

Sokparaméteres modelloptimalizálás

Témavezető:

Turányi Tamás

ELTE Kémiai Intézet

1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/A, 146-os szoba

e-mail: turanyi@chem.elte.hu

Web: www.turanyi.eu

A téma leírása:

Az égések és a lángok gyors kémiai folyamatok. A gyulladásokat és a lángterjedést közönséges, illetve parciális differenciálegyenlet-rendszer megoldásán alapuló modellekkel lehet leírni. Ezek a modellek több száz, vagy akár több ezer paraméter tartalmaznak. Ezeket a paramétereket közvetlenül is meg lehet mérni, de csak nagy hibával. Egy másik lehetséges megközelítés, ha a legfontosabb paramétereket közvetett módon határozzák meg. Ebben az esetben laboratóriumi kísérletekben a gyulladásig eltelt időt és lángsebességet mérnek, és a kémiai modell sok (20-50) paraméterét egyszerre illesztik a nagyszámú (pl. 5000) mérési adatra.

Létrehoztunk egy mérési adatgyűjteményt és egy MATLAB nyelvű programot, amivel a hidrogén és a szénmonoxid égési mechanizmusait optimalizáltuk a mérési adatok pontos leírására. A megoldandó feladat annak vizsgálata lesz, hogyan lehet a mostani eljárást tökéletesíteni. A továbbfejlesztés néhány lehetséges iránya:

- A Matlab program átírása C++ programmá, majd tovább fejlesztése.
- A programunk most egy saját fejlesztésű globális optimalizálási algoritmust használ. Az Internetről számos más globális optimalizálási program is letölthető. Megvizsgálandó, hogy ugyanazt a paraméteroptimalizálási feladatot milyen sebességgel és hatékonysággal oldják meg az egyes algoritmusok, és ezek a tulajdonságok hogyan változnak az illesztendő paraméterek számának növelésével.
- Az illesztett modell egyes mérési adatokat nem tud jól leírni. Lehet-e kijelenteni, hogy ezek a mérési adatok nem konzisztensek a kapott optimalizált modellel? Hogyan lehet jellemezni mérési adatok konzisztenciáját egymással egy modell alapján?
- Vizualizációs eszközök kifejlesztése és használata az eredmények bemutatására. A sok adat és a sok illesztett paraméter miatt a kapott eredmények nehezen mutathatók be látványosan. Milyen számítástechnikai eszközökkel lehetne jól bemutatni az modellillesztés eredményeit?

A vállalkozó hallgató feladata a fenti témák **egyikének** kiválasztása és annak vizsgálata, hogy a feladat megoldásával hogyan javítható a modellek optimalizálása. A feladatok háttere kémiai, de a munkához semmilyen kémiai ismeretre nincs szükség. Szükséges viszont készség MATLAB vagy C++ programok áttekintésére és módosítására. Az irodalmi források angol nyelvűek.

Hivatkozások:

Turányi T, Zsély I. Gy., Nagy T, Varga T., Pálvölgyi R.

[Reakciósebességi paraméterek meghatározása közvetlen és közvetett mérések együttes felhasználásával](#)

Magyar Kémiai Folyóirat, **118**, 129-136(2012)

T. Turányi, T. Nagy, I. Gy. Zsély, M. Cserháti, T. Varga, B.T. Szabó, I. Sedyó, P. T. Kiss,

A. Zempléni, H. J. Curran

[Determination of rate parameters based on both direct and indirect measurements](#)

Int.J.Chem.Kinet., **44**, 284–302(2012)

T. Varga, T. Nagy, C. Olm, I.Gy. Zsély, R. Pálvölgyi, É. Valkó, G. Vincze, M. Cserháti, H.J. Curran, T. Turányi

Optimization of a hydrogen combustion mechanism using both direct and indirect measurements

Proc. Combust. Inst., megjelenés alatt (2015)