Aplikace základů automatického řízení pro popis systému síťovací reakce

Rostislav Bořuta

Bakalářská práce
2006

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky
Ústav automatizace a řídicí techniky
akademický rok: 2005/2006

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení:	**Rostislav BOŘUTA**
Studijní program:	**B 3902 Inženýrská informatika**
Studijní obor:	**Automatické řízení a informatika**
Téma práce:	**Aplikace základů automatického řízení pro popis systému síťovací reakce**

Zásady pro vypracování:

1) Seznamte se s mechanismem síťovací reakce hydrolyzovaného kolagenu a způsoby měření průběhu této reakce metodou impedanční spektroskopie.
2) Vytvořte vhodný software v programovém prostředí MATLAB umožňující přehledné zobrazení již naměřených dat, jejich proložení vhodnými analytickými křivkami za účelem systémového popisu.
3) Dále prozkoumejte vhodnost použití jednoho z evolučních algoritmů, a to samo organizujícího se migračního algoritmu SOMA, pro optimalizační úlohu nalezení vhodných parametrů dané regresní funkce.
4) Navrhněte možnosti využití systémového popisu pro oblast zkoumání kinetiky síťovacích reakcí.

Rozsah práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

Balátě, J. (2003). Automatické řízení. BEN – technická literatura, Praha.
Zelinka, I. (2002). Umělá inteligence v problémech globální optimalizace. BEN – technická literatura, Praha.

Hedvig, P. (1977). Dielectric Spectroscopy of Polymers, AKADEMIAI KIADO Budapešť.

Navrátil M. (2002). Instrumentace a zpracování signálů při měření kinetiky síťovacích reakcí pomocí impedanční spektroskopie. Diplomová práce, UTB ve Zlíně, Fakulta technologická, Zlín.

Vedoucí bakalářské práce: **Ing. Milan Navrátil**
Ústav elektrotechniky a měření

Datum zadání bakalářské práce: **14. února 2006**

Termín odevzdání bakalářské práce: **16. června 2006**

Ve Zlíně dne 14. února 2006

prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
pověřený děkan

UNIVERZITA TOMÁŠE BATI VE ZLÍNĚ
Fakulta aplikované informatiky

prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.
ředitel ústavu

ABSTRAKT

Cílem bakalářské práce bylo seznámit se s hydrolyzovaným kolagenem, kinetikou síťovací reakce a způsoby měření pomocí impedanční spektroskopie. Bylo použito programového prostředí Matlab k vytvoření vhodného softwaru pro zobrazování již naměřených dat. Dále byla ověřena vhodnost použití evolučního algoritmu SOMA pro optimalizační úlohu nalezení vhodných parametrů regresní funkce.

Klíčová slova: Kolagen, síťovací reakce, regresní funkce, SOMA, impedanční spektroskopie

ABSTRACT

The purpose of this bachelor thesis was to get acquainted with collagen hydrolysate, reaction kinetics of the cross-linking and with the measuring methods using dielectric spectroscopy method. I have used the software environment Matlab to create the appropriate software tools for displaying and processing the measured data. I have also verified the usability of the evolutional algorithm SOMA for optimization of the parameters of regressive function.

Keywords: Collagen, cross-linking reaction, regressive function, SOMA, dielectric spectroscopy

Rád bych poděkoval touhle cestou vedoucímu bakalářské práce Ing.Milanu Navrátilovi, za odborné vedení při vytváření mé práce, zodpovězení mých dotazů, cenné rady v technickém směru a trvalý zájem na úspěšném dokončení a zvládnutí všech problémů, které se během práce vyskytly.

Souhlasím s tím, že s výsledky mé bakalářské práce může být naloženo podle uvážení vedoucího bakalářské práce a ředitele ústavu a Institutu. V případě publikace budu uveden jako spoluautor.

Prohlašuji, že na celé bakalářské práci jsem pracoval samostatně a použitou literaturu jsem citoval.

Ve Zlíně 16. června 2006 .....

Rostislav Bořuta

OBSAH

ÚVOD **7**

I TEORETICKÁ ČÁST **8**

1.1 KOLAGEN 9

1.1.1 Aminokyselinové složení kolagenu 10

1.2 HYDROLYZÁT KOLAGENU 11

1.2.1 Síťování hydrolyzátu kolagenu 12

1.3 METODA IMPEDANČNÍ SPEKTROSKOPIE 13

1.3.1 Disipační faktor 14

1.4 IDENTIFIKACE SYSTÉMŮ 15

1.4.1 Vyhodnocování a aproximace přechodových charakteristik 16

1.5 METODY REGRESNÍ ANALÝZY 19

1.5.1 Jednoduchá regrese, metoda nejmenších čtverců (MNČ) 21

1.6 EVOLUČNÍ ALGORITMUS SOMA:SAMO-ORGANIZUJÍCÍ SE MIGRAČNÍ ALGORITMUS 22

1.6.1 Co je SOMA? 22

1.6.2 Parametry SOMA algoritmu 22

1.6.3 Závislost SOMA na řídících a ukončovacích parametrech 23

1.6.4 Strategie SOMA algoritmu 24

II PRAKTICKÁ ČÁST **25**

2 ÚVOD PRAKTICKÉ ČÁSTI **26**

2.1 SOFTWAROVÉ PROSTŘEDKY 26

2.1.1 Programové prostředí MATLAB 6.5 26

2.1.2 Microsoft Office 2003 – MS Excel 27

2.2 ČASOVÉ KONSTANTY 28

2.2.1 Relativní rozsah časových konstant a jeho použití 28

2.3 APROXIMACE PŘECHODOVÉ CHARAKTERISTIKY STREJCOVOU METODOU 29

2.4 POPIS PROGRAMU NÁHLED FUNKCE 31

2.5 VYUŽITÍ PROGRAMU NÁHLED FUNKCE PRO NAMĚŘENÁ DATA 33

2.5.1 Určení rovnice nelineární regrese 33

2.5.2 Nelineární regrese pomocí SOMA algoritmu 34

2.5.3 Nelineární regrese s využitím funkcí v Matlabu 39

2.5.4 Nelineární regrese versus SOMA algoritmus jako Optimalizační nástroj 44

3 ROZBOR VÝSLEDKŮ **47**

ZÁVĚR **49**

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY **50**

SEZNAM OBRÁZKŮ **53**

SEZNAM TABULEK **54**

SEZNAM PŘÍLOH **55**

ÚVOD

Analýza experimentálních dat nabývá dneska stále na větším významu a stává se často jedním ze základních přístupů v řadě přírodovědných, technických a sociálních věd. Matematický model systému a jeho získáni není vždy jednoduché. Proto k popisu využíváme experimentálně naměřené data, která pomocí statistických nebo matematických aparátů zpracováváme a výsledky využíváme k systémovému popisu.[3]

Regresní metody jsou metody prokládání funkcí z předem vymezených tříd empirickými daty. Proloženou funkci lze potom využít jednak ke studiu vztahů mezi jednotlivými proměnnými a zákonitostí, kterými se data řídí, jednak k predikci hodnot závisle proměnné v případech, které v datech nejsou zachyceny. Nejjednodušším typem regrese je regrese lineární, která se odedávna používala ve statistice, stejně jako i některé velmi jednoduché typy regrese nelineární, např. polynomiální regrese.[4]

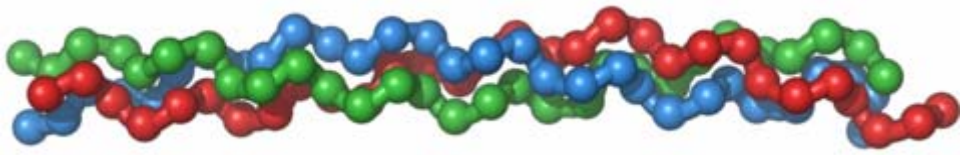
Během posledních 20–30 let se však, díky růstu výkonnosti počítačů, velmi rychle rozvíjí mnohem důmyslnější typy nelineární regrese, např.vypočet parametrů odhadů nelineárních regresí pomocí evolučních algoritmů, regrese založená na umělých neuronových sítích atd. Tyto metody však již nejsou rozpracovávány v rámci statistiky, ale v rámci samostatných disciplin na pomezí matematiky a umělé inteligence. Důsledkem je nedostatek jednotících implementací většího počtu moderních regresních metod, a především velký nedostatek solidního porovnání těchto metod, které by ukazovalo výhody a nevýhody používání jednotlivých typů těchto metod pro různé druhy dat .

Jako cílem mé bakalářské práce se pokusím vyhodnotit data naměřená metodou impedanční spektroskopie a porovnat použití klasických metod nelineárních regresí a metod dnes již známých a účinných jako je například samo organizující migrační algoritmus SOMA.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1.1 Kolagen

Kolagen je hlavní bílkovina pojivové tkáně ve zvířatech a nejhojnější bílkovina v savcích. Jako strukturální bílkovina jsou hlavní organickou složkou podpůrného systému živočišného organismu, kostí, chrupavek, šlach, vaziva a kůže. Kromě toho jsou významnou složkou cévních stěn, bazálních membrán, rohovek a některých orgánů těla.Kolagen je jeden z dlouhých, vláknitých strukturálních bílkovin jehož funkce jsou docela odlišné od těch kulovitých bílkovin takový jako enzymy.[9]



Obr. 1 Tropocollagen trojnásobí spirálu

Kolagen má charakter amfoterního polyelektrolytu, jeho iontové reakce tedy probíhají v závislosti na pH prostředí. Z fyzikálně chemického hlediska patří ke gelům, tj. přechodným koloidním soustavám, jejichž nejdůležitější vlastností je schopnost botnat. V roztoku podléhá progresivní hydrolytické degradaci doprovázené ztrátou mnoha fyzikálních vlastností. Rychlost tohoto procesu roste s teplotou a dále je závislá na pH systému a na vnitřním tlaku roztoku. Při neurálním pH postupuje degradace pomaleji, s pohybem na obě strany se zrychluje. Další z reakcí vedoucích k degradaci kolagenu je oxidační degradace, která je založena na reakci činidel se sacharidy obsaženými v kolagenu.[9]

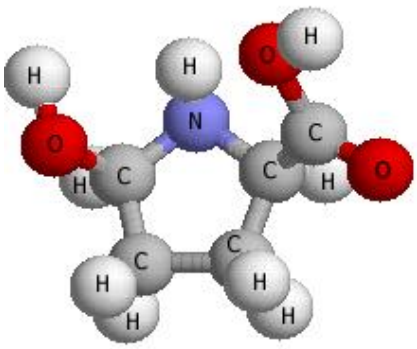
Nejrozšířenější a nejdůležitější je kolagen typu I. Je cennou surovinou pro řadu technických oborů. Důležité jsou farmaceutické výrobky, jako jsou hemostatické plsti a pěny, chirurgické nitě, kolagenové membrány, filtry a pod. Kolagen je i významnou složkou potravinových doplňků, v nichž má profylaktickou i terapeutickou úlohu u chorob klíčových částí pohybového aparátu, tj. kloubů a šlach. Uplatňuje se také v kosmetickém průmyslu v přípravcích pro potlačení projevů stárnutí pokožky.[1]

Tabulka I: Příklad strukturní hierarchie kolagenu a přiřazené obory použití

STRUKTURNÍ ROVINA	***OBOR POUŽITÍ / PRODUKTY***
Plocha (pletivo vláken)	výroba usní, krytí ran, náhrada pokožky, náhrada cév
Vlákna	střívka z kolagenových past, obalové fólie, membrány, prášek na rány
Fibrily	biokompaktibilní plastové nebo keramické materiály, kostní a čelistní chirurgie
Makromolekuly	nativní kolagen, atelokolagen, desamido-kolagen pro kosmetiku a medicínu
Polypeptidy	želatina, klíh, hydrolyzáty kolagenu, expandéry plasmy, kapsule, želatinační prostředky, tenzidy, emulgátory, zahušťovadla, krmiva, hnojiva

1.1.1 Aminokyselinové složení kolagenu

Kolagen obsahuje značné množství glycinu (330 molů na 1 000 molů aminokyselin), který je v molekule rozložený úplně pravidelně, to znamená, že tvoří každou třetí aminokyselinu v sekvenci jednotlivých řetězců. Toto rozložení umožňuje těsné spojení polypeptidických řetězců do trojnásobné šroubovice. Velké množství této aminokyseliny způsobuje vysoký obsah dusíku v kolagenu. Hydroxyprolin je pro kolagen charakteristickou aminokyselinou, protože je obsažen ve větším množství jen v této bílkovině.Velký obsah hydroxyprolinu a prolinu, tzv. iminokyselin, je charakteristický pro aminokyselinové složení kolagenu, podmiňuje jeho sterickou rigiditu.[9]



Obr. 2 Hydroxypropilin

Tabulka II: Procentuální zastoupení hlavních AMK v kolagenu a v hydrolyzátu

AMK	*HYDROLYZÁT KOLAGENU*	*KOLAGEN*
Glycin	33,0	32,7
Prolin	12,5	13,0
Hydroxyprolin	10,0	8,6
Alanin	8,4	11,4
Glutamová kyselina	7,7	7,5
Asparagová kyselina	5,1	4,6
Arginin	4,8	5,2
Serin	4,1	3,1

1.2 Hydrolyzát kolagenu

Výzkumy se dále zaměřují na enzymatickou hydrolýzu bílkovin, která musí být prováděna za vyšších teplot, protože nativní kolagen je jinak vůči působení běžných proteolytických enzymů odolný. Při vyšší teplotě dochází k rozpadu sekundární struktury kolagenu a peptidové segmenty se stanou přístupnými téměř všem proteolytickým enzymům.

Například přeměna kolagenu na želatinu nastává při teplotě okolo 60° C, závisí však na pH, iontové síle, složení roztoku a stupni kovalentního zesíťování kolagenu. Jde o transformaci prvního řádu, pravou fázovou přeměnu krystalické modifikace biopolymeru na amorfní modifikaci. Vlivem této transformace se mění konformace polypeptidických řetězců a zároveň se uvolňuje vazebná energie a vzrůstá entropie. Přeměna je většinou nevratná, po ochlazení se již nevytváří spontánně krystalická kolagenová konformace, i když struktura má do určité míry i vratný charakter.[1]

1.2.1 Síťování hydrolyzátu kolagenu

K modifikaci vlastností kolagenu lze použít řadu chemických činidel. Bylo prováděno síťování pomocí formaldehydu, glyoxalu, glutaraldehydu, hexamethylendiisokyanátu, butadiendiepoxidu, nebo diepoxioktanu. My se budeme orientovat především na aldehydovou kondenzaci. U aldehydů jsou všechny předpoklady rychlé reakce s aminovými, amidovými a karboxylovými skupinami již při mírných reakčních podmínkách. Síťování lze docílit mono- i bi-funkčními aldehydy, jejich reakce se však liší.

Alifatický dialdehyd, glutaraldehyd (GLU), modifikuje kolagen tvorbou můstků za vzniku Schiffovy báze (R_1-C-N=C-$(C)_n$-C=N-C-R_2). Reaguje přednostně s ε–aminoskupinami lysinových zbytků řetězců, ale byly získány také reakce s N-koncovými AMK peptidů, SH skupinami cysteinu a imidazolovými kruhy histidinu. GLU reaguje s ε-NH_2 skupinami, přičemž vniká málo stabilní amin s molární hmotností přibližně 200 g/mol. V přítomnosti nadbytku GLU nastává rychlá konverze na výšemolekulární meziprodukt. Při nízké koncentraci tvoří GLU intramolekulární síťování a při vyšší vznikají dlouhé polymerní řetězce, které způsobují intermolekulární fixaci.

Glutaraldehyd se ukázal jako velmi účinné síťovací činidlo pro želatinu. Již po přídavku 2% vytváří stabilní gely, u nichž nedochází k rozpuštění při teplotě 70° C. S rostoucím přídavkem GLU však dochází ke snížení pevnosti materiálu.

Byly provedeny testy biodegradability u chemicky modifikovaných želatin a ukázalo se, že ta nejvíce závisí na typu použitého síťovacího činidla. Stanovení biodegradability chemicky modifikovaných biopolymerů se ukázalo, jako hlavní klíč k řešení problémů při zkoumání ekologicky šetrných materiálů.

Proces síťování hydrolyzátu kolagenu aldehydy byl sledován pomocí impedanční spektroskopie. Tyto metody byly doposud používány pouze ke sledování procesů souvisejících s vytvrzováním reaktoplastů.[1]

1.3 Metoda impedanční spektroskopie

Impedance je komplexní veličina, která ve zobecněném tvaru Ohmova zákona nahrazuje ohmický odpor.

$$Z(\omega) = \frac{U_0}{I_0} \tag{1}$$

Používá se při práci se střídavým proudem, kdy je nutno kromě ohmického odporu uvažovat také příspěvky kapacity, případně indukčnosti.

Střídavý proud se vyznačuje sinusovým průběhem proudu a napětí o úhel φ.

Rovnice proudu a potenciálu jsou dány vztahy:

$$\begin{aligned} u(t) &= U_0 \sin(\omega t) \\ i(t) &= I_0 \sin(\omega t + \varphi) \end{aligned} \tag{2}$$

Tyto vztahy se dají převést na :

$$\begin{aligned} u(t) &= U_0 \exp(i\omega t) \\ i(t) &= I_0 \exp[i(\omega t + \varphi)] \end{aligned} \tag{3}$$

Po dosazení do rovnic získáme vztah

$$Z = (\frac{U_0}{I_0}) \exp(-i\varphi) = (\frac{U_0}{I_0})(\cos\varphi - i\sin\varphi) \tag{4}$$

který lze rozdělit na reálnou a imaginární část

$$\begin{aligned} Z_{\mathrm{Re}al} &= (\frac{U_0}{I_0})\cos\varphi \\ Z_{\mathrm{Im}ag} &= -(\frac{U_0}{I_0})\sin\varphi \end{aligned} \tag{5}$$

Pro základní elektrické prvky jsou jejich impedanční vztahy dále uvedeny.

Resistance : $Z_R = R$ (6)

Kapacitance : $Z_C = \frac{1}{i\omega C}$ (7)

Induktance : $Z_L = i\omega L$ (8)

Admitance : $Y(\omega) = \frac{1}{Z(\omega)} = \frac{I_0}{U_0}$ (9)

kde: ω je úhlová rychlost (ω=2π**f**), R je odpor [Ω] a **C** je kapacita [F], L je indukčnost [H].Pro grafické znázornění impedančních spekter se nejčastěji používají dva typy diagramů:

• Bodeho diagram, který udává závislost modulu impedance *Z* a fázového úhlu φ na logaritmu frekvence [1]

• Nyquistův diagram, který udává závislost $-Z_{imag}$ na Z_{real}.

Absolutní hodnota nazývaná také modulem impedance je dána vztahem:

$$|Z| = \sqrt{Z^2_{\mathrm{Re}al.} + Z^2_{\mathrm{Im}ag.}} \quad (10)$$

a fázový úhel je dán vztahem:

$$tg\varphi = \frac{-Z_{\mathrm{Im}ag}}{Z_{\mathrm{Re}al.}} \quad (11)$$

1.3.1 Disipační faktor

Při měření impedance se využívá faktor disipace D. Není závislý na velikosti impedance, ale pouze na jejím fázovém posunu.[1] Jeho definice je:

$$D = \mathrm{cotg}(\phi) = \mathrm{tg}(\delta) = \left|\frac{\mathrm{Re}(Z)}{\mathrm{Im}(Z)}\right| = \left|\frac{\frac{R}{1+\omega^2R^2C^2}}{\frac{-\omega R^2C}{1+\omega^2R^2C^2}}\right| = \frac{1}{\omega RC} \quad (12)$$

Protože platí:

$$R = \rho\frac{l}{S} \quad (13)$$

$$C = \varepsilon\frac{S}{l} \quad (14)$$

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \tag{15}$$

kde σ je měrná vodivost [S.m^{-1}], ρ je měrný elektrický odpor [Ω.m], ε je permitivita prostředí, S je plocha [m^2], *l* je vzdálenost [m], můžeme po dosazení zapsat ve tvaru:

$$D = \frac{1}{\omega RC} = \frac{1}{\omega\rho\frac{l}{S}\varepsilon\frac{S}{l}} = \frac{1}{\omega\rho\varepsilon} = \frac{\sigma}{\omega\varepsilon} \tag{16}$$

Z výše uvedeného je patrné, že faktor disipace je závislý na úhlové frekvenci, hodnotě permitivity a vodivosti materiálu, tedy pouze na materiálových vlastnostech.

Další používanou veličinou je ztrátový úhel δ, což je dielektrická vlastnost [1].

materiálu a je definován:

$$\delta = arctg(D) \tag{17}$$

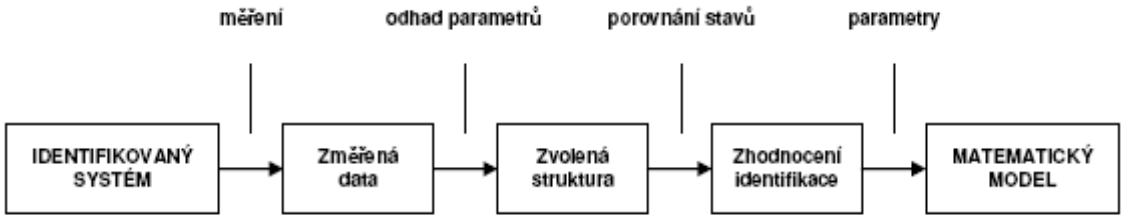
přičemž také platí:

$$\delta = \frac{\pi}{2} - \phi \tag{18}$$

1.4 Identifikace Systémů

Pro teorii automatického řízení má největší význam redukce systému na jeho matematický model, která se nazývá Identifikace.Máme-li k dispozici matematický model systému, potom experimentování se systémem můžeme nahradit experimentováním s jeho matematickým modelem. Při experimentování s modelem napodobujeme nějakou situaci nebo vytváříme podmínky, které mohou nastat u skutečného systému během normálních, resp. havarijních pracovních podmínek. Matematická model zkoumaného systému musí

umožnit jak kvantitativní tak i kvalitativní analýzu chování, tj. analýzu jeho statických i dynamických vlastností. Zkoumaný systém lze identifikovat analyticky nebo empiricky.[5]



Obr. 3 Blokové schéma experimentální identifikace

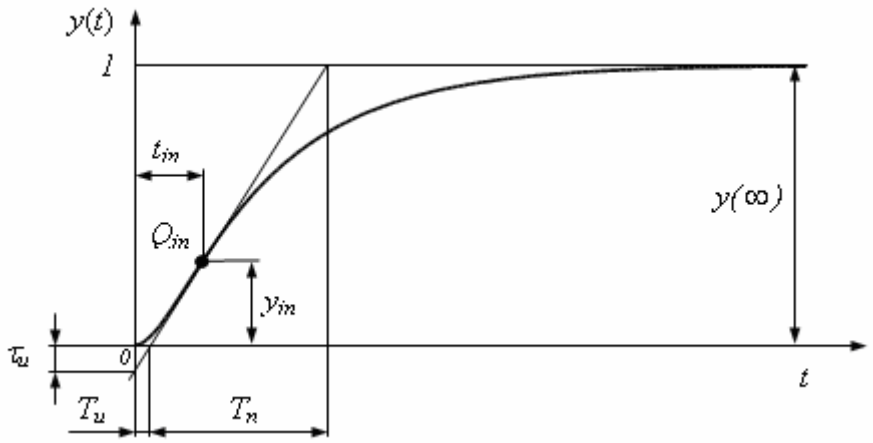
Při analytickém způsobu identifikace, tj. při matematicko-fyzikální analýze, se matematický model daného systému získá sestavením rovnic vyjadřujících vztahy mezi vstupními, výstupními a stavovými signály prvků. Při sestavování rovnic vycházíme z látkové nebo energetické rovnováhy, z rovnic fyzikálních, v našem případě chemických a biologických procesů. Analyticky získaný matematický model lze charakterizovat jako „vnitřní" popis chování zkoumaného systému. Jeho parametry mají fyzikální smysl, popisuje chování ve „větším rozsahu". Při empirickém způsobu identifikace se matematický model určí na základě experimentálně získaných údajů o chování daného systému. Předpokládá se přitom, že hodnoty vstupních a výstupních signálů lze měřit.

Empiricky získaný model lze charakterizovat jako „vnější" popis chování daného systému. Má většinou jednoduchý tvar, parametry se snadno určují, ale často nemívají fyzikální smysl. Takový model je často použitelný v „menším rozsahu" (např. v okolí pracovního bodu a v ustáleném stavu apod.). Při identifikaci složitého systému provedeme nejprve předběžnou identifikaci a poté na základě experimentálně obdržených údajů tento předběžný matematický model upřesňujeme.[5]

1.4.1 Vyhodnocování a aproximace přechodových charakteristik

K dispozici jsme měli již naměřená data, která vyjadřovala časovou závislost Disipačního faktoru při průběhu síťovací reakce hydrolyzovaného kolagenu s různým množstvím glutaraldehydu. Dané křivky se dají chápat jako přechodové charakteristiky uvedeného systému. Jednotkovým skokem je změna koncentrace síťovadla. Systém by se dal aproximovat proporcionální nekmitavou (aperiodickou) regulovanou soustavou. Nejedno-

duší identifikační metodou je určení doby průtahu T_u a doby náběhu T_n Strejcovou metodou. Je možné ji použít pro objekty, které můžeme považovat za statické soustavy. Předpokládáme přitom, že kořeny charakteristické rovnice jsou reálné a záporné. Metoda umožňuje aproximovat naměřené data soustavami n-tého řádu se stejnými časovými konstantami, nebo soustavami druhého řádu s různě velkými časovými konstantami. O způsobu aproximace se rozhodne podle úseků, které vytíná na časové ose tečna, sestrojená v inflexním bodě aproximované přechodové charakteristiky, resp. podle poměru $\tau_u = T_u/T_n$. [8]



Obr. 4 Normovaná přechodová charakteristika statické soustavy vyššího řádu

Postup pro učení aproximační funkce vyšetřované soustavy, je následující:

1) Sestrojíme tečnu v inflexním bodě přechodové charakteristiky a určíme hodnotu $\tau_u = T_u/T_n$.
   Tečnu, tedy i hodnoty T_u, T_n potřebné pro určení τ_u, můžeme určit nejenom graficky, ale také numericky, a to následujícím postupem:
   - Inflexní bod výsledné přechodové charakteristiky se určí pomocí vztahu
   $$\frac{y(t^i) - y(t^{i-1})}{t^i - t^{i-1}} = \max, \quad \text{pro } i = 0, 1, 2, \ldots, m \tag{19}$$
   - Pomocí několika bodové lineární regrese v okolí inflexního bodu se určí rovnice tečny k inflexnímu bodu Q_{in}
   $$y_t = a + bt \tag{20}$$
   - Parametry *a, b* se určí regresním výpočtem. Dále se určí doba průtahu a dobu náběhu podle vztahů
   $$T_u = -\frac{a}{b}, \; T_n = \frac{1}{b} \tag{21}$$
2) Je-li $\tau_u \geq 0{,}104$, zvolíme pro aproximaci soustavu n-tého řádu se stejnými časovými konstantami.

a) Z podílu T_u/T_n určíme z tabulky (Tabulka III) nejbližší řád *n* aproximačního přenosu.

b) Z tabulky (Tabulka) také stanovíme pro určený řád aproximačního přenosu hodnoty T_n/T, T_u/T příp. t_{in}/T, ze kterých určíme průměrnou neznámou časovou konstantu *T*

c) Přenos aproximační soustavy má tvar

$$G(s) = \frac{K}{(Ts+1)^n} \tag{22}$$

3) Je-li $\tau_u \leq 0{,}104$, zvolíme pro aproximaci soustavu druhého řádu s různě velkými časovými úseky t_1 a vypočítáme součet časových konstant.

a) Pro pořadnici $y(t_1)$ = 0,720 odečteme z přechodové charakteristiky časový úsek t_1 a vypočítáme součet konstant

$$T_1 + T_2 = \frac{t_1}{1{,}2564} \tag{23}$$

b) Vypočítáme časový úsek

$$t_2 = 0{,}3574\,(T_1 + T_2) \tag{24}$$

a z naměřené přechodové charakteristiky odečteme příslušnou pořadnici $y(t_2)$.

c) Z grafu závislosti $y(t_2) = f(\tau)$ na obrázku (obr.5) určíme poměr časových konstant

$$\tau = \frac{T_2}{T_1} \tag{25}$$

d) Z rovnic (6) a (8) se určí hledané časové konstanty.

e) Přenos aproximační soustavy má tvar

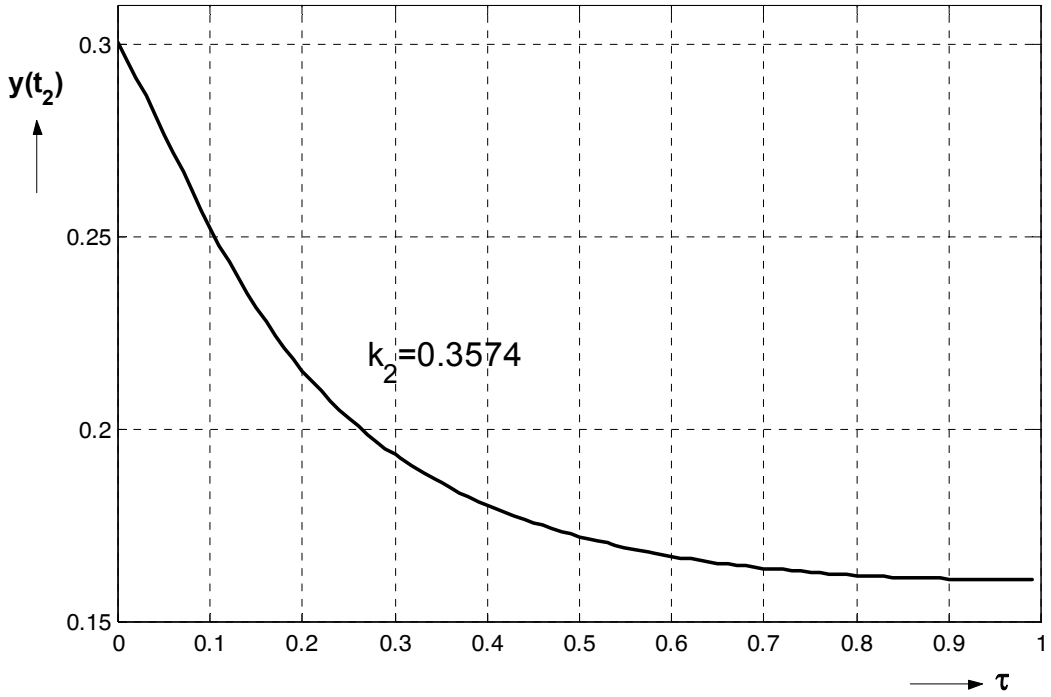
$$G(s) = \frac{K}{(T_1 s+1)(T_2 s+1)} \tag{26}$$

4) Zesílení *K* se v obou případech určí podle vztahu

$$K = \frac{y(\infty) - y(0)}{\Delta u(t)} = \frac{\Delta y(t)}{\Delta u(t)} \tag{27}$$

Tabulka III: Tabulka hodnot pro vyhodnocování statických soustav n-tého řádu se stejnými časovými konstantami

n	***1***	***2***	***3***	***4***	***5***	***6***	***7***	***8***	***9***	***10***
τ_u	0	0,104	0,218	0,319	0,410	0,493	0,570	0,642	0,709	0,771
t_i/T	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
T_u/T	0	0,282	0,805	1,425	2,100	2,811	3,549	4,307	5,081	5,861
T_n/T	1,000	2,718	3,695	4,463	5,119	5,699	6,226	6,711	7,144	7,590



Obr. 5 Graf pro určení poměru časových konstant $\tau=T_2/T_1$ pro normovanou přechodovou charakteristiku

1.5 Metody regresní analýzy

Regresním modelem nazveme matematický model, v němž vyjadřujeme představu o statické závislosti a výchozí předpoklady regresní analýzy. Jako výchozím podkladem regresní analýzu je n dvojic nezávisle a závisle proměnné (xi, yi), které vytvářejí v pravoúhlém souřadnicovém systému tzv. bodový (korelační diagram). Jelikož na proměnnou y působí kromě proměnné x ještě další vedlejší a náhodné vlivy, neleží body (xi,

yi) na křivce, ale kolísají kolem ní. Tuto okolnost zachytíme v matematickém modelu vztahem :

$$y_i = (x_i) + \varepsilon_i \tag{30}$$

Kde ε_i je odchylka způsobená vedlejšími a náhodnými vlivy.

Funkce :

$$\varphi = (x, \beta_0, \beta_1, ..., \beta_p) \tag{31}$$

se nazývá teoretická regresní funkce, $\beta_0, \beta_1, ..., \beta_p$ jsou jejími neznámé parametry, kterým říkáme regresní koeficienty. Nejčastěji se používají funkce, jejichž parametry jsou v lineárním tvaru.

$$\varphi = \beta_0 + \beta_1 g_1(x) + \beta_2 g_2(x) + ... + \beta_p g_p(x), \tag{32}$$

Kde $g_1(x), g_2(x), ...g_p(x)$ jsou funkce proměnné x,které mají známý tvar a neobsahují neznámé parametry.[4]

Základním problémem regresní analýzy je volba vhodné regresní funkce. Regresními funkcemi mohou být různé funkce, které známe z matematiky. Při rozhodování o typu regresní funkce je dobře si uvědomit, že pro praktické účely je nejvhodnější volit regresní funkci co nejvhodnější, která popisuje základní rysy průběhu závislosti. U jednoduché regrese se v praxi nejčastěji uplatňují zejména tyto regresní funkce:

a) přímka

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x \tag{33}$$

b) parabola 2.stupně

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_{11} x^2 \tag{34}$$

c) hyperbola 1.stupně

$$\eta = \frac{\beta_0 + \beta_1}{x}; x \neq 0 \tag{35}$$

d) logaritmická funkce

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 \log x; x \rangle 0 \tag{36}$$

e) exponenciální funkce

$$\eta = \beta_0 \beta_1^{\,x} \tag{37}$$

$$\eta = \beta_0 e^{\beta_1 x} \tag{38}$$

f) mocninná funkce

$$\eta = \beta_0 x^{\beta_1} \tag{39}$$

Neznámé parametry teoretické regresní funkce se odhadují na základě naměřených, resp. pozorovaných údajů. Nahradíme-li neznámé parametry teoretické regresní funkce jejich odhady $b_0, b_1, b_2, ...b_p$, obdržíme empirickou (výběrovou) regresní funkcí [3].

$$\hat{y} = f(x, b_0, b_1, ..., b_p). \tag{40}$$

1.5.1 Jednoduchá regrese, metoda nejmenších čtverců (MNČ)

Empirická regresní funkce by měla co nejlépe vystihnout průběh naměřených (empirických) hodnot. Musí být tedy její parametry $b_0, b_1, b_2, ...b_p$ stanoveny optimálně. Toho lze dosáhnout mnoha principy. Nejzákladnějším principem je Metoda nejmenších čtverců. Volíme-li za výběrové regresní koeficienty $b_0, b_1, b_2, ...b_p$ veličiny, které činí minimální součet kvadrátů odchylek [3].

$$Q = \sum_{i=1}^{n} e_i^{\,2} = \sum_{i=+}^{m} (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} [y_i - f(x, b_0, b_1, ..., b_p)]^2 \tag{41}$$

Říkáme, že jsme výběrové regresní koeficienty stanovili metodou MNČ. Veličina Q jakožto funkce hledaných parametrů $b_0, b_1, b_2, ...b_p$ má jediný extrém, a to minimum.

1.6 Evoluční algoritmus SOMA:Samo-organizující se Migrační Algoritmus

1.6.1 Co je SOMA?

Soma je evoluční algoritmus,jehož činnost je založena na geometrických principech.Tento algoritmus,který pracuje stejně jako ostatní evoluční algoritmy s populací inteligentních jedinců,jenž kooperují na řešení společného úkolu.SOMA od své základní verze doznal několik významných změn až do dnešní podoby, kdy se svou robustností ve smyslu nalezení globálního extrému se vyrovnává takovým algoritmům,jako je například diferenciální evoluce.Vzhledem k tomu,že vlastní jádro SOMA nekopíruje již zmíněné evoluční principy,ale řídí se principy vycházejícími ze spolupráce inteligentních jedinců migrujících v prostoru možných řešení,tak jako jejich biologické protějšky po krajině,byl pro evoluční cyklus známý jako „GENERACE“zvolen název „Migrační kolo“.V přírodě se to dá přirovnat např.mravencům,včelám, predátorům atd.,kteří ve smečce hledají potravu.

SOMA se řadí k mementickým algoritmům. Vlastnost samo-organizace u SOMA algoritmu plyne z faktu, že se jedinci ovlivňují navzájem během hledání lepšího řešení, což mnohdy vede k tomu, že v prostoru možných řešení vznikají skupiny jedinců, které se rozpadají či spojují, putují přes prohledávaný prostor.Jinými slovy si skupina jedinců neboli populace sama organizuje vzájemný pohyb jedinců – odtud samo-organizace [2].

1.6.2 Parametry SOMA algoritmu

Zajímavou částí SOMA algoritmu jsou jeho řídící a ukončovací parametry.Pro kvalitní běh algoritmu se tyto parametry musí nastavit v doporučeném rozsahu. Řídící parametry jsou ty, které mají vliv na kvalitu algoritmu (z hlediska hodnoty účelové funkce) a ukončovací jsou ty .které za předem nadefinovaných podmínek běh algoritmu ukončují. Všechny parametry se musí nadefinovat uživatelem ještě než započne běh algoritmu [2].

Tabulka IV: Význam parametrů SOMA

Parametr	***Doporučený rozsah***	***Poznámka***
Mass	<1.1 , 5>	Řídící parametr
Step	<0.11 , Mass>	Řídící parametr
PRT	<0 , 1>	Řídící parametr
D	dáno problémem	Počet argumentů účelové funkce
NP	<10 ,definuje uživatel>	Řídící parametr
Migrace	<10 ,definuje uživatel>	Ukončovací parametr
AcceptedError	<libovolný , definuje uživatel>	Ukončovací parametr

Závislost kvality běhu SOMA algoritmu na těchto parametrech je veliká.Doporučené rozsahy vycházejí z různých testů SOMA a z jednoduché geometrické interpretace těchto parametrů.

1.6.3 Závislost SOMA na řídících a ukončovacích parametrech

V případě základní verze SOMA je počet ohodnocení účelové funkce dán vztahem

$$N_{eval} = \frac{(NP-1) * Mass * Migrations}{Step} \tag{42}$$

Lze předpokládat, že účelová funkce je definovaná v celočíselném oboru a tudíž konečný i počet hodnot, kterých může nabývat jak účelová funkce, tak její argumenty. V případě „n“ dimenzionální funkce má účelová funkce „n“ argumentů, které by mohly nabývat celočíselných hodnot od 1 do L. Je tedy celkem L^n možných hodnot účelové funkce, z nichž jen jedna (v optimálním případě) je minimální.

Pravděpodobnost, že bude nalezen globální extrém, je na základě platnosti uvedených zjednodušujících předpokladů dána vztahem

$$P_{GE} = \frac{N_{eval}}{L^n} \tag{43}$$

Z toho vztahu je vidět, že se pravděpodobnost zvyšuje zároveň s rostoucím čitatelem. Ten roste pouze tehdy, jestliže se ve vztahu zvyšuje parametr Mass nebo Migrations, nebo když se zvyšuje parametr Step, případně kombinací všech tří možností.

V praktické části se budu zabývat testování těchto parametrů v závislosti na řešení na optimalizaci účelové funkce popisující nelineární závislost naměřených dat.[2]

1.6.4 Strategie SOMA algoritmu

V současné době existuje několik variací základního algoritmu SOMA, pro jejichž obecné označení se používá rovněž výraz „strategie“ místo „variace“ či „verze“, aby se podtrhl fakt kooperace jedinců a geometrického přesouvání populace po hyperploše, neboli prostorem možných řešení. Všechny verze jsou navzájem prakticky plně porovnatelné ve smyslu nalezení globálního extrému. Jsou to strategie:

1. „Všichni k jednomu“ (AllToOne). Tato strategie je používána v mé praktické části pro řešení optimalizaci účelové funkce popisující nelineární závislost naměřených dat.
2. „Všichni ke všem“ (AllToAll). V této strategii neexistuje Leader. Všichni jedinci migrují ke všem ostatním jako ve verzi „AllToOne“ s tím rozdílem, že po dokončení migraci aktuálního jedince se daný jedinec vrací na pozici, kde byl nalezen nejlepší extrém během jeho NP-1 migračních cest vykonaných v jednom migračním kole. [2]

Existují další strategie: „Adaptivně všichni ke všem“ (AllToAllAdaptive),

„Všichni k jednomu náhodně“ (AllToOneRand),

„Svazky“ (Clusters).

II. PRAKTICKÁ ČÁST

2 ÚVOD PRAKTICKÉ ČÁSTI

Úkolem praktické části bylo především vytvoření vhodného softwaru pro přehledné zobrazení již naměřených dat, jejich proložení vhodnými analytickými křivkami za účelem systémového popisu. Dalším cílem bylo, identifikovat chemickou reakci jako systém pro možnou regulaci síťovací reakce.

2.1 Softwarové prostředky

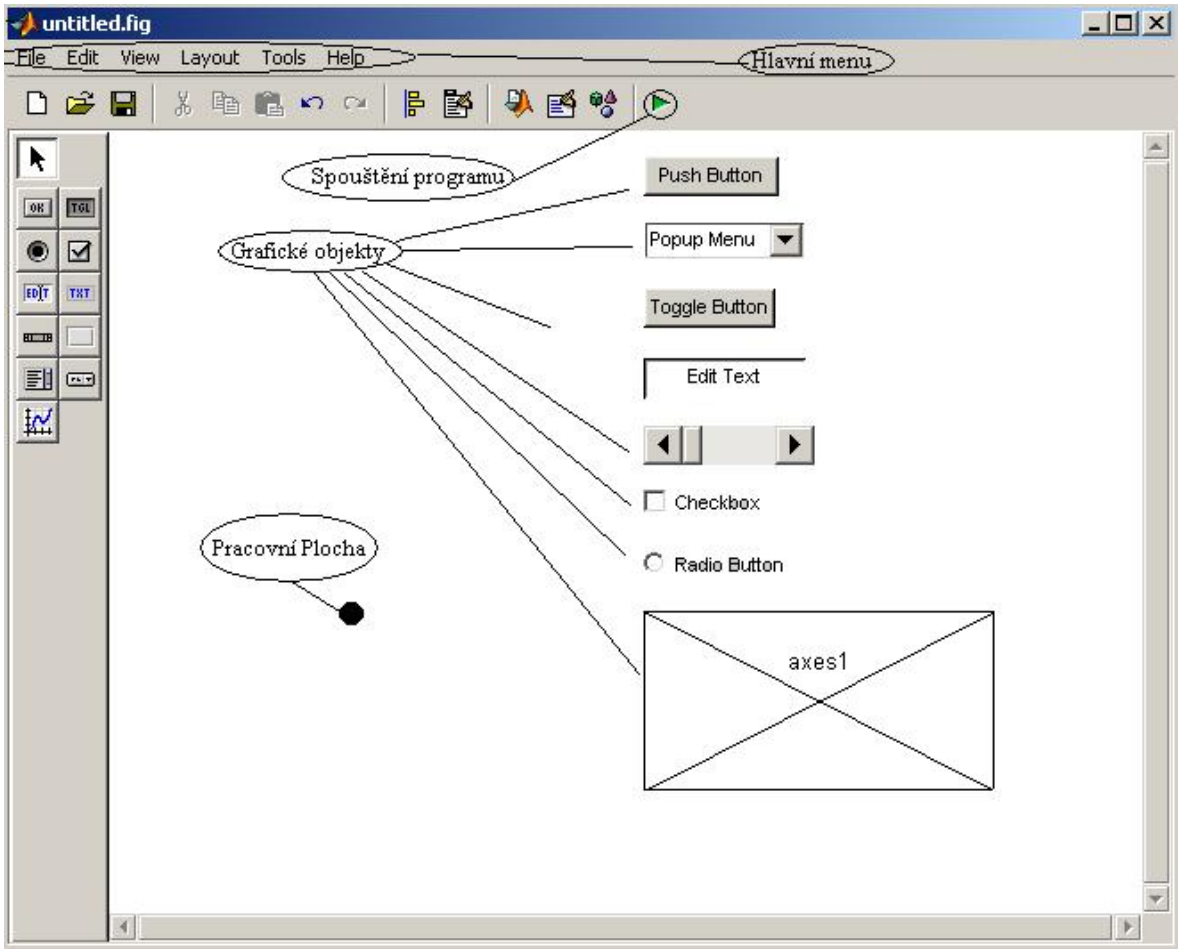
2.1.1 Programové prostředí MATLAB 6.5

Programový systém PC-MATLAB (produkt firmy MathWorks) je velmi efektivním nástrojem pro vědecké a inženýrské výpočty, který obsahuje spoustu matematických operací. Integruje výpočty, vizualizaci a programování do jednoduše použitelného prostředí, kde problémy i řešení jsou vyjádřeny v přirozeném tvaru. Jde o interaktivní systém jehož základním datovým typem je dvourozměrné pole (bez nutnosti deklarovat rozměry). Tato vlastnost spolu s možností zabudovaných funkcí umožňuje řešení mnoha technických problémů, speciálně takových, které vedou na vektorovou či maticovou formulaci, v mnohem kratším čase než je řešení v klasických jazycích jako je C nebo FORTRAN. Typické oblasti použití jsou:

- Inženýrské výpočty
- Vývoj algoritmů
- Modelování, simulace a vývoj prototypů
- Analýza dat a jejich vizualizace
- Inženýrská grafika
- Vývoj aplikací včetně tvorby grafického uživatelského rozhraní GUI [11]

Výhodou je otevřenost, možnost rozšiřování o vlastní funkce. Toolboxy jsou orientované balíky hotových funkcí. Nevýhodu je cenová nákladnost jednotlivých Toolboxů, kdy jejich cena se pohybuje až v tisících korunách. Při tvorbě softwaru bylo využito nápovědy Help, kde se nachází dost podrobné vysvětlení jednotlivých funkcí.

K tvorbě softwaru bylo využito grafického prostředí GUI (Graphical User Interface) Matlabu, kde se navrhla grafická část softwaru a k daným objektům (textová pole, přepínače, tlačítka, atd.) byla přiřazena patřičná funkce. Grafické prostředí je daleko přehlednější a pohodlnější při ovládání programu, než zadávání úkolů přes příkazový řádek.



Obr. 6 Okno grafického prostředí GUI v matlabu

2.1.2 Microsoft Office 2003 – MS Excel

Aplikace Excel 2003 je tabulkový procesor kancelářské sady Office 2003, kdy umožňuje převádět data na informace pomocí účinných nástrojů pro analýzu, komunikaci a sdílení výsledků. Aplikace Excel 2003 usnadňuje týmovou spolupráci, ochranu a kontrolu přístupu k dokumentům. Kromě toho můžete pracovat s daty ve standardním formátu XML (Extensible Markup Language). Je snadným nástrojem pro zobrazování dat a následném vykreslení do grafů.

MS Excel byl využit pro vyhodnocování a aproximaci přechodových charakteristik, při tvorbě tabulek a některých grafů.

2.2 Časové konstanty

Rozsah různých časových konstant procesů může být použit k charakterizování rychlosti odezvy procesu na vstupní poruchy. Rychlé procesy jsou charakterizovány malou hodnotou časové konstanty T1 [s], zatímco pomalé procesy velkou hodnotou časové konstanty. Časové konstanty se vztahují k různým rychlostem průběhu procesů.[6]

Termín *časová konstanta* je víceméně ekvivalentní k termínům doba zpracování, časová charakteristika a relaxační doba. Relaxační doba se často používá ve fyzice, ale je aplikována pouze na procesy prvního řádu a odkazuje na čas, který proces potřebuje k dosažení určitého stupně dokončení. [6]

Tento stupeň je vyjádřen výrazem (1-1/e) = 0.63, jenž je u procesů prvního řádu, dosažen v čase $t = \tau$ [s] . Časové konstanty také mohou být použity k popsání procesů vyšších řádů a nelineárních procesů. V těchto případech je časová konstanta definována jako čas, ve kterém proces dosáhne jistého stupně ustáleného stavu. Procesy vyšších řádů jsou často elegantněji popsány řadou časových konstant. [6]

2.2.1 Relativní rozsah časových konstant a jeho použití

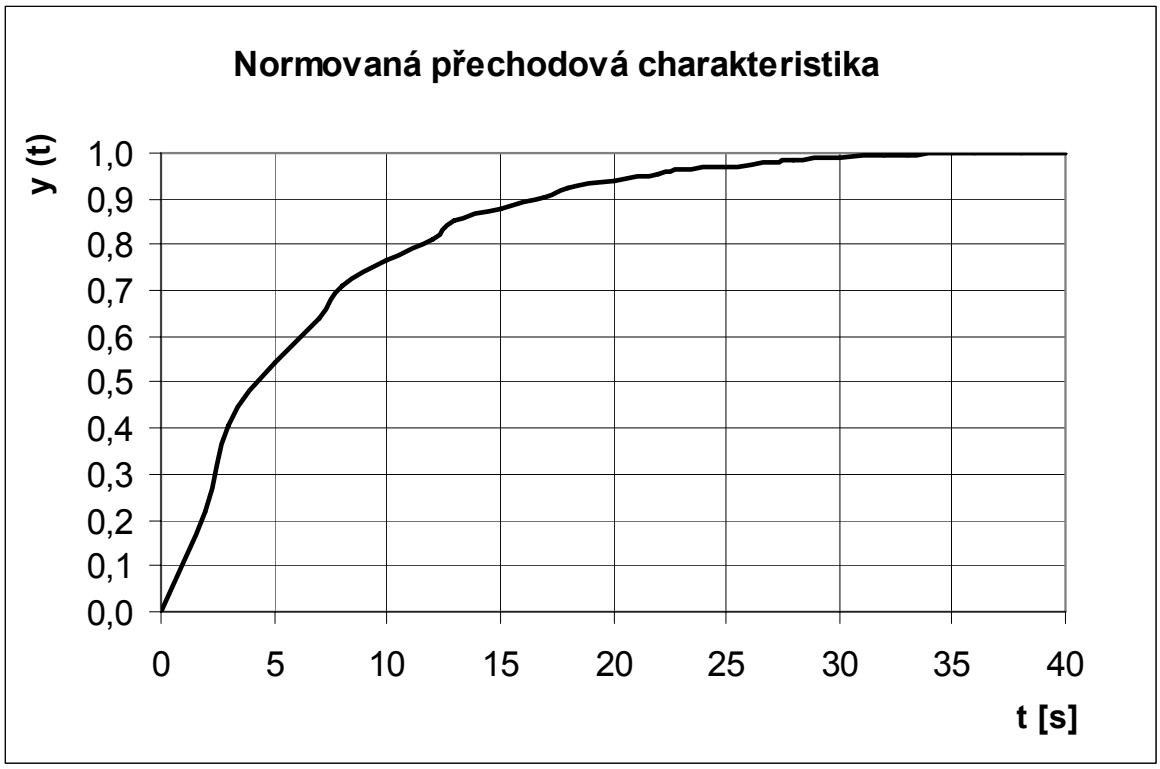
Znalost relativního rozsahu časových konstant ovlivňujících dynamický proces je často velmi užitečná v analýze daného problému. Může být použita k:

- zjištění zda dojde ke změně režimu řízení při náběhu
- redukování komplexity matematických modelů
- určení zda je celková rychlost procesu limitována rychlostí určitého dílčího procesu, jako např. kinetickým omezením nebo při difúzi, míchání, atd.
- zjistit obtížnost numerického řešení při náročných rovnicích

Pokud jsou různé časové konstanty chemického procesu vyneseny do grafu jako funkce systémových proměnných, můžeme tím často zjistit které procesy nás omezují. Na mnoho bezrozměrných proměnných může být pohlíženo jako na míru časových konstant pro rozdílné procesy, což nám může poskytnout jasnější pohled na fyzikální význam těchto proměnných. Měli by jsme brát v úvahu důležitost časových konstant procesů v obecném poli dynamické simulace.[6]

2.3 Aproximace přechodové charakteristiky Strejcovou metodou

Přechodová funkce je odezva systému na jednotkový skok při nulových počátečních podmínkách. Abychom mohli danou síťovací reakci řídit bylo ji zapotřebí identifikovat a určit přenos řízení. K tomu bylo využito znalostí z Teorie automatického řízení a použito strejcovy metody k získání časových konstant T1 a T2. Pro znázornění postupu byl vybrán soubor dat GLU_1, který byl naměřen metodou impedanční spektroskopie. [7]



Obr. 7 Normovaná přechodová charakteristika

Z normované přechodové charakteristiky byla naměřena doba průtahu a doba náběhu, tedy T_u = 0,0861 s a T_n = 7,55287 s.

Poměr τ_u těchto dvou hodnot je:

$$\tau_u = \frac{T_u}{T_n} = \frac{0{,}0861}{7{,}55287} = 0{,}0114 < 0{,}104 \rightarrow$$ jde o soustavu 2. řádu s nestejnými koeficienty.

Z přechodové charakteristiky bylo odečteno pro $y(t_1) = 0{,}720$ hodnota t_1. tedy:

$t_1 = 8$ s

Součet časových konstant $T_1 + T_2$:

$$T_1 + T_2 = \frac{8}{1{,}2564} = 6{,}367\ s$$

Doba t_2 byla určena podle vztahu:

$t_2 = 0{,}3574(T_1 + T_2) = 0{,}3574.6{,}367 = 2{,}2756$ s

Z přechodové charakteristiky se určilo $y(t_2)$:

$y(t_2) = 0{,}273$

Z grafu pro $y(t_2)$ byla odečtena hodnota τ:

$$\tau = \frac{T_2}{T_1} = 0{,}05$$

Časové konstanty byly určeny z poměru τ a součtu časových konstant $T_1 + T_2$, tedy:

$T_1 = 6{,}06$ s, $T_2 = 0{,}303$ s

Konstanta zesílení soustavy byla určena ze vztahu:

$$K = \frac{\Delta y}{\Delta u} = \frac{(0{,}35 - 0{,}34)}{4} = 0{,}01$$

Přenos soustavy 2 řádu je

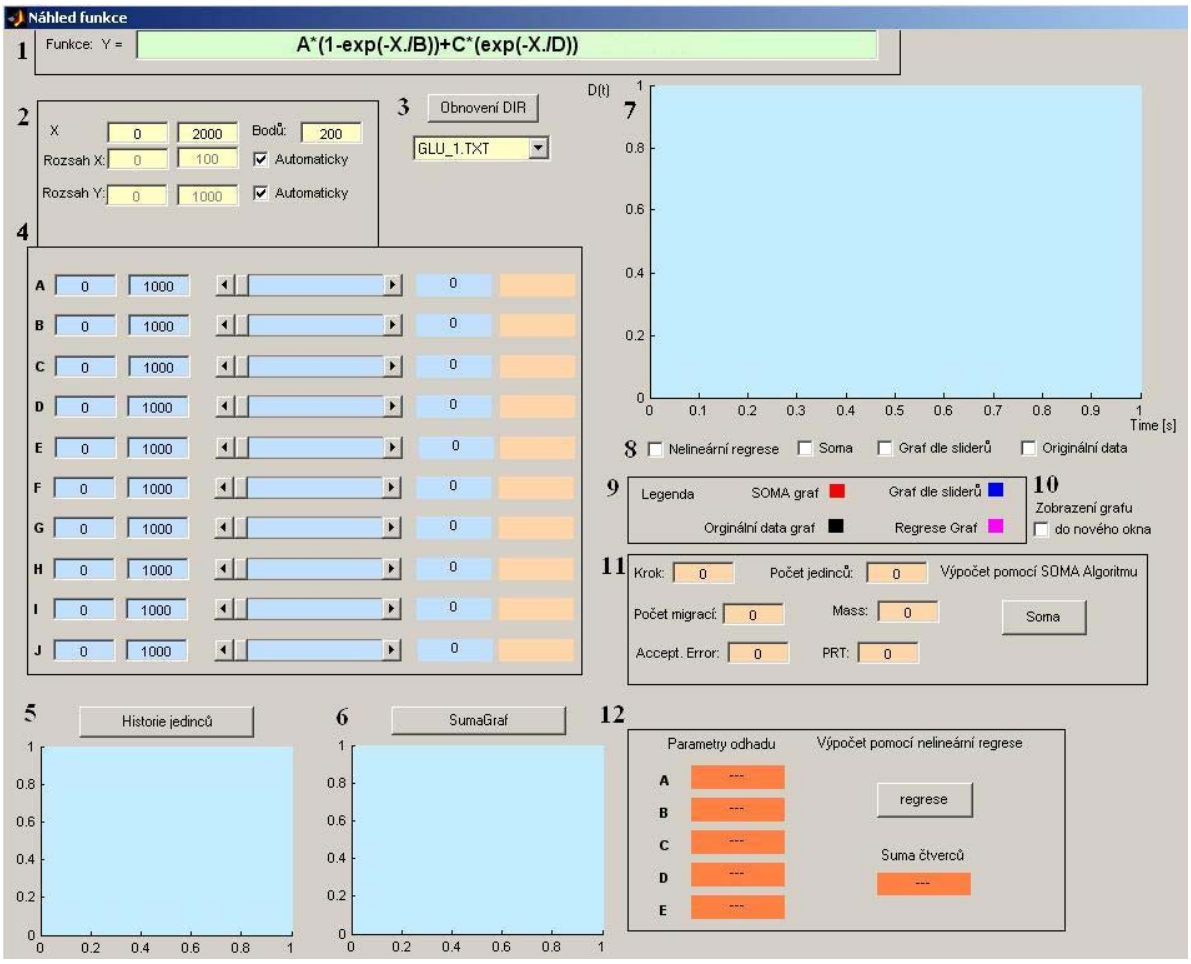
$$G(s) = \frac{0{,}01}{(6{,}06s + 1)(0{,}303s + 1)}$$

Odhady časových konstant T1 a T2 se dále dají zpřesnit metodou nejmenších čtverců. Díky přenosu systému můžeme navrhnout regulátor, který by reguloval přidávání množství síťovadla a tím pádem i celou síťovací reakci hydrolyzovaného kolagenu.

2.4 Popis programu Náhled funkce

Program *Náhled funkce* je velice účinný nástroj pro nelineární regresy, zobrazování naměřených dat, optimalizaci účelových funkcí, hledání vhodných parametrů regresních funkcí a porovnávání výsledků vyhodnocených jak evolučním algoritmem SOMA, tak klasickými regresemi, které vycházejí ze statistických metod. Mezi přednosti programu je jednoduchost v ovládání, díky grafickému prostředí GUI, kde pomocí tlačítek přepínačů a textových polí můžete zadávat vlastní data a následovně je vyhodnocovat pro účel systémového popisu.

Program se skládá ze tří souborů typu M-file a to *nahled_funkce.m* (základní spouštěcí soubor obsahující veškeré propojení s GUI a vlastními funkcemi jednotlivých grafických objektů), *soma_all_to_one.m* (soubor obsahující naprogramovaný algoritmus SOMA), *kriterium.m* (obsahuje základní nastavení minimalizační funkce (MNČ)), *nahled_funkce.fig* (GUI).



Obr. 8 Vizualizace programu Náhled Funkce

Program *Náhled funkce* (obr.8) má dvanáct různých částí. Popis a význam jednotlivých programu *Náhled Funkce*:

- První část: Obsahuje textového pole kde je možno zadávat regresní funkci.
- Druhá část: Umožňuje uživateli zadávat manuální nebo automatický rozsah os (měřítko osy X a Y) a maximální rozsah osy X.
- Třetí část: Načtení vstupních dat. Pro funkčnost je zapotřebí aby patřičná data byla uložena v pracovním adresáři tohoto programu v textovém formátu (*.TXT) a hodnoty zobrazující se na ose X byly v prvním sloupci a Y v druhém odděleny mezi sebou mezerou.
- Čtvrtá část: Nastavení počátečních odhadů parametrů dané regresní funkce. První dva sloupce jsou uživatelem nedefinované rozsahy od min do max hodnoty a posuvník (slider) slouží k nastavení odhadů na určitou hodnotu. Oranžový sloupec nám zobrazuje vypočítané hodnoty odhadů regresní funkce při použití SOMA algoritmu. Posuvníky (slidery) můžeme dále použít k manuálnímu doladění analytické křivky, která se nám vykresluje po zaškrtnutí patřičného pole.
- Pátá část: Náhled na historii a vývoj jedinců při migračních kolech u použití SOMA algoritmu na optimalizaci regresní funkce.
- Šestá část: Náhled na vývoj sumy z funkce minimalizace která je definovaná jako minimální rozdíl naměřených a vypočítaných hodnot (MNČ).
- Sedmá část: Hlavní osy pro zobrazování naměřených, vypočítaných dat.
- Osmá část: Jednotlivé volby typů regrese pro zobrazování na hlavních osách X a Y je zapotřebí zaškrtnou ten typ, který chceme zobrazit.
- Devátá část: Legenda popisující regrese a jejich barvy
- Desátá část: Pro přehlednější a efektivnější vykreslení regresí do nového okna.
- Jedenáctá část: SOMA a jeho počáteční parametry. Jak již bylo řečeno v teoretické části je vhodné použít počáteční parametry SOMA algoritmu podle doporučení a to v tabulce (Tab.IV).
- Dvanáctá část: Nelineární regrese pomocí funkce „fittype“obsažená v Curve Fitting Toolbox, kde první sloupec nám zobrazuje vypočítané parametry regresní funkce a Suma čtverců zobrazuje hodnotu z minimalizační funkce MNČ.

2.5 Využití programu Náhled funkce pro naměřená data

Jako vstupní data byly použity naměřené hodnoty při síťovací reakci hydrolyzovaného kolagenu s glutaraldehydem. Většinou šlo o systémy druhého řádu. Dané křivky se dají chápat jako přechodové charakteristiky uvedeného systému. Jednotkovým skokem je změna koncentrace síťovala.

2.5.1 Určení rovnice nelineární regrese

Rovnice nelineární regrese byla zvolena tak, aby se podobala co nejlépe tvaru průběhu naměřených dat. Jako základní vypozorovaná vlastnost naměřených dat byla podoba s exponenciálními funkcemi. Kdy první část naměřených dat by se dala popsat matematickým modelem:

$$Y_1(t) = A * (1 - e^{\frac{-t}{B}}) + C_1 \tag{44}$$

Kde A,B,C_1 jsou parametry neznámé a t je čas [s]. Parametr B se dá chápat jako časová konstanta T1 [s].

Druhá část za přechodovou oblastí se dá popsat matematickým modelem:

$$Y_2(t) = C_2 * (e^{\frac{-t}{D}}) + E \tag{45}$$

Kde C_2,D,E jsou parametry neznámé a t je čas [s]. Parametr D se dá chápat jako časová konstanta T2 [s].

Celý průběh by se dal tedy popsat výslednou funkcí Y(t), která by byla daná součtem obou funkcí $Y_1(t)$ a $Y_2(t)$ z rovnic (44) a (45).

$$Y = A * (1 - e^{\frac{-t}{B}}) + C * (e^{\frac{-t}{D}}) + E \tag{46}$$

Kde A,B,C,D,E jsou parametry regresní funkce, které se snažíme zjistit. Parametr B a D můžeme chápat jako časové konstanty (T1 [s] a T2 [s]).

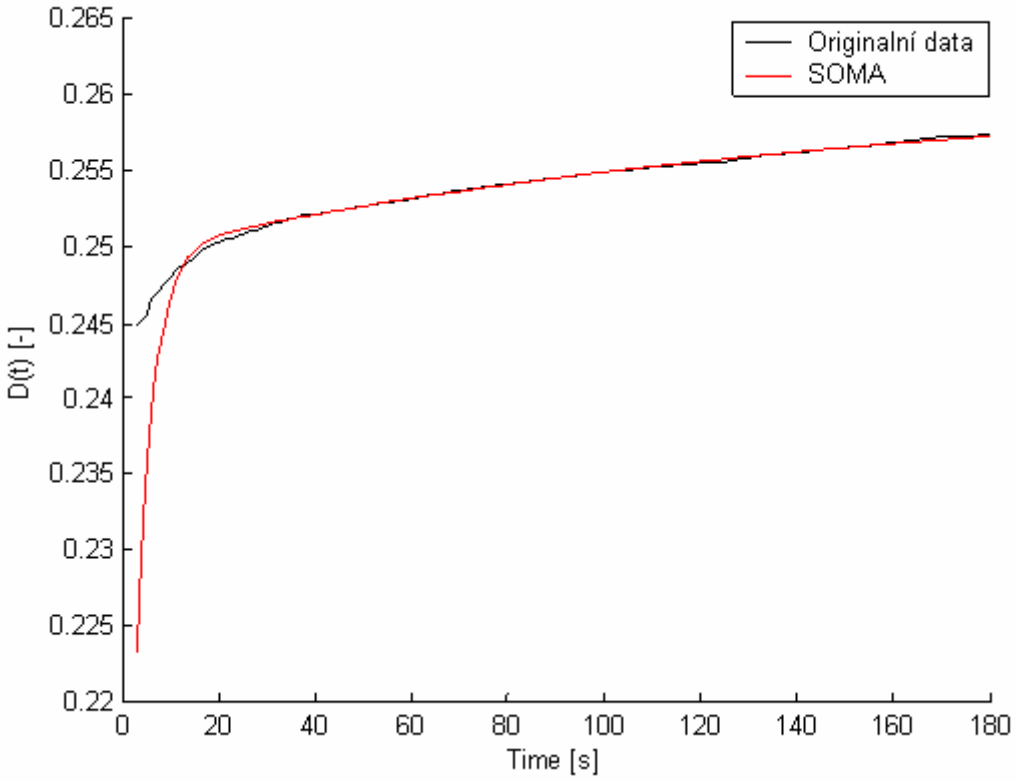
Jako další funkce, která byla vhodnou regresní funkcí pro popis celé oblasti našich naměřených dat byla funkce podobná (46), ale upravená, aproximovaná Taylorovým rozvojem v řadu. Jako příklad :

$$\begin{aligned} Y &= A*(1-e^{\frac{-t}{B}})+C*e^{-\frac{t}{D}}+E*(e^{\frac{-t}{F}})+G \\ Y &= A*(1-e^{\frac{-t}{B}})+C*e^{-\frac{t}{D}}+E*(1-\frac{t}{F})+G \end{aligned} \tag{47}$$

2.5.2 Nelineární regrese pomocí SOMA algoritmu

Základní nastavení vstupních parametrů SOMA algoritmu bylo zvoleno podle doporučeného rozsahu (viz.Tab.IV). Jako vstupní data se použilo 6 souborů s naměřenými daty.

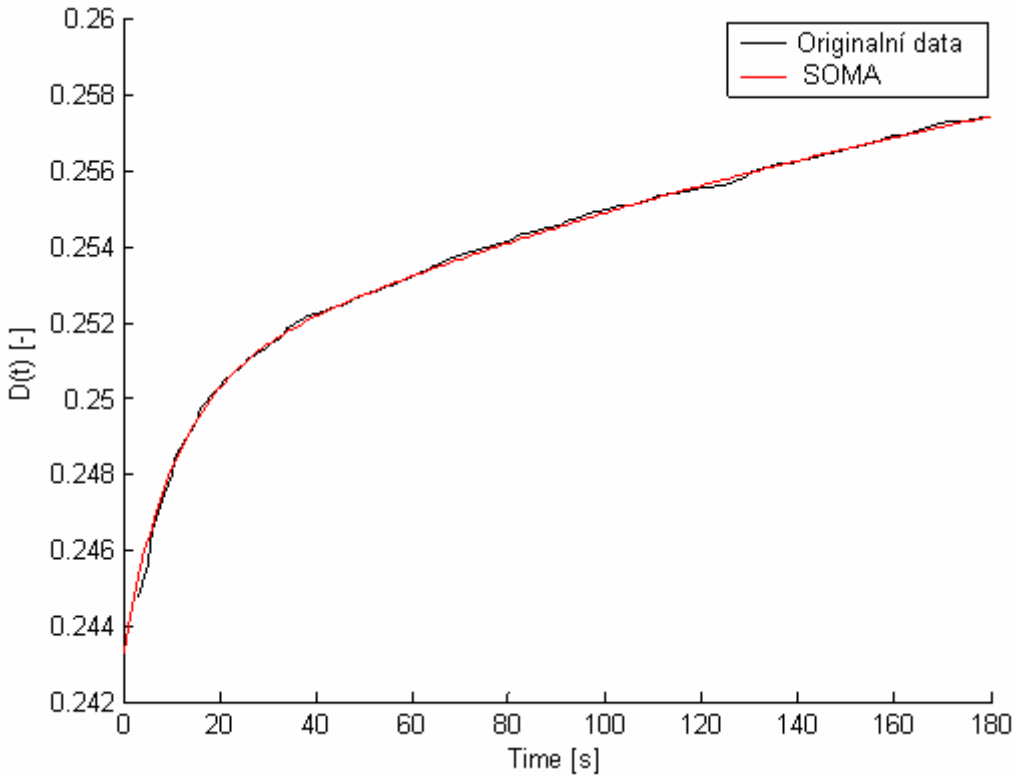
Při použití SOMA algoritmu je velmi důležité nastavení mezních intervalů pro dané hledané parametry. Určování počtu jedinců a migračních kol je velice závislé na čase, který SOMA potřebuje k tomu aby prošel všechny zvolené migrační kola. Tím pádem jako postačující hodnoty pro naše měření byly zvoleny: Počet jedinců = 20 a Počet migrací = 20.



Obr. 9 Graf znázorňující nelineární regresi pomocí SOMA algoritmu

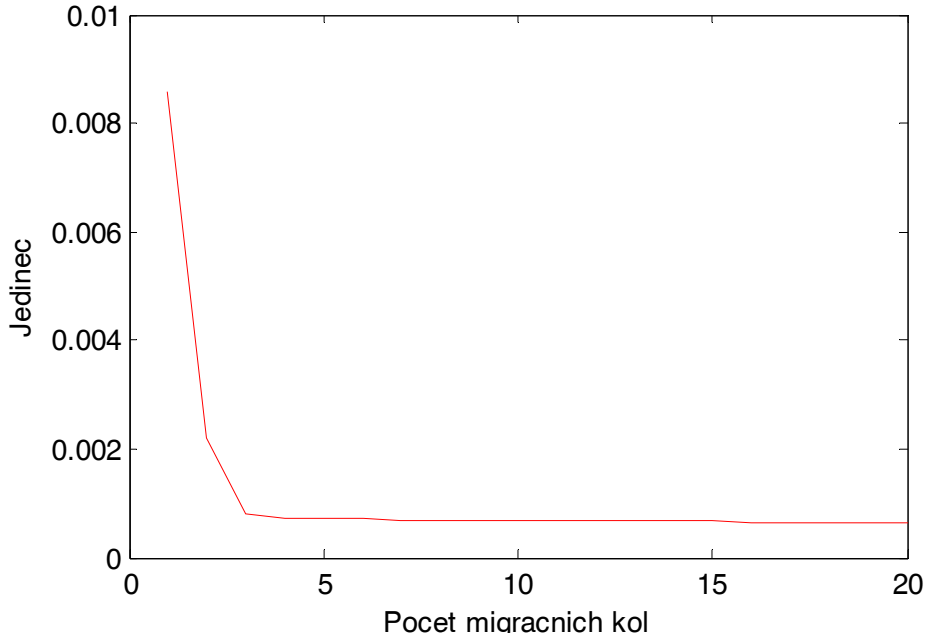
Na obrázku (obr.9) je znázorněna nelineární regrese pomocí SOMA algoritmu. Proložení analytické křivky danou regresí nebylo přesné, jelikož byly parametry odhadů voleny ve velkém rozsahu. Aby k dané chybě nedocházelo je zapotřebí zpřesnit odhad parametrů.

Jako základní odhad parametrů lze využít buď manuálního vykreslení analytické křivky pomocí posuvníků a nebo si nechat spočítat parametry nelineární regrese pomocí funkce fittype a zvolit výsledné hodnoty regrese jako vstupní hodnoty SOMA algoritmu.Výsledkem je obrázek (obr.10).

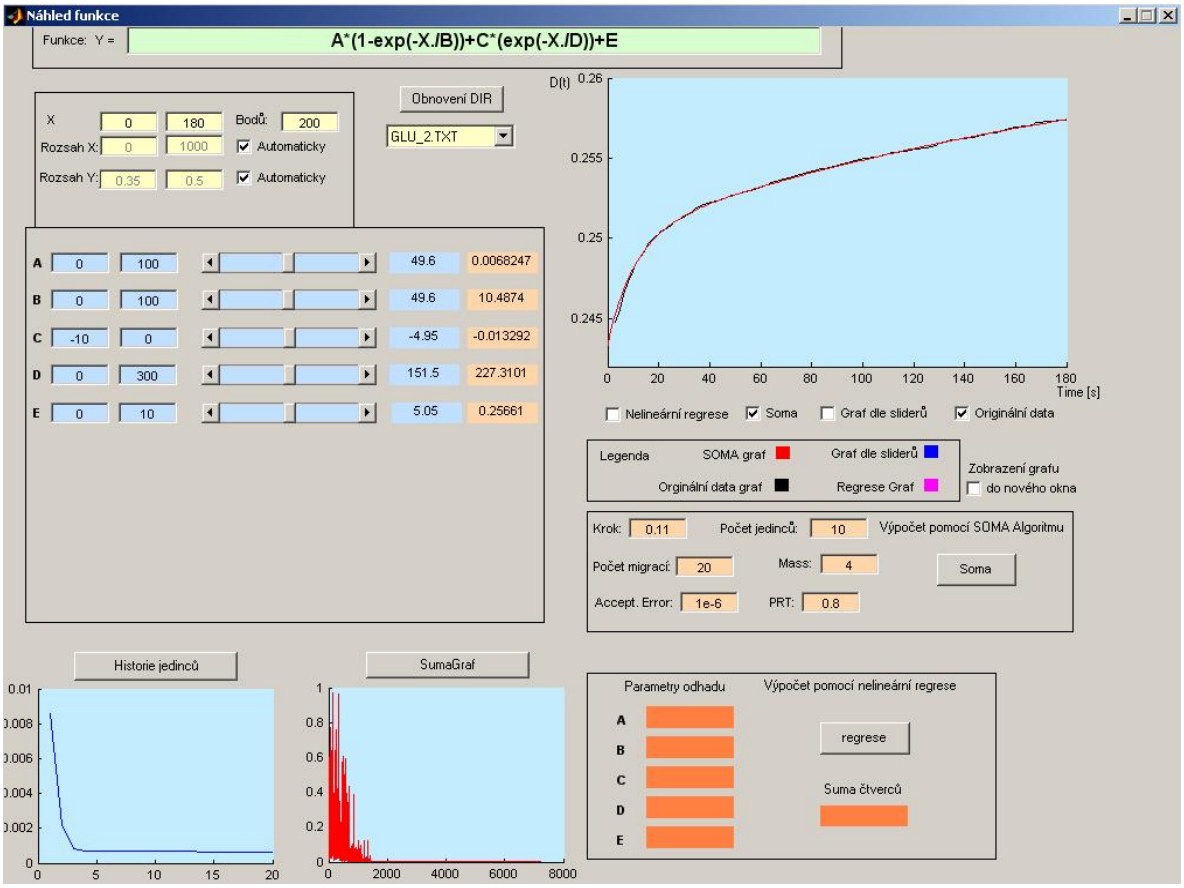


Obr. 10 Graf znázorňující nelineární regresi pomocí SOMA algoritmu

Následující obrázek (obr.11) nám ukazuje, že by k nalezení vhodného výsledku stačilo použití dvou migračních kol při deseti jedinců.



Obr. 11 Graf znázorňující Historii Jedinců v migračních kolech



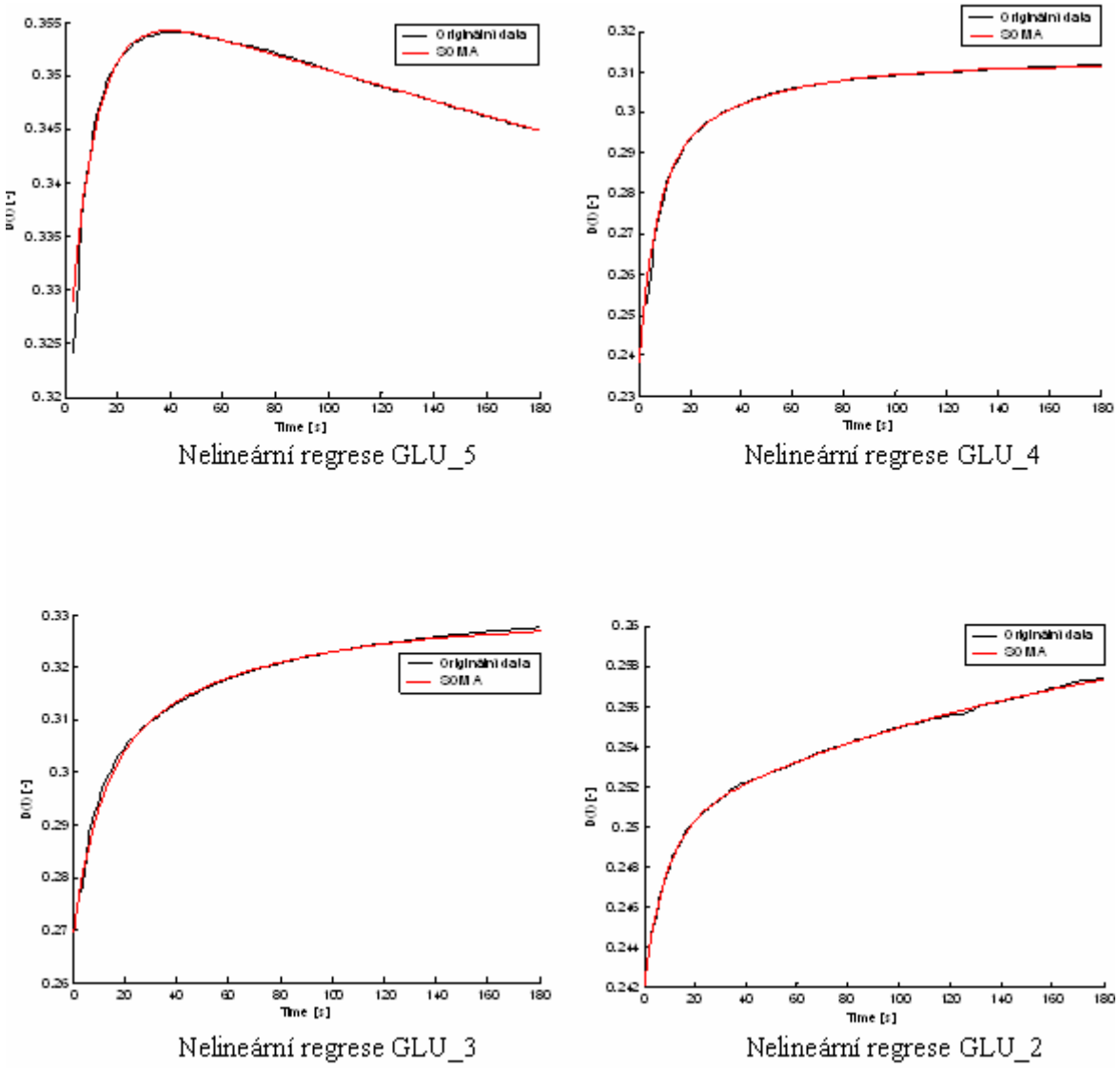
Obr. 12 Kompletní náhled na výsledek nelineární regrese pomocí SOMA algoritmu

Výsledky zobrazující kompletní regresy pomocí SOMA algoritmu se zdají být vhodné pro použití systémového popisu u síťovací reakce hydrolyzovaného kolagenu. Parametry odhadů jsou zapsány v tabulce (Tab.V).

Tabulka V: Hodnoty nastavených a vypočítaných odhadu parametrů

Parametry	***Počáteční nastavení odhadů v rozsahu***	***Vypočítané hodnoty SOMA***
A	<0,100>	0,0068
B	<0,100>	10,4874
C	<-10,0>	-0,0133
D	<0,300>	227,3101
E	<0,10>	0,2566

Výsledná hodnota minimalizační funkce MNČ při použití SOMA algoritmu u GLU_2 je 6,55E-04. Hodnoty časových konstant jsou parametry B = T1 = 10,4874 a D = T2 = 227,3101. SOMA je velice účinným nástrojem pro optimalizaci. Bylo uděláno několik nelineárních regresí pro naše data pomocí SOMA algoritmu a výsledky byly porovnány s originálními daty a jejich výsledná suma odchylek byla velice blízká hodnotě 0.



Obr. 13 Grafy znázorňující nelineární regresy pomocí SOMA algoritmu

Grafy na obrázku (obr.13), jsou výsledkem nelineární regrese při použití SOMA algoritmu. Originální data jsou pojmenována jako GLU_5, 4, 3, 2 a vyjadřují časovou závislost Disipačního faktoru při průběhu síťovací reakce hydrolyzovaného kolagenu s glutaraldehydem.

Jako řídící a ukončovací parametry SOMA algoritmu byly použity hodnoty z tabulky (Tab.VI).

Tabulka VI: Hodnoty parametrů SOMA algoritmu

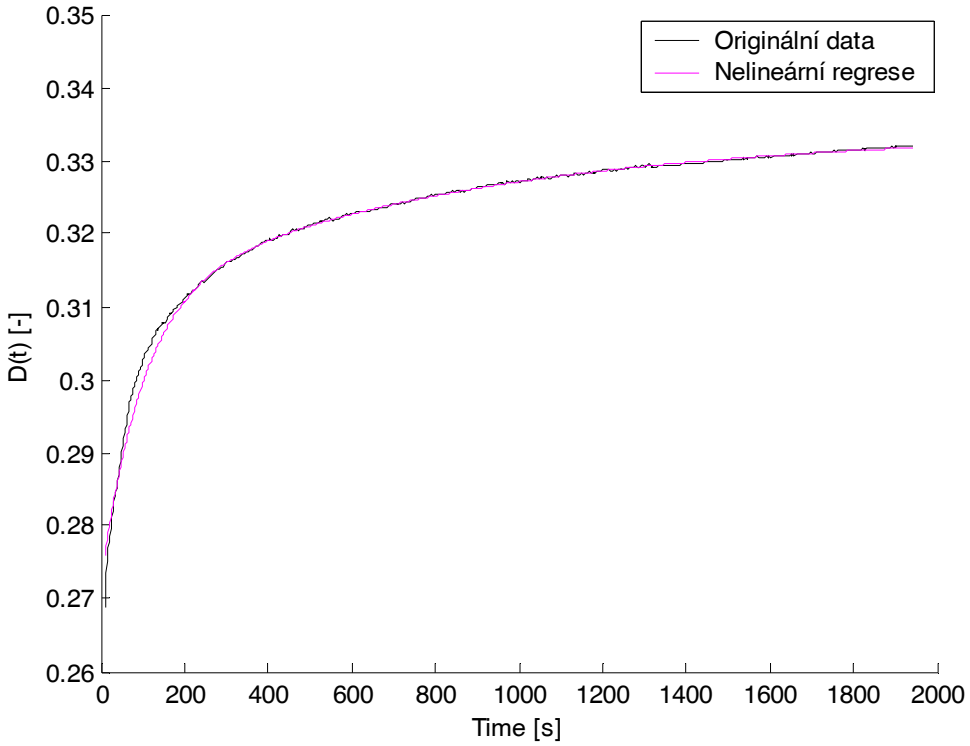
PARAMETR	***ZADANÁ HODNOTA***	***POZNÁMKA***
Mass	3	Řídící parametr
Step	0,11	Řídící parametr
PRT	8,50E-01	Řídící parametr
Počet migrací	20	Řídící parametr
Počet jedinců	20	Ukončovací parametr
AcceptedError	1,00E-07	Ukončovací parametr

2.5.3 Nelineární regrese s využitím funkcí v Matlabu

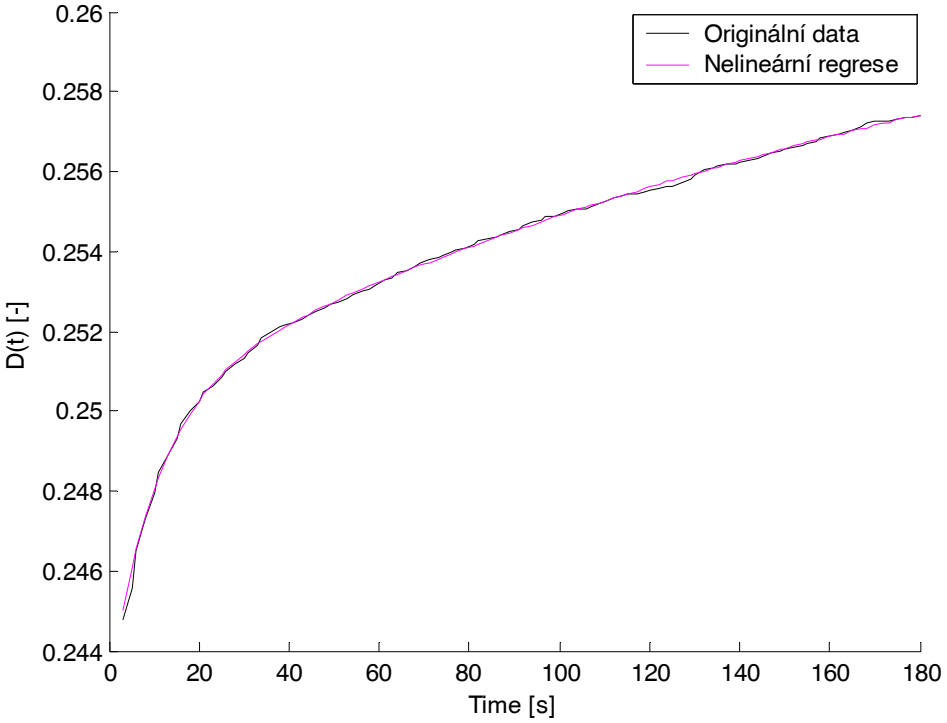
V programu *Náhled funkce* byly použity klasické nelineární regrese, které vycházejí ze základní metody nejmenších čtverců. Jako vhodným pomocníkem pro výběr určité funkce pro optimalizaci bylo využito Helpu v Matlabu a jeho patřičných Toolboxů obsahující dané funkce.

Optimization Toolbox je balíček v Matlabu který, obsahuje funkce, jejich popis, základní nastavení, vstupní a výstupní parametry funkcí atd. pro optimalizační účely. Obsahuje funkce například: *fsolve, fzero, lsqlin, lsqnonlin, otimget, lsqcurvefit* a další. Vybralo se k naprogramování nelineární regrese funkce lsqcurvefit, která se zdála být vhodnou funkcí pro naše potřeby. Funkce pracovala velice dobře pro rovnice nelineární regrese (47). V případě použití pro rovnice typu (46), funkce a její výsledky vycházeli nepřesně [10].

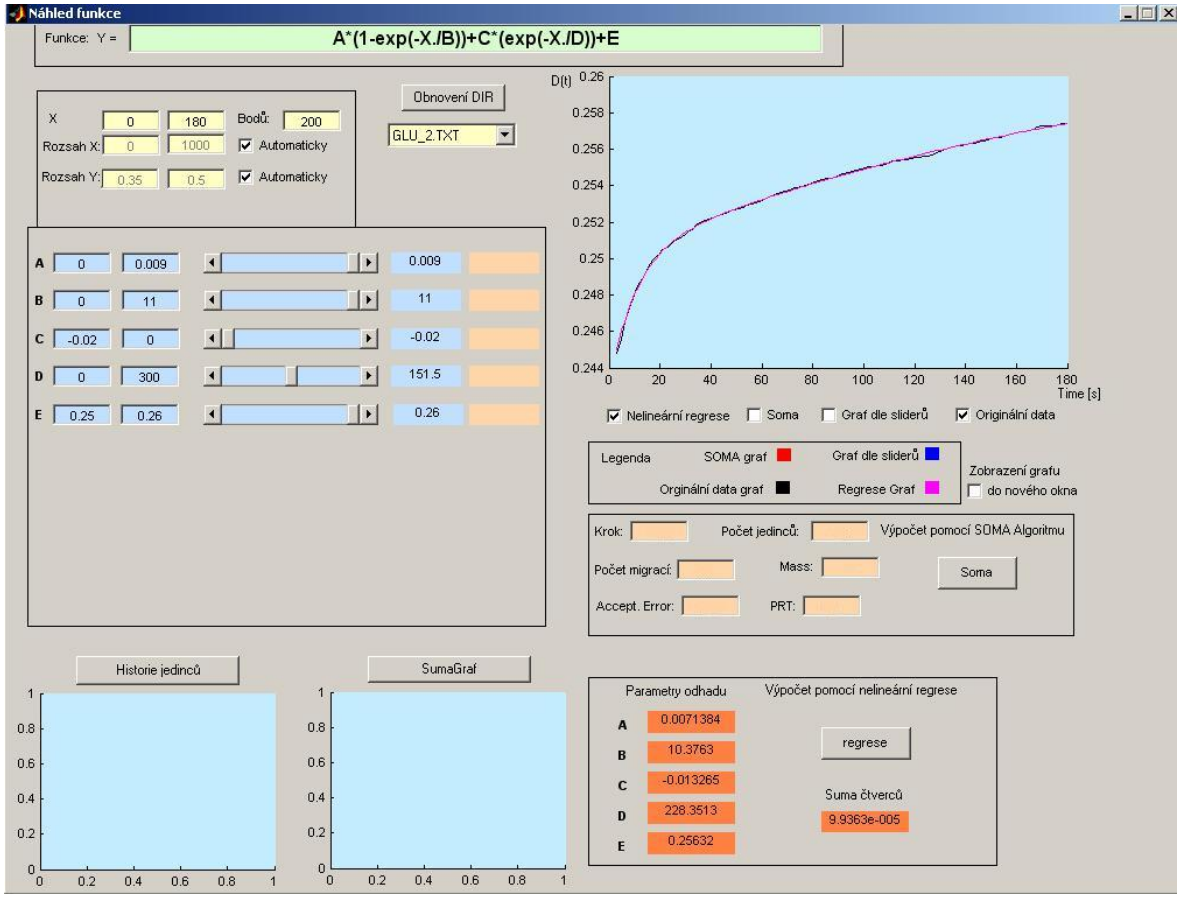
Curve Fitting Toolbox je další balíček, kde byla vybrána funkce na nelineární regresy použitá v Náhledu Funkce. Jako vhodné nástroje k optimalizaci jsou využity funkce *fittype* a *fitoptions.* Jejich základní nastavení bylo prozkoumáno v Helpu. Počáteční odhady jsou nastaveny na hodnotu *param0* = [1 10 1 1000 1]. Jako vstupní data *fittype* jsou: regresní funkce, startující odhady viz. *param0*, originální data x. Ukázalo se, že výsledky regrese při použití funkcí z matlabu jsou velice postačující a přesné pro naše účely. Bylo uděláno několik regresí a výsledky jsou na následujících obrázcích. Jako u SOMA algoritmu i regrese v Matlabu je závislá na počátečních odhadech ale závislost není zdaleka tak silná jako u SOMA. Bylo také zjištěno, že výpočet odhadů nelineární regrese v Matlabu není časově náročný.



Obr. 14 Graf znázorňující výsledek nelineární regresy GLU_1



Obr. 15 Graf znázorňující výsledek nelineární regresy GLU_2

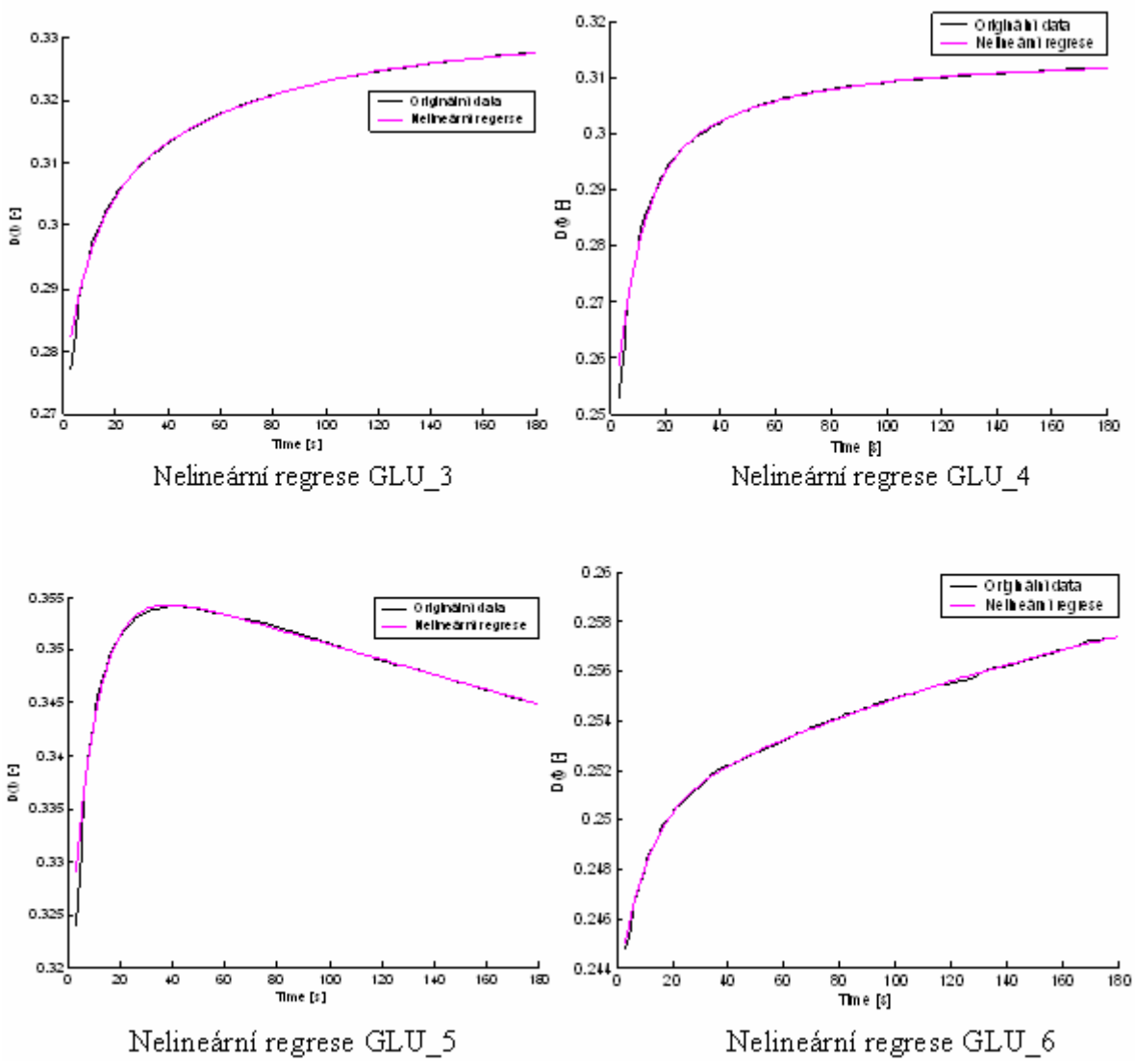


Obr. 16 Kompletní náhled na výsledek nelineární regrese GLU_2

Výsledky nelineární regrese u obou souborů dat (GLU_1 a GLU_2) jsou v tab.[VII]. Je vidět, že hodnota sumy odchylek je velice blízká hodnotě 0. Jako počáteční odhady byly již zmíněné hodnoty *param0* = [1 10 1 1000 1]. Parametr B a D jsou časové konstanty T1 a T2 a jejich počáteční odhad je T1 = 10 a T2 = 1000. Odhady byly voleny podle tvaru průběhu originálních, vstupních dat.

Tabulka VII: Hodnoty nastavených a vypočítaných parametrů

Parametry	***Počáteční nastavení odhadů***	***Vypočítané hodnoty regrese***	
		GLU_1	***GLU_2***
A	1	0,03831	0,00714
B	10	96,1386	10,3763
C	1	-0,02355	-0,01327
D	1000	798,0242	228,3513
E	1	0,29552	0,25632
SUMA	-	0,00018	0,0001



Obr. 17 Grafy znázorňující výsledek nelineární regrese u souboru dat GLU_3,4,5,6.

Použitím programu *Náhled funkce* byla již naměřená data GLU_1,2,3,4,5,6 proložena vhodnými analytickými křivky. Použitím funkce *fittype* byly vypočítány parametry regresní funkce. Teď, když známe matematické modely a jejich parametry, můžeme zjistit časové konstanty jednotlivých procesů a navrhnout regulátory k řízení již zmiňované síťovací reakci hydrolyzovaného kolagenu s glutaraldehydem.

Díky tomu, že se jedná o chemickou reakci tak síťovací proces nejde realizovat v jednoduchých laboratorních podmínkách. Je za potřebí mít vysoce kvalitní laboratorní prostředí k získání přesných výsledků. Proto při návrhu regulátoru záleží i na jiných faktorech jak jen na časových konstantách a přenosu řízení.

2.5.4 Nelineární regrese versus SOMA algoritmus jako Optimalizační nástroj

V téhle části práce byly porovnány výsledky jak u SOMA algoritmu tak i u klasické nelineární regrese. Program Náhled funkce mám umožňuje vzájemné posouzení obou regresí a jejich kvalit. Výsledkem je nalezení nejvhodnějších parametrů pro systémový popis daných analytických křivek.

Výhody SOMA algoritmu jsou :

- velice efektivní nalezení parametrů jakékoli regresní funkce
- možnost aplikovat algoritmus na jakoukoli optimalizační úlohu
- při zvýšení počtu jedinců a migračních kol je důkladnější prohledání zkoumané oblasti a tím pádem zajištění kvalitnějších výsledků

Nevýhody SOMA algoritmu jsou :

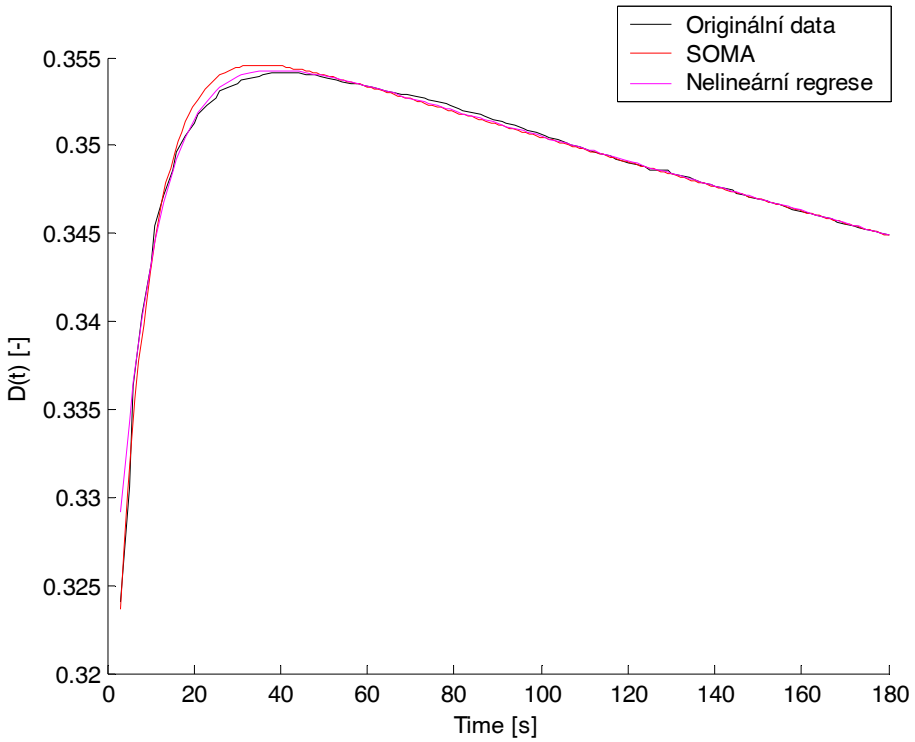
- čas potřebný k vykonání všech migračních kol pro zadané jedince a nalezení všech parametrů je úměrný k výkonu počítače. Uvnitř algoritmu dochází ke složitým matematickým výpočtům a proto je náročnost na procesor a operační paměť veliká.
- výsledná nelineární regrese pomocí SOMA algoritmu je silně závislá na počátečních odhadech parametrů regresní funkce
- naprogramování vlastního jádra algoritmu je složitější

Výhody klasické nelineární regresní metody jsou:

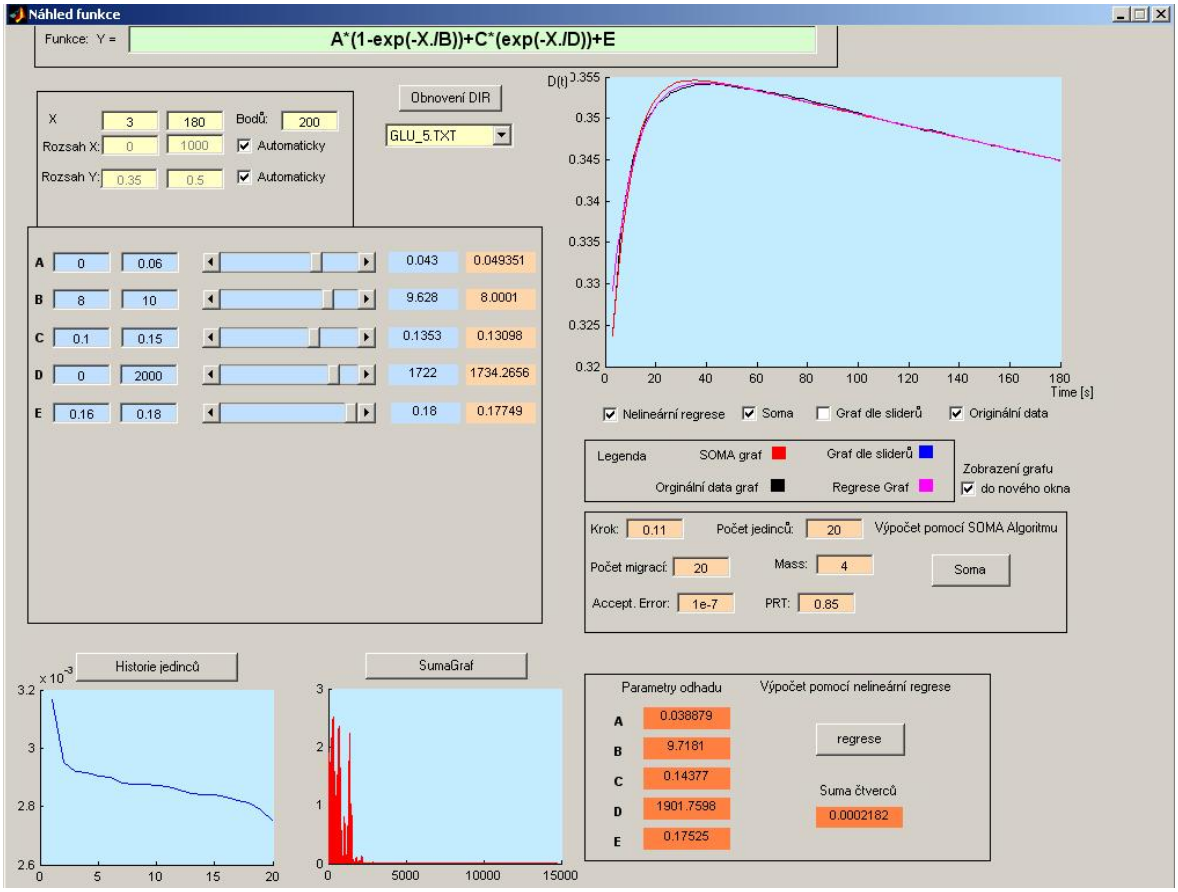
- čas na výpočet parametrů regresní funkce je menší jak u SOMA algoritmu
- jednoduchost v naprogramování
- u jednoduchých funkcí jsou výsledky regrese přesné a postačující k systémovému popisu naměřených dat

Nevýhoda klasické nelineární regresní metody je:

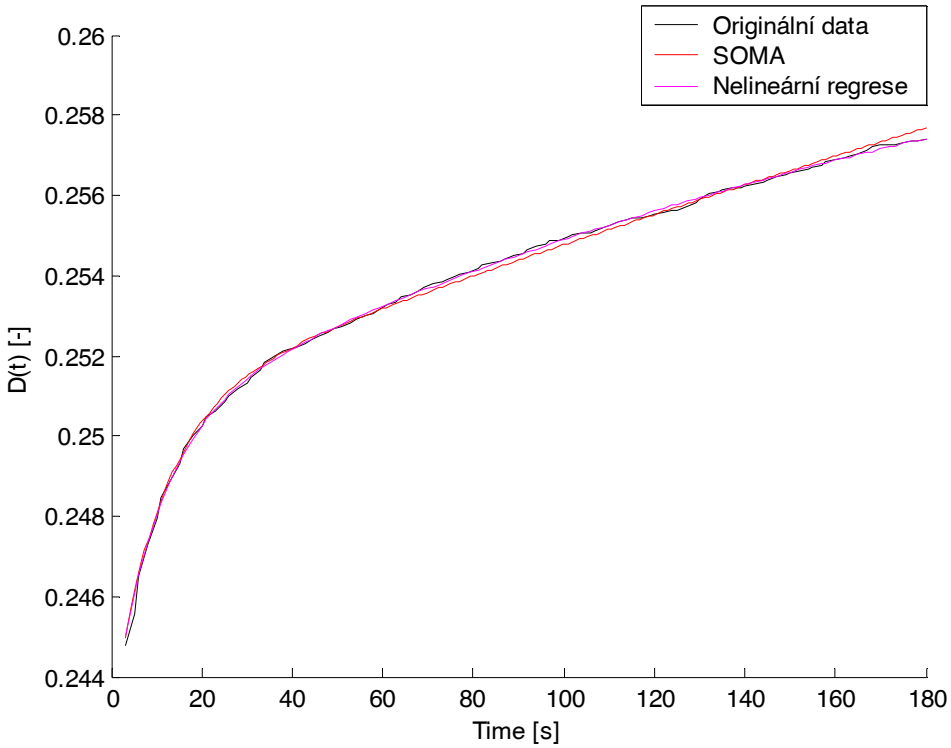
- kvalita regrese (proložení naměřených dat analytickými křivky) závisí na nastavení počátečních odhadů parametrů regresní funkce



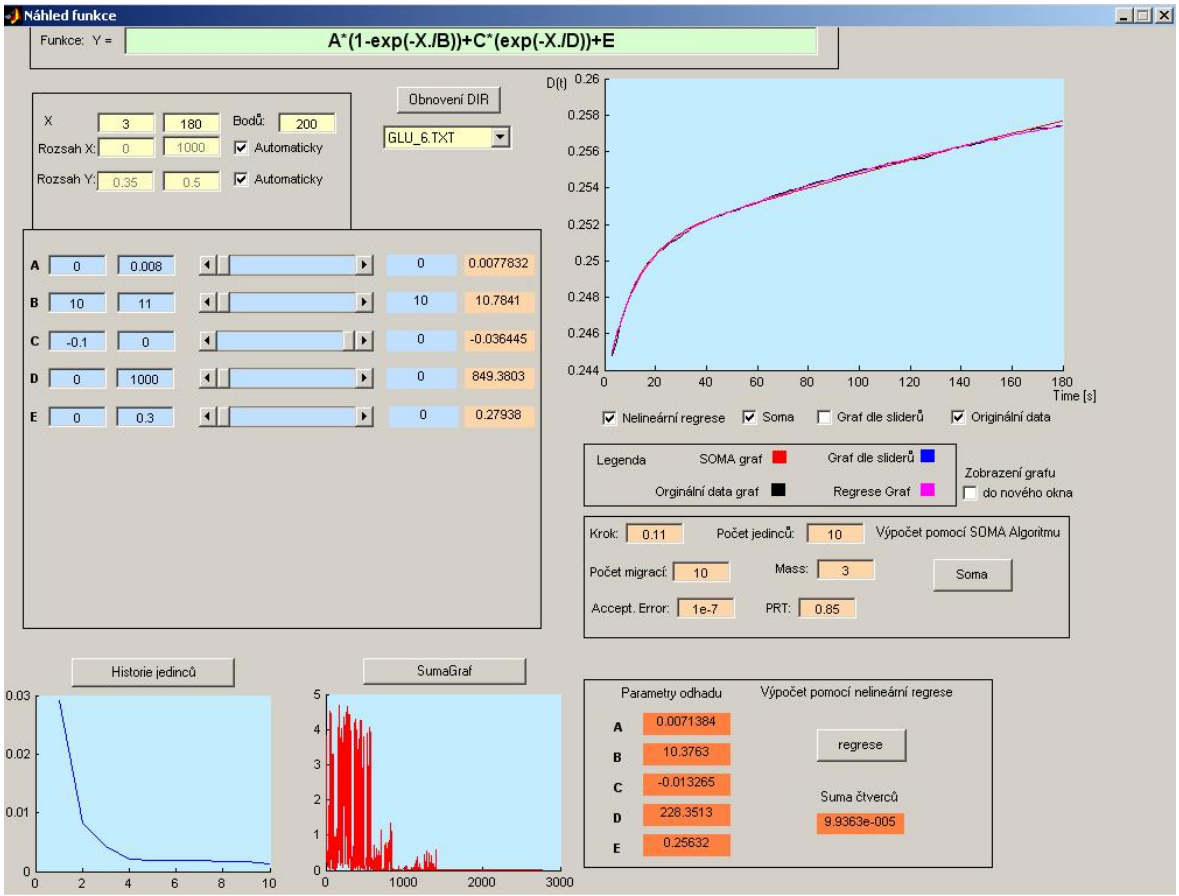
Obr. 18 Výsledek nelineární regrese klasické a SOMA u GLU_5



Obr. 19 Náhled funkce znázorňující výsledek nelineární regrese obou metod u GLU_5



Obr. 20 Výsledek nelineární regrese klasické a SOMA u GLU_2



Obr. 21 Náhled funkce znázorňující výsledek nelineární regrese obou metod u GLU_2

3 ROZBOR VÝSLEDKŮ

Výsledky nelineárních regresí byly mezi sebou porovnány viz.následující tabulky a vyhodnoceny jako vyhovující k systémovému popisu naměřených dat. Veškeré výpočty byly provedeny v softwarovém prostředí Matlab. Vytvořený program Náhled funkce nám ulehčil práci při výpočtech parametrů odhadů regresní funkce a názorné proložení již naměřených dat analytickými křivkami.

Bylo vybráno 6 souborů dat (GLU_1, 2, 3, 4, 5, 6), na kterých byly dané metody regrese použity. Data obsažená v souboru, byla časová závislost disipačního faktoru při průběhu síťovací reakce hydrolyzovaného kolagenu s různým množstvím glutaraldehydu. Díky výsledkům jsme zjistili časové konstanty této chemické reakce. Důležitost a použití časových konstant u chemických procesů je zmíněna v kapitole 2.2.

Dalším poznatkem je, že bylo využito evolučního algoritmu SOMA k optimalizaci a nalezení vhodných parametrů regresní funkce. SOMA je použitelná pro optimalizaci, ale v našem případě jsou klasické metody nelineární regrese přesnější a rychlejší na výpočet. Je to zřejmě dáno tím, že SOMA algoritmus vyžaduje zadání mezních intervalů pro každý parametr.

V tabulce (Tab.VIII) byly zaznamenány výsledky regresí pomocí evolučního algoritmu SOMA a klasické nelineární regrese u souboru dat GLU_1. SUMA je výsledná hodnota optimalizační funkce udávající kvalitu regrese a tj. nejmenší odchylka originálních dat od vypočítaných. V přílohách byly zobrazeny následující výsledky souborů dat GLU_2, GLU_3, GLU_4 GLU_5 a GLU_6.

Tabulka VIII: Výsledky nelineární regrese obou metod u GLU_1

Výsledky nelineární regrese u souboru dat GLU_1 ***Regresní funkce: $Y = A*(1-exp^{-t/B})+C*(exp^{-t/D})+E$***				
Parametr	***Nelineární regrese***		***Regrese SOMA algoritmu***	
	Poč. odhad	***Vypočítané***	***Poč. nastavení odhadů v rozsahu***	***Vypočítané***
A	1	0,03831	<0;0,04>	0,03596
B = T1[s]	10	96,1386	<80;100>	93,2739
C	1	-0,0236	<-0,1;0>	-0,0235
D = T2[s]	1000	798,024	<0;1000>	785,317
E	1	0,29552	<0;0,3>	0,29771
SUMA	-	0,00018		0,0444

ZÁVĚR

Byl vytvořen software *Náhled funkce.* K vytvoření softwaru bylo použito programového prostředí Matlab 6.5 a jeho uživatelského grafického rozhraní (GUI). *Náhled funkce* slouží k zobrazování naměřených dat a jejich proložení vhodnými analytickými křivkami za účelem systémového popisu.

Pro testování programu a jeho funkcí bylo vybráno šest souborů dat (GLU_1, 2, 3, 4, 5, 6), která vyjadřovala časovou závislost Disipačního faktoru při průběhu síťovací reakce hydrolyzovaného kolagenu s různým množstvím glutaraldehydu. Dané křivky se dají chápat jako přechodové charakteristiky uvedeného systému. Jednotkovým skokem je změna koncentrace přidaného síťovala.

Výběr regresní funkce byl zvolen tak, aby se co nejlépe podobal tvaru průběhu naměřených dat. Bylo vypozorováno, že naměřená data se podobají exponenciálním funkcím. Nelineární funkce v exponenciálním tvaru byla zvolena jako regresní model pro již naměřená data. Parametry regresní funkce byly optimalizovány pomocí evolučního samo organizujícího se algoritmu SOMA a klasickými metodami, jako je metoda nejmenších čtverců MNČ.

SOMA jako optimalizační nástroj je velice účinný a použitelný i na složité funkce. Byl otestován pro optimalizační úlohu nalezení vhodných parametrů nelineárního, exponenciálního, regresního modelu. Bylo provedeno několik testů s různými parametry na všech souborech dat a porovnány s klasickými metodami nelineární regrese. Dá se říci, že SOMA je použitelná na regresi daných souborů dat, které byly testovány, ale daleko rychlejší a přesnější vycházeli výsledky klasických nelineárních regresí.

Pomocí programu *Náhled funkce* byla naměřená data proložena analytickými křivkami, a byli spočítány parametry regresního modelu. Díky tomu byli zjištěny časové konstanty T1 a T2, které nám ovlivňují dynamický proces systému. Znalost časových konstant dílčích procesů je dost důležitá k určení a charakterizování vlastností systému jako je například: rychlost odezvy procesu na vstupní poruchy, zjištění zda dojde ke změně režimu řízení při náběhu, k návrhu regulátoru.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

[1] NAVRÁTIL, Milan. *Instrumentace a zpracování signálů při měření kinetiky síťovacích reakcí pomocí impedanční spektroskopie*. [s.l.], 2002. 56 s. , 4 UTB ve Zlíně, Fakulta technologická. Diplomová práce.

[2] ZELINKA, Ivan. *Umělá inteligence : V problémech globální optimalizace*. 1. vyd. Praha : BEN, 2002. 192 s. ISBN 80-7300-069-5, 50-95

[3] HINDLS, Richard, KAŇOKOVÁ, Jara, NOVÁK, Ilja. *Metody statistické analýzy pro ekonomy*. 1. aktualiz. vyd. Praha : Management Press, 1997. 248 s. ISBN 80-85943-44-1.

[4] MELOUN, Milan, MILITKÝ, Jiří. *Statistické zpracování experimentálních dat*. Praha : Plus, spol.s.r.o., 1994. 839 s. ISBN 80-85297-56-6.

[5] BALÁTĚ, Jaroslav. *Automatické řízení*. Praha : BEN-technická literatura, 2003. 664 s. ISBN 80-7300-020-2.

[6] INGHAM, J., et al. *Chemical Engineering Dynamics*. Německo, Weinheim : WILEY-VCH, Verlag, 2000. 646 s. ISBN 3-527-29776-6, 77-78

[7] Bobál, V. (1990). *Identifikace systémů*. Skriptum VUT v Brně Fakulty technologické ve Zlíně.41-138

[8] TU Liberec. (2002). *Aproximace přechodových charakteristik metodou prof. Strejce*. Dostupné na URL: http://www.fm.vslib.cz/~krtsub/fm/zsr/Strejc.pdf

[9] GALNTÍK, Antonín. *Kolageny* [online]. 2005 , 21.7.2005 [cit. 2006-05-04]. Dostupný z WWW: <http://www.kolageny.com/>.

[10] MATHWORKS. *Documentation-Help* [online]. 1994 [cit. 2006-05-05]. Dostupný z WWW: <http://www.mathworks.com/access/helpdesk/help/helpdesk.html>.

[11] DUŠEK, František. *Úvod do používání Matlab*. [s.l.], 1997. 56 s. Univerzita Prdubice,FCHT KŘPVT. Učební text.

Seznam použitých symbolů a zkratek

AMK		aminokyselina
GLU		glutaraldehyd
MNČ		metoda nejmenších čtverců
NP		počet jedinců
XML		extensible markup language
GUI		graphical user interface
ω	$[s^{-1}]$	úhlová frekvence
t	[s]	čas
φ	[rad]	fázový úhel
j		imaginární jednotka
C	[F]	kapacita
L	[H]	indukčnost
Y	[S]	admitance
ρ	[Ω.m]	měrný elektrický odpor
S	$[m^2]$	plocha
ε	$[F.m^{-1}]$	permitivita
σ	$[S.m^{-1}]$	měrná elektrická vodivost
D	[-]	faktor disipace
δ	[rad]	ztrátový úhel
ϕ	[rad]	fázový posun
T_n	[s]	doba náběhu
T_u	[s]	doba průtahu
Q_{in}		inflexní bod
Z	[Ω]	impedance

U	[V]	napětí
I	[A]	proud
e		eulorovo číslo
R	[Ω]	elektrický odpor

SEZNAM OBRÁZKŮ

Obr. 1 Tropocollagen trojnásobí spirálu 9
Obr. 2 Hydroxypropilin 10
Obr. 3 Blokové schéma experimentální identifikace 16
Obr. 4 Normovaná přechodová charakteristika statické soustavy vyššího řádu 17
Obr. 5 Graf pro určení poměru časových konstant $\tau=T_2/T_1$ pro normovanou 19
Obr. 6 Okno grafického prostředí GUI v matlabu 27
Obr. 7 Normovaná přechodová charakteristika 29
Obr. 8 Vizualizace programu Náhled Funkce 31
Obr. 9 Graf znázorňující nelineární regresi pomocí SOMA algoritmu 35
Obr. 10 Graf znázorňující nelineární regresi pomocí SOMA algoritmu 36
Obr. 11 Graf znázorňující Historii Jedinců v migračních kolech 36
Obr. 12 Kompletní náhled na výsledek nelineární regrese pomocí SOMA algoritmu 37
Obr. 13 Grafy znázorňující nelineární regresy pomocí SOMA algoritmu 38
Obr. 14 Graf znázorňující výsledek nelineární regresy GLU_1 40
Obr. 15 Graf znázorňující výsledek nelineární regresy GLU_2 41
Obr. 16 Kompletní náhled na výsledek nelineární regrese GLU_2 41
Obr. 17 Grafy znázorňující výsledek nelineární regrese u souboru dat GLU_3,4,5,6. 43
Obr. 18 Výsledek nelineární regrese klasické a SOMA u GLU_5 45
Obr. 19 Náhled funkce znázorňující výsledek nelineární regrese obou metod u GLU_5 45
Obr. 20 Výsledek nelineární regrese klasické a SOMA u GLU_2 46
Obr. 21 Náhled funkce znázorňující výsledek nelineární regrese obou metod u GLU_2 46

SEZNAM TABULEK

Tabulka II: Příklad strukturní hierarchie kolagenu a přiřazené obory použití

Tabulka II: Procentuální zastoupení hlavních AMK v kolagenu a v hydrolyzátu

Tabulka III: Tabulka hodnot pro vyhodnocování statických soustav n-tého řádu se stejnými časovými konstantami

Tabulka IV: Význam parametrů SOMA

Tabulka V: Hodnoty nastavených a vypočítaných odhadu parametrů

Tabulka VI: Hodnoty parametrů SOMA algoritmu

Tabulka VII: Hodnoty nastavených a vypočítaných parametrů

Tabulka VIII: Výsledky nelineární regrese obou metod u GLU_1

SEZNAM PŘÍLOH

P I: Výsledky nelineární regrese obou metod u GLU_2,3

P II: Výsledky nelineární regrese obou metod u GLU_4,5

P III: Výsledky nelineární regrese obou metod u GLU_6

PŘÍLOHA P I: VÝSLEDKY NELINEÁRNÍ REGRESE GLU_2,3

Výsledky nelineární regrese u souboru dat GLU_2 *Regresní funkce: $Y = A*(1-exp^{-t/B})+C*(exp^{-t/D})+E$*				
Parametr	***Nelineární regrese***		***Regrese SOMA algoritmu***	
	Poč. odhad	***Vypočítané***	***Poč. nastavení odhadů v rozsahu***	***Vypočítané***
A	1	0,007138	<0;0,009>	0,008
B = T1[s]	10	10,3763	<0;11>	9,3599
C	1	-0,01327	<-0,02;0>	-0,0139
D = T2[s]	1000	228,3513	<0;300>	243,0946
E	1	0,25632	<0,025;0,026>	0,256
SUMA	-	9,94E-05		6,91E-04

Výsledky nelineární regrese u souboru dat GLU_3 *Regresní funkce: $Y = A*(1-exp^{-t/B})+C*(exp^{-t/D})+E$*				
Parametr	***Nelineární regrese***		***Regrese SOMA algoritmu***	
	Poč. odhad	***Vypočítané***	***Poč. nastavení odhadů v rozsahu***	***Vypočítané***
A	1	0,026695	<0,01;1>	0,0293
B = T1[s]	10	10,4245	<9;11>	9,0002
C	1	-0,0282	<-0,03;0>	-0,0292
D = T2[s]	1000	67,5154	<50;70>	65,1071
E	1	0,30274	<0,2;0,3>	0,3
SUMA	-	0,000357		0,002

PŘÍLOHA P II: VÝSLEDKY NELINEÁRNÍ REGRESE GLU_4,5

Výsledky nelineární regrese u souboru dat GLU_4 *Regresní funkce: $Y = A*(1-exp^{-t/B})+C*(exp^{-t/D})+E$*				
Parametr	***Nelineární regrese***		***Regrese SOMA algoritmu***	
	Poč. odhad	***Vypočítané***	***Poč. nastavení odhadů v rozsahu***	***Vypočítané***
A	1	0,038305	<-5;1>	0,0648
B = T1[s]	10	96,1386	<-5;10>	9,5751
C	1	-0,02355	<-5;1>	-0,0712
D = T2[s]	1000	798,0242	<-5;1000>	999,8746
E	1	0,29552	<-5;1>	0,308
SUMA	-	0,000177		0,0116

Výsledky nelineární regrese u souboru dat GLU_5 *Regresní funkce: $Y = A*(1-exp^{-t/B})+C*(exp^{-t/D})+E$*				
Parametr	***Nelineární regrese***		***Regrese SOMA algoritmu***	
	Poč. odhad	***Vypočítané***	***Poč. nastavení odhadů v rozsahu***	***Vypočítané***
A	1	0,038879	<0;0,88795>	0,035812
B = T1[s]	10	9,7181	<0;10>	10
C	1	0,14377	<0;1>	0,12426
D = T2[s]	1000	1901,76	<0;2000>	1630,676
E	1	0,1725	<0;0,2>	0,19782
SUMA	-	0,000218		0,0014

PŘÍLOHA P III: VÝSLEDKY NELINEÁRNÍ REGRESE GLU_6

Výsledky nelineární regrese u souboru dat GLU_6 *Regresní funkce: $Y = A*(1-exp^{-t/B})+C*(exp^{-t/D})+E$*				
Parametr	***Nelineární regrese***		***Regrese SOMA algoritmu***	
	Poč. odhad	***Vypočítané***	***Poč. nastavení odhadů v rozsahu***	***Vypočítané***
A	1	0,47461	<0;1>	0,99997
B = T1[s]	10	1,2525	<0;20>	0,062906
C	1	0,032862	<0;1>	0,038182
D = T2[s]	1000	525,5264	<0;1000>	345,9047
E	1	-0,21098	<-1000;1000>	-0,73318
SUMA	-	0,000403		0,0787