

Technická zpráva

Číslo projektu	Číslo zprávy	Revize	Datum
TK02030042	LA-02-V2-03		25. 04. 2025

Název zprávy:

SW pro návrh konstrukčních parametrů latentních akumulátorů tepla

Technická zpráva prokazující dosažení výsledku V2.

Organizace	Autor	Datum vydání
 FAKULTA STROJNÍ ČVUT V PRAZE	Ing. Petr Jančík, Ph.D.	16. 04. 2025
	doc. Ing. Tomáš Hyhlík, Ph.D.	
 TEDOM		
	Schválil	Datum
	Ing. Pavel Sláma, Ph.D.	25. 04. 2025

Předmět revize

Č. Revize	Popis

Seznam použitých zkratk

PCM – Phase change material – látka, využívající pro uložení tepla fázové přeměny

Obsah

1	Úvod	2
2	Aplikace	2
2.1	LATES - Nelineární regrese měrné tepelné kapacity s fázovým přechodem	2
2.2	LATES - Žebrované trubky	6
2.3	LATES - Alfa	11
3	Závěr	15
4	Reference	15

1 Úvod

Soubor programů představuje inovativní komplexní řešení pro modelování tepelných procesů s fázovou přeměnou, které zahrnuje tři vzájemně propojené softwarové aplikace, všechny splňující kritéria výsledku typu R - Software dle Metodiky TAČR:

1. LATES - Nelineární regrese měrné tepelné kapacity s fázovým přechodem
2. LATES - Žebrované trubky
3. LATES - Alfa

Všechny aplikace byly vyvinuty s grafickým uživatelským rozhraním (GUI) pro snadné použití i bez hlubokých znalostí programování. Tyto nástroje představují významný pokrok v oblasti modelování tepelných systémů, především díky implementaci původních matematických modelů a moderních výpočetních přístupů, které zvyšují objem znalostí v dané oblasti.

2 Aplikace

2.1 LATES - Nelineární regrese měrné tepelné kapacity s fázovým přechodem

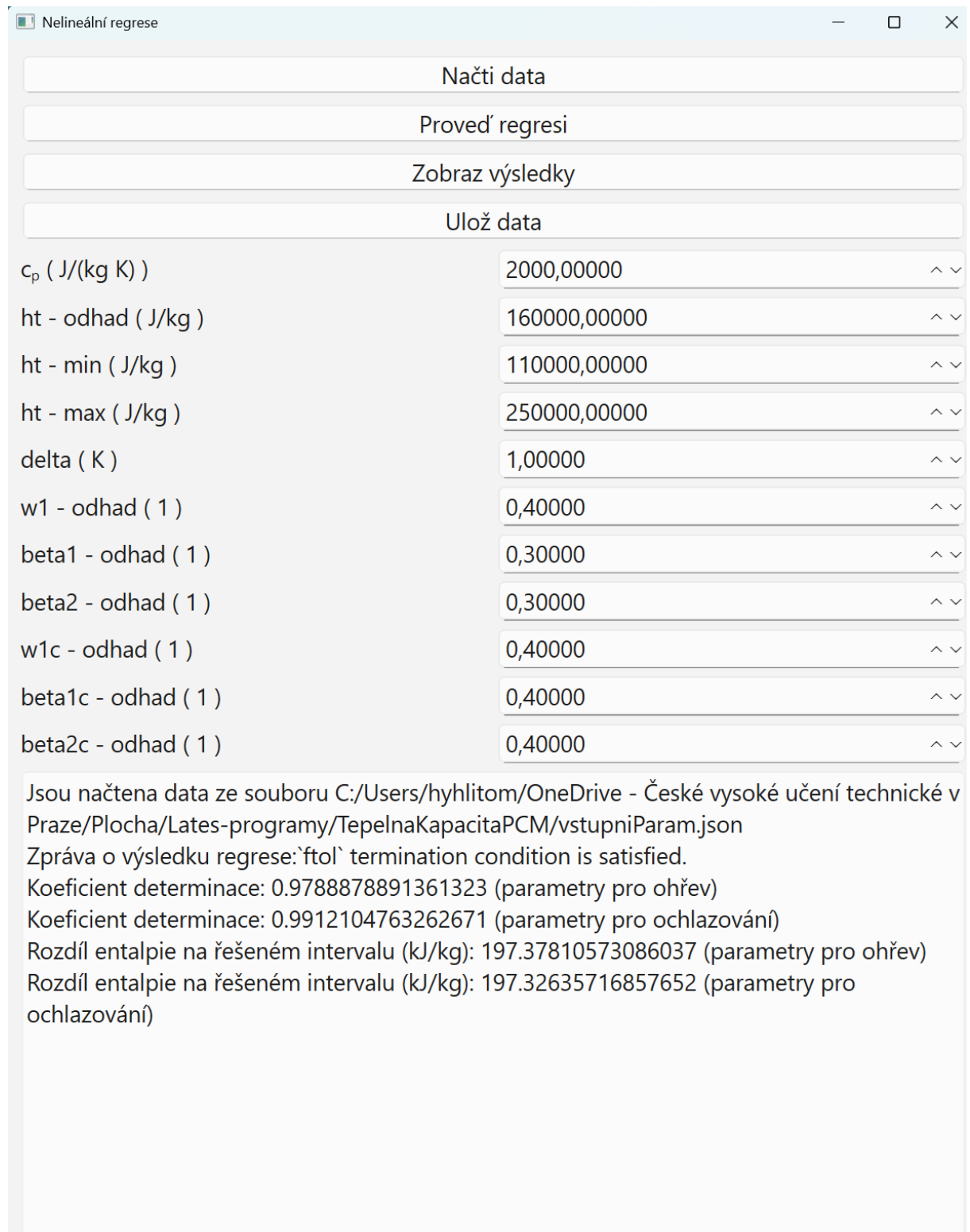
Tato aplikace je určena pro provádění nelineární regrese experimentálních dat měrné tepelné kapacity v závislosti na teplotě s uvažováním fázového přechodu.

Prvky novosti a unikátnosti:

- Unikátní matematický model - software využívá nový přístup modelování fázových přeměn pomocí směsných Gumbelových distribucí, což představuje významnou metodologickou inovaci oproti běžně používaným aproximacím (např. polynomiálním či lineárním fitům)
- Originální implementace - kombinace interaktivního vizuálního prostředí a fyzikálně motivovaného modelování tepelné kapacity pomocí směsných Gumbelových distribucí není dostupná v žádném jiném komerčně ani akademicky dostupném softwaru
- Pokročilá parametrizace - software zahrnuje nový systém optimalizace parametrů vázaných na fyzikální význam, což zajišťuje nejen matematickou přesnost, ale i fyzikální relevanci výsledků

Klíčové vlastnosti:

- Interaktivní GUI vytvořené pomocí PySide6 (obrázek 1)



Obrázek 1: GUI aplikace LATES - Nelineární regrese

- Načítání a ukládání dat ve formátu JSON (obrázek 2 a obrázek 3)
- Vizualizace výsledků pomocí knihovny Matplotlib
- Výpočet entalpického rozdílu mezi fázemi

- Derivace hmotnostního zlomku kapalně fáze

```
{
  "komentar_hp": "hp je vektor parciálních entalpií pro ohřev po 1°C",
  "hp": [3000, 3000, 4000, 4000, 5000, 7000, 9000, 14000, 31000, 80000, 40000, 12000, 7000, 6000, 6000, 6000],
  "komentar_hpc": "hp je vektor parciálních entalpií pro ochlazování po 1°C, rozměr odpovídá hp",
  "hpc": [3000, 3000, 4000, 4000, 6000, 22000, 44000, 113000, 8000, 8000, 6000, 5000, 4000, 5000, 5000, 5000],
  "komentar_t": "t je vektor teplot od t_min do t_max po 1°C, rozměr vektoru odpovídá hp a hpc",
  "t": [23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38],
  "komentar_cp": "měrná tepelná kapacita mimo oblast fázové změny",
  "cp": 2000,
  "komentar_ht_odhad": "odhad skupenského tepla pro nelineární optimalizaci",
  "ht_odhad": 160000,
  "komentar_ht_min": "minimum skupenského tepla pro nelineární optimalizaci",
  "ht_min": 110000,
  "komentar_ht_max": "maximum skupenského tepla pro nelineární optimalizaci",
  "ht_max": 250000,
  "komentar_delta": "polovina intervalu teplot, kde se hledá parametr mu blíží se střední teplotě fázové změny",
  "delta": 1,
  "komentar_w1_odhad": "odhad váhového parametru w1 mezi 0 a 1 pro nelineární optimalizaci - ohřev",
  "w1_odhad": 0.4,
  "komentar_beta1_odhad": "odhad parametru beta1 mezi 0 a 1 pro nelineární optimalizaci - ohřev",
  "beta1_odhad": 0.3,
  "komentar_beta2_odhad": "odhad parametru beta2 mezi 0 a 1 pro nelineární optimalizaci - ohřev",
  "beta2_odhad": 0.3,
  "komentar_w1c_odhad": "odhad váhového parametru w1c mezi 0 a 1 pro nelineární optimalizaci - ochlazování",
  "w1c_odhad": 0.4,
  "komentar_beta1c_odhad": "odhad parametru beta1c mezi 0 a 1 pro nelineární optimalizaci - ochlazování",
  "beta1c_odhad": 0.4,
  "komentar_beta2c_odhad": "odhad parametru beta2c mezi 0 a 1 pro nelineární optimalizaci - ochlazování",
  "beta2c_odhad": 0.4
}
```

Obrázek 2: Příklad vstupního JSON souboru

```
{
  "parametry_pro_ohrev": {
    "ht": 167386.0412033251,
    "mu1": 32.592680853677564,
    "beta1": 0.9999999999999999,
    "mu2": 32.03937225056773,
    "beta2": 0.45751765624287866,
    "w1": 0.6948793160291251
  },
  "parametry_pro_chlazení": {
    "htc": 167386.0412033251,
    "mu1c": 30.141955740926182,
    "beta1c": 0.06172593840511315,
    "mu2c": 29.646241262698652,
    "beta2c": 0.869690804388779,
    "w1c": 0.2567180535018407
  },
  "dalsi parametry": {
    "tmin_change": 25.190000000000342,
    "tmax_change": 34.510000000001796,
    "cp": 2000
  }
}
```

Obrázek 3: Příklad výstupního JSON souboru

Technické detaily:

- Numerická regrese s unikátním matematickým modelem
- Statistické vyhodnocení kvality fitu (R^2)

- Multigrafová prezentace dat
- Optimalizace parametrů s ohledem na fyzikální význam

Software je implementován v jazyce Python s využitím knihoven:

- NumPy pro numerické výpočty
- SciPy pro pokročilé vědecké výpočty a nelineární regresi
- Matplotlib pro grafické výstupy
- PySide6 pro grafické uživatelské rozhraní
- Scikit-learn pro statistické vyhodnocení kvality regrese

Architektura programu:

- Modulární design oddělující výpočetní jádro od uživatelského rozhraní
- Implementace specializovaných matematických modelů
- Propracovaný systém pro načítání, zpracování a ukládání dat
- Interaktivní GUI pro snadnou modifikaci parametrů

Ověření funkčnosti:

Software byl rigorózně otestován na reálných experimentálních datech měření tepelné kapacity materiálů s fázovou přeměnou, kde prokázal:

- Přesnou aproximaci experimentálních dat s vysokým koeficientem determinace
- Správnou identifikaci intervalů fázové přeměny
- Stabilní chování při zpracování různých datových souborů

Software je určen pro vědecké a výzkumné účely v oblasti návrhu energetických systémů, konkrétně pro:

- Charakterizaci nových materiálů pro tepelnou akumulaci
- Přesnou analýzu tepelné kapacity materiálů s fázovou přeměnou

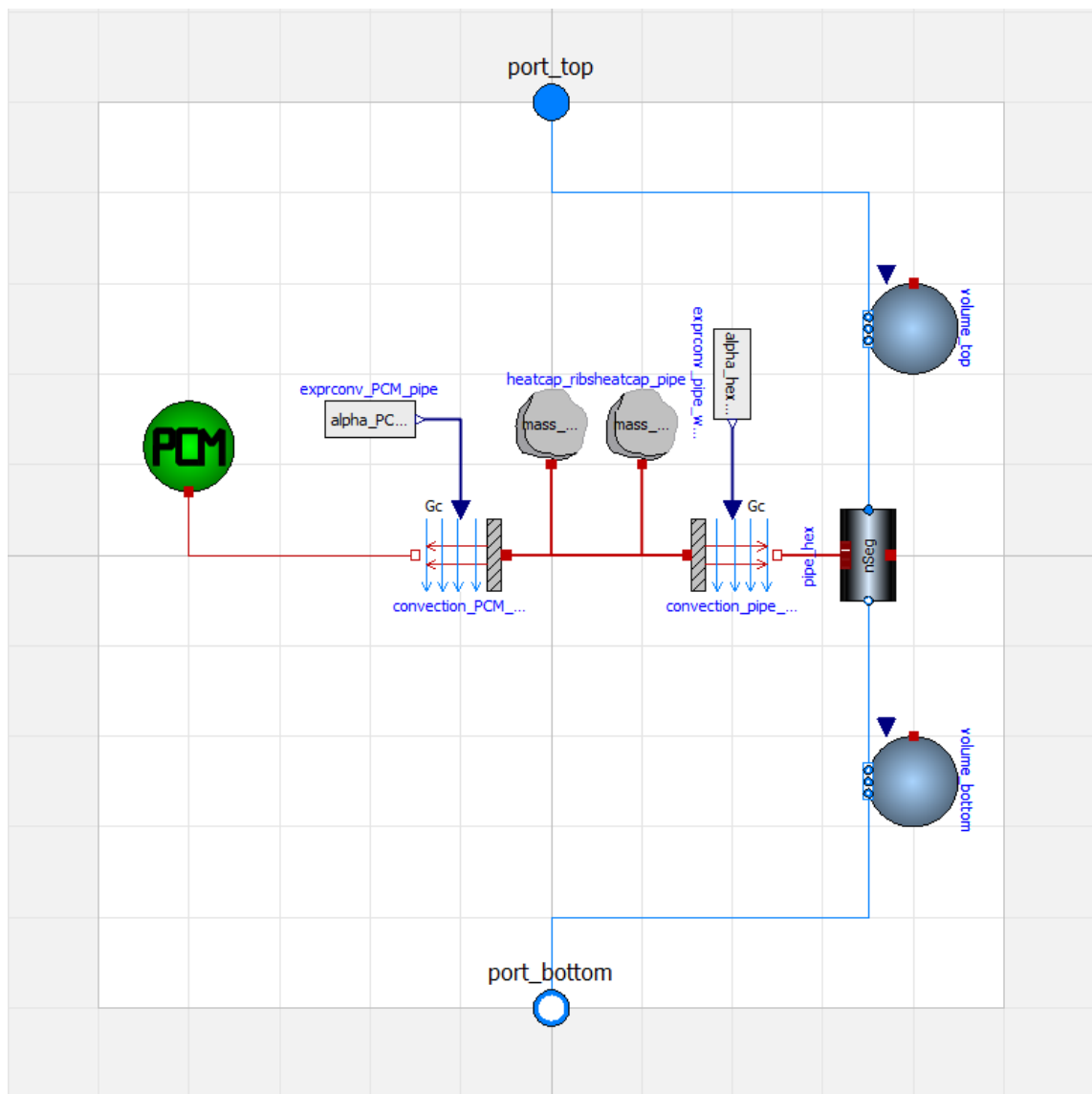
2.2 LATES - Žebrované trubky

Aplikace "LATES - Žebrované trubky" představuje specializovaný simulační nástroj vyvinutý pro modelování tepelných procesů v žebrovaných trubkách s materiály s fázovou přeměnou (PCM).

Prvky novosti a unikátnosti:

- Pokročilý model fázových přeměn - implementace unikátní kombinace Gumbelových funkcí pro přesné modelování přechodu mezi fázemi PCM materiálu s různými koeficienty pro tání a tuhnutí, což představuje metodologický pokrok v oblasti modelování tepelných procesů

- Efektivní numerické metody - využití binárního vyhledávání pro rychlou interpolaci dat ve velkých datových sadách, což zajišťuje výpočetní efektivitu při zachování přesnosti
- Propojení GUI s FMU modelem - originální propojení uživatelského rozhraní s výpočetním jádrem založeným na standardu FMI (Functional Mock-up Interface), což umožňuje modulární přístup k modelování (FMU model vychází z obrázku 4)
- Komplexní model žebrovaných trubek - detailní modelování přenosu tepla v komplexní geometrii žebrovaných trubek s PCM materiálem, které zahrnuje pokročilé fyzikální modely nedostupné v běžném simulačním softwaru



Obrázek 4: Komponenta akumulátoru jako žebrované trubky

Funkční požadavky:

- Simulace sdílení tepla v průběhu času
- Modelování fázových přeměn PCM pomocí Gumbelových funkcí

- Nastavitelné vstupní parametry
- Import a export dat
- Grafická vizualizace výsledků
- Srovnání s referenčními daty

Architektura softwaru:

Aplikace je navržena jako desktopová aplikace s grafickým rozhraním vytvořeným pomocí PyQt5. Architektura je rozdělena do následujících komponent:

- GUI vrstva - zajišťuje interakci s uživatelem (obrázek 5)
- Simulační jádro - zapouzdřuje práci s FMU modelem
- Datová vrstva - zajišťuje ukládání a načítání dat

Matematický model:

Software využívá pokročilý matematický model založený na:

- Modelování fázových přeměn pomocí Gumbelových funkcí s odlišným přístupem pro tání a tuhnutí
- Numerické integraci s adaptivním časovým krokem
- Tepelném přenosu mezi různými komponentami systému

Implementace:

- Jazyk Python
- Knihovna PyQt5 pro GUI
- FMPy pro práci s Functional Mock-up Unit
- Matplotlib pro vizualizaci výsledků

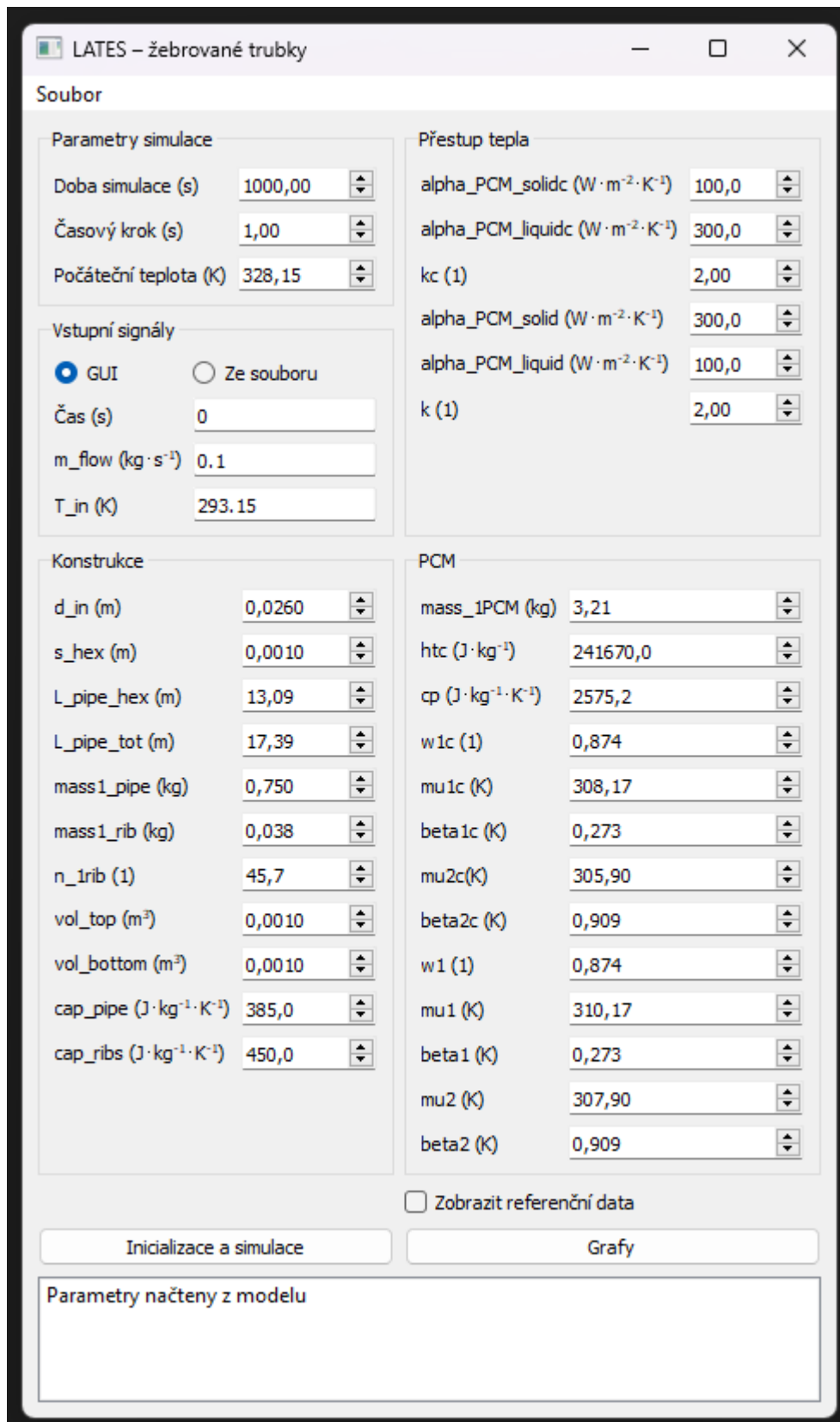
Datové struktury:

- Parameter - třída pro definici a správu parametrů modelu
- Input - třída pro definici a správu vstupních signálů
- Output - třída pro definici a správu výstupních signálů

Uživatelské rozhraní:

Hlavní okno aplikace (viz obrázek 5) umožňuje nastavení parametrů simulace (tabulka 1), které jsou rozděleny do následujících sekcí:

- Parametry simulace (doba, časový krok, počáteční teplota)
- Vstupní signály (průtok, teplota)



Obrázek 5: GUI aplikace LATES – Žebrované trubky

Tabulka 1: Přehled parametrů aplikace LATES – žebrované trubky

Název parametru	Popis	Jednotka
Parametry simulace		
Doba simulace	Délka trvání simulace	s
Časový krok	Velikost časového kroku simulace	s
Počáteční teplota	Počáteční teplota systému	K
Vstupní signály		
Čas	Čas vstupního signálu	s
m_flow	Hmotnostní průtok	kg·s ⁻¹
T_in	Teplota vstupující vody	K
Konstrukce		
d_in	Vnitřní průměr trubky	m
s_hex	Tloušťka stěny trubky	m
L_pipe_hex	Délka potrubí v tepelném výměníku	m
L_pipe_tot	Celková délka potrubí	m
mass1_pipe	Hmotnost 1 m trubky	kg
mass1_rib	Hmotnost jednoho žebra	kg
n_1rib	Počet žebor na 1 m trubky	1
vol_top	Objem vody v horní části (malá hodnota může vést k pádu aplikace)	m ³
vol_bottom	Objem vody v dolní části (malá hodnota může vést k pádu aplikace)	m ³
cap_pipe	Měrná tepelná kapacita potrubí	J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
cap_ribs	Měrná tepelná kapacita žebor	J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
Přestup tepla		
alpha_PCM_soliddc	Přestup tepla pevného PCM při tuhnutí	W·m ⁻² ·K ⁻¹
alpha_PCM_liquidc	Přestup tepla kapalného PCM při tuhnutí	W·m ⁻² ·K ⁻¹
kc	Parametr přestupu tepla při tuhnutí	1
alpha_PCM_solidd	Přestup tepla pevného PCM při tání	W·m ⁻² ·K ⁻¹
alpha_PCM_liquidd	Přestup tepla kapalného PCM při tání	W·m ⁻² ·K ⁻¹
k	Parametr přestupu tepla při tání	1
PCM		
mass_1PCM	Hmotnost PCM na 1 m trubky	kg
htc	Latentní teplo	J·kg ⁻¹
cp	Měrná tepelná kapacita PCM	J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹
w1c	Součinitel lineární kombinace křivek při tuhnutí	1
mu1c	Střed 1. části křivky při tuhnutí	K
beta1c	Šířka 1. části křivky při tuhnutí	K
mu2c	Střed 2. části křivky při tuhnutí	K
beta2c	Šířka 2. části křivky při tuhnutí	K
w1	Součinitel lineární kombinace křivek při tání	1
mu1	Střed 1. části křivky při tání	K
beta1	Šířka 1. části křivky při tání	K
mu2	Střed 2. části křivky při tání	K
beta2	Šířka 2. části křivky při tání	K

- Konstrukce (geometrické a materiálové parametry)
- Přestup tepla (koeficienty pro různé fáze PCM)
- PCM (parametry materiálu s fázovou přeměnou)

Práce s aplikací:

1. Nastavení parametrů simulace - využití ovládacích prvků na hlavním okně
2. Nahrání vstupních dat - ruční zadání nebo načtení ze souboru
3. Inicializace a spuštění simulace - tlačítko "Inicializace a simulace"
4. Zobrazení výsledků - grafy časových průběhů vybraných veličin
5. Uložení výsledků - export do souboru CSV

Přehled parametrů:

Kompletní seznam parametrů je uveden v Tabulce 1, která zahrnuje:

- Parametry simulace (doba, časový krok, počáteční teplota)
- Vstupní signály (čas, průtok, teplota)
- Konstrukce (rozměry, hmotnosti, tepelné kapacity)
- Přestup tepla (koeficienty pro různé fáze)
- PCM (hmotnost, latentní teplo, parametry křivek)

2.3 LATES - Alfa

Aplikace "LATES - Alfa" je inovativní nástroj určený k výpočtu součinitelů přestupu tepla při fázových přeměnách materiálů PCM v tepelně akumulacích systémech.

Prvky novosti a unikátnosti:

- Aplikace umělé inteligence - software využívá metody strojového učení, konkrétně předtrénované neuronové sítě, k aproximaci výsledků komplexních fyzikálně-matematických modelů, což představuje zcela nový přístup k řešení problematiky přenosu tepla při fázových přeměnách
- Dramatické zrychlení procesu návrhu - zatímco tradiční numerické simulace trvají hodiny až dny, LATES Alfa poskytuje výsledky okamžitě, což umožňuje rychlé iterativní navrhování a optimalizaci parametrů tepelně akumulacích systémů
- Optimalizovaná architektura neuronových sítí - unikátní struktura neuronových sítí speciálně navržená pro predikci tepelně-technických parametrů s vysokou přesností (odchylka do 5% od detailních numerických simulací)

Účel softwaru:

Software slouží k rychlému výpočtu součinitelů přestupu tepla na začátku a konci fázové přeměny materiálů PCM. Tyto výpočty jsou běžně řešeny prostřednictvím časově náročných numerických simulací, které LATES Alfa zjednodušuje využitím předtrénovaných neuronových sítí.

Primární funkce:

- Zadávání geometrických parametrů tepelných systémů
- Zadávání fyzikálních parametrů materiálů
- Výpočet součinitelů přestupu tepla
- Kontrola validity vstupních dat

Architektura softwaru:

- Prezentační vrstva - GUI implementované pomocí PyQt5 (obrázek 6)
- Aplikační vrstva - zpracování vstupů a vyhodnocení výsledků
- Modelová vrstva - implementace neuronových sítí pomocí PyTorch

Implementační detaily:

Software implementuje několik typů neuronových sítí, přičemž pro výpočet používá SigmoidModel se sigmoidální aktivační funkcí, který byl zvolen na základě výzkumu jako optimální pro danou aplikaci. Predikce probíhá ve dvou samostatných neuronových sítích:

- model_solid pro začátek fázové přeměny
- model_liquid pro konec fázové přeměny

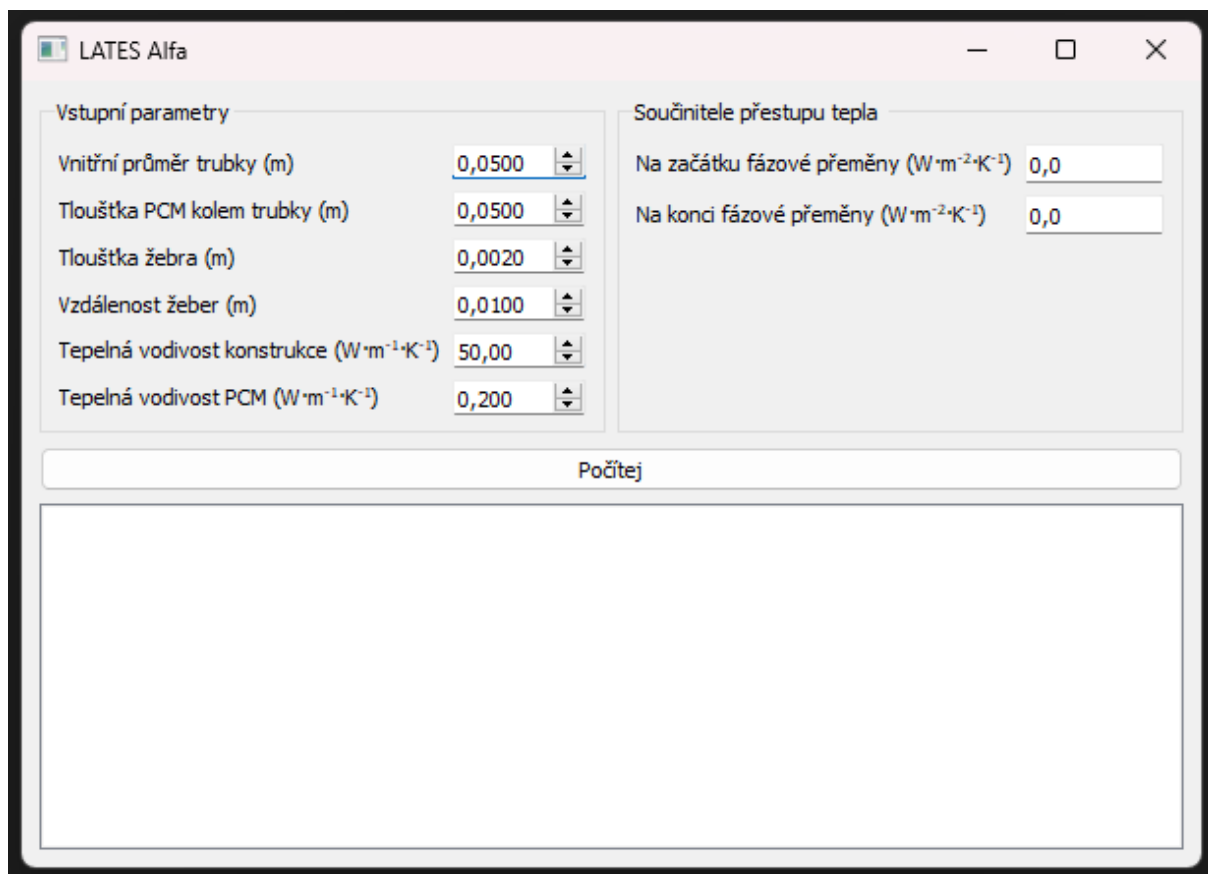
Přesnost výpočtů:

Průměrná odchylka výsledků od detailních numerických simulací nepřesahuje 5%, což je pro inženýrské aplikace velmi dobrá přesnost. Toto bylo dosaženo optimalizací architektury neuronových sítí a rozsáhlým tréninkovým datasetem.

Rozsah platnosti:

Software poskytuje spolehlivé výsledky v těchto rozsazích parametrů:

- Vnitřní průměr trubky: 0,025 až 0,075 m
- Tloušťka PCM kolem trubky: 0,01 až 0,1 m
- Tloušťka žebra: 0,0005 až 0,003 m
- Vzdálenost žeber: 0,004 až 0,05 m
- Tepelná vodivost konstrukce: 15 až 400 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
- Tepelná vodivost PCM: 0,1 až 5,0 $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$



Obrázek 6: GUI aplikace LATES – Alfa

Tabulka 2: Přehled parametrů aplikace LATES - Alfa

Vstupní parametry	Popis	Jednotka
Vnitřní průměr trubky	Vnitřní průměr trubky	m
Tloušťka PCM kolem trubky	Rozdíl poloměru oblasti vyplněné PCM a vnějšího poloměru trubky	m
Tloušťka žebra	Tloušťka žebra	m
Vzdálenost žeber	Vzdálenost mezi žebry (oblast vyplněná PCM).	m
Tepelná vodivost konstrukce	Tepelná vodivost materiálu konstrukce.	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
Tepelná vodivost PCM	Tepelná vodivost PCM.	$W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$
Výstupní parametry	Popis	Jednotka
Součinitel přestupu tepla na začátku fázové přeměny	Součinitel přestupu tepla na začátku fázové přeměny.	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$
Součinitel přestupu tepla na konci fázové přeměny	Součinitel přestupu tepla na konci fázové přeměny.	$W \cdot m^{-2} \cdot K^{-1}$

Přehled parametrů (tabulka 2):

Vstupní parametry aplikace zahrnují:

- Vnitřní průměr trubky

- Tloušťku PCM kolem trubky
- Tloušťku žebra
- Vzdálenost žeber
- Tepelnou vodivost konstrukce a PCM

Výstupní parametry jsou:

- Součinitel přestupu tepla na začátku fázové přeměny
- Součinitel přestupu tepla na konci fázové přeměny

Zdůvodnění splnění kritérií výsledku typu R - Software

Všechny tři aplikace systému LATES splňují kritéria pro uznání jako výsledek typu R - Software dle Metodiky TAČR, neboť:

1. LATES - Nelineární regrese

- Přináší unikátní implementaci modelování fázových přeměn pomocí směsných Gumbelových distribucí
- Zavádí nové metody optimalizace parametrů s fyzikálním významem
- Nejedná se o pouhou aplikaci existujících metod, ale o implementaci nových matematických modelů pro analýzu tepelných procesů

2. LATES - Žebrované trubky

- Implementuje originální propojení GUI s FMU modelem
- Přináší nové numerické metody pro efektivní interpolaci dat
- Využívá pokročilé modelování fázových přeměn, které není dostupné v existujících softwarových řešeních

3. LATES - Alfa

- Představuje první aplikaci neuronových sítí na problematiku výpočtu součinitelů přestupu tepla při fázových přeměnách
- Zavádí nový přístup nahrazující časově náročné numerické simulace rychlými predikcemi
- Implementuje unikátní architekturu neuronových sítí specificky optimalizovanou pro danou problematiku

Všechny aplikace byly důkladně zdokumentovány, včetně analýzy funkčních požadavků, technické a programátorské dokumentace, a byly ověřeny na reálných datech, čímž splňují veškeré formální požadavky na výsledek typu R - Software.

3 Závěr

Vyvinutý systém LATES představuje komplexní a inovativní řešení pro simulaci a optimalizaci systémů akumulace tepla, které kombinuje teoretické základy přenosu tepla s praktickými výhodami uživatelsky přívětivého rozhraní. Systém jako celek přináší významný pokrok do oblasti počítačových programů a zvyšuje objem znalostí v dané oblasti.

Klíčovými přínosy jsou:

1. Přesné modelování fázových přeměn - využití směsných Gumbelových funkcí pro detailní popis chování PCM materiálů představuje metodologickou inovaci v této oblasti
2. Flexibilita konstrukce - podpora různých geometrií včetně žebrovaných trubek s pokročilými modely přenosu tepla
3. Rychlost výpočtů - díky použití neuronových sítí v aplikaci LATES - Alfa je dosaženo bezprecedentního zrychlení procesu návrhu a optimalizace
4. Integrace komponent - schopnost modelovat komplexní systémy akumulace tepla díky provázanosti jednotlivých aplikací
5. Uživatelská přívětivost - intuitivní grafické rozhraní všech aplikací při zachování pokročilých výpočetních kapacit

Aplikace "LATES - Nelineární regrese", "LATES - Žebrované trubky" a "LATES - Alfa" jsou vzájemně komplementární a společně tvoří ucelený nástroj pro analýzu, návrh a optimalizaci systémů tepelné akumulace s materiály s fázovou přeměnou. Implementace moderních technologií, originálních matematických modelů a nových výpočetních přístupů zajišťuje, že tento softwarový systém představuje skutečnou inovaci a pokrok v oblasti počítačových programů pro modelování tepelných procesů.

4 Reference

- [1] JANČÍK, Petr. *Modely pro návrh akumulátoru tepla a jejich použití*. Praha, 2021.
- [2] JANČÍK, Petr, Tomáš HYHLÍK. *Hydrodynamický a termodynamický výzkum látek ve vztahu k interním oblastem akumulátoru*. Praha, 2023.
- [3] JANČÍK, Petr, Tomáš HYHLÍK. *Parametrický výpočetní simulační model – part B*. Praha, 2024