

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ
ÚSTAV MATEMATIKY
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING
INSTITUTE OF MATHEMATICS

PREDIKCE VLIVU POVRCHOVÉ VRSTVY OXIDŮ NA
INTENZITU VODNÍHO CHLAZENÍ
WATER COOLING INTENSITY PREDICTION FOR GIVEN THICKNESS OF OXIDE LAYER

DIPLOMOVÁ PRÁCE
DIPLOMA THESIS

AUTOR PRÁCE
AUTHOR

Bc. VÍT HALUZA

VEDOUCÍ PRÁCE
SUPERVISOR

Ing. MICHAL POHANKA, Ph.D.

Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství

Ústav matematiky

Akademický rok: 2014/2015

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

student(ka): Bc. Vít Haluza

který/která studuje v **magisterském navazujícím studijním programu**

obor: **Matematické inženýrství (3901T021)**

Ředitel ústavu Vám v souladu se zákonem č.111/1998 o vysokých školách a se Studijním a zkušebním řádem VUT v Brně určuje následující téma diplomové práce:

Predikce vlivu povrchové vrstvy oxidů na intenzitu vodního chlazení

v anglickém jazyce:

Water cooling intensity prediction for given thickness of oxide layer

Stručná charakteristika problematiky úkolu:

V průmyslových aplikacích se velmi často používá vodní chlazení kovových materiálů. Vlivem vysoké teploty materiálu se na jejich povrchu, který je ve styku se vzduchem, vytváří vrstva oxidů. Ty mají zpravidla podstatně menší tepelnou vodivost, než čistý materiál. Ve srovnání s čistými kovy se chovají jako izolanty bránící prostupu tepla. Je tedy známým faktem, že povrchové oxidy mají zásadní vliv na intenzitu vodního chlazení. V roce 2012 byla publikovaná teze, že za určitých podmínek (vysoká teplota a určitý rozsah tloušťky oxidů) může přítomnost oxidů intenzitu chlazení až několikanásobně zvýšit.

Cíle diplomové práce:

1. Sestavit parametrický numerický model vedení tepla, který bude schopen pro zadanou tloušťku oxidů, materiálové vlastnosti a další parametry vypočítat rychlost ochlazování základního materiálu.
2. Nalezení vhodných korelačních vztahů pro predikci efektu oxidů na chlazení.
3. Použití k predikci některou z heuristických metod. Například neuronových sítí.
4. Porovnat a zvážit vhodnost různých metod predikce (numerický výpočet, korelační vztahy, heuristické metody).

Seznam odborné literatury:

Incropera, F. P.; DeWitt, D. P. Fundamentals of Heat and Mass Transfer. 4th ed. New York: Wiley, 1996. ISBN 0-471-30460-3.

Patankar, S. V. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, 1980. ISBN 0-891-16522-3.

Raudenský, M.; Hnízdil, M.; Kotrbáček, P. Why oxides intensify spray cooling. The 30th International Steel Industry Conference. Paris. 2012. p. 92 - 337.

Rastokin P., Froněk P. Nelineární regrese. VÚZE, Praha, 1973.

Zvára K. Regrese, Matfyzpress, 2008, ISBN 8073780410.

William T. V. Numerical Recipes in C. Cambridge University Press, 2nd Edition, 1992, ISBN 0-521-43108-5.

Dumek, V.; Grove, T.; Raudenský, M.; Krejsa, J. Novel approaches to the IHCP: Neural networks. In Int. symposium on inverse problems - Inverse problems in Engineering Mechanics, Paris, 1994, pp. 411-416.

Dumek, V.; Grove, T. D.; Raudenský, M.; Krejsa, J. Novel approaches to IHCP: Neural networks. In Inverse Problems in Engineering Mechanics, Rotterdam, 1994, pp. 411-416. ISBN 90-5410-517-8.

Vedoucí diplomové práce: Ing. Michal Pohanka, Ph.D.

Termín odevzdání diplomové práce je stanoven časovým plánem akademického roku 2014/2015.

V Brně, dne 20.11.2014

L.S.

prof. RNDr. Josef Šlapal, CSc.
Ředitel ústavu

prof. RNDr. Miroslav Doupovec, CSc., dr. h. c.
Děkan fakulty

Abstrakt

Tato diplomová práce se zabývá analýzou vlivu povrchové vrstvy oxidů na vedení tepla. Důraz je kladen především na numerické simulace. Kromě modelování vedení tepla pomocí diferenciálních rovnic je k predikci vlivu oxidů na chlazení použito také lineárních regresních modelů a umělých neuronových sítí. Výsledkem práce je stanovení podmínek, za kterých dojde ke zintenzivnění chlazení vlivem oxidických vrstev a porovnání jednotlivých metod predikce vlivu oxidů na chlazení.

Summary

This diploma thesis is dealing with the impact of oxide scales on heat conduction. One of the main tools that were used are numerical simulations. Heat conduction is modelled by solving partial differential equations. Regression models and artificial neural networks are used for the prediction of the influence of oxides on cooling intensity. Determination of the conditions when the cooling was intensified and comparison of individual methods of prediction are the main results of the thesis.

Klíčová slova

přenos tepla, vodní chlazení, oxidy oceli, regrese, umělá neuronová síť

Keywords

heat transfer, water cooling, steel oxides, regression, artificial neural network

HALUZA, V. *Predikce vlivu povrchové vrstvy oxidů na intenzitu vodního chlazení*. Brno: Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2015. 66 s. Vedoucí diplomové práce Ing. Michal Pohanka, Ph.D.

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci *Predikce vlivu povrchové vrstvy oxidů na intenzitu vodního chlazení* vypracoval samostatně pod vedením Ing. Michala Pohanky, Ph.D., s použitím podkladů uvedených v seznamu použitých zdrojů.

Bc. Vít Haluza

Na tomto místě bych rád poděkoval všem, kteří se jakýmkoli způsobem podíleli na tvorbě této diplomové práce. Zejména vedoucímu Ing. Michalu Pohankovi, Ph.D., a celému týmu Laboratoře přenosu tepla a proudění na Fakultě strojního inženýrství v Brně. Výsledků týkajících se neuronových sítí bych nikdy nedosáhl bez spolupráce s pracovníky Fakulty metalurgie a materiálového inženýrství na Vysoké škole báňské v Ostravě. Za cenné rady a náměty k mojí činnosti patří můj dík také doc. Mgr. Zuzaně Hübnerové, Ph.D.

Bc. Vít Haluza

Obsah

1	Úvod	12
2	Teoretický základ	13
2.1	Vznik oxidických vrstev	13
2.1.1	Fyzikální a mechanické vlastnosti okují	14
2.2	Přenos tepla	16
2.2.1	Okrajové a počáteční podmínky	17
2.2.2	Analytické řešení rovnice vedení tepla	18
2.2.3	Numerické řešení rovnice vedení tepla	19
2.2.4	Modelování vedení tepla pod chladicími tryskami	21
2.3	Regresní analýza	24
2.3.1	Lineární regresní model	24
2.3.2	Zobecněný lineární model	27
2.4	Umělé neuronové sítě	28
2.4.1	Myšlenka neuronových sítí	28
2.4.2	Model neuronu	28
2.4.3	Propojení neuronů	29
2.4.4	Proces učení neuronové sítě	30
2.4.5	Citlivostní analýza	33
2.4.6	Aplikace neuronových sítí	34
3	Vypracování úkolu	35
3.1	Parametrický model vedení tepla	35
3.1.1	Geometrické charakteristiky	35
3.1.2	Materiálové charakteristiky	36
3.1.3	Výpočet průběhu chlazení	37
3.2	Predikce efektu oxidů na chlazení	40
3.2.1	Regresní analýza	40
3.2.2	Umělá neuronová síť	48
4	Vyhodnocení	50
4.1	Zhodnocení výsledků numerického modelu	50
4.2	Predikce vlivu oxidů na chlazení	54
4.3	Porovnání metod	56
4.4	Vysvětlení zvýšení intezity chlazení	56
5	Závěr	58
	Seznam použitých zdrojů	60
	Seznam použitých veličin a zkratk	60

Příloha A Vybraná rozdělení pravděpodobnosti	64
A.1 Normální rozdělení	64
A.2 Poissonovo rozdělení	65
A.3 Gamma rozdělení	65

1 Úvod

V technických aplikacích se často setkáváme s chlazením kovových materiálů, na kterých je přítomna oxidická vrstva. Ačkoli je tepelná vodivost oxidů nižší než vodivost oceli, a tudíž by se měly chovat jako tepelný izolant, experimenty a simulace potvrzují, že za určitých podmínek dojde ke zvýšení intenzity chlazení. Tento jev nastává z důvodu rychlého ochlazení povrchu, následkem kterého vzroste tepelný tok mezi okolím a chlazeným objektem.

Jelikož ke chlazení přes vrstvu okují dochází v praxi zcela běžně (například při výrobě oceli kontinuálním odléváním), bylo by velmi užitečné tomuto jevu více porozumět a vymezit podmínky, za kterých k němu dochází. Optimalizací procesu chlazení při zpracování oceli je možné dosáhnout značných časových a energetických úspor. Dalším důvodem podrobného zkoumání tohoto fenoménu je fakt, že časový průběh teplot chlazeného materiálu má dominantní vliv na mikrostrukturu a mechanické vlastnosti finálního produktu.

Se značným rozvojem výpočetní techniky se pojí také možnost efektivně simulovat vedení tepla skrz vrstvu oxidů. Právě simulace tvoří jedno ze stěžejních témat této diplomové práce. Dalším významným bodem předkládaného textu je porovnání několika metod, které je možné použít k predikci vlivu povrchové vrstvy oxidů na chlazení. Kromě numerického modelu jednorozměrného vedení tepla se jedná o regresní modely a neuronové sítě. Dalším neméně významným tématem zahrnutým v této práci je stanovení podmínek, za kterých ke zintenzivnění dochází. Ve vyhodnocení práce je také zahrnuto jedno z možných vysvětlení tohoto jevu.

2 Teoretický základ

V následující kapitole budou stručně shrnuty veškeré teoretické znalosti potřebné ke zdárnému splnění cílů diplomové práce. První část se zabývá materiálovými vlastnostmi oxidických vrstev. Tedy chemickým složením a termofyzikálními vlastnostmi, které je potřeba znát k provedení simulací odpovídajících realitě.

Hlavním tématem je matematický aparát, jenž bude použit k popisu vedení tepla a vlivu okují na chlazení. Vedení tepla bude modelováno pomocí parciálních diferenciálních rovnic. Kromě analytického řešení několika speciálních případů bude popsáno také řešení numerické. Dále se text věnuje regresní analýze. Jelikož byly během řešení úkolů diplomové práce implementovány také umělé neuronové sítě, bude poslední sekce teoretické části věnována právě jim.

2.1 Vznik oxidických vrstev

Všechny operace při výrobě a manipulaci s kovovými materiály probíhají v otevřené atmosféře, oxidace povrchu je tedy nevyhnutelnou součástí těchto procesů. Vrstva oxidů na výrobku se jeví jako nežádoucí, bývá proto ve finální části výrobního procesu odstraňována.

V případě oxidace oceli dochází k reakci železa s kyslíkem v okolní atmosféře. K rychlosti reakce mohou přispět voda, elektrický proud a zejména vysoká teplota. Oxidické vrstvy, které vznikly za vysokých teplot nazýváme okuje¹. Jedná se o struktury, jejichž morfologické a chemické vlastnosti mohou být značně proměnné. Tyto vrstvy vznikají už při výrobě oceli. Podle fáze výrobního procesu, ve kterém vznikly, je dělíme do tří základních skupin.

V první fázi zpracování oceli (při jejím ohřívání) vznikají primární okuje, na to navazuje vznik sekundárních okují po vytažení z pece. Terciární okuje vznikají v konečné fázi výrobního procesu, tedy po vytažení z pece a odstranění primárních okují.

Často se zaměňují výrazy okuje a oxidy, nicméně tyto pojmy nejsou ekvivalentní. Okuje jsou speciálním případem oxidů a vznikají vlivem vysokých teplot reakcí železa s kyslíkem.

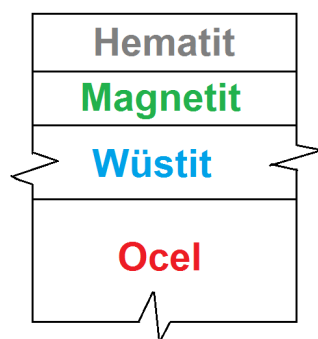
Při zpracování oceli vznikají tři typy chemických sloučenin. Jsou to wüstit (FeO), magnetit (Fe_3O_4) a hematit (Fe_2O_3). Vrstva okují je složena z těchto sloučenin v pevně stanoveném pořadí (viz obr. 2.1). Toto pořadí je stanoveno dle tzv. *LeChatelierova* principu [8]. Vnitřní vrstvu tvoří wüstit, střední vrstva je tvořena magnetitem a svrchní vrstvu tvoří hematit.

Růst okují je závislý jak na teplotě při které vznikají, tak na době, po kterou je základní materiál ohříván v peci. Dalšími faktory, ovlivňujícími vznik okují jsou např. chemické složení materiálu nebo agresivita prostředí, ve kterém okuje vznikají. V literatuře (např. [8]) lze dohledat grafy růstu okují a jejich jednotlivých složek. Dále se problematikou růstu okují zabývá např. [15]. Až na výjimky se autoři uvedených textů zabývají pozorováním růstu oxidické vrstvy na běžných uhlíkových ocelích. Co se týče růstu okují na korozivzdorné oceli, jsou publikované výsledky výzkumu mnohem vzácnější.

V Laboratoři přenosu tepla a proudění v Brně probíhala měření růstu vrstvy okují na korozivzdorné oceli při 950 °C. Vzorok byly vystaveny vysokým teplotám po dobu několika

¹V angličtině se užívá pojem *scales*.

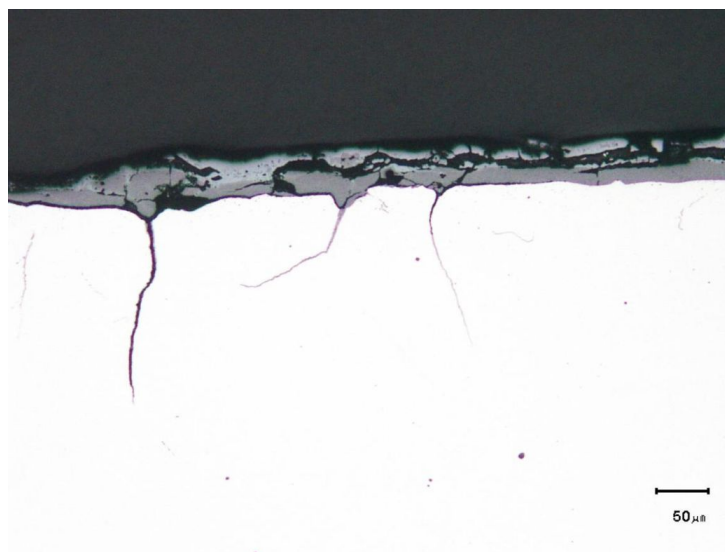
2.1. VZNIK OXIDICKÝCH VRSTEV



Obrázek 2.1: Chemické složení vrstvy okují.

hodin až dní. Fotografie povrchu, které byly získány po zvětšení na optickém mikroskopu jsou na obrázcích 2.2 a 2.3. Při menším zvětšení (viz obr. 2.2) je na první pohled patrná značná nesouvislost oxidických vrstev. Zdá se, že vlivem agresivního prostředí v peci došlo mimo jiné i k popraskání původního povrchu. Při větším zvětšení (viz obr. 2.3) je patrné, že okuje nejsou homogenní. Vrstva na povrchu má odlišné chemické složení od vrstev ve větší hloubce. Dále je z obrázků zřejmé, že okuje obsahují narozdíl od oceli drobné dutinky a póry, které jsou vyplněny vzduchem. Ty mají pravděpodobně významný vliv na tepelnou vodivost okují.

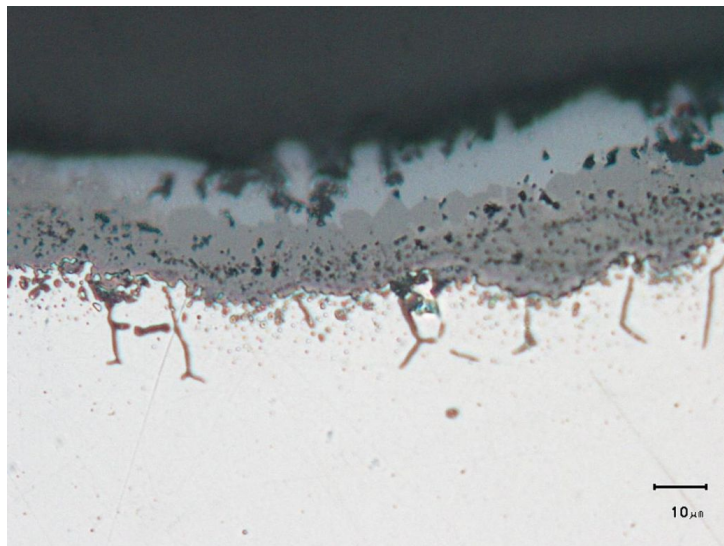
Pórovitost, přesné chemické složení vrstvy okují a řada dalších faktorů mají zřejmě signifikantní vliv na značnou proměnnost fyzikálních a mechanických vlastností těchto vrstev. Dále o tom pojednává kapitola 2.1.1.



Obrázek 2.2: Fotografie mikrostruktury okují z optického mikroskopu při menším zvětšení.

2.1.1 Fyzikální a mechanické vlastnosti okují

Aby výsledky simulací vedení tepla odpovídaly realitě, je nutné zadat do modelu přesné materiálové vlastnosti okují. Konkrétně jsou potřeba hustota ρ , měrné teplo c a tepelná vodivost λ . Pro měření těchto fyzikálních vlastností se v praxi často využívají chemické, či laserové metody [8]. Je možné najít zdroje [12] s konkrétními hodnotami, nicméně se většinou jedná pouze o popis vlastností jednotlivých chemických sloučenin, které se



Obrázek 2.3: Fotografie mikrostruktury okují z optického mikroskopu při větším zvětšení.

ve vrstvách okují vyskytují. Tyto složky zde mohou být zastoupeny v různém poměru. Přesné chemické složení vrstvy okují je závislé na chemickém složení oceli, která tvoří podklad této vrstvě, a teplotě oxidace. Například na vysoce legovaných ocelích se tvoří vrstvy obsahující oxidy prvků jako Cr, Ni a Si, s vlastnostmi, které se od oxidů železa liší značným způsobem [24].

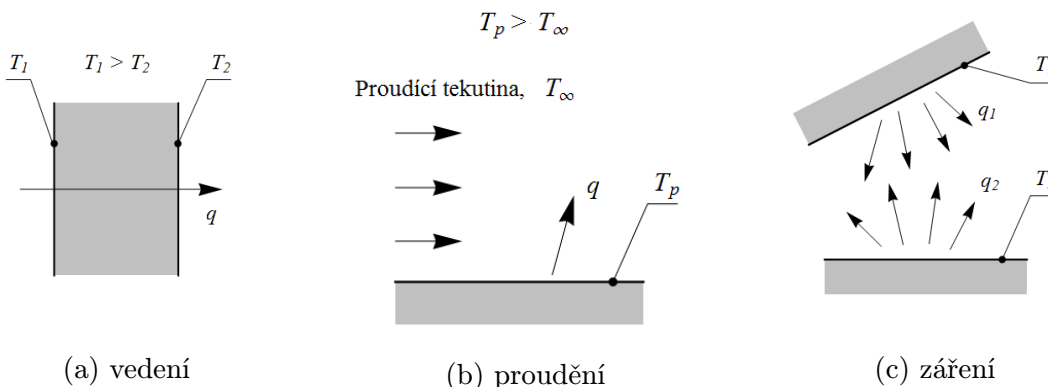
Oxidické vrstvy bývají zpravidla pórovité - obsahují značné množství dutin vyplněných vzduchem. Póry jsou zde náhodně rozmístěny s tím, že jejich koncentrace na rozhraní oceli a okují je větší, než v jiných oblastech. Častokrát je na tomto rozhraní patrná souvislá vrstva vzduchu. Zvyšováním času a teploty oxidace se zvyšuje počet a velikost vzduchových pórů [15]. Ukazuje se, že vzduchové póry značným způsobem ovlivňují průměrnou tepelnou vodivost vrstvy okují. Uváděné hodnoty tepelné vodivosti okují se pohybují v rozmezí od $0,2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [13] až do $3 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [23]. Oxidické vrstvy mohou obsahovat až 30 % vzduchu [15]. Neexistuje vyhovující způsob predikce podílu vzduchu v oxidických vrstvách. Je tedy obtížné odhadnout skutečnou tepelnou vodivost těchto vrstev.

Dalším vlivem, který může mít značný vliv na přestup tepla je drsnost povrchu [17]. Formování oxidických vrstev za vysokých teplot v agresivním prostředí zcela určitě přetváří povrch oceli. Také je nutné brát v úvahu, že mechanické i fyzikální vlastnosti okují jsou teplotně závislé. Všechny tyto skutečnosti vedou ke značnému rozptylu hodnot termofyzikálních vlastností vrstev okují. Podrobnější zkoumání těchto vlastností přesahuje rámec této diplomové práce.

2.2 Přenos tepla

Teplu je jednou ze základních termodynamických veličin. Je definováno jako energie vyměněná mezi určitým systémem a okolím jako důsledek teplotního rozdílu mezi nimi [7]. Smyslem následující kapitoly je zavedení základních pojmů a principů termodynamiky, pomocí kterých je možné modelovat vedení tepla v tuhých tělesech. Následovat bude formulace problému vedení tepla společně s popisem několika základních metod řešení tohoto problému.

Existují tři základní druhy přenosu tepla. V tuhém tělese nebo v kapalině ve stacionárním stavu dochází k přestupu tepla vedením. Pokud sledujeme přestup tepla mezi proudící kapalinou a tuhým tělesem, jedná se o tzv. proudění². Každý povrch o konečné teplotě vyzařuje energii ve formě elektromagnetických vln. Výměnu tepla pomocí těchto vln nazýváme záření (radiace). Jednotlivé druhy přenosu tepla jsou znázorněny na obrázku 2.4.



Obrázek 2.4: Jednotlivé druhy přenosu tepla.

V dalším se budeme zabývat především vedením tepla. Přímá úloha vedení tepla spočívá v nalezení teplotního pole daného média, jestliže jsou známy okrajové podmínky na jeho hranici. Nechť funkce $T(x, y, z, t)$ vyjadřuje teplotu v bodě (x, y, z) v čase t . Pak musí být splněna *rovnice vedení tepla* [19]

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q} = \rho \cdot c \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (2.1)$$

kde λ je koeficient tepelné vodivosti, ρ je hustota materiálu a c je měrná tepelná kapacita materiálu. Parametr \dot{q} odpovídá vnitřnímu zdroji tepla. Tato rovnice je někdy také nazývána *rovnice tepelné difuze*. Jedná se o parabolickou parciální diferenciální rovnici (PDR) druhého řádu. V dalším textu se omezíme pouze na úlohu vedení tepla v jedné dimenzi.

Podíl tepelné vodivosti a tepelné kapacity

$$a = \frac{\lambda}{\rho \cdot c} \quad (2.2)$$

se nazývá *součinitel teplotní vodivosti* nebo též *difuzivita*. Tato veličina vyjadřuje schopnost vedení tepla v poměru k uchování energie daného materiálu. Materiály s velkým součinitelem a reagují na teplotní změnu v okolí rychleji, než je tomu u materiálů s nízkou hodnotou a .

²Někteří autoři používají také název konvekce odvozený od anglického slova *convection*.

2.2.1 Okrajové a počáteční podmínky

Řešení rovnice vedení tepla je závislé na podmínkách na hranicích pozorovaného média. Pokud se jedná o úlohu nestacionární (závislou na čase), je nutné znát také počáteční podmínku. Pro jednodimenzionální úlohu vedení tepla nabývá tvaru

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad (2.3)$$

kde T_0 je vhodná spojitá funkce.

V praxi se vyskytují tři základní typy okrajových podmínek (OP). Jestliže je známa teplota na povrchu tělesa, pak mluvíme o okrajové podmínce I. druhu (*Dirichletova*). Pro jednodimenzionální případ má v bodě $x = 0$ Dirichletova podmínka tvar

$$T(0, t) = T_p(t), \quad (2.4)$$

kde T_p je opět nějaká spojitá funkce.

Okrajová podmínka II. druhu se také někdy nazývá *Neumannova*. Tuto podmínku lze použít, je-li znám tepelný tok q_p na povrchu zkoumaného tělesa. Níže je uveden opět příklad pro jednu dimenzi.

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = q_p(t). \quad (2.5)$$

Speciálním případem je dokonale izolovaný (adiabatický) povrch. Pak platí

$$\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0. \quad (2.6)$$

Okrajová podmínka III. druhu (někdy též *Newtonova* či *Robinova*) se předepisuje v případě přenosu tepla konvekcí na rozhraní povrchu tělesa a pohybující se tekutiny. V jedné dimenzi pak nabývá tvaru

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \alpha(T_\infty - T), \quad (2.7)$$

kde T_∞ je teplota okolí, T je teplota povrchu a α je tzv. *součinitel přestupu tepla*. Ten bývá často silně závislý na teplotě povrchu tělesa. Do podmínky III. druhu bývá často zahrnut také člen vyjadřující přenos tepla zářením (radiací). Velikost tohoto členu udává Stefanův-Boltzmannův zákon [7]

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \sigma \epsilon (T_\infty^4 - T^4), \quad (2.8)$$

kde σ je Stefanova-Boltzmannova konstanta a ϵ je emisivita povrchu. Celkově lze tedy Newtonovu podmínku vyjádřit jako kombinaci konvektivního a radiačního členu rovnicí

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \alpha(T_\infty - T) + \sigma \epsilon (T_\infty^4 - T^4). \quad (2.9)$$

Okrajová podmínka III. druhu se často používá v technických aplikacích, neboť ji lze využít pro modelování přenosu tepla při chlazení vodní tryskou [11].

2.2.2 Analytické řešení rovnice vedení tepla

Analytické řešení rovnice vedení tepla lze najít pouze pro některé jednoduché geometrie se speciálně zadanými okrajovými podmínkami. Tyto případy jsou popsány v literatuře [9]. Ve valné většině úloh ovšem analytické řešení daného problému najít nelze. Je tedy nutné použít některou z numerických metod (viz kapitolu 2.2.3). Analytické řešení problému se často používá při určování přesnosti jednotlivých numerických metod.

Jedním z případů, kdy je možné najít analytické řešení, je jednodimenzionální vedení tepla s jednou okrajovou podmínkou. Tuto úlohu můžeme interpretovat jako řešení problému vedení tepla v nekonečněrozměrné desce, která má také nekonečnou hloubku. Častěji se ale tato úloha popisuje jako vedení tepla v tyči, jejíž výška a šířka je vzhledem k délce zanedbatelná. Jednotlivá řešení se liší dle typu okrajové podmínky na povrchu desky. Materiálové vlastnosti desky musí být konstantní. Dále se předpokládá, že deska má počáteční teplotu T_0 , což je rovněž konstanta. Jestliže nastane náhlá změna okrajových podmínek, pak jsou analytická řešení jednotlivých případů dána následujícími vztahy [9]:

- Konstantní teplota na povrchu

$$\frac{T(x, t) - T_p}{T_0 - T_p} = \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot t}}\right), \quad (2.10)$$

$$q_p(t) = \frac{\lambda(T_p - T_0)}{\sqrt{\pi \cdot a \cdot t}}. \quad (2.11)$$

- Konstantní tepelný tok

$$T(x, t) = \frac{2q_p\sqrt{\frac{a \cdot t}{\pi}}}{\lambda} \cdot \exp\left(\frac{-x^2}{4a \cdot t}\right) - \frac{q_p \cdot x}{\lambda} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot t}}\right) + T_0. \quad (2.12)$$

- Konstantní proudění na povrchu

$$\begin{aligned} \frac{T(x, t) - T_0}{T_\infty - T_0} = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot t}}\right) - \exp\left(\frac{\alpha \cdot x}{\lambda} + \frac{\alpha^2 \cdot a \cdot t}{\lambda^2}\right) \\ \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{a \cdot t}} + \frac{\alpha\sqrt{a \cdot t}}{\lambda}\right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Symbolem $\operatorname{erf}(x)$ je označena tzv. *Gaussova chybová funkce*³ a $\operatorname{erfc}(x)$ je tzv. *doplňková chybová funkce*, jejíž hodnota je dána vztahem $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$.

Jestliže má deska konečnou tloušťku $2L$ a je náhle vystavena proudění s konstantním koeficientem přenosu tepla α a teplotou T_∞ , pak lze přesné řešení vyjádřit vztahem [9]

$$\frac{T(x, t) - T_\infty}{T_0 - T_\infty} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4 \sin \zeta_n}{2\zeta_n + \sin(2\zeta_n)} \cdot \exp\left(\frac{-\zeta_n^2 \cdot a \cdot t}{L^2}\right) \cdot \cos(\zeta_n \cdot x), \quad (2.14)$$

kde diskrétní hodnoty ζ_n jsou kladné kořeny transcendentní rovnice

$$\zeta_n \tan \zeta_n = \frac{\alpha \cdot L}{\lambda}. \quad (2.15)$$

Protože okrajové podmínky jsou shodné na obou koncích, je teplotní pole symetrické podle středu desky. Do něj je umístěn počátek soustavy souřadnic $x = 0$.

³Je definována vztahem $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ [3].

2.2.3 Numerické řešení rovnice vedení tepla

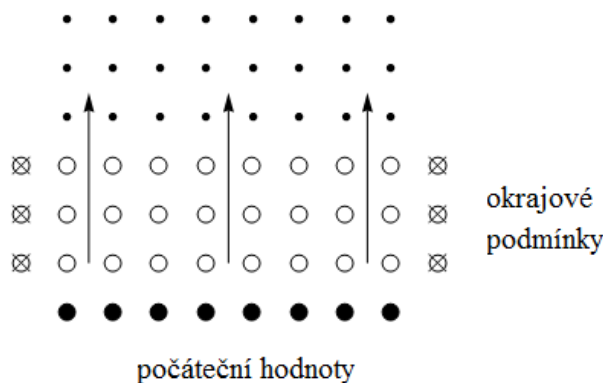
V situacích, kdy nelze nalézt analytické řešení PDR vedení tepla, je nutné použít některou z numerických metod, kterých v současné době existuje celá řada. Nejpoužívanějšími z nich jsou metoda konečných diferencí, metoda konečných objemů a metoda konečných prvků. Základní informace o jednotlivých metodách lze dohledat například v [18, 6].

Pro numerické výpočty vedení tepla přes okraje bude využita metoda konečných diferencí, která je popsána v následujícím textu.

Jak již bylo v úvodu řečeno, problém vedení tepla popisuje PDR tepelné difuze 2.1, která je parabolická. Za předpokladu použití difuzivity a nabývá tato rovnice v jedné dimenzi tvaru

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(a \frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (2.16)$$

Tato rovnice popisuje, jak se bude s přibývajícím časem měnit teplota $T(x, t)$.



Obrázek 2.5: Grafické znázornění počátečního problému jednorozměrného vedení tepla.

Cílem numerické metody je výpočet teplot dopředu v čase s předem stanovenou přesností. Důležitým požadavkem na použitý algoritmus je jeho stabilita a záruka konvergence ke správnému řešení. Při volbě metody je také nutné dbát na výpočetní náročnost. Například počáteční problém na síti o 100×100 uzlech povede na řešení soustavy rovnic o 10 000 neznámých, což znamená počítání s maticí o velikosti $10\,000 \times 10\,000$, která obsahuje 10^8 prvků.

Předpokládejme nejprve, že a je konstantní. Pak lze rovnici 2.16 přepsat do tvaru

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (2.17)$$

Dále předpokládejme $a \geq 1$. V opačném případě je totiž tato rovnice fyzikálně nestabilní, tedy malé výchylky v počátečních datech vedou ke hromadění energie, ačkoli ta by se měla spíše rozptylovat.

Rovnici 2.17 lze pak diskretizovat do tvaru

$$\frac{T_j^{m+1} - T_j^m}{\Delta t} = a \left(\frac{T_{j+1}^m - 2T_j^m + T_{j-1}^m}{(\Delta x)^2} \right), \quad (2.18)$$

kde T_j^m je označení pro teplotu v j -tém uzlu v časovém kroku m . Symboly Δt , Δx označují délky kroku v čase respektive v prostoru. Toto schéma nese označení FTCS⁴. Jeho název je

⁴Forward Time Centered Space

2.2. PŘENOS TEPLA

odvozen od skutečnosti, že diskretizace v čase je dopředná, zatímco prostorová diskretizace je centrální. Toto schéma se též někdy nazývá *explicitní*. Pro jeho úspěšné použití musí být splněna podmínka stability [20]

$$\frac{2a\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq 1. \quad (2.19)$$

Maximální délka časového kroku je tedy omezená vzdáleností sousedních uzlů Δx .

Další možností, jak lze zavést časovou diskretizaci, je tzv. *implicitní* schéma

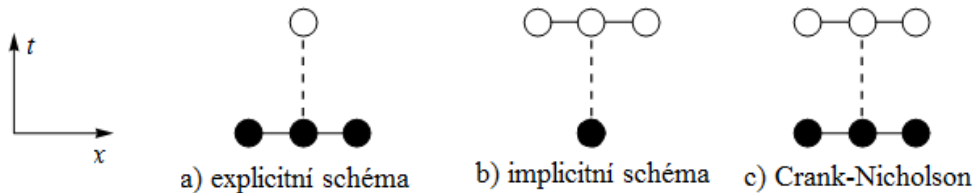
$$\frac{T_j^{m+1} - T_j^m}{\Delta t} = a \left(\frac{T_{j+1}^{m+1} - 2T_j^{m+1} + T_{j-1}^{m+1}}{(\Delta x)^2} \right). \quad (2.20)$$

Použití schématu 2.20 vyžaduje řešení soustavy lineárních rovnic v každém časovém kroku. Naštěstí je v jedné dimenzi situace značně zjednodušena, protože matice této soustavy je tridiagonální. Soustava je tedy snadno numericky řešitelná. Výhodou tohoto schématu je záruka stability. Pro velké hodnoty Δt (vzhledem k Δx) jsou ovšem výsledky výpočtu značně nepřesné.

Kombinací předchozích dvou schémat obdržíme tzv. *Crankovo-Nicholsonovo* numerické schéma. To je dáno předpisem

$$\frac{T_j^{m+1} - T_j^m}{\Delta t} = \frac{a}{2} \left(\frac{T_{j+1}^{m+1} - 2T_j^{m+1} + T_{j-1}^{m+1} + T_{j+1}^m - 2T_j^m + T_{j-1}^m}{(\Delta x)^2} \right). \quad (2.21)$$

Je to metoda druhého řádu jak v čase, tak v prostoru, a jedná se o aritmetický průměr schémat 2.20 a 2.18. Protože obsahuje implicitní schéma, je to metoda relativně stabilní a měla by konvergovat ke správnému řešení pro všechny volby Δt . Bohužel se ukazuje, že pro velké Δt a teplotně závislou difuzivitu a stabilitu ztrácí. Tato metoda je často



Obrázek 2.6: Znázornění tří schémat časové diskretizace.

doporučována v případě řešení jednoduchých problémů vedení tepla. Pro zlepšení stability je vhodné v několika posledních krocích použít plně implicitní předpis (viz obr. 2.6).

Nyní se vrátíme k případu, kdy koeficient a v rovnici 2.16 není konstantní. Předpokládejme, že je funkcí prostorové proměnné x . Je možné aplikovat dva odlišné přístupy. Prvním z nich je transformace

$$y = \int \frac{dx}{a(x)}. \quad (2.22)$$

Pak 2.16 nabývá tvaru [20]

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{a(y)} \frac{\partial T}{\partial y^2} \quad (2.23)$$

Je zřejmé, že je potřeba dopočítat hodnoty a v uzlech y_j . Kritérium stability pro časový krok Δt nabývá při tomto přístupu tvaru

$$\Delta t \leq \min_j \left[\frac{(\Delta y)^2}{2a_j^{-1}} \right]. \quad (2.24)$$

Za povšimnutí stojí rovněž skutečnost, že ekvidistantní dělení v proměnné y neznamená ekvidistantní dělení v x a naopak.

Dalším možným přístupem je diskretizace rovnice 2.16 pomocí schématu

$$\frac{T_j^{m+1} - T_j^m}{\Delta t} = \frac{a_{j+1/2}(T_{j+1}^m - T_j^m) - a_{j-1/2}(T_j^m - T_{j-1}^m)}{(\Delta x)^2}, \quad (2.25)$$

kde

$$a_{j+1/2} = a\left(x_j + \frac{\Delta x}{2}\right). \quad (2.26)$$

Kritérium stability je opět pozměněno

$$\Delta t \leq \min_j \left[\frac{(\Delta x)^2}{2a_{j+1/2}} \right]. \quad (2.27)$$

Dalším možným problémem je řešení počátečního problému, který není lineární. Tento jev nastane například pro $a = a(T)$. Explicitní schémata pak mohou být jednoduše diferencována zřejmým způsobem. Například v rovnici 2.25 lze difuzivitu přepsat na

$$a_{j+1/2} = \frac{1}{2} \left(a(T_{j+1}^m) + a(T_j^m) \right). \quad (2.28)$$

U implicitních schémat je situace poněkud komplikovanější. Nahrazení $m \rightarrow m + 1$ v rovnici 2.28 vede k řešení soustavy nelineárních rovnic v každém časovém kroku. Často je možné zvolit jednodušší způsob. Jestliže je závislost $a(T)$ zadána ve vhodném tvaru, pak lze psát

$$dU = a(T)dT \quad (2.29)$$

a pravá strana rovnice 2.16 přejde na $\partial^2 U / \partial x^2$. Tento výraz diferencujeme implicitně takto:

$$\frac{U_{j+1}^{m+1} - 2U_j^{m+1} + U_{j-1}^{m+1}}{(\Delta x)^2}. \quad (2.30)$$

Nyní je nutné zlinearizovat členy ve výrazu 2.30. Kupříkladu

$$U_j^{m+1} \equiv U(T_j^{m+1}) = U(T_j^m) + (T_j^{m+1} - T_j^m) \frac{\partial U}{\partial T} \Big|_{j,m} \quad (2.31)$$

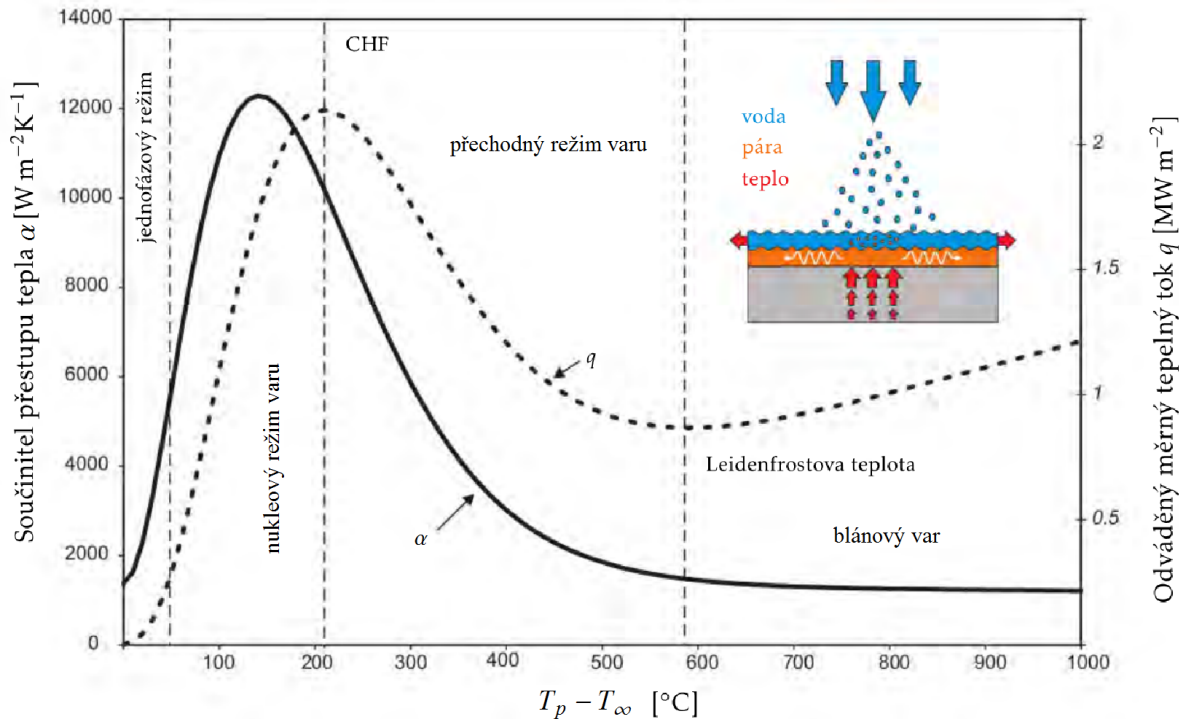
$$= U(T_j^m) + (T_j^{m+1} - T_j^m) a(T_j^m). \quad (2.32)$$

Tím opět získáme systém s třídiagonální maticí, který si ponechává výhody stability plně implicitních numerických schémat.

2.2.4 Modelování vedení tepla pod chladicími tryskami

Jelikož jedním z hlavních cílů této práce je modelování přenosu tepla při chlazení vodními tryskami, je nutné alespoň stručně shrnout zákonitosti a obecné principy, kterými se tento proces řídí. Hlavním cílem chlazení vodní tryskou je šetrné snížení teploty chlazeného tělesa. Průběh teplot v jednotlivých částech materiálu je objektem zájmu vědeckých pracovníků, neboť jím může být do značné míry ovlivněna struktura a vlastnosti materiálu.

2.2. PŘENOS TEPLA



Obrázek 2.7: Graf závislosti koeficientu přestupu tepla α a měrného tepelného toku q v závislosti na rozdílu teploty povrchu T_p a teploty okolí T_∞ [26].

Odvod tepla z povrchu chlazeného tělesa je způsoben zejména vedením a zářením. Zásadní otázkou je pak správné stanovení velikosti koeficientu přenosu tepla α . Chlazení probíhá v několika režimech (viz obr. 2.7), které závisí na fyzikálním mechanismu přestupu tepla. Za vysokých teplot chlazeného povrchu dochází k tzv. režimu varu povrchového filmu⁵, při kterém dochází k velice krátkému kontaktu chlazeného povrchu s vodními kapkami, které se okamžitě vypařují a vzniká zde stabilní parní vrstva. Ta brání kapkám smáčet povrch a množství odvedeného tepla v tomto režimu je tedy relativně nízké. Koeficient přestupu tepla α je v tomto režimu téměř konstantní (není funkcí teploty povrchu).

K přechodnému režimu varu⁶ dochází v momentě, kdy teplota povrchu klesne pod tzv. *Leidenfrostovu teplotu* a parní vrstva začíná být nestabilní. V tomto režimu narůstá efektivita chlazení a teplota chlazeného povrchu výrazně klesá. S klesající teplotou hodnoty koeficientu přestupu tepla a tepelného toku rostou. Z obrázku 2.7 je také patrné, že v Leidenfrostově bodě je tepelný tok minimální.

Tepelný tok roste s klesající teplotou povrchu do té doby, než dosáhne svého lokálního maxima. Mluvíme o tzv. kritickém tepelném toku (CHF z angl. *Critical Heat Flux*), při kterém začnou kapky efektivně smáčet povrch za současného přechodu do tzv. nukleového režimu varu. Hodnota tepelného toku je zpočátku tohoto režimu vysoká, ale s klesající teplotou povrchu prudce klesá. Po dalším poklesu postupně zaniká nukleace (tvorba zárodků) výparných bublinek. Přenos tepla je pak zprostředkován přirozenou

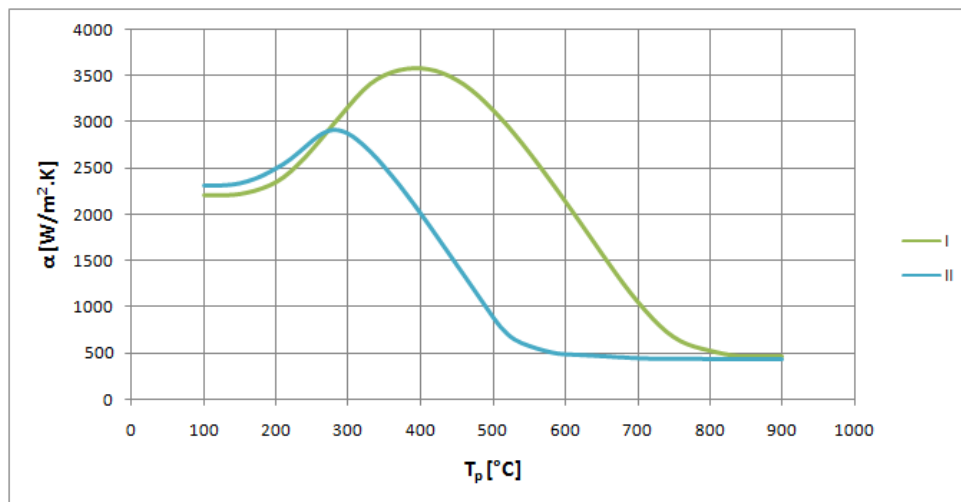
⁵Často bývá označován také jako blánový var. V anglické literatuře se používá termínu *Film Boiling Regime*.

⁶Anglicky *Transition Boiling Regime*.

2. TEORETICKÝ ZÁKLAD

konvekci přes vodní film vytvořený dopadajícími kapkami, mluvíme o tzv. jednofázovém režimu.

Intenzitu chlazení je možné upravovat například výměnou trysky, či změnou průtoku vody. Laboratorní měření ukazují, že zvýšením intenzity chlazení se zvyšuje hodnota koeficientu přestupu tepla, ale také se posunuje Leidenfrostova teplota. Tato změna je patrná z obrázku 2.8, kde křivka I odpovídá chlazení o nižší intenzitě. Křivka II odpovídá intenzivnějšímu chlazení.



Obrázek 2.8: Porovnání dvou intenzit vodního chlazení.

2.3 Regresní analýza

Cílem následující kapitoly bude stručné shrnutí obecných zákonitostí a pravidel, týkajících se modelování pomocí *regrese*. Tento pojem zavedl Francis Galton již v 19. století, když vyšetřoval vztah průměrné výšky potomků vzhledem k průměrné výšce jejich rodičů [27]. Nejdříve bude popsáno odvození klasického lineárního modelu, který bude v následující části zobecněn.

Při popisu dat budou použity základní metody popisné statistiky (např. aritmetický průměr, histogram), které jsou k dohledání ve většině příruček matematické statistiky. Dalším předpokladem pro porozumění textu následující kapitoly je alespoň intuitivní znalost elementárních statistických pojmů, jakými jsou náhodná veličina, střední hodnota či rozptyl. Definice a vlastnosti těchto pojmů je možné dohledat např. v [2]. Při popisu lineárních a zobecněných lineárních modelů bylo čerpáno především z [22].

2.3.1 Lineární regresní model

Statistickou analýzou pomocí lineární regrese modelujeme vztah mezi výstupní závisle proměnnou Y a vstupními (nezávislými) proměnnými X_1, \dots, X_k . Proměnná Y se v regresi bere jako náhodná, zatímco X_i jsou pro $i = 1, \dots, k$ pevné (jednotlivá pozorování budou značena malými písmeny). Předpokládáme, že vstupní data obsahují n pozorování vysvětlované veličiny Y společně s n hodnotami nezávislých vstupních veličin X_1, \dots, X_k .

Nechť i -té pozorování vysvětlované proměnné Y lze modelovat rovnicí

$$Y_i = \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_k x_{ik} + e_i, \quad (2.33)$$

kde pro $i = 1, \dots, n$ a $j = 1, \dots, k$

- Y_i je i -té pozorování závislé proměnné Y ,
- x_{ij} je hodnota proměnné x_j při i -tém pozorování,
- β_j jsou neznámé regresní koeficienty a
- e_i je neznámá náhodná chyba i -tého pozorování veličiny Y .

Dále budeme předpokládat, že pro $i = 1, \dots, n$, $j = 1, \dots, n$ je

(i) $E(e_i) = 0$.

Tedy střední hodnota náhodné složky je nulová. Tato podmínka znamená, že náhodné chyby nevychylují hodnoty závislé proměnné Y systematickým způsobem.

(ii) $\text{var}(e_i) = \sigma^2$.

Rozptyl náhodné složky je konstatní a má hodnotu σ^2 . Tato podmínka se někdy také nazývá *homoskedasticita*.

(iii) $\text{cov}(e_i, e_j) = 0$.

Náhodné chyby jsou nekorelované. Z toho vyplývá také nekorelovanost jednotlivých pozorování Y_i náhodné veličiny Y .

Model, daný rovnicí 2.33, se pak nazývá *lineární regresní model* (LRM). Jestliže zavedeme označení

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}, \mathbf{e} = \begin{bmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_n \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1k} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix}, \quad (2.34)$$

pak lze tento model zapsat zjednodušeně v maticovém tvaru

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}. \quad (2.35)$$

Matice \mathbf{X} se označuje jako matice plánu či regresní matice. Jestliže jsou její sloupce lineárně nezávislé a počet parametrů β_i je menší, než n , pak lze vektor koeficientů $\boldsymbol{\beta}$ odhadnout pomocí tzv. metody nejmenších čtverců, která spočívá v minimalizaci součtu druhých mocnin chyb

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = (\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})'(\mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}). \quad (2.36)$$

Odhad koeficientů $\boldsymbol{\beta}$ je pak dán vztahem [27]

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{Y}. \quad (2.37)$$

Stříška nad znakem $\boldsymbol{\beta}$ značí, že se jedná o odhad daného parametru. Lze dokázat, že $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ je nejlepším nestranným odhadem vektoru koeficientů $\boldsymbol{\beta}$. Z této skutečnosti vyplývá, že nejlepším nestranným odhadem střední hodnoty $E(Y_i)$ je veličina $\hat{Y}_i = \hat{\beta}_1 x_{i1} \dots + \hat{\beta}_k x_{ik}$. Kvalitu sestaveného modelu lze potom posoudit porovnáním pozorovaných hodnot Y_i a predikovaných hodnot \hat{Y}_i (např. v grafech). Rozdíl $r_i = Y_i - \hat{Y}_i$ se nazývá *i-té reziduum*. Veličina

$$RSS = \sum_{i=1}^n r_i^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad (2.38)$$

se nazývá *reziduální součet čtverců*. Pomocí RSS stanovujeme kvalitu proložení měřených dat Y_i odhadnutými hodnotami \hat{Y}_i . Lze ukázat, že za předpokladu (ii) je veličina

$$s^2 = \frac{RSS}{n - k}, \quad (2.39)$$

kteřá se nazývá *reziduální rozptyl*, nestranným odhadem rozptylu chyb σ^2 (důkaz např. [2]).

Podíl variability závislé proměnné, kterou popisuje zkonstruovaný LRM, udává veličina nazývaná *koeficient determinace*. Ta je definovaná vztahem

$$R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS}, \quad (2.40)$$

kde

$$TSS = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2 \quad (2.41)$$

je tzv. *celkový součet čtverců*. Symbolem \bar{Y} je označen aritmetický průměr veličin Y_i . Koeficient determinace může nabývat pouze hodnot v intervalu od 0 do 1. Jestliže $R^2 = 1$,

2.3. REGRESNÍ ANALÝZA

pak je modelem vysvětleno 100 % variability proměnné Y . Jestliže však $R^2 = 0$, pak model nedává žádnou užitečnou informaci.

V technických aplikacích se chyba modelu také často vyjadřuje vztahem [10]

$$RMS = \left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \right)^{1/2}. \quad (2.42)$$

RMS je v tomto případě zkratkou anglického pojmu *Root Mean Squared*.

Základem všech regresních modelů je výběr vhodné modelové rovnice. Matici \mathbf{X} lze totiž zvolit mnoha různými způsoby. Předpokládáme-li například, že Y závisí na druhé mocnině proměnné X_j , pak je vhodné do matice \mathbf{X} zahrnout sloupec $(x_{1j}^2, \dots, x_{nj}^2)$. Tímto způsobem se dá postupovat k mocninám vyšších stupňů. Hrozí zde ovšem riziko náročnější interpretace sestaveného modelu.

Dalším trikem, který lze použít při modelování LRM je zohlednění interakcí mezi jednotlivými proměnnými. Předpokládáme-li, že Y je závislá spíše na kombinaci dvou (či více) nezávislých proměnných, pak se za některé ze sloupců matice \mathbf{X} dosadí jejich součin. Je zřejmé, že v případě velkého množství nezávislých proměnných vstupujících do modelu se hledání vhodné rovnice závislosti Y a X_1, \dots, X_k jeví jako poměrně složitý úkol (více v [27]).

Při volbě modelové rovnice se také někdy dostaneme do situace, kdy je vhodné transformovat závisle proměnnou. Činíme tak proto, abychom zajistili splnění některého z předpokladů (i)-(iii). Častokrát se tímto způsobem stabilizuje rozptyl náhodné složky modelu. Každá nelineární transformace závisle proměnné ovlivňuje její rozdělení včetně rozptylu. Mezi běžně používané transformace patří logaritmická nebo mocninná [27].

Obecně platným pravidlem při modelování pomocí regrese je zásada jednoduchosti. Máme-li dva modely, z nichž je jeden jednodušší a popisuje data srovnatelně se složitějším modelem, pak je dána přednost modelu jednoduššímu, který je lépe interpretovatelný a zároveň je zde větší šance, že bude vhodnější pro predikci výstupní proměnné Y . Orientačním ukazatelem míry závislosti mezi dvěma proměnnými může být tzv. *koefficient korelace*⁷.

Při výběru koeficientů se také někdy používají sekvenční metody výběru modelu, které porovnávají jednotlivé modely pomocí tzv. *Akaikeho informačního kritéria (AIC)*, což je logaritmus odhadu rozptylu, který je zvětšený o penalizaci počtu odhadovaných parametrů [27]. Sekvenční metody se dělí na vzestupné a sestupné. V prvním případě jsou do modelu postupně zahrnovány proměnné, které přispějí k vysvětlení variability v odezvě nejvíce. Druhá metoda naopak ve svém průběhu sloupce matice \mathbf{X} redukuje. K ukončení těchto metod dochází v okamžiku, kdy je rozdíl v AIC přidáním (resp. odebráním) dalšího regresoru již zanedbatelný. Na začátku algoritmu je většinou zvolena nějaká kritická hodnota, tedy hranice pod kterou nesmí klesnout rozdíl parametru AIC starého a nového modelu.

⁷Pro dva náhodné výběry $X = (X_1, \dots, X_n)$ a $Y = (Y_1, \dots, Y_n)$ je dán vztahem $r = \frac{S_{XY}}{\sqrt{S_X^2 S_Y^2}}$, kde $S_{XY} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})$ a $S_X^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$, obdobně pro Y . Symbol \bar{X} zde opět značí aritmetický průměr veličiny X .

2.3.2 Zobecněný lineární model

Lineární regresní modely lze efektivně použít jen tehdy, jsou-li splněny všechny předpoklady (i)-(iii), které jsou pro praxi častokrát velice limitující. Často se proto využívá tzv. *zobecněných lineárních modelů* (ZLM), které vyžaduje poněkud obecnější předpoklady.

Zobecněný lineární model je složen ze tří komponent:

1. Nezávislých náhodných veličin Y_i se středními hodnotami μ_i pro $i = 1, \dots, n$, kde n je opět počet pozorování. Tyto náhodné veličiny sdílejí stejné rozdělení pravděpodobnosti, které spadá do tzv. *exponenciální třídy rozdělení*⁸.
2. *Lineárního prediktoru*, tedy lineární funkce n nezávislých pozorování

$$\eta_i = \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_k x_{ik}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.43)$$

3. Spojité invertibilní *linkovací funkce* g , která transformuje střední hodnotu závislé proměnné, $\mu_i = E(Y_i)$, na lineární prediktor η_i . Platí tedy

$$g(\mu_i) = \eta_i = \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_k x_{ik}, \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.44)$$

Protože linkovací funkce je invertibilní, lze psát

$$\mu_i = g^{-1}(\eta_i) = g^{-1}(\beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_k x_{ik}), \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.45)$$

Na ZLM tedy může být nahlíženo jako na lineární model pro transformaci očekávané odezvy. Správná volba linkovací funkce je klíčovou částí konstrukce ZLM. Příkladem běžně používaných linkovacích funkcí mohou být např. identita, logaritmus, inverze, mocninné funkce nebo tzv. *logitová* linkovací funkce (více ve [14]).

Příkladem ZLM může být již zmiňovaná lineární regrese, neboť normální rozdělení spadá do exponenciální třídy a volbou identity jako linkovací funkce obdržíme vztah

$$E(Y_i) = \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_k x_{ik}, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.46)$$

ekvivalentní se vztahem 2.33. Dalšími modely, které spadají do kategorie ZLM, jsou různé modely analýzy rozptylu nebo například logistická regrese.

Odhad vektoru parametrů β probíhá metodou maximální věrohodnosti, což je jedna ze základních metod matematické statistiky. Zajišťuje, že získaný odhad bude mít žádoucí vlastnosti. Je založena na tom, že maximalizuje tzv. *věrohodnostní funkci*. Pro nalezení koeficientů ZLM je nutné řešit nelineární problém, proto se při odhadu parametru β používá iteračních metod. Detailní odvození této metody pro ZLM lze najít např. v [22].

Při diagnostice ZLM lze využít metod, popsanych v kapitole 2.3.1. Jedná se zejména o vizualizaci reziduí nebo výpočet *AIC*. Tento parametr slouží opět jako dobrý ukazatel pro výběr optimální množiny prediktorů v sekvenčních metodách.

⁸Jedná se o spojitá či diskrétní rozdělení, jejichž hustotu pravděpodobnosti lze zapsat ve tvaru $f(x; \xi) = r(x)s(\xi)\exp(t(x)u(\xi))$, kde r, s, t, u jsou reálné funkce a ξ je neznámý parametr. Rozdělení, která náležejí do exponenciální třídy mají mnoho „pěkných“ vlastností [14]. Příkladem může být normální, Poissonovo, binomické nebo gamma rozdělení pravděpodobnosti.

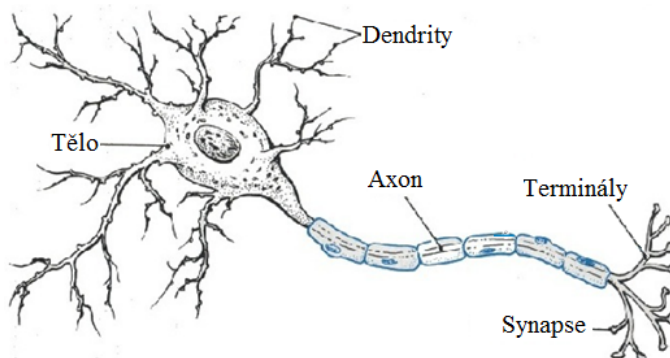
2.4 Umělé neuronové sítě

Umělé neuronové sítě (zkráceně UNS) již poměrně dlouhou dobu nacházejí uplatnění v mnoha odvětvích lidské činnosti. Častokrát vhodně doplňují konvenční analytické metody a nabízejí zajímavý alternativní postup při řešení mnoha technických, či jiných problémů. Následující kapitola stručně pojednává o principu činnosti umělých neuronových sítí. Zároveň jsou zde zhodnoceny výhody a nevýhody použití UNS.

2.4.1 Myšlenka neuronových sítí

Umělé neuronové sítě jsou matematické struktury, které jsou určeny pro distribuované, paralelní zpracování dat. Při jejich vzniku se vědci inspirovali stavbou a činností nervové soustavy člověka. Správně sestavená umělá neuronová síť by, stejně jako síť biologická, měla reagovat vhodným výstupním signálem na vstupy (podněty) z okolí.

Základním výkonným a stavebním prvkem biologické neuronové sítě je neuron. Velmi zjednodušeně jeho funkce spočívá v příjmu signálů ze svého okolí, jejich zpracování, vytvoření odezvy a přenosu této odezvy dále. Na obrázku 2.9 je znázorněn zjednodušený model biologického neuronu, zároveň jsou zde popsány základní stavební prvky neuronu.



Obrázek 2.9: Biologický neuron [4].

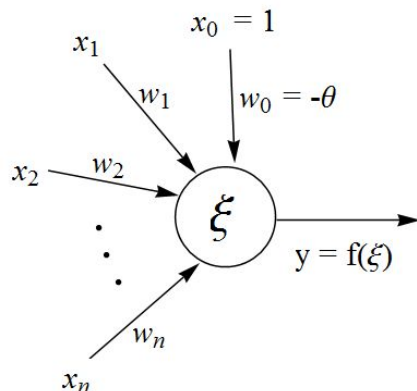
Do těla neuronu vede velký počet vstupů, neboli *dendritů*. Vystupuje z něj pouze jeden výstup (*axon*), který se ovšem může dále rozvětvovat do tzv. *terminálů*. Ty se připojují na dendrity dalších neuronů pomocí zvláštních mezineuronových rozhraní, tzv. *synapsí*. Synaptická propustnost se každým průchodem signálu mění, což dává neuronu schopnost paměti. Vzájemně propojené neurony pak vytvářejí nervovou soustavu.

2.4.2 Model neuronu

Jak již bylo řečeno, základním prvkem mozku je biologický neuron. V umělých neuronových sítích je základní stavební prvek tvořen tzv. *formálním neuronem* (viz obr. 2.10).

Formální neuron má n , obecně reálných, vstupů x_i . Tyto vstupy jsou ohodnoceny synaptickými vahami w_i . Váhy určují míru propustnosti jednotlivých vstupních signálů. Pokud je překročen práh θ , pak je neuron excitován a vyšle signál y , který je funkcí vnitřního potenciálu ξ , jenž je určen vztahem

$$\xi = \sum_i w_i x_i. \quad (2.47)$$



Obrázek 2.10: Formální neuron.

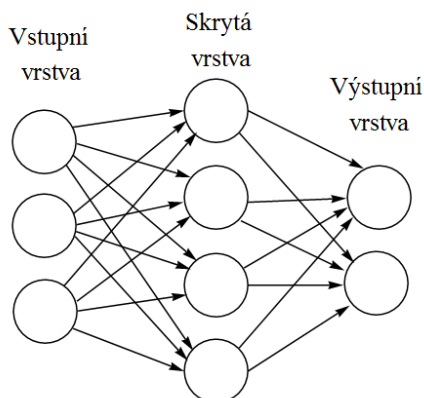
V praxi se používají přenosové funkce různých typů. Nejpoužívanější z nich je nejspíše standartní (logistická) sigomida, která je dána vztahem

$$f(\xi) = \frac{1}{1 + e^{-\xi}}. \quad (2.48)$$

Byla odvozena od skokové funkce, která se v některých neuronových sítích také využívá. Mezi hlavní výhody logistické sigmoidy patří především její snadná diferencovatelnost. Dále se používají funkce jako hyperbolický tangens nebo různé varianty po částech lineárních funkcí.

2.4.3 Propojení neuronů

Zpracovaný signál $f(\xi)$ může být buď prvkem výstupního vektoru, nebo je zaveden na vstup dalšího neuronu. Jednotlivé neurony jsou pak vzájemně propojené a tvoří soustavu, tedy *neuronovou síť*. Rozlišujeme síť jednovrstvé (většinou speciální typy např. *Kohonenova* či *Hopfieldova* [10]) a vícevrstvé. Příklad vícevrstvé sítě je na obrázku 2.11. Z tohoto vyobrazení je patrné, že jednotlivé vrstvy sítě lze rozlišit na vrstvy vstupní, výstupní a skryté.



Obrázek 2.11: Příklad vícevrstvé neuronové sítě.

Dále lze UNS rozlišit z hlediska směru toku informací na rekurentní (cyklické) a dopředné (acyklické). Rekurentní UNS se vyznačují tím, že v nich existuje skupina neuronů, která je spojena v kruhu (tzv. *cyklus*). Nejjednodušším příkladem cyklu je tzv. *zpětná*

2.4. UMĚLÉ NEURONOVÉ SÍŤE

vazba, tj. neuron, jehož výstup je zároveň jeho vstupem. Sítě s dopřednou topologií naopak cyklus neobsahují.

2.4.4 Proces učení neuronové sítě

Učení je základní a podstatná vlastnost neuronových sítí. V biologických neuronových sítích jsou zkušenosti uloženy v dendritech, zatímco v umělých neuronových sítích jsou zkušenosti uloženy v jejich matematickém ekvivalentu, tzn. ve vahách. Učení sítě probíhá změnou hodnot těchto vah a většinou představuje složitý nelineární optimalizační problém, jehož řešení může trvat velice dlouhou dobu i na výkonných počítačích. Hrozí zde také nebezpečí, že algoritmus adaptace sítě diverguje. V takovém případě bývá vhodné zcela změnit topologii neuronové sítě (například přidáním, či odebráním neuronů ze skrytých vrstev). K tomu se často využívá heuristických algoritmů (např. genetických) nebo zde do procesu učení vstupuje zásah člověka. Učení neuronových sítí rozlišujeme na tzv. *učení s učitelem* a *učení bez učitele*.

V případě učení s učitelem je využita zpětná vazba. Neuronové síti je předložen vzor neboli *trénovací množina*. Na základě aktuálního nastavení vah je zjištěn výstup neuronové sítě, který se porovná s výstupem požadovaným a určí se chyba. Ta může být definována různými způsoby. Často se využívá kvadrátu odchylek požadovaného výstupu od výstupu aktuálního. Dále je spočtena nutná korekce (dle typu neuronové sítě) a jsou upraveny hodnoty vah či prahů tak, aby byla chyba snížena. Tento postup se opakuje až do dosažení předem stanovené minimální chyby. Mezi metody učení s učitelem patří např. Backpropagation, stochastické učení, genetický algoritmus a učení s korekcí chyby [25].

Učení bez učitele nemá žádné vnější kritérium správnosti. Algoritmus učení je navržen tak, že hledá ve vstupních datech určité vzory se společnými vlastnostmi. Tomuto procesu se také někdy říká samoorganizace. Sítě, které jsou trénovány učением bez učitele, jsou určeny především pro klasifikaci vstupních kombinací.

Dále lze učení UNS rozlišit na *deterministické* (změny hodnot vah jsou vypočítány podle pevně stanovených pravidel) a *stochastické* (synaptické váhy jsou upravovány náhodně).

Před započítím učení sítě jsou vstupní data rozdělena na několik částí. První z nich je tzv. *trénovací množina*. Ta obsahuje vzory, pomocí kterých neuronová síť upravuje hodnoty vah tak, aby UNS transformovala vstupní data požadovaným způsobem. Reálná množina o velikosti několika desítek či stovek prvků, měla by obsahovat co největší množství stavů sítě, aby bylo možné nastavit váhy tak, že bude připravena na širokou škálu kombinací vstupních proměnných. Důležitým rysem neuronových sítí je tzv. *generalizace* (zevšeobecnování). Jedná se o schopnost sítě využít tréninkových dat tak, že je schopna reagovat správně nejen na kombinace signálů v tréninkové množině obsažené, ale také na kombinace nové.

K ověření správné generalizace UNS slouží *testovací množina*. Jestliže je chyba UNS na testovací množině vzhledem k množině trénovací příliš velká, nastal jev, který se nazývá *přeučení sítě*. Tento problém se obvykle řeší výběrem další tzv. *validační* (ověřovací) množiny, pomocí níž jsme schopni přesně stanovit okamžik, kdy se síť začíná příliš fixovat na jednotlivé vzory, a ukončit učení právě v tomto momentu.

Kvalitu trénovací množiny je těžké předem určit. To bývá zapříčiněno také špatnou znalostí zákonitostí v systémech, které se snažíme pomocí neuronových sítí modelovat. Často se využívá dat naměřených v nějaké rozsáhlé soustavě. V těchto datech

mohou klíčové informace chybět nebo mohou být zkreslené. Také se může stát, že trénovací množina obsahuje data, která jsou určitým způsobem nadbytečná, tedy nesouvisí se zkoumaným jevem. Nevhodně zvolená trénovací množina se projeví vysokou chybovostí neuronové sítě.

Metoda Backpropagation

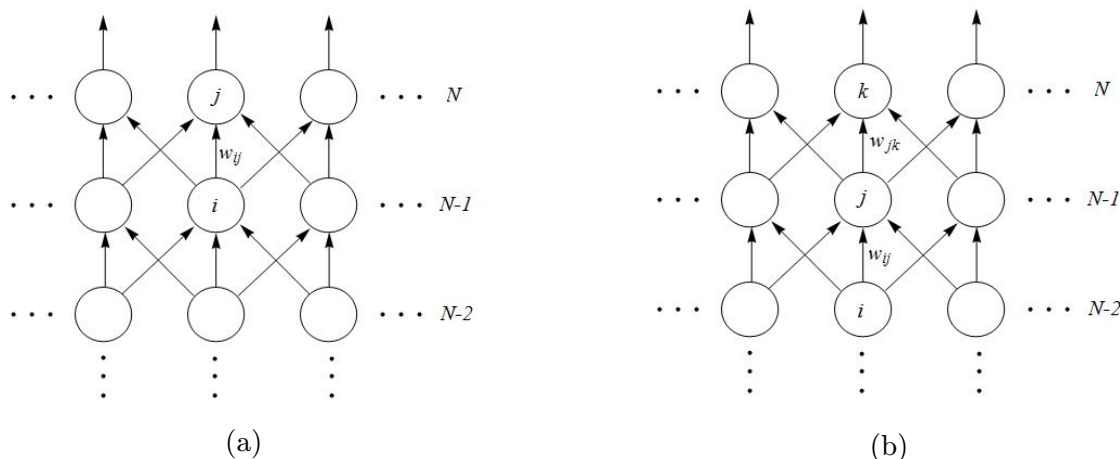
V následující části bude popsán deterministický učící algoritmus založený na metodě největšího spádu, který se nazývá *Backpropagation* (*metoda zpětného šíření*). Mírně upravené verze tohoto algoritmu jsou velice často používány pro trénování vícevrstevných UNS [10]. Tato metoda je založena na minimalizaci energetické funkce, která je pro jeden prvek trénovací množiny daná vztahem

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y_i - o_i)^2. \quad (2.49)$$

V uvedeném vztahu je použito následující označení:

- n je počet neuronů výstupní vrstvy,
- y_i je výstupní signál neuronové sítě na i -tém neuronu,
- o_i je požadovaná odezva i -tého neuronu výstupní vrstvy daná vzorem trénovací množiny.

Energie 2.49 se dá považovat za míru chybovosti neuronové sítě. Je to kvadratická funkce, takže je možná její minimalizace pomocí gradientní metody největšího spádu.



Obrázek 2.12: Označení neuronů pro odvození metody zpětného šíření chyby.

Uvažujme dopřednou UNS o N vrstvách a vezměme dva neurony i a j , které jsou vzájemně propojeny (viz obr. 2.12). Minimální chyby lze dosáhnout postupným upravením synaptických vah pomocí formule

$$\Delta w_{ij} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{ij}}, \quad (2.50)$$

kde Δw_{ij} je změna váhy z i -tého do j -tého neuronu a η je tzv. *koeficient učení*. Pokud je hodnota derivace podle váhy w_{ij} kladná, znamená to, že chyba odezvy s kladnou změnou

2.4. UMĚLÉ NEURONOVÉ SÍŤE

váhy roste, pro záporné hodnoty derivace klesá. Je tedy nutné ubrat resp. přidat nějakou část z hodnoty váhy. Míru této změny udává koeficient učení η . Čím je větší, tím jsou větší také změny hodnot vah v jednotlivých krocích. Stanovení optimální hodnoty tohoto koeficientu je důležité pro správnou rychlost učení. Bude-li hodnota η příliš velká, může se stát, že učicí proces bude divergovat.

Pro stanovení míry změny váhy je nutné spočítat gradient složené energetické funkce E . Parciální derivaci $\frac{\partial E}{\partial w_{ij}}$ se dá rozepsat na

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial E}{\partial y_j} \frac{dy_j}{d\xi_j} \frac{\partial \xi_j}{\partial w_{ij}}. \quad (2.51)$$

Jestliže pro j -tý neuron platí

$$\xi_j = \sum_i w_{ij} y_i, \quad (2.52)$$

kde y_i je výstup neuronu i z předchozí vrstvy. Pak je derivace potenciálu rovna výrazu

$$\frac{\partial \xi_j}{\partial w_{ij}} = y_i. \quad (2.53)$$

Dále lze za předpokladu

$$y_j = f(\xi_j) = \frac{1}{1 + e^{-\xi_j}} \quad (2.54)$$

derivaci přenosové funkce lze zapsat jako

$$\frac{dy_j}{d\xi_j} = \frac{e^{-\xi_j}}{(1 + e^{-\xi_j})^2} = \frac{1 + e^{-\xi_j} - 1}{(1 + e^{-\xi_j})^2} = \frac{1}{1 + e^{-\xi_j}} - \frac{1}{(1 + e^{-\xi_j})^2} = y_j(1 - y_j). \quad (2.55)$$

Zbývá určit hodnotu výrazu $\frac{\partial E}{\partial y_j}$. Jestliže je neuron j součástí výstupní vrstvy (viz obr. 2.12a), pak lze ukázat [5], že platí

$$\frac{\partial E}{\partial y_j} = y_j - o_j. \quad (2.56)$$

Označíme-li $\delta_j^N = y_j(1 - y_j)(y_j - o_j)$ (horním indexem N je označena vrstva, ve které se nachází neuron j), pak dostáváme

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = \delta_j^N y_i. \quad (2.57)$$

Nyní postoupíme o vrstvu výše. Uvažujme, že neuron j je částí skryté vrstvy $N - 1$ (viz obr. 2.12b). Derivace $\frac{\partial E}{\partial w_{ij}}$ pak nabývá tvaru

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{ij}} &= \sum_{k=1}^n \frac{\partial E}{\partial y_k} \frac{dy_k}{d\xi_k} \frac{\partial \xi_k}{\partial w_{ij}} = \sum_{k=1}^n y_k(1 - y_k)(y_k - o_k) w_{jk} \frac{\partial y_j}{\partial w_{jk}} = \\ &= \sum_{k=1}^n \delta_k^N w_{jk} y_j(1 - y_j) y_i = y_i y_j(1 - y_j) \sum_{k=1}^n \delta_k^N w_{jk}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

kde n je počet neuronů výstupní vrstvy. Označením

$$\delta_j^{N-1} = y_j(1 - y_j) \sum_{k=1}^n \delta_k^N w_{jk} \quad (2.59)$$

pak dostaneme rovnici stejného tvaru jako 2.57. Derivace podle vah z další vrstvy směrem ke vstupní se počítají obdobně, přičemž v každém kroku do výrazu přibývá jedna vnořená suma stejně, jako tomu bylo v 2.58. Pro parciální derivaci $\frac{\partial E}{\partial w_{ij}}$ tedy obecně platí

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = \delta_j^l y_i, \quad (2.60)$$

neuron j se nachází v l té vrstvě a

$$\delta_j^l = \begin{cases} y_j(1 - y_j)(y_j - o_j) & \text{pro } l = N, \\ y_j(1 - y_j) \sum_k \delta_k^{l+1} w_{jk} & \text{pro } l = 2, \dots, N - 1, \end{cases} \quad (2.61)$$

index k probíhá přes všechny neurony vrstvy $l + 1$.

Z tohoto schématu je zřejmé, že výpočet přírůstků synaptických vah Δw_{ij} probíhá od nejvyšších vrstev k vrstvám nižším a používá se při něm výsledků z předchozích výpočtů. Odtud pochází český název této metody - zpětné šíření chyby.

Po vyčíslení všech přírůstků Δw_{ij} dojde ke změně synaptických vah. Pak následuje výběr dalšího prvku z tréninkové množiny a celý proces se opakuje. Po vyčerpání celé trénovací množiny se vyhodnotí celková chyba pro všechny vzory trénovací množiny. Pokud je vyšší, než požadovaná, celý proces se opakuje znovu. Pokud je dostatečně malá, proces učení je ukončen.

2.4.5 Citlivostní analýza

Při modelování pomocí UNS je velice důležité správné určení vstupních parametrů. Problém výběru spočívá ve zhodnocení, zdali je daný parametr pro výstup neuronové sítě signifikantní. Některé proměnné mohou být zcela nevýznamné nebo mohou do modelu vstupovat veličiny, které jsou vzájemně korelované. Mohou zde také existovat složitější závislosti, které se běžnými metodami (např. korelační analýzou) odhadují jen velice obtížně.

Míra významnosti jednotlivých vstupních parametrů je dána tzv. *citlivostními koeficienty*, které jsou definovány vztahem

$$s_{ij} = \left| \frac{\partial y_j}{\partial x_i} \right|. \quad (2.62)$$

Parametr s_{ij} udává míru závislosti výstupního signálu y_j na vstupu x_i . Parciální derivace podle vstupů, které odezvu sítě ovlivňují významným způsobem, jsou mnohem vyšší, než parciální derivace podle parametrů s nízkou významností. Proto bývají vstupy s nejnižšími hodnotami citlivostních koeficientů z modelu vynechávány. Ukazuje se, že tak dojde ke zlepšení schopnosti generalizace dané UNS.

Při výpočtu citlivostních koeficientů se opět využije myšlenky zpětného šíření. Jelikož se jedná o derivaci složené funkce, která se v mnoha ohledech podobá chybové funkci 2.49, probíhá výpočet obdobným způsobem jako při učení sítě metodou backpropagation [5].

2.4.6 Aplikace neuronových sítí

UNS nacházejí uplatnění v úlohách týkajících se zpracování neúplných, či málo přesných informací. K jejich nezpochybnitelným výhodám patří schopnost generalizace a také schopnost najít komplexní, obecně nelineární vztahy mezi vstupy a výstupy.

Používají se především k predikci, klasifikaci, rozpoznávání složitých signálů a řešení úloh optimalizačního charakteru za složitých a nejednoznačných podmínek. Úlohy tohoto druhu se vyskytují například v bankovníctví, dopravě, zemědělství atd. Při jejich použití se musí zohlednit rychlost učení a odezvy UNS vzhledem k alternativním metodám. Zejména učení může být výpočetně velice náročný proces. Neméně závažným problémem je výběr trénovací množiny, která může značným způsobem ovlivnit nastavení, a tím i odezvu, sítě.

UNS nejsou vhodné pro přesné výpočty a úlohy numerického charakteru. V rozsáhlých maticích vah jsou nalezené zákonitosti uloženy tak, že do nich „není vidět“. Toto je velkou nevýhodou neuronových sítí. Další nevýhodou je nejistota, zda se podaří dosáhnout žádaných výsledků a také skutečnost, že není možné předem odhadnout velikost chyby.

3 Vypracování úkolu

Následující kapitola bude věnována řešení úkolů, které byly stanoveny v cílech diplomové práce. Konkrétně se jedná o sestavení numerického modelu vedení tepla přes vrstvu okují. Stěžejním bodem bude správná determinace vstupních a výstupních parametrů tohoto modelu. Následně bude popsán průběh simulací pro zvolené hodnoty vstupních parametrů. Výsledek těchto simulací bude sloužit jako trénovací množina regresních modelů a neuronových sítí. Implementace výše zmíněných metod bude popsána v sekci zabývající se predikcí vlivu okují na chlazení.

3.1 Parametrický model vedení tepla

Jedním z hlavních úkolů této diplomové práce je sestavení parametrického numerického modelu vedení tepla, který je schopen pro zadanou tloušťku oxidů, materiálové vlastnosti a další parametry vypočítat rychlost ochlazování základního materiálu. Pro řešení tohoto úkolu bylo využito výpočetní techniky. Model byl naprogramován v prostředí *Delphi*. Značnou výhodou tohoto prostředí byla možnost využít pro výpočty některé předem definované funkce (např. v knihovně *Math*). Dalším důvodem pro tuto volbu je fakt, že výpočetní náročnost aplikací naprogramovaných v *Delphi* je v porovnání s jiným vědecko-technickým softwarem (např. *MATLAB* či *Wolfram Mathematica*) podstatně nižší.

Jak již bylo řečeno, sestavování modelu probíhalo za využití stolního počítače. V dalším textu budou popsány jednotlivé parametry a charakteristiky sestaveného modelu. Obecně lze říci, že jejich hodnoty byly voleny tak, aby odpovídaly podmínkám chlazení oceli při kontinuálním odlévání. Častokrát bylo nutné přistoupit ke značnému zjednodušení, jehož důsledkem byla snadnější interpretace a vizualizace výsledků. Dalším kladem těchto zjednodušení je značné snížení výpočetní náročnosti simulací.

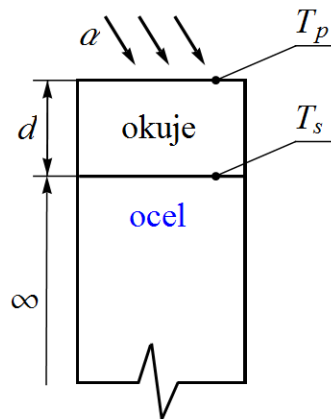
3.1.1 Geometrické charakteristiky

Sestavený model měl za úkol kvantifikovat míru zintenzivnění vodního chlazení povrchu, na kterém je přítomna oxidická vrstva o určité tloušťce. K dosažení tohoto cíle je zapotřebí vyřešit rovnici tepelné difuze, což je rovněž omezující podmínka sestavovaného modelu. Tato rovnice byla řešena numericky, konkrétně metodou konečných diferencí.

Geometrické charakteristiky modelu jsou vyobrazeny na obr. 3.1. Model simuloval jednorozměrné vedení tepla v desce (resp. tyči) o nekonečné hloubce (resp. délce). Na povrchu s předepsanou okrajovou podmínkou III. druhu je přítomna vrstva okují o tloušťce d . Ta byla prvním vstupním parametrem sestavovaného numerického modelu a nabývala devíti hodnot od $10\ \mu\text{m}$ do $300\ \mu\text{m}$. Dělení tohoto intervalu nebylo ekvidistantní, protože se předpokládalo, že na změnu hodnot d bude model reagovat citlivěji v oblasti nižších tloušťek. Na obrázku 3.1 jsou dále vyznačeny důležité teploty, jejichž hodnoty byly během výpočtů sledovány. Jedná se o T_p , což je teplota na povrchu okují, tedy tělesa. Teplota na rozhraní ocel-okuje je označena symbolem T_s .

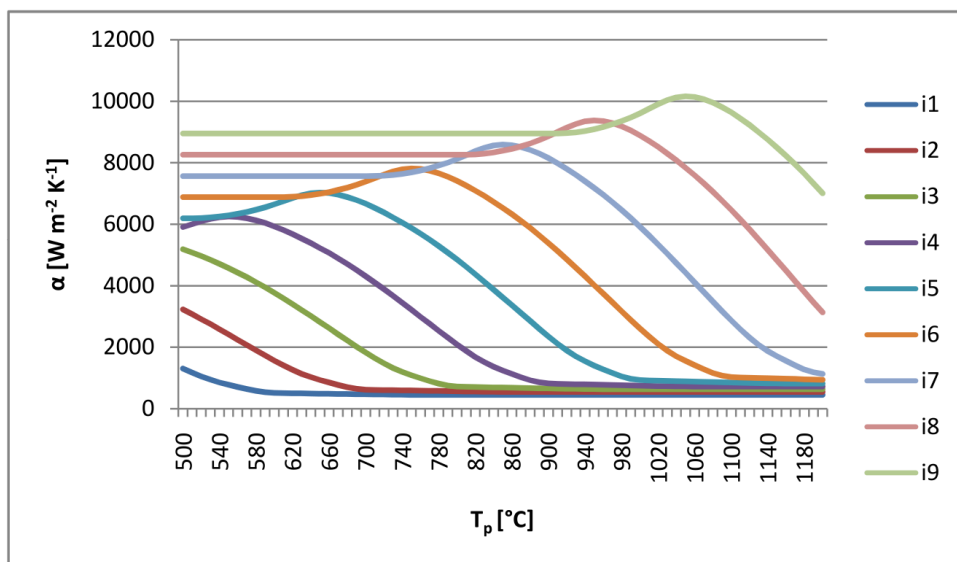
Jak již bylo řečeno, na chlazeném konci uvažovaného tělesa byla předepsána OP III. druhu, tedy závislost koeficientu přestupu tepla α na teplotě povrchu T_p . Intenzita chlazení byla dalším vstupním parametrem numerického modelu. Označena byla znakem i . V průběhu výpočtu nabývala devíti různých hodnot v intervalu od 0 do 1 s tím, že

3.1. PARAMETRICKÝ MODEL VEDENÍ TEPLA



Obrázek 3.1: Schéma modelu vedení tepla v nekonečně hlubokém tělese.

hodnotě 0 odpovídalo chlazení o nejnižší intenzitě. Na obrázku 3.2 jsou znázorněny jednotlivé křivky chlazení pro různé intenzity. Byly vytvořeny jednoduchou transformací¹ ze závislosti, která byla naměřena experimentálně.



Obrázek 3.2: Křivky závislosti α na T_p pro různé intenzity chlazení.

Modelování nekonečně dlouhého tělesa není za použití výpočetní techniky možné. Proto byla šířka desky zvolena tak, aby se změna teplot během celého procesu chlazení na opačném konci vůbec neprojevila. Ukázalo se, že hodnota 500 mm byla pro tento účel dostatečná. Prostorová diskretizace byla volena tak, že síť blízko povrchu byla relativně hustá, zatímco pro oblasti hlouběji pod povrchem byl délkový krok řádově větší.

3.1.2 Materiálové charakteristiky

Do numerického modelu vedení tepla vstupují také termofyzikální parametry dvou materiálů - oceli a oxidické vrstvy. Konkrétně jsou to měrné teplo, hustota a tepelná vodivost. Pro výpočet termofyzikálních vlastností základního materiálu (ocelové desky) byly využity

¹Vynásobením pevně zvoleným koeficientem a posunutím.

regresní vztahy, které se používají pro modelování teplotního pole bramy² při kontinuálním odlévání [16]. Pro tepelnou vodivost a měrné teplo jsou to vztahy

$$\lambda(T) = 58,676491 + T[-0,051443 + T(2,320847 \cdot 10^{-5} + T(-9,405061 \cdot 10^{-11}))], \quad (3.1)$$

$$c(T) = 392,035678 + T[1,12188 + T[(-1,163574 \cdot 10^{-3} + T(3,785874 \cdot 10^{-7})]]]. \quad (3.2)$$

Hustota oceli byla uvažována konstantní $\rho = 7800 \text{ kg m}^{-3}$.

Jak již bylo zmíněno v kapitole 2.1, v případě termofyzikálních vlastností okují je situace mnohem složitější. Autor práce přistoupil ke značnému zjednodušení. Materiálové vlastnosti okují byly považovány za konstantní (s teplotou neměnné). Protože zdrojů, ve kterých by byly uvedeny vztahy pro měrné teplo a hustotu oxidické vrstvy je velmi málo, pro hustotu byla použita hodnota odpovídající hustotě hematitu při $600 \text{ }^\circ\text{C}$ [1] a měrné teplo odpovídalo měrnému teplotě wüstitu při $600 \text{ }^\circ\text{C}$ [12]. Tepelná vodivost λ oxidické vrstvy byla pro svoji značnou proměnnost dalším vstupním parametrem numerického modelu a během výpočtů nabývala devíti hodnot od $0,2 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ do $1,4 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$.

3.1.3 Výpočet průběhu chlazení

Numerický model měl celkem tři vstupní parametry, jejichž hodnoty byly zvoleny nenáhodně (viz tab. 3.1) tak, aby odpovídaly podmínkám, které je možné pozorovat během kontinuálního odlévání oceli. Každá ze vstupních proměnných nabývala devíti hodnot,

Tabulka 3.1: Tabulka hodnot všech vstupních parametrů numerického modelu vedení tepla. Symbolem d je označena tloušťka oxidické vrstvy, λ je její tepelná vodivost a i je označení pro intenzitu chlazení.

Symbol	Rozměr	Hodnoty
d	$[\mu\text{m}]$	10, 30, 50, 80, 110, 150, 200, 250, 300
i	$[-]$	0, 0,125, 0,25, 0,375, 0,5, 0,625, 0,75, 0,875, 1,0
λ	$[\text{W m}^{-1} \text{ K}^{-1}]$	0,2, 0,35, 0,5, 0,65, 0,8, 0,95, 1,1, 1,25, 1,4

zkombinováním všech možných variant bylo obdrženo $9^3 = 729$ uspořádaných trojic, které byly uloženy do souboru. Tento soubor byl později načten aplikací realizující numerický model.

Před zahájením výpočtu vedení tepla byla nastavena teplota v celém tělese na počáteční hodnotu $1200 \text{ }^\circ\text{C}$. Následovalo načtení řádku ze souboru vstupních parametrů a pro danou kombinaci d , λ a i se simulovalo chlazení. Teplota vody byla nastavena pevně na $17 \text{ }^\circ\text{C}$. Výpočet probíhal do doby, kdy bylo na rozhraní ocel-okuje dosaženo teploty $T_s = 500 \text{ }^\circ\text{C}$. Výsledkem byl čas chlazení povrchu s okujemi t_o . Velikost časového kroku byla volena tak, aby došlo k obdržení výsledků v rozumném čase. Při volbě $\Delta t = 0,1 \text{ s}$ byl výpočet vedení tepla pro jednu kombinaci vstupních parametrů hotov během několika sekund.

Následně byl celý proces zopakován pouze s tím rozdílem, že tloušťka okují d byla nastavena na nulovou hodnotu. Ostatní volby vstupních parametrů zůstaly zachovány. Výsledkem tohoto procesu byl čas chlazení čistého povrchu t_c .

²O bramovém odlévání mluvíme v tom případě, jestliže průřez odlitku tvoří obdélník se specifickým poměrem stran.

3.1. PARAMETRICKÝ MODEL VEDENÍ TEPLA

Prvním výstupním parametrem numerického modelu byl koeficient, v dalším textu označovaný jako k , který byl dán vztahem

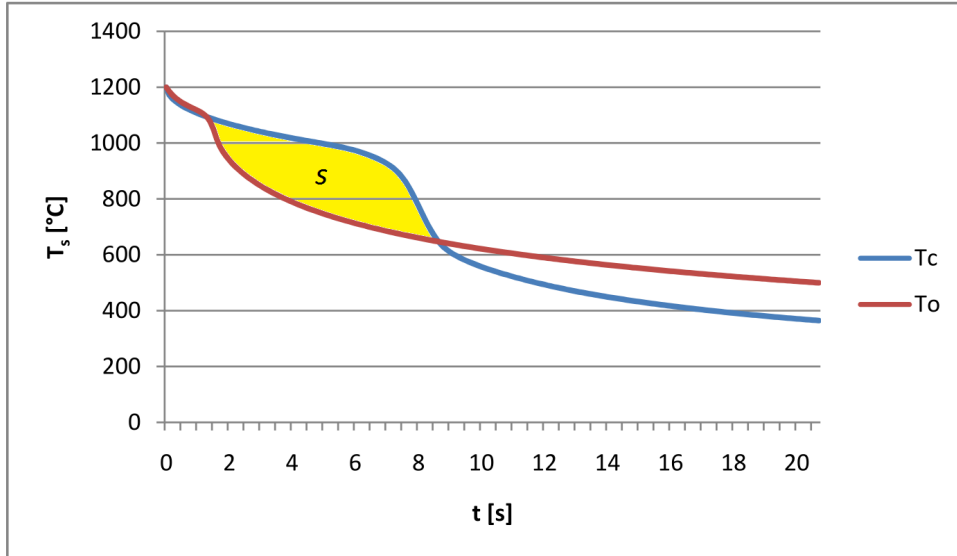
$$k = \frac{t_o}{t_c}. \quad (3.3)$$

Jedná se o relativní prodloužení (resp. zkrácení) doby chlazení z počáteční teploty 1200 °C na koncovou teplotu 500 °C. Tato teplota je sledována v místě na rozhraní základního materiálu a oxidické vrstvy (na obrázku 3.1 je označena jako T_s). Pro $k > 1$ nastalo prodloužení doby chlazení, zatímco pro $k < 1$ bylo chlazení přes vrstvu okují zintenzivněno.

Čas chlazení z pevně stanovené počáteční teploty na teplotu koncovou nemusí obsahovat informaci, zdali ke zintenzivnění někdy během procesu došlo. Z tohoto důvodu byla zavedena druhá výstupní proměnná, která tuto skutečnost dokázala odhalit. Byla označena symbolem s a její hodnota byla dána vztahem

$$s = \frac{1}{2} \int_0^{t_o} ((T_c - T_o) + |T_c - T_o|) dt. \quad (3.4)$$

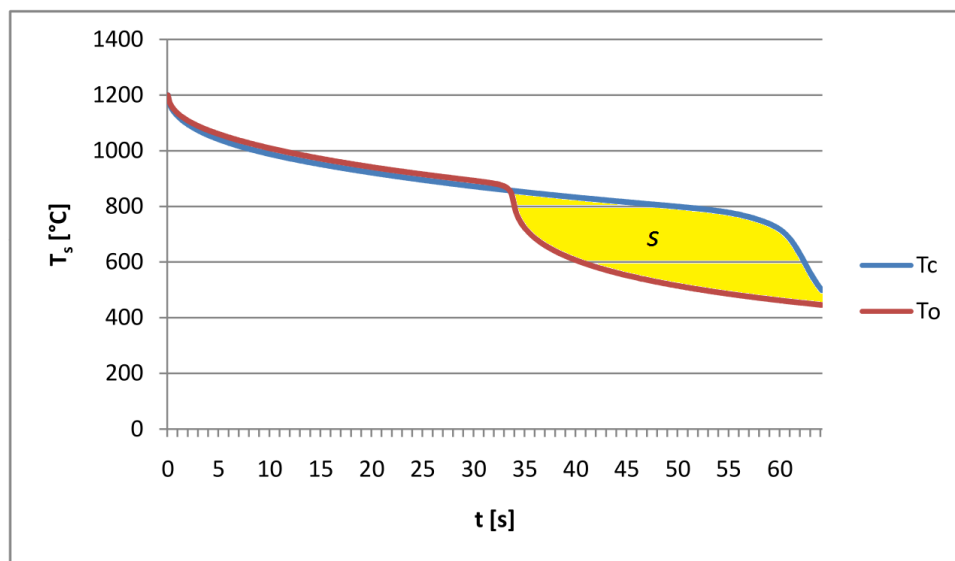
Hodnota tohoto integrálu byla vyčíslena pouze numericky. Jednotkou veličiny s je 1 K·s a její geometrický význam je znázorněn na obrázku 3.3. Aby bylo integrál možné vyčíslit, byl pro případ $t_o < t_c$ dopočítán také průběh teplot okujeného povrchu až do času t_c (viz obr. 3.4).



Obrázek 3.3: Grafické znázornění výstupní proměnné s .

Hodnoty výstupních proměnných s a k byly vypočteny pro každou z kombinací vstupních parametrů d , λ a i . Výsledná matice \mathbf{M} (o rozměrech 729×5) byla uložena do textového souboru, aby mohla být v následujících pasážích zpracována. Výpočet byl hotov v relativně krátkém čase³. Simulace vedení tepla ve více dimenzích nebo ve složitějších podmínkách by jistě výpočetní náročnost několikanásobně zvýšilo.

³Na stolním počítači s procesorem Intel Pentium SU4100 se dvěma jádry o frekvenci 1,3 GHz byl výpočet jedné vstupní kombinace hotov řádově v sekundách. Celkově tedy výpočet zabral několik minut.

Obrázek 3.4: Příklad průběhu teplot T_s pro případ $t_o < t_c$.

3.2 Predikce efektu oxidů na chlazení

V následující části bude popsán postup implementace regresní analýzy a umělých neuronových sítí pro predikci efektu oxidů na chlazení. Výchozí množinou trénovacích dat byla matice, vygenerovaná numerickými simulacemi, v předchozím textu označená jako \mathbf{M} . Nejprve byla provedena statistická analýza těchto dat. Další postup spočíval v hledání regresních vztahů, nejdříve pro proměnnou k , poté pro s .

Predikční schopnosti jednotlivých modelů byly následně otestovány na vygenerované množině, která obsahovala 110 kombinací náhodných hodnot vstupních parametrů d , λ a i . Při náhodném vybírání bylo dbáno na to, aby žádné z vygenerovaných čísel nepřesáhlo krajní hodnoty, kterých mohla daná proměnná nabývat v matici \mathbf{M} (například d bylo voleno v rozmezí od 10 do 300 μm). K takto zvoleným hodnotám byly pomocí numerického modelu z kapitoly 3.1 vypočítány také hodnoty výstupních proměnných k a s . Popsaná testovací matice bude v následujícím textu označena symbolem \mathbf{T} .

3.2.1 Regresní analýza

Regresní modely byly sestavovány opět za využití stolního počítače v prostředí statistického softwaru R . Objektem statistické analýzy byla matice \mathbf{M} o rozměrech 729×5 , která obsahovala výsledky simulací sestaveného numerického modelu (viz kapitolu 3.1). Tedy pevně zvolené hodnoty tří vstupních proměnných d , λ a i společně s odpovídajícími hodnotami k a s . Statistická analýza vstupů není nutná, neboť ty byly zvoleny nenáhodně.

Tabulka 3.2: Základní statistické veličiny proměnných k a s .

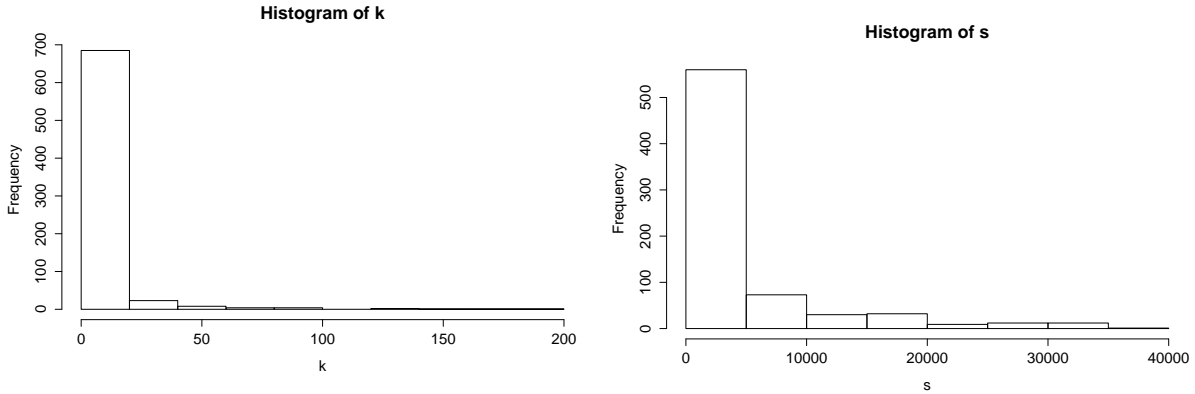
	Minimum	Medián	Průměr	Maximum
k	0,639	1,516	6,287	199,000
s	0	550	3999	35 350

Základní výběrové charakteristiky proměnných k a s jsou přehledně shrnuty v tabulce 3.2. Dále jsou uvedeny histogramy (grafy absolutních četností) proměnných k a s (viz obr. 3.5). Tyto histogramy jsou značně asymetrické, takže se nejeví jako pravděpodobné, že by se jednalo o veličiny s normálním rozdělením. V úvahu připadá spíše některé z exponenciálních rozdělení asymetrického tvaru (např. gamma rozdělení). Pro zadaná data byla vypočítána také korelační matice (viz tab. 3.3). Absolutní hodnoty výběrových korelačních koeficientů nejsou vysoké. Tato skutečnost nasvědčuje tomu, že nelze očekávat lineární vztah mezi vstupními proměnnými a výstupem. Z korelační matice je možné odečíst vztahy mezi vstupy a výstupy tedy pouze orientačně (např. vzrůstající d způsobí růst k). Za povšimnutí stojí, že korelační koeficient mezi proměnnými λ a s je téměř nulový. Korelace mezi proměnnými s a k je také velice nízká.

Regrese pro koeficient k

Jelikož byly regresní vztahy hledány pro každou výstupní proměnnou zvlášť, bude text věnován nejprve proměnné k a až poté se bude věnovat proměnné s . Při hledání regresních modelů byla jejich kvalita posuzována podle několika kritérií:

- koeficientu determinace R^2 (viz vztah 2.40),

Obrázek 3.5: Histogramy proměnných k a s .

Tabulka 3.3: Korelace mezi jednotlivými proměnnými.

	d	λ	i	k	s
d	1	0	0	0,320	0,214
λ	0	1	0	-0,316	-0,098
i	0	0	1	0,303	-0,673
k	0,320	-0,316	0,303	1	-0,181
s	0,214	-0,098	-0,673	-0,181	1

- diagnostických grafů (např. velikost rezidua v závislosti na predikované hodnotě, viz obr. 3.6),
- kritéria AIC (viz kapitolu 2.3.1, str. 26).

Po nalezení relativně kvalitního modelu byly otestovány jeho predikční schopnosti na testovací množině \mathbf{T} . Pak následoval výpočet chyby RMS definovaný vztahem 2.42.

Prvním krokem bylo sestavení jednoduchého lineárního modelu

$$E(k) = \beta_0 + \beta_1 d + \beta_2 \lambda + \beta_3 i. \quad (3.5)$$

Symbolem $E(k)$ je zde míněna střední hodnota závislé proměnné k . Ukazuje se, že takto sestavený model vykazuje velice špatné vlastnosti, neboť jeho koeficient determinace R^2 nabýval hodnoty 0,291. Tento model tedy vysvětluje jen velice málo variability ve výstupní proměnné. Graf reziduí v závislosti na predikovaných hodnotách (obr. 3.6) je důkazem, že data nesplňují základní předpoklady lineární regrese. Rezidua očividně nemají konstantní rozptyl, ten se zvyšujícím se k roste značným způsobem.

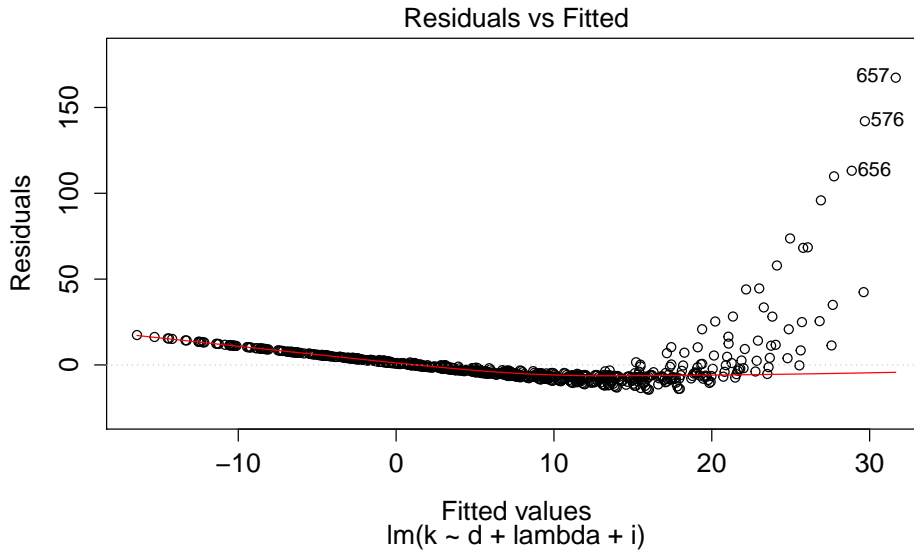
V některých případech lze rozptyl stabilizovat vhodnou transformací výstupní proměnné. V našem případě bylo nejlepších výsledků dosaženo pomocí tzv. *Boxovy-Coxovy transformace*⁴. Optimálním exponentem stanoveným metodou maximální věrohodnosti bylo číslo $-0,5$. Obdrželi jsme tak model

$$E(k^{-0,5}) = \beta_0 + \beta_1 d + \beta_2 \lambda + \beta_3 i. \quad (3.6)$$

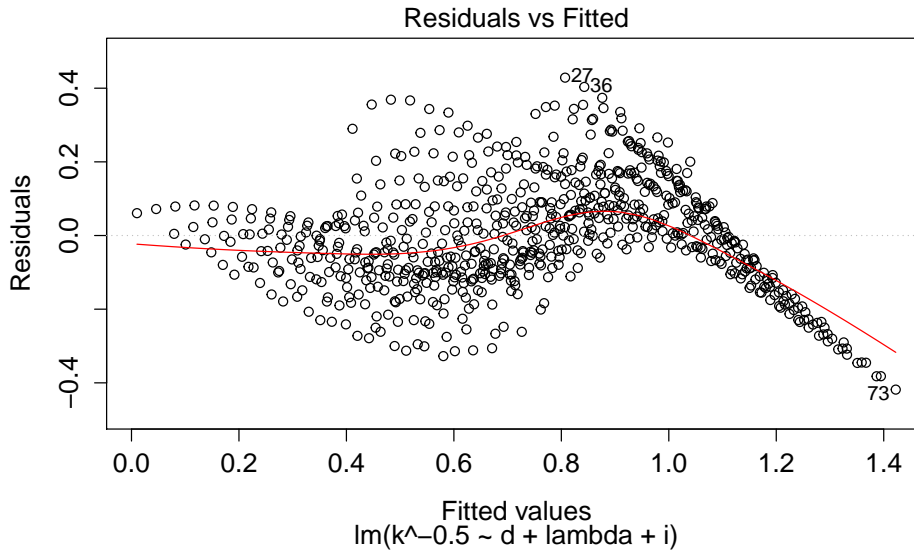
Hodnotu R^2 se tímto krokem podařilo zvýšit na 0,790, ale rozptyl chyb stále neodpovídal modelu, od kterého by se daly očekávat kvalitní odhady (viz obr. 3.7). Kvalita modelu

⁴Jedná se o mocninnou transformaci, která zajistí maximální přiblížení k normalitě [27].

3.2. PREDIKCE EFEKTU OXIDŮ NA CHLAZENÍ



Obrázek 3.6: Graf pro rezidua jednoduchého lineárního modelu.



Obrázek 3.7: Graf pro rezidua jednoduchého lineárního modelu po Boxově-Coxově transformaci.

byla tentokrát prověřena i na testovací množině \mathbf{T} . Byla vyčíslena chyba tohoto modelu ($RMS = 3,611$).

Kvalitnějšího modelu lze v aplikacích častokrát dosáhnout zavedením interakcí a vyšších mocnin jednotlivých vstupních proměnných. Dalším krokem tedy byla konstrukce polynomiálního modelu

$$\begin{aligned}
 E(k^{-0,5}) = & \beta_0 + \beta_1 d + \beta_2 d^2 + \beta_3 d^3 + \beta_4 \lambda + \beta_5 \lambda^2 + \beta_6 \lambda^3 \\
 & + \beta_7 i + \beta_8 i^2 + \beta_9 i^3 + \beta_{10} d\lambda + \beta_{11} d\lambda^2 + \beta_{12} d^2\lambda + \beta_{13} di \\
 & + \beta_{14} di^2 + \beta_{15} d^2i + \beta_{16} i\lambda + \beta_{17} i\lambda^2 + \beta_{18} i^2\lambda + \beta_{19} d\lambda i, \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

kde byly zahrnuty třetí mocniny jednotlivých vstupů a také jejich interakce tak, aby nepřesahovaly třetí stupeň. Mocninná transformace proměnné k byla v modelu ponechána.

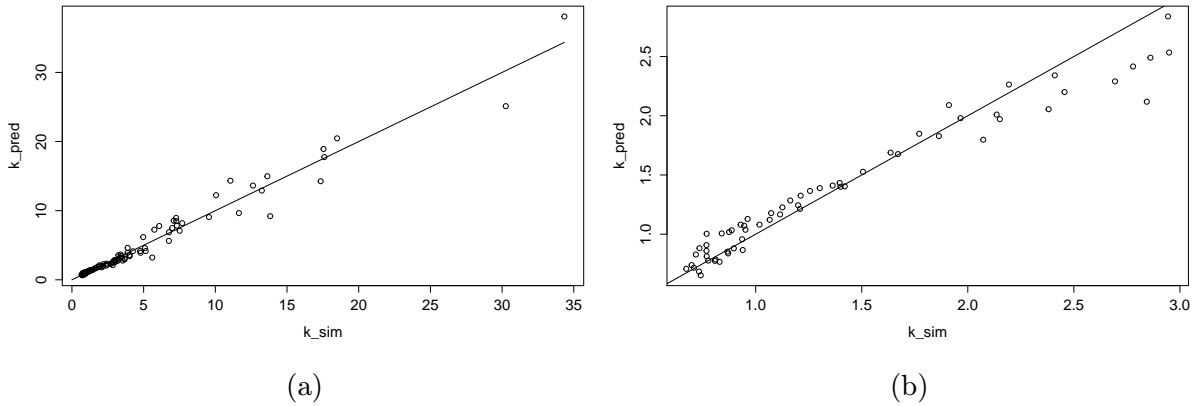
Na model 3.7 byla pro další zkvalitnění aplikována funkce *step*, založená na porovnávání parametrů AIC plného modelu a jednotlivých podmodelů, ve kterých je vynechán některý z koeficientů β_j . Pomocí této funkce jsou determinovány a vynechány koeficienty s nízkou významností. Touto procedurou byla vyřazena vstupní proměnná $i\lambda^2$. Konkrétní odhady koeficientů polynomiálního modelu jsou přehledně shrnuty v následující rovnici:

$$E(k^{-0,5}) = \begin{bmatrix} 1 \\ d \\ d^2 \\ d^3 \\ \lambda \\ \lambda^2 \\ \lambda^3 \\ i \\ i^2 \\ i^3 \\ d\lambda \\ d\lambda^2 \\ d^2\lambda \\ di \\ di^2 \\ d^2i \\ i\lambda \\ i^2\lambda \\ d\lambda i \end{bmatrix}' \cdot \begin{bmatrix} 1,100 \\ -1,610 \cdot 10^{-3} \\ 3,815 \cdot 10^{-6} \\ -1,110 \cdot 10^{-8} \\ 3,898 \cdot 10^{-1} \\ -8,558 \cdot 10^{-1} \\ 2,886 \cdot 10^{-1} \\ -1,536 \cdot 10^{-1} \\ -1,918 \\ 1,546 \\ 4,516 \cdot 10^{-3} \\ -7,140 \cdot 10^{-4} \\ -4,519 \cdot 10^{-6} \\ -1,065 \cdot 10^{-2} \\ 4,917 \cdot 10^{-3} \\ 1,653 \cdot 10^{-5} \\ 1,427 \\ -8,723 \cdot 10^{-1} \\ -2,154 \cdot 10^{-3} \end{bmatrix} \cdot \quad (\text{LRMk})$$

Po testování na množině \mathbf{T} se ukázalo, že tento model vykazoval již mnohem lepší schopnost predikce koeficientu k , než tomu bylo u předchozího modelu. Byla vyčíslena chyba $RMS = 1,085$, koeficient determinace R^2 nabýval v tomto případě hodnoty 0,963. Závislost predikovaných hodnot na hodnotách vypočtených numericky je patrná z obrázku 3.8. Graf 3.8b ilustruje přesnost odhadu daného modelu pro malé hodnoty k (konkrétně $k_{sim} < 3$).

Dalším krokem při hledání regresních vztahů pro koeficient k bylo sestavení zobecněného lineárního modelu. Po vyzkoušení několika různých modelů bylo nejlepších výsledků dosaženo za předpokladu, že odezva má gamma rozdělení pravděpodobnosti. Linkovací funkcí optimálního modelu byl přirozený logaritmus. Jako nezávislé proměnné byly opět použity mocniny proměnných d , λ a i až do třetího stupně včetně. Zahrnuty byly také interakce stejně jako v modelu 3.7.

3.2. PREDIKCE EFEKTU OXIDŮ NA CHLAZENÍ

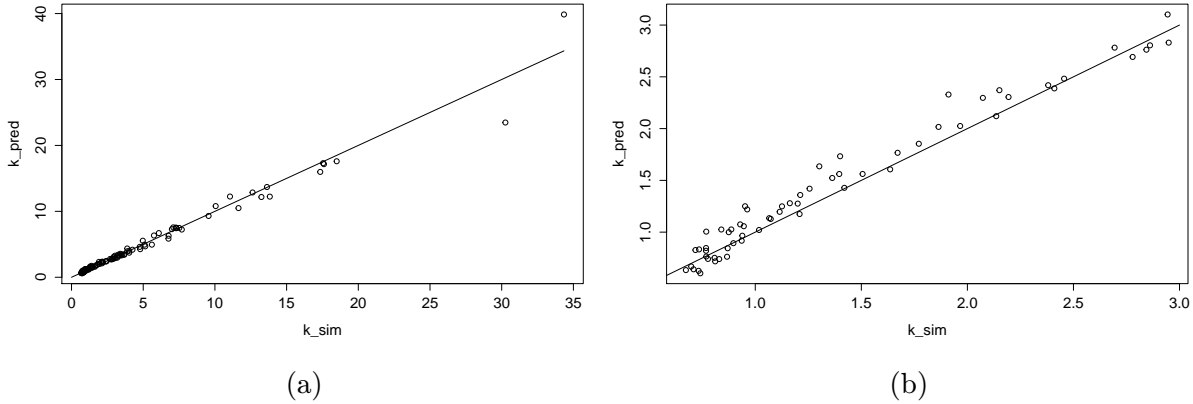


Obrázek 3.8: Grafy odhadu koeficientu k pomocí modelu LRMk. Jako k_{sim} jsou označena nasimulovaná data a k_{pred} označuje predikované hodnoty. Graf (b) ilustruje přesnost odhadu v oblasti malých hodnot k

Výběr množiny regresorů byl stejně jako v případě LRM učiněn pomocí sekvenciální funkce *step*, která jako kritérium kvality modelu bere parametr *AIC*. Tímto postupem byly vyřazeny proměnné d^2 a d^3 . Odhady zbylých koeficientů, udává rovnice

$$\ln(\mathbb{E}(k)) = \begin{bmatrix} 1 \\ d \\ \lambda \\ \lambda^2 \\ \lambda^3 \\ i \\ i^2 \\ i^3 \\ d\lambda \\ d\lambda^2 \\ d^2\lambda \\ di \\ di^2 \\ d^2i \\ i\lambda \\ i\lambda^2 \\ i^2\lambda \\ d\lambda i \end{bmatrix}' \cdot \begin{bmatrix} -1,248 \cdot 10^{-1} \\ 5,149 \cdot 10^{-3} \\ -1,634 \\ 3,969 \\ -1,713 \\ -1,209 \cdot 10^{-1} \\ 7,124 \\ -5,236 \\ -1,957 \cdot 10^{-2} \\ 6,254 \cdot 10^{-3} \\ 1,641 \cdot 10^{-5} \\ 3,552 \cdot 10^{-2} \\ -9,659 \cdot 10^{-3} \\ -4,018 \cdot 10^{-5} \\ -5,773 \\ 1,380 \\ 2,093 \\ -2,692 \cdot 10^{-3} \end{bmatrix} \quad (\text{ZLMk})$$

Stejně jako v případě polynomiálního modelu byly také v této části otestovány predikční schopnosti výsledného modelu na náhodně vygenerované trénovací množině \mathbf{T} . Grafy predikovaných hodnot k jsou na obrázcích 3.9a a 3.9b. Pro ZLMk byla velikost chyby $RMS = 0,919$ a $R^2 = 0,973$.



Obrázek 3.9: Grafy odhadu koeficientu k pomocí modelu ZLMk. Jako k_{sim} jsou označena nasimulovaná data a k_{pred} označuje predikované hodnoty. Graf (b) ilustruje přesnost odhadu v oblasti malých hodnot k

Regrese pro proměnnou s

Při hledání optimálních regresních modelů pro proměnnou s byl postup obdobný jako při hledání regresních vztahů pro koeficient k . Našlo se ovšem několik rozdílů. Lze jmenovat například skutečnost, že závislá proměnná (v tomto případě s) mohla nabývat také nulových hodnot.

Obecně lze říct, že hledání korelačních vztahů pro proměnnou s bylo komplikovanější, než tomu bylo u proměnné k . Pravděpodobným důvodem je fakt, že vztahy mezi vstupními proměnnými a odezvou jsou ještě složitější než tomu bylo u proměnné k . Jednotlivé vstupní proměnné mezi sebou opět zřejmě interagují.

Jednoduchý lineární model

$$E(s) = \beta_0 + \beta_1 d + \beta_2 \lambda + \beta_3 i \quad (3.8)$$

dával velice špatné výsledky a ani vyzkoušení velkého množství transformací (včetně Boxovy-Coxovy) nevedlo ke konstrukci použitelného modelu. Jelikož sloupec matice \mathbf{M} , příslušející proměnné s obsahoval značné množství nul, byli jsme při výběru transformací odezvy značným způsobem limitováni. Ani logaritmus, ani mocninné transformace se záporným exponentem nemohly být bez předchozího posunutí dat do kladných hodnot použity.

Do modelu byly zahrnuty polynomy vyšších stupňů až do řádu 3 včetně. Obecná rovnice modelu pak vypadala následovně:

$$\begin{aligned} E(s) = & \beta_0 + \beta_1 d + \beta_2 d^2 + \beta_3 d^3 + \beta_4 \lambda + \beta_5 \lambda^2 + \beta_6 \lambda^3 \\ & + \beta_7 i + \beta_8 i^2 + \beta_9 i^3 + \beta_{10} d\lambda + \beta_{11} d\lambda^2 + \beta_{12} d^2 \lambda + \beta_{13} d i \\ & + \beta_{14} d i^2 + \beta_{15} d^2 i + \beta_{16} i \lambda + \beta_{17} i \lambda^2 + \beta_{18} i^2 \lambda + \beta_{19} d \lambda i. \end{aligned} \quad (3.9)$$

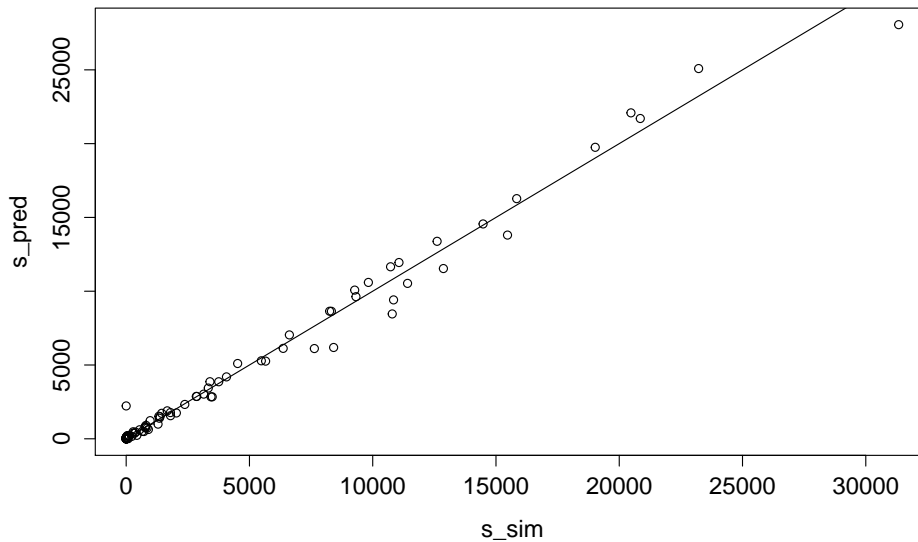
Z diagnostických grafů reziduí bylo možné vyčíst trendy, podle kterých se jeví jako vhodné stabilizovat rozptyl pomocí transformace. Jak již bylo řečeno v předchozím odstavci, logaritmus ani mocninná transformace se záporným exponentem nemohla být použita. Po vyzkoušení velkého množství možností se jako optimální jeví transformace

3.2. PREDIKCE EFEKTU OXIDŮ NA CHLAZENÍ

mocninná s exponentem 0,5. Funkcí *step* nebyl z modelu vyřazen žádný z koeficientů. Výsledkem byl model

$$E(s^{0,5}) = \begin{bmatrix} 1 \\ d \\ d^2 \\ d^3 \\ \lambda \\ \lambda^2 \\ \lambda^3 \\ i \\ i^2 \\ i^3 \\ d\lambda \\ d\lambda^2 \\ d^2\lambda \\ di \\ di^2 \\ d^2i \\ i\lambda \\ i\lambda^2 \\ i^2\lambda \\ d\lambda i \end{bmatrix}' \cdot \begin{bmatrix} 1,008 \cdot 10^2 \\ 9,227 \cdot 10^{-1} \\ -4,690 \cdot 10^{-3} \\ 4,511 \cdot 10^{-6} \\ -4,396 \cdot 10^1 \\ -8,048 \cdot 10^1 \\ 3,905 \cdot 10^1 \\ -1,820 \cdot 10^2 \\ 1,181 \cdot 10^1 \\ 7,318 \cdot 10^1 \\ 7,957 \cdot 10^{-1} \\ -3,447 \cdot 10^{-1} \\ 4,841 \cdot 10^{-4} \\ -1,661 \\ 8,398 \cdot 10^{-1} \\ 2,753 \cdot 10^{-3} \\ 1,727 \cdot 10^2 \\ 3,167 \cdot 10^1 \\ -1,298 \cdot 10^2 \\ -4,378 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix}, \quad (\text{LRMs})$$

Který byl již použitelný pro (alespoň orientační) predikci proměnné *s* (viz obr. 3.10). Byly vyčísleny také číselné charakteristiky kvality odhadu pomocí tohoto modelu, pro které platilo $RMS = 676,157$ a $R^2 = 0,987$.



Obrázek 3.10: Graf odhadu *s* pomocí polynomiálního modelu. Jako *s_sim* jsou označena nasimulovaná data a *s_pred* označuje predikované hodnoty.

3. VYPRACOVÁNÍ ÚKOLU

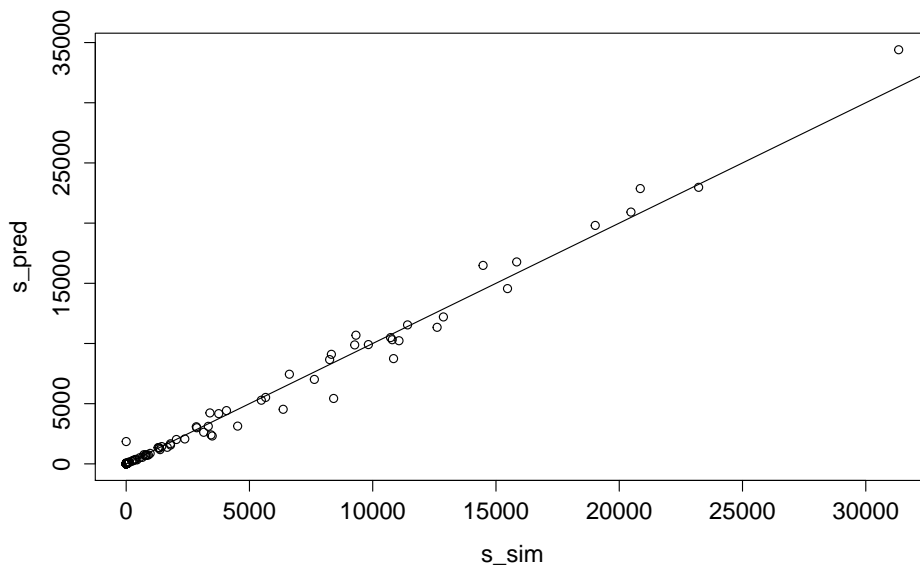
Dalším bodem bylo hledání regresních vztahů pro s za použití zobecněného lineárního modelu. Bylo využito zkušeností s proměnnou k a do modelu byly rovnou zapojeny také druhé a třetí mocniny jednotlivých vstupů (viz rovnici 3.9). Při konstruování ZLM pro s bylo dále nutné postupovat poněkud odlišným způsobem, než tomu bylo u proměnné k . Předpoklad, že proměnná s má gamma rozdělení pravděpodobnosti nemohl být tentokrát použit, neboť definičním oborem tohoto rozdělení jsou pouze kladná reálná čísla. V úvahu připadalo posunutí (přičtení malé konstanty) závislé proměnné, ale ukázalo se, že takto vzniklý model vykazoval ještě menší kvality než polynomiální LRMs.

Po vyzkoušení několika různých možností bylo nalezeno vyhovující řešení. Vzhledem k velkému rozptylu závislé proměnné (hodnoty s se pohybovaly od 0 do 35 350) se jevilo jako nemožné predikovat jeho hodnotu přesně. Chyba vzniklá zaokrouhlením hodnot proměnné s na celá čísla se zdála tolerovatelná. Po zaokrouhlení bylo možné vyzkoušet některá diskrétní rozdělení pravděpodobnosti. ZLM vykazoval nejlepší vlastnosti, jestliže jsme předpokládali, že odezva má Poissonovo rozdělení pravděpodobnosti. Jako linkovací funkce byl opět použit přirozený logaritmus. Ještě před zahájením testování modelu byla použita funkce *step*, která ovšem nevyřadila žádný z koeficientů β_j . Odhady jednotlivých koeficientů výsledného ZLM jsou vyčísleny v následující rovnici modelu:

$$\ln(E(s)) = \begin{bmatrix} 1 \\ d \\ d^2 \\ d^3 \\ \lambda \\ \lambda^2 \\ \lambda^3 \\ i \\ i^2 \\ i^3 \\ d\lambda \\ d\lambda^2 \\ d^2\lambda \\ di \\ di^2 \\ d^2i \\ i\lambda \\ i\lambda^2 \\ i^2\lambda \\ d\lambda i \end{bmatrix}' \cdot \begin{bmatrix} 9,304 \\ 2,646 \cdot 10^{-2} \\ -1,841 \cdot 10^{-4} \\ 2,734 \cdot 10^{-7} \\ -2,036 \\ -3,103 \\ 2,288 \\ -3,856 \\ 2,400 \\ -1,327 \cdot 10^1 \\ 3,310 \cdot 10^{-2} \\ -1,602 \cdot 10^{-2} \\ 4,504 \cdot 10^{-7} \\ -3,356 \cdot 10^{-2} \\ -1,882 \cdot 10^{-2} \\ 3,478 \cdot 10^{-5} \\ 6,999 \\ -4,381 \\ 3,322 \\ 1,482 \cdot 10^{-2} \end{bmatrix} \cdot \quad (\text{ZLMs})$$

Tento model byl opět otestován na množině \mathbf{T} . Grafické znázornění predikovaných hodnot je vyobrazeno na obr. 3.11. Pro chybu modelu ZLMs platilo $RMS = 700,972$ a koeficient determinace R^2 nabýval v tomto případě hodnoty 0,986.

3.2. PREDIKCE EFEKTU OXIDŮ NA CHLAZENÍ



Obrázek 3.11: Graf odhadu s pomocí ZLM. Jako s_{sim} jsou označena nasimulovaná data a s_{pred} označuje predikované hodnoty.

3.2.2 Umělá neuronová síť

Další metodou pro predikci výstupních proměnných v závislosti na vstupech bylo použití vícevrstvé neuronové sítě. Implementace UNS proběhla ve spolupráci s VŠB-TU⁵ v Ostravě, konkrétně s pracovníky Fakulty metalurgie a materiálového inženýrství.

Výhodou UNS je možnost vytvoření jediné sítě pro proměnné k i s zároveň. Při hledání optimální sítě byla použita matice M . Trénovaná UNS měla na vstupu 3 neurony, které odpovídaly proměnným d , λ a i . Proměnné, k a s byly výstupní. K učení sítě bylo určeno 75 % náhodně vybraných řádků této matice, 15 % řádků sloužilo jako testovací množina. Přeučení sítě měla zabránit validační množina o stejné velikosti, jako množina testovací. Jako přenosová funkce byla zvolena logistická sigmoida (viz rovnici 2.48). Síť byla trénována na stolním počítači⁶ v prostředí matematického softwaru *STATISTICA 9.0* v modulu *Neural network*. Jedno učení sítě trvalo v porovnání s ostatními metodami velice dlouhou dobu (přibližně pět hodin). Během učení bylo vyzkoušeno několik sítí s různými topologiemi. Jako optimální se jevila UNS ve složení 3 – 9 – 2, tedy 3 vstupní neurony, 9 neuronů ve skryté vrstvě a 2 neurony ve výstupní vrstvě.

Tabulka 3.4: Tabulka chyb a koeficientu determinace pro UNS.

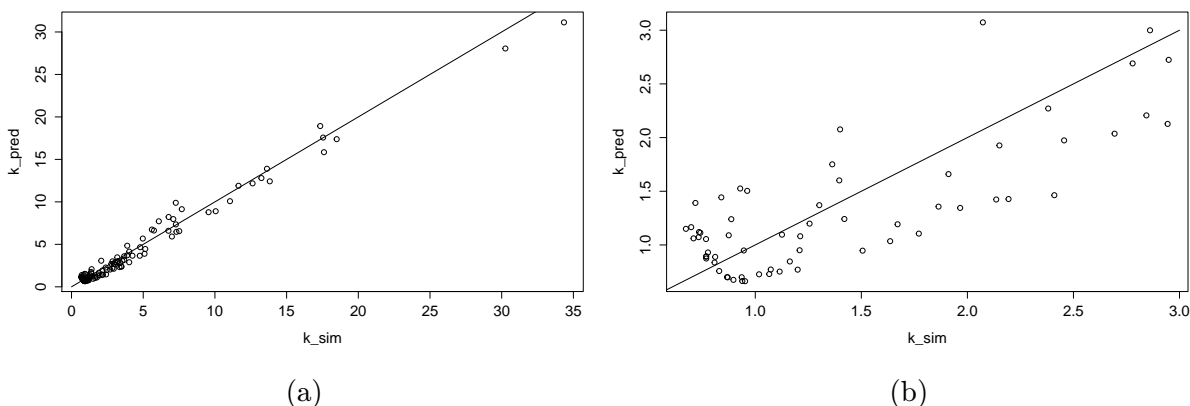
Proměnná	RMS	R^2
k	0,796	0,980
s	312,484	0,998

⁵Vysoká škola báňská - Technická univerzita

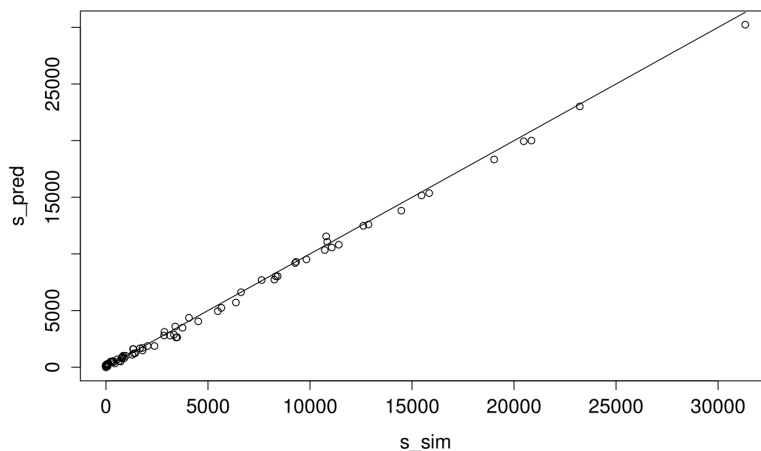
⁶Tento počítač byl vybaven procesorem Intel Pentium Dual-Core E5400 se dvěma jádry o frekvenci 2.7 GHz.

3. VYPRACOVÁNÍ ÚKOLU

Dále byly otestovány predikční schopnosti sestavené sítě. K tomuto účelu opět posloužila testovací množina **T**. Parametry R^2 a RMS byly napočítány pro proměnné k a s zvlášť, jejich hodnoty jsou shrnuty v tabulce 3.4. Grafické porovnání predikovaných hodnot s hodnotami nasimulovanými je znázorněno na obrázcích 3.12 a 3.13.



Obrázek 3.12: Grafy odhadu koeficientu k pomocí UNS. Jako k_{sim} jsou označena nasimulovaná data a k_{pred} označuje predikované hodnoty. Graf (b) ilustruje přesnost odhadu v oblasti malých hodnot k



Obrázek 3.13: Graf odhadu proměnné s umělou neuronovou sítí. Znakem s_{pred} jsou označena data na výstupu UNS, s_{sim} je označení pro data pocházející ze simulace.

Značnou výhodou implementace neuronové sítě je možnost provedení citlivostní analýzy, jejíž výsledky jsou uvedeny v tabulce 3.5.

Tabulka 3.5: Citlivostní analýza vstupních proměnných.

Proměnná	Relativní důležitost
i	352,114
d	124,717
λ	53,703

4 Vyhodnocení

V následující kapitole bude provedeno vyhodnocení výsledků sestaveného numerického modelu. Výstupní proměnné k a s budou analyzovány každá zvlášť. Dále budou porovnány použité metody predikce vlivu okují na chlazení. Konec kapitoly bude věnován vysvětlení, proč je za určitých podmínek chlazení okujeného povrchu zintenzivněno.

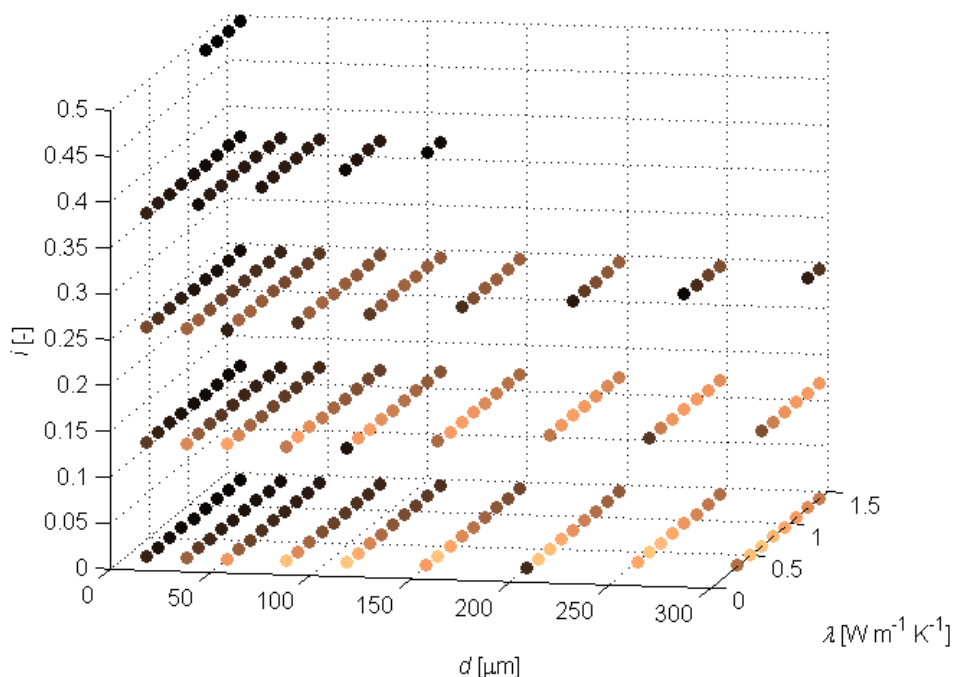
4.1 Zhodnocení výsledků numerického modelu

Simulace vedení tepla proběhly pro mnoho kombinací vstupních parametrů. Následující část textu bude věnována vizualizaci dat a určení oblasti, ve které bylo chlazení zintenzivněno. Stejně jako v předchozích částech se budeme věnovat proměnným k a s zvlášť. Vizualizace proběhla v matematickém softwaru *MATLAB*.

Vizualizace proměnné k

Proměnná k udávala zrychlení či zpomalení chlazení okujeného povrchu vzhledem k povrchu čistému z počáteční teploty 1200 °C na teplotu 500 °C. Pozorována byla teplota na rozhraní ocel-okuje, označena byla jako T_s . Jedná se o bezrozměrnou veličinu a během simulací nabývala hodnot od 0,639 až do 199. Pro $k > 1$ nebylo chlazení zintenzivněno, zatímco pro $k < 1$ bylo chlazení s vrstvou okují na povrchu rychlejší než chlazení čisté oceli.

Proměnnou k bylo možné vizualizovat jako funkci tří proměnných d , λ a i v trojrozměrném grafu. V obr. 4.1 jsou zobrazeny pouze ty body pro které platilo $k < 1$. Ostatní

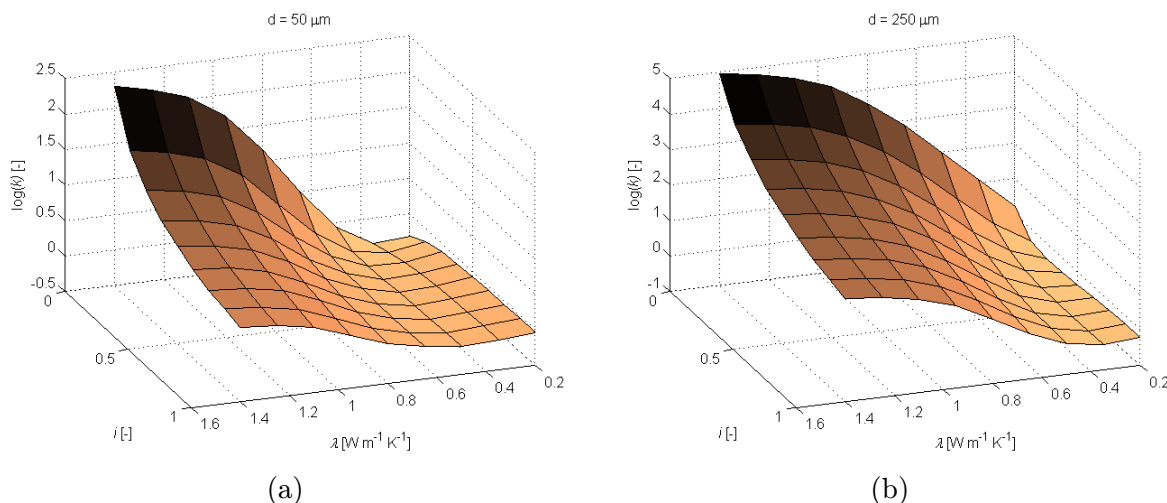


Obrázek 4.1: Graf závislosti koeficientu k na proměnných d , λ a i . Tmavá barva bodu byla zvolena pro vysoké hodnoty k , zatímco světlá barva značí nízkou hodnotu koeficientu k .

body nejsou pro přehlednost výsledného grafu vykresleny. Světlost jednotlivých bodů je přímo úměrná míře zintenzivnění chlazení (v nejsvětlejších bodech je hodnota k nejmenší). Z tohoto znázornění je možné určit hodnoty jednotlivých vstupních parametrů, pro které bylo chlazení vrstvou okují na povrchu zrychleno.

Chlazení bylo zintenzivněno v oblastech s vysokými hodnotami parametru d , hodnota i zde byla naopak nízká (nejnižší hodnoty k se vyskytovaly ve vrstvách, kde $i = 0$ nebo $i = 0,125$). Určit rozmezí parametru λ , pro které nabývá k nízkých hodnot není jednoduché. Pro nízké hodnoty tloušťky okují ($d \approx 75 \mu\text{m}$) je žádoucí, aby vodivost byla nízká. Naopak pro vyšší hodnoty tloušťky okují dojde ke zintenzivnění chlazení jestliže je vodivost λ vyšší.

Dále bylo možné zobrazit řez čtyřdimenzionální oblasti pro pevně zvolenou hodnotu jednoho ze vstupních parametrů. Výsledkem byla plocha, tedy závislost k na zbylých dvou parametrech. Příklady těchto řezů jsou znázorněny na obrázcích 4.2, 4.3 a 4.4. Výhodou těchto řezů je větší rozlišovací schopnost. Protože hodnota k zde není znázorněna barvou, ale „výškou“ v souřadnicové ose z lze snáze odhadnout trend závislosti k na vstupech. Aby byly dobře viditelné změny pro malé i velké hodnoty k , byla při vykreslování ploch zvolena logaritmická stupnice. Světlá barva opět odpovídá nízkým hodnotám koeficientu k .



Obrázek 4.2: Grafy závislosti k na i a λ pro pevně zvolené hodnoty d .

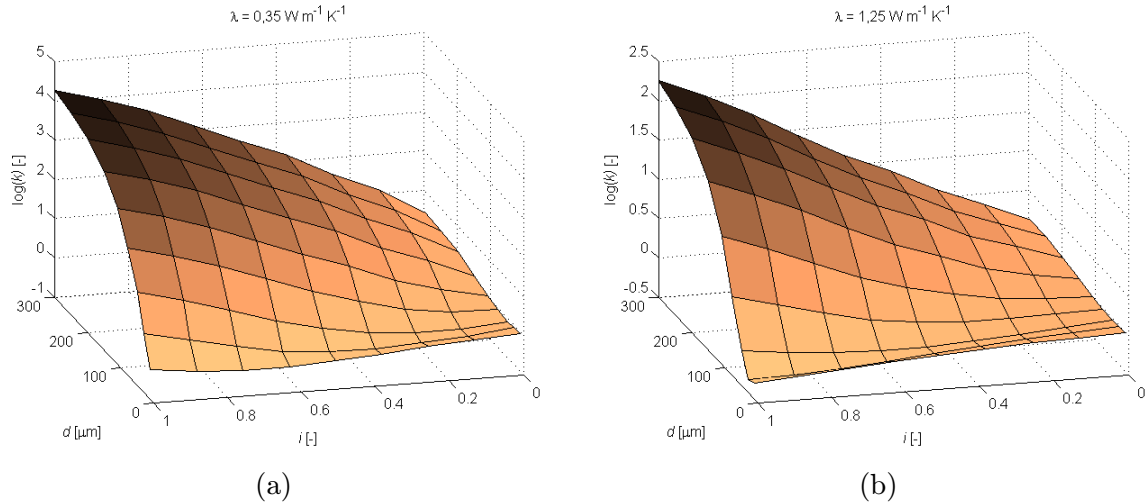
Z grafů 4.4 lze vyčíst, že na tvar výsledné plochy má proměnná i značný vliv. Dalším vstupem, který má na k značný vliv je tloušťka okují d . Tepelná vodivost λ se na výstupu projeví v porovnání s ostatními vstupy nejméně. Jak již bylo řečeno, ve většině řezů s rostoucím i resp. d roste také k . Zvyšující se tepelná vodivost okují λ způsobuje v mnoha případech růst koeficientu k , ovšem lze najít i výjimky (viz 4.4a).

V průběhu analýzy byla také vykreslena data bez logaritmické transformace proměnné k . Vzniklé plochy byly značně pokřivené, nedá se tedy očekávat, že výstup je na vstupech lineárně závislý.

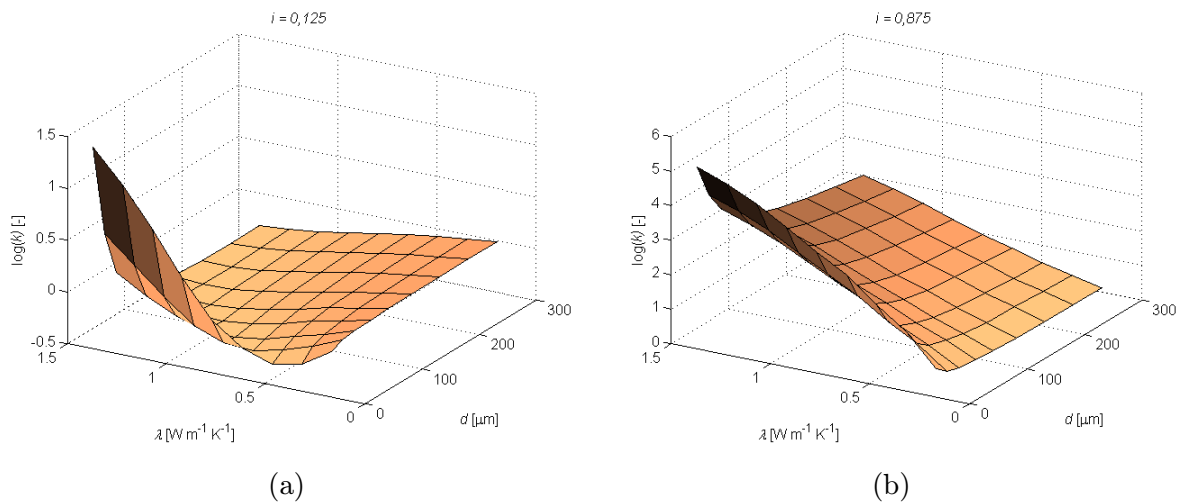
Vizualizace proměnné s

Proměnná s udávala, zdali během procesu chlazení poklesla teplota T_s u zoxidovaného povrchu pod teplotu, kterou by měl čistý povrch při chlazení za stejných podmínek ve stejném čase. Míra velikosti s byla určena oblastí, mezi křivkami T_c a T_o (viz obr. 3.3 a

4.1. ZHODNOCENÍ VÝSLEDKŮ NUMERICKÉHO MODELU



Obrázek 4.3: Grafy závislosti k na d a i pro pevně zvolené hodnoty λ .

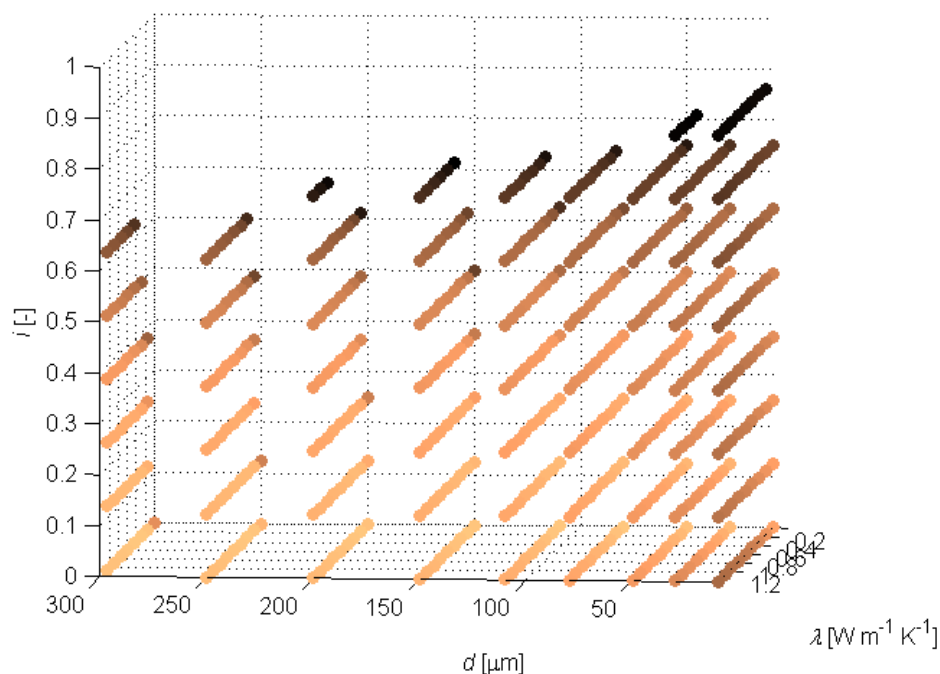


Obrázek 4.4: Grafy závislosti k na d a λ pro pevně zvolené hodnoty i .

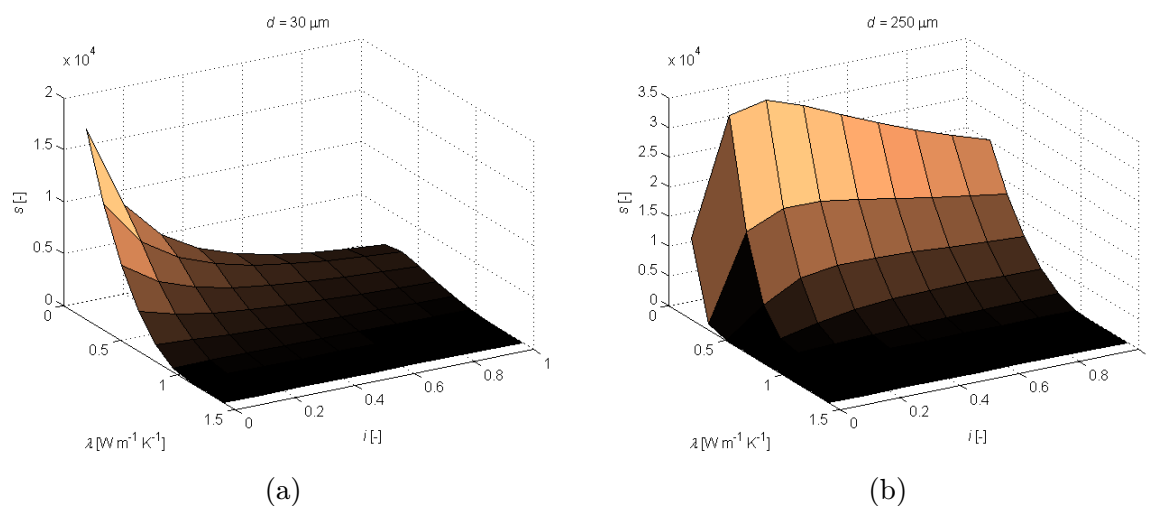
3.4). Jednotkou této veličiny je 1 K s. Důvodem zavedení této proměnné byla skutečnost, že proměnná k je vypočtena pouze z doby chlazení, nikoli z jeho průběhu. Pro velké množství kombinací vstupních parametrů byla hodnota s malá nebo nulová (chlazení nebylo zintenzivněno). Našly se ovšem i takové případy, kdy byla velikost plochy s vzhledem k průměru všech hodnot značná (až několik desítek tisíc K s).

Závislost proměnné s na vstupních parametrech byla znázorněna analogickým způsobem, jako u koeficientu k v grafu 4.1. Jas barvy opět posloužil jako nástroj k zachycení velikosti hodnoty závislé proměnné. V tomto případě odpovídala tmavá barva nízkým hodnotám s , zatímco body s vysokými hodnotami s byly znázorněny světle. Body, ve kterých $s = 0$, nebyly pro přehlednost vykresleny.

Z obrázku 4.5 je patrné, že nejvyšších hodnot nabývá proměnná s v oblastech, kde je intenzita chlazení nízká, tedy pro hodnoty i v rozmezí od 0 do 0,3. Tloušťka vrstvy okují je zde naopak relativně vysoká (od 100 do 300 μm). Změna hodnoty λ má na změnu s nízký vliv a v porovnání s ostatními vstupními parametry ovlivňuje s pouze minimálně. Obecně lze tedy říct, že výsledky analýzy proměnné s jsou v souladu s předchozí částí, kde byl pozorován koeficient k . Chlazení bylo zintenzivněno ve stejných oblastech a vstupní parametr λ zde hrál také méně významnou roli. Dále byly opět vykresleny řezy pro pevně



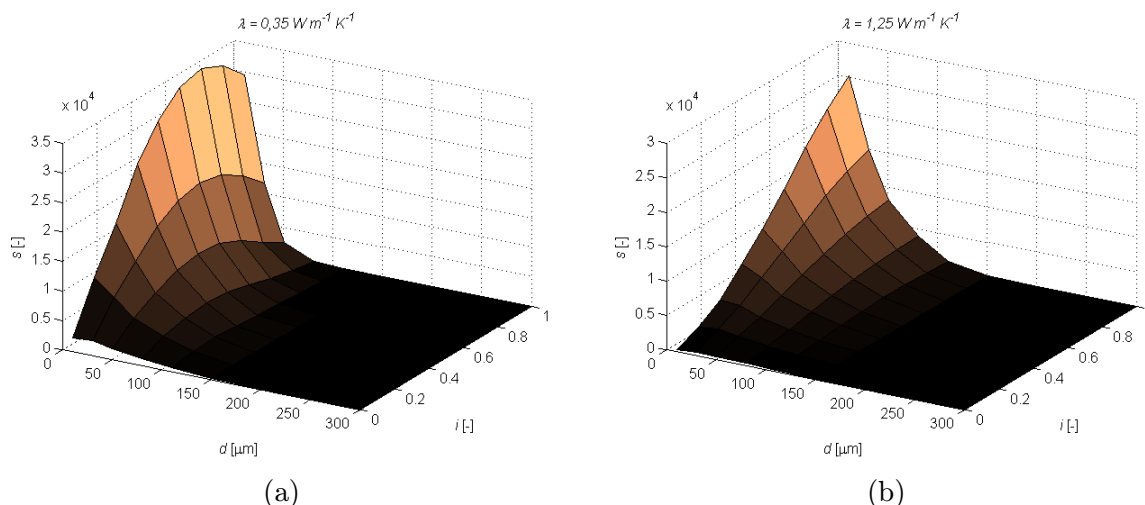
Obrázek 4.5: Graf závislosti plochy s na proměnných d , λ a i . Světlá barva odpovídá vysokým hodnotám s .



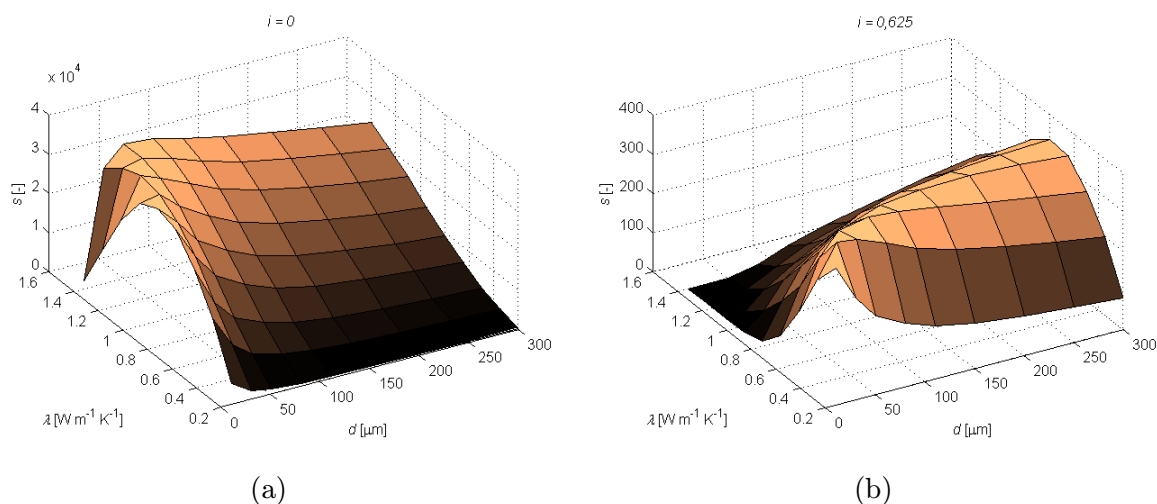
Obrázek 4.6: Grafy závislosti s na λ a i pro pevně zvolené hodnoty d .

zvolené hodnoty jednoho ze vstupních parametrů. Příklady těchto řezů jsou na obrázcích 4.6, 4.7 a 4.8. Plochy jsou značně pokrivené, lineární závislost s na vstupech tedy není pravděpodobná. V některých proměnných funkce s dokonce není monotónní (nejprve roste a pak klesá, viz např. 4.8b). V porovnání s proměnnou k vykazovaly plochy pro s ještě větší míru zakřivení. Logaritmická transformace závislé proměnné s v tomto případě nevedla k větší názornosti vykreslených grafů. Proto nejsou grafy s touto transformací v této práci zahrnuty.

4.2. PREDIKCE VLIVU OXIDŮ NA CHLAZENÍ



Obrázek 4.7: Grafy závislosti s na d a i pro pevně zvolené hodnoty λ .



Obrázek 4.8: Grafy závislosti s na d a λ pro pevně zvolené hodnoty i .

4.2 Predikce vlivu oxidů na chlazení

V následující části jsou rozebrány jednotlivé metody predikce míry zintenzivnění chlazení a jejich výsledky. Text je opět rozdělen na dvě části. Každá z nich odpovídá jedné z výstupních proměnných.

Po provedení simulací v sestaveném numerickém modelu proběhla regresní analýza a trénování neuronové sítě. Cílem bylo najít vztah, kterým by šlo (alespoň přibližně) určit velikost některé z výstupních proměnných. Predikční schopnosti jednotlivých modelů byly otestovány na množině, kde volby vstupů byly zvoleny náhodně a výstupy byly vypočteny numericky. Velikosti chyb a koeficienty determinace pro jednotlivé modely určené k predikci proměnné k , jsou shrnuty v tabulce 4.1. Nejmenší chybovost měla neuronová síť, následoval zobecněný lineární model. Nejhorší vlastnosti měl polynomiální model.

Polynomiální model LRMk byl použitelný pouze pro orientační predikci koeficientu k . Z grafu 3.8b je patrné, že menší hodnoty k byly tímto modelem nadhodnocovány, zatímco velké hodnoty k byly odhadnuty nízko. Možné vysvětlení tohoto chování je velká míra nelinearity v datech, tedy nevhodný statistický soubor pro použití LRM. Je pravdě-

Tabulka 4.1: Shrnutí chyb a koeficientů determinace pro jednotlivé metody predikce koeficientu k .

Model	RMS	R^2
LRMk	1,085	0,963
ZLMk	0,919	0,973
UNS	0,796	0,980

podobné, že minimálně jeden z předpokladů LRM zde není splněn. Lepších výsledků bylo dosaženo pomocí zobecněného lineárního modelu ZLMk. Graf predikovaných hodnot 3.9b ale ukazuje, že tento model má tendence vracet příliš vysoké hodnoty.

Z grafu 3.12b se predikce pomocí UNS jeví jako nejméně přesná. V oblasti malých k je míra chybovosti UNS v porovnání s ostatními metodami vysoká. Výhodou použití UNS je ale zachování konstantní chybovosti i pro vysoké hodnoty koeficientu k . Rozptyl odhadu koeficientu k pomocí regresních modelů se vzrůstajícím k roste značným způsobem. Proto je hodnota RMS pro UNS nejnižší. Lze tedy tvrdit, že LRM a ZLM dávají kvalitní odhad koeficientu k v malých hodnotách, nicméně s přibývajícím velikostí odhadovaného parametru roste i jejich chyba. Jestliže by data byla vhodná pro modelování pomocí regrese, pak by chybovost modelů byla pravděpodobně mnohem nižší.

Výsledkem citlivostní analýzy sestavené UNS je pořadí důležitosti jednotlivých proměnných (viz tabulku 3.5). Sestrojená UNS je nejvíce citlivá na změnu v intenzitě chlazení i , následuje tloušťka okují d a λ se jeví jako nejméně významný vstupní parametr. Tyto výsledky jsou také v souladu s vizuálním zhodnocením dat. Velkou výhodou použití UNS je možnost konstrukce jedné sítě pro obě proměnné. Dále není nutné složité hledání transformací výstupní proměnné. Zdá se, že za použití UNS jsme schopni relativně dobře vystihnout složité vztahy mezi vstupy a výstupy v celé oblasti dat. Regresní vztahy dávají dobré výsledky pouze v její části.

Regresní analýza pro s probíhala obdobně, jako tomu bylo u proměnné k . Opět se podařilo sestavit modely, kterými bylo možné pro zadanou kombinaci vstupních parametrů odhadnout odezvu s . Tabulka 4.2 udává porovnání chybovosti těchto modelů a neuronové sítě. Výsledky obou lineárních modelů byly velice podobné, koeficienty determinace a

Tabulka 4.2: Shrnutí chyb a koeficientů determinace pro jednotlivé metody predikce proměnné s .

Model	RMS	R^2
LRMs	676,157	0,987
ZLMs	700,972	0,986
UNS	312,484	0,997

chyby RMS se pro jednotlivé modely lišily jen nepatrně. Těmito modely bylo možné určit velikost plochy s pro náhodně zvolené vstupní parametry pouze orientačně. Úkol najít obecně platný jednoduchý vztah pro proměnnou s byl tedy splněn pouze částečně.

Ukazuje se, že UNS má u proměnné s zhruba poloviční chybovost, než regresní modely. Opět se tedy potvrzuje, že použití neuronových sítí má smysl, jestliže se domníváme, že vztahy mezi vstupy a výstupy jsou nelineární, nebo mezi sebou neznámým způsobem

4.3. POROVNÁNÍ METOD

interagují. Graf 3.13 predikovaných hodnot je potvrzením, že neuronová síť dává vskutku kvalitní výsledky.

4.3 Porovnání metod

Jelikož se nepodařilo najít vhodné, dostatečně jednoduché korelační vztahy pro predikci vlivu oxidické vrstvy na chlazení a použití UNS vykazuje také značnou míru chybovosti, jeví se použití těchto metod pro výpočet míry zintenzivnění chlazení jako nevhodné. Nej-
přesnější je simulace pomocí numerického řešení PDR vedení tepla. Použití regresní analýzy nebo neuronových sítí je nevyhnutelné v případě, jsou-li k dispozici naměřená data, která jsou určena ke zpracování. Také se může stát, že bude použití některé z těchto metod výpočetně méně náročné, než numerická simulace. Nicméně v případě řešení úlohy jednorozměrného vedení tepla je tomu spíše naopak. Jestliže to okolnosti dovolují a je možné nasimulovat vedení tepla, pak by tato možnost měla být preferována.

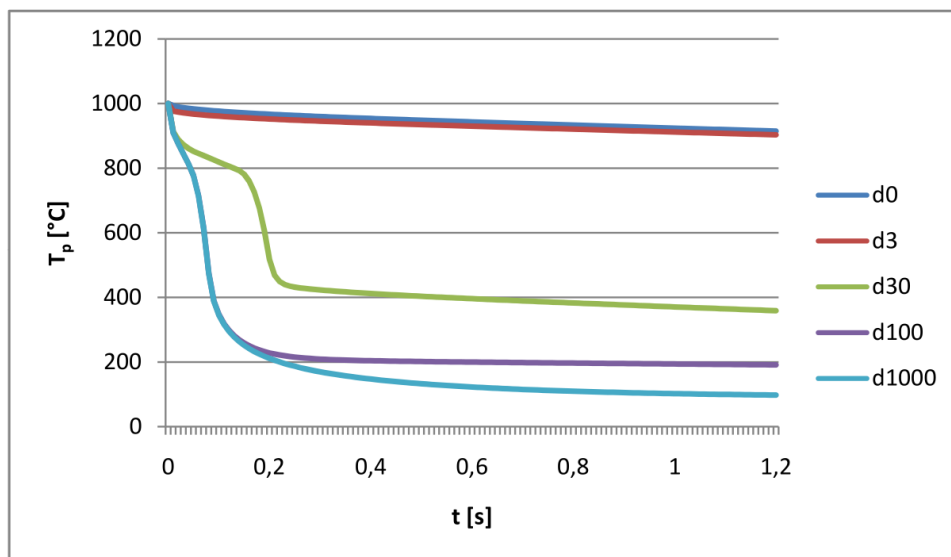
Regresní modely jsou výborným nástrojem pro predikci, jestliže jsou vztahy mezi odezvou a regresory lineární nebo je možné data nějakým vhodným způsobem transformovat. To však vyžaduje zkušenost a trpělivost při konstrukci regresních modelů. S rostoucím počtem vstupních parametrů se hledání vhodného modelu stává velice komplikovaným. Při výběru množiny vysvětlujících proměnných se používají testy, které dokáží s jistotou určit, zdali je daná proměnná pro vysvětlování variability odezvy signifikantní či nikoli. Při konstruování regresních modelů je nutné brát v úvahu, že musí být splněny určité podmínky (např. omezení na rozptyl náhodné složky sestavovaného modelu). Dalším předpokladem, který je v aplikacích velice limitující, je nezávislost jednotlivých vstupů.

UNS mají pro použití mnohem méně omezení, jejich nevýhodou ovšem je, že výsledky lze jen velice těžko interpretovat (chybí zde koeficienty u jednotlivých vstupních proměnných). Další nevýhodou je značná nejistota při určování chyby UNS. Není možné testovat hypotézy pro parametry sestavované sítě. Jejich použití je vhodné zejména tam, kde ostatní metody zklamaly nebo dávají špatné výsledky. Ukazuje se, že UNS jsou schopné zpracovat data, ve kterých uživatel marně hledá nějaké zjednodušující vztahy. Při výběru vstupních proměnných nebo jejich popisu lze použít velice užitečný nástroj - citlivostní analýzu.

4.4 Vysvětlení zvýšení intezity chlazení

Oxidické vrstvy mají mnohem nižší teplotní vodivost ($0,1 - 3 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$), než je teplotní vodivost oceli ($15 - 60 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$). Styk okují s ocelí také častokrát nebývá dokonalý. Z těchto důvodů bychom očekávali, že vrstva okují o jakékoli tloušťce bude působit jako tepelný izolant. Experimenty [21] a simulace, které byly provedeny v této práci ovšem ukazují, že za jistých podmínek je chlazení přes vrstvu okují intenzivnější, než chlazení čistého materiálu.

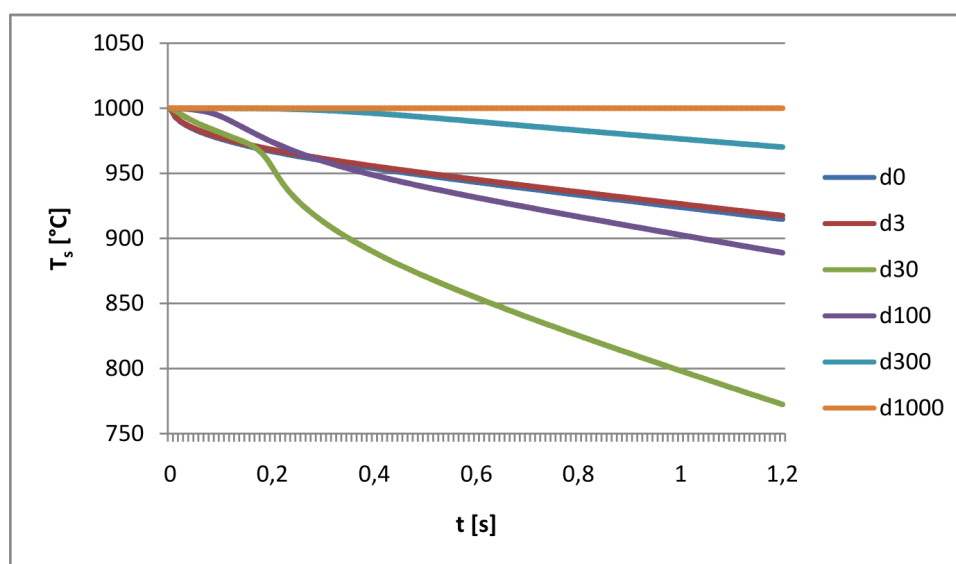
Abychom lépe porozuměli tomuto zvláštnímu jevu, je nutné analyzovat závislost koeficientu přestupu tepla α na teplotě povrchu chlazeného tělesa. Z obrázku 2.7 je patrné, že s klesající teplotou povrchu velikost α prudce roste. Tepelný tok mezi chlazeným povrchem a okolím se vzrůstajícím koeficientem přestupu tepla α je také rostoucí. Množství odvedeného tepla tedy s klesající teplotou povrchu roste. Jelikož jsou okuje špatnými vodiči tepla, dochází při chlazení k velice rychlému ochlazení povrchu tělesa (ačkoli uvnitř



Obrázek 4.9: Graf závislosti teploty T_p na čase pro různé tloušťky okují.

materiálu je těleso stále horké). V případě čistého povrchu je teplo okamžitě přiváděno z oceli a povrch je tak chlazen několikanásobně pomaleji. Tato skutečnost je vyobrazena na grafu 4.9, kde jednotlivé křivky odpovídají různým volbám tloušťky okují d . Například křivka $d30$ odpovídá volbě $d = 30 \mu\text{m}$.

Jestliže je vrstva okují velice tenká, izolační vlastnosti oxidů se téměř neprojeví (viz křivku $d3$ na obrázku 4.10). Okuje o určité tloušťce zapříčiní vznik velkého rozdílu teplot T_s a T_p . V takovém případě je teplo z chlazeného tělesa odváděno velice rychle. Příkladem je křivka $d30$ v obrázku 4.10. Jestliže je ovšem vrstva okují příliš silná, pak je povrch zcela zaizolován a ani výrazný pokles teploty povrchu nemá na intenzitu chlazení pozitivní vliv.



Obrázek 4.10: Graf závislosti teploty T_s na čase pro různé tloušťky okují.

5 Závěr

Tato diplomová práce se zabývá vlivem povrchové vrstvy oxidů na přenos tepla. V teoretické části byly nejdříve velice stručně popsány vznik a vlastnosti oxidických vrstev. Dále byl text věnován matematickému modelování vedení tepla, tedy analytickému a numerickému řešení rovnice tepelné difuze. Následovala kapitola týkající se regresní analýzy tj. aparátu, který umožnil hledat vhodné korelační vztahy pro predikci efektu oxidů na chlazení. Poslední kapitola teoretické části se věnovala umělým neuronovým sítím. Kromě popisu těchto matematických struktur zde byla také odvozena nejznámější metoda učení vícevrstevných UNS, tedy metoda zpětného šíření chyby.

Po úspěšném sestavení numerického modelu bylo nasimulováno vedení tepla pro různé kombinace vstupních parametrů. Výsledky tohoto modelu byly vizualizovány a na základě grafů byla orientačně určena oblast, ve které dochází vlivem povrchové vrstvy oxidů ke zintenzivnění chlazení. Zdá se, že nejdůležitějšími parametry, které ovlivňují chlazení přes okuje, jsou jeho intenzita a také tloušťka oxidické vrstvy. Tepelná vodivost má v porovnání se zmíněnými parametry menší významnost. Ke zrychlení chlazení okujeného povrchu dochází, jestliže je chlazení málo intenzivní a vrstva oxidů je relativně silná (kolem $300 \mu\text{m}$).

Množina dat vygenerovaná numerickým modelem dále sloužila ke hledání regresních vztahů mezi vstupy a výstupy a také ke trénování neuronové sítě. Ukazuje se, že numerický model je vhodným nástrojem pro analýzu vlivu oxidické vrstvy na chlazení z důvodu velké přesnosti a možnosti volby vstupních parametrů dle požadavků uživatele. Jestliže je to možné, měl by k predikci vlivu vrstvy okují na chlazení sloužit právě numerický model.

Hledání korelačních vztahů pro predikci efektu oxidů na chlazení se ukázalo jako velice náročné. Chyby regresních modelů uvedených v této práci jsou relativně vysoké a je důvod se domnívat, že data nesplňují některou z podmínek pro použití lineárního regresního modelu. Nicméně hodnoty výstupních proměnných se podařilo predikovat alespoň orientačně.

Použití umělých neuronových sítí k predikci vlivu vrstvy okují na chlazení je v porovnání s regresními modely mnohem jednodušší. Projevuje se zde výhoda, že správně vytrénovaná síť odpovídá na vstupy požadovanými výstupy bez nutnosti zásahu uživatele. Podařilo se dokázat, že neuronové sítě jsou schopny postihnout variabilitu v datech se značnou mírou nelinearity a složitosti.

Cílů této diplomové práce tedy bylo úspěšně dosaženo. Nalezené regresní vztahy jsou ale poněkud složité a pro praxi pravděpodobně nepoužitelné. Podařilo se ovšem porovnat jednotlivé metody predikce vlivu vrstvy oxidů na chlazení. Těchto výsledků může být využito při práci s daty z reálných experimentů. Ukazuje se, že problematika vedení tepla přes okuje je vzhledem ke komplikacím s přesným určením materiálových vlastností okují a také značnému množství parametrů, které mohou vedení tepla ovlivňovat, velice složitá.

Seznam použitých zdrojů

- [1] Akiyama, T.; Ohta, H.; Takakashi, R.; aj.: Measurement and modeling of thermal conductivity for dense iron oxide porous iron ore agglomerates in stepwise reduction. *ISIJ International*, ročník 30, č. 7, 1992: s. 829–837.
- [2] Anděl, J.: *Matematická statistika*. SNTL, 1985.
- [3] Bartsch, H.-J.: *Matematické vzorce*. Praha: SNTL, první vydání, 1983, 832 s.
- [4] Chalupnik, V.: Biologické algoritmy (4) - Neuronové sítě. 2012.
URL <http://www.root.cz/clanky/biologicke-algoritmy-4-neuronove-site/>
- [5] Chlada, M.: *Zpracování signálů akustické emise pomocí umělých neuronových sítí*. Dizertační práce, České vysoké učení technické v Praze, 2008, fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská.
- [6] Čermák, L.: *Numerické metody II, Diferenciální rovnice*. Brno: Akademické nakladatelství CERM, červenec 2010.
- [7] Halliday, D.; Walker, J.; Resnick, R.: *Fyzika*. Brno: VUTIUM, 2014, 1200 s.
- [8] Hrabovský, J.: *Kvantifikace mechanismů hydraulického odstranění okují*. Dizertační práce, Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2012.
- [9] Incropera, F. P.; DeWitt, D. P.: *Fundamentals of heat and mass transfer*. New York: Wiley, 1996.
- [10] Jančíková, Z.: *Umělé neuronové sítě v materiálovém inženýrství*. VŠB - Technická univerzita Ostrava, 2006.
- [11] Klimeš, L.: *Optimalizace parametrů sekundárního chlazení plynulého odlévání oceli*. Dizertační práce, Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2014.
- [12] Krzyzanowski, M.; Beynon, J. H.; Farrugia, D. C. J.: *Oxide Scale Behavior in High Temperature Metal Processing*. Wiley-VCH, 2009.
- [13] Lin, M.; Bodnar, R. L.; Shen, Y.; aj.: Some fundamentals for the accelerated cooling of plate products. In *International Symposium on Steel for Fabricated Structures*, 1999, s. 95–103.
- [14] Lindsey, J. K.: *Applying Generalized Linear Models*. Springer, 1997.
- [15] Mancheno, V. V. B.: *Scale Formation and descaling in hot rolling of low carbon steel*. Dizertační práce, Department of Mining and Materials Engineering, McGill University, 2008.
- [16] Mauder, T.: *Optimalizace Bramového plynulého odlévání oceli za pomoci numerického modelu teplotního pole*. Dizertační práce, Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2012.

SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ

- [17] Pais, M. R.; Chow, L. C.; Mahefkey, E. T.: Surface Roughness and Its Effects on the Heat Transfer Mechanism in Spray Cooling. *J. Heat Transfer*, ročník 114, č. 1, 1992: s. 211–219.
- [18] Patankar, S. V.: *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1980.
- [19] Pohanka, M.: *Technical Experiment Based Inverse Tasks in Mechanics*. Dizertační práce, Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2006.
- [20] Press, W. H.; Teukolsky, S. A.; Vetterling, W. T.; aj.: *Numerical Recipes in C*. Cambridge University Press, druhé vydání, 1992.
- [21] Raudenský, M.; Hnízdil, M.; Kotrbáček, P.: Why oxides intensify spray cooling. In *The 30th International Steel Industry Conference*, Paris, 2012, s. 92–337.
- [22] Sladká, V.: *Statistická klasifikace pomocí zobecněných lineárních modelů*. Diplomová práce, Vysoké učení technické v Brně, Fakulta strojního inženýrství, 2010.
- [23] Slowik, J.; Borchardt, G.; Kohler, C.; aj.: Influence of oxide scales on heat transfer in secondary cooling zones in the continuous casting process: Part II. Determination of material properties of oxide scales on the steel under spray-water cooling conditions. *Steel Res. Int.*, ročník 61, č. 7, 1990: s. 302–311.
- [24] Takeda, M.; Onishi, T.; Nakakubo, S.; aj.: Physical Properties of Iron-Oxide Scales on Si-Containing Steels at High Temperature. *Materials Transactions*, ročník 50, č. 9, 2009: s. 2242–2246.
- [25] Šnorek, M.; Jiřina, M.: *Neuronové sítě a neuropočítače*. Praha: ČVUT, 1998.
- [26] Wendelstorf, J.; Spitzer, K.-H.; Wendelstorf, R.: Spray water cooling heat transfer at high temperatures and liquid mass fluxes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, ročník 51, 2008: s. 4902–4910.
- [27] Zvára, K.: *Regrese*. Matfyzpress, 2008, ISBN 0-891-16522-3.

Seznam použitých veličin a zkratek

Symbol	Rozměr	Veličina
a	$[\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$	součinitel teplotní vodivosti
AIC	$[-]$	Akaikeho informační kritérium
c	$[\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}]$	měrná tepelná kapacita
d	$[\mu\text{m}]$	tloušťka vrstvy okují
i	$[-]$	intenzita chlazení
k	$[-]$	koeficient zintenzivnění chlazení, viz rov. 3.3
q	$[\text{W m}^{-2}]$	měrný tepelný tok
\dot{q}	$[\text{W m}^{-3}]$	objemová energie tepelného zdroje
R^2	$[-]$	koeficient determinace
RMS	$[-]$	chyba predikčního modelu
s	$[\text{K s}]$	výstupní parametr num. modelu, viz rov. 3.4
T	$[\text{K}, \text{°C}]$	teplota
T_∞	$[\text{K}, \text{°C}]$	teplota okolí
T_p	$[\text{K}, \text{°C}]$	teplota povrchu
T_s	$[\text{K}, \text{°C}]$	teplota na rozhraní ocel-okuje
t	$[\text{s}]$	čas
Δt	$[\text{s}]$	časový diskretizační krok
Δx	$[\text{m}]$	prostorový diskretizační krok
x, y, z	$[\text{m}]$	označení jednotlivých složek kartézské soustavy souřadnic
α	$[\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}]$	součinitel přestupu tepla
ϵ	$[-]$	emisivita (poměrná zářivost)
λ	$[\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}]$	koeficient tepelné vodivosti
ρ	$[\text{kg m}^{-3}]$	hustota
σ	$[\text{W m}^{-2} \text{K}^{-4}]$	Stefanova-Boltzmannova konstanta

SEZNAM POUŽITÝCH VELIČIN A ZKRATEK

Zkratka	Význam
CHF	kritický tepelný tok (<i>Critical Heat Flux</i>)
FTCS	numerické schéma dopředné v čase, centrální v prostoru (<i>Forward Time Centered Space</i>)
LRM	lineární regresní model
OP	okrajová podmínka
PDR	parciální diferenciální rovnice
UNS	umělá neuronová síť
ZLM	zobecněný lineární model

Přílohy

A Vybraná rozdělení pravděpodobnosti

A.1 Normální rozdělení

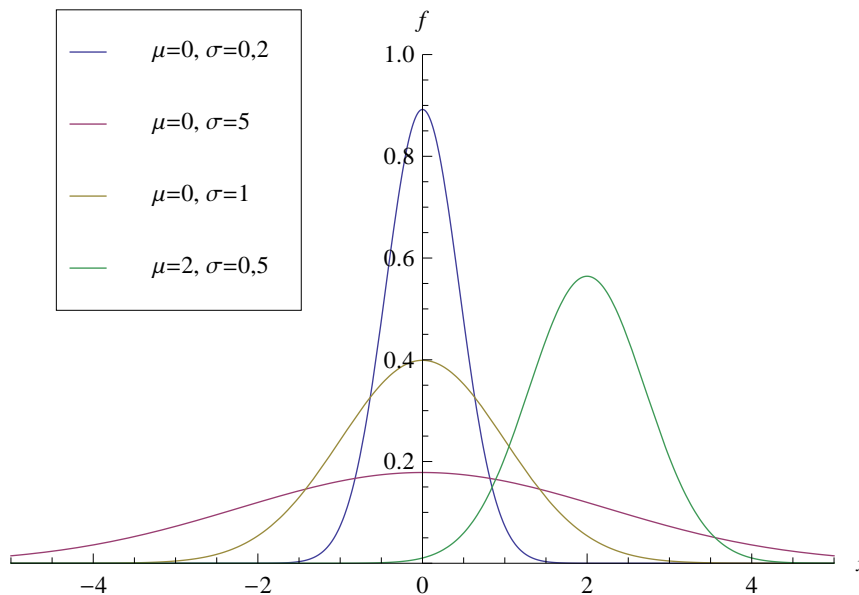
Normální rozdělení se střední hodnotou $\mu \in \mathbb{R}$ a rozptylem $\sigma^2 > 0$ je definováno hustotou pravděpodobnosti

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \text{ kde } x \in \mathbb{R}.$$

Distribuční funkce tohoto rozdělení je pak dána vztahem

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) dt.$$

Tuto funkci nelze analyticky vyjádřit. Její hodnoty se počítají numericky nebo se odečítají z tabulek. Příklady několika normálních rozdělení pro různou volbu parametrů μ, σ^2 jsou na obrázku A.1.



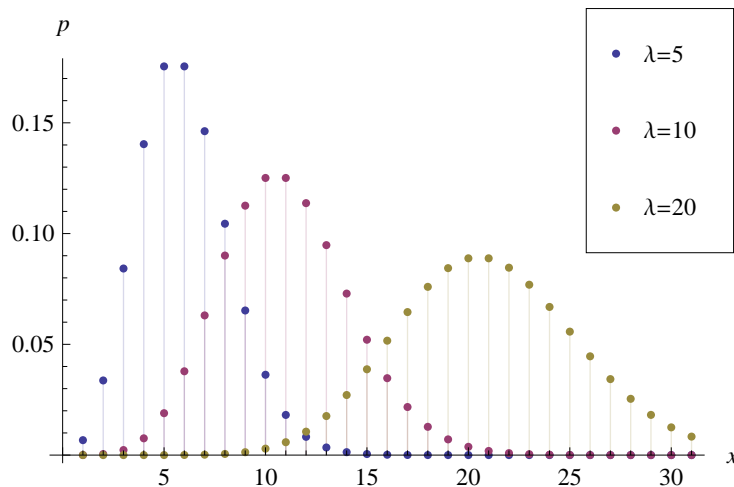
Obrázek A.1: Hustota pravděpodobnosti normálního rozdělení.

A.2 Poissonovo rozdělení

Poissonovo rozdělení pravděpodobnosti s parametrem $\lambda > 0$ je dáno pravděpodobnostní funkcí

$$p(x) = \frac{\lambda^x}{x!} e^{-\lambda}, \text{ kde } x = 0, 1, 2, \dots$$

Jedná se o diskrétní rozdělení a vyjadřuje počet výskytů jevu, který se může odehrát během daného časového intervalu s pevně danou pravděpodobností. Příklady pravděpodobnostní funkce jsou pro různé volby λ na obrázku A.2.



Obrázek A.2: Pravděpodobnostní funkce Poissonova rozdělení.

A.3 Gamma rozdělení

Gamma rozdělení s parametrem tvaru $\alpha > 0$ a parametrem měřítka $\beta > 0$ je dáno spojitou hustotou pravděpodobnosti

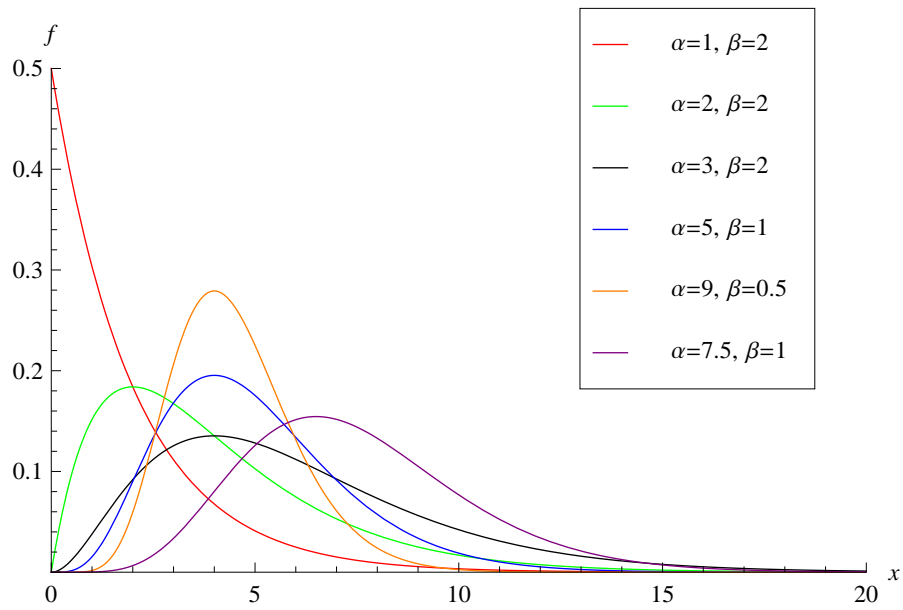
$$f(x) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-1} e^{-\beta x}, \text{ kde } x > 0.$$

Symbolem $\Gamma(\alpha)$ je míněna tzv. *Gamma funkce*, která je definována jako integrál

$$\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-x} x^{\alpha-1} dx.$$

Jedná se v podstatě o zobecněný faktoriál [3]. Ukázky hustot pravděpodobnosti jsou pro několik voleb parametrů α a β k nahlédnutí na obrázku A.3.

A.3. GAMMA ROZDĚLENÍ



Obrázek A.3: Hustota pravděpodobnosti gamma rozdělení.