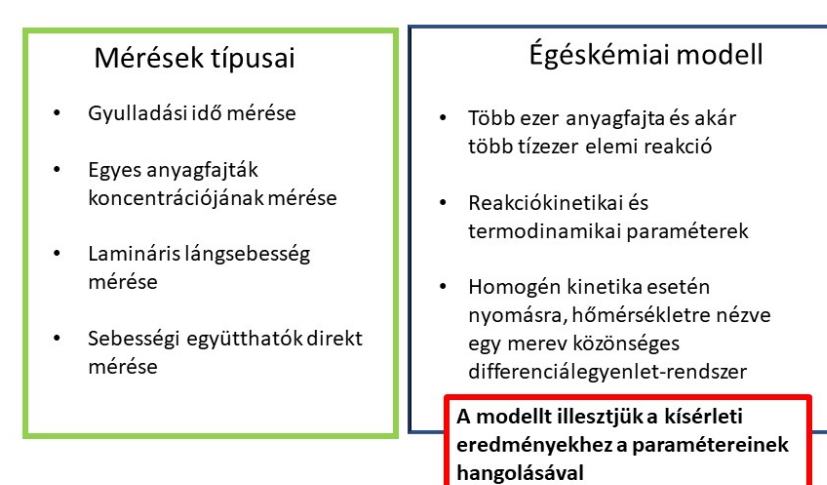


## Bevezetés



### 1. Kísérlettervezés

Az égés-kémiai folyamatok kémiai kinetikai területén a kísérlettervezés egy lehetséges célja a reakciómechanizmusok paraméterértékeinek pontos becslése a lehető legkevesebb kísérlet eredménye alapján.

### 2. Modellfejlesztés

A részletes reakciómechanizmusok fejlesztése optimalizáción alapulhat. Ez azt jelenti, hogy a modell fontos paramétereit kiválasztott kísérleti adatokhoz illesztik. Az optimalizált modell minősége a kísérleti adatok megfelelő kiválasztásától függ. A cél klaszterezési módszerek alkalmazása a mechanizmus optimalizálásán alapuló égés-kémiai modellek javítására irányuló mérések kiválasztására.

## Kísérlettervezés

A kísérlettervezés célja és szerepe

- ▶ Olyan mérési körülmények azonosítása, ahol az elvégzett kísérlet a legtöbb információt hordozza a becsülni kívánt paraméter(ek)re
- ▶ Modellek fejlesztése
- ▶ Célzott kísérletvégzés, költségcsökkentés

Differenciális entrópia számításán alapuló kísérlettervezés

Shannon-féle entrópia<sup>a</sup> (1948)

$$H = E(\ln P_X) = - \int P_X(\mathbf{x}) \ln P_X(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (1)$$

ahol  $E(\cdot)$  a várható érték operátora,  $P_X$  az  $X$  valószínűségi változó sűrűségfüggvénye. Az entrópia mátrix értelmezése

$$\mathbf{S}_{ij} = \frac{\partial H_j}{\partial H_i^{obs}}, \quad (2)$$

ahol  $H_j$  a  $j$ -edik modelleredmény entrópiája míg  $H_i^{obs}$  az  $i$ -edik mérés entrópiája.

<sup>a</sup>C. E. Shannon, Bell Systems Technical Journal 27 (1948), 379–423

## Az EDDI algoritmus

Alapja az egy mérésre vonatkoztatott nettó információs áram

$$\Phi_r = \sum_j (S_{rj}^2) - \sum_i (S_{ir}^2) \quad (3)$$

Experimental Design through Differential Information (EDDI) algoritmus

1. Adott kísérleti körülményeken mérési adatok – bizonytalansággal terheltek
2. Az égés-kémiai modell paramétereinek becslése a mérési eredmények alapján, a modell eredmények *a posteriori* bizonytalanságának meghatározása
3. Nettó információs áramok kiszámítása minden mérési eredményre
4. Van negatív információs áram?

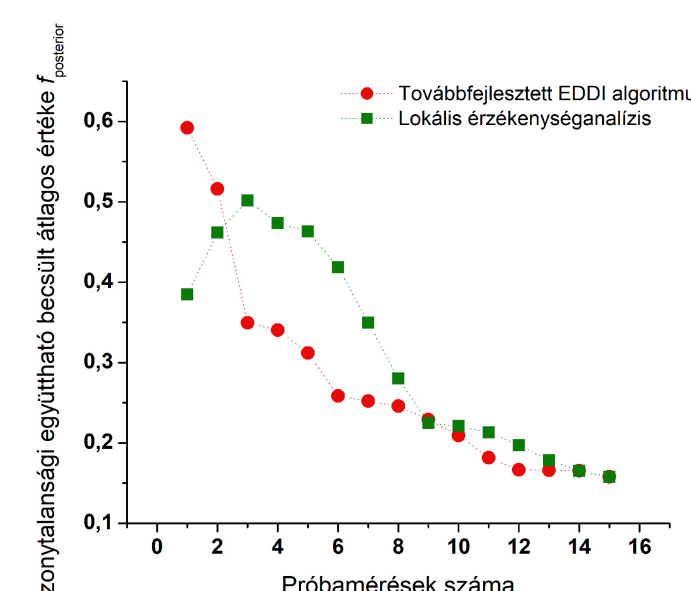
- ▶ Igen: dobod ki a legkisebb információ-tartalmú mérést, majd 2.
- ▶ Nincs: STOP, azonosítottuk a mérési adatok azon csoportját, melyek a legnagyobb hatással vannak a modelleredmények bizonytalanságának csökkentésére és a köztük lévő korreláció minimális.

Az algoritmus fejlesztése, adekvátabb hibaterjedési modell beépítése Turányi és mtsai. munkája alapján.

## Eredmények

A kísérlettervező algoritmus futtatása metanolégési mechanizmus vizsgálatára nitrogénmonoxid jelenlétében

- ▶ 88 fizikai körülmény közül 41 kiszűrése, ahol az elvégzett mérés nem szolgáltat információt a vizsgált modellparaméterre
- ▶ A maradék 47 pontban az illetett paraméter becsült *a posteriori* hibája monoton csökkenő
- ▶ A módszer összevetése a szakirodalomban gyakran használt lokális érzékenységgel



Hol végzünk mérést?	$f_{posterior}$
Lokális érzékenység analízis (15 mérés)	0,158
Differenciális entrópia számításán alapuló algoritmus (47 mérés)	0,141
Mindenütt (88 mérés)	0,141

## Kísérlettervezés

## Ipari alkalmazások és együttműködések

Szoftveripar: A kutatás célja korszerű kísérlettervezési algoritmusok fejlesztése, valamint az égés-kémiai területén alkalmazott modelloptimalizációs eljárások fejlesztése.  
Együttműködés: ELTE, Reakciókinetikai Laboratórium.

## Modellfejlesztés

- ▶ Metán égését leíró égés-kémiai modell vizsgálata
- ▶ A metán oxidációjának egy lehetséges mérése a gyulladási idő mérése: 4071 valós kísérleti adat, különböző hőmérsékleten, nyomáson, tüzelőanyag összetétel mellett, valamint közel 25000 szimulált mérési adat
- ▶ Minden kísérleti körülményen a lokális normalizált érzékenységi-vektorok kiszámítása, az érzékenységi vektorok alapján a kísérletek klaszterezése ((4071 + 25000) × 517 méretű mátrix).

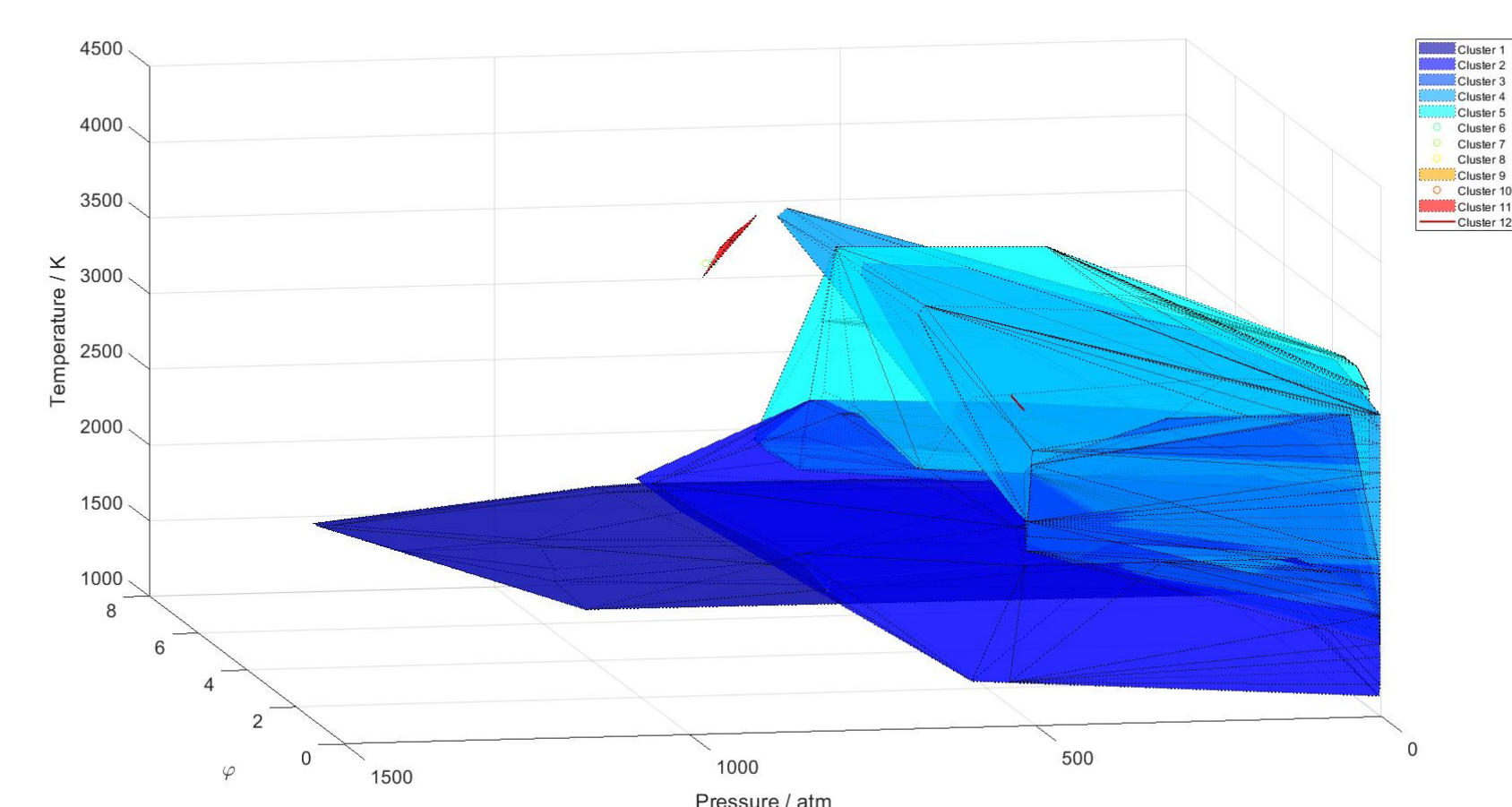
Az  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  függvény érzékenységi vektora az  $\mathbf{x}^*$  pontban

$$\left( \frac{x_1^*}{f(\mathbf{x}^*)} \cdot \frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}^*), \dots, \frac{x_n^*}{f(\mathbf{x}^*)} \cdot \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}^*) \right) \quad (4)$$

- ▶ Hierarchikus klaszterezés, a távolságot a vektorok által bezárt szög koszinuszának segítségével mérjük, a klaszterek között súlyozott távolságfüggvény.

## Eredmények

- ▶ A valós- és szimulált kísérletek méréstípusok szerinti klaszterezése
- ▶ Az egyes klaszterek hőmérséklet-, nyomás-, tüzelőanyag-levegő összetétel-től való függésének vizsgálata.



1. ábra. Levegő, mint hígítógáz esetén 5796 szimulált mérés csoportosítása az érzékenységi vektorok alapján.

## Publikációk

- [1] Éva Valkó and T. Turányi, *Mathematical Modelling in Real Life Problems Case Studies from ECMI-Modelling*. Springer, 2020, ch. Uncertainty quantification of chemical kinetic reaction rate coefficients, pp. 35–44.
- [2] Éva Valkó, M. Papp, T. Varga, I. G. Zsély, and T. Turányi, "Design of combustion experiments using differential entropy," *Combustion Theory and Modelling (submitted)*, 2020.