

České vysoké učení technické v Praze

Fakulta stavební

Katedra materiálového inženýrství a chemie



Magisterská práce

Poděkování

Za všechny cenné rady, připomínky a odborné konzultace při zpracování této magisterské práce děkuji Ing. Jiřímu Maděrovi, Ph. D. a Ing. Anně Kučerové, Ph. D.

Čestné prohlášení

Prohlašuji, že jsem tuto magisterskou práci vypracoval samostatně, pouze za odborného vedení vedoucího práce Ing. Jiřího Maděry, Ph.D.

Dále prohlašuji, že veškeré podklady, ze kterých jsem čerpal, jsou uvedeny v seznamu použité literatury.

.....

podpis

Inverzní analýza přenosu tepla a vlhkosti
pomocí genetického algoritmu

Inverse analysis of heat and moisture transport
using genetic algorithm

Anotace:

Tato magisterská práce je prvním uceleným pohledem na otázku využití genetických algoritmů v rámci inverzní analýzy přenosu tepla a vlhkosti ve stavebních materiálech. Stěžejním nástrojem inverzní analýzy je genetický algoritmus GRADE, který byl implementován do současných výpočetních nástrojů. S touto implementací proběhlo několik optimalizací. Funkčnost genetického algoritmu je nejprve ověřena na teoretickém experimentu, u něhož jsou všechny vstupy známy a poté je genetický algoritmus aplikován na skutečný experiment s cílem nalézt vhodnou aproximaci křivky součinitele vlhkostní vodivosti κ .

Klíčová slova: *inverzní analýza, genetické algoritmy, GRADE, přenos tepla a vlhkosti, součinitel vlhkostní vodivosti*

Abstract:

This thesis is a first comprehensive paper dealing with genetic algorithms issue used within the frame of inverse analysis of heat and moisture transport in building materials. As a main tool of the inverse analysis, the genetic algorithm GRADE was chosen and implemented into current computer simulation tools for modeling coupled heat and moisture transport. With this implementation a few different optimizations were accomplished. The utility of GRADE is first demonstrated and proved on a simple theoretical experiment. Then the genetic algorithm is applied to a real experiment data with the objective to find an appropriate approximation of a moisture diffusivity coefficient κ .

Keywords: *inverse analysis, genetic algorithms, GRADE, heat and moisture transport, moisture diffusivity coefficient*

Obsah

1	Úvod	8
2	Současný stav problematiky	11
2.1	Inverzní analýza	11
2.1.1	Dopředný postup inverzní analýzy	11
2.1.1.1	Gradientní metody	13
2.1.1.2	Genetické algoritmy	13
2.1.2	Zpětný postup inverzní analýzy	17
2.2	Inverzní analýza přenosu tepla a vlhkosti	18
2.2.1	Jednokřivkové metody	20
2.2.2	Víceřivkové metody	22
3	Cíle práce	24
4	Výběr metody pro řešení inverzního problému	25
5	Aplikace genetického algoritmu na teoretickém experimentu	26
5.1	Popis experimentu	26
5.2	Optimalizované veličiny	28
5.3	Stanovení objektivní funkce	30
5.4	Výsledky aplikace genetického algoritmu na teoretickém experimentu	37
5.4.1	Přesnost genetického algoritmu	37
5.4.2	Rychlost konvergence genetického algoritmu	41
5.4.3	Ověření nalezených řešení	42
5.5	Shrnutí aplikace genetického algoritmu na teoretickém experimentu	46
6	Aplikace genetického algoritmu na reálném experimentu	47
6.1	Popis experimentu	47
6.2	Data získaná z experimentu	48
6.3	Počítačová simulace experimentu	50
6.4	Optimalizované parametry	50
6.5	Nalezená řešení	52
6.5.1	Nalezená řešení pro optimalizaci č. 1	52
6.5.2	Nalezená řešení pro optimalizaci č. 2	57
6.5.3	Stanovení objektivní funkce pro identifikaci součinitele vlhkostní vodivosti	60
6.6	Další metody optimalizace vedoucí ke zvýšení přesnosti	63
6.6.1	Popis nových optimalizací vedoucí ke zvýšení přesnosti	64
6.6.2	Nalezená řešení pro optimalizaci č. 3	64
6.6.3	Nalezená řešení pro optimalizaci č. 4	68
7	Diskuse nad získanými řešeními	73

8	Závěr.....	76
	Literatura.....	78
	Seznam obrázků	81
	Seznam tabulek.....	83

1 Úvod

Při řešení simulace transportních jevů ve stavebních materiálech často narážíme na problémy se vstupními parametry. Ačkoliv existují dostatečně kvalitní a spolehlivé numerické modely popisující transport tepla a vlhkosti, nezbytnou podmínkou pro jejich správnou funkčnost je právě kvalita a přesnost vstupních dat. Vstupními daty se rozumí nejen počáteční a okrajové podmínky, ale také celá řada materiálových parametrů, které hrají zásadní roli při modelování transportních jevů v materiálech. Materiálové parametry patří do nejrizikovější skupiny z hlediska možného ovlivnění výsledku. Materiálové modely, které se v současné době nejvíce využívají na Katedře materiálového inženýrství a chemie, Fakulty stavební ČVUT v Praze při řešení transportu tepla a vlhkosti ve stavebních materiálech, rozeznávají sedm různých materiálových parametrů, z nichž některé jsou měřitelné snáze a jiné hůře. Obecně lze říci, že parametry ovlivňující transport tepla, např. tepelná kapacita či součinitel tepelné vodivosti, se získávají bez větších komplikací a s vyššími přesnostmi, zatímco měření parametrů ovlivňujících transport vlhkosti je náročnější. Příkladem může být součinitel vlhkostní vodivosti či sorpční izoterma vlhkosti. Tyto veličiny navíc figurují v simulacích jako parametry závislé na aktuální vlhkosti materiálu, což představuje velkou časovou náročnost při měření, u kterého je třeba dostatečné přesnosti. Problematika transportu vlhkosti je také mnohem komplexnější a obsáhlejší než je tomu u transportu tepla, proto jsou při porovnávání výsledků počítačové simulace s reálným experimentem často větší odchylky u vlhkostních průběhů než u teplotních.

Ideálním nástrojem k určení vstupních parametrů může být inverzní (zpětná) analýza, která na základě známých výstupů dokáže určit neznámé vstupy. Pokud by se takováto metoda implementovala do problematiky transportních jevů, bylo by možné snadno určit ty materiálové parametry, které se obtížně měří. To by mělo za následek nejen urychlení měření, ale také značné ušetření finančních prostředků. Je třeba si ale uvědomit, že takto nalezené „virtuální“ parametry nemusí korespondovat s parametry získanými laboratorním měřením, jelikož fyzický experiment je aproximován numerickým modelem. Proto, i když pomocí inverzní analýzy nalezneme parametry se sebevětší přesností, stále se bude jednat o vstupní parametry pro numerický model. Pokud je však aproximace reálného experimentu dostatečně přesná a materiálové parametry získané inverzní metodou jsou použity k dalším simulacím, je tato metoda naprosto ideální.

Nástrojů inverzní analýzy existuje celá řada a jedním z nejmodernějších a nejoblíbenějších v inženýrských aplikacích jsou genetické algoritmy. Tyto algoritmy v podstatě sledují analogii procesů, které probíhají v přírodě během evoluce živých organismů po dobu mnoha milionů let a tato evoluce je vhodným způsobem přenesena do inženýrského problému.

Nespornou výhodou genetických algoritmů je fakt, že je lze aplikovat v případech, kdy tradiční gradientní metody optimalizace selhávají. Důvodem takového selhání je například komplexnost numerického modelu, jehož výstupy jsou ovlivněny množstvím interakcí různých vstupních parametrů. Často také bývá numerický model uzavřen v konečně-prvkovém programu omezeném licenčními podmínkami, uzavřeným kódem apod. Tudíž znalost prvních a vyšších derivací objektivní funkce je nedostupná nebo samotná objektivní funkce není spojitě diferencovatelná, a proto není možné takovou funkci minimalizovat analytickým způsobem. Jak bude ukázáno dále, tradiční gradientní metody k nalezení hledaného parametru v případě transportních jevů použít nelze, proto se předmětem této práce stává aplikace a využití genetického algoritmu.

V první teoretické části je uveden přehled současné problematiky. V této kapitole je obecně pojednáno o principech inverzní analýzy a jsou zde představeny základní metody určování transportních parametrů při laboratorních experimentech.

Po stanovení cílů práce následuje kapitola 4. V této kapitole je analyzován řešený problém, je zde odůvodněna zvolená metoda řešení, která je dále podrobně vysvětlena a rozepsána.

V kapitole 5 je pak zvolená metoda aplikována na virtuální experiment, který slouží k její verifikaci, tj. ověření funkčnosti na teoretické úrovni. K verifikaci byl zvolen jednoduchý experiment simulující jednorozměrný transport vlhkosti uvnitř tyčového prvku. Cílem aplikovaného genetického algoritmu je nalézt známý (referenční) součinitel vlhkostní vodivosti materiálu na základě porovnání podélných vlhkostních křivek v několika různých časech.

Šestá kapitola je věnována validaci inverzní metody za užití genetického algoritmu, čímž se rozumí ověření funkčnosti genetického algoritmu na skutečném experimentu. Pro tyto účely byl vybrán experiment uskutečněný v laboratořích katedry Materiálového inženýrství a chemie, v rámci rozsáhlého projektu HAMSTAD. Cílem tohoto projektu bylo stanovení základních materiálových parametrů u vybraných materiálů. Pro účely validace byl vybrán pórobeton a stanovení jeho součinitele vlhkostní vodivosti. Stanovení proběhlo pomocí experimentu jednorozměrné vodorovné nasákavosti. Poté, co byl součinitel stanoven, byl celý experiment simulován počítačovým programem TRANSMAT s implementovaným genetickým algoritmem, jehož cílem bylo nalézt tento parametr numerickou metodou.

Výsledky experimentu jsou prezentovány v závěru práce, kde je rovněž provedena diskuze nad získanými poznatky. V poslední kapitole je učiněno shrnutí dosud získaných poznatků a je zde naznačen další možný vývoj problematiky inverzní analýzy při řešení transportních jevů v materiálech.

2 Současný stav problematiky

2.1 Inverzní analýza

Řešení mnoha inženýrských problémů v dnešní době spočívá v aplikaci inverzní analýzy. Obecně lze říci, že cílem takové analýzy je zpětné určení neznámých vstupů na základě známých výstupů. V běžných inženýrských aplikacích je tedy cílem najít vstupní parametry reálného experimentu na základě jeho výsledků. Předpokladem je však existence věrohodného matematického modelu, který dokáže simulovat reálný experiment. Skutečným cílem je pak nalezení vstupních parametrů pro zvolený numerický model.

Existuje několik numerických modelů popisující transportní jevy v materiálech, konkrétně pak transport tepla a vlhkosti. V současné době je na Katedře materiálového inženýrství a chemie ČVUT v Praze v největší míře zastoupen model dle K. H. Künzela [8], který byl v minulosti již několikrát podroben verifikaci (např. [9] a [10]). Proto můžeme tento model považovat za dostatečně spolehlivý a využít jej v této práci.

Inverzní analýza má dva základní postupy řešení: dopředný a zpětný [18]. Dopředný postup (forward mode) je založen na definici chybové funkce v rozdílu odezvy modelu a výstupu z experimentu. Úlohou je pak minimalizace této funkce. V tomto případě se nejčastěji uplatňují evoluční algoritmy. Jelikož je většina současných modelů založena na náročných výpočtech pomocí metody konečných prvků, najdou zde uplatnění i algoritmy vhodné na aproximaci těchto modelů. Druhý postup, zpětný (inverse mode), předpokládá, že existuje inverzní vztah mezi výstupy a vstupy. Tento vztah je nejčastěji modelován umělými neuronovými sítěmi.

2.1.1 Dopředný postup inverzní analýzy

Jak již bylo naznačeno výše, problém inverzní analýzy lze formulovat na základě existence experimentu E , který, ať už fyzicky či virtuálně, na základě známých vstupních parametrů \mathbf{x}^E vrací požadované výstupy \mathbf{y}^E . Formálně lze tento vztah zapsat jako funkci experimentu E :

$$\mathbf{y}^E = E(\mathbf{x}^E) \quad (1)$$

Problém inverzní analýzy je pak definován jako hledání neznámých vstupních parametrů \mathbf{x}^E (tepelné či vlhkostní vlastnosti materiálu) z výstupních hodnot \mathbf{y}^E (teplotní či vlhkostní pole v materiálu). V praxi je pak experiment E nahrazen virtuálním modelem M , který je často reprezentován programem na bázi nějaké numerické metody, například metody konečných prvků. Virtuální model M obvykle nepopisuje reálný experiment E dokonale, přesto pro další práci předpokládáme, že model M je dostatečně přesný. Jinými slovy

$$M \approx E \quad (2)$$

$$\mathbf{y}^M = M(\mathbf{x}^M) \quad (3)$$

Tato aproximace má význam zejména z hlediska ekonomického, jelikož náklady na vyhodnocení modelu M jsou nesrovnatelně nižší k finanční náročnosti experimentu E .

Na základě výše uvedených podmínek je dopředný postup inverzní analýzy definován jako minimalizace chybové (objektivní) funkce $F(x)$ z rozdílu mezi výstupy z modelu \mathbf{y}^M a výstupy z experimentu \mathbf{y}^E , tj.

$$\min F(x) = \min \|\mathbf{y}^E - M(\mathbf{x}^M)\|. \quad (4)$$

Mezi hlavní výhody takto definovaného postupu oproti zpětnému postupu je jeho obecnost ve všech rovinách a schopnost vždy najít nějaké řešení, pokud takové existuje. Speciálními příklady dokazující toto tvrzení je užití dopředné metody v následujících případech:

- a) Pro více vstupů \mathbf{x} existují shodné výstupy \mathbf{y} , např. existence několika globálních optim. Tento příklad vede na multimodální optimalizaci [12], kterou lze řešit speciální úpravou algoritmu [19].
- b) Existují různé výstupy \mathbf{y} pro stejné vstupy \mathbf{x} . Příkladem jsou stochastické a pravděpodobnostní úlohy nebo experimenty zatížené šumem či experimentální chybou. Tento problém lze řešit zavedením stochastických parametrů pro vstup i výstup nebo úpravou chybové funkce, např. [13, 14, 15].
- c) Existuje více než jeden experiment E pro stejný materiál. Např. v případě dvou experimentů $\mathbf{y}^{E1} = E1(\mathbf{x}^E)$ a $\mathbf{y}^{E2} = E2(\mathbf{x}^E)$, lze chybovou funkci (4) sčítat přes \mathbf{y}^{E1} a \mathbf{y}^{E2} , nebo lze celý problém řešit jako vícekritériální optimalizační úlohu.

Optimalizace problému spočívá v nalezení globálního minima objektivní funkce. Nejznámějšími optimalizačními metodami jsou metody gradientní, které jsou schopny najít optimum pomocí derivace objektivní funkce. Vedle těchto metod existují také modernější metody, které se dají použít v případech, kdy gradientní metody selhávají. Příkladem mohou být například genetické algoritmy.

2.1.1.1 Gradientní metody

Gradientní metody (např. metoda největšího spádu, metoda konjugovaných gradientů apod.) jsou považovány za jedny z nejefektivnějších optimalizačních metod a jsou ideální pro řešení pomocí počítačových simulací. Tyto metody byly aplikovány např. v pracích [13, 14, 15]. Předpokladem je analytické určení objektivní funkce. Základní otázkou užití gradientních metod je nalezení první a vyšší derivace optimalizované funkce. Pokud je chybová funkce stanovená rozdílem mezi výstupy matematického modelu \mathbf{y}^M a výstupy z experimentu \mathbf{y}^E složitá, může být nalezení derivace velice náročné. Z tohoto důvodu by bylo využití gradientní metody nevhodné.

Adekvátní náhradou by mohla být optimalizace pomocí numerického gradientu, ovšem ten selhává v případech, kdy je optimalizovaná funkce:

- nespojitá
- nehladká
- po částech diskrétní
- má více lokálních extrémů

2.1.1.2 Genetické algoritmy

Genetické algoritmy patří do třídy tzv. evolučních algoritmů, které mimo ně zahrnují také evoluční strategie a genetické programování [16]. Jsou to optimalizační algoritmy založené na mechanismu přirozeného výběru a principech genetiky. Jejich velkou výhodou je poměrná jednoduchost. Ideovým vzorem pro genetické algoritmy byly principy vývoje, které se uplatňují v přírodě. Zde existují populace jednotlivých živočišných druhů, složených z jedinců různých vlastností. Tyto vlastnosti jsou prvotně zakódovány v jejich genech, které tvoří větší celky, chromozomy. Při křížení vznikají noví jedinci, kteří mají zpravidla náhodně část genů od jednoho rodiče a část genů od rodiče druhého. Přitom ve zvlášť výjimečném případě může dojít k náhodné změně některého genu v chromozomu, tzv. mutaci, která může

být pro další vývoj druhu příznivá nebo ne. Podle svých vlastností má každý z potomků větší nebo menší schopnost obstát v přirozeném výběru a vytvořit další generaci. Proces výběru se stále opakuje a v jeho průběhu se zlepšují genetické vlastnosti daného druhu. Tak probíhala celá evoluce v přírodě.

V teorii umělé inteligence je genetický algoritmus proces postupného vylepšování populace jedinců opakovanou aplikací genetických operátorů, který vede k evoluci takových jedinců, kteří lépe vyhovují stanoveným podmínkám než jedinci, ze kterých vznikli. Proces konverguje k situaci, kdy je populace tvořena jen těmi nejlepšími jedinci. Hlavním principem je kopírování a vyměňování řetězců – chromozomů. Chromozom má pevnou délku, jednotlivé pozice tvoří geny. Geny reprezentuje často binární 0 nebo 1, ale obecně mohou mít libovolnou hodnotu. Množina chromozomů tvoří populaci. Každý chromozom v populaci má definovanou hodnotící funkci, nazývanou fitness funkce, která charakterizuje kvalitu chromozomu.

Genetické algoritmy jsou jedním z nejmodernějších a nejoblíbenějších nástrojů k řešení optimalizačních úloh. Principy genetických algoritmů poprvé prezentoval Holland [1]. Další publikace, například díla Goldberga [2] či Michallewicze [3], se staly nejpopulárnějšími díly zabývající se tímto tématem. Genetické algoritmy byly úspěšně aplikovány k řešení optimalizačních problémů v kombinatorice [4], stejně tak jako při řešení různých inženýrských problémů, např. [5, 6, 23, 24].

V základním schématu jsou chromozomy zastoupeny binárními řetězci. Takový typ zastoupení je přímo ideální pro optimalizační úlohy na poli kombinatoriky (např. problém cestujícího obchodníka). Nicméně, v inženýrské a vědecké praxi se většinou setkáváme s parametry z oboru reálných čísel. Převod reálných parametrů na binární řetězce, obvyklý u standardních genetických algoritmů, však může způsobit vážné potíže. Výsledkem tohoto převodu je pak neuspokojivé chování genetického algoritmu, které je charakterizováno pomalou konvergencí k hledanému řešení a nedostatečnou přesností. Vývoj genetických algoritmů však přinesl několik možností, jak řešit problémy s optimalizací reálných hodnot pomocí binárních algoritmů.

Jiným řešením je použití genetického algoritmu (nebo jiného evolučního algoritmu), který pracuje přímo s reálnými hodnotami [3].

Zajímavé porovnání několika různých genetických algoritmů je provedeno v disertační práci Ing. Anny Kučerové, Ph.D. [18]. Zde je zřetelně ukázáno, že pro optimalizaci multimodálních spojitych problémů, které se týkají reálných domén, jsou mnohem vhodnější

algoritmy, pracující na bázi reálných čísel s diferenčními operátory, než tradiční binární algoritmy, dokonce i v případě, kdy jsou tyto algoritmy vylepšeny propracovanými metodami.

Jedním z genetických algoritmů je algoritmus **GRADE**, který byl použit pro identifikaci vstupních parametrů pro přenos tepla a vlhkosti. Tento algoritmus byl vyvinut na Katedře mechaniky, Fakulty stavební ČVUT v Praze a byl úspěšně aplikován při řešení několika inženýrských problémů. Jeho detailní popis spolu s aplikacemi je uveden v disertační práci Ing. Anny Kučerové, Ph.D. [18].

Jedná se o diferenční genetický algoritmus, pracující s různými genetickými operátory. Základní schéma algoritmu GRADE je velice podobné standardnímu genetickému algoritmu:

- 1) V prvním kroku je náhodně vygenerována počáteční populace a všem chromozomům v populaci je přiřazena hodnota objektivní funkce (fitness funkce). Velikost populace je definována jako počet proměnných, přenásobený jistým parametrem (*pop_rate*).
- 2) Za využití operátoru mutace (*mutation*) je vytvořeno několik nových chromozomů – celkový počet mutací záleží na hodnotě parametru *radioactivity*, který zvyšuje pravděpodobnost mutace.
- 3) Další nové chromozomy jsou vytvořeny užitím zjednodušeného diferenčního operátoru (*crossing-over*). Celkový počet chromozomů se tak zdvojnásobí.
- 4) Hodnota objektivní funkce je posléze přiřazena všem nově vzniklým chromozomům
- 5) Na dvojnásobnou populaci je aplikován operátor selekce, kterým se počet jednotlivců sníží na původní hodnotu.
- 6) Kroky 2 – 5 jsou opakovány ve smyčce, dokud není splněna podmínka pro ukončení algoritmu.

Detailní popis operátorů je proveden níže. Nechť $x_i(g)$ je i -tý chromozom v generaci g ,

$$x_i(g) = (x_{i1}(g), x_{i2}(g), \dots, x_{in}(g)), \quad (5)$$

kde n je počet proměnných objektivní funkce. Nyní můžeme genetické operátory popsat následovně:

mutation – pokud byl k mutaci vybrán určitý chromozom $x_i(g)$, je nejprve vytvořen náhodný chromozom x_{RP} a poté je vytvořen nový chromozom $x_k(g + 1)$ na základě vztahu:

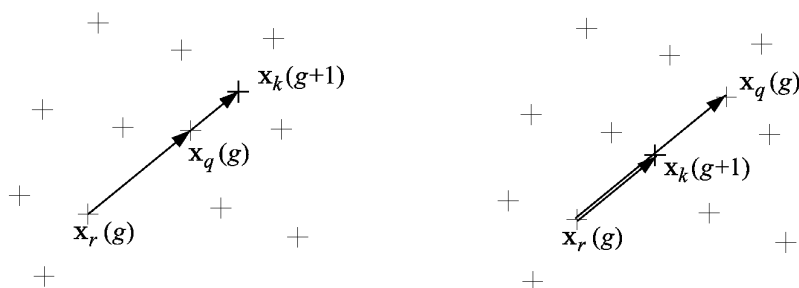
$$x_k(g + 1) = (x_i(g) + MR(x_{RP} - x_i(g))), \quad (6)$$

kde MR je konstanta náhodně zvolená v intervalu $\langle 0, 1 \rangle$,

crossing-over – namísto tradičního *cross-over* operátoru, metoda GRADE využívá zjednodušený diferenciální operátor převzatý z diferenciální evoluce, který lze zapsat jako

$$x_k(g+1) = \max(x_q(g); x_r(g)) + CR(x_q(g) - x_r(g)). \quad (7)$$

Pouze dva chromozomy $x_q(g)$ a $x_r(g)$ jsou náhodně vybrány z celkové populace. Vektor jejich rozdílu je redukován parametrem CR a je přidán pouze k „lepšímu“ z chromozomů. Geometrický význam tohoto operátoru je na *obr. 1*.



Obr. 1: Geometrický význam operátoru crossing-over

selection – tato metoda je obdobou vyřazovací metody play-off k redukci počtu chromozomů. Dva náhodně vybrané chromozomy jsou porovnány a horší je vyřazen. Tímto se populace sníží o jeden chromozom. Tento cyklus je opakován, dokud stav populace neklesne na původní počet.

Detailní popis GRADE, vč. dokumentace a zdrojových kódů v jazyce C/C++ je možné stáhnout z webové stránky [21].

Důležitou výhodou algoritmu GRADE je také skutečnost, že algoritmus používá pouze tři parametry: *pop_rate*, *radioactivity* a CR . Parametr *pop_rate* byl ve všech předchozích simulacích nastaven na hodnotu 10, jelikož tato hodnota byla mnohokrát prověřena jako dostačující. Výsledky testování parametrů CR a *radioactivity* jsou prezentovány v [18], kapitola 4.1.2. Na základě této studie byly parametry pro řešení optimalizačních problémů stanoveny následovně:

Tab. 1: Nastavení algoritmu GRADE

Parametr	Hodnota
<i>pop_rate</i>	10
<i>CR</i>	1.0
<i>radioactivity</i>	0.2

2.1.2 Zpětný postup inverzní analýzy

Druhá metoda, tzv. zpětný postup, předpokládá existenci inverzního vztahu mezi vstupy a výstupy, tj. existuje takový inverzní model M^{INV} vycházející z modelu M , který splňuje následující podmínku

$$\mathbf{x} = M^{INV}(\mathbf{y}) \quad (8)$$

pro všechna možná \mathbf{y} . V podstatě tento model ani nemusí existovat, přesto však předpokládáme, že je možné nalézt jeho aproximaci s dostatečnou přesností na uzavřené části studované oblasti. Zabývejme se dále aproximací inverzního vztahu, nikoliv jeho popisem. Přesnost této aproximace lze ověřit snadno, jelikož dvojice \mathbf{x} , \mathbf{y} , získaná z rovnice (8), by měla splňovat rovnici (3). Konečné použití této metody je jednoduché, protože požadované hodnoty \mathbf{x}^M , získáme prostým dosazením \mathbf{y}^E do rovnice (8). Příklady použití zpětné metody jsou uvedeny v článku [20] nebo [28].

2.2 Inverzní analýza přenosu tepla a vlhkosti

Je dána rovnice jednorozměrného vedení tepla

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) \quad (9)$$

či jednorozměrného vedení vlhkosti

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial u}{\partial x} \right). \quad (10)$$

kde ρ [kg/m³] je objemová hmotnost, c_p [J/kgK] měrná tepelná kapacita, λ [W/mK] součinitel tepelné vodivosti, κ [m²/s] součinitel vlhkostní vodivosti a u [kg/kg] je vlhkost materiálu.

Předpokládejme, že na základě měření známe teplotní pole $T(x, t)$, resp. vlhkostní pole $u(x, t)$ a známe i počáteční a okrajové podmínky, za nichž transport tepla, resp. vlhkosti probíhal (v případě transportu tepla je třeba dále znát funkce $\rho(T)$ a $c_p(T)$). Řešení inverzní úlohy nyní spočívá v nalezení hodnoty λ , resp. κ , a jelikož obecně platí, že $\lambda \neq konst.$, $\kappa \neq konst.$, hledáme funkce $\lambda(T)$, resp. $\kappa(u)$.

Z formálního zápisu (9) a (10) je patrná podobnost obou rovnic a proto se můžeme dále omezit pouze na jednu z rovnic s tím, že vše, co bude o této rovnici řečeno, lze použít i pro rovnici druhou. V této práci se zaměříme na rovnici vedení vlhkosti.

Řešení inverzních úloh je obecně podstatně složitější než řešení vlastních diferenciálních rovnic, protože i u poměrně jednoduchých úloh řešení často buď neexistuje nebo v případě existence není jednoznačné. Proto se obvykle přistupuje k tzv. fyzikálnímu řešení, tj. je zvolen dostatečně jednoduchý problém, který je řešen za jistých doplňujících podmínek.

Součinitel vlhkostní vodivosti κ je transportní parametr, charakterizující přenos kapalné vlhkosti u v porézní látce. Jednorozměrnou difúzní rovnici pro přenos kapalné vlhkosti s ohledem na funkční závislost parametru κ je možno napsat ve tvaru

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad (11)$$

$$u = \frac{m_v - m_s}{m_s}, \quad (12)$$

kde m_v [kg] je hmotnost vlhkého a m_s [kg] je hmotnost suchého vzorku.

Součinitel vlhkostní vodivosti κ se stanovuje řešením inverzního problému, který je aplikován na jednoduchém laboratorním experimentu. Experiment se obvykle provádí na dlouhém hranolu, jehož jeden rozměr je výrazně delší než ostatní dva. Na jednom konci je hranol v kontaktu s vodní hladinou, druhý konec je vystaven působení vzduchu o stejné relativní vlhkosti, jaká je v pórech na počátku experimentu (*obr. 2*).



Obr. 2: Schéma experimentu pro stanovení součinitele vlhkostní vodivosti

Princip experimentu spočívá v určení vlhkostních profilů, jinými slovy, určí se rozložení vlhkosti $u(x,t)$ po délce vzorku v daných časech, nejčastěji kapacitní metodou. Z těchto profilů je na základě několika různých metod inverzními vztahy stanoven součinitel vlhkostní vodivosti κ .

Všechny přímé metody určování součinitele vlhkostní vodivosti, a to jak stacionární, tak i nestacionární, využívají jednorozměrné difúzní rovnice, proto je nutné, aby bylo zabráněno odpařování vody z bočních stran hranolu. To je zajištěno vodotěsnou a parotěsnou izolací vzorku po všech stranách s výjimkou čel.

Pro většinu materiálů jsou vhodné nestacionární metody určování součinitele vlhkostní vodivosti κ . Použití stacionárních metod je značně omezené jednak jejich časovou náročností a jednak principiální nepoužitelností v případě, že stacionární stav je totožný s homogenním provlhnutím vzorku. Nejvhodnějšími nestacionárními metodami pro určení součinitele vlhkostní vodivosti κ jsou Matanova metoda, gradientní metoda, diferenční metoda či dvojná integrační metoda. Všechny tyto metody jsou stručně představeny v článku [7]. Všechny níže

uvedené metody se z hlediska rozdělení inverzních metod (kap. 2.1) řadí mezi metody zpětného postupu inverzní analýzy (kap. 2.1.2).

2.2.1 Jednokřivkové metody

Metody jednokřivkové používají pro výpočet $\kappa(u)$ jen jednu křivku $u(x)$ nebo $u(t)$. Řeší se úloha (10) s okrajovou podmínkou

$$u(0, t) = u_1 = \text{konst.} \quad (13)$$

a okrajovou podmínkou

$$u(x, 0) = u_2 = \text{konst.} \quad (14)$$

V praxi to může znamenat např. experiment na obr. 2. Při řešení inverzní úlohy (10), (13) a (14) se využívá Boltzmannovy transformace

$$\eta = \frac{x}{2\sqrt{t}} \quad (15)$$

$$\omega(\eta) = u(x, t). \quad (16)$$

Dosazením (15) a (16) do (10), (13) a (14), pak vzhledem k tomu, že platí

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{du}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{du}{d\eta} \frac{1}{2\sqrt{t}} \quad (17)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{du}{d\eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{du}{d\eta} \cdot \left(-\frac{x}{4t\sqrt{t}} \right) = \frac{du}{d\eta} \cdot \left(-\frac{\eta}{2t} \right) \quad (18)$$

dostáváme

$$\frac{d}{d\eta} \left(\kappa \frac{d\omega}{d\eta} \right) + 2\eta \frac{d\omega}{d\eta} = 0 \quad (19)$$

$$\omega(0) = u_1 \quad (20)$$

$$\omega(+\infty) = u_2. \quad (21)$$

Touto transformací se podařilo převést parciální diferenciální rovnici na obyčejnou a tím pádem do značné míry zjednodušit hledané řešení. Za předpokladu, že pro čas $t_0 = \text{konst.}$ známe $u(x, t_0)$, můžeme zavést novou transformaci

$$z = \eta \cdot 2\sqrt{t_0} \quad (22)$$

$$u(z) = \omega(\eta) \quad (23)$$

a získáme

$$\frac{d}{dz} \left(\kappa \frac{du}{dz} \right) + \frac{z}{2t_0} \frac{du}{dz} = 0 \quad (24)$$

$$u(0) = u_1 \quad (25)$$

$$u(+\infty) = u_2. \quad (26)$$

Rovnice (24) představuje obyčejnou diferenciální rovnici prvního řádu a lze jí řešit například použitím některé z numerických metod, např. metody konečných prvků.

Jednokřivkové metody jsou výhodné zejména pro svou jednoduchost. Mají však jedno základní úskalí, předpokládají totiž automodelnost jevu, v případě transportu vlhkosti tedy platnost zákona \sqrt{t} , tj. po provedení transformace (15) bychom měli dostat jednu křivku $u(\eta)$. Toto ovšem neplatí v praxi zcela vždy. Všeobecně lze konstatovat, že \sqrt{t} zákon je možné použít pro relativně krátké časové intervaly po začátku působení vlhkostního zdroje, kdy je ještě proces dostatečně vzdálen stacionárnímu stavu, ale ne zas tak krátké, že by ještě s dostatečnou přesností platila podmínka (13).

Příkladem jednokřivkových metod inverzního stanovení součinitele κ je **Matanova metoda**. Tato metoda patří mezi nejpoužívanější metody nestacionárního určení součinitele vlhkostní vodivosti [25]. Ke stanovení součinitele κ je třeba znát jednu křivku navlhání a času od počátku experimentu. Tato křivka je získána z vlhkostních profilů pomocí Boltzmannovy transformace. Známe-li rozložení vlhkosti v daném profilu $u(x)$ v jistém čase t , pak je možné vypočítat součinitel vlhkostní vodivosti k na základě vztahu

$$\kappa(u(x)) = \frac{1}{2tu'(x)} \int_x^\infty \xi u'(\xi) d\xi, \quad (27)$$

kde $u'(x)$ je derivace obsahu vlhkosti podle osy x .

2.2.2 Vícekřivkové metody

Jednou z vícekřivkových metod je **gradientní metoda**. Tato metoda, prezentovaná v r. 1984 [26], je založena na výpočtu hustoty vlhkostního toku při znalosti dvou vlhkostních profilů v různých časech $t_1 < t_2$: $u(x, t_1)$, $u(x, t_2)$ a aplikování Fickova zákona pro jednorozměrný problém. Součinitel vlhkostní vodivosti odpovídající obsahu vlhkosti u_0 je posléze stanoven na základě vztahu

$$\kappa(u_0) = \frac{2 \int_{x_0}^{\infty} (u(x, t_2) - u(x, t_1)) dx}{(t_1 - t_2) \left(\frac{\partial u(x_0, t_2)}{\partial x} + \frac{\partial u(x_0, t_1)}{\partial x} \right)}, \quad (28)$$

$$\text{kde } u_0 = \frac{(u(x_0, t_2) + u(x_0, t_1))}{2}. \quad (29)$$

Při konkrétním řešení je pro přesnost metody velmi důležité, jak blízké budou časy t_1 a t_2 . Pokud jsou příliš vzdálené, trpí tím přesnost výpočtu $\frac{\delta u}{\delta x}$ i u , pokud jsou naopak příliš blízké, nemusí být přesnost výpočtu vlhkostního toku vyhovující. Obecně lze říci, že optimálních výsledků je dosaženo tehdy, pokud se $u(x, t_2)$ a $u(x, t_1)$ liší přibližně o 10 %.

Jinou dvoukřivkovou metodou je např. **diferenční metoda**. Tato metoda z r. 1997 byla původně vyvinuta pro určení tepelné vodivosti [27]. Použitím podobného přístupu ke stanovení součinitele vlhkostní vodivosti κ dostaneme

$$\kappa \left(x - \frac{\Delta x}{2}, t + \frac{\Delta t}{2} \right) = \kappa \left(x + \frac{\Delta x}{2}, t + \frac{\Delta t}{2} \right) \frac{A}{C} - \frac{B}{C} \quad (30)$$

kde

$$\begin{aligned} A &= u(x + \Delta x, t) - u(x, t) + u(x + \Delta x, t + \Delta t) - u(x, t + \Delta t) \\ B &= \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} (u(x, t + \Delta t) - u(x, t)) \\ C &= u(x, t) - u(x - \Delta x, t) + u(x, t + \Delta t) - u(x - \Delta x, t + \Delta t) \end{aligned} \quad (31)$$

a Δx je délkový interval, Δt časový interval. Rovnice (30) je rekurzivní vztah pro sestavení součinitele vlhkostní vodivosti v závislosti na vlhkosti. Aby mohl být aplikován, je třeba znát jednu hodnotu tohoto součinitele, např. pro $u \rightarrow 0$ (suchý stav).

Dvojná integrační metoda, popsaná v článkách [28, 29], používá ke stanovení součinitele vlhkostní vodivosti několik vlhkostních profilů. Výsledný vzorec je následující:

$$\kappa(v) = \frac{\int_0^{x_0(v,\tau)} d\xi u(\xi, \tau) - \int_0^{x_0(v,0)} d\xi u(\xi, 0) - v[x_0(v, \tau) - x_0(v, 0)] - Q(\tau)}{\int_0^\tau dt \frac{\partial u(x_0(v, \tau)\tau)}{\partial x}} \quad (32)$$

kde v je zvolená konstantní hodnota obsahu vlhkosti,

$$Q(\tau) = \int_0^l dx (u(x, \tau) - u_2) \quad (33)$$

l je délka vzorku a u_2 je počáteční vlhkost.

3 Cíle práce

Hlavním cílem této magisterské práce je nalezení vstupních parametrů materiálového modelu pomocí inverzní analýzy. Ke splnění tohoto cíle jsou formulovány následující dílčí cíle:

- analyzovat problematiku využití inverzní analýzy při řešení transportních procesů v materiálech a na základě této analýzy zvolit vhodnou metodu řešení
- implementovat zvolený způsob inverzní analýzy (inverzní analýza pomocí genetického algoritmu) do stávajících výpočetních nástrojů
- verifikovat zvolenou metodu řešení, tj. sestavit takový teoretický experiment, který jednoznačně prokáže funkčnost genetického algoritmu a odhalí případné nedostatky
- validovat zvolenou metodu řešení, tj. aplikovat tuto metodu na reálném experimentu

4 Výběr metody pro řešení inverzního problému

Na základě problematiky prezentované v kapitole 2 můžeme při řešení inverzního problému volit mezi dvěma základními metodami, a sice dopředným postupem inverzní analýzy (forward mode) nebo zpětným postupem inverzní analýzy (inverse mode). Výhody a nevýhody těchto metod jsou uvedeny v kapitole 2. Pojdme se nyní zaměřit na výběr metody, vhodné pro identifikaci součinitele vlhkostní vodivosti κ na základě známých vlhkostních profilů.

Dopředný postup inverzní analýzy je založen na minimalizaci objektivní (chybové) funkce, což je v tomto případě rozdíl mezi výstupy matematického modelu \mathbf{y}^M a výstupy z experimentu \mathbf{y}^E (viz rovnice (4)). Tato minimalizace pak vede na optimalizační problém. Jelikož jsou k výpočtům použity moderní počítače, je stanovení jednoho výstupu otázkou několika vteřin. Stanovení celé chybové funkce čítající několik tisíc výstupů je pak otázkou několika hodin. Dalším významným argumentem pro použití dopředného postupu je přímé zapojení matematického modelu. Pokud bychom tedy tímto způsobem našli vhodnou aproximaci součinitele vlhkostní vodivosti κ , která nemusí být nutně totožná s laboratorně naměřeným součinitelem, můžeme si být jisti, že lze tuto aproximaci použít i v dalších počítačových simulacích, jelikož rozhodujícím kritériem je přesnost výstupů.

Zpětný postup inverzní analýzy má také jednu velkou výhodu, a to v případě, že se podaří nalézt inverzní model M^{INV} . Pokud je nalezen inverzní vztah, je poté určení požadovaných vstupů otázkou vteřin. Několik inverzních vztahů je představeno v kapitole 2.2.1 a 2.2.2. Tyto vztahy mají bohužel nevýhodu v tom, že jsou odvozeny pro zjednodušené fyzikální experimenty, u kterých je předpokládána stacionární okrajová podmínka. Proto se často používají pro laboratorní experimenty, ve kterých je simulováno navlhání s konstantním zdrojem vlhkosti. Pokud je okrajová podmínka proměnlivá, nelze tyto vztahy aplikovat a je třeba nalézt jiné řešení.

Jelikož je snahou nalézt univerzální metodu stanovení součinitele vlhkostní vodivosti, kterou bude možné aplikovat na všechny případy navlhání či vysychání, nebo jejich vzájemnou kombinaci (např. při simulaci obvodových plášťů budov v reálných klimatických podmínkách apod.), je ideální dopředný postup zpětné analýzy, jelikož tento postup může být snadno aplikován na počítačové simulace transportních jevů ve stavebních materiálech.

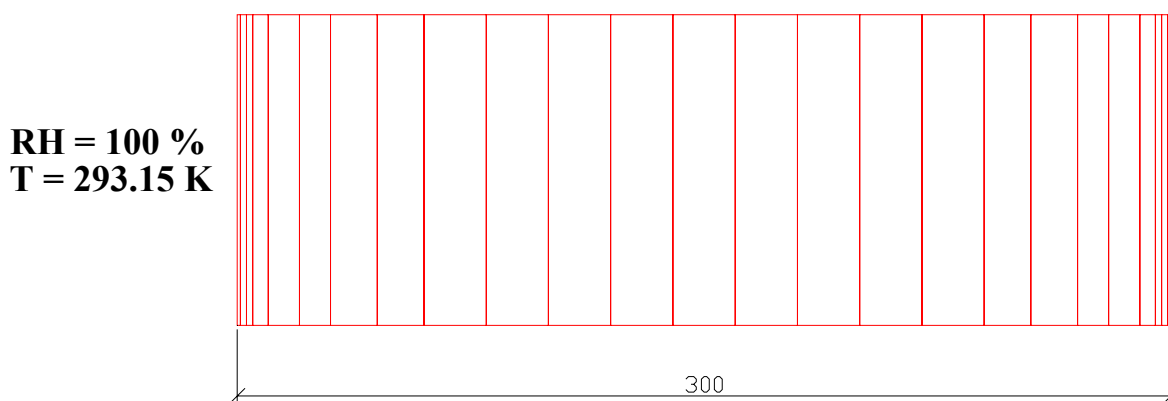
5 Aplikace genetického algoritmu na teoretickém experimentu

5.1 Popis experimentu

Pro účely ověření funkčnosti a schopnosti genetického algoritmu najít hledané řešení byl zvolen jednoduchý teoretický experiment. Jednalo se o jednorozměrný transport kapalné vlhkosti napříč tyčovým prvkem, který byl sestaven tak, aby se co nejvíce projevil součinitel vlhkostní vodivosti (κ [m²/s]). Prakticky stejný experiment v reálném měřítku se používá v laboratořích Katedry materiálového inženýrství a chemie při stanovení tohoto součinitele. V tomto případě, byl však tento experiment přenesen do teoretické roviny a namodelován pomocí matematického modelu. Dílčí cíle tohoto teoretického experimentu byly následující:

- stanovit referenční podélné profily ve vybraných časech,
- sestavení objektivní funkce, která bude optimalizována,
- ověřit funkčnost genetického algoritmu,
- zjistit odezvu genetického algoritmu (rychlost konvergence a doba výpočtu).

Základem experimentu byl cihlový jednorozměrný tyčový prvek délky 300 mm, který byl z jedné strany vystaven stálému zdroji vlhkosti. Tento zdroj byl definován pomocí Dirichletovy okrajové podmínky s hodnotou 100 % relativní vlhkosti a 293.15 K (20 °C) a simuloval tak kontakt s volnou hladinou vody (viz *obr. 3*). Na počátku simulace byla relativní vlhkost cihly 10 % a teplota 293.15 K.



Obr. 3: Schéma experimentu

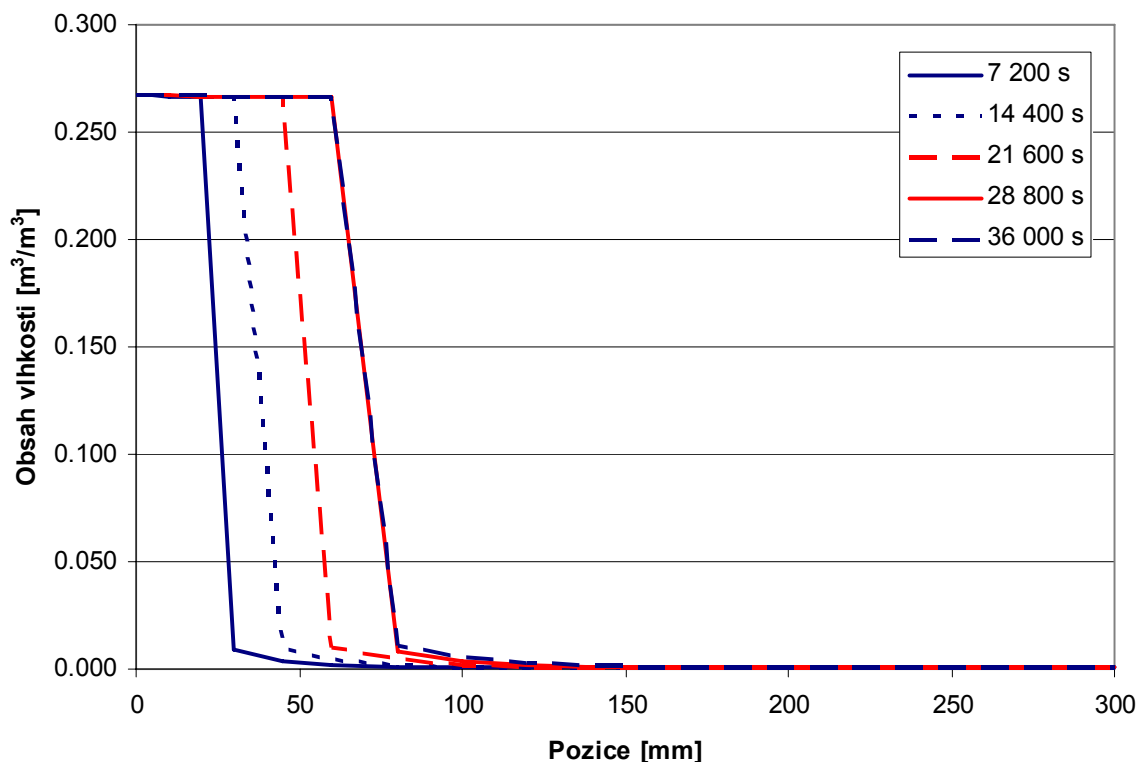
Základní materiálové parametry cihly jsou uvedeny v *tab. 2*. Zde jsou uvedeny tyto hodnoty: ρ – objemová hmotnost [kg/m^3], c – měrná tepelná kapacita [J/kgK], μ – faktor difúzního odporu vodní páry [-], θ_{sat} – saturovaný obsah vlhkosti [m^3/m^3], θ_{hyg} – hygroskopický obsah vlhkosti [m^3/m^3], κ - součinitel vlhkostní vodivosti [m^2/s].

Tab. 2: Základní materiálové parametry cihly

ρ	c	μ	θ_{sat}	θ_{hyg}	κ
1746	893.7	22.5	0.33	0.015	$4 \cdot 10^{-8} \cdot e^{14,689\theta}$

Výstupem z experimentu bylo několik podélných časových profilů $y^{E,v}$, které byly vzaty jako referenční a sloužily jako srovnávací křivky při hledání součinitele vlhkostní vodivosti pomocí genetického algoritmu.

Délka simulace byla stanovena na 10 hodin (36 000 s) s ohledem na rychlost šíření vlhkostní vlny. Výstupy byly zvoleny v pěti různých časech, a to 2 hodiny (7 200 s), 4 hodiny (14 400 s), 6 hodin (21 600 s), 8 hodin (28 800 s) a 10 hodin (36 000 s). Vlhkostní profily v těchto časech jsou znázorněny na *obr. 4*.

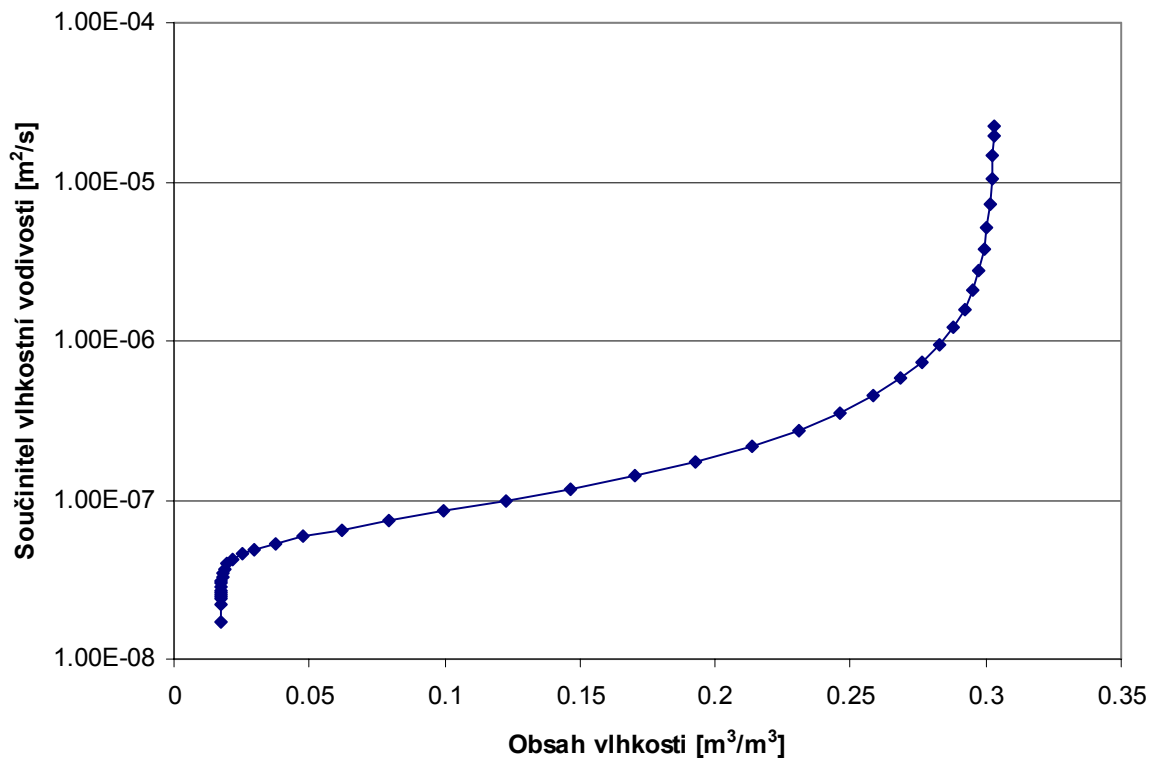


Obr. 4: Referenční podélné profily ve vybraných časech

5.2 Optimalizované veličiny

Experiment popsáný v kapitole 5.1 byl sestaven tak, aby v co největší míře vystihnul vliv součinitele vlhkostní vodivosti κ . Ačkoliv bylo možné optimalizovat libovolný materiálový parametr, nebyl parametr κ vybrán náhodně. V praxi se totiž tento parametr měří celkem obtížně s velkými nepřesnostmi, které později ve výpočtech hrají značnou roli. Parametr κ byl zvolen rovněž proto, že bude předmětem optimalizace v dalším experimentu popsáném v kapitole 6.

Součinitel vlhkostní vodivosti je veličina, která je závislá na vlhkosti materiálu. Obecně platí, že se vzrůstající vlhkostí materiálu stoupá hodnota tohoto součinitele. Tato závislost však není čistě lineární a nelze ji popsat jednoduchým vztahem. Typický průběh závislosti tohoto parametru na vlhkosti je zobrazen na obr. 5. Jedná se o součinitel vlhkostní vodivosti sádry.



Obr. 5: Součinitel vlhkostní vodivosti sádky

Složitost této křivky se projevuje zejména při vysokých vlhkostech, kdy se derivace součinitele prudce zvyšuje. Nárůst součinitele při nízkých vlhkostech je dán chybou měření a při výpočtech se tato část křivky zanedbává. V praxi, pokud nejsou dostupné výsledky měření, se často nahrazuje křivka vlhkostní vodivosti jednoduchým empirickým vztahem

$$y = A \times e^{B \times x}, \quad (34)$$

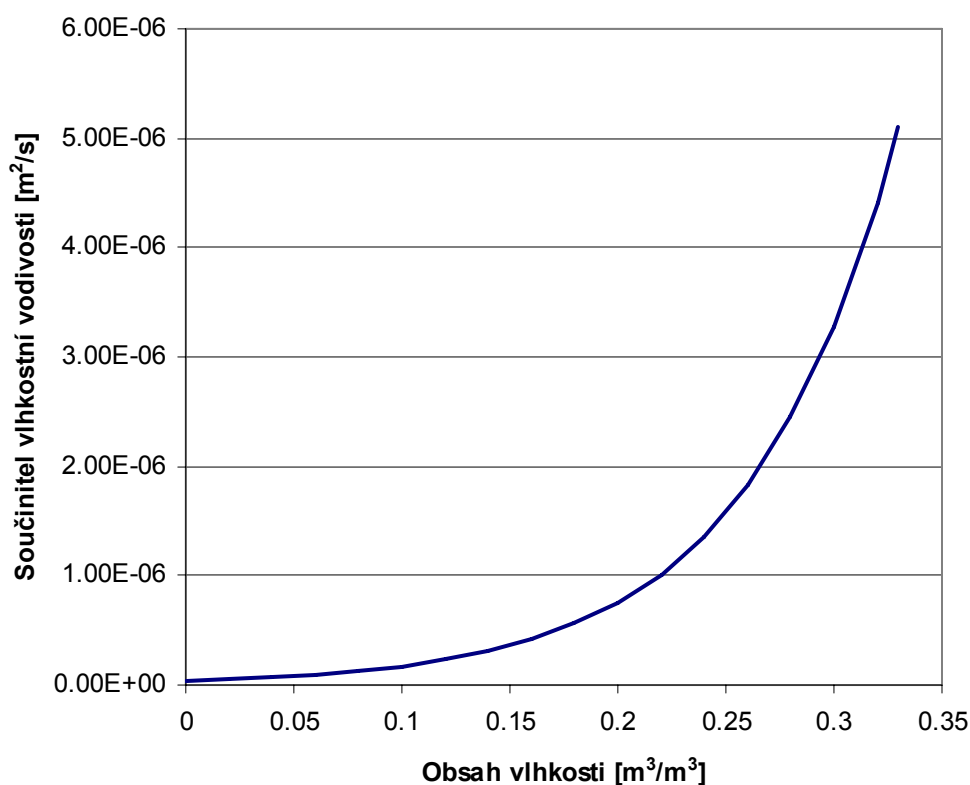
kde A a B jsou konstantní parametry. Proměnná y představuje součinitel vlhkostní vodivosti κ , proměnná x reprezentuje obsah vlhkosti θ . Po dosazení do (34) dostáváme tento vztah

$$\kappa = A \times e^{B \times \theta}. \quad (35)$$

Je nesporné, že rovnice (35) je výhodná z hlediska časové náročnosti pro výpočet, jelikož v ní vystupují pouze dva neznámé parametry, které se snažíme identifikovat. Otázkou však zůstává, do jaké míry je tento vztah schopen nahradit skutečné průběhy součinitelů vlhkostní vodivosti u reálných stavebních materiálů. Pro účely ověření funkčnosti je však tento předpis ideální, jelikož se snažíme identifikovat pouze dva parametry, čímž se zvyšuje rychlost konvergence genetického algoritmu. Referenční hodnoty byly zvoleny následovně

$$A = 4 \cdot 10^{-8} \quad B = 14.689$$

Součinitel vlhkostní vodivosti má potom podobu, viz *obr. 6*.



Obr. 6: Referenční součinitel vlhkostní vodivosti cihly

5.3 Stanovení objektivní funkce

Chybová funkce (v tomto případě totožná s objektivní funkcí) je definována jako závislost mezi vstupními parametry a odchylkou výstupních parametrů $\mathbf{y}^{M,v}$ virtuálního modelu od referenčního stavu $\mathbf{y}^{E,v}$. Tato funkce by měla být prvním krokem před jakoukoliv optimalizací, jelikož na základě této funkce lze vhodně a efektivně zvolit optimalizační metodu a odhadnout chování a odezvu modelu. V tomto případě byly vstupními hodnotami

parametry A a B , vyjadřující průběh exponenciály pro vlhkostní vodivost. Výstupem byla suma čtverců odchylek všech výstupů v podélných profilech od referenčního stavu (viz *obr. 4*). Tento vztah lze zapsat rovnicí

$$f_c(A, B) = (\mathbf{y}^{E,v} - \mathbf{y}^{M,v}(A, B))^2. \quad (36)$$

Jednotlivé vlhkostní profily $\mathbf{y}^{E,v}$ a $\mathbf{y}^{M,v}$ lze zapsat jako vektory, jejichž složky odpovídají jednotlivým hodnotám obsahu vlhkosti v podélném vlhkostním profilu

$$\begin{aligned} \mathbf{y}^{E,v} &= (w_1^{E,v}, w_2^{E,v}, w_3^{E,v}, \dots, w_n^{E,v}) \\ \mathbf{y}^{M,v} &= (w_1^{M,v}(A, B), w_2^{M,v}(A, B), w_3^{M,v}(A, B), \dots, w_n^{M,v}(A, B)) \end{aligned} \quad (37)$$

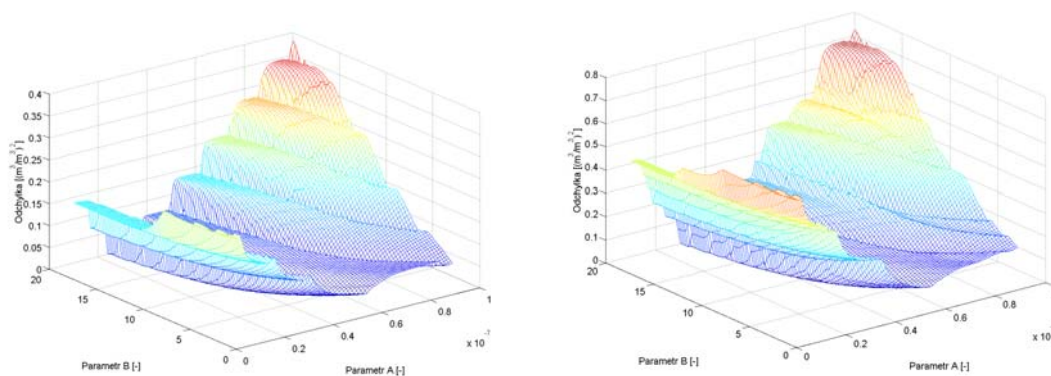
kde n je počet výstupů v jednom profilu. Výstupy $\mathbf{y}^{M,v}$ jsou závislé na parametrech A a B , proto jsou v rovnici zapsány jako jejich funkce. Dosazením (37) do (36) získáme rovnici pro stanovení hodnoty chybové funkce přes všechny výstupy ve všech podélných profilech

$$f_c(A, B) = \sum_1^m \sum_1^n \left((w_{m,n}^{E,v} - y_{m,n}^{M,v}(A, B))^2 \right), \quad (38)$$

kde n je počet výstupů ve vlhkostním profilu a m je číslo vlhkostního profilu.

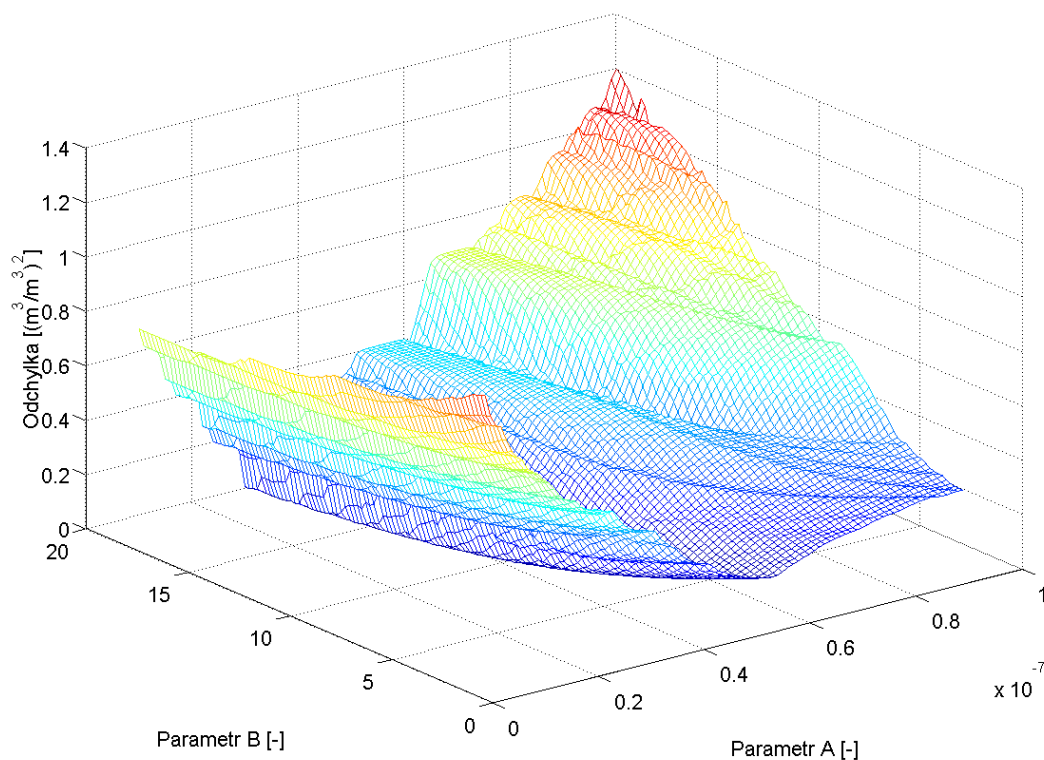
Základní otázkou při stanovení chybové funkce byl způsob vyhodnocení odchylky. Jako nejvhodnější se jeví použití čtverců odchylek, otázkou ale bylo, zda porovnávat výstupy pouze v jednom nebo ve více časových profilech zároveň.

K vynesení objektivní funkce bylo zapotřebí provést přibližně 10 000 počítačových simulací s rozdílnými vstupními parametry A a B při definici součinitele vlhkostní vodivosti. Rozsah parametru A byl volen od $1 \cdot 10^{-8}$ do $1 \cdot 10^{-7}$, parametr B byl testován v rozsahu 2 až 20. Na *obr. 7a* je vynesena chybová funkce vyhodnocená porovnáním výstupů v jednom vlhkostním profilu, sestaveném pro čas $t = 36\,000$ s. *Obr. 7b* znázorňuje chybovou funkci sestavenou pro vlhkostní profily ve třech různých časech ($t_1 = 7\,200$ s, $t_2 = 21\,600$ s a $t_3 = 36\,000$ s).



Obr. 7: Chybová funkce pro výstup v jednom čase (7a) a ve třech časech (7b)

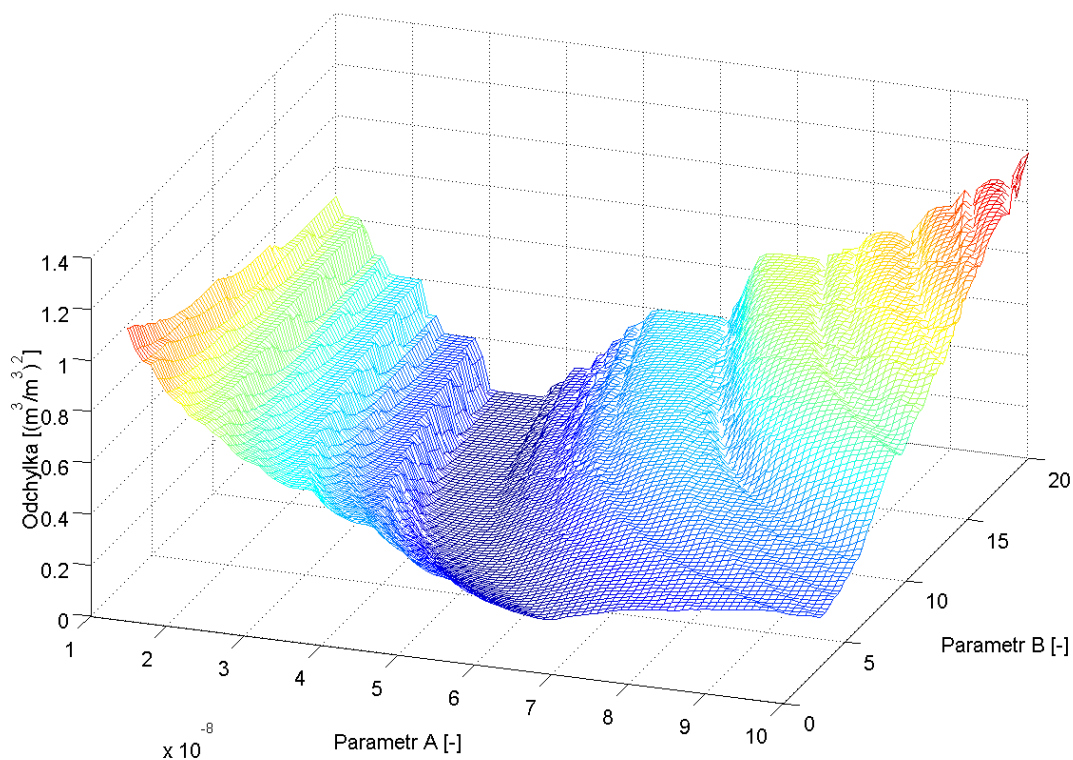
V další fázi bylo provedeno vyhodnocení chybové funkce pro pět různých časových profilů ($t_1 = 7\,200$ s, $t_2 = 14\,400$ s, $t_3 = 21\,600$ s, $t_4 = 28\,800$ s a $t_5 = 36\,000$ s). Získaná chybová funkce je zobrazena na obr. 8.



Obr. 8: Chybová funkce pro výstupy v pěti časech (vlevo)

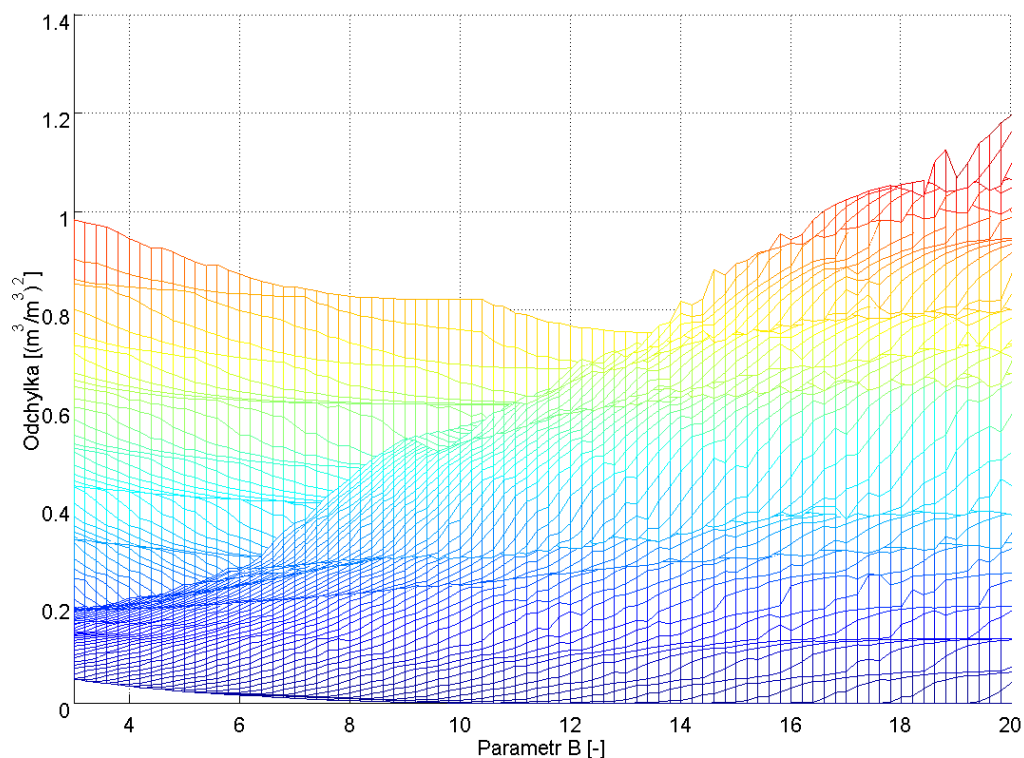
Tvary všech tří funkcí na *obr. 7a*, *7b* a *8* jsou velmi podobné, mění se pouze rozsah na ose Z (celková odchylka). Při důkladném pohledu na *obr. 7* až *8* je však patrná jedna věc. Ačkoliv všechny tři grafy mají stejný směr a orientaci hlavního „údolí“ (valley), od *obr. 7b* postupně mizí lokální údolí. Z hlediska přesnosti se jako nejvhodnější jeví graf na *obr. 8*, jelikož je nejhladší ze všech tří použitých metod vyhodnocení. Tato hladkost je dána počtem výstupů, kterou jsou do výpočtu chybové funkce zahrnuty. Nebude-li uvedeno jinak, bude v dalších částech uvažována chybová funkce z *obr. 8* jako výchozí funkce pro optimalizaci.

Na *obr. 9* je zobrazena chybová funkce při pohledu ve směru hlavního údolí. Směr údolí napovídá, jak jsou jednotlivé parametry citlivé na přesnost, resp. jaká je odezva jejich změny.



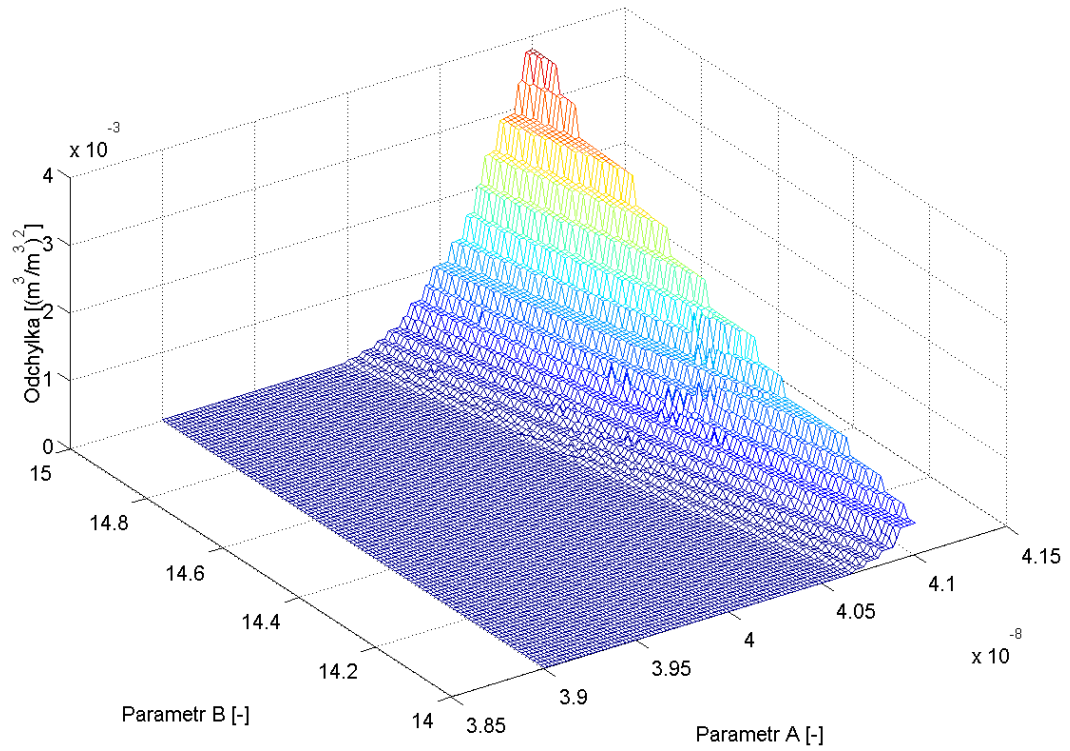
Obr. 9: Pohled na chybovou funkci ve směru hlavního údolí

Je zřejmé, že parametr *A* je výrazně citlivější než parametr *B*. Uvážíme-li, že hledané optimum funkce (místo s nejmenší funkční hodnotou) má souřadnice $4 \cdot 10^{-8}$ a 14.689, je patrné, že drobná změna parametru *B* nezvýší hodnotu chybové funkce tak výrazně, jako by tomu bylo u parametru *A*.

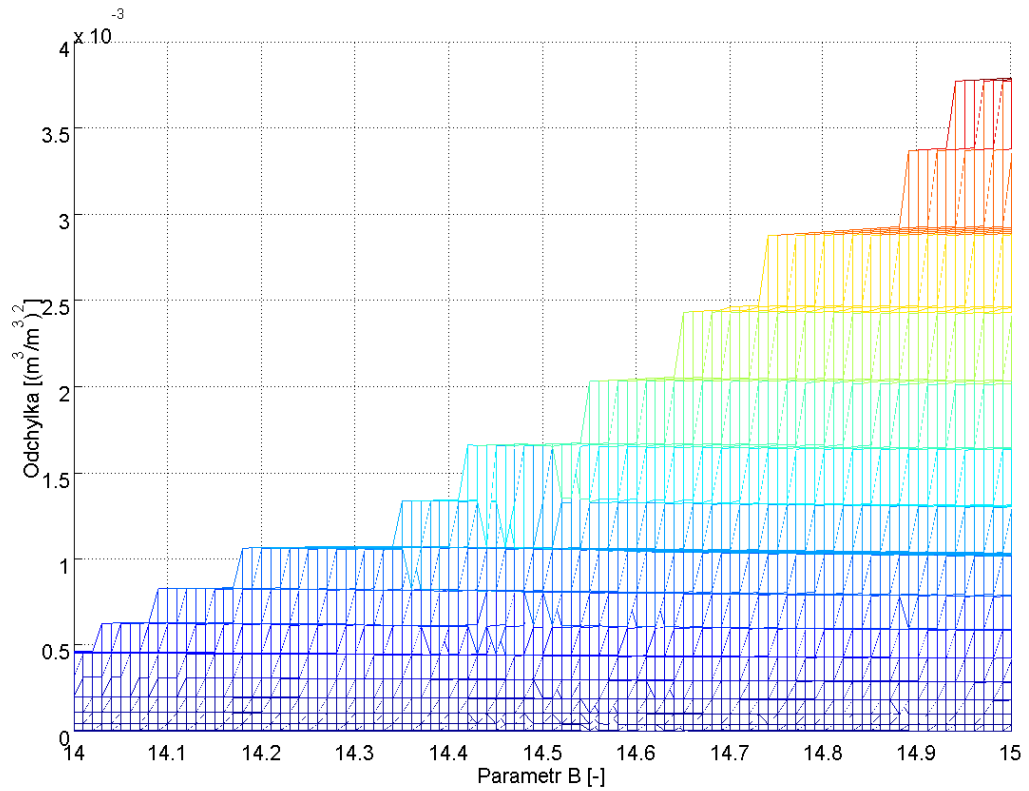


Obr. 10: Pohled na chybovou funkci z profilu

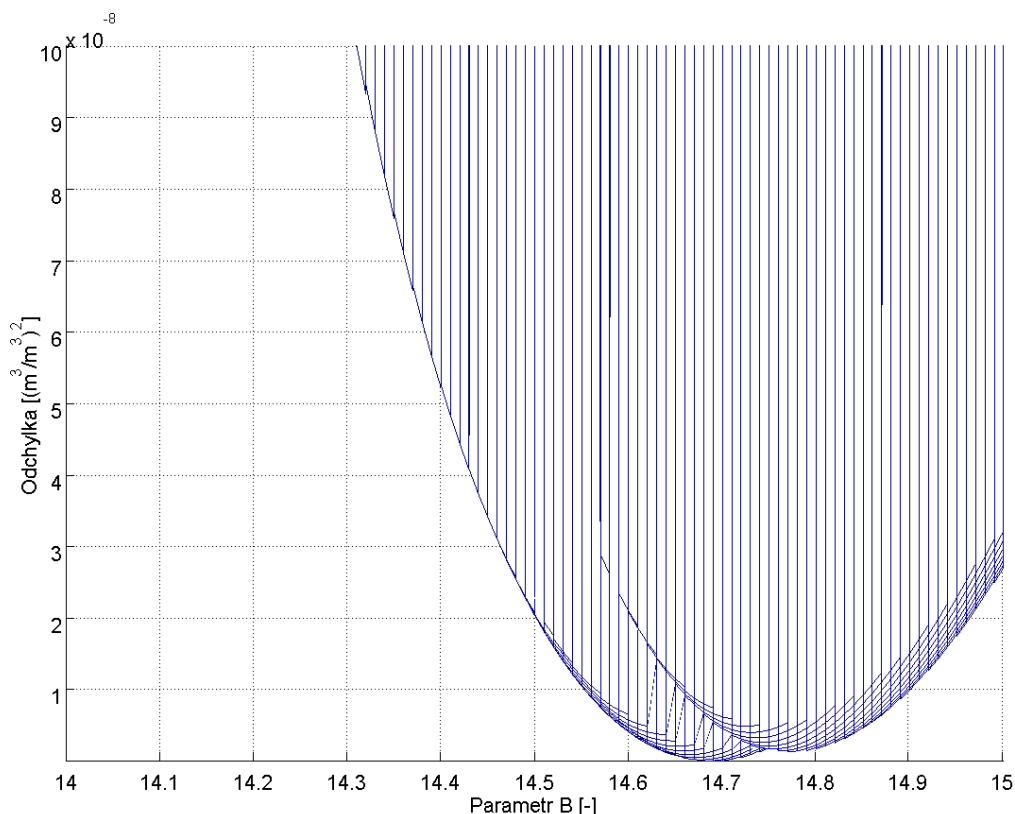
Obr. 10 znázorňuje pohled na chybovou funkci z profilu. Jelikož se jedná o teoretický experiment, musí existovat bod optima, jehož hodnota je rovna 0. Toto globální optimum nacházející se na souřadnici $B = 14.689$ však není patrné, proto bylo třeba provést nové simulace s jemnějším rastrem, aby mohla být existence globálního extrému prokázána. Pro nové simulace byl zvolen rastr parametru A v rozsahu od $3.9 \cdot 10^{-8}$ od $4.1 \cdot 10^{-8}$, parametr B byl volen od 14 do 15. Výsledná chybová funkce se zaměřením na bod optima je představena na *obr. 11*. Ačkoli ani zde není na první pohled optimum zřejmé, lze jej snadno prokázat dalším přiblížením. *Obr. 12* zachycuje pohled na výřez chybové funkce z profilu, u kterého je následně zmenšen rozsah osy Z a to od 0 do $1 \cdot 10^{-7}$ (*obr. 13*). Z *obr. 13* je již přítomnost globálního extrému jasně patrná.



Obr. 11: Celkový pohled na výřez chybové funkce



Obr. 12: Pohled z profilu na výřez chybové funkce



Obr. 13: Pohled na výřez chybové funkce z profilu při zvětšeném měřítku

Prokázáním globálního extrému na souřadnici $A = 4 \cdot 10^{-8}$ a $B = 14.689$ byla ověřena správnost sestavené chybové funkce. Nyní lze přistoupit k optimalizaci této funkce s vědomím, že pokud bude optimalizační metoda pracovat správně, musí být schopna nalézt řešení blízko tohoto optima.

Máme-li se rozhodnout mezi optimalizačními metodami pro dopředný postup inverzní analýzy, který byl vybrán v kapitole 4, je rozhodující podoba a tvar objektivní funkce. Tvar objektivní funkce napoví, zda použít standardní gradientní metody, či využít modernější metody optimalizace.

Jelikož je objektivní funkce výsledkem celého komplexu diferenciálních rovnic, je velice obtížné stanovit její analytické vyjádření. Objektivní funkce navíc obsahuje mnoho lokálních extrémů, proto nelze použít ani jednu z gradientních metod (např. metodu numerického gradientu). Z tohoto důvodu byla zvolena optimalizační metoda pomocí genetického algoritmu jako nejvhodnější.

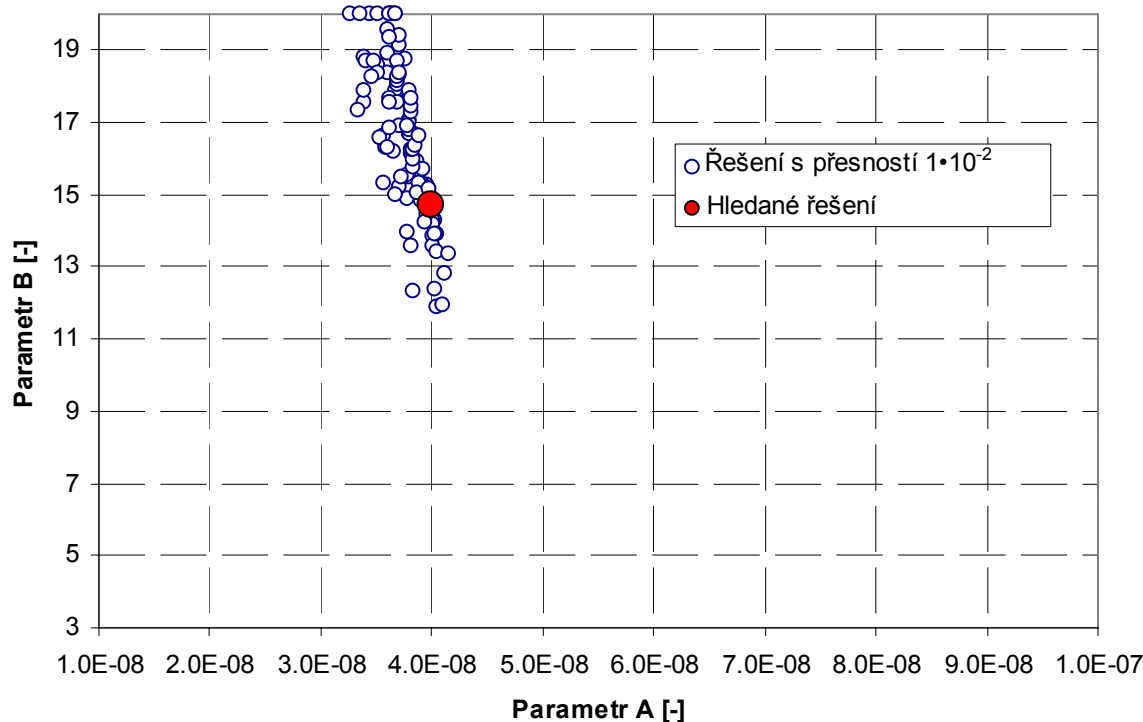
5.4 Výsledky aplikace genetického algoritmu na teoretickém experimentu

5.4.1 Přesnost genetického algoritmu

Genetický algoritmus použitý při řešení inverzního problému je řízen dvěma hlavními kritérii. Jakmile je některého z kritérií dosaženo, je běh programu zastaven a algoritmus vrací nejlepší nalezené řešení. Prvním kritériem je počet vyhodnocení objektivní funkce, druhým kritériem je přesnost hledaného řešení (hodnota objektivní funkce). Program se tedy zastaví, najde-li řešení s požadovanou maximální odchylkou nebo v případě, že překročí maximální počet vyhodnocení, aniž by našel řešení. Jelikož je počet vyhodnocení chybové funkce nastaven v řádech milionů, je obvyklé, že pokud existuje hledané řešení, algoritmus ho najde dříve, než dosáhne podmínky pro počet vyhodnocení.

Při hledání optima pomocí genetického algoritmu byly zvoleny tři testovací fáze. V první fázi byl spuštěn algoritmus 100krát s cílem nalézt řešení s přesností $1 \cdot 10^{-2}$. Jak již bylo popsáno v kapitole 2.1.1.2, genetický algoritmus pracuje s náhodnými čísly. Přesněji řečeno, počáteční populace je vygenerována náhodně a z této populace pomocí genetických operátorů pracujících také s náhodnými čísly vzejdou výsledné vlastnosti jedince. Jelikož je počáteční populace pokaždé jiná, je zřejmé, že při 100 simulacích vzejde 100 různých „jedinců“.

Při vyhodnocování bylo opět porovnáváno 5 podélných profilů o 26 výstupech, což představuje celkem 130 hodnot. Při celkové přesnosti $1 \cdot 10^{-2}$ (součtu čtverců všech odchylek) je průměrná hodnota čtverce odchylky na jeden výstup $7.692 \cdot 10^{-5} \text{ (m}^3/\text{m}^3)^2$, což představuje odchylku vlhkosti na jednu hodnotu výstupu přibližně $0.00877 \text{ m}^3/\text{m}^3$ (tato odchylka odpovídá 2.66 % hodnoty maximální saturace vzorku). Grafické znázornění nalezených řešení je zobrazeno na *obr. 14*. Rozsah parametrů A a B na vodorovné a svislé ose odpovídá hledanému rozmezí.



Obr. 14: Nalezená řešení s přesností $1 \cdot 10^{-2}$

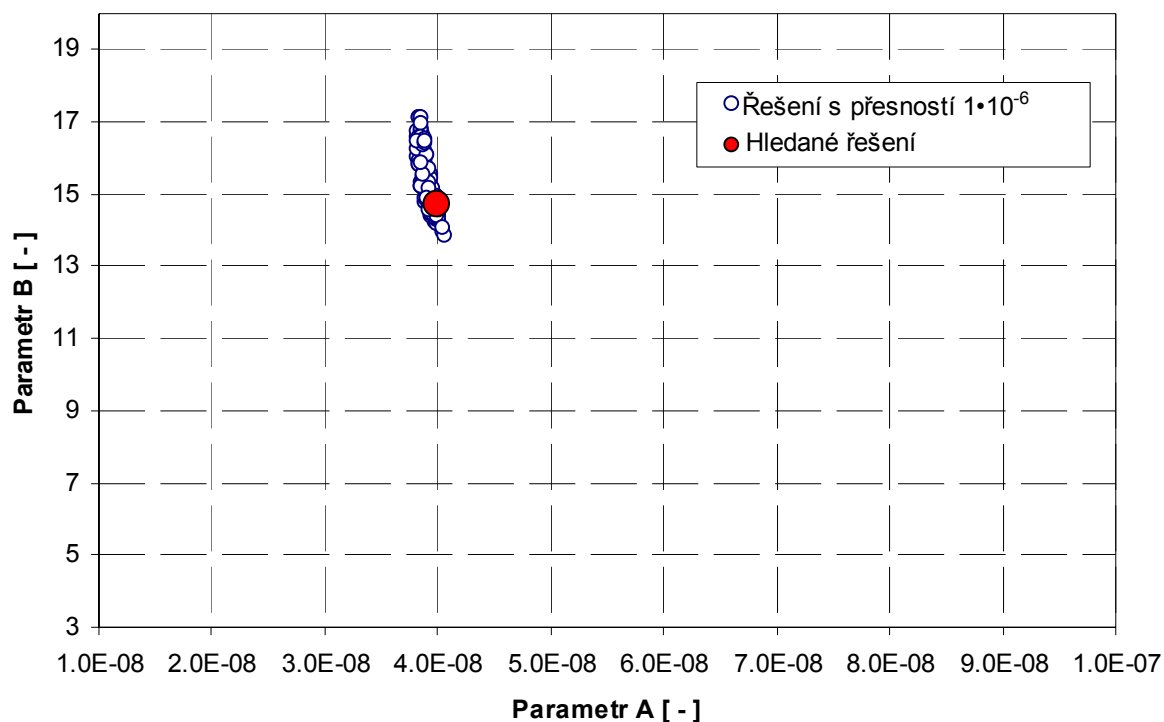
Statistika nalezených řešení je uvedena v tab. 3.

Tab. 3: Statistika nalezených řešení s přesností $1 \cdot 10^{-8}$

f_c	Parametr A	Parametr B
	$\langle 1 \cdot 10^{-8}; 1 \cdot 10^{-8} \rangle$	$\langle 3; 20 \rangle$
min.	$3.27 \cdot 10^{-8}$	11.898
max.	$4.15 \cdot 10^{-8}$	20.000
průměr	$3.76 \cdot 10^{-8}$	16.533

V druhé fázi byla přesnost zvětšena na $1 \cdot 10^{-6}$. Při stejném počtu profilů a počtu výstupů připadá na jeden výstup průměrný čtverec odchylky $7.692 \cdot 10^{-9} \text{ (m}^3/\text{m}^3)^2$, což představuje průměrnou odchylku na jeden výstup přibližně $0.0000877 \text{ m}^3/\text{m}^3$. Toto řešení je z hlediska praktického významu považováno za velmi přijatelné, jelikož vlhkosti použitého materiálu se běžně pohybují v rozmezí 0 až $0.3 \text{ m}^3/\text{m}^3$. Průměrná odchylka vlhkosti tedy nepřekračuje hodnotu 0.3 ‰ z maximální saturace materiálu. Tuto přesnost lze však získat pouze na teoretické úrovni, prakticky je tato odchylka nedosažitelná. Na základě zkušeností s předchozími simulacemi je považováno za velký úspěch, pokud se odchylky pohybují kolem 1 – 3 % (relativní vlhkosti, nikoli objemové vlhkosti).

Grafické znázornění nalezených řešení je zobrazeno na *obr. 15*. Rozsah os je stejný jako na *obr. 14*.



Obr. 15: Nalezená řešení s přesností $1 \cdot 10^{-6}$

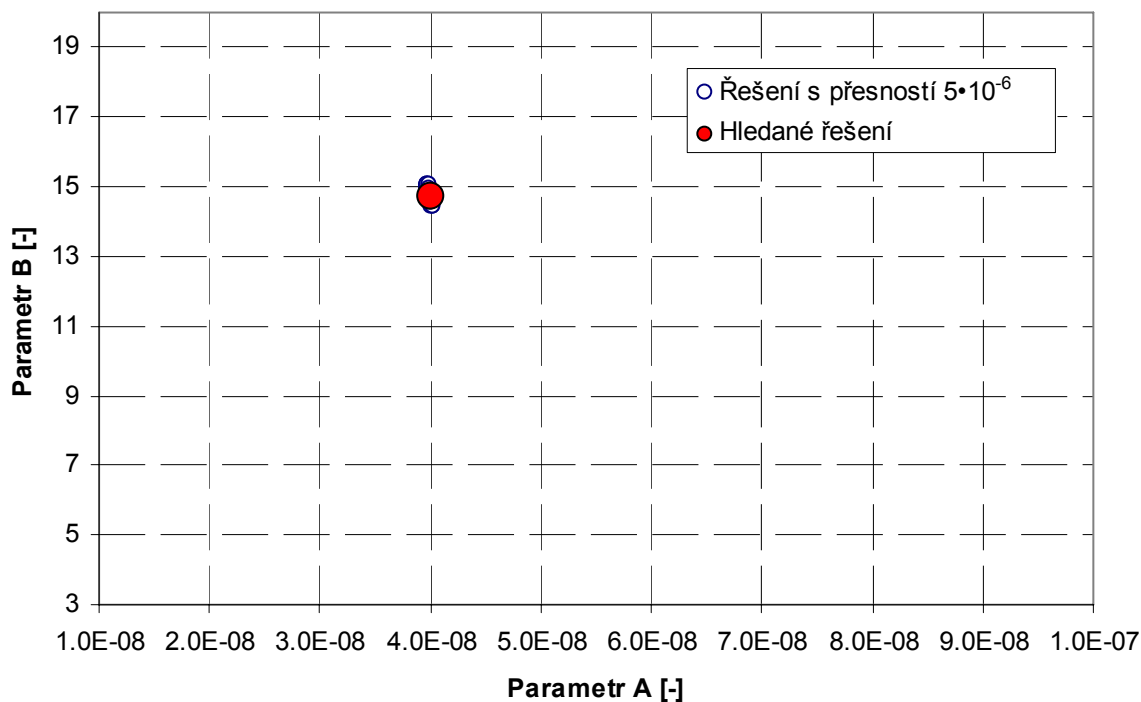
Statistika nalezených řešení je uvedena v *tab. 4*.

Tab. 4: Statistika nalezených řešení s přesností $1 \cdot 10^{-6}$

f_c	Parametr A	Parametr B
	$\langle 1 \cdot 10^{-8}; 1 \cdot 10^{-7} \rangle$	$\langle 3; 20 \rangle$
min.	$3.82 \cdot 10^{-8}$	13.862
max.	$4.06 \cdot 10^{-8}$	17.111
průměr	$3.90 \cdot 10^{-8}$	15.616

Se zvyšující se přesností genetického algoritmu je zřejmá konvergence k hledanému řešení. Jelikož při teoretickém experimentu lze dosáhnout velmi přesných výsledků, byla provedena i třetí fáze s vysokou přesností $5 \cdot 10^{-8}$. Při této přesnosti je průměrná odchylka čtverce na jeden

výstup rovna přibližně $3.846 \cdot 10^{-10} \text{ (m}^3/\text{m}^3)^2$, což odpovídá hodnotě $0.00001961 \text{ m}^3/\text{m}^3$ na jeden výstup (0.065 ‰ z maximální saturace materiálu). Grafické znázornění nalezených řešení je na *obr. 16*.



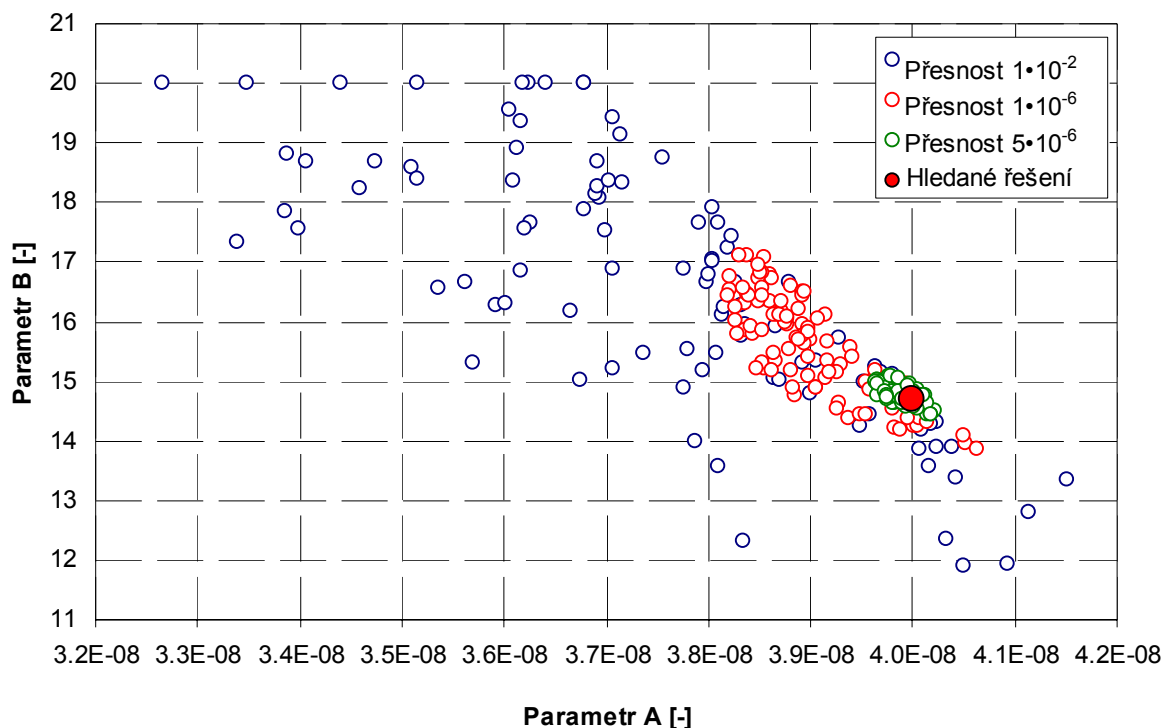
Obr. 16: Nalezená řešení s přesností $5 \cdot 10^{-6}$

Statistika nalezených řešení je uvedena v *tab. 5*.

Tab. 5: Statistika nalezených řešení s přesností $5 \cdot 10^{-6}$

f_c	Parametr <i>A</i>	Parametr <i>B</i>
	$\langle 1 \cdot 10^{-8}; 1 \cdot 10^{-8} \rangle$	$\langle 3; 20 \rangle$
min.	$3.96 \cdot 10^{-8}$	14.434
max.	$4.02 \cdot 10^{-8}$	15.088
průměr	$3.99 \cdot 10^{-8}$	14.783

Je zřejmé, že se vzrůstající přesností genetického algoritmu se snižuje rozptyl nalezených řešení. Pro názornost jsou výsledky všech tří testovacích fází uvedeny na *obr. 17*.



Obr. 17: Porovnání testovacích fází s různými přesnostmi

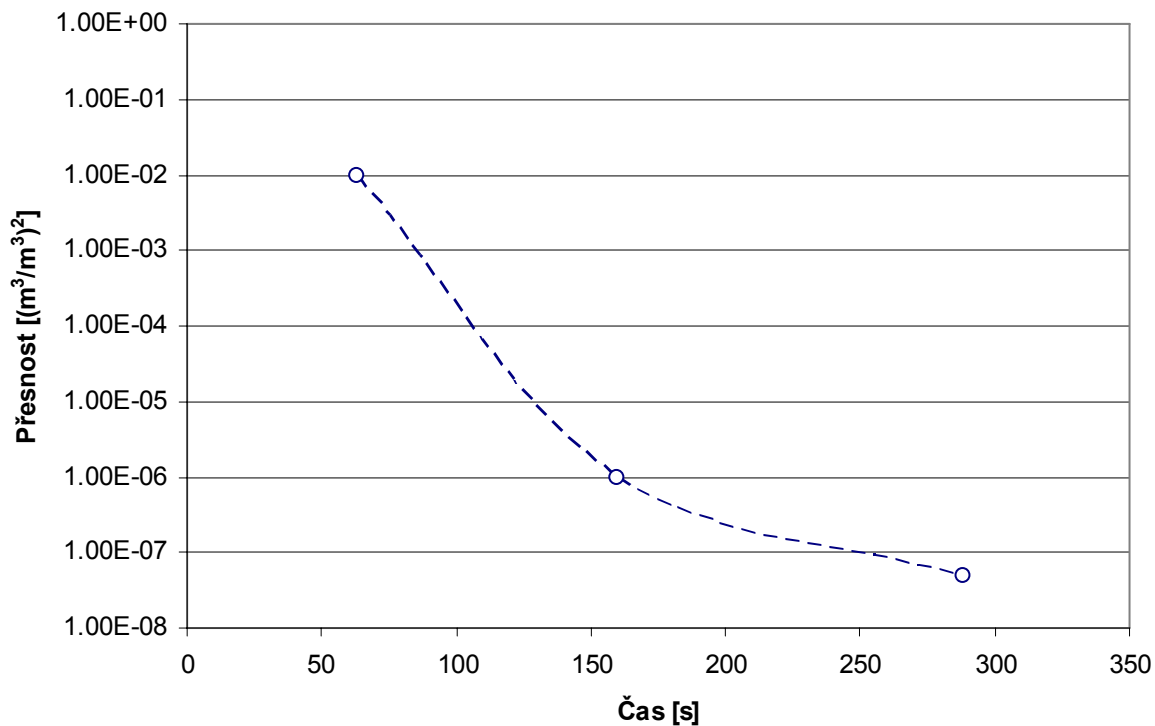
5.4.2 Rychlost konvergence genetického algoritmu

Na základě výsledků testovacích fází uvedených v kapitole 5.4.1 byla provedena drobná statistika, jejíž výsledky jsou shrnuty v tab. 6. Statistickým souborem pro vyhodnocení byly výstupy genetického algoritmu, který byl v každé fázi testování spuštěn 100krát.

Tab. 6: Statistické vyhodnocení testovacích fází genetického algoritmu

Přesnost	Počet simulací		
	min.	max.	průměr
$1 \cdot 10^{-2}$	80	120	102.40
$1 \cdot 10^{-6}$	80	560	258.00
$5 \cdot 10^{-8}$	120	840	465.20

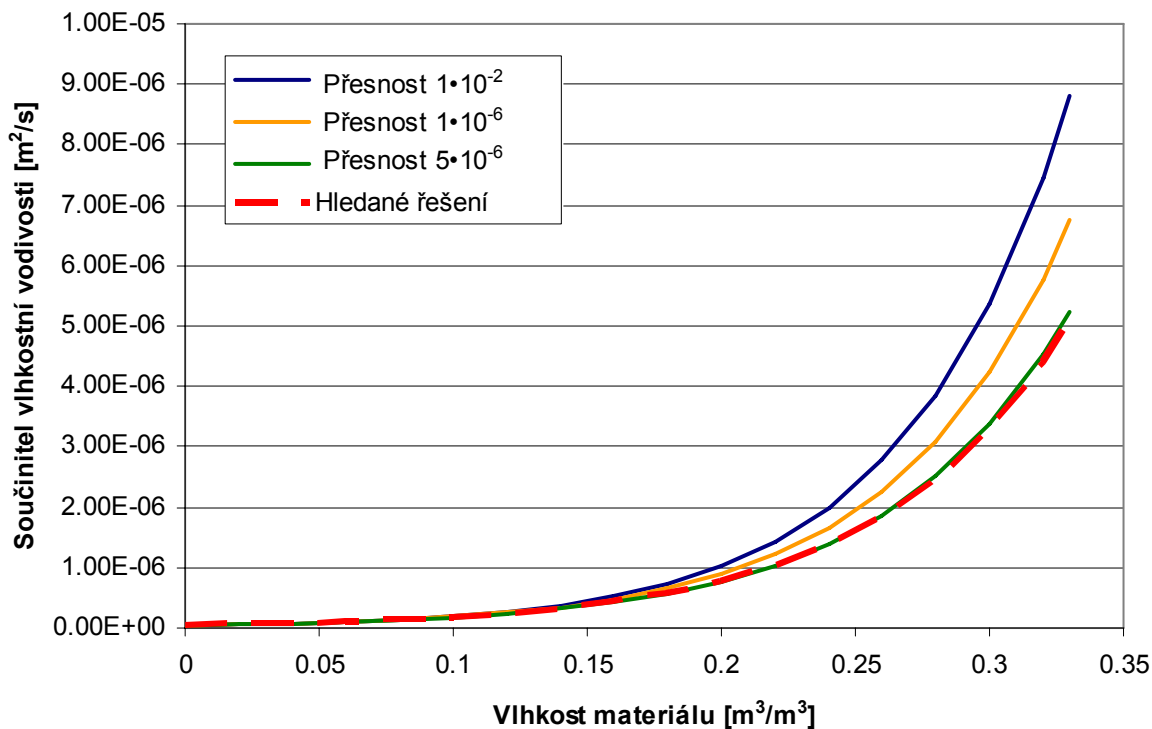
Na základě délky výpočtu jedné simulace, která činí přibližně 0.62 sekundy, byla sestavena závislost mezi přesností genetického algoritmu a dobou optimalizace. Tato závislost vychází z průměrného počtu simulací pro jednotlivé přesnosti a její křivka je zobrazena na obr. 18.



Obr. 18: Závislost mezi přesností genetického algoritmu a dobou optimalizace

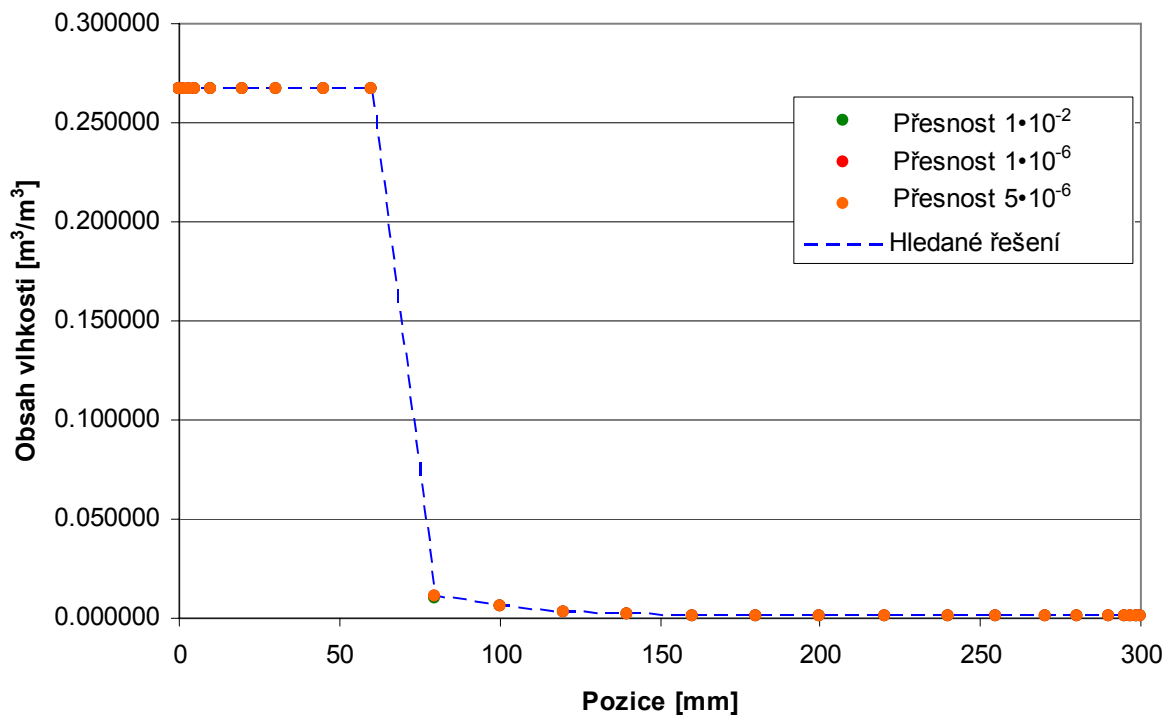
5.4.3 Ověření nalezených řešení

Na obr. 19 je zobrazen přehled nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro jednotlivé fáze experimentu s různými přesnostmi. Všechny tři průběhy součinitelů se neliší nijak výrazně, zejména pak křivka nalezená s přesností $5 \cdot 10^{-8}$ je téměř totožná s referenční křivkou součinitele κ .



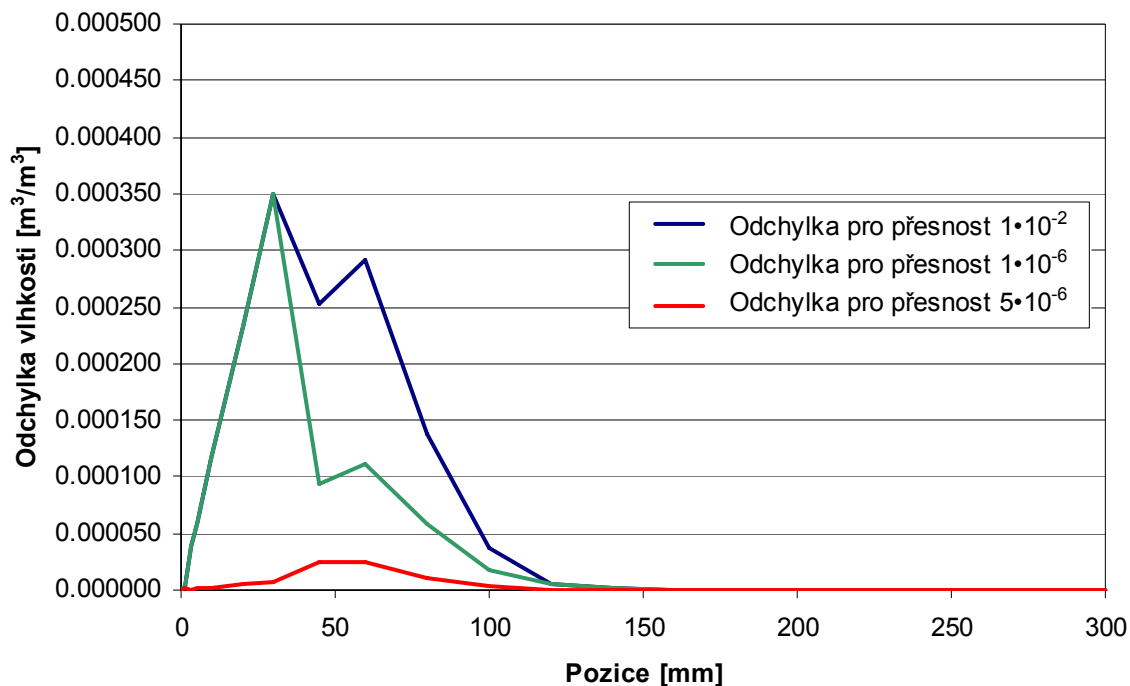
Obr. 19: Přehled nalezených křivek součinitelů vlhkostní vodivosti pro různé přesnosti genetického algoritmu

Podélné vlhkostní profily v čase $t = 36\,000$ s, sestavené na základě nalezených součinitelů κ , jsou prezentovány na obr. 20. Jelikož se podélné profily jednotlivých součinitelů κ liší v řádech tisíců až desítitisíců, jsou všechny profily téměř totožné. Toto zjištění je pozitivní z hlediska dalších simulací založených na reálném experimentu, jelikož na reálné úrovni jsou zkoumané odchylky ($1 \cdot 10^{-2}$, $1 \cdot 10^{-6}$ a $5 \cdot 10^{-8}$) prakticky nedosažitelné. Při simulacích reálných experimentů může být tedy celková odchylka zvolena řádově mnohem vyšší za předpokladu stejného počtu výstupů.

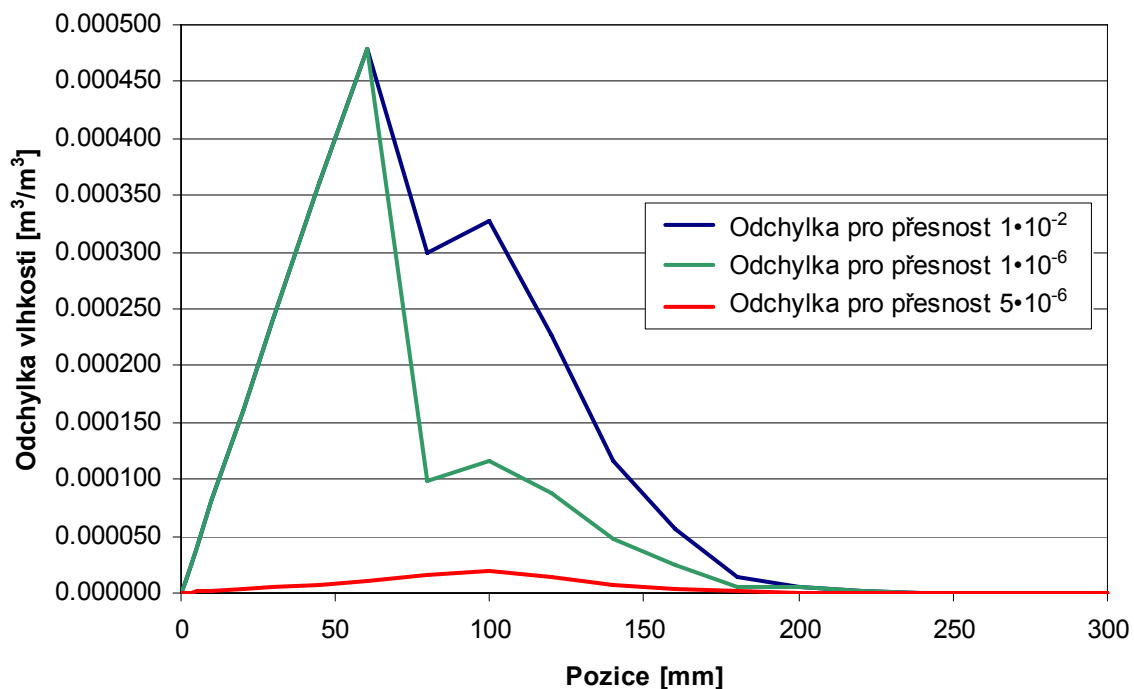


Obr. 20: Podélné vlhkostní profily v čase $t = 36\,000\text{ s}$ (10 hodin)

Jelikož z podélných vlhkostních profilů na obr. 20 nelze odečíst odchylky u jednotlivých výstupů, jsou pro názornost na obr. 21 a 22 vykresleny pouze odchylky jednotlivých křivek pro vlhkostní profily odpovídající časům, tj. $t = 14\,400\text{ s}$ a $t = 36\,000\text{ s}$.



Obr. 21: Odchylky jednotlivých vlhkostních profilů od referenčního profilu v čase $t = 14\,400\text{ s}$



Obr. 22: Odchylky jednotlivých vlhkostních profilů od referenčního profilu v čase $t = 36\,000\text{ s}$

Statistika zjištěných odchylek je uvedena v *tab. 7*. Předmětem zkoumání je maximální odchylka v jednotlivých vlhkostních profilech od referenční vlhkostní křivky a dále pak průměrná hodnota odchylky

Tab. 7: Statistické vyhodnocení odchylek podélných profilů nalezených v jednotlivých fázích

přesnost	maximální odchylka	průměrná odchylka
$1 \cdot 10^{-2}$	$7.52 \cdot 10^{-4}$	$9.10 \cdot 10^{-5}$
$1 \cdot 10^{-6}$	$5.80 \cdot 10^{-4}$	$6.20 \cdot 10^{-5}$
$5 \cdot 10^{-8}$	$6.10 \cdot 10^{-5}$	$4.00 \cdot 10^{-6}$

Z výše prezentovaných hodnot odchylek je jasně patrná konvergence k hledanému řešení.

5.5 Shrnutí aplikace genetického algoritmu na teoretickém experimentu

Na základě výsledků prezentovaných v kapitole 5.4 byla ověřena a jednoznačně prokázána funkčnost použitého genetického algoritmu GRADE, který je proto možné použít pro další simulace. Významné zjištění bylo rovněž učiněno analýzou odchylky chybové funkce, na jejíž základě lze odhadnout rozmezí odchylky pro simulace založené na reálných experimentech.

6 Aplikace genetického algoritmu na reálném experimentu

6.1 Popis experimentu

Pro ověření funkčnosti genetického algoritmu GRADE v praxi byl vybrán experiment, který byl uskutečněn v laboratořích Katedry materiálového inženýrství a chemie, na Fakultě stavební ČVUT v Praze. Projekt, nazvaný HAMSTAD, se týkal měření základních fyzikálních vlastností několika různých materiálů, konkrétně kalcium-silikátu (tepelná izolace s hydrofilními vlastnostmi), pórobetonu a pálené cihly. Pro ověření funkčnosti genetického algoritmu v praxi byla převzata experimentální data naměřená u pórobetonu.

Měření součinitele vlhkostní vodivosti κ probíhalo na tělesech tyčového charakteru o rozměrech 20 x 40 x 300 mm. K zajištění jednorozměrného transportu byly vzorky opatřeny vodotěsnou a parotěsnou termofólií po celé délce (viz obr. 23).



Obr. 23: Schéma experimentu pro měření součinitele vlhkostní vodivosti

Na počátku experimentu byly vzorky vysušeny a uloženy v laboratorním prostředí, aby bylo dosaženo rovnováhy s okolím. Po umístění do kontaktu s vodou byly změřeny vlhkostní profily ve vybraných časech. Pro určení vlhkostních profilů byla použita kapacitní metoda a metoda TDR [30]. Na základě těchto profilů byl pomocí metod popsanych v kapitole 2.1 stanoven součinitel vlhkostní vodivosti.

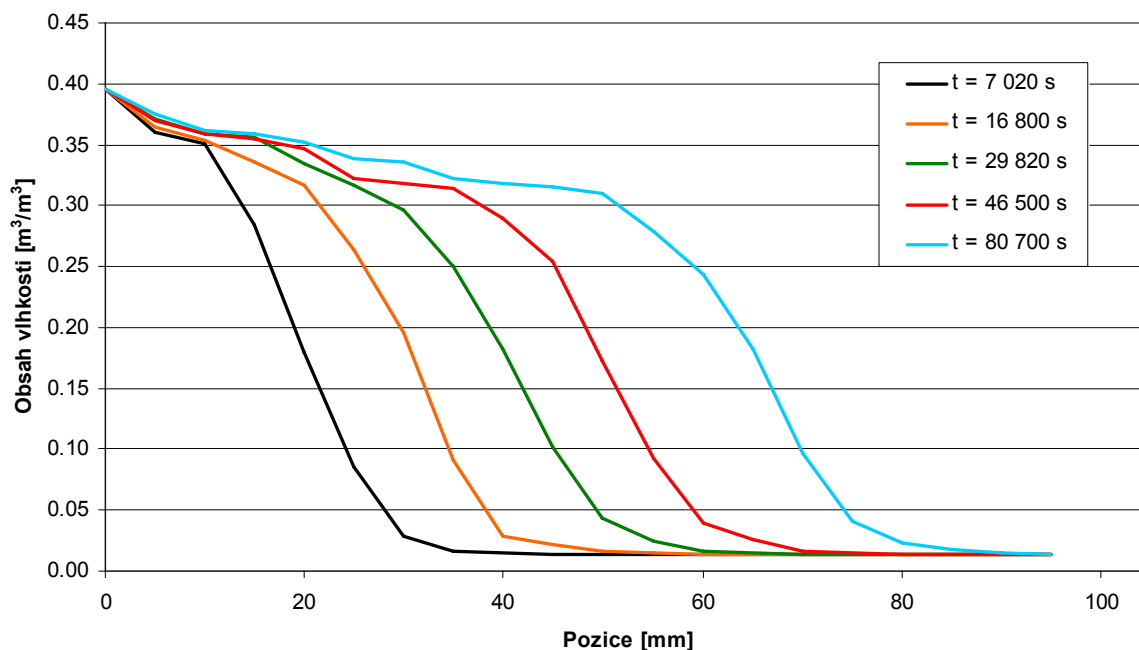
6.2 Data získaná z experimentu

Výsledkem experimentu popsaného výše bylo stanovení základních materiálových parametrů uvedených v *tab. 8*. Zde jsou uvedeny následující hodnoty: ρ – objemová hmotnost [kg/m^3], c – měrná tepelná kapacita [J/kgK], μ – faktor difúzního odporu vodní páry [-], θ_{sat} – saturovaný obsah vlhkosti [m^3/m^3], θ_{hyg} – hygroskopický obsah vlhkosti [m^3/m^3].

Tab. 8: Základní materiálové parametry použité pro optimalizaci součinitele vlhkostní vodivosti pórobetonu

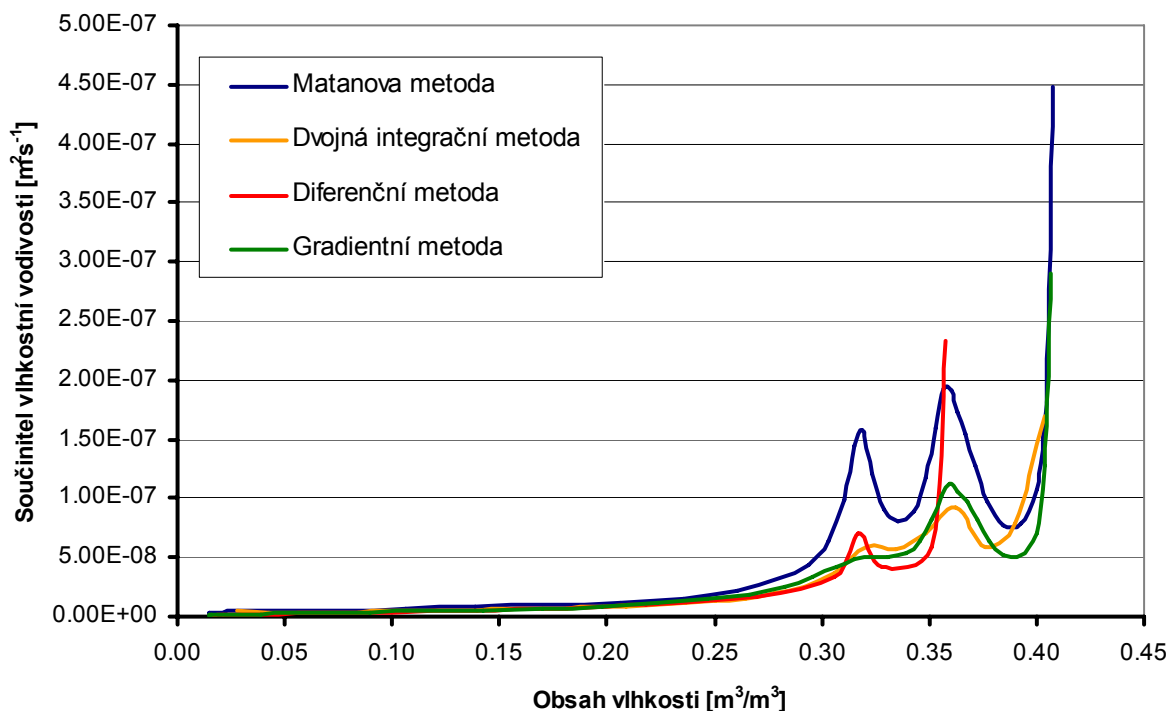
ρ	c	μ	θ_{sat}	θ_{hyg}
475	800	9.589	0.783	0.05

Z hlediska optimalizace součinitele vlhkostní vodivosti bylo rovněž potřeba znát vlhkostní profily ve zvolených časech. Profily byly měřeny v časech $t = 7\,200$ s, $16\,800$ s, $29\,820$ s, $46\,500$ s a $80\,700$ s. Jejich průběhy jsou znázorněny na *obr. 24*.



Obr. 24: Zjištěné vlhkostní profily ve vybraných časech

Z vlhkostních profilů na *obr. 24* byly inverzními metodami popsanými v kapitole 2.2 stanoveny křivky součinitelů vlhkostní vodivosti κ v závislosti na obsahu vlhkosti v materiálu.



Obr. 25: Součinitele vlhkostní vodivosti κ stanovené různými metodami

Pro správnou predikci vlhkostního chování je třeba rovněž znát sorpční izotermu materiálu, která vyjadřuje závislost mezi relativní vlhkostí vzduchu v pórovém systému a obsahem vlhkosti v materiálu. Tato křivka bohužel nebyla k dispozici, a proto musela být určena empiricky pomocí vztahu ROOT [31]

$$\theta = (1 - \sqrt{1 - \varphi}) \times \theta_{hyg}^*, \quad (39)$$

kde θ je obsah vlhkosti, φ je relativní vlhkost vzduchu v pórech, θ_{hyg}^* je definováno pomocí vztahu

$$\theta_{hyg}^* = \frac{\theta_{hyg}}{1 - \sqrt{1 - \varphi_{hyg}}}, \quad (40)$$

kde θ_{hyg} je hygroskopický obsah vlhkosti a φ_{hyg} je maximální hygroskopická relativní vlhkost v pórech materiálu.

6.3 Počítačová simulace experimentu

Pomocí genetického algoritmu GRADE lze optimalizovat libovolný parametr vstupující do výpočtu. Cílem této práce je identifikace parametru týkajících se transportu vlhkosti – součinitele vlhkostní vodivosti. Experiment vedení vlhkosti, popsáný v kapitole 6.1, byl proto diskretizován pomocí programu TRANSMAT, který byl vyvinut na Katedře materiálního inženýrství a chemie a Katedře mechaniky ČVUT v Praze. Tento program řeší transportní rovnice pomocí metody konečných prvků [11].

Experiment byl namodelován jako jednorozměrná úloha s Dirichletovou okrajovou podmínkou na jednom konci, která simulovala kontakt s vodou. Aby se ve výsledcích projevil vliv jen této okrajové podmínky, byl při matematické simulaci namodelován vzorek mnohem delší než ve skutečnosti, navíc druhému konci nebyla přiřazena žádná okrajová podmínka. Materiálové parametry byly převzaty z výsledků měření reálného experimentu s výjimkou sorpční izotermy vlhkosti, která byla definována pomocí vztahů (39) a (40). Pro řešení transportu tepla a vlhkosti byl použit materiálový model dle Künzela [8]. Pozice výstupů ze simulace byly nastaveny tak, aby odpovídaly místům ve vzorku, ve kterých byly změřeny vlhkostní profily kapacitní metodou. Výstupy v čase odpovídaly intervalům, ve kterých byly stanoveny skutečné vlhkostní profily. Na základě tohoto nastavení mohly být výstupy z jednotlivých simulací porovnávány s referenčními hodnotami vlhkostních profilů a celý experiment tak mohl být optimalizován.

6.4 Optimalizované parametry

Cílem počítačové optimalizace bylo určit **součinitel vlhkostní vodivosti** κ . Ten byl definován pomocí vztahu (35), vedoucím na identifikaci dvou parametrů. Genetický algoritmus byl tedy spuštěn s počáteční populací dvacet jedinců ($pop_rate = 10$), což značně urychlilo konvergenci k hledanému optimu. Klíčovým faktorem optimalizace byla zvolená přesnost. Pro stanovení odchylky dle rovnice (36) bylo použito vždy pět vlhkostních profilů ($m = 5$) v různých časech, z toho každý profil obsahoval 20 výstupních hodnot ($n = 20$). Pro vyhodnocení každé iterace bylo celkem porovnáno 100 výstupů.

Přesnost hledaného řešení byla nejprve nastavena na vysokou hodnotu 0.35, čemuž odpovídá odchylka vlhkosti na jednom výstupu přibližně $0.059 \text{ m}^3/\text{m}^3$. Tato odchylka je

poměrně vysoká, ale cílem této „hrubé“ optimalizace bylo pouhé zjištění, zda a s jakou odezvou je algoritmus schopen nalézt řešení.

Další optimalizace byla spuštěna s mnohem vyšší přesností, konkrétně 0.035. Této přesnosti odpovídá průměrná odchylka vlhkosti na jednom výstupu v podélném vlhkostním profilu přibližně $0.0187 \text{ m}^3/\text{m}^3$. Při porovnání s předchozí optimalizací se podařilo snížit průměrnou odchylku na výstupu o více než dvě třetiny, ale vzhledem k délce konvergence už nebylo přistoupeno k dalším optimalizacím s vyššími přesnostmi.

Výsledky obou optimalizací jsou prezentovány v kapitole 6.5.

6.5 Nalezená řešení

Dříve než budou prezentovány výsledky jednotlivých optimalizací, je nutné shrnout několik faktů. Celkem byly realizovány dvě různé optimalizace. Tyto optimalizace jsou nazvány optimalizace č. 1 a č. 2. Přehled jednotlivých optimalizací, včetně stručného popisu je uveden v *tab. 9*.

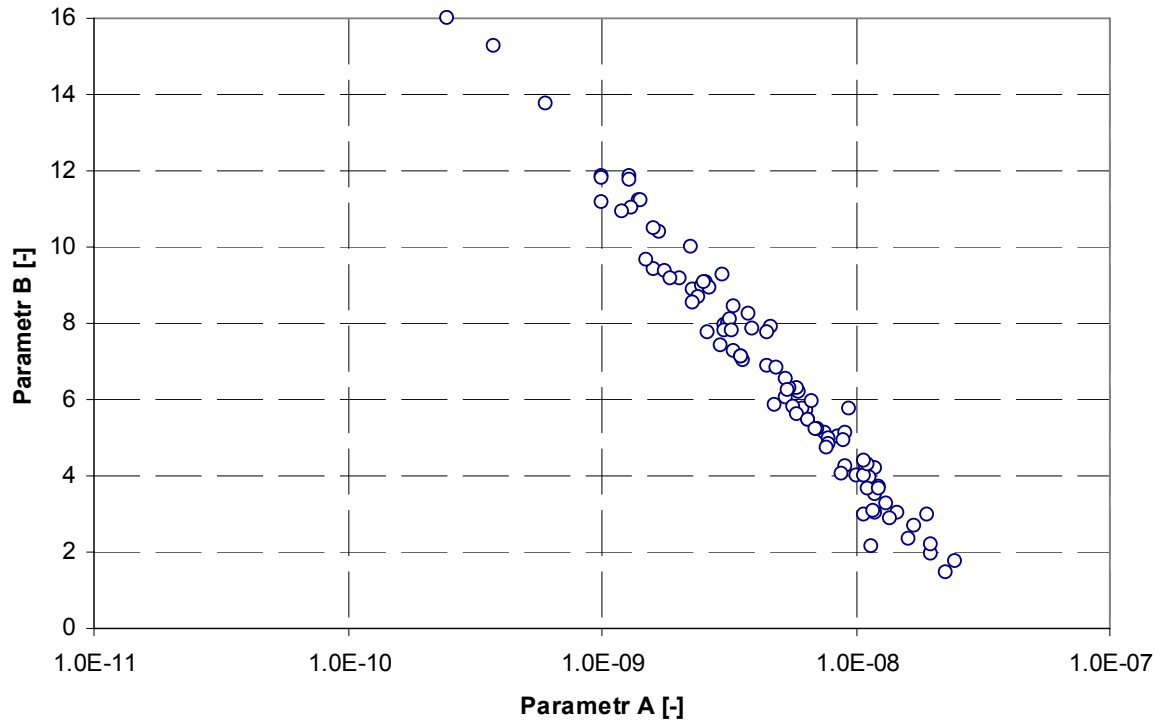
Tab. 9: Přehled uskutečněných optimalizací

Optimalizace	Přesnost	Popis
č. 1	0.350	součinitel κ definován pomocí exponenciály
č. 2	0.035	součinitel κ definován pomocí exponenciály

Všechny optimalizace byly spuštěny 100krát, aby byla vyloučena možnost nalezení náhodného řešení a to zejména, co se týče rychlosti konvergence. Ze statistického souboru 100 optimalizací pak bylo možné určit průměrnou délku optimalizace i rozptyl řešení. Výsledky jednotlivých optimalizací jsou prezentovány v následujících kapitolách.

6.5.1 Nalezená řešení pro optimalizaci č. 1

Grafické znázornění všech nalezených řešení pro optimalizaci č. 1 je zobrazeno na *obr. 26*. Rozsahy os odpovídají intervalům, ve kterých byly jednotlivé parametry hledány. Statistika nalezených řešení je uvedena v *tab. 10*. Hlavní význam optimalizace č. 1 spočíval v tom, že tato optimalizace ukázala, zda je genetický algoritmus schopen nalézt nějaké řešení a zároveň odhalila v jakém rozsahu přesnosti se hledaná řešení pohybují. Dalším důležitým poznatkem bylo množství času, které bylo třeba k nalezení řešení. Jelikož je z *obr. 26* patrný veliký rozptyl nalezených řešení, je zřejmé, že můžeme bez obav u dalších optimalizací snížit maximální odchylku.



Obr. 26: Nalezená řešení pro optimalizaci č. 1

Tab. 10: Statistika nalezených řešení pro optimalizaci č. 1

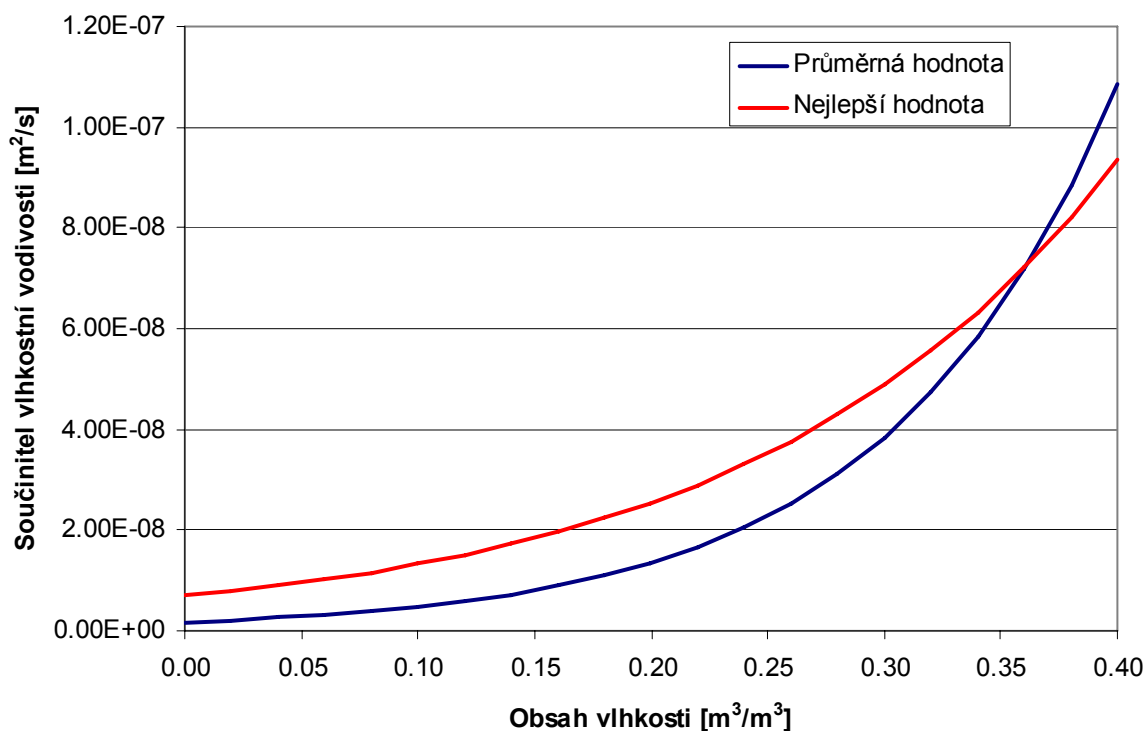
f_c	Parametr A	Parametr B
	$\langle 1 \cdot 10^{-11}; 1 \cdot 10^{-7} \rangle$	$\langle 0; 16 \rangle$
min.	$2.47 \cdot 10^{-10}$	1.441
max.	$2.46 \cdot 10^{-8}$	16.000
průměr	$6.68 \cdot 10^{-9}$	6.603

Přehled dosažených přesností je uveden v *tab. 11*.

Tab. 11: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 1

Přesnost	Dosažené přesnosti		
	min.	max.	průměr
0.350	0.0368	0.3246	0.1174

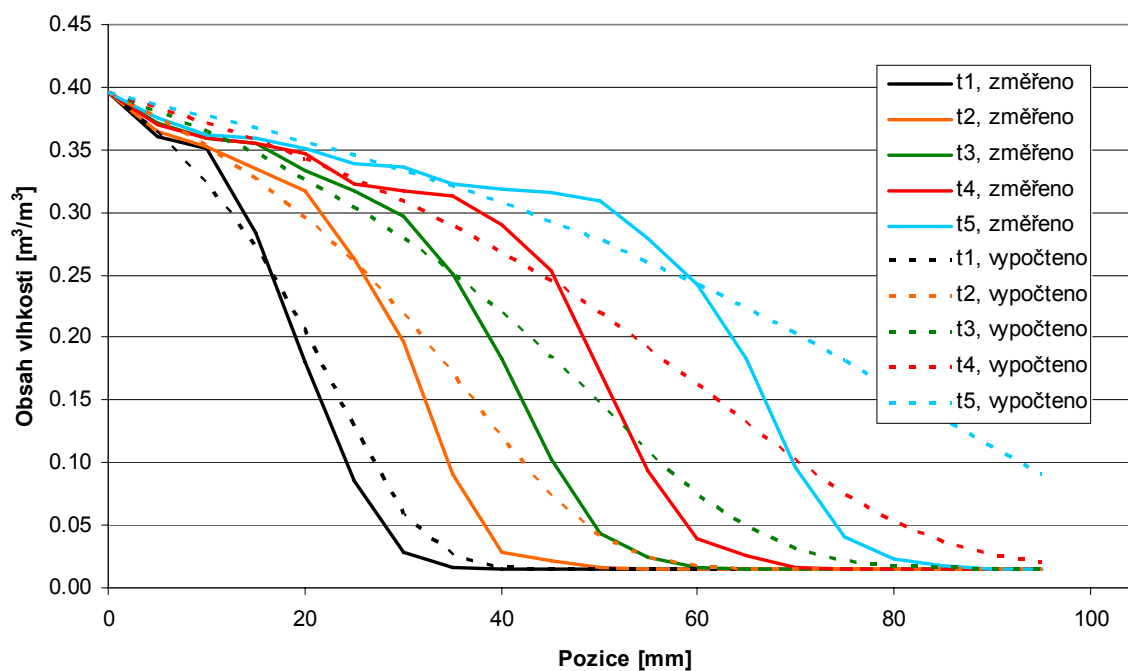
Průběhy průměrného a nejlepšího nalezeného součinitele vlhkostní vodivosti jsou uvedeny na *obr. 27*.



Obr. 27: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 1

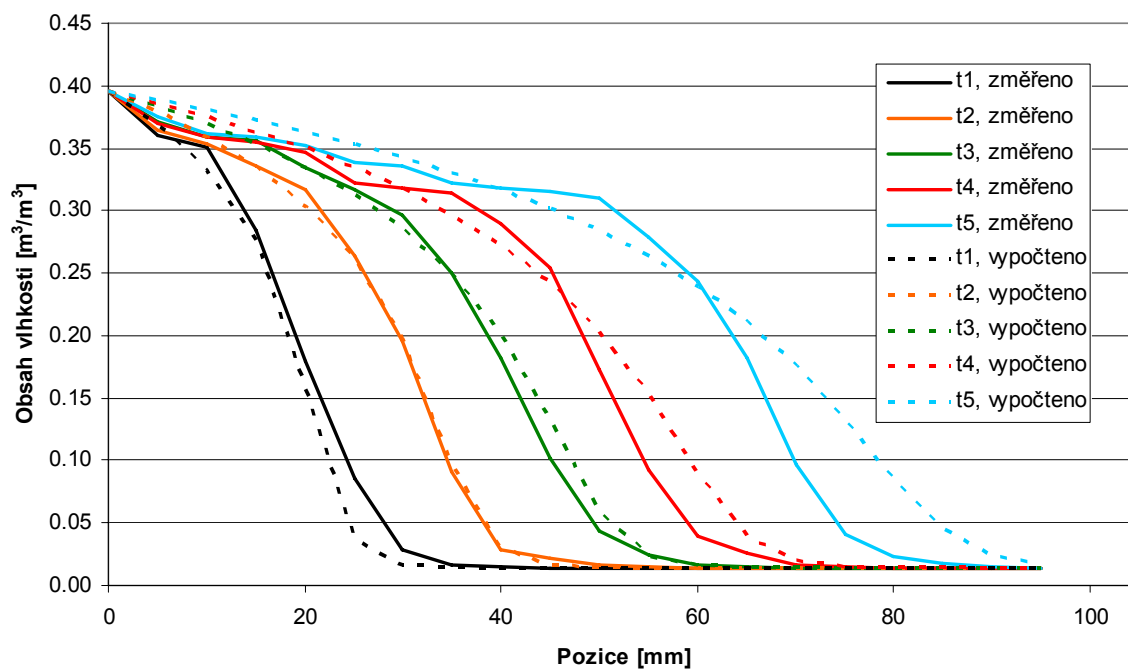
Na *obr. 28* a *29* jsou zobrazeny vlhkostní profily pro průměrné a nejlepší nalezené řešení součinitele vlhkostní vodivosti. Jelikož je u nalezených řešení velký rozptyl, je logické, že vlhkostní profily sestavené na základě průměrné hodnoty součinitele vlhkostní vodivosti nedosahují takových přesností (*obr. 28*). Důvodem této nepřesnosti je význam optimalizace č. 1, která byla provedena pouze za účelem testování. Vlhkostní profily byly měřeny v pěti

různých časech a v grafech jsou označeny jako t_1 až t_5 . Těmto symbolům odpovídají následující hodnoty: $t_1 = 7\,200$ s, $t_2 = 16\,800$ s, $t_3 = 29\,820$ s, $t_4 = 46\,500$ s a $t_5 = 80\,700$ s.



Obr. 28: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 1

Na obr. 29 je již patrné přiblížení naměřených a namodelovaných vlhkostních profilů, stále se však nejedná o nějak zvlášť přesné hodnoty. Zejména co se týče vlhkostního profilu stanoveného pro čas t_5 .



Obr. 29: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 1

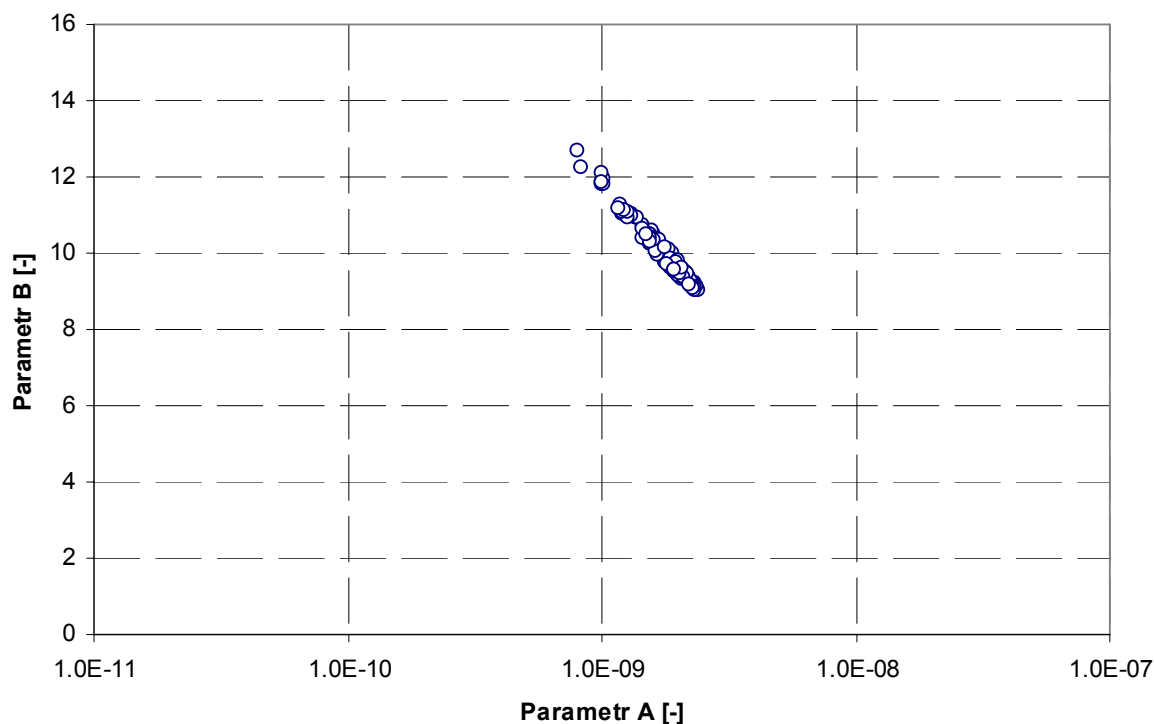
Nejzajímavějším poznatkem, získaným z optimalizace č. 1 je statistika délky konvergence. Ta je uvedena v tab. 12. Za předpokladu, že délka jedné simulace je přibližně 2.75 sekundy, trvalo nalezení jednoho řešení v průměru necelé 4 minuty a 23 vteřin. Tento čas znamená velmi rychlou konvergenci k hledanému řešení, což je dalším důkazem podporující tvrzení, že existují řešení přesnější.

Tab. 12: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 1

Přesnost	Počet simulací		
	min.	max.	průměr
0.350	80	120	95.5

6.5.2 Nalezená řešení pro optimalizaci č. 2

Zajímavé jsou výsledky optimalizace č. 2. Objektivní funkce, která byla optimalizována, zůstala nezměněna. Oproti optimalizaci č. 1 se změnila pouze přesnost hledaného řešení, a to z 0.350 na 0.035. Nalezená řešení jsou zobrazena na *obr. 30*. Rozsahy os odpovídají intervalům, ve kterých byly jednotlivé parametry hledány.



Obr. 30: Nalezená řešení pro optimalizaci č. 2

Z *obr. 30* je patrná koncentrace všech nalezených řešení do jednoho bodu, což naznačuje, že zvolená přesnost hledaných řešení se blíží k maximální dosažitelné přesnosti. Statistika nalezených řešení je uvedena v *tab. 13*.

Tab. 13: Statistika nalezených řešení pro optimalizaci č. 2

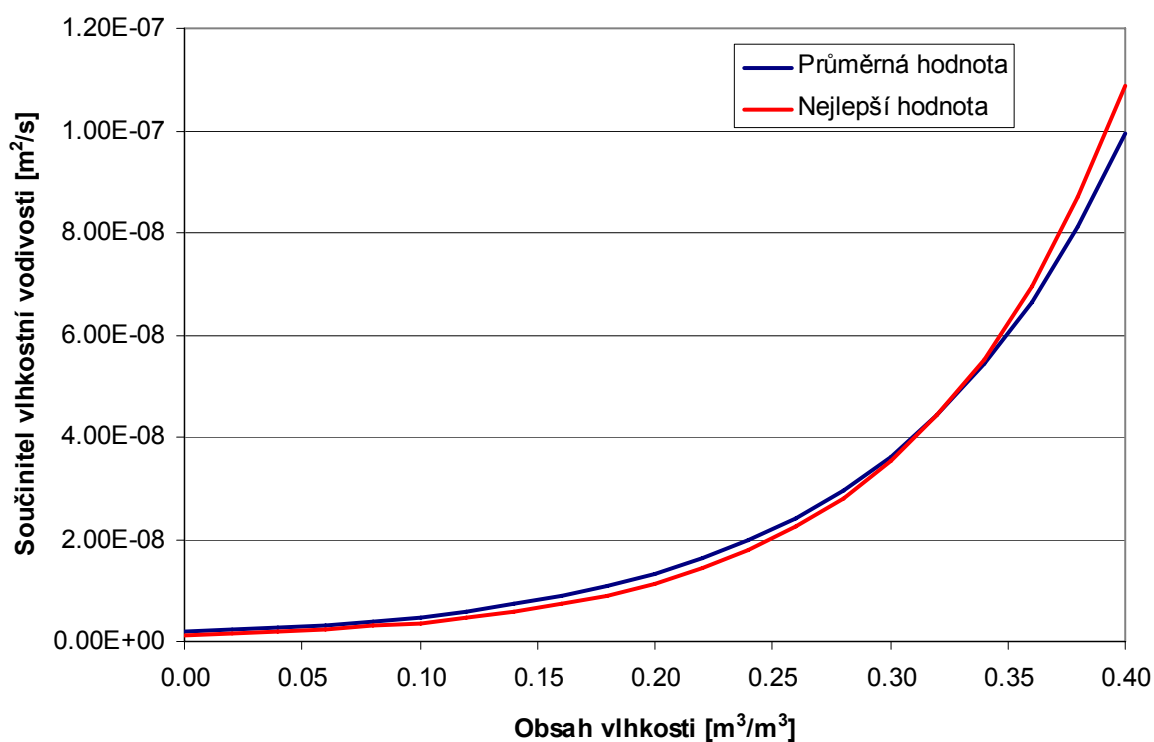
f_c	Parametr A	Parametr B
	$\langle 1 \cdot 10^{-9}; 1 \cdot 10^{-6} \rangle$	$\langle 0; 16 \rangle$
min.	$8.07 \cdot 10^{-10}$	9.018
max.	$2.39 \cdot 10^{-9}$	12.675
průměr	$1.77 \cdot 10^{-9}$	10.071

Přehled dosažených přesností je uveden v *tab. 14*.

Tab. 14: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 2

Přesnost	Dosažené přesnosti		
	min.	max.	průměr
0.035	0.02396	0.03494	0.03057

Průběhy průměrného a nejlepšího nalezeného součinitele vlhkostní vodivosti jsou uvedeny na *obr. 31*.

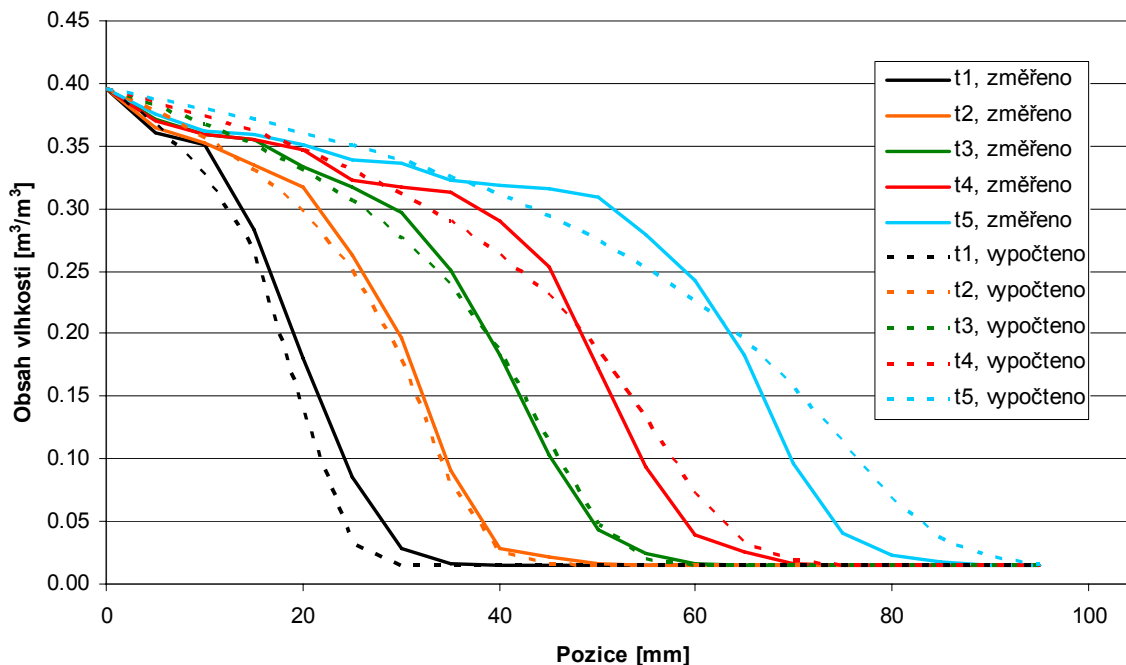


Obr. 31: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 2

Na *obr. 31* je vidět, jak jsou průběhy průměrného a nejlepšího nalezeného součinitele vlhkostní vodivosti podobné. To je jedním z ukazatelů, že maximální odchylka, zvolená při optimalizaci, je velmi blízko optima optimalizované funkce.

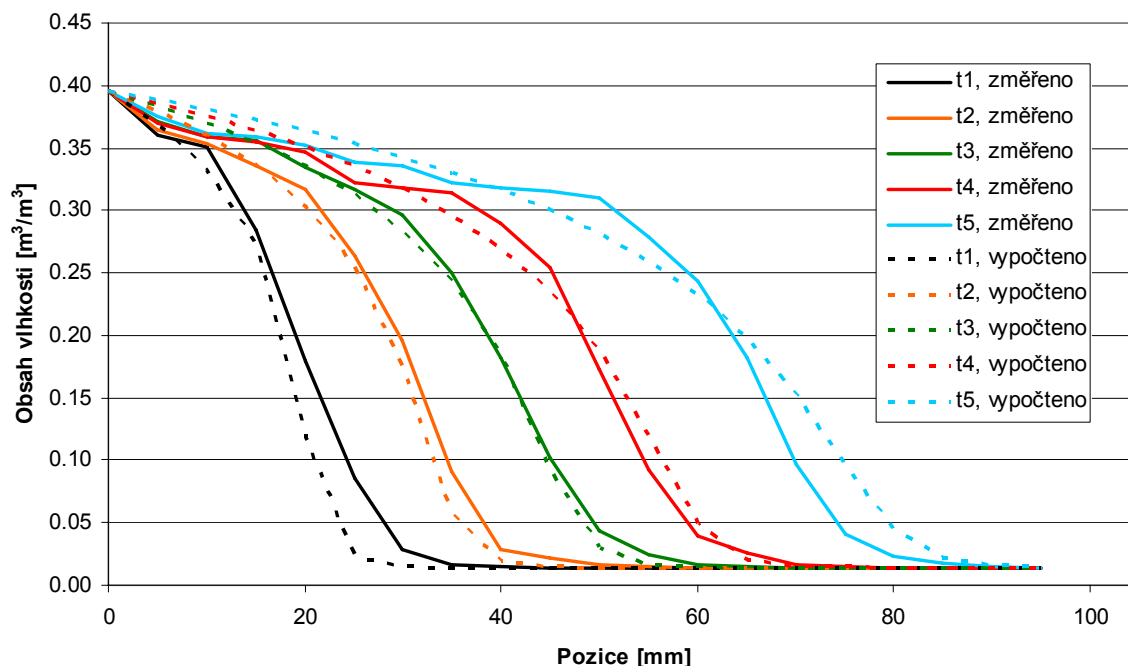
Zajímavý je pohled na *obr. 32*, který znázorňuje vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti κ , nalezeného při optimalizaci č. 2. Při této optimalizaci se

podařilo zachytit nástup vlhkostní vlny i její trend. Bohužel rychlost šíření vlhkostní „vlny“ není ideální, což se projeví zejména v profilu t_5 , který stále jeví velké známky nepřesnosti.



Obr. 32: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 2

Naopak na obr. 33 je zobrazeno vlhkostní pole pro nejpřesnější nalezené řešení v rámci optimalizace č. 2. Toto řešení má odchylku 0.02395 a bylo dosaženo pro parametry $A = 1.1927 \cdot 10^{-9}$ a $B = 11.286$. Při porovnání s obr. 31 je patrná přesnější aproximace všech profilů, což má podstatný význam na zvýšení celkové přesnosti.



Obr. 33: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 2

Celková suma čtverců odchylek na všech výstupech, která je rovna $0.02395 \text{ (m}^3/\text{m}^3)^2$, představuje průměrnou odchylku na výstupu $0.015 \text{ m}^3/\text{m}^3$, což odpovídá 3.9 % plného nasycení vzorku.

Statistika délky konvergence je uvedena v tab. 15.

Tab. 15: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 2

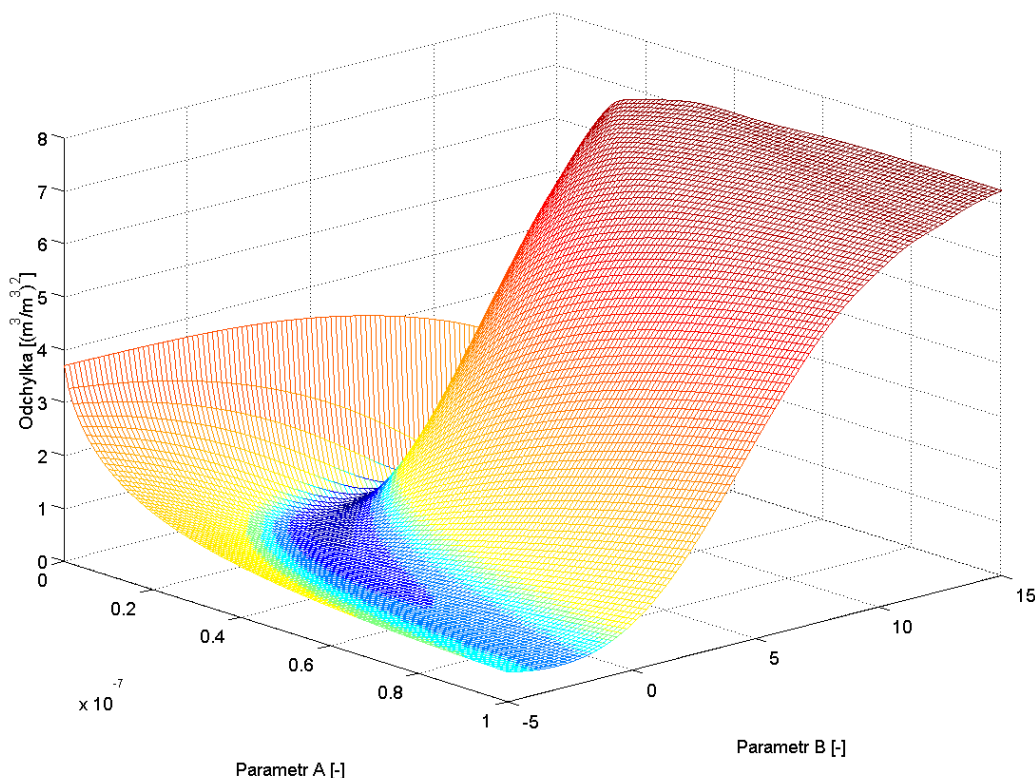
Přesnost	Počet simulací		
	min.	max.	průměr
0.035	80	920	468.4

Průměrná doba k nalezení jednoho řešení je tedy přibližně 1 288 sekund, což je přibližně 22 minut.

6.5.3 Stanovení objektivní funkce pro identifikaci součinitele vlhkostní vodivosti

Jelikož optimalizace s přesností 0.035 vykazovala vyšší délky konvergence k hledanému řešení, bylo přistoupeno ke stanovení objektivní funkce, která byla optimalizována. Existoval totiž silný předpoklad, že nalezená řešení pod hodnotou 0.035 budou zároveň nejpřesnějšími z množiny dostupných řešení. Jelikož je objektivní funkce optimalizována pouze na určité

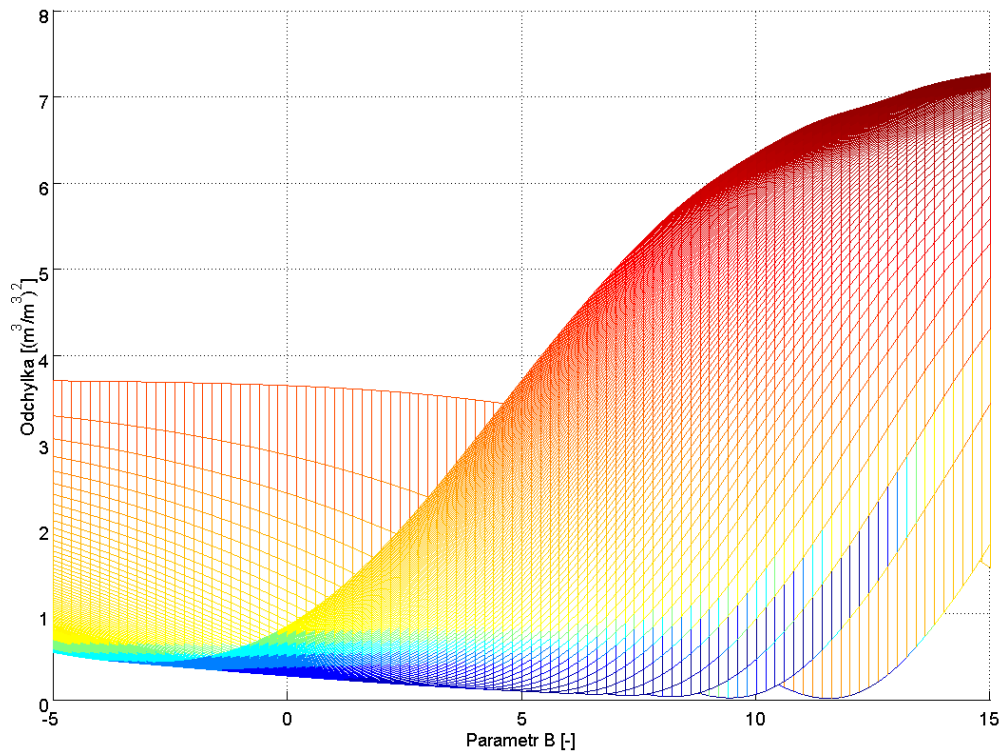
části, definované rozsahem optimalizovaných parametrů, měla by podoba objektivní funkce zároveň odhalit, zda jsou pro optimalizaci zvoleny správné rozsahy parametrů. Např. pokud by na hranicích definičních oborů existoval vysoký gradient, bylo by pravděpodobné, že hledané optimum se nachází mimo zvolený rozsah. Podoba objektivní funkce je znázorněna na *obr. 34*.



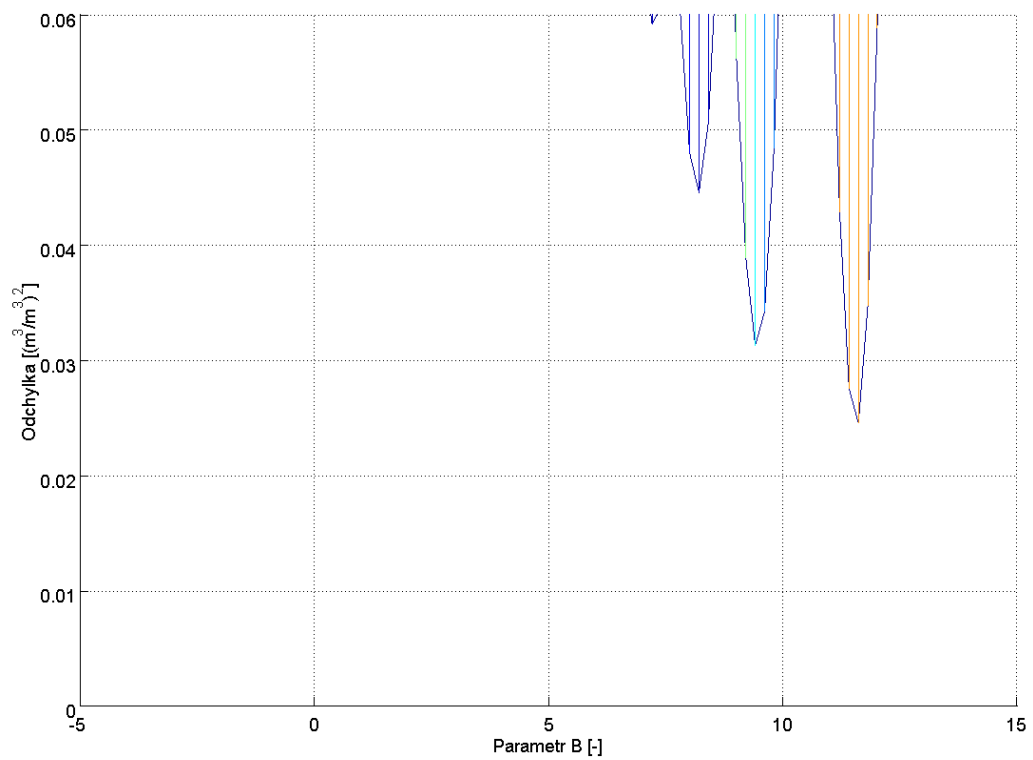
Obr. 34: Objektivní funkce pro optimalizaci součinitele κ

Z *obr. 34* je patrné, že rozsahy hledaných parametrů byly zvoleny správně. Na všech hranicích je totiž funkce rostoucí, tudíž je velmi nepravděpodobné, že by se optimum funkce nacházelo mimo zvolené hranice.

Další otázka se týká globálního minima optimalizované funkce. Při optimalizaci č. 2 byla stanovena maximální přípustná odchylka na hodnotu 0.035, což se projevilo zvýšenou časovou náročností pro nalezení jednoho řešení. Pokud přiblížíme na bod optima, zjistíme, že nejvyšší možná přesnost se pohybuje okolo hodnoty 0.023 (*obr. 34 a 35*). Nejpřesnější řešení optimalizace č. 2 má hodnotu 0.02395 a je tedy velmi blízko.



Obr. 35: Pohled na chybovou funkci z profilu



Obr. 36: Pohled na výřez chybové funkce z profilu

6.6 Další metody optimalizace vedoucí ke zvýšení přesnosti

Veškeré dosavadní optimalizace byly založeny na identifikaci dvou parametrů, definujících průběh exponenciály, která vyjadřuje závislost součinitele vlhkostní vodivosti κ na aktuální vlhkosti materiálu. Otázkou však zůstává, do jaké míry je schopen tento jednoduchý vztah reprezentovat skutečné průběhy součinitele κ .

V současné době nebyl do počítačového programu TRANSMAT implementován žádný jednoduchý matematický vztah, který by lépe popisoval průběh součinitele vlhkostní vodivosti κ . Otázkou také zůstává, zda vůbec nějaký jednoduchý vztah existuje. Při běžných simulacích transportu vlhkosti se tento nedostatek řeší poměrně jednoduše. Součinitel vlhkostní vodivosti je definován pomocí libovolného počtu datových dvojic. Tímto způsobem lze získat funkci libovolného průběhu, aniž by tato křivka měla nějaké analytické vyjádření. Toto řešení je pro běžné simulace velice elegantní, ovšem má svá úskalí, pokud chceme takovouto funkci identifikovat.

Z hlediska optimalizace je totiž klíčový počet parametrů, které se snažíme identifikovat. Některé funkce bývají často definované pomocí 50 – 100 datových dvojic, což je z hlediska optimalizace za využití genetických algoritmů neřešitelné. V praxi je totiž obvyklá horní mez optimalizace maximálně 10 parametrů najednou. Pokud je optimalizovaných hodnot více, výrazně se prodlužuje konvergence algoritmu k hledanému řešení a snižuje se tím schopnost hledané řešení nalézt.

Novou metodou vedoucí ke zvýšení přesnosti genetického algoritmu by tedy mohlo být popsání křivky součinitele vlhkostní vodivosti κ pomocí určitého počtu datových dvojic. Pro upřesnění, datová dvojice představuje souřadnici bodu, který tvoří křivku součinitele vlhkostní vodivosti, tj. $[X, Y]$. X odpovídá vlhkosti materiálu, Y odpovídá hodnotě součinitele κ . Optimalizace by pak mohla probíhat dvěma způsoby:

- a) předem se definují hodnoty X-souřadnic u všech datových dvojic a genetický algoritmus pak hledá pouze Y-souřadnice
- b) předem se definují hodnoty Y-souřadnic u všech datových dvojic a genetický algoritmus pak hledá pouze X-souřadnice

Pokud bychom se měli rozhodnout, kterou z následujících metod použít, je volba celkem prostá. Genetický algoritmus totiž pracuje s náhodnými čísly, která mezi sebou nemají žádnou vazbu. V případě, že bychom se rozhodli pro variantu b) a generovali náhodně X-souřadnice, musela by být v genetickém algoritmu zavedena podmínka, aby každá nově vygenerovaná souřadnice X_i měla vyšší hodnotu než předchozí souřadnice X_{i-1} . Tím by se zajistilo, že datové

dvojice, postupně jak jsou generovány, budou dávat dohromady křivku mající požadovaný průběh. Jinými slovy, každému bodu na ose X bude přiřazena právě jedna hodnota součinitele vlhkostní vodivosti. Jelikož však žádná taková podmínka v genetickém algoritmu zavedena není, bylo rozhodnuto o využití metody a), tj. generování Y-souřadnic.

Pro urychlení konvergence genetického algoritmu je však nutné, aby byla křivka součinitele vlhkostní vodivosti κ popsána co nejmenším počtem datových dvojic. S tímto předpokladem byly spuštěny další dvě optimalizace, u kterých byl definován součinitel vlhkostní vodivosti κ pomocí šesti, resp. devíti datových dvojic. Koncentrace datových bodů byla zhuštěna v místě, kde dochází k nárůstu derivace hledaného součinitele.

6.6.1 Popis nových optimalizací vedoucí ke zvýšení přesnosti

Před spuštěním nových optimalizací č. 3 a č. 4 bylo využito poznatků, které byly získány z předchozí optimalizace č. 2. Protože byl znám relativně kvalitní průběh součinitele vlhkostní vodivosti κ , definovaný pomocí exponenciály, byl tento průběh proložen šesti, resp. devíti body, definovanými pomocí datových dvojic. Rovněž rozsahy hledaných parametrů byly omezeny tak, aby genetický algoritmus negeneroval zbytečně nízké, či naopak zbytečně vysoké hodnoty. Tímto způsobem se podařilo významně snížit časovou náročnost u optimalizace pomocí datových dvojic, která by jinak byla velice vysoká.

Přehled jednotlivých optimalizací je uveden v *tab. 16*.

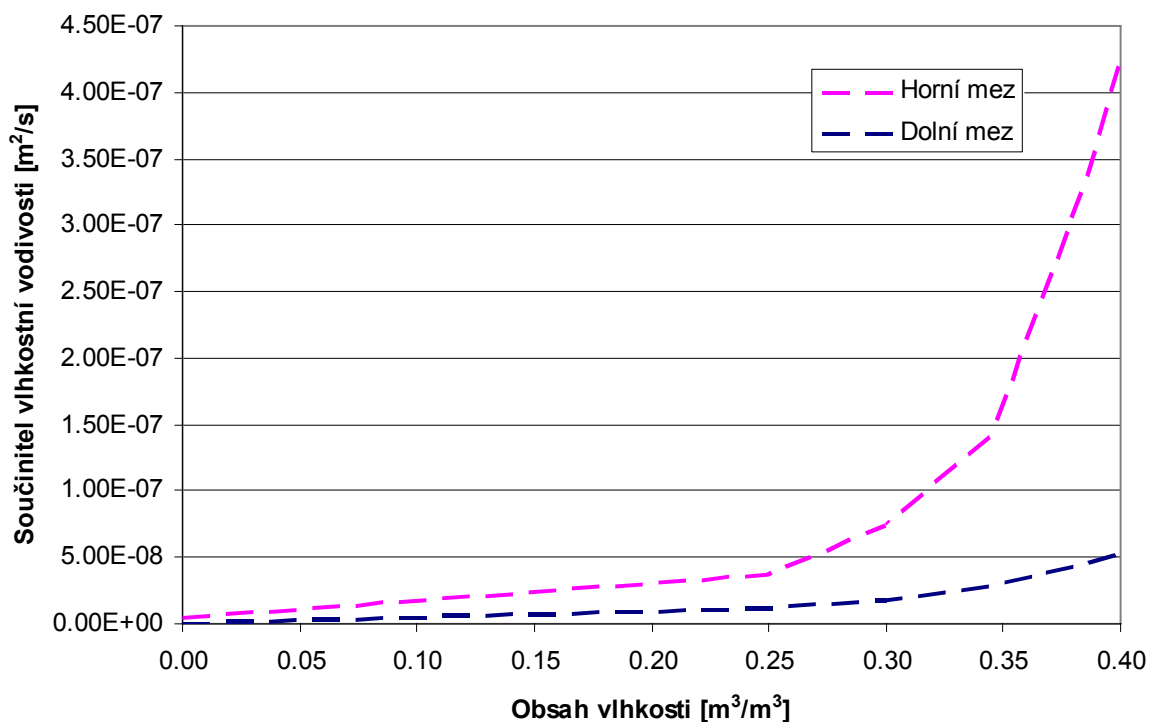
Tab. 16: Optimalizace pomocí datových dvojic

Optimalizace	Přesnost	Popis
č. 3	0.025	součinitel κ definován pomocí šesti datových dvojic
č. 4	0.021	součinitel κ definován pomocí devíti datových dvojic

Výsledky optimalizací jsou prezentovány v kapitolách 6.6.2 a 6.6.3

6.6.2 Nalezená řešení pro optimalizaci č. 3

Cílem optimalizace č. 3 bylo aproximovat hledaný součinitel vlhkostní vodivosti pomocí šesti datových dvojic. Aby se urychlila konvergence k hledanému řešení, byly využity poznatky z optimalizace č. 2 a na základě těchto poznatků byly stanoveny meze optimalizace (viz. *obr. 37*). Přestože se podařilo konvergenci značně urychlit, byla z časových důvodů spuštěna optimalizace pouze 50krát.



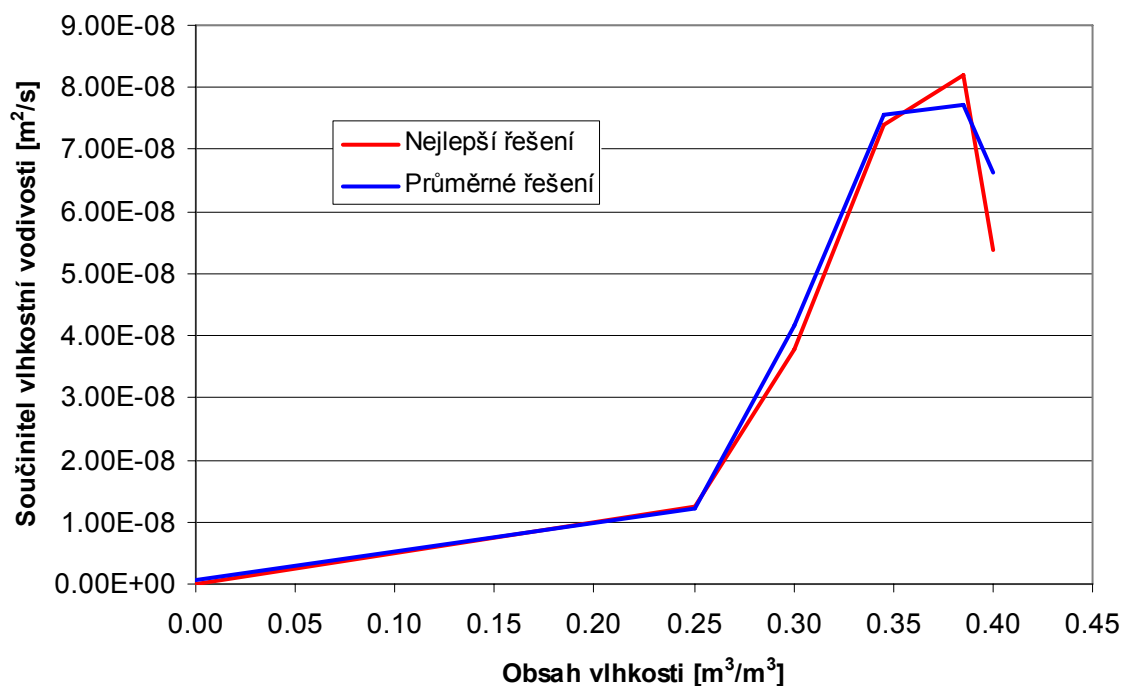
Obr. 37: Meze pro optimalizaci č. 3

V tab. 17 je uvedena statistika dosažených přesností.

Tab. 17: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 3

Přesnost	Dosažené přesnosti		
	min.	max.	průměr
0.025	0.02372	0.02499	0.02456

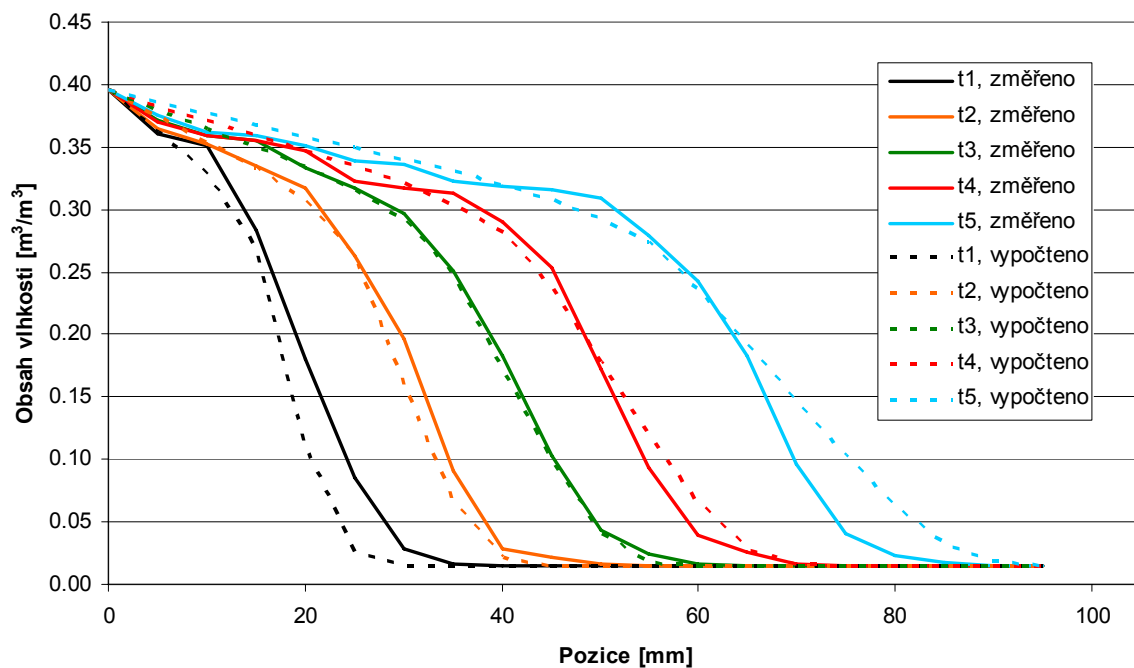
Průběhy nejlepšího a průměrného nalezeného součinitele vlhkostní vodivosti jsou zobrazeny na obr. 38. Opět je patrné, že se tyto průběhy vzájemně liší jen minimálně, což je důkazem, že dosažené přesnosti jsou v rámci definice optimalizace č. 3 téměř nejvyšší možné.



Obr. 38: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 3

Na základě nalezených řešení byly stanoveny vlhkostní profily, které jsou porovnány s referenčním stavem. Na obr. 39 je porovnání výstupů sestavených na základě vstupní průměrné hodnoty součinitele vlhkostní vodivosti κ .

Při prvním pohledu na vykreslené průběhy součinitele κ je trochu matoucí hodnota odpovídající vlhkosti $0.40 \text{ m}^3/\text{m}^3$, jelikož součinitel vlhkostní vodivosti zde klesá. Vysvětlení tohoto jevu je ale jednoduché. Příčinou je fakt, že materiál při simulacích vlhkosti $0.40 \text{ m}^3/\text{m}^3$ nikdy nedosáhl, proto poslední datová dvojice nemá takový vliv na celkové rozložení vlhkosti v materiálu jako ostatní dvojice a genetický algoritmus ji mohl přiřadit víceméně libovolnou hodnotu.

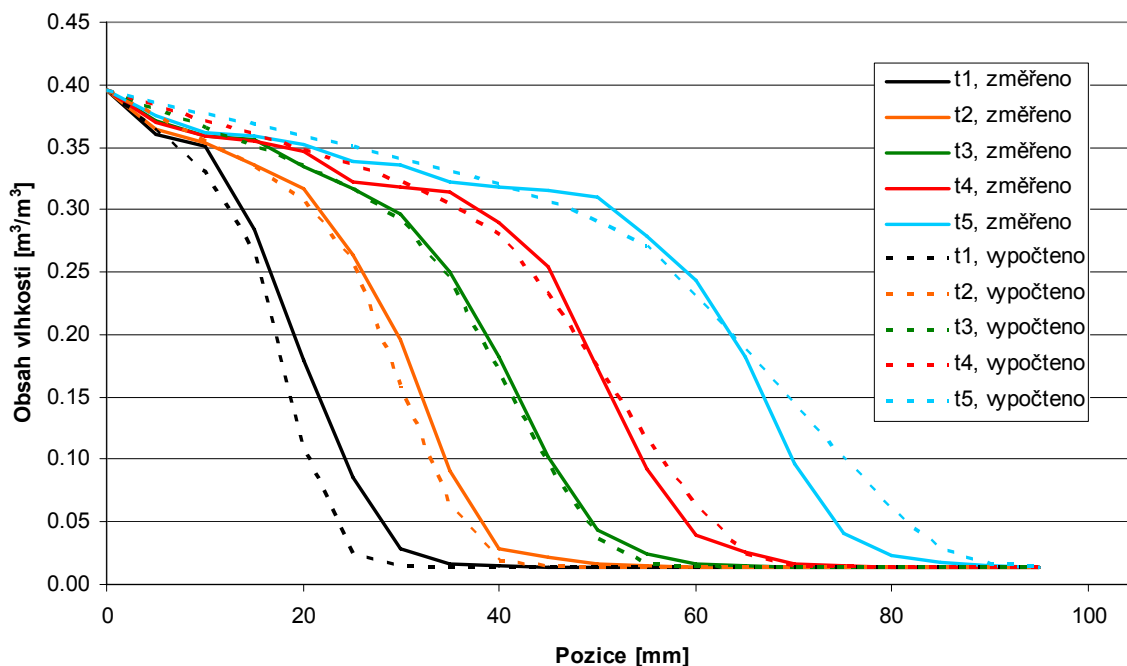


Obr. 39: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 3

Na obr. 40 je zobrazeno vlhkostní pole pro nejpřesnější nalezené řešení v rámci optimalizace č. 3. Toto řešení má odchylku 0.02372 a bylo dosaženo pro datové dvojice uvedené v tab. 18.

Tab. 18: Datové dvojice nejlepšího nalezeného řešení v rámci optimalizace č. 3

X [m^3/m^3]	0.000	0.250	0.300	0.345	0.385	0.400
Y [m^2/s]	$1 \cdot 10^{-10}$	$1.2674 \cdot 10^{-8}$	$3.7724 \cdot 10^{-8}$	$7.4065 \cdot 10^{-8}$	$8.1968 \cdot 10^{-8}$	$5.3700 \cdot 10^{-8}$



Obr. 40: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 3

Celková suma čtverců odchylek na všech výstupech, která je rovna $0.02371 \text{ (m}^3/\text{m}^3)^2$, představuje přibližně stejnou průměrnou odchylku na výstupu, tedy $0.015 \text{ m}^3/\text{m}^3$, čemuž odpovídá 3.9 % plného nasycení vzorku.

Statistika délky konvergence je uvedena v tab. 19.

Tab. 19: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 3

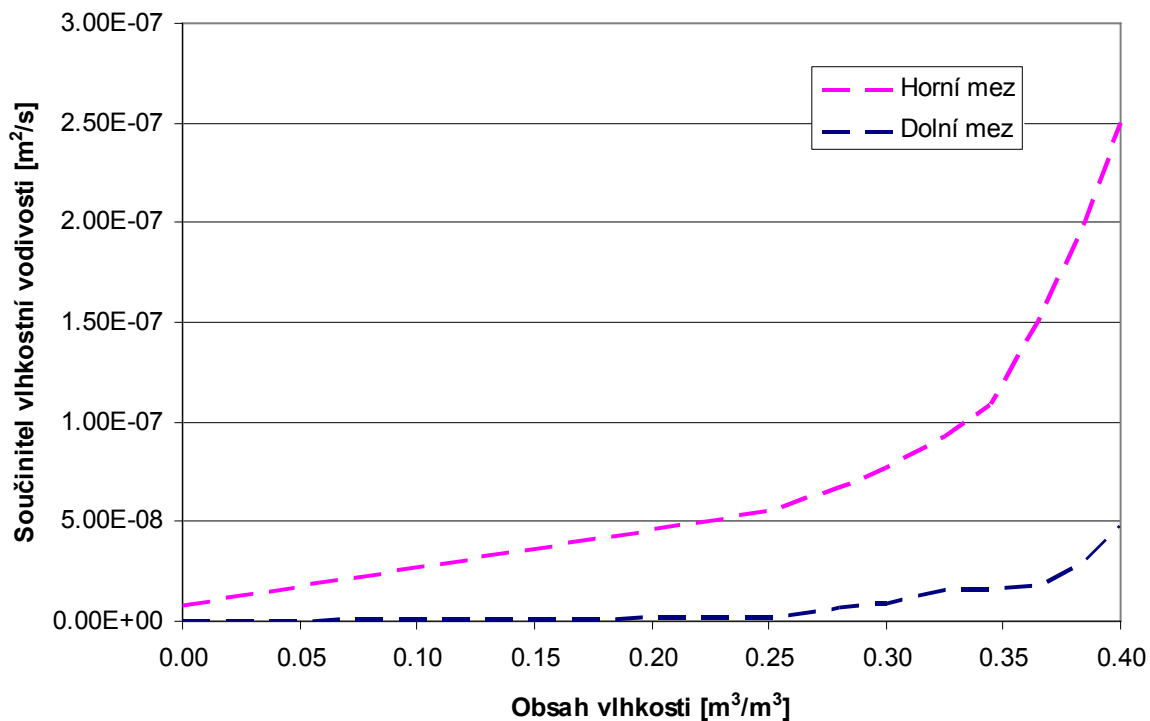
Přesnost	Počet simulací		
	min.	max.	průměr
0.025	360	4680	2426.9

Průměrná doba k nalezení jednoho řešení je tedy přibližně 6 674 sekund, což je přibližně 1 hodina a 51 minut.

6.6.3 Nalezená řešení pro optimalizaci č. 4

Cílem optimalizace č. 4 bylo aproximovat hledaný součinitel vlhkostní vodivosti pomocí devíti datových dvojic. Aby se urychlila konvergence k hledanému řešení, byly opět využity poznatky z optimalizace č. 2 a na základě těchto poznatků byly stanoveny meze optimalizace

(viz. obr. 41). Optimalizace č. 4 byla spuštěna pouze 40krát, jelikož byl výpočet časově velice náročný.



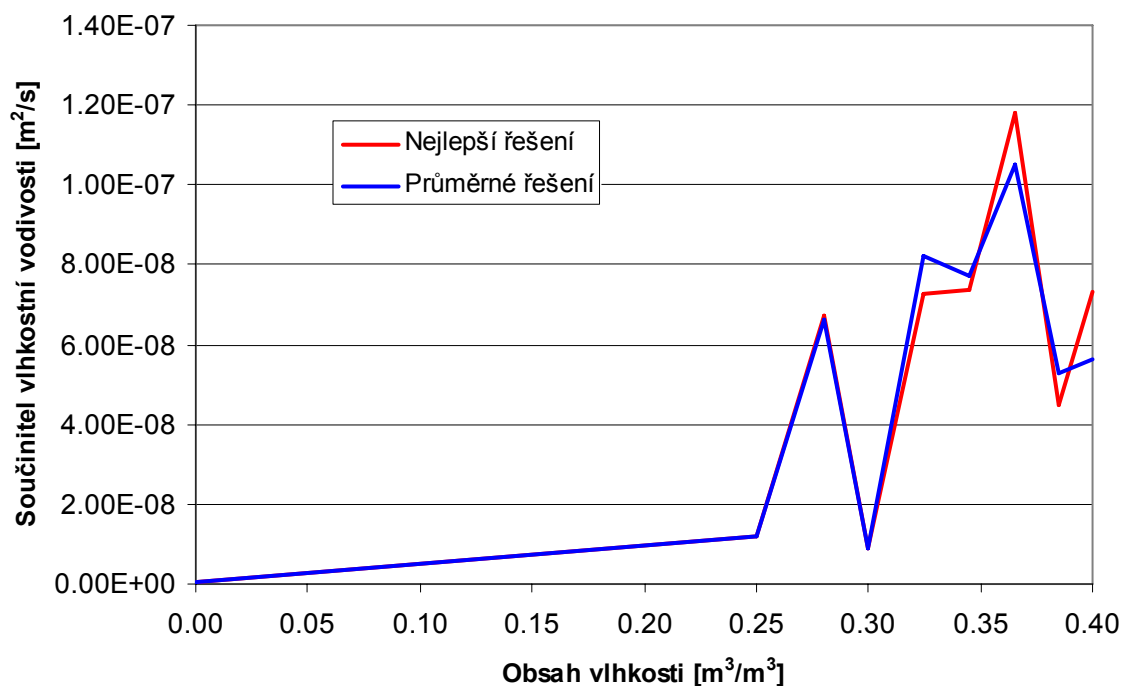
Obr. 41: Meze pro optimalizaci č. 4

V tab. 20 je uvedena statistika dosažených přesností.

Tab. 20: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 4

Přesnost	Dosažené přesnosti		
	min.	max.	průměr
0.021	0.02063	0.02099	0.02091

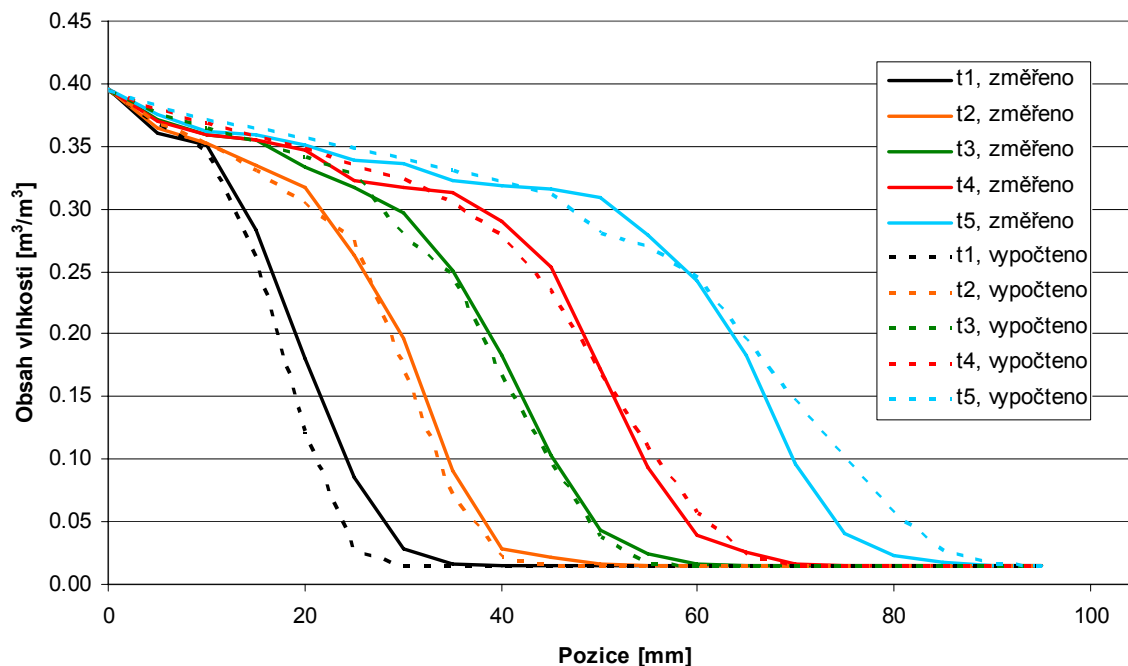
Průběhy nejlepšího a průměrného nalezeného součinitele vlhkostní vodivosti jsou zobrazeny na obr. 42. Opět je patrné, že se tyto průběhy vzájemně liší jen minimálně, což je důkazem, že dosažené přesnosti jsou v rámci definice optimalizace č. 4 jedny z nejvyšších možných.



Obr. 42: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 4

Průběh součinitele vlhkostní vodivosti κ je opět poněkud atypický, jelikož se v něm vyskytuje několik sestupných větví. To je dáno nejspíše chybami měření. Je ale nutné poznamenat, že součinitel κ je hledán jako parametr numerického modelu a proto je nutné respektovat tyto průběhy z matematického hlediska, tedy jako průběhy vykazující největší přesnosti na výstupech.

Na základě nalezených řešení byly stanoveny vlhkostní profily, které jsou porovnány s referenčním stavem. Na obr. 43 je porovnání výstupů sestavených na základě vstupní průměrné hodnoty součinitele vlhkostní vodivosti κ .

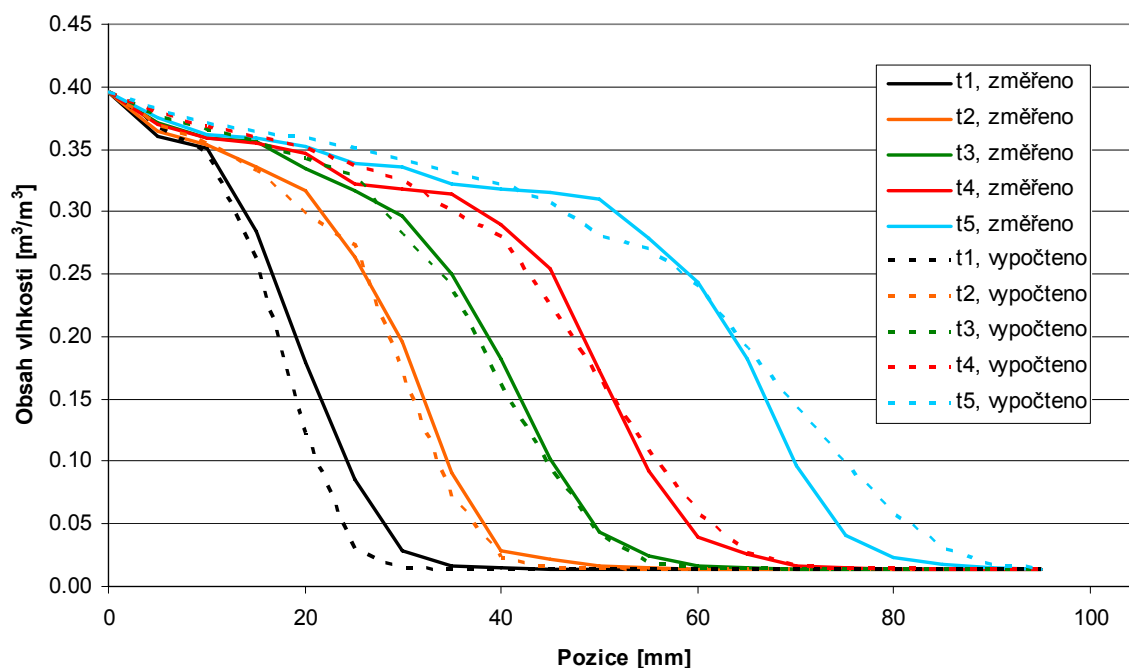


Obr. 43: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 4

Na obr. 44 je zobrazeno vlhkostní pole pro nejpřesnější nalezené řešení v rámci optimalizace č. 4. Toto řešení má odchylku 0.02063 a bylo dosaženo pro datové dvojice uvedené v tab. 21.

Tab. 21: Datové dvojice nejlepšího nalezeného řešení v rámci optimalizace č. 4

X [m ³ /m ³]	0.000	0.250	0.280	0.300	0.325	0.345	0.365	0.385	0.400
Y [m ² /s]	7.436 ·10 ⁻¹⁰	1.188 ·10 ⁻⁸	6.730 ·10 ⁻⁸	8.900 ·10 ⁻⁹	7.266 ·10 ⁻⁸	7.379 ·10 ⁻⁸	1.179 ·10 ⁻⁷	4.471 ·10 ⁻⁸	7.344 ·10 ⁻⁸



Obr. 44: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 4

Celková suma čtverců odchylek na všech výstupech, která je rovna $0.02063 \text{ (m}^3/\text{m}^3)^2$, představuje přibližně stejnou průměrnou odchylku na výstupu, tedy $0.014 \text{ m}^3/\text{m}^3$, čemuž odpovídá 3.6 % plného nasycení vzorku.

Statistika délky konvergence je uvedena v tab. 22.

Tab. 22: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 4

Přesnost	Počet simulací		
	min.	max.	průměr
0.021	2700	15480	7135.4

Průměrná doba k nalezení jednoho řešení je tedy přibližně 19 622 sekund, což je přibližně 5 hodin a 27 minut.

7 Diskuse nad získanými řešeními

Pokud bychom měli shrnout výsledky aplikace genetického algoritmu na reálném experimentu, je třeba vyzdvihnout přesnosti, s jakými se genetickému algoritmu podařilo aproximovat součinitel vlhkostní vodivosti pomocí exponenciály (optimalizace č. 2). Výsledky byly nad očekávání přesné, což je velice pozitivní z hlediska dalších optimalizací.

Aproximace součinitele vlhkostní vodivosti v rámci optimalizace č. 3 (pomocí šesti datových dvojic) umožnila jen nepatrné snížení odchylky oproti optimalizaci č. 2, ovšem za cenu výrazného prodloužení délky optimalizace.

Optimalizace č. 4 přinesla nejpřesnější výsledky, ale opět za cenu výrazného prodloužení délky optimalizace.

Shrnutí výsledků všech optimalizací s výjimkou optimalizace č. 1 je uvedeno v *tab. 23*.

Tab. 23: Vyhodnocení všech optimalizací

	Nejvyšší přesnost	Průměrná doba výpočtu
Optimalizace č. 2	0.02396	1 288 s
Optimalizace č. 3	0.02372	6 674 s
Optimalizace č. 4	0.02063	19 622 s

Pokud bychom vzali jako referenční optimalizaci č. 2 zjistíme, že optimalizace č. 3 přinesla zlepšení přesnosti o 1.0 %, zatímco délka optimalizace stoupla na více než pětinasobek.

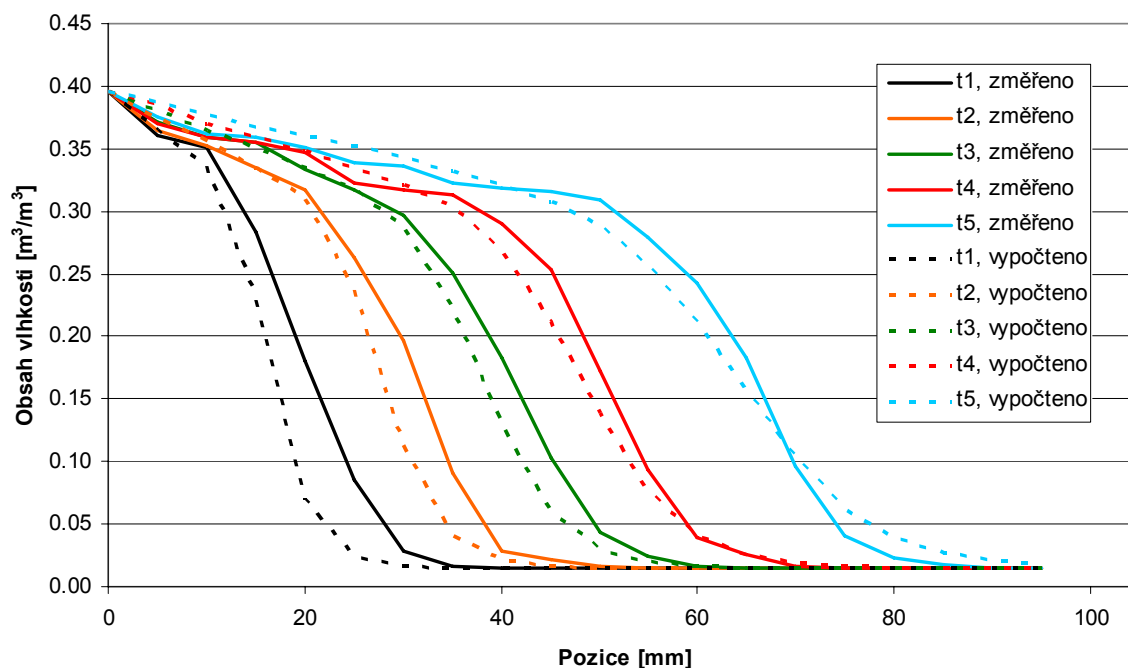
U optimalizace č. 4 je časový nárůst ještě markantnější. Přesnost se sice zlepšila o 13.9 %, ale čas, potřebný k nalezení řešení vzrostl na více než patnáctinasobek. Porovnáním výsledků optimalizace č. 2 a optimalizace č. 4 pouhým okem, však nenajdeme téměř žádné rozdíly.

Zajímavé je rovněž srovnání získaných výsledků s laboratorně naměřenými hodnotami součinitele vlhkostní vodivosti. Tyto hodnoty byly vloženy do numerického modelu, který byl použit při optimalizaci a výstupy byly porovnány s referenčním stavem. Výsledky porovnání jsou uvedeny v *tab. 24*.

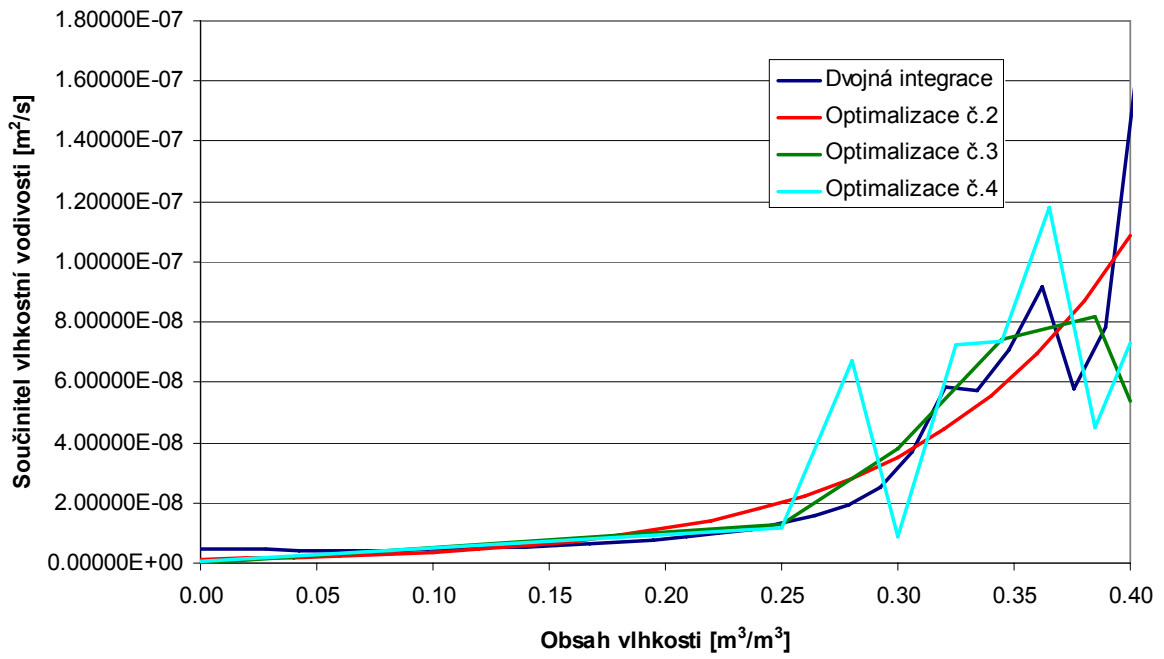
Tab. 24: Porovnání přesností laboratorně zjištěných součinitelů vlhkostní vodivosti

Metoda stanovení	Odchylka
Matanova metoda	2.755
Dvojná integrace	0.044
Diferenční metoda	4.384
Gradientní metoda	2.207

Pokud bychom tedy porovnávali vstupní parametry reálného experimentu se vstupními parametry numerického modelu, obstála by nejlépe metoda dvojně integrace. Vlhkostní pole stanovené na základě této křivky je na obr. 45. Avšak ani tato metoda stanovení vstupního součinitele vlhkostní vodivosti nakonec nedosahuje tak přesných výsledků na výstupu, jakých dosahují vstupy zjištěné optimalizací pomocí genetického algoritmu.


 Obr. 45: Vlhkostní pole pro součinitel vlhkostní vodivosti k , stanovený metodou dvojně integrace

Pro názornost jsou nejlepší křivky, stanovené v rámci všech uskutečněných optimalizací, uvedeny na obr. 46. Laboratorní měření zde zastupuje křivka stanovená pomocí dvojně integrace.



Obr. 46: Porovnání nalezených řešení s laboratorně naměřenými daty

8 Závěr

Závěrem práce bych rád shrnul veškeré získané poznatky a to s ohledem k vytyčeným cílům a dále nastínil možný směr, kterým se může inverzní analýza transportních procesů ubírat.

Problematika využití inverzní analýzy při řešení transportních jevů v materiálech byla důkladně analyzována v kapitole 4. V této kapitole je vysvětleno, proč má inverzní analýza uplatnění v otázce transportních procesů. Zároveň je v kapitole 5.3 v logickém sledu vybrán vhodný způsob inverzní analýzy pro zpětné určení vstupních parametrů materiálového modelu, kterým jsou genetické algoritmy.

Správnost implementace genetického algoritmu do současných výpočetních nástrojů na Katedře materiálového inženýrství a chemie se podařilo prokázat v kapitole 5. Genetický algoritmus byl aplikován na teoretický experiment a v rámci této aplikace bylo dosaženo výsledků s obrovskou přesností. To bylo dáno jednak tím, že byl vstupní parametr, tj. součinitel vlhkostní vodivosti, definován jednoduše pomocí dvou parametrů. Hlavní příčinou však bylo záměrné nezapojení fyzického experimentu. Hledané výstupy tedy byly výstupy numerického modelu a pomocí stejného numerického modelu pak probíhala inverzní analýza. Proto bylo předem jasné, že hledané řešení musí existovat a pouze nesprávná funkčnost či nesprávná implementace genetického algoritmu mohla zabránit toto řešení nalézt.

Velice pozitivně lze shrnout aplikaci genetického algoritmu na reálném experimentu v kapitole 6. Největším úskalím této aplikace byla kvalita a přesnost vstupních dat naměřených laboratorně. I s tímto problémem se však genetický algoritmus dokázal vypořádat a našel velmi kvalitní řešení. Příjemným poznatkem jsou výsledky dosažené v rámci jednoduché aproximace součinitele vlhkostní vodivosti κ pomocí exponenciály. Pokud se prokáže, že takto lze aproximovat součinitele vlhkostní vodivosti nejen u pórobetonu, urychlí se tím optimalizace i u ostatních materiálů. Poněkud překvapivě však dopadly optimalizace pomocí datových dvojic, u kterých se očekávaly mnohem vyšší přesnosti. Bohužel současné hardwarové kapacity nejsou schopny pojmout náročnější optimalizace, které identifikují více než deset parametrů. Proto není možné aproximovat skutečné průběhy součinitele vlhkostní vodivosti přesněji a zřejmě i to je důvodem, proč z hlediska poměru přesnost/délka optimalizace nejlépe obstála optimalizace č. 2. Z hlediska přesnosti dopadla nejlépe optimalizace č. 4.

Inverzní analýza transportních procesů v materiálech má zcela jistě svou perspektivu i v budoucnu. Jedním z důvodů je vysoké tempo vývoje nového hardwaru, díky kterému bude čím dál více možné spouštět náročnější optimalizace. Druhým z faktorů jsou například nové technologie a znalosti. Příkladem může být neustále se rozvíjející genetické programování, jehož výsledky už v mnohých oblastech překonaly hranice lidské inteligence [17]. Genetické programování je optimalizační metoda, při níž počítač vytváří svůj vlastní zdrojový kód a vytváří tak nové a lepší algoritmy. Pokud by se podařilo zavést genetické programování do inverzní analýzy transportních procesů, mohli bychom např. definovat analyticky složité průběhy součinitele vlhkostní vodivosti, což by mělo za následek mnohem přesnější optimalizace.

Literatura

- [1] Holland, J. H.: *Adaptation in natural and artificial systems*. Internal report. Ann Arbor, MI: University of Michigan; 1975
- [2] Goldberg, E. D.: *Genetic algorithms in search, optimization and machine learning*. Reading, MA: Addison-Wesley; 1989
- [3] Michalewicz, Z.: *Genetic algorithms + data structures = evolution programs*, 3rd ed. Berlin: Springer; 1996.
- [4] Grefenstette, J.: Genetic algorithms and their applications. In *Grefenstette J, editor. Proceedings of the Second International Conference on Genetic Algorithms and their Applications*. London: Lawrence Erlbaum; 1987.
- [5] Lepš, M., Šejnoha, M.: New approach to optimization of reinforced concrete beams. In *Computers & Structures*, 2003; 81(18 – 19), 1957 - 1966
- [6] Matouš, K., Lepš, M., Zeman, J., Šejnoha, M.: Applying genetic algorithms to selected topics commonly encountered in engineering practise. In *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2000. 190(13 – 14): 1629 – 50.
- [7] Drchalová, J., Pavlík, Z., Černý, R.: A comparison of Various Techniques for Determination of Moisture Diffusivity from Moisture Profiles. *Inženýrská mechanika*, 2002. vol. 9, no. 1/2, p. 31-41.
- [8] Künzeli, H.: *Simultaneous Heat and Moisture Transport in Building Components: One- and Two-dimensional Calculation Using Simple Parameters*. Stuttgart: IRB Verlag, 1995.
- [9] Kočí, J.: *Teplotně-vlhkostní poměry v obvodovém plášti na bázi lité sádry*, Bakalářská práce, Fakulta stavební ČVUT v Praze, 2007.
- [10] Tesárek, P., Maděra, J., Černý, R., Kočí, J.: Calibration and Verification of a Heat and Moisture Transport Using a Pilot-Scale Experiment. *Proceeding of the 2nd Conference on Experimental and Computational Method for Directed Design and Assessment of Functional Properties of Building Materials in honour of the 50th birthday of R.Cerny*. Prague: Czech Technical University, 2008, vol. 1, p. 63-71.
- [11] Maděra, J., Černý, R. (2005). *TRANSMAT – a Computer Simulation Tool for Modeling Coupled Heat and Moisture Transport in Building Materials*. Proceedings of Workshop 2005 – Part A, B. Prague: CTU, 2005, p. 470-471
- [12] Mahfoud, S. W.: *Niching methods for genetic algorithms*. PhD thesis, 1995. University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, IL, USA.
- [13] Iacono, C., Sluys, L. J., van Mier, J. G. M.: Estimation of model parameters in nonlocal damage theories by inverse analysis techniques. In *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2006. 195(52):7211 – 7222.
- [14] Mahnken, R. and Stein, E.: Parameter identification for viscoplastic models based on analytical derivatives of a least-squares functional and stability investigations. In *International Journal of Plasticity*, 1996. 12(4):451 - 479
- [15] Maier, G., Bocciarelli, M., Bolzon, G., Fedele, R.: Inverse analyses in fracture mechanics. In *International Journal of Fracture*, 2006. 138:47 – 73.

- [16] Kučerová, A., Lepš, M., Zeman, J.: *Applying genetic algorithms to several problems of engineering practice*. In Bugeda, G., Désidéri, J.-A., Périaux, J., Schoenauer, M., and Winter, G., editors, *Evolutionary Methods for Design, Optimization and Control: Applications to Industrial and Societal Problems*, Eurogen 2003, pages 126-127. International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), 2003.
- [17] Koza, John R., Keane, Martin A., Streeter, Matthew J., Mydlowec, William, Yu, Jessen, and Lanza, Guido. 2003. *Genetic Programming IV: Routine Human-Competitive Machine Intelligence*. Kluwer Academic Publishers. ISBN 1-4020-7446-8.
- [18] Kučerová, A.: *Identification of nonlinear mechanical model parameters based on softcomputing methods*. PhD thesis, Ecole Normale Supérieure de Cachan, 2007.
- [19] Hrstka, O., Kučerová, A.: Improvements of real coded genetic algorithms based on differential operators preventing the premature convergence. In *Advances in Engineering Software*, 2004. 35(3-4):237-246
- [20] Hrstka, O., Kučerová, A.: Searching for optimization method on multidimensional real domains. In *Contributions to Mechanics of Materials and Structures*, 2000, volume 4 of CTU Reports, pages 87 – 104. Czech Technical University in Prague.
- [21] Hrstka, O. (WWW). Homepage of SADE.
<http://klobouk.fsv.cvut.cz/~ondra/sade/sade.html>.
- [22] Kučerová, A., Lepš, M., and Zeman, J.: Back Analysis of microplane model parameters using soft computing methods. *CAMES: Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, 2007. 14(2): 219-242
- [23] Ibrahimbegović, A., Knopf-Lenoir, C., Kučerová, A., Villon, P.: Optimal design and optimal control of structures undergoing finite rotations and elastic deformations. In *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2004. 61(14):2428-2460
- [24] Hrstka, O., Kučerová, A., Lepš, M., Zeman, J.: A competitive comparison of different types of evolutionary algorithms. *Computers & Structures*, 2003. 81(18-19):1979-1990.
- [25] Matano, C. 1933. *On the Relation between the Diffusion Coefficient and Concentration of Solid Metals*. Jap. J. Phys., Vol. 8, pp. 109-113.
- [26] Kašpar, I.: *Moisture transport in Building Materials*. DSc. Thesis, 1984. ČVUT Praha, Praha.
- [27] Černý, R., Toman, J.: A Difference Method for Determining the Thermal Conductivity of Porous Materials in a Wide Temperature Range. *High Temp.-High Press.*, 1997. Vol. 29, pp. 51-57
- [28] Drchalová, J.: *A Transient Method for Determination of Moisture Diffusivity*. PhD thesis, 1983. ČVUT Praha, Praha.
- [29] Drchalová, J., Černý, R.: Non-Steady-State Methods for Determining the Moisture Diffusivity of Porous Materials. In *Int. Comm. In Heat and Mass Transfer*, 1998. Vol. 25, pp. 109-116.
- [30] Pavlík, Z., Tesárek, P., Jiříčková, M., Černý, R.: A comparison of Capacitance and TDR Techniques for Determination of Moisture Profiles in Building Materials. *Monitoring and Modelling the Properties of Soil as Porous Medium: the Role of Soil*, 2005. Use. Lublin: Institute of Agrophysics in Lublin, Polish Academy of Sciences, pp. 23 - 25

- [31] Grunewald, J.: *DELPHIN 4.1 – Documentation, Theoretical Fundamentals*, Dresden: TU Dresden, 2000, p. 43

Seznam obrázků

Obr. 1: Geometrický význam operátoru crossing-over	16
Obr. 2: Schéma experimentu pro stanovení součinitele vlhkostní vodivosti	19
Obr. 3: Schéma experimentu	27
Obr. 4: Referenční podélné profily ve vybraných časech	28
Obr. 5: Součinitel vlhkostní vodivosti sádry	29
Obr. 6: Referenční součinitel vlhkostní vodivosti cihly	30
Obr. 7: Chybová funkce pro výstup v jednom čase (7a) a ve třech časech (7b)	32
Obr. 8: Chybová funkce pro výstupy v pěti časech (vlevo)	32
Obr. 9: Pohled na chybovou funkci ve směru hlavního údolí	33
Obr. 10: Pohled na chybovou funkci z profilu	34
Obr. 11: Celkový pohled na výřez chybové funkce	35
Obr. 12: Pohled z profilu na výřez chybové funkce	35
Obr. 13: Pohled na výřez chybové funkce z profilu při zvětšeném měřítku	36
Obr. 14: Nalezená řešení s přesností $1 \cdot 10^{-2}$	38
Obr. 15: Nalezená řešení s přesností $1 \cdot 10^{-6}$	39
Obr. 16: Nalezená řešení s přesností $5 \cdot 10^{-6}$	40
Obr. 17: Porovnání testovacích fází s různými přesnostmi	41
Obr. 18: Závislost mezi přesností genetického algoritmu a dobou optimalizace	42
Obr. 19: Přehled nalezených křivek součinitelů vlhkostní vodivosti pro různé přesnosti genetického algoritmu	43
Obr. 20: Podélné vlhkostní profily v čase $t = 36\ 000$ s (10 hodin)	44
Obr. 21: Odchytky jednotlivých vlhkostních profilů od referenčního profilu v čase $t = 14\ 400$ s	45
Obr. 22: Odchytky jednotlivých vlhkostních profilů od referenčního profilu v čase $t = 36\ 000$ s	45
Obr. 23: Schéma experimentu pro měření součinitele vlhkostní vodivosti	47
Obr. 24: Zjištěné vlhkostní profily ve vybraných časech	48
Obr. 25: Součinitele vlhkostní vodivosti κ stanovené různými metodami	49
Obr. 26: Nalezená řešení pro optimalizaci č. 1	53
Obr. 27: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 1	54

Obr. 28: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 1	55
Obr. 29: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 1	56
Obr. 30: Nalezená řešení pro optimalizaci č. 2	57
Obr. 31: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 2	58
Obr. 32: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 2	59
Obr. 33: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 2	60
Obr. 34: Objektivní funkce pro optimalizaci součinitele κ	61
Obr. 35: Pohled na chybovou funkci z profilu	62
Obr. 36: Pohled na výřez chybové funkce z profilu	62
Obr. 37: Meze pro optimalizaci č. 3	65
Obr. 38: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 3	66
Obr. 39: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 3	67
Obr. 40: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 3	68
Obr. 41: Meze pro optimalizaci č. 4	69
Obr. 42: Průběhy nalezených součinitelů vlhkostní vodivosti pro optimalizaci č. 4	70
Obr. 43: Vlhkostní pole pro průměrnou hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 4	71
Obr. 44: Vlhkostní pole pro nejlepší hodnotu součinitele vlhkostní vodivosti nalezenou při optimalizaci č. 4	72
Obr. 45: Vlhkostní pole pro součinitel vlhkostní vodivosti k , stanovený metodou dvojně integrace	74
Obr. 46: Porovnání nalezených řešení s laboratorně naměřenými daty	75

Seznam tabulek

Tab. 1: Nastavení algoritmu GRADE	17
Tab. 2: Základní materiálové parametry cihly	27
Tab. 3: Statistika nalezených řešení s přesností $1 \cdot 10^{-8}$	38
Tab. 4: Statistika nalezených řešení s přesností $1 \cdot 10^{-6}$	39
Tab. 5: Statistika nalezených řešení s přesností $5 \cdot 10^{-8}$	40
Tab. 6: Statistické vyhodnocení testovacích fází genetického algoritmu	41
Tab. 7: Statistické vyhodnocení odchylek podélných profilů nalezených v jednotlivých fázích	46
Tab. 8: Základní materiálové parametry použité pro optimalizaci součinitele vlhkostní vodivosti pórobetonu.....	48
Tab. 9: Přehled uskutečněných optimalizací.....	52
Tab. 10: Statistika nalezených řešení pro optimalizaci č. 1	53
Tab. 11: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 1.....	54
Tab. 12: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 1	56
Tab. 13: Statistika nalezených řešení pro optimalizaci č. 2	57
Tab. 14: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 2.....	58
Tab. 15: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 2	60
Tab. 16: Optimalizace pomocí datových dvojic.....	64
Tab. 17: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 3.....	65
Tab. 18: Datové dvojice nejlepšího nalezeného řešení v rámci optimalizace č.3	67
Tab. 19: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 3	68
Tab. 20: Statistika dosažených přesností pro optimalizaci č. 4.....	69
Tab. 21: Datové dvojice nejlepšího nalezeného řešení v rámci optimalizace č.4.....	71
Tab. 22: Statistika délky konvergence pro optimalizaci č. 4	72
Tab. 23: Vyhodnocení všech optimalizací	73
Tab. 24: Porovnání přesností laboratorně zjištěných součinitelů vlhkostní vodivosti.....	74