

F-BERG, TECHNICKÁ UNIVERZITA V KOŠICIACH

Ústav riadenia a informatizácie výrobných procesov

**Výskum nepriameho merania teploty a uhlíka v procese
skujňovania**

(zmluva o dielo č. P-101-0030/17)

Riešiteľský kolektív:

Za zhotoviteľa:

doc. Ing. Marek Laciak, PhD.

(vedúci riešiteľ projektu)

prof. Ing. Ivo Petrás, DrSc.

prof. Ing. Ján Terpák, CSc.

doc. Ing. Ján Kačur, PhD.

doc. Ing. Patrik Flegner, PhD.

Ing. Milan Durdán, PhD.

Za objednávateľa:

Ing. Gabriel Tréfa, PhD., MBA

OBSAH:

Zoznam tabuliek:	4
Zoznam obrázkov:	4
Úvod	6
1. Analýza procesu skujňovania v konvertore	7
1.1 Štruktúra a popis meraných dát	7
1.2 Základné štatistické ukazovatele	12
1.3 Analýza závislosti jednotlivých veličín	15
2. Návrh metód riešenia	19
2.1 Nepriame meranie uhlíka	19
2.1.1 Bilančný model uhlíka	19
2.1.1.1 Vstupy a výstupy	19
2.1.1.2 Bilancia uhlíka	19
2.1.1.3 Dosiahnuté výsledky	22
2.1.2 Model uhlíka na báze Learning machine method	24
2.1.2.1 Support Vector Machines (SVMs)	27
2.1.2.2 Support Vector Regression (SVR)	28
2.1.2.3 Dosiahnuté výsledky	32
2.2 Nepriame meranie teploty	38
2.2.1 Teplotný bilančný model	38
2.2.1.1 Vstupy a výstupy	38
2.2.1.2 Procesy	39
2.2.1.3 Materiálová bilancia	41
2.2.1.4 Tepelná bilancia	42
2.2.1.5 Implementácia	44
2.2.1.6 Dosiahnuté výsledky	45
2.2.2 Regresný model pre nepriame meranie teploty	46
2.2.2.1 Štruktúra regresných modelov	48
2.2.2.2 Dosiahnuté výsledky	48
2.2.2.3 Zmena štruktúry modelov M1 a M4	53
2.2.3 Model teploty na báze Learning machine method	56
2.2.3.1 Dosiahnuté výsledky	58
2.2.4 Termodynamický model teploty	62

2.2.4.1	Algoritmus termodynamického modelu teploty	66
2.3	Komplexný deterministický model pre nepriame meranie teploty a uhlíka	69
2.3.1	Model oxidácie uhlíka	69
2.3.2	Teplotný model.....	73
Záver	75	
Použitá literatúra	77	

Zoznam tabuliek:

- Tab. 1. Štruktúra statických dát z procesu skujčovania
Tab. 2. Štruktúra dynamických dát z procesu skujčovania
Tab. 3. Štatistické charakteristiky statických dát - I
Tab. 4. Štatistické charakteristiky statických dát - II
Tab. 5. Štatistické charakteristiky statických dát pre akost 684 - I
Tab. 6. Štatistické charakteristiky statických dát pre akost 684 - II
Tab. 7. Obsah uhlíka v jednotlivých položkách šrotu
Tab. 8. Materiálová bilancia tavby číslo 47108
Tab. 9. Tepelná bilancia tavby číslo 47108
Tab. 10. Výsledky regresných modelov pre variant I
Tab. 11. Výsledky regresných modelov pre variant II
Tab. 12. Výsledky regresných modelov M5 a M6
Tab. 13. Bilancia atómov

Zoznam obrázkov:

- Obr. 1. Histogram akostí tavieb
Obr. 2. Histogramy pre vybrané merané veličiny procesu skujčovania
Obr. 3. Regresné závislosti vybraných veličín na T_SKUT a C_SKUT pre všetky tavby
Obr. 4. Regresné závislosti vybraných veličín na T_SKUT a C_SKUT pre tavby akosti 684
Obr. 5. Regresné závislosti vybraných veličín na T_SUZE, a HM_SUZE pre všetky tavby
Obr. 6. Regresné závislosti vybraných veličín na T_SUZE, a HM_SUZE pre tavby akosti 684
Obr. 7. Regresné závislosti ΔC na O2_SKUT a na O2_TRVANIE pre tavby akosti 684
Obr. 8. Regresné závislosti ΔT na O2_SKUT a na O2_TRVANIE pre tavby akosti 684
Obr. 9. Regresná závislosť $\Delta T(^{\circ}C)$ a $\Delta C(\%)$ pre tavby akosti 684
Obr. 10. Regresná závislosť koncentrácie resp. hmotnosti uhlíka v suze na objeme kyslíka
Obr. 11. Regresná závislosť hmotnosti C, Si, Mn, P, S v suze na objeme kyslíka
Obr. 12. Algoritmus bilančného modelu uhlíka
Obr. 13. Priekopy a koncentrácia pre tavbu číslo 48873
Obr. 14. Korigované priekopy a koncentrácia pre tavbu číslo 48873
Obr. 15. Koncentrácia uhlíka a rýchlosť oduhlíčenia pre tavbu číslo 48873
Obr. 16. Koncentrácia uhlíka pre analyzované tavby
Obr. 17. Zhluk počiatočných a koncových meraných koncentrácií uhlíka z databázy statických dát interpretovaný ako „časový rad“ resp. postupnosť tavieb
Obr. 18. Závislosť počiatočných a koncových meraných koncentrácií uhlíka v tavenine na koncentrácií CO a CO₂
Obr. 19. Závislosť počiatočnej a koncovej meranej teploty taveniny na meranej teplote spalín
Obr. 20. Schéma SVR s použitím ϵ -insenzitívnej stratovej funkcie.
Obr. 21. Hore - Meraná koncentrácia uhlíka (počiatočná aj koncová) z postupnosti tavieb, Dole – Simulovaná (predikovaná) koncentrácia uhlíka na tréningových pozorovaniach
Obr. 22. Výsledok učenia „fittovania“ modelu t.j. porovnanie meranej a simulovanej (predikcia) koncentrácie uhlíka pre postupnosť tavieb
Obr. 23. Merané dynamické veličiny pre tavbu 47095 ako vstupné pozorovania na výpočet predikcie

- Obr. 24. Priebeh simulovanej koncentrácie uhlíka (predikcia), z tavby 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 0,288)
- Obr. 25. Priebeh simulovanej koncentrácie uhlíka (predikcia), z tavby 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 0,088).
- Obr. 26. Merané dynamické veličiny pre tavbu 47105 ako vstupné pozorovania na výpočet predikcie
- Obr. 27. Priebeh simulovanej koncentrácie uhlíka (predikcia) počas tavby 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 0,301).
- Obr. 28. Priebeh simulovanej koncentrácie uhlíka (predikcia) z tavby 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 0,151).
- Obr. 29. Vstupy a výstupy kyslíkového konvertora
- Obr. 30. Schéma bilancie chemických prvkov a zlúčenín
- Obr. 31. Schéma materiálovej bilancie
- Obr. 32. Schéma tepelnej bilancie
- Obr. 33. Algoritmus materiálovej bilancie
- Obr. 34. Algoritmus tepelnej bilancie
- Obr. 35. Vstupy regresného modelu
- Obr. 36. Priebeh nepriamo meraných teplôt podľa M1 a M4 pre variant I
- Obr. 37. Priebeh koncentrácie CO, CO₂, O₂ v spalinách a teplota spalín pre tavbu 46888
- Obr. 38. Priebeh nepriamo meraných teplôt regresných modelov pre tavbu 46888 – variant I
- Obr. 39. Histogram presnosti modelu M4 pre variant I
- Obr. 40. Priebeh nepriamo meraných teplôt podľa M1 a M4 pre variant II
- Obr. 41. Priebeh nepriamo meraných teplôt regresných modelov pre tavbu 46888 – variant II
- Obr. 42. Histogram presnosti modelu M4 pre variant II
- Obr. 43. Priebeh koncentrácie CO a kumulatívnej koncentrácie CO (kk_CO) v spalinách
- Obr. 44. Priebeh nepriamo meraných teplôt podľa modelov M5 a M6 pre 20 taviel
- Obr. 45. Priebeh nepriamo meraných teplôt regresných modelov M5 a M6 pre tavbu 46888
- Obr. 46. Zhluk počiatočných a koncových meraných teplôt taveniny z databázy statických dát interpretovaný ako „časový rad“ resp. postupnosť taviel
- Obr. 47. Závislosť počiatočných a koncových meraných teplôt na koncentrácií CO a CO₂
- Obr. 48. Závislosť počiatočnej a koncovej meranej teploty taveniny na meranej teplote spalín
- Obr. 49. Hore - Meraná teplota (počiatočná aj koncová) z postupnosti taviel, Dole – odpovedajúca simulovaná (predikovaná) teplota na tréningových pozorovaniach
- Obr. 50. Výsledok učenia „fittovania“ modelu t.j. porovnanie meranej a simulovanej (predikcia) teploty postupnosti taviel
- Obr. 51. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 3 °C)
- Obr. 52. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 14 °C)
- Obr. 53. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 19 °C)
- Obr. 54. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 24°C)

Úvod

Predložená správa zahŕňa návrh metód pre riešenie skúmaného problému, ktorým je nepriame meranie teploty taveniny a obsahu uhlíka v tavenine v priebehu tavby. Je výstupom 1. etapy riešenia projektu s názvom „*Výskum nepriameho merania teploty a uhlíka v procese skujňovania*“. V rámci tejto etapy boli skúmané nasledovné metódy a prístupy k riešeniu:

- Bilančný model pre nepriame meranie teploty a uhlíka
- Modely nepriameho merania na báze Learning machine method
- Deterministický prístup
- Regresné modely

1. Analýza procesu skujňovania v konvertore

Analýza procesu skujňovania v konvertore bola zameraná na analýzu a popis nameraných procesných dát, základné štatistické ukazovatele nameraných dát a analýzu závislostí medzi jednotlivými veličinami.

1.1 Štruktúra a popis meraných dát

Namerané dátá z procesu skujňovania v konvertore môžeme rozdeliť na:

- statické dátá
- dynamické dátá

Statické dátá sú dátá, ktoré „prichádzajú“ len raz v priebehu tavby. Sú to dátá na začiatku tavby (napr. číslo akostí, hmotnosť a zloženie surového železa, požadované percentuálne chem. zloženie v oceli, a pod.), na konci tavby (napr. teplota ocele nameraná, namerané percentuálne chem. zloženie ocele, a pod.) a niektoré statické dátá môžu byť namerané aj v priebehu procesu (množstvo troskotvorných prísad). Ich označenie, štruktúra a popis je uvedený v Tab. 1.

Tab. 1. Štruktúra statických dát z procesu skujňovania

Stípec	Premenná	Jednotka	Popis
A	STEELSHOP	-	číslo oceliarne (všetky sú 2)
B	HEATSTEP	-	číslo tavby korporátne (6 miestne číslo)
C	HEATNO	-	číslo tavby (5 miestne číslo, napr. 47096)
D	PLANT	-	číslo konvertora (napr. 4)
E	RELEASE_TIME	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas (napr. 2.8.2017 2:46)
F	HEAT_TIME	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas (napr. 1.8.2017 20:07)
G	MET_HEAT_DATE	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas (napr. 1.8.2017 0:00)
H	AKOST	-	číslo akostí (1 až 3 miestne číslo, napr. 684)
I	SUPER_GRADE	-	č. akostí korp. (2ab.+2čís. znaky, napr. NA09)
J	ZMENA	-	zmena (napr. A, B, C, D, E)
K	TAVIC	-	číslo taviča (3 miestne číslo, napr. 606)
L	T_MOD_1VKK	°C	teplota ocele podľa predpisu
M	T_SET_1VKK	°C	teplota ocele nastavená operátorom
N	T_VYP_MOD	°C	teplota ocele vypočítaná modelom
O	T_SKUT_1VKK	°C	teplota ocele skutočná nameraná
P	TEMPLOSS	???	tepelné straty podľa modelu
Q	ZMENA_T_FUK	-	kód dôvodu zmeny teploty fúkaním
R	C_GRADE_FUK	%	%C
S	C_MOD	%	%C v oceli podľa predpisu
T	C_SET	%	%C v oceli nastavené operátorom
U	C_SKUT	%	%C v oceli skutočné namerané
V	P_MOD	%	%P v oceli podľa predpisu
W	P_SKUT	%	%P v oceli skutočné namerané
X	P_MAX	%	%P v oceli max. dovolené podľa akostí
Y	LPPAR	-	prázdne ???
Z	MN_MOD	%	%Mn v oceli podľa predpisu
AA	MN_SKUT	%	%Mn v oceli skutočné namerané

AB	LMNPAR	-	prázdne ???
AC	S_MOD	%	%S v oceli podľa predpisu
AD	S_SKUT	%	%S v oceli skutočné namerané
AE	S_MAX	%	%S v oceli max. dovolené podľa akostí
AF	LSPAR	-	prázdne ???
AG	CR_MOD	%	%Cr v oceli podľa predpisu
AH	CR_SKUT	%	%Cr v oceli skutočné namerané
AI	CR_MAX	%	%Cr v oceli max. dovolené podľa akostí
AJ	LCRPAR	-	prázdne ???
AK	O2_MOD	Nm ³	objem fúkaného kyslíka vypočítané modelom
AL	O2_SET	Nm ³	objem fúkaného kyslíka nastavené - operátor
AM	O2_SKUT	Nm ³	objem fúkaného kyslíka skutočne namerané
AN	O2YIELD		výťažnosť kyslíka
AO	LOPAR		??? (0,76159 – 1,42826)
AP	O2_TRVANIE	s	doba fúkania skutočná
AQ	PRIC_PRER_FUK1	-	kód príčiny prerušenia fúkania 1
AR	PRIC_PRER_FUK2	-	kód príčiny prerušenia fúkania 2
AS	PRIC_PRER_FUK3	-	kód príčiny prerušenia fúkania 3
AT	O2_DOFUK_MOD	Nm ³	množstvo kyslíka vypočítané modelom dofuk
AU	O2_DOFUK_SET	Nm ³	množstvo kyslíka nastavené dofuk
AV	O2_DOFUK_SKUT	Nm ³	množstvo kyslíka skutočne namerané dofuk
AW	O2_DOFUK_KOD	-	kód dofuku (napr. 1, 2 , ... 9)
AX	O2_DOFUK_PRIC	-	príčina dofuku (napr. 1, 2 , ... 32)
AY	DOFUK1_ZAC	DD.MM.RRRR HH:MM	začiatok dofuku 1 dátum a čas
AZ	DOFUK1_O2	Nm ³	množstvo kyslíka dofuk 1
BA	DOFUK1_KON	DD.MM.RRRR HH:MM	koniec dofuku 1 dátum a čas
BB	DOFUK2_ZAC	DD.MM.RRRR HH:MM	začiatok dofuku 2 dátum a čas
BC	DOFUK2_O2	Nm ³	množstvo kyslíka dofuk 2
BD	DOFUK2_KON	DD.MM.RRRR HH:MM	koniec dofuku 2 dátum a čas
BE	DOFUK3_ZAC	DD.MM.RRRR HH:MM	začiatok dofuku 3 dátum a čas
BF	DOFUK3_O2	Nm ³	množstvo kyslíka dofuk 3
BG	DOFUK3_KON	DD.MM.RRRR HH:MM	koniec dofuku 3 dátum a čas
BH	DOFUK_VAPNO1	???	množstvo vápna pri dofuku 1
BI	DOFUK_VAPNO1_CAS	DD.MM.RRRR HH:MM	vápno pri dofuku 1 dátum a čas
BJ	DOFUK_VAPNO2	???	množstvo vápna pri dofuku 2
BK	DOFUK_VAPNO2_CAS	DD.MM.RRRR HH:MM	vápno pri dofuku 2 dátum a čas
BL	DOFUK_VAPNO3	???	množstvo vápna pri dofuku 3
BM	DOFUK_VAPNO3_CAS	DD.MM.RRRR HH:MM	vápno pri dofuku 3 dátum a čas
BN	VYSKA_KUP_MOD	m	výška ??? model
BO	VYSKA_KUP_SET	m	výška ??? nastavené
BP	VYSKA_KUP_SKUT	m	výška ??? skutočné
BQ	BOTLIN	m	výška taveniny (ocel + troska)
BR	PELETY_MOD	kg	množstvo pelet model
BS	PELETY_SET	kg	množstvo pelet nastavené
BT	PELETY_SKUT	kg	množstvo pelet skutočné
BU	BRIKETY_MOD	kg	množstvo brikiet model

BV	BRIKETY_SET	kg	množstvo brikiet nastavené
BW	BRIKETY_SKUT	kg	množstvo brikiet skutočné
BX	TCMAG_MOD	kg	množstvo TCMAG model
BY	TCMAG_SET	kg	množstvo TCMAG nastavené
BZ	TCMAG_SKUT	kg	množstvo TCMAG skutočné
CA	VAPNO_MOD	kg	množstvo vápna model
CB	VAPNO_SET	kg	množstvo vápna nastavené
CC	VAPNO_SKUT	kg	množstvo vápna skutočné
CD	VAPNO_DOFUK	kg	množstvo vápna dofuk (1 + 2 + 3)
CE	VAPNO_SPOLU	kg	množstvo vápna spolu (_SKUT + _DOFUK)
CF	DOL_VAPNO_MOD	kg	množstvo dolomitického vápna model
CG	DOL_VAPNO_SET	kg	množstvo dolomitického vápna nastavené
CH	DOL_VAPNO_SKUT	kg	množstvo dolomitického vápna skutočné
CI	MAGNEZIT_MOD	kg	množstvo magnezitu model
CJ	MAGNEZIT_SET	kg	množstvo magnezitu nastavené
CK	MAGNEZIT_SKUT	kg	množstvo magnezitu skutočné
CL	FESI_MOD	kg	množstvo FeSi model
CM	FESI_SET	kg	množstvo FeSi nastavené
CN	FESI_SKUT	kg	množstvo FeSi skutočné
CO	FESI75_MOD_KK	kg	množstvo FeSi75 model
CP	FESI75_SET_KK	kg	množstvo FeSi75 nastavené
CQ	FESI75_SKUT_KK	kg	množstvo FeSi75 skutočné
CR	FEMN_SKUT	kg	množstvo FeMn skutočné
CS	TROSKA_MOD	kg	množstvo trosky model
CT	BAZICITA_MOD	-	bazicita model %CaO/(%SiO ₂ +%P ₂ O ₅)
CU	BAZICITA_SKUT	-	bazicita skutočné namerané
CV	V_RATIO_MOD	-	pomer %CaO/%SiO ₂ model
CW	V_RATIO_SKUT	-	pomer skutočné
CX	FE0_MOD	%hm.	%FeO v troske model
CY	FE2O3_MOD	%hm.	%Fe ₂ O ₃ v troske model
CZ	FE_T_SKUT	%hm.	%Fe v troske model
DA	MGO_T_SKUT	%hm.	%MgO v troske model
DB	SROT_VAHA	kg	hmotnosť šrotu (20000 až 55100)
DC	SROT_SELEKT	-	kód šrotu (napr. 1, 3, 4, 5, 6)
DD	T_SUZE	°C	teplota surového železa (1199 až 1545)
DE	HMOTN_SUZE	kg	hmotnosť surového železa (20200 až 168400)
DF	C_SUZE	%	%C v surovom železe (0,559 až 4,655)
DG	SI_SUZE	%	%Si v surovom železe (0,029 až 3,04)
DH	MN_SUZE	%	%Mn v surovom železe (0,103 až 1,411)
DI	P_SUZE	%	%P v surovom železe (0,017 až 0,128)
DJ	S_SUZE	%	%S v surovom železe (0,0013 až 0,098)
DK	TI_SUZE	%	%Ti v surovom železe (0,001 až 0,064)
DL	LAST_MODIFIED	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas
DM	HEAT_ID_SEQ	-	??? (6 miestne číslo)
DN	HEAT_END	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas
DO	CAS_SUZE	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas surového železa
DP	CAS_SKUT	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas skutočný
DQ	T_1_LIACEJ_PANVE	°C	teplota 1 ocele v LP (1575 až 1768)
DR	CAS_1_LIACEJ_PANVE	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas

DS	T_ZPO_POZ	°C	teplota ocele ZPO požadovaná (1590 až 1650)
DT	CAS_ZPO_POZ	DD.MM.RRRR HH:MM	dátum a čas na ZPO požadovaný
DU	T_MPO_ZAC	°C	teplota ocele MPO začiatočná (1570 až 1658)
DV	CAS_MPO_ZAC	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas
DW	T_MPO_KON	°C	teplota ocele MPO konečná (1553 až 1614)
DX	CAS_MPO_KON	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas
DY	T_MPO_POZ	°C	teplota ocele MPO požad. (1526 až 1606)
DZ	CAS_MPO_POZ	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas
EA	SROT_MPO	kg	hmotnosť šrotu na MPO (iba 0)
EB	BRAMA_MPO	???	použitie bramy na MPO (2, 3, 4)
EC	MAGNEZIT_CHLADENIE	kg	hmotnosť magnezitu na chladenie (0 až 4207)
ED	T_ZPO_ZAC	°C	teplota ocele ZPO začiatočná (1425 až 1577)
EE	CAS_ZPO_ZAC	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas
EF	T_ZPO_KON	°C	teplota ocele ZPO konečná (1525 až 1577)
EG	CAS_ZPO_KON	DD.MM.RRRR HH:MM	??? dátum a čas
EH	T_MOD_ODPICH	°C	teplota ocele, odpich mod. (1622 až 1710)
EI	T_MOD_ODPICH_MIN	°C	min. teplota ocele, odpich mod.(1614-1702)
EJ	T_MOD_ODPICH_MAX	°C	max. teplota ocele, odpich mod.(1630-1718)
EK	T_ODPICHU	°C	teplota ocele, odpich (1614-1715)
EL	ZMENA_T_ODPICH	°C	zmena teploty ocele, odpich (1-25)
EM	T_LIKVID	°C	teplota tuhnutia ocele (1515-1535)
EN	OCEL_ZPO	kg	hmotnosť ocele na ZPO (152990-191200)
EO	HMOTNOST_FE	kg	hmotnosť kovonosnej vs. (172736-204870)
EP	POBYT_V_LP	???	??? prázdné
EQ	OHREV_LP_ZAC	???	??? prázdné
ER	OHREV_LP_KON	???	??? prázdné
ES	SKUPINA	-	kód (2, 3a, 3b, 3c, 5a, 5b)
ET	AKTIVITA_KYSLIKA	???	aktivita O2 (0, 427,6 - 2092)
EU	HMOTN_MOD	kg	hmotnosť ??? ocele model (165143-183866)
EV	DOHOTOVENIE	???	???(221 - 2907)
EW	ZLIATOK	???	???(0, 2000, 3000, 4000, 5000, 9000)
EX	MOKRY_SROT	???	???
EY	PRAVIDLO_SRO	???	???
EZ	FE_SUZE	kg	hmotnosť Fe v sur.Fe (136200 - 170600)
FA	VYTAZOK	%	výťažnosť (82,78 – 98,54)
FB	HMOTN_VRATOCEL	kg	??? hmotnosť vratnej ocele
FC	DATE_MESIAC	MM	mesiac (8, 9)
FD	DATE_TYZDEN	TT	týždeň (32-38)
FE	VYT_VYP_PREDIK	%	výťažnosť predikovaná (87,19 – 98,08)
FF	VYT_VYP_SKUT	%	výťažnosť skutočná (83,83 – 99,06)
FG	VYT_VYP_PRIZNAK	-	výťažnosť príznak (0, 1)
FH	CISLO_TRYSKY	-	číslo trysky (5, 6, 8, 9, 10)
FI	ODS_TROSKA_STIAH_PERC	???	prázdné
FJ	TAVIC_MPO	-	Tavič MPO (542 až 604)

Dynamické dáta sú dáta, ktoré „prichádzajú“ resp. sú merané v priebehu tavby v časovom intervale 1s. Ide predovšetkým o riadiace veličiny (výška trysky a objemový

prietok fúkaného kyslíka), merané veličiny z analýzy spalín, prietoky spalín a tlaky v spalinovom trakte. Ich označenie, štruktúra a popis je uvedený v Tab. 2.

Tab. 2. Štruktúra dynamických dát z procesu skujňovania

Stípec	Premenná	Jednotka	min	max	Popis
A					
B	OC2_COMM1_K4_FUKANIE	boolean	0	1	Príznak fúkania kyslíka (0, 1)
C	K41_VYASKA_TRYSKY	cm	0	1800	Výška trysky 1 v KK4 (274.5)
D	K42_VYASKA_TRYSKY	cm	0	1800	Výška trysky 2 v KK4 (113.2 až 274.5)
E	K41_PRIETOK_O2	Nm ³ /min	0	700	Priektor O2 na KK4, tryska 1 (iba 0)
F	K42_PRIETOK_O2	Nm ³ /min	0	700	Priektor O2 na KK4, tryska 2 (0 až 554)
G	K41_P_O2_OUT	MPa	0	3	Tlak O2 na KK4, tryska 1 (0.000868056, 0.001736111)
H	K42_P_O2_OUT	MPa	0	3	Tlak O2 na KK4, tryska 2 (0.0078125 ÷ 1.331597328)
I	K4_CO	%	0	100	Koncentrácia CO v suchých spalinách (0 ÷ 84.03)
J	K4_CO2	%	0	100	Koncentrácia CO2 v suchých spalinách (1.27 ÷ 35.36)
K	K4_H2	%	0	100	Koncentrácia H2 v suchých spalinách (0.37 ÷ 17.10)
L	K4_O2	%	0	100	Koncentrácia O2 v suchých spalinách (0 ÷ 23.34)
M	OC2_PLCK4_VAI_TEPLOTA_1_NA_VS_T_DO_GRANIVORU	°C	-30	1200	Teplota 1 konv. plynu na vst. do granivoru (iba 1368)
N	OC2_PLCK4_VAI_TEPLOTA_2_NA_VS_T_DO_GRANIVORU	°C	-30	1200	Teplota 2 konv. plynu na vst. do granivoru (160.8 ÷ 884.7)
O	OC2_PLCK4_VAI_TEPLOTA_1_ODPAD_PLYN_ZA_GRAN	°C	-30	100	Teplota 1 konv. plynu za granivorom (49.9 ÷ 56.8)
P	OC2_PLCK4_VAI_TEPLOTA_2_ODPAD_PLYN_ZA_GRAN	°C	-30	100	Teplota 2 konv. plynu za granivorom (52.8 ÷ 53.1)
Q	OC2_K4_P_PODTLAK_PRETLAK_DYM_NIK	Pa	-1000	1000	Podtlak, pretlak na KK4, dymník (-1000 ÷ 626.7)
R	OC2_PLCK4_PODTLAK_GRANIVOR_VYSTUP	kPa	0	27	Podtlak konv. plynu na vyst. z granivoru (0 ÷ 3.46)
S	OC2_PLCK4_MERANIE_PRIETOKU_SPAL_PROMECON	m ³ /hod	0	3060 00	Priektor spalín (0 ÷ 160517), nový priektor, potrebný prepočet na Nm ³ /hod z teploty (O,P) a tlaku (R)
T	OC2_K4_ZKP_PRIETOK_SPALIN_AKTUALNY	m ³ /hod	0	2500 00	Priektor spalín aktuálny (64328 ÷ 134464) je ďalej ako nový
U	OC2_K4_ZKP_PRIETOK_SPALIN_NORMOVANY	Nm ³ /hod	0	2500 00	Priektor spalín normovaný z aktuálneho (45867 ÷ 96310)

1.2 Základné štatistické ukazovatele

Zo statických dát bolo analyzovaných 872 tavieb realizovaných na konvertore č.4. Z nameraných dát pre jednotlivé tavby boli vypočítané štatistické charakteristiky. Významnými ukazovateľmi sú maximálna hodnota, minimálna hodnota, priemer a rozptyl, ktorý ukazuje variabilitu meranej veličiny. V Tab. 3 a Tab. 4 sú vyčíslené štatistické charakteristiky vybraných statických dát procesu skujňovania v konvertore. Rozsah medzi minimálnou a maximálnou nameranou teplotou ocele (T_SKUT_1) je 146°C a priemerná hodnota je 1658°C. U percentuálneho obsahu uhlíka v oceli je priemerná hodnota 0,045%. Priemerná spotreba kyslíka je 8191 m³ a priemerná doba trvania tavby je 991s čo je približne 16,5 min.

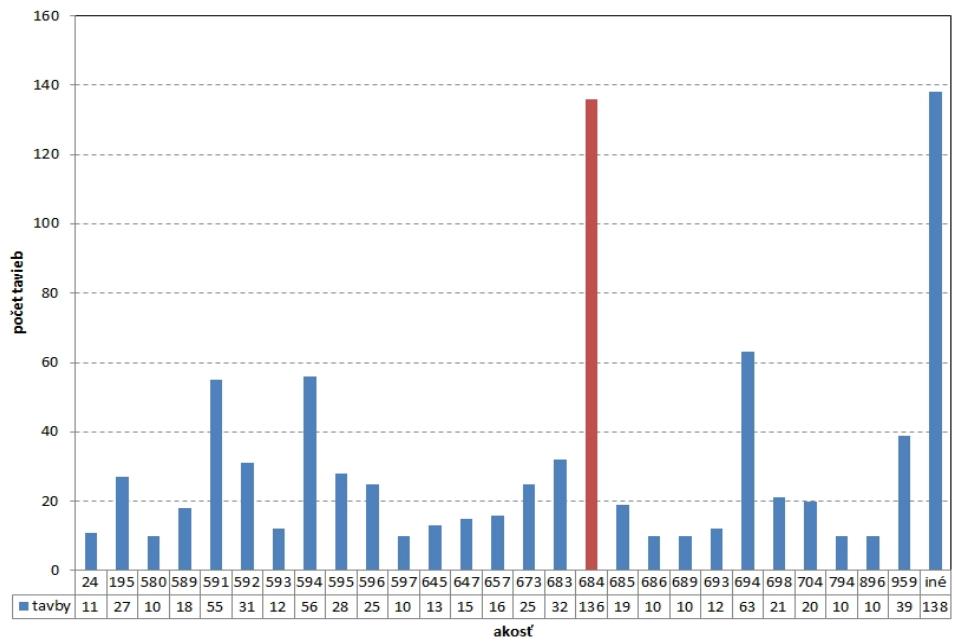
Tab. 3. Štatistické charakteristiky statických dát - I

Štatistická charakt.	T_SKUT	C_SKUT	O2_SKUT	O2_TRVAN	T_SUZE	HMETN_SU	C_SUZE
priemer	1658	0,045	8191	991	1316,0	148387	4,360
štandard. odchýlka	22,7	0,012	451	60	35,1	10239	0,336
rozptyl	516,9	0,000	203586	3542	1232,5	104841766	0,113
špicatosť	0,393	4,565	89,599	50,613	3,5	84,975	63,177
šikmost'	-0,261	1,238	-8,217	-5,233	0,3	-7,748	-6,598
minimum	1577	0,02	2733	366	1199,1	20200	0,559997
maximum	1723	0,132	8929	1211	1545,1	168400	4,655
počet	872	872	872	872	872	872	872

Tab. 4. Štatistické charakteristiky statických dát - II

Štatistická charakt.	TROSKA_M	BAZICITA	BAZICITA	SROT_VAH	VAPNO_SK	DOL_VAPNO	VAPNO_SP.
priemer	17261	3,92	3,66	40375	5698,9	3303,9	5816,3
štandard. odchýlka	3385	1,65	0,54	5332	1269,0	651,7	1378,7
rozptyl	11456202	2,73	0,29	28435370	1610348,9	424766,5	1900903,8
špicatosť	12	282,74	4,95	0,889	6,6	9,0	4,8
šikmost'	3	14,67	1,48	-0,734	1,8	2,3	1,7
minimum	12812	2,09	1,3	20000	359	2158	359
maximum	41940	39,06	6,7	55100	13040	7535	13040
počet	872	872	872	872	872	872	872

Následne sme sa zamerali na vyrábané akosti a tavby sme rozdelili podľa akosti do skupín. Počty tavieb zodpovedajúcej akosti sú uvedené v histograme na Obr. 1. Najväčší počet tavieb mala akosť 684 a to 136 tavieb (červená farba). Následne boli vyčíslené štatistické ukazovatele aj pre tavby vyrábanej akosti 684 (Tab. 5 a Tab. 6).



Obr. 1. Histogram akostí tavieb

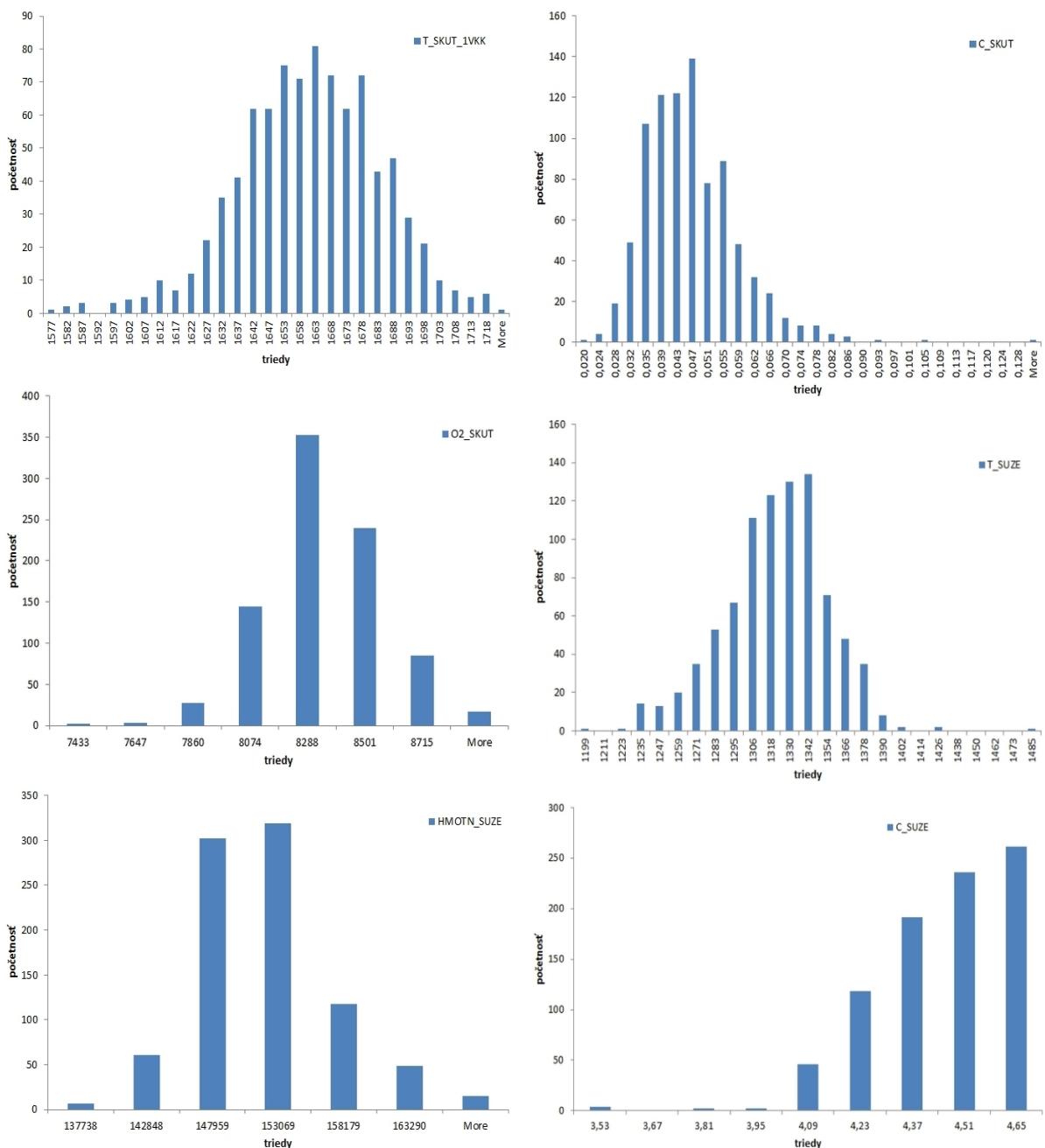
Tab. 5. Štatistické charakteristiky statických dát pre akosť 684 - I

Štatistická charakt.	T_SKUT_1	C_SKUT	O2_SKUT	O2_TRVANT	T_SUZE	HMOTN_SU	C_SUZE
priemer	1659,6148	0,04489	8130,748	977,65926	1319,331	149520,207	4,387511111
štandard. odchýlka	19,809912	0,01119	191,0446	38,807247	34,740414	4656,68265	0,175468578
rozptyl	392,43261	0,00013	36498,03	1506,0024	1206,8964	21684693,3	0,030789222
špicatosť	1,89637	2,06754	-0,006438	9,9297807	0,3833993	-0,055465	-0,79873632
šikmost'	-0,630931	0,97216	0,083723	2,3052462	-0,648057	0,63563493	-0,34643218
minimum	1582	0,023	7616,468		922	1199,114	140900
maximum	1703	0,091	8639,418		1211	1392,936	163001
počet	136	136	136		136	136	136

Tab. 6. Štatistické charakteristiky statických dát pre akosť 684 - II

Štatistická charakt.	TROSKA_M	BAZICITA	BAZICITA	SROT_VAH	VAPNO_SK	DOL_VAPNO	VAPNO_SP.
priemer	16102,076	4,06644	3,72197	39877,037	5720,1259	3208,31852	5811,259259
štandard. odchýlka	1866,4381	0,84694	0,898881	4508,5647	538,91002	452,203554	649,6043338
rozptyl	3483591,3	0,71731	0,807987	20327155	290424,01	204488,055	421985,7905
špicatosť	5,7837771	6,6931	7,663308	0,0705837	11,483547	3,79855393	6,775577526
šikmost'	1,9997041	1,8937	-1,65366	-0,63553	3,268814	1,42549811	2,61777718
minimum	13183,959	3,17931	0	27200	5507	2424	5507
maximum	25438,545	8,81552	6,3	48400	8852	5388	8852
počet	136	136	136	136	136	136	136

Významnými štatistickými ukazovateľmi sú aj histogramy, ktoré boli skonštruované pre významné merané statické veličiny ako meraná teplota ocele pod označením T_SKUT_1VKK, percentuálny obsah uhlíka v oceli C_SKUT, množstvo spotrebovaného kyslíka O2_SKUT, teplota surového železa T_SUZE, hmotnosť surového železa HMOTN_SUZE, percentuálny obsah uhlíka v surovom železe C_SUZE. Na nasledujúcim obrázku (Obr. 2) sú ich histogramy, ktoré vychádzajú zo spracovania statických dát. Poukazujú na rozdelenie meraných parametrov do tried v závislosti na početnosti. Čo sa týka rozdelenia nameranej teploty ocele, jej rozdelenie zodpovedá Gaussovmu normálnemu rozdeleniu. To isté môžeme prehľať aj o percentuálnom obsahu uhlíka v oceli (aj keď niekoľko tovieb má vyšší obsah uhlíka).

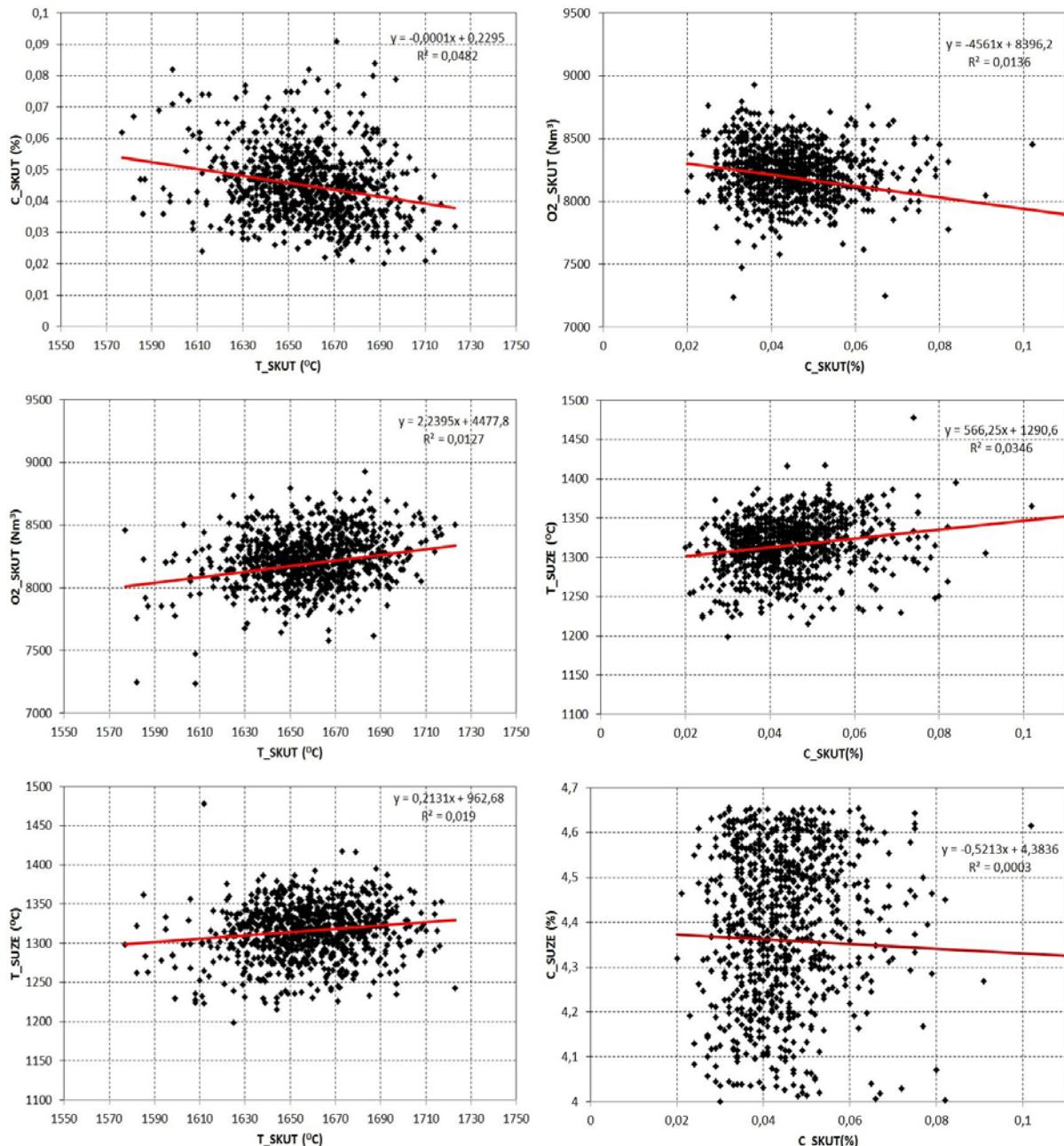


Obr. 2. Histogramy pre vybrané merané veličiny procesu skujňovania

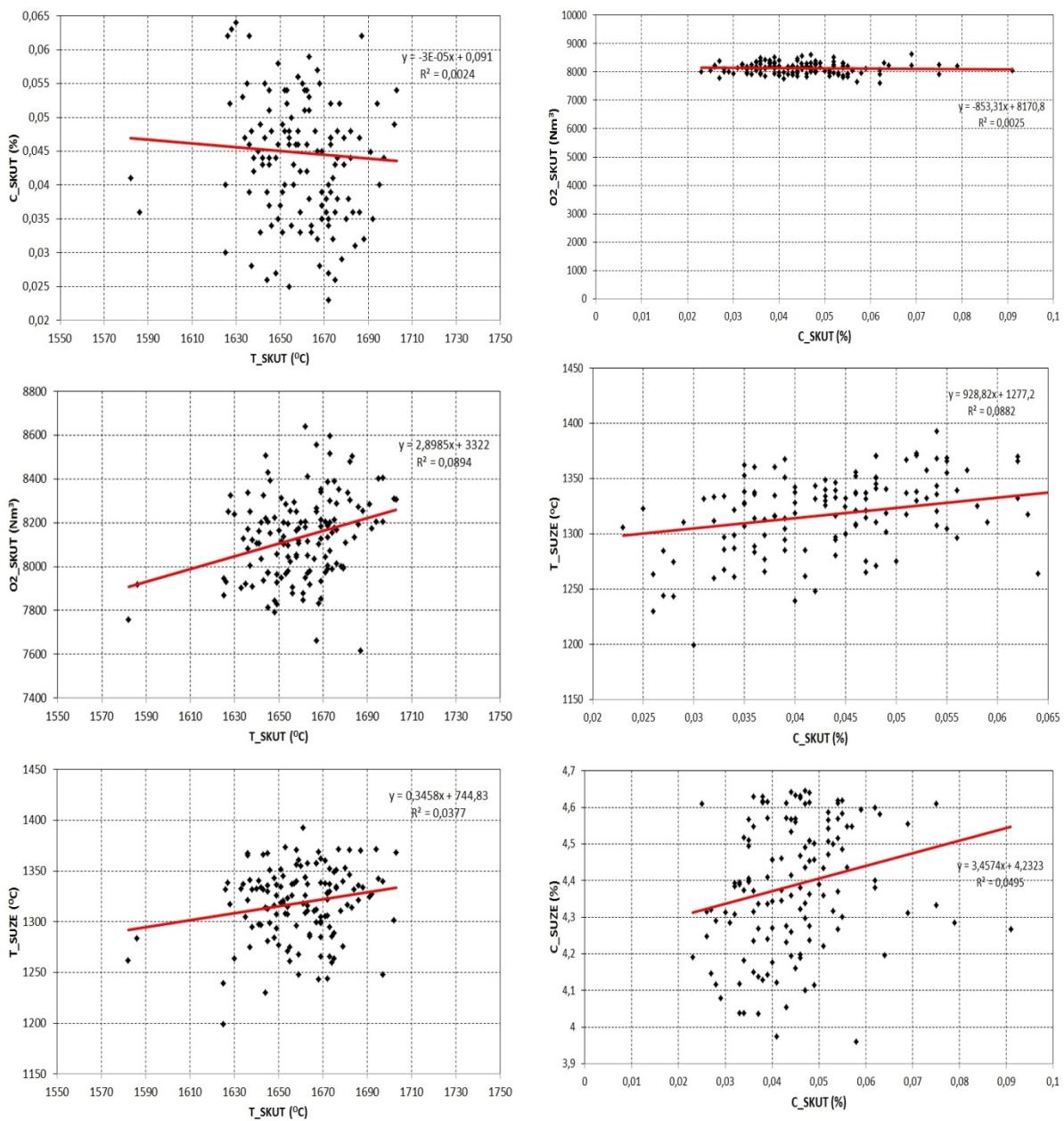
1.3 Analýza závislosti jednotlivých veličín

V poslednej časti analýzy sme sa pokúšali nájsť medzi nameranými statickými veličinami regresné závislosti. Táto analýza bola prevedená taktiež v dvoch krokoch, najprv na vzorke všetkých tavieb (872 tavieb) a následne na vzorke tavieb akosti 684 (136 tavieb).

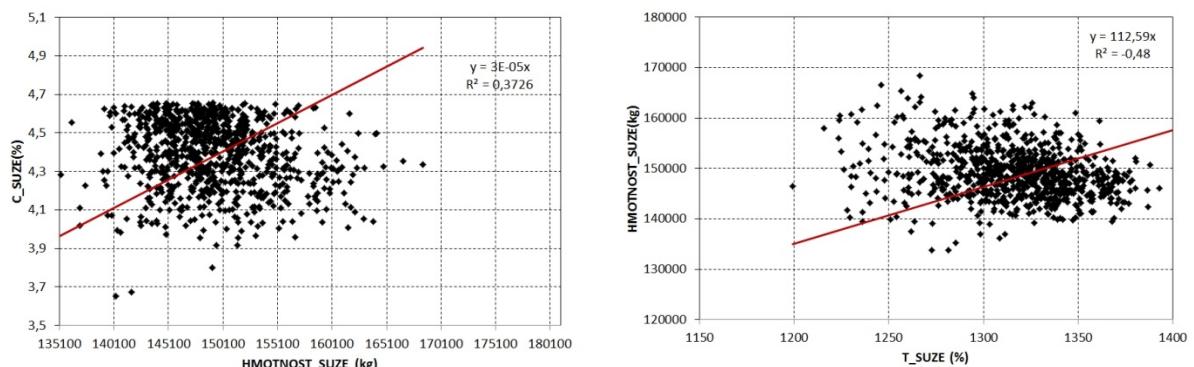
Na Obr. 3 (pre všetky tavby) a Obr. 4 (pre tavby akosti 684) môžeme vidieť závislosti niektorých veličín na nameranej teplote na konci tavby (T_{SKUT}) – Obr. 3 vľavo a niektorých veličín na nameranom obsahu uhlíka v oceli (C_{SKUT}) – Obr. 3 vpravo. Ani z jednej z týchto závislostí nie je vidieť väčšia korelácia.



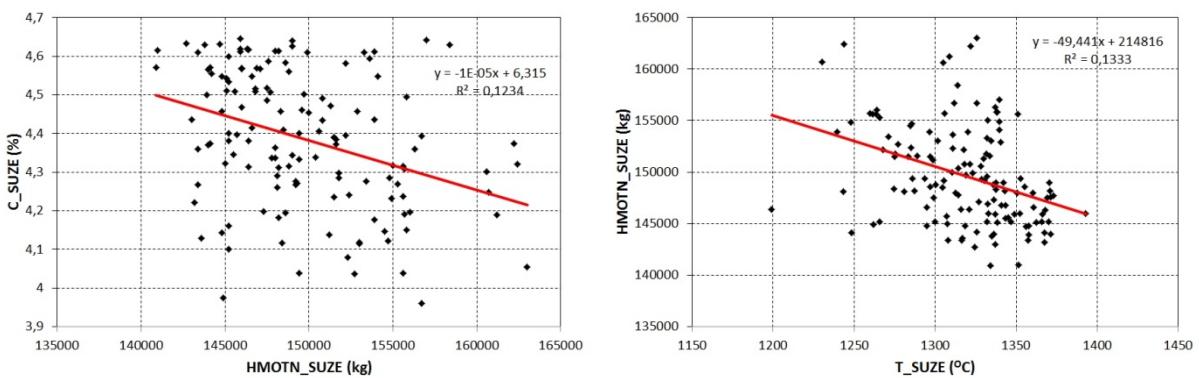
Obr. 3. Regresné závislosti vybraných veličín na T_{SKUT} a C_{SKUT} pre všetky tavby



Obr. 4. Regresné závislosti vybraných veličín na T_SKUT a C_SKUT pre tavby akostí 684

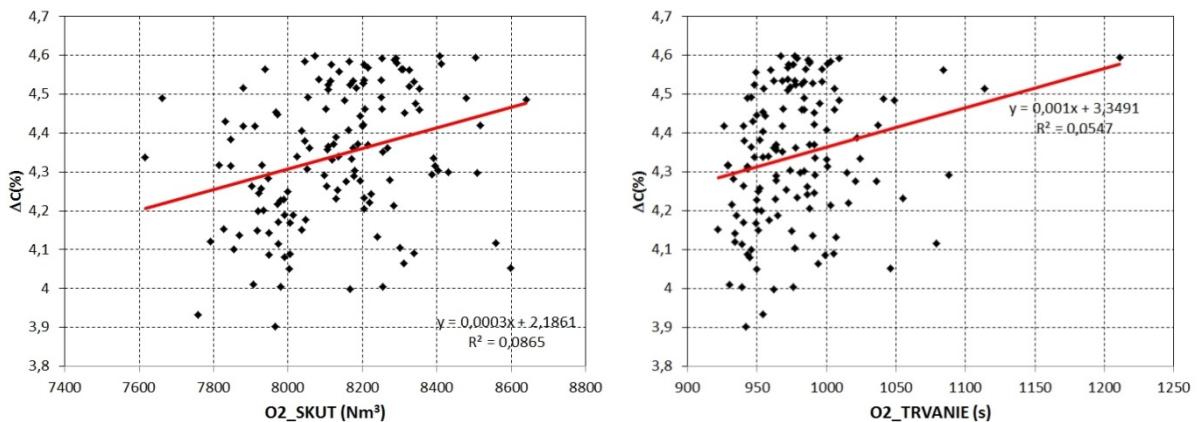


Obr. 5. Regresné závislosti vybraných veličín na T_SUZE, a HM_SUZE pre všetky tavby

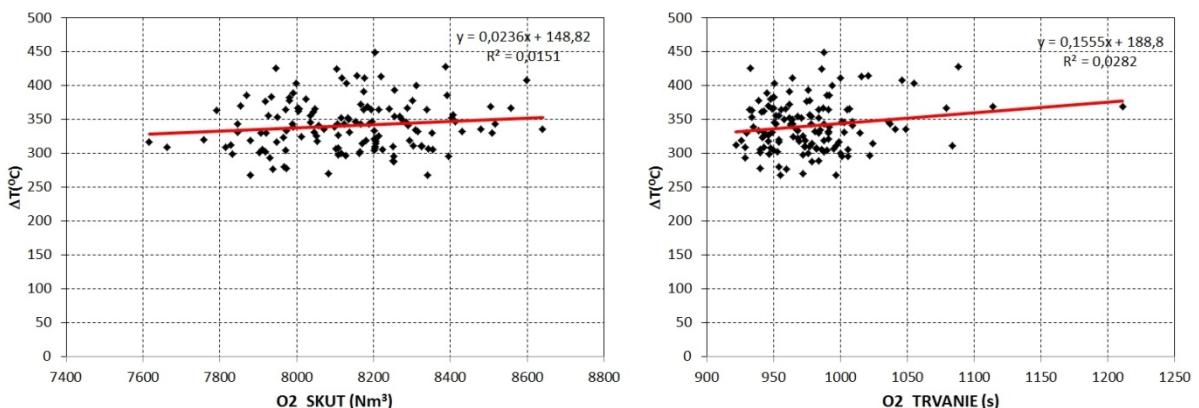


Obr. 6. Regresné závislosti vybraných veličín na T_{SUZE} , a HM_{SUZE} pre tavby akostí 684

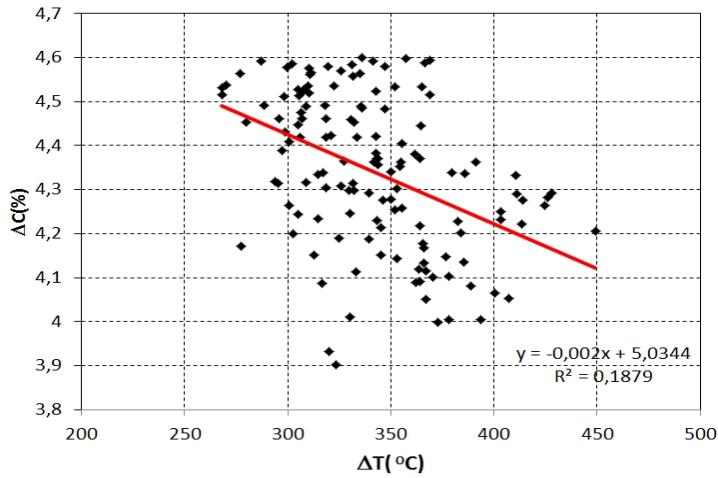
Pri hľadaní regresných závislostí bolo uvažované aj s rozdielom teploty v priebehu procesu skujčovania $\Delta T = T_{SKUT} - T_{SUZE}$ a rozdielom koncentrácie uhlíka $\Delta\%C = \%C_{SUZE} - \%C_{SKUT}$. Na nasledovných obrázkoch sú znázornené závislosti ΔC (Obr. 7) a ΔT (Obr. 8) na spotrebovanom kyslíku a na dobe trvania tavby pre tavby akostí 684. Samotná závislosť medzi závislosti ΔC a ΔT je uvedená na Obr. 9. Nepotvrdila sa lepšia korelácia medzi uvedenými veličinami.



Obr. 7. Regresné závislosti ΔC na $O2_{SKUT}$ a na $O2_{TRVANIE}$ pre tavby akostí 684

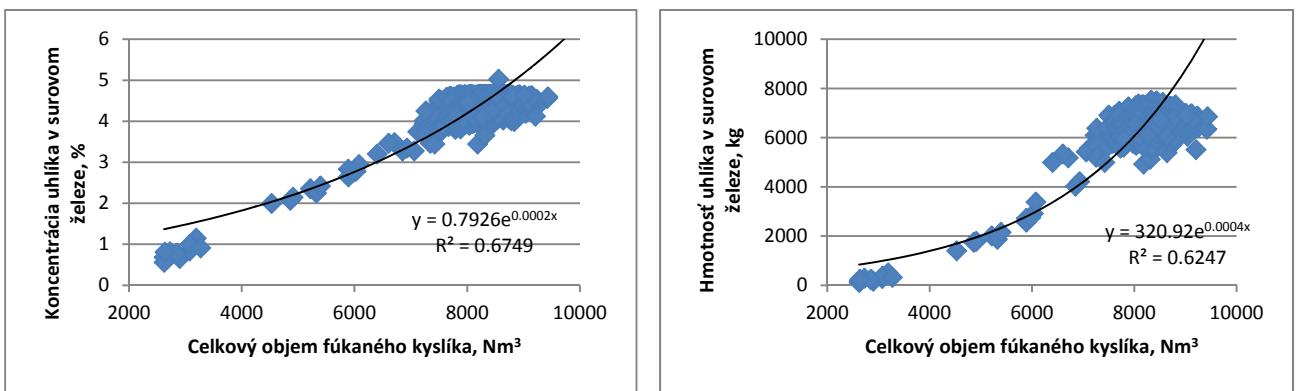


Obr. 8. Regresné závislosti ΔT na $O2_{SKUT}$ a na $O2_{TRVANIE}$ pre tavby akostí 684

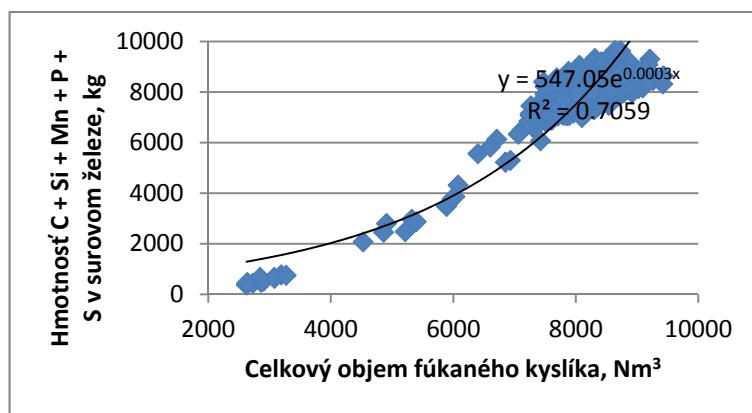


Obr. 9. Regresná závislosť $\Delta T(^{\circ}\text{C})$ a $\Delta C(\%)$ pre tavby akosti 684

Najsilnejšia korelácia medzi statickými veličinami, ktorú sa podarilo nájsť je medzi koncentráciou uhlíka v surovom železe a objemom nafúkaného kyslíka resp. medzi hmotnosťou uhlíka v surovom železe a objemom kyslíka (Obr. 10). V prípade zahrnutia koncentrácie resp. hmotnosti ostatných prvkov v surovom železe je korelácia medzi hmotnosťou týchto prvkov a objemom nafúkaného kyslíka ešte väčšia (Obr. 11).



Obr. 10. Regresná závislosť koncentrácie resp. hmotnosti uhlíka v suze na objeme kyslíka



Obr. 11. Regresná závislosť hmotnosti C, Si, Mn, P, S v suze na objeme kyslíka

2. Návrh metód riešenia

V rámci návrhu metód riešenia sú v tejto kapitole popísané navrhnuté modely pre nepriame meranie teploty taveniny a uhlíka v procese skujňovania, ich štruktúra, vstupy a výstupy. U niektorých z modelov sú prezentované aj prvotné výsledky dosiahnuté pri ich overení na niekoľkých reálnych tavbách.

2.1 Nepriame meranie uhlíka

Pre nepriame meranie uhlíka sú navrhované nasledujúce spôsoby riešenia:

- bilančný model uhlíka,
- model na báze Learning machine method,
- deterministický model.

2.1.1 Bilančný model uhlíka

Základom bilančného modelu uhlíka je uhlíková bilancia, ktorá vychádza z počiatočného množstva uhlíka v kovonosnej vsádzke a z úbytku uhlíka, ktorý je vypočítaný na základe meraného objemu, koncentrácie oxidu uhoľnatého a uhličitého v konvertorovom plyne.

2.1.1.1 Vstupy a výstupy

Uhlík na vstupe sa nachádza v kovonosnej vsádzke, teda v surovom železe, o ktorom je meraná hmotnosť (HMOTN_SUZE, kg) a zloženie uhlíka (C_SUZE, hm.%) a taktiež sa uhlík nachádza v šrote, pre ktorý je daná hmotnosť šrotu (SROT_VAHA, kg), pričom hmotnostné percento uhlíka v šrote je potrebné vypočítať podľa hmotnosti jednotlivých položiek šrotu (max. 42) a percenta uhlíka v jednotlivých položkách (vid' Tab. 7).

Okrem statických dát uvedených vyššie sú potrebné aj dynamické dáta. Sú to predovšetkým nasledovné dátá:

- koncentrácia oxidu uhoľnatého (K4_CO, obj.%),
- koncentrácia oxidu uhličitého (K4_CO2, obj.%),
- prietok konvertorového plynu
(OC2_PLCK4_MERANIE_PRIETOKU_SPAL_PROMECOM, m³/hod),
- teplota konvertorového plynu za granivorm
(OC2_PLCK4_VAI_TEPLOTA_1_ODPAD_ZA_GRAN alebo,
OC2_PLCK4_VAI_TEPLOTA_2_ODPAD_ZA_GRAN °C)
- podtlak konvertorového plynu na výstupe z granivoru
(OC2_PLCK4_PODTLAK_GRANIVOR_VYSTUP, kPa).

2.1.1.2 Bilancia uhlíka

Bilančný model uhlíka vychádza z rýchlosťi úbytku uhlíka v_C vo vsádzke, ktorý je daný rovnicou

$$v_C = -dm_e/d\tau = V_{KP} (x_{CO,KP} + x_{CO2,KP}) Ah_C/V_M \quad (1)$$

kde V_{KP} – objemový prietok konvertorového plynu (Nm³/s), $x_{CO,KP}$ – objemový zlomok CO v konvertorovom plyne (m³/m³), $x_{CO2,KP}$ – objemový zlomok CO₂ v konvertorovom

plyne (m^3/m^3), Ah_C – atómová hmotnosť uhlíka (kg/kmol), V_M – molový objem plynu (m^3/kmol).

Tab. 7. Obsah uhlíka v jednotlivých položkách šrotu

ID	Kód	Popis (EN)	Popis (SK)	C / hm.%
hm-1		Hot metal 1	Surové železo 1	4,5
Order scr		Order scrap		0,15
0				4,5
5	HSZ	Home scrap - tundish skulls	Vlastný šrot - zliatky z medzipánvy	0,15
6	HSB	Home scrap - heavy slabs	Vlastný šrot - bramy	0,15
7	HSC	Home scrap - coils	Vlastný šrot - zvitky	0,005
8	HSK	Home scrap - old cast mold iron	Pevné surové Fe z DZ VP (bochníky pevného surového Fe) a kokilovina	4,455
9	HSD	Home scrap - demolition	Vlastný šrot - z demolácií	0,25
10	HS	Home scrap	Komunálny šrot	0,15
11	PAS	Plate and structural	Šrot z plochej a konštrukčnej ocele	0,2
12	2HM	No.2 Heavy melting scrap	2.Trieda – ľažko taviteľný šrot	0,2
13	1HM	No.1 Heavy melting scrap	1.Trieda – ľažko taviteľný šrot	0,2
14	MCE	Mill crop ends	Šrot z valcovaných a oceľ. odrezkov	
20		Iron ore		0
21	1BC	No.1 Baling clips	1.Trieda – Lisovateľný šrot nový	0,05
23	HST	Home scrap tin	Pocínovaný domáci šrot	0,05
24	TBS	Tin busheling scrap	Pocínovaný bušelový šrot	0,05
25	ZBS	Zinc busheling scrap	Pozinkovaný bušelový šrot	0,05
26	SBS	Silicon busheling scrap	Kremíkový bušelový šrot	0,05
27	2BC	No.2 Baling clips	2.Trieda – Lisovateľný šrot starý	0,2
31	1IB	No.1 Industrial bundles	1.Trieda – priemyselné balíky	0,05
33	1DB	No.1 Dealer bundles	1.Trieda – nové balíky	0,05
34	1TB	No.1 Tin bundles	1.Trieda – nové balíky pocínované	0,05
36	2DB	No.2 Dealer bundles	2.Trieda – staré balíky	0,2
41	1SH	No.1 Sheared material	1.Trieda – strihaný materiál	0,2
42	2SH	No.2 Sheared material	2.Trieda – strihaný materiál	0,2
44	1RR	No.1 Rail road scrap	1.Trieda – železničný šrot	0,2
45	TBC	Tin baling clips	Lisovateľný šrot nový – pocínovaný	0,05
46	1SR	No.1 Sheared rebars	1.Trieda – strihané roxory	0,425
51	STS	Steel turnings	Oceľové špony	0,1
59	1BBC	No.1 Baling clips Bundles	Balíky z lisovania 1BC	0,05
60	2BBC	No.2 Baling clips Bundles	Balíky z lisovania 2BC	0,2
61	TBBC	Tin busheling scrap Bundles	Balíky z lisovania TBC	0,05
63		Home Bundles	Balíky z lisovania HS	0,15
74	1BS	No.1 Busheling scrap	1.Trieda – bušelový šrot	0,05
77	SHS	Shredded scrap	Trhaný šrot	0,35
80	TRM	Trial code for recycled material	Skúšobný kód pre recykl. materiály	0,2
91	DSI	Desulf station iron	Odsírené surové železo	3,5
92	SKI	Skimmer iron	Odlúčené surové železo	0,2
93	Pig Iron	Pig Iron	Surové železo	4,5
94	1PIT	No.1 Pit scrap	1.Trieda – šrot	0,3
95	BPIT	No.1 Pit scrap (B fraction -small)	1.Trieda – šrot (B frakcia-menšia)	0,3
96	2PIT	No.2 Pit scrap	2.Trieda – šrot	0,2
99	TSS		Žľabovina z odlievania bochníkov Fe	1,44
110		Home scrap-addition	10 dovažok	0,15
131		No.1 Industrial bundles-addition	31 dovažok	0,05

Diskretizáciou rovnice (1) získame vzťah pre výpočet hmotnosti uhlíka

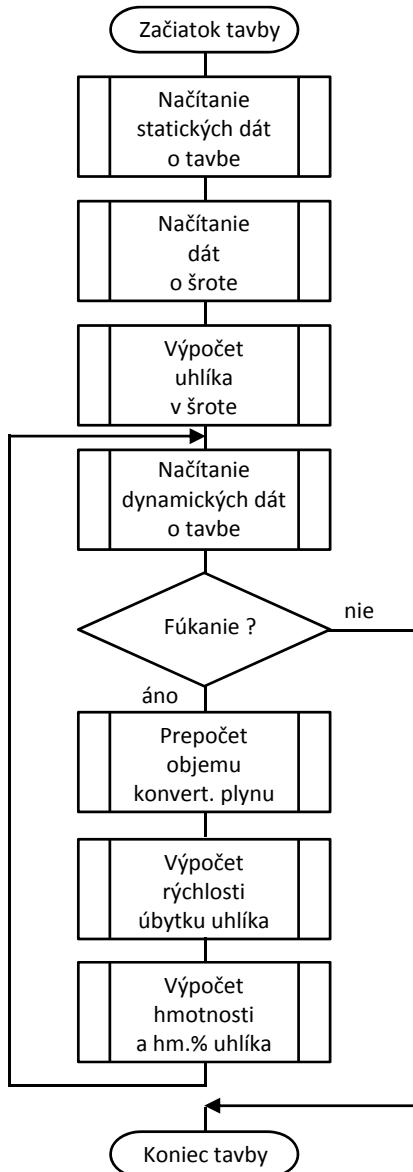
$$m_{C,i+1} = m_{C,i} - v_c \Delta\tau \quad (2)$$

prípadne koncentráciu uhlíka v oceli

$$x_{C,i+1} = x_{C,i} - V_c \Delta\tau / m_{ocel} \quad (3)$$

kde $m_{C,i+1}$ – hmotnosť uhlíka v oceli v nasledujúcom časovom kroku (kg), $m_{C,i}$ – hmotnosť uhlíka v oceli v predchádzajúcom časovom kroku (kg), $\Delta\tau$ – časový krok (s), x_C – hmotnostný zlomok uhlíka v oceli (kg/kg), m_{ocel} – hmotnosť ocele (kg).

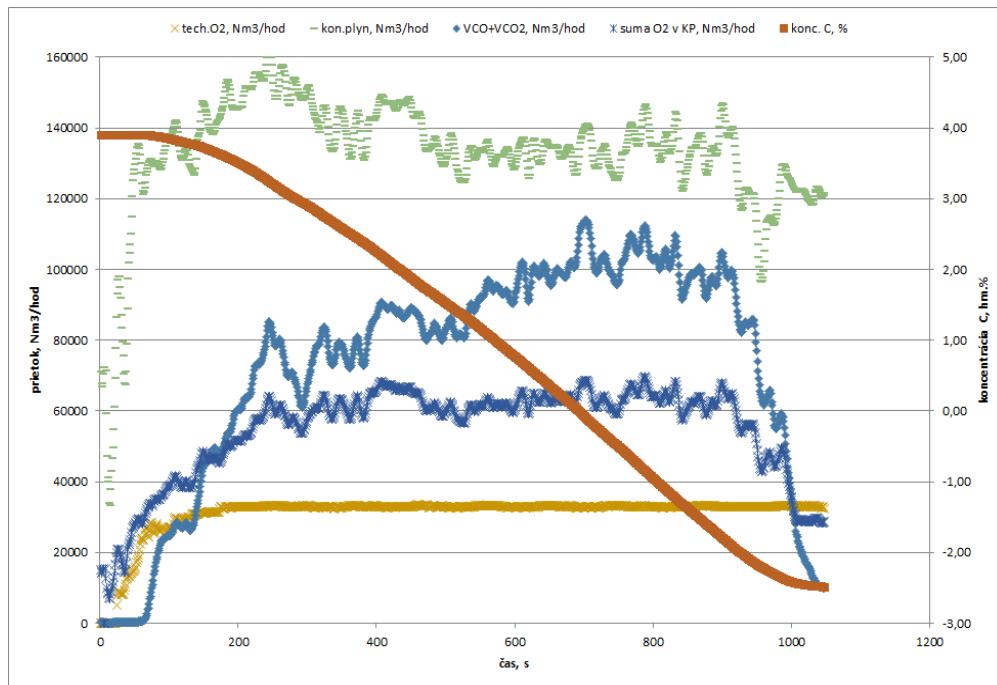
Algoritmus pre realizáciu bilančného modelu uhlíka je znázornený na Obr. 12



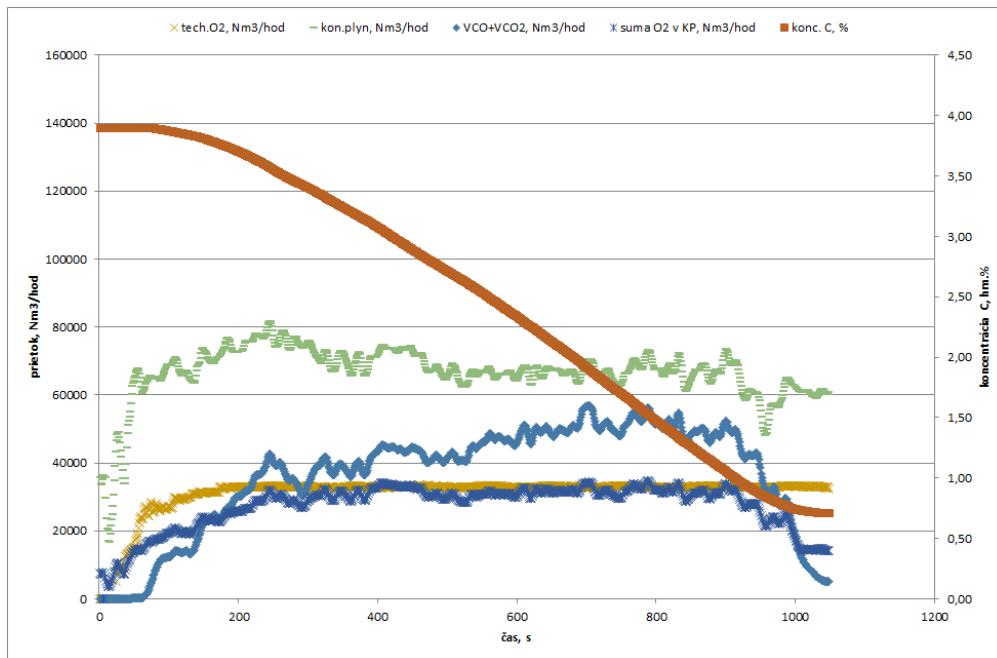
Obr. 12. Algoritmus bilančného modelu uhlíka

2.1.1.3 Dosiahnuté výsledky

Bilančný model uhlíka bol testovaný na 10 tavbách číslo 48873 až 48881. V prípade tavby číslo 48878 a 48881 neboli správne meraný prietok konvertorového plynu. Na obrázku Obr. 13 je znázornený priebeh meraných dynamických dát ako je objemový prietok technického kyslíka, konvertorového plynu, oxidu uhoľnatého, resp. uhličitého a taktiež je znázornený priebeh vypočítanej koncentrácie uhlíka v oceli.

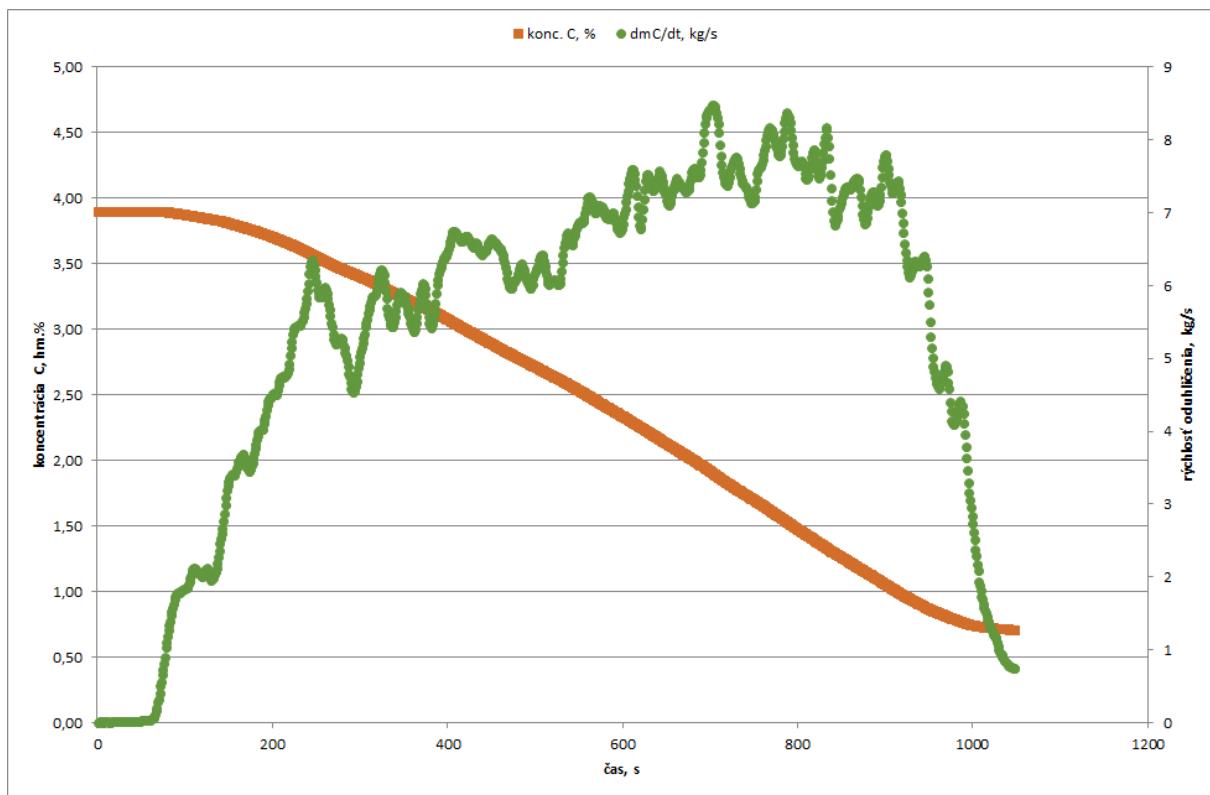


Obr. 13. Priekopy a koncentrácia pre tavbu číslo 48873

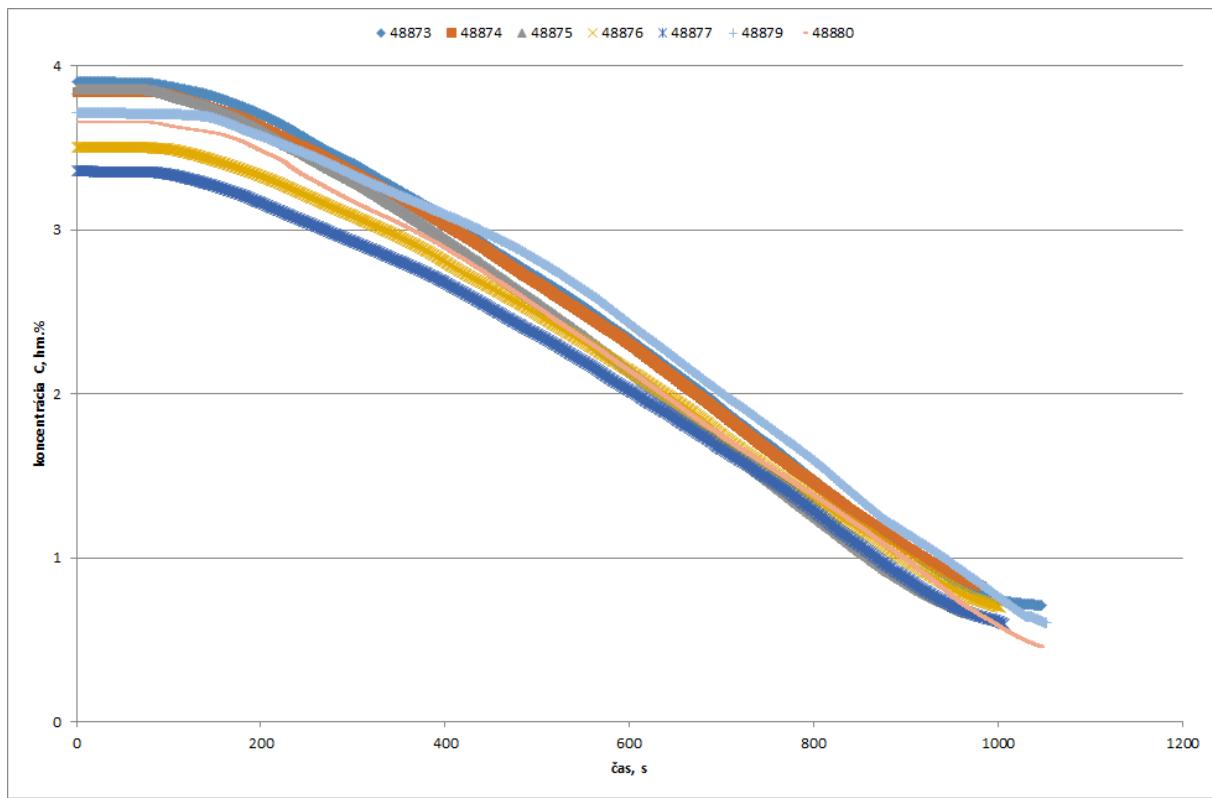


Obr. 14. Korigované priekopy a koncentrácia pre tavbu číslo 48873

Z priebehov na Obr. 13 vyplýva, že priebeh koncentrácie uhlíka prechádza do záporných hodnôt, čo znamená, že množstvo odchádzajúceho uhlíka v podobe CO a CO₂ je väčšie ako množstvo uhlíka na začiatku v kovonosnej vsádzke. Množstvo odchádzajúceho uhlíka je dané koncentráciou CO plus CO₂ a objemom spalín. Ak sa pozrieme na priebehy z hľadiska bilancie kyslíka, tak v záverečnej fáze ked' dochádza k vyhorievaniu uhlíka by prívod kyslíka mal odpovedať kyslíku v konvertorovom plyne. Suma kyslíka v plyne je minimálne dvojnásobná ako kyslík privádzaný, čo vedie k záveru, že objem konvertorového plynu je nesprávne meraný a je väčší oproti skutočnosti. Ak korigujeme objemový prietok konvertorového plynu napríklad na polovicu (Obr. 14) je bilancia kyslíka bližšie k predpokladanej hodnote a priebeh koncentrácie uhlíka neprechádza do záporných hodnôt. Na Obr. 15 je zobrazený priebeh koncentrácie uhlíka a rýchlosť úbytku uhlíka, resp. rýchlosť oduhlíčenia, pričom priebehy majú očakávaný charakter. Na Obr. 16 sú taktiež znázornené priebehy koncentrácie uhlíka pre všetky analyzované tavby, u ktorých bol meraný prietok konvertorového plynu.



Obr. 15. Koncentrácia uhlíka a rýchlosť oduhlíčenia pre tavbu číslo 48873



Obr. 16. Koncentrácia uhlíka pre analyzované tavby

Z dosiahnutých výsledkov vyplýva, že z dostupných dynamických a statických dát je možné určiť priebeh koncentrácie uhlíka, avšak kritické je meranie objemového prietoku konvertorového plynu. Nepresnosť hodnoty prietoku môže byť spôsobená:

- hodnotou teploty a tlaku použitou pri prepočte na normálne podmienky,
- hodnotou prierezu potrubia použitou pri prepočte rýchlosťi na objemový prietok,
- hodnotou rýchlosťi v zmysle, či je to priemerná rýchlosť v potrubí,
- hodnotou rozsahu rýchlosťi,
- hodnotou rozsahu analógového signálu zo snímača rýchlosťi.

2.1.2 Model uhlíka na báze Learning machine method

Jedným z potenciálnym prístupov pre zabezpečenie nepriameho merania koncentrácie uhlíka alebo správnejšie „bezkontaktného merania“ koncentrácie uhlíka v tavenine je aplikácia postupov „data mining“ resp. dolovania dát v kombinácii so strojovým učením t.j. Machine Learning.

Machine learning alebo strojové učenie je podmnožina počítačových vied (soft computing), ktoré sa zaobráva rozpoznávaním tzv. vzorov resp. „patterns“ (z hľadiska vztahu vstup-výstup), ktoré sú pozorovateľné na skúmanom systéme. Teória a algoritmy strojového učenia spadajú pod kategóriu umelej inteligencie. Strojové učenie je oficiálne definované ako "studijný odbor, ktorý dáva počítaču schopnosť učiť sa bez výslovného naprogramovania". Algoritmy strojového učenia sú schopné predpovedať (predikovať) budúce správanie sa systému na základe vytvoreného modelu zo vzoriek tréningového súboru vstupných pozorovaní.

Strojové učenie je úzko spojené s (a často sa prekryva s) výpočtovou štatistikou, ktorá sa tiež zameriava na predikciu s využitím počítačov. Má silné väzby na matematickú optimalizáciu, ktorá prináša metódy, teóriu a aplikačnú doménu do odboru. Strojové učenie sa niekedy kombinuje s procesom „data mining“ resp. dolovanie dát (t.j. analýza skúmaných dát). Data mining predstavuje výpočtový proces objavovania vzorov vo veľkých množinách údajov aj za pomoci algoritmov a metód strojového učenia. Jedná sa o priesecník strojového učenia, štatistiky a databázových systémov. Je to dôležitý proces, pri ktorom sa používajú inteligentné metódy na extrakciu dátových vzorov. Ide o interdisciplinárne podskupinu informatiky. Celkovým cieľom procesu získavania údajov je získať informácie z množiny údajov a premeniť ich na zrozumiteľnú štruktúru na ďalšie použitie. Niektoré metódy prinášajú lepšiu predikciu na úkor spotreby výpočtového výkonu a času, iné predikujú časové rady rýchlejšie ale s horšou predikciou.

Cieľom je vytvoriť model, ktorý by existoval len v počítači (t.j. in machine) ako naučená matica optimálnych parametrov ktoré vstupujú do regresnej funkcie. Pri týchto metódach spravidla ide o extrahovanie užitočných informácií z veľkej databázy v našom prípade databázy tavieb a hľadanie korelácií alebo vzorov spomedzi tisícok polí v databáze. Výsledkom takejto extrakcie dát je trénovacia množina a testovacia množina (tavieb a ich dát). Vytvorený model by mal byť schopný simulať resp. predikovať dynamický priebeh koncentrácie uhlíka v tavenine počas ľubovoľnej tavby na základe veľkého množstva trénovacích dát.

Data mining bol v tomto prípade použitý na **vytvorenie trénovacej množiny dát** nasledovne:

1. Bola vytvorená prázdna databáza statických a dynamických dát tavieb s nasledovnými stĺpcami:

HEATNO, AKOST, T_SKUT_1VKK, C_SKUT, O2_SKUT, O2_TRVANIE,
 T_SUZE, HMOTN_SUZE, C_SUZE, DYNAMIC_DATA, VYSKA_TRYSKY,
 PRIETOK_O2, CO, CO2, H2, O2,
 VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU,
 VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU,
 PODTLAK_PRETLAK_DYMNIK, PRIETOK_SPAL_PROMECON,
 TEPLOTA_TAVENINY_CIELOVA, TEPLOTA_SPALIN,
 KONCENTRACIA_UHLIKA_V_OCELI_CIELOVA,

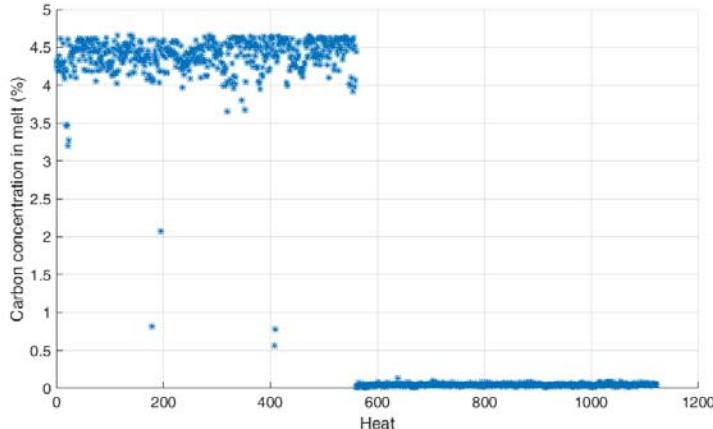
Pozn.: Niektoré stĺpce odpovedajú stĺpcom z databázy statických dát a niektoré z stĺpcom z databázy dynamických dát. Stĺpec DYNAMIC_DATA logickou hodnotou indikuje, či k danej tavbe existujú aj namerané dynamické dátá (v databáze dynamických dát)

2. Naplnenie práznej databázy statických a dynamických dát riadkami z databázy statických dát (spolu 872 riadkov resp. tavieb).
3. Stĺpec KONCENTRACIA_UHLIKA_V_OCELI_CIELOVA sa naplnil hodnotami zo stĺpca C_SUZE (t.j. počiatočná meraná koncentrácia uhlíka v surovom železe).
4. Každej tavbe (riadku) v databáze statických a dynamických dát boli zapísané stĺpce s dynamickými dátami danej tavby (t.j. VYSKA_TRYSKY, PRIETOK_O2, CO, CO2, H2, O2, VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU, VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU, PODTLAK_PRETLAK_DYMNIK, PRIETOK_SPAL_PROMECON), pričom sa vždy vybral ku danej tavbe riadok s ofsetom **200 s od začiatku** (z databázy dynamických dát). Tento ofset bol určený na základe analýzy ustálenia dynamických dát a je možné ho zmeniť. V prípade že k danej tavbe neexistujú dynamické dátá (v databáze dynamických dát) hodnota v stĺpci DYNAMIC_DATA sa pri danej tavbe nastavila na 0. V opačnom prípade t.j. dátu boli úspešne extrahované zapísala sa 1.

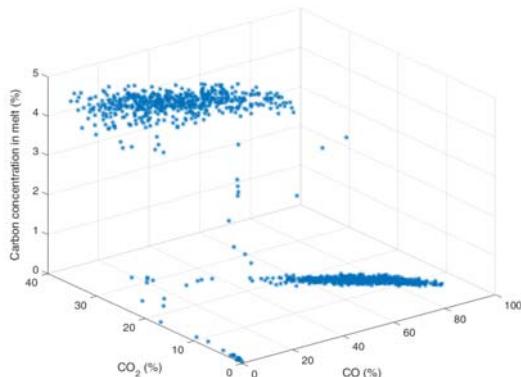
5. Do stĺpca TEPLOTA_SPALIN boli zapísané hodnoty z stĺpca VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU alebo zo stĺpca VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU podľa toho kde boli reálne zaznamenané teploty spalín.
6. Proces napĺňania sa zopakuje ešte raz a to tak, že celkový počet tavieb (riadkov) v databáze statických a dynamických dát sa zdvojnásobí. Stĺpce HEATNO, AKOST, T_SKUT_1VKK, C_SKUT, O2_SKUT, O2_TRVANIE, T_SUZE, HMOTN_SUZE, C_SUZE zostávajú rovnaké ako v prvej časti.
7. Stĺpec KONCENTRACIA_UHLIKA_V_OCELI_CIELOVA sa naplnil hodnotami zo stĺpca C_SKUT (t.j. koncová meraná koncentrácia uhlíka v surovom železe).
8. Každej tavbe (riadku) v databáze statických a dynamických dát boli zapísané stĺpce s dynamickými dátami danej tavby (t.j. VYSKA_TRYSKY, PRIETOK_O2, CO, CO2, H2, O2, VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU, VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU, PODTLAK_PRETLAK_DYMNIK, PRIETOK_SPAL_PROMECON), pričom sa vždy vybral ku danej tavbe riadok s ofsetom **200 s od konca** (z databázy dynamických dát). Tento ofset bol určený na základe analýzy ustálenia dynamických dát a je možné ho zmeniť. V prípade že k danej tavbe neexistujú dynamické dáta (v databáze dynamických dát) hodnota v stĺpci DYNAMIC_DATA sa pri danej tavbe nastavila na 0. V opačnom prípade t.j. dáta boli úspešne extrahované zapísala sa 1.
9. Podľa stĺpca DYNAMIC_DATA bola celá databáza filtrovaná len na exitujúce tavby t.j. tavby ku ktorým existujú aj dynamické dáta). Ďalej je možné databázu filtrovať podľa rôznych stĺpcov prípadne vylúčiť niektoré tavby. Vylúčené boli tavby 47102, 47106, 47095, 47105, 47094. Tieto tavby (riadky) nevstupovali do učenia (fittovania) regresného modelu a slúžili len na otestovanie predikcie.
10. Získali sme tak postupnosť „časový“ rad celkového počtu 1122 tavieb v databáze statických a dynamických dát tavieb.

Predpokladom je, že trénovacia množina by sa priebežne dopĺňala o ďalšie tavby za účelom adaptácie modelu a zlepšovania predikcie. Vytvorená databáza statických a dynamických dát tavieb umožňuje vytvorenie rôznych grafických prehľadov. Vytvorili sme graf, ktorý ilustrujú rozloženie hodnôt koncentrácií uhlíka (počiatočných a koncových) v rade resp. postupnosti tavieb (Obr. 17). Je vidieť, že len málo hodnôt sa nachádza na intervale 0,5-4 % čo neskôr môže znižovať kvalitu predikcie na tomto intervale. Tento problém je možné riešiť zmenou hodnoty ofsetu (od začiatku aj od konca), zvolením iného kritéria výberu údajov (vzoriek) z databázy dynamických dát alebo zvýšením počtu skutočne meraných hodnôt uhlíka. Tento problém ilustruje aj Obr. 18, ktorý znázorňuje závislosť meranej koncentrácie uhlíka na potenciálnych vstupných dynamických dátach (merané CO a CO₂). Podobne Obr. 19 demonštruje závislosť koncentrácie uhlíka na teplote spalín. Uvedený **zhľuk bodov je len ľahko možné popísat' niektorým zo známych regresných modelov**. Načrtnutý problém ale dokáže riešiť vhodná regresná metóda strojového učenia o čom pojednáva nasledujúca kapitola. V našom prípade bola použitá metóda **Support Vector Regression**, ktorá bude v ďalšej časti stručne vysvetlená. **Testované boli dva tavby t.j. č. 47095 a 47105.**

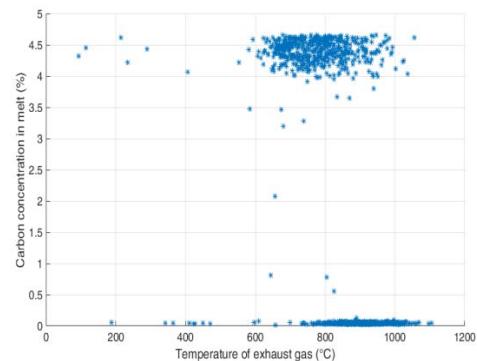
Táto metóda spolu s metódou Monte Carlo už bola v minulosti aplikovaná na predikciu konečnej teploty taveniny a konečnej koncentrácie uhlíka v statickom modeli nie však na dynamických dátach [29].



Obr. 17. Zhluk počiatočných a koncových meraných koncentrácií uhlíka z databázy statických dát interpretovaný ako „časový rad“ resp. postupnosť tovieb



Obr. 18. Závislosť počiatočných a koncových meraných koncentrácií uhlíka v tavenine na koncentrácií CO a CO_2



Obr. 19. Závislosť počiatočnej a koncovej meranej teploty taveniny na meranej teplote spalín

2.1.2.1 Support Vector Machines (SVMs)

Veľa metód strojového učenia sa vyznačuje jednoduchými a efektívnymi algoritmami učenia, napr. jednovrstvové umelé neurónové siete ale z hľadiska riešenia všeobecnej úlohy, t.j. nájsť hranice, ktoré oddelujú určité triedy vo vstupnom priestore sú veľmi silne obmedzené schopnosti naučiť sa iba lineárne oddelovače (priamky, roviny, nadroviny). Na druhej strane existujú metódy ako mnohovrstvové umelé neurónové siete (napr. Sigmoidálne trénované spätným šírením chýb – backpropagation), ktoré sú schopné reprezentovať všeobecné nelineárne funkcie. Ich nevýhodou je však často veľmi náročné učenie, pretože prakticky vždy existuje riziko uviaznutia v lokálnom minime chybovej funkcie a navyše učenie je silne komplikované hľadaním vysokého počtu váh v multidimenzionálnom priestore. K alternatívnym, relatívne novým metódam patria podporné vektory tzv. Support Vector Machines (SVM), ktoré tvoria určitú kategóriu tzv. jadrových algoritmov (kernel machines). Tieto metódy sa snažia využiť výhody poskytované efektívnymi algoritmami pre nájdenie lineárnej hranice a zároveň sú schopné reprezentovať vysoko zložité nelineárne funkcie. Jedným zo základných princípov je prevod daného pôvodného vstupného priestoru do iného viacdimenzionálneho, kde sa od seba

lineárne oddelia triedy. Otázkou však je ako najlepšie umiestniť lineárnu hranicu. Tak aby bola vedená čo najefektívnejšie z hľadiska kategorizácie budúcich dát, ktoré nebolo možné pri tréningu použiť. Samotná optimalizácia umiestnenia hraníc je záležitosť umiestnenia hraníc je v zásade komplikovaná ale riešiteľná úloha. Metóda jadrových funkcií sa snaží nájsť optimálny lineárny oddeľovač. Optimálny lineárny oddeľovač sa v algoritme Support Vector Machine hľadá pomocou metódy kvadratického programovania. Je tu určitá obdoba s hľadaním maxima ako v prípade lineárneho programovania, problém je však zložitejší.

2.1.2.2 Support Vector Regression (SVR)

SVM sa používajú na predikciu a klasifikáciu dát. Boli úspešné aplikované v programoch, ktoré riešia rozpoznávania znakov (klasifikačná úloha) zo skenovaného textu (OCR) [12], [13] a známe sú aj aplikácie pre úlohy regresie a predikcie dát [14], [15]. Veľa aplikácií môžeme nájsť napr. v [6], [7], [8], [9], [10], [16], [17]. V SVM regresii alebo v tzv. **Support Vector Regresii (SVR)** je základná myšlienka mapovať dátá $\mathbf{x} \in \chi$ do vysoko-dimenzióvnego priestoru (high-dimensional feature space \mathcal{F}) prostredníctvom nelineárneho mapovania Φ a vykonaním lineárnej regresie v tomto priestore [11], [12]. Pre vektor \mathbf{x} platí, že $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_l)$. Ak uvažujeme regresiu s jednou výstupnou premennou, tak pozorovania (tzv. observations) na skúmanom objekte môžeme zapísat' ako postupnosť dvojíc $(\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_i, y_i), \dots, (\mathbf{x}_l, y_l)$, $\mathbf{x}_i \in \mathbf{R}^n$, $y_i \in \mathbf{R}$. Toto mapovanie môžeme matematicky zapísat' nasledovne:

$$f(\mathbf{x}) = (\omega \cdot \Phi(\mathbf{x})) + b \quad \text{kde } \Phi(\mathbf{x}): \mathbf{R}^n \rightarrow \mathcal{F}, \omega \in \mathcal{F}, \quad (4)$$

Vektor \mathbf{x}_i predstavuje jednu vzorku vstupných pozorovaní $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{in})$. V našom prípade to môže byť **jeden riadok (tavba) z databázy statických a dynamických dát tavieb** (pozri úvodný text). Parameter b predstavuje hraničnú hodnotu alebo tzv. prah. Takže lineárna regresia vo vysoko-dimenzióvnom priestore (feature space) odpovedá nelineárnej regresii v nízko-dimenzióvnom vstupnom priestore (low dimensional input space) \mathbf{R}^n . Pretože $\Phi(\mathbf{x})$ je pevné, parameter ω určíme z dát minimalizáciou sumy emprického rizika $R_{emp}[f]$ a zložitosti (complexity term) $\|\omega\|^2$, ktorý vynúti rovnosť (flatness) v priestore \mathcal{F} . Matematický zápis optimalizačnej úlohy má nasledovný tvar:

$$\text{MIN } R_{reg}[f] = R_{emp}[f] + \lambda \|\omega\|^2 = \sum_{i=1}^l C(f(\mathbf{x}_i) - y_i) + \lambda \|\omega\|^2, \quad (5)$$

kde l je počet vzoriek $(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_l)$, C je tzv. nákladová funkcia (cost function) a λ je tzv. regularizačná konštanta. Pre veľkú množinu nákladových funkcií, môže byť rovnica (5) minimalizovaná riešením problému kvadratického programovania [18], [19]. Vektor ω môže byť zapísaný v zmysle dátových bodov nasledovne:

$$\omega = \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) \Phi(\mathbf{x}_i), \quad (6)$$

kde α_i , α_i^* sú riešením problému kvadratického programovania. Parametre α_i , α_i^* majú intuitívnu interpretáciu ako sily potiahnutia alebo potlačenia $f(\mathbf{x}_i)$ k meraniu y_i [20]. Ak zoberieme do úvahy rovnice (4) a (6), celý problém môžeme prepísat' ako skalárny súčin (dot products) v nízko-dimenzióvnom vstupnom priestore. Jedná sa o koncept predstavený v [21].

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) (\Phi(\mathbf{x}_i) \cdot \Phi(\mathbf{x})) + b = \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b. \quad (7)$$

Ak zoberieme dva body (vstupy) $\mathbf{x}_i \in \chi$ a $\mathbf{x}_j \in \chi$, potom funkcia, ktorá vracia skalárny súčin medzi ich obrazmi v priestore f je známa ako jadrová funkcia resp. tzv. kernel function. V rovnici (4) je zavedená jadrová funkcia $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\Phi(\mathbf{x}_i) \cdot \Phi(\mathbf{x}_j))$. Dá sa tiež dokázať, že každá jadrová funkcia k vyhovuje Mercerovej podmienke odpovedajúcej skalárному súčinu v nejakom vysoko-dimenzionálnom priestore (feature space) (pozri [11] pre detaily). Nasleduje prehľad niektorých jadrových funkcií:

- RBF kernel - (Gaussová) radiálna bázická jadrová funkcia:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = e^{-\gamma \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}, \quad (8)$$

kde γ je jadrový parameter, ktorý riadi citlivosť jadrovej funkcie.

- Lineárny kernel:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j, \quad (9)$$

- Polynomický kernel:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\gamma (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + 1))^d, \quad (10)$$

kde γ je jadrový parameter, ktorý riadi citlivosť jadrovej funkcie a d je celé číslo.

- Sigmoidálny kernel:

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh(\gamma \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + d). \quad (11)$$

Pre vytvorenie modelu sa v SVR používa tzv. jadrová matica (kernel matrix) $\mathbf{K} = (k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j))_{i,j=1}^l$, kde $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j \in \chi$. Je to symetrická, pozitívne definitná matica a hoci špecifikuje skalárne súčiny medzi všetkými párami bodov $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^l$, kompletne určuje relatívnu pozíciu medzi týmito bodmi vo vloženom priestore. Ak máme jadrovú maticu už viac nepotrebuje jadrovú funkciu ani implicitne definované mapovanie Φ a ani súradnice bodov $\Phi(\mathbf{x}_i)$ [22]. Rozšírený popis jadrových funkcií môžeme nájsť v literatúre [19]. Jadrová matica (v literatúre tiež označovaná ako Gram matrix) má rozmer $l \times l$ a každý jej element k_{ij} je rovný skalárному súčinu prediktorov transformovanému podľa Φ . Platí však, že nepotrebuje poznáť Φ , pretože môžeme použiť jadrovú funkciu na priame generovanie jadrovej matice \mathbf{K} . Použitím tejto metódy, nájde nelineárne SVMs optimálnu funkciu v transformovanom prediktorovom priestore.

ϵ -SVM regresia (epsilon-necitlivá (epsilon-insensitive) regresia) - L1 loss

Pre túto špeciálnu nákladovú funkciu sú Langrageové multiplikátory α_i, α_i^* rozptýlené, t.j. po optimalizácii (5) majú nenulové hodnoty iba keď sa nachádzajú v alebo mimo ohraničenia, čo znamená, že spĺňajú tzv. Karush-Kuhn-Tucker (KKT) podmienky [12][18]. ϵ -insenzitívna nákladová funkcia je daná vztahom:

$$C(f(\mathbf{x}) - y) = \begin{cases} |f(\mathbf{x}) - y| - \epsilon & \text{pre } |f(\mathbf{x}) - y| \geq \epsilon \\ 0 & \text{inak} \end{cases} \quad (12)$$

príslušný problém kvadratického programovania je definovaný ako

$$\begin{aligned} \text{minimalizovať} \quad & \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^l (\alpha_i^* - \alpha_i)(\alpha_j^* - \alpha_j) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \sum_{i=1}^l \alpha_i^* (y_i - \epsilon) - \alpha_i (y_i + \epsilon) \\ \text{za podmienky, že} \quad & \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0, \quad \alpha_i, \alpha_i^* \in \left[0, \frac{1}{\lambda}\right] \end{aligned} \quad (13)$$

Rovnica (10) ukazuje ako vypočítať premenné α_k, α_k^* . Pre správnu voľbu parametra b však musíme priamo využiť KKT podmienky, ktoré vedú k vyššie uvedeným kvadratickým programovacím problémom. Klúčovou myšlienkovou je vybrať také hodnoty, pre ktoré môže byť predikčná chyba $\delta_k = f(\mathbf{x}_k) - y_k$ jednoznačne určená. V ε -insenzitívnom prípade to znamená vybrať body \mathbf{x}_k na okraji (tzv. margin) s vyžadovaním, aby jeden odpovedajúci α_k alebo α_k^* bol v otvorenom intervale $(0, \frac{1}{\lambda})$. V takom prípade poznáme presnú hodnotu

$$\delta_k = \varepsilon \cdot \text{sign}(\alpha_k - \alpha_k^*), \quad (14)$$

predikčnej chyby. Už jeden známy \mathbf{x}_k by bol dostatočný na výpočet parametra b ale z dôvodu naplnenia cieľa stability sa požaduje zobrať priemer všetkých bodov na okrají (margin). Výpočet parametra b potom môžeme realizovať pomocou nasledovného vzťahu:

$$b = \text{average}_k \left\{ \delta_k + y_k - \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right\}. \quad (15)$$

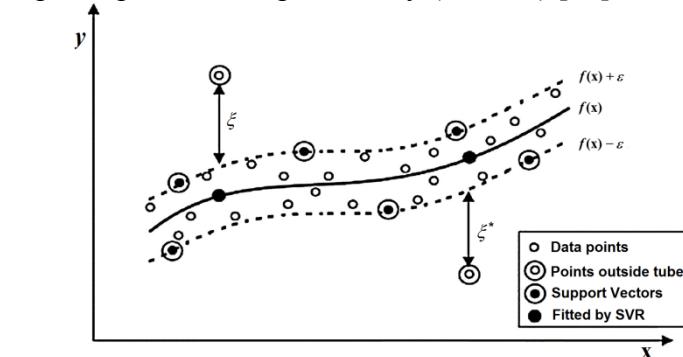
Nakoniec poznamenajme, že keď riešime problém kvadratického programovania s optimalizátorom, ktorý počíta dvojitý duálny problém (tzv. double dual) (pozri vysvetlenie napr. v [23]), môžeme priamo získať hodnoty prvotnej premennej b , ktorá odpovedá premennej b z double dual [19],[16].

V ε -SVM regresii, množina tréningových dát zahŕňa prediktorové premenné \mathbf{x} a pozorované odpovede systému y . Cieľom je nájsť funkciu $f(\mathbf{x})$, ktorá je odvodnená od y pomocou hodnoty nie väčšou než ε pre každý trénovací bod \mathbf{x} a zároveň, aby táto funkcia bola čo najviac plochá (flat) [24].

Funkcia použitá na predikciu nových hodnôt závisí len na podporných vektoroch (support vectors) a má tvar:

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b, \quad (16)$$

kde α, α^* sú nie-negatívne Langrageové multiplikátory pre každé pozorovanie \mathbf{x} . Prahový parameter b môže byť odvodený z Langregeových multiplikátorov. Voľné premenné (slack variables) ξ a ξ^* pre každý bod umožňujú regresným chybám aby existovali až do hodnoty ξ a ξ^* a aby stále splňali požadované podmienky (Obr. 20) [25].



Obr. 20. Schéma SVR s použitím ϵ -insenzitívnej stratovej funkcie.

Nelineárna SVM regresia nájde Langrageové koeficienty tak, že minimalizuje nasledovnú Langrageovú funkciu:

$$L(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^l \sum_{j=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*)(\alpha_j - \alpha_j^*) \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \varepsilon \sum_{i=1}^l (\alpha_i + \alpha_i^*) - \sum_{i=1}^l y_i (\alpha_i^* - \alpha_i), \quad (17)$$

s obmedzeniami:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) &= 0 \\ \forall i: 0 \leq \alpha_i &\leq C \\ \forall i: 0 \leq \alpha_i^* &\leq C \end{aligned} \quad (18)$$

KKT komplementárne podmienky sú:

$$\begin{aligned} \forall i: \alpha_i (\varepsilon + \xi_i - y_i + f(\mathbf{x}_i)) &= 0 \\ \forall i: \alpha_i^* (\varepsilon + \xi_i^* - y_i - f(\mathbf{x}_i)) &= 0 \\ \forall i: \xi_i (C - \alpha_i) &= 0 \\ \forall i: \xi_i^* (C - \alpha_i^*) &= 0 \end{aligned} \quad (19)$$

KKT komplementárne podmienky (19) sú optimalizačné obmedzenia potrebné na získanie optimálnych hodnôt α . Tieto podmienky indikujú, že všetky pozorovania striktne vo vnútri tzv. epsilonovej trubice (epsilon tube) majú Langrageové multiplikátory $\alpha_i=0$ a $\alpha_i^* = 0$. Pozorovania s nenulovými Langrageovými multiplikátormi sa nazývajú podporné vektory (support vectors) [25].

Konštantu C je tzv. krabicové obmedzenie (box constraint). Jedná sa o pozitívnu numerickú hodnotu, ktorá riadi pokutu resp. penále (penalty) zavedenú na pozorovania, ktoré ležia mimo epsilonového okraja (ε) a pomáhajú zabrániť preučeniu tzv. overfitting (t.j. regularizácia). Táto hodnota určuje kompromis medzi plochost'ou (flatness) funkcie $f(\mathbf{x})$ množstvom, do ktorého sú odchýlky väčšie než ε tolerované. Lineárne ε -insenzitívna stratová funkcia, ignoruje chyby, ktoré sú v rámci ε dištancie pozorovanej hodnoty, ktorá je spracovaná tak, ako keby bola rovná nule. Strata je meraná na základe dištancie medzi pozorovanou hodnotou y a ε hranicou [92].

Minimalizačný problém môže byť vyjadrený v štandardnej forme kvadratického programovania a riešený použitím bežných kvadratických programovacích techník. Avšak použitie kvadratického programovacieho algoritmu môže byť výpočtovo veľmi náročné hlavne v prípade veľkej jadrovej matice môže vzniknúť problém s ukladaním dát do pamäti počítača.

V praxi sa používajú dve najčastejšie metódy riešenia tohto optimalizačného problému:

- *Dekompozičná metóda* (tiež známa ako *chunking and working set method*) rozdelí všetky pozorovania do dvoch rozpojených množín: pracovná (working set) a zvyšková množina (remaining set). Dekompozičná metóda modifikuje iba elementy v pracovnej množine v každej iterácii. Pretože len niektoré stĺpce v jadrovej matici sú potrebné v každej iterácii, to redukuje množstvo potrebného pamäťového priestoru.
- *Sekvenčná minimálna optimalizácia* (*Sequential Minimal Optimization* - SMO) je najviac populárny prístup pre riešenie SVM problémov [26]. SMO vykonáva sériu dvojbodových optimalizácií. V každej iterácii pracovná množina dvoch bodov je zvolená na základe výberového pravidla, ktoré používa informáciu druhého rádu. Potom Langrageové multiplikátory pre túto pracovnú množinu sú riešené analyticky použitím prístupu popísaného v [27] a [28]. V SVM regresii je gradientný vektor ∇L pre aktívnu množinu aktualizovaný po každej iterácii. Dekomponovaná rovnica pre n -tý gradientný vektor je nasledovná:

$$(\nabla L)_n = \begin{cases} \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_n) + \varepsilon - y_n, & n \leq l \\ -\sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) \mathbf{K}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_n) + \varepsilon + y_n, & n > l \end{cases} \quad (20)$$

- Iteračný algoritmus s jedným údajom (Iterative Single Data Algorithm - ISDA) aktualizuje jeden Langrageov multiplikátor s každou iteráciou. ISDA je často prevedená bez biasovského parametra b pridaním malej pozitívnej konštanty a do jadrovej funkcie. Zahodením parametra b zahodíme aj sumu obmedzení

$$\sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \quad (21)$$

v duálnej rovnici. To umožňuje aktualizovať jeden Langrageov multiplikátor v každej iterácii čo robí metódu jednoduchšou než SMO pri odstraňovaní mimo ležiacich bodov. ISDA vyberá najhoršie α zo všetkých hodnôt α_i a α_i^* z hľadiska porušenia KKT podmienok a vytvára z nich pracovnú množinu, ktorú aktualizuje[24].

Podrobnejší algoritmus SVR môžeme nájsť v prácach [15] a [30]. SVR je v súčasnosti implementovaná vo viacerých aplikačných programoch (Matlab, R) a nájsť môžeme aj hotové knižnice pre rôzne programovacie jazyky (Java, C#, a pod.). Pre modelovanie konvertorového procesu **bol použitý Matlab a Statistics and Machine Learning Toolbox™**. Na predikciu teploty taveniny v LD konvertore a koncentrácie uhlíka v tavenine bola použitá epsilon-necitlivá (epsilon-insensitive) SVM (ε -SVM) regresia, ktorá je tiež známa ako $L1$ loss, ktorá je implementovaná v spomínanom Toolboxe. Ako algoritmus riešenie optimalizačného problému **bol použitý algoritmus sekvenčnej minimalizačnej optimalizácie (SMO)** – tzv. „SMO solver“. Ďalej budú prezentované výsledky z aplikácie SVR na predikciu uhlíka v tavenine.

2.1.2.3 Dosiahnuté výsledky

Pozorovania pre **naučenie (tréновanie) SVR modelu:**

Vstupy: (databáza statických a dynamických dát tavieb)

$x_1 = \text{CO} (\%)$ (stĺpec CO),

$x_2 = \text{CO}_2 (\%)$ (stĺpec CO₂),

$x_3 = \text{Teplota spalín (}^\circ\text{C)}$ (stĺpec TEPLOTA_SPALIN),

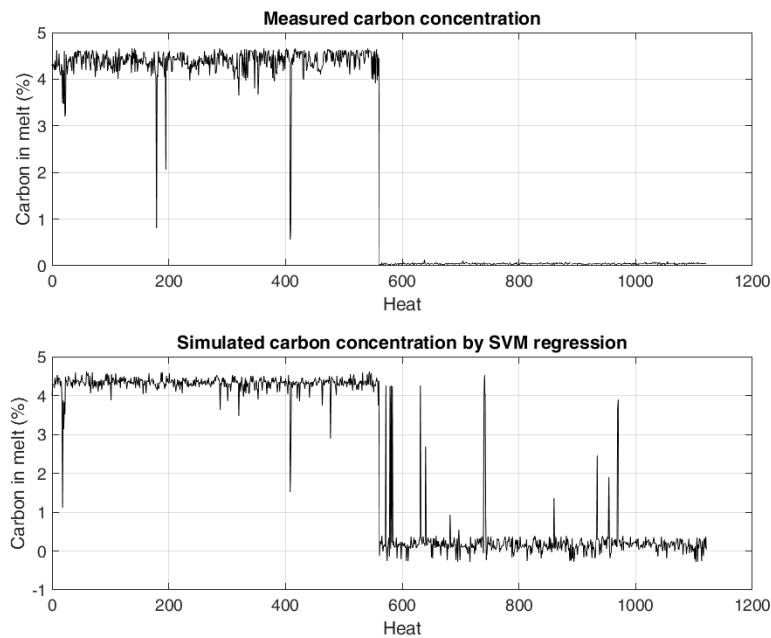
$y = \text{Koncentrácia uhlíka v tavenine (}\%)$

(stĺpec KONCENTRACIA_UHLIKA_V_OCELI_CIELOVA)

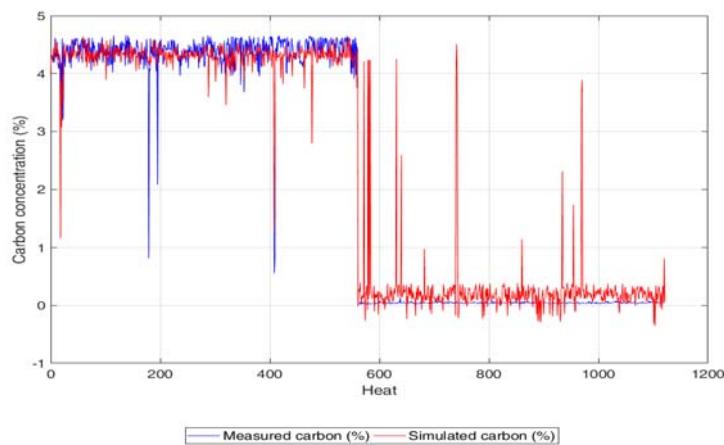
Výstup:

$y = \text{Koncentrácia uhlíka v tavenine (}\%)$ (test predikcie na len trénovacích dátach (Obr. 21, Obr. 22))

Naučený model obsahuje maticu optimálnych podporných vektorov uloženú v pamäti počítača.



Obr. 21. Hore - Meraná koncentrácia uhlíka (počiatočná aj koncová) z postupnosti tavieb,
Dole – Simulovaná (predikovaná) koncentrácia uhlíka na tréningových pozorovaniach



Obr. 22. Výsledok učenia „fittovania“ modelu t.j. porovnanie meranej a simulovanej
(predikcia) koncentrácie uhlíka pre postupnosť tavieb

Test predikcie:

Testované boli dva tavby t.j. č. 47095 a 47105 s nasledovnými pozorovaniami (observations):

Vstupy z tavby: 47095 (nebola súčasťou učenia/trénovania) (Obr. 23)

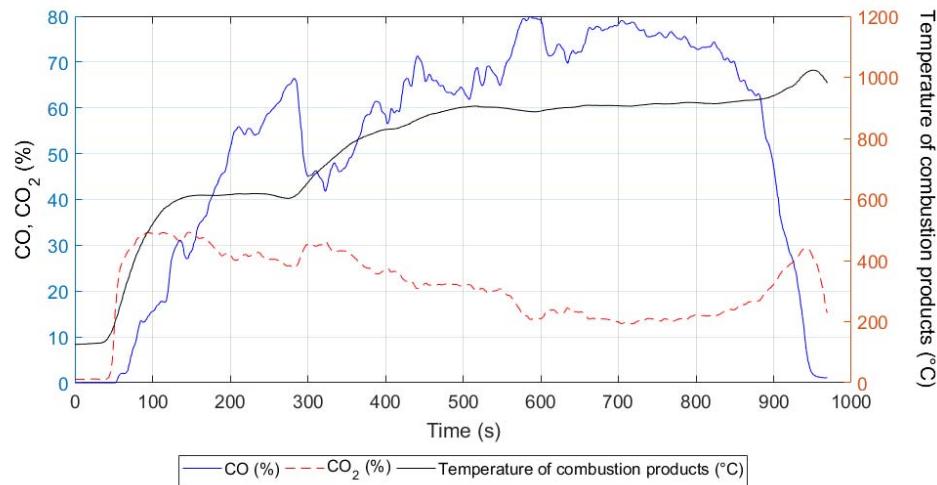
$x_1 = \text{CO} (\%)$ (z databázy dynamický dát)

$x_2 = \text{CO}_2 (\%)$ (z databázy dynamický dát)

$x_3 = \text{Teplota spalín} (\text{°C})$ (stĺpec TEPLOTA_SPALIN v databáze dynamických dát)

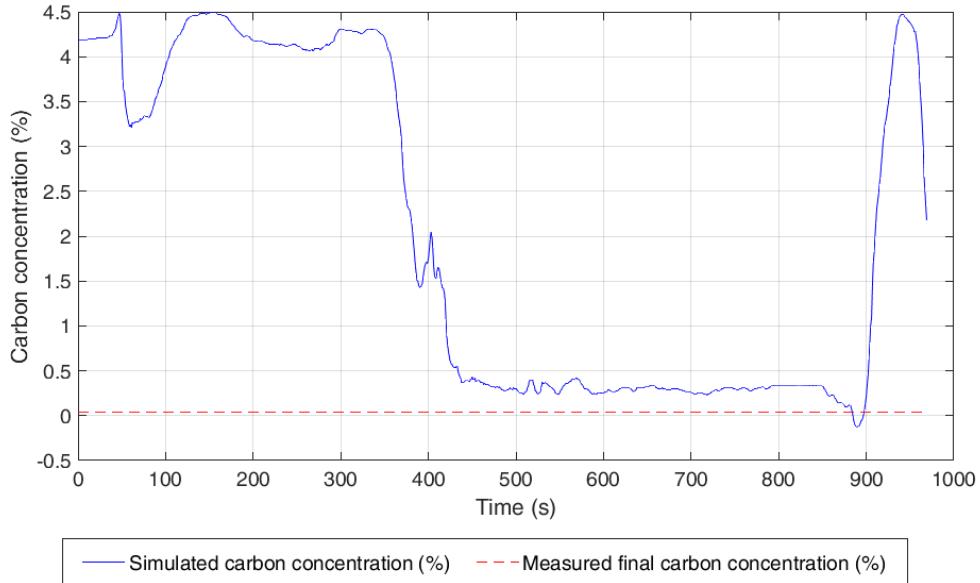
Výstup:

y = Koncentrácia uhlíka v tavenine (%) (simulované resp. v tomto prípade predikované dynamické dátá) (Obr. 24, Obr. 25)



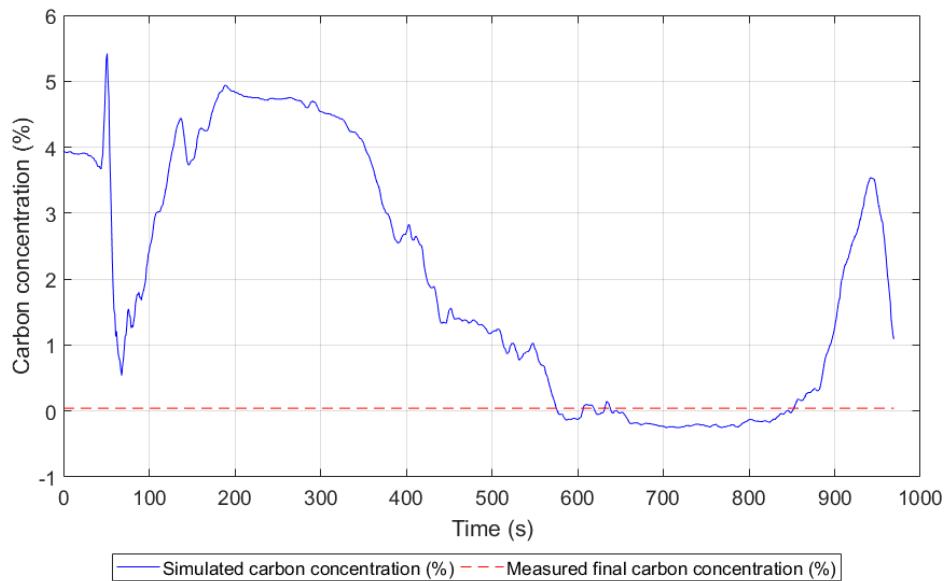
Obr. 23. Merané dynamické hodnoty pre tavbu 47095 ako vstupné pozorovania na výpočet predikcie

```
test_heat_number = 47095
final_temperature = 1647 °C
final_carbon = 0.042 %
kernel_function = gaussian;
```



Obr. 24. Priebeh simulovanej koncentracie uhlíka (predikcia), z tavby 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútne chyba v čase 800 s bola 0,288)

```
test_heat_number = 47095
final_temperature = 1647 °C
final_carbon = 0.042 %
kernel_function = polynomial;
```



Obr. 25. Priebeh simulovanej koncentrácie uhlíka (predikcia), z tavby 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 0,088).

Vstupy z tavby: 47105 (nebola súčasťou učenia/trénovania) (Obr. 26)

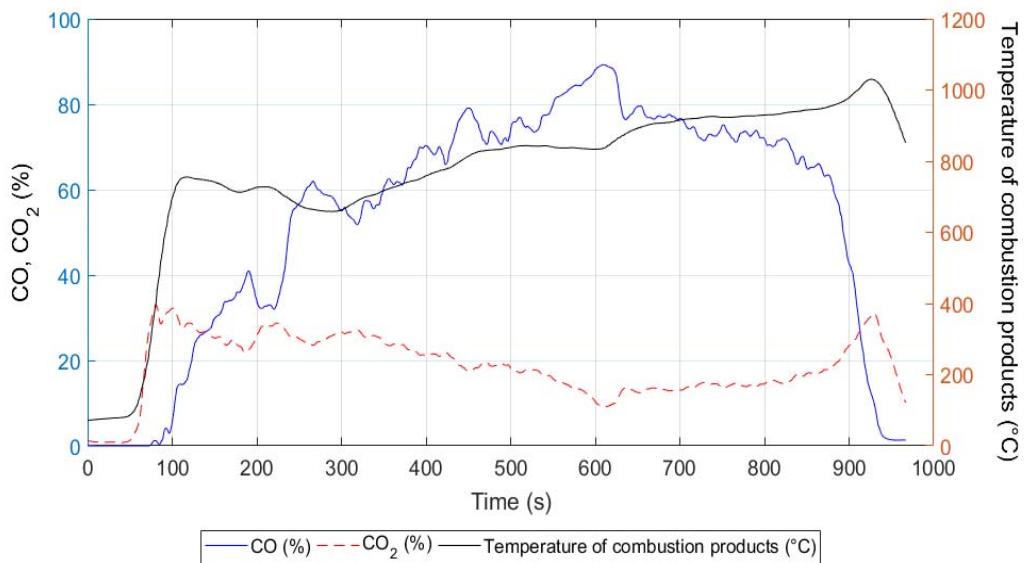
$x_1 = \text{CO } (\%)$ (z databázy dynamický dát)

$x_2 = \text{CO}_2 \text{ } (\%)$ (z databázy dynamický dát)

$x_3 = \text{Teplota spalín } (\text{°C})$ (stĺpec TEPLOTA_SPALIN v databáze dynamických dát)

Výstup:

$y = \text{Konzentrácia uhlíka v tavenine } (\%)$ (simulované resp. v tomto prípade predikované dynamické dátá) (Obr. 27, Obr. 28)

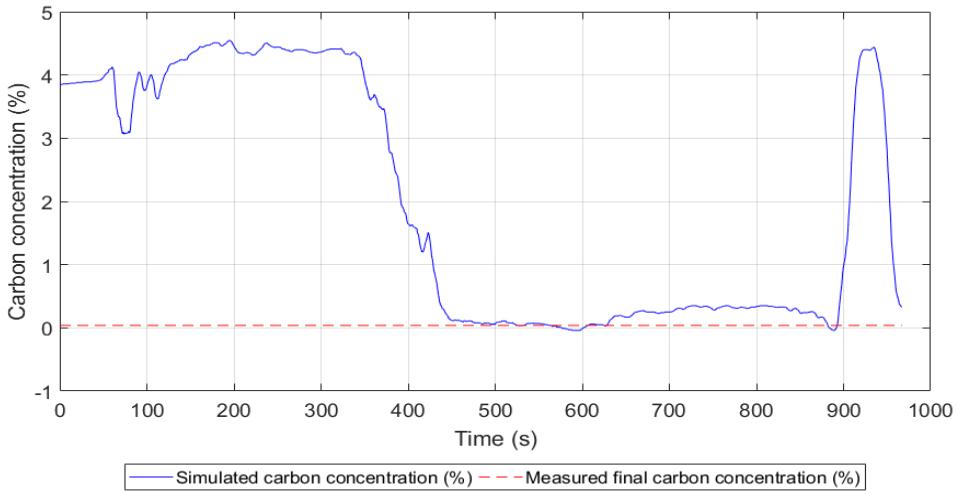


Obr. 26. Merané dynamické veličiny pre tavbu 47105 ako vstupné pozorovania na výpočet predikcie

```

test_heat_number = 47105
final_temperature = 1642 °C
final_carbon = 0.039 %
kernel_function = gaussian;

```

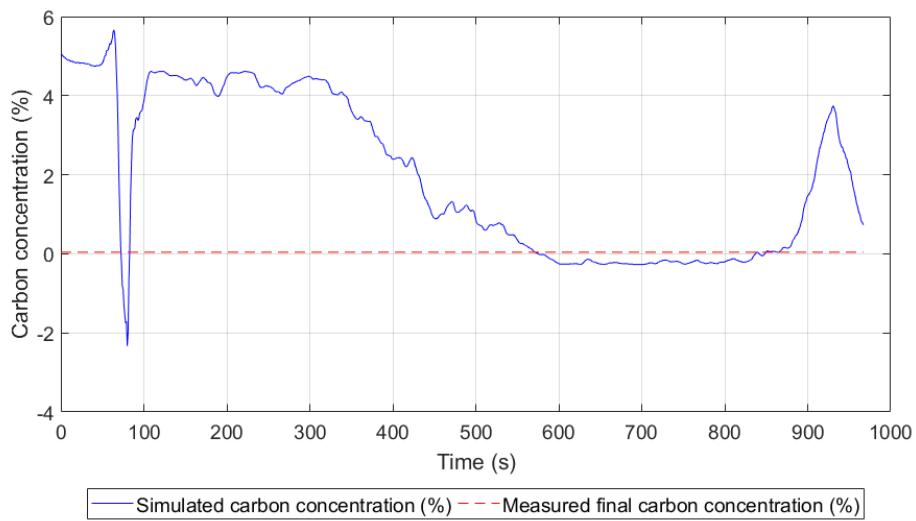


Obr. 27. Priebeh simulovanej koncentrácie uhlíka (predikcia) počas tavby 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 0,301).

```

test_heat_number = 47105
final_temperature = 1642 °C
final_carbon = 0.039 %
kernel_function = polynomial;

```



Obr. 28. Priebeh simulovanej koncentrácie uhlíka (predikcia) z tavby 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 0,151).

Na záver môžeme povedať, že predikcia uhlíka s použitím polynomického kernela dosiahla nižšiu hodnotu absolútnej chyby vo vybranom čase ako v prípade keď bol použitý Gaussov kernel. Simulovaný priebeh koncentrácie uhlíka s použitím polynomického kernela sa viac približuje reálnemu priebehu. Nevyriešený zostáva úsek na začiatku, kde predikcia vytvára nežiadany lokálny extrém v predikovanej hodnote. Rovnako problematický je aj záver tavby, kde vstupné pozorovania nezodpovedajú meranému výstupu. Pričinou je praktizovaný technologický postup t.j. zdvihnutie klobúka LD konvertora. Kvalitu (resp. výkon) predikcie a tvar priebehu predikovaných dynamických dát je možné ovplyvniť zmenou jadrovej funkcie alebo zvolením iného kritéria výberu údajov (vzoriek) z databázy dynamických dát. V ďalšom výskume predpokladáme, že naučenie SVR modelu s viacerými relevantnými vstupmi (napr. pridanie kyslíka ako ďalšieho vstupného pozorovania) a doplnenie dynamických dát o vypočítané hodnoty uhlíka by mohlo zvýšiť kvalitu predikcie. Ďalej predpokladáme, že predikcia by sa zlepšila aj v prípade zvýšenia počtu skutočné meraných koncentrácií uhlíka počas tavby a filtrovaním databázy statických a dynamických dát, aby sa vylúčili nevyhovujúce tavby.

2.2 Nepriame meranie teploty

Pre nepriame meranie teploty sú navrhované a v nasledujúcich podkapitolách popísané nasledujúce spôsoby riešenia:

- bilančný model,
- regresný model,
- model na báze Learning machine method,
- termodynamický model

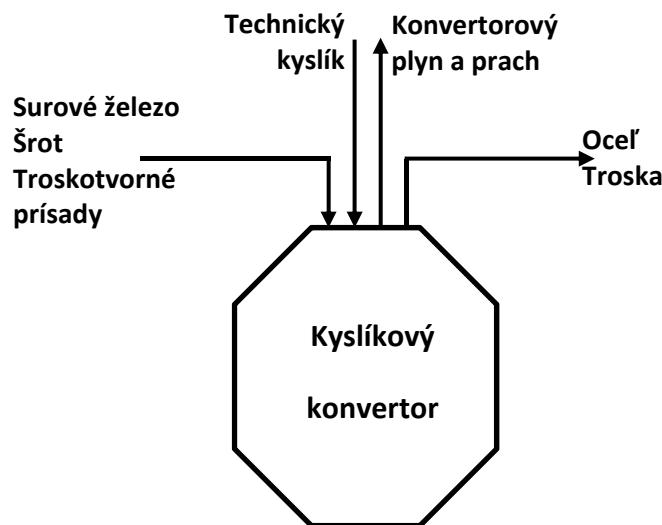
2.2.1 Teplotný bilančný model

Bilančný model predstavuje prístup vychádzajúci z analýzy kyslíkového konvertora, na základe ktorej je vytvorená materiálová a tepelná bilancia statických dát s cieľom stanoviť teplotu ocele na konci procesu.

Kyslíkový konvertor je zariadenie, ktoré pracuje ako vsádzkový reaktor pričom kovonosná vsádzka, t.j. surové železo a šrot a troskotvorné prísady predstavujú základné vstupy vsádzané na začiatku procesu skujňovania. Ocel' a troska sú výstupy z tohto procesu. Kyslíkový konvertor súčasne pracuje aj ako prietokový reaktor pretože do konvertora sa spojite privádza technický kyslík a odvádzsa konvertorový plyn a prach (Obr. 29).

2.2.1.1 Vstupy a výstupy

Kovonosnú vsádzku tvorí šrot, ktorý je selektívne pripravený pre jednotlivé akosti ocele. Základné údaje o šrote sú hmotnosť šrotu (SROT_VAHA, kg) a kód šrotu (SROT_SELEKT, -). Pre každú tavbu je dostupné množstvo jednotlivých položiek šrotu (max. 42) a pre každú položku šrotu je známe jeho zloženie v hm.% (Al, C, Cr, Cu, Fe, Mn, Mo, Ni, P, S, Si, Sn, Al_2O_3 , CaO, FeO, K_2O , MgO, SiO_2 , TiO_2). Pre teplotu šrotu sa uvažuje teplota okolia.



Obr. 29. Vstupy a výstupy kyslíkového konvertora

Ďalšou základnou zložkou kovonosnej vsádzky je surové železo. Meraná je hmotnosť (HMOTN_SUZE, kg), teplota (T_{SUZE} , °C) a zloženie pre uhlík (C_{SUZE} ,

hm.%), kremík (SI_SUZE, hm.%), mangán (MN_SUZE, hm.%), fosfor (P_SUZE, hm.%), síru (S_SUZE, hm.%) a titán (TI_SUZE, hm.%). Okrem uvedených zložiek je možné zrealizovať aj podrobnejšiu analýzu zloženia surového železa v hm.% (B, Ca, Co, Cr, Cu, H₂, Mn, Mo, N₂, Nb, Ni, O₂, P, Pb, S, Sb, Si, Ti, V, Zn, Zr).

Vzhľadom na troskotvorný režim sú potrebné aj ďalšie vstupy v podobe troskotvorných prísad. Pre každú z troskotvorných prísad je známe zloženie uvedené v príslušnom predpise v, hm.% (P, S, Al₂O₃, CaO, Fe₂O₃, MgO, P₂O₅, SiO₂, CO₂) a merané sú hmotnosti vápna (VAPNO_SKUT, kg), dolomitového vápna (DOL_VAPNO_SKUT, kg), TC-MAG 88 troskotvornej prísady (TCMAG_SKUT, kg), magnezitu (MAGNEZIT_SKUT, kg). Okrem troskotvorných prísad sa vsádzajú aj legujúce prísady s príslušným zložením v hm.% (Al, C, Ca, Cr, Mn, N, O, P, Si, Ti) a hmotnosťou brikiet (BRIKETY_SKUT, kg), peliet (PELETY_SKUT, kg), FeSi (FESI_SKUT, kg), FeSi75 (FESI75_SKUT, kg), FeMn (FEMN_SKUT, kg). Pre teplotu prísad sa uvažuje teplota okolia.

K spojite privádzaným vstupom patrí technický kyslík, ktorý má zloženie dané predpisom (99,5% O₂ a 0,5% N₂). Z hľadiska statických dát je známy objem spotrebovaného kyslíka (O₂_SKUT, Nm³) a pre teplotu kyslíka sa uvažuje teplota okolia.

Hlavným výstupom z procesu skujňovania je oceľ, pre ktorú je nameraná teplota (T_SKUT_1VKK, °C) a zloženie pre uhlík (C_SKUT, hm.%), fosfor (P_SKUT, hm.%), mangán (MN_SKUT, hm.%), síru (S_SKUT, hm.%) a chróm (CR_SKUT, hm.%). Podľa akosti vyrábanej ocele je v predpise uvedené požadované zloženie ocele v hm.% (C_MOD, P_MOD, MN_MOD, S_MOD, CR_MOD).

Ďalším výstupom z konvertora je troska, pre ktorú nie sú k dispozícii merané údaje o hmotnosti, zložení a teplote. Spojite odvádzaným výstupom je konvertorový plyn a prach, o ktorých nie sú evidované hodnoty statických dát.

2.2.1.2 Procesy

Podstatou výroby ocele v kyslíkovom konvertore je oxidácia prvkov z kovonosnej vsádzky s kyslíkom fúkaným do konvertora. Oxidy týchto prvkov prechádzajú do trosky alebo odchádzajú vo forme konvertorového plynu (Obr. 30). Intenzita oxidácie jednotlivých prvkov závisí od ich chemickej afinity ku kyslíku.

Oxidácia uhlíka je jedným z najdôležitejších procesov. Uhlík sa v kove počas oceliarského pochodu oxiduje vplyvom kyslíka najmä na CO a čiastočne na CO₂ podľa reakcií



Mangán sa v konvertore oxiduje na MnO



Fosfor je v oceli nežiaduci a oxiduje sa na P_2O_5



Síra patrí medzi škodlivé prvky a prechádza do trosky vo forme CaS na základe reakcie



pričom MnS vzniká podľa reakcie



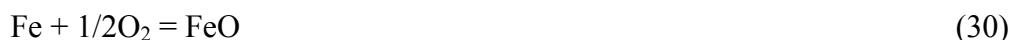
a síra taktiež odchádza aj vo forme plynu ako SO_2



Kremík ma vysokú afinitu ku kyslíku, čiže sa ľahko oxiduje pričom vzniká SiO_2



Potrebné je taktiež uvažovať aj straty železa vo forme FeO a Fe_2O_3



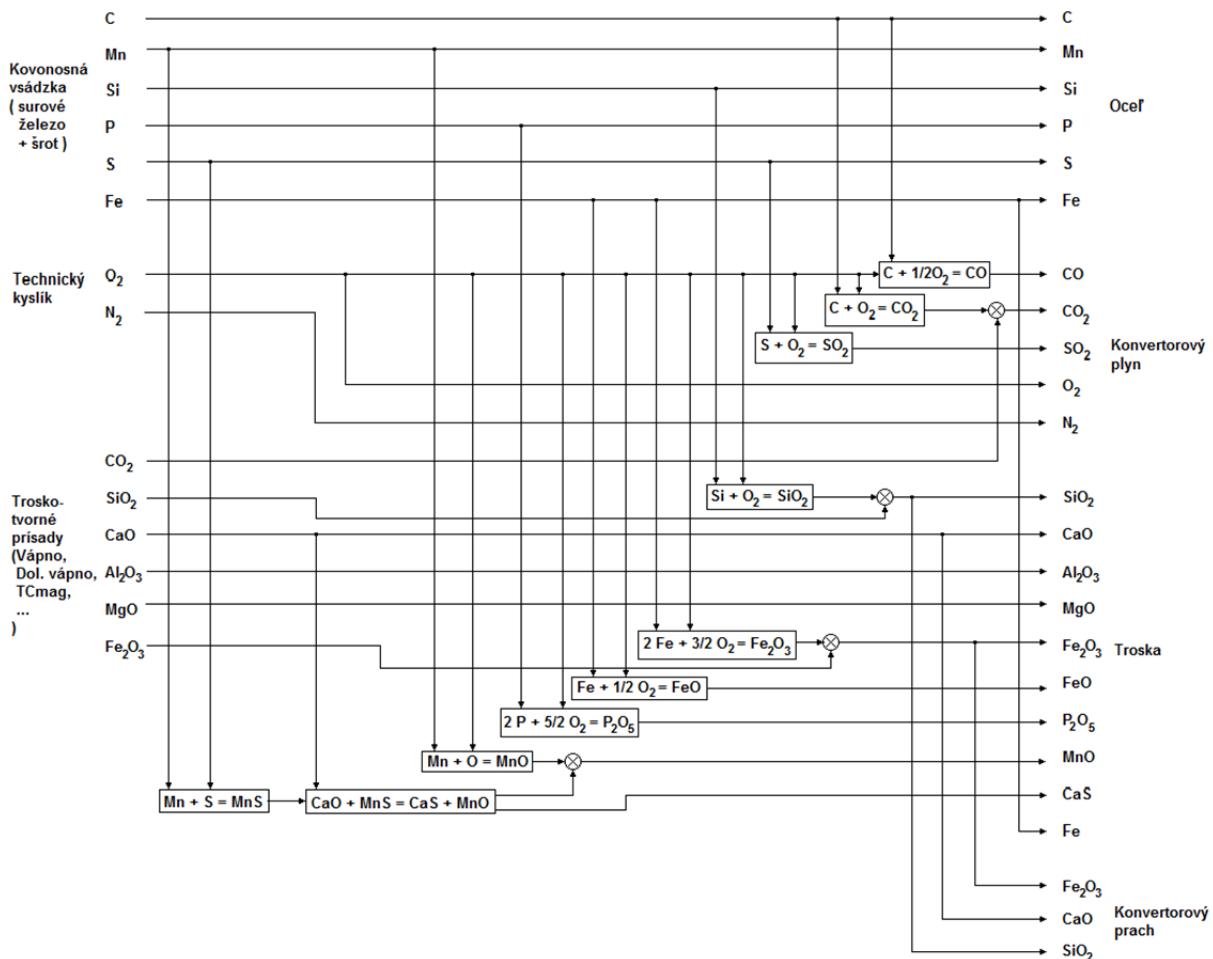
ktoré prechádzajú do trosky, resp. Fe_2O_3 odchádza v konvertorovom prachu. Kvapky kovového železa sa nachádzajú aj v troske (Obr. 30).

Vzniknutý SiO_2 (29) prechádza do trosky ako $2CaO \cdot SiO_2$ podľa rovnice



a obdobne P_2O_5 (4) prechádza do trosky ako $3CaO \cdot P_2O_5$ podľa rovnice





Obr. 30. Schéma bilancie chemických prvkov a zlúčenín

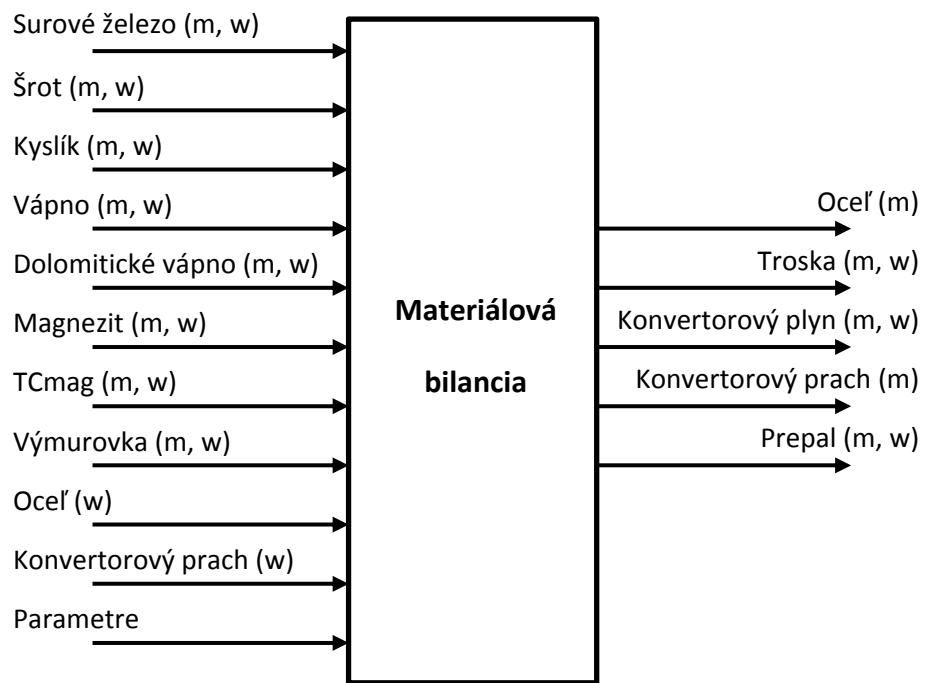
2.2.1.3 Materiálová bilancia

Materiálová bilancia vychádza z ustáleného stavu, pre ktorý platí nasledujúca rovnica

$$\begin{aligned}
 & m_{surFe} + m_{srot} + m_{vapno} + m_{dol,vapno} + m_{magnezit} + m_{TCmag} + m_{vymur} + m_{techO2} = \\
 & m_{ocel} + m_{troska} + m_{kon.plyn} + m_{kon.prach}
 \end{aligned} \tag{34}$$

kde m_{surFe} – hmotnosť surového železa, m_{srot} – hmotnosť šrotu, m_{vapno} – hmotnosť vápna, $m_{dol.vapno}$ – hmotnosť dolomitického vápna, $m_{magnezit}$ – hmotnosť magnezitu, m_{TCmag} – hmotnosť troskotvornej prísady TCmag, m_{vymur} – hmotnosť opotrebovanej výmurovky pripadajúcej na jednu tavbu, m_{techO2} – hmotnosť fúkaného technického kyslíka, m_{ocel} – hmotnosť ocele, m_{trosky} – hmotnosť trosky, $m_{kon.plyn}$ – hmotnosť konvertorového plynu, $m_{kon.prach}$ – hmotnosť konvertorového prachu.

Obdobne ako celkovú materiálovú bilanciu môžeme vyjadriť aj bilancie jednotlivých zložiek, t.j. prvkov a zlúčenín (Obr. 30). Vzhľadom na rôznorodosť chemického zloženia jednotlivých tuhých fáz (napr. šrot, vápno, magnezit a pod.) a kvapalných fáz (napr. surové železo, ocel, troska a pod.) je potrebné uvažovať jednotné zloženie, ktoré má nasledujúce zložky C, Cr, Cu, Fe, Mn, Mo, Ni, P, S, Si, Sn, Ti, V, Zn, Al₂O₃, CaO, CaS, CO₂, FeO, Fe₂O₃, MgO, MnO, P₂O₅, SiO₂. V prípade plynnej fázy, t.j. technického kyslíka a konvertorového plynu uvažujeme zloženie z položkami CO, CO₂, H₂, N₂, O₂, SO₂.



Obr. 31. Schéma materiálovej bilancie

Schéma materiálovej bilancie je znázornená na obrázku Obr. 31. Vstupy ako surové železo, šrot, kyslík, vápno, dolomitické vápno, magnezit, TCmag a výmurovka sú zadané v tvare hmotnosť (m) a zloženie (w). V prípade ocele je zadané požadované zloženie (w) a konvertorový prach je charakterizovaný predpokladaným zložením (w). Vstupujúce parametre predstavujú percento Fe z kovonosnej vsádzky, ktoré prejde ako FeO a Fe₂O₃ do trosky, ako Fe₂O₃ do konvertorového prachu. Ďalej je to percento z C, ktoré prejde na CO (zvyšok na CO₂) a taktiež percento z S, ktoré prejde na SO₂.

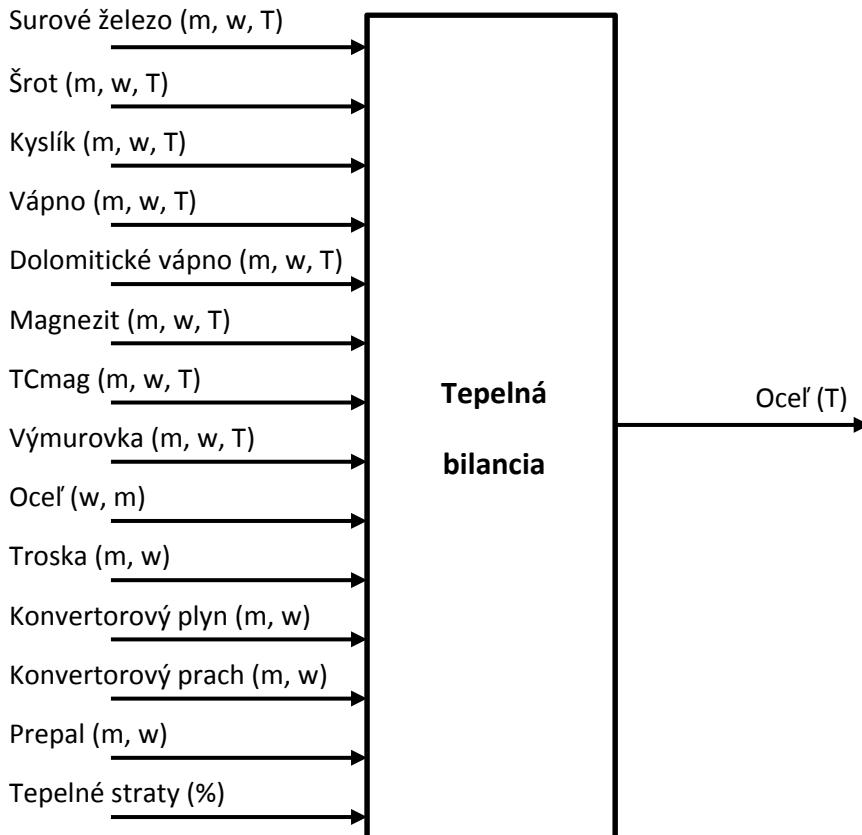
2.2.1.4 Tepelná bilancia

Tepelná bilancia vychádza z ustáleného stavu, pre ktorý platí nasledujúca rovnica (Obr. 32)

$$Q_{surFe} + Q_{srot} + Q_{vapno} + Q_{dol,vapno} + Q_{magnezit} + Q_{TCmag} + Q_{techO2} + Q_{ch_ox} + Q_{ch_tr} =$$

$$Q_{ocel} + Q_{troska} + Q_{ch_CaCO3} + Q_{kon.plyn} + Q_{kon.prach} + Q_{str} \quad (35)$$

kde Q_{surFe} – fyzikálne a latentné teplo surového železa, Q_{srot} – fyzikálne teplo šrotu, Q_{vapno} – fyzikálne teplo vápna, $Q_{dol.vapno}$ – fyzikálne teplo dolomitického vápna, $Q_{magnezit}$ – fyzikálne teplo magnezitu, Q_{TCmag} – fyzikálne teplo troskotvornej príssady TCmag, Q_{techO2} – fyzikálne teplo fúkaného technického kyslíka, Q_{ch_ox} – teplo z oxidačných reakcií, Q_{ch_tr} – teplo reakcií z tvorby trosky, Q_{ocel} – fyzikálne a latentné teplo ocele, Q_{trosky} – fyzikálne a latentné teplo trosky, $Q_{ch.CaCO_3}$ – teplo na rozklad uhličitanu vápenatého, $Q_{kon.plyn}$ – fyzikálne teplo konvertorového plynu, $Q_{kon.prach}$ – fyzikálne teplo konvertorového prachu, Q_{str} – straty tepla.



Obr. 32. Schéma tepelnej bilancie

Fyzikálne a latentné teplo Q_{fli} surového železa, ocele a trosky je vypočítané podľa vzťahu

$$Q_{fli} = m_i (c_{pti} T_{ti} + Q_{ti} + c_{pki} (T_i - T_{ti})) \quad (36)$$

kde m_i – hmotnosť, c_{pti} – merná tepelná kapacita v tuhom stave, T_{ti} – teplota tavenia, Q_{ti} – latentné teplo tavenia, c_{pki} – merná tepelná kapacita v tekutom stave, T_i – teplota.

Fyzikálne teplo Q_{fi} šrotu, vápna, dolomitického vápna, magnezitu, troskotvornej príssady TCmag, technického kyslíka, konvertorového plynu a konvertorového prachu je vypočítané podľa nasledujúceho vzťahu

$$Q_{fi} = m_i c_{pi} T_i \quad (37)$$

kde m_i – hmotnosť, c_{pi} – merná tepelná kapacita, T_i – teplota.

Teplo na rozklad uhličitanu vápenatého $Q_{ch_CaCO_3}$ je dané vzťahom

$$Q_{ch_CaCO_3} = m_{CaCO_3} \Delta H_{CaCO_3} \quad (38)$$

kde m_{CaCO_3} – hmotnosť CaCO₃, ΔH_{CaCO_3} – tepelná energia na rozklad CaCO₃.

Vzťah pre teplo z oxidačných reakcií Q_{ch_ox} má tvar

$$\begin{aligned} Q_{ch_ox} = & Q_{C_CO} m_{C_CO} + Q_{C_CO_2} m_{C_CO_2} + Q_{S_SO_2} m_{S_SO_2} + Q_{Si_SiO_2} m_{Si_SiO_2} + Q_{P_P_2O_5} m_{P_P_2O_5} \\ & + Q_{Mn_MnO} m_{Mn_MnO} + Q_{Fe_FeO} m_{Fe_FeO} + Q_{Fe_Fe_2O_3} m_{Fe_Fe_2O_3} \end{aligned} \quad (39)$$

kde Q_{C_CO} – reakčné teplo reakcie (22), m_{C_CO} – hmotnosť zreagovaného C na CO, $Q_{C_CO_2}$ – reakčné teplo reakcie (23), $m_{C_CO_2}$ – hmotnosť zreagovaného C na CO₂, $Q_{S_SO_2}$ – reakčné teplo reakcie (26), $m_{S_SO_2}$ – hmotnosť zreagovanej S na SO₂, $Q_{Si_SiO_2}$ – reakčné teplo reakcie (27), $m_{Si_SiO_2}$ – hmotnosť zreagovaného Si na SiO₂, $Q_{P_P_2O_5}$ – reakčné teplo reakcie (25), $m_{P_P_2O_5}$ – hmotnosť zreagovaného P na P₂O₅, Q_{Mn_MnO} – reakčné teplo reakcie (24), m_{Mn_MnO} – hmotnosť zreagovaného Mn na MnO, Q_{Fe_FeO} – reakčné teplo reakcie (30), m_{Fe_FeO} – hmotnosť zreagovaného Fe na FeO, $Q_{Fe_Fe_2O_3}$ – reakčné teplo reakcie (31), $m_{Fe_Fe_2O_3}$ – hmotnosť zreagovaného Fe na Fe₂O₃.

Vzťah pre teplo Q_{ch_tr} z reakcií tvorby trosky

$$Q_{ch_tr} = Q_{2CaO_SiO_2} m_{2CaO_SiO_2} + Q_{3CaO_P_2O_5} m_{3CaO_P_2O_5} \quad (40)$$

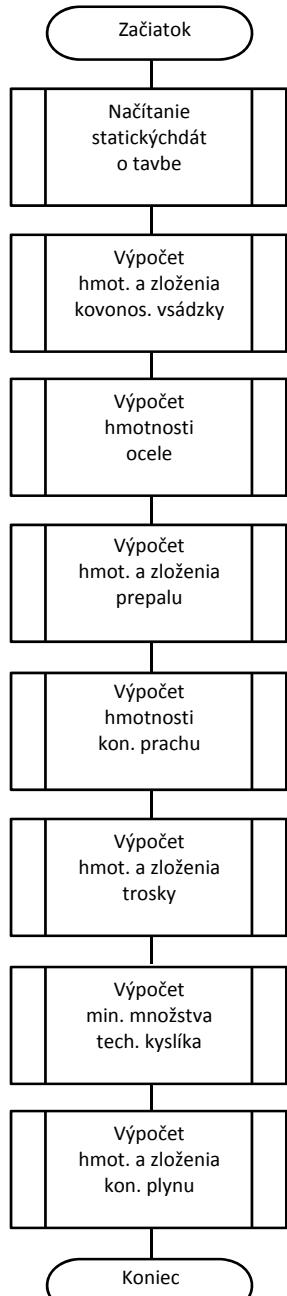
kde $Q_{2CaO_SiO_2}$ – reakčné teplo reakcie (32), $m_{2CaO_SiO_2}$ – hmotnosť zreagovaného SiO₂ na 2CaO.SiO₂, $Q_{3CaO_P_2O_5}$ – reakčné teplo reakcie (33), $m_{3CaO_P_2O_5}$ – hmotnosť zreagovaného P₂O₅ na 3CaO.P₂O₅.

Výpočet strát tepla Q_{str} sa realizuje ako percento z privedeného tepla p_{str} , t.j. z tepla, ktoré je dané súčtom tepiel na ľavej strane rovnice (35), t.j.

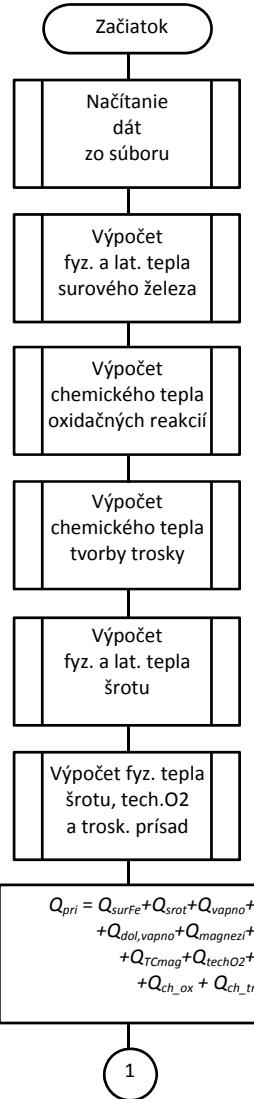
$$\begin{aligned} Q_{str} = & p_{str} \cdot (Q_{surFe} + Q_{srot} + Q_{vapno} + Q_{dol,vapno} + Q_{magnezit} + Q_{TCmag} + Q_{techO_2} + \\ & Q_{ch_ox} + Q_{ch_tr}) / 100 \end{aligned} \quad (41)$$

2.2.1.5 Implementácia

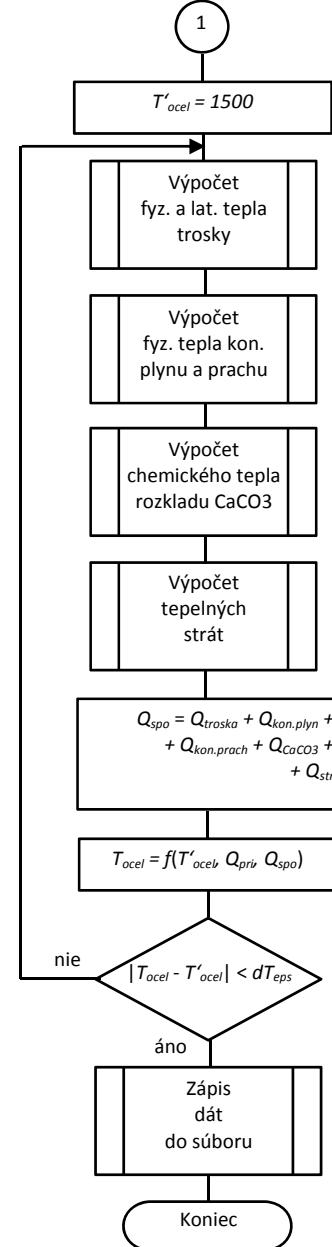
Bilančný model bol implementovaný v jazyku PASCAL. Vstupy do modelu sú uložené a načítané z textového súboru, ktoré sú následne spracované. Vstupy a získané výstupy z bilančného modelu sú uložené do výstupného textového súboru. Práca s textovými súbormi umožňuje realizovať model v režime off-line, resp. nahradzuje prepojenie na databázu statických dát. Stručný algoritmus materiálovej a tepelnej bilancie je zobrazený na Obr. 33 a na Obr. 34.



Obr. 33. Algoritmus materiálovej bilancie



Obr. 34. Algoritmus tepelnej bilancie



a tepelnej bilancie (viď kap. 2.2.1.3, resp. 2.2.1.4). Výstupom z modelu je taktiež bazicita trosky, ktorá v prípade tavby číslo 47108 je 3,01 a nameraná bola 3,2.

Tab. 8. Materiálová bilancia tavby číslo 47108

Vstup:			Výstup:		
Popis	Hmotnosť, t	Podiel, %	Popis	Hmotnosť, t	Podiel, %
Surové železo	150,901	70,0767	Ocel'	172,242	79,9872
Šrot	38,500	17,8790	Troska	25,189	11,6975
Technický kyslík	11,650	5,4101	Konvertorový plyn	15,025	6,9774
Vápno	4,526	2,1018	Konvertorový prach	2,881	1,3378
Dolomitické vápno	3,447	1,6007			
TC mag	2,525	1,1726			
Výmurovka	3,788	1,7591			
Spolu	215,337	100,0000	Spolu	215,337	100,0000

Tab. 9. Tepelná bilancia tavby číslo 47108

Teplo privedené:			Teplo spotrebované:		
Popis	Teplo, MJ	Podiel, %	Popis	Teplo, MJ	Podiel, %
fyz. teplo surového železa	218335,304	56,6412	fyz. teplo ocele	276942,181	56,6412
teplo oxid. reakcií	148505,356	38,5257	fyz. teplo trosky	65335,173	16,9494
fyz. teplo šrotu	8172,888	2,1202	fyz. teplo kon. plynu	33748,597	8,7552
teplo tvorby trosky	5437,947	1,4107	fyz. teplo kon. prachu	4989,774	1,2945
fyz. teplo technického O ₂	3190,094	0,8276	straty tepla	3854,711	1,0000
fyz. teplo vápna	1011,665	0,2624	teplo rozkladu CaCO ₃	600,627	0,1558
fyz. teplo dol. vápna	770,484	0,1999			
fyz. teplo TC mag	47,325	0,0123			
Spolu	385471,063	100,0000	Spolu	385471,063	100,0000

Uvedený bilančný model je určený pre stanovenie teploty ocele na konci procesu, pričom sú známe informácie o vstupoch do procesu a známe je výstupné požadované zloženie ocele podľa akosti. Stanovenie teploty ocele priebežne počas procesu skújnovania pomocou bilančného modelu je problematické nakoľko priebežné zloženie ocele nepoznáme. Ak však vychádzame z predpokladu, že prvky ako Si, Mn, S a P vyhorievajú v prvej štvrtine procesu skújnovania (viď literatúra [1], [2], [3], [4], [5] a pod.) a následne vyhorieva už len C, potom spojením bilancie uhlíka (kap. 2.1.1.2) a tepelnej bilancie (kap. 2.2.1.4) môžeme nepriamo stanoviť teplotu ocele v priebehu procesu skújnovania.

2.2.2 Regresný model pre nepriame meranie teploty

Regresná analýza skúma funkčný vzťah (ariebeh závislosti), podľa ktorého sa mení závisle premenná Y pri zmenách nezávislých veličín x_1, x_2, \dots, x_k . Priebeh závislosti odhadujeme vhodnými funkiami.

$$Y^o = f(x_1, x_2, \dots, x_k, b_1, b_2, \dots, b_p, \varepsilon) \quad (42)$$

kde b_1, b_2, \dots, b_p sú odhadované parametre regresnej funkcie a ε je náhodná odchýlka.

Úlohou regresnej analýzy je nájsť funkčný vzťah podľa ktorého sa mení závislá premenná Y so zmenou nezávislých premenných x_i (vhodnú regresnú funkciu). Súčasne je potrebné odhadnúť parametre regresnej funkcie (b_1, b_2, \dots, b_p). Regresný prístup k tvorbe modelov pre nepriame meranie vychádza z nameraných procesných dát, na základe ktorých môžeme zostaviť vhodné regresné modely.

Odhady parametrov regresnej funkcie môžeme určiť pomocou metódy najmenších štvorcov (MNŠ), ktorá vychádza z Gaussovoho mnohonásobne overeného princípu: „Súčet štvorcov rozdielov medzi skutočnými a teoretickými hodnotami je najmenší možný“.

$$F = \sum_{k=1}^n (Y_i - Y_i^o)^2 \rightarrow MIN \quad (43)$$

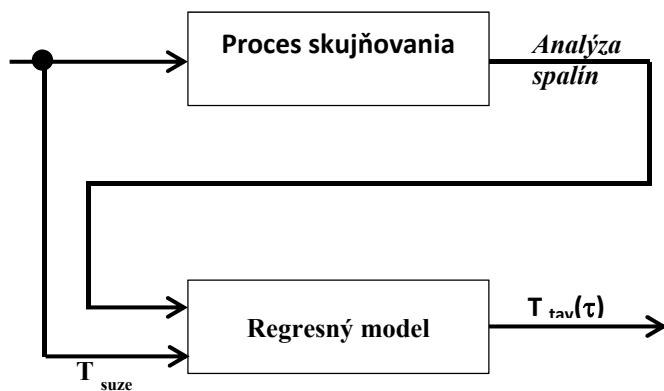
$$F = \sum_{k=1}^n (Y_i - f(x_1, x_2, \dots, x_k, b_1, b_2, \dots, b_p))^2 \quad (44)$$

Minimalizáciou odchýlky F dostaneme sústavu rovníc, z ktorej vieme vypočítať vektor koeficientov – parametrov modelu b_i .

$$\frac{\partial F}{\partial b_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, p. \quad (45)$$

V návrhu pre regresný model nepriameho merania teploty uvažujeme, že nezávislé veličiny budú tvoriť merané veličiny z analýzy spalín (konvertorového plynu) na výstupe z procesu (Obr. 35) a riadiace veličiny procesu. Tieto veličiny sú merané v priebehu procesu v sekundovom časovom intervale. Medzi tieto veličiny patrí:

- koncentrácia CO v spalinách (%),
- koncentrácia CO₂ v spalinách (%),
- koncentrácia H₂ v spalinách (%),
- koncentrácia O₂ v spalinách (%),
- prietok spalín (m³/hod),
- výška trysky (cm),
- objemový prietok kyslíka (Nm³/min).



Obr. 35. Vstupy regresného modelu

2.2.2.1 Štruktúra regresných modelov

Štruktúra navrhnutých regresných modelov pre nepriame meranie teploty taveniny je nasledovná:

Model M1:

$$T_{tav}(k+1) = b_0 + b_1 \cdot T_{sp}(k) + b_2 \cdot CO(k) + b_3 \cdot CO_2(k) + b_4 \cdot V_{O2}(k) \quad (46)$$

Model M2:

$$T_{tav}(k+1) = b_0 + b_1 \cdot T_{sp}(k) + b_2 \cdot CO(k) + b_3 \cdot CO_2(k) + b_4 \cdot H_2(k) + b_5 \cdot T_{tav}(k) \quad (47)$$

Model M3:

$$\begin{aligned} T_{tav}(k+1) = & b_0 + b_1 \cdot T_{sp}(k) + b_2 \cdot CO(k) + b_3 \cdot CO_2(k) + b_4 \cdot H_2(k) + b_5 \cdot T_{tav}(k) \\ & + b_6 \cdot P_{gran}(k) \end{aligned} \quad (48)$$

Model M4:

$$\begin{aligned} T_{tav}(k+1) = & b_0 + b_1 \cdot T_{sp}(k) + b_2 \cdot CO(k) + b_3 \cdot CO_2(k) + b_4 \cdot H_2(k) + b_5 \cdot T_{tav}(k) \\ & + b_6 \cdot P_{gran}(k) + b_7 \cdot V_{O2}(k) \end{aligned} \quad (49)$$

kde b_i sú parametre modelu

T_{tav} je teplota taveniny (nepriamo meraná)

T_{sp} je teplota spalín

CO je koncentrácia CO v spalinách

CO_2 je koncentrácia CO_2 v spalinách

H_2 je koncentrácia H_2 v spalinách

P_{gran} je podtlak spalín na vstupe do granivoru

V_{O2} kumulatívne množstvo nafúkaného kyslíka

Regresný model predikuje, resp. nepriamo meria teplotu taveniny v priebehu tavby, na základe priamo meraných procesných veličín. Model 1 patrí medzi modely bez tzv. spätnej väzby. V každom časovom kroku (v našom prípade 1s) vypočíta teplotu taveniny na základe meraných veličín z predchádzajúceho časového kroku. Modely 2-4 majú spätnú väzbu, tzn. vstup nepriamo meranej veličiny T_{tav} do modelu nepriameho merania vypočítanej z predchádzajúceho časového kroku.

2.2.2.2 Dosiahnuté výsledky

Uvedené regresné modely M1 až M4 boli overené na 20-ich tavbách v dvoch variantach. V prvej variante (Variant I) boli vybrané a overené tavby bez prerušenia a z rôznych akostí a v druhej variante (Variant II) to boli len tavby vyrábanej akostí 684. Výsledky modelov sú

prezentované v podobe absolútnej ($Todch_{abs}$) a relatívnej odchýlky ($Todch_{rel}$). Pre I. variant sú výsledky uvedené v Tab. 10 pre všetky modely. V poslednom riadku tabuľky je uvedená priemerná absolútna a relatívna odchýlka pre všetky štyri modely. Z tohto pohľadu sa najlepšie javí model M4, ktorého priemerná relatívna odchýlka je 1.16% čo zodpovedá 19.4°C .

$$Todch_{abs} = abs(T^{NM} - T^{mer}) \quad (\text{°C}) \quad (50)$$

$$Todch_{rel} = \frac{abs(T^{NM} - T^{mer})}{T^{mer}} \cdot 100 \quad (\%) \quad (51)$$

kde T^{NM} je teplota ocele na konci tavby podľa modelu

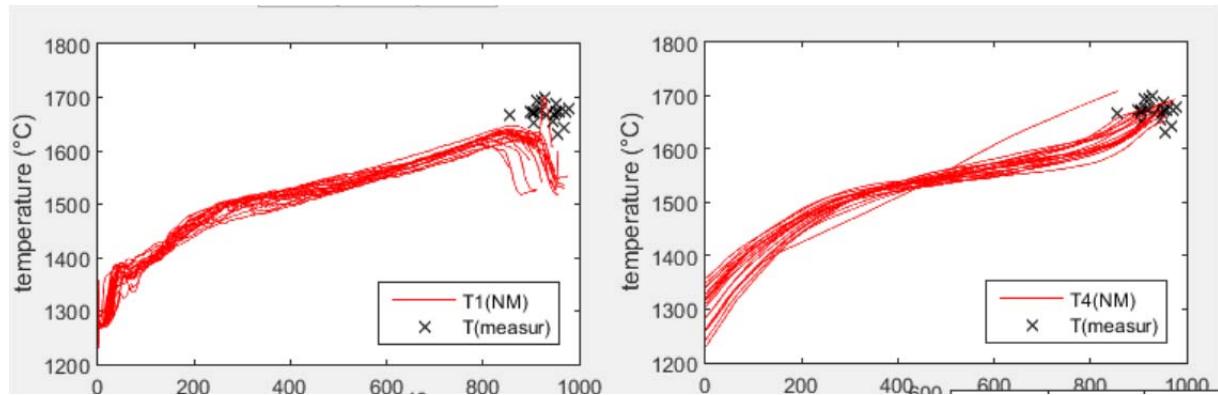
T^{mer} je meraná teplota ocele na konci tavby

Tab. 10. Výsledky regresných modelov pre variant I

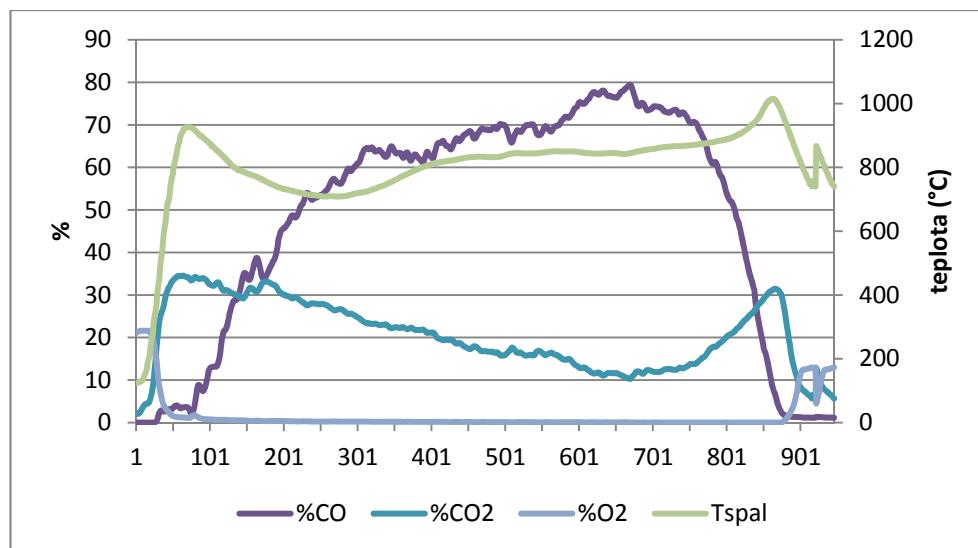
	<i>abs_odch (°C)</i>				<i>rel_odch (%)</i>			
	M1	M2	M3	M4	M1 %	M2 %	M3 %	M4 %
46886	112.88	126.66	161.39	47.15	6.87	7.70	9.82	2.87
46887	138.62	80.12	69.72	12.60	8.28	4.79	4.16	0.75
46888	147.60	30.72	27.95	0.90	8.81	1.83	1.67	0.05
46890	87.42	22.58	36.00	3.24	5.24	1.35	2.16	0.19
46891	85.35	9.74	20.14	8.19	5.10	0.58	1.20	0.49
46892	67.51	55.50	72.02	26.17	4.04	3.33	4.32	1.57
46893	40.64	43.34	56.55	17.68	2.46	2.62	3.42	1.07
46894	56.96	11.03	32.58	27.21	3.41	0.66	1.95	1.63
46895	136.23	28.28	23.26	2.31	8.17	1.70	1.39	0.14
46899	94.39	3.51	8.02	6.11	5.64	0.21	0.48	0.37
46900	167.38	1.14	20.86	17.67	9.88	0.07	1.23	1.04
46905	99.84	106.81	72.26	41.53	5.99	6.41	4.33	2.49
46906	137.06	72.46	56.45	14.21	8.11	4.29	3.34	0.84
46931	137.07	10.03	39.17	43.34	8.07	0.59	2.31	2.55
46932	152.39	11.39	50.42	38.17	9.00	0.67	2.98	2.25
46933	48.52	48.91	15.24	16.12	2.93	2.96	0.92	0.97
46934	29.83	114.17	77.98	31.34	1.83	7.00	4.78	1.92
46935	154.38	41.76	9.46	17.94	9.23	2.50	0.57	1.07
46936	127.28	58.39	15.10	14.85	7.58	3.48	0.90	0.88
46937	113.56	16.68	15.47	1.06	6.79	1.00	0.92	0.06
priemer	106.7	44.7	44.0	19.4	6.37	2.69	2.64	1.16

Na Obr. 36 sú uvedené priebehy nepriameho merania teploty taveniny v priebehu tavby pre model M1 (vľavo) a model M4 (vpravo). Z kvalitatívneho hľadiska sú priebehy teplôt v poriadku až na koniec tavby u modelu M1, kde teplota taveniny prudko klesá. Model M1 je model bez tzv. spätnej väzby (nevstupuje do neho teplota taveniny z predchádzajúceho časového kroku) a vstupom do modelu sú len priamo merané procesné

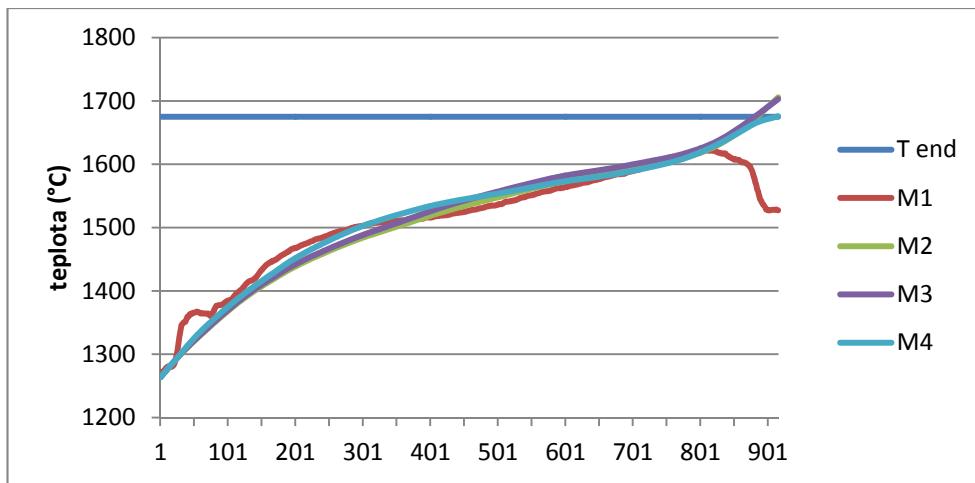
veličiny. Ako môžeme vidieť na Obr. 37, na konci tavby dochádza k poklesu percentuálneho obsahu CO, teploty spalín a naopak k zvýšeniu percentuálneho obsahu CO₂, čo sú vstupy do modelu M1 a majú vplyv na pokles teploty na konci tavby. Obr. 38 dokumentuje pokles teploty modelu M1 na konci tavby.



Obr. 36. Priebeh nepriamo meraných teplôt podľa M1 a M4 pre variant I



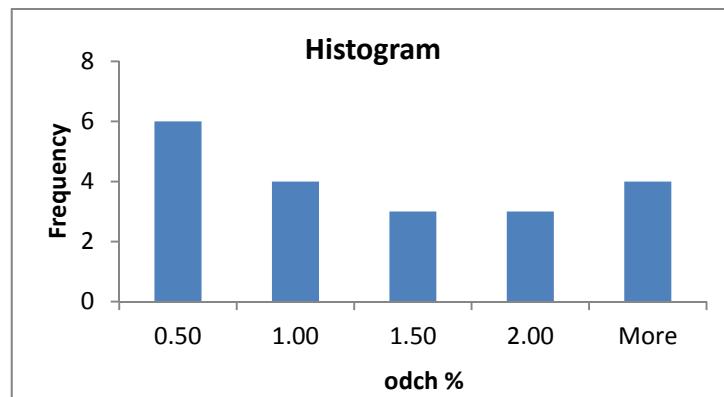
Obr. 37. Priebeh koncentrácie CO, CO₂, O₂ v spalinách a teplota spalín pre tavbu 46888



Obr. 38. Priebeh nepriamo meraných teplôt regresných modelov pre tavbu 46888 – variant I

Na Obr. 39 je zobrazený histogram presnosti modelu M4 podľa relatívnej odchýlky, 65 % taviač (13 z 20-ich) dosiahlo odchýlku do 1,5%.

odch%	početnosť	%
0.50	6	30.00%
1.00	4	50.00%
1.50	3	65.00%
2.00	3	80.00%
More	4	



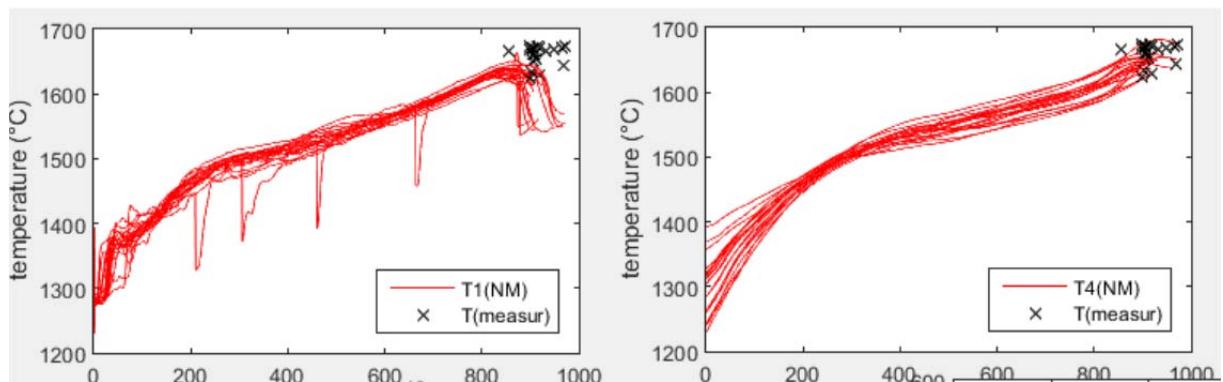
Obr. 39. Histogram presnosti modelu M4 pre variant I

V Tab. 11 sú uvedené výsledky regresných modelov pre nepriame meranie teploty pre variant II (tavby akosti 648). Aj u tejto variante je z hľadiska priemernej odchýlky najlepší model M4, ktorého priemerná relatívna odchýlka je 1.49% čo zodpovedá 24.8°C.

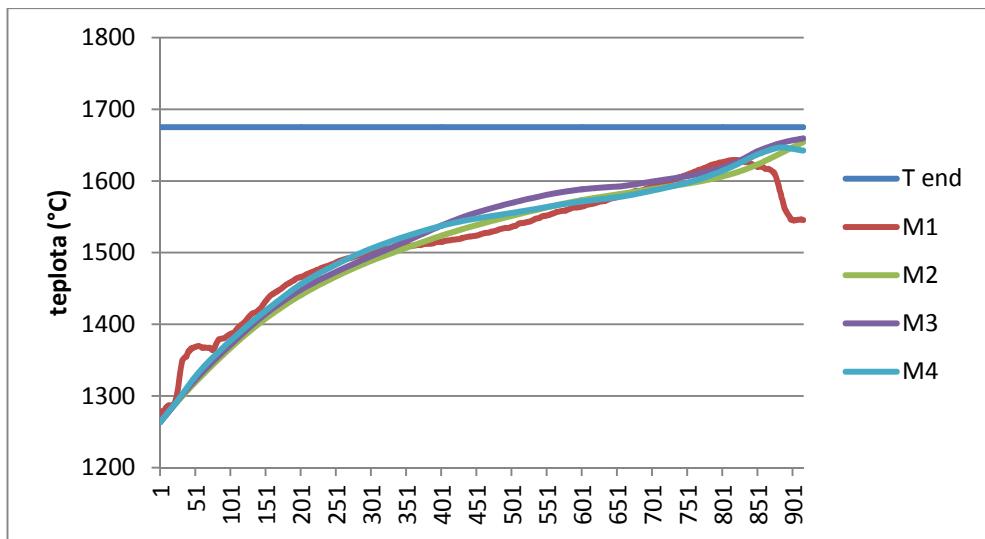
Na Obr. 40 sú uvedené priebehy nepriameho merania teploty taveniny pre model M1 (vľavo) a model M4 (vpravo). U modelu M1 môžeme opäť vidieť pokles teploty na konci tavby. Pre grafické porovnanie výsledkov jednotlivých modelov je na Obr. 41 znázornený priebeh teploty všetkých modelov u tavby 46888 ako to bolo vo variante I (Obr. 38).

Tab. 11. Výsledky regresných modelov pre variant II

Akost 684	abs_odch (°C)				rel_odch (%)			
	M1	M2	M3	M4	M1 %	M2 %	M3 %	M4 %
46885	119.30	2.34	14.89	34.90	7.14	0.14	0.89	2.09
46886	94.85	39.43	149.95	30.67	5.77	2.40	9.12	1.87
46887	120.67	1.80	7.70	23.55	7.21	0.11	0.46	1.41
46888	129.60	20.53	15.59	32.68	7.74	1.23	0.93	1.95
46889	67.57	9.69	3.49	6.64	4.15	0.59	0.21	0.41
46890	70.59	37.43	57.72	17.54	4.23	2.25	3.46	1.05
46891	69.39	37.49	51.63	28.92	4.15	2.24	3.09	1.73
46892	52.60	53.97	88.01	35.53	3.15	3.23	5.27	2.13
46893	28.09	32.36	79.25	30.65	1.70	1.96	4.80	1.86
46894	44.36	37.64	75.82	43.43	2.65	2.25	4.53	2.60
46895	118.33	31.54	22.30	14.88	7.09	1.89	1.34	0.89
46896	74.88	33.29	61.14	15.31	4.58	2.04	3.74	0.94
46897	40.59	14.09	26.22	45.30	2.43	0.85	1.57	2.72
46898	60.86	40.40	58.35	34.03	3.75	2.49	3.59	2.09
46899	78.39	30.66	1.85	18.90	4.68	1.83	0.11	1.13
46965	101.85	20.59	44.89	3.81	6.16	1.24	2.71	0.23
46966	38.61	20.63	35.13	37.00	2.31	1.24	2.11	2.22
46967	43.90	13.19	20.97	22.86	2.64	0.79	1.26	1.38
46968	46.23	2.76	32.48	11.96	2.78	0.17	1.96	0.72
47081	75.16	25.55	23.99	6.75	4.57	1.55	1.46	0.41
priemer	73.8	25.3	43.6	24.8	4.44	1.52	2.63	1.49

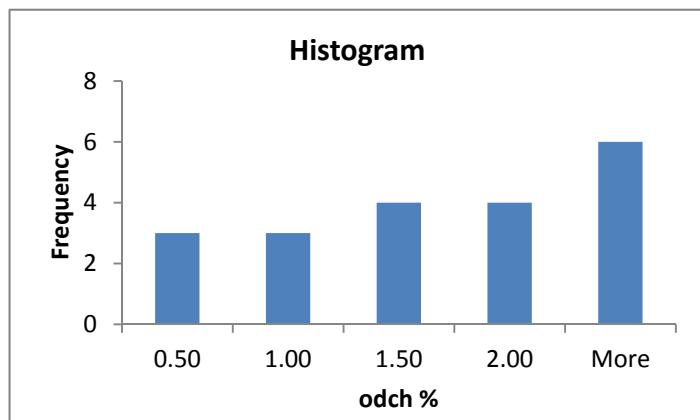


Obr. 40. Priebeh nepriamo meraných teplôt podľa M1 a M4 pre variant II



Obr. 41. Priebeh nepriamo meraných teplôt regresných modelov pre tavbu 46888 – variant II

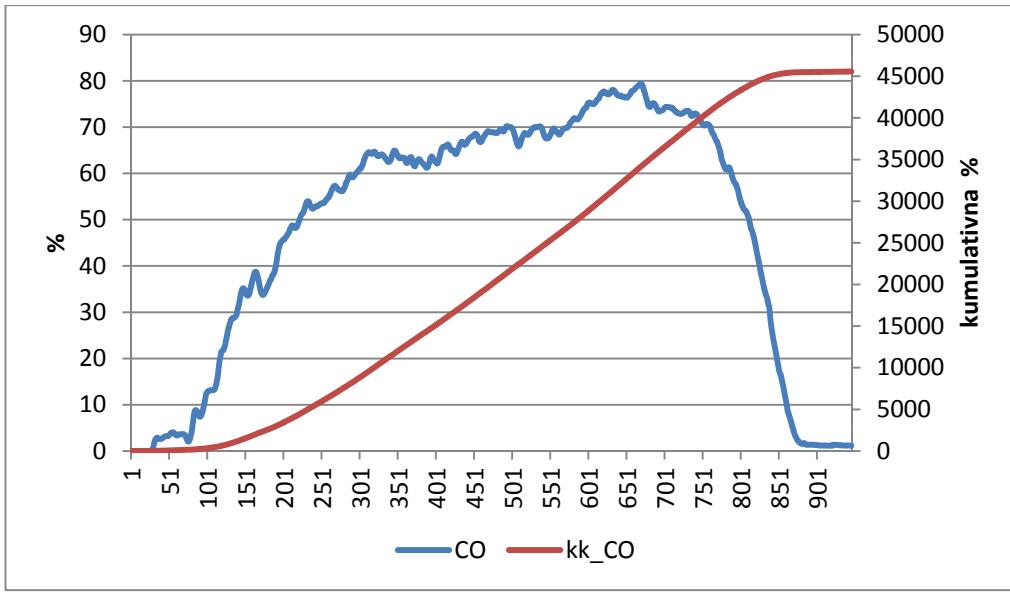
odch%	početnosť	%
0.50	3	15.00%
1.00	3	30.00%
1.50	4	50.00%
2.00	4	70.00%
More	6	



Obr. 42. Histogram presnosti modelu M4 pre variant II

2.2.2.3 Zmena štruktúry modelov M1 a M4

Za účelom zlepšenia výsledkov regresných modelov nepriameho merania teploty taveniny sme sa rozhodli pre zmenu v štruktúre modelov M1 a M4. Model M1 nám dával prakticky najhoršie výsledky, ktoré boli zapríčinené poklesom koncentrácie CO resp. nárastom koncentrácie CO₂ v spalinách. Model M4 nám dával doteraz najlepšie výsledky z hľadiska odchýlky. Rozhodli sme sa nahradíť v modeloch M1 a M4 aktuálnu koncentráciu CO a CO₂ v spalinách kumulatívnu koncentráciou (Obr. 43). Vznikli dva nové modely M5 (50) a M6 (51).



Obr. 43. Priebeh koncentrácie CO a kumulatívnej koncentrácie CO (kk_CO) v spalinách

Model M5:

$$T_{tav}(k+1) = b_0 + b_1 \cdot T_{sp}(k) + b_2 \cdot kk_CO(k) + b_3 \cdot kk_CO_2(k) + b_4 \cdot V_{O2}(k) \quad (50)$$

Model M6:

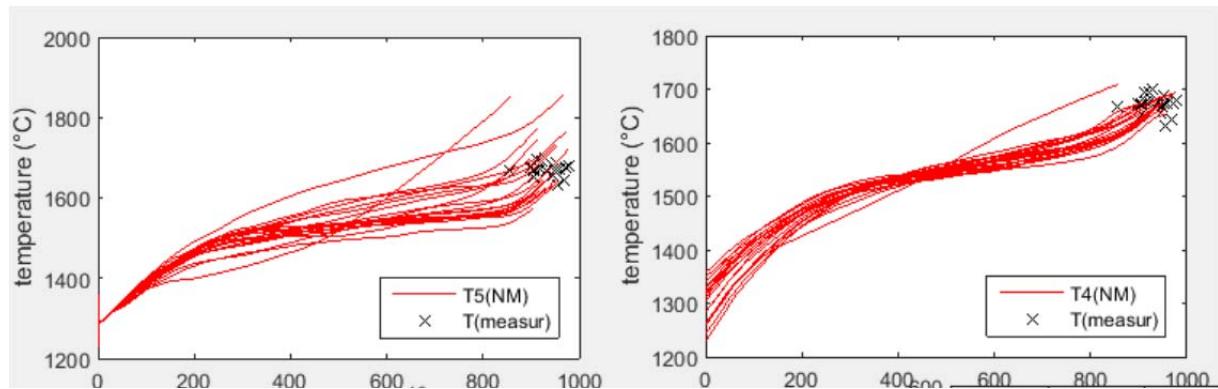
$$\begin{aligned} T_{tav}(k+1) = & b_0 + b_1 \cdot T_{sp}(k) + b_2 \cdot kk_{CO}(k) + b_3 \cdot kk_{CO_2}(k) + b_4 \cdot H_2(k) \\ & + b_5 \cdot T_{tav}(k) + b_6 \cdot P_{gran}(k) + b_7 \cdot V_{O2}(k) \end{aligned} \quad (51)$$

kde kk_CO je kumulatívna koncentrácia CO v spalinách v priebehu tavby
 kk_CO_2 je kumulatívna koncentrácia CO₂ v spalinách v priebehu tavby

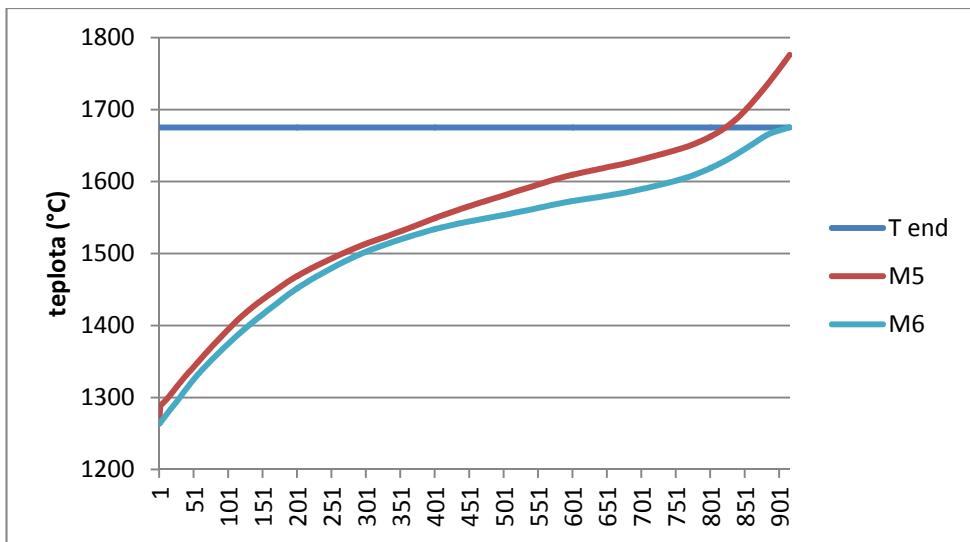
Výsledky modelov M5 a M6 sú prezentované v Tab. 12 spoločne s výsledkami modelov M1 a M4. Ako môžeme vidieť, u modelu M6 v porovnaní s modelom M1 je priemerná relatívna odchýlka nižšia takmer o polovicu (model M1 6,37% a model M5 3,88%). U tohto modelu sa podarilo zavedením kumulatívnej koncentrácie CO a CO₂ odstrániť pokles nepriamo meranej teploty taveniny na konci tavby ako je možné vidieť na Obr. 44 resp. Obr. 45. Model M6 dosiahol zavedením kumulatívnych koncentrácií malé zlepšenie.

Tab. 12. Výsledky regresných modelov M5 a M6

	abs_odch (°C)				rel_odch (%)			
	M1	M4	M5	M6	M1 %	M4 %	M5 %	M6 %
46886	112.88	47.15	214.21	46.16	6.87	2.87	13.03	2.81
46887	138.62	12.60	91.40	11.83	8.28	0.75	5.46	0.71
46888	147.60	0.90	101.08	0.56	8.81	0.05	6.03	0.03
46890	87.42	3.24	40.37	3.12	5.24	0.19	2.42	0.19
46891	85.35	8.19	15.32	8.30	5.10	0.49	0.92	0.50
46892	67.51	26.17	59.36	26.32	4.04	1.57	3.56	1.58
46893	40.64	17.68	77.89	17.51	2.46	1.07	4.72	1.06
46894	56.96	27.21	55.57	27.26	3.41	1.63	3.32	1.63
46895	136.23	2.31	3.06	2.36	8.17	0.14	0.18	0.14
46899	94.39	6.11	26.70	6.44	5.64	0.37	1.59	0.38
46900	167.38	17.67	51.29	17.33	9.88	1.04	3.03	1.02
46905	99.84	41.53	185.03	40.52	5.99	2.49	11.10	2.43
46906	137.06	14.21	47.78	14.38	8.11	0.84	2.83	0.85
46931	137.07	43.34	56.09	43.33	8.07	2.55	3.30	2.55
46932	152.39	38.17	45.93	38.12	9.00	2.25	2.71	2.25
46933	48.52	16.12	22.24	15.50	2.93	0.97	1.34	0.94
46934	29.83	31.34	100.32	30.45	1.83	1.92	6.15	1.87
46935	154.38	17.94	27.99	17.56	9.23	1.07	1.67	1.05
46936	127.28	14.85	42.41	14.88	7.58	0.88	2.53	0.89
46937	113.56	1.06	27.70	1.13	6.79	0.06	1.66	0.07
priemer	106.7	19.4	64.59	19.15	6.37	1.16	3.88	1.15



Obr. 44. Priebeh nepriamo meraných teplôt podľa modelov M5 a M6 pre 20 taviel



Obr. 45. Priebeh nepriamo meraných teplôt regresných modelov M5 a M6 pre tavbu 46888

2.2.3 Model teploty na báze Learning machine method

Tento model v podstate kopíruje model predikcie koncentrácie uhlíka v tavenine, ale zavádza určité zmeny v procese dolovania dát a učenia. Cieľom je, aby vytvorený model bol schopný simulovať resp. predikovať dynamický priebeh teploty taveniny počas ľubovoľnej tavby na základe veľkého množstva trénovacích dát. Princíp dolovania dát bol aplikovaný podobne ako v prípade prípravy dát na predikciu uhlíka v tavenine. Data mining bol v tomto prípade použitý **vytvorenie trénovacej množiny dát** nasledovne (zmeny sú zvýraznené):

1. Bola vytvorená prázdna databáza statických a dynamických dát tavieb s nasledovnými stĺpcami:

HEATNO, AKOST, T_SKUT_1VKK, C_SKUT, O2_SKUT, O2_TRVANIE,
T_SUZE, HMOTN_SUZE, C_SUZE, DYNAMIC_DATA, VYSKA_TRYSKY,
PRIETOK_O2, CO, CO2, H2, O2,
VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU,
VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU,
PODTLAK_PRETLAK_DYMNIK, PRIETOK_SPAL_PROMECON,
TEPLOTA_TAVENINY_CIELOVA, TEPLOTA_SPALIN,
KONCENTRACIA_UHLIKA_V_OCELI_CIELOVA,

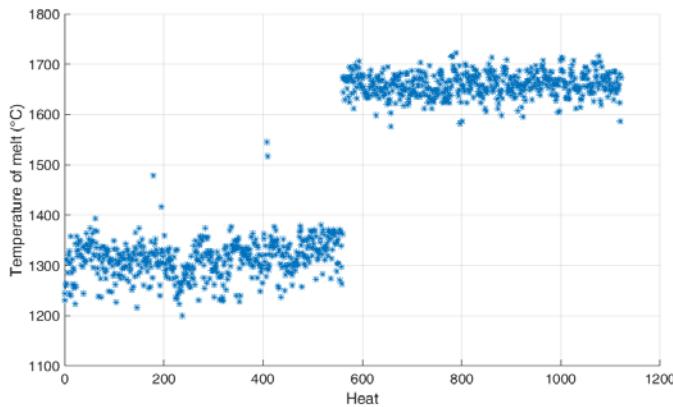
Pozn.: Niektoré stĺpce odpovedajú stĺpcom z databázy statických dát a niektoré z stĺpcom z databázy dynamických dát. Stĺpec DYNAMIC_DATA logickou hodnotou indikuje, či k danej tavbe existujú aj namerané dynamické dátá (v databáze dynamických dát)

2. Naplnenie práznej databázy statických a dynamických dát riadkami z databázy statických dát (spolu 872 riadkov resp. tavieb).
3. Stĺpec TEPLOTA_TAVENINY_CIELOVA sa naplnil hodnotami zo stĺpca T_SUZE (t.j. počiatocná meraná teplota surového železa).
4. Každej tavbe (riadku) v databáze statických a dynamických dát boli zapísané stĺpce s dynamickými dátami danej tavby (t.j. VYSKA_TRYSKY, PRIETOK_O2, CO, CO2, H2, O2, VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU, VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU, PODTLAK_PRETLAK_DYMNIK, PRIETOK_SPAL_PROMECON), pričom sa vždy vybral ku danej tavbe riadok s offsetom **200** s od začiatku (z databázy

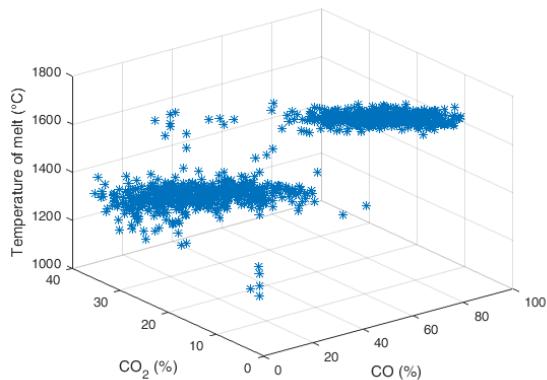
dynamických dát). Tento offset bol určený na základe analýzy ustálenia dynamických dát a je možné ho zmeniť. V prípade že k danej tavbe neexistujú dynamické dátá (v databáze dynamických dát) hodnota v stlpci DYNAMIC_DATA sa pri danej tavbe nastavila na 0. V opačnom prípade t.j. dátá boli úspešne extrahované zapísala sa 1.

5. Do stĺpca TEPLOTA_SPALIN boli zapísané hodnoty z stĺpca VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU alebo zo stĺpca VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU podľa toho kde boli reálne zaznamenané teploty spalín.
6. Proces napĺňania sa zopakuje ešte raz a to tak, že celkový počet tavieb (riadkov) v databáze statických a dynamických dát sa zdvojnásobí. Stĺpce HEATNO, AKOST, T_SKUT_1VKK, C_SKUT, O2_SKUT, O2_TRVANIE, T_SUZE, HMOTN_SUZE, C_SUZE zostávajú rovnaké ako v prvej časti.
7. **Stĺpec TEPLOTA_TAVENINY_CIELOVA sa naplnil hodnotami zo stĺpca T_SKUT (t.j. koncová meraná teplota taveniny).**
8. Každej tavbe (riadku) v databáze statických a dynamických dát boli zapísané stĺpce s dynamickými dátami danej tavby (t.j. VYSKA_TRYSKY, PRIETOK_O2, CO, CO2, H2, O2, VAI_TEPLOTA_1_NA_VST_DO_GRANIVORU, VAI_TEPLOTA_2_NA_VST_DO_GRANIVORU, PODTLAK_PRETLAK_DYMNIK, PRIETOK_SPAL_PROMECON), pričom sa vždy vybral ku danej tavbe riadok s offsetom **200 s od konca** (z databázy dynamických dát). Tento offset bol určený na základe analýzy ustálenia dynamických dát a je možné ho zmeniť. V prípade že k danej tavbe neexistujú dynamické dátá (v databáze dynamických dát) hodnota v stlpci DYNAMIC_DATA sa pri danej tavbe nastavila na 0. V opačnom prípade t.j. dátá boli úspešne extrahované zapísala sa 1.
9. Podľa slpca DYNAMIC_DATA bola celá databáza filtrovaná len na existujúce tavby t.j. tavby ku ktorým existujú aj dynamické dátá). Ďalej je možné databázu filtrovať podľa rôznych stlpov prípadne vylúčiť niektoré tavby. Vylúčené boli tavby 47102, 47106, 47095, 47105, 47094. Tieto tavby (riadky) nevstupovali do učenia (fittovania) regresného modelu a slúžili len na otestovanie predikcie.
10. Získali sme tak postupnosť „časový“ rad celkového počtu 1122 tavieb v databáze statických a dynamických dát tavieb.

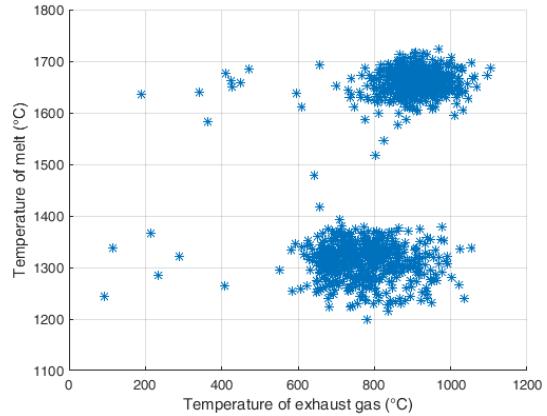
Vytvorená databáza statických a dynamických dát tavieb umožňuje vytvorenie rôznych grafických prehľadov. Vytvorili sme graf, ktorý ilustruje rozloženie teplôt taveniny (počiatočných a koncových) v rade resp. postupnosti tavieb (Obr. 46). Je vidieť, že len málo hodnôt sa nachádza na intervale 1400-1600 °C, čo podobne ako v prípade koncentrácie uhlíka neskôr môže znižovať kvalitu predikcie na tomto intervale. Tento problém je možné riešiť zmenou hodnoty offsetu (od začiatku aj od konca), zvolením iného kritéria výberu údajov (vzoriek) z databázy dynamických dát alebo zvýšením počtu skutočne meraných teplôt. Tento problém ilustruje aj Obr. 47, ktorý znázorňuje závislosť meranej teploty taveniny na potenciálnych vstupných dynamických dátach (merané CO a CO₂). Podobne Obr. 48 demonštruje závislosť koncentrácie uhlíka na teplote spalín. Uvedený zhľuk bodov je len ľažko možné popísať niektorým zo známych regresných modelov. Načrtnutý problém ale dokáže aj v tomto prípade riešiť **Support Vector Regression**.



Obr. 46. Zhluk počiatočných a koncových meraných teplôt taveniny z databázy statických dát interpretovaný ako „časový rad“ resp. postupnosť tavieb



Obr. 47. Závislosť počiatočných a koncových meraných teplôt na koncentrácií CO a CO₂



Obr. 48. Závislosť počiatočnej a koncovej meranej teploty taveniny na meranej teplote spalín

2.2.3.1 Dosiahnuté výsledky

Pozorovania pre naučenie (trénovanie) SVR modelu:

Vstupy: (databáza statických a dynamických dát tavieb)

$x_1 = \text{CO} (\%)$ (stĺpec CO),

$x_2 = \text{CO}_2 (\%)$ (stĺpec CO₂),

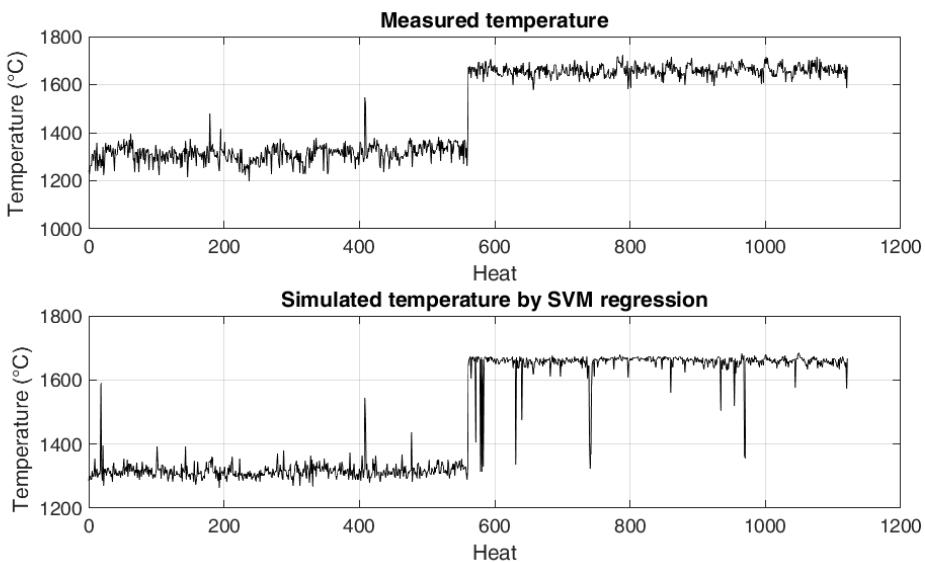
$x_3 = \text{Teplota spalín (°C)}$ (stĺpec TEPLOTA_SPALIN),

$y = \text{Teplota taveniny (°C)}$ (stĺpec TEPLÔTA_TAVENINY_CIELOVA)

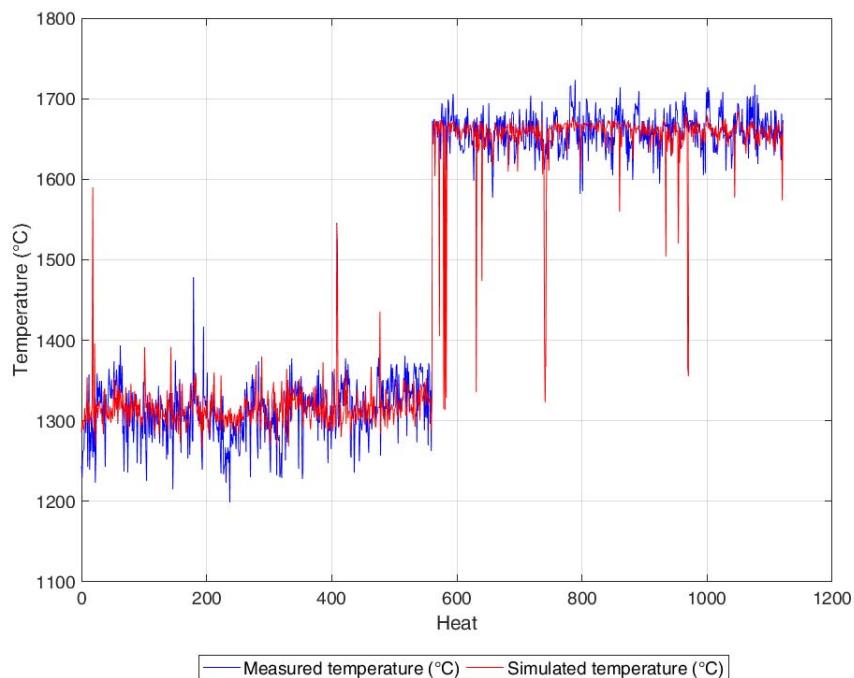
Výstup:

$y = \text{Teplota taveniny (°C)}$ (test predikcie na len trénovacích dátach (Obr. 49, Obr. 50))

Naučený model obsahuje maticu optimálnych podporných vektorov uloženú v pamäti počítača.



Obr. 49. Hore - Meraná teplota (počiatočná aj koncová) z postupnosti tavieb, Dole – odpovedajúca simulovaná (predikovaná) teplota na tréningových pozorovaniach



Obr. 50. Výsledok učenia „fittovania“ modelu t.j. porovnanie meranej a simulovanej (predikcia) teploty postupnosti tavieb

Test predikcie:

Testované boli dva tavby t.j. č. 47095 a 47105 s nasledovnými pozorovaniami (observations):

Vstupy z tavby: 47095 (nebola súčasťou učenia/trénovania)

$x_1 = \text{CO } (\%)$ (z databázy dynamický dát)

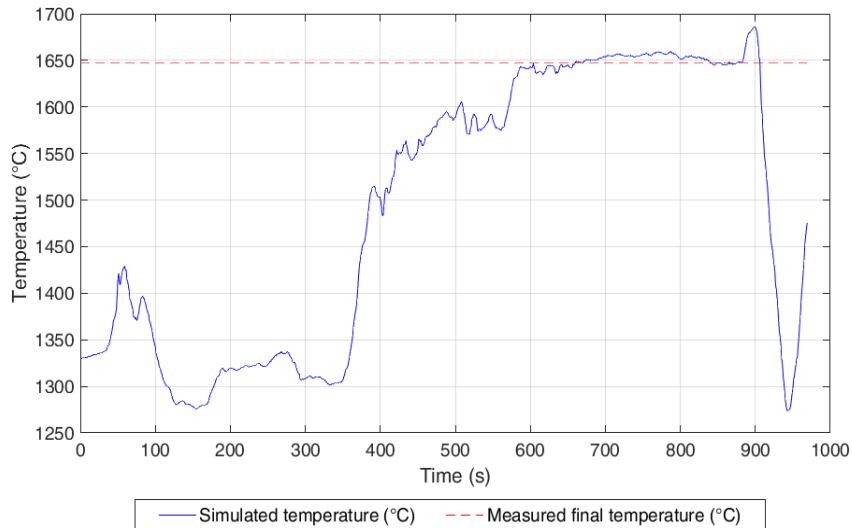
$x_2 = \text{CO}_2 \text{ } (\%)$ (z databázy dynamický dát)

$x_3 = \text{Teplota spalín } (\text{°C})$ (stĺpec TEPLOTA_SPALIN v databáze dynamických dát)

Výstup:

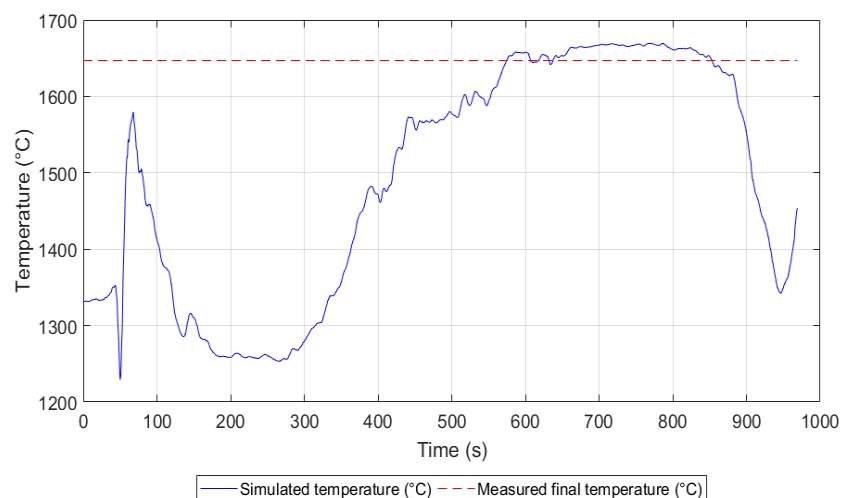
y = Teplota taveniny ($^{\circ}\text{C}$) (simulované resp. v tomto prípade predikované dynamické dátá)
(Obr. 51, Obr. 52)

```
test_heat_number = 47095  
final_temperature = 1647 °C  
final_carbon = 0.042 %  
kernel_function = gaussian;
```



Obr. 51. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 3 $^{\circ}\text{C}$)

```
test_heat_number = 47095  
final_temperature = 1647 °C  
final_carbon = 0.042 %  
kernel_function = polynomial;
```



Obr. 52. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47095, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 14 $^{\circ}\text{C}$)

Vstupy z tavby: 47105 (nebola súčasťou učenia/trénovania)

$x_1 = \text{CO} (\%)$ (z databázy dynamický dát)

$x_2 = \text{CO}_2 (\%)$ (z databázy dynamický dát)

$x_3 = \text{Teplota spalín} (\text{°C})$ (stĺpec TEPLOTA_SPALIN v databáze dynamických dát)

Výstup:

$y = \text{Teplota taveniny} (\text{°C})$ (simulované resp. v tomto prípade predikované dynamické dáta)

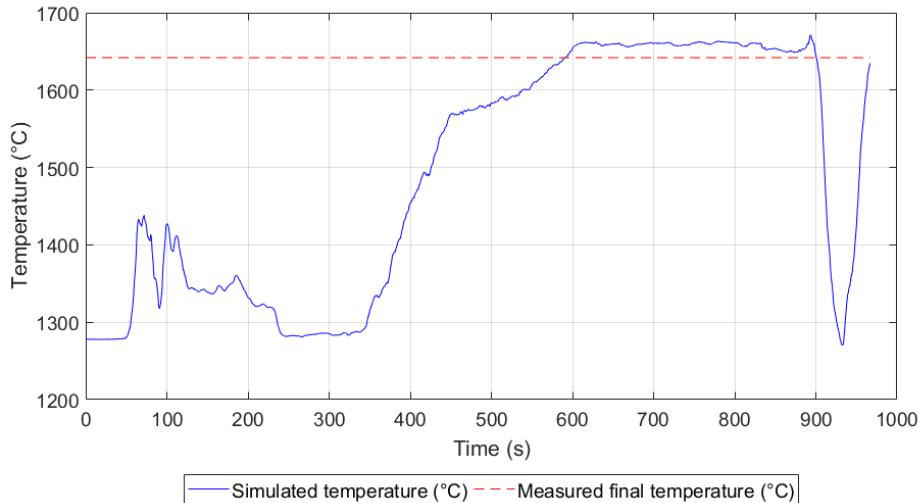
(Obr. 53, Obr. 54)

test_heat_number = 47105

final_temperature = 1642 °C

final_carbon = 0.039 %

kernel_function = gaussian;



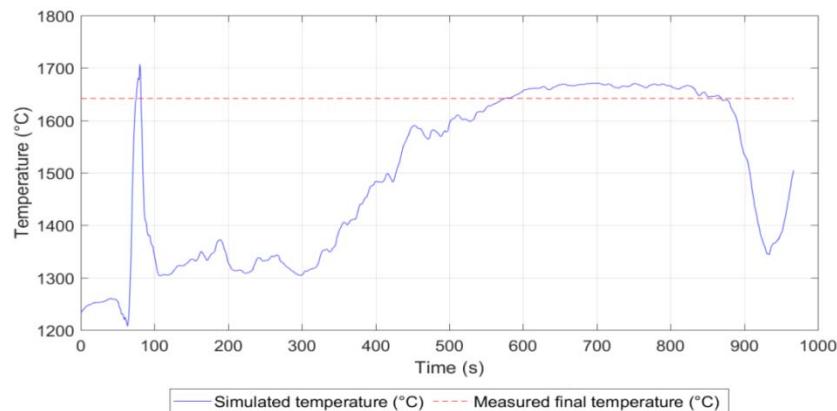
Obr. 53. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 19 °C)

test_heat_number = 47105

final_temperature = 1642 °C

final_carbon = 0.039 %

kernel_function = polynomial;



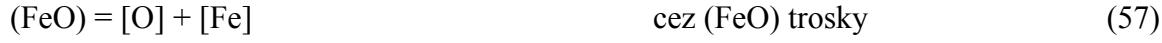
Obr. 54. Priebeh simulovanej teploty (predikcia) pre tavbu 47105, ktorá nebola súčasťou učenia (absolútна chyba v čase 800 s bola 24 °C)

Na záver môžeme povedať, že predikcia teploty taveniny s použitím Gaussového kernela dosiahla nižšiu hodnotu absolútnej chyby vo vybranom čase ako v prípade keď bol použitý polynomický kernel. Pri porovnaní s predikciou koncentrácie uhlíka, lepšie výsledky boli dosiahnuté v prípade polynomického kernela. Podobne ako v predikcii uhlíka nevyriešený zostáva úsek na začiatku, kde predikcia vytvára nežiadany lokálny extrém v predikovanej hodnote. Rovnako problematický je aj záver tavby, kde vstupné pozorovania nezodpovedajú meranému výstupu. Príčinou je praktizovaný technologický postup t.j. zdvihnutie klobúka LD konvertora. Kvalitu (resp. výkon) predikcie a tvar priebehu predikovaných dynamických dát je možné ovplyvniť zmenou jadrovej funkcie alebo zvolením iného kritéria výberu údajov (vzoriek) z databázy dynamických dát. V ďalšom výskume predpokladáme, že naučenie SVR modelu s viacerými relevantnými vstupmi (napr. pridanie kyslíka ako ďalšieho vstupného pozorovania). Ďalej predpokladáme, že predikcia by sa zlepšila aj v prípade zvýšenia počtu skutočné meraných teplôt počas tavby a filtrovaním databázy statických a dynamických dát, aby sa vylúčili nevyhovujúce tavby.

2.2.4 Termodynamický model teploty

Termodynamický model teploty vychádza z matematického modelu výpočtu zloženia plynu na základe prebiehajúcich chemických reakcií a známych vstupných položiek (vektor \vec{b}) ako je hmotnosť, zloženie surového železa a šrotu a objem fúkaného kyslíka [33][34]. Matematický model rozšírimo o použitie optimalizačnej metódy pre optimalizáciu teploty roztavenej ocele, kde účelová funkcia bude počítaná ako súčet kvadrátu odchýlok medzi vypočítaným zložením plynu v kmol a zložením plynu v kmol, ktoré dostaneme prepočtom z priamo meranej koncentrácie konvertorového plynu. V termodynamickom modeli budeme uvažovať s nasledovnými chemickými reakciami:

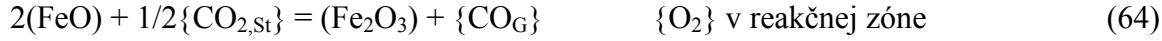
Prenos kyslíka (O) do kúpel'a



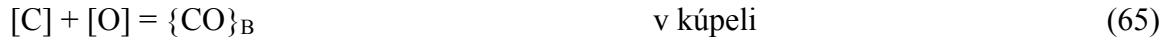
Tvorba trosky



Prechod kyslíka (O) do trosky



Oxidácia [C] na $\{\text{CO}\}$ a $\{\text{CO}_2\}$



Vyhorenie $\{CO\}$ na $\{CO_2\}$



Spätné tvorenie $\{CO_2\}_{St}$ po zhorení $\{CO\}$ na $\{CO_2\}$



Zátvorky v rovniciach vyjadrujú koncentrácie látok:

- [] -v kove,
 - () -v troske,
 - { } -v plynnnej fáze.

Z reakcií (54) až (71) je zrejmé, že vzniká sústava, ktorej zložky sú C , O_2 , CO , CO_2 , Fe , FeO , Fe_2O_3 , Si , SiO_2 , Mn , MnO , P , S , P_2O_5 , Al_2O_3 , CaO , MgO , CaS , Al , Ca , Mg a pre takúto sústavu môžeme napísat bilanciu atómov uvedenú v Tab. 13.

Tab. 13. Bilancia atómov

Atómy/Zložky	C	O_2	CO	CO_2	Fe	FeO	Fe_2O_3	Si	SiO_2	Mn	MnO	P	S	P_2O_5	Al_2O_3	CaO	MgO	CaS	Al	Ca	Mg	\bar{b}
C	1	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	b_1
O	0	2	1	2	0	1	3	0	2	0	1	0	0	5	3	1	1	0	0	0	0	b_2
Fe	0	0	0	0	1	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	b_3
Si	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	b_4
Mn	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	b_5
P	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	2	0	0	0	0	0	0	0	b_6
S	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	0	0	b_7
Al	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	1	0	0	b_8
Ca	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	b_9
Mg	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	b_{10}

Bilanciu pre uvažovaných 10 atómov môžeme vyjadriť bilančnou rovnicou (72)

$$A \cdot \bar{n} = \bar{b} \quad (72)$$

pre

$$\bar{n} = (n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6, n_7, n_8, n_9, n_{10}, n_{11}, n_{12}, n_{13}, n_{14}, n_{15}, n_{16}, n_{17}, n_{18}, n_{19}, n_{20}, n_{21})^{-1}$$

kde A – matica podielu atómov v jednotlivých zložkách a_{kj} pre $j = 1, \dots, 21 = N$, $k = 1, \dots, 10 = M$, \bar{b} – vektor obmedzení b_k pre $k = 1, \dots, 10 = M$, \bar{n} – vektor neznámych parametrov n_j pre $j = 1, \dots, 21 = N$.

Úlohu môžeme sformulovať ako určenie počtu kilomolov sústavy N -rovníc (rovnice sú vyjadrené pre jednotlivé zložky sústavy), ktorá sa pri danej teplote ustáli za relatívne krátke čas na rovnovážnom stave. Vychádzajúc z termodynamiky, sústava bude v rovnováhe, ak celková Gibbsova energia bude minimálna

$$G = \sum_{j=1}^N n_j \cdot \mu_j \quad (73)$$

$$\mu_j = \mu_j^0 + R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{n_j}{\sum_{j=1}^N n_j} \cdot \frac{P}{P^0} \right) \quad (74)$$

kde R – univerzálna plynová konšanta ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}$), T – teplota (K), P – tlak v sústave (Pa), P^0 – tlak okolia (Pa), μ_j – štandardný chemický potenciál ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$).

Štandardný chemický potenciál môžeme vypočítať nasledovne:

$$\mu_j^0 = H^0(T) - T \cdot S^0(T) \quad (75)$$

$$H^0(T) = \left(-a_1 T^{-2} + a_2 \frac{\ln T}{T} + a_3 + a_4 \frac{T}{2} + a_5 \frac{T^2}{3} + a_6 \frac{T^3}{4} + a_7 \frac{T^4}{5} + b_1 \frac{1}{T} \right) \cdot R \cdot T \quad (76)$$

$$S^0(T) = \left(-a_1 \frac{T^{-2}}{2} - a_2 T^{-1} + a_3 \ln T + a_4 T + a_5 \frac{T^2}{2} + a_6 \frac{T^3}{3} + a_7 \frac{T^4}{4} + b_2 \right) \cdot R \quad (77)$$

kde $H^0(T)$ – entalpia ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$), $S^0(T)$ – entrópia ($\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}$), a_1 až a_7 – koeficienty NASA polynómu, b_1 a b_2 – integračné konštanty.

V tejto fáze riešenia je úlohou nájsť zloženie výstupného plynu pri známej teplote T a tlaku P minima sumárnej Gibbsovej energie sústavy **Chyba! Nenašiel sa žiadnen zdroj odkazov.** – **Chyba! Nenašiel sa žiadnen zdroj odkazov..** Zadanú úlohu môžeme riešiť ako optimalizačnú úlohu, ktorej cieľom je minimalizácia **Chyba! Nenašiel sa žiadnen zdroj odkazov.** pri obmedzeniach **Chyba! Nenašiel sa žiadnen zdroj odkazov.** resp.

$$\bar{b} - A \cdot \bar{n} = 0 \quad (78)$$

Optimalizačnú úlohu vyjadrenú pomocou rovníc (73) a (78) môžeme riešiť metódou Lagrangeových multiplikátorov. Sformulujeme Lagrangeovu funkciu

$$L(\bar{n}, \bar{\lambda}) = \sum_{j=1}^N n_j \cdot \mu_j + \sum_{k=1}^M \lambda_k \cdot (b_k - \sum_{j=1}^N a_{kj} \cdot n_j) \quad (79)$$

Podmienky optima pre stacionárny bod n^o sú

$$\frac{\partial L(\bar{n}, \bar{\lambda})}{\partial n_j} = \mu_j - \sum_{k=1}^M a_{kj} \cdot \lambda_k = 0, \text{ pre } j = 1, \dots, N \quad (80)$$

$$\frac{\partial L(\bar{n}, \bar{\lambda})}{\partial \lambda_k} = b_k - \sum_{j=1}^N a_{kj} \cdot n_j = 0, \text{ pre } k = 1, \dots, M \quad (81)$$

Z podmienky (80) dostávame sústavu N rovníc:

$$\mu_1^0 + R \cdot T \cdot \ln \left(\frac{n_1}{\sum_{j=1}^N n_j} \cdot \frac{P}{P^0} \right) - (1 \cdot \lambda_1 + 0 \cdot \lambda_2 + 0 \cdot \lambda_3 + 0 \cdot \lambda_4 + 0 \cdot \lambda_5 + 0 \cdot \lambda_6 + 0 \cdot \lambda_7 + 0 \cdot \lambda_8 + 0 \cdot \lambda_9 + 0 \cdot \lambda_{10}) = 0$$

$$\mu_{21}^0 + R \cdot T \cdot \ln\left(\frac{n_{21}}{\sum_{j=1}^N n_j} \cdot \frac{P}{P_0}\right) - (0 \cdot \lambda_1 + 0 \cdot \lambda_2 + 0 \cdot \lambda_3 + 0 \cdot \lambda_4 + 0 \cdot \lambda_5 + 0 \cdot \lambda_6 + 0 \cdot \lambda_7 + 0 \cdot \lambda_8 + 0 \cdot \lambda_9 + 1 \cdot \lambda_{10}) = 0$$

Z podmienky **Chyba! Nenašiel sa žiadnen zdroj odkazov.** 81) dostávame sústavu M rovníc

$$b_1 - \left(\begin{array}{l} 1 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 1 \cdot n_3 + 1 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_2 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 2 \cdot n_2 + 1 \cdot n_3 + 2 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 1 \cdot n_6 + 3 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 2 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 1 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 5 \cdot n_{14} + 3 \cdot n_{15} + 1 \cdot n_{16} + 1 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_3 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 1 \cdot n_5 + 1 \cdot n_6 + 2 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_4 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 1 \cdot n_8 + 1 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_5 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 1 \cdot n_{10} + 1 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_6 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 1 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 2 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_7 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 1 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 1 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_8 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 2 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 1 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_9 - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 1 \cdot n_{16} + 0 \cdot n_{17} + 1 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 1 \cdot n_{20} + 0 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

$$b_{10} - \left(\begin{array}{l} 0 \cdot n_1 + 0 \cdot n_2 + 0 \cdot n_3 + 0 \cdot n_4 + 0 \cdot n_5 + 0 \cdot n_6 + 0 \cdot n_7 + 0 \cdot n_8 + 0 \cdot n_9 + 0 \cdot n_{10} + 0 \cdot n_{11} \\ + 0 \cdot n_{12} + 0 \cdot n_{13} + 0 \cdot n_{14} + 0 \cdot n_{15} + 0 \cdot n_{16} + 1 \cdot n_{17} + 0 \cdot n_{18} + 0 \cdot n_{19} + 0 \cdot n_{20} + 1 \cdot n_{21} \end{array} \right) = 0$$

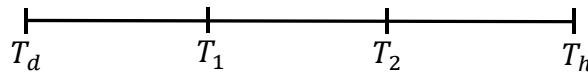
Z riešenia nelineárnych rovníc $N + M$ získame $N + M$ neznámych, t.j. vektory \bar{n} a $\bar{\lambda}$. Výsledným riešením je vektor \bar{n} , ktorého zložky nám určia zloženie konvertorového plynu v kmol. Tieto hodnoty si môžeme previesť na percentá jednotlivých zložiek a vykresliť v grafe.

2.2.4.1 Algoritmus termodynamického modelu teploty

Navrhovaný algoritmus výpočtu teploty taveniny s využitím termodynamického modelu a optimalizačnej metódy je nasledovný:

1. Prevod vstupného zloženia vsádzky (surové železo, šrot) na počet kilomolov (získanie hodnôt vektora \bar{b} - b_1 až b_{10}).
2. Nastavenie času $\tau = 0$.
3. Posun v čase o hodnotu $\Delta\tau$, $\tau = \tau + \Delta\tau$.
4. Aktualizácia hodnoty b_2 na základe množstva fúkaného kyslíka za čas $\Delta\tau$.
5. Priame meranie koncentrácie zložiek konvertorového plynu a prevod jednotlivých zložiek na hodnoty v kmol, získame n_1^m a n_{18}^m .
6. Nastavenie vstupných hodnôt pre Fibonacciho metódu, ktorú použijeme pre optimalizáciu hodnoty teploty:

- 6.1 Načítame hranice intervalu, v ktorom budeme hľadať teplotu ocele $\langle T_d, T_h \rangle$ a presnosť ε .
- 6.2 Vypočítame Fibonacciho číslo $F_{n+2} = \frac{2 \cdot (T_h - T_d)}{\varepsilon}$
- 6.3 Po výpočte čísla F_{n+2} musíme nájsť k nemu najbližšie vyššie číslo v stĺpci F_n vo Fibonacciho postupnosti čísel a tým číslom ho nahradíť. Ďalej zo stĺpca F_n určiť hodnoty F_{n+1} ako prvé a F_n ako druhé menšie číslo od čísla F_{n+2} . Počet pokusov (optimalizačných krokov) je potom rovný číslu v stĺpici n pri hodnote F_n .
- 6.4 Fibonacciho metóda využíva delenie intervalu na úseky, v ktorých postupne hľadáme extrém.



Počiatočné body T_1 a T_2 sú vypočítané podľa rovníc

$$T_1 = T_d + \frac{F_n}{F_{n+2}} \cdot (T_h - T_d) \quad T_2 = T_d + \frac{F_{n+1}}{F_{n+2}} \cdot (T_h - T_d)$$

$$(T_h - T_d)$$

- 6.5 Vypočítame funkčnú hodnotu v bodech T_1 a T_2 – napr. použijeme *Newtonovú metódu* na riešenie sústavy $N+M$ rovníc termodynamického modelu. Získame číselné hodnoty zložiek vektorov \bar{n}^1 a $\bar{\lambda}^1$ pri teplote T_1 a hodnoty zložiek vektorov \bar{n}^2 a $\bar{\lambda}^2$ pri teplote T_2 .
- 6.6 Vypočítame hodnotu účelovej funkcie pre získané zložky vektorov \bar{n}^1 a \bar{n}^2 . V prípade ak by neboli priamo merané všetky zložky konvertorového plynu, tak v účelovej funkcií vystupuje súčet kvadrátu odchýlok len medzi zložkami, ktoré sú priamo merané:

$$F_1 = \sum_{j=1}^N (n_j^m - n_j^1)^2 \quad F_2 = \sum_{j=1}^N (n_j^m - n_j^2)^2$$

- 6.7 Porovnáme a priradíme

Ak $F_1 < F_2$:

$$T_h = T_2$$

$$T_2 = T_1$$

$$F_2 = F_1$$

$$\bar{n}^v = \bar{n}^1$$

$$T_1 = T_d + T_h - T_2$$

Vypočítame F_1 z hodnôt \bar{n}^1 a $\bar{\lambda}^1$

vypočítaných pri aktuálnom T_1 .

Ak $F_1 > F_2$:

$$T_d = T_1$$

$$T_1 = T_2$$

$$F_1 = F_2$$

$$\bar{n}^v = \bar{n}^2$$

$$T_2 = T_d + T_h - T_1$$

Vypočítame F_2 z hodnôt \bar{n}^2 a $\bar{\lambda}^2$

vypočítaných pri aktuálnom T_2 .

- 6.8 Ak sme ešte nevykonali predpísaný počet n optimalizačných krokov Fibonacciho metódy, tak výpočet opakujeme od kroku 6.7. V opačnom prípade pokračujeme na bod 7.
7. Na základe hodnôt výstupného vektora \bar{n}^v nastavíme hodnoty \bar{b} (jednotlivé prvky vektora \bar{b} budú odpovedať hodnotám prvkom vo vektore \bar{n}^v).
8. Ak sme na konci tavby (koncentrácia b_1 po prepočte na % je na požadovanej hodnote), tak ukončíme výpočet. V opačnom prípade sa vrátíme na bod 3.

2.3 Komplexný deterministický model pre nepriame meranie teploty a uhlíka

Deterministické modely vychádzajú z fyzikálno – chemických zákonitostí dielčích procesov a sú vhodné pre štúdium interakcie medzi nimi. Jednou z výhod je, že si nevyžadujú takmer žiadne náklady na experimenty. Nevýhodou takýchto modelov je zložitosť riešenia a dlhší čas tvorby komplexných deterministických modelov.

Komplexný deterministický model procesu skujňovania v konvertore by mal pozostávať s nasledovných čiastkových modelov:

- Model reakčnej zóny,
- Model distribúcie kyslíka,
- Modely oxidácie jednotlivých prvkov (C, Mn, P, Si, ...),
- Model tvorby trosky,
- Model tavenia šrotu,
- Teplotný model,
- Model tvorby konvertorového plynu, a pod.

V nasledujúcich dvoch podkapitolách sú popísané dva matematické modely, ktoré nás v rámci riešenia projektu najviac zaujímajú a to model oxidácie uhlíka a teplotný model. Uvedené modely vychádzajú z literárnych zdrojov [35][36] a zahŕňajú konštanty, ktoré sú momentálne neznáme. V texte správy sú zvýraznené červenou farbou. Je nutné podotknúť, že je nemožné zostaviť len tieto modely, keďže je potrebné sa na tento proces pozerať komplexne.

2.3.1 Model oxidácie uhlíka

Kyslík je prenášaný do kovu cez reakčnú zónu. Kyslíkom obohatená masa je odnášaná z reakčnej zóny prirodzeným prúdením, absorbciou energie z prúdu kyslíka a stúpaním bublín CO. Táto masa reaguje s uhlíkom v tavenine. Ďalším faktorom ovplyvňujúcim oduhlíčovaciu reakciu sú čiastočky kovu rozptýlené v troske, ktoré zväčšujú rozhranie medzi troskou a kovom. V prvej període fúkania rýchlosť oduhlíčenia závisí od rýchlosťi prenosu kyslíka do taveniny. Na konci fúkania, keď je obsah uhlíka nízky, limitujúcim krokom pre rýchlosť oduhlíčovania je prenos hmoty. Tieto faktory sú zohľadnené v diferenciálnej rovnici:

$$\frac{d}{d\tau} [\%C] = -RKC \cdot \frac{\rho_{HK}}{m_{HK}} \cdot \frac{1201}{1600} \cdot \left(\frac{P_c}{P_{CO} + 2 \cdot P_{CO_2}} \right) \cdot \left([\%O] - \frac{P_{CO}}{f_C \cdot [\%C] \cdot f_O \cdot K_{CO} \cdot F^2} \right) (\%.s^{-1}) \quad (82)$$

kde RKC - rýchlosťná konštanta reakcie uhlíka s kyslíkom ($m^3.s^{-1}$), ρ_{HK} - hustota horúceho kovu ($kg.m^{-3}$), m_{HK} - hmotnosť horúceho kovu (kg), P_c - celkový tlak (Pa), P_{CO} - parciálny tlak CO (Pa), P_{CO_2} - parciálny tlak CO_2 (Pa), $[\%O]$ - koncentrácia kyslíka v kovovom kúpeli/kove (%), $[\%C]$ - koncentrácia uhlíka v kove (%), f_C, f_O - aktivitné koeficienty uhlíka a kyslíka v kove, K_{CO} - rovnovážna konštanta oduhlíčovacej reakcie, F - pomer hmotnosti horúceho kovu na začiatku a v čase τ .

Rýchlosná konšanta reakcie uhlíka s kyslíkom

$$RKC = \frac{D_o \cdot A}{\Delta\delta} \quad (m^3 \cdot s^{-1}) \quad (83)$$

kde D_o - difúzny koeficient kyslíka ($m^2 \cdot s^{-1}$), A - plocha rozhrania fáz (m^2), $\Delta\delta$ - hrúbka difúzneho sloja v kove (m).

Difúzny koeficient kyslíka D_o :

$$D_o = 4,56 \cdot 10^{-8} \cdot e^{\left[\frac{-4120}{t_{HK} + 273} \right]} \quad (84)$$

kde t_{HK} - teplota horúceho kovu ($^{\circ}\text{C}$).

Plocha rozhrania fáz kov – troska A :

$$A = \frac{k \cdot \left(\dot{V}_{O_2} + 0,1 \right) \cdot m_{TR}}{\left(1 + 0,5 \cdot H^2 + 0,5 \cdot 10^4 \cdot m_{TR} \right)} \quad (85)$$

kde k - konštanta určená empiricky, H - výška trysky nad kľudnou hladinou (m), m_{TR} - hmotnosť trosky (kg), \dot{V}_{O_2} - objemový tok fúkaného kyslíka ($m^3 \cdot s^{-1}$).

Hrúbka difúzneho sloja $\Delta\delta$:

$$\Delta\delta_i = \sqrt{\pi \cdot D_i \cdot \tau_{HK}} \quad (86)$$

kde D_i - difúzny koeficient ($i = O$, kyslíka) ($m^2 \cdot s^{-1}$), τ_{HK} - priemerná doba pobytu plynovej bublinky v kove (s).

$$\tau_{HK} = \tau_B - \tau_{TR} \quad (87)$$

$$\tau_B = \frac{k \cdot h_{RZ}}{w_B} \quad (88)$$

$$w_B = k' \cdot \frac{d[\%C]}{d\tau} \cdot \frac{H}{(H - H_0)} \quad (89)$$

$$\tau_{TR} = \varepsilon_0 \cdot \frac{\tau}{(1 + \varepsilon_0)} \quad (90)$$

kde τ_B - doba pobytu bublinky v konvertore (s), τ_{TR} - doba pobytu bublinky v troske (s), w_B - rýchlosť výstupu bublinky ($w_B \approx 1,2 \text{ m.s}^{-1}$), h_{RZ} - hĺbka reakčnej zóny (m), k a k' - konštandy určené empiricky, H - výška zdvihnutej hladiny (m), H_0 - výška hladiny kľudnej taveniny (m), ε_0 - pomer výšky trosky k výške kovu.

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{(H \cdot \rho_{TR} \cdot S_{kon} / m_{TR} - 1)} \quad (91)$$

$$H = h_{TR} + h_{HK} \quad (92)$$

kde H - výška kľudného kúpeľa h_{HK} s výškou trosky h_{TR} (m), ρ_{TR} - hustota trosky ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$), $S_{kon} = A$.

Hĺbka reakčnej zóny h_{RZ} (m):

Tvar reakčnej zóny formovanej prúdom kyslíka z trysky je kužeľovitého tvaru. Hĺbka reakčnej zóny pre viacotvorovú trysku môže byť určená podľa:

$$h_{RZ} = 6,3 \cdot \left(\frac{c \cdot \dot{V}_{O_2}}{n \cdot d} \right)^{\frac{2}{3}} \cdot e^{\left(\frac{c \cdot \dot{V}_{O_2}}{n \cdot d} \right)^{\frac{2}{3}}} \quad (93)$$

kde H - výška trysky (m), d - priemer otvoru trysky (m), \dot{V}_{O_2} - objemový tok kyslíka \dot{V}_{O_2} [$\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$], n - počet trysiek, c - koeficient trysky.

Aktivitné koeficienty uhlíka a kyslíka

Aktivitný koeficient uhlíka, keď koncentrácia je vyjadrená v percentách, môžeme vypočítať podľa:

$$\lg f_C = e_C^C \cdot [\%C] \quad (94)$$

kde

$$e_C^C = \frac{158}{t + 0,0581} \quad (95)$$

je interakčný koeficient uhlíka.

Aktivitný koeficient kyslíka v kove je

$$\lg f_O = -0,42 \cdot [\%C] + 0,008 \cdot [\%C]^2 \quad (96)$$

Rovnovážna konštanta oduhličovacej reakcie

$$\lg K_C = \frac{1860}{T} + 1,643 \quad (97)$$

Pomer hmotnosti horúceho kovu na začiatku a v čase τ

$$F = \frac{m_{HKO}}{m_{HK}} \quad (98)$$

Celkový tlak P_c (Pa)

$$P_c = P_{CO} + P_{CO_2} \quad (99)$$

Parciálne tlaky P_{CO} a P_{CO_2} môžu byť vypočítané zo vzťahov pre výpočet rovnovážnej konštanty oduhličovacej reakcie:

$$K_{CO} = \frac{P_{CO}}{(f_C \cdot [\%C] \cdot F) \cdot (f_O \cdot [\%O]_r \cdot F)} \quad (100)$$

a

$$K_{CO_2} = \frac{P_{CO_2}}{(f_C \cdot [\%C] \cdot F) \cdot 2 \cdot (f_O \cdot [\%O] \cdot F)} \quad (101)$$

kde $[\%O]$ je rovnovážna koncentrácia kyslíka v kove.

Vzťahy rovnovážnych konštánt pre reakcie:

$$[C] + [O] \rightarrow \{CO} \quad \lg K = \lg \frac{P_{CO}}{[\%C] \cdot [\%O] \cdot f_C \cdot f_O} = \frac{1860}{T} + 1,643 \quad (102)$$

$$[C] + 0.5\{O_2\} \rightarrow \{CO} \quad \lg K = \lg \frac{P_{CO}}{[\%C] \cdot f_C \cdot P_{O_2}^{0.5}} = \frac{7965}{T} + 1,77 \quad (103)$$

$$[C] + \{O_2\} \rightarrow \{CO_2\} \quad \lg K = \lg \frac{P_{CO_2}}{[\%C] \cdot f_C \cdot P_{O_2}} = \frac{22510}{T} - 2,64 \quad (104)$$

$$0.5\{O_2\} \rightarrow [O] \quad \lg K = \lg \frac{[\%O]}{P_{O_2}^{0.5}} = \frac{6100}{T} + 0,12 \quad (105)$$

kde T - teplota (K), P_{O_2} - parciálny tlak kyslíka (Pa).

Zmenu množstva uhlíka v čase ($mol.s^{-1}$)

$$\dot{n}_C = k_{CO} \cdot \left(\frac{P_{CO}}{K_{CO}} - x_C \cdot x_O \right) + r_C \quad (106)$$

kde \dot{n}_C - zmena množstva uhlíka v čase ($mol.s^{-1}$), k_{CO} - konštanta rýchlosťi reakcie, určená empiricky, P_{CO} - parciálny tlak CO (Pa), môže byť počítaný z rovnovážnej konštanty oduhličovacej reakcie, K_{CO} - rovnovážna konštantá reakcie, x_C , x_O - mólové zlomky prvkov v kúpeli (mol), r_C - v určitom čase pridané množstvo uhlíka (v prísadách) (mol).

Zmena množstva kyslíka v kúpeli ($mol.s^{-1}$)

$$\dot{n}_O = \dot{n}_C - r_C + 2 \cdot \left(\dot{n}_{Si} - r_{Si} \right) + k_{FeO} \cdot \left(\frac{x_{FeO}}{K_{FeO}} - x_O \right) + r_O \quad (107)$$

$$\dot{n}_{Si} = -k_{SiO_2} \cdot x_{Si} \cdot x_O^2 + r_{Si} \quad (108)$$

kde K_{FeO} je rovnovážna konštantá, k_{FeO} , k_{SiO_2} sú rýchlosťné konštanty reakcií určené empiricky a x_i sú molárne zlomky (mol).

2.3.2 Teplotný model

Rýchlosť zmeny teploty v kúpeli môže byť počítaná z rýchlosťí odstraňovania nežiaducich prímesí, tavenia šrotu a tavenia vápna. Teplota surového železa sa zvyšuje prostredníctvom tepla uvoľneného pri exotermických reakciach kyslíka s prímesami kovu.

Teplo uvoľnené pri oxidácii uhlíka na oxid uhoľnatý (CO):

$$\frac{dQ_{CO}}{d\tau} = - \left(\Delta H_{CO} + \frac{M_{CO}}{12,01} \cdot C'_{p_{CO}} \cdot DT \right) \cdot \frac{m_{HK_0}}{100} \cdot \frac{P_{CO}}{P_{cel}} \cdot \left(- \frac{d[\%C]}{d\tau} \right) \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (109)$$

a na oxid uhličitý (CO₂):

$$\frac{dQ_{CO_2}}{d\tau} = - \left(\Delta H_{CO_2} + \frac{M_{CO_2}}{12,01} \cdot C'_{p_{CO_2}} \cdot DT \right) \cdot \frac{m_{HK_0}}{100} \cdot \frac{P_{CO_2}}{P_{cel}} \cdot \left(- \frac{d[\%C]}{d\tau} \right) \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (110)$$

Exotermické teplo z oxidácie kremíka:

$$\frac{dQ_{Ca_2SiO_4}}{d\tau} = - \left(\Delta H_{Ca_2SiO_4} + \frac{M_{Ca_2SiO_4}}{28,09} \cdot C'_{p_{Ca_2SiO_4}} \cdot DT \right) \cdot \frac{m_{HK_0}}{100} \cdot \frac{P_{Ca_2SiO_4}}{P_{cel}} \cdot \left(\frac{d[\%Si]}{d\tau} \right) \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (111)$$

mangánu:

$$\frac{dQ_{MnO}}{d\tau} = - \left(\Delta H_{MnO} + \frac{M_{MnO}}{54,94} \cdot C'_{p_{MnO}} \cdot DT \right) \cdot \frac{m_{HK_0}}{100} \cdot \left(\frac{d[\%Mn]}{d\tau} \right) \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (112)$$

fosforu:

$$\frac{dQ_{Ca_4P_2O_9}}{d\tau} = - \left(\Delta H_{Ca_4P_2O_9} + \frac{M_{Ca_4P_2O_9}}{61,94} \cdot C'_{p_{Ca_4P_2O_9}} \cdot DT \right) \cdot \frac{m_{HK_0}}{100} \cdot \left(\frac{d[\%P]}{d\tau} \right) \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (113)$$

železa:

$$\frac{dQ_{FeO}}{d\tau} = - \left(\Delta H_{Fe-FeO} \cdot \frac{55,85}{M_{FeO}} + C'_{p_{FeO}} \cdot DT \right) \cdot \frac{d(m_{FeO_{cel}})}{d\tau} \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (114)$$

$$\frac{dQ_{1FeO}}{d\tau} = - \left(\Delta H_{FeO-Fe} \cdot \frac{(\%FeO)}{100} \cdot \frac{55,85}{M_{FeO}} + \Delta H_{Fe_2O_3-Fe} \cdot \frac{(\%Fe_2O_3)}{100} \cdot \frac{111,7}{M_{Fe_2O_3}} \right) \cdot \frac{d(m_{RB})}{d\tau} \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (115)$$

Teplo uvoľnené sálaním:

$$\frac{dQ_{sálaním}}{d\tau} = \sigma \cdot S \cdot R \cdot \left((t_{plameňl} + 273,2)^4 - (t_{HK} + 273,2)^4 \right) \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (116)$$

Potom celkové teplo:

$$\begin{aligned} \frac{d(C'_{p_{HK}} \cdot m_{HK} \cdot T_{HK})}{d\tau} &= \frac{dQ_{CO}}{d\tau} + \frac{dQ_{CO_2}}{d\tau} + \frac{dQ_{Ca_2SiO_4}}{d\tau} + \frac{dQ_{MnO}}{d\tau} + \frac{dQ_{P_2O_5}}{d\tau} + \frac{dQ_{FeO}}{d\tau} + \\ &+ \frac{dQ_{1FeO}}{d\tau} + \frac{dQ_{sálaním}}{d\tau} - \frac{dQ_{straty}}{d\tau} - \frac{dQ_{šrot}}{d\tau} - C'_{p_{CaO}} \cdot DT \cdot \frac{d(m_{nezreagované_vápno})}{d\tau} \end{aligned} \quad (\text{J.s}^{-1}) \quad (117)$$

kde sú rátané tepelné straty na topenie vápna, šrotu a do výmurovky, DT - teplotný rozdiel medzi počiatočnou a momentálnou teplotou kúpeľa (°C), ΔH - reakčné teplo (J.mol⁻¹),

M - molová hmotnosť ($\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$), C_p - priemerná špecifická tepelná kapacita ($\text{J} \cdot \text{K}^{-1}$),
 P - parciálny tlak (Pa).

Tepelná kapacitu kovu, trosky a plynu:

$$c_{HK} = 0,653 + 4,44 \cdot 10^{-4} \cdot (t_{HK} - 1200) \quad (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}) \quad (118)$$

$$c_{troska} = 1,3 + 2,43 \cdot 10^{-3} \cdot (t_{HK} - 1200) \quad (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}) \quad (119)$$

$$c_{plyn} = 1,75 + 0,183 \cdot 10^{-3} \cdot (t_{HK} + 273) - 0,0205 \cdot 10^5 \cdot (t_{HK} + 273)^{-2} \quad (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot ^\circ\text{C}^{-1}) \quad (120)$$

Chladiaci účinok šrotu, vápna a rudy:

$$q_{šrot} = q_{topenia}^{šrot} + q_{1535}^{šrot} + q_{T_{HK}}^{šrot} = 1382 + 0,92 \cdot (t_{HK} - 1535) \quad (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}) \quad (121)$$

$$q_{vápno} = 1140 + 1,017 \cdot (t_{HK} - 1200) \quad (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}) \quad (122)$$

$$q_{rudy} = 1140 + 20,5 \cdot X_{Fe_2O_3}^{ruda} + 1,017 \cdot 0,9 \cdot (t_{HK} - 1200) \quad (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1}) \quad (123)$$

Teplo, ktoré sa uvoľní pri horení CO na CO_2 za jednotku času pri:

$$(1 - \eta_{O_2}) \cdot \xi \cdot I_{O_2} \geq 0,5 \cdot I_{CO} \quad (124)$$

$$\overset{\vee}{Q}_{CO-CO_2} = 12402 \cdot \frac{22,4}{M_C} \cdot \left(\overset{\vee}{m}_c^{HK-PRÚD} + \overset{\vee}{m}_c^{HK-BUBLINKA} \right) \quad (\text{J} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (125)$$

alebo pri:

$$(1 - \eta_{O_2}) \cdot \xi \cdot \dot{V}_{O_2} < 0,5 \cdot \dot{V}_{CO} \quad (126)$$

$$\overset{\vee}{Q}_{CO-CO_2} = 2 \cdot 12402 \cdot (1 - \eta_{O_2}) \cdot \xi \cdot \dot{V}_{O_2} \quad (\text{J} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (127)$$

Bilancia tepla:

$$\begin{aligned} \sum_i^{\vee} \overset{\vee}{Q}_i - \overset{\vee}{Q}_{straty} &= 4420 \overset{\vee}{m}_{Fe}^{HK-PRÚD} + 27947 \overset{\vee}{m}_{Si}^{HK-PRÚD} + 6536 \overset{\vee}{m}_{Mn}^{HK-PRÚD} + 24972 \overset{\vee}{m}_P^{HK-PRÚD} + 11564 \overset{\vee}{m}_C^{HK-PRÚD} + \\ &+ 1874 \overset{\vee}{m}_{FeO_3}^{TR-PRÚD} + \overset{\vee}{Q}_{CO-CO_2} + 21285 \overset{\vee}{m}_{Si}^{HK-TR} + 4441 \overset{\vee}{m}_{Mn}^{HK-TR} + 17430 \overset{\vee}{m}_P^{HK-TR} + 2975 \overset{\vee}{m}_C^{HK-BUBLINKA} - 2891 \overset{\vee}{m}_S^{HK-TR} - (128) \\ &- 7580 \overset{\vee}{m}_O^{TR-HK} + 771 \overset{\vee}{m}_N + 587 \overset{\vee}{m}_{FeO_3} - q_{šrot} \cdot \overset{\vee}{m}_{šrot} - q_{vápno} \cdot \overset{\vee}{m}_{vápno} - q_{rudy} \cdot \overset{\vee}{m}_{rudy} - c_{plyn} \cdot T_{HK} \cdot \left\{ \overset{\bullet}{V}_{CO} + \overset{\bullet}{V}_{N_2} \right\} + k \end{aligned}$$

Rýchlosť ohrevania kovu:

$$v_T = \frac{\left(\sum_i^{\vee} \overset{\vee}{Q}_i - \overset{\vee}{Q}_{straty} \right)}{(c_{HK} \cdot \overset{\vee}{m}_{HK} + c_{TR} \cdot \overset{\vee}{m}_{TR})} \quad (^{\circ}\text{C} \cdot \text{s}^{-1}) \quad (129)$$

Teplota tekutého kovu sa potom vypočíta ako:

$$t_{HK} = t_{Sur.železa0} + \int_0^{\tau} v_T d\tau \quad (^{\circ}\text{C}) \quad (130)$$

Záver

Uvedená správa sa venuje výskumu metód a modelov pre nepriame meranie uhlíka a teploty v procese skujňovania v konvertore. Pre **nepriame meranie uhlíka** sú v správe popísané nasledujúce modely:

- bilančný model uhlíka
- model na báze Learning machine method
- deterministický model uhlíka

Základom bilančného modelu uhlíka je uhlíková bilancia, ktorá vychádza z počiatočného množstva uhlíka v kovonosnej vsádzke a z úbytku uhlíka, ktorý je vypočítaný na základe meraného objemu, koncentrácie oxidu uhoľnatého a uhličitého v konvertorovom plyne. Z dosiahnutých výsledkov vyplýva, že z dostupných dynamických a statických dát je možné určiť priebeh koncentrácie uhlíka, avšak kritické je meranie objemového prietoku konvertorového plynu. Z analýzy dát predpokladáme, že meranie objemového prietoku je chybné, resp. nepresné. Nepresnosť nameraných hodnôt prietoku môže byť spôsobená:

- hodnotou teploty a tlaku použitou pri prepočte na normálne podmienky,
- hodnotou prierezu potrubia použitou pri prepočte rýchlosťi na objemový prietok,
- hodnotou rýchlosťi v zmysle, či je to priemerná rýchlosť v potrubí,
- hodnotou rozsahu rýchlosťi,
- hodnotou rozsahu analógového signálu zo snímača rýchlosťi.

Ďalším z potenciálnych prístupov pre zabezpečenie nepriameho merania uhlíka alebo v tavenine je aplikácia postupov „data mining“ resp. dolovania dát v kombinácii so strojovým učením t.j. Machine Learning. Machine learning alebo strojové učenie je podmnožina počítačových vied (soft computing), ktoré sa zaoberá rozpoznávaním tzv. vzorov resp. „patterns“ (z hľadiska vzťahu vstup-výstup), ktoré sú pozorovateľné na skúmanom systéme. Teória a algoritmy strojového učenia spadajú pod kategóriu umelej inteligencie. Algoritmy strojového učenia sú schopné predpovedať (predikovať) budúce správanie sa systému na základe vytvoreného modelu zo vzoriek tréningového súboru vstupných pozorovaní.

Po overení tohto modelu resp. algoritmov môžme povedať, že predikcia uhlíka s použitím polynomického kernela dosiahla nižšiu hodnotu absolútnej chyby vo vybranom čase ako v prípade keď bol použitý Gaussov kernel. Simulovaný priebeh koncentrácie uhlíka s použitím polynomického kernela sa viac približuje reálnemu priebehu. Nevyriešený zostáva úsek na začiatku, kde predikcia vytvára nežiadany lokálny extrém v predikovanej hodnote. Rovnako problematický je aj záver tavby, kde vstupné pozorovania nezodpovedajú meranému výstupu. Príčinou je praktizovaný technologický postup t.j. zdvihnutie tzv. klobúka konvertora. Kvalitu (resp. výkon) predikcie a tvar priebehu predikovaných dynamických dát je možné ovplyvniť zmenou jadrovej funkcie alebo zvolením iného kritéria výberu údajov (vzoriek) z databázy dynamických dát. V ďalšom výskume predpokladáme, že naučenie SVR modelu s viacerými relevantnými vstupmi (napr. pridanie kyslíka ako ďalšieho vstupného pozorovania) a doplnenie dynamických dát o vypočítané hodnoty uhlíka by mohlo zvýšiť kvalitu predikcie. Ďalej predpokladáme, že predikcia by sa zlepšila aj

v prípade zvýšenia počtu skutočné meraných koncentrácií uhlíka počas tavby a filtrovaním databázy statických a dynamických dát, aby sa vylúčili nevyhovujúce tavby.

Pre **nepriame meranie teploty** sú popísané nasledujúce modely:

- teplotný bilančný model,
- regresný model,
- model na báze Learning machine method,
- termodynamický model,
- deterministický model teploty.

Teplotný bilančný model je určený pre stanovenie teploty ocele na konci procesu, pričom sú známe informácie o vstupoch do procesu a známe je výstupné požadované zloženie ocele podľa akostí. Stanovenie teploty ocele priebežne počas procesu skujňovania pomocou bilančného modelu je problematické nakoľko priebežné zloženie ocele nepoznáme. Ak však vychádzame z predpokladu, že prvky ako Si, Mn, S a P vyhorievajú v prvej štvrtine procesu skujňovania (viď literatúra [1], [2], [3], [4], [5] a pod.) a následne vyhorieva už len C, potom spojením bilancie uhlíka a tepelnej bilancie môžeme nepriamo stanoviť teplotu ocele v priebehu procesu skujňovania.

V rámci regresných modelov boli navrhnuté štyri modely označené ako M1 až M4. Výsledky modelov sú prezentované v podobe absolútnej ($Todch_{abs}$) a relatívnej odchýlky ($Todch_{rel}$). Na vzorke 20-ich taviel boli overené všetky štyri navrhnuté modely. Z uvedených výsledkov sa najlepšie javí model M4, ktorého priemerná relatívna odchýlka je 1.16% čo zodpovedá 19.4°C (Tab. 10). Model M1 je ako jediný z modelov model bez tzv. spätnej väzby (nevstupuje do neho teplota taveniny z predchádzajúceho časového kroku) a vstupom do modelu sú len priamo merané procesné veličiny. Na konci tavby dochádza k poklesu percentuálneho obsahu CO, teploty spalín a naopak k zvýšeniu percentuálneho obsahu CO₂, čo sú vstupy do modelu M1 a majú vplyv na pokles teploty na konci tavby (Obr. 38).

U modelu na báze Learning machine method pre nepriame meranie teploty, pri porovnaní s predikciou uhlíka, boli dosiahnuté lepšie výsledky v prípade polynomického kernela. Podobne ako u nepriameho merania uhlíka, nevyriešený zostáva úsek na začiatku a na konci tavby, kde vstupné pozorovania nezodpovedajú meranému výstupu. V ďalšom výskume predpokladáme, že naučenie SVR modelu s viacerými relevantnými vstupmi (napr. pridanie kyslíka ako ďalšieho vstupného pozorovania). Ďalej predpokladáme, že predikcia by sa zlepšila aj v prípade zvýšenia počtu skutočné meraných teplôt počas tavby a filtrovaním databázy statických a dynamických dát, aby sa vylúčili nevyhovujúce tavby.

Použitá literatúra

- [1] Jalkanen, H.: Experiences in Physicochemical modeling of Oxigen Converter process (BOF), Sohn International Symposium ADVANCED PROCESSING OF METALS AND MATERIALS VOLUME 2 - THERMO AND PHYSICOCHEMICAL PRINCIPLES: IRON AND STEEL MAKING, 2006
- [2] Widlund, D. et al.: Towards Model-Based Closed-Loop Control of the Basic Oxygen Steelmaking Process, IFAC Automation in Mining, Mineral and Metal Processing, Cologne, Germany, 1998
- [3] Iso, H. et al.: Dynamic Refining Control by from LD Converter, Transactions ISIJ, Vol. 27, 1987
- [4] Takawa, T. et al.: Analysis of Converter Process Variables from Exhaust Gas, Transactions ISIJ, Vol. 28, 1988
- [5] Blanco, C., Diaz, M.: Model of Mixed Control for Carbon and Silicon in a Steel Converter, ISIJ International, Vol. 33 (1 993), No. 7, pp. 757-763
- [6] A. Aryafar, R. Gholami, R. Rooki, F. D. Ardejani, Heavy metal pollution assessment using support vector machine in the shur river, sarcheshmeh copper mine, iran, Environmental Earth Sciences 67 (4) (2012) 1191–1199.
- [7] W. Yan, H. Shao, X. Wang, Soft sensing modeling based on support vector machine and bayesian model selection, Computers & Chemical Engineering 28 (8) (2004) 1489–1498.
- [8] S. Iplikci, A support vector machine based control application to the experimental three-tank system, ISA Transactions 49 (3) (2010) 376–386.
- [9] S. Liu, Z. Hou, C. Yin, Data-driven modeling for fixed-bed intermittent gasification processes by enhanced lazy learning incorporated with relevance vector machine, in: 11th IEEE International Conference on Control & Automation (ICCA), IEEE, 2014, pp. 1019–1024.
- [10] M. Chugh, S. S. Thumsi, V. Keshri, A comparative study between least square support vector machine(lssvm) and multivariate adaptive regression spline(mars) methods for the measurement of load storing capacity of driven piles in cohesion less soil, International Journal of Structural and Civil Engineering Research.
- [11] B. E. Boser, I. M. Guyon, V. N. Vapnik, A training algorithm for optimal margin classifiers, in: Proceedings of the 5th Annual ACM Workshop on Computational Learning Theory - COLT'92, Pittsburgh, PA, ACM Press, 1992, pp. 144–152.
- [12] V. N. Vapnik, Constructing learning algorithms, in: The Nature of Statistical Learning Theory, Springer Verlag, New York, 1995, pp. 119–166.
- [13] B. Schölkopf, C. Burges, V. Vapnik, Extracting support data for a given task, in: U. M. Fayyad and R. Uthurusamy, editors, Proceedings, First International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, AAAI Press, Menlo Park, CA, 1995, pp. 252–257.
- [14] H. Drucker, C. J. C. Burges, A. S. L. Kaufman, V. Vapnik., Support vector regression machines, in: M. Mozer, M. Jordan, and T. Petsche, editors, Advances in Neural Information Processing Systems 9, MIT Press, Cambridge, MA, 1997, pp. 155–161.
- [15] V. Vapnik, S. Golowich, A. Smola, Support vector method for function approximation, regression estimation, and signal processing, in: M. Mozer, M.

- Jordan, and T. Petsche, editors, Advances in Neural Information Processing Systems 9, MIT Press, Cambridge, MA, 1997, pp. 281–287.
- [16] K. R. Müller, A. J. Smola, G. Rätsch, B. Schölkopf, J. Kohlmorgen, V. Vapnik, Predicting time series with support vector machines, in: Lecture Notes in Computer Science, Springer Berlin Heidelberg, 1997, pp. 999–1004.
 - [17] J. Kačur, M. Laciak, M. Durdán, P. Flegner, Utilization of machine learning method in prediction of UCG data, in: 2017 18th International Carpathian Control Conference (ICCC), IEEE, 2017, pp. 278–283.
 - [18] A. J. Smola, B. Schölkopf, On a Kernel-Based Method for Pattern Recognition, Regression, Approximation, and Operator inversion, *Algorithmica* 22 (1-2) (1998) 211–231.
 - [19] A. Smola, B. Schölkopf, K.-R. Müller, General cost functions for support vector regression, in: T. Downs, M. Frean, and M. Gallagher, editors, Proceedings of the 9th Australian Conference on Neural Networks, Brisbane, Australia, University of Queensland, 1999, pp. 79–83.
 - [20] C. J. C. Burges, B. Schölkopf, Improving the accuracy and speed of support vector learning machines, in: M. Mozer, M. Jordan, and T. Petsche, editors, Advances in Neural Information Processing Systems 9, MIT Press, Cambridge, MA, 1997, pp. 375–381.
 - [21] M. Aizerman, E. Braverman, L. Rozonoer, Theoretical foundations of the potential function method in pattern recognition learning, *Automation and Remote Control* 25 (1) (1964) 821–837.
 - [22] G. Lanckriet, N. Cristianini, P. Bartlett, G. L. El, M. Jordan, Learning the kernel matrix with semidefinite programming, *Journal of Machine Learning Research* 5 (2004) 27–72.
 - [23] R. J. Vanderbei, Loqo user's manual - version 2.27. technical report sot-97-08 (1997).
 - [24] MathWorks, Statistics and Machine Learning Toolbox User's Guide (R2016b), stats.pdf (2016).
 - [25] J. Kačur, M. Laciak, M. Durdán, P. Flegner, Utilization of Machine Learning Method in Prediction of UCG Data, in: ICCC 2017: 18th International Carpathian Control Conference, IEEE, 2017, pp. 1–6.
 - [26] J. C. Platt, Sequential Minimal Optimization: A Fast Algorithm for Training Support Vector Machines, Technical report msr-tr-9814, Microsoft Research (1999).
 - [27] R. E. Fan, P. H. Chen, C. J. Lin, Working Set Selection Using Second Order Information for Training Support Vector Machines, *The Journal of machine Learning Research* 6 (2005) 1871–1918.
 - [28] R. E. Fan, P. H. Chen, C. J. Lin, A Study on SMO-Type Decomposition Methods for Support Vector Machines, *Transactions on Neural Networks*, IEEE 17 (4) (2006) 893–908.
 - [29] Salah Bouhouche, Zoheir Mentouri, Hazzem Meradi and Laib dit Leksir Yazid: Combined Use of Support Vector Regression and Monte Carlo Simulation in Quality and Process Control Calibration, Proceedings of the 2012 International Conference on Industrial Engineering and Operations Management Istanbul, Turkey, July 3 – 6, 2012.
 - [30] F. Parrella: Online Support Vector Regression, A Thesis presented for the degree of Information Science, Department of Information Science, University of Genoa, Italy, June 2007. P. 101

- [31] Laciak, Marek, Kačur, Ján, Durdán, Milan, Flegner, Patrik, System of indirect measurement temperature of melt with adaptation module - 2015. In: ICCC 2015. - Danvers : IEEE, 2015 P. 277-281. - ISBN 978-1-4799-7369-9
- [32] Mudarri, Tawfik, Laciak, Marek, Kačur, Ján, Flegner, Patrik, Durdán, Milan, The verification of models for indirect measurement melt temperature in steelmaking process - 2017. In: SGEM 2017. - Sofia : STEF92 Technology Ltd., 2017 P. 711-717. - ISBN 978-619-7408-01-0
- [33] Marek Laciak, Diana Ráškayová, The using of thermodynamic model for the optimal setting of input parameters in the UCG process - 2016. In: ICCC 2016. - Danvers : IEEE, 2016 P. 418-423. - ISBN 978-1-4673-8605-0
- [34] Diana Ráškayová, Marek Laciak, Tawfik Mudarri, The system of optimization quantity of oxidizers in UCG process with thermodynamic model - 2017. In: ICCC 2017. - Danvers : IEEE, 2017 P. 1-5. - ISBN 978-1-5090-5825-9
- [35] Karol Kostúr, Marek Laciak, Peter Bubelíny, Modelovanie a optimálne riadenie konvertorového procesu - Košice : Vienala, - 2002. - 86 s. - ISBN 80-88922-62-3.
- [36] Karol Kostúr, Marek Laciak – 2002, Model for indirect measurements of LD Steelmaking Process. In: Metalurgija. Vol. 41, no. 2 (2002), p. 113-116. - ISSN 0543-5846