

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI  
FAKULTA ELEKTROTECHNICKÁ

Disertační práce

---

VYUŽITÍ METAMODELU PŘI NÁVRHU A ŘÍZENÍ  
ELEKTROTECHNICKÝCH ZAŘÍZENÍ

---

Ing. Karel PAVLÍČEK

Školitel: doc. Ing. Václav Kotlan, Ph.D.  
Konzultant specialista: prof. Ing. Pavel Karban, Ph.D.

duben 2019

---

## ANOTACE A KLÍČOVÁ SLOVA

---

Předkládaná disertační práce se zabývá jednou z možností, která se využívá pro snížení výpočetní náročnosti modelů komplexních úkolů současné elektrotechniky. Fyzikální děje lze matematicky popsat obecně soustavou parciálních a obyčejných diferenciálních rovnic (následně řešených numericky metodou konečných prvků). Ty je pak možné zjednodušit pomocí metamodelu (jinak také nazývaného náhradní model), vytvořeného z výsledků simulací.

Každý model má svoje vstupní parametry, ke kterým je přiřazena konkrétní hodnota vybrané výstupní veličiny. Pokud je potřeba udělat výpočet velkého množství různých variant vstupních parametrů, může celkové řešení vyžadovat velké množství času. Existuje myšlenka z dostupných výsledků těchto simulací vytvořit metamodel, pomocí kterého je následně možné odhadovat hodnotu výstupu modelu pro nové vstupní parametry. Výsledky získané pomocí metamodelu budou zatíženy chybou odhadu, nicméně došlo ke značné časové úspoře oproti řešení plného modelu.

V teoretické části práce je krátce shrnuto modelování fyzikálních polí v elektrotechnice a následně jsou v ní představeny metody pro tvorbu metamodelu používané v současné době.

V praktické části práce jsou získané poznatky použity k řešení reálné elektrotechnické úlohy z oblasti elektrického tepla. Úlohou, na které je možnost aplikace metamodelování prezentována, je hybridní laserové svařování (s indukčním předehřevem) dvou ocelových desek. To je z hlediska výpočetní náročnosti zajímavé, protože se jedná o modelování sdružené úlohy kombinující teplotní a elektromagnetické pole. Výstupem simulace je teplotní rozložení, ze kterého se následně určuje hloubka svaru. Ta je klíčovým parametrem z hlediska kvality svaru. Pomocí metamodelu je možné následně provést odhad kvality svaru i pro nové hodnoty vstupních parametrů modelu.

Pro tvorbu metamodelu je z hlediska použitých metod použita regrese s Gaussovským procesem (angl. *Gaussian Process Regression*, jinak také nazývaná jako kriging). Její hlavní výhodou je, že umožňuje odhadovat hodnotu a navíc i nejistotu odhadu. Pro srovnání s dalšími metodami jsou dále zvoleny: vícevrstvá neuronová síť a náhodný les.

Díky použití metamodelování došlo ke snížení času potřebného k získání (odhadu) hloubky svaru. Pro nové body je možné provádět odhady v řádu sekund. Důležitou otáz-

kou je kvalita metamodelu, která závisí silně na množství dostupných vstupních dat na sledovaném intervalu. V případě vhodně zvolených vstupních dat je možné dosáhnout relativní chyby v řádu procent (oproti vypočtenému řešení).

Hlavním přínos práce spočívá v aplikační oblasti, ve které demonstruje, že pomocí metamodelování je možné získat výsledky velmi rychle. Všechny odhady jsou dle očekávání zatíženy chybou. Nicméně vzhledem ke složitosti jsou chybou zatíženy i klasické modely.

#### KLÍČOVÁ SLOVA

metamodelování, náhradní modelování, metoda plochy odezvy, metoda konečných prvků, numerická analýza, odhad parametrů modelu, matematické modelování, aproximace, modelování teplotního pole, regresní analýza, laserové svařování, hybridní laserové svařování

---

## ANOTATION AND KEYWORDS

---

The thesis deals with possibilities to reduce complex models computational costs in the domain of electrical engineering. Mathematics, particularly by a system of partial and ordinary differential equations, can be used to describe physical phenomena. Such equations are in engineering applications usually solved numerically using finite element method. It can be simplified using metamodel (known also as surrogate model) which is created from outcome of finite element simulations.

Each model has its inputs parameters which must be defined to solve one particular model variant. If many model variants computations are needed, the model is solved for each variant and it may be very time consuming. In such cases idea is to create metamodel from available simulation results. It can be afterwards used to predict model outputs for new parameter sets. Results obtained using metamodeling process add approximation error but results can be obtained very fast in comparison to original model.

In the theoretical part of the thesis physical fields modeling theory is summed up and also contemporary surrogate modeling techniques.

In the application part of the thesis is used real electrical engineering problem to demonstrate metamodeling process. The studied problem is hybrid laser welding problem (with induction preheating), two steel sheets are welded together. Such problem is very demanding from computational point of view, because it is coupled problem where both electromagnetic and thermal field must be solved. The simulation outcome is temperature distribution from which can be determined weld depth, quantifying the weld quality. A laser weld depth prediction can be done using metamodel for new variants of input model parameters.

Many different techniques might be used to create metamodel. In the thesis the primary one is Gaussian Process regression (kriging), which allows to make a prediction and also provides probability of the prediction. Two additional methods selected for comparison are: Multi Layer Perceptron Artificial Neural Network and Random Forest.

When the metamodel is used, the time needed to get information about weld depth is significantly reduced. The estimation for new model variants can be done in a scale of seconds. Very important topic is precision which depends strongly to the amount of

available input data in the studied parameter intervals. In case of well defined input data, relative approximation error is in a scale of percents.

The novelty of the work is in the application of metamodeling to interesting electroheating problem. It is demonstrated that it can be used to receive results in a very short time. As expected all the predictions suffer from approximation error. Nevertheless even finite element models can not be fully precise due to complexity of the studied phenomena.

#### KEYWORDS

metamodeling, surrogate modeling, response surface method, finite element method, numerical analysis, parameter estimation, mathematical modelling, approximation, heat transfer modelling, regression analysis, laser welding, hybrid laser welding

---

## PODĚKOVÁNÍ

---

Tímto chci poděkovat svému školiteli doc. Ing. Václavu Kotlanovi Ph.D. i svému konzultantovi prof. Ing. Pavlu Karbanovi Ph.D. za vedení mého doktorandského studia, cenné rady při zpracování disertační práce a za veškerou poskytnutou podporu. Rovněž chci poděkovat i dalším kolegům z Katedry teoretické elektrotechniky za pomoc a podporu při studiu.

Dále bych chtěl poděkovat své rodině za podporu během celého mého doktorského studia. Bez této podpory by nemohla tato práce vzniknout.

---

## PROHLÁŠENÍ

---

Předkládám tímto k posouzení disertační práci, zpracovanou během mého studia na Fakultě elektrotechnické Západočeské univerzity v Plzni.

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně s použitím uvedené odborné literatury a pramenů uvedených v seznamu, který je součástí této práce. Dále prohlašuji, že veškerý software, použitý při jejím řešení a zpracování, byl využit s respektováním všech jeho licenčních podmínek.

V Plzni dne 15. dubna 2019

Karel Pavlíček

---

SEZNAM POUŽITÝCH VELIČIN

---

$\alpha_T$	$(W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1})$	koeficient přestupu tepla prouděním
$A$	$(Wb \cdot m^{-1})$	magnetický vektorový potenciál
$B$	(T)	magnetická indukce
$c_p$	$(J \cdot m^{-3} \cdot K^{-1})$	měrná tepelná kapacita při stálém tlaku
$C$	(–)	emisivita
$D$	$(C \cdot m^{-2})$	elektrická indukce
$\varepsilon$	$(F \cdot m^{-1})$	permitivita
$E$	$(V \cdot m^{-1})$	intenzita elektrického pole
$\gamma$	$(S \cdot m^{-1})$	konduktivita
$H$	$(A \cdot m^{-1})$	intenzita magnetického pole
$I$	(A)	elektrický proud
$J$	$(A \cdot m^{-2})$	proudová hustota
$K_j$	$(A \cdot m^{-1})$	povrchový proud
$\lambda$	$(W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1})$	tepelná vodivost
$\mu$	$(H \cdot m^{-1})$	permeabilita
$\omega$	$(rad \cdot s^{-1})$	úhlová frekvence
$\varphi$	(V)	elektrický skalární potenciál
$\Phi$	(Wb)	magnetický indukční tok
$\Psi$	(C)	elektrický indukční tok
$q$	(W)	tepelný tok
$Q$	(C)	elektrický náboj
$\rho$	$(kg \cdot m^{-3})$	měrná hmotnost
$\rho_V$	$(C \cdot m^{-3})$	objemová hustota náboje
$R$	( $\Omega$ )	elektrický odpor
$\sigma$	$(W \cdot m^{-2} \cdot K^{-4})$	Stefan-Boltzmannova konstanta
$\sigma_S$	$(C \cdot m^{-2})$	povrchová hustota náboje
$t$	(s)	čas
$T$	(K)	teplota
$U$	(V)	elektrické napětí
$v$	$(m \cdot s^{-1})$	rychlost
$w$	$(W \cdot m^{-3})$	objemové vnitřní zdroje tepla
$X$	( $\Omega$ )	reaktance



---

## OBSAH

---

<b>I ÚVOD DO PROBLEMATIKY</b>	<b>5</b>
1 ÚVOD A MOTIVACE PRÁCE	6
1.1 Hlavní cíle práce . . . . .	7
1.2 Definice základních pojmů . . . . .	8
2 SOUČASNÝ STAV POZNÁNÍ	10
2.1 Proces metamodelování . . . . .	10
2.2 Příklady řešených úloh . . . . .	10
2.3 Metody používané pro tvorbu metamodelů . . . . .	12
2.4 Alternativy k metamodelování . . . . .	12
<b>II TEORETICKÁ ČÁST PRÁCE</b>	<b>13</b>
3 MODELOVÁNÍ A SIMULACE OBECNĚ	14
4 MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ V ELEKTROTECHNICE	16
4.1 Modelování elektromagnetického pole - Maxwellovy rovnice . . . . .	16
4.1.1 Elektrostatické pole . . . . .	17
4.1.2 Nestacionární elektrické proudové pole . . . . .	18
4.1.3 Nestacionární elektromagnetické pole . . . . .	19
4.2 Modelování rovnice přestupu tepla . . . . .	21
4.3 Modelování sdružených úloh . . . . .	22
5 ÚVOD DO STROJOVÉHO UČENÍ	24
6 TECHNIKY METAMODELOVÁNÍ	27
6.1 Polynomiální regrese . . . . .	27
6.2 Regrese s Gaussovským procesem (Kriging) . . . . .	30
6.2.1 Predikce pomocí Gaussovského procesu . . . . .	32
6.2.2 Výhody a nevýhody . . . . .	33
6.2.3 Příklad vytvoření metamodelu - regrese s Gaussovským procesem . . . . .	34
6.3 Umělé neuronové sítě . . . . .	37
6.3.1 Neuronová síť s radiálními bázovými funkcemi . . . . .	38
6.3.2 Vícevrstvá neuronová síť . . . . .	41

6.4	Regrese pomocí náhodných lesů - Random Forest Regression . . . . .	42
6.4.1	Rozhodovací stromy . . . . .	42
6.4.2	Příklad rozhodovacího stromu . . . . .	45
6.4.3	Příklad regresního stromu . . . . .	45
6.4.4	Od regresního stromu k náhodnému regresnímu lesu . . . . .	46
6.5	SW Frameworky používané pro tvorbu metamodelů . . . . .	48
6.5.1	Scikit-learn . . . . .	49
7	PRAKTICKÉ ASPEKTY TVORBY METAMODELŮ . . . . .	51
7.1	Problematika volby vstupních dat - Design of Experiments . . . . .	51
7.1.1	Ilustrativní příklad . . . . .	53
7.2	Problematika přeučení a nedoučení modelu - ilustrativní příklad . . . . .	54
	<b>III PŘÍKLADY UŽITÍ METAMODELŮ . . . . .</b>	<b>57</b>
8	LASEROVÉ SVAŘOVÁNÍ OCELOVÝCH DESEK . . . . .	58
8.1	Úvodní popis úlohy laserového svařování . . . . .	58
8.2	Technologie laserového svařování a hybridní laserové svařování . . . . .	58
8.3	Problematika kvality svaru . . . . .	60
8.4	Modelování hybridního laserového svařování . . . . .	62
8.4.1	Modelování indukčního ohřevu . . . . .	63
8.4.2	Teplovní pole způsobené laserovým ohřevem . . . . .	64
9	ŘEŠENÍ ÚLOHY LASEROVÉHO SVAŘOVÁNÍ S POUŽITÍM METAMODELOVÁNÍ . . . . .	66
9.1	Aplikace metamodelu pro řešení dané úlohy . . . . .	66
9.2	Použitá softwarová část pro řešení úlohy . . . . .	67
10	UKÁZKOVÝ PŘÍKLAD ŘEŠENÍ . . . . .	69
10.1	Úloha 1 - kombinace tloušťka desky a výkonu laseru . . . . .	70
10.1.1	Vstupní data . . . . .	70
10.1.2	Metoda použitá pro tvorbu metamodelu . . . . .	71
10.1.3	Výsledky . . . . .	71
10.1.4	Validace . . . . .	71
10.2	Úloha 2 - kombinace rychlost posuvu a výkon laseru . . . . .	77
10.2.1	Závěr . . . . .	79
11	POROVNÁNÍ RŮZNÝCH METOD TVORBY METAMODELU NA ÚLOZE HYBRIDNÍHO LASEROVÉHO SVAŘOVÁNÍ . . . . .	81
11.1	Testovací funkce pro ověření tvorby metamodelu . . . . .	82
11.2	Výsledky tvorby metamodelu pro testovací funkce . . . . .	83
11.3	Výsledky tvorby metamodelu 3 zvolenými technikami . . . . .	85

12	PROVNÁNÍ EXPERIMENTÁLNÍCH DAT S VÝSLEDKY Z METAMODELOVÁNÍ	88
12.1	Vzorek $V_1$ . . . . .	89
12.2	Vzorek $V_2$ . . . . .	90
	<b>IV ZHODNOCENÍ A ZÁVĚR</b>	94
13	ZÁVĚR	95
14	SMĚRY DALŠÍHO POKRAČOVÁNÍ PRÁCE	97
	<b>V PŘÍLOHY</b>	107
A	SEZNAM PUBLIKACÍ AUTORA	108

---

## SEZNAM OBRÁZKŮ

---

Obrázek 1	Metamodel nahrazující model zkoumané fyzikální reality. . . .	8
Obrázek 2	Vztah mezi zkoumaným jevem, modelem a metamodelem, podle [35]. . . . .	9
Obrázek 3	Vývojový diagram řešení sdružené úlohy - indukční ohřev, podle [63]. . . . .	23
Obrázek 4	Vizualizace metody systematického prohledávání ( <i>Grid Search</i> ). . . . .	26
Obrázek 5	Příklad dvojrozměrného normálního (Gaussovského) rozdělení. . . . .	30
Obrázek 6	Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu. . . . .	35
Obrázek 7	Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - dodán další bod. . . . .	36
Obrázek 8	Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - mnoho dostupných výsledků. . . . .	36
Obrázek 9	Nelineární model neuronu, podle [27, s. 12]. . . . .	37
Obrázek 10	Neuronová síť s RBF pro regresní úlohu, podle [27, s. 240]. . . . .	39
Obrázek 11	Příklad vícevrstvé neuronové sítě se dvěma skrytými vrstvami (1 výstup). . . . .	41
Obrázek 12	Příklad vícevrstvé neuronové sítě se dvěma skrytými vrstvami (2 výstupy). . . . .	41
Obrázek 13	Příklad rozhodovacího stromu. . . . .	46
Obrázek 14	Příklad regresního stromu. . . . .	47
Obrázek 15	Příklad regresního lesa. . . . .	47
Obrázek 16	Ilustrace metody Latin Hypercube, podle [92]. . . . .	52
Obrázek 17	Nevhodná volba vstupních dat. . . . .	53
Obrázek 18	Vhodná volba vstupních dat Latin - Hypercube sampling. . . . .	54
Obrázek 19	Nedoučený model. . . . .	55
Obrázek 20	Správně naučený model. . . . .	56
Obrázek 21	Přeučený model. . . . .	56
Obrázek 22	Hybridní laserové svařování s indukčním přehřevem. . . . .	60
Obrázek 23	Obecné určení hloubky $p$ a šířky $w$ laserového svaru. . . . .	61
Obrázek 24	Varianty rozložení teploty v místě svaru. . . . .	61
Obrázek 25	Fotografie svaru - vyznačení významných izoterm. . . . .	62

Obrázek 26	Metamodelování úlohy svařování dvou ocelových desek. . . . .	66
Obrázek 27	Vývojový diagram - algoritmus řešení problému odhadu hloubky svaru. . . . .	69
Obrázek 28	Výsledky odhadu hloubky svaru pro 3 vstupní body (varianta bez indukčního přehřevu). . . . .	72
Obrázek 29	Výsledky odhadu hloubky svaru pro 5 vstupních bodů (varianta bez indukčního přehřevu). . . . .	73
Obrázek 30	Výsledky odhadu hloubky svaru pro 9 vstupních bodů (varianta bez indukčního přehřevu). . . . .	74
Obrázek 31	Výsledky odhadu hloubky svaru pro 9 vstupních bodů (varianta s indukčním přehřevem). . . . .	75
Obrázek 32	Rozložení teploty v místě svaru - tloušťka desky 4 mm (varianta bez indukčního přehřevu). . . . .	76
Obrázek 33	Rozložení teploty v místě svaru - tloušťka desky 2 mm (varianta bez indukčního přehřevu). . . . .	76
Obrázek 34	Výsledky vytvoření metamodelu pro Úlohu 2 - 9 vstupních bodů.	77
Obrázek 35	Rozložení teploty v místě svaru - $P = 1400 \text{ W}$ , $v = 10 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ .	78
Obrázek 36	Výsledky vytvoření metamodelu - 20 vstupních bodů. . . . .	79
Obrázek 37	Postupné učení metamodelu na úloze 2. . . . .	80
Obrázek 38	Zvolené testovací funkce. . . . .	82
Obrázek 39	Tvorba metamodelu pomocí regrese s Gaussovským procesem pro testovací funkci (a) a (c). . . . .	83
Obrázek 40	Tvorba metamodelu pomocí vícevrstvé neuronové sítě pro tes- tovací funkci (a) a (c). . . . .	83
Obrázek 41	Tvorba metamodelu pomocí náhodného lesa pro testovací funkci (a) a (c). . . . .	85
Obrázek 42	Metamodel vytvořený pomocí regrese s Gaussovským procesem.	86
Obrázek 43	Metamodel vytvořený pomocí vícevrstvé neuronové sítě. . . . .	87
Obrázek 44	Metamodel vytvořený pomocí náhodného lesa. . . . .	87
Obrázek 45	Fotka pracoviště laserového svařování. . . . .	88
Obrázek 46	Měřicí aplikace. . . . .	89
Obrázek 47	Měření vzorky s navařenými termočlánky. . . . .	90
Obrázek 48	Vývoj teploty na termočláncích - $V_1$ . . . . .	91
Obrázek 49	Vývoj teploty na termočláncích - $V_2$ . . . . .	92
Obrázek 50	Ukázka nekvalitního svaru. . . . .	92
Obrázek 51	Vyhovující kvalita svaru. . . . .	93

Obrázek 52	Svar provařený skrz materiál. . . . .	93
------------	---------------------------------------	----

---

SEZNAM TABULEK

---

Tabulka 1	Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - vstupní data. . . . .	34
Tabulka 2	Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - vstupní data rozšířená o jednu hodnotu. . . . .	35
Tabulka 3	Příklad regresního stromu - vstupní data. . . . .	45
Tabulka 4	Soubor vstupních dat pro vytvoření metamodelu - kombinace $b$ a $P$ . . . . .	70
Tabulka 5	Porovnání odhadu hloubky svaru $p$ oproti MKP simulaci (varianta bez indukčního předehřevu). . . . .	73
Tabulka 6	Porovnání odhadu hloubky svaru $p$ oproti MKP simulaci (varianta bez indukčního předehřevu). . . . .	74
Tabulka 7	Výsledky validace metamodelu pro Úlohu 2. . . . .	78
Tabulka 8	Validace metamodelu - regrese s Gaussovským procesem. . . . .	85
Tabulka 9	Validace metamodelu - vícevrstvá neuronová síť. . . . .	85
Tabulka 10	Validace metamodelu - náhodný les. . . . .	86
Tabulka 11	Experiment $V_1$ , rychlost posuvu laseru. . . . .	90
Tabulka 12	Experiment $V_1$ , příkon laseru. . . . .	91

Část I

ÚVOD DO PROBLEMATIKY

---

## ÚVOD A MOTIVACE PRÁCE

---

Matematické modelování a počítačové simulace jsou jedním z trendů, které se v současnosti používají napříč vědeckými disciplínami. Oblast elektrotechniky není výjimkou a je celá řada úloh, které je výhodné řešit za pomoci matematického modelování a počítačových simulací. Ty slouží k popisu chování sledovaných fyzikálních dějů a umožňují ho sledovat ve virtuálním prostředí počítače. To má celou řadu výhod, především to vede k urychlení vývoje a snížení finančních nákladů na výrobu prototypů.

Jednou z konkrétních oblastí elektrotechniky, kde jsou modelování a simulace hojně využívány, je řešení fyzikálních polí. Jejich popis je proveden pomocí parciálních diferenciálních rovnic (nejčastěji druhého řádu). Vzhledem ke komplexnosti řešených inženýrských úloh je potřeba je řešit vhodnou numerickou metodou. Nejrozšířenější numerickou metodou v této oblasti je metoda konečných prvků (MKP). Její velkou výhodou je velmi dobrá přesnost výsledků pro inženýrskou praxi. Nicméně je relativně výpočetně náročná v závislosti na dimenzi úlohy. Velký vliv na výpočetní náročnost má především: jemnost výpočetní sítě, nelinearity modelu, výpočet přechodných dějů a multifyzikální modelování (sdružené řešení více typů fyzikálních polí). Výpočetní čas se u složitých úloh může i na velmi výkonném výpočetním hardwaru vyšplhat řádově na jednotky až desítky hodin pro výpočet jedné konkrétní úlohy, resp. pro konkrétní danou parametrizaci modelu. I při drobné změně v definici modelu, v okrajových podmínkách nebo v jeho parametrech je nutné celý výpočet provést znovu.

V současné době je velmi rozvinutá výpočetní technika, proto není problém používat k řešení komplexních modelů velmi výkonné počítače a výpočetní clustery. I přes tento vývoj je jedním z trendů snižování výpočetní náročnosti řešených úloh. To je velmi výhodné ve speciálních aplikacích. Takovými příklady mohou být například výpočty prováděné v mikrokontrolérech, tzn. real-time aplikace a výpočty. Další takovou oblastí je řešení optimalizačních úloh, které volí z velkého množství vypočítaných řešení. Každá možná varianta vyžaduje kompletní MKP výpočet.



Model je vždy akceptovatelné zjednodušení fyzikální reality, proto je každý model ze svého principu nepřesný. Nároky na jeho přesnost je nutné posoudit na základě kontextu aplikace, kde má být použit. Nabízí se tedy myšlenka nahrazení plného modelu jiným modelem, který redukuje přesnost, ale je méně výpočetně náročný, tzv. metamodel. Použitím vhodných metod je tedy možné získat metamodel, který za určitých zjednodušujících předpokladů a omezení řešené oblasti dostatečně přesně popisuje sledovaný fyzikální děj.

Jedním z impulzů pro práci na tématu, je úloha řešená v rámci [70], ve kterém byla řešena optimalizace aktuátoru pomocí genetického algoritmu. Genetický algoritmus potřebuje k získání výsledků provést  $x$  běhů simulace, ze kterých následně vybírá optimální řešení. To může být časově velmi náročné. Z toho důvodu bylo následně uvažováno, jak by bylo možné výpočetní čas ušetřit. Tato úvaha následně vedla k problematice metamodelování. Zvolenou ryze praktickou aplikací, kde je potřeba vypočítat velké množství variant, je laserové svařování. Pomocí něj je možné svařovat různé desky pro různé technologické parametry procesu.

## 1.1 HLAVNÍ CÍLE PRÁCE

Cílem práce je představení metod vhodných pro vytvoření metamodelu a následná aplikace metamodelu na reálné úloze. Jako vzorová úloha, kde je prezentována možnost metamodelování, je zvoleno laserové svařování ocelových desek. Hlavní krok spočívá v nahrazení plného modelu metamodelem, který je výpočetně mnohem méně náročný. Protože takovéto zjednodušení poskytuje méně přesné výsledky, je cílem i kriticky posoudit, zda je metamodel v dané aplikaci vhodný i dostatečně přesný.

Vytyčené cíle v práci je možné shrnout v následujících bodech:

- analyzovat metody vhodné pro tvorbu metamodelů,
- ověřit využitelnost metamodelů při řešení reálné elektrotechnické úlohy (laserové svařování ocelových desek),
- shrnout výhody a nevýhody využití metamodelů.

Vedle hlavních cílů práce jsou formulovány základní hypotézy:

- použitím metamodelu je možné značně ušetřit výpočetní čas při výpočtu mnoha variant modelu,
- metamodel bude zatížen chybou, jejíž velikost musí být akceptovatelná,
- metamodel je možné vytvořit různými metodami, je potřeba určit vhodnou.

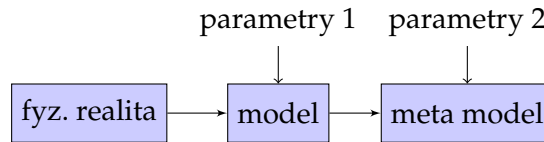
## 1.2 DEFINICE ZÁKLADNÍCH POJMŮ

Pro ujasnění základních termínů používaných dále v práci je provedena jejich definice.

Klíčové termíny:

- Fyzikální model = abstraktní nahrazení reálného děje při zachování funkčnosti systému,
- Matematické modelování = proces popisu fyzikálního modelu s užitím matematického aparátu,
- Metamodel = abstraktní nahrazení modelu (v literatuře se také velmi často používá termín náhradní model - anglicky *surrogate model*, případně metoda plochy odezvy - anglicky *response surface method*),
- Simulace = užití modelu pro zkoumání systému/děje.

Na Obr. 1 je znázorněno, jak je možné použít metamodel k modelování fyzikální reality. Nejprve je zkoumaná fyzikální realita nahrazena obecným modelem, který je vyřešen pro jednu konkrétní známou množinu parametrů modelu označenou jako *parametry 1*. Na základě tohoto modelu je možné vytvořit metamodel a pomocí něho modelovat fyzikální realitu pro jinou množinu parametrů, než byl řešen původní model (označeno jako *parametry 2*).



Obr. 1: Metamodel nahrazující model zkoumané fyzikální reality.

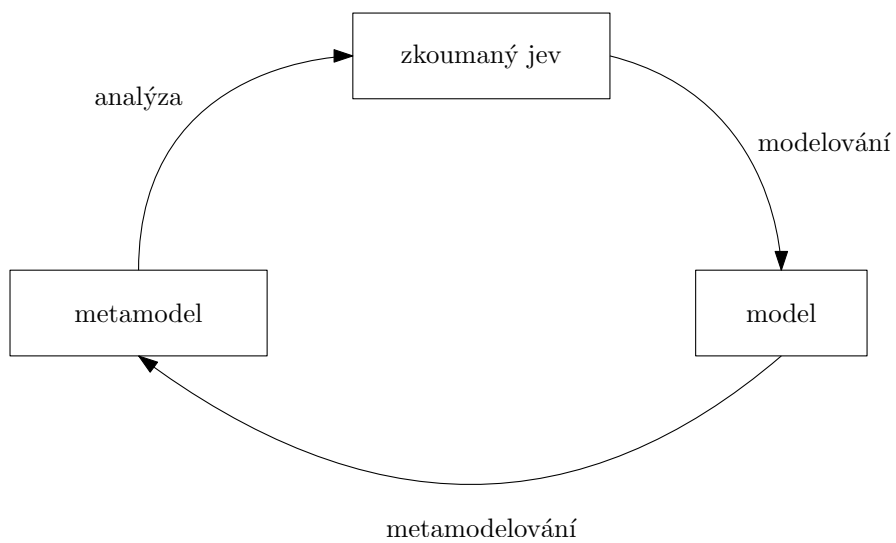
Vztah mezi metamodelem a plným modelem (angl. *high-fidelity model*) je možné vystihnout vztahem:

$$\hat{f}(x) = f(x) + e(x), \quad (1)$$

kde  $\hat{f}(x)$  je metamodel,  $f(x)$  plný model a  $e(x)$  je chyba nahrazení metamodelem [58].

Na Obr. 2 je vyobrazen vztah mezi modelem, metamodelem a modelovaným problémem.

Dalším důležitým pojmem je strojové učení (angl. *machine learning*), protože jeho metody je možné používat pro tvorbu metamodelů. Obecně je možné na metamodelování nahlížet jako na regresní úlohu strojového učení, kde je zdrojem dat model. Definice



Obr. 2: Vztah mezi zkoumaným jevem, modelem a metamodelem, podle [35].

strojového učení je dle [61]: „Strojové učení je soubor metod, které umí automaticky detekovat vzory v datech a na základě jich odhadovat data budoucí“.

Dalším možný pohledem na tvorbu metamodelů je klasická regresní analýza (statistický pohled). V této práci je preferován pohled z hlediska strojového učení.

---

## SOUČASNÝ STAV POZNÁNÍ

---

V současné a nedávné době bylo v oblasti elektrotechniky a příbuzných oborů publikováno množství článků, které používají různé druhy metamodelování k řešení celé řady různorodých technických problémů a úloh. Pro představu jsou v následujících odstavcích zmíněny některé příklady. Klíčovými otázkami jsou především definice vhodné úlohy a následné zvolení metody tvorby metamodelu.

### 2.1 PROCES METAMODELOVÁNÍ

Z obecného hlediska metamodelování je vhodným úvodním článkem [35]. Ten se zabývá obecně hlavními dílčími kroky při tvorbě metamodelu od návrhu vstupních dat a řešeného intervalu vstupních parametrů po vlastní vytvoření metamodelu a predikci s jeho použitím. Důležitým krokem je problematika validace metamodelu, tzn. porovnání mezi odhadnutou hodnotou a hodnotou získanou pomocí plného modelu, například řešeným v [87].

Dalším vhodným úvodním článkem je [80], kde jsou popsány různé metody pro vytvoření metamodelu aplikací na různé testovací funkce.

Zajímavým článkem je [87], který se zamýšlí nad možností využití metamodelů k validaci nelineárních konečně-prvkových modelů.

Kompletní monografii k použití metamodelů v inženýrských úlohách je kniha [17].

### 2.2 PŘÍKLADY ŘEŠENÝCH ÚLOH

Řešené úlohy je možné rozdělit na dva okruhy, a to na optimalizační úlohy a na speciální aplikace.

U optimalizačních úloh se ze souboru dostupných řešení vybírá optimální řešení. Vzhledem k potřebě napočítat velké množství různých variant je zřejmé, že každé snížení výpočetní náročnosti je velmi výhodné, obzvláště v případě multikriteriální optimalizace (například pomocí evolučních algoritmů). Touto oblastí se zabývá např. literatura [1, 16, 25, 26, 37, 38, 48, 55, 58, 68, 76, 91]. Techniky metamodelování v oblasti optimalizačních úloh poskytují z hlediska výpočetní přesnosti zajímavé výsledky, například v [56] dosahovaly výsledky testovací optimalizační úlohy TEAM 22 získané pomocí meta-modelování přesnosti 95 % plného modelu (získaného pomocí metody konečných prvků). V [1] bylo použito metamodelování v úloze optimalizace lineárního elektromotoru a transformátoru, které používalo metodu konečných prvků. Další úlohou z oblasti elektrických strojů je [20] kde se pomocí krigingu optimalizuje 3D sdružená úloha.

Blízkým oborem k optimalizačním úlohám je problematika citlivostní analýzy, která sleduje vliv jednotlivých parametrů modelu na jeho výstup. To je pro optimalizace velmi výhodné, protože je možné snížit celkový počet optimalizovaných parametrů. Článek [60] se zabývá aplikací metamodelu pro řešení úlohy citlivostní analýzy.

Ze speciálních aplikací metamodelování bylo například použito v oblasti integrovaných obvodů pro řízení a regulaci hodin procesoru na základě měřené teploty a jejího odhadu [18]. Další zajímavou oblastí je modelování chování elektrických obvodů [93] nebo zpracování dat z chytrých senzorů pomocí prokládání dat s využitím statistiky [67].

V publikaci [75] jsou na příkladě návrhu chladiče pro elektroniku ukázány možnosti použití metamodelu. Nahrazovaným polem je pole teplotní a zvolenou metodou pro tvorbu metamodelu je regrese s Gausovským procesem. Sledovaným parametrem je odvod tepla v závislosti na parametrech chladiče. Zajímavou myšlenkou v této publikaci je tvorba metamodelu ve dvou krocích. Nejprve je vytvořen základní metamodel, který používá jako vstupní data výsledky z tzv. aproximativního modelu, který používá metodu konečných diferencí. Tento základní metamodel je následně vylepšen menším počtem výsledků z detailní simulace založené na metodě konečných prvků.

Blízkým příkladem k v rámci této práce řešené úloze je [88], kde se metamodel používá k predikci parametru tvářecího procesu ocelových plechů.

Pro zajímavost, mimo oblast elektrotechniky (v oblasti strukturální mechaniky) se metamodelováním a optimalizacemi s jeho použitím zabývala disertační práce Floriana Jurcky [32], která je velmi ucelenou prací o tématu. Zabývá se mimo jiné i porovnáním různých druhů tvorby metamodelů a problematikou volby vstupních dat pro optimální pokrytí sledovaného vstupního prostoru (*Design of Experiments*). Další zajímavou oblastí, kde se metamodelování používá je oblast vodního hospodářství, podrobný přehledový článek je [79].

### 2.3 METODY POUŽÍVANÉ PRO TVORBU METAMODELŮ

Pro vytvoření metamodelu je principiálně možné použít libovolnou metodu z oblasti strojového učení ve formulaci pro regresní typ úloh (hledání vzájemného vztahu mezi závislou a nezávislou proměnnou ve vstupních datech). Případně je možné na úlohu nahlížet ze statistického pohledu jako na regresní analýzu.

Často používanými metodami pro tvorbu metamodelu jsou jmenovitě:

- polynomiální regrese (*Polynomial Regression*),
- regrese s Gaussovským procesem (*Gaussian Process Regression*) - známá také jako kriging,
- neuronové sítě s radiálními bázemi (*Radial Basis Function ANN*),
- vícevrstvé neuronové sítě (*Multi-Layer Perceptron ANN*),
- náhodný les (*Random Forest*),
- metoda podpůrných vektorů (*Support Vector Machines*).

Krátký popis některých zmíněných metod je v následující kapitole.

### 2.4 ALTERNATIVY K METAMODELOVÁNÍ

Další otázkou, která může vyvstat, je, jaké jsou alternativy k použití metamodelu za účelem redukce výpočetního času. Možností jsou techniky redukce řádu modelu (*Reduced Order Modeling*, nebo častější anglický název *Model Order Reduction* - MOR). Jejich myšlenkou je vytvořit zjednodušený model, který zachycuje hlavní „prvky“ původního modelu, které mají největší vliv na celkové výstupní chování systému [22, s. 5].

Často používanými technikami jsou *Proper Orthogonal Decomposition (POD)* a *Proper Generalized Decomposition (PGD)*. Obě metody jsou popsány například v publikacích [7, 8].

Techniky redukce řádu modelu jsou v oblasti zájmu již nějakou dobu, např. v publikacích [31, 81] bylo řešeno jejich použití společně s komerčními nástroji pro konečně-prvkové modelování. Obecně velikou výzvou pro MOR je jejich aplikace na nelineární úlohy, taková úloha je řešena například v [59], kde je modelován elektrický točivý stroj. Použití MOR na inverzní statistické úlohy je studováno v [46].

Metody redukce modelu nejsou hlavním zaměřením této práce. Detailní popisy zmíněných metod je možné nalézt v odkazované literatuře.

Část II

TEORETICKÁ ČÁST PRÁCE

# 3

---

## MODELOVÁNÍ A SIMULACE OBECNĚ

---

Modelování a simulace jsou všeobecně jedním z velmi důležitých nástrojů ve vědě. Pomocí nich je možné sledovat chování jednoduchých, nebo i velmi komplexních systémů<sup>1</sup>. Zabývá se jimi (a jejich následnou aplikací) řada publikací a je možné na ně pohlížet z mnoha různých hledisek. Některé z publikací se zabývají vlastní filozofií modelování, např. [47, 83], jiné pomocí něj řeší reálné úlohy.

Běžně používaným druhem modelování je matematické modelování, které využívá matematický aparát k popisu chování systému. V případě použití počítače k implementaci modelu je potřeba ho převést na úlohu řešitelnou pro počítač, zpravidla ve formě numerického modelu.

Jednou ze zajímavých otázek je, jak modelování dělit. Základní možností, jak lze dělit matematické modelování v oblasti fyzikálních (tedy i elektrotechnických) problémů, je dělení na přímý problém (*forward problem*) a inverzní problém (*inverse problem*). V případě přímého problému je na základě modelu (charakterizovaného parametry) předpovídán výsledek. V případě inverzního problému jde o opačný postup. Na základě známých výsledků (získaných např. měřeními) dochází k predikci modelu/parametrů modelu. Důležitý rozdíl mezi oběma druhy problému je v unikátnosti řešení. Přímý model problému má vždy pouze jedno řešení. Oproti tomu inverzní problém má více možných řešení (teoreticky nekonečně mnoho). Každý model fyzikální reality má parametry, jejichž hodnoty ho plně definují. U přímého modelování je fyzikální realita popsána modelem (charakterizovaným fyzikálními zákony) s definovanými parametry. Z toho vyplývá, že pro získání je potřeba znát/zvolit konkrétní hodnoty parametrů modelu předem. V případě inverzního modelování (nazývaného také jako syntéza) je postup opačný, jsou známy výsledky měření a na jejich základě je určen model a jeho parametry. [86]

---

<sup>1</sup> Pro definici pojmu systém viz [24].



Pro inženýrské úlohy je zajímavé dělení modelování dynamických systémů, tzn. systémů měnících se v čase. To je provedené například v [62, s. 8]<sup>2</sup>:

- přímé modelování
  - spojité modely:
    - \* založené na obyčejných diferenciálních rovnicích,
    - \* založené na parciálních diferenciálních rovnicích.
  - modely s diskrétními událostmi a hybridní modely.
- inverzní modelování.

Protože je každý model pouze zjednodušením reality, je potřeba ho následně s realitou porovnat. Ověření modelu se nazývá termínem verifikace modelu a komplexně se jí zabývá například literatura [62]. Obecně k vlastnímu ověření může sloužit měření nebo výsledky simulace fungující na jiném principu.

---

<sup>2</sup> Detailní popis zmíněných systémů je možné nalézt v literatuře [62].

# 4

---

## MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ V ELEKTROTECHNICE

---

V elektrotechnice se modeluje celá řada problémů, například chování elektrických obvodů, nebo analýza fyzikálních polí. Tato práce se zaměřuje především na problematiku modelování fyzikálních polí.

Mezi často modelovaná fyzikální pole v elektrotechnice patří elektromagnetické a teplotní pole. Elektromagnetické pole je popsáno pomocí Maxwellových rovnic a pole teplotní rovnicí přestupu tepla (Fourier-Kirchhoffovou rovnicí). V této kapitole jsou uvedeny základní vztahy popisující sledované děje.

### 4.1 MODELOVÁNÍ ELEKTROMAGNETICKÉHO POLE - MAXWELLOVY ROVNICE

Pro každý matematický model aplikovaný v elektrotechnice se vychází ze základních fyzikálních vztahů, které se následně upravují do formy vhodné k řešení. V případě elektromagnetického pole se vychází z Maxwellových rovnic, které mohou být psány v integrálním nebo diferenciálním tvaru. Dále jsou uvedeny pouze rovnice v diferenciálním tvaru, které se v oblasti modelování používají častěji.

*Diferenciální tvar Maxwellových rovnic:*

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho_V, \quad (4)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \quad (5)$$

Dále platí materiálové vztahy mezi veličinami:

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (6)$$

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathbf{E}, \quad (7)$$

$$\mathbf{J} = \gamma(\mathbf{E} + \mathbf{E}_V), \quad (8)$$

kde  $\mu$  je permeabilita,  $\varepsilon$  permitivita,  $\gamma$  elektrická vodivost,  $\mathbf{E}_V$  intenzita vtisknutého elektrického pole.

Tyto základní Maxwellovy rovnice se nicméně nehodí v základním tvaru pro potřeby modelování, a proto se dále upravují. Kompletní odvození vztahů vhodných pro modelování elektromagnetického pole je možné nalézt např. v literatuře [41, 51, 82]. Ve zmíněné literatuře je možné dohledat i další vztahy, jako např. vztahy pro Lorentzovu sílu atd.

Z hlediska dělení polí v elektromagnetismu jsou pole časově neproměnná (statická nebo stacionární) nebo časově proměnná (nestacionární). V případě časově neproměnných polí jsou u Maxwellových rovnic nulové členy parciální derivace  $\frac{\partial}{\partial t} = 0$ .

Pro ilustraci jsou uvedeny upravené rovnice pro následující pole:

- elektrostatické pole,
- nestacionární elektrické proudové pole,
- nestacionární elektromagnetické pole s permanentními magnety a zohledněnou pohybovou složkou.

#### 4.1.1 Elektrostatické pole

Pro elektrostatické pole mají Maxwellovy rovnice následující tvar:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0, \quad (9)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho_V. \quad (10)$$

Elektrostatické pole se ale modeluje pomocí pomocné veličiny - elektrického potenciálu  $\varphi(V)$ , který je vhodný vzhledem ke své jednoduchosti.

Platí:

$$\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi. \quad (11)$$

Do třetí Maxwellovy rovnice se dosadí známé základní vztahy a platí [51, s. 53]:

$$\text{div } \mathbf{D} = \text{div } \epsilon \mathbf{E} = \text{div } \epsilon(-\text{grad } \varphi) = \rho_V. \quad (12)$$

To je pomocí operátorových výrazů a předpokladu konstantní, nebo po částech konstantní permitivity možné přepsat do jednoduššího tvaru:

$$\Delta \varphi = -\frac{\rho_V}{\epsilon}. \quad (13)$$

Okrajové podmínky aplikované pro elektrostatické pole jsou [51, s. 126]:

- Dirichletova okrajová podmínka:  $\varphi = \text{konst.}$  (známý potenciál na hranici oblasti),
- Neumannova okrajová podmínka:  $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = -\frac{\sigma_S}{\epsilon}$  (pokud je známa povrchová hustota náboje  $\sigma_S$  a permitivita  $\epsilon$ ),
- nulová Neumannova okrajová podmínka:  $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$  (osa symetrie).

#### 4.1.2 Nestacionární elektrické proudové pole

Pro nestacionární elektrické proudové pole platí tzv. rovnice kontinuity elektrického proudu (v diferenciálním tvaru):

$$\text{div } \mathbf{J} = -\frac{\partial \rho_V}{\partial t}. \quad (14)$$

Rovnici je možné odvodit z první a třetí Maxwellovy rovnice, odvození viz [51, s. 362].

Pro potřeby modelování se rovnice (14) dále upravuje do vhodné podoby. Předtím je potřeba uvést další vztah - Ohmův zákon v diferenciálním tvaru.

Obecná formulace Ohmova zákona v diferenciálním tvaru:

$$\mathbf{J} = \gamma \mathbf{E} + \mathbf{J}_E, \quad (15)$$

kde  $\mathbf{J}_E$  je proudová hustota dodaná z vnějších zdrojů.

Dosazením (15) do rovnice kontinuity (14) a zohledněním vztahů (10) a (7) vznikne výsledná rovnice pro modelování nestacionárního proudového pole:

$$-\operatorname{div} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon \operatorname{grad} \varphi) - \operatorname{div} (\gamma \operatorname{grad} \varphi - J_E) = K_j, \quad (16)$$

kde  $K_j$  je povrchový proud v ( $\text{A} \cdot \text{m}^{-1}$ ).

Pro další případy rovnice (16) jako například harmonické pole viz [9].

Co se týče okrajových podmínek pro proudové pole, jsou shodné s podmínkami pro pole elektrostatické. Je známá hodnota na hranici  $S$  pro  $\varphi$  nebo  $\frac{\partial \varphi}{\partial n}$ . Výsledkem řešení rovnice pro proudové pole je hodnota intenzity elektrického pole  $E$ , ze které se dá následně určit hodnota proudové hustoty  $J$ .

#### 4.1.3 Nestacionární elektromagnetické pole

Nestacionární magnetické pole obecně obsahuje i pohybovou složku (proto je zavedena plná derivace  $\frac{d}{dt}$ ) a člen týkající se permanentních magnetů definovaný pomocí koercitivní intenzity magnetického pole  $H_c$ . Maxwellovy rovnice mají poté tvar:

$$\operatorname{rot} (\mathbf{H} - \mathbf{H}_c) = \mathbf{J} + \frac{d\mathbf{D}}{dt}, \quad (17)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{d\mathbf{B}}{dt}, \quad (18)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho_V, \quad (19)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0. \quad (20)$$

Pro potřeby modelování se zavádí pomocná veličina vektorový magnetický potenciál  $A$ . Detaily o jeho definici je možné najít v [41, 51, 82].

Pro vektorový magnetický potenciál  $A$  platí vztah:

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}. \quad (21)$$

Výsledná rovnice, která se používá pro modelování pomocí vektorového magnetického potenciálu  $\mathbf{A}$ , má následující tvar:

$$\operatorname{rot} \left( \frac{1}{\mu} \operatorname{rot} \mathbf{A} - \mathbf{H}_c \right) + \gamma \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \mathbf{v} \times \operatorname{rot} \mathbf{A} \right) = \mathbf{J}_{ext}. \quad (22)$$

Obecná rovnice (22) je velmi obtížně řešitelná. Je proto potřeba provést v praxi několik zjednodušení. Za prvé se předpokládá po částech konstantní permeabilita  $\mu$ . Za druhé v praxi se často modelují úlohy s harmonickými průběhy veličin, pak je možné uvažovat  $\mathbf{A}$  jako harmonické a použít symbolicko-komplexní metodu.

Zápis pomocí fázorů má tvar:

$$\operatorname{rot} \left( \frac{1}{\mu} (\operatorname{rot} \underline{\mathbf{A}} - \mathbf{B}_r) \right) + \gamma (j\omega \underline{\mathbf{A}} - \mathbf{v} \times \operatorname{rot} \underline{\mathbf{A}}) = \underline{\mathbf{J}}_{ext}, \quad (23)$$

kde  $\omega$  je úhlová frekvence.

Protože je uvažováno po částech konstantní  $\mu$ , je možné převést rovnici (23) do tvaru:

$$\operatorname{rot} (\operatorname{rot} \underline{\mathbf{A}} - \mathbf{B}_r) + \gamma \mu (j\omega \underline{\mathbf{A}} - \mathbf{v} \times \operatorname{rot} \underline{\mathbf{A}}) = \mu \underline{\mathbf{J}}_{ext}. \quad (24)$$

Vzhledem k faktu, že pohybová složka je oproti časové změně zanedbatelná, je možné člen  $\mathbf{v} \times \operatorname{rot} \underline{\mathbf{A}}$  vynechat:

$$\operatorname{rot} (\operatorname{rot} \underline{\mathbf{A}} - \mathbf{B}_r) + \gamma \mu j\omega \underline{\mathbf{A}} = \mu \underline{\mathbf{J}}_{ext}. \quad (25)$$

V případě harmonického pole a zanedbání vztahu pro permanentní magnety  $\mathbf{H}_c$  i pohybovou složku  $\mathbf{v} \times \operatorname{rot} \mathbf{A}$  je možné rovnici (22) přepsat do jednodušší formy. Za předpokladu po částech konstantní permeability  $\mu$  je možné uvažovat  $\mathbf{A}$  jako harmonické a použít symbolicko-komplexní metodu. Zápis pomocí fázorů má tvar:

$$\operatorname{rot} \left( \frac{1}{\mu} \operatorname{rot} \underline{\mathbf{A}} \right) + \gamma (j\omega \underline{\mathbf{A}}) = \underline{\mathbf{J}}_{ext}. \quad (26)$$

Pro řešení definované rovnice (22) je potřeba stanovit okrajové podmínky.

Dirichletova okrajová podmínka na hranici  $S$  má definovanou hodnotu magnetického potenciálu  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}(x, y, z, t). \quad (27)$$

Neumannova okrajová podmínka má na hranici  $S$  definovanou hodnotu parciální derivace podle normálového vektoru:

$$\frac{1}{\mu} \frac{\partial A}{\partial \mathbf{n}} = A(x, y, z, t). \quad (28)$$

Dále existuje smíšená okrajová podmínka (Newtonova), která je kombinací předchozích dvou okrajových podmínek (27) a (28).

#### 4.2 MODELOVÁNÍ ROVNICE PŘESTUPU TEPLA

Dále je uveden základní popis vztahů týkajících se rovnice přestupu tepla.

Pro tepelný tok platí Fourierův zákon v operátorové formě [44, s. 51]:

$$\mathbf{q} = -\lambda \text{grad } T, \quad (29)$$

kde  $\lambda$  je tepelná vodivost.

Rovnice přestupu tepla je parciální diferenciální rovnice, kterou je možné psát např. v následujícím tvaru [65, s. 13]:

$$-(\text{div } \mathbf{q}) + w = \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (30)$$

kde  $\mathbf{q}$  je vektor tepelného toku,  $w$  objemové vnitřní zdroje tepla (např. ztráty vířivými proudy nebo ztráty magnetizační),  $\rho$  měrná hmotnost,  $c_p$  měrná tepelná kapacita při stálém tlaku,  $T$  teplota a  $t$  čas.

Výslednou rovnici přenosu tepla je pak možné psát ve tvaru:

$$\text{div } \lambda \text{grad } T - \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -w. \quad (31)$$

V případě homogenních materiálů (vlastnosti nezávislé na polohovém vektoru  $\mathbf{r}$ ) platí závislost na teplotě  $T$ :

$$\lambda = \lambda(T). \quad (32)$$

V modelování se používají následující okrajové podmínky:

- definovaná teplota na hranici  $S$ :

$$T_s = T_1(x, y, z, t). \quad (33)$$

- definovaný tepelný tok na hranici  $S$ :

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = -q_s. \quad (34)$$

- okrajová podmínka pro proudění na hranici  $S$ :

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \alpha_T (T - T_O). \quad (35)$$

- okrajová podmínka pro záření na hranici  $S$ :

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial \mathbf{n}} = \sigma C (T^4 - T_O^4), \quad (36)$$

kde  $\alpha_T$  je koeficient přestupu tepla prouděním,  $T$  je povrchová teplota (neznámá),  $\sigma$  Stefan–Boltzmannova konstanta,  $C$  emisivita (poměrná zářivost),  $T_O$  teplota okolí.

V případě modelování přechodného děje je nutné znát počáteční podmínky v čase  $t = 0$ :

$$T(\mathbf{r}, 0) = T_0(\mathbf{r}). \quad (37)$$

Kompletní odvození rovnice přestupu tepla je možné nalézt v literatuře [44], oblastí modelování se zabývá [65].

#### 4.3 MODELOVÁNÍ SDRUŽENÝCH ÚLOH

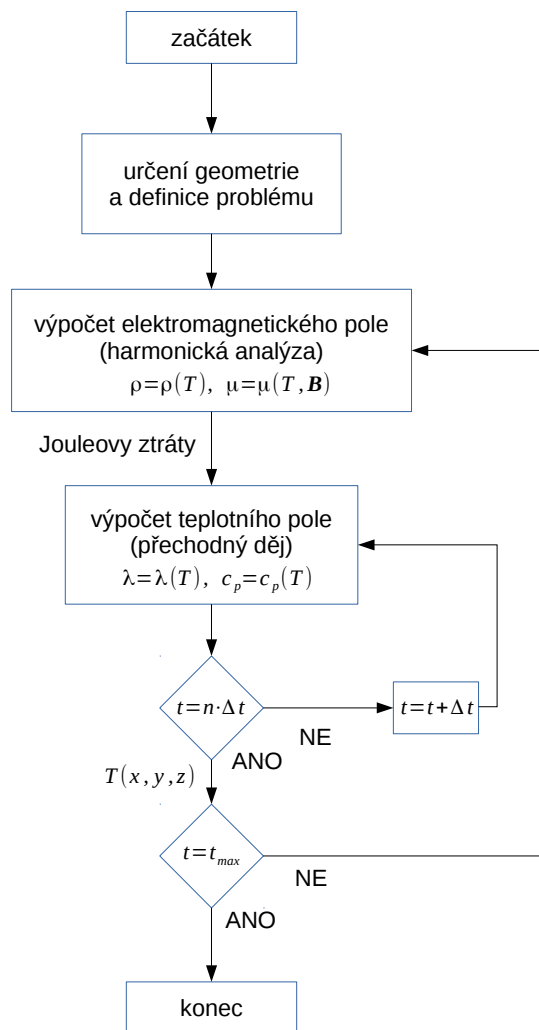
Modelování komplexních problémů často vyžaduje řešení více vzájemně se ovlivňujících fyzikálních jevů současně, řeší se tzv. sružené (multi-fyzikální) úlohy. Tyto úlohy jsou velmi výpočetně náročné, protože je potřeba vyřešit dva a více problémů. Výstup jednoho výpočtu je následně vstupem pro výpočet další.

Klasickým příkladem modelování sružené úlohy je indukční ohřev, kde je řešeno teplotní a elektromagnetické pole. Shrnutí modelování indukčního ohřevu je provedeno například v [43]. Vývojový diagram popisující sružení mezi harmonickým elektromagnetickým polem a teplotním polem je vidět na Obr. 3. Na tomto obrázku je schematicky naznačena jednoduchá Eulerova časová diskretizace s konstantním krokem.<sup>3</sup>

Dalším možným příkladem je indukční tavení, které kombinuje modelování teplotního pole, elektromagnetického pole a proudění.

<sup>3</sup> V praxi se dále používají i výkonnější a složitější metody Runge-Kutta nebo BDF.





Obr. 3: Vývojový diagram řešení sdružené úlohy - indukční ohřev, podle [63].

Modelování sdružených úloh je velmi komplexním tématem a vzhledem k jeho rozsahu není možné ho v této práci dopodrobna popsat. Detailnější popis a příklady aplikací je možné nalézt v [13, 33, 74].

# 5

---

## ÚVOD DO STROJOVÉHO UČENÍ

---

Na metody používané pro tvorbu metamodelu je možné pohlížet také jako na úlohy z oblasti strojového učení (angl. *Machine Learning*). Z tohoto důvodu je zde uveden krátký úvod do problematiky. Strojové učení se zabývá způsoby, jak pomocí vstupních dat učít stroj (počítač) řešit zadanou úlohu. Výstupy řešené úlohy se pomocí učícího procesu postupně zlepšují.

Existují následující skupiny strojového učení:

- učení s učitelem (*supervised learning*),
- učení bez učitele (*unsupervised learning*),
- učení posilováním (*reinforced learning*).

V případě učení s učitelem jsou dostupná vstupní data, která určují správné chování systému. Učení bez učitele se používá pro hledání pravidelnosti v datech.

Strojové učení rozlišuje následující základní typy úloh:

- klasifikace (*classification*),
- regrese (*regression*),
- shlukování (*clustering*).

Rozdíl mezi klasifikací a regresí je následující. Výstup klasifikační úlohy je diskrétní, výstup regresní úlohy je spojitý. Klasifikace rozděluje vstupní diskrétní data do známých tříd, klasickým příkladem klasifikace je rozpoznávání obrazu, např. rozpoznávání psaného textu. Regresní úloha se používá pro předpověď průběhu veličiny, sleduje tedy vztah závislé veličiny na nezávislé veličině (veličinách). Shlukování dává vstupní data do neznámých skupin na základě podobnosti. Jedná se o typickou úlohu pro metody strojového učení bez učitele.

Metamodelování je tedy obecně úlohou regresní. Techniky popsané v této práci se zpravidla používají jak pro klasifikaci, tak i pro regresi. Vzhledem k zaměření práce se ale použití metod pro klasifikaci nezmiňuje, protože metamodelování využívá odhad spojitě výstupní veličiny (regresní analýzu). Nicméně detaily je možné vždy najít v referencované literatuře.

Dostupná vstupní data se rozdělí na tři skupiny - data pro naučení modelu (trénovací data), validační data pro naladění parametrů systému (resp. tzv. hyperparametrů<sup>4</sup>) a data testovací, která slouží k posouzení kvality odhadu. Pomocí těchto dat je vytvořen model umožňující v neznámých bodech predikovat výstup.

Jedním z problémů regrese, potažmo i celého strojového učení, je problém přeučení (angl. *overfitting*), nebo nedoučení modelu (angl. *underfitting*). Tomuto tématu je se ještě dále v práci věnováno.

Jedním z možných opatření proti přeučení modelu je křížová validace používaná pro posouzení komplexnosti modelu (jak reaguje na různá vstupní data). Často používaným typem je  $k$ -násobná křížová validace (angl. *k-fold cross validation*) [30, 54, 57, 61, 77]. Při ní je celý soubor vstupních dat rozdělen na  $N$  podskupin, z nich jsou následně vytvořeny různé kombinace trénovacích a validačních dat. Poměr trénovacích dat a validačních dat může být například 70 % a 30 %. S každou z podskupin je provedeno trénování a validace modelu, přičemž je každá varianta vyhodnocena vhodnou metrikou kvality modelu. Existují i další metody k omezení přeučení modelu např. regularizace, rozšíření množiny vstupních dat atd. Výhodou křížové validace je, že je možné ji použít pro většinu metod.

Další důležitým krokem u strojového učení je určení hyperparametrů, ke kterému se často používá optimalizačních metod.

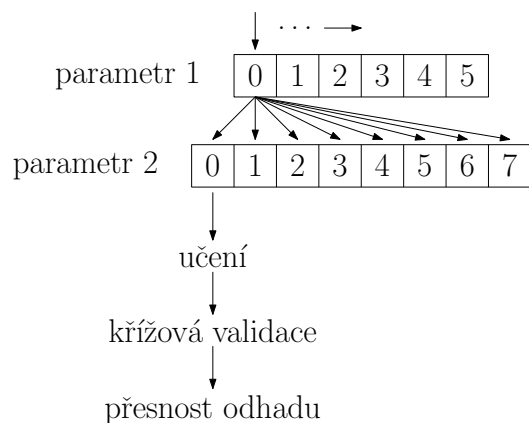
Základními metodami jsou [3]:

- manuální prohledávání (angl. *manual search*),
- systematické prohledávání (angl. *grid search*),
- náhodnostní prohledávání (angl. *random search*).

---

<sup>4</sup> Hyperparametry jsou parametry, které není možné určit ze vstupních dat, ale je potřeba je zadat z vnějšku.

Systematické prohledávání spočívá v následujících krocích, viz Obr. 4. Na začátku se definuje množina možných vstupních hyperparametrů. Pro každou jejich kombinaci se následně provede učení, křížová validace. Následně se vybere varianta s nejlepším výsledkem.



Obr. 4: Vizualizace metody systematického prohledávání (*Grid Search*).

---

## TECHNIKY METAMODELOVÁNÍ

---

Tvorba metamodelu je proces, který vytváří z jednoho modelu model jiný, jenž se přibližuje svým chováním modelu původnímu. Jak již bylo zmíněno v úvodu, tvorba metamodelů je vhodná pro aplikace, kde je potřeba ušetřit výpočetní výkon a výpočet plného modelu by trval příliš dlouho. Cílem je tedy snížit výpočetní náročnost původního modelu. V této části jsou stručně popsány čtyři metody, které se k tomuto účelu používají. Jmenovitě jde o polynomiální regresi, kriging (regresi s Gaussovským procesem), umělé neuronové sítě a náhodný les.

### 6.1 POLYNOMIÁLNÍ REGRESE

Nejjednodušší formou tvorby metamodelu je polynomiální regrese. Jedná se o statistickou metodu, která z dostupných vstupních dat, nezávislé proměnné (proměnných) a závislé proměnné, hledá jejich vzájemný vztah ve formě aproximační polynomiální funkce. [80]

Kvůli větší obecnosti jsou uvedeny vztahy pro případ dvou vstupních nezávislých proměnných a jedné závislé proměnné. V tomto případě se polynomiální regrese často nazývá metodou plochy odezvy (*surface response methodology*), např. [66].

Metoda je v této práci označena jako polynomiální regrese, nicméně v modifikované formě je možné použít i jinou aproximační funkci (v takovém případě se ale nejedná o polynomiální regresi).

Dále uvedené vztahy platí pro aproximaci metodou nejmenších čtverců s polynomem druhého stupně v případě dvourozměrného prostoru. V případě použití polynomu vyššího řádu by se uvedené vztahy rozšířily. Pro vztahy platné pro případ jedné nezávislé proměnné a jedné závislé proměnné viz [78, s. 236].

Cílem je z dostupných dat  $(\mathbf{x}_k, y_k \quad k = 1, 2, \dots, N)$  získat aproximační funkci  $\hat{y}$ :

$$y(\mathbf{x}) \rightarrow \hat{y}(\mathbf{x}). \quad (38)$$

Dostupná vstupní data jsou aproximována polynomem druhého stupně ve tvaru:

$$y_k = \beta_0 + \beta_1 x_{1k} + \beta_2 x_{2k} + \beta_{11} x_{1k}^2 + \beta_{22} x_{2k}^2 + 2\beta_{12} x_{1k} x_{2k} + \varepsilon_k, \quad (39)$$

kde  $\beta$  jsou jednotlivé koeficienty polynomu a  $\varepsilon_k$  chyba aproximace [80, s. 3].

Rovnici (39) je výhodné přepsat do maticové podoby:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (40)$$

kde jednotlivé členy rovnice (40) mají formu:

$$\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_m]^T, \quad (41)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_m]^T, \quad (42)$$

$$\boldsymbol{\beta} = [\beta_0, \beta_1, \beta_2, \beta_{11}, \beta_{22}, 2\beta_{12}]^T, \quad (43)$$

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{21} & x_{11}^2 & x_{21}^2 & x_{11}x_{21} \\ 1 & x_{12} & x_{22} & x_{12}^2 & x_{22}^2 & x_{12}x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{1N} & x_{2N} & x_{1N}^2 & x_{2N}^2 & x_{1N}x_{2N} \end{bmatrix}. \quad (44)$$

Nyní je nutné určit hodnoty koeficientů, což je možné udělat různými způsoby. Dále je uvedeno určení pomocí metody nejmenších čtverců, tzn. jako minimalizace součtu kvadrátů odchylek.

$$S = \sum_{k=1}^m \varepsilon_k^2. \quad (45)$$

Maticový zápis rovnice (45):

$$S = \boldsymbol{\varepsilon}^T \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (46)$$

Chybu aproximace  $\varepsilon$  je možné vyjádřit z rovnice (40) jako:

$$\varepsilon = \mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}. \quad (47)$$

Dosazením rovnice (47) do rovnice (46) vznikne:

$$S(\varepsilon\hat{\boldsymbol{\beta}}) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}). \quad (48)$$

Následným roznásobením závorčky v rovnici (48) vznikne:

$$S(\hat{\boldsymbol{\beta}}) = \mathbf{y}^T \mathbf{y} - \hat{\boldsymbol{\beta}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{y} + \hat{\boldsymbol{\beta}}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}. \quad (49)$$

Pro minimalizaci  $S$  platí:

$$\frac{\partial S(\hat{\boldsymbol{\beta}})}{\partial \hat{\boldsymbol{\beta}}} = 0. \quad (50)$$

Derivace  $S$  z rovnice (49) má hodnotu:

$$\frac{\partial S(\hat{\boldsymbol{\beta}})}{\partial \hat{\boldsymbol{\beta}}} = -2\mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})\hat{\boldsymbol{\beta}}. \quad (51)$$

Pro minimalizace tedy platí:

$$-2\mathbf{X}^T \mathbf{y} + 2(\mathbf{X}^T \mathbf{X})\hat{\boldsymbol{\beta}} = 0. \quad (52)$$

Další úpravou (52) vznikne:

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{X})\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}. \quad (53)$$

Úkolem je nyní určit hodnotu koeficientů  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  ze soustavy lineárních rovnic (53):

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}. \quad (54)$$

Pokud známe hodnoty koeficientů polynomu  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ , je možné určit hodnotu pomocí aproximované funkce i pro nové hodnoty  $\mathbf{X}$ :

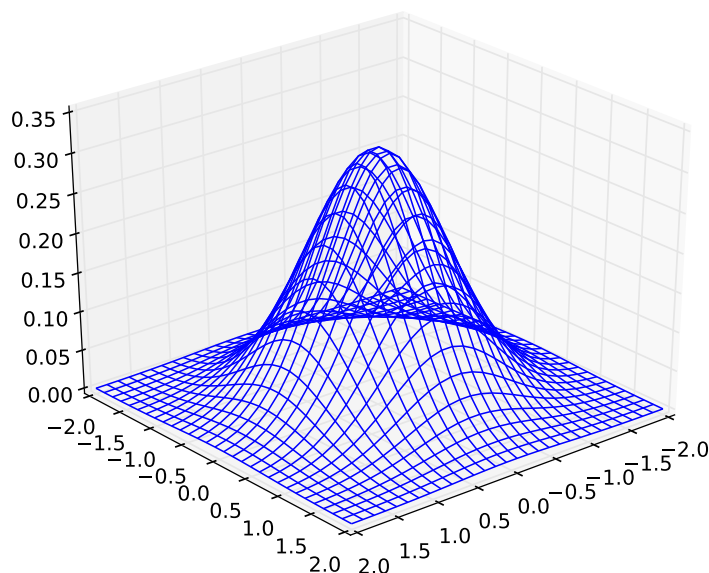
$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}. \quad (55)$$

## 6.2 REGRESE S GAUSSOVSKÝM PROCESEM (KRIGING)

Metody nazvané v této práci jako regrese s Gaussovským procesem jsou známé poměrně dlouhou dobu. V praktických aplikacích se používají od 60. let dvacátého století (pod pojmem kriging) v oblasti geostatistiky [49, 50], např pro predikci ložisek nerostných surovin. Díky prudkému rozvoji výpočetní techniky se dostaly do zájmu také v oblasti strojového učení [89].

Pro pochopení metody je potřeba nejprve definovat pojem Gaussovský proces. Gaussovský proces je kolekce náhodných veličin, kde vybereme-li konečný počet veličin, výstupem je mnohazměrné Gaussovské rozdělení [77, p. 13].<sup>5</sup>

Jak může vypadat dvourozměrné Gaussovské rozložení je vidět na Obr. 5.



Obr. 5: Příklad dvojrozměrného normálního (Gaussovského) rozdělení.

Gaussovský proces je plně určen dvěma funkcemi, a to funkcí střední hodnoty  $m(x)$  a kovarianční funkcí  $k(x, x')$ .

<sup>5</sup> Dalším možným názvem pro mnohazměrné Gaussovské rozdělení je vícerozměrné normální rozdělení.



Ve formě vzorce je možné to zapsat jako:

$$f(\mathbf{x}) \sim GP(m(\mathbf{x}), k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')). \quad (56)$$

Funkce střední hodnoty  $m(\mathbf{x})$  se běžně uvažuje jako nulová, tzn. po aplikaci funkce na vstupní data vznikne vektor 0 o velikosti  $N$ .

Velmi důležitou součástí je vhodná volba kovarianční funkce  $k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ , která se jinak označuje také jako jádro (angl. *kernel*). Obecně kovariance určuje, jak moc mezi sebou závisí dva body. Aplikaci kovarianční funkce na vstupní data vznikne kovarianční matice, která se využívá při odhadu hodnoty, přičemž existují různé druhy jader, velmi podrobně se jimi zabývá [14].

Základními druhy jader jsou [14]:

- squared exponential kernel,
- periodický (angl. *periodic*),
- lineární (angl. *linear*),
- Matérneho jádro (angl. *Matérn kernel*).

Často používaným typem jádra je squared exponential kernel [77]:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \exp\left[-\frac{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|^2}{2l^2}\right], \quad (57)$$

kde  $\sigma_f^2$  a  $l$  jsou parametry funkce, které se souhrnně nazývají hyperparametry.  $\sigma_f^2$  je průměrná vzdálenost funkce od středu [14] a obecně nastavuje škálování. Pomocí  $l$  se definuje, jak je funkce hladká. Malé hodnoty  $l$  říkají, že se funkce může rychle měnit. Parametr  $l$  také určuje maximální hodnotu, kterou je možné použít pro extrapolaci [14].

Určení hyperparametrů je jedním z klíčových úkolů při regresi s gaussovským procesem, což se provádí odhadem ze vstupních dat například pomocí metody maximální věrohodnosti (*maximum-likelihood*) nebo pomocí bayesovského přístupu (*Bayesian approach*) [89].

Periodické jádro má tvar [14]:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{2}{l^2} \sin^2\left(\pi \frac{\mathbf{x} - \mathbf{x}'}{p}\right)\right), \quad (58)$$

kde hyperparametr  $p$  určuje vzdálenost mezi opakováním funkce [15].

Lineární jádro má pak tvar [14]:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sigma_f^2 (\mathbf{x} - c)(\mathbf{x}' - c), \quad (59)$$

kde  $c$  je posuv.

Dalším velmi používaným jádrem je Matérn [77]:

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{2^{1-\nu}\Gamma(\nu)} \left( \frac{\sqrt{2\nu}|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{\ell} \right)^\nu K_\nu \left( \frac{\sqrt{2\nu}|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|}{\ell} \right), \quad (60)$$

kde  $K_\nu$  je modifikovaná Besselova funkce (číslo  $\nu$  je řád Besselovy funkce).

Na závěr ke kernelům je vhodné zmínit, že je možné je kombinovat dohromady pomocí operací násobení a sčítání.

### 6.2.1 Predikce pomocí Gaussovského procesu

Pomocí Gaussovského procesu odhadujeme hodnotu rozdělení pravděpodobnosti pro každý bod, ve kterém děláme predikci. Jsou dostupná vstupní data ve formátu:  $D = (\mathbf{x}_i, y_i) \quad i = 1, 2, \dots, N$ , kde hodnoty nezávislé proměnné  $\mathbf{x}$  jsou uvažovány jako více-rozměrné (například 2 rozměrné).

Pro regresi se používají následující vztahy (pozn. je předpokládána  $m(\mathbf{x} = 0)$ ) [4, 89]:

$$\hat{y}(\mathbf{x}_*) = \mathbf{k}^{*\top}(\mathbf{x}_*) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{y}, \quad (61)$$

$$\sigma_{\hat{y}}^2(\mathbf{x}_*) = k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_*) - \mathbf{k}^{*\top}(\mathbf{x}_*) \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}^*(\mathbf{x}_*), \quad (62)$$

kde  $\hat{y}(\mathbf{x})$  je funkce vyjadřující aproximaci hodnot  $y$ . Bod, ve kterém je prováděna predikce, je pak označen jako  $\mathbf{x}_*$ .

Kovarianční matice má tvar:

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \dots & k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{pmatrix}. \quad (63)$$

Vektor  $\mathbf{k}^*$  je pak definován ve tvaru:

$$\mathbf{k}^*(\mathbf{x}_*) = (k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_1), \dots, k(\mathbf{x}_*, \mathbf{x}_n))^T. \quad (64)$$

Klíčovou operací je inverze kovarianční matice, která může být komplikovaná pro velké rozměry matice.

Gaussovskými procesy se komplexně zabývá celá řada publikací. Velmi používaná je kniha od C. E. Rasmussena & C. K. I. Williamse: *Gaussian Processes for Machine Learning* [77]. Velmi kvalitní část o regresi s Gaussovským procesem má také kniha *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)* od Christophera M. Bishopa [4]. V těchto knihách je možné najít velmi detailní pojednání na téma Gaussovských procesů a jejich aplikace na úlohy strojového učení, především klasifikace a regrese. Automatickým návrhem modelů založených na Gaussovských procesech se zabývá disertační práce, jejíž autor je David Kristjanson Duvenaud [14].

Regrese s Gaussovským procesem je velmi obsáhlým tématem a je možné v rámci ní řešit celou témat. Například zajímavým případem je regrese v případě zašumělých vstupních dat (nezávislé proměnné  $x$ ), viz literatura [12, 19, 52]. Tento problém není v rámci této práce řešen, protože vstupem v aplikační části práce jsou data získaná pomocí simulací. Relevantním problémem je to v případě použití naměřených dat zatížených šumem k vytvoření metamodelu.

### 6.2.2 Výhody a nevýhody

Mezi hlavní výhody metody patří:

- je založená na pravděpodobnosti a statistice - poskytuje informaci o nejistotě odhadu,
- je možné ji implementovat pomocí operací maticového počtu.

Mezi hlavní nevýhody patří:

- pro velký počet vstupních dat vznikne velká kovarianční matice, jejíž inverze může být komplikovaná,
- závislost odhadu na vhodné volbě kovarianční funkce a nastavení jejích hyperparametrů.

### 6.2.3 Příklad vytvoření metamodelu - regrese s Gaussovským procesem

V této části textu je krátce popsán jednoduchý ilustrativní příklad regresní úlohy s použitím Gaussovského procesu. Pro jednoduchost jsou zvoleny funkční hodnoty funkce sinus ( $y$ ) v zadaných bodech  $x$ . Cílem je získat funkční závislost (model), která umožní určit hodnotu  $y$  mimo známé body  $x$ :

$$\hat{y} = f(x). \quad (65)$$

Jsou dostupná následující data:

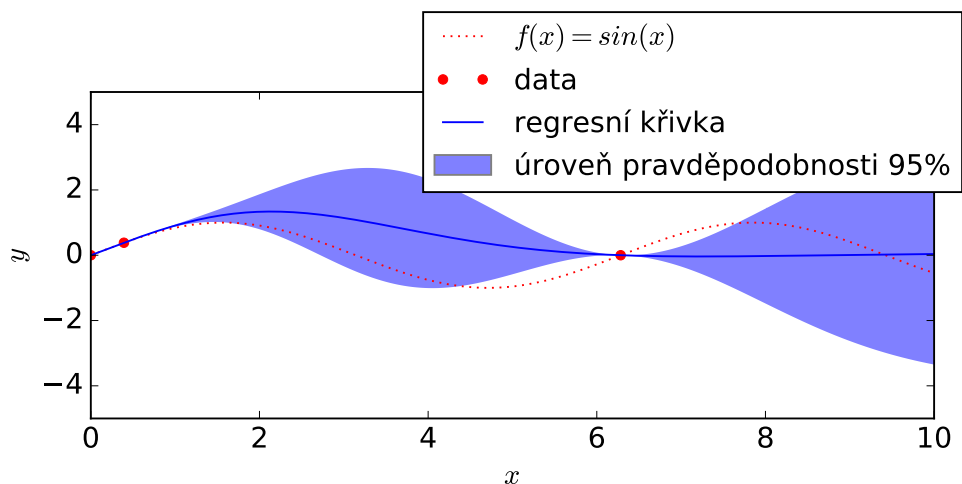
x	0	$\frac{\pi}{8}$	$2\pi$
y	0	0,38268	0

Tab. 1: Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - vstupní data.

Funkci je možné získat provedením regrese s použitím Gaussovského procesu, při které dojde k proložení zadaných hodnot funkcí se zohledněním normálního Gaussovského rozložení pravděpodobnosti. V případě určení hodnoty  $\hat{y}$  tedy vrátí jednak vlastní hodnotu, tak i informaci o „nejistotě“ jejího určení.

Následující graf Obr. 6 ukazuje výsledky proložení 3 zadaných hodnot a následné určení hodnot ve všech bodech pomocí získané funkční závislosti na intervalu  $\langle 0, 10 \rangle$  s krokem 0,001. Modrá oblast se nazývá oblast úrovně pravděpodobnosti 95 % a podává informaci o přesnosti „modelu“. Největší přesnost je v oblasti v okolí známých/zadaných hodnot, mimo ně je přesnost menší, případně nedostatečná.

V případě rozšíření vstupních dat o nové hodnoty a následné nové proložení je možné s větší přesností určovat další hodnoty v intervalu poblíž nově zadaných hodnot.



Obr. 6: Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu.

Na zmíněném příkladě v případě rozšíření vstupních dat o 1 bod  $[\frac{3\pi}{2}, -1]$ , je tabulka vstupních dat (Tab. 2) nyní ve tvaru:

x	0	$\frac{\pi}{8}$	$\frac{3\pi}{2}$	$2\pi$
y	0	0,38268	-1	0

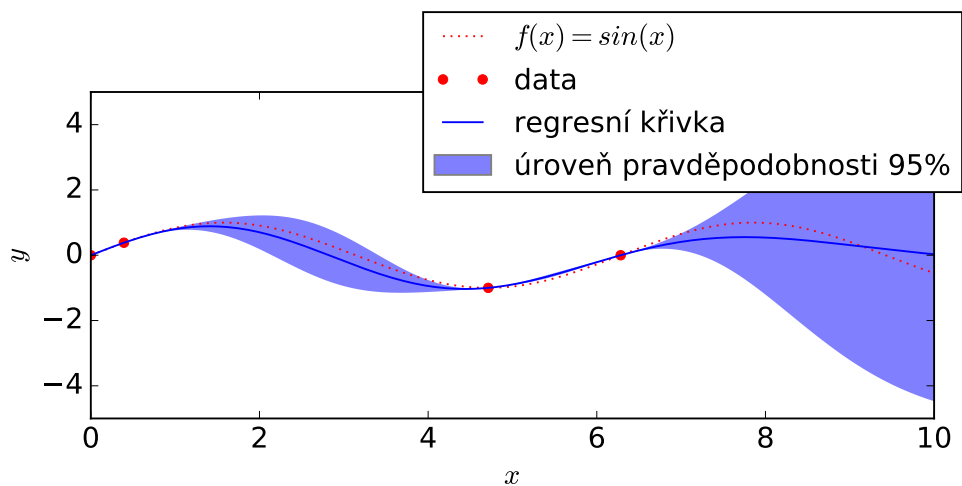
Tab. 2: Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - vstupní data rozšířená o jednu hodnotu.

Nové proložení funkcí a určení hodnot na intervalu  $\langle 0, 10 \rangle$  s krokem 0,001 je graficky znázorněno na Obr. 7.

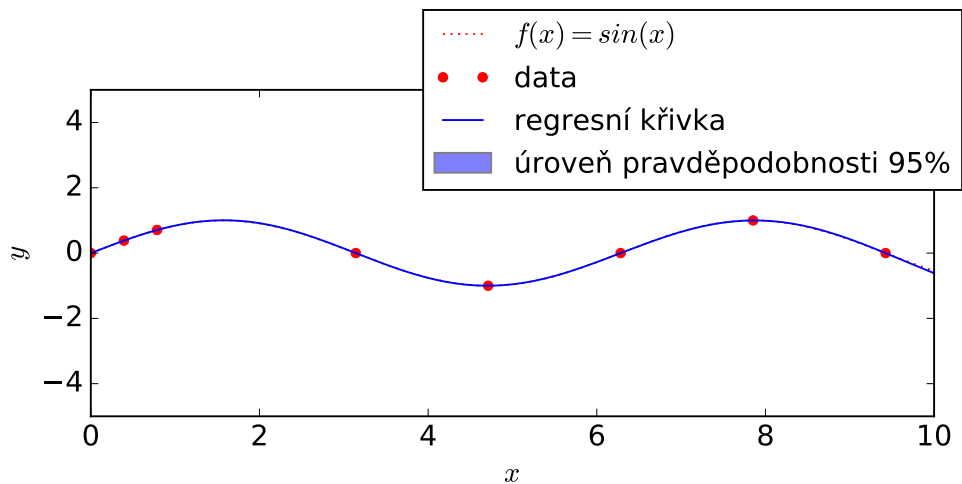
Obr. 6 a Obr. 7 názorně ukazují výhody metody regresní analýzy s Gaussovským procesem. Její výhody spočívají ve schopnosti proložit vstupní data funkcí a při predikci zároveň získat vedle vlastních hodnot i informace o přesnosti jejich určení.

Pokud by zadaná vstupní data v tabulce Tab. 1 byla výstupem simulace (matematického modelu), jednalo by se o vytvoření jednoduchého metamodelu.

Zmíněná metoda je silně závislá na počtu a kvalitě (přesnosti) vstupních dat, a protože se jedná o aproximační metodu, nemůže být ze svého principu stoprocentně přesná. Limitací je například, že pokud jsou dostupné pouze dva body, není možné určit přesnou aproximaci. Doplněním (učením) metamodelu je však možné snížit míru nejistoty určení. Například předchozí příklad doplněním dalších bodů do vstupních je možné metamodel vylepšit až do podoby na Obr. 8.



Obr. 7: Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - dodán další bod.



Obr. 8: Příklad regrese s užitím Gaussovského procesu - mnoho dostupných výsledků.

Z předchozích odstavců je zřejmé, že metoda pro tvorbu metamodelu je efektivní, pouze pokud jsou zvolena vhodná vstupní data.

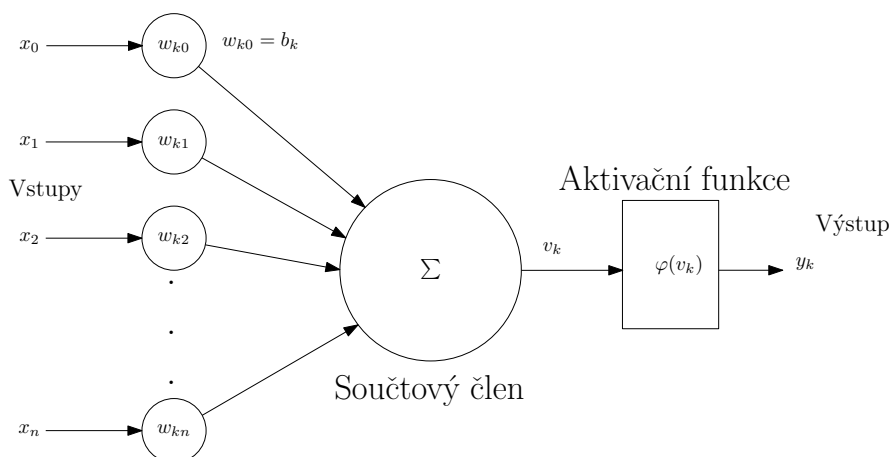
### 6.3 UMĚLÉ NEURONOVÉ SÍTĚ

Umělé neuronové sítě se běžně používají pro zpracování a klasifikaci dat, tedy i pro interpolaci dostupných dat a tím pádem i pro potřeby metamodelování [56]. Neuronovými sítěmi se velmi podrobně zabývá literatura [23, 27].

V případě interpolace dat se používají neuronové sítě s radiálními bázovými funkcemi (RBF). Další velmi často používanou metodou jsou vícevrstvé neuronové sítě (angl. *Multi Layer Artificial Neural Networks*).

Neuronová síť je inspirována lidským mozkem a skládá se z neuronů, které jsou uspořádány do vrstev. Typicky se používají sítě rozdělené celkem do 3 vrstev: vstupní, skryté a výstupní. Vstupní vrstva obsahuje signálové uzly a přenáší vstupní data. Skrytá vrstva se skládá z aktivační funkce, která dělá vlastní zpracování informací. Výstupní vrstva je lineární.

Model základního prvku neuronové sítě neuronu (někdy označovaného také jako perceptron<sup>6</sup>) je možné vidět na Obr. 9, kde  $w$  jsou synaptické váhy, které umožňují nastavit důležitost jednotlivých vstupů  $x$ . Člen  $b_k$  je posuv, pro který platí  $x_0 = +1$  a  $w_{k0} = b_k$  [27, s. 12].



Obr. 9: Nelineární model neuronu, podle [27, s. 12].

<sup>6</sup> Pojmem perceptron se také často označuje typ neuronové sítě, která se skládá z jediného neuronu.

Platí vztahy:

$$v_k = \sum_{i=0}^m w_{ki} \mathbf{x}_i + b_k, \quad (66)$$

$$y_k = \varphi(v_k), \quad (67)$$

kde  $\varphi$  je aktivační funkce.

Jednotlivé neurony se spojují do neuronových sítí a dále upravují, je nezbytné navrhnout architekturu neuronové sítě pro řešení daného problému. Nejjednodušší neuronová síť se skládá z jedné vrstvy. Aby bylo možné ji používat k regresi pro nelineární průběhy, je možné použít radiální bázovou aktivační funkci, nebo použít více vrstev.

Po navržení vhodné architektury neuronové sítě je potřeba ji naučit vykonávat danou úlohu. To spočívá v naladění synaptických vah (a případně členu pro posuv) pomocí dostupných vstupních trénovacích dat. Běžně používaný je algoritmus nazývaný anglickým názvem *Backpropagation* (metoda zpětného šíření chyby), který k naladění vah používá optimalizaci, například pomocí metody nejstrmějšího sestupu (angl. *Gradient Descent*). Detailní popis algoritmu je možné nalézt v literatuře [40, 57]

### 6.3.1 Neuronová síť s radiálními bázovými funkcemi

Architektura neuronové sítě s radiálními bázovými funkcemi je vidět na Obr. 10, skládá se z jedné vstupní vrstvy, jedné skryté vrstvy a jedné výstupní vrstvy.

Jsou dostupná vstupní data  $\{\mathbf{x}_i, d_i\}_{i=1}^N$  [27, s. 239], vstupní data mají rozměr  $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^{m_0}$ ,  $d_i \in \mathbb{R}^1$ . Je hledána funkce  $F(\mathbf{x})$ , která splní interpolační podmínku [27, s. 239]:

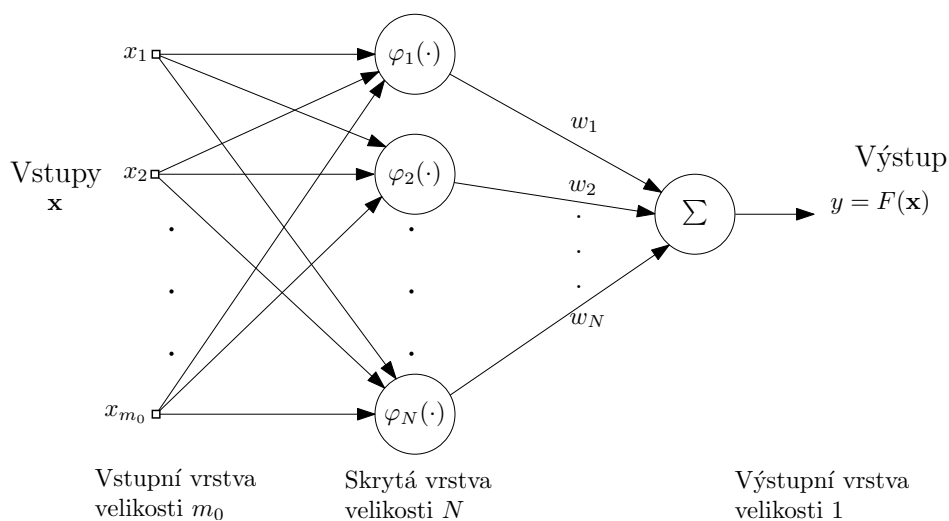
$$F(\mathbf{x}_i) = d_i, i = 1, 2, \dots, N. \quad (68)$$

Cílem regrese v případě neuronové sítě s RBF je zvolit funkci ve tvaru:

$$F(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N w_i \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|). \quad (69)$$

Aktivační funkce je obvykle Gaussovská funkce a počítá se eukleidovská vzdálenost mezi vektorem vstupních dat a vektorem parametrů neuronové sítě [58]. Výstupem sítě je závislost mezi výstupní proměnnou a několika vstupními proměnnými. Výstupní





Obr. 10: Neuronová síť s RBF pro regresní úlohu, podle [27, s. 240].

funkce se skládá z radiální bázové funkce (je pouze funkcí vzdálenosti) násobené váhovými koeficienty, viz [16].

Bázová aktivační funkce  $\varphi$  může být psána ve tvaru [27, s. 239]:

$$\varphi_i(\mathbf{x}) = \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_i^2} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2\right), \quad (70)$$

kde člen  $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$  určuje vzdálenost bodů vstupního vektoru  $\mathbf{x}$  vůči známým bodům vektoru  $\mathbf{x}_i$ , které jsou zvoleny jako střed radiální bázové funkce. Člen  $\sigma$  označuje šířku Gaussovské křivky. Aktivační radiální bázové funkce tvoří skrytou vrstvu neuronové sítě a je jich stejný počet, jako je počet vstupních prvků [27, s. 239].

Po přepsání do maticové podoby:

$$\begin{bmatrix} \varphi_{11} & \varphi_{12} & \cdots & \varphi_{1N} \\ \varphi_{21} & \varphi_{22} & \cdots & \varphi_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{N1} & \varphi_{N2} & \cdots & \varphi_{NN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_N \end{bmatrix}, \quad (71)$$

$$\Phi = \begin{bmatrix} \varphi_{11} & \varphi_{12} & \cdots & \varphi_{1N} \\ \varphi_{21} & \varphi_{22} & \cdots & \varphi_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{N1} & \varphi_{N2} & \cdots & \varphi_{NN} \end{bmatrix}. \quad (72)$$

Pro prvky matice  $\Phi$  platí:

$$\varphi_{ij} = \varphi(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j) \quad i, j = 1, 2, \dots, N, \quad (73)$$

kde  $\mathbf{w}$  je vektor synaptických vah.

$$\mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_N]^T. \quad (74)$$

Vektor známých výstupních dat  $\mathbf{d}$ :

$$\mathbf{d} = [d_1, d_2, \dots, d_N]^T. \quad (75)$$

Po přepsání soustavy lineárních rovnic do vektorové formy:

$$\Phi \mathbf{w} = \mathbf{x}. \quad (76)$$

Vektor synaptických vah  $\mathbf{w}$  se určí jako:

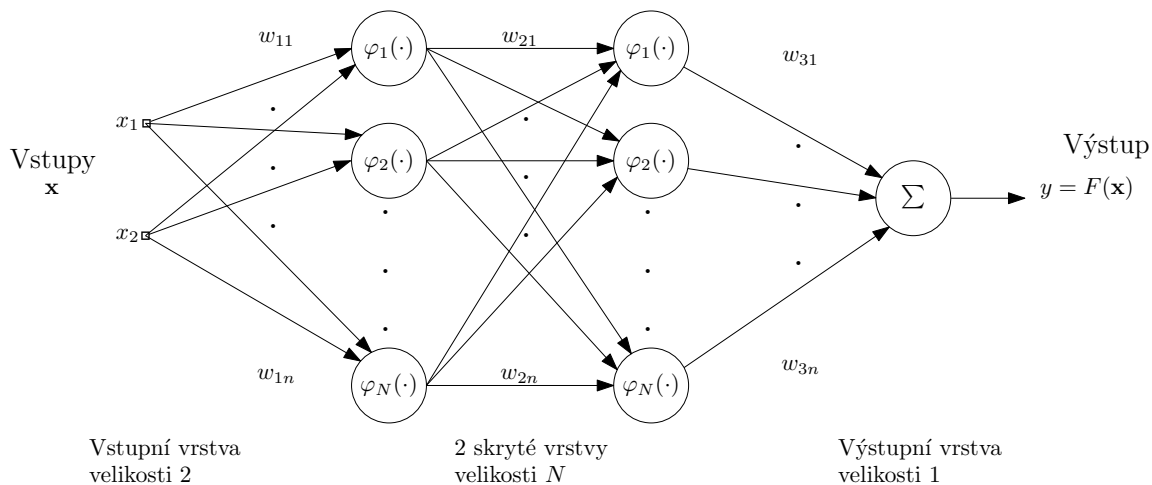
$$\mathbf{w} = \Phi^{-1} \mathbf{x}. \quad (77)$$

Pro vyřešení soustavy rovnic nesmí být interpolační matice  $\Phi$  singulární.

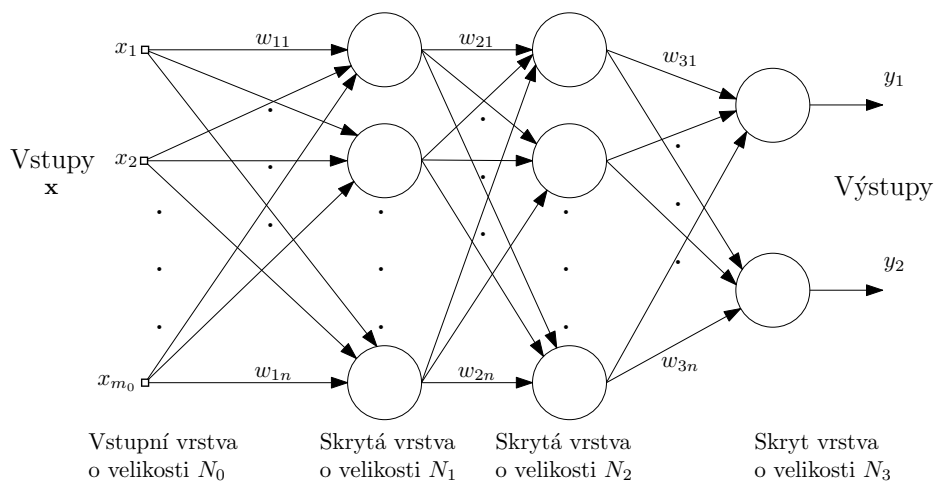
Výhodnou vlastností je, že pomocí lineární kombinace vah je možné vyjádřit obecně nelineární závislost výstupní proměnné na vstupní [45].

### 6.3.2 Vícevrstvá neuronová síť

Oproti neuronové síti s radiálními bázovými funkcemi se liší vícevrstvá neuronová síť v několika ohledech. Předně obsahuje  $N$  skrytých vrstev o velikosti  $M$ . Příklady možné architektury se dvěma skrytými vrstvami je vidět na Obr. 11 a Obr. 12<sup>7</sup>.



Obr. 11: Příklad vícevrstvé neuronové sítě se dvěma skrytými vrstvami (1 výstup).



Obr. 12: Příklad vícevrstvé neuronové sítě se dvěma skrytými vrstvami (2 výstupy).

<sup>7</sup> Inspirováno [27].

Dále se liší v použité aktivační funkci uvnitř skrytých vrstev. Je možné použít například následující aktivační funkce [73]:

- lineární (angl. *linear, identity*):  $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}$ ,
- sigmoidální (angl. *sigmoid*):  $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{(1+\exp(-\mathbf{x}))}$ ,
- hyperbolický tangens (angl. *tanh function*):  $f(\mathbf{x}) = \tanh(\mathbf{x})$ ,
- ReLU (*Rectified Linear unit function*):  $f(\mathbf{x}) = \max(0, \mathbf{x})$ .

Jedním ze současných trendů je používat aktivační funkci ReLU activation, jejíž výhodou je rychlé učení při použití algoritmu Gradient Descent [39].

#### 6.4 REGRESE POMOCÍ NÁHODNÝCH LESŮ - RANDOM FOREST REGRESSION

Další moderní metodou pro regresní analýzu jsou takzvané náhodné lesy, anglicky *Random Forest* (neboli *Random Forest Regression*). Náhodnými lesy se intenzivně zabýval Leo Breiman, např. v [5], který je často citován jako autor metody [36]. Z české literatury se problematikou zabývá například [34, 36]. Dalšími vhodnými zdroji jsou [11, 30, 85]

Náhodné lesy patří do kategorie technik kombinujících výstupy více modelů (angl. *Ensemble methods*). Tyto metody využívají myšlenku, že kombinace výstupu více modelů bude mít lepší vypovídající hodnotu, než použití modelu jednoho, a dojde k jeho zlepšení a bude odstraněn problém s přeučněním modelu.

Před vlastním vysvětlením principu náhodného lesa je potřeba definovat pojem rozhodovací strom, na kterém je metoda založena. Z rozhodovacích stromů je následně vytvořen náhodný les.

##### 6.4.1 Rozhodovací stromy

Rozhodovací strom je metoda hierarchického utřídění rozhodovacích pravidel. Jde o grafické znázornění rozhodování. Hovoří se o rozhodovacích stromech vzhledem k jejich analogii k opravdovým stromům. Strom během procesu učení roste a větví se.

Rozhodovací stromy mohou být dle cílové aplikace a druhu výstupní veličiny dvojího typu:

- klasifikační stromy,
- regresní stromy.

Každý strom se skládá celkem ze tří částí:

- kořenový uzel (angl. *root node*),
- dceřiné uzly (angl. *decision node*), v něm se dělá větvení (angl. *splitting node*),
- koncové (terminální) uzly / listy (angl. *leaf/terminal node*).

Proces tvorby (růstu) stromu je následující. Základním prvkem je kořenový uzel, který na začátku obsahuje celý soubor vstupních dat. Z něho dochází k prvnímu větvení (angl. *splitting*) buď rovnou do terminálních uzlů, nebo do dceřiných uzlů, ve kterých dochází k dalšímu větvení. V terminální uzlech už nedochází k dalšímu větvení, nazývají se také listy (angl. *leaves*) a dochází v nich k vlastní predikci.

Na základě druhu větvení se dělí na binární a nebinární stromy. U binárních stromů dochází v každém dceřiném nebo kořenovém uzlu k větvení na dvě větve, tedy odpovídá se na otázku ANO/NE. Toho se dosahuje pomocí operátoru  $==$  v případě klasifikačních stromů, nebo  $<$  nebo  $>$  v případě regresních stromů.

Pro efektivní dělení se v každém bodě dělení určuje tzv. kritériální statistika (angl. *splitting criterion*). Pro regresní stromy se používá kritérium minima kvadratické chyby (angl. *Least Square Deviation*)  $Q(T)$ , která se určí za pomoci aritmetického průměru (78) a dělá se vždy v jednom konkrétním uzlu (označení  $t$ ) stromu  $T$ .

$$\bar{y}_t = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} y_{i(t)}. \quad (78)$$

Ze znalosti průměru se následně určí vlastní kritérium minima kvadratické chyby  $Q(T)$ :

$$Q_t(T) = \frac{1}{N_t} \sum_{i=1}^{N_t} (y_i - \bar{y}_t)^2. \quad (79)$$

V případě klasifikačních stromů se používají kriteria s názvem Gini index, Entropie a klasifikační chyba. Pro jejich určení viz [36, 85]

Za využití výše zmíněných principů se tvoří vlastní stromy. Častým algoritmem řešení tvorby stromu je metoda nazývaná jako CART (*Classification And Regression Trees*), která platí pro klasifikační i regresní stromy. V metodě CART se používá pouze binární rozdělení. Metoda CART nejdříve nechá strom vyrůst na maximum a pak se následně prořezává[34].

Popis algoritmu CART [36]:

1. rozdělení vstupního souboru dat na trénovací a testovací,
2. nalezení nejlepšího rozdělení každé z nezávislých proměnných (prediktorů),
  - a) seřazení hodnoty prediktorů od nejmenšího po největší,
  - b) projití všech hodnot nezávislé proměnné a výpočet kritériální statistiky všech možných rozdělení závislé proměnné na dva dceřiné uzly
  - c) pokud je  $X \geq x_i$ :  $Y$  jde do levého uzlu, jinak jde do pravého,
  - d) zvolení hodnoty s minimální kritériální statistikou dělení  $Y$  (jedna pro každou nezávislou proměnnou),
  - e) rozdělení souboru dat  $y_i$  do dvou dceřiných uzlů na základě  $X$  s minimální kritériální statistikou.
3. rozdělení dle hodnoty určené v předchozím bodě do dvou dceřiných uzlů,
4. opakování dvou předchozích bodů, dokud nejsou splněna kritéria pro zastavení růstu (prediktory vybíráme s opakováním z celé množiny).
5. ověření vhodné velikosti stromu pomocí testovacích dat a eventuální prořezání stromu.

Výsledkem maximálního růstu stromu může být strom, který bude postižen problémem přeučení. Aby se tomu zabránilo, používají se různé techniky. Nejpoužívanějšími metodami je prořezávání stromu (angl. *pruning*) a zastavení růstu (angl. *stopping criterion*). Při prořezávání dochází k nahrazení podstromu terminálním uzlem a řídí se kritériem složitosti stromu (angl. *cost complexity criterion*) [36].

Zastavení růstu stromu (angl. *stopping rules*) se řídí dle následujících podmínek [36]:

- maximem je velikost vstupního souboru dat,
- v terminální uzlu je jen jeden bod,
- všechny body v uzlu mají stejnou hodnotu nezávislé proměnné (prediktoru),
- všechny body v uzlu mají stejnou hodnotu závislé proměnné,
- parametrem se dá omezit maximální počet větvení,
- parametrem se dá omezit maximální počet bodů v koncovém uzlu,
- parametrem se dá omezit větvení na základě střední kvadratické chyby.

Další alternativou k omezení přeučení je použití náhodného lesa.

Výhody klasifikačních a regresních stromů:

- jednoduché na pochopení,
- jednoduché na implementaci,
- jednoduché na interpretaci výsledků,
- fungují na lineární i nelineární úlohy,
- neparametrická metoda.

Nevýhody klasifikačních a regresních stromů:

- malá změna vstupu může velmi měnit výstup,
- potencionální problém s přeučení modelu - řeší například náhodný les (*random forest*),
- nevhodné na malý počet vzorků.

#### 6.4.2 Příklad rozhodovacího stromu

Je uvažován následující ilustrativní příklad. Je dostupný nový projekt a na základě dostupnosti rozpočtu a vhodného týmu je nutné rozhodnout, zda je možné projekt realizovat, nebo ne. Na Obr. 13 je vidět vizualizace rozhodovacího procesu pomocí klasifikačního stromu.

Výstupem klasifikačního stromu jsou tedy dvě třídy: lze realizovat, nelze realizovat. Jedná se tedy o klasickou úlohu klasifikace. Na velmi podobném principu pracují regresní stromy, viz následující ilustrativní příklad.

#### 6.4.3 Příklad regresního stromu

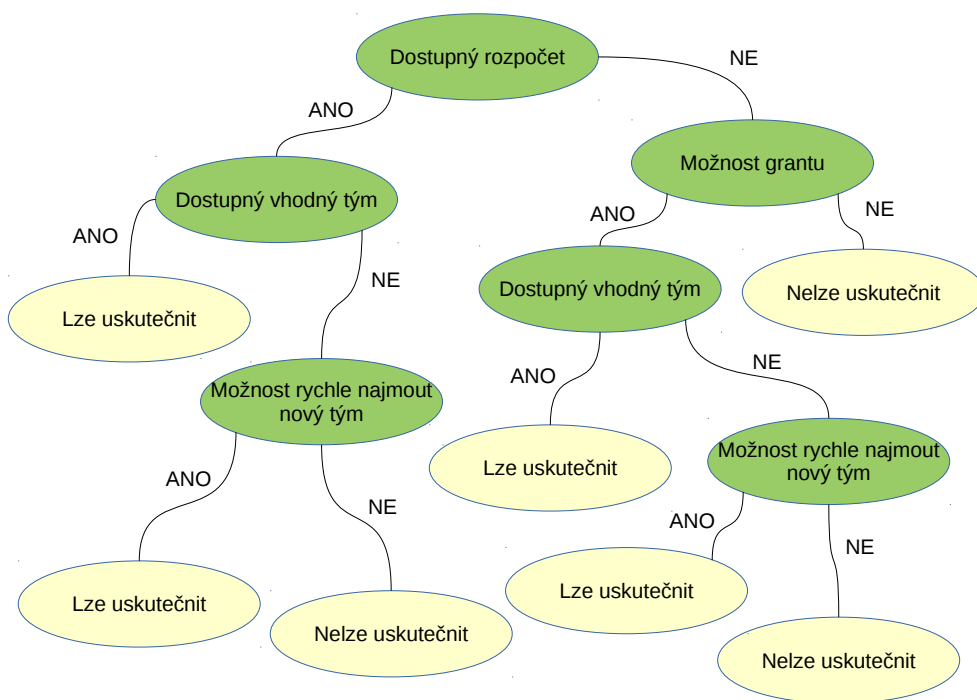
Jsou dostupná následující vstupní data, viz tabulka 3.

$x$	0	1	2	3
$y$	0	2	4	5

Tab. 3: Příklad regresního stromu - vstupní data.

Dle tabulky je zřejmé, že se jedná o jednoduchou lineární závislost.

Jedna z možných variant vytvoření regresního stromu je vidět na Obr. 14.



Obr. 13: Příklad rozhodovacího stromu.

Výstupem regresního stromu je spojité veličina, respektive v tomto případě celé číslo. Regresní strom například pro vstupní hodnotu  $x = 1,5$  odhadne hodnotu  $y = 2$ .

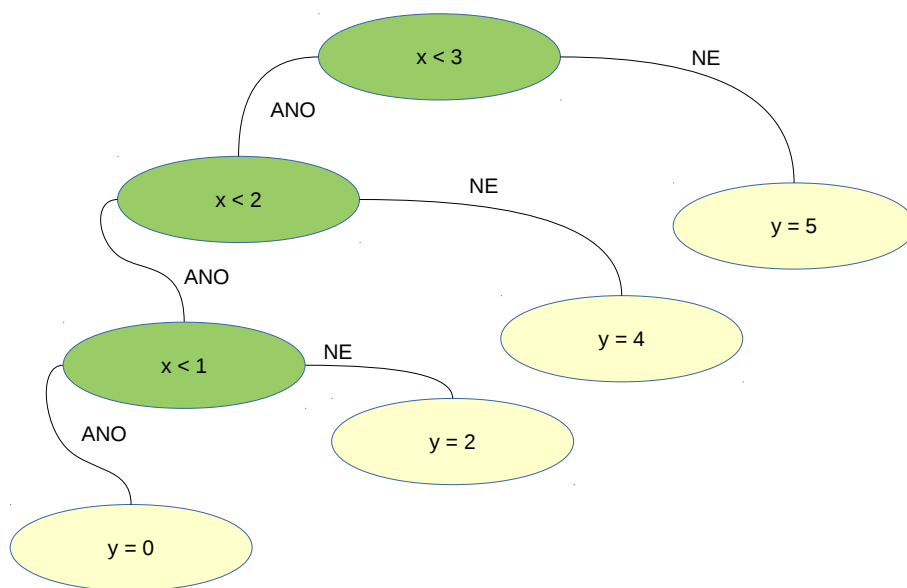
Je také vidět, že není možné efektivně odhadnout hodnotu pro  $x$  větší než je maximální hodnota vstupních dat. Například pro  $x = 7$  odhadne strom hodnotu  $y = 5$ . Regresní stromy mají obecně problém s extrapolací.

#### 6.4.4 Od regresního stromu k náhodnému regresnímu lesu

Jedním z přístupů k řešení problémů a nestability regresních (a klasifikačních stromů) je jejich seskupení do skupin lesů a jejich naučení náhodnou kombinací dostupných trénovacích dat. Tato metoda se nazývá náhodný les (*Random Forest*).

Náhodný les se skládá z  $n$  stromů  $T_1 \dots T_n$ , přičemž každý strom provádí predikci a následně je hodnota zprůměrována (u klasifikace jednotlivé stromy hlasují o výsledku). To zvýší výpočetní náročnost problému, ale dojde ke zpřesnění odhadu [34]. Algoritmus tvorby stromu je odolný vůči odlehlým hodnotám, které lze včas odhalit při křížové validaci.

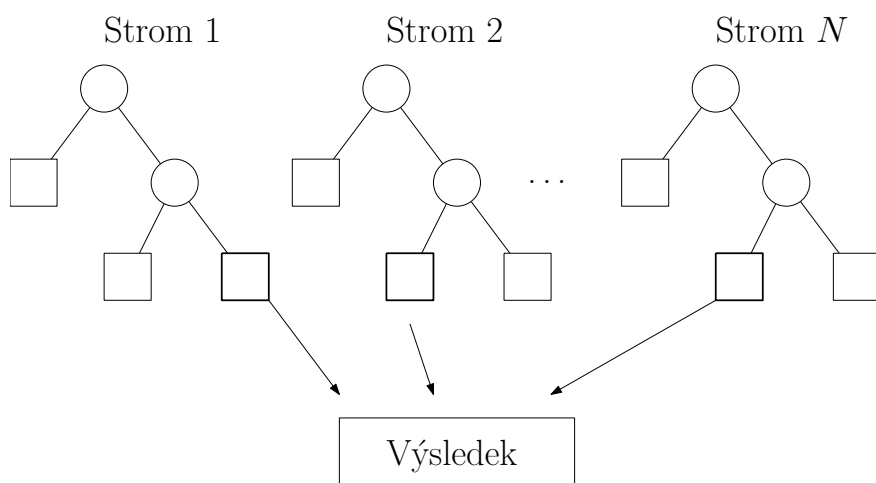




Obr. 14: Příklad regresního stromu.

Opatřením proti přeučení modelu je založeno na myšlence statistického porovnání výstupů množství stromů. Každý regresní strom v lese roste do své maximální velikosti, není tedy použito prořezávání ani zastavení růstu stromu.

Principiální schéma náhodného lesa je vidět na Obr. 15.



Obr. 15: Příklad regresního lesa.

Výhody a nevýhody regresních lesů jsou následující.

Výhody:

- je možné je použít pro lineární i nelineární úlohy,
- jednoduchost, názornost a interpretovatelnost metody,
- funguje na libovolná vstupní data,
- odstranění problému s přeučením modelu,
- vzhledem ke principu je snadná paralelizace výpočtů,
- funguje na klasifikační i regresní úlohy,
- není potřeba řešit prořezávání stromů.

Nevýhody:

- ztráta přehlednosti regresních stromů,
- problém s predikcí mimo interval (extrapolací), na kterém byl naučen.

## 6.5 SW FRAMEWORKY POUŽÍVANÉ PRO TVORBU METAMODELŮ

V oblasti strojového učení (*machine learning*) a oblasti dolování dat (angl. *data mining*) se používá velká řada SW produktů, které umožňují provádět pokročilé operace se vstupními daty. Dále jsou krátce zmíněny některé běžně používané nástroje. Existuje jich ale celá řada a zmínit všechny není prakticky možné, protože vzhledem k velkému zájmu o oblast strojového učení neustále vznikají nové projekty.

Běžně používané free nebo open-source SW nástroje jsou:

- scikit-learn: <http://scikit-learn.org>
- Weka: <https://www.cs.waikato.ac.nz/ml/weka>
- LIBSVM: <https://www.csie.ntu.edu.tw/~cjlin/libsvm>
- knihovny pro programovací jazyk R: <https://cran.r-project.org/web/packages>

V oblasti hlubokého strojového učení jsou běžné open-source frameworky:

- TensorFlow: <https://www.tensorflow.org>
- Microsoft Cognitive Toolkit (CNTK): <https://www.microsoft.com/en-us/cognitive-toolkit>
- Theano: <http://deeplearning.net/software/theano>
- Torch: <http://torch.ch>
- Caffe: <http://caffe.berkeleyvision.org>

Vedle open source programů existují i proprietární řešení. Hojně využívaným vývoje-  
vým prostředím je Matlab/Simulink od firmy Mathworks: [https://www.mathworks.com/  
solutions/machine-learning.html](https://www.mathworks.com/solutions/machine-learning.html).

Respektive jsou potřeba následující toolboxy:

- Statistics and Machine Learning Toolbox™,
- Neural Network Toolbox™,
- Computer Vision System Toolbox™,
- Fuzzy Logic Toolbox™.

Na pomezí mezi proprietárním a zdarma dostupným řešením je komplexní projekt zaměřený přímo na metamodelování SURrogate MOdeling (SUMO) Toolbox: <http://www.sumo.intec.ugent.be/SUMO>, který je vyvíjen v prostředí Matlab na univerzitě v Ghentu. Tato knihovna slouží pro pokročilou práci s metamodely. Na pomezí mezi proprietární a open-source je z důvodu, že pro komerční použití je potřeba si zakoupit licenci, pro čistě akademické výzkumné projekty je možné ho používat zcela zdarma.[21]

Velmi běžnými tématy, především v oblasti velkých dat (angl. Big Data) a hlubokého učení (*Deep Learning*), je efektivní využití CPU, paralelizace výpočtů, distribuované výpočty, využití grafických karet pro výpočty atd.

Pro příklady používané v této práci je použit SW framework Scikit learn založený na programovacím jazyce Python. Proto je dále popsán. Ostatní frameworky nejsou zmiňovány, dodatečné informace je možné najít na webových stránkách jednotlivých projektů, viz. odrážky v této kapitole.

### 6.5.1 *Scikit-learn*

Scikit-learn je open-source knihovna pro strojové učení napsaná v programovacím jazyce Python (především na projektech NumPy, SciPy a matplotlib)[73]. Oficiální webové stránky stabilní verze knihovny jsou na adrese: <http://scikit-learn.org/stable/>. Zdrojový kód je volně dostupný na GitHub stránce projektu <https://github.com/scikit-learn/scikit-learn>.

Mezi hlavní výhody knihovny patří:

- otevřený kód - je možné se podívat na vlastní implementaci algoritmů,
- aktivní vývojářská komunita,
- široké spektrum metod pro strojové učení,
- používá moderní ověřené metody,
- díky použití jazyka Python je platformně nezávislá (Windows, Linux, ...),
- fungující review process (stabilita),
- snadná instalace pomocí příkazu `pip`.

Podporuje následující druhy úloh:

- klasifikace (*Classification*),
- regrese (*Regression*),
- shlukování (*Clustering*).

Dále má podpůrné nástroje pro:

- redukci dimenze (*Dimensionality reduction*),
- výběr modelu (*Cross-validation*),
- přípravu dat (*Preprocessing*).

Z knihovny Sci-kit learn je možné použít například následující algoritmy pro regresi<sup>8</sup>:

- zobecněné lineární modely (*Generalized Linear Models*) -> např. metoda nejmenších čtverců, hřebenová regrese (*Ridge Regression*), polynomiální regrese atd.,
- *Kernel ridge regression*
- metoda podpůrných vektorů (*Support Vector Machines*),
- *Stochastic Gradient Descent*
- algoritmus k-nejbližších sousedů (*Nearest Neighbors*),
- regrese s Gaussovským procesem (*Gaussian Process Regression (GPR)*),
- regresní stromy (*Regression Trees*),
- Metody kombinování modelů (*Ensemble Methods*)- např. náhodné lesy (*Random Forest*), *Bagging*, ...,
- neuronové sítě s učitelem (*Neural Network Models (supervised)*).

Algoritmy pro klasifikaci a shlukování nejsou dále zmíněny, jejich seznam je možné najít na: [http://scikit-learn.org/stable/supervised\\_learning.html#supervised-learning](http://scikit-learn.org/stable/supervised_learning.html#supervised-learning) a <http://scikit-learn.org/stable/modules/clustering.html#clustering>.

---

<sup>8</sup> Platné pro verzi scikit-learn 0.19.1.

---

## PRAKTICKÉ ASPEKTY TVORBY METAMODELŮ

---

### 7.1 PROBLEMATIKA VOLBY VSTUPNÍCH DAT - DESIGN OF EXPERIMENTS

Velmi důležitou součástí tvorby metamodelu je volba vstupních dat, která jsou následně proložena vhodnou křivkou/plochou. Je tedy potřeba provést  $n$  výpočtů plného modelu pro vhodné varianty vstupních parametrů. Aby bylo možné pokrýt zvolenou oblast, musí být zvolená data rozložena rovnoměrně, aby pokryla celou oblast. Toho je možné docílit ruční volbou vstupních dat, případně existují metody, které tuto volbu provedou automaticky. Obecně se problematika volby vstupních dat skrývá pod anglickým názvem *Design of Experiments (DOE)*, česky je možné to přeložit jako plánování experimentu. Jinými slovy se zabývá metodickou volbou vstupních dat pro experiment (i počítačový, resp. numerický).

V případě ručního zvolení vstupních bodů i automatické volby, je vždy nutné určit potřebný počet bodů. Toto číslo je potřeba zvolit vhodně vzhledem k výpočetní náročnosti úlohy. Čím více výpočtů provedeme, tím bude metamodel přesnější. Získání velkého množství může být ale neúměrně dlouhé.

Běžné metody pro volbu vstupních dat jsou například [93]:

- *Latin Hypercube Sampling*,
- *Hammersley Sampling*,
- *Monte Carlo Sampling*,
- *Voronoi Tessellation*.

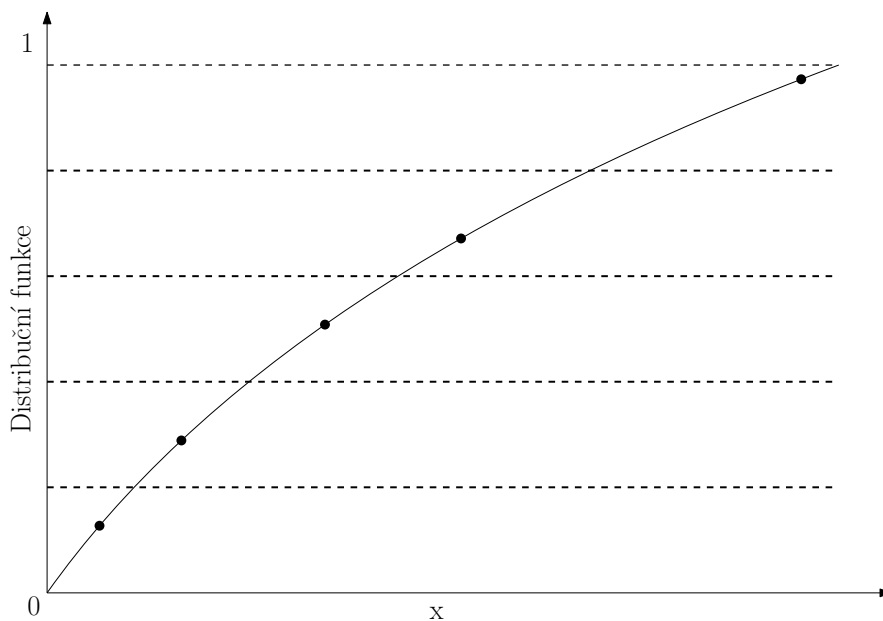
Velmi často používanou technikou je vzorkování pomocí *Latin Hypercube* [28, 53, 84], které se používá pro generování náhodných vzorků, funguje na jednoduchém principu. Vezme se funkce hustoty pravděpodobnosti pro sledovanou proměnnou a rozdělí se na  $N$  stejných částí. V každé části se náhodně zvolí jeden bod. V případě vícerozměrného pro-

storu se provede stejný postup pro každou proměnnou a následně se provede náhodná kombinace získaných dat. [92]

Shrnutí postupu v krocích:

- rozdělení distribuční funkce na  $N$  stejně velkých intervalů,
- v každém intervalu náhodné vybrání jednoho bodu reprezentujícího daný interval.

Následující obrázek vykresluje princip metody pro jednorozměrný vstupní prostor:



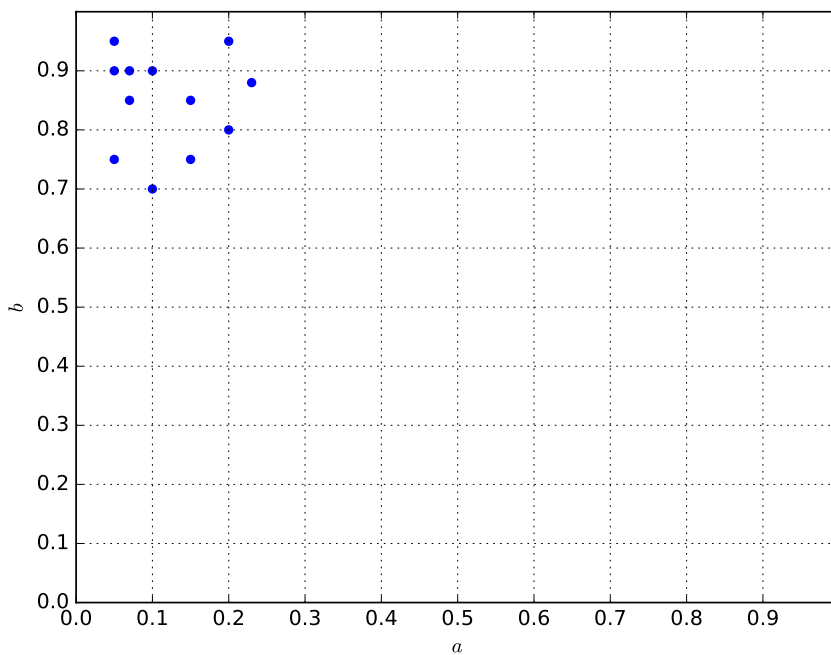
Obr. 16: Ilustrace metody Latin Hypercube, podle [92].

Pro použitou metodu *Latin Hypercube Sampling (LHS)* je dále uveden ilustrativní příklad. Další metody nejsou vzhledem k rozsahu práce popisovány, detaily k nim je možné najít například v [2, 6, 10, 90].

### 7.1.1 Ilustrativní příklad

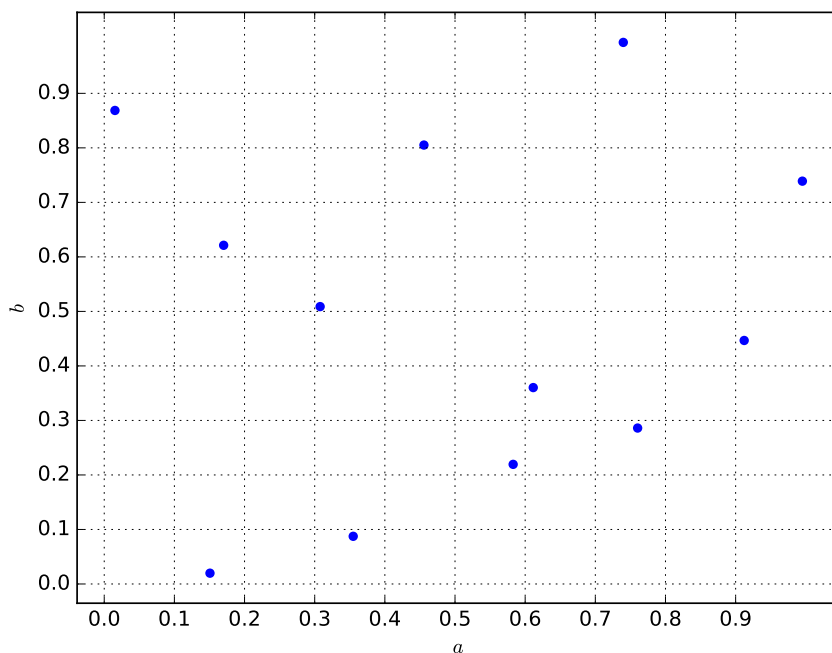
Je uvažován následující ilustrativní příklad. Bude potřeba provést výpočty pro dva vstupní parametry  $a$  a  $b$ , přičemž každý z nich je definován na intervalu  $\langle 0,1 \rangle$ , tzn.  $a \in \langle 0,1 \rangle$  a  $b \in \langle 0,1 \rangle$ . Úkolem je nalézt vhodné rozložení pro 12 bodů, ve kterých by se následně provedly výpočty.

Pro srovnání je na Obr. 17 vidět nevhodné zvolení vstupních dat, protože vůbec nepokrývá velké části sledovaného prostoru a je tedy na sledovaném intervalu nepoužitelné.



Obr. 17: Nevhodná volba vstupních dat.

Oproti tomu na Obr. 18 je vidět zvolení vstupních data pomocí LHS, které je vzhledem k limitu 12 vstupních bodů vhodné.



Obr. 18: Vhodná volba vstupních dat Latin - Hypercube sampling.

## 7.2 PROBLEMATIKA PŘEUCENÍ A NEDOUČENÍ MODELU - ILUSTRATIVNÍ PŘÍKLAD

Jedním z problémů společných pro všechny metody strojového učení pro regresní úlohy je problematika přeučení (angl. *Overfitting*), případně nedoučení modelu (angl. *Underfitting*).

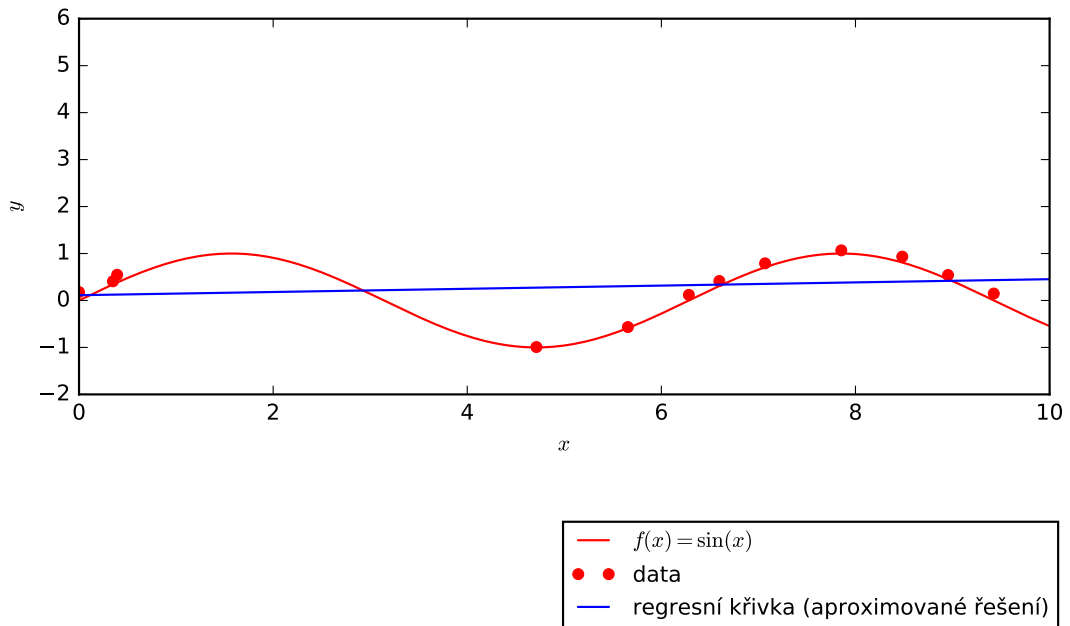
Následující příklad ilustruje podstatu problému. Pro ilustraci je zvolena dobře známá funkce sinus, ke které je připočten drobný náhodný šum. Vstupní data jsou prokládána polynomiálními funkcemi různého řádu pomocí metody nejmenších čtverců.

Jsou-li vstupní data proložena polynomem prvního řádu, nejsme schopni věrohodně předpovídat hodnoty, došlo k nedoučení modelu, viz Obr. 19.

V případě, že jsou vstupní data proložena polynomem šestého řádu, je možné predikovat hodnoty s určitou nepřesností, viz Obr. 20.

Jsou-li však vstupní data proložena polynomem desátého řádu, je možné udělat předpoklad, že by měla být vstupní data proložena lépe, a mělo by být možné predikovat hod-

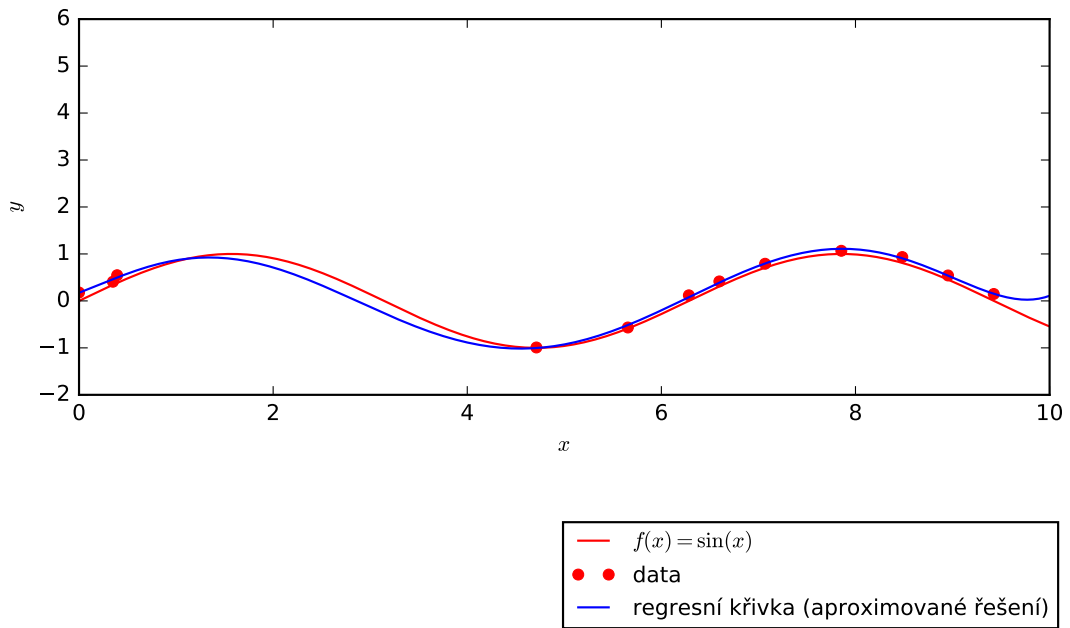




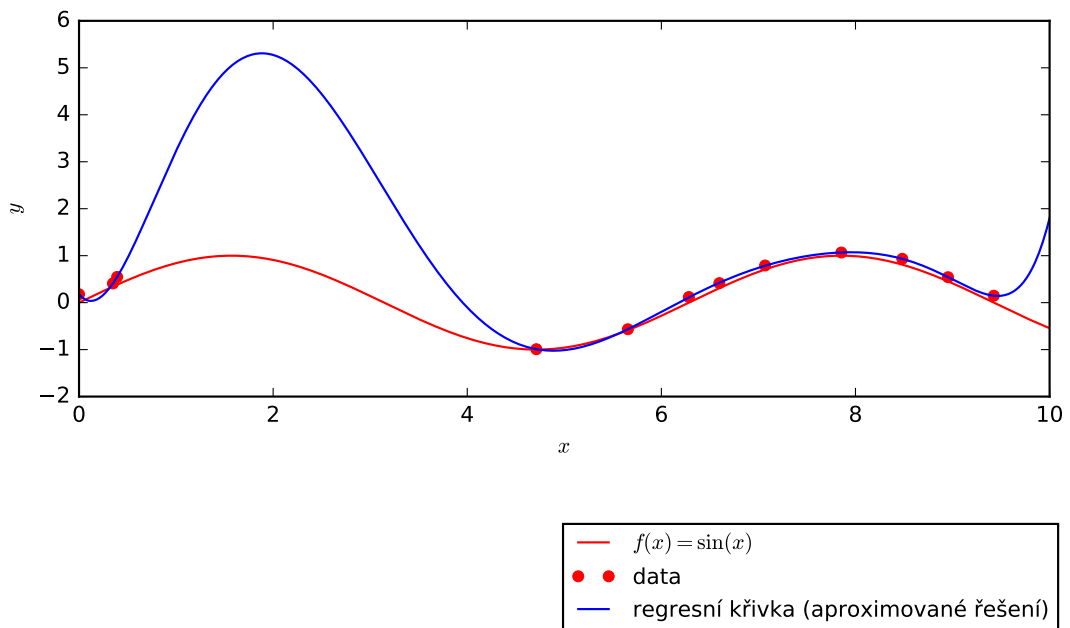
Obr. 19: Nedoučený model.

noty s menší nepřesností. K tomu skutečně dojde ve zvolených bodech, ale na zbytku intervalu může být odhad hodnoty naprosto chybný, viz Obr. 21.

Obecným závěrem, který je možné udělat, je, že jsou-li aproximační funkce příliš komplexní, může v závislosti na použitých vstupních datech dojít k přeučení modelu, který bude poskytovat nekvalitní odhady. Stejně tak nekvalitní odhady bude poskytovat i model nedoučený.



Obr. 20: Správně naučený model.



Obr. 21: Přeučený model.

Část III

PŘÍKLADY UŽITÍ METAMODELŮ

---

## LASEROVÉ SVAŘOVÁNÍ OCELOVÝCH DESEK

---

### 8.1 ÚVODNÍ POPIS ÚLOHY LASEROVÉHO SVAŘOVÁNÍ

Reálná úloha, na které chci demonstrovat možnost použití metamodelu, je z oblasti elektrického tepla, konkrétně se jedná o úlohu laserového svařování dvou ocelových desek. Tento technologický proces je možné za zjednodušujících předpokladů modelovat pomocí metody konečných prvků. Výstupem simulace je teplotní profil svaru. Jeho analýzou je na základě izotermy možné určit hloubku svaru  $p$  (m), kterou je možné použít ke kvantifikaci kvality. Při změně vstupních parametrů procesu je ale nutné přepočítat znovu celé teplotní pole a hloubku svaru. Účelem metamodelu je nahradit výpočet pomocí aproximace a následně odhadovat hloubku svaru pro libovolné vstupní parametry. Cílem užití metamodelování je ušetřit výpočetní čas, nikoliv nahradit „plný“ konečně-prvkový model.

### 8.2 TECHNOLOGIE LASEROVÉHO SVAŘOVÁNÍ A HYBRIDNÍ LASEROVÉ SVAŘOVÁNÍ

Jednou z velmi častých technologií používaných ke svařování je laser. Jeho principem je koncentrování velkého množství energie na malou plochu, čímž dochází k rychlému nárůstu teploty a jejím působením k vzniku nových meziatomárních vazeb (spojení materiálu). Vlastní svařování provádí laserový paprsek, který se pohybuje rychlostí  $v$  v místě sesazení dvou ocelových desek. Přitom na průběh svařování má vliv celá řada faktorů, je proto možné hovořit o technologickém procesu svařování.

Parametry, které mají vliv na průběh svařování, jsou následující:

- průměr svazku laseru,
- výkon laseru,
- rychlost pohybu paprsku,
- materiálové parametry (největší vliv příměsí uhlíku (C) a křemíku (Si).),
- rozměry desek.

Laserové svařování má celou řadu výhod, ale i nevýhod. Obojí je shrnuto v následujících bodech.

Mezi jeho hlavní výhody patří:

- je možné ho snadno řídit (výkon dodávaný do laseru, rychlost posuvu),
- vysoká přesnost,
- nevznikají žádné zplodiny (šetrné k životnímu prostředí).

Nevýhody je možné v bodech shrnout jako:

- velká hodnota zbytkového napětí a pnutí způsobená extrémně rychlým ohřevem a ochlazování povrchu materiálu.

Vysoká hodnota zbytkového napětí a pnutí je způsobena velmi rychlou změnou teploty na povrchu svařovaného materiálu. Rychlost změny dosahuje řádově až  $1000\text{ °C} \cdot \text{s}^{-1}$ . Toto zbytkové pnutí a napětí je rizikové z hlediska kvality svaru, protože kvůli němu může snadno dojít k mechanickému poškození.

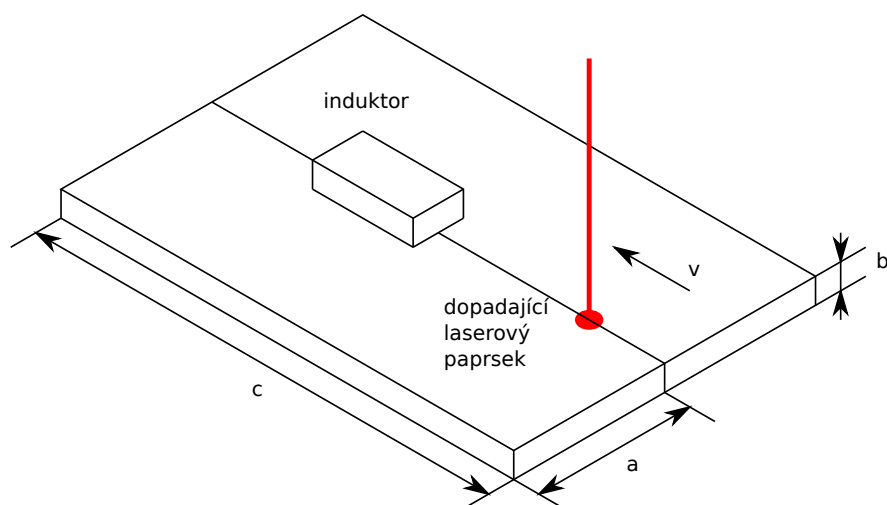
Řešením tohoto problému je snížení rychlosti změny teploty na povrchu materiálu, což je možné udělat navýšením počáteční teploty. Například aplikací druhého přídavného zdroje tepla, hovoří se o tzv. hybridním laserovém svařování. K omezení tohoto negativního jevu se používají různé techniky.

Velmi elegantní variantou řešení je kombinace laseru s indukčním předehřevem, případně i dohřevem. Cílem indukčního předehřevu je zlepšit rozložení teploty uvnitř svaru. Indukční ohřev je aplikován lokálně v oblasti svaru a předehřívá oblast cca na 200–400 °C.<sup>9</sup> Následně je oblast zahřáta laserem nad teplotu tavení (přes 2000 °C). Případně je možné ještě realizovat dodatečné prohřátí k odstranění pnutí.

Schématické znázornění hybridního laserového svařování je vidět na Obr. 22.

---

<sup>9</sup> Při předehřevu hraje roli doba mezi předehřátím a okamžikem dopadu laseru.



Obr. 22: Hybridní laserové svařování s indukčním přehřevem.

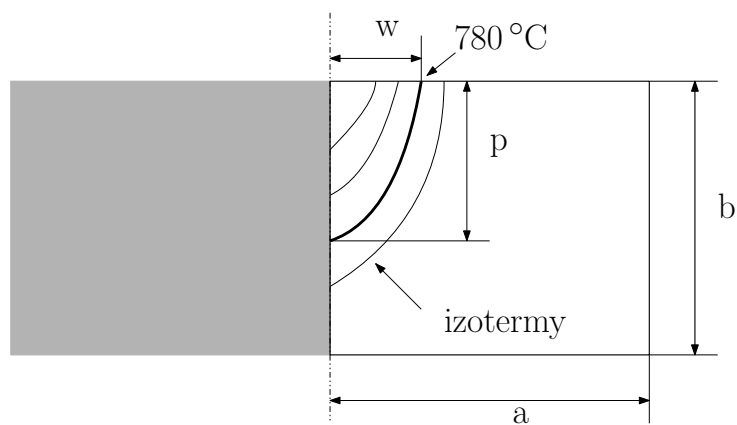
### 8.3 PROBLEMATIKA KVALITY SVARU

Mechanické vlastnosti svaru a jeho kvalita jsou klíčové pro následné použití v praxi. Z tohoto důvodu je nutné celý proces nastavit tak, aby byla dodržena vysoká kvalita. Abychom se mohli dále vyjadřovat konkrétněji, bude další část vztažena ke konkrétní svařované oceli S355.

Informaci o kvalitě svaru je možné získat z rozložení teploty uvnitř materiálu, protože tepelným působením dochází k fázovým změnám, které jsou spojeny s ohřevem materiálu nad definovanou teplotu, a tu lze znázornit izotermou. Pomocí tvaru těchto významných izoterm se dají definovat klíčové parametry kvality svaru.

Laserový svar je definován hloubkou provaření  $p$  (mm) a šířkou svaru  $w$  (mm). Oba parametry jsou získány na základě izotermie s teplotou  $780\text{ }^{\circ}\text{C}$ , viz Obr. 23. Počátek fázových změn pro ocel S355 odpovídá teplotě mezi  $740\text{--}780\text{ }^{\circ}\text{C}$  (v závislosti na příměsích). Dochází při nich k vytváření martenzitických struktur, které jsou patrné v průřezu materiálu při metalografickém vyhodnocení kvality svaru (dojde k rozříznutí desky). Hloubku svaru je tedy ze svého principu velmi složité určit. Alternativou, jak určit hloubku svaru bez rozříznutí (zničení) vzorku, je pomocí počítačové simulace, kde je vyhodnocení nahrazeno detekcí izotermie  $780\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

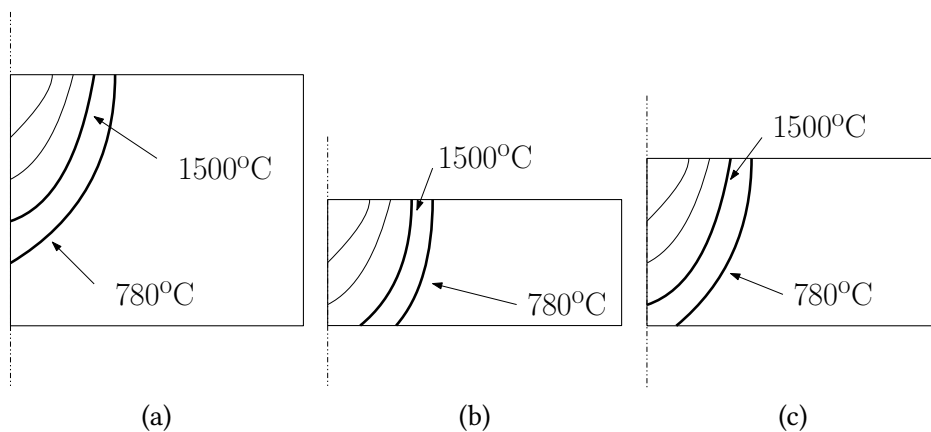
Očekávané zjednodušené teplotní rozložení v místě svaru a určení jeho šířky a hloubky je zobrazeno na Obr. 23.



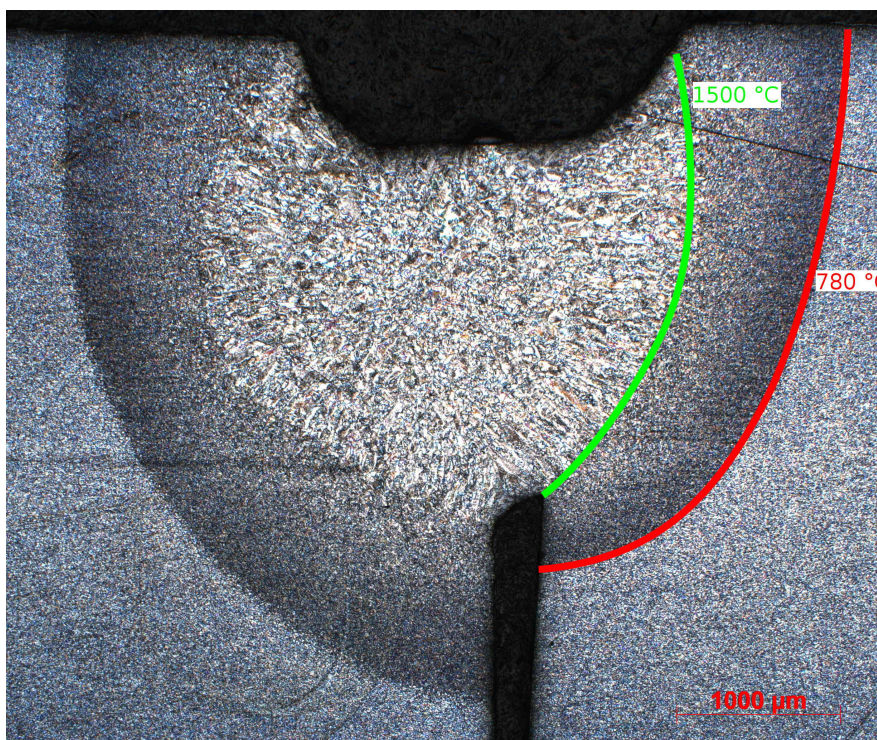
Obr. 23: Obecné určení hloubky  $p$  a šířky  $w$  laserového svaru.

Z hlediska kvality svaru mohou během svařování nastat celkem tři situace (jednotlivé případy jsou vyobrazeny na Obr. 24):

- kvalitní svar s dobrými mechanickými vlastnostmi Obr. 24(a),
- laser se provaří skrz materiál Obr. 24(b),
- potenciálně nekvalitní svar se špatnými mechanickými vlastnostmi Obr. 24(c).



Obr. 24: Varianty rozložení teploty v místě svaru.



Obr. 25: Fotografie svaru - vyznačení významných izoterm.

#### 8.4 MODELOVÁNÍ HYBRIDNÍHO LASEROVÉHO SVAŘOVÁNÍ

Z hlediska modelování je hybridní laserového svařování s indukčním předehřevem velmi náročná úloha z oblasti modelování fyzikálních polí řešená pomocí metody konečných prvků. Výstupem simulace je rozložení teploty a vývoj teploty v čase. Jedná se tedy o klasickou úlohu modelování teplotního pole (šíření tepla vedením uvnitř pevné látky), respektive o silně sdruženou úlohu v případě hybridního svařování s indukčním předehřevem.

Modelované teplotní pole je v případě této úlohy dodáváno pomocí dvou mechanismů:

- teplo vznikající přímo uvnitř materiálu pomocí časově proměnného magnetického pole (indukční ohřev),
- teplo z externího zdroje (dopadajícího laserového paprsku).



Hlavními výzvami jsou:

- silně sdružená úloha (elektromagnetické a teplotní pole),
- nelinearita materiálových parametrů,
- nejistota ohledně přesné hodnoty parametrů,
- geometrické uspořádání -> induktor plus laser -> 3D úloha,
- simulace přechodného děje (postupný ohřev materiálu v čase).

Jak bylo zmíněno v předchozích odstavcích na proces svařování má vliv celá řada parametrů. Na model je tedy možné nahlížet jako na parametrický.

#### 8.4.1 Modelování indukčního ohřevu

Vzhledem k teplu vznikajícímu přímo uvnitř materiálu pomocí principu indukčního ohřevu je nutné modelovat nejprve elektromagnetické pole. Platí formulace pro vektorový magnetický potenciál  $\mathbf{A}$  [42]:

$$\operatorname{curl} \left( \frac{1}{\mu} \operatorname{curl} \mathbf{A} \right) + \gamma \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \mathbf{v} \times \operatorname{curl} \mathbf{A} \right) = \mathbf{J}_{\text{ext}}, \quad (80)$$

kde  $\mu$  permeabilita (ve feromagnetických částech je závislá na působícím magnetickém poli),  $\gamma$  je elektrická vodivost,  $\mathbf{v}$  je rychlost pohybu desky a  $\mathbf{J}_{\text{ext}}$  proudová hustota dodaná z vnějších zdrojů.

Řešení rovnice (80) je výpočetně velmi složité. Aby bylo možné ji efektivně řešit ve 3D, jsou uvažována celkem dvě zjednodušení:

- permeabilita  $\mu$  feromagnetických částí je uvažována jako po částech konstantní (linearizovaná),
- nízká rychlost pohybu  $v$  (řádově  $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$  nebo  $\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ ).

Jsou-li uvažována tato dvě zjednodušení a harmonický průběh, je možné rovnici (80) přepsat do tvaru obsahujícího fázor  $\underline{\mathbf{A}}$ :

$$\operatorname{curl} (\operatorname{curl} \underline{\mathbf{A}}) + j \cdot \mu \omega \gamma \underline{\mathbf{A}} = \mu \underline{\mathbf{J}}_{\text{ext}}, \quad (81)$$

kde  $\omega = 2\pi f$  je úhlová rychlost.

Pro řešení rovnice (80) a (81) jsou důležité okrajové podmínky. V dostatečné vzdálenosti se aplikuje Dirichletova okrajová podmínka -  $\underline{\mathbf{A}} \times \mathbf{n} = \mathbf{0}$ . Pro další ušetření

výpočetního času je výhodné využít symetrie, pro kterou platí Neumannova okrajová podmínka.

V rámci úlohy druhým řešeným fyzikálním polem je pole teplotní. Platí pro něj rovnice přestupu tepla [29]:

$$\operatorname{div} (\lambda \operatorname{grad} T) = \rho c_p \left( \frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \operatorname{grad} T \right) - w, \quad (82)$$

kde  $\lambda$  je tepelná vodivost,  $\rho$  je měrná hmotnost,  $c_p$  je měrná tepelná kapacita při stálém tlaku,  $w$  jsou objemové vnitřní zdroje tepla a  $t$  je čas. Rychlost nelze na rozdíl od magnetického pole zanedbat.

Objemové zdroje tepla  $w$  se skládají z měrných joulovských ztrát  $w_J$  a měrných hysteretických ztrát  $w_h$ :

$$w = w_J + w_h,$$

kde

$$w_J = \frac{|J_{\text{ind}}|^2}{\gamma}, \quad J_{\text{ind}} = \mathbf{j} \cdot \omega \gamma \mathbf{A}. \quad (83)$$

Hysterezní ztráty je možné určit dvěma způsoby: z měření ztrát pro zvolený materiál, nebo pomocí analytických vzorců, například Steinmetzova vzorce. Pro uvažované frekvence indukčního ohřevu je možné hysteretické ztráty zanedbat, protože jsou v porovnání s joulovskými ztrátami  $w_J$  malé.

Z hlediska okrajových podmínek se zohledňuje přestup tepla prouděním i zářením a je možné je souhrnně zapsat do rovnice:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \alpha (T - T_0) + \sigma C (T^4 - T_r^4), \quad (84)$$

kde  $T$  je teplota povrchu materiálu,  $\alpha$  je koeficient přestupu tepla prouděním,  $T_0$  je teplota okolí (vzduchu),  $\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$  je Stefan-Boltzmannova konstanta,  $C$  je emisivita ohřívané části a  $T_r$  je teplota povrchu, kam záření dopadá.

#### 8.4.2 Teplotní pole způsobené laserovým ohřevem

Mechanismus ohřevu materiálu laserem se modeluje pomocí okrajové podmínky na základě výkonu dodaného laserovým paprskem.

Tedy jako u předchozího mechanismu ohřevu platí stejná rovnice, tzn. rovnice přestupu tepla 82. Vnitřní objemové ztráty jsou ale rovny nule  $w = 0$ .

Dodané teplo se zadává přes okrajovou podmínku, která má tvar podobný rovnici (84), navíc se ale zavede člen pro dopadající tepelný tok  $q_{\text{in}}$  [29]:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = -q_{\text{in}} + \alpha (T - T_0) + \sigma C (T^4 - T_r^4) . \quad (85)$$

Okrajová podmínka je závislá na aktuální teplotě materiálu (závisí tedy například na přehřevu materiálu...).

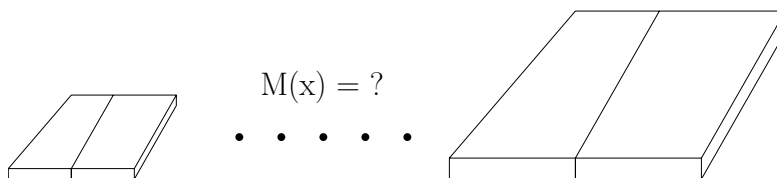
---

## ŘEŠENÍ ÚLOHY LASEROVÉHO SVAŘOVÁNÍ S POUŽITÍM METAMODELOVÁNÍ

---

### 9.1 APLIKACE METAMODELU PRO ŘEŠENÍ DANÉ ÚLOHY

Nevýhodou konečně-prvkového modelu je, že při každé i malé změně parametrů je potřeba přepočítat celý model. To je velmi výpočetně náročné, protože se jedná o velmi komplexní simulaci zohledňující celou řadu faktorů. Metamodelování je zamýšleno jako nadstavba modelu procesu svařování umožňující predikci vlivu parametrů na hloubku svaru, takovým případem může například různé velikosti a tloušťky desek. Pomocí „plného“ modelování pro krajní případy je možné získat přesné výsledky pro jeden konkrétní případ s danými geometrickými rozměry a materiálovými parametry (má proto smysl modelovat krajní hodnoty, „největší“ a „nejmenší“ desku a několik případů mezi nimi).



Obr. 26: Metamodelování úlohy svařování dvou ocelových desek.

Metamodel umožní určit bez nutnosti konečně-prvkového výpočtu, jak bude probíhat proces svařování pro varianty nacházející se mezi krajními variantami. Na začátku je nutné použít vhodnou techniku pro proložení vypočtených dat. Výhodné je použít techniku, která poskytne vedle vlastní hodnoty hloubky svaru i informaci o nejistotě/chybě odhadu výsledku, proto je prvotně uvažována metoda regrese s Gaussovským procesem. V případě znalosti nejistoty se dá uvažovat o aplikaci postupného učení metamodelu. Pokud je nepřesnost odhadu přijatelná, bude použit výsledek metamodelu, v opačném

případě bude spuštěn výpočet konečně-prvkového modelu, který poskytne přesné výsledky, jež budou následně použity k vylepšení metamodelu. Jde o obdobný princip jako u příkladu se sinusovkou, viz Obr. 6, Obr. 7, Obr. 8.

V následující části textu jsou uvedeny případy, kde jsou měněny různé vstupní parametry modelu. Každý z modelů je tedy principiálně jiná úloha. V prvním případě se tedy měnil parametr svařovaných desek a jeden parametr laseru, v druhém případě se měnily dva parametry laseru. Nejprve je tedy sledována hloubka provaření  $p$  v závislosti na tloušťce desky  $b$  a výkonu laseru  $P$ . V druhém případě je sledována závislost hloubky provaření na rychlosti posuvu laseru  $v$  a výkonu laseru  $P$ . Tyto dva parametry procesu je možné snadno regulovat, z tohoto důvodu jsou z průmyslového hlediska nejzajímavější. Z tohoto důvodu jsou zvoleny i pro další analýzu, která spočívá v porovnání několika metod pro vytvoření metamodelu.

Varianta použití metamodelu pro kombinaci rychlosti a výkonu laseru byla publikována v [71]. Varianta sledující kombinaci výkonu a tloušťky desky byla publikována v [69]. Porovnání několika metod pro vytvoření metamodelu bylo publikováno v [72].

## 9.2 POUŽITÁ SOFTWAREOVÁ ČÁST PRO ŘEŠENÍ ÚLOHY

K řešení úlohy je použito několik různých softwarových částí. První částí je konečně-prvkový výpočetní software pro získání vstupních dat pro tvorbu metamodelu, Konkrétně jsou všechny výpočty MKP modelu provedeny v programu COMSOL Multiphysics ve verzi 5.2. Výsledky jsou následně exportovány do .csv souboru.

Dalšími částmi je software určený ke zpracování vypočtených dat, tvorbě metamodelu a vizualizaci výsledků. Pro potřeby této práce je použit programovací jazyk python v kombinaci s SciPy knihovnou pro strojové učení scikit-learn [73] a knihovnou matplotlib pro přípravu grafů. Scikit-learn byl použit ve verzích 0.17 a 0.19.1.

Knihovna scikit-learn je jednou z možností, jak využívat vhodné techniky pro tvorbu metamodelů, aniž by bylo nutné je psát od začátku. Pomocí této knihovny je možné využívat většinu běžně dostupných metod používaných ve strojovém učení. Řešená úloha je definována jako úloha regresního typu, proto jsou zajímavé pouze některé třídy použité knihovny.

Programovací jazyk python (a tím pádem i scikit-learn) je objektově orientovaný. Metamodel je tedy založen na instanci třídy *Regressor* pro zvolenou metodu. Při vytvoření instance třídy se nastavují atributy třídy, především počáteční hodnoty hyperparametrů.

K proložení vstupních dat (naučení metamodelu) slouží metoda *fit*, odhad se následně provádí metodou *predict*.

Následující velmi zjednodušený krátký příklad kódu demonstruje, jak se zjednodušeně používá knihovna *sklearn.gaussian\_process* za použití výchozího nastavení parametrů (platné pro verzi 0.17).

Vytvoření instance třídy *sklearn.gaussian\_process* a následný proklad vstupních dat pomocí metody *fit*:

```
from sklearn.gaussian_process import GaussianProcess
import INPUT_DATA

x = INPUT_DATA.x
y = INPUT_DATA.y

gp_p = GaussianProcess()
gp_p.fit(x, y)
```

Predikce pomocí metody *predict*:

```
p_predict, p_predict_MSE = gp_p.predict(x_values,
                                       y_values,
                                       MSE=True)
```

Metoda *predict* umožňuje poskytnout vedle vlastního odhadu i jeho nejistotu (důvodem je statistické pozadí metody). Metrikou charakterizující přesnost odhadu je *MSE* (*Mean Square Error*).

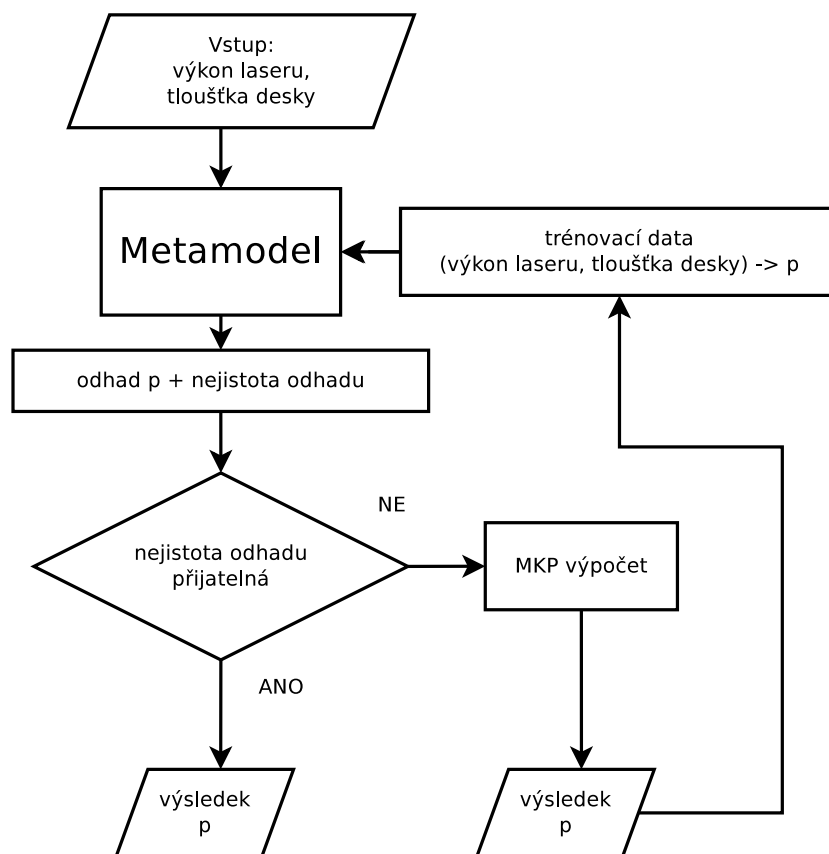
Definice *MSE* (česky střední kvadratická chyba) pro veličinu  $Y$  je následující:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_1^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2, \quad (86)$$

kde  $n$  je počet vzorků,  $Y$  je známá hodnota veličiny a  $\hat{Y}$  je její odhad.

## UKÁZKOVÝ PŘÍKLAD ŘEŠENÍ

Algoritmus řešení problému je vidět na Obr. 27:



Obr. 27: Vývojový diagram - algoritmus řešení problému odhadu hloubky svaru.

Vstupní data jsou ve formátu  $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_n]^T$  a výstupní  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$ . Nejistotu odhadu poskytne metoda regrese s Gaussovským procesem.

## 10.1 ÚLOHA 1 - KOMBINACE TLOUŠŤKA DESKY A VÝKONU LASERU

### 10.1.1 Vstupní data

Jako vstupní data jsou použita data ze simulace sdružené úlohy. Kromě toho jsou použita i data ze simulace čistě teplotního pole (bez indukčního předehřevu), tento příklad se tedy skládá ze dvou dílčích úloh. Z hlediska metamodelování jsou ale oba druhy vstupních dat rovnocenné a není v nich žádný rozdíl. Samozřejmě v případě nahrazení sdružené úlohy metamodelem je předpoklad většího ušetření výpočetního času.

K vytvoření metamodelu je použit následující soubor vstupních dat ve formě:

$$x_i = (b_i, P_i), \quad (87)$$

kde  $b$  je tloušťka svařované desky a  $P$  je výkon laseru (resp. příkon laseru). Pro nezávislou proměnnou platí:

$$y_i = (p_i). \quad (88)$$

Konkrétní zvolené hodnoty jsou shrnuty v tabulce Tab. 4 a pro ně je proveden výpočet rozložení teploty a následné určení hloubky svaru pro hybridní variantu (označení  $p_{\text{HYB}}$  a variantu bez indukčního předehřevu (označení  $p$ ).

Tab. 4: Soubor vstupních dat pro vytvoření metamodelu - kombinace  $b$  a  $P$ .

$b$ (mm)	16	11	6	14	11	18	8	10	14
$P$ (W)	325	375	425	425	475	500	525	575	600
$p$ (mm)	2,548	2,833	3,101	3,076	3,287	3,383	3,476	3,643	3,720
$p_{\text{HYB}}$ (mm)	2,871	3,236	3,596	3,446	3,639	3,659	3,913	3,974	4,059

Z těchto vstupních dat je vytvořen metamodel umožňující predikci hloubky svaru  $p$  pro libovolnou kombinaci  $b$  a  $P$ . Pro ilustraci se soubor vstupních dat postupně zvětšoval až do koncové formy, která odpovídá celé tabulce. Pomocí znaku  $||$  je rozlišeno, jak se postupně rozšiřoval soubor vstupních dat („učení metamodelu“).



### 10.1.2 *Metoda použitá pro tvorbu metamodelu*

Pro vytvoření metamodelu je v obou případech použita regrese pomocí Gaussovského procesu. Tato metoda poskytuje vedle odhadu hloubky svaru i hodnotu o pravděpodobnosti odhadu. K vymezení přesnosti odhadu se v této práci používá interval spolehlivosti 95 %. Metamodel se postupně zlepšuje (učí) s rozšiřujícím se vstupním souborem dat.

Gaussovský proces je určen v případě této úlohy především svým nastavením v scikit-learn. Je použita kovarianční funkce typu „squared-exponential kernel“. Z hyperparametrů je použito výchozí nastavení, které se následně optimalizuje pomocí metody *L-BFGS-B*.

### 10.1.3 *Výsledky*

Výsledky proložení vstupních dat a odhadu hloubky svaru je provedeno v následujících obrázcích pro variantu bez indukčního předeřevu a pro variantu hybridní. Z předchozí tabulky Tab. 4 je zřejmé, že nejprve jsou pro ilustraci použité pouze 3 vstupní body. Výsledek je vidět na Obr. 28. Vstupní body jsou v grafu označeny zeleně.

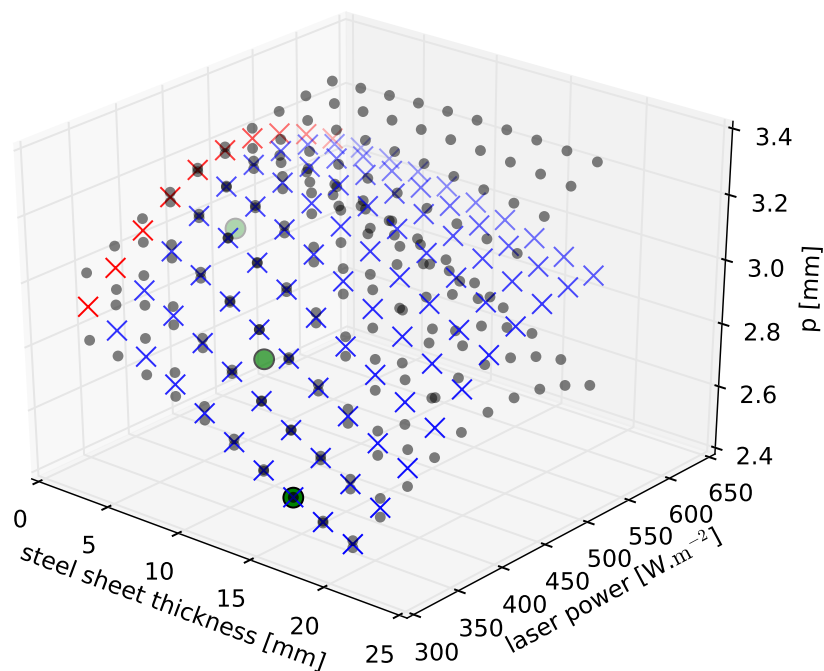
Nejistota je na veliké části intervalu (kombinace tloušťky desky  $b$  a výkonu laseru  $P$ ) velmi vysoká. Na první pohled je zřejmé, že není možné proložit efektivně dané body vhodnou plochou. Jsou-li pro tvorbu metamodelu použity další dva body, tzn. soubor vstupních dat je roven pěti bodům, výrazně se zlepšuje nejistota odhadu hloubky svaru  $p$ . Viz Obr. 29.

Přidáním dalších bodů dle tabulky Tab. 4 až do celkového počtu devíti bodů se znovu sníží úroveň nejistoty. Viz Obr. 30 pro variantu bez indukčního předeřevu a Obr. 31 pro variantu s indukčním předeřevem.

### 10.1.4 *Validace*

Jedním z běžných úkolů je problematika validace výstupů metamodelu oproti plnému modelu, v případě dané aplikace, respektive validace odhadu hloubky svaru.<sup>10</sup> Jako referenční data jsou vzaty výsledky z konečně-prvkové simulace, které ale nebyly použity pro vlastní vytvoření metamodelu.

<sup>10</sup> V této části je použito slovo validace pro porovnání odhadnutých a vypočtených dat. V oblasti strojového učení se ale validační data používají k ladění hyperparametrů. Pro posouzení schopnosti predikce se používají data testovací. Bylo by tedy možné použít slovo testování místo validace.

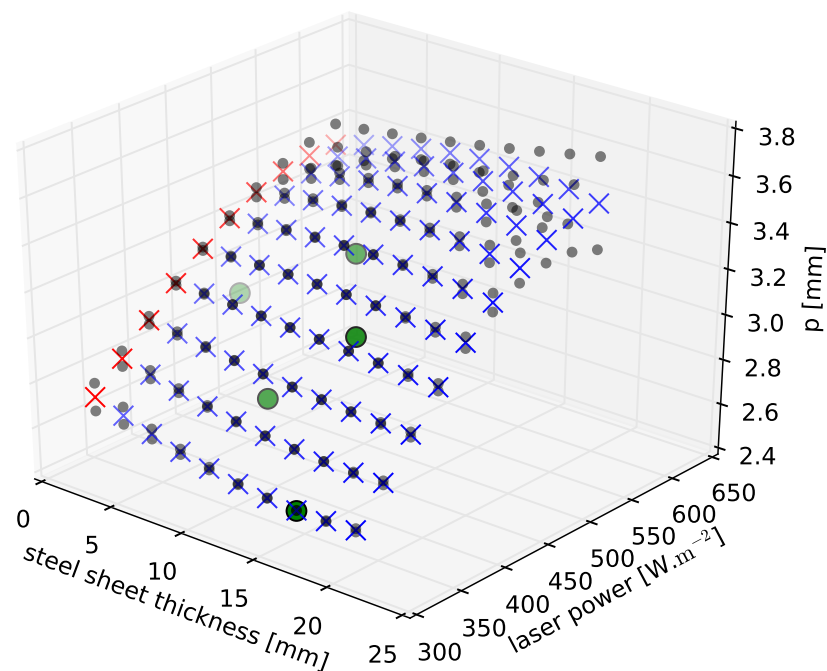


Obr. 28: Výsledky odhadu hloubky svaru pro 3 vstupní body (varianta bez indukčního předehřevu).

V tabulce 5 je provedeno porovnání pro variantu bez indukčního předehřevu (tato tabulka se tedy týká Obr. 30). Hlavní indikátorem je relativní chyba odhadu  $p$ , přičemž jako referenční hodnota je hloubka svaru  $p$  získaná konečně-prvkovou simulací, viz (89).

$$\text{rel. chyba odhadu } p = \left| 1 - \frac{\text{odhad } p}{p_{\text{FEM}}} \right| \cdot 100. \quad (89)$$

Zajímavým výsledkem odhadu je vypočtená hodnota  $p_{\text{FEM}} = 4.0$  v bodě (4.0, 575). Jedná se přesně o případ špatného svaru, kde byl aplikován příliš velký výkon laseru  $P$  (případně rychlost pohybu laseru  $v$ , nebo v kombinaci) vzhledem k tloušťce desky. Izoterma  $780^\circ\text{C}$  se těsně dotýká spodního okraje materiálu. Takovýto svar je málo odolný proti mechanickému namáhání. Jedná se tedy o variantu zmíněnou na Obr. 24(c). Takovýto svar je velmi nekvalitní a křehký. Velmi nepříjemné je, že tento problém není možné při vlastním svařování opticky odhalit.

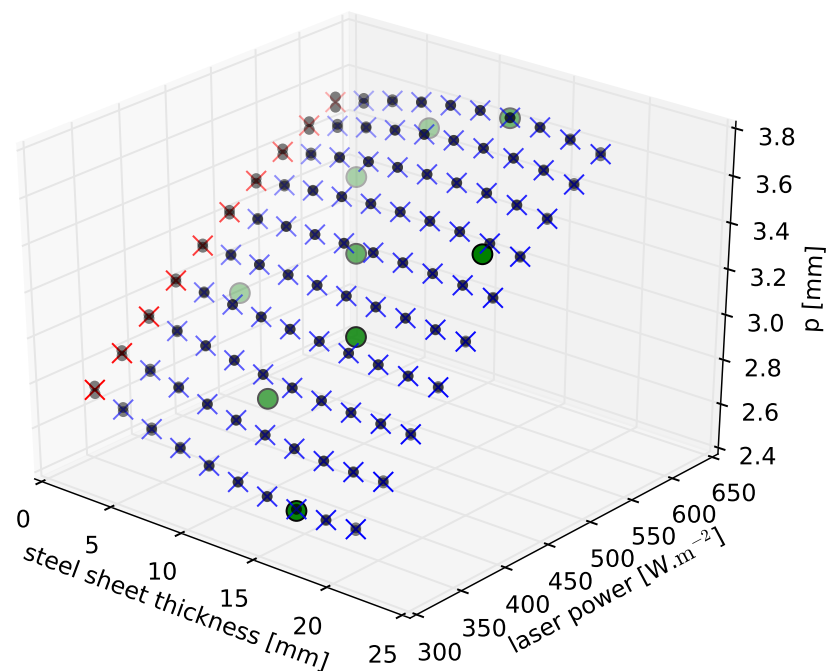


Obr. 29: Výsledky odhadu hloubky svaru pro 5 vstupních bodů (varianta bez indukčního předehřevu).

Tab. 5: Porovnání odhadu hloubky svaru  $p$  oproti MKP simulaci (varianta bez indukčního předehřevu).

$b$ (mm)	15	15	5.5	4.0	11
$P$ (W)	550	400	350	575	500
odhad $p$ (mm)	3.579	2.935	2.795	3.562	3.397
střední kvadratická chyba $p$ (mm <sup>2</sup> )	0.00023	0.00020	0.00188	0.00396	0.00018
$p_{FEM}$ (mm)	3.561	2.959	2.732	3.562	3.383
relativní chyba (%)	0.52	0.81	2.32		0.42

Při nastavování výkonu laseru  $P$  (a rychlosti pohybu laseru  $v$ ) může nastat ještě varianta kompletního provaření skrz materiál. Takový stav je na Obr. 28, 29, 30, 31 vyznačen pomocí červeného křížku. Případem nevhodné kombinace  $b$  a  $P$  je varianta ( $b = 2$  mm,  $P = 575$  W). Rozložení teploty v místě svaru je vidět na Obr. 33. Oproti předchozímu



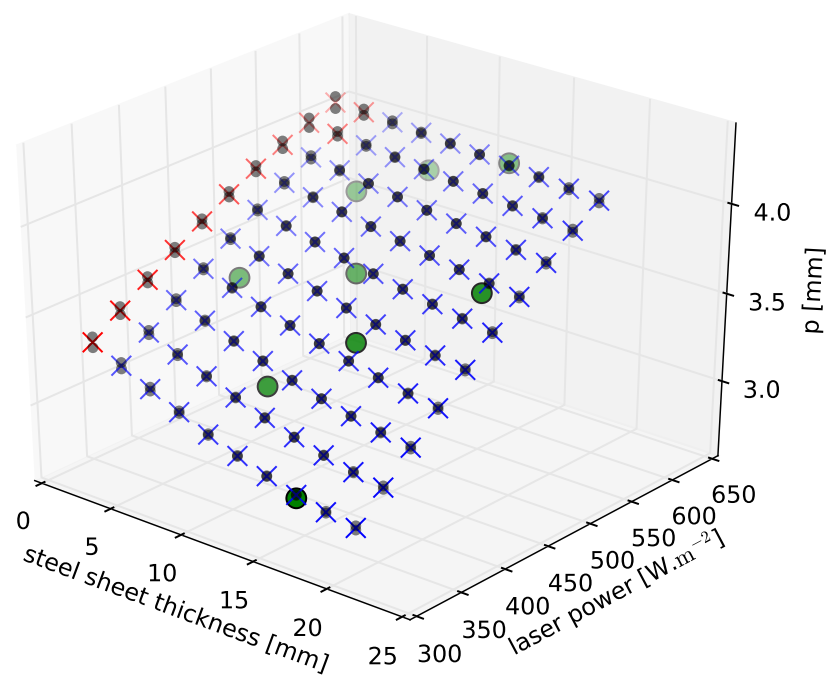
Obr. 30: Výsledky odhadu hloubky svaru pro 9 vstupních bodů (varianta bez indukčního předehřevu).

případu nekvalitního svaru je při vlastním svařování problém na první pohled zřejmý, protože došlo ke kompletnímu roztavení materiálu.

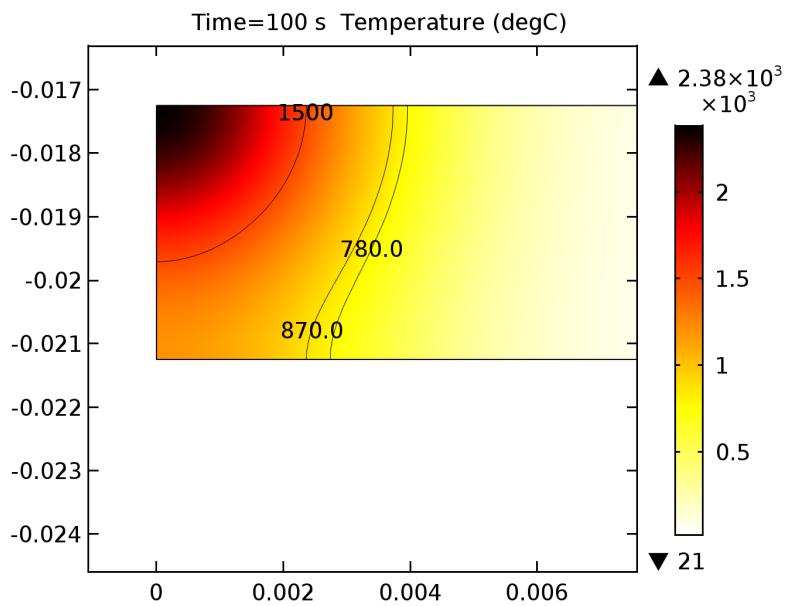
V případě varianty s indukčním předehřevem, tzn. hybridní laserové svařování, bylo rovněž provedeno porovnání mezi výstupem metamodelu a konečně-prvkovou simulací. Vlastní porovnání je v tabulce Tab. 6, která se váže k Obr. 31

Tab. 6: Porovnání odhadu hloubky svaru  $p$  oproti MKP simulaci (varianta bez indukčního předehřevu).

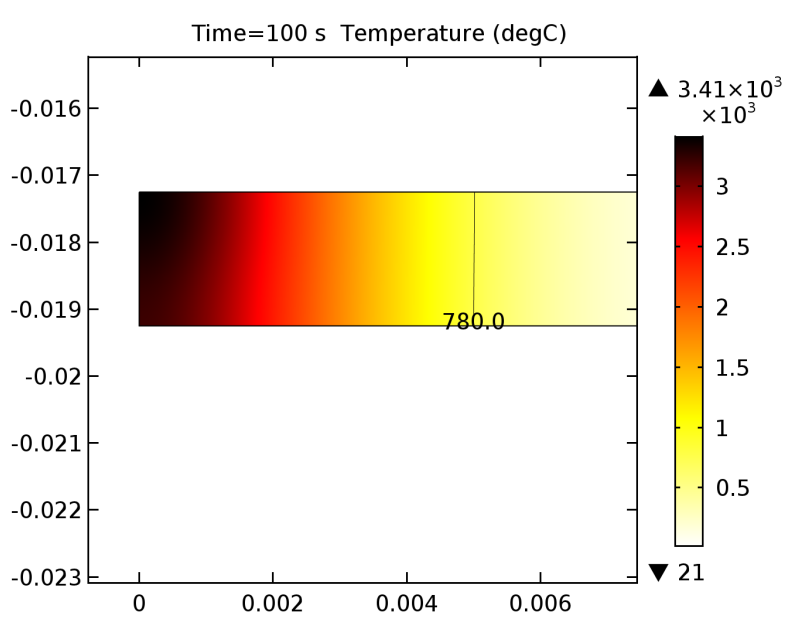
$b$ (mm)	15	15	11
$P$ (W)	550	400	500
odhad $p$ (mm)	3.882	3.268	3.758
střední kvadratická chyba $p$ ( $\text{mm}^2$ )	0.00059	0.00051	0.00048
$p_{\text{FEM}}$ (mm)	3.827	3.233	3.720
relativní chyba (%)	1.45	1.09	1.03



Obr. 31: Výsledky odhadu hloubky svaru pro 9 vstupních bodů (varianta s indukčním předehřevem).



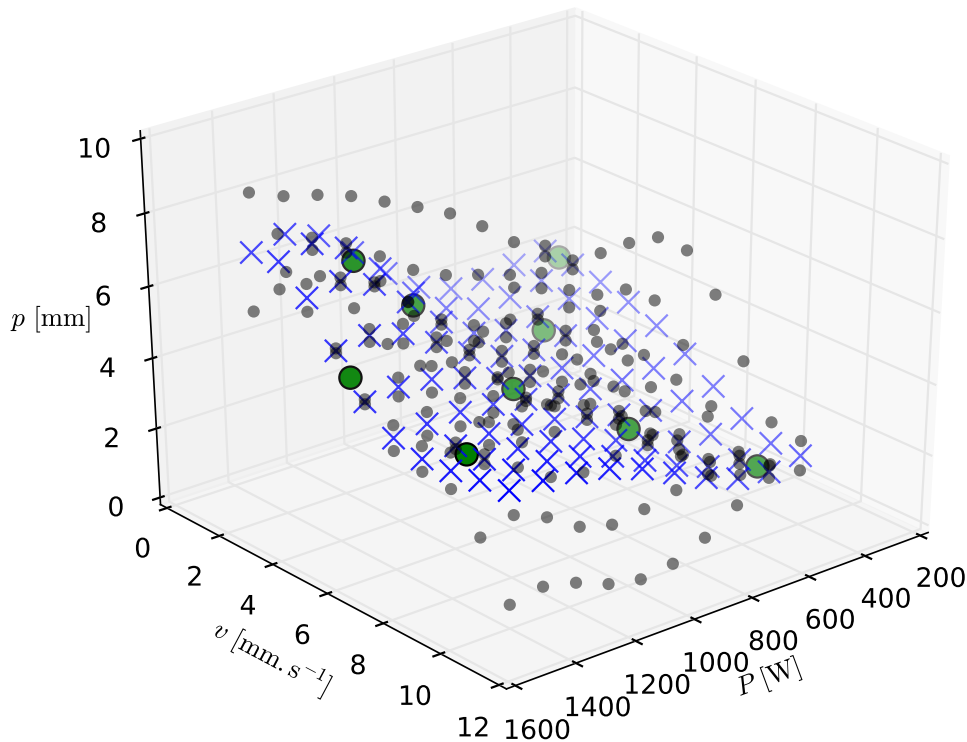
Obr. 32: Rozložení teploty v místě svaru - tloušťka desky 4 mm (varianta bez indukčního předehřevu).



Obr. 33: Rozložení teploty v místě svaru - tloušťka desky 2 mm (varianta bez indukčního předehřevu).

## 10.2 ÚLOHA 2 - KOMBINACE RYCHLOST POSUVU A VÝKON LASERU

Druhá řešená varianta sleduje závislost hloubky provaření  $p$  [mm] na rychlosti pohybu  $v$  a výkonu laseru  $P$ . Ve většině úloh byla vstupní data rozdělena na trénovací a testovací (použitá pro validaci). Nejprve bylo zvoleno 9 trénovacích bodů, výkon je zvolen z rozsahu 400 – 1400 W a rychlost pohybu laseru je zvolena z rozsahu 1 – 10 mm · s<sup>-1</sup>. Výsledky jsou pro názornost vyneseny do grafů, prvních 9 bodů je vyneseno do grafu Obr. 34.



Obr. 34: Výsledky vytvoření metamodelu pro Úlohu 2 - 9 vstupních bodů.

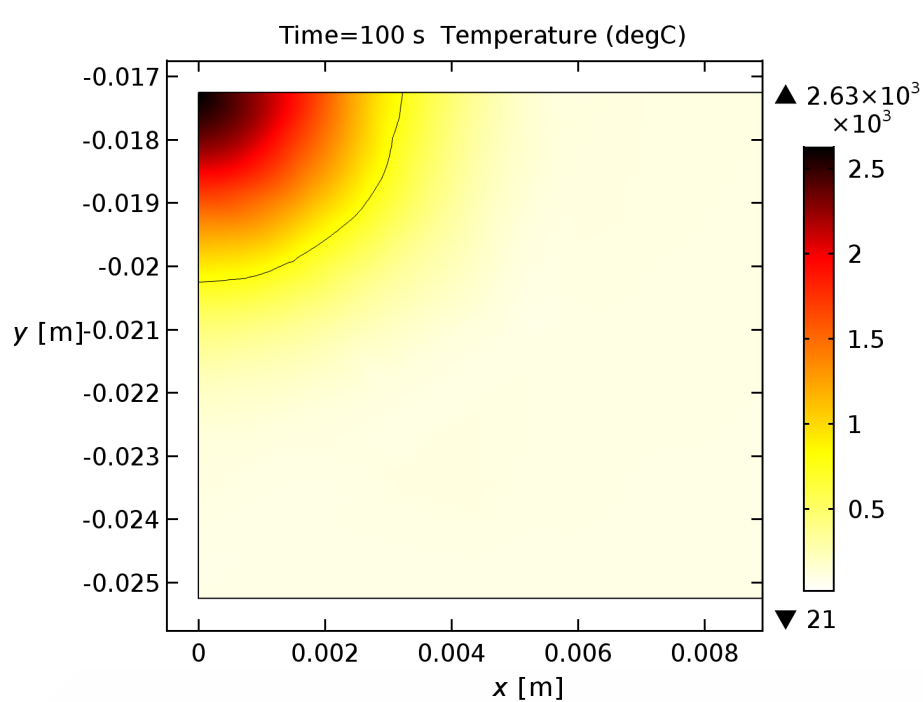
Zelené body jsou vstupní data pro tvorbu metamodelu, tzn. vypočtená pomocí metody konečných prvků. Modré body jsou body, kde je provedena validace, a šedé body ohraničují interval úrovně spolehlivosti 95 %.

Pro validaci metamodelu jsou zvoleny 2 body, výsledky pro validační body  $P = 1400$  W,  $v = 10$  mm · s<sup>-1</sup> a  $P = 700$  W,  $v = 10$  mm · s<sup>-1</sup> jsou shrnuty v tabulce Tab. 7.

Pro úplnost je na Obr.35 vyneseno rozložení teploty získané pomocí metody konečných prvků (v průřezu místa svaru ocelové desky) v bodě  $P = 1400$  W,  $v = 10$  mm · s<sup>-1</sup>.

Tab. 7: Výsledky validace metamodelu pro Úlohu 2.

$P$ (W)	1400	700
$v$ ( $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$ )	10	10
odhad $p$ (mm)	3.651	1.972
střední kvadratická chyba $p$ (mm)	1.623	0.725
$p_{\text{FEM}}$ (mm)	2.995	2.041
relativní chyba (%)	21.91	3.51

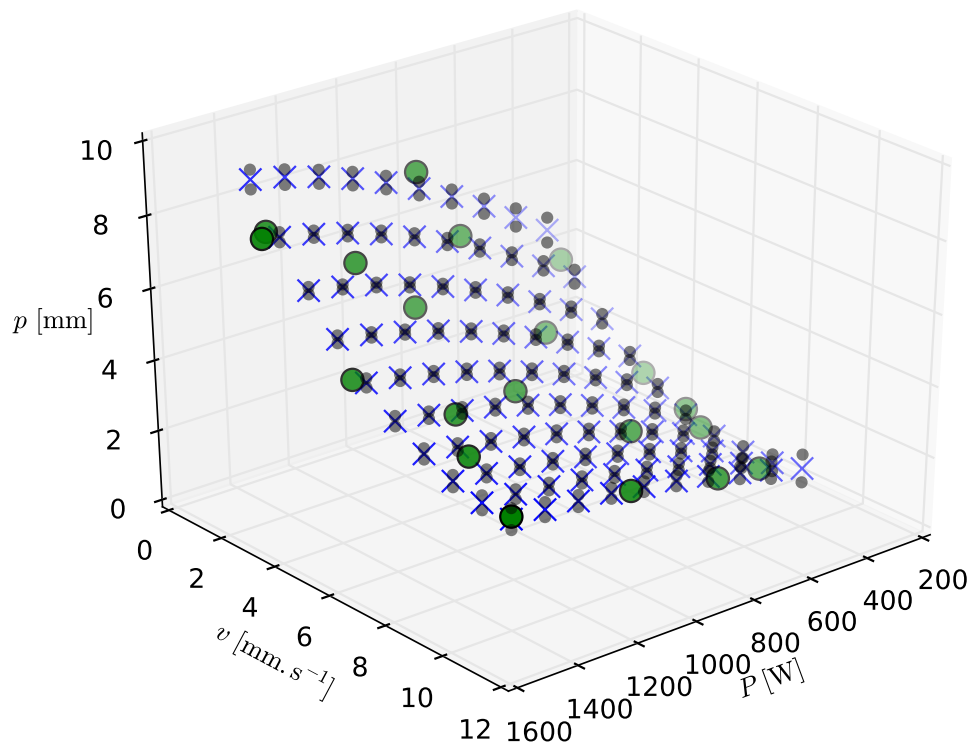


Obr. 35: Rozložení teploty v místě svaru -  $P = 1400 \text{ W}$ ,  $v = 10 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ .

Po doplnění dalších 11 hodnot (tzn. celkový počet bodů použitých pro vytvoření metamodelu je 20, včetně dvou bodů použitých pro validaci), vznikne závislost, viz Obr. 36.

Předem bylo očekáváno, že odhad  $p$  v bodě (1400, 10) bude mít větší střední kvadratickou chybu (bude méně přesný) než v bodě (700, 10). Po přidání dodatečných 11 bodů, viz Obr. 36 je vidět, že nejistota odhadu klesla. Metamodel se tedy obecně zlepšil. Ilustrace postupného zlepšování modelu je vidět na Obr. 37.

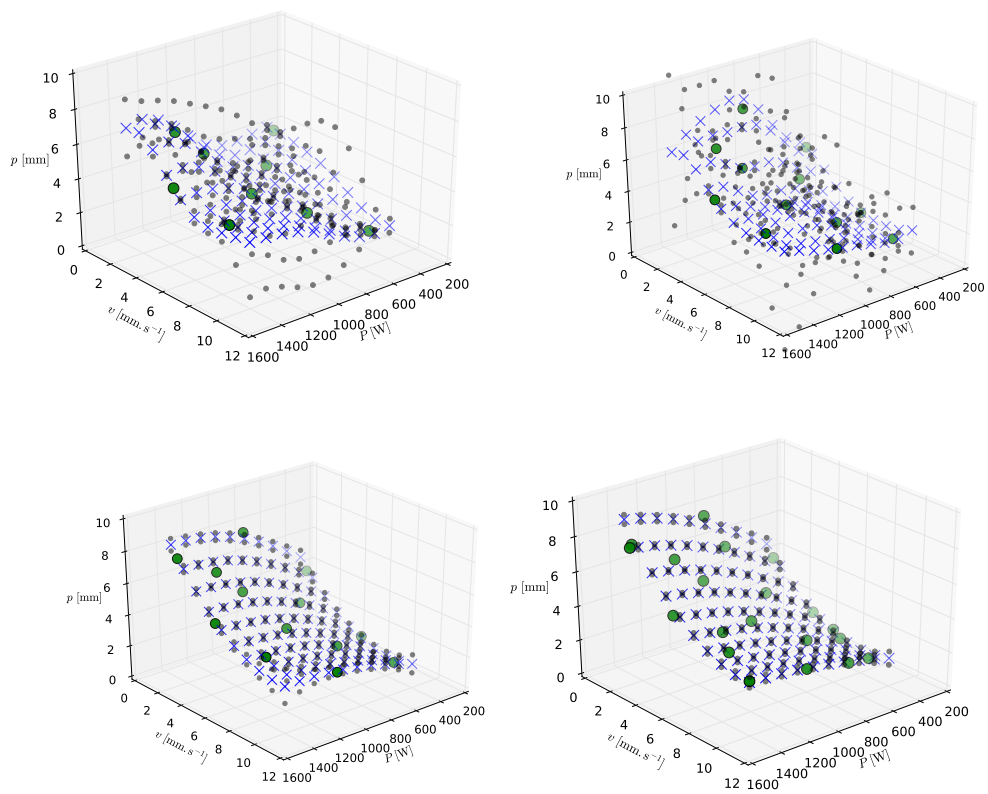




Obr. 36: Výsledky vytvoření metamodelu - zo vstupních bodů.

### 10.2.1 Závěr

Na sledované úloze bylo cílem ukázat, že je velmi výhodné použít techniku metamodelování k ušetření výpočetního času. Ušetření času je opravdu markantní. Odhad hloubky provaření je možné provést v řádech sekund. Pro srovnání výpočet původní sdružené úlohy ve 3D trval na počítači řádově 2 hodiny a 30 minut. Pomocí souborů vstupních dat bylo cílem ukázat postupné zlepšování (učení) metamodelu.



Obr. 37: Postupné učení metamodelu na úloze 2.

---

## POROVNÁNÍ RŮZNÝCH METOD TVORBY METAMODELU NA ÚLOZE HYBRIDNÍHO LASEROVÉHO SVAŘOVÁNÍ

---

V teoretické části práce bylo zmíněno několik různých technik, které je možné použít pro tvorbu metamodelů. Jednou z důležitých otázek je, jakou metodu zvolit. Pro porovnání jsou zvoleny tři principiálně odlišné metody: regrese s Gaussovským procesem (použitá již dříve v této aplikační části práce), vícevrstvá neuronová síť a náhodný les. Pro tvorbu metamodelu je použito několik praktických technik: návrh experimentu pomocí techniky Latin Hypercube. Dále je použita křížová validace a metoda grid search k nalezení optimálních parametrů jednotlivých metamodelů.

Pro regresi s Gaussovským procesem se vybírá z následujících hyperparametrů:

- regularizační parametr  
 $\alpha = [0, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}, 10^{-9}, 10^{-10}]$ ,
- typ použité kovarianční funkce (kernelu)  
= [ConstantKernel \* ExpSineSquared, ConstantKernel \* Matern, ConstantKernel \* RBF].

Pro vícevrstvou neuronovou síť se vybírá z následujících hyperparametrů:

- velikost skryté vrstvy (počet vrstev a neuronů v nich)  
= [(20, 20, 20), (15, 15, 15), (20, 15, 15), (20, 15, 10), (20, 20), (20, 15)],
- regularizační parameter  $\alpha$   
 $\alpha = [0, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}, 10^{-8}, 10^{-9}, 10^{-10}]$ .

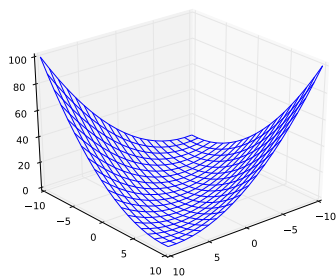
Pro náhodný les se vybírá z následujících hyperparametrů:

- počet stromů v lese = [100, 90, 80, 70, 60, 50].

Před vlastní aplikací metod na soubor vstupních dat bylo použito několik testovacích funkcí, které mají za úkol otestovat připravené skripty pro tvorbu metamodelů a porovnat je pomocí nelineárních hladkých a nehladkých funkcí, viz následující část.

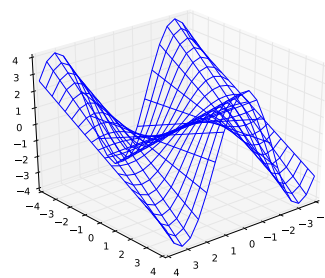
### 11.1 TESTOVACÍ FUNKCE PRO OVĚŘENÍ TVORBY METAMODELU

Jsou zvoleny celkem čtyři testovací funkce, z čehož jsou 2 funkce hladké (Obr. 38(a), Obr. 38(d)) a 2 nehladké (Obr. 38(b), Obr. 38(c)).



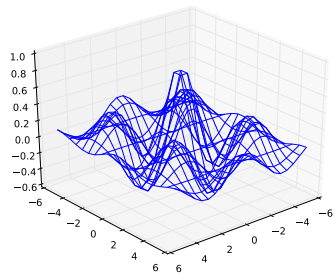
(a)

$$f(\mathbf{x}) = 0.26 \cdot (x_1^2 + x_2^2) - 0.48x_1x_2$$



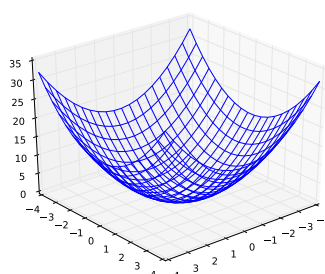
(b)

$$f(\mathbf{x}) = \cos(x_1)x_2$$



(c)

$$f(\mathbf{x}) = \cos(x_1) \cos(x_2) \exp\left(\frac{-\sqrt{(x_1^2 + x_2^2)}}{4}\right)$$



(d)

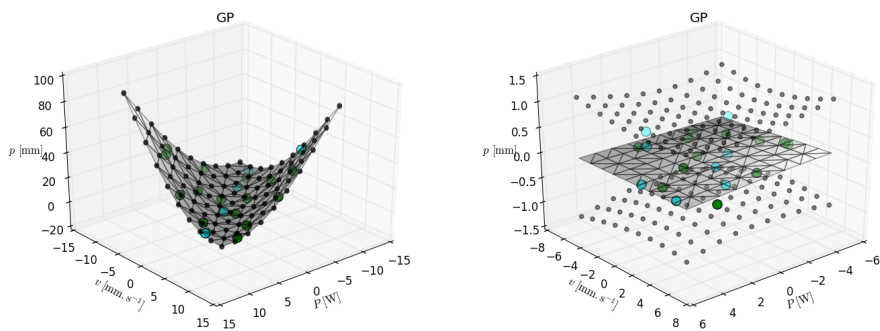
$$f(\mathbf{x}) = x_1^2 + x_2^2$$

Obr. 38: Zvolené testovací funkce.

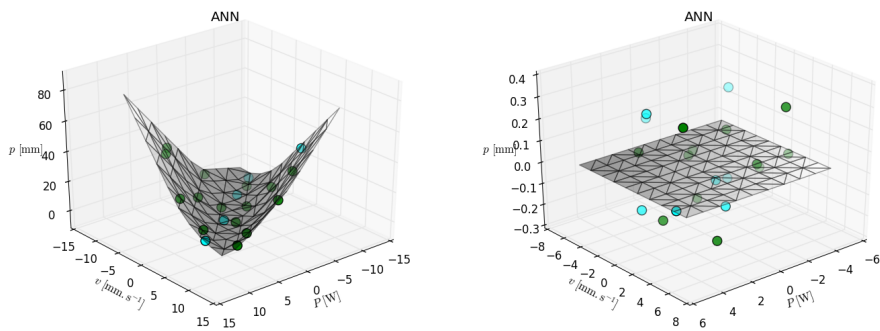
## 11.2 VÝSLEDKY TVORBY METAMODELU PRO TESTOVACÍ FUNKCE

Pro vytvoření metamodelu je zvoleno 15 trénovacích bodů a 5 validačních bodů. Výsledky jsou zde uvedeny pro testovací funkce Obr. 38(a) a Obr. 38(c). Hladká testovací funkce Obr. 38(d) se chová podobně jako Obr. 38(a). Nehladká testovací funkce Obr. 38(b) se chová podobně jako Obr. 38(c).

Na Obr. 39 je vidět, že regrese s Gaussovským procesem i s malým počtem vstupních dat dokázala nahradit hladkou funkci *a* a selhala na nehladké funkci se složitým tvarem (c). Podobně dopadl metamodel založený na vícevrstvé neuronové síti, viz Obr. 40.



Obr. 39: Tvorba metamodelu pomocí regrese s Gaussovským procesem pro testovací funkci (a) a (c).



Obr. 40: Tvorba metamodelu pomocí vícevrstvé neuronové sítě pro testovací funkci (a) a (c).

Hodnoty metriky  $R^2$  pro testovací funkci Obr. 38(a) jsou pro jednotlivé metody následující:

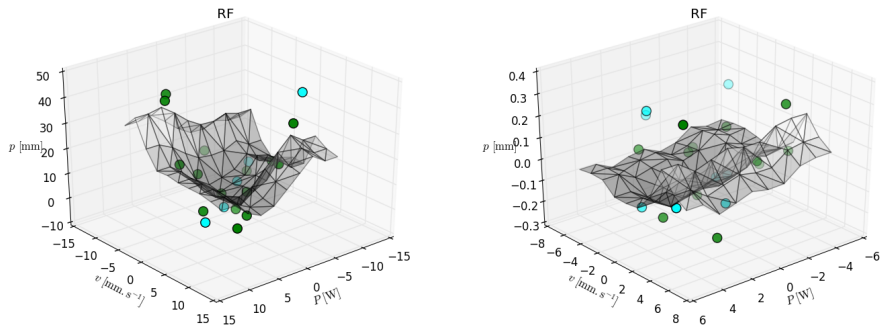
- regrese s Gaussovským procesem:
  - $\alpha = 0.1$ , použitý kernel:  $RBf(length\_scale = 1)$ ,
  - $R^2 = 0.99973$ .
- vícevrstvá neuronová síť:
  - $\alpha = 0.01$ , velikost skryté vrstvy = (15, 15, 15),
  - $R^2 = 0.99297$ .
- náhodný les:
  - počet stromů v lese = 90,
  - $R^2 = 0.00339$ .

Pro testovací funkci Obr. 38(c) jsou pak hodnoty metriky  $R^2$ :

- regrese s Gaussovským procesem:
  - $\alpha = 0$ , použitý kernel:  $RBf(length\_scale = 1)$ ,
  - $R^2 = -0.10616$ .
- vícevrstvá neuronová síť:
  - $\alpha = 0.1$ , velikost skryté vrstvy = (20, 15),
  - $R^2 = -0.07984$ .
- náhodný les:
  - počet stromů v lese = 70,
  - $R^2 = -0.91920$ .

Odlíšné výsledky ukázala metoda náhodného lesa, viz Obr. 41, které se s dostupným malým počtem vstupních dat nepodařilo věrohodně obnovit tvar funkce (a), ani (c). Oproti předchozím dvěma metodám ale došlo v případě nehladké funkce (c) k odezvě metamodelu, nicméně i ta dostatečně přesně nevystihuje tvar testovací funkce.

Závěr k výsledkům tvorby metamodelu je, že pro relativně hladké funkce dokáží zvolené metody poskytnout relativně přesnou aproximaci i s relativně malým počtem vstupních dat (s výjimkou metody náhodného lesa). V případě nehladkých funkcí se složitým tvarem by bylo potřeba použít větší množství vstupních dat, což ale může být problém v případě reálných (časově náročných) výpočtů. Pro reálné inženýrské aplikace je ale možné předpokládat spíše funkce hladké.



Obr. 41: Tvorba metamodelu pomocí náhodného lesa pro testovací funkci (a) a (c).

### 11.3 VÝSLEDKY TVORBY METAMODELU 3 ZVOLENÝMI TECHNIKAMI

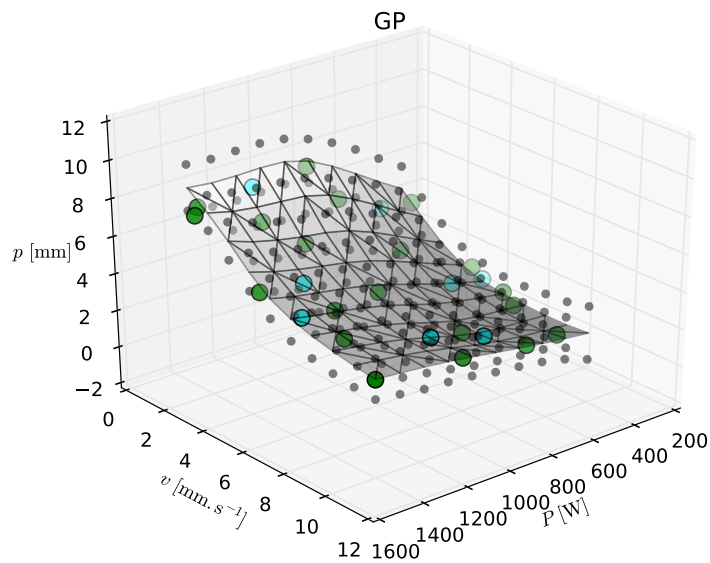
Tři zmíněné metody pro tvorbu metamodelu jsou aplikovány na úlohu odhadu hloubky svaru v závislosti na rychlosti posuvu laseru  $v$  a jeho výkonu  $P$ . K tvorbě metamodelu je použito 20 trénovacích bodů (v grafech označeny zeleně) a pro validaci následně dalších 8 bodů (v grafech označeny tyrkysovou barvou).

Tab. 8: Validace metamodelu - regrese s Gaussovským procesem.

$P$ (W)	$v$ ( $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$ )	$p$ (mm)	$p_{\text{predicted}}$ (mm)	relative error (%)
600	5.5	2.611	2.102	19.5
1000	8.5	2.817	2.468	12.39
400	5	1.842	1.715	6.87
600	2	4.928	5.064	2.74
800	9	2.376	1.965	17.28
1150	1.5	7.776	7.654	1.57
1200	4.5	4.342	4.393	1.18
1350	6	3.877	3.889	0.31
			AVERAGE	7.73

Tab. 9: Validace metamodelu - vícevrstvá neuronová síť.

$P$ (W)	$v$ ( $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$ )	$p$ (mm)	$p_{\text{predicted}}$ (mm)	relative error (%)
600	5.5	2.611	1.349	48.32
1000	8.5	2.817	2.876	2.1
400	5	1.842	1.678	8.87
600	2	4.928	5.552	12.65
800	9	2.376	2.273	4.33
1150	1.5	7.776	7.250	6.76
1200	4.5	4.342	4.171	3.93
1350	6	3.877	3.914	0.96
			AVERAGE	10.99



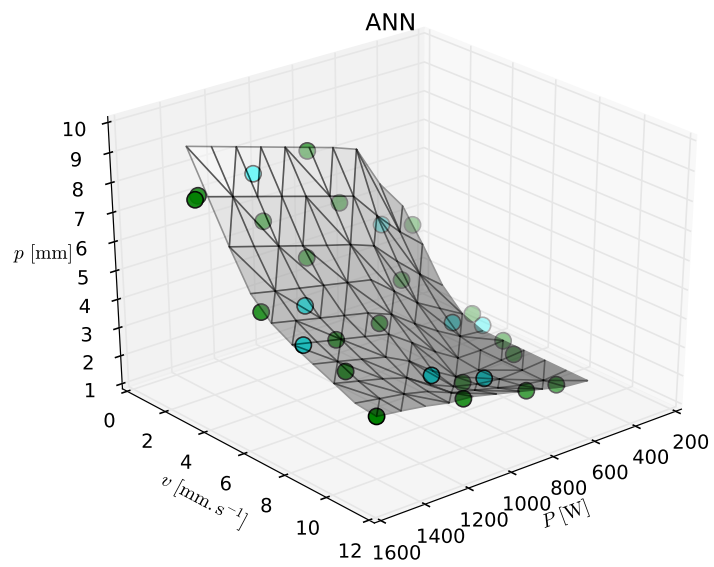
Obr. 42: Metamodel vytvořený pomocí regrese s Gaussovským procesem.

Tab. 10: Validace metamodelu - náhodný les.

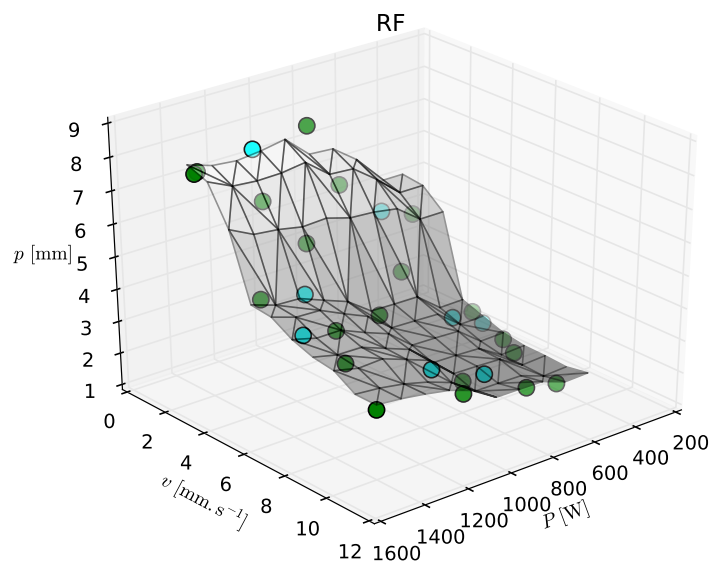
$P$ (W)	$v$ ( $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$ )	$p$ (mm)	$p_{\text{predicted}}$ (mm)	relative error (%)
600	5.5	2.611	2.419	7.33
1000	8.5	2.817	2.866	1.74
400	5	1.842	2.065	12.14
600	2	4.928	5.329	8.13
800	9	2.376	1.935	18.55
1150	1.5	7.776	7.531	3.16
1200	4.5	4.342	3.975	8.46
1350	6	3.877	3.754	3.19
			AVERAGE	7.8375

Z výsledků na Obr. 42, Obr. 43 a Obr. 44 je vidět, že všechny zmíněné metody dokázaly aproximovat tvar výstupní funkce. Dokonce i metoda náhodného lesa dokázala dostatečně věrohodně proložit vstupní data. V tabulkách Tab. 8, Tab. 9, Tab. 10 je shrnuto porovnání predikce pomocí metamodelu a konečně-prvkových výpočtů.





Obr. 43: Metamodel vytvořený pomocí vícevrstvé neuronové sítě.



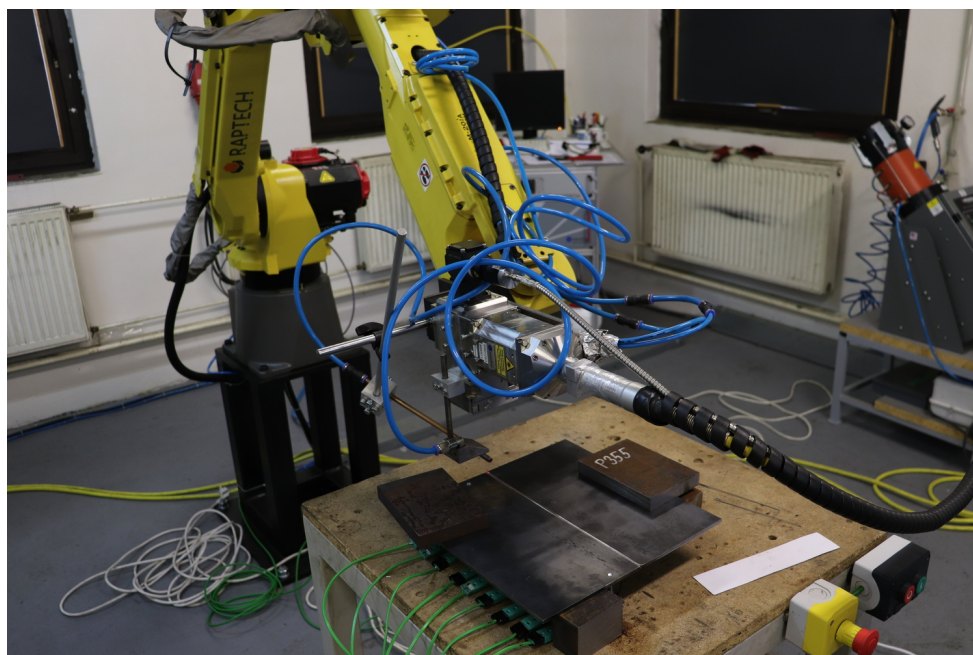
Obr. 44: Metamodel vytvořený pomocí náhodného lesa.

---

## PROVNÁNÍ EXPERIMENTÁLNÍCH DAT S VÝSLEDKY Z METAMODELOVÁNÍ

---

K porovnání metamodelu a reality byla dne 22.11.2018 provedena první část experimentu svařování dvou ocelových desek. Obrázek pracoviště, kde byl experiment proveden, je vidět na Obr. 45. Je zde vidět robotické rameno pro laserové svařování a stůl, na který se umísťují svařované desky.

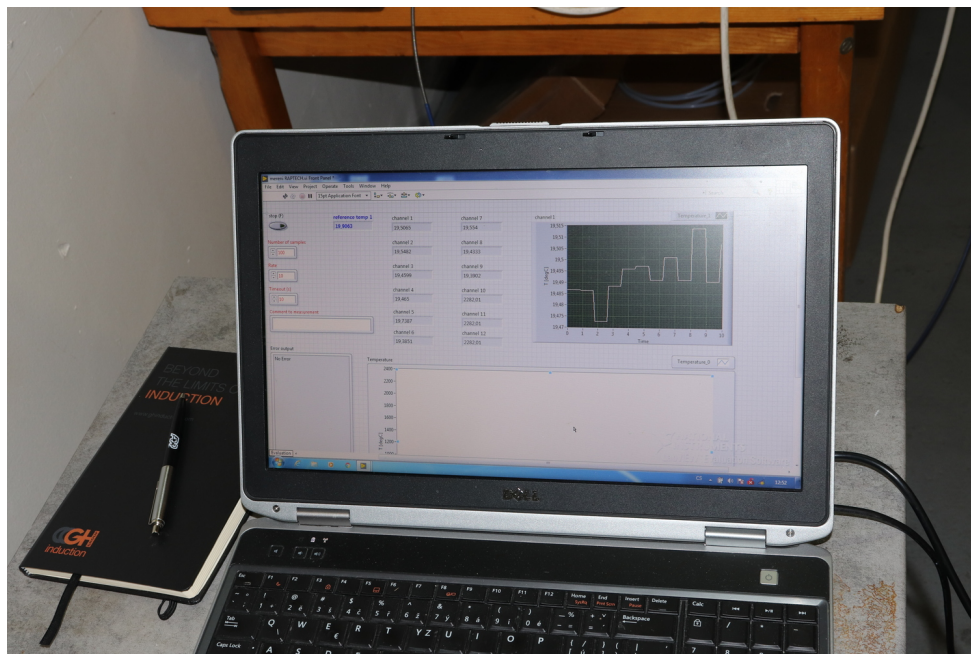


Obr. 45: Fotka pracoviště laserového svařování.

Robotické rameno nese diodový laser, jako ochranná atmosféra je použit argon.

Experiment byl proveden pro 2 vzorky (varianty), označení  $V_1$  a  $V_2$ . V případě svařování  $V_1$  byl konstantní příkon laseru a v průběhu se dvakrát změnila rychlost pohybu

laseru (celkem tři různé rychlosti). U  $V_2$  byla konstantní rychlost laseru a byl dvakrát měněn příkon laseru (celkem tři různé příkony). K měření byly použity navařovací termočlánky typu K připojené k měřicímu systému od firmy National Instrument. K ovládní byl použit program LabVIEW, viz Obr. 46. U obou variant byla použita 3 čidla na jednotlivé segmenty (celkem 9 čidel). Jedno čidlo měřilo teplotu okolí (čidlo  $T_0$ ).

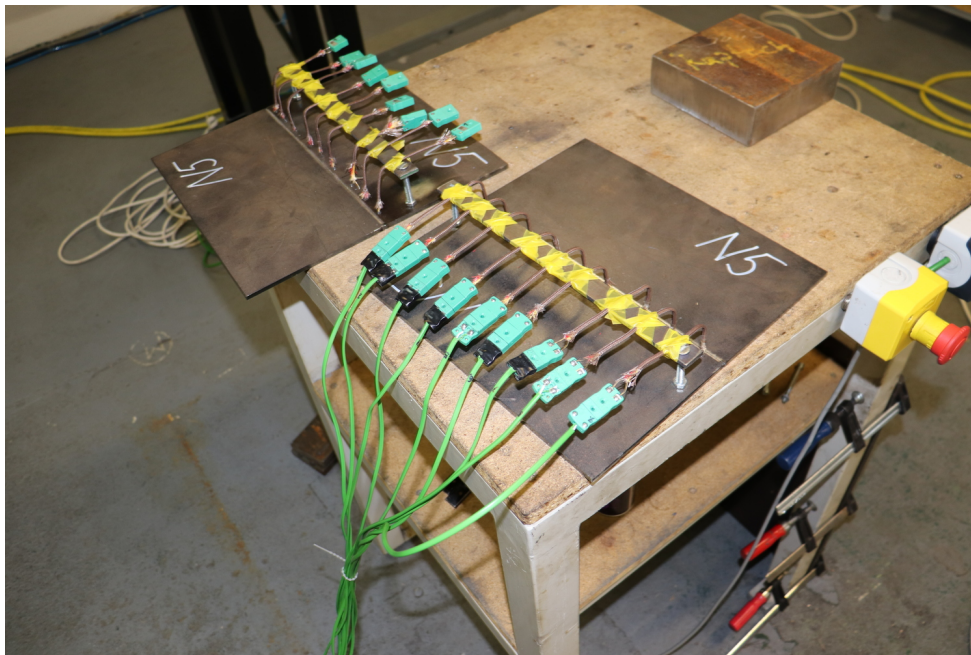


Obr. 46: Měřicí aplikace.

Termočlánky byly ke vzorkům přivařeny do předem navrtaných děr (pomocí specializované bodové svářečky k upevňování termočlánků), viz Obr. 47. Díry jsou vrtány tak, aby bylo čidlo 2 mm pod povrchem. Ke vzorkům je dále připevněna drobná kovová konstrukce, ke které je uchycena kabeláž vedoucí k termočlánkům. Označení termočlánků je dále v textu je  $T_1, T_2, \dots, T_9$

### 12.1 VZOREK V1

Pro první vzorek byl po dobu celého experimentu konstantní příkon laseru  $P = 3 \text{ kW}$ . Rychlost pohybu laseru se v průběhu měnila. Každá  $1/3$  desky (= 10 cm) byla svařována rozdílnou rychlostí, přičemž celková délka desky je 30 cm. Zvolená rychlost posuvu laseru je v tabulce Tab. 11.



Obr. 47: Měření vzorky s navařenými termočládky.

Tab. 11: Experiment  $V_1$ , rychlost posuvu laseru.

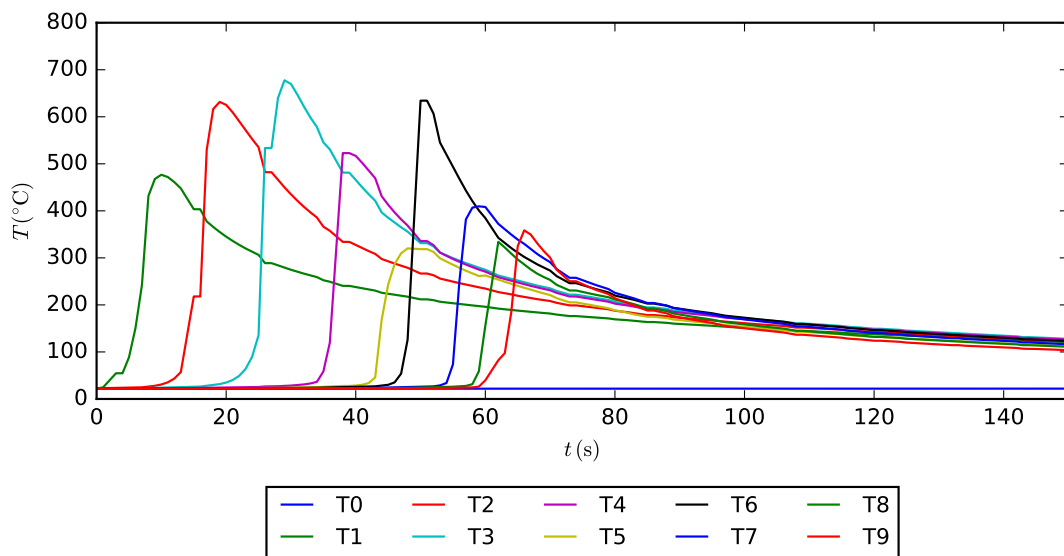
označení	$v$ ( $\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$ )
$V_{1a}$	3
$V_{1b}$	5
$V_{1c}$	7

Pro zmíněné hodnoty bylo následně spuštěno svařování. Průběh teploty na jednotlivých čidlech je vidět na Obr. 48. Optimální kvalita svaru je pro příkon laseru  $P = 3 \text{ kW}$  a rychlost  $v = 5 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ .

## 12.2 VZOREK $V_2$

Pro druhý vzorek  $V_2$  byla po dobu celého experimentu konstantní rychlost posuvu laseru  $v = 3 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$ . Příkon laseru se měnil dle tabulky Tab. 12. Průběh teploty na jednotlivých čidlech je pro  $V_2$  vidět na Obr. 48.

Rychlost  $v = 3 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$  a příkon  $P = 2400 \text{ W}$  je pro svařování daných desek optimální a je při něm nejlepší kvalita svaru (úzká šířka svaru). Pro variantu  $V_{2c}$  došlo k pro-



Obr. 48: Vývoj teploty na termočláncích -  $V_1$ .

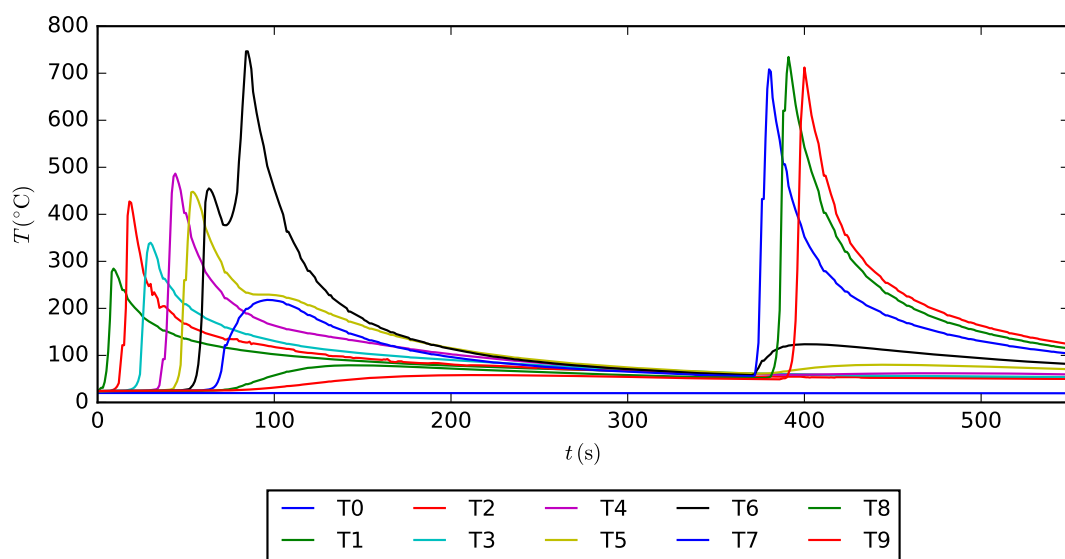
Tab. 12: Experiment  $V_1$ , příkon laseru.

označení	$P$ (W)
$V_{2a}$	1800 (60 % maxima)
$V_{2b}$	2400 (80 % maxima)
$V_{2c}$	3000 (100 % = maximum)

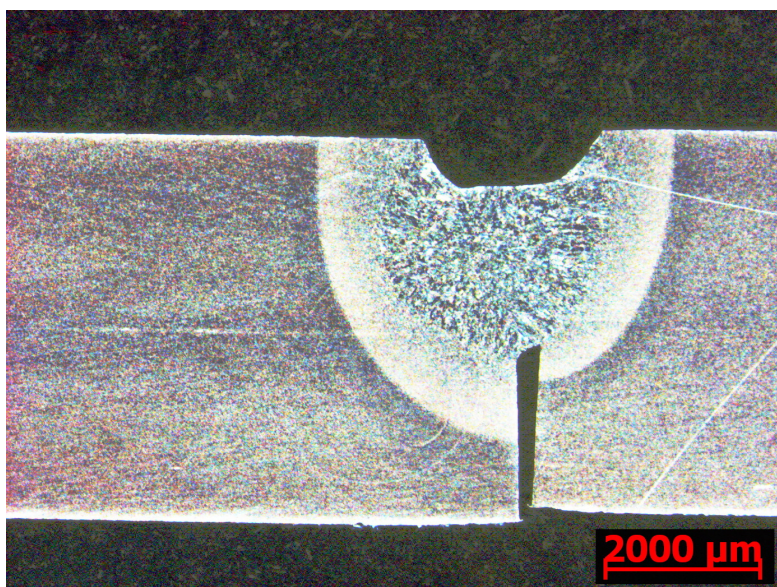
vaření skrz materiál. Problémem bylo přehřátí na teplotu 40-50 °C vlivem svařování předchozí 1/3 desky. Laser byl na chvíli odstaven, ochlazení desek ale nebylo dostatečné.

Ukázka svarů je na Obr. 50, Obr. 51 a Obr. 52<sup>11</sup>.

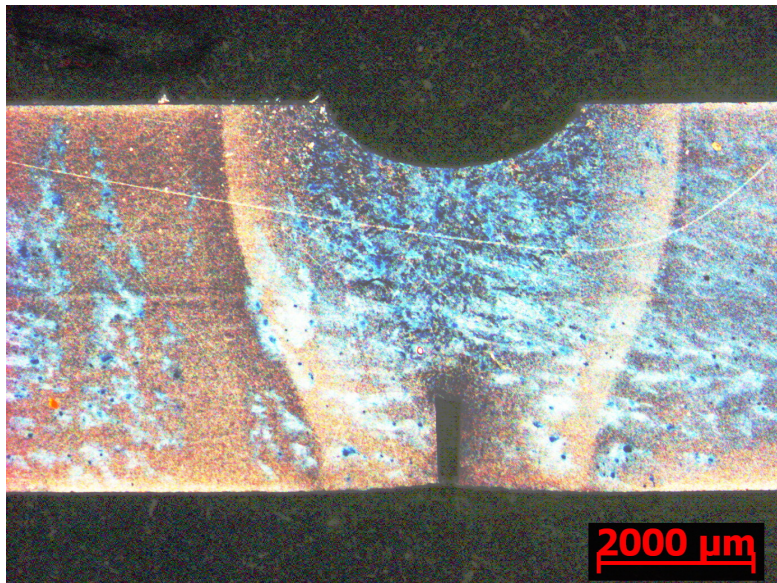
<sup>11</sup> Obrázky svarů jsou pro lepší ilustraci barevně upraveny.



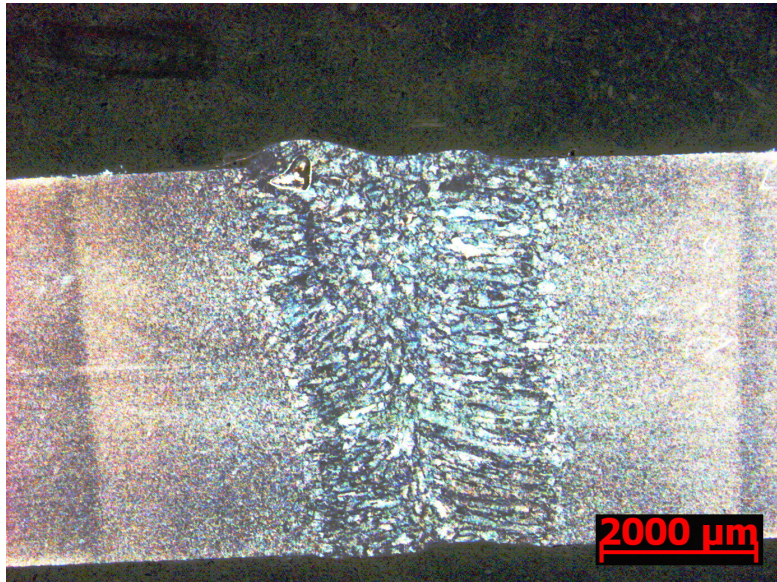
Obr. 49: Vývoj teploty na termočláncích - Vz.



Obr. 50: Ukázka nekvalitního svaru.



Obr. 51: Vyhovující kvalita svaru.



Obr. 52: Svar provařený skrz materiál.

Část IV

ZHODNOCENÍ A ZÁVĚR



---

## ZÁVĚR

---

I přes obrovský rozvoj velmi výkonné výpočetní techniky je v současné době jedním z trendů snížení výpočetní náročnosti modelů. Ve speciálních úlohách je řešení klasických konečně-prvkových modelů příliš zdlouhavé a je potřeba získat výsledky rychleji. Příkladem takových úloh můžou být například optimalizační úlohy, simulace řešené v reálném čase nebo speciální průmyslové aplikace. Jednou z možností snížení výpočetní náročnosti modelů je v současné době metamodelování. Jeho velkou výhodou je možnost ho využít na libovolnou inženýrskou úlohu (a to i mimo oblast elektrotechniky). Předpokladem je vhodná definice úlohy.

Čím je úloha výpočetně náročnější a složitější, tím je využití metamodelu výhodnější, protože časová úspora je větší. Mezi výpočetně nejnáročnější úlohy patří: sdružené úlohy a modely obsahující nelinearity. V rámci této práce je řešena úloha sdružená s nelineárními materiálovými parametry. Z tohoto důvodu je vhodným příkladem k demonstraci použití metamodelování k redukci výpočetního času. Vzhledem ke komplexnosti úlohy není možné pouze jedním metamodelem pokrýt kompletní chování sledovaného systému jako v případě konečně-prvkového modelu. Sledována byla kvalita svaru, zjednodušená pro potřeby modelování a charakterizována pouze jedním parametrem (hloubkou svaru). To samozřejmě nevystihuje všechny jevy, ke kterým dochází během svařování. Velkou výhodou metamodelování je možnost odhadovat výsledky na základě relativně malého množství dostupných dat.

Hlavním přínosem práce je shrnutí dosavadních znalostí z hlediska tvorby metamodelů a jejich aplikace na výpočetně velmi náročnou úlohu z oblasti elektrického tepla (hybridní laserové svařování). Z výsledků reálného příkladu je zřejmé, že metamodelování je dle předpokladů výhodné k ušetření výpočetního času. Pomocí metamodelu je možné odhadovat hloubku svaru v řádu sekund, což je v porovnání se standardní dobou výpočtu v řádu hodin znatelné zrychlení. Práce byla od začátku jako aplikační. Algoritmy pro tvorbu metamodelů jsou především používány, vlastní vývoj metod, ani jejich

rozšíření není cílem práce. Stěžejním přínosem práce je ukázka potenciálu využití metamodelů v průmyslu.

V úvodu práce jsou nejprve představeny základní pojmy, teorie a rozebrány vybrané techniky metamodelování. Z představených technik je pro aplikaci na reálnou úlohu vybrána regrese s Gaussovským procesem (kriging), protože ze svého principu poskytuje odhad i nejistotu odhadu.

Důležitou otázkou metamodelování je výběr vhodné techniky, proto je kromě Gaussovského procesu věnována v práci pozornost ještě dvěma dalším metodám a jejich následné konfrontaci, jedná se o vícevrstvou neuronovou síť a metodu náhodného lesa. Všechny tři metody jsou pro srovnání aplikovány nejprve na zvolené testovací funkce a následně i na řešenou úlohu. Výsledky potvrzují vhodnost regrese s Gaussovským procesem v případě omezeného počtu vstupních dat. Je zřejmé, že čím více vstupních dat je dostupných, tím bude metamodel přesnější. Nicméně vstupní data musí vhodně pokrývat sledovaný vstupní prostor, z tohoto důvodu je v práci popsána i problematika volby vstupních dat (*Design of Experiments*).

V práci je potvrzena hypotéza týkající se ušetření výpočetního času pro různé varianty modelu. To je zároveň hlavní výhodou užití metamodelování. Oproti tomu hlavní nevýhodou metamodelování je ztráta přesnosti a komplexnosti původního modelu. Velikost chyby metamodelu je vzhledem k uspořenému času akceptovatelná.

Na základě výsledků je možné potvrdit, že metamodelování je možné aplikovat k řešení reálné elektrotechnické úlohy v podobě hybridního laserové svařování ocelových desek. Je potřeba mít ale na paměti omezení způsobená jeho principem. Dále jsou krátce popsány další možné směry pokračování této disertační práce.

---

## SMĚRY DALŠÍHO POKRAČOVÁNÍ PRÁCE

---

V této části práce je krátce nastíněno, v jakých směrech je možné na disertační práci navázat.

Pro tvorbu metamodelů je možné zvolit celou řadu metod. V rámci této práce se osvědčila metoda regrese s Gaussovským procesem, protože je možné ji efektivně aplikovat i na malé soubory vstupních dat. Její obrovskou výhodou je její statistické pozadí, díky kterému je možné vedle vlastního odhadu získat i hodnotu jeho pravděpodobnosti a s touto informací dále pracovat. Klíčovou částí metody je volba vhodné kovarianční funkce a jejích hyperparametrů. Volba těchto prvků má obrovský vliv na odhad i pravděpodobnost odhadu, obecně jejich určení není jednoduché. Zajímavou cestou k určení hyperparametrů je metoda Hamiltonian Monte Carlo (HMC) [64].

Obecně důležitým bodem je srovnání výsledků modelování a metamodelování s fyzikální realitou. Reálný experiment popsáný v této práci bude dále zpracováván, v přípravě je publikace na konferenci HES 2019.

Dalším zajímavým směrem by bylo porovnání výsledků získaných pomocí metamodelování s výsledky získanými pomocí metod redukce řádu modelů (*Model Order Reduction*), a to především na nelineárních a sdružených úlohách.

Závěrem je vhodné zmínit, že poznatky získané při zpracovávání této disertační práce budou dále aplikovány ve výzkumně-vývojových aktivitách katedry. Využití metamodelů bude i nadále studováno a využito k odhadům parametrů konečně prvkových modelů a jejich ověření pomocí reálných experimentů. V plánu je využití metodiky na úlohy laserového navařování kovů.

---

## LITERATURA

---

- [1] AYED, R. B. et al. Three-Level Output Space Mapping Strategy for Electromagnetic Design Optimization. *IEEE Transactions on Magnetics*. Feb 2012, 48, 2, s. 671–674. ISSN 0018-9464. doi: 10.1109/TMAG.2011.2174349.
- [2] BARMUTA, P. et al. Design of Experiments Using Centroidal Voronoi Tessellation. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*. Nov 2016, 64, 11, s. 3965–3973. ISSN 0018-9480. doi: 10.1109/TMTT.2016.2613918.
- [3] BERGSTRA, J. – BENGIO, Y. Random search for hyper-parameter optimization. *Journal of Machine Learning Research*. 2012, 13, Feb, s. 281–305.
- [4] BISHOP, C. M. *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Springer-Verlag New York, Inc., 2006. ISBN 0387310738.
- [5] BREIMAN, L. Random forests. *Machine learning*. 2001, 45, 1, s. 5–32.
- [6] CAVAZZUTI, M. *Optimization methods : from theory to design scientific and technological aspects in mechanics*. Springer, 2013. ISBN 978-3-642-31187-1.
- [7] CHINESTA, F. *PGD-based modeling of materials, structures and processes*. Springer, 2014. ISBN 978-3-319-06181-8.
- [8] CHINESTA, F. *The proper generalized decomposition for advanced numerical simulations : a primer*. Springer, 2014. ISBN 978-3-319-02864-4.
- [9] *COMSOL Multiphysics: AC/DC Module User's Guide, Version 5.2*. COMSOL AB, 2015. Dostupné z: <https://www.comsol.com>.
- [10] COX, D. R. – REID, N. *The theory of the design of experiments*. Chapman and Hall/CRC, 2000.
- [11] CRIMINISI, A. et al. Decision forests: A unified framework for classification, regression, density estimation, manifold learning and semi-supervised learning. *Foundations and Trends® in Computer Graphics and Vision*. 2012, 7, 2–3, s. 81–227.

- [12] DALLAIRE, P. – BESSE, C. – CHAIB-DRAA, B. Learning Gaussian process models from uncertain data. In *International Conference on Neural Information Processing*, s. 433–440. Springer, 2009.
- [13] DEDE, E. *Multiphysics simulation : electromechanical system applications and optimization*. Springer, 2014. ISBN 978-1-4471-5640-6.
- [14] DUVENAUD, D. *Automatic model construction with Gaussian processes*. PhD thesis, University of Cambridge, 2014.
- [15] DUVENAUD, D. K. The Kernel Cookbook: Advice on Covariance functions. [Cit. 11.11.2018]. Dostupné z: <https://www.cs.toronto.edu/~duvenaud/cookbook/>.
- [16] DÍAZ-MANRÍQUEZ, A. – TOSCANO-PULIDO, G. – GÓMEZ-FLORES, W. On the selection of surrogate models in evolutionary optimization algorithms. In *2011 IEEE Congress of Evolutionary Computation (CEC)*, s. 2155–2162, June 2011. doi: 10.1109/CEC.2011.5949881.
- [17] FORRESTER, A. – KEANE, A. – OTHERS. *Engineering design via surrogate modelling: a practical guide*. John Wiley & Sons, 2008.
- [18] FRANKIEWICZ, M. – KOS, A. Maximum Temperature Detection System for Integrated Circuits. *Journal of Electrical Engineering*. 2015, 66, 2, s. 79–84.
- [19] GIRARD, A. – MURRAY-SMITH, R. Learning a Gaussian process model with uncertain inputs.
- [20] GONG, J. et al. Multi objective optimization of a linear induction motor using 3D FEM. *COMPEL - The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering*. 2012, 31, 3, s. 958–971. doi: 10.1108/03321641211209834.
- [21] GORISSEN, D. et al. A surrogate modeling and adaptive sampling toolbox for computer based design. *Journal of Machine Learning Research*. 2010, 11, Jul, s. 2051–2055.
- [22] GU, C. *Model order reduction of nonlinear dynamical systems*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 2011.
- [23] HAGAN, M. T. et al. *Neural network design*. 20. Pws Pub. Boston, 1996.
- [24] HARARY, F. – BATELL, M. F. *What is a system?* 1981.

- [25] HAWE, G. – SYKULSKI, J. Considerations of accuracy and uncertainty with kriging surrogate models in single-objective electromagnetic design optimisation. *IET Science, Measurement Technology*. January 2007, 1, 1, s. 37–47. ISSN 1751-8822.
- [26] HAWE, G. – SYKULSKI, J. Considerations of accuracy and uncertainty with kriging surrogate models in single-objective electromagnetic design optimisation. *IET Science, Measurement Technology*. January 2007, 1, 1, s. 37–47. ISSN 1751-8822. doi: 10.1049/iet-smt:20060035.
- [27] HAYKIN, S. *Neural networks and learning machines*. Prentice Hall/Pearson, 2009. ISBN 978-0-13-147139-9.
- [28] HELTON, J. C. – DAVIS, F. J. Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems. *Reliability Engineering & System Safety*. 2003, 81, 1, s. 23–69.
- [29] HOLMAN, J. P. *Heat transfer*. McGraw-Hill, 2002. ISBN 9780072406559.
- [30] JAMES, G. et al. *An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R (Springer Texts in Statistics)*. Springer, 2013. ISBN 978-1-4614-7138-7.
- [31] JUNGWIRTH, M. – HOFINGER, D. – WEINZIERL, H. A comparison of model order reduction methods used in different FE software tools. In *2010 11th International Thermal, Mechanical Multi-Physics Simulation, and Experiments in Microelectronics and Microsystems (EuroSimE)*, s. 1–5, April 2010. doi: 10.1109/ESIME.2010.5464612.
- [32] JURECKA, F. *Robust design optimization based on metamodeling techniques*. PhD thesis, Technische Universität München, Arcisstr. 21 80333 München, 5 2007.
- [33] KEYES, D. E. et al. Multiphysics simulations: Challenges and opportunities. *The International Journal of High Performance Computing Applications*. 2013, 27, 1, s. 4–83. doi: 10.1177/1094342012468181.
- [34] KLASCHKA, J. – KOTRČ, E. Klasifikační a regresní lesy. In *ROBUST 2004. Sborník prací 13. letní školy JČMF, 2004*, 2004. Dostupné z: <http://www.statspol.cz/robust/robust2004/klaschka.pdf>.
- [35] KLEIJNEN, J. P. – SARGENT, R. G. A methodology for fitting and validating metamodels in simulation. Two anonymous referees' comments on the first draft lead to an improved organization of our paper. *European Journal of Operational Research*.

- 2000, 120, 1, s. 14 – 29. ISSN 0377-2217. doi: [https://doi.org/10.1016/S0377-2217\(98\)00392-0](https://doi.org/10.1016/S0377-2217(98)00392-0).
- [36] KOMPRDOVÁ, K. *Rozhodovací stromy a lesy*. Akademické nakladatelství CERM, 2012. ISBN 978-80-7204-785-7.
- [37] KOZIEL, S. *Surrogate-based modeling and optimization : applications in engineering*. Springer, 2013. ISBN 978-1-4614-7551-4.
- [38] KOZIEL, S. – BEKASIEWICZ, A. Strategies for computationally feasible multi-objective simulation-driven design of compact RF/microwave components. *Engineering Computations*. 2016, 33, 1, s. 184–201.
- [39] KRIZHEVSKY, A. – SUTSKEVER, I. – HINTON, G. E. Imagenet classification with deep convolutional neural networks. In *Advances in neural information processing systems*, s. 1097–1105, 2012.
- [40] KUBAT, M. *An introduction to machine learning*. Springer, 2015. ISBN 978-3-319-20010-1.
- [41] KUCZMANN, M. *The finite element method in magnetics*. Akadémiai Kiado, 2008. ISBN 978-963-05-8649-8.
- [42] KUCZMANN, M. – IVÁNYI, A. *The finite element method in magnetics*. Akadémiai Kiadó, 2008.
- [43] LAVERS, J. State of the art of numerical modeling for induction processes. *COMPEL - The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering*. 2008, 27, 2, s. 335–349. doi: 10.1108/03321640810847625.
- [44] LIENHARD IV, J. – LIENHARD V, J. *A Heat Transfer Textbook*. Phlogiston Press, 4th edition, 2016. Version 2.04. Dostupné z: <http://ahtt.mit.edu>.
- [45] LOWE, D. – BROOMHEAD, D. Multivariable functional interpolation and adaptive networks. *Complex systems*. 1988, 2, 3, s. 321–355.
- [46] M., F. et al. *Surrogate and Reduced-Order Modeling: A Comparison of Approaches for Large-Scale Statistical Inverse Problems*, 7, s. 123–149. Wiley-Blackwell, 2010. doi: 10.1002/9780470685853.ch7. ISBN 9780470685853.
- [47] MAGNANI, L. *Springer handbook of model-based science*. Springer, 2017. ISBN 978-3-319-30526-4.

- [48] MARTÍNEZ, S. Z. – COELLO, C. A. C. Combining surrogate models and local search for dealing with expensive multi-objective optimization problems. In *2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, s. 2572–2579, June 2013. doi: 10.1109/CEC.2013.6557879.
- [49] MATHERON, G. Principles of geostatistics. *Economic geology*. 1963, 58, 8, s. 1246–1266.
- [50] MATHERON, G. The intrinsic random functions and their applications. *Advances in applied probability*. 1973, 5, 3, s. 439–468.
- [51] MAYER, D. *Aplikovaný elektromagnetizmus: úvod do makroskopické teorie elektromagnetického pole pro elektrotechnické inženýry*. Kopp, 2. vyd. edition, 2012. 538 s. ISBN 978-80-7232-436-1.
- [52] MCHUTCHON, A. – RASMUSSEN, C. E. Gaussian process training with input noise. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, s. 1341–1349, 2011.
- [53] MCKAY, M. D. – BECKMAN, R. J. – CONOVER, W. J. Comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*. 1979, 21, 2, s. 239–245.
- [54] MECKESHEIMER, M. et al. Computationally inexpensive metamodel assessment strategies. *AIAA journal*. 2002, 40, 10, s. 2053–2060.
- [55] MENDES, M. H. S. et al. A Surrogate Genetic Programming Based Model to Facilitate Robust Multi-Objective Optimization: A Case Study in Magnetostatics. *IEEE Transactions on Magnetics*. May 2013, 49, 5, s. 2065–2068. ISSN 0018-9464. doi: 10.1109/TMAG.2013.2238615.
- [56] MENDES, M. H. S. et al. Appraisal of Surrogate Modeling Techniques: A Case Study of Electromagnetic Device. *IEEE Transactions on Magnetics*. May 2013, 49, 5, s. 1993–1996. ISSN 0018-9464. doi: 10.1109/TMAG.2013.2241401.
- [57] MITCHELL, T. *Machine Learning*. McGraw-Hill, 1997. ISBN 0070428077.
- [58] MONTEMAYOR-GARCÍA, G. – TOSCANO-PULIDO, G. A study of surrogate models for their use in multiobjective evolutionary algorithms. In *2011 8th International Conference on Electrical Engineering, Computing Science and Automatic Control*, s. 1–6, Oct 2011. doi: 10.1109/ICEEE.2011.6106655.



- [59] MONTIER, L. et al. Transient simulation of an electrical rotating machine achieved through model order reduction. *Advanced Modeling and Simulation in Engineering Sciences*. 2016, 3, 1, s. 1–17. ISSN 2213-7467. doi: 10.1186/s40323-016-0062-z.
- [60] MOST, T. – WILL, J. Sensitivity analysis using the Metamodel of Optimal Prognosis. *Weimar Optimization and Stochastic Days*. 2011, 8, s. 24–40.
- [61] MURPHY, K. P. *Machine Learning: A Probabilistic Perspective (Adaptive Computation and Machine Learning series)*. The MIT Press, 2012. ISBN 978-0-262-01802-9.
- [62] MURRAY-SMITH, D. J. *An Introduction to Simulation Models and the Modelling Process*, s. 1–18. Springer International Publishing, Cham, 2015. doi: 10.1007/978-3-319-15099-4\_1. ISBN 978-3-319-15099-4.
- [63] NACKE, B. UIE Intensive Course for Ph.D. Students on Induction Heating, Induction Melting and Power Supplies, 2014.
- [64] NEAL, R. M. – OTHERS. MCMC using Hamiltonian dynamics. *Handbook of Markov Chain Monte Carlo*. 2011, 2, 11, s. 2.
- [65] NIKISHKOV, G. *Programming Finite Elements in Java™*. Springer London, 2010. ISBN 9781848829725.
- [66] OSTERTAGOVÁ, E. Modelling using polynomial regression. *Procedia Engineering*. 2012, 48, s. 500–506.
- [67] PASTUCHOVÁ, E. – ZÁKOPČAN, M. Comparison of Algorithms For Fitting a Gaussian Function Used in Testing Smart Sensors. *Journal of Electrical Engineering*. 2015, 66, 3, s. 178–181.
- [68] PAVELSKI, L. M. et al. ELMOEA/D-DE: Extreme Learning Surrogate Models in Multi-objective Optimization Based on Decomposition and Differential Evolution. In *2014 Brazilian Conference on Intelligent Systems*, s. 318–323, Oct 2014. doi: 10.1109/BRACIS.2014.64.
- [69] PAVLÍČEK, K. – KOTLAN, V. – DOLEŽEL, I. Estimation of laser weld parameters using surrogate modelling technique. *Journal of Electrical Engineering*. mar 2018, 69, 2, s. 170–176. doi: 10.2478/jee-2018-0021.

- [70] PAVLÍČEK, K. et al. Acceleration of evolution-based algorithms by relation preconditioning of optimization parameters. In *20th International Conference on the Computation of Electromagnetic Fields (Compumag 2015)*, s. 1–2. International Compumag Society Board, 2015.
- [71] PAVLÍČEK, K. – KOTLAN, V. – DOLEŽEL, I. Surrogate modelling technique in multi-parametric laser welding process. In *2018 ELEKTRO*, s. 1–4, May 2018. doi: 10.1109/ELEKTRO.2018.8398349.
- [72] PAVLÍČEK, K. – KOTLAN, V. – DOLEŽEL, I. Applicability and comparison of surrogate techniques for modeling of selected heating problems. *Computers & Mathematics with Applications*. 2019. ISSN 0898-1221. doi: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2019.02.013>.
- [73] PEDREGOSA, F. et al. Scikit-learn: Machine Learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*. 2011, 12, s. 2825–2830.
- [74] PRYOR, R. *Multiphysics modeling using COMSOL : a first principles approach*. Jones and Bartlett Publishers, 2011. ISBN 978-0-7637-7999-3.
- [75] QIAN, Z. et al. Building Surrogate Models Based on Detailed and Approximate Simulations. *Journal of Mechanical Design - J MECH DESIGN*. 07 2006, 128.
- [76] QUEIPO, N. V. et al. Surrogate-based analysis and optimization. *Progress in aerospace sciences*. 2005, 41, 1, s. 1–28.
- [77] RASMUSSEN, C. E. – WILLIAMS, C. K. I. *Gaussian Processes for Machine Learning (Adaptive Computation and Machine Learning series)*. The MIT Press, 2005. Dostupné z: <http://www.gaussianprocess.org/gpml/chapters/>. ISBN 026218253X.
- [78] RAWLINGS, J. O. – PANTULA, S. G. – DICKEY, D. A. *Applied regression analysis: a research tool*. Springer Science & Business Media, 2001.
- [79] RAZAVI, S. – TOLSON, B. A. – BURN, D. H. Review of surrogate modeling in water resources. *Water Resources Research*. 2012, 48, 7.
- [80] ROOS, D. et al. Advanced surrogate models within the robustness evaluation. *Proc. Weimarer Optimierungs-und Stochastiktage*. 2007, 4, s. 29–30.
- [81] RUDNYI, E. B. – KORVINK, J. G. Model order reduction for large scale engineering models developed in ANSYS. In *International Workshop on Applied Parallel Computing*, s. 349–356. Springer, 2004.

- [82] SADIKU, M. N. *Numerical Techniques in Electromagnetics, Second Edition*. CRC Press, 2 edition, 7 2000. ISBN 9780849313950.
- [83] SHANNON, R. E. Introduction to the art and science of simulation. In *Proceedings of the 30th conference on Winter simulation*, s. 7–14. IEEE Computer Society Press, 1998.
- [84] SHIELDS, M. D. – ZHANG, J. The generalization of Latin hypercube sampling. *Reliability Engineering & System Safety*. 2016, 148, s. 96–108.
- [85] STEINBERG, D. CART: Classification and Regression Trees. In XINDONG WU, V. K. (Ed.) *The top ten algorithms in data mining*. Boca Raton: CRC Press, 2009. 10, s. "179–201". ISBN 9781420089646.
- [86] TARANTOLA, A. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. Other titles in applied mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005. ISBN 9780898715729.
- [87] W DOEBLING, S. et al. A metamodel-based approach to model validation for nonlinear finite element simulations. 09 2018.
- [88] WESSING, S. et al. Replacing FEA for sheet metal forming by surrogate modeling. *Cogent Engineering*. 2014, 1, 1, s. 950853. doi: 10.1080/23311916.2014.950853.
- [89] WILLIAMS, C. K. – RASMUSSEN, C. E. Gaussian processes for regression. In *Advances in neural information processing systems*, s. 514–520, 1996.
- [90] WONG, T.-T. – LUK, W.-S. – HENG, P.-A. Sampling with Hammersley and Halton points. *Journal of graphics tools*. 1997, 2, 2, s. 9–24.
- [91] XIAO, S. – ROTARU, M. – SYKULSKI, J. K. Exploration versus exploitation using kriging surrogate modelling in electromagnetic design. *COMPEL - The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering*. 2012, 31, 5, s. 1541–1551. doi: 10.1108/03321641211248291.
- [92] XIN, L. Monte Carlo Analysis: Latin hypercube sampling and Importance sampling. University Lecture in 18-660: Numerical Methods for Engineering Design and Optimization, 2015. Dostupné z: [https://users.ece.cmu.edu/~xinli/classes/cmu\\_18660/Lec25.pdf](https://users.ece.cmu.edu/~xinli/classes/cmu_18660/Lec25.pdf).

- [93] YELTEN, M. B. et al. Demystifying Surrogate Modeling for Circuits and Systems. *IEEE Circuits and Systems Magazine*. Firstquarter 2012, 12, 1, s. 45–63. ISSN 1531-636X. doi: 10.1109/MCAS.2011.2181095.

Část V

PŘÍLOHY



---

## SEZNAM PUBLIKACÍ AUTORA

---

2019

PAVLÍČEK, K., KOTLAN, V., DOLEŽEL, I. Applicability and comparison of surrogate techniques for modeling of selected heating problems. *Computers & Mathematics with Applications*, 2019, ISSN: 0898-1221, Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.camwa.2019.02.013>. (**Jimp**) (In Press, Corrected Proof)

2018

PAVLÍČEK, K., KOTLAN, V., DOLEŽEL, I. Surrogate modelling technique in multi-parametric laser welding process. In: *12th International Conference Elektro 2018 : proceedings*. Piscataway: IEEE, 2018. s. 1-4. ISBN: 978-1-5386-4758-5.

PAVLÍČEK, K., KOTLAN, V., DOLEŽEL, I. Estimation of laser weld parameters using surrogate modelling technique. *Journal of Electrical Engineering = Elektrotechnický časopis*, 2018, roč. 69, č. 2, s. 170-176. ISSN: 1335-3632. (**Jimp**)

2017

PAVLÍČEK, K., KOTLAN, V., DOLEŽEL, I., SOUKUP, R. Determination of heat flux for needs of modelling multi-layer smart protective suit. In *Proceedings of 2017 18th International Conference Computational Problems of Electrical Engineering (CPEE)*. Piscataway: IEEE, 2017. s. 1-4. ISBN: 978-1-5386-1040-4.

2016

PAVLÍČEK, K., KOTLAN, V., MACH, F., KARBAN, P., DOLEŽEL, I., SOUKUP, R., KALČÍK, J. Fast algorithm for evaluation of critical parameters of smart overalls. In: *11th International Conference Elektro 2016 : proceedings*. Piscataway: IEEE, 2016. s. 561-564. ISBN: 978-1-4673-8698-2.

KOTLAN, V., PAVLÍČEK, K., DOLEŽEL, I., SOUKUP, R., KUPKA, L. Heat transfer in sandwich smart textiles. In: *HES-16 : International Conference on Heating by Electromagnetic Sources : (proceedings)*. Padua: University of Padua, 2016. s. 413-418. ISBN: 978-88-89884-32-4 , ISSN: 2385-2933.

2015

PAVLÍČEK, K., MACH, F., KARBAN, P., DOLEŽEL, I. Acceleration of evolution-based algorithms by relation preconditioning of optimization parameters. In: *20th International Conference on the Computation of Electromagnetic Fields (Compumag 2015) : /proceedings/*. Montreal: International Compumag Society Board, 2015. s. 1-2. ISBN: neuvedeno.

PAVLÍČEK, K. Porovnání přesnosti numerického řešení 2D a 3D problému. In: *Elektrotechnika a informatika 2015*. Elektrotechnika, elektronika, elektroenergetika. Plzeň: Západočeská univerzita v Plzni, 2015. s. 91-94. ISBN: 978-80-261-0514-5.

2014

PAVLÍČEK, K. Návrh a modelování reluktančního motoru s permanentními magnety. In: *Elektrotechnika a informatika 2014*. Část 1., Elektrotechnika. Plzeň: Západočeská univerzita v Plzni, 2014. s. 91-94. ISBN: 978-80-261-0367-7.