

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ  
BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY



FAKULTA STROJNÍHO INŽENÝRSTVÍ  
ENERGETICKÝ ÚSTAV  
FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING  
ENERGY INSTITUTE

## OPTIMALIZACE PARAMETRŮ SEKUNDÁRNÍHO CHLAZENÍ PLYNULÉHO ODLÉVÁNÍ OCELI

OPTIMIZING THE PARAMETERS OF THE SECONDARY COOLING  
OF CONTINUOUS CASTING OF STEEL

POJEDNÁNÍ KE STÁTNÍ DOKTORSKÉ ZKOUŠCE  
TREATISE ON DOCTORAL THESIS

AUTOR PRÁCE  
AUTHOR

Ing. LUBOMÍR KLIMEŠ

ŠKOLITEL  
SUPERVISOR

doc. Ing. JOSEF ŠTĚTINA, Ph.D.



## **Abstrakt**

Předkládané pojednání ke státní doktorské zkoušce se zabývá stochastickou optimalizací provozních parametrů zařízení pro plynulé odlévání oceli. V práci je uveden současný stav poznání v oblasti technologie plynulého odlévání oceli, numerických modelů teplotních polí plynule odlévaných předlitků, možností paralelizace a optimalizačních metod a algoritmů pro řešení inženýrských úloh, především obsahujících náhodnost a neurčitost. Důraz je kladen na metodu kontrolních objemů, algoritmus progressive hedging umožňující řešit scénářové stochastické optimalizační problémy a architekturu CUDA. Práce dále obsahuje souhrn současného stavu řešení dizertační práce a dosažené dílčí výsledky. Závěrem jsou vytyčeny cíle dizertační práce a metodika, která bude použita k jejich splnění.

## **Klíčová slova**

plynulé odlévání oceli, numerický model teplotního pole, paralelizace, CUDA, stochastická optimalizace

## **Summary**

The treatise on the doctoral thesis deals with stochastic optimization of operating parameters of the continuous steel casting machine. The thesis contains the-state-of-the-art in the field of the continuous casting technology, numerical models of temperature field of continuously cast blanks, parallel computing, and optimization techniques and algorithms that can be used for solving engineering problems, especially with uncertainty and randomness. The focus is chiefly on the control volume method, the progressive hedging algorithm for solving scenario-based stochastic optimization problems, and the CUDA architecture. Further, the treatise presents the current state of the doctoral thesis solution and partial results that have already been attained. In the conclusion, the aims of the doctoral thesis are formulated and the methodology, which will be utilized, is discussed.

## **Keywords**

continuous steel casting, numerical model of temperature field, parallelization, CUDA, stochastic optimization

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem předkládané pojednání ke státní doktorské zkoušce vypracoval samostatně pod vedením svého školitele doc. Ing. Josefa Štětiny, Ph.D. s použitím podkladů uvedených v seznamu použitých zdrojů.

Ing. Lubomír Klimeš



|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Plynulé odlévání oceli</b>  | <b>5</b>  |
| 1.1      | Charakteristika výroby oceli plynulým odléváním . . . . .                            | 5         |
| 1.2      | Historický vývoj plynulého odlévání oceli . . . . .                                  | 5         |
| 1.3      | Zařízení pro plynulé odlévání . . . . .  | 6         |
| 1.3.1    | Formáty předlitků odlévaných na ZPO . . . . .  | 6         |
| 1.3.2    | Konstrukční provedení ZPO . . . . .  | 6         |
| 1.4      | Hlavní části ZPO a princip jeho činnosti . . . . .                                   | 8         |
| 1.5      | Parametry charakterizující provoz ZPO . . . . .                                      | 10        |
| 1.6      | Vady předlitků při plynulém odlévání oceli . . . . .                                 | 11        |
| <b>2</b> | <b>Matematický model teplotního pole plynule odlévaného předlitku</b>                | <b>12</b> |
| 2.1      | Model teplotního pole s fázovými změnami . . . . .                                   | 12        |
| 2.1.1    | Metoda entalpie . . . . .  | 13        |
| 2.1.2    | Metoda efektivní tepelné kapacity . . . . .  | 14        |
| 2.2      | Počáteční a okrajové podmínky matematického modelu teplotního pole . . . . .         | 14        |
| 2.2.1    | Stanovení koeficientu přestupu tepla pod chladícími tryskami . . . . .               | 17        |
| 2.3      | Geometrické a fyzikální podmínky matematického modelu teplotního pole . . . . .      | 17        |
| 2.4      | Metody řešení matematického modelu teplotního pole . . . . .                         | 18        |
| 2.4.1    | Analytické metody řešení . . . . .   | 18        |
| 2.4.2    | Numerické metody řešení . . . . .  | 19        |
| 2.5      | Numerická diskretizace matematického modelu teplotního pole . . . . .                | 21        |
| 2.5.1    | Diskretizace metodou entalpie . . . . .  | 23        |
| 2.5.2    | Diskretizace metodou efektivní tepelné kapacity . . . . .                            | 25        |
| 2.5.3    | Stabilita explicitní časové diskretizace . . . . .                                   | 26        |
| 2.6      | Srovnání metod entalpie a efektivní tepelné kapacity a jejich implementace . . . . . | 27        |
| 2.7      | Paralelizace výpočtu teplotního pole na GPU . . . . .                                | 27        |
| 2.7.1    | Grafické karty nVidia a architektura CUDA . . . . .                                  | 29        |
| 2.7.2    | Implementace modelu teplotního pole v CUDA . . . . .                                 | 29        |
| <b>3</b> | <b>Optimalizace a optimalizační algoritmy</b>  | <b>31</b> |
| 3.1      | Matematické programování a optimalizace . . . . .                                    | 31        |
| 3.2      | Deterministická optimalizace . . . . .   | 32        |
| 3.3      | Stochastická optimalizace . . . . .  | 32        |
| 3.3.1    | Deterministické ekvivalenty stochastické optimalizační úlohy . . . . .               | 33        |
| 3.3.2    | Vícetupňová stochastická optimalizace . . . . .                                      | 34        |
| 3.3.3    | Stochastická optimalizace se scénáři . . . . .                                       | 35        |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 3.3.4    | Algoritmus progressive hedging . . . . .  | 36        |
| 3.4      | Heuristické optimalizační algoritmy . . . . .   | 37        |
| <b>4</b> | <b>Současný stav řešení dizertační práce</b>  | <b>39</b> |
| 4.1      | Numerické modely . . . . .  | 39        |
| 4.1.1    | Numerický model předlitku pro studium chladících účinků trysek . . . . .                | 39        |
| 4.1.2    | Numerický model kruhového sochorového předlitku . . . . .                               | 40        |
| 4.1.3    | Paralelizace výpočtu teplotního pole na GPU s využitím CUDA . . . . .                   | 40        |
| 4.2      | Stochastická optimalizace provozu ZPO . . . . .   | 41        |
| 4.3      | Studie vlivu chemického složení na teplotní pole plynulé odlévaného předlitku . . . . . | 43        |
| <b>5</b> | <b>Cíle dizertační práce a závěr</b>  | <b>45</b> |
| 5.1      | Cíle dizertační práce . . . . .   | 45        |
| 5.2      | Závěr . . . . .   | 46        |
|          | <b>Seznam použitých zdrojů</b>  | <b>47</b> |
|          | <b>Vlastní publikace vztahující se k tématu dizertační práce</b>                        | <b>52</b> |
|          | <b>Ostatní vlastní publikace</b>  | <b>53</b> |
|          | <b>Seznam použitých symbolů a zkratk</b>  | <b>55</b> |

**T**ECHNOLOGIE plynulého odlévání patří v současné době k dominantnímu způsobu celosvětové výroby oceli. Plynulým odléváním se dnes vyrábí více než 95 % veškeré světové produkce oceli, navíc je tato technologie využívána např. k odlévání slitin hliníku nebo mědi. Požadavky na zvyšování produktivity výroby oceli, její kvality, jakosti odlévaných předlitků a současné nároky na snižování výrobních nákladů vedoucí k posílení konkurenceschopnosti jednotlivých výrobních provozů není možné splnit bez použití numerických modelů teplotních polí plynule odlévaných předlitků a implementace optimalizačních algoritmů. Prudký rozvoj výpočetní techniky a numerických metod umožnil rozšíření těchto modelů do provozů a v současné době jsou dynamické solidifikační modely běžně využívány v ocelárnách se zařízeními plynulého odlévání pro řízení, monitoring výroby a snižování výskytu a predikce vad. V případě výskytu vad předlitku nebo nízké kvality odlité oceli jsou data teplotních polí z numerických modelů zpětně analyzována a podrobena kontrole, aby se v budoucnu uvedeným nedostatkům zabránilo. Současný trend je rovněž zmiňované numerické modely využívat nejenom pro řízení a sledování provozu lícího zařízení, ale také pro optimalizaci nastavení parametrů zařízení pro plynulé odlévání a jeho optimální řízení.

Předkládané pojednání ke státní doktorské zkoušce je zaměřeno na implementaci numerických modelů teplotního pole plynule odlévaných předlitků na zařízení pro plynulé odlévání oceli, které jsou následně využity metodami optimalizace pro optimální řízení lícího stroje. Pozornost je věnována sochorovým předlitkům kruhového a především čtvercového průřezu, pro který je odvozena koncepce numerického modelu teplotního pole a solidifikace oceli metodou kontrolních objemů. V oblasti optimalizace a optimalizačních algoritmů je kladen důraz na přístup stochastické optimalizace, metodu progressive hedging pro řešení scénářových stochastických optimalizačních úloh a heuristické optimalizační algoritmy, které je možné využít pro řešení dílčích optimalizačních podúloh algoritmu progressive hedging. Z důvodu vysoké výpočetní a časové náročnosti numerických modelů je v práci rovněž diskutována možnost paralelizace výpočtů pomocí grafických karet s návrhem implementace numerického modelu teplotního pole pomocí architektury CUDA. Dílčí výsledky použití zmíněného optimalizačního algoritmu jsou uvedeny pro úlohu se zjednodušeným modelem, která řeší optimální reakci na poruchový stav výpadku chladicího okruhu sekundární chladicí zóny při provozu lícího stroje.

První kapitola je věnována popisu podstaty metody plynulého odlévání, jsou diskutovány typy lících strojů pro plynulé odlévání, jejich hlavní části a funkce. Dále jsou uvedeny hlavní parametry zařízení pro plynulé odlévání, které ovlivňují provoz stroje a tedy výrobu předlitků. Závěrem kapitoly je uveden přehled základních vad plynule odlévaných předlitků a jejich charakteristických příčin.

Kapitola druhá je zaměřena na matematický popis modelu teplotního pole, podmínek jednoznačnosti úlohy a její numerickou diskretizaci. V práci je uvedena teoretická podstata dvou nejběžnějších metod, které lze použít pro modelování úloh s fázovými přeměnami: metoda entalpie a metoda efektivní tepelné kapacity. Výhody, nevýhody a implementační detaily obou přístupů jsou vzájemně porovnány a diskutovány. Pomocí metody kontrolních objemů jsou pak odvozeny diskretizační rovnice matematického modelu zahrnující oba výše uvedené přístupy modelování fázových změn. Závěrečnou část druhé kapitoly tvoří úvod do problematiky paralelizace výpočtu modelu teplotního pole na grafických kartách nVidia a architektury CUDA. Součástí kapitoly je rovněž návrh implementace numerického modelu v programovacím jazyku C++.

Třetí kapitola je věnována problematice optimalizace, matematického programování a optimalizačních algoritmů. Důraz je kladen na metody stochastické optimalizace umožňující řešit úlohy zahrnující náhodnost a neurčitost. Pro řešení scénářových stochastických optimalizačních problémů, které se v praxi hojně vyskytují a které je možné aplikovat v problematice optimálního řízení provozu zařízení pro plynulé odlévání, je detailněji diskutován algoritmus progressive hedging. Závěrem třetí kapitoly jsou popsány heuristické algoritmy, jejichž principy a chování je inspirováno přírodou a které lze v součinnosti s algoritmem progressive hedging použít pro řešení optimalizačních úloh a optimálního řízení provozu zařízení pro plynulé odlévání.

Kapitola čtvrtá shrnuje současný stav řešení dizertační práce, jsou zde uvedeny dílčí výsledky a závěry v oblasti vývoje a implementace numerických modelů sochorových předlitků čtvercového a kruhového formátu a jejich paralelních výpočtů na grafických jednotkách GPU pomocí architektury CUDA, dílčí výsledky v oblasti stochastické optimalizace se scénáři na zjednodušeném modelu ZPO s možností havarijního výpadku okruhu v sekundární chladicí zóně. Součástí kapitoly jsou rovněž výsledky a závěry provedené analýzy vlivu odchýleného chemického složení na teplotní pole plynule odlévaného sochoru.

Pátou kapitolu tvoří vymezení a formulace cílů dizertační práce a závěr.



PŘED rokem 1950 byla ocel v hutích odlévána do stacionárních forem – kokil na tzv. ingoty. Tato metoda však nebyla příliš efektivní a produktivní, protože ocel ve formách tuhla poměrně dlouhou dobu a pro další zpracování musela být opětovně ohřívána, což bylo energeticky nevýhodné. V 50. letech minulého století byla vyvinuta metoda plynulého odlévání oceli, která se zařadila mezi moderní hutnické výrobní metody a významným způsobem přispěla ke zvýšení produktivity, kvality a efektivnosti výroby oceli. Z tohoto důvodu se metoda plynulého odlévání stala dominantní technologií pro výrobu oceli.

V současné době je více než 95 % celosvětové produkce oceli vyráběno metodou plynulého odlévání oceli [86]. Mimo ocel je možné také tuto technologii výroby použít pro hliník, měď a jejich slitiny.

Cílem této kapitoly je popsat základní principy metody plynulého odlévání, typy licích strojů využívaných pro plynulé odlévání a jejich hlavních částí a rovněž charakterizovat nejdůležitější parametry provozu zařízení pro plynulé odlévání. Závěrem kapitoly je diskutována problematika vad plynule odlévaných předliték a jejich hlavních příčin.

## 1.1 Charakteristika výroby oceli plynulým odléváním

Technologický proces výroby oceli lze rozdělit na dva na sebe navazující kroky: (a) zpracování vstupních surovin v podobě ocelářské vsázky pomocí rafinace v tavících zařízeních a zařízeních pánvové metalurgie a (b) samotný proces odlévání oceli, tj. přeměna taveniny tuhnutím na tzv. předlitky požadovaného tvaru, které jsou určeny pro další zpracování [5].

Plynulé odlévání oceli je technologický postup, při kterém je roztavená ocel, tzv. tavenina, postupně transformována v zařízení pro plynulé odlévání na tuhý polotovár požadovaného tvaru (resp. průřezu) a délky, tzv. předlitek, který je následně dále zpracováván na finální výrobky, nejčastěji tvářením za tepla. Charakteristickým rysem metody plynulého odlévání a hlavní odlišností ve srovnání s odléváním oceli do forem na ingoty je plynulost: přestože je roztavená ocel dopravována periodicky v pánvích do mezipánve ZPO, licí stroj umožňuje kontinuálně odlévat předlitek polonekonečné délky, který je ovšem z důvodu manipulovatelnosti a dalšího zpracování periodicky dělen na požadovanou délku [5, 11, 86].

## 1.2 Historický vývoj plynulého odlévání oceli

Počátky principu metody plynulého odlévání se objevují již v první polovině 19. století, kdy v roce 1840 a posléze v roce 1843 zkonstruovali G. E. Sellers a J. Laring zařízení pro plynulé od-

lívání olověných trubek [5]. V roce 1857 si nechal H. Bessemer patentovat zařízení pro odlévání ocelových plechů mezi dva otáčivé válce, které byly chlazeny vodou [86, 5]. Na tuto myšlenku následně navázali další vynálezci a inženýři, např. v roce 1934 A. V. Ulitovskij, který zkonstruoval zařízení založené na principu Bessemerova stroje, na kterém odléval pásy z oceli i litiny [5, 11]. Následný vývoj opustil myšlenku použití otáčejících se chlazených válců a následovalo použití speciálních forem, tzv. krystalizátorů, pomocí kterých bylo možné lépe řídit solidifikaci oceli. V roce 1886 si nechal B. Atha patentovat princip vertikálního plynulého odlévání [86], J. T. Rowley a A. McKee navrhli a zkonstruovali v roce 1915 zařízení pro plynulé odlévání s licím obloukem a rovnacím zařízením [86], asynchronní oscilaci krystalizátoru navrhnul jako první v roce 1933 S. Junghaus [5]. Od třicátých let 20. století se začínají objevovat poloplynulé provozy zařízení pro plynulé odlévání, rozmach metody plynulého odlévání nastává po druhé světové válce a v 60. a 70. letech 20. století je plynulé odlévání oceli již rozšířenou celosvětovou technologií pro výrobu oceli, jejíž podíl výroby stále roste. První zařízení pro plynulé odlévání bylo v Československu uvedeno do provozu v Podbrezové v roce 1961 [5].

### 1.3 Zařízení pro plynulé odlévání

Termínem zařízení pro plynulé odlévání (ZPO) je označován licí stroj a jeho příslušenství, který slouží k přeměně taveniny na tuhé polotovary, tzv. předlitky. Hlavní dělení zařízení pro plynulé odlévání je možné provést podle průřezu odlévaného předlitku, tzv. formátu, a podle konstrukčního řešení licího stroje [86, 5].

#### 1.3.1 Formáty předlitků odlévaných na ZPO

Podle osového průřezu odlévaného předlitku, tzv. formátu, se ZPO dělí na (a) *bramové*, (b) *sochorové* a (c) *blokové* licí zařízení. Bramou je nazýván předlitek, jehož průřez je tvořen obdélníkem s poměrem stran větším než 1,3, obvyklý poměr stran průřezu bramy se pohybuje mezi 4 až 10. Předlitek se čtvercovým nebo kruhovým průřezem se nazývá sochozem a blokem je označován předlitek s obdélníkovým průřezem, jehož poměr stran je menší než 1,5 [5, 11, 61]. Přestože se jednotlivé typy ZPO odlišují tvarem odlévaného předlitku, hlavní části licího stroje a jejich charakteristika popsané v následující části jsou shodné pro všechny zmíněné typy ZPO. Avšak jednotlivé části se mohou konstrukčně nebo technicky lišit, např. konfigurací chladících trysek sekundární chladicí zóny z důvodu odlišných požadavků na ochlazování předlitku nebo systémem vodících válců z důvodu odlišně působícího ferostatického tlaku taveniny.

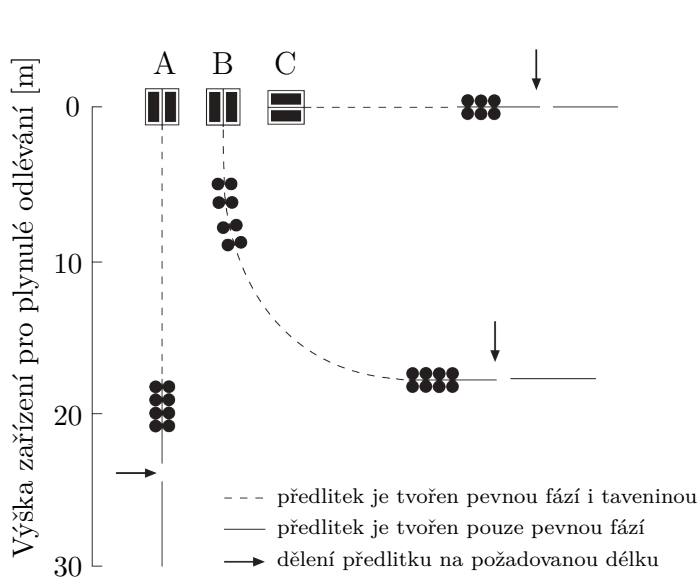
#### 1.3.2 Konstrukční provedení ZPO

Zařízení pro plynulé odlévání je možné členit podle konstrukčního provedení a uspořádání jednotlivých částí licího stroje na (a) *vertikální*, (b) *radiální* a (c) *horizontální*.

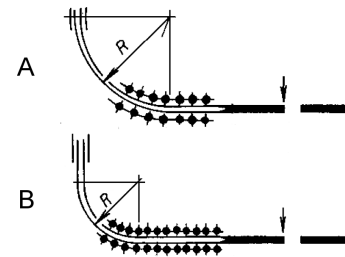
##### Vertikální ZPO

Historicky nejstarším konstrukčním řešením je *vertikální* ZPO, jehož hlavní části jsou umístěny na vertikální přímce, tj. svisle pod sebou. Koncepce uspořádání vertikálního licího stroje vychází z technologie odlévání oceli do kokil a charakteristickým znakem je svislý pohyb předlitku a jeho ochlazování přes přímý vertikální krystalizátor, pod kterým následuje svislá sekundární a terciální chladicí zóna [5, 11]. Schématické znázornění vertikálního ZPO je na Obrázku 1.1, pozice A. Tento typ ZPO se stavěl především na počátku druhé poloviny 20. století. Od 70. let 20. století bylo vertikální ZPO stavěno pouze vyjíměčně a nahradily jej jiné typy ZPO, především radiální. Výhodami vertikálního ZPO jsou např. snadnější dosažení čistoty předlitku (vměstky snadněji vyplouvají svislým tekutým jádrem) a skutečnost, že předlitek nevyžaduje rovnání [5]. Hlavní nevýhodou vertikálního ZPO je velká konstrukční výška celého zařízení (viz Obrázek 1.1), což

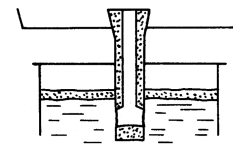
znamená vysoké stavební náklady. Dalšími nevýhodami jsou omezení licí rychlosti z důvodu výšky ZPO (v přímém vztahu k metalurgické délce) a s tím související omezené možnosti zvyšování produktivity, složitější zařízení pro dopravu odlitých předlitků, vyšší poruchovost a obtížná údržba zařízení [5, 11].



**Obrázek 1.1:** Typy ZPO podle konstrukce:  
(A) vertikální, (B) radiální, (C) horizontální [86]



**Obrázek 1.2:** Typy radiálního ZPO podle tvaru krystalizátoru:  
(A) zakřivený, (B) přímý [5]



**Obrázek 1.3:** Ponorná trubice [5]

### Radiální ZPO

U radiálního<sup>1</sup> ZPO, který patří v současné době mezi nejrozšířenější typ ZPO, jsou hlavní části licího stroje umístěny na oblouku, nejčastěji na čtvrtkružnici, viz Obrázek 1.1, pozice B. Na krystalizátor, který může být zakřivený (tj. osa krystalizátoru je částí kružnice; viz Obrázek 1.2, pozice A) nebo méně často přímý (viz Obrázek 1.2, pozice B) [5], navazují sekundární a terciální chladicí zóny, které leží na pomyslné kružnici, jejíž střed nejčastěji ve stejné výšce jako horizontální osa krystalizátoru (viz Obrázek 1.2, pozice A). Podle provozních podmínek ZPO dochází k solidifikaci celého průřezu předlitku buď již na kruhové části ZPO, nebo až za místem rovnání<sup>2</sup> na horizontální části ZPO, což koresponduje s tendencí zvyšování licího výkonu a tedy i prodloužování metalurgické délky. Zároveň probíhá rovnání předlitku při jeho tekutém jádru, což přináší nižší nároky na mechanické namáhání předlitku a redukcí vznik případných vad způsobených rovnáním. Nároky na snižování celkové výšky ZPO a tedy ke snížení stavebních nákladů vedou ke snižování poloměru licího oblouku, což způsobuje posun metalurgické délky a odpovídající části předlitku na horizontální část ZPO [5]. Snižování výšky ZPO a zmenšování poloměru licího oblouku je na druhé straně omezeno rostoucí deformací předlitku v místě rovnání, což má nepříznivý vliv na kvalitu odlévaných předlitků. Hlavními výhodami radiálního ZPO jsou především možnost dosahovat vyšší produkce, menší stavební náklady ZPO, jednodušší zařízení pro dopravu odlitých předlitků, nižší poruchovost a snadnější obsluha. Nevýhodou radiálního ZPO jsou zejména vyšší nároky na čistotu oceli před odléváním, nákladnější výroba krystalizátorů v případě ZPO se zakřiveným krystalizátorem a obtížnější údržba, kontrola a seřízení ZPO v licím oblouku [5, 11].

<sup>1</sup>často také nazýváno *obloukové* ZPO

<sup>2</sup>místo na ZPO, kde dochází k přechodu obloukové části na vodorovnou přímou část

## Horizontální ZPO

Nejméně rozšířeným typem je *horizontální* ZPO, u kterého jsou hlavní prvky licího stroje umístěny na horizontální přímce, viz Obrázek 1.1, pozice C. Na horizontálních ZPO se odlévají především speciální a vysoce jakostní oceli. Hlavní výhodou horizontálních ZPO jsou především nižší nároky na stavební výšku zařízení a s tím spojené nižší stavební náklady, malý ferostatický tlak vznikající v předlitku, není nutné provádět rovnání předlitku a rovněž snadná obsluha a seřizování stroje. Hlavními nevýhodami horizontálního ZPO jsou především vyšší náklady na provoz zařízení, nižší životnost krystalizátoru a omezení velikosti formátu odlévaného předlitku [5].

### 1.4 Hlavní části ZPO a princip jeho činnosti

Licí stroj pro plynulé odlévání se obvykle skládá z těchto hlavních částí:

**Pánev** slouží k dopravě roztavené oceli z pece nebo konvertoru do ZPO. Pánve jsou obvykle periodicky dopravovány jeřábem do otočného licího stojanu, který umožňuje manipulaci s více pánvemi nad licím strojem tak, aby byl zabezpečen přísun dostatečného množství roztavené oceli do mezipánve. Velikost pánve se obvykle pohybuje v závislosti na tavně řádově v desítkách až stovkách tun [5, 31].

**Mezipánev** je umístěna pod otočným stojanem s pánvemi, ze kterých přitéká přes stínící trubici<sup>3</sup> roztavená ocel do mezipánve. Mezipánev je obvykle tvořena vyzdívkou ze žáruvzdorných materiálů a opatřena víkem pro zmenšení tepelných ztrát taveniny. Hlavními úkoly mezipánve jsou zajistit dostatečné množství<sup>4</sup> taveniny pro provoz ZPO, homogenizace roztavené oceli a její teploty, oddělení zbývající strusky od taveniny a redukce ferostatického tlaku taveniny [11, 5, 65]. Tyto činitele významně ovlivňují celkovou produktivitu ZPO a kvalitu odlévaných předlitků a proto je mezipánev jednou z nejdůležitějších částí ZPO. Velikost mezipánve se obvykle pohybuje řádově v desítkách tun.

**Krystalizátor** je zařízení umístěné pod mezipánví, ze které je do krystalizátoru přiváděna tavenina pomocí ponorné trubice<sup>5</sup>, viz Obrázek 1.3. Hlavní úlohou krystalizátoru je počáteční odvod<sup>6</sup> tepla z taveniny a vytvoření tuhé slupky na povrchu předlitku. Ztuhlá vrstva na povrchu předlitku musí mít na výstupu z krystalizátoru dostatečnou tloušťku a pevnost, aby zamezila svému protržení<sup>7</sup> vlivem ferostatického tlaku taveniny a naopak umožnila průchod předlitku sekundární chladicí zónou, ve které je předlitek dále ochlazován [17, 5]. Krystalizátor patří mezi nejdůležitější části ZPO, neboť homogenita a způsob odvodu tepla v krystalizátoru ovlivňuje celkové teplotní pole předlitku, strukturu vznikající tuhé fáze, tepelné napětí působící na předlitek a další veličiny ovlivňující kvalitu odlévané oceli [11, 66, 13]. Krystalizátory lze podle konstrukce rozdělit na *deskové* a *trubkové*. Krystalizátor, který je chlazený protékající vodou, je nejčastěji vyroben z mědi, případně ze slitin mědi pro jejich vysokou tepelnou vodivost. Vnitřní povrch krystalizátoru je niklováním opatřen ochrannou vrstvou a průřez krystalizátoru určuje odlévaný formát předlitku [5]. Z důvodu tepelné smrštivosti oceli je krystalizátor konstruován jako osově se zužující<sup>8</sup>, čímž se předchází vzniku mezer mezi krystalizátorem a předlitkem, které způsobují výrazný nežádoucí pokles odvodu tepla z předlitku [66]. Schéma trubkového krystalizátoru

<sup>3</sup>stínící trubice, obvykle vyrobená z keramických žáruvzdorných materiálů (zejména oxidy křemíku, hořčíku a hliníku), zabraňuje reoxidaci a znehodnocení taveniny při její dopravě z pánve do mezipánve

<sup>4</sup>mezipánev je zároveň zásobníkem taveniny pro ZPO v okamžiku výměny pánví; v případě víceproudeho ZPO obsahuje licí stroj pouze jednu pánev, která zásobuje taveninou všechny proudy, čímž je dosaženo vyšší homogenity odlévané oceli

<sup>5</sup>podobně jako stínící trubice zabraňuje reoxidaci oceli a umožňuje ponorné lití roztavené oceli do krystalizátoru

<sup>6</sup>v závislosti na typu ZPO a odlévaného formátu se jedná o 10 až 30 % celkového tepla, které je z předlitku na ZPO odvedeno

<sup>7</sup>tato závažná porucha při provozu ZPO se nazývá *průval* [11]

<sup>8</sup>úkos krystalizátoru se podle typu odlévaného formátu obvykle pohybuje od 0,5 do 1,5 % [5]

pro sochorové ZPO je zobrazeno na Obrázku 1.5. Během provozu ZPO vykonává krystalizátor kmitavý oscilační pohyb<sup>9</sup> ve směru lití, který zabraňuje ulpívání předlitku na stěnách krystalizátoru, rozrušování povrchu předlitku a vzniklé kúry a počáteční tvorbě vad [5, 11, 86]. Pro snížení tření mezi krystalizátorem a pohybujícím se předlitkem se během odlévání do krystalizátoru přidává tzv. licí prášek<sup>10</sup>, který kromě snížení tření vytváří po natavení v krystalizátoru na hladině taveniny, tzv. menisku, vrstvu, která brání reoxidaci oceli, pohlcuje vměstky a tepelně izoluje meniskus a taveninu od okolního prostředí [5, 48, 12].

**Sekundární chladicí zóna s vodícím systémem** je umístěna pod krystalizátorem a je tvořena chladícími vodními nebo vodovzdušnými tryskami a vodícím systémem válců [5]. Chladící trysky jsou v sekundární zóně uspořádány do chladících okruhů, pro které jsou nastavovány jednotlivé parametry, např. tlak vody a průtočné množství vody v okruhu. Předlitek vstupuje do sekundární chladicí zóny s vytvořenou pevnou kúrou na svém povrchu, ale v jeho jádře je ocel stále v tekutém stavu. Hlavním cílem chladících trysek je atomizace proudu vody na kapky, které dopadají na povrch předlitku a způsobují jeho postupné a rovnoměrné ochlazování v celém průřezu předlitku tak, aby na výstupu ZPO byl předlitek v celém průřezu již tuhém stavu vhodném k dělení na požadovanou délku [11, 17, 5]. Chladící trysky lze podle chladicího média rozdělit na *vodní* a *vodovzdušné*. Vodící válce slouží k vedení předlitku sekundární zónou dle jejího tvaru a zabraňují deformacím předlitku vlivem ferostatického tlaku kapalné fáze v jádře předlitku. Chladící trysky jsou obvykle umístěny mezi vodícími válci, případně se jich využívá i pro chlazení samotných vodících válců [5]. Podle tvaru plochy ostříkované tryskou lze trysky rozdělit na *kuželové* (ostříkovaná plocha má tvar kruhu) a *ploché* (ostříkovaná plocha má tvar elipsy nebo obdélníku) [66, 17]. Způsob chlazení v sekundární zóně, který významně ovlivňuje kvalitu předlitku a tvorbu povrchových i vnitřních vad [13, 11, 17], je možné regulovat např. použitými typy trysek, umístěním trysek, tlakem a průtočným množstvím chladicí vody a tato nastavení je možné dále optimalizovat.

**Terciální chladicí zóna s vodícím systémem** je umístěna za sekundární chladicí zónou a ochlazování předlitku zde probíhá převážně radiací a v menší míře také přirozenou konvekcí do okolního vzduchu [5]. Terciální chladicí zóna je vybavena systémem vodících válců podobně jako sekundární chladicí zóna.

**Tažné stolice a rovníací zařízení** jsou dle celkového uspořádání ZPO často součástí sekundární nebo terciální chladicí zóny [11]. Tažná stolice je zařízení skládající se ze systému válců, které jsou poháněny nejčastěji elektromotorem a způsobují nucený pohyb předlitku licím strojem. V závislosti na typu ZPO a odlévaném formátu může být umístěno několik tažných stolic za sebou. Součástí radiálního ZPO je také rovníací zařízení, jehož umístění na ZPO se označuje jako místo rovnání [5, 11]. Rovníací zařízení je tvořeno systémem válců, který silovým působením vyvolává v předlitku plastické deformace a vyrovnává předlitek opouštějící obloukovou část ZPO do přímého tvaru.

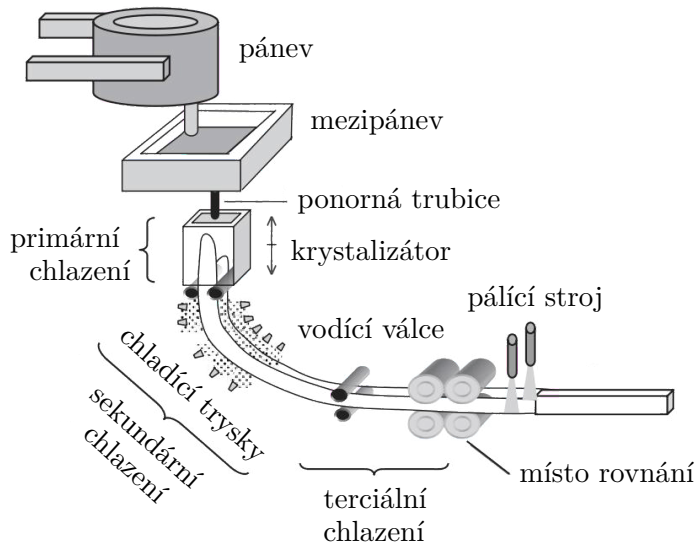
**Dělicí zařízení** je umístěno na výstupu ZPO a slouží k dělení předlitku na požadovanou délku. V současné době je pro dělení nejčastěji používán kyslíkovo-acetylenový pálicí stroj, v minulosti se pro menší odlévané formáty používalo i mechanických nůžek, které však způsobovány nežadoucí deformace předlitku [5].

Důležitými částmi ZPO jsou rovněž systém pro chladnutí a přepravu odlitých předlitků k dalšímu zpracování nebo uskladnění, systém pánvového hospodářství s tavícím agregátem

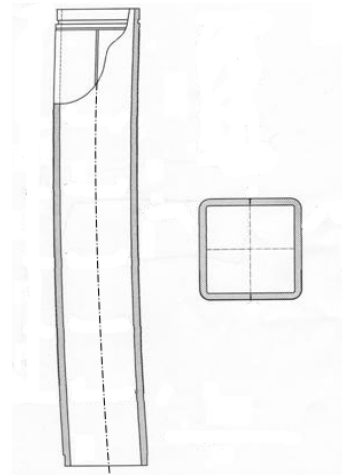
<sup>9</sup>nejčastěji se využívá sinusoidní kmitání krystalizátoru s tzv. negativním stripem [61], kdy se krystalizátor ve směru lití předlitku pohybuje přibližně třikrát rychleji než při vratném protipohybu; frekvence kmitání krystalizátoru se obvykle pohybuje v jednotkách Hz; projevem kmitavého pohybu jsou na povrchu předlitku mělké příčné nerovnosti, tzv. oscilační vrásky [5]

<sup>10</sup>obvykle se jedná o jemnozrnnou směs oxidů křemíku, hliníku, manganu a vápníku s tavidlem

(pecí, konvertorem) a systém vodního hospodářství (nádrže, čerpadla apod.) zajišťující distribuci chladicí vody do celého lícího stroje [5, 11]. Pro zlepšení homogenity odlévaných předlitků bývá ZPO pod krystalizátorem vybaveno elektromagnetickým míchacím zařízením, které na principu elektromagnetické indukce vytváří v předlitku silové pole umožňující promíchávání taveniny v jádře předlitku [86, 20]. Schématický náčrt sochorového radiálního ZPO je na Obrázku 1.4.



Obrázek 1.4: Schéma radiálního sochorového ZPO [63]



Obrázek 1.5: Trubkový krystalizátor sochorového ZPO čtvercového formátu [78]

## 1.5 Parametry charakterizující provoz ZPO

**Licí rychlost** je rychlost, kterou opouští předlitek krystalizátor. Licí rychlost, která je přímo spjata s produktivitou zařízení pro plynulé odlévání, je především závislá na formátu a rozměru odlévaného předlitku, značce odlévané oceli, přehřátí oceli a tloušťce a pevnosti ztuhlé kůry na povrchu předlitku na výstupu z krystalizátoru [5]. Licí rychlost musí být volena i v závislosti na metalurgické délce tak, aby na výstupu předlitku ze zařízení pro plynulé odlévání, kde dochází k dělení předlitku na požadovanou délku byla ocel v tuhém stavu v celém průřezu předlitku [11]. Obecně platí, že bramové předlitky jsou odlévány pomaleji než předlitky sochorové nebo blokové z důvodu jejich větší náchylnosti ke vzniku trhlin na povrchu předlitku [5].

**Metalurgická délka** je definována jako maximální osová vzdálenost menisku a kapalně odlévaného předlitku [5, 11]. Metalurgická délka tedy určuje nejkratší vzdálenost od menisku, ve které je již veškerá ocel v tuhém stavu. Z technologického pohledu je metalurgická délka omezena místem rovnání předlitku a místem, kde dochází k dělení předlitku na požadovanou délku, tj. umístěním pálicího stroje.

**Licí formát** určuje výsledný tvar odlévaného předlitku. Podle lícího formátu rozlišujeme zařízení pro plynulé odlévání na (a) bramová, (b) sochorová a (c) bloková, viz část 1.3.1.

**Přehřátí a licí teplota** charakterizují stav oceli v mezipánvi, ze které je tavenina přiváděna do krystalizátoru. Přehřátím se nazývá rozdíl teploty oceli v mezipánvi a teploty tání, tzv. teploty likvidu, dané značky oceli [11, 5]. Z důvodu vyšších nároků na odvod tepla krystalizátorem a obtížnější inicializaci krystalizace taveniny na tuhou fázi je snahou minimalizace přehřátí, které obvykle činí řádově desítky °C [5]. Licí teplotou se rozumí teplota taveniny, která je přiváděna do krystalizátoru.

**Ocel, tavba a sekvence** jsou základní charakteristiky odlévaného materiálu. Ocel je charakterizována především chemickým složením, zejména obsahem uhlíku. Tavbu tvoří tavenina jedné pánve a skupina na sebe navazujících taveb se nazývá sekvence.

## 1.6 Vady předlitků při plynulém odlévání oceli

Záměrem použití optimalizace a matematických modelů solifikace plynule litých předlitků je kromě optimálního řízení výroby na ZPO také zmenšení výskytu vad předlitku a jejich důsledků. Vady předlitků významným způsobem ovlivňují jakost výrobků (např. plechů nebo trubek), které se z plynule litých předlitků vyrábějí. Jakost výrobků je i jedním z hlavních parametrů zákazníka.

Vady plynule litých předlitků mohou být způsobeny mnoha faktory, např. chemickým složením oceli, nastavením licího stroje, provozními podmínkami a podobně [13, 11]. V dalším se zaměříme především na faktory v souvislosti s nastavením licího stroje, protože tato nastavení je možné pomoci numerických modelů teplotního pole předlitku řídit a optimalizovat.

Vady předlitků vyráběných plynulým odléváním lze rozdělit do tří skupin na povrchové, vnitřní a vady tvaru [11].

**Povrchové vady** vznikají na povrchu předlitku nebo těsně pod jeho povrchem [11, 13], např.

- *podélné trhliny*: způsobené vysokými licími teplotami, vysokou licí rychlostí, následkem vysokého opotřebení nebo poškození stěn krystalizátoru, nízkou jakostí licího prášku, nevhodnou kónicitou krystalizátoru, chybným nastavením intenzity chlazení krystalizátoru a sekundární zóny,
- *příčné trhliny*: způsobené nesouladem licí rychlosti a teploty stěn krystalizátoru, chybně seřízenou rovníčnicí, chybným nastavením intenzity chlazení sekundární zóny; vznik příčných trhlin podporují oscilační vrásky, které vznikají v krystalizátoru vlivem jeho kmitavého pohybu,
- *výronek* (průnik taveniny trhlinou na povrch předlitku): nevhodná intenzita chlazení v krystalizátoru a sekundární zóně; při protržení kůry taveninou dochází k tzv. průvalu,
- *přeplátování*: vytahování ztuhlé oceli povrchem krystalizátoru,
- *broky* (rozstřík): zoxidované částičky oceli na povrchu předlitku,
- *podpovrchové bubliny*: dutiny pod povrchem předlitku,
- *bodliny*: malé dutiny vyskytující se ve shlucích pod povrchem předlitku.

**Vnitřní vady** vznikají uvnitř předlitku vlivem tepelného a mechanického napětí způsobeného fázovými změnami [11]. Vnitřní vady tedy nepronikají na povrch předlitku a proto jsou obtížně detekovatelné. Většina vnitřních vad se tvoří v teplotním intervalu tzv. *lámavosti za tepla*, který ve vyskytuje těsně pod teplotou solidu. K výraznějšímu výskytu vnitřních vad dochází u feritických ocelí než u austenitických. Tvorbu vnitřních vad je možné výrazně redukovat použitím zařízení elektromagnetického míchaní. Vnitřní vady jsou nejčastěji způsobeny nerovnoměrnou intenzitou ochlazování předlitku na ZPO a nevhodně zvolenou licí rychlostí [11]. Mezi nejčastější povrchové vady patří

- *podpovrchové, hvězdicové a diagonální trhliny*,
- *středová porozita*: dutiny v ose předlitku,
- *středová segregace*: vylučování příměsí v oceli, nejčastěji síry,
- *vměstky*: malé částičky příměsí (např. sulfidu manganatého nebo oxidu hlinitého či křemičitého) v oceli.

**Vady tvaru** jsou spjaty s porušením pravidelného tvaru předlitku, které znesnadňují jeho další tváření a způsobují vznik nadbytečného odpadu při dalším zpracování. Hlavními příčinami tvarových vad jsou velký ferostatický tlak, vysoká licí rychlost, chybné nastavení intenzity chlazení licího stroje a nesouosost vodících válců [11]. Nejčastějšími vadami tvaru jsou

- *deformace do tvaru kosodélníku*,
- *deformace do tvaru oválu*,
- *vyboulení, vydutí*.

# Matematický model teplotního pole plynule odlévaného předlitku

V současné době vedou požadavky na zvyšování kvality, snižování nákladů a zlepšení efektivity a konkurenceschopnosti k nutnosti optimálního řízení zařízení pro plynulé odlévání. Toho není možné dosáhnout bez implementace numerických modelů pro řešení teplotních polí odlévaných předlitků, protože není možné zkoumat a ověřovat nastavení lícího stoje a jeho vlivů experimentálně přímo během výroby při provozu ZPO. Numerické modely teplotního pole jsou tedy následně využity metodami optimálního řízení a optimalizačními algoritmy pro stanovení optimálních parametrů ZPO při daném stavu zařízení a dalších okolností.

Problematikou implementace numerických modelů teplotního pole a jejich použití v problematice plynulého odlévání oceli se zabývala řada autorů, viz např. [45, 18, 67, 19, 80] (modely solifikace a teplotního pole pro plynule odlévané předlitky), [9] (implementace automatického chladicího systému sekundární zóny sochorového ZPO), [53] (model chladicího systému plynulého odlévání), [63] (matematické modelování a optimalizace provozu ZPO genetickým algoritmem), [10] (numerická analýza sekundárního chlazení ZPO), [7] (numerická analýza tepelných procesů v krystalizátoru).

## 2.1 Model teplotního pole s fázovými změnami

Z fyzikálního hlediska se při plynulém odlévání a jeho numerickém modelování jedná o problematiku přenosu tepla a látky v nestacionárním režimu, ve kterém se uplatňuje především mechanismus kondukce [80, 24, 6]. Ostatní mechanismy vedení tepla, tedy konvektivní a radiální přenos, pak hrají roli především v okrajových podmínkách úlohy [53, 24]. Do numerického modelu je navíc nutné zahrnout i vliv fázových změn, ke kterým při ochlazování oceli dochází. Mezi fázové změny patří změny skupenství, tj. přechod z kapalně fáze do pevné, a změny struktury v pevném stavu<sup>1</sup>. Důsledkem těchto fázových změn stavu materiálu je vývin latentního tepla, které významně ovlivňuje celý proces solidifikace odlévaného předlitku [69].

Při plynulém odlévání oceli je výchozím stavem tavenina, tj. kapalná fáze. Snížením teploty na teplotu tuhnutí, tzv. teplotu likvidu, dochází ke vzniku pevné fáze – v tavenině začínají vznikat krystaly kovu. Mezi teplotou likvidu a teplotou tání, tzv. teplotou solidu, koexistují obě fáze současně. Odchlazením kovu pod teplotu solidu je systém tvořen pouze pevnou fází [69].

<sup>1</sup>např. změna modifikace železa, peritektická přeměna, eutektoidní přeměna atp.



Licí stroj je obvykle konstruován tak, že teplotní pole předlitku je možné považovat za symetrické vzhledem k podélné rovině procházející osou předlitku, viz Obrázek 2.1. Z tohoto důvodu je postačující se zabývat symetrickou polovinou odlévaného předlitku s vhodně ošetřenou okrajovou podmínkou v rovině symetrie, viz níže oddíl 2.2.

Pro matematické modelování teplotního pole<sup>2</sup> materiálu s fázovou přeměnou existuje několik metod. Mezi nejrozšířenější<sup>3</sup> patří metody entalpie a efektivní tepelné kapacity [69].

### 2.1.1 Metoda entalpie

Tato metoda je založena na použití termodynamické funkce objemové entalpie  $H$ , která umožňuje zahrnout vývin latentního tepla skupenských a strukturálních změn. Objemová entalpie je definována vztahem [69, 70]

$$H(T) = \rho L_f(1 - f_s) + \int_{T_{\text{ref}}}^T \rho c d\theta, \quad (2.1)$$

kde  $\rho$  je hustota,  $L_f$  je latentní teplo fázové přeměny,  $f_s$  je zlomek podílu tuhé fáze<sup>4</sup> a  $T_{\text{ref}}$  je zvolená referenční teplota. Dle vztahu (2.1) je objemová entalpie funkce rostoucí s teplotou. Sklon funkce entalpie, tj. směrnice tečny  $\frac{\partial H}{\partial T}$  ke grafu entalpie, je výrazně větší v teplotních rozmezích změn skupenství a struktury než vně těchto teplotních intervalů, viz Obrázek 2.6. Tento prudký růst entalpie je spjatý s vývinem latentního tepla fázových změn.

Zavedením objemové entalpie do rovnice vedení tepla a přidáním členu  $v_z \frac{\partial H}{\partial z}$  zohledňující pohyb předlitku v licím stroji lze odvodit<sup>5</sup> Fourierovu-Kirchhoffovu rovnici [71, 80, 69], která popisuje teplotní pole odlévaného předlitku v kartézských souřadnicích:

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + v_z \frac{\partial H}{\partial z}, \quad (2.6)$$

kde  $T(x, y, z, t)$  je teplota v bodě  $(x, y, z)$  a čase  $t$ ,  $H(x, y, z, t)$  představuje entalpii v bodě  $(x, y, z)$  a čase  $t$ ,  $k$  je tepelná vodivost a  $v_z$  je licí rychlost ve směru lití<sup>6</sup>, tj. osy  $z$ .

<sup>2</sup>tj. teploty jako funkce času a prostorových proměnných, tj.  $T = f(x, y, z, t)$

<sup>3</sup>dalšími metodami jsou např. metoda front tracking (viz např. [36, 28]), nebo metoda zotavující se teploty (temperature recovery method, viz např. [73])

<sup>4</sup>tzv. solid fraction

<sup>5</sup>odvození Fourierovy-Kirchhoffovy rovnice vychází z rovnice nestacionárního vedení tepla

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + \dot{q}_{\text{gen}}, \quad (2.2)$$

kde  $c$  je měrná tepelná kapacita a  $\dot{q}_{\text{gen}}$  je vnitřní zdroj tepla. Zdrojem tepla při ochlazování předlitku je fázová přeměna doprovázená v případě ochlazování uvolněním latentního tepla. Protože v případě oceli je množství latentního tepla fázové přeměny konstantní a zlomek podílu tuhé fáze  $f_s$  je pouze funkcí teploty [70], pak platí

$$\dot{q}_{\text{gen}} = \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (2.3)$$

kde  $L_f$  je latentní teplo fázové přeměny. Úpravou výchozí rovnice (2.2) platí

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \dot{q}_{\text{gen}} = \rho c \frac{\partial T}{\partial t} - \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = \left( \rho c - \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial T} \right) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.4)$$

a zdiferencováním definičního vztahu (2.1) dostáváme

$$\frac{\partial H}{\partial T} = -\rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial T} + \rho c. \quad (2.5)$$

Substitucí vztahu (2.5) do rovnice (2.2) a přidáním členu  $v_z \frac{\partial H}{\partial z}$  zohledňujícího pohyb taveniny v předlitku získáváme Fourierovu-Kirchhoffovu rovnici (2.6).

<sup>6</sup>pohyb taveniny ve směrech souřadných os  $x$  a  $y$ , které jsou kolmé na směr lití ve směru osy  $z$ , lze zanedbat a tedy  $v_x = v_y = 0$

V případě radiálního ZPO je vhodné Fourierovu-Kirchhoffovu rovnici (2.6) pro obloukovou část transformovat zavedením cylindrických souřadnic<sup>7</sup>  $(r, \phi, \omega)$  na tvar

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left( k \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial}{\partial \omega} \left( k \frac{\partial T}{\partial \omega} \right) + v_\phi \frac{1}{r} \frac{\partial H}{\partial \phi}. \quad (2.7)$$

### 2.1.2 Metoda efektivní tepelné kapacity

Principem metody efektivní tepelné kapacity je zahrnutí latentního tepla fázových přeměn do měrné tepelné kapacity materiálu, která se nazývá efektivní tepelná kapacita [69] a lze ji definovat pomocí entalpie jako

$$c_{\text{eff}} = \frac{\partial H}{\partial T} = -\rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial T} + \rho c. \quad (2.8)$$

Substitucí definičního vztahu efektivní kapacity do rovnice (2.4) a přidáním členu  $v_z c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial z}$  zohledňující pohyb předlitku licím strojem získáváme rovnici

$$c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) + v_z c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial z}, \quad (2.9)$$

která popisuje tepelné chování předlitku v kartézských souřadnicích. Transformací rovnice (2.7) do cylindrických souřadnic pro popis obloukové části předlitku lze odvodit

$$c_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial \phi} \left( k \frac{\partial T}{\partial \phi} \right) + \frac{\partial}{\partial \omega} \left( k \frac{\partial T}{\partial \omega} \right) + v_\phi c_{\text{eff}} \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \phi}. \quad (2.10)$$

## 2.2 Počáteční a okrajové podmínky matematického modelu teplotního pole

Protože je rovnice (2.6), resp. (2.7), popisující nestacionární tepelné chování předlitku parciální diferenciální rovnicí druhého řádu, je nutné ke korektní formulaci matematického modelu doplnit rovnici (2.6), resp. (2.7), počáteční a okrajovými podmínkami [14, 24, 6, 33].

Jak již bylo zmíněno v úvodu této kapitoly, za hlavní mechanismus přenosu tepla uvnitř odlévaného předlitku je považována kondukce (vedení) a přenos hmoty je zanedbáván. Ostatní mechanismy přenosu tepla – konvekce (přenos tepla proudící tekutinou) a radiace (záření) hrají důležitou roli v okrajových podmínkách úlohy [80, 53, 24].

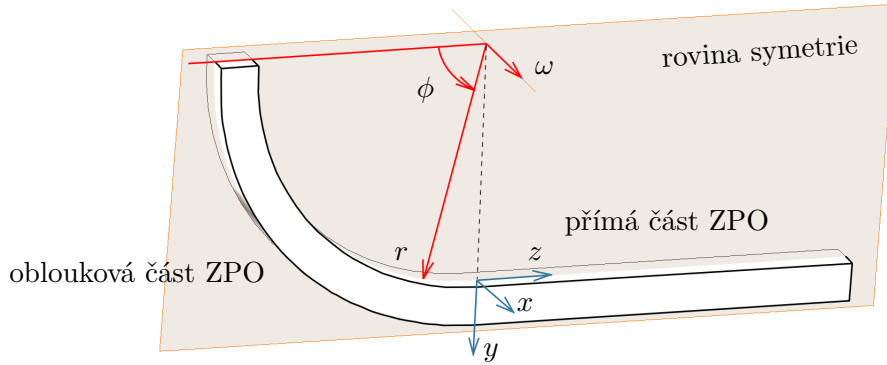
**Poznámka k označení souřadnic.** Z důvodu použití kartézského a cylindrického souřadného systému v popisu matematického modelu bude v této části textu věnované počáteční a okrajovým podmínkám pro přehledný zápis souřadnic souřadného systému používán vektor  $\mathbf{x}$ . V přímé části ZPO, která využívá kartézský souřadný systém (viz Obrázek 2.1), pak platí, že složky vektoru  $\mathbf{x}$  jsou kartézské souřadnice:  $\mathbf{x} = (x, y, z)^T$ . V obloukové části ZPO popisované cylindrickým souřadným systémem (viz Obrázek 2.1) jsou pak složky vektoru  $\mathbf{x}$  cylindrické souřadnice, tj.  $\mathbf{x} = (r, \phi, \omega)^T$ .

**Počáteční podmínka.** Protože matematický model teplotního pole odlévaného předlitku popisuje nestacionární děj v čase, je nutné pomocí počáteční podmínky [14, 24]

$$T(\mathbf{x}, t = 0) = T_0(\mathbf{x}) \quad (2.11)$$

definovat stav předlitku, tj. teplotu v každém jeho bodě  $T(\mathbf{x}, 0)$ , v počátečním okamžiku  $t = 0$ , kdy začínáme proces odlévání a solidifikace předlitku sledovat.

<sup>7</sup>mezi kartézskými a cylindrickými souřadnicemi platí vztahy  $x = r \cos \phi$ ,  $y = r \sin \phi$ ,  $z = \omega$ , detaily transformace Fourierovy-Kirchhoffovy rovnice do cylindrických souřadnic viz [24, kapitola 2]



**Obrázek 2.1:** Kartézský a cylindrický souřadný systém na radiálním ZPO

**Okrajové podmínky.** Pro popis tepelné interakce odlévaného předlitku s okolím se používají okrajové podmínky, které lze kategorizovat do pěti základních skupin dle veličiny a mechanismu přenosu tepla, které se v nich uplatňují [14, 6, 40].

- Okrajovou podmínkou *I. druhu*, rovněž nazývanou podmínkou *Dirichletovou* [14, 6], je předepsána teplota na povrchu tělesa ve tvaru  $T(\mathbf{x}, t)|_{\text{povrch}} = f(\mathbf{x}, t)$ . Tento typ podmínky se v matematickém modelu uplatňuje v okrajové podmínce (2.12) předepisující teplotu na menisku, která je rovna lici teplotě  $T_\ell$ ,

$$T(\mathbf{x}, t)|_{\text{meniskus}} = T_\ell. \quad (2.12)$$

- Okrajová podmínka *II. druhu*, která je často nazývána podmínkou *Neumannovou* [14, 24], určuje měrný tepelný tok  $\dot{q}$  na povrchu tělesa. Podle Fourierova zákona lze tuto podmínku formulovat jako  $-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \dot{q}(\mathbf{x}, t)$ . Speciálním případem je pak tepelně izolovaný povrch, kdy  $\dot{q} = 0$ . Neumannova okrajová podmínka se v modelu vyskytuje v podmínce (2.13) popisující odvod tepla z krystalizátoru

$$-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \dot{q}(\mathbf{x}, t) \quad (2.13)$$

a v podmínce (2.14), která je použita v rovině symetrie předlitku (viz oddíl 2.1 a Obrázek 2.1) a v místě dělení předlitku na výstupní části ZPO (viz dělicí zařízení, oddíl 1.4 a Obrázek 1.4),

$$-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = 0. \quad (2.14)$$

- Okrajová podmínka *III. druhu*, nazývaná také podmínkou *Newtonovou* nebo *Robinovou* [14, 6], popisuje přenos tepla *konvekcí* na rozhraní povrchu tělesa a pohybující se tekutiny podle vztahu  $-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h(T - T_\infty)$ .

Podle původu pohybu tekutiny podél povrchu rozlišujeme konvekci *přirozenou* (volnou), kdy je pohyb tekutiny způsoben gravitačním polem a současným gradientem hustoty v tekutině, a konvekci *nucenou*, při které je pohyb tekutiny vyvoláván vnější silou [24]. V okrajových podmínkách modelu teplotního pole předlitku se vyskytují oba typy konvekce: nucená konvekce pod chladícími tryskami v sekundární zóně a volná konvekce mezi tryskami a vodícími válci v sekundární a terciální chladící zóně. Kvantitativně se uvedené dva typy konvekce odlišují především velikostí koeficientu přestupu tepla  $h$ : u přirozené konvekce se  $h$  pohybuje v řádu desítek  $\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}$ , zatímco u nucené konvekce běžně dosahuje hodnot v řádu tisíců  $\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}$  [6].

Do podmínky *III. druhu* se obvykle zahrnuje i přenos tepla z předlitku *radiací* (zářením, sáláním), který je na základě Stefanova-Boltzmannova zákona [24] kvantitativně popsán

vztahem  $-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \sigma \varepsilon (T^4 - T_\infty^4)$ , kde  $\sigma$  je Stefanova-Boltzmannova konstanta a  $\varepsilon$  je emisivita povrchu. Okrajovou podmínku v sekundární a terciální chladicí zóně lze tedy souhrně zapsat jako kombinaci konvektivního a radiálního mechanismu přenosu tepla,

$$-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h (T - T_\infty) + \sigma \varepsilon (T^4 - T_\infty^4). \quad (2.15)$$

Radiační složku  $\sigma \varepsilon (T^4 - T_\infty^4)$  je možné také vyjádřit<sup>8</sup> pomocí redukovaného koeficientu přestupu tepla [80]

$$h_{\text{red}} = \sigma \varepsilon (T + T_\infty) (T^2 + T_\infty^2) \quad (2.16)$$

a okrajová podmínka (2.15) tedy přejde do tvaru

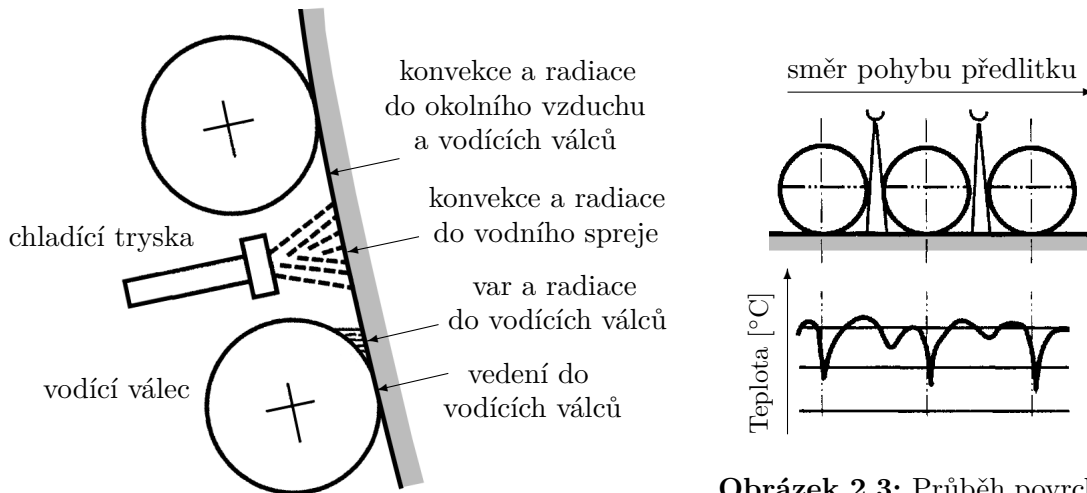
$$-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = (h + h_{\text{red}}) (T - T_\infty). \quad (2.17)$$

Schématické znázornění mechanismů přenosu tepla v sekundární zóně ZPO je uvedeno na Obrázku 2.2. Obrázek 2.3 schématicky ilustruje průběh povrchové teploty v sekundární zóně v závislosti na poloze vzhledem k chladícím tryskám a vodícím válcům.

Koeficient přestupu tepla přirozené konvekce v místě povrchu, který není chlazen tryskou ani kontaktem s vodícím válcem, lze stanovit např. podle empirického vztahu [21]

$$h = 0,84 (T_{\text{povrch}} - T_\infty)^{\frac{1}{3}}. \quad (2.18)$$

V místě kontaktu vodících válců se pro kvantifikaci přenosu tepla z povrchu obvykle používá předepsání odváděného tepelné toku do válce okrajovou podmínkou II. druhu (viz vztah (2.13)). Jinou možností je v místě dotyku válce s předlitem uvažovat fiktivní přenos tepla konvekcí podle vztahu  $-k \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = h_{\text{válec}} (T - T_\infty)$  a koeficient přestupu tepla  $h_{\text{válec}}$  se poté určí empirickým vztahem, např. viz [89, 53].



**Obrázek 2.2:** Mechanismy přenosu tepla v sekundární zóně [17]

**Obrázek 2.3:** Průběh povrchové teploty v sekundární zóně [17]

- Podmínka *IV. druhu* se používá pro popis přenosu tepla na rozhraní styku dvou těles  $A$  a  $B$  [40]. Podle průběhu teploty na rozhraní lze rozdělit styk těles na (a) *dokonalý*, při kterém je teplota v místě styku spojitou veličinou, platí  $-k_A \frac{\partial T_A}{\partial \mathbf{n}_A} = -k_B \frac{\partial T_B}{\partial \mathbf{n}_B}$  a tedy v místě styku  $T_A = T_B$ , a (b) *nedokonalý*, při kterém je teplota v místě styku nespojitá z důvodu teplotního propadu způsobeného tepelným odporem rozhraní styku těles  $A$  a  $B$ . Okrajová podmínka *IV. druhu* se v modelu teplotního pole odlévaného předlitku přímo neuplatňuje.

<sup>8</sup>s využitím algebraického rozkladu  $(T^4 - T_\infty^4) = (T^2 - T_\infty^2)(T^2 + T_\infty^2) = (T - T_\infty)(T + T_\infty)(T^2 + T_\infty^2)$

- Podmínkou *V. druhu* lze popsat fázovou přeměnu látky, např. změnu skupenství tuhnutím [40, 69]. Na rozhraní fází *A* a *B* pak platí  $-k_A \frac{\partial T_A}{\partial \mathbf{n}_A} = -k_B \frac{\partial T_B}{\partial \mathbf{n}_B} + \rho_B L_f \frac{\partial f_B}{\partial t}$ , kde  $f_B$  je fázový zlomek podílu fáze *B*. Okrajová podmínka *V. druhu* se v modelu teplotního pole přímo neuplatňuje, fázová přeměna a vývin latentního tepla jsou modelovány pomocí metod popsaných v oddílu 2.1.

### 2.2.1 Stanovení koeficientu přestupu tepla pod chladícími tryskami

Odvod tepla z předlitku v sekundární zóně chlazení je komplexní fyzikální jev (přenos tepla a látky, tvorba parních vrstev apod., viz např. [3, 83]), který je obtížně matematicky popsitelný. Pod chladícími tryskami je odvod tepla kvantitativně vyjádřen koeficientem přestupu tepla  $h$ , který je obecně závislý na mnoha parametrech, např. množství chladícího média dopadajícího na povrch, tlaku chladiva v trysce, velikosti, rychlosti a úhlu dopadajících vodních kapek, chemickém složení oceli, kvalitě povrchu, povrchové teplotě předlitku v souvislosti s Leidenfrostovým jevem apod., viz např. [66, 72]. Příklad rozložení koeficientu pod chladící tryskou je na Obrázku 2.4.

Pro určení koeficientu přestupu se obvykle používají *empirické vztahy* nebo *experimentální měření*. Příkladem empirického vztahu je [90]

$$h = 992,9(1 - 7,5 \cdot 10^{-3}T_w) \cdot I^{0,451} \quad (2.19)$$

nebo vztah [72]

$$h = 2,6612 \cdot 10^5 \frac{I^{0,616}}{T_{\text{povrch}}^{2,445}}, \quad (2.20)$$

kde  $I$  je měrné množství dopadající vody na povrch předlitku,  $T_w$  je teplota chladící vody a  $T_{\text{povrch}}$  je teplota povrchu. Jak je ze vztahů (2.19) a (2.20) patrné, koeficient přestupu tepla stanovený empirickými vztahy zohledňuje pouze některé z výše jmenovaných faktorů, které hodnotu koeficientu přestupu tepla ovlivňují. Z tohoto důvodu se pro přesnější stanovení koeficientu přestupu tepla pod chladícími tryskami používá experimentálních měření. Příkladem experimentální metodiky je tzv. teplý model [23, 58, 59], viz Obrázek 2.5, který je kombinací měření teplot termočlánky v tryskou ochlazované ocelové desce a následného numerického řešení inverzní úlohy přenosu tepla. Dalším možným přístupem je pak statistické zpracování experimentálně naměřených dat a použití např. split-normálního nesymetrického rozdělení (viz oddíl 4.1.1, Obrázek 4.2 a [75]) pro stanovení koeficientu přestupu tepla v rozsahu provozních podmínek, pro které byly provedeny experimenty.

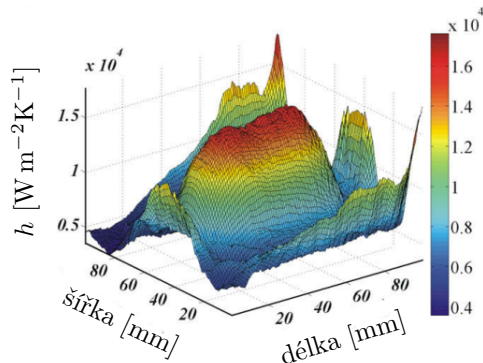
Split-normální rozdělení, na které lze pohlížet jako na nesymetrické Gaussovo normální rozdělení s vlastnostmi hustoty pravděpodobnosti (zejména hladkost), je definováno [75] jako

$$f(\mathbf{x}) = \begin{cases} c \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} s (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\} & \text{pro } \mathbf{v}^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \leq 0 \\ c \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} s (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\} & \text{pro } \mathbf{v}^T (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) > 0, \end{cases} \quad (2.21)$$

kde  $c$ ,  $s$ ,  $\boldsymbol{\mu}$ ,  $\boldsymbol{\Sigma}$  a  $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$  jsou parametry určující tvar, velikost a polohu hustoty split-normálního rozdělení a  $\mathbf{v}$  je vlastní vektor matice  $\boldsymbol{\Sigma}$ . Ilustrační příklad použití vztahu (2.21) viz Obrázek 4.2.

## 2.3 Geometrické a fyzikální podmínky matematického modelu teplotního pole

Kromě rovnice popisující vlastní děj vedení tepla v předlitku doplněné o počáteční a okrajové podmínky je nutné matematický model teplotního pole odlévaného předlitku dále rozšířit o podmínky geometrické a fyzikální. Souhrně se podmínky počáteční, okrajové, geometrické a fyzikální nazývají podmínkami *jednoznačnosti* úlohy [40].



**Obrázek 2.4:** Koefficient přestupu tepla pod chladicí tryskou [76]



**Obrázek 2.5:** Teplý model provozovaný v LPTaP na FSI VUT v Brně [32]

1. *Geometrické podmínky* modelu slouží k definici tvaru uvažovaného tělesa, jeho konkrétních rozměrů a rovněž např. k definici povrchů tělesa pro popis okrajových podmínek [40]. V případě teplotního modelu předlitku jsou geometrickými podmínkami např. odlévaný formát a jeho rozměry, poloměr a délka lícího oblouku v případě radiálního ZPO, délka a umístění krystalizátoru, délka sekundární a terciální chladicí zóny, umístění chladicích trysek a vodících válců apod.
2. *Fyzikální podmínky* slouží ke specifikaci fyzikálních, případně termofyzikálních vlastností uvažovaného tělesa [40]. V případě odlévaného ocelového předlitku (viz vztahy (2.6), (2.9), (2.1), (2.8)) se jedná např. o teplotní závislost tepelné vodivosti, měrné tepelné kapacity, hustoty a entalpie oceli.

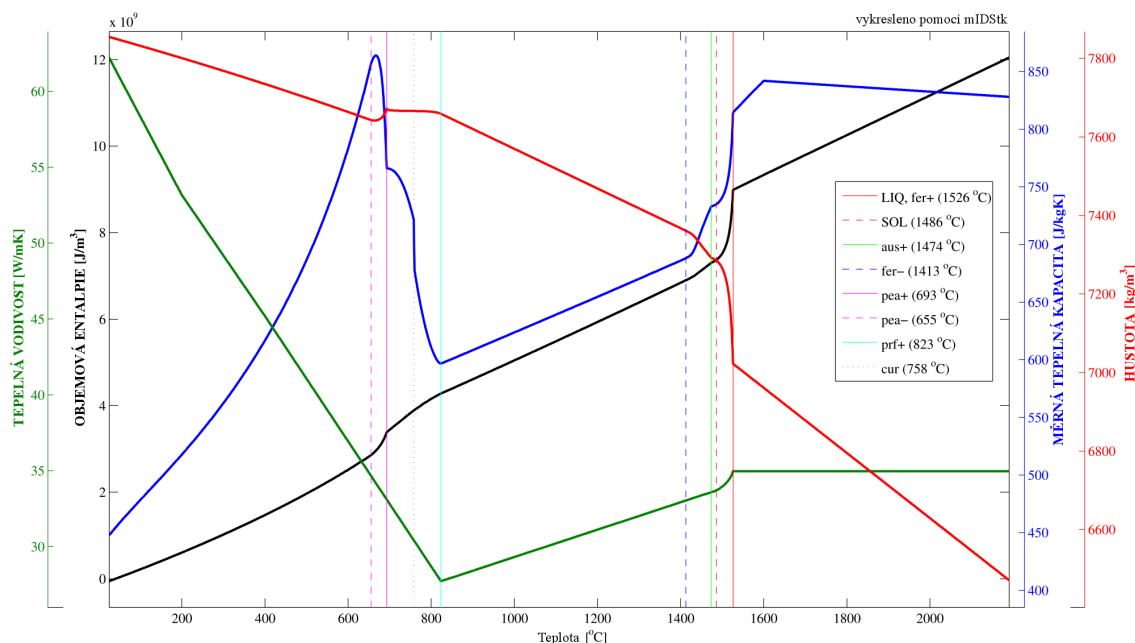
Zmíněné termofyzikální vlastnosti jsou v případě oceli závislé kromě teploty také na konkrétním chemickém složení [79]. Proto je nutné tyto materiálové charakteristiky stanovovat pro každou značku oceli zvlášť podle konkrétního chemického složení. Nesprávně určené termofyzikální vlastnosti mohou být příčinou chybné predikce teplotního pole, která může vést dokonce ke ztrátě kvality oceli a tvorbě povrchových vad [13, 79, 11]. Termofyzikální veličiny je možné stanovit experimentálně (pro velké množství odlévaných značek oceli drahé a časově náročné) nebo pomocí numerických solidifikačních modelů, např. IDS [46, 47]. Ukázka termofyzikálních veličin pro ocel značky S235JRH stanovené solidifikačním modelem IDS je na Obrázku 2.6.

## 2.4 Metody řešení matematického modelu teplotního pole

Fourierovy-Kirchhoffovy rovnice (2.6) a (2.7), resp. (2.9) a (2.10), doplněné o podmínky jednoznačnosti (počáteční, okrajové, geometrické a fyzikální podmínky; viz oddíly 2.2 a 2.3) popisují chování teploty v každém bodě tělesa a každém časovém okamžiku. Pro stanovení hodnot teploty jako funkce časové a prostorových souřadnic  $T(\mathbf{x}, t)$  je nutné výše popsany matematický model vyřešit. Metody řešení parciálních diferenciálních rovnic lze rozdělit na *analytické* a *numerické*.

### 2.4.1 Analytické metody řešení

Analytickým řešením úlohy je nazýváno řešení  $T(\mathbf{x}, t)$ , které popisuje *přesné* chování teploty v *každém* bodě tělesa [14]. Analytické metody řešení jsou založeny na postupném použití matematických vztahů a ekvivalentních úprav, které umožňují získat řešení úlohy. Bohužel, analytické metody řešení lze použít pouze pro specifické případy s velmi jednoduchými počáteční, okrajovými a geometrickými podmínkami. Mezi nejznámější analytické metody pro řešení nestacionárních úloh vedení tepla patří např. *metoda separace proměnných*, pomocí které lze sestavit



**Obrázek 2.6:** Závislost termofyzikálních vlastností oceli S235JRH (0,07 wt. % C) na teplotě

řešení ve tvaru Fourierovy řady [14]; *metody Fourierovy* nebo *Laplaceovy integrální transformace* [14], které transformují parciální diferenciální rovnici na obyčejnou diferenciální rovnici a *metoda soustředěné kapacity*<sup>9</sup> [24, 6, 33] pro úlohy splňující podmínku pro Biotovo číslo<sup>10</sup>  $Bi \leq \frac{1}{10}$ . Analyticky také lze řešit jednoduché případy vedení v polonekonečném pevném tělese [24], jejichž řešení obsahují Gaussovu chybovou funkci<sup>11</sup>  $\text{erf } x$ . Pro odhad řešení lze využít *princip maxima a minima* [14].

### 2.4.2 Numerické metody řešení

Analyticky lze řešit úlohy vedení tepla pouze pro specifické případy a proto se v inženýrské praxi používají pro řešení modelu teplotního pole metody *numerické*. Charakteristikou těchto metod je nalezení *přibližného* řešení úlohy v *konečném počtu* předem definovaných bodů tělesa a v předem definovaných časových okamžicích [14, 24, 51].

Pro numerické řešení úloh vedení tepla byla současně s rychlým rozvojem výpočetní techniky v druhé polovině 20. století vyvinuta celá řada numerických metod. Jejich softwarová implementace pak umožňuje vznik numerických modelů, které mohou být následně využity pro řízení provozu ZPO, predikci výroby a vad a především pro optimalizaci provozu ZPO.

**Metoda konečných diferencí.** Jedná se o jednu z nejjednodušších metod, při které je těleso diskretizováno společně s časovou proměnnou do sítě bodů a proto se také tato metoda někdy nazývá metodou sítě. Rovnice je diskretizována v jednotlivých uzlech sítě, přičemž parciální

<sup>9</sup>ang. *lumped capacitance method*

<sup>10</sup>je bezrozměrné podobnostní číslo vyjadřující poměr tepelných odporů uvnitř a na povrchu tělesa:  $Bi = L \frac{h}{k_b}$ , kde  $L$  je charakteristický rozměr tělesa (obvykle stanoven jako podíl objemu a povrchu tělesa,  $L = \frac{V}{S}$ ),  $h$  je koeficient přestupu tepla na povrchu tělesa a  $k_b$  je tepelná vodivost tělesa

<sup>11</sup>Gaussova chybová funkce je neelementární funkce definovaná jako

$$\text{erf } x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$

derivace z rovnice a okrajových podmínek jsou nahrazeny Taylorovými rozvoji, ve kterých se zanedbají členy vyšších řádů dle požadované přesnosti, např.

$$\left. \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{T_{i-1,j,k} - 2T_{i,j,k} + T_{i+1,j,k}}{\Delta^2 x}, \quad (2.22)$$

kde  $T_{i,j,k}$  je teplota v uzlu sítě  $(i, j, k)$  a  $\Delta x$  je diskretizační krok v ose  $x$ . Diskretizací rovnice ve všech bodech sítě tedy vznikne soustava algebraických rovnic, jejíž řešením je teplota tělesa  $T(\mathbf{x}, t)$  v uzlech sítě. Výhodou této metody je především její jednoduchost a snadná softwarová implementace. Nevýhodou je především obtížné lokální zjemnění sítě v místech tělesa např. s výskytem velkých teplotních gradientů, kde je požadována vyšší přesnost řešení. Více o metodě konečných diferencí viz např. [55, 24].

**Metoda kontrolních objemů.** Tato metoda je podobná předchozí metodě konečných diferencí. Principem je rozdělení tělesa na tzv. kontrolní objemy, které mohou být různých velikostí nebo i tvarů dle požadavků na hustotu sítě a přesnost řešení. Po rozčlenění tělesa do množiny disjunktálních<sup>12</sup> kontrolních objemů je pro každý kontrolní objem sestavena rovnice energetické bilance<sup>13</sup> za časovou jednotku podle vztahu

$$\dot{E}_{\text{in}} + \dot{E}_{\text{gen}} - \dot{E}_{\text{out}} = \dot{E}_{\text{st}}, \quad (2.23)$$

kde  $\dot{E}_{\text{in}}$  je energie vstupující do kontrolního objemu z okolních kontrolních objemů za časovou jednotku,  $\dot{E}_{\text{gen}}$  představuje vnitřní zdroje energie v kontrolním objemu (např. latentní teplo fázových změn) za časovou jednotku,  $\dot{E}_{\text{out}}$  je energie vystupující z kontrolního objemu do okolních kontrolních objemů za jednotku času a  $\dot{E}_{\text{st}}$  vyjadřuje změnu energie uchované v kontrolním objemu za časovou jednotku. Z bilančních vztahů jednotlivých objemů je pak sestavena soustava algebraických rovnic, jejichž řešením je hledané teplotní pole. Výhodami metody kontrolních objemů jsou zejména fyzikální vzhled do řešené úlohy, relativní jednoduchost metody a její implementace a také možnost tvorby sítě s různou hustotou buněk, viz např. [24, 6, 33, 80]. Pro uvedené výhody bude tato metoda použita pro diskretizaci numerického modelu v této práci, viz oddíl 2.5.

**Metoda konečných objemů.** Principem této metody je rozdělení tělesa, na kterém se úloha řeší, na tzv. konečné objemy. Rovnice popisující děj je pak zintegrována<sup>14</sup> přes všechny konečné objemy, čímž vzniknou tzv. bilanční rovnice. V těchto rovnicích jsou pak parciální derivace nahrazeny přibližnými numerickými formulami dle požadavků na přesnost a následně jsou integrální operace nahrazeny kvadraturními formulami. Aplikace uvedeného postupu na všechny konečné objemy pak vede na soustavu algebraických rovnic, jejichž vyřešením lze získat hledané řešení. Tato metoda se často používá při řešení úloh z oblasti mechaniky tekutin a kontinua a je základním principem pro oblast CFD (Computer Fluid Dynamics). Více o metodě konečných objemů viz např. [74, 35].

**Metoda konečných prvků.** Tato metoda je založena na použití tzv. variačního principu a slabé formulace, které jsou z matematického hlediska náročnější než metody konečných diferencí a kontrolních objemů. Základní myšlenkou je rozdělení oblasti na tzv. konečné prvky, pro které je na základě slabé formulace problému sestavena soustava algebraických rovnic pro jednotlivé konečné prvky. Výhodou je možnost volby velikosti prvků podle požadavků uživatele, rychlost a přesnost řešení. Hlavní nevýhodou je zejména složitost metody a nutnost hlubší

<sup>12</sup>bez vzájemného průniku

<sup>13</sup>aplikace zákona zachování energie

<sup>14</sup>integrace přes konečné objemy vede obecně na vícerozměrné integrály, které se integrací per-partes částečně transformují na plošné integrály přes hranice konečných objemů za současného snížení řádu derivací



znalosti matematiky. Metoda konečných prvků se využívá zejména v mechanice těles pro napjatostní výpočty, deformační analýzu a podobné úlohy. Více o metodě konečných prvků viz např. [27, 22].

**Metoda hraničních prvků.** Principem této metody je převedení úlohy popsané parciální diferenciální rovnicí na řešení hraničních integrálních rovnic, které se řeší nikoliv v celém tělese jako např. u metody konečných prvků, ale pouze na jeho hranici. Hodnoty hledané funkce uvnitř tělesa se pak získají pomocí hodnot na jeho hranici, které jsou řešením hraničních integrálních rovnic. Pro sestavení hraničních integrálních rovnic lze použít např. tzv. přímou formulaci. Hlavní výhodou metody je nutnost diskretizovat pouze hranici studovaného tělesa a možnost řešit i problémy na neohraničených tělesech. Metoda hraničních prvků je využívána podobně jako metoda konečných prvků především v mechanice těles pro napjatostní výpočty, viz např. [64, 2].

**Bezsíťové metody.** Tyto tzv. mesh-free metody, které se řadí mezi relativně nové, se od všech výše uvedených vyznačují tím, že pro řešení není nutná diskretizace oblasti na elementy či prvky. Tato vlastnost je velkou výhodou, protože tvorba sítě, tzv. meshování, je často jednou z nejobtížnějších a časově nejnáročnějších částí numerického řešení úlohy. Bezsíťové metody místo sítě vyžadují pouze libovolné rozmístění bodů v řešené oblasti a v těchto bodech se pak konstruuje přibližné řešení. Výhodou tedy je snadné hustší rozmístění bodů do míst, kde je nutné zpřesnit řešení (např. v místech s velkými teplotními gradienty), a naopak řidší rozmístění bodů v místech s malou změnou sledované veličiny. Více o bezsíťových metodách viz např. [68, 37, 52].

Principem bezsíťových metod je zavedení tzv. shape funkcí, pomocí kterých je sestaven tvar řešení úlohy. Dosazením navrženého tvaru řešení do řídicí rovnice úlohy se parciální derivace z neznámé funkce, tj. teploty, transformují na derivace shape funkce, které jsou ale známé. Tímto postupem lze pro všechny body sestavit algebraické rovnice, které tvoří soustavu. Jejím řešením je pak hledané přibližné řešení úlohy. Výhodou těchto metod je zmíněná možnost libovolného rozmístění bodů v oblasti bez nutnosti meshování. Další výhodou je také jejich rychlost a efektivnost. Nevýhodou je naopak jejich relativní složitost, náročnější matematická podstata a problémy v souvislosti s okrajovými podmínkami úlohy [37].

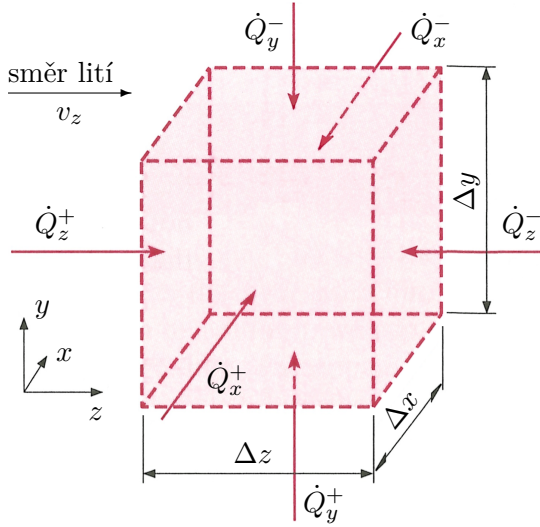
## 2.5 Numerická diskretizace matematického modelu teplotního pole

V tomto oddílu bude popsána diskretizace teplotního modelu plynule odlévaného předlitku metodou kontrolních objemů (viz oddíl 2.4.2) [24, 6, 33, 80], který je tvořen rovnicemi a podmínkami jednoznačnosti popsanými v oddílech 2.1, 2.2 a 2.3. Metoda kontrolních objemů je zvolena zejména pro její názorné odvození s fyzikálním vzhledem a možnost implementace různé hustoty objemů podle požadavků na přesnost řešení. V této části práce se omezíme na případ diskretizace numerického modelu teplotního pole radiálního ZPO pro sochorový předlitek se čtvercovým průřezem, nicméně uvedenou metodiku odvození diskretizačních rovnic lze rovněž přímočaře použít i pro předlitky jiného tvaru a průřezu, např. sochorů s kruhovým průřezem nebo bram.

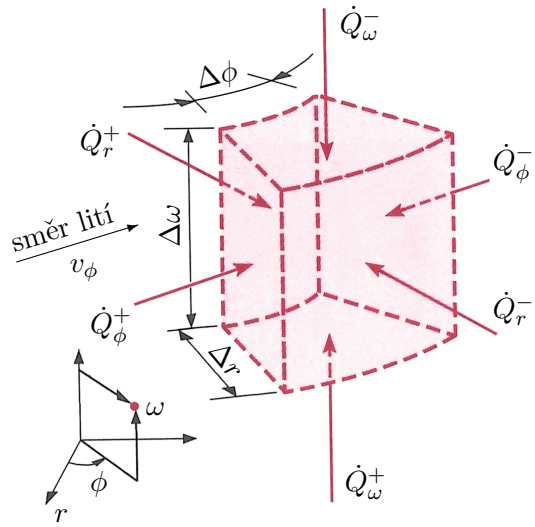
Protože dopředu nejsou známy směry toků energie kontrolním objemem (tj. zda uvažovanou hranicí kontrolního objemu energie „vtéká“ dovnitř objemu nebo „odtéká“ vně tento objem), je vhodné sestavovat bilanční rovnice s předpokladem, že toky energií všemi hranicemi směřují *dovnitř* objemu. Tento předpoklad je fyzikálně nereálný, ale vede k sestavení konzistentních<sup>15</sup> bilančních rovnic [24]. S využitím tohoto předpokladu se bilanční rovnice (2.23) transformuje na tvar

$$\dot{E}_{\text{in}} + \dot{E}_{\text{gen}} = \dot{E}_{\text{st}} = \frac{\Delta E_{\text{st}}}{\Delta t}, \quad (2.24)$$

<sup>15</sup>přestože všechny toky energií směřují „dovnitř“ objemu, je energetická bilance zajištěna znaménkem teplotního gradientu, resp. rozdílu teplot, který je v rovnici zahrnut



**Obrázek 2.7:** Kontrolní objem v kartézských souřadnicích [24]



**Obrázek 2.8:** Kontrolní objem v cylindrických souřadnicích [24]

kde výraz  $\dot{Q}_{\text{gen}}$  představuje vnitřní zdroj tepla v kontrolním objemu a člen  $\Delta E_{\text{st}}$  reprezentuje změnu vnitřní energie kontrolního objemu za časový okamžik  $\Delta t$ . V případě kontrolního objemu uvnitř tělesa v kartézském souřadném systému (viz Obrázek 2.7) přejde bilanční rovnice (2.24) do tvaru

$$\dot{Q}_x^+ + \dot{Q}_x^- + \dot{Q}_y^+ + \dot{Q}_y^- + \dot{Q}_z^+ + \dot{Q}_z^- + \dot{Q}_{\text{pohyb}} + \dot{Q}_{\text{gen}} = \dot{E}_{\text{st}} = \frac{\Delta E_{\text{st}}}{\Delta t}, \quad (2.25)$$

kde  $\dot{Q}$  jsou tepelné toky<sup>16</sup>, znaménko + nebo – v horním indexu označuje kladnou, resp. zápornou orientaci toku vzhledem k ose souřadného systému uvedené v dolním indexu, viz Obrázek 2.7 a 2.8. Člen  $\dot{Q}_{\text{pohyb}}$  v bilanční rovnici (2.25) zohledňuje energii vstupující do kontrolního objemu vlivem pohybu předlitku licím strojem. V případě cylindrického souřadného systému (viz Obrázek 2.8) použitým na obloukové části ZPO pak bilanční rovnice (2.24) přejde do tvaru

$$\dot{Q}_r^+ + \dot{Q}_r^- + \dot{Q}_\phi^+ + \dot{Q}_\phi^- + \dot{Q}_\omega^+ + \dot{Q}_\omega^- + \dot{Q}_{\text{pohyb}} + \dot{Q}_{\text{gen}} = \dot{Q}_{\text{st}} = \frac{\Delta E_{\text{st}}}{\Delta t}. \quad (2.26)$$

Pro tepelné toky v bilančních rovnicích (2.25) a (2.26) lze podle Fourierova zákona  $\dot{Q} = -kS\nabla T$  odvodit pro kartézský souřadný systém

$$\dot{Q}_x^+ = k_x \Delta y \Delta z \frac{T_{i-1,j,k}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta x}, \quad \dot{Q}_x^- = k_x \Delta y \Delta z \frac{T_{i+1,j,k}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta x}, \quad (2.27)$$

$$\dot{Q}_y^+ = k_y \Delta x \Delta z \frac{T_{i,j-1,k}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta y}, \quad \dot{Q}_y^- = k_y \Delta x \Delta z \frac{T_{i,j+1,k}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta y}, \quad (2.28)$$

$$\dot{Q}_z^+ = k_z \Delta x \Delta y \frac{T_{i,j,k-1}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta z}, \quad \dot{Q}_z^- = k_z \Delta x \Delta y \frac{T_{i,j,k+1}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta z} \quad (2.29)$$

a pro cylindrický souřadný systém

$$\dot{Q}_r^+ = k_r \left( r - \frac{\Delta r}{2} \right) \Delta \phi \frac{T_{i-1,j,k}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta r}, \quad \dot{Q}_r^- = k_r \left( r + \frac{\Delta r}{2} \right) \Delta \phi \frac{T_{i+1,j,k}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta r}, \quad (2.30)$$

$$\dot{Q}_\phi^+ = k_\phi \Delta r \Delta \omega \frac{T_{i,j-1,k}^* - T_{i,j,k}^*}{r \Delta \omega}, \quad \dot{Q}_\phi^- = k_\phi \Delta r \Delta \omega \frac{T_{i,j+1,k}^* - T_{i,j,k}^*}{r \Delta \omega}, \quad (2.31)$$

$$\dot{Q}_\omega^+ = k_\omega r \Delta r \Delta \phi \frac{T_{i,j,k-1}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta \omega}, \quad \dot{Q}_\omega^- = k_\omega r \Delta r \Delta \phi \frac{T_{i,j,k+1}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta \omega}. \quad (2.32)$$

<sup>16</sup>tj. energie ve formě tepla vstupující během časového okamžiku  $\Delta t$  do kontrolního objemu

Hvězdičky v horním indexu teplot ve vztazích (2.27)–(2.32) a ve vztazích níže jsou zástupným symbolem pro časový index. V případě použití explicitní metody diskretizace v časové proměnné pak platí  $*$  = { $t$ }, v případě implicitní metody pak  $*$  = { $t + \Delta t$ }.

Člen  $\dot{Q}_{\text{pohyb}}$  zohledňující pohyb předlitku licím strojem lze pak vyjádřit pro kontrolní objem v kartézském souřadném systému jako

$$\dot{Q}_{\text{pohyb}} = v_z \rho c \Delta x \Delta y \Delta z \frac{T_{i,j,k-1}^* - T_{i,j,k}^*}{\Delta z} \quad (2.33)$$

a pro kontrolní objem v cylindrickém souřadném systému vztahem

$$\dot{Q}_{\text{pohyb}} = v_\phi \rho c r \Delta r \Delta \phi \Delta \omega \frac{T_{i,j,k-1}^* - T_{i,j,k}^*}{r \Delta \phi} \quad (2.34)$$

Pro změnu vnitřní energie kontrolního objemu vlivem změny teploty pak lze podle vztahu  $dU = m c_v dT$  odvodit pro kartézský souřadný systém

$$\Delta E_{\text{st}} = \rho c \Delta x \Delta y \Delta z \left( T_{i,j,k}^{t+\Delta t} - T_{i,j,k}^t \right) \quad (2.35)$$

a pro cylindrický souřadný systém

$$\Delta E_{\text{st}} = \rho c r \Delta r \Delta \phi \Delta \omega \left( T_{i,j,k}^{t+\Delta t} - T_{i,j,k}^t \right). \quad (2.36)$$

Posledním nevyjádřeným členem v bilančních rovnicích (2.25) a (2.26) zůstává člen  $\dot{Q}_{\text{gen}}$ , který představuje vnitřní zdroj tepla kontrolního objemu. V případě modelů pro plynulé odlévání oceli je tímto vnitřním zdrojem latentní teplo fázové přeměny [69]. V následujícím textu budou popsány diskretizace dvou popsaných metod, které umožňují vývin latentního tepla zahrnout do výpočtu: *metoda entalpie* a *metoda efektivní tepelné kapacity*. Podstata a základní principy těchto metod byly vyloženy v oddíle 2.1. V následujícím textu omezíme pouze na explicitní diskretizaci v časové proměnné, která umožňuje počítat hodnoty hledaných veličin postupně a nezávisle na sobě, čímž nabízí vhodné podmínky pro paralelizaci výpočtu, viz oddíl 2.7.

### 2.5.1 Diskretizace metodou entalpie

Základním principem tohoto přístupu je zahrnout vývin latentního tepla fázových přeměn do termodynamické funkce objemové entalpie  $H$ , která je definována vztahem (2.1), viz oddíl 2.1. Zavedením objemové entalpie do bilančních rovnic dojde k jejich transformaci, člen  $\dot{Q}_{\text{gen}}$  představující latentní teplo fázových přeměn je včleněn do objemové entalpie a bilanční rovnice pro kartézský souřadný systém (2.25) přejde do tvaru

$$\dot{Q}_x^+ + \dot{Q}_x^- + \dot{Q}_y^+ + \dot{Q}_y^- + \dot{Q}_z^+ + \dot{Q}_z^- + \dot{Q}_{\text{pohyb}}^H = \frac{\Delta E_{\text{st}}^H}{\Delta t} \quad (2.37)$$

a pro člen  $\dot{Q}_{\text{pohyb}}^H$  zohledňující pohyb předlitku platí

$$\dot{Q}_{\text{pohyb}}^H = v_z \Delta x \Delta y \Delta z \frac{H_{i,j,k-1}^* - H_{i,j,k}^*}{\Delta z}. \quad (2.38)$$

Změnu vnitřní energie  $\Delta E_{\text{st}}^H$  kontrolního objemu v kartézském souřadném systému pak lze vyjádřit jako

$$\Delta E_{\text{st}}^H = \Delta x \Delta y \Delta z \left( H_{i,j,k}^{t+\Delta t} - H_{i,j,k}^t \right). \quad (2.39)$$

Bilanční rovnice pro cylindrický souřadný systém (2.26) přejde zavedením objemové entalpie do tvaru

$$\dot{Q}_r^+ + \dot{Q}_r^- + \dot{Q}_\phi^+ + \dot{Q}_\phi^- + \dot{Q}_\omega^+ + \dot{Q}_\omega^- + \dot{Q}_{\text{pohyb}}^H = \frac{\Delta E_{\text{st}}^H}{\Delta t} \quad (2.40)$$

a kde pro člen  $\dot{Q}_{\text{pohyb}}^H$  popisující pohyb předlitku licím strojem platí

$$\dot{Q}_{\text{pohyb}}^H = v_\phi r \Delta r \Delta \phi \Delta \omega \frac{H_{i,j,k-1}^* - H_{i,j,k}^*}{r \Delta \phi}. \quad (2.41)$$

Pro změnu vnitřní energie  $\Delta E_{\text{st}}^H$  kontrolního objemu v cylindrických souřadnicích pak platí

$$\Delta E_{\text{st}}^H = r \Delta r \Delta \phi \Delta \omega \left( H_{i,j,k}^{t+\Delta t} - H_{i,j,k}^t \right). \quad (2.42)$$

Za předpokladu explicitní diskretizace časové derivace (tj. dosazením za zástupný symbol  $*$  =  $\{t\}$  ve vztazích (2.27)–(2.32), (2.38) a (2.41)) lze substitucí vztahů (2.27)–(2.29), (2.38) a (2.39) do bilanční rovnice (2.37) odvodit explicitní vztah pro neznámou hodnotu entalpie  $H_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  v časovém okamžiku  $t + \Delta t$  stanovenou ze známých hodnot veličin v časovém kroku  $t$  pro kontrolní objem v kartézských souřadnicích,

$$H_{i,j,k}^{t+\Delta t} = H_{i,j,k}^t + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y \Delta z} \left( \dot{Q}_x^+ + \dot{Q}_x^- + \dot{Q}_y^+ + \dot{Q}_y^- + \dot{Q}_z^+ + \dot{Q}_z^- \right) + v_z \Delta t \frac{H_{i,j,k-1}^t - H_{i,j,k}^t}{\Delta z}. \quad (2.43)$$

Podobně lze substitucí vztahů (2.30)–(2.32), (2.41) a (2.42) do bilanční rovnice (2.40) odvodit explicitní vztah pro výpočet v cylindrických souřadnicích,

$$H_{i,j,k}^{t+\Delta t} = H_{i,j,k}^t + \frac{\Delta t}{r \Delta r \Delta \phi \Delta \omega} \left( \dot{Q}_r^+ + \dot{Q}_r^- + \dot{Q}_\phi^+ + \dot{Q}_\phi^- + \dot{Q}_\omega^+ + \dot{Q}_\omega^- \right) + v_\phi \Delta t \frac{H_{i,j,k-1}^t - H_{i,j,k}^t}{r \Delta \phi}. \quad (2.44)$$

V případě diskretizace okrajového kontrolního objemu se vyjádří odpovídající toky v bilančních rovnicích pomocí předepsaných okrajových podmínek.

V krystalizátoru nebo v místě kontaktu vodícího válce s povrchem předlitku, kde je předepsán okrajovou podmínkou (2.13) měrný tepelný tok  $\dot{q}$  na povrchu, pak platí např.  $\dot{Q}_x^+ = \dot{q} \Delta y \Delta z$  pro kontrolní objem v kartézských souřadnicích a  $\dot{Q}_r^+ = \dot{q} \left( r - \frac{\Delta r}{2} \right) \Delta \phi \Delta \omega$  pro kontrolní objem v cylindrických souřadnicích. Analogicky se provede vyjádření toků v dalších osách souřadného systému.

V případě okrajového kontrolního objemu v oblasti sekundární chladicí zóny, kde je okrajovou podmínkou (2.17) předepsán konvektivní a radiační odvod tepla, pak např. pro tok  $\dot{Q}_x^+$  v kartézském souřadném systému platí  $\dot{Q}_x^+ = (h + h_{\text{red}}) (T - T_\infty) \Delta y \Delta z$ . Pro kontrolní objem v cylindrických souřadnicích a např. tok  $\dot{Q}_r^+$  platí  $\dot{Q}_r^+ = (h + h_{\text{red}}) (T - T_\infty) \left( r - \frac{\Delta r}{2} \right) \Delta \phi \Delta \omega$ .

Analogickým postupem lze odvodit toky pro další typy okrajových podmínek a po jejich dosazení do bilančních rovnic pak následně odvodit explicitní vztahy výpočet neznámých hodnot entalpií  $H_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  v časovém okamžiku  $t + \Delta t$ .

**Postup výpočtu.** Počáteční podmínkou (2.11) modelu teplotního pole je určeno teplotní pole předlitku v počátečním čase  $t_0 = 0$ . Pomocí rovnic (2.43), (2.44) a rovnic odvozených pro okrajové kontrolní objemy se vypočítají hodnoty objemových entalpií  $H_{i,j,k}^{t_0+\Delta t} = H_{i,j,k}^{t_1}$  v čase  $t_1 = t_0 + \Delta t$  pro všechny kontrolní objemy tělesa. Ze známého vztahu objemové entalpie a teploty (viz Obrázek 2.6) konkrétního chemického složení odlévané oceli jsou objemové entalpie  $H_{i,j,k}^{t_1}$  přepočteny na hledané teploty  $T_{i,j,k}^{t_1}$  v časovém okamžiku  $t_1$ . Tímto přepočtem je výpočtová smyčka uzavřena, teploty  $T_{i,j,k}^{t_1}$  jsou v další iteraci použity jako vstupní data pro výpočet hodnot objemových entalpií  $H_{i,j,k}^{t_1+\Delta t} = H_{i,j,k}^{t_2}$  v časovém okamžiku  $t_2 = t_1 + \Delta t$  a následně jsou opět přepočteny na teploty  $T_{i,j,k}^{t_2}$ . Toto výpočetní schéma se  $n$ -krát opakuje až do výpočtu teplotního pole v koncovém čase  $t_n$ . Smyčku výpočtu lze tedy souhrně charakterizovat jako

$$T^t \rightarrow H^{t+\Delta t} \rightarrow T^{t+\Delta t}. \quad (2.45)$$

### 2.5.2 Diskretizace metodou efektivní tepelné kapacity

Podstatou této metody je zahrnout vývin latentního tepla fázových přeměn do tzv. efektivní tepelné kapacity  $c_{\text{eff}}$ , kterou lze definovat pomocí vztahu (2.8), viz oddíl 2.1. Protože je efektivní tepelná kapacita výrazně závislá na teplotě [69], bude v následujícím textu hodnota efektivní tepelné kapacity značena s explicitní závislostí na teplotě  $T$  jako  $c_{\text{eff}}(T)$ . Stejně jako v případě metody entalpie dojde zavedením efektivní tepelné kapacity do bilančních rovnic k jejich transformaci, člen  $\dot{Q}_{\text{gen}}$  zahrnující vývin latentního tepla fázových přeměn je zahrnut do efektivní tepelné kapacity a bilanční rovnice pro kontrolní objem v kartézských souřadnicích (2.25) přejde do tvaru

$$\dot{Q}_x^+ + \dot{Q}_x^- + \dot{Q}_y^+ + \dot{Q}_y^- + \dot{Q}_z^+ + \dot{Q}_z^- + \dot{Q}_{\text{pohyb}}^{\text{ceff}} = \frac{\Delta E_{\text{st}}^{\text{ceff}}}{\Delta t} \quad (2.46)$$

a člen  $\dot{Q}_{\text{pohyb}}^{\text{ceff}}$ , který zohledňuje pohyb předlitku licím strojem, je pak

$$\dot{Q}_{\text{pohyb}}^{\text{ceff}} = v_z \Delta x \Delta y \Delta z \frac{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k-1}^*) \cdot T_{i,j,k-1}^* - c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^*) \cdot T_{i,j,k}^*}{\Delta z}. \quad (2.47)$$

Změnu vnitřní energie  $\Delta E_{\text{st}}^{\text{ceff}}$  kontrolního objemu v kartézském souřadném systému pak lze vyjádřit jako

$$\Delta E_{\text{st}}^{\text{ceff}} = \Delta x \Delta y \Delta z \left( c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^{t+\Delta t}) \cdot T_{i,j,k}^{t+\Delta t} - c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^t) \cdot T_{i,j,k}^t \right). \quad (2.48)$$

Bilanční rovnice pro cylindrický souřadný systém (2.26) přejde zavedením efektivní kapacity do tvaru

$$\dot{Q}_r^+ + \dot{Q}_r^- + \dot{Q}_\phi^+ + \dot{Q}_\phi^- + \dot{Q}_\omega^+ + \dot{Q}_\omega^- + \dot{Q}_{\text{pohyb}}^{\text{ceff}} = \frac{\Delta E_{\text{st}}^{\text{ceff}}}{\Delta t}, \quad (2.49)$$

kde pro člen  $\dot{Q}_{\text{pohyb}}^{\text{ceff}}$ , který zohledňuje pohyb předlitku licím strojem, platí

$$\dot{Q}_{\text{pohyb}}^{\text{ceff}} = v_\phi r \Delta r \Delta \phi \Delta \omega \frac{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k-1}^*) \cdot T_{i,j,k-1}^* - c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^*) \cdot T_{i,j,k}^*}{r \Delta \phi}. \quad (2.50)$$

Pro změnu vnitřní energie  $\Delta E_{\text{st}}^{\text{ceff}}$  kontrolního objemu v cylindrickém souřadném systému pak platí

$$\Delta E_{\text{st}}^{\text{ceff}} = r \Delta r \Delta \phi \Delta \omega \left( c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^{t+\Delta t}) \cdot T_{i,j,k}^{t+\Delta t} - c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^t) \cdot T_{i,j,k}^t \right). \quad (2.51)$$

Předpokládejme explicitní diskretizaci časové derivace a tedy dosazení za zástupný symbol  $*$  =  $\{t\}$  ve vztazích (2.27)–(2.32), (2.47) a (2.50)). Protože je teplota  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  neznámá, nelze ji použít jako parametr při výpočtu efektivní tepelné kapacity  $c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^{t+\Delta t})$  ve vztazích (2.48) a (2.51). Proto za předpokladu dostatečně malého časového kroku  $\Delta t$  a malého rozdílu teplot  $T_{i,j,k}^t$  a  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  lze provést přibližné nahrazení

$$c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^{t+\Delta t}) \approx c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^t). \quad (2.52)$$

Pak lze substitucí vztahů (2.27)–(2.29), (2.47) a (2.48) do bilanční rovnice (2.46) s využitím vztahu (2.52) odvodit explicitní vztah pro neznámou hodnotu teploty  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  v časovém okamžiku  $t + \Delta t$  stanovenou ze známých teplot  $T_{i,j,k}^t$ : pro kontrolní objem v kartézských souřadnicích platí

$$T_{i,j,k}^{t+\Delta t} = T_{i,j,k}^t + \frac{\Delta t}{\Delta x \Delta y \Delta z} \cdot \frac{1}{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^t)} \left( \dot{Q}_x^+ + \dot{Q}_x^- + \dot{Q}_y^+ + \dot{Q}_y^- + \dot{Q}_z^+ + \dot{Q}_z^- \right) + v_z \frac{\Delta t}{\Delta z} \left( \frac{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k-1}^t)}{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^t)} T_{i,j,k-1}^t - T_{i,j,k}^t \right). \quad (2.53)$$

Podobně lze substitucí vztahů (2.30)–(2.32), (2.41) a (2.42) do bilanční rovnice (2.40) odvodit explicitní vztah pro výpočet teploty  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  kontrolního objemu v cylindrických souřadnicích

$$T_{i,j,k}^{t+\Delta t} = T_{i,j,k}^t + \frac{\Delta t}{r\Delta r\Delta\phi\Delta\omega} \cdot \frac{1}{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^t)} \left( \dot{Q}_r^+ + \dot{Q}_r^- + \dot{Q}_\phi^+ + \dot{Q}_\phi^- + \dot{Q}_\omega^+ + \dot{Q}_\omega^- \right) + v_\phi \frac{\Delta t}{r\Delta\phi} \left( \frac{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k-1}^t)}{c_{\text{eff}}(T_{i,j,k}^t)} T_{i,j,k-1}^t - T_{i,j,k}^t \right). \quad (2.54)$$

V případě diskretizace okrajového kontrolního objemu se vyjádří odpovídající toky v bilančních rovnicích analogicky jako v případě metody entalpie pomocí předepsaných okrajových podmínek, viz oddíl 2.5.1.

**Postup výpočtu.** Stejně jako v případě metody entalpie je počáteční podmínkou (2.11) určeno teplotní pole předlitku v počátečním čase  $t_0 = 0$ . Pomocí rovnic (2.53), (2.54) a rovnic odvozených pro okrajové kontrolní objemy pak lze přímo vypočítat hledané teploty  $T_{i,j,k}^{t_0+\Delta t} = T_{i,j,k}^{t_1}$  v čase  $t_1 = t_0 + \Delta t$  pro všechny kontrolní objemy tělesa. Tímto je výpočtová smyčka uzavřena a teploty  $T_{i,j,k}^{t_1}$  jsou v další iteraci použity jako vstupní data pro výpočet teplot  $T_{i,j,k}^{t_1+\Delta t} = T_{i,j,k}^{t_2}$  v časovém okamžiku  $t_2 = t_1 + \Delta t$ . Toto výpočetní schéma se  $n$ -krát opakuje až do výpočtu teplotního pole v koncovém čase  $t_n$ . Smyčku výpočtu lze tedy souhrně charakterizovat jako

$$T^t \rightarrow T^{t+\Delta t}. \quad (2.55)$$

### 2.5.3 Stabilita explicitní časové diskretizace

Důležitou vlastností explicitní diskretizace v časové proměnné je její *podmíněná stabilita* [24, 51]. Tato vlastnost je hlavní nevýhodou explicitní časové diskretizace, protože prostorové a časové dělení sítě, tj. velikosti prostorových diskretizačních kroků  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  a časového diskretizačního kroku  $\Delta t$  jsou vzájemně svázány a určitým způsobem omezeny. Při volbě prostorových diskretizačních kroků  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  a  $\Delta z$  uživatelem modelu je tedy nutné stanovit velikost diskretizačního kroku v časové proměnné  $\Delta t$  pomocí podmínek stability v závislosti na velikostech  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$ , přičemž velikost diskretizačního kroku  $\Delta t$  je shora omezená. Se zjemněním prostorové sítě je tedy nutné zmenšit krok  $\Delta t$ , z čehož plyne provést více iterací výpočtu a tedy i vyšší výpočetní náročnost. Porušení podmínek stability vede k nestabilitě nebo dokonce oscilacím řešení.

Podmíněnou stabilitu redukuje použití implicitní metody diskretizace časové proměnné, které jsou sice nepodmíněně stabilní, tj. velikosti diskretizačních kroků nejsou nijak omezeny, ale tyto metody vyžadují řešit *soustavu* vzájemně provázaných algebraických rovnic [6, 24], což je pro velký počet kontrolních objemů výpočetně velmi náročné.

Podmínky stability explicitní metody lze odvodit pomocí explicitních vztahů (2.43), (2.44), (2.53), (2.54). Podmínku stability lze při explicitním vyjádření teploty  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  pro kontrolní objem  $(i, j, k)$  a časový okamžik  $t + \Delta t$  ve tvaru

$$T_{i,j,k}^{t+\Delta t} = \Psi_{i,j,k} T_{i,j,k}^t + \Psi_{i-1,j,k} T_{i-1,j,k}^t + \Psi_{i+1,j,k} T_{i+1,j,k}^t + \Psi_{i,j-1,k} T_{i,j-1,k}^t + \dots \quad (2.56)$$

formulovat jako *nezápornost* koeficientu  $\Psi_{i,j,k}$  teploty  $T_{i,j,k}^t$  [6], tj. teploty kontrolního objemu  $(i, j, k)$  v předchozí časové iteraci  $t$ . Pro zaručení stability výpočtu je tedy nutné pro *všechny* kontrolní objemy  $(i, j, k)$  splnit podmínku

$$\Psi_{i,j,k} \geq 0. \quad (2.57)$$

## 2.6 Srovnání metod entalpie a efektivní tepelné kapacity a jejich implementace

**Metoda entalpie** zavádí do rovnice popisující tepelné chování předlitku novou veličinu – objemovou entalpii, která je spolu s teplotou také neznámou veličinou. Aby bylo možné rovnici (2.6), resp. (2.7), vyřešit, je nutné model doplnit o vzájemný vztah mezi teplotou a entalpií, viz Obrázek 2.6. Závislost teplota-entalpie je pro značky ocelí s odlišným chemickým složením obecně různá a proto je nutné tuto závislost stanovit podle chemického složení oceli pomocí numerických solidifikačních modelů (např. programový balík pro analýzu solidifikace IDS, viz [47]) nebo experimentálně, což je časově i finančně náročné. Z důvodu dvou neznámých v rovnici je následně nutné numerický výpočet teploty provádět s mezivýpočtem entalpie podle schématu  $T^t \rightarrow H^{t+\Delta t} \rightarrow T^{t+\Delta t}$ , což prodlužuje výpočetní dobu a zvyšuje nároky na výpočetní výkon. Navíc je vztah teplota-entalpie obvykle znám nikoliv jako funkční závislost, ale jako sada tabelovaných hodnot [80]. Z tohoto důvodu je nutné používat sofistikované vyhledávací algoritmy  $H \rightarrow T$ , protože určení teploty z hodnoty entalpie je nutné provést v každém časovém kroku pro každý kontrolní objem modelu, kterých je běžně řádově několik milionů. Díky nutnosti přepočtu je také obtížné implementovat implicitní diskretizační schéma v časové proměnné. Výhodou ve srovnání s metodou efektivní kapacity jsou pak lepší numerická stabilita a vyšší přesnost [49, 69].

**Metoda efektivní kapacity** umožňuje řešit úlohy vedení tepla přímo zavedením efektivní tepelné kapacity podle schématu  $T^t \rightarrow T^{t+\Delta t}$ . Přímý výpočet je hlavní výhodou této metody ve srovnání s metodou entalpie. Touto vlastností je současně umožněno případné použití implicitní časové diskretizace, avšak z důvodu velké variability efektivní tepelné kapacity na teplotě je velikost časového kroku  $\Delta t$  z důvodu přesnosti limitována [69]. Rovněž nutnost řešit v případě implicitního schématu soustavu algebraických rovnic místo postupného řešení jednotlivých diskretizačních rovnic je výpočetně náročné a především limituje možnost paralelizace výpočtu. Nevýhodou ve srovnání s metodou entalpie jsou horší numerická stabilita a nižší přesnost [49, 69].

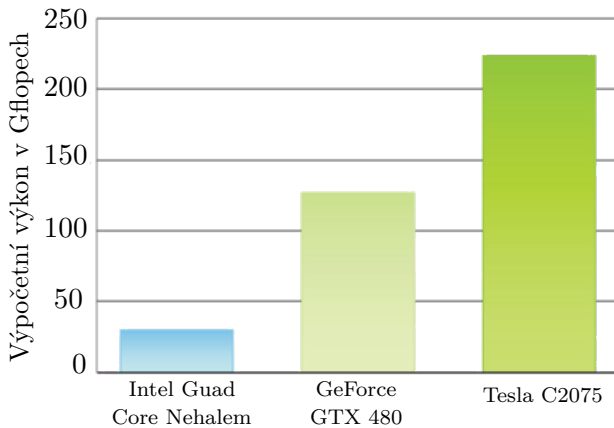
## 2.7 Paralelizace výpočtu teplotního pole na GPU

Výpočet teplotního pole je výpočetně náročná úloha s vysokými požadavky na výkon výpočetní techniky. Zejména požadavky na jemnější diskretizaci, tj. na menší velikost kontrolních objemů a tedy přesnější řešení úlohy, vedou k nutnosti počítat v každé časové iteraci statisíce až miliony hodnot teplotního pole. Časových iterací, které je třeba vykonat, bývá řádově tisíce až desetitisíce a tedy řešit úlohu nestacionárního teplotního pole předlitku tedy znamená provést řádově až miliardy dílčích výpočtů [80]. Současně je kladen požadavek na schopnost modelu počítat teplotní pole v co nejkratším výpočtovém čase, který musí být v on-line<sup>17</sup> verzi numerického modelu kratší než reálný čas. Rovněž pro účely optimalizace, při které je nutné teplotní pole předlitku počítat opakovaně s různými parametry, je žádoucí minimalizace výpočtového času modelu. Pro splnění těchto požadavků je paralelizace jedním z možných prostředků ke zkrácení výpočtového času.

Při výpočtu teplotního pole na výpočetním zařízení s jedním procesorem CPU probíhá výpočet sekvenčně, tj. požadované operace jsou procesorem prováděny postupně za sebou, tj. čas potřebný pro výpočet je dán součtem dílčích časů všech vykonaných operací. Naopak při výpočtu na výpočetním zařízení s více procesory je možné určitou část výpočtu provádět paralelně, tedy ve stejném časovém okamžiku. Charakteristické pro paralelizaci je vykonávání totožné části numerického kódu na odlišných výpočetních jednotkách, ale ve stejný časový okamžik a s různými daty.

Použití explicitních metod časové diskretizace, které byly popsány v oddíle 2.5, umožňuje výraznou paralelizaci numerického výpočtu nestacionárního teplotního pole odlévaného před-

<sup>17</sup>tj. ve verzi, která je použita přímo v provozu k řízení ZPO



**Obrázek 2.9:** Srovnání výpočetního výkonu GPU Tesla C2075, GeForce GTX 480 a procesoru Intel Quad Core Nehalem na testovací  $n$ -body úloze ( $n = 107\,520$ ) ve dvojitě přesnosti (zdroj: <http://www.nvidia.com/>)



**Obrázek 2.10:** GPU nVidia Tesla C2075 s 448 CUDA jádry a 6 GB GDDR pamětí (zdroj: <http://www.nvidia.com/>)

litku. V případě použití metody entalpie lze paralelizovat v každé časové iteraci výpočet objemových entalpií  $H_{i,j,k}^{t+\Delta t}$ , které jsou počítány vztahy (2.43), (2.44). Navíc lze v každé časové iteraci paralelně provádět i přepočítání objemových entalpií na teploty podle schématu  $H_{i,j,k}^{t+\Delta t} \rightarrow T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$ . V případě implementace modelu s využitím metody efektivní tepelné kapacity lze paralelně počítat v každé časové iteraci hodnoty teplot  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  podle vztahů (2.53) a (2.54).

Paralelizaci je možné provádět např. na výpočetní technice, která je vybavena vícejádrovým procesorem. Pak je možné na každém jádře, kterých může být běžně např. 16, souběžně provádět výpočet. Daleko větší možnosti a především výpočetní výkon pak nabízejí grafické jednotky GPGPU<sup>18</sup>, které v posledních letech zaznamenaly prudký rozvoj [62]. Tyto grafické jednotky a jejich výpočetní potenciál lze mimo jiné<sup>19</sup> využít pro paralelizaci vědecko-technických výpočtů. Srovnání výpočetního výkonu grafických jednotek nVidia Tesla C2075, GeForce GTX 480 a čtyřjádrového procesoru Intel Quad Core Nehalem ve dvojitě přesnosti na testovací úloze  $n$ -body (viz např. [54]) pro  $n = 107\,520$  je na Obrázku 2.9. Z tohoto obrázku je patrný vysoký výpočetní potenciál grafických jednotek ve srovnání s vícejádrovými procesory.

V současné době mezi nejvýznamnější výrobce grafických jednotek GPU<sup>20</sup> patří společnost nVidia, která ke svým GPU poskytuje výpočetní architekturu CUDA<sup>21</sup> a společnost AMD, jejichž GPU využívají výpočetní architekturu OpenCL.

Protože je pracoviště autora tohoto pojednání vybaveno výkonnými GPU Tesla C2075 od společnosti nVidia, omezíme se v dalším textu na využití architektury CUDA pro paralelizaci výpočtu teplotního pole plynule odlévaného předlitku. Grafická jednotka Tesla C2075 (viz Obrázek 2.10) je vybavena 448 CUDA jádry s frekvencí 1,15 GHz a 6 GB GDDR5 pamětí s frekvencí 1,5 GHz, 384-bitovou sběrnicí a propustností 144 GB s<sup>-1</sup>. Teoretický výkon GPU Tesla C2075 je 515 Gflops<sup>22</sup> ve dvojitě přesnosti a 1 030 Gflops v jednoduché přesnosti<sup>23</sup>.

<sup>18</sup>zkratka z **General-Purpose computing on Graphics Processing Units**

<sup>19</sup>původně byly grafické jednotky určeny zejména pro počítačovou grafiku v souvislosti s graficky náročnými aplikacemi, především hrami

<sup>20</sup>**Graphics Processing Unit**

<sup>21</sup>**Compute Unified Device Architecture**

<sup>22</sup>Gflops je jednotka výpočetního výkonu: **Giga Floating-point Operations per Second**

<sup>23</sup>zdroj: <http://www.nvidia.com/>



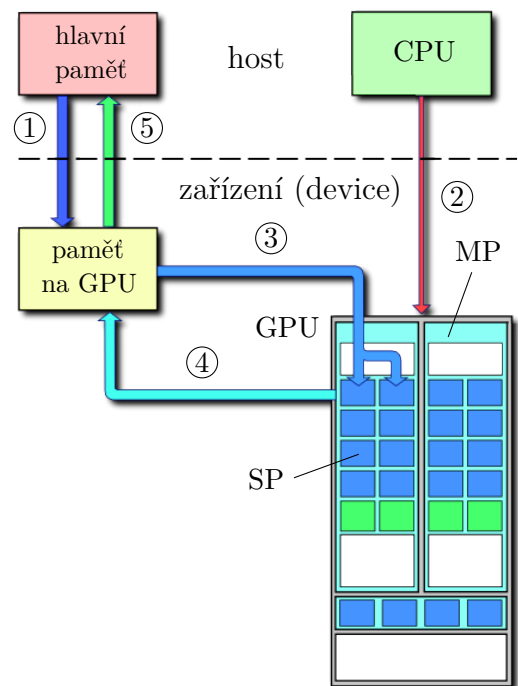
### 2.7.1 Grafické karty nVidia a architektura CUDA

V roce 2007 společnost nVidia uvolnila první verzi CUDA pro svoje grafické karty nVidia Tesla s architekturou G80, verze 3 umožnila nativní používání zdvojené přesnosti (double precision) [85]. Současná nejnovější verze je 4.2 a umožňuje provádět výpočty na GPU sérií GeForce, Quadro a Tesla, podporovány jsou operační systémy Windows, Linux a Max OS X. Grafická jednotka GPU od společnosti nVidia je tvořena velkým počtem jednoduchých, tzv. skalárních procesorů, které jsou uskupeny do tzv. streamovacích multiprocesorů vybavených sdílenou pamětí a polem registrů [62].

Pro implementaci CUDA kódu spustitelného na GPU je možné využít některého z podporovaných programovacích jazyků, např. jazyk C/C++ nebo Fortran. Jinou možností je použití MATLABu. Tento program určený pro vědecko-technické výpočty a jeho Parallel Toolbox ve své poslední verzi obsahují přímou podporu výpočtů na grafických kartách s využitím architektury CUDA.

Program spustitelný na GPU s využitím architektury CUDA je tvořen částmi, které mohou být spuštěny na lokálním zařízení, tj. obvykle na CPU (*host*), nebo na GPU (*device*). Paralelizovatelná část je implementována v tzv. jádře (*kernel*), které je hostem spuštěno na zařízení GPU. Se spuštěním jádra vytvoří CUDA podle požadavku uživatele a možnosti GPU a CUDA tzv. vlákna (*thread*), ve kterých je totožný kód jádra paralelně vykonáván na různých datech. Vlákna je možné dále sdružovat do tzv. bloků (*block*), které tvoří mřížku (*grid*). Toto členění vláken do bloků a mřížky umožňuje např. využití speciálních typů paměti na GPU, např. paměť konstant nebo textur [62, 85].

**Postup výpočtu** s využitím GPU a CUDA je zobrazen na Obrázku 2.11. V kroku ① se zkopírují data určená ke zpracování z paměti hosta do paměti zařízení (*device*) GPU, protože GPU nemůže přistupovat do paměti hosta. Následně je v kroku ② pomocí CPU hosta spuštěno jádro (*kernel*) obsahující kód, který se bude provádět paralelně. Spuštěním jádra vytvoří CUDA dle požadavků uživatele a možnosti zařízení mřížku se specifikovaným počtem bloků a vláken, které přiřadí jednotlivým multiprocesorům MP, resp. skalárním procesorům SP, viz Obrázek 2.11. Následně v kroku ③ začne každé vlákno vykonávat kód jádra s odpovídajícími daty z paměti zařízení. Při vykonání kódu jádra jsou data uložena vlákny zpět do paměti zařízení GPU (krok ④), odkud jsou zkopírována zpět do paměti hosta k dalšímu zpracování (krok ⑤) [85, 62].



**Obrázek 2.11:** Schéma provádění paralelních výpočtů na GPU s CUDA [85]

### 2.7.2 Implementace modelu teplotního pole v CUDA

V tomto oddíle popíšeme návrh implementace numerického modelu teplotního pole odlévaného předlitku s využitím paralelizace na GPU s využitím CUDA. Návrh implementace bude popsán pro jazyk C/C++ [62]. Konkrétní výsledky a závěry autora pojednání v oblasti řešení úloh pomocí paralelizace na GPU s použitím CUDA jsou uvedeny v kapitole 4.

1. Proveď dle požadavků uživatele dělení předlitku na  $n_x \times n_y \times n_z$  kontrolních objemů a čas, pro který má být teplotní pole řešeno, rozděl do  $n_\tau$  časových kroků.
2. Do paměti hosta načti počáteční teplotní pole  $T_0$  dané počáteční podmínkou (2.11).
3. Alokuj CUDA metodou `cudaMalloc()` paměť na zařízení GPU pro teplotní pole ve tvaru čtyřrozměrné matice  $\mathbf{T}(i, j, k, \tau)$  o velikosti  $n_x \times n_y \times n_z \times n_\tau$ , kde  $i = 1, \dots, n_x$ ,  $j = 1, \dots, n_y$  a  $k = 1, \dots, n_z$  jsou indexy kontrolních objemů a  $\tau = 1, \dots, n_\tau$  je index časového kroku.
4. Do proměnné  $\mathbf{T}(\cdot, \cdot, \cdot, 0)$  v paměti zařízení GPU zkopíruj metodou `cudaMemcpy()` počáteční teplotní pole  $T_0$  z paměti z hosta.
5. Podle počtu kontrolních objemů  $n_x \times n_y \times n_z$  a možností zařízení GPU urči počet bloků `blocks` a jejich velikost `threads`.
6. Spuště na zařízení GPU jádro příkazem `kernel<<<blocks, threads>>>()`. Každé vlákno mřížky nyní představuje jeden konkrétní kontrolní objem předlitku a s ním spjaté výpočty.
7. Zkopíruj z paměti zařízení GPU vypočítané nestacionární teplotní pole  $\mathbf{T}$  do paměti hosta metodou `cudaMemcpy()`.
8. Uvolni paměť na zařízení GPU metodou `cudaFree()`.
9. Zpracuj na hostu vypočítané teplotní pole  $\mathbf{T}$  dle požadavků uživatele.

V jádře `kernel` je implementován samotný výpočet teplotního pole všech kontrolních objemů předlitku. V případě implementace metody entalpie (viz oddíly 2.1.1 a 2.5.1) lze kód jádra zapsat následovně:

Pro  $\tau = 1, \dots, n_\tau$  prováděj ve smyčce:

1. CUDA metodami `threadIdx` a `blockIdx` urči indexy  $i$ ,  $j$  a  $k$ .
2. Polož  $T_{i,j,k}^t = \mathbf{T}(i, j, k, \tau - 1)$ .
3. Vypočítej pomocí vztahů (2.43) a (2.44) entalpii  $H_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  v časovém okamžiku  $t + \Delta t$ .
4. Přepočítej hodnotu entalpie  $H_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  pomocí vztahu entalpie-teplota na teplotu  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  a ulož ji do paměti zařízení GPU, tj. proveď  $\mathbf{T}(i, j, k, \tau) = T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$ .
5. Synchronizuj vlákno s ostatními vlákny mřížky pomocí příkazu `__syncthreads()`. Synchronizace vláken během paralelního výpočtu zaručí konzistenci, návaznost a dostupnost teplot  $T_{i,j,k}^t$  nutných při výpočtu teplot  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  jednotlivými vlákny.
6. Pokud  $\tau = n_\tau$ , pak konec. Jinak  $\tau = \tau + 1$  a pokračuj krokem 1.

V případě implementace metody efektivní tepelné kapacity je jedinou změnou ve výše uvedeném pseudokódu jádra sloučení kroků 3 a 4 do jednoho kroku, ve kterém probíhá výpočet teploty  $T_{i,j,k}^{t+\Delta t}$  podle vztahů (2.53) a (2.54). Krok 4 v případě metody efektivní tepelné kapacity odpadá, protože tato metoda umožňuje stanovit hodnotu teploty v časovém okamžiku  $t + \Delta t$  přímo z teplot v čase  $t$ .

# Optimalizace a optimalizační algoritmy

**P**ROBLEMATIKA optimálního řízení a provozu ZPO vyžaduje nutnost implementovat optimalizační algoritmy, které následně při své činnosti využívají numerického modelu teplotního pole. V této kapitole jsou popsány základní přístupy deterministické a stochastické optimalizace a matematického programování. Pozornost je věnována stochastické optimalizaci, která umožňuje řešit úlohy s neurčitostí a náhodností. Diskutována je rovněž vícestupňová stochastická optimalizace, scénářový přístup a algoritmus progressive hedging, který umožňuje řešit stochastické optimalizační úlohy se scénáři. Závěr kapitoly tvoří úvod do heuristických algoritmů, které představují alternativu k deterministickým optimalizačním algoritmům.

Problematikou optimalizace provozu ZPO a implementací optimalizačních algoritmů se zabývala řada autorů, viz např. [53, 8, 19, 81, 77, 26] (numerické modely a optimální řízení provozu ZPO), [63] (optimalizace ZPO použitím genetických algoritmů), [44] (optimalizace provozu ZPO světlušším algoritmem), [39, 82] (optimalizace nastavení sekundární chladicí zóny ZPO), [38] (optimalizace procesu *soft reduction* na ZPO), [25] (optimalizace výšky hladiny taveniny v krystalizátoru), [7] (tepelná analýza krystalizátoru pomocí metody konečných objemů a genetických algoritmů).

## 3.1 Matematické programování a optimalizace

Matematické programování a optimalizace jsou interdisciplinárním vědním oborem, který se zabývá úlohami hledání extrémů účelové funkce vzhledem k daným omezením. Vyřešením optimalizační úlohy je nalezení optimálního řešení, které dle charakteru řešené úlohy minimalizuje nebo maximalizuje hodnotu účelové funkce za současného splnění předepsaných omezení [57, 56, 1]. Tato omezení ve tvaru nerovností nebo rovností specifikují tzv. množinu přípustných řešení, která je podmnožinou  $N$ -rozměrného konečnědimenzionálního prostoru. Optimální řešení úlohy tedy musí být prvkem množiny přípustných řešení. Obecně lze formulovat úlohu matematického programování a optimalizace s využitím vektorového zápisu následovně [50, 57, 1]:

Najdi (alespoň jedno)  $\mathbf{x}_{\min}$  takové, které

$$\begin{aligned} &\text{minimalizuje} && f(\mathbf{x}) \\ &\text{vzhledem k} && \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \\ &&& \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \\ &&& \mathbf{x} \in X, \end{aligned} \tag{3.1}$$

kde  $X \subset \mathbb{R}^N$  je podprostor  $N$ -rozměrného prostoru  $\mathbb{R}^N$ ,  $f(\mathbf{x})$  je účelová funkce,  $\mathbf{g}(\mathbf{x})$  je vektorová funkce  $\mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^m$  popisující  $m$  omezení ve tvaru nerovnosti a  $\mathbf{h}(\mathbf{x})$  je vektorová funkce  $\mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^n$  popisující  $n$  omezení ve tvaru rovnosti. Přestože je obecný tvar úlohy matematického programování formulován jako minimalizační úloha, lze v případě maximalizačního problému tuto úlohu převést na minimalizační [1, 56]. Množinu přípustných řešení úlohy (3.1) lze tedy zapsat jako

$$C = \{\mathbf{x} \in X \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}. \quad (3.2)$$

Pro kompaktní zápis optimalizační úlohy lze také použít

$$? \in \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmin}}\{f(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in C = X \cap \{\mathbf{x} \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}\}\}, \quad (3.3)$$

kde „argmin“ označuje množinu všech optimálních řešení úlohy. Tento zápis optimalizační úlohy bude použit v dalším textu.

### 3.2 Deterministická optimalizace

Deterministickým optimalizačním problémem je úloha matematického programování (3.1), která obsahuje deterministická data. Termínem deterministická data jsou nazývány veškeré parametry a vstupy úlohy (koeficienty a parametry účelové funkce a všech omezení), které musí být *plně známé* v okamžiku řešení problému [1, 56]. Deterministický optimalizační problém tedy neobsahuje *žádná* neurčitá a náhodná data, což je hlavním rozdílem ve srovnání se stochastickou optimalizační úlohou.

Obecný tvar deterministické optimalizační úlohy lze zapsat pomocí kompaktního tvaru (3.3) jako [1, 56, 57]

$$? \in \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmin}}\{f(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \mid \mathbf{x} \in X \cap \{\mathbf{x} \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \mathbf{0}\}\}, \quad (3.4)$$

kde vektor  $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^K$  je  $K$ -dimenzionální deterministický vektor parametrů. Speciálním případem deterministické optimalizační úlohy (3.4) je optimalizační úloha, jejíž účelová funkce a omezení jsou lineární a množina  $X$  je konvexní polyedrická množina. Úlohu lineární deterministické optimalizace lze pak zapsat jako

$$? \in \underset{\mathbf{x}}{\operatorname{argmin}}\{\mathbf{c}^T \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in X \cap \{\mathbf{x} \mid \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \mathbf{x} \geq \mathbf{0}\}\}, \quad (3.5)$$

kde  $\mathbf{c}$  je  $N$ -dimenzionální deterministický vektor,  $\mathbf{A}$  je deterministická matice rozměru  $(m+n) \times N$  a  $\mathbf{b}$  je  $(m+n)$ -dimenzionální deterministický vektor.

Pro řešení deterministických optimalizačních problémů byla vyvinuta celá řada optimalizačních algoritmů. Pro řešení lineárních problémů je nejznámějším algoritmem *simplexová metoda* [56, 57], pro nelineární úlohy např. *metoda bisekce*, *metoda cyklických souřadnic*, *metoda největšího spádu*, gradientní *Newtonův-Raphsonův algoritmus*, bezgradientní *Hookeho-Jeevesova metoda* nebo *zobecněná metoda redukováných gradientů* [1, 56].

Při řešení nelineárních optimalizačních problémů lze využít tzv. Karushovy-Kuhnovy-Tuckerovy podmínky optimality [1], pomocí kterých lze stanovit nutné podmínky, které musí optimální řešení úlohy splňovat.

### 3.3 Stochastická optimalizace

Použití deterministické optimalizace v reálných aplikacích je často omezeno, protože úlohy reálného světa obvykle zahrnují jistý stupeň neurčitosti a náhodnosti a použití deterministické optimalizace pro řešení těchto úloh může vést k chybným nebo dokonce úplně nesprávným výsledkům a závěrům. Pro modelování optimalizačních úloh s neurčitostí lze použít několik přístupů. Jedním

z nich je *stochastická optimalizace*, která pro popis neurčitosti a náhodnosti využívá *náhodných veličin* se známým rozdělením pravděpodobnosti z aparátu matematické statistiky [29, 4].

**Definice náhodné veličiny.** Necht je trojice  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$  pravděpodobnostní prostor. Pak se zobrazení  $\xi: \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  nazývá *náhodná veličina* [15, 16], jestliže  $\forall x \in \mathbb{R}$  platí

$$\{\omega: \xi(\omega) \leq x\} \in \mathcal{A}.$$

Obecný tvar úlohy stochastické optimalizace je pak možné zapsat jako [4, 29]

$$? \in \underset{x}{\operatorname{argmin}} \{f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) \mid \mathbf{x} \in X \cap \{\mathbf{x} \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \mathbf{0}\}\}, \quad (3.6)$$

kde  $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_K)^T$ ,  $\boldsymbol{\xi}(\omega): \Omega \rightarrow \mathbb{R}^K$  je  $K$ -dimenzionální náhodný vektor jehož prvky jsou náhodné veličiny  $\xi_i$  pravděpodobnostního prostoru  $(\Omega, \mathcal{A}, P)$ . Zobrazení  $\boldsymbol{\xi}: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^K$  indukuje na prostoru  $\mathbb{R}^K$  pravděpodobnostní míru  $\mathcal{P}$  s Borelovskou algebrou  $\mathcal{B}$ , která je  $\sigma$ -algebrou [15, 16]. Rozdělení pravděpodobnosti náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$  předpokládáme známé. Označíme-li pravděpodobnostní prostor korespondující s mírou  $\mathcal{P}$  jako  $(\Xi, \mathcal{B}, \mathcal{P})$ , pak ve formulaci stochastické optimalizační úlohy (3.6) je účelová funkce  $f$  zobrazení  $f: \mathbb{R}^N \times \Xi \rightarrow \mathbb{R}$  a funkce omezení  $\mathbf{g}$  a  $\mathbf{h}$  jsou zobrazeními  $\mathbf{g}: \mathbb{R}^N \times \Xi \rightarrow \mathbb{R}^m$ , resp.  $\mathbf{h}: \mathbb{R}^N \times \Xi \rightarrow \mathbb{R}^n$ .

Na úlohu stochastické optimalizace (3.6) lze pohlížet jako na úlohu deterministické optimalizace (3.4), ve které jsou některá data nebo parametry (prvky  $p_i$  vektoru  $\mathbf{p}$ ) zaměněny za náhodné veličiny  $\xi_i$  náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$ . Pro řešení stochastické optimalizační úlohy (3.6) existují dva základní metody podle způsobu interpretace náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$  a přístupu k řešení [29]. Jedním z nich je přístup *wait-and-see*, jehož podstatou je počkat na konkrétní realizaci  $\boldsymbol{\xi}^p$  náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$ , dosadit vektor  $\boldsymbol{\xi}^p$  do úlohy (3.6) a následně vyřešit vzniklou deterministickou optimalizační úlohu. Obvykle ovšem nelze čekat s řešením úlohy až do doby, kdy je známý výsledek realizace náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$ . Cílem je tedy najít řešení úlohy beze znalosti výsledku neurčitosti a náhody v řešené úloze, přičemž požadavkem je, aby nalezené řešení bylo v určitém smyslu optimální pro libovolnou realizaci náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$ . Tento přístup se nazývá *here-and-now* a pro jeho použití je třeba zavést tzv. *deterministické ekvivalenty* úlohy (3.6), které umožní korektní interpretaci náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$  [4, 29].

### 3.3.1 Deterministické ekvivalenty stochastické optimalizační úlohy

Existuje několik způsobů pomocí kterých je možné definovat deterministické ekvivalenty úlohy (3.6). Mezi nejznámější patří ekvivalenty *wait-and-see*, individuálního scénáře, „tlustého“ řešení, střední hodnoty EV (expected value) a očekávaného cíle EO (expected objective). V následujícím se zaměříme na ekvivalenty EV a EO, které mají v aplikacích největší význam [4, 29].

**Ekvivalent Expected Value (EV).** Podstatou EV ekvivalentu je využití prvního momentu náhodné veličiny, tj. *střední hodnoty*, pomocí které je interpretována neurčitost a náhodnost úlohy (3.6) vyjádřená náhodným vektorem  $\boldsymbol{\xi}$ . Úlohu řešení stochastického optimalizačního problému (3.6) s využitím EV ekvivalentu lze formulovat jako [4]

$$? \in \underset{x}{\operatorname{argmin}} \{f(\mathbf{x}, \mathbb{E}(\boldsymbol{\xi})) \mid \mathbf{x} \in X \cap \{\mathbf{x} \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbb{E}(\boldsymbol{\xi})) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}(\mathbf{x}, \mathbb{E}(\boldsymbol{\xi})) = \mathbf{0}\}\}. \quad (3.7)$$

Optimální řešení úlohy (3.7) je označeno  $\mathbf{x}^{\text{EV}}$ . Zdůrazněme zde nutnost znalosti rozdělení pravděpodobnosti náhodného vektoru uvedenou v předchozí části 3.3, protože v případě EV ekvivalentu úlohy (3.6) je nutné stanovit střední hodnoty náhodných veličin.

**Ekvivalent Expected Objective (EO).** Hlavní myšlenkou EO ekvivalentu je včlenění střední hodnoty do účelové funkce a splnění omezujících podmínek *téměř jistě* (ozn. a. s.), tj. pro všechna  $\xi$  kromě množiny s pravděpodobností 0. Úlohu řešení stochastického optimalizačního problému (3.6) s využitím EO ekvivalentu lze tedy formulovat jako [4]

$$? \in \operatorname{argmin}_x \{ \mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}, \xi)) \mid \mathbf{x} \in X \cap \{ \mathbf{x} \mid \mathbf{g}(\mathbf{x}, \xi) \leq \mathbf{0} \text{ a. s.}, \mathbf{h}(\mathbf{x}, \xi) = \mathbf{0} \text{ a. s.} \} \}. \quad (3.8)$$

Optimální řešení úlohy (3.7) je označeno  $\mathbf{x}^{\text{EO}}$ . Pokud je kladen požadavek na zohlednění rozptylu náhodného vektoru  $\xi$  v účelové funkci, lze účelovou funkci v (3.8) nahradit např. výrazem

$$\mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}, \xi)) + \lambda \sqrt{\operatorname{var}_\xi(f(\mathbf{x}, \xi))}, \quad (3.9)$$

kde  $\lambda > 0$  je parametr.

Vzájemné porovnání „kvality“ řešení  $\mathbf{x}^{\text{EV}}$  a  $\mathbf{x}^{\text{EO}}$  úlohy stochastické optimalizace deterministickými ekvivalenty EV a EO lze provést pomocí *hodnoty stochastického řešení* (value of stochastic solution) VSS [4, 29], která je definována jako

$$\text{VSS} = \mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}^{\text{EV}}, \xi)) - \mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}^{\text{EO}}, \xi)), \quad (3.10)$$

kde člen  $\mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}^{\text{EV}}, \xi))$  je tzv. *očekávaný střední výsledek použití EV řešení* (expected result of using EV solution) EEV a člen  $\mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}^{\text{EO}}, \xi))$  je hodnota účelové funkce deterministického ekvivalentu EO při dosažení jeho optimálního řešení  $\mathbf{x}^{\text{EO}}$ .

Význam hodnoty stochastického řešení VSS je následující. Řešení deterministického ekvivalentu EV je vždy značně jednodušší než řešení deterministického ekvivalentu EO, neboť v případě EV ekvivalentu stanovením středních hodnot náhodných veličin přejde úloha stochastické optimalizace na úlohu deterministické optimalizace. Nicméně lze ukázat, že v případě minimalizačního problému platí vztah

$$\mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}^{\text{EO}}, \xi)) \leq \mathbb{E}_\xi(f(\mathbf{x}^{\text{EV}}, \xi)) \quad (3.11)$$

(srovnej se vztahem (3.10)), tj. řešení deterministického ekvivalentu EO nabízí lepší ve smyslu optimálnější řešení než řešení deterministického ekvivalentu EV. Hodnota stochastického řešení VSS tedy kvantifikuje vzájemný rozdíl účelových funkcí obou deterministických ekvivalentů EV a EO. Tedy, je-li hodnota VSS vysoká, pak lze řešením ekvivalentu EO získat výrazně lepší řešení než řešením ekvivalentu EV. Naopak, pro malé hodnoty VSS je postačující místo řešení náročného úlohy EO ekvivalentu řešit pouze výrazně jednodušší deterministický ekvivalent EV [4, 29].

### 3.3.2 Vícetupňová stochastická optimalizace

V předchozím oddíle byly diskutovány úlohy stochastické optimalizace, ve kterých rozhodovatel provádí pouze jedno rozhodnutí v jediném časovém okamžiku. Avšak hlavní výhodou stochastické optimalizace je možnost řešit tzv. vícetupňové úlohy, ve kterých rozhodovatel koná více rozhodnutí v různých časových okamžicích. Nejjednodušším případem je dvojstupňová stochastická optimalizace [29], ve které rozhodovatel koná dvě rozhodnutí: *rozhodnutí prvního stupně* (first-stage decision) musí být provedeno na počátku sledovaného děje, tj. v okamžiku, kdy není dostupná informace o vývoji náhodného vektoru v budoucnosti. Rozhodnutí prvního stupně tedy musí být totožné pro libovolnou budoucí realizaci náhodného vektoru a tato vlastnost se nazývá *neanticipativita* [4]. Následně s plynoucím časem rozhodovatel pozoruje výsledek náhodné složky (tj. konkrétní realizaci náhodného vektoru) a v reakci na něj koná *rozhodnutí druhého stupně* (two-stage decision), na které lze pohlížet jako na korekci již provedeného rozhodnutí prvního stupně. Úlohou dvojstupňového programování je tedy naleznout optimální rozhodnutí prvního  $\mathbf{x}$

a druhého  $\mathbf{y}(\boldsymbol{\xi})$  stupně. Pro aplikaci dvojstupňové stochastické optimalizace v úloze optimálního řízení provozu ZPO s možností výpadku chladicího okruhu v sekundární zóně viz kapitulu 4.

Obecný tvar úlohy dvojstupňové stochastické optimalizace lze formulovat následovně [4]: Najdi  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{y}$  splňující

$$? \in \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \left\{ f(\mathbf{x}) + \mathcal{Q}(\mathbf{x}) \mid \mathbf{x} \in X \cap \left\{ \mathbf{x} \mid \mathbf{g}^1(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}^1(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \right\} \right\}, \quad (3.12)$$

kde  $\mathcal{Q}(\mathbf{x}) = \mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(Q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}))$  a

$$Q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) = \min_{\mathbf{y}} \left\{ q(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\boldsymbol{\xi}), \boldsymbol{\xi}) \mid \mathbf{t}_g^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + \mathbf{g}^2(\mathbf{y}(\boldsymbol{\xi}), \boldsymbol{\xi}) \leq \mathbf{0} \text{ a. s.}, \right. \\ \left. \mathbf{t}_h^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) + \mathbf{h}^2(\mathbf{y}(\boldsymbol{\xi}), \boldsymbol{\xi}) = \mathbf{0} \text{ a. s.} \right\}. \quad (3.13)$$

Vektorové funkce  $\mathbf{g}^1$  a  $\mathbf{h}^1$  definují omezení spjaté s *prvním stupněm* úlohy a s rozhodnutím prvního stupně  $\mathbf{x}$ , zatímco vektorové funkce  $\mathbf{t}_g^2$ ,  $\mathbf{t}_h^2$ ,  $\mathbf{g}^2$  a  $\mathbf{h}^2$  definují omezení ve vztahu ke *druhému stupni* úlohy a rozhodnutí druhého stupně  $\mathbf{y}$ . Jak je patrné z podúlohy (3.13), rozhodnutí druhého stupně  $\mathbf{y}$  je minimem funkce  $q$ , která představuje „cenu“ rozhodnutí druhého stupně. Podúloha (3.13) spjatá s druhým stupněm tedy hledá „nejlevnější“ rozhodnutí druhého stupně  $\mathbf{y}$ .

### 3.3.3 Stochastická optimalizace se scénáři

V tomto oddíle byly doposud popsány stochastické optimalizační modely, které zahrnují (v účelové funkci nebo omezeních) střední hodnoty  $\mathbb{E}$  náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$  a náhodných veličin  $\xi_i$ . Tyto střední hodnoty jsou obecně definovány v integrálním tvaru [4]

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})) = \int_{\Xi} f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}) dP, \quad (3.14)$$

ze kterého plyne hlavní nevýhoda použití středních hodnot v optimalizačních modelech, protože jejich výpočet, který je nutné často provádět opakovaně, je výpočetně velmi náročný. Navíc je integrál ve vztahu (3.14) v případě náhodného vektoru vícerozměrný, což přináší nutnost implementace numerických metod pro výpočet vícenásobných integrálů [4].

Z tohoto důvodu se velmi často využívá tzv. *scénářového přístupu* a scénářové analýzy [4, 60]. Hlavní myšlenkou scénářového přístupu je použití náhodného vektoru  $\boldsymbol{\xi}$  s *diskrétním* rozdělením pravděpodobnosti, tj. náhodný vektor  $\boldsymbol{\xi}$  nabývá pouze konečného počtu konkrétních realizací a tedy  $|\Xi| < \infty$ . Každá konkrétní realizace vektoru  $\boldsymbol{\xi}^s$  se nazývá *scénář*  $s$  [4, 84] a množina všech scénářů  $S$  je pak

$$S = \left\{ s^i \mid i = 1, \dots, L \right\}, \quad (3.15)$$

kde  $L = |S|$  je počet scénářů. Počet scénářů a jejich výběr jsou voleny rozhodovatelem: je-li nutné popsat náhodnost a neurčitost úlohy přesněji, pak se volí vyšší počet scénářů  $L$ . Pokud je postačující zevrubné popsání náhodnosti a neurčitosti, pak je možné zvolit nižší počet scénářů. Pro každý scénář  $s$  je pak stanovena pravděpodobnost  $p_s$  jeho realizace, tj.  $p_s = P(\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{\xi}^s) \geq 0$  a pravděpodobnosti všech scénářů musí splňovat vlastnost  $\sum_{s \in S} p_s = 1$  [84, 60, 4].

Zavedením konceptu scénářů pak pro střední hodnotu libovolné funkce  $u(\cdot, \boldsymbol{\xi})$  platí

$$\mathbb{E}_{\boldsymbol{\xi}}(u(\cdot, \boldsymbol{\xi})) = \sum_{s \in S} p_s u(\cdot, \boldsymbol{\xi}^s), \quad (3.16)$$

tedy výpočet střední hodnoty se výrazně zredukuje z výpočtu integrálu na algebraickou operaci sčítání. Úlohu dvojstupňové stochastické optimalizace se scénáři lze pak reformulovat z (3.12) a (3.13) na následující tvar [4, 29].

Najdi  $\mathbf{x}$  a  $\mathbf{y}$  splňující

$$? \in \operatorname{argmin}_{\mathbf{x}, \mathbf{y}} \left\{ f(\mathbf{x}) + \sum_{s \in S} p_s Q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^s) \mid \mathbf{x} \in X \cap \left\{ \mathbf{x} \mid \mathbf{g}^1(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}, \mathbf{h}^1(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \right\} \right\}, \quad (3.17)$$

kde

$$Q(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^s) = \min_{\mathbf{y}_s} \left\{ q(\mathbf{x}, \mathbf{y}(\boldsymbol{\xi}), \boldsymbol{\xi}^s) \mid \mathbf{t}_g^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^s) + \mathbf{g}^2(\mathbf{y}(\boldsymbol{\xi}^s), \boldsymbol{\xi}^s) \leq \mathbf{0} \text{ a. s.}, \right. \\ \left. \mathbf{t}_h^2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}^s) + \mathbf{h}^2(\mathbf{y}(\boldsymbol{\xi}^s), \boldsymbol{\xi}^s) = \mathbf{0} \text{ a. s.} \right\}. \quad (3.18)$$

Požadavek neanticipativity v případě úlohy se scénáři implikuje rovnost rozhodnutí prvního stupně pro všechny scénáře, tj.  $\forall i, j \in S$  musí platit  $\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_j$ . Řešením úlohy (3.17) je tedy množina obsahující rozhodnutí prvního stupně  $\mathbf{x}$  a rozhodnutí druhého stupně  $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_L$ .

V případě řízení ZPO lze pomocí scénářového přístupu řešit například optimální řízení provozu licího stroje s možností havárie nebo poruchy části zařízení, např. výpadku čerpadla chladicí zóny v sekundární chladicí zóně. Havárie a poruchy jsou pak modelovány jednotlivými scénáři a řešením vzniklé optimalizační vícestupňové úlohy je možné stanovit optimální reakce obsluhy ZPO na vzniklé poruchy, které mohou nastat s pravděpodobnostmi  $p_i$ .

### 3.3.4 Algoritmus progressive hedging

Algoritmus progressive hedging, který navrhli R. J.-B. Wets a R. T. Rockafellar v 80. letech minulého století, patří do třídy dekompozičních metod umožňující řešit vícestupňové stochastické optimalizační úlohy se scénáři [84, 60]. Hlavní výhodou této metody, která využívá agregačního principu, je dekompozice úlohy (3.17) na menší subúlohy, které jsou vzájemně nezávislé a proto je lze řešit odděleně s možností paralelizace [60]. Další výhodou je skutečnost, že řešení získané použitím algoritmu progressive hedging je totožné s řešením deterministického ekvivalentu EO, viz oddíl 3.3.1, které poskytuje lepší řešení než deterministický ekvivalent EV, viz vztah (3.11) [4, 84].

Níže je uveden algoritmus progressive hedging ve verzi pro řešení dvojstupňových úloh stochastické optimalizace. Algoritmus progressive hedging ve verzi pro vícestupňové úlohy viz [84, 60].

#### Algoritmus progressive hedging pro dvojstupňové úlohy stochastické optimalizace

**Inicializace.** Zvol penalizační parametr  $\rho > 0$  a toleranci pro ukončení algoritmu  $\varepsilon > 0$ . Nastav váhy  $\mathbf{W}^0(s) = \mathbf{w}_1^0(s) = \mathbf{0}$  pro všechna  $s \in S$ , iniciační „průměrná“ řešení  $\hat{\mathbf{X}}^0(s) = (\mathbf{0}, \mathbf{0})$  pro všechna  $s \in S$  a  $j = 1$ .

#### Hlavní část.

1. Pro každé  $s \in S$  vyřeš úlohu

$$\begin{aligned} &\text{minimalizuj} && f(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, s) + \mathbf{w}_1^{j-1}(s)^T \cdot \mathbf{x}_1 + \frac{1}{2}\rho \left\| \mathbf{x}_1 - \hat{\mathbf{x}}_1^{j-1} \right\|^2 && (3.19) \\ &\text{vzhledem k} && \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in C_s, \end{aligned}$$

kde  $C_s$  je množina přípustných řešení scénáře  $s$  a označ řešení scénářové úlohy (3.19) jako  $\mathbf{X}^j(s) = (\mathbf{x}_1^j(s), \mathbf{x}_2^j(s))$ .

2. Vypočítej pro všechna  $s \in S$  „průměrné“ řešení  $\hat{\mathbf{X}}^j(s) = (\hat{\mathbf{x}}_1^j, \hat{\mathbf{x}}_2^j(s))$ :

$$\hat{\mathbf{x}}_1^j(s) = \hat{\mathbf{x}}_1^j = \sum_{s \in S} p_s \mathbf{x}_1^j(s), \quad \hat{\mathbf{x}}_2^j(s) = \mathbf{x}_2^j(s).$$



Pokud podmínka pro ukončení

$$\left( L \left\| \hat{\mathbf{x}}_1^{j-1} - \hat{\mathbf{x}}_1^j \right\|^2 + \sum_{s \in S} \left\| \hat{\mathbf{x}}_2^{j-1}(s) - \hat{\mathbf{x}}_2^j(s) \right\|^2 + \sum_{s \in S} p_s \left\| \mathbf{x}_1^j(s) - \hat{\mathbf{x}}_1^j \right\|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \varepsilon$$

platí, pak stop,  $\hat{\mathbf{X}}^j(s) = (\hat{\mathbf{x}}_1^j, \hat{\mathbf{x}}_2^j(s)) \equiv (\mathbf{x}, \mathbf{y}_s)$  je řešení původní úlohy s danou tolerancí  $\varepsilon$ . Jinak pro všechna  $s \in S$  přepočítej člen

$$\mathbf{w}_1^j(s) = \mathbf{w}_1^{j-1}(s) + \rho (\mathbf{x}_1^j(s) - \hat{\mathbf{x}}_1^j),$$

nastav  $j = j + 1$  a vrať se do kroku 1 hlavní části algoritmu.

### 3.4 Heuristické optimalizační algoritmy

Doposud uváděné optimalizační algoritmy v oddílech 3.2 a 3.3 patří do třídy tzv. *deterministických* algoritmů, jejíž charakteristikou je vykonávání optimalizačních algoritmů dle předem pevně stanoveného postupu [1, 56]. Naopak *heuristické* optimalizační algoritmy patří do skupiny tzv. *stochastických* optimalizačních algoritmů, které obsahují složku náhodnosti. Dopředu tedy nelze přesně stanovit způsob, kterým je prohledáván stavový prostor úlohy a hledání optimálního řešení [87]. Mezi nejznámější heuristické algoritmy, které jsou často inspirovány evolučním vývojem, přírodou a chováním živočichů, patří *genetické algoritmy*, *simulované žihání* (simulated annealing), *světluščí algoritmus* (firefly algorithm), *algoritmy kolonie mravenců a roje včel* (ant colony algorithm, bee algorithm), *algoritmy hejna jedinců*, např. ptáků nebo ryb (particle swarm algorithms) nebo *algoritmus opylení květin* (flower pollination algorithm) [34, 87, 88]. Dalším využitím heuristických algoritmů je jejich aplikace v optimalizačních úlohách řešených pomocí regulačních algoritmů s využitím aparátu fuzzy logiky, jejichž použití již bylo ověřeno pro úlohu optimálního řízení ZPO [43].

Optimalizace provozu zařízení pro plynulé odlévání oceli s využitím numerického modelu teplotního pole vede v případě použití deterministických optimalizačních algoritmů na velmi rozsáhlé úlohy s velkým počtem neznámých, neboť je nutné numerický model implementovat do formy optimalizační úlohy. Z tohoto důvodu je obtížné a někdy i takřka nemožné tyto úlohy řešit, a to jak algoritmicky, tak výpočetně. Naproti tomu heuristické a meta-heuristické algoritmy<sup>1</sup>, jejichž název je odvozen od řeckého slova *heuriskó* – naleznout, objevit, obecně nezaručují nalezení optimálního řešení, umožňují však nalézt v přijatelném výpočetním čase řešení, které je blízké optimálnímu řešení [87, 34]. Heuristické algoritmy obsahují náhodný člen, který umožňuje nezávislé prohledávání stavového prostoru a umožňuje při nalezení lokálního extrému účelové funkce jeho opuštění a následné nalezení extrému globálního. Teorie heuristických algoritmů je založena na použití náhodných veličin, náhodné procházky (random walk), Markovových řetězců a Lévyho distribuce [87].

V případě implementace heuristických algoritmů v úloze optimálního řízení provozu ZPO je numerický model teplotního pole předlitku využíván iteračně heuristickým algoritmem jako tzv. *black-box*, tj. algoritmus vyžaduje v každé svojí iteraci pouze vyhodnocení teplotního pole pro zadané parametry. Přestože je numerický model potřeba vyhodnotit během hledání optimálního řešení opakovaně, separace numerického modelu (do black-boxu) od vlastního optimalizačního algoritmu umožňuje významné snížení počtu proměnných optimalizační úlohy, která je rychleji a snadněji řešitelná.

V následujícím textu je uveden a okomentován pseudokód a základní princip nově vyvinutého heuristického optimalizačního algoritmu opylení květin (flower pollination algorithm) [88]. Inspirací a principem tohoto algoritmu je po stovky milionů let evolucí vyvíjený a zdokonalovaný mechanismus opylení květin v přírodě, který jim umožňuje se velmi efektivně rozmnožovat.

<sup>1</sup>meta-heuristické algoritmy jsou heuristické algoritmy vyšší úrovně; často se však název heuristické a meta-heuristické algoritmy zaměňuje bez jednoznačné hranice mezi nimi [87]

**Algoritmus 3.1:** ALGORITMUS OPYLENÍ KVĚTIN

---

Náhodně vygeneruj počáteční populaci květů a pylů  $\mathbf{x}_i^0$  pro  $i = 1, \dots, N$ ;  
Podle hodnoty účelové funkce  $f(\mathbf{x}_i)$  najdi v počáteční populaci nejlepší řešení  $\mathbf{x}^*$ ;  
Definuj pravděpodobnost  $p \in \langle 0, 1 \rangle$ ;  
Definuj *stop* kritérium pro ukončení iterační smyčky algoritmu (např. dosažená přesnost);  
Zvol maximální počet populací květů a pylů  $G_{\max}$  a nastav  $n = 0$ ;  
**while**  $n < G_{\max}$  **and**  $!(stop)$  **do**  
  **for**  $i = 1$  **to**  $N$  **do**  
    Vygeneruj náhodné číslo  $\theta \in \langle 0, 1 \rangle$ ;  
    **if**  $\theta < p$  **then**  
      Proveď globální opylení  
      
$$\mathbf{y} = \mathbf{x}_i^n + L(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_i^n), \quad (3.20)$$
  
      kde  $L > 0$  je tzv. krok z Lévyho distribuce [87],  
      
$$L \sim \frac{\lambda \Gamma(\lambda) \sin \frac{\pi \lambda}{2}}{\pi} \frac{1}{s^{1+\lambda}}, \quad (3.21)$$
  
      kde  $\lambda, s \gg 0$  jsou parametry a  $\Gamma(\cdot)$  je gamma funkce;  
    **else**  
      Proveď lokální opylení  
      
$$\mathbf{y} = \mathbf{x}_i^n + \epsilon(\mathbf{x}_j^n - \mathbf{x}_k^n), \quad (3.22)$$
  
      kde  $\epsilon \in \mathcal{U}(0, 1)$  je náhodný výběr z rovnoměrného rozdělení pravděpodobnosti;  
    **end if**  
    Vyhodnoť účelovou funkci nového květu nebo pylu  $\mathbf{y}$ . Pokud nové řešení vede ke zlepšení účelové funkce, pak toto řešení  $\mathbf{y}$  přijmi jako květ nebo pyl nové populace, tj.  $\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{y}$ , jinak  $\mathbf{x}_i^{n+1} = \mathbf{x}_i^n$ ;  
  **end for**  
  Nalezni v aktuální populaci květů a pylů nejlepší řešení  $\mathbf{x}^*$ ;  
  Nastav  $n = n + 1$ ;  
**end while**

---

Postatou algoritmu, která rovněž umožňuje opustit nalezený lokální extrém a dosáhnout extrému globálního, jsou dva způsoby opylení květů. Globální opylení (velká změna optimalizovaných proměnných ve stavovém prostoru, viz vztah (3.20)) je uskutečněno mezi květinami na větší vzdálenosti, kdy pyl prostředím přenáší např. hmyz. Naopak lokální opylení (malá změna ve stavovém prostoru optimalizační úlohy, vztah (3.22)) předpokládá, že pyl je přenášen na krátké vzdálenosti v okolí květiny difúzí prostředím, tj. např. větrem. Konkrétní mechanismus opylení se uplatňuje stejně jako v přírodě náhodně, tj. použitím náhodně vygenerovaného čísla  $\theta \in \langle 0, 1 \rangle$  a tzv. switch pravděpodobnosti  $p$  [88]. Na mechanismus globálního opylení lze pohlížet jako na tzv. Lévyho přelety (Lévy flights) splňující Lévyho distribuci [87]. Naopak lokální opylení s náhodným výběrem  $\epsilon$  z rovnoměrného rozdělení pravděpodobnosti  $\mathcal{U}(0, 1)$  je z matematického hlediska náhodná procházka (random walk) v lokálním okolí květiny (tj. aktuálního řešení optimalizační úlohy).

# Současný stav řešení dizertační práce

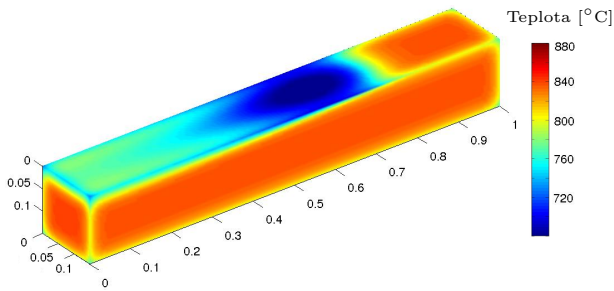
TATO kapitola je shrnutím dílčích výsledků a prací, které byly provedeny v rámci řešení dizertační práce. Pozornost byla soustředěna na tvorbu numerických modelů teplotních polí a studium možností a využití stochastické optimalizace se scénáři pro řešení zjednodušené úlohy optimálního provozu ZPO s možností výskytu havarijní poruchy v sekundární chladicí zóně. Rovněž byla provedena analýza vlivu odchyleného chemického složení na teplotní pole předlitku.

## 4.1 Numerické modely

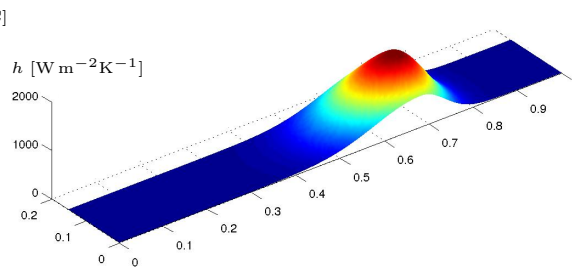
V rámci řešení dizertační práce byl proveden vývoj, implementace a aplikace dílčích numerických modelů teplotních polí. Pro implementaci modelů byly využívány postupy popsané v kapitole 2: metoda kontrolních objemů a metody entalpie a efektivní tepelné kapacity pro modelování vzniku latentního tepla fázových přeměn. Dílčí výsledky těchto prací byly již autorem pojednání využity pro řešení inženýrských úloh numerického modelování a optimalizace úloh zahrnující problematiku fázových změn, viz např. [A1, A10, A11], [B7, B8, B3, B9].

### 4.1.1 Numerický model předlitku pro studium chladících účinků trysek

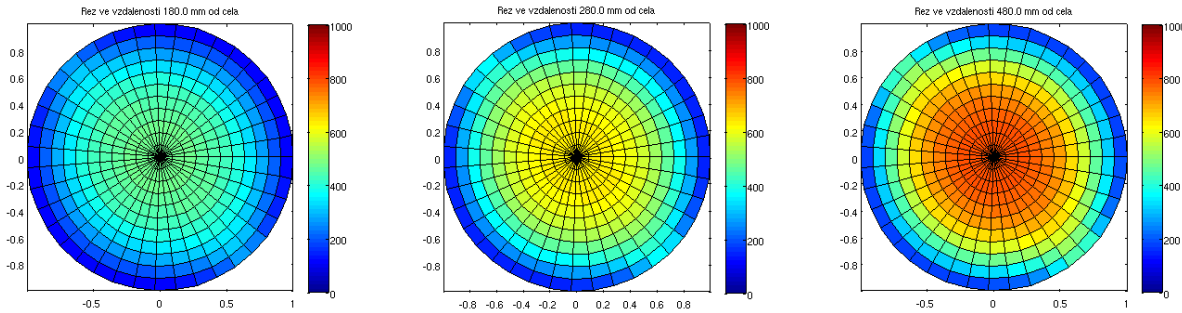
Pro studium a modelování odvodu tepla z plynule odlévaného předlitku pomocí vodních nebo vodovzdušných chladících trysek byl v MATLABu implementován numerický model vedení tepla čtvercového sochorového předlitku, který umožňuje analyzovat změnu teplotní pole vlivem účinku chladící trysky pohybující se podél předlitku, viz Obrázek 4.1. Model umožňuje charakterizovat chladící účinek trysky pomocí koeficientu přestupu tepla, který lze definovat funkční závislostí nebo daty z experimentů, viz např. [23, 58, 59] a Obrázek 2.5. Uvedený model byl implementován ve dvou verzích, ve kterých bylo pro modelování fázových přeměn použito obou přístupů (metoda entalpie a metoda efektivní tepelné kapacity) popsáných v oddíle 2.1. Dvě verze numerického modelu následně umožnily vzájemné porovnání obou zmíněných přístupů, rychlosti výpočtů a vypočtených teplotních polí. Na základě provedené literární rešerše bylo pro modelování koeficientu přestupu tepla pod tryskami využito tzv. split-normálního rozdělení pravděpodobnosti (viz vztah (2.21)), které svými vlastnostmi umožňuje pomocí několika parametrů vhodně definovat asymetrický tvar koeficientu přestupu tepla pod pohybující se chladící tryskou, viz Obrázek 4.2 a [75]. V rámci řešení dizertační práce se předpokládá využití tohoto modelu pro další analýzu a zpracování výsledků experimentů tak, aby bylo možné kvantifikovat koeficient přestupu tepla pod chladící tryskou také pro parametry (průtok tryskou, tlak v hrdle trysky, rychlost posuvu), pro které experimenty nejsou dostupné. Uvedený numerický



Obrázek 4.1: Ukázka teplotního pole předlitku chlazeného tryskou



Obrázek 4.2: Model koeficientu přestupu tepla pomocí split-normálního rozdělení



Obrázek 4.3: Model teplotního pole kruhového sochorového předlitku (osové řezy)

model bude rovněž použit jako základ modelu sochorového čtvercového předlitku, který bude plně respektovat geometrii reálného lícího stroje a jehož vývoj a implementace je jedním z cílů dizertační práce.

#### 4.1.2 Numerický model kruhového sochorového předlitku

V rámci řešení dizertační práce byl zahájen vývoj a tvorba numerického modelu teplotního pole sochorového předlitku s kruhovým průřezem. Numerický model byl sestaven podle koncepce uvedené v kapitole 2 a v [33], pro modelování latentního tepla fázových přeměn je použito metody entalpie. V současné verzi umožňuje řešit teplotní pole kruhového nepohyblivého se předlitku ve tvaru přímého válce, viz ilustrační Obrázek 4.3. Tento numerický model bude během řešení dizertační práce dále rozvíjen, zejména bude kladen důraz na vývoj s respektováním geometrie skutečného zařízení pro plynulé odlévání a odpovídajících okrajových podmínek. Dalším krokem ve vývoji numerického modelu sochorového předlitku kruhového i čtvercového předlitku pak bude jeho implementace v paralelizovatelné verzi. Předpokládá se využití jazyka C++ a architektury CUDA, protože analýza možností paralelizace na zjednodušeném modelu (viz oddíl 4.1.3) naznačila výrazné zkrácení výpočetní doby paralelizovaných modelů. Zmíněné modely budou poté využity metodami optimalizace a optimálního řízení, které ke své činnosti vyžadují opakované vyhodnocení teplotního pole numerickým modelem. Z uvedeného důvodu pak lze paralelizaci výrazně zkrátit výpočetní čas optimalizačních algoritmů a zefektivnit jejich použití v praxi.

#### 4.1.3 Paralelizace výpočtu teplotního pole na GPU s využitím CUDA

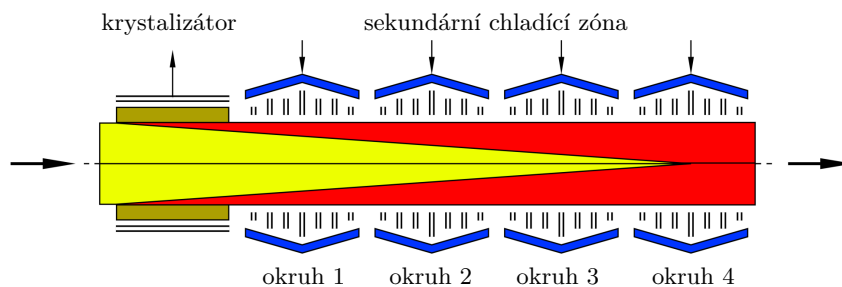
Jak již bylo uvedeno v oddíle 2.7, výpočet numerického modelu teplotního pole nabízí značné možnosti paralelizace. V rámci řešení dizertační práce byl uskutečněn vývoj a testování numerického modelu zjednodušeného teplotního pole dvojrozměrného předlitku. Tento numerický model byl vypracován ve dvou verzích. První model byl implementován v programovacím jazyce C++ s využitím architektury CUDA, jehož koncepce vychází z návrhu uvedeném v oddíle 2.7.2. Druhá verze téhož numerického modelu byla implementována ve formě neparalelizovaného

programu pro MATLAB. Dvě verze identického numerického modelu řešícího přenos tepla zjednodušeného předlitku pak umožnily srovnání možností paralelizace, její vliv na výpočetní dobu modelů a zhodnocení dalšího vývoje paralelizovaných numerických modelů. Srovnání výpočetní výkonnosti paralelizované (C++ a CUDA) a neparalelizované verze numerického modelu bylo provedeno na PC se 4-jádrovým procesorem Intel 2,4 GHz, 6 GB RAM, Win 7 64-bit., GPU nVidia GeForce 8800 GTS (96 jader na GPU, 320 MB RAM), verze CUDA 4.0 a z důvodu staršího modelu<sup>1</sup> GPU s tzv. *compute capability* verzí 1.0. Protože uvedená verze *compute capability* 1.0 umožňuje architekturu CUDA používat pouze proměnné v jednoduché přesnosti (single) ve srovnání s dvojitou přesností (double) v MATLABu, bylo tímto současně umožněno také porovnání vlivu typu proměnných, do kterých je v numerických modelech ukládáno teplotní pole.

Provedenou analýzou, výpočty a srovnáním paralelizovaného a neparalelizovaného modelu bylo zjištěno, že paralelizovaný model s využitím programovacího jazyka C++ a architektury CUDA umožňuje výpočet teplotního pole přibližně 7-krát rychleji než neparalelizovaný model implementovaný v MATLABu. Zároveň lze předpokládat, že výpočetní čas bude možné na výkonější GPU Tesla C2075 dále zkrátit, a to i využitím speciálních typů paměti (paměť konstant, paměť textur atd.) GPU, které je možné použitím architektury CUDA využít. Uskutečněná studie rovněž naznačila, že typ proměnných (jednoduchá přesnost *single* vs. dvojitá přesnost *double*) pro ukládání teplotního pole numerických modelů má spíše menší vliv, protože absolutní hodnota rozdílu mezi vypočteným teplotním polem pomocí jednoduché přesnosti v CUDA a dvojitě přesnosti v MATLABu byla zanedbatelná.

## 4.2 Stochastická optimalizace provozu ZPO

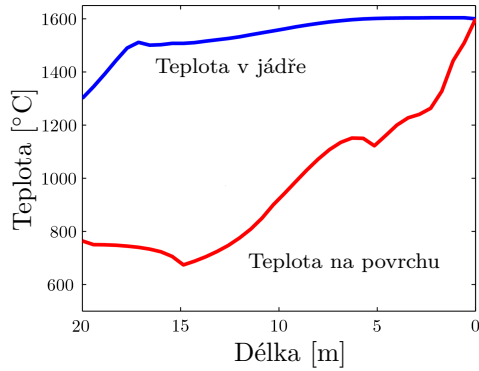
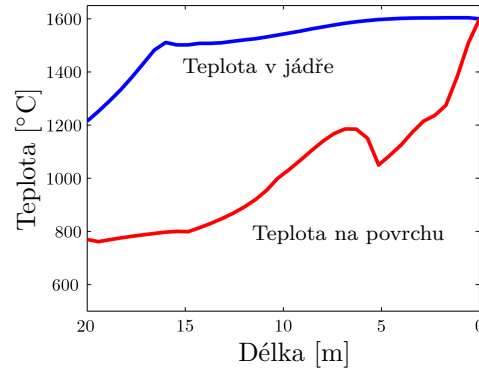
Pomocí metod stochastické optimalizace, víceúrovňových úloh a scénářového přístupu (viz oddíly 3.3, 3.3.2, 3.3.3) a optimalizačního algoritmu progressive hedging (viz oddíl 3.3.4) byla provedena studie možnosti optimalizace nastavení parametrů licího stroje během provozu ZPO se zahrnutím možnosti výpadku chladicího okruhu sekundární chladicí zóny. Pro uvedenou úlohu byl použit zjednodušený 2D model teplotního pole horizontálního ZPO se čtyřmi chladicími okruhy v sekundární chladicí zóně (viz Obrázek 4.4) převzatý z [42, 41], který byl modifikován pro účely níže popsané optimalizační úlohy. Modelování náhodného výpadku bylo provedeno pomocí dvou scénářů: jeden scénář s pravděpodobností 0,95 byl použit pro popis běžného bezporuchového provozu ZPO, druhý scénář s pravděpodobností 0,05 pak modeloval havarijní situaci ZPO, ve které došlo k výpadku druhého chladicího okruhu, např. z důvodu výpadku čerpadla okruhu.



**Obrázek 4.4:** Schéma zjednodušeného modelu ZPO se čtyřmi chladicími okruhy

Úloha byla koncipována jako dvojestupňový optimalizační problém, ve kterém byly hledány optimální hodnoty koeficientů přestupu tepla ve čtyřech chladicích okruzích sekundární zóny a optimální hodnota licí rychlosti. Řešením prvního stupně je tedy optimální nastavení licího stroje v okamžiku spuštění výroby s požadavkem, aby toto nastavení rovněž s danou pravděpodobností zohledňovalo možnost výpadku druhého okruhu sekundární chladicí zóny. Řešením

<sup>1</sup>pracoviště autora pojednání bylo vybaveno GPU Tesla C2075 popisované v oddíle 2.7 až po provedené analýze

Obrázek 4.5: Průběh teplot pro scénář  $s_1$ Obrázek 4.6: Průběh teplot pro scénář  $s_2$ 

druhého stupně je pak úprava původního nastavení licího stroje (řešení prvního stupně) v případě, že k popsané poruše v sekundární chladicí zóně skutečně došlo.

Uvedená optimalizační úloha byla řešena pomocí původní paralelní implementace algoritmu progressive hedging, která je založena na použití optimalizačního řešiče GAMS. Pro vlastní paralelizaci jednotlivých podúloh (viz 3.3.4) byla použita metoda MPI Message Passing Interface s využitím implementace ve formě API knihovny LAM/MPI, programovacího jazyka C a kompilátoru `mpicc`. Detaily řešení a výsledků uvedené optimalizační úlohy viz [A3], [30]. Více o původní implementaci viz [A4], [30], o modifikaci matematického modelu teplotního pole pro úlohu dvojstupňové stochastické optimalizace viz [A5], o použití stochastické optimalizace v inženýrských úlohách viz [A2].

Řešením popsané stochastické optimalizační úlohy pro zvolené parametry matematického modelu bylo nalezeno následující optimální řešení:

1. V okamžiku spuštění licího stroje nastav průtoky v jednotlivých okruzích sekundární zóny tak, aby koeficienty přestupu tepla byly

$$\mathbf{x} = (h_1^x, h_2^x, h_3^x, h_4^x)^T = (476, 3; 249, 1; 309, 1; 0)^T \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-1}$$

a licí rychlost  $v_z^x = 2,22 \text{ m min}^{-1}$ .

2. Pokud nenastane během provozu ZPO porucha, pak nastavení licího stroje  $\mathbf{x}$  a  $v_z^x$  neměň. Pokud ale nastane výpadek druhého chladicího okruhu sekundární zóny, pak uprav průtoky v jednotlivých okruzích sekundární zóny tak, aby koeficienty přestupu tepla byly

$$\mathbf{y} = (h_1^y, h_2^y, h_3^y, h_4^y)^T = (500; 0; 68, 1; 0)^T \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-1}$$

a licí rychlost uprav na  $v_z^y = 1,84 \text{ m min}^{-1}$ .

Teplotní profily na povrchu předlitku (červeně) a v jádře předlitku (modře) pro bezporuchový provozní stav (scénář  $s_1$ ) a pro stav s výpadkem druhého chladicího okruhu sekundární chladicí zóny (scénář  $s_2$ ) jsou zobrazeny na Obrázku 4.5, resp. na Obrázku 4.6. Pomocí deterministických ekvivalentů úlohy popsanych v oddíle 3.3.1 byla vypočtena hodnota stochastického řešení VSS (viz vztah 3.10) řešeného optimalizačního problému, přičemž  $VSS = 0,026 \text{ m min}^{-1}$ . Tato hodnota představuje „zisk“ vyjádřený v licí rychlosti, který je možné získat řešením náročnějšího EO deterministického ekvivalentu (v tomto případě řešeného pomocí algoritmu progressive hedging) ve srovnání s řešením jednoduššího EV deterministického ekvivalentu úlohy. Při zohlednění ceny odlévaného předlitku, provozních nákladů a množství odlévaných předlitků není uvedená hodnota VSS zanedbatelná.

### 4.3 Studie vlivu chemického složení na teplotní pole plynulé odlévaného předlitku

V rámci řešení dizertační práce byla rovněž studována problematika vlivu chemického složení a jeho odchýlení na teplotní pole odlévaného předlitku. Pro analýzu byly vybrány tři značky ocelí s nízkým, středním a vysokým obsahem uhlíku, které jsou odlévány v Železiárnách Podbrezová na Slovensku a tvoří většinou produkci železáren. Pozornost byla soustředěna na změnu predikce teplotního pole a technologických parametrů při odchýlení skutečného chemického složení oceli od předpokládaného chemického složení, které je vstupním údajem dynamického modelu teplotního pole. Rovněž byl studován vliv odchýleného chemického složení na změnu termofyzikálních vlastností, které jsou fundamentálními veličinami numerického modelu, tj. objemové entalpie, měrné tepelné kapacity, tepelné vodivosti a hustoty.

Pro analýzu byl použit dynamický solidifikační model radiálního ZPO vyvinutý školitelem autora pojednání [78, 80] a plynule odlévaný sochorový předlitek čtvercového formátu a rozměru  $200 \times 200$  mm licí rychlostí  $0,9 \text{ m min}^{-1}$ . Analyzovanými značkami oceli byly (A) nelegovaná konstrukční ocel S235JRH s nízkým obsahem uhlíku 0,08 %, (B) nelegovaná konstrukční jemnozrnná ocel S355J2G3 se středním obsahem uhlíku 0,18 % a (C) uhlíková konstrukční ocel C45 ke zúšlechťování s vysokým obsahem uhlíku 0,45 %. Chemické složení (obsah hlavních prvků) ocelí je uvedeno v Tabulce 4.1. Ke každému chemickému složení ocelí A, B a C získaného chemickou analýzou (ozn. dolním indexem „real“) byly uvažovány dva mezní stavy chemického složení dle norem a materiálových listů jednotlivých značek: *minimální* chemické složení (ozn. dolním indexem „min“) a *maximální* chemické složení (ozn. dolním indexem „max“), viz Tabulka 4.1.

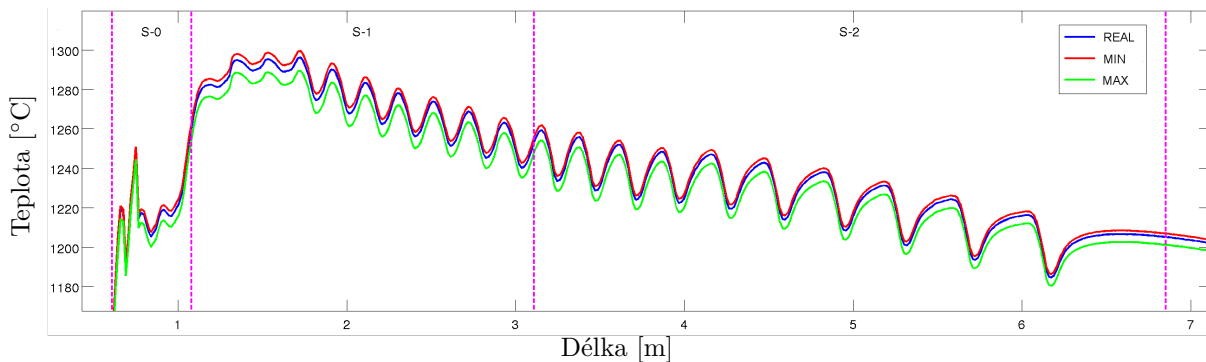
**Tabulka 4.1:** Chemické složení analyzovaných ocelí: (A) S235JRH, (B) S355J2G3, (C) C45

| Ocel             | Chemické složení [%] |      |      |       |       |      |      |      |      |       |       |       |       |
|------------------|----------------------|------|------|-------|-------|------|------|------|------|-------|-------|-------|-------|
|                  | C                    | Si   | Mn   | P     | S     | Cr   | Ni   | Mo   | Cu   | Al    | Sn    | Nb    | Ti    |
| <b>A</b>         | 0,07                 | 0,21 | 0,44 | 0,011 | 0,007 | 0,06 | 0,05 | 0,01 | 0,17 | 0,026 | 0,012 | 0,002 | 0,002 |
| A <sub>min</sub> | 0,07                 | 0,17 | 0,40 | 0     | 0     | 0    | 0    | 0    | 0    | 0,020 | 0     | 0     | 0     |
| A <sub>max</sub> | 0,09                 | 0,25 | 0,50 | 0,015 | 0,015 | 0,10 | 0,15 | 0,03 | 0,25 | 0,030 | 0,02  | 0,010 | 0,010 |
| <b>B</b>         | 0,19                 | 0,22 | 1,17 | 0,016 | 0,012 | 0,06 | 0,09 | 0,01 | 0,26 | 0,022 | 0,016 | 0     | 0,002 |
| B <sub>min</sub> | 0,17                 | 0,15 | 1,15 | 0     | 0     | 0    | 0    | 0    | 0    | 0,020 | 0     | 0     | 0     |
| B <sub>max</sub> | 0,2                  | 0,25 | 1,30 | 0,025 | 0,02  | 0,3  | 0,25 | 0,08 | 0,3  | 0,03  | 0,022 | 0,01  | 0,01  |
| <b>C</b>         | 0,46                 | 0,23 | 0,63 | 0,009 | 0,011 | 0,05 | 0,05 | 0,01 | 0,19 | 0,017 | 0,013 | 0,001 | 0,021 |
| C <sub>min</sub> | 0,44                 | 0,17 | 0,6  | 0     | 0     | 0    | 0    | 0    | 0    | 0,01  | 0     | 0     | 0,015 |
| C <sub>max</sub> | 0,5                  | 0,35 | 0,8  | 0,025 | 0,025 | 0,25 | 0,25 | 0,03 | 0,3  | 0,03  | 0,022 | 0,01  | 0,025 |

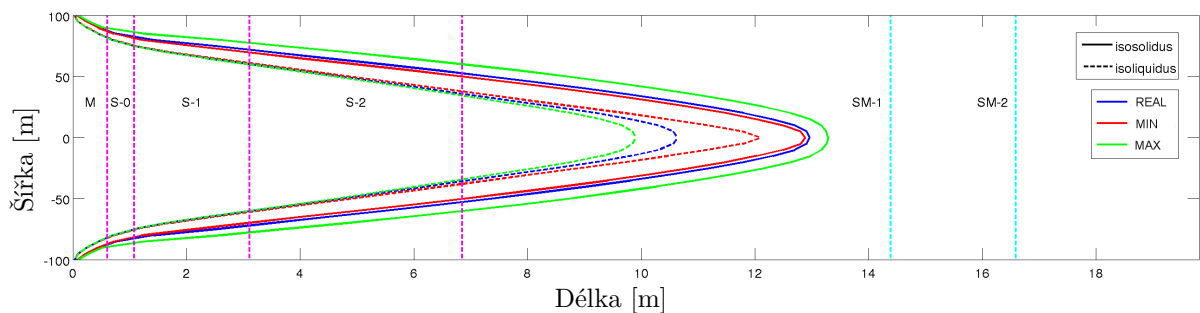
Studii byla zjištěna přímá závislost chemického složení na průběh výše uvedených termofyzikálních veličin, které v podobě vstupních parametrů významným působením ovlivňují zejména

- *teplotní pole předlitku* (viz Obrázek 4.7 ilustrující vliv odchýleného chemického složení oceli C45 na průběh povrchových teplot malého radiusu v sekundární chladicí zóně),
- *metalurgickou délku a velikost mushy zóny* (viz Obrázek 4.8 s isolikvidami a izosolidami v podélném horizontálním řezu procházející podélnou osou předlitku pro ocel S235JRH),
- *způsob solidifikace* předlitku (viz Obrázky 4.9 a 4.10) ilustrující tzv. místní interval tuhnutí oceli S355J2G3, který vyjadřuje dobu přeměny taveniny na pevnou fázi vztahenou k licí rychlosti).

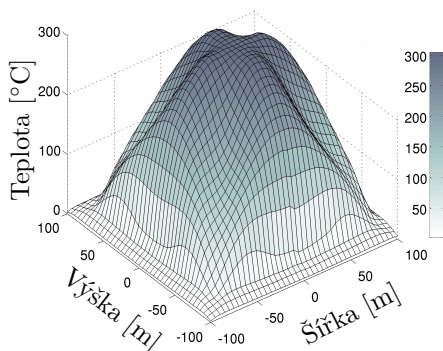
Analýza tedy potvrdila skutečnost, že pro získání přesné a spolehlivé predikce teplotního pole plynule odlévaného předlitku pomocí numerických modelů je nezbytné provádět chemický rozbor oceli v mezipánvi za účelem stanovení přesného chemického složení odlévané oceli. Podrobnější výsledky a závěry provedené analýzy lze nalézt v konferenčních příspěvcích [A6, A7] autora pojednání.



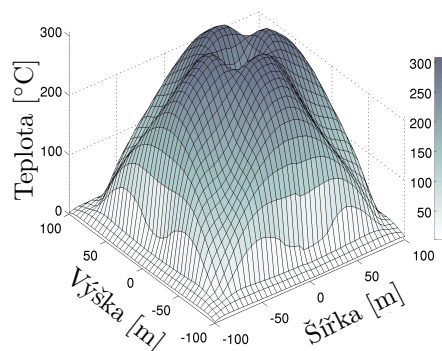
Obrázek 4.7: Vliv odchýleného chemického složení na povrchovou teplotu (ocel C45)



Obrázek 4.8: Vliv odchýleného chemického složení na izokřivky (ocel S235JRH)



Obrázek 4.9: Místní interval tuhnutí oceli S355J2G3 s chemickým složením B (viz Tabulka 4.1)



Obrázek 4.10: Místní interval tuhnutí oceli S355J2G3 s chemickým složením B<sub>max</sub> (viz Tabulka 4.1)



# Cíle dizertační práce a závěr

## 5.1 Cíle dizertační práce

Cíle dizertační práce je možné formulovat do následujících čtyř hlavních skupin:

1. *Vývoj a implementace numerických modelů ZPO.* V rámci řešení dizertační práce bude metodami kapitoly 2 s důrazem na metodu kontrolních objemů vyvinut a implementován 3D numerický model plynule odlévaného sochorového předlitku. Důraz bude kladen na sochorový předlitek čtvercového průřezu, protože pro tento formát jsou dostupná provozní data z oceláren Třinecké železářny, a. s. a Železiarny Podbrezová, a. s. včetně dostatečného množství provedených experimentů na tzv. teplých modelech, které poskytují numerickému modelu informaci o rozložení koeficientu přestupu tepla konkrétních chladících trysek sekundární zóny ZPO. Numerický model bude rovněž implementován pro sochorový předlitek kruhového průřezu, jehož vývoj a verifikace jsou ale limitovány nedostatkem reálných provozních dat a rovněž absencí experimentů trysek na teplých modelech ve tvaru válce. Vývoj modelu bude zaměřen na ZPO s trubkovým krystalizátorem a vodními, zejména kuželovými, chladícími tryskami v sekundární zóně. Při implementaci numerického modelu bude využito možnosti paralelizace na GPU, která byla nastíněna v oddíle 2.7. Jak již bylo v oddíle 4.1.3 naznačeno, paralelizací výpočtu numerického modelu na grafických jednotkách lze očekávat výrazné zrychlení výpočtu teplotního pole předlitku, zkrácení výpočetního času a tedy zefektivnění činnosti optimalizačních algoritmů, které by mohly díky paralelizaci řešit optimální řízení provozu ZPO v reálném čase.
2. *Validace numerického modelu.* Vyvinutý numerický model sochorového předlitku čtvercového formátu bude verifikován s dostupnými provozními daty z reálného provozu ZPO. Pro sochorový předlitek kruhového formátu nelze z důvodu nedostupnosti provozních dat a měření verifikaci zaručit. Zároveň budou statistickým zpracováním provozních dat získány vstupní údaje pro úlohu stochastické optimalizace provozu ZPO.
3. *Zpracování experimentů trysek na teplých modelech.* Experimenty pro stanovení koeficientu přestupu tepla pod chladícími tryskami jsou na teplých modelech prováděny pro určité konfigurace provozních parametrů, např. průtočné množství chladící vody, tlak v ústí trysky, rychlost posuvu (tj. líčí rychlost při provozu ZPO) apod. Z důvodu finanční a časové náročnosti experimentů není možné provádět velké množství uvedených experimentů pro získání detailního chování distribuce koeficientu přestupu tepla pro velký rozsah provozních parametrů. V rámci dizertační práce tedy budou dostupná data z experimentů zpracována a bude vytvořen nástroj, který bude na základě provedených experimentů umožňovat stanovit odhad a chování koeficientu přestupu tepla pro provozní parametry, pro které nejsou dostupné výsledky z experimentálních měření na teplých modelech.

4. *Optimalizace provozu ZPO.* V rámci řešení dizertační práce bude implementován stochastický optimalizační algoritmus pro optimální řízení provozu ZPO. Důraz bude kladen optimalizaci provozních parametrů ZPO se zaměřením na nestandardní a havarijní situace, jak již bylo naznačeno v kapitolách 3 a 4. Snahou je optimálně řešit uvedené provozní situace tak, aby byla zaručena bezpečnost a plynulost výroby se současným požadavkem na přijatelnou kvalitu odlévaných předlitků, tj. např. zamezit vzniku vad. Příkladem zmíněných nestandardních situací provozu ZPO jsou např. výpadky chladících okruhů sekundární zóny ZPO, zanesení chladících trysek a s tím spojený pokles odvodu tepla z předlitku nebo náhlé změny licí rychlosti. Pro optimalizační účely lze předpokládat využití algoritmu progressive hedging (viz oddíl 3.3.4) a scénářového přístupu (viz oddíl 3.3.3), kdy jednotlivé provozní situace na ZPO budou reprezentovány odpovídajícím počtem scénářů. Pro řešení jednotlivých podúloh algoritmu progressive hedging se předpokládá využití heuristických algoritmů (viz oddíl 3.4), jejichž použití v úloze optimálního řízení ZPO již bylo úspěšně prokázáno. Základním kamenem optimalizačního algoritmu pak bude vytvořený paralelizovaný numerický model teplotního pole předlitku, který je jedním z cílů dizertační práce.

## 5.2 Závěr

Předkládané pojednání ke státní doktorské zkoušce je souhrnem současného stavu poznání v oblasti tématu dizertační práce, dále je prezentován současný stav řešení dizertační práce, jsou specifikovány její cíle a nastíněn koncept dalšího postupu při řešení dizertační práce. První kapitola je věnována souhrnu technologie plynulého odlévání oceli, základním částem licího stroje a jejich významu, základním parametrům plynulého odlévání a dělení vad plynule odlévaných předlitků. Druhá kapitola se zabývá tvorbou a implementací numerických modelů, metodami pro modelování latentního tepla fázových přeměn. Důraz je kladen na diskretizační metodu kontrolních objemů, pro kterou jsou odvozeny výpočetní vztahy. Kapitulu rovněž tvoří úvod do paralelních výpočtů na grafických jednotkách s využitím architektury CUDA. Třetí kapitola je stručným přehledem metod optimalizace, které mají velký význam při řešení inženýrských problémů s náhodností a neurčitostí pomocí scénářového přístupu. Jednou z možných metod, které lze použít pro řešení zmíněných úloh, je diskutovaný algoritmus progressive hedging. Závěrem kapitoly je uvedena charakteristika heuristických optimalizačních metod, které lze ve spolupráci s algoritmem progressive hedging využít pro řešení optimálního řízení ZPO. Čtvrtá kapitola je souhrnem současného stavu řešení dizertační práce, jsou zde uvedeny dílčí výsledky v oblasti implementace numerických modelů a jejich paralelních výpočtů, stochastické optimalizace na zjednodušeném modelu ZPO a závěry provedené analýzy vlivu chemického složení na teplotní pole plynule odlévaného sochoru.

Cílem dizertační práce je vytvoření paralelizovaného numerického modelu teplotního pole plynule odlévaného sochorového předlitku, který bude verifikován s provozními daty a následně využit ve spolupráci se stochastickým optimalizačním algoritmem a scénářovým přístupem pro optimalizaci parametrů ZPO v případě nestandardních a havarijních situací licího stroje.

Autor předkládaného pojednání se v rámci řešení dizertační práce podílel na řešení výzkumných projektů GAČR 106/09/0940 *Numerický a stochastický model plynule odlévaných ocelových předlitků obdélníkového profilu*, GAČR P107/11/1566 *Analýza vlivu metalurgicko-materiálových a technologických parametrů kontinuálně litých ocelových předlitků na jejich kvalitu a na stabilitu pochodu*, a juniorských projektů FSI-J-10-8 *Matematické modelování a optimalizace v průmyslových aplikacích* (spoluřešitel), FSI-J-11-7 *Optimalizace a numerické modelování úloh s fázovými a strukturálními přeměnami* (spoluřešitel) a FSI-J-12-22 *Aplikace metod numerického modelování a optimalizace v inženýrských úlohách se změnou skupenství a struktury* (navrhovatel a hlavní řešitel). Autor pojednání je rovněž držitelem stipendia Brno PhD Talent.

## Seznam použitých zdrojů

- [1] BAZARAA, M. S., SHERALI, H. D., SHEETY, C. M. *Nonlinear Programming: Theory and Algorithms*. Druhé vydání. New York: John Wiley, 1993. 638 s. ISBN 0-471-55793-5.
- [2] BEER, G. *Programming the Boundary Element Method: An Introduction for Engineers*. První vydání. Chichester: Wiley & Sons, 2001. 472 s. ISBN 978-0471863335.
- [3] BERNARDIN, J. D., MUDAWAR, I. Film boiling heat transfer of droplet streams and sprays. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, ročník 40, č. 11, 1997: s. 2579–2593. ISSN 0017-9310.
- [4] BIRGE, J. R., LOUVEAUX, F. *Introduction to Stochastic Programming*. Springer Series in Operations Research, New York: Springer Verlag, 1997. 445 s. ISBN 0-387-98217-5.
- [5] BÖHM, Z., CAGAŠ, J., DOLEJŠÍ, Z., KUČERA, J., PĚTROŠ, J., ŠMRHA, L. *Plynulé odlévání oceli*. První vydání. Praha: SNTL Nakladatelství technické literatury, 1992. 448 s. ISBN 80-03-00661-9.
- [6] ÇENGEL, Y., GHAJAR, A. *Heat and Mass Transfer: Fundamentals and Applications*. Čtvrté vydání. New York: McGraw-Hill, 2010. 924 s. ISBN 978-0077366643.
- [7] CHAKRABORTI, N., KUMAR, K. S., ROY, G. G. A heat transfer study of the continuous caster mold using a finite volume approach coupled with genetic algorithms. *Journal of materials engineering and performance*, ročník 12, č. 4, 2003: s. 430–435. ISSN 1059-9495.
- [8] CHANG, Y.-H., ZHANG, J.-Q., Development and Application of Dynamic Secondary Cooling Control Model for Beam Blank Casting Based on FEM. In *Manufacturing processes and systems, Advanced Materials Research*, ročník 148-149, Zurich: Trans Tech Publications, 2011, s. 569–574. ISBN 978-0-87849-201-5.
- [9] CHAUDHURI, S., SINGH, R. K., PATWARI, K., MAJUMDAR, S., RAY, A. K., SINGH, A. K. P., NEOGI, N. Design and implementation of an automated secondary cooling system for the continuous casting of billets. *ISA Transactions*, ročník 49, č. 1, 2010: s. 121–129. ISSN 0019-0578.
- [10] CHO, K.-H., KIM, B.-M. Numerical analysis of secondary cooling in continuous slab casting. *Journal of materials science & technology*, ročník 24, č. 3, 2008: s. 389–390. ISSN 1005-0302.
- [11] DOLEJŠÍ, Z., JUREČKA, P., MOLÍNEK, J., PŘÍHODA, M., RÉDR, M. *Plynulé odlévání oceli (Poradenská příručka č. 42/1): díl I. Tepelně technické poměry při plynulém odlévání oceli*. Druhé vydání. Praha: Technickoekonomický výzkumný ústav hutního průmyslu, 1989. 383 s.
- [12] DOLEJŠÍ, Z., PŘÍHODA, M., MOLÍNEK, J., JUREČKA, P., VESELÝ, K. *Plynulé odlévání oceli (Poradenská příručka č. 42/2): díl II. Nové systémy v technologii plynulého odlévání oceli*. První vydání. Praha: Technickoekonomický výzkumný ústav hutního průmyslu, 1988. 383 s.
- [13] EMI, T.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Surface Defects on Continuously Cast Strands. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.

- 
- [14] EVANS, L. C. *Partial Differential Equations*. Druhé vydání. Rhode Island: American Mathematical Society, 2010. 749 s. ISBN 978-0821849743.
- [15] FELLER, W. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*. Třetí vydání. New York: Wiley & Sons, 1968. 509 s. ISBN 978-0471257080.
- [16] FELLER, W. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*. Druhé vydání. New York: Wiley, 1991. 669 s. ISBN 978-0471257097.
- [17] GILLES, H. L.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Primary and Secondary Cooling Control. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [18] GONZALEZ, M., GOLDSCHMIT, M., ASSANELLI, A., BERDAGUER, E., DVORKIN, E. Modeling of the solidification process in a continuous casting installation for steel slabs. *Metallurgical and materials transactions B: Process metallurgy and materials processing science*, ročník 34, č. 4, 2003: s. 455–473. ISSN 1073-5615.
- [19] GUO, B.-Z., SUN, B. Numerical solution to the optimal feedback control of continuous casting process. *Journal of global optimization*, ročník 39, č. 2, 2007: s. 171–195. ISSN 0925-5001.
- [20] HANLEY, P. J., KOLLBERG, S. G.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Electromagnetic Methods for Continuous Casting. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [21] HARDIN, R. A., LIU, K., KAPOOR, A., BECKERMAN, C. A transient simulation and dynamic spray cooling control model for continuous steel casting. *Metallurgical and materials transactions B: Process metallurgy and materials processing science*, ročník 34, č. 3, 2003: s. 297–306. ISSN 1073-5615.
- [22] HEINRICH, J. C.: *Handbook of Numerical Heat Transfer*, kapitola Finite-Element Method. Druhé vydání. New York: Wiley & Sons, 2006, s. 91–124. ISBN 978-0471348788.
- [23] HORSKÝ, J., RAUDENSKÝ, M., Measurement of heat transfer characteristics of secondary cooling in continuous casting. In *Proceedings of 14th Conference on Metallurgy and Materials METAL 2005*, Ostrava: Tanger, s.r.o., 2005, s. 1–8. ISBN 80-86840-13-1.
- [24] INCROPERA, F. P., DEWITT, D. P., BERGMAN, T. L., LAVINE, A. S. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer*. 6. vydání. New York: Wiley & Sons, 2010. 886 s. ISBN 978-0470881453.
- [25] JABRI, K., DUMUR, D., GODOY, E., MOUCHETTE, A., BELE, B. Particle swarm optimization based tuning of a modified smith predictor for mould level control in continuous casting. *Journal of process control*, ročník 21, č. 2, 2011: s. 263–270. ISSN 0959-1524.
- [26] JANOSCH, E. Plynulé odlévání sochorových a blokových předlitků. *Hutnické aktuality*, ročník 30, č. 10, 1989: s. 1–44. ISSN 0322-8525.
- [27] JOHNSON, C. *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. První vydání. New York: Dover Publications, 2009. 288 s. ISBN 978-0486469003.
- [28] JURIC, D., TRYGGVASON, G. A Front-Tracking Method for Dendritic Solidification. *Journal of Computational Physics*, ročník 123, č. 1, 1996: s. 127–148. ISSN 0021-9991.
- [29] KALL, P., WALLACE, S. W. *Stochastic Programming*. Druhé vydání. Chichester: John Wiley & Sons, 1994. 326 s.
- [30] KLIMEŠ, L.: *Stochastic Programming Algorithms*. Diplomová práce, Vysoké učení technické v Brně, 2010, vedoucí práce RNDr. Pavel Popela, Ph.D.
- [31] KOR, G. J. W., GLAWS, P. C.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Ladle Operations. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [32] KOTRBÁČEK, P., LUKS, T., HORSKÝ, J.: Měření chladících účinků trysek konti, etapa I pro ŽP VVC s.r.o. Technická zpráva, Laboratoř přenosu tepla a proudění, FSI VUT v Brně, 2010.

- 
- [33] KREITH, F., MANGLIK, R. M., BOHN, M. S. *Principles of Heat Transfer*. 7. vydání. Pacific Grove: CL Engineering, 2010. 784 s. ISBN 978-0495667704.
- [34] LEE, K. Y., EL-SHARKAWI, M. A. *Modern Heuristic Optimization Techniques: Theory and Applications to Power Systems*. První vydání. Wiley – IEEE Press, 2008. ISBN 978-0471457114.
- [35] LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. První vydání. Cambridge University Press, 2002. 578 s. ISBN 978-0521009249.
- [36] LI, C.-Y., GARIMELLA, S. V., SIMPSON, J. Fixed-grid front-tracking algorithm for solidification problems, part I: Method and validation. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, ročník 43, č. 2, 2003: s. 117–141. ISSN 10407790.
- [37] LIU, G. R. *Mesh Free Methods: Moving Beyond the Finite Element Method*. Druhé vydání. Boca Raton: CRC Press, 2009. 792 s. ISBN 978-0849312380.
- [38] LIU, K., ZHANG, J. Numerical analysis of optimum soft reduction amount for continuous casting slab. *Metalurgia International*, ročník 17, č. 4, 2012: s. 14–18. ISSN 1582-2214.
- [39] MA, H., WANG, Q., LI, Y.-G., LU, Y.-J., HE, S. Optimization on the secondary cooling patterns for wide and thick continuous casting slab corner. *Metalurgia International*, ročník 17, č. 6, 2012: s. 30–34. ISSN 1582-2214.
- [40] MACHÁČKOVÁ, A., KOCICH, R. *Sdílení tepla a proudění*. První vydání. Ostrava: VŠB – Technická univerzita Ostrava, 2012. 187 s. ISBN 978-80-248-2576-2.
- [41] MAUDER, T. Optimization Methods for the Secondary Cooling Zone of a Continuous Casting Process of Steel Slabs. *Strojárstvo/Strojírenství*, ročník 2009, 2009: s. 175–176. ISSN 1335-2938.
- [42] MAUDER, T., KAVIČKA, F., ŠTĚTINA, J., FRANĚK, Z., MASARIK, M., A Mathematical & Stochastic Modelling of the Concasting of Steel Slabs. In *Proceeding of 18th International conference on metallurgy and materials METAL 2009*, Ostrava: Tanger, s.r.o., 2009, s. 41–48. ISBN 978-80-87294-10-9.
- [43] MAUDER, T., ŠANDERA, V., ŠTĚTINA, J. A fuzzy-based optimal control algorithm for a continuous casting process. *Materiali in tehnologije*, ročník 46, č. 4, 2012: s. 325–328.
- [44] MAUDER, T., ŠANDERA, V., ŠTĚTINA, J., ŠEDA, M. Optimization of the quality of continuously cast steel slabs using the firefly algorithm. *Materiali in tehnologije*, ročník 45, č. 4, 2011: s. 347–350. ISSN 1580-2949.
- [45] MENG, Y. A., THOMAS, B. G. Heat-transfer and solidification model of continuous slab casting: CON1D. *Metallurgical and materials transactions B: Process metallurgy and materials processing science*, ročník 34, č. 5, 2003: s. 685–705. ISSN 1073-5615.
- [46] MIETTINEN, J. Calculation of Solidification-Related Thermophysical Properties for Steels. *Metallurgical and Materials Transactions B*, ročník 28B, č. 2, 1997: s. 281–297. ISSN 1073-5615.
- [47] MIETTINEN, J., LOUHENKILPI, S., KYTÖNEN, H., LAINE, J. IDS: Thermodynamic–kinetic–empirical tool for modelling of solidification, microstructure and material properties. *Mathematics and Computers in Simulation*, ročník 80, č. 7, 2010: s. 1536–1550. ISSN 0378-4754.
- [48] MILLS, K. C.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Mold Powders for Continuous Casting. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [49] MUHIEDDINE, M., CANOT, E., MARCH, R. Various Approaches for Solving Problems in Heat Conduction with Phase Change. *International Journal On Finite Volumes*, ročník 6, č. 1, 2009.
- [50] NOCEDAL, J., WRIGHT, S. *Numerical Optimization*. Druhé vydání. New York: Springer, 2006. 686 s. ISBN 978-0387303031.

- 
- [51] PATANKAR, S. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. První vydání. New York: Taylor & Francis, 1980. 214 s. ISBN 978-0891165224.
- [52] PEPPER, D. W.: *Handbook of Numerical Heat Transfer*, kapitola Meshless Methods. Druhé vydání. New York: Wiley & Sons, 2006, s. 225–248. ISBN 978-0471348788.
- [53] PETRUS, B., ZHENG, K., ZHOU, X., THOMAS, B. G., BENTSMAN, J. Real-Time, Model-Based Spray-Cooling Control System for Steel Continuous Casting. *Metallurgical and materials transactions B: Process metallurgy and materials processing science*, ročník 42, č. 1, 2011: s. 87–103. ISSN 1073-5615.
- [54] PLAYNE, D., JOHNSON, M., HAWICK, K.: Benchmarking GPU Devices with N-Body Simulations (CSTN-077). Technická zpráva, Massey University – Albany, Auckland, 2009.
- [55] PLETCHER, R. H.: *Handbook of Numerical Heat Transfer*, kapitola Finite-Difference Method. Druhé vydání. New York: Wiley & Sons, 2006, s. 53–90. ISBN 978-0471348788.
- [56] RAO, S. S. *Engineering Optimization: Theory and Practice*. Čtvrté vydání. New York: Wiley & Sons, 2009. 840 s. ISBN 978-0470183526.
- [57] RARDIN, R. L. *Optimization in Operations Research*. První vydání. New Jersey: Prentice Hall, 1997. 990 s. ISBN 978-0023984150.
- [58] RAUDENSKÝ, M., HORSKÝ, J. Secondary cooling in continuous casting and Leidenfrost temperature effects. *Ironmaking & Steelmaking*, ročník 32, č. 2, 2005: s. 159–164. ISSN 0301-9233.
- [59] RAUDENSKÝ, M., POHANKA, M., HORSKÝ, J.: *Heat Transfer VII*, kapitola Combined inverse heat conduction method for highly transient processes. Southampton: WIT Press, 2002, s. 35–42. ISBN 1-85312-906-2.
- [60] ROCKAFELLAR, R. T., WETS, R. J.-B.: Scenarios and Policy Aggregation in Optimization Under Uncertainty. In *Mathematics of Operation Research*, ročník 16, Maryland: Informs, 1991, s. 119–147.
- [61] SAMARASEKERA, I. V., CHOW, C.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Continuous Casting of Steel Billets. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [62] SANDERS, J., KANDROT, E. *CUDA by Example: An Introduction to General-Purpose GPU Programming*. První vydání. Boston: Addison-Wesley Professional, 2010. 312 s. ISBN 978-0131387683.
- [63] SANTOS, C., SPIM, J., GARCIA, A. Mathematical modeling and optimization strategies (genetic algorithm and knowledge base) applied to the continuous casting of steel. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, ročník 16, č. 5–6, 2003: s. 511–527. ISSN 0952-1976.
- [64] SAUTER, S. A., SCHWAB, C. *Boundary Element Methods*. První vydání. New York: Springer, 2010. 517 s. ISBN 978-3540680925.
- [65] SCHADE, J. H., O'MALLEY, R. J., KEMENY, F. L., SAHAI, Y., ZACHARIAS, D. J.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Tundish Operations. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [66] SCHWERDTFEGER, K. J.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Heat Withdrawal in Continuous Casting of Steel. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [67] SHEN, H. F., HARDIN, R. A., MACKENZIE, R., BECKERMANN, C. Simulation using realistic spray cooling for the continuous casting of multi-component steel. *Journal of materials science and technology*, ročník 18, č. 4, 2002: s. 311–314. ISSN 1005-0302.
- [68] SLADEK, J., SLADEK, V. *Advances in Meshless Methods*. První vydání. Los Angeles: Tech Science Press, 2006. 320 s. ISBN 978-0971788022.
- [69] STEFANESCU, D. M. *Science and Engineering of Casting Solidification*. Druhé vydání. New York: Springer, 2009. 400 s. ISBN 978-1441945099.

- [70] SWAMINATHAN, C. R., VOLLER, V. R. A general enthalpy method for modeling solidification processes. *Metallurgical and materials transactions B: Process metallurgy and materials processing science*, ročník 23, č. 5, 1992: s. 651–664. ISSN 0360-2141.
- [71] THOMAS, B. G.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Modeling of Continuous Casting. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [72] TOTTEN, G. E., BATES, C. E., CLINTON, N. A. *Handbook of Quenchants and Quenching Technology*. Ohio: ASM International, 1993. 507 s.
- [73] TSZENG, T., IM, Y., KOBAYASHI, S. Thermal analysis of solidification by the temperature recovery method. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, ročník 29, č. 1, 1989: s. 107 – 120. ISSN 0890-6955.
- [74] VERSTEEG, H., MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Druhé vydání. New Jersey: Prentice Hall, 2007. 520 s. ISBN 978-0131274983.
- [75] VILLANI, M., LARSSON, R. The multivariate split normal distribution and asymmetric principal components analysis. *Communications in statistics: theory and methods*, ročník 35, č. 6, 2006: s. 1123–1140. ISSN 0361-0926.
- [76] VORSTER, W. J. J., SCHWINDT, S. A., SCHUPP, J., KORSUNSKY, A. M. Analysis of the spray field development on a vertical surface during water spray-quenching using a flat spray nozzle. *Applied Thermal Engineering*, ročník 29, č. 7, 2009: s. 1406–1416.
- [77] ŠANDERA, V., MAUDER, T., Optimization algorithm for continuous casting process. In *Proceedings of 17th International conference on soft computing MENDEL 2011*, Brno: Vysoké učení technické v Brně, 2011, s. 252–258. ISBN 978-80-214-4302-0.
- [78] ŠTĚTINA, J.: *Optimalizace parametrů lití sochorů pomocí modelu teplotního pole*. Habilitační práce, Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, Ostrava, 2008.
- [79] ŠTĚTINA, J., KAVIČKA, F. The influence of the chemical composition of steels on the numerical simulation of a continuously cast slab. *Materiali in tehnologije*, ročník 45, č. 4, 2011: s. 363–367. ISSN 1580-2949.
- [80] ŠTĚTINA, J.: *Dynamický model teplotního pole plynule odlévané bramy*. Dizertační práce, Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava, Ostrava, 2007.
- [81] ŠTĚTINA, J., KAVIČKA, F., DOBROVSKÁ, J., ČAMEK, L., MASARIK, M. Optimization of a concasting technology via a dynamic solidification model of a slab caster. *Materials Science Forum*, ročník 475-479, č. 5, 2005: s. 3831–3834. ISSN 0255-5476.
- [82] WANG, X. Y., LIU, Q., WANG, B., WANG, X., QING, J. S., HU, Z. G., SUN, Y. H. Optimal control of secondary cooling for medium thickness slab continuous casting. *Ironmaking & Steelmaking*, ročník 38, č. 7, 2011: s. 552–560. ISSN 0301-9233.
- [83] 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, č. 19-20, 2008: s. 4902–4910.
- [84] WETS, R. J.-B.: An Aggregation Principle in Scenario Analysis and Stochastic Optimization. In *Algorithms and Model Formulations in Mathematical Programming*, editace S. W. Wallace, New York: Springer Verlag, 1989.
- [85] WIKIPEDIA: Wikipedia.org: CUDA. online, cit. 16. 7. 2012.  
URL <http://en.wikipedia.org/wiki/CUDA>
- [86] WOLF, M. M.: *Making, Shaping and Treating of Steel: Casting*, kapitola Historical Aspects and Key Technologies. 11. vydání. Warrendale: Assn of Iron & Steel Engineers, 2003. ISBN 978-0930767044.
- [87] YANG, X.-S. *Nature-Inspired Metaheuristic Algorithms*. Cambridge: Luniver Press, 2010. 160 s. ISBN 978-1905986286.

- [88] YANG, X.-S., Nature-inspired flower pollination algorithm. In *Proceedings of 18th Conference on Soft Computing MENDEL 2012*, Vysoké učení technické v Brně, 2012, s. 1–6. ISBN 978-80-214-4540-6.
- [89] ZHANG, Q., YANG, L. D., WEN, H. A Mathematical Modeling of Heat Transfer in Continuous Casting Slab. *Applied Mechanics and Materials*, ročník 44-47, 2011: s. 33–37. ISSN 1662-7482.
- [90] ZHANG, X. Z., JIANG, Z. Y., TIEU, A. K., ZHU, H. T., TIAN, Z. W., Analysis of surface temperature and thermal stress field of slab continuous casting. In *Proceedings of conference 12th International Symposium on Advances in Abrasive Technology*, ročník 76-78, Zurich: Trans Tech Publications, 2009, s. 554–559. ISBN 978-0-87849-314-2.

### Vlastní publikace vztahující se k tématu dizertační práce

- [A1] KLIMEŠ, L., CHARVÁT, P., OSTRÝ, M. Challenges in computer modeling of phase change materials. *Materiali in tehnologije*, ročník 46, č. 4, 2012: s. 335–338. ISSN 1580-2949.
- [A2] KLIMEŠ, L., MAUDER, T., ŠTĚTINA, J., Numerical Modelling and Optimization Including Stochastic Approach in Engineering Problems. In *Sborník přednášek z konference Teorie a praxe výroby a zpracování oceli 2011*, Ostrava: Tanger s.r.o., 2011, s. 70–76. ISBN 978-80-87294-21-5.
- [A3] KLIMEŠ, L., MAUDER, T., ŠTĚTINA, J., Stochastic Approach and Optimal Control of Continuous Steel Casting Process by Using Progressive Hedging Algorithm. In *Sborník příspěvků 20. mezinárodní konference METAL 2011*, Ostrava: Tanger, s.r.o., 2011, s. 146–151. ISBN 978-80-87294-22-2.
- [A4] KLIMEŠ, L., POPELA, P., An Implementation of Progressive Hedging Algorithm for Engineering Problems. In *16th International Conference on Soft Computing MENDEL 2010*, Vysoké učení technické v Brně, 2010, s. 459–464. ISBN 978-80-214-4120-0.
- [A5] KLIMEŠ, L., POPELA, P., ŠTĚTINA, J., Decomposition Approach Applied to Stochastic Optimization of Continuous Steel Casting. In *17th International Conference on Soft Computing MENDEL 2011*, Vysoké učení technické v Brně, 2011, s. 314–319. ISBN 978-80-214-4302-0.
- [A6] KLIMEŠ, L., ŠTĚTINA, J., PARILÁK, L., BUČEK, P., Influence of chemical composition of cast steel on temperature field of continuously cast billets. In *Sborník příspěvků 21. mezinárodní konference materiálů a metalurgie METAL 2012*, Tanger, s.r.o., Ostrava, Tanger, s.r.o., Ostrava, 2012, s. 34–39. ISBN 978-80-87294-29-1.
- [A7] KLIMEŠ, L., ŠTĚTINA, J., PARILÁK, L., BUČEK, P., Study of thermal behaviour of continuously cast billets. In *Sborník příspěvků 31. mezinárodní konference Setkání kateder mechaniky tekutin a termomechaniky*, Brno: Vysoké učení technické v Brně, 2012, s. 93–96. ISBN 978-80-214-4529-1.
- [A8] ŠTĚTINA, J., KAVIČKA, F., KLIMEŠ, L., MASARIK, M., ŠAŇA, Z., Transient simulation temperature field for continuous casting steel slab. In *Sborník příspěvků 20. mezinárodní konference materiálů a metalurgie METAL 2011*, 2011. ISBN 978-80-87294-22-2.
- [A9] ŠTĚTINA, J., KAVIČKA, F., MAUDER, T., KLIMEŠ, L., Transient simulation temperature field for continuous casting steel billet and slab. In *METEC InSteelCon 2011*, Düsseldorf, Německo: TEMA Technologie Marketing AG, 2011, s. 13–23.
- [A10] ŠTĚTINA, J., KAVIČKA, F., MAUDER, T., KLIMEŠ, L., MASARIK, M., ŠAŇA, Z., Optimization of secondary cooling in order to achieve higher surface temperatures at the slab unbending point. In *Sborník příspěvků 21. mezinárodní konference materiálů a metalurgie METAL 2012*, Ostrava: Tanger s.r.o., 2012, s. 36–41. ISBN 978-80-87294-29-1.



- [A11] ŠTĚTINA, J., KLIMEŠ, L., MAUDER, T., KAVIČKA, F. Final-structure prediction of continuously cast billets. *Materiali in tehnologije*, ročník 46, č. 2, 2012: s. 155–160. ISSN 1580-2949.
- [A12] ŠTĚTINA, J., MAUDER, T., KLIMEŠ, L., MASARIK, M., Increasing the surface temperature at the slab continuous casting straightening. In *Sborník příspěvků 31. mezinárodní konference Setkání kateder mechaniky tekutin a termomechaniky 2012*, Brno: Vysoké učení technické v Brně, 2012, s. 217–220. ISBN 978-80-214-4529-1.

### Ostatní vlastní publikace

- [B1] CHARVÁT, P., KLIMEŠ, L., MAUDER, T., An air-PCM heat exchanger for thermal storage in air-based solar thermal systems. In *Sborník příspěvků 31. mezinárodní konference Setkání kateder mechaniky tekutin a termomechaniky*, Brno: Vysoké učení technické v Brně, 2012, s. 75–78. ISBN 978-80-214-4529-1.
- [B2] CHARVÁT, P., KLIMEŠ, L., OSTRÝ, M., MAUDER, T., PCM-based thermal storage for solar air systems. In *Proceedings of 10th International Conference on Phase-Change Materials and Slurries for Refrigeration and Air Conditioning*, Kobe: International Institute of Refrigeration, Japan Society of Refrigerating and Air Conditioning Engineers, 2012, s. 211–216. ISBN 978-2-913149-91-5.
- [B3] CHARVÁT, P., MAUDER, T., KLIMEŠ, L., OSTRÝ, M., Simulation of the performance of a solar air collector with an absorber containing phase change material. In *Proceedings of 12th Conference on Energy Storage Innostock 2012*, Lleida: GREA Innovacio Concurrent, University of Lleida, 2012, s. 146–152. ISBN 978-84-938793-3-4.
- [B4] CHARVÁT, P., OSTRÝ, M., MAUDER, T., KLIMEŠ, L., A Solar Air Collector with Integrated Latent Heat Thermal Storage. In *Conference Proceedings of international conference Experimental Fluid Mechanics 2011*, Liberec: Technická univerzita v Liberci, 2011, s. 688–692. ISBN 978-80-7372-784-0.
- [B5] CHARVÁT, P., OSTRÝ, M., MAUDER, T., KLIMEŠ, L. A solar air collector with integrated latent heat thermal storage. *EPJ Web of Conferences*, ročník 25, č. 1, 2012: s. 01028.1–01028.5. ISSN 2100-014X.
- [B6] KLIMEŠ, L., User's Code Implementation for TRNSYS Simulations. In *Sborník příspěvků z konference 30. setkání kateder mechaniky tekutin a termomechaniky*, Liberec: Technická univerzita v Liberci, 2011, s. 93–96. ISBN 978-80-7372-747-5.
- [B7] KLIMEŠ, L., CHARVÁT, P., Heuristic optimization of fluid temperature attenuator design with phase change material. In *18th Conference on Soft Computing MENDEL 2012*, Vysoké učení technické v Brně, 2012, s. 338–343. ISBN 978-80-214-4540-6.
- [B8] KLIMEŠ, L., CHARVÁT, P., ŠTĚTINA, J., OSTRÝ, M., Stochastic optimization of a multi-layer wall design with phase change materials. In *Proceedings of 12th Conference on Energy Storage Innostock 2012*, Lleida: GREA Innovacio Concurrent, University of Lleida, 2012, s. 168–177. ISBN 978-84-938793-3-4.
- [B9] OSTRÝ, M., KLUBAL, T., CHARVÁT, P., KLIMEŠ, L., Comparison of different latent heat storage techniques integrated in building structures. In *Proceedings of 12th Conference on Energy Storage Innostock 2012*, Lleida: GREA Innovacio Concurrent, University of Lleida, 2012, s. 140–145. ISBN 978-84-938793-3-4.

# Seznam použitých symbolů a zkratek

| Symbol                   | Rozměr   | Veličina  |
|--------------------------|--|---|
| $H$                      | $[\text{J m}^{-3}]$  | objemová entalpie   |
| $T$                      | $[\text{K}, ^\circ\text{C}]$                                       | teplota   |
| $T_{\text{ref}}$         | $[\text{K}, ^\circ\text{C}]$                                       | referenční teplota  |
| $T_\ell$                 | $[\text{K}, ^\circ\text{C}]$                                       | licí teplota  |
| $T_\infty$               | $[\text{K}, ^\circ\text{C}]$                                       | teplota okolí, teplota volného proudu   |
| $T_w$                    | $[\text{K}, ^\circ\text{C}]$                                       | teplota chladící vody   |
| $T_{\text{povrch}}$      | $[\text{K}, ^\circ\text{C}]$                                       | teplota povrchu předlitku   |
| $\rho$                   | $[\text{kg m}^{-3}]$   | hustota   |
| $L_f$                    | $[\text{J kg}^{-1}]$   | latentní teplo fázové přeměny   |
| $f_s$                    | $[-]$  | zlomek podílu tuhé fáze   |
| $t$                      | $[\text{s}]$   | čas   |
| $(x, y, z)$              | $[\text{m}, \text{m}, \text{m}]$                                   | souřadnice kartézského souřadného systému   |
| $(r, \phi, \omega)$      | $[\text{m}, \text{rad}, \text{m}]$                                 | souřadnice cylindrického souřadného systému   |
| $k$                      | $[\text{W m}^{-1}\text{K}^{-1}]$                                   | tepelná vodivost  |
| $v_z, v_\phi$            | $[\text{m s}^{-1}]$  | licí rychlost   |
| $c$                      | $[\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$                                  | měrná tepelná kapacita  |
| $c_{\text{eff}}$         | $[\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}]$                                  | efektivní tepelná kapacita  |
| $\dot{q}_{\text{gen}}$   | $[\text{W m}^{-3}]$  | měrný vnitřní zdroj tepla   |
| $Q$                      | $[\text{W}]$   | tepelný tok   |
| $\dot{Q}_{\text{gen}}$   | $[\text{W}]$   | tepelný tok generovaný uvnitř kontrolního objemu  |
| $\dot{Q}_{\text{pohyb}}$ | $[\text{W}]$   | tepelný tok do kontrolního objemu vlivem pohybu předlitku   |
| $\dot{q}$                | $[\text{W m}^{-2}]$  | měrný tepelný tok   |
| $\mathbf{x}$             | $[\text{m}, \text{m}, \text{m}], [\text{m}, \text{rad}, \text{m}]$ | vektor prostorových souřadnic (kap. 2)  |
| $\mathbf{x}$             | $[-]$  | vektor rozhodovací proměnné, rozhodnutí prvního stupně (kap. 3)                                   |
| $\mathbf{y}$             | $[-]$  | rozhodnutí druhého stupně (kap. 3)  |
| $\mathbf{n}$             | $[\text{m}, \text{m}, \text{m}], [\text{m}, \text{rad}, \text{m}]$ | normálový vektor  |
| $h$                      | $[\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}]$                                   | koeficient přestupu tepla   |
| $h_{\text{red}}$         | $[\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}]$                                   | redukováný koeficient přestupu tepla  |
| $h_{\text{válec}}$       | $[\text{W m}^{-2}\text{K}^{-1}]$                                   | fiktivní koeficient přestupu tepla v místě dotyku válce a předlitku                               |
| $\sigma$                 | $[\text{W m}^{-2}\text{K}^{-4}]$                                   | Stefanova-Boltzmannova konstanta,<br>$\sigma = 5,671 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2}\text{K}^{-4}$ |
| $\varepsilon$            | $[-]$  | emisivita (poměrná zářivost)  |
| $I$                      | $[\ell \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}]$                               | měrné množství dopadající vody na povrch  |

|  |                      |   |
|--|----------------------|---|
| $(i, j, k)$                            | $[-, -, -]$          | indexy diskretizovaných kontrolních objemů<br>v souřadných osách                    |
| $\tau$                                 | $[-]$                | časový index diskretizace   |
| Bi                                     | $[-]$                | Biotovo číslo   |
| $\Delta x, \Delta y, \Delta z$         | $[m, m, m]$          | diskretizační kroky kartézského souřadného systému                                  |
| $\Delta r, \Delta \phi, \Delta \omega$ | $[m, \text{rad}, m]$ | diskretizační kroky cylindrického souřadného systému                                |
| $\Delta t$                             | $[s]$                | časový diskretizační krok   |
| $L$                                    | $[m]$                | charakteristický rozměr   |
| $V$                                    | $[m^3]$              | objem   |
| $S$                                    | $[m^2]$              | velikost povrchu (plocha)   |
| $\Delta E_{\text{st}}$                 | $[J]$                | změna vnitřní energie kontrolního objemu  |
| $\dot{E}_{\text{in}}$                  | $[W]$                | energie vstupující do kontrolního objemu<br>za jednotku času                        |
| $\dot{E}_{\text{gen}}$                 | $[W]$                | energie vnitřního zdroje kontrolního objemu<br>za jednotku času                     |
| $\dot{E}_{\text{out}}$                 | $[W]$                | energie vystupující z kontrolního objemu<br>za jednotku času                        |
| $\dot{E}_{\text{st}}$                  | $[W]$                | energie uchovaná v kontrolním objemu (ve formě<br>vnitřní energie) za jednotku času |
| $\Psi_{i,j,k}$                         | $[-]$                | koeficient vztažený k teplotě $T_{i,j,k}$   |
| $n_\alpha$                             | $[-]$                | počet kontrolních objemů v ose $\alpha$ souřadného systému                          |
| $\mathbf{p}$                           | $[-]$                | deterministický vektor  |
| $\xi$                                  | $[-]$                | náhodná veličina  |
| $\boldsymbol{\xi}$                     | $[-]$                | náhodný vektor  |
| $(\Omega, \mathcal{A}, P)$             | $[-]$                | pravděpodobnostní prostor   |
| $\mathbb{E}(\cdot)$                    | $[-]$                | střední hodnota   |
| var                                    | $[-]$                | rozptyl   |
| $s$                                    | $[-]$                | scénář  |
| $\mathbf{w}, \mathbf{W}$               | $[-]$                | váhová proměnná   |
| $C$                                    | $[-]$                | množina přípustných řešení  |

### Zkratka Význam

|       |  |
|-------|--|
| AMD   | Advanced Micro Devices                                 |
| API   | Application Programmable Interface                     |
| CFD   | Computer Fluid Dynamics                                |
| CUDA  | Compute Unified Device Architecture                    |
| EEV   | expected result of using EV solution                   |
| EO    | expected objective                                     |
| EV    | expected value   |
| GAMS  | General Algebraic Modelling System                     |
| GPGPU | General-Purpose computing on Graphics Processing Units |
| GPU   | Graphics Processing Unit                               |
| MP    | multiprocessor   |
| MPI   | Message Passing Interface                              |
| SP    | single processor                                       |
| VSS   | value of stochastic solution                           |
| ZPO   | zařízení pro plynulé odlévání                          |