

## 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](http://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 tartalmazznak. 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 gyulladási időket és lángsebességeket mérnek, és a kémiai modell sok (20-50) paraméterét egyszerre illesztik a nagyszámú (pl. 5000) mérési adataira. Ebben az esetben az illesztett paraméterek bizonytalansága sokkal kisebb.

Létrehoztunk egy XML kódolású mérési adatgyűjteményt ([www.respecth.hu](http://www.respecth.hu)) és egy C++ nyelvű, Optima nevű programot, amivel már több égési folyamat modelljét optimalizáltuk a mérési adatok pontos leírására. A megoldandó feladat annak vizsgálata lesz, hogyan lehet a mostani eljárást tökéletesíteni.

A továbbfejlesztés néhány lehetséges iránya:

- A programunk most egy saját fejlesztésű globális optimalizálási algoritmust használ. Az Internetről számos más globális optimalizálási program is letölthető. Megvizsgálendő, 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.
- A mérési adatok egy részét nagyon hasonló körülmények között mérték. Milyen módszert alkalmazunk arra, hogy előnyben részesítsük azokat a mérési adatokat, amelyek több információt hordoznak a meghatározandó paraméterekre? Mi az adatok és a paraméterek kapcsolata: az egyes illesztett paraméterek elsősorban mely mérési adatokon alapulnak?
- Az illesztett modell egyes mérési adatokat nem tud jól leírni. Lehet-e kijelenteni, hogy ezek a mérési adatok nem konzisztensek a kapott optimalizált modellel?
- 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 C++ és esetleg MATLAB 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)

[http://garfield.chem.elte.hu/Turanyi/pdf/109\\_Turanyi\\_MagyarKemiaiFolyoirat\\_118\\_129-136\\_2012.pdf](http://garfield.chem.elte.hu/Turanyi/pdf/109_Turanyi_MagyarKemiaiFolyoirat_118_129-136_2012.pdf)

T. Turányi, T. Nagy, I. Gy. Zsély, M. Cserhádi, 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)

[http://garfield.chem.elte.hu/Turanyi/pdf/104\\_Turanyi\\_IntJChemKinet\\_44\\_284-302\\_2012.pdf](http://garfield.chem.elte.hu/Turanyi/pdf/104_Turanyi_IntJChemKinet_44_284-302_2012.pdf)

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

Development of a joint hydrogen and syngas combustion mechanism based on an optimization approach

*Int.J.Chem.Kinet.*, **48**, 407–422 (2016)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/kin.21006/full>

