle 57444; 75772 \rangle$.

PŘÍKLAD 4: VÍCEODEZVOVÁ NELINEÁRNÍ REGRESE A KORELACE PARAMETRŮ

ZADÁNÍ:

Ve vsádkovém reaktoru byla sledována následná heterogenně katalyzovaná reakce $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$. Změřené hodnoty závislosti koncentrace na čase jsou uvedeny v tabulce včetně počátečních koncentrací (počátečních podmínek)

t, min	0	10	14	19	24	34	69	124
c_A	0.1012	0.0150	0.0044	0.0028	0.0029	0.0017	0.0003	0.0001
c_B	0.2210	0.1064	0.0488	0.0242	0.0015	0.0005	0.0004	0.0002
c_C	0.6570	0.6941	0.6386	0.5361	0.3956	0.2188	0.0299	0.0001
c_D	0.0208	0.1977	0.3058	0.4444	0.6055	0.7808	0.9680	0.9982

Jako model použijte soustavu diferenciálních rovnic sestavenou s použitím následujících rychlostních rovnic:

$$r_1 = k_1 c_A \quad [16-a]$$

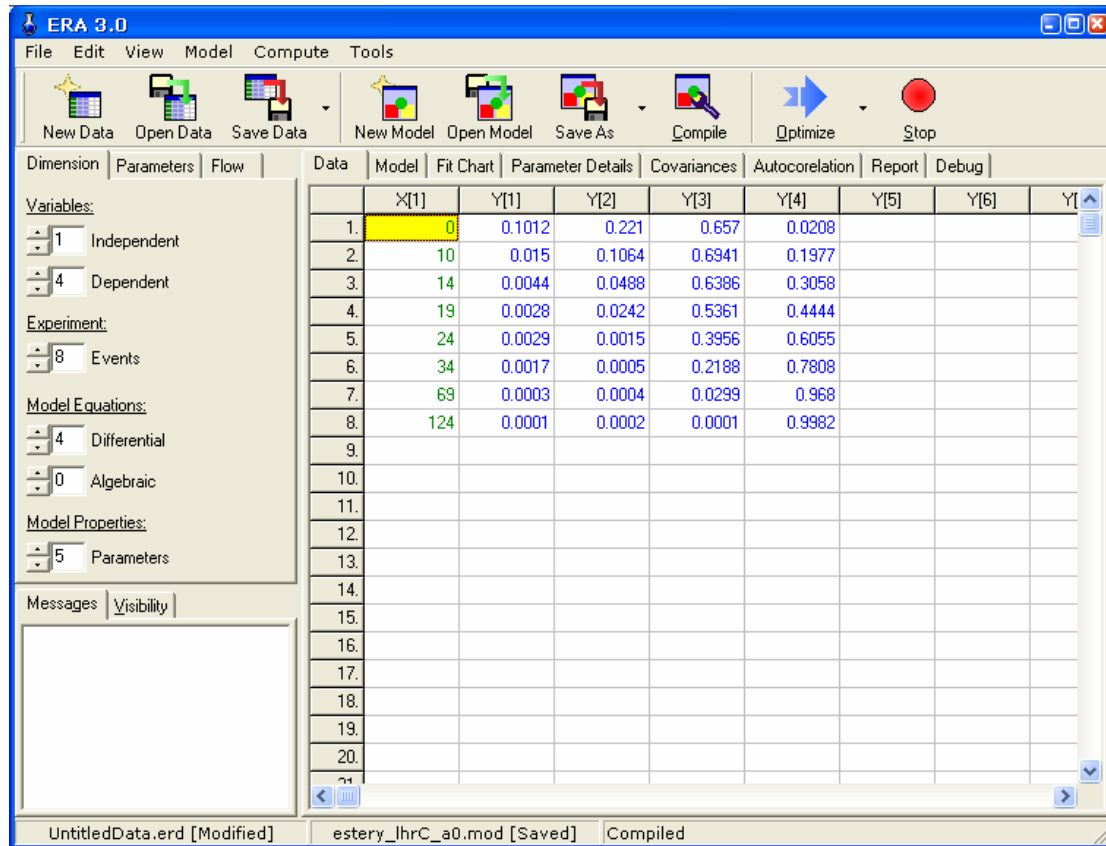
$$r_2 = k_2 \frac{K_B c_B}{K_B c_B + c_C + K_D c_D} \quad [16-b]$$

$$r_3 = k_3 \frac{c_C}{K_B c_B + c_C + K_D c_D} \quad [16-c]$$

Odhadněte optimální hodnoty parametrů, vypočítejte jejich intervalové odhady a korelační koeficienty. Porovnejte oba typy intervalových odhadů v souvislosti s hodnotami korelačních koeficientů.

ŘEŠENÍ:

Při víceodezvové regresi zkoumáme závislost několika závisle proměnných na jedné nebo několika nezávisle proměnných. Jako obvykle je při řešení příkladu programem ERA zapotřebí nejprve specifikovat rozměr systému a zadat experimentální data (viz obrázek).



Matematický model bude mít následující tvar:

```

language=pascal
declar
  r1,r2,r3,ads : Double;
end declar
static

end static
dynamic
  ads := p[4]*y[2] + y[3] + p[5]*y[4];
  r1 := p[1]*y[1]/ads;
  r2 := p[2]*p[4]*y[2]/ads;
  r3 := p[3]*y[3]/ads;
  dy[1] := - r1;
  dy[2] := r1 - r2;
  dy[3] := r2 - r3;
  dy[4] := r3;
end dynamic

```

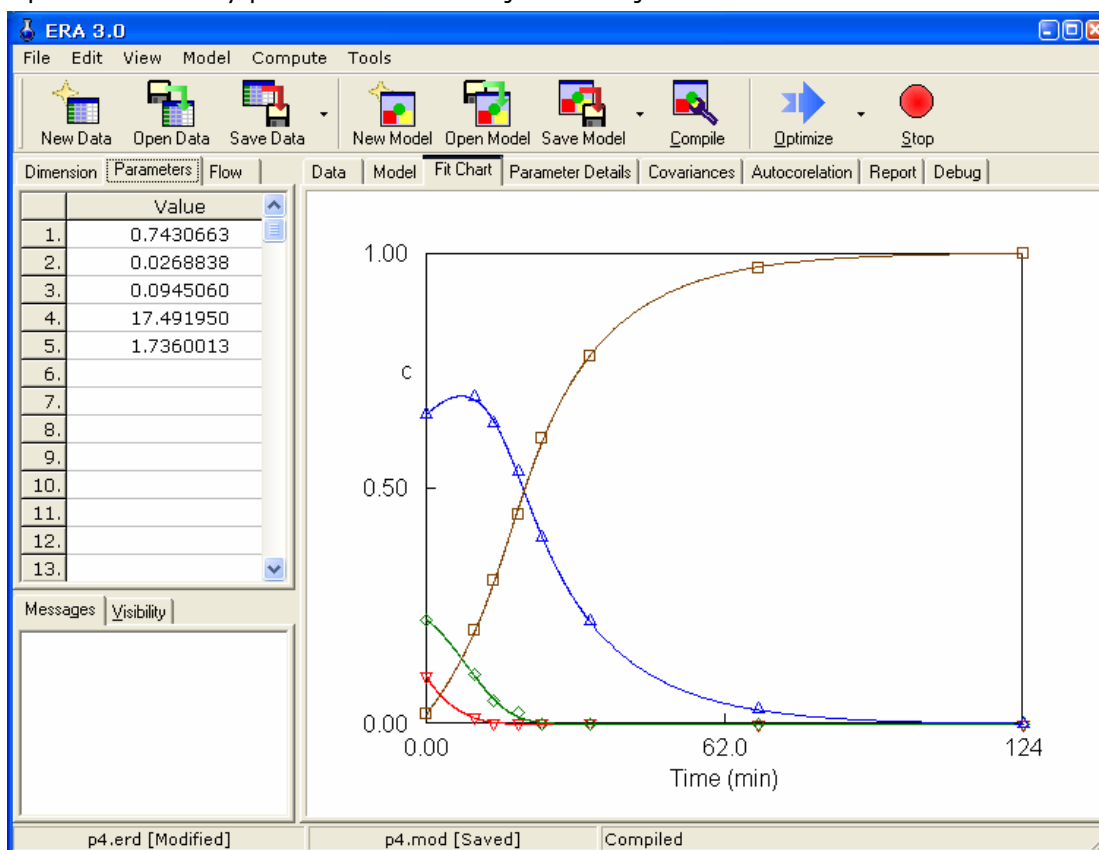
V zápise modelu je vidět, že pro přehlednost i efektivitu zápisu je užitečné si definovat pomocné proměnné.

Optimalizace již u tohoto komplexnějšího modelu trvá déle a její doba se může pohybovat od několik sekund do minuty podle zvolených počátečních hodnot parametrů. Pro zajímavost je možné porovnat rychlost konvergence z různých počátečních hodnot parametrů – tzv. počátečních odhadů.



Optimalizace probíhá několikanásobně rychleji, nemusí-li program zobrazovat grafické řešení po každé úspěšné iteraci. Toto zobrazování je možné vypnout jednoduše přepnutím zobrazení hlavního sešitu na jinou kartu než *Fitchart*.

Optimální hodnoty parametrů znázorňuje následující obrázek:



Po ukončení optimalizace je možné přistoupit k výpočtu intervalových odhadů. Výsledky zachycuje další obrázek.

	Value	Min	Max	Std. Error	Lo F-Limit	Hi F-Limit
1.	0.74307	0.00000	10000.0	0.21791	0.49296	1.22380
2.	0.02688	0.00000	10000.0	0.00238	0.02349	0.03106
3.	0.09451	0.00000	10000.0	0.02493	0.06739	0.16301
4.	17.4919	0.00000	10000.0	6.09065	10.7829	34.0220
5.	1.73600	0.00000	10000.0	0.60263	1.07933	3.36988
6.						
7.						
8.						
9.						
10.						
11.						
12.						
13.						
14.						
15.						
16.						
17.						
18.						
19.						
20.						

Hodnoty uvedené v matici výsledků na kartě *Parameter Details* v hlavním sešitě lze tažením myši označit a zkopírovat do schránky *Ctrl+C* pro další zpracování např. v programu *MS Excel*.

Je patrné, že konfidenční intervaly jsou výrazně užší než je rozpětí konfidenčních mezí. To je možné vysvětlit vysokými korelacemi (viz kap. 1.3.1) mezi parametry a nesymetrickým tvarem konfidenční oblasti (viz např. obr. 3). V programu ERA 3.0 lze korelační koeficienty vypočítat příkazem *Compute/Normalized Covariances*. Výsledky se zobrazí na kartě *Covariances* hlavního sešitu (viz obrázek).

	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.
1.	1.00	-0.09	0.43	0.04	0.49					
2.	-0.09	1.00	-0.73	-0.68	-0.47					
3.	0.43	-0.73	1.00	0.85	0.93					
4.	0.04	-0.68	0.85	1.00	0.75					
5.	0.49	-0.47	0.93	0.75	1.00					
6.										
7.										
8.										
9.										
10.										
11.										
12.										
13.										
14.										
15.										
16.										
17.										
18.										
19.										

VÝSLEDEK:

Porovnání vypočtených intervalových odhadů vede k závěru, že konfidenční intervaly hodnotí parametry jako nerealisticky spolehlivé. Vzhledem k nelinearitě modelu a vysokým korelacím mezi parametry představují konfidenční meze podstatně věrohodnější obraz o spolehlivosti odhadnutých parametrů.

PŘÍKLAD 5: VÝZNAMNOST PARAMETRŮ

ZADÁNÍ:

Ve vsádkovém reaktoru byla sledována následná heterogenně katalyzovaná reakce $A \rightarrow B \rightarrow C$. Změřené hodnoty závislosti koncentrace na čase jsou uvedeny v následující tabulce

t min	0	0.167	0.25	0.5	1	2	3	6.25	7	7.5	9.5
c_A	1.000	0.949	0.927	0.905	0.780	0.638	0.409	0.214	0.178	0.157	0.088
c_B	0.000	0.048	0.069	0.090	0.206	0.337	0.527	0.676	0.695	0.701	0.681
c_C	0.000	0.003	0.004	0.005	0.014	0.026	0.064	0.110	0.128	0.142	0.231

τ_r min	12.5	15	17.5	20	22.5	25	27.5	30	32.5	35
c_A	0.050	0.038	0.032	0.025	0.018	0.013	0.006	0.002	0.001	0.001
c_B	0.599	0.432	0.304	0.239	0.158	0.090	0.047	0.018	0.008	0.002
c_C	0.351	0.530	0.665	0.736	0.824	0.897	0.947	0.980	0.991	0.997

Jako model použijte soustavu diferenciálních. Rychlostní rovnice použijte v následujícím tvaru:

$$r_1 = k_1 \frac{K_A c_A}{1 + K_A c_A + K_B c_B + K_C c_C} \quad [17-a]$$

$$r_2 = k_2 \frac{K_B C_B}{1 + K_A C_A + K_B C_B + K_C C_C} \quad [17-b]$$

Odhadněte optimální hodnoty parametrů, vypočítejte jejich intervalové odhady a korelační koeficienty. Na základě těchto údajů zhodnoťte statistickou významnost parametrů a případně proveďte vyloučení nevýznamných parametrů.

ŘEŠENÍ:

Při řešení příkladu programem ERA je zapotřebí nejprve specifikovat rozměr systému a zadat experimentální data (viz obrázek).

	X[1]	Y[1]	Y[2]	Y[3]	Y[4]	Y[5]	Y[6]	Y[7]
9.	7	0.178	0.695	0.128				
10.	7.5	0.157	0.701	0.142				
11.	9.5	0.088	0.681	0.231				
12.	12.5	0.05	0.599	0.351				
13.	15	0.038	0.432	0.53				
14.	17.5	0.032	0.304	0.665				
15.	20	0.025	0.239	0.736				
16.	22.5	0.018	0.158	0.824				
17.	25	0.013	0.09	0.897				
18.	27.5	0.006	0.047	0.947				
19.	30	0.002	0.018	0.98				
20.	32.5	0.001	0.008	0.991				
21.	35	0.001	0.002	0.997				
22.								
23.								
24.								
25.								
26.								
27.								
28.								
29.								

Matematický model bude mít následující tvar:

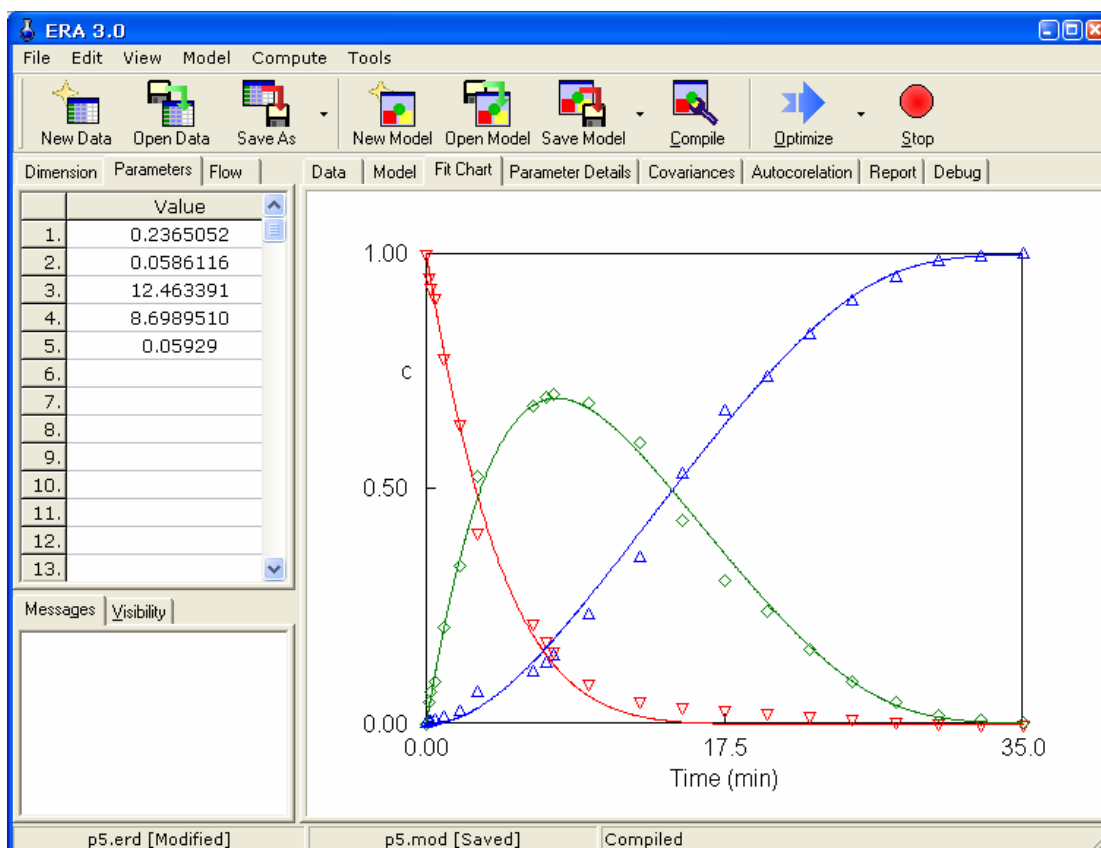
```

language=pascal
declar
  r1,r2,ads : Double;
end declar
static

end static
dynamic
  ads := 1 + p[3]*y[1] + p[4]*y[2] + p[5]*y[3];
  r1 := p[1]*p[3]*y[1]/ads;
  r2 := p[2]*p[4]*y[2]/ads;
  dy[1] := - r1;
  dy[2] := r1 - r2;
  dy[3] := r2;
end dynamic

```

Grafické znázornění řešení pro optimální hodnoty parametrů a jejich intervalové odhady jsou znázorněny na následující dvojici obrázků



	Value	Min	Max	Std. Error	Lo F-Limit	Hi F-Limit
1.	0.23651	0.00000	10000.0	0.00000	0.19187	0.27961
2.	0.05861	0.00000	10000.0	0.00000	0.04899	0.07532
3.	12.4634	0.00000	10000.0	0.00000	6.20533	126.306
4.	8.69895	0.00000	10000.0	0.00000	3.71711	65.7617
5.	0.05929	0.00000	10000.0	0.00000	0.00000	9.39821
6.						
7.						
8.						
9.						
10.						
11.						
12.						
13.						
14.						
15.						
16.						
17.						
18.						
19.						
20.						

Přestože experimentálních dat je v tomto případě dostatek a jejich rozptyl je poměrně malý, je spolehlivost odhadu některých parametrů velmi nízká. Je to způsobeno

vysokými korelacemi parametrů. Navíc je parametr K_C **statisticky nevýznamný** (statisticky nevýznamně odlišný od nuly – viz kap. 1.4) protože rozsah jeho konfidenčních mezí zahrnuje nulu. Nejméně spolehlivé jsou odhady parametrů K_A a K_B , které jsou nejsilněji korelované s nevýznamným parametrem a také mezi sebou navzájem. Nevýznamnost adsorpčního koeficientu K_C je možno interpretovat jako zanedbatelnou sílu sorpce látky C na povrchu katalyzátoru ve srovnání s látkami A a B. Vyloučením parametru K_C z adsorpčního členu byl získán zjednodušený model se čtyřmi parametry.

```

language=pascal
declar
  r1,r2,r3,ads : Double;
end declar
static

end static
dynamic
  ads := 1 + p[3]*y[1] + p[4]*y[2];
  r1 := p[1]*p[3]*y[1]/ads;
  r2 := p[2]*p[4]*y[2]/ads;
  dy[1] := - r1;
  dy[2] := r1 - r2;
  dy[3] := r2;
end dynamic

```

Optimální parametry tohoto zjednodušeného modelu a jejich intervalové odhady ukazuje následující obrázek.

	Value	Min	Max	Std. Error	Lo F-Limit	Hi F-Limit
1.	0.23767	0.00000	10000.0	0.02189	0.20884	0.27499
2.	0.05886	0.00000	10000.0	0.00798	0.04996	0.07342
3.	11.8158	0.00000	10000.0	5.86997	6.50160	28.9243
4.	8.25427	0.00000	10000.0	4.95809	3.92661	23.5657
5.						

VÝSLEDEK:

Vyloučení nevýznamného parametru způsobilo výrazné snížení korelací parametrů. Zjednodušený model byl přitom schopen popsat průběh reakce prakticky stejně dobře jako model původní. Nižší míra korelací parametrů a jejich nižší počet se u zjednodušeného modelu projevuje v poměrně vysoké spolehlivosti odhadnutých parametrů.

SEZNAM SYMBOLŮ

Latinské symboly

a	vektor poloos hyperelipsoidu definujícího prohledávanou oblast	-
B	diagonální matice s prvky $b_{jj} = h_{jj} ^{-1/2}$ (pro $h_{jj} = 0$ je $b_{jj} = 1$)	-
C	variačně-kovarianční matice parametrů	-
F	kritická hodnota Fischerova rozdělení	-
H	matice druhých derivací účelové funkce (Hessián)	-
J	Jacobiho matice parciálních derivací reziduí podle parametrů	-
k	rychlostní konstanta chemické reakce	min ⁻¹
	konstanta úměrnosti	-
K	formální adsorpční koeficient	-
L	věrohodnostní funkce	-
	konfidenční interval	-
M	momentová matice (prvky m_{ij})	-
N_E	počet měření	-
N_P	počet parametrů	-
N_S	počet úspěšných náhodných výběrů	-
N_Y	počet závisle proměnných (odezev)	-
p	hustota pravděpodobnosti	-
p	vektor parametrů	-
p̂	vektor optimálních hodnot parametrů	-
q	gradient účelové funkce	-
r	rychlost chemické reakce	min ⁻¹
	délka kroku optimalizační metody	-
r	krok optimalizační metody	-
r'	rychlost zpětné reakce	min ⁻¹
R	korelační matice (prvky r_{ij})	-
	definiční matice gradientové metody (pozitivně definitní)	-
S_R²	reziduální rozptyl	-
S	účelová funkce	-
t	kritická hodnota studentova rozdělení	-
t	čas	min
v	směrový vektor	-
X_M	matice bodů měření	-
y	vektor závisle proměnných	-
Δy	reziduum	-
Y	matice naměřených hodnot závisle proměnné	-
Z	diagonální matice	-

Řecké symboly

ε	kontrakční koeficient	-
ε	kontrakční vektor	-
κ	kladná konstanta rychlosti konvergence	-
λ	kladná konstanta	-

μ	vektor středních hodnot náhodné veličiny	-
ν	stechiometrický koeficient	-
ρ_{ij}	korelační koeficient	-
θ	stupeň pokrytí povrchu	-
σ^2	rozptyl parametru	-
σ_y^2	rozptyl závisle proměnné, rozptyl měření	-
Σ	kovarianční matice chyb odhadu parametrů (prvky σ^{ij})	-
Σ_y	kovarianční matice chyb měření (prvky σ_y^{ij})	-
ω	parametr hustoty rozdělení náhodných výběrů	-