

# Numerikus algoritmus finomhangolása

TDK dolgozat

Készítette: Koncz Viktória  
mérnök-informatikus BSc hallgató

Témavezető: Dr. Pataricza András  
egyetemi tanár

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem  
Villamosmérnöki és Informatikai Kar  
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék

Budapest, 2015

# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>4</b>
1.1. Témaválasztás . . . . .	4
1.1.1. Előzmények . . . . .	5
1.1.2. A kutatás célkitűzése . . . . .	6
1.1.3. Az alkalmazott módszer . . . . .	7
1.2. A dolgozat felépítése . . . . .	9
<b>2. A benchmark</b>	<b>10</b>
2.1. A sav-bázis dióda . . . . .	11
2.2. A dióda matematikai modellje . . . . .	13
2.3. A probléma reprezentativitása . . . . .	14
<b>3. Végeselem-módszer</b>	<b>15</b>
3.1. A végeselem-módszer alapjai . . . . .	15
3.2. Számítási komplexitás . . . . .	17
3.3. Leképezés korszerű architektúrákra . . . . .	18
3.4. MESH szerepe a szimulációkban . . . . .	19
3.5. Adaptív hálógenerálás . . . . .	20
3.5.1. Az adaptív hálógenerálásról általában . . . . .	20
3.5.2. Alkalmazása a sav-bázis diódában . . . . .	22
<b>4. Vizsgálati módszertan</b>	<b>23</b>
4.1. Tervezett munkafolyamatok . . . . .	23
4.1.1. Sav-bázis dióda példája . . . . .	25
4.2. Általános vizsgálati környezet bemutatása . . . . .	26
4.2.1. Adatfájlok előállítása . . . . .	27
4.3. Leírók kiválasztása . . . . .	28
<b>5. A szimulációs eredmények feldolgozása</b>	<b>32</b>
5.1. MESH "kísérletek" . . . . .	33
5.1.1. Hálóelemek száma – szimulációs idő . . . . .	33
5.1.2. Szimulációs hiba számítása . . . . .	33
5.1.3. Szimulációs eredmények validálása . . . . .	35

5.2.	Statisztikai adatelemzés . . . . .	36
5.2.1.	Leírók szélsőértékeinek elemzése . . . . .	37
5.2.2.	Leírók lokálisan összefüggő értékeinek elemzése . . . . .	43
5.2.3.	Hibafájlok elemzése . . . . .	50
5.3.	Javaslatok az adaptív algoritmus gyorsítására . . . . .	54
<b>6.</b>	<b>Összefoglalás, további tervek</b>	<b>55</b>
6.1.	A dolgozat tartalmának rövid összefoglalása . . . . .	55
6.2.	További terveink . . . . .	56
<b>7.</b>	<b>Függelék</b>	<b>58</b>
7.1.	Kémiai kisokos . . . . .	58
7.2.	A szimulációkhoz felhasznált adatok . . . . .	59
7.3.	További ábrák, táblázatok . . . . .	60
7.3.1.	Leírók szélsőértékének elemzése . . . . .	60
7.3.2.	Leírók lokálisan összefüggő értékeinek elemzése . . . . .	60
	<b>Hivatkozások</b>	<b>60</b>

# Kivonat

Napjainkban a termékek és ipari eljárások tervezésében egyre fontosabb szerepet játszik a szimuláció, hiszen ezzel sok különböző verziót lehet kipróbálni anélkül, hogy az általában rendkívül költséges fizikai vizsgálatot mindegyikükre el kellene végezni.

Ugyanakkor bonyolultabb folyamatok vizsgálatánál a rendelkezésre álló számítástechnikai kapacitás korlátai behatárolják az alkalmazható modell részletességét, finomságát és valósághűségét is. A számítástechnikai kapacitás hatékony kihasználása így meghatározó tényezője a szimulációs kísérlet hasznosságának.

Dolgozatomban ezért egy olyan megközelítést vizsgálok, amely a vizsgálatok hatékonyságát úgy javítja, hogy a szimulált objektum aktuálisan fontos helyét finom felbontással, a kevésbé érdekeseket pedig csak durva felbontással modellezi, követve a szimulációs folyamat dinamikáját.

Az általános problémát egy kiemelten fontos kémiai analitikai módszer példáján vizsgáltam, amellyel a detektor által mért jelből (pl. áramerősség) egy minta minőségi és mennyiségi összetételére következtethetünk.

Az eddigi kutatási eredmények azt mutatják, hogy egy sav-bázis diódának nevezett kémiai rendszerből érzékeny és olcsó ionérzékelő (pl. víz- vagy vérmintában nátrium és kálium szint meghatározásra alkalmas) fejleszhető.

A szimulációs program a végeselem-módszer alkalmazásával oldja meg a diódát leíró parciális differenciálegyenlet-rendszert. Ez a közelítő módszer a geometriai objektumot, melyen a megoldást keressük, véges elemekre osztja. Ezt hálógenerálásnak nevezzük.

Mivel a dióda jól közelíthető egy egyszerű egydimenziós modellel, esetünkben ez az alaosztás szakaszokat jelent, és a jelentkező effektusok közelítésének finomságát az szabja meg, hogy egy adott hosszúságot hány részzakaszra bontunk. A differenciál-egyenlet rendszer megoldása az egyes szakaszokon polinomiális közelítéssel áll elő.

A modellezett sav-bázis diódára jellemző, hogy abban egy kémiai reakció halad végig. Ennek helye a kritikus zóna, ahol jóval nagyobb felbontást (több szakasz) kell alkalmazni, mint a dióda többi részén ahhoz, hogy a mérés szempontjából kritikus hatásról valósághű képet kapjunk. A tranziens szimulációk nehézségét épp az okozza, hogy ennek a zónának a helyzete az időben változik („mozog”), így mindig máshova kell a nagy felbontású zónát helyezni (adaptív hálógenerálás), hiszen az egész objektum finom felbontású modellezése irreális futási idejű bonyolultságot jelentene.

A sav-bázis diódák tranziens modellezése kapcsán az adaptív hálógenerálási algoritmusok gyorsítási lehetőségeit vizsgáltam.

Meghatároztam a szimulációkban használt háló finomságának hatását a szimulációs időre, valamint a megoldás numerikus hibájára, hiszen az első romlik, a második pedig javul a háló finomításával.

Kiválasztottam néhány lehetséges „monitorozó” függvényt (a differenciálegyenlet-rendszer változóinak térbeli deriváltjai, kémia reakciót jelző tag stb.), melyekből a szükséges hálósűrűség optimalizálható.

# 1. fejezet

## Bevezetés

### Köszönetnyilvánítás

Ezúton is szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Dr. Pataricza András egyetemi tanárnak útmutató tanácsaiért és kritikáiért egész kutatómunkám során.

### 1.1. Témaválasztás

A BME Vegyész- és Biomérnöki Karán szereztem BSc (2010) és MSc (2013) diplomámat analitikai- és szerkezetvizsgálati szakirányon. Még vegyész szakos hallgatóként kezdtem az informatika iránt érdeklődni, amikor TDK hallgatóként csatlakoztam a BME Fizika Tanszék Kémiai Fizika Csoportjához, ahol számítógépes modellezéssel kezdtem el foglalkozni.

Jelenleg ugyanitt vagyok doktoráns hallgató, témám sav-bázis diódák modellezése és kísérleti vizsgálata. Az eddigi kutatások alapján a diódából gyors és érzékeny iondetektort lehet kifejleszteni, amely kémiai mérések széles spektrumán fog mérőérzékelőként szolgálni.

Távlatilag egy ilyen érzékelővel szemben számos metrológiai elvárás van:

- Kiemelt fontosságú az érzékenység, ahhoz, hogy kis ionkoncentrációk esetén is használható legyen.
- Hasonlóan fontos a pontosság és reprodukálhatóság, annak érdekében, hogy mérés technikailag megfelelő alapot képezzen a vizsgálatokhoz.
- A kémiai analitikában alapvető kérdés a szelektivitás, azaz a detektor

milyen mértékben és milyen anyagokra reagál.

- A távlati technológizálás során a detektor kialakítása mellett számos kérdés vetődik fel, annak anyagösszetételével, tisztaságával és gyártástechnológiájával kapcsolatban.
- Hasonlóan lényeges kérdés a detektor dinamikája, hiszen ez képezi a pontos mérés, és rendszerbe integrálhatóság egyik megalapozó karakterisztikáját.

Ma az analitikai kémia eszköztárának fejlesztése is fokozottan épít a számítógépes modellezésre és szimulációra, hiszen az elvégzendő nagyszámú vizsgálat közvetlen kísérleti kivitelezése rendkívül idő-, anyag- és eszközigenyes, amelyet hatékonyan csökkenthet egy számítógépes modellel végzett kísérlet-sorozat feltéve, hogy rendelkezésre áll az eszköznek egy kellően valóságghű modellje. Természetesen legfontosabb eredmények tekintetében továbbra is elengedhetetlen az analitikai kémiai kísérleti validáció.

### 1.1.1. Előzmények

Még a BME Vegyészmérnöki Karán végzett tanulmányaim során kezdtem foglalkozni sav-bázis diódákkal. MSc diplomatervemben előkísérleteket végeztem a sav-bázis dióda tranziens modellezésével. Egy alapvetően általános célú kereskedelmi algoritmus köré egy olyan dedikált környezetet alakítottam ki, amely alkalmas volt a sav-bázis dióda működésének megértését támogató szimulációs vizsgálatokra [23].

Ezek a vizsgálatok ugyanakkor megmutatták, hogy egy kellően valóságghű tranziens vizsgálat erőforrásigénye hatalmas, még akkor is, ha csak egyetlen egy vizsgálatot kell elvégezni.

- A stacionárius szimulációkkal ellentétben egy-egy modellszámítás erőforrásigénye jóval nagyobb, mivel ebben az esetben sokkal nagyobb felbontást kell alkalmazni a modellezett rendszerben, pontosabban egy részében, mint stacionárius szimuláció esetén.
- A diódában található egy kritikus zóna (itt kémiai reakció zajlik, az egyes változók gradiensei itt a legnagyobbak), ahol kiemelten sűrű háló szükséges a megfelelő konvergenciához. A modellezés nehézségét épp az okozza, hogy ennek a kritikus zónának a helyzete az időben változik.
- Ekkor jó megoldás, ha a kritikus zónában (esetleg zónákban) jóval nagyobb felbontást alkalmazunk, mint a rendszer többi részén, a felbontást pedig az időben teljesen automatizálva változtatjuk (adaptív hálógenerálási technikák).

MSc diplomamunkám során kénytelen voltam, leginkább empirikus úton, egy ilyen adaptív algoritmust készíteni ("béta verzió"), mert különben a szimulációim, melynek eredményeiből fizikai-kémiai, analitikai kémiai következtéseket vontam le, csak nagyon lassan futottak volna le (már ha az akkori rendelkezésre álló számítási kapacitás mellett egyáltalán lefutott volna). Ebben az algoritmusban azonban számos gyorsítási lehetőség rejlik, amellyel mint vegyész, egyáltalán nem foglalkoztam, mert a közvetlen célkitűzésen messze túlnyúlt.

Éppen a számítógépes módszerek használatával mértem fel azt, hogy a hatékony kutatómunkához elengedhetetlenül szükséges a mélyebb számítástudományi és informatikai műveltség, hiszen az általam választott speciális kémiai probléma vizsgálata során rendre beleütköztem a jó hírű kereskedelmi eszköz korlátaiba.

Ezért a vegyészmérnöki MSc képzéssel párhuzamosan megkezdtem a mérnök-informatikus BSc képzést is.

Az elméleti és technológiai megalapozottsággal kapcsolatban és a analitikai kémia területen végzett kutatásaim előrehaladtával, hogy a hatékony szimulációhoz elméleti mélységű vizsgálatokra is szükség van. a számítástudományi és informatikai célú, az analitikai kémiai kutatásaim által inspirált, de annál szélesebb fókuszú metodikai kutatásomat a BME VIK Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszékén TDK munka formájában mélyítettem el.

### 1.1.2. A kutatás célkitűzése

A metrológiai célú vizsgálat ugyanakkor sokkal pontosabb és ennek megfelelően nagy felbontású, sok aspektusból elvégzendő vizsgálatssorozatot igényel, amelyre a korábbi módszereim már alkalmatlanok.

A mai, megnövelt számítási kapacitás (pl. felhő számítástechnika) mellett elvileg lehetségesnek tűnik, hogy a brutális erő elvét használva az egész rendszerben a szükséges nagy felbontást alkalmazzuk, hiszen kellő számítástechnikai teljesítmény mellett a számítások akkor is véges időn belül lefutnának.

- Bár a szimulációs rendszer magjának futási bonyolultsága elméletileg lineáris függvénye a modell finomságának, de az gyakorlatilag szuperlineáris az alkalmazott felbontás függvényében, ami többször tíz - száz elemű vizsgálatssorozat esetében három- négy nagyságrendnyi számítástechnikai többletkapacitást igényelne.
- Mindemellett egy adott felbontásnál durvábbat alkalmazva az iterációkon alapuló számítási algoritmus kieshet a konvergenciatartományból, így egyszerűen nem is szolgáltat eredményt.



Az előzetes vizsgálatok szerint a vizsgálandó effektus az eszköz egy kis, de helyét dinamikusan változtató részére koncentrálódik.

A diplomatervemben ösztönösen alkalmazott adaptív hálógenerálási technikában ugyanakkor benne rejlik az a lehetőség is, hogy a szimuláció folyamatát és eredményeit nyomon követve, a finom felbontást és így a nagy számítástechnikai kapacitást a modell aktuálisan "izgalmas" részére koncentráljuk, a többit pedig csak a feltétlenül szükséges felbontással vizsgáljuk, így korlátos számítási kapacitással a terminálást biztosító és a finom felbontású modellekkel egybevethető pontosságú szimulációs eredményeket kapjunk.

Ennek a technikának az alkalmazása azonban jelentős elméleti megalapozást is igényel. A jelenség bonyolultsága miatt ez szükségképpen azt jelenti, hogy egy kis mintakísérleten végzett szimuláció folyamatát és eredményeit részletesen naplózva, majd azokat kiértékelve dolgozzuk ki a későbbi futtatások számára a modellhangolási stratégiát.

Jelen informatikai TDK munkámban szigorúan csak ennek lehetőségeit vizsgálom meg.

- A mintakísérletek tapasztalatai alapján igyekszem azon változók, faktorok halmazát csökkenteni, mely ezen algoritmus tervezésekor szóba jöhetnek.
- Az adaptív hálógenerálási stratégiának a leglényegesebb modellparaméterekre való korlátozása ugyanis azt ígéri, hogy az adaptív technika alkalmazása előnyeinek megmaradása mellett a viszonylag nagy darabszámú módosított modelleken végzett vizsgálatoknál is hatékony lesz a számítás, hiszen a kulcsváltozók az összes szimulációs kísérletben közös alapvető kémiai folyamat lényegéhez kötődnek.

A csak lokálisan finom felbontású modellvizsgálat alkalmazásának dacára történő kellő pontosság eléréséhez többféle paraméterezéssel számos szimulációt futtattam még. Kezdetben az általam korábban készített adaptív hálógenerálási algoritmussal. Azonban ebben az esetben sokkal inkább a szimuláció hibájára, konvergenciára voltam kíváncsi, mint a kémiai-fizikai folyamat lefutására.

### **1.1.3. Az alkalmazott módszer**

A numerikus algoritmus hangolásánál alapvető nehézséget jelent, hogy az alkalmazott kereskedelmi forrású végeelem probléma megoldójának belső működése nemigen dokumentált, sem a belső algoritmusok, sem az alkalmazott gyorsítóheurisztikák szempontjából.

Ez számomra a számítási folyamat gyorsításának szempontjából azt jelentette, hogy a megoldót alig szürke, inkább fekete dobozként kellett kezelnem, és a hangoláshoz csak az általam külön beépített és csak részleges megfigyelhetőséget biztosító naplót használhattam.

Az így gyűjtött (ill. korábbi szimulációs eredményekből kinyert) adatokat ezért statisztikai módszerekkel kellett elemezni, és ennek eredményei alapján teszek javaslatot az adaptív háló kialakítására.

A fenti naplók elemzése is önmagában speciális technikákat igényelt. A hangolás során elvben szóba jöhető paraméterek száma elvben néhány 10, amely intuitív alapon 10-re szűkíthető, összhangban az irodalomban hasonló problémák megoldásával. Ennyi paraméterrel azonban nem lehet olyan hálóhangolási stratégiát készíteni, ami kellően robusztus lenne a sokféle módosított modellre is.

A vizsgált naplófájlok ugyanakkor rendkívül terjedelmesek ill. a kereskedelmi megoldó zártága miatt nem tudható-e előre pontosan, hogy mely adatokra lesz szükség, sőt a számítási folyamat nem is teljesen megfigyelhető, így az elemzés a nagy adatprobléma (Big Data) határáig jutott el.

Az adatok elemzése során ezért három megközelítést is vizsgáltam, hatékonyság és alaposság szempontjából:

- Vizuális feltáró adatanalízist (Visual Exploration Data Analysis) alkalmaztam a számítási folyamat alapvető megértésére ill. az elsődleges összefüggések megtalálására.
- Számítógéppel segített részletes statisztikai analízist (Statistical Confirmatory Data Analysis) alkalmaztam az első lépésben talált részben sejtésszerű induló statisztikai modell ellenőrzésére és finomítására.
- Végezetül a kapott eredményeket egybevetetten a nagy adatanalízis legújabb trendjét tükröző "Algorithm as a Service" jellegű automatizált statisztikai modellgeneráló szoftver (IBM Watson Analytics) eredményeivel.

A dolgozat alapvetően a számítási folyamatot és a fokozatosan kialakuló megoldást az informatika területén is szokásos mérésadat feldolgozási módszerekkel vizsgálja, és a hangolási feladat során elsődlegesen az algoritmikus szintre koncentrálok. A megfontolások során igyekeztem olyan módszereket és informatikai eszközöket alkalmazni, amelyek a korlátos kiterjedésű hatásokat FEM-mel vizsgáló szélesebb problémakörre is alkalmazhatóak.

A MSc diplomamunkámban korábban elért ill. további doktoráns kutatómunkámból származó (alapvetően fizikai-kémiai fókuszú) eredményeket (melyekből a publikációk még csak az előkészítésnél tartanak), mint irodalomból

származó adatokat kezelem. A jelen TDK ezeket csak az informatikai területen végzett kutatásaimhoz inspiráló, és egyúttal a gyakorlati alkalmazhatóság ellenőrzésére szolgáló példaként használja.

## 1.2. A dolgozat felépítése

Dolgozatomban leelőször (2. fejezet) nagyon röviden bemutatom a sav-bázis diódák legfontosabb fizikai, kémiai tulajdonságait, melyek pl. a félvezető diódákhoz hasonló karakterisztikával rendelkeznek (innen származik az elnevezés). Ebben egy-két kémiai fogalom is elkerülhetetlenül előkerül, melyek definíciója a Függelékben található Kémiai kisokosban megtalálható (7.1. fejezet). Ehhez szorosan kapcsolódva a dióda matematikai modelljét ismertetem, mely lényegében egy egydimenziós parciális differenciálegyenlet-rendszernek tekinthető.

A dióda modellezése során ezen differenciálegyenlet-rendszert, melynek analitikus megoldása nem lehetséges, numerikus, közelítő megoldását keresi a szoftver. Ehhez a szimulációs program a végeselem-módszert (finite element method, FEM) alkalmazza, melynek alapfogalatait ill. számítási komplexitását, valamint a háló szerepét a szimulációkban a 3. fejezetben (kitérve a dióda FEM modellezésére) ismertetem. Ezután röviden bemutatom az irodalomban ismert adaptív hálógenerálási technikákat, megfontolásokat.

A következőkben a vizsgálati módszertant általánosságában mutatom be (4. fejezet), ahol a vizsgálati környezetet is részletesen ismertetem. Ez nem más, mint a szimulációk hatékony végrehajtását támogató szoftverkörnyezet.

Végül a Szimulációs eredmények feldolgozása c. fejezetben (5. fejezet) különböző adaptív hálókkal való szimulációk eredményeit hasonlítom össze, majd az adaptív algoritmus hangolásához szóba jöhető paraméterek és változók hatását, valamint alkalmazhatóságát elemzem.

A dolgozat legvégén egy rövid összefoglaló található a TDK munka legfontosabb eredményeiről, nyitott problémáiról és a megközelítés továbbfejlesztési lehetőségeiről.

## 2. fejezet

# A benchmark

A sav-bázis dióda<sup>1</sup> egy reakció – diffúzió – ionos migráció rendszer, ahol az alkalmazott koncentráció- és elektromos potenciál gradiensek hatására az ionok mozognak, miközben egy egyszerű kinetikájú sav-bázis reakció zajlik. A rendszer egyes komponenseinek egyszerűsége dacára a kétféle, ionmozgásos ill. kémiai reakció kölcsönhatása egy meglehetősen bonyolult rendszert eredményez.

Hasonlóan az egyszerű félvezető diódának a modelljében a zárási tartomány sokszor egy kikapcsolt kapcsolóval jellemzik ill. az áramszivárgási jelenségek jól modellezhetők. A dióda karakterisztikájának részletes modelljére akkor van szükség, ha a feszültségfüggő nyitási folyamat részletei is relevánsak egy folyamatban.

A sav-bázis diódák esetében azonban a kémia alkalmazások szempontjából leginkább a záróirányú tartomány izgalmas. A stacionárius állapot számító-gépes modellezése során egészen véletlenül fedezték fel azokat a sószennyezéssel kapcsolatos jelenségeket, amikor egy szimuláció rossz paraméterekkel indult el. A jelenség teljesen ellentmondott a józan ész általi megfontolásoknak és várakozásnak (ilyen esetet nem is kutattak, mert triviálisnak tartották).

Azonban sem a modellben, sem a numerikus eredményekben nem igazán találtak semmilyen hibát, ezért a jelenséget kísérletekkel is tüzetesen megvizsgálták, ami teljesen igaznak bizonyult. Ez a sószennyezéssel kapcsolatos jelenség lehet egy gyors és érzékeny iondetektor alapja.

A fenti történet is jól mutatja a gyors és hatékony számítógépes modellezés

---

<sup>1</sup>A diódáról megjelent össze publikációt a Hivatkozások között szerepeltetem, a szövegkörnyezetben ugyanakkor csak a legfontosabbakat jelölöm. Ezen dolgozatnak nem célja az elektrolit diódák irodalmának részletes ismertetése, ezen munka viszont mégis nagymértékben támaszkodik rá.

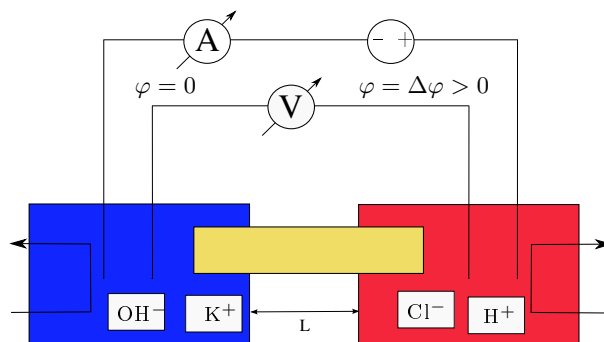
fontosságát. Azon túl, hogy számítógépes szimulációkkal nagyon sok pénz- és időigényes kísérletet kiválthatunk, gyökeresen új jelenségeket is felfedezhetünk, amit kísérletileg eszünkbe sem jutott volna megvizsgálni. Ezenkívül, ha szimulációs eredmények alapján már ipari terméket tudunk tervezni, az nagyon jó visszaigazolása a modell helyességének.

## 2.1. A sav-bázis dióda

A sav-bázis diódában (2.1. ábra) egy lúgos (KOH) és egy savas (HCl) oldatret egy gél vagy egy membrán (összekötőelem) tagol, amely megakadályozza a folyadékok összekeveredését, de megengedi az egyes oldatbeli komponensek diffúzióját és reakcióját.

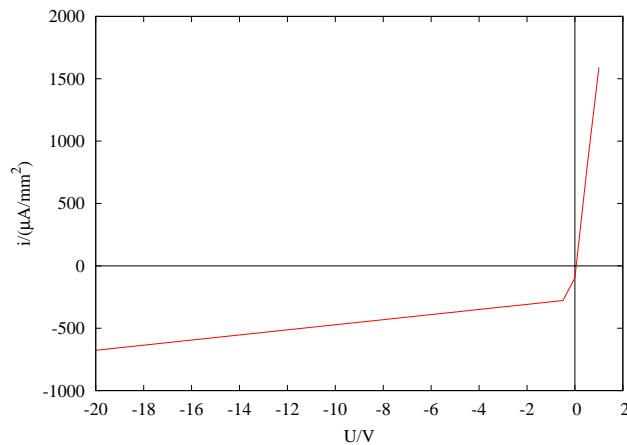
Az oldatterekbe munkaelektrodok merülnek, melyekkel potenciálkülönbséget hozhatunk létre a két oldattér között. Ha a savas oldattérnek nagyobb a potenciálja, mint a lúgosnak, ebben az esetben az elektromos erőtér hatására a gélbe  $H^+$  és  $OH^-$  ionok kerülnek, melyek ott rekombinálnának vízzé.

A rendszeren mérhető áramerősség a feszültségtől és az oldatterekben lévő ionok koncentrációjától függ. A félvezető diódákhoz hasonlóan, jelen esetben is függ a mért áram nagysága függ attól, hogy a feszültséget milyen polaritással kapcsoljuk a rendszerre – innen az elektrolit dióda elnevezés. Ennek mintájára megkülönböztethetünk nyitó- és záróirányt a sav-bázis diódában (2.2. ábra).



2.1. ábra. Erős sav – erős bázis dióda (KOH – HCl) elvi vázlata.

Ha a sav-bázis dióda valamelyik oldattereibe sószennyezést adagolunk (erős sav – erős bázis dióda esetében KCl sót), akkor a szennyező só koncentrációja befolyásolja a záróirányba kapcsolt diódán átfolyó áramerősséget.



2.2. ábra. A sav-bázis dióda karakterisztikája. A nyitóirányt a pozitív, a záróirányt a negatív feszültségértékek jelentik.

- Ha a sószennyezést a diódának csak az egyik oldatterébe juttatjuk, akkor az áram a sókoncentráció függvényében nő (pozitív sóhatás) [4].
- Azonban például ha a dióda mindkét oldatterébe sószennyezést juttatunk, akkor elérhető, hogy az áram a „növekvő” vezető sókoncentráció ellenére először csökkenni kezd (negatív sóhatás). A dióda mindkét oldatterének szennyezésével elérhető, hogy a diódán átfolyó áram erőssége kis sókoncentrációk esetén változzon a legmeredekebben [5].

A dióda sószennyezés hatására bekövetkező viselkedésváltozását átütésnek ill. visszazárásnak nevezzük.

A pozitív és negatív sóhatás erősen nemlineáris jelenségét stacionárius állapotra már sikerült számítógépes szimulációkkal részletesen modellezni, valamint kísérletileg is alaposan megvizsgálni. Ezek alapján felmerült, hogy a sav-bázis diódából a negatív sóhatás elvén működő gyors és érzékeny iondetektort lehetne kifejleszteni. Ebben az esetben a mért jel a diódán átfolyó áramerősség volna, amelyből a diódába jutó sókoncentrációra (esetleg sómennyiségre) lehetne következtetni.

A sav-bázis dióda érzékelőként való felhasználásához előfeltétel az, hogy mind a villamos, mind pedig a kémiai szennyezettségre vonatkozó jelenség transferkarakterisztikáját, és az eszköz dinamikáját részletesen és lehetőleg pontosan ismerjük. Ez mindenképpen célszerűvé teszi a számítógépes szimulációt, hiszen a bemenő hatások jól modellezhetőek, és így a fizikai vizsgálatokat megelőzően jó összkép nyerhető.

## 2.2. A dióda matematikai modellje

A gélben sav-bázis reakció, diffúzió és az elektromos erőtér hatására bekövetkező ionmigráció egy időben zajlik, ezért a matematikai modell egyenletei az egyes komponensekre ( $H^+$ ,  $OH^-$ ,  $K^+$ ,  $Cl^-$ ) felírható mérlegegyenletek és az elektromos potenciálra ( $U$ ) felírható Poisson-egyenlet. A dióda matematikai modellje lényegében egy dimenziósnak tekinthető. A mérlegegyenlet egydimenziós alakja a következő:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(J_i) + \sigma_i. \quad (2.1)$$

A mérlegegyenletben az adott komponens áramsűrűségét a Nernst-Planck-egyenletből számíthatjuk, amely szerint az áramsűrűség egy diffúziós és egy migrációs tagból áll:

$$J_i = J_i^{\text{diff}} + J_i^{\text{migr}} = -D_i \frac{\partial c_i}{\partial x} - D_i c_i z_i \frac{\partial \Phi}{\partial x} \frac{F}{RT}, \quad (2.2)$$

ahol  $J_i^{\text{diff}}$  az  $i$ -edik komponens diffúziós,  $J_i^{\text{migr}}$  a migrációs áramsűrűsége,  $D_i$  a diffúziós állandója,  $z_i$  a töltésszáma,  $\Phi$  az elektromos potenciál,  $x$  a helykoordináta a diódába,  $F$  a Faraday-állandó,  $R$  az egyetemes gázállandó,  $T$  pedig az abszolút hőmérséklet.

A potenciált a Poisson-egyenlet alapján számolhatjuk:

$$\frac{\partial}{\partial x}(-\varepsilon \frac{\partial \Phi}{\partial x}) = F(c_{H^+} - c_{OH^-} + c_{K^+} - c_{Cl^-} - c_{FA^-}). \quad (2.3)$$

Itt  $c_{FA^-}$  a fixált anionok koncentrációja,  $\varepsilon$  pedig a közeg permittivitása (dielektromos állandója).

A sav-bázis dióda összekötő eleme még tartalmazhat ún. fixált töltéseket [7] is (gél vagy membrán gyengén savas karakterisztikájú fixált csoportok vannak, melyek disszociációja fixált anionokat eredményez). Ezért a dióda matematikai modelljében is számolunk ezek jelenlétével.

A modellezett diódában (összekötőelemre oldjuk meg a differenciálegyenlet-rendszert) alapvetően a határfeltételeket, pl. az oldatterekben a koncentrációk, diódára kapcsolt feszültség, változtatjuk, ezzel módosítjuk a szimulációs beállításokat.

A dióda modelljében Dirichlet-típusú határfeltételeket alkalmazunk (függvényérték a határokon). A pontos koncentráció és potenciálértékeket egy algebrai egyenletrendszerből kaphatjuk meg (Donnan-egyensúllyal vagy más néven membránegyensúllyal is számolni kell).

### 2.3. A probléma reprezentativitása

A alap- és az alkalmazott kutatásban, mérnöki gyakorlatban nagyon sok olyan problémával találkozhatunk, mely numerikus analízisben igen hasonló a sav-bázis diódák fent bemutatott modellezéséhez. Ezt a megközelítési elvet egyenletalapú modellezésnek nevezzük, melynek során az adott problémát leíró parciális differenciálegyenlet-rendszer megoldását keressük. ("A természet a differenciálegyenletek nyelvén beszél.") Nagyon könnyen előfordulhat, hogy gyökeresen eltérő tudományterületek problémáit igen hasonló differenciálegyenletek írják le. A sikeresen alkalmazható numerikus módszerek sokkal inkább a differenciálegyenletekhez köthetők, mint a probléma típusához.

Ezek alapján a sav-bázis dióda modellje jó példa a következőkre:

- egy csatolt parabolikus (Nernst-Planck-egyenletek) – elliptikus (Poisson-egyenlet) differenciálegyenlet-rendszer
- erősen nemlineáris tagokat tartalmaz
- időbeli dinamika, mely extrém nagy mozgó gradiensekhez vezet

Ezen kiválasztott modell során nyert tapasztalatok további problémák sikeres numerikus analízisét is elősegíthetik:

- áramlástan, konvekciós modellek
- vegyipari reaktorok, eszközök tervezése
- hővezetési, hőtranszport problémák
- szilárdságtani modellezés



## 3. fejezet

# Végeselem-módszer

A FEM hatékony módszer parciális differenciálegyenlet-rendszerek közelítő megoldására. A FEM nagyon sok algoritmust foglal magába, ezek gyakran alkalmazásonként, tudományterületenként picit különböznek egymástól, mert a FEM algoritmuscsalád keretén belül egy-egy adott problématípus esetében a megoldás jellegéről rendelkezésre álló a priori tudás hatékony konvergenciát segítő, valamint gyorsító heurisztikákat tartalmazhat.

Ezek ismertetése messze meghaladja a dolgozat kereteit, épp ezért csak a módszer alapgondolatát, illetve számítási komplexitását mutatom be röviden. Meggyőződésem ugyanakkor, hogy a például választott sav-bázis dióda modellezésénél követett gondolatmenet és lépések lényegesen általánosabbak ennél az egyetlen példánál.

### 3.1. A végeselem-módszer alapjai

A szimulációs program [32] a FEM alkalmazásával számítja ki a diódát leíró parciális differenciálegyenlet-rendszer megoldását az általunk megadott peremfeltételekkel és az egyéb – a számoláshoz szükséges – állandókkal. A fejezet csak egy rövid bevezető a FEM modellezésbe [25, 26, 27], a dióda sem stacionárius, sem tranziens modellezéséhez szükséges algoritmusokat nem ismertetem részletesen.

A módszer lényege, hogy az egydimenziós<sup>1</sup> objektumot (dióda esetében gél) véges számú elemre ( $|E|$  darabra) osztjuk (diszkrétizáljuk a gél). Ezt nevezük hálógenerálásnak (MESH generálás). Az így kapott elemek mindegyikén a FEM a differenciálegyenlet-rendszer megoldására külön-külön közelítő

---

<sup>1</sup>Természetesen a módszer térben többdimenziós problémák megoldására is alkalmas.

függvényeket keres olyan módon, hogy ezek az elemek határán folytonosan csatlakozzanak egymáshoz.

Az így kapott kis részek (elemeken) a közelítő függvényeket ún. bázisfüggvények lineáris kombinációjaként keressük:

$$\tilde{y}^{(e)}(x) = \sum_{j=1}^n a_j \cdot \Phi_j^{(e)}(x), \quad (3.1)$$

ahol  $\tilde{y}^{(e)}(x)$  az  $e$  elemen egy közelítő megoldást,  $\Phi_j^{(e)}$  a lehetséges bázisfüggvényeket,  $a_j$  pedig ezen függvények együtthatóit jelöli. (Az  $a_j$  együtthatókból álló vektort a későbbiekben  $\mathbf{a}$ -val jelölöm.)

Ezen bázisfüggvények lineárisan független polinomok (Lagrange-féle interpolációs alappolinomok). Az általunk készített szimulációs program másodfokú polinomokat alkalmaz bázisfüggvényeknek (ebben az esetben  $n = 3$ ). A megoldás során arra törekszünk, hogy ez az  $\tilde{y}^{(e)}(x)$  közelítőfüggvény az adott szakaszon minél jobban abszolút hiba értelemben megközelítse a differenciálegyenlet képletmegoldását ( $y^{(e)}(x)$ ). Ezt adott  $e$  elemre az alábbiak szerint írhatjuk le:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} |\tilde{y}^{(e)}(x) - y^{(e)}(x)| dx = R^{(e)}(x, \mathbf{a}) = \min, \quad (3.2)$$

ahol  $R^{(e)}(x, \mathbf{a})$  a megoldás hibáját jelenti az adott  $e$  elemen. A (3.2) egyenlet alapján sem  $R^{(e)}(x, \mathbf{a})$ -t, sem  $\mathbf{a}$ -t nem lehet meghatározni (ehhez az  $y^{(e)}(x)$  megoldást kéne ismerni), ez csak definícióul szolgál.

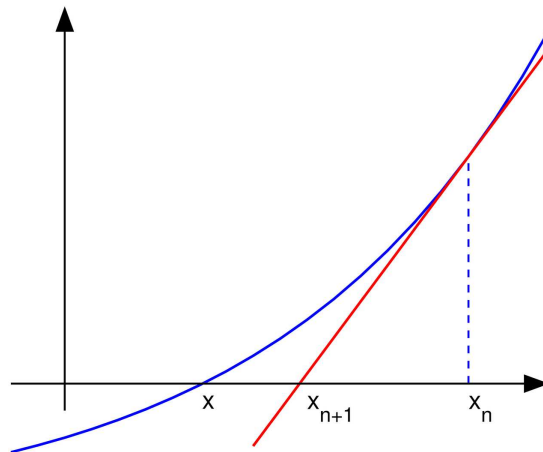
A gyakorlatban a megoldás hibáját valamilyen más módon becsüljük, például a közelítőfüggvény differenciálegyenletbe helyettesítésével. Bizonyítható, hogy a legjobb közelítő megoldás (az adott szakaszon) ebben az altérben az, amelynek hibája ortogonális a módszer bázisaira ( $\Phi_j^{(e)}$ -kre):

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} R^{(e)}(x, \mathbf{a}) \cdot \Phi_j^{(e)} = 0. \quad (3.3)$$

(A skalárszorzat fogalmának a függvények terében a szorzatintegrál felel meg.) A (3.3) egyenlet minden  $\Phi_j^{(e)}$  bázisfüggvényre külön-külön is igaz az adott elemen, tehát a fenti integrál  $n$  darab egyenletet határoz meg az  $n$  darab ismeretlen bázisfüggvény-együtthatóra nézve, tehát végeredményben egy algebrai egyenletrendszer kell megoldanunk a bázis függvények a súlyozóvektorának meghatározásához. Ez az algebrai egyenletrendszer azonban csak akkor lineáris, ha már az eredeti differenciálegyenlet is lineáris volt.

A sav-bázis diódát leíró matematikai modell nemlineáris (2.2. fejezet), így a közelítés egy nehezebben kezelhető nemlineáris egyenletrendszer megoldását igényli.

Ennek megoldása az ún. Newton-módszer alkalmazásával (vagy ehhez lényegében hasonló numerikus módszerrel) történik. A módszer abból indul ki, hogy egy nemlineáris egyenletrendszer megoldása, valamint egy függvény gyökhelyeinek megtalálása egymással numerikusan ekvivalens feladat. Ez egy iterációs módszer, mely egy függvény gyökeit egy adott pontból az ott számított derivált értékével közelíti (3.1. ábra).



3.1. ábra. A Newton-módszer alap gondolata

Ha minden  $e$  elemre meghatározzuk az adott peremfeltételek mellett az  $\mathbf{a}$  vektor értékeit, ebből visszahelyettesítve a (3.1) egyenletbe, megkapjuk egy közelítő megoldását az adott problémának. A probléma megoldásánál figyelembe kell vennünk azt is, hogy a szomszédos szakaszokon kiszámított megoldásfüggvények folytonosan csatlakoznak egymáshoz (belső peremfeltételek).

## 3.2. Számítási komplexitás

A FEM szimuláció számítási komplexitásának becslése kritikus nagy méretű (pl. finom felbontású) modellek esetén. A FEM-nem sokféle implementációja van, de alapvetően mindegyik a következő lépésekből áll [21]:

1. adatok előkészítése,
2. térbeli diszkretizálás (mátrixegyenletek előállítása a határfeltételek figyelembevételével),
3. valamint az eleve lineáris vagy linearizált egyenletrendszer megoldása.

Az algoritmus komplexitásának felderítésekor az általában csak egyszer végrehajtandó első lépést elhanyagolják, mivel túl sok mindentől függhet, túlzottan problémaspecifikus. A második lépés elvégzéséhez  $\mathcal{O}|E|$  műveletre van

szükség, ahol  $E$  a MESH elemek számát jelöli, hiszen az egy elemhez való lokális egyenletrendszer (ebből épül fel a globális) előállításához véges számú műveletre van szükség (alappolinomok számától függ). Ezen felül a globális együtthatómátrixban néhány értéket a külső és belső határfeltételek alapján módosítani kell. Legrosszabb esetben ennek komplexitása:

$$\mathcal{O}(|N||W|), \quad (3.4)$$

ahol  $|N|$  a csomópontok számát,  $|W|$  pedig az együtthatómátrix sávszélességét<sup>2</sup> jelenti.

A legutolsó lépésben a lineáris (linearizált) egyenletrendszert kell megoldani. Erre számos módszer, algoritmus áll rendelkezésre. A Gauss-eliminációt alkalmazva (pontos megoldást állít elő) az együtthatómátrixot először felső háromszög mátrixszá kell alakítani (LU faktorizáció):

$$\mathcal{O}(|N||W|^2), \quad (3.5)$$

majd ez alapján kell a megoldást előállítani:

$$\mathcal{O}(|N||W|). \quad (3.6)$$

A Gauss-elimináción kívül nagyon sok, lineáris egyenletrendszer megoldására szolgáló numerikus algoritmus létezik. Ezek közül jó néhány ki tudja használni (így a megoldást gyorsítani), ha az együtthatómátrix nagyon sok nulla elemet tartalmaz (ritka mátrix). A FEM szimulációs szoftverek nagy részének lineáris megoldói is ilyenek (mivel a FEM modell is ritka mátrixokhoz vezet).

Egy dimenziós matematikai modell esetén a MESH csomópontok száma ( $|N|$ ) kb. megegyezik a MESH elemek számával ( $|E|$ ), valamint  $|W|$  értéke konstansnak tekinthető. Így ebben az esetben az egész algoritmus műveletigénye kb.  $\mathcal{O}(|N|)$ -nek tekinthető. A gyakorlatnak jól megfelel, ha igyekszünk olyan kevés MESH elemet választani, mellyel még a szimuláció (elfogadható pontossággal) elvégezhető [22].

### 3.3. Leképezés korszerű architektúrákra

Jelenleg a piacon számos FEM modellezést segítő professzionális vagy nyílt forráskódú szoftver található. Az általam használt FEM algoritmusok igen

---

<sup>2</sup>Ha egy mátrixban nem csupán a főátlóval szomszédos első elemek(tridiagonális), hanem még a második, harmadik stb. elemek is különbözhetnek zérustól, de a főátlóval bizonyos távolságra már valamennyi elem zérus, akkor azt sávmátrixnak (vagy szalagmátrixnak) nevezzük [31]. A FEM globális együttható mátrixa kvázi sávmátrix.

jól párhuzamosítottak, legalábbis a normál számítógépekben található többmagos CPU-kra. Az ezekben alkalmazott algoritmusok jó része elég jól párhuzamosított, legalábbis a személyi számítógépben található CPU-kat gyakorlatilag 100 %-os hatékonysággal kihasználja, hiszen a magok közötti kommunikáció (elemek illesztése a határon) egy processzor magjai között nagy sebességű.

Éppen az illesztési probléma az, amiatt még a kereskedelmi megoldások egy része sem kínálja a durvább granularitású párhuzamosítást.

A FEM algoritmusok párhuzamosításának, így GPU-ra vagy GRID-be való átültetését már vizsgálták ill. sikerrel alkalmazták [33, 34, 35]. A professzionális FEM modellező szoftverek egy részében már van GPU támogatottság (pl. ANSYS), míg másoknál nincsen egyelőre (pl. COMSOL).

Bonyolult és nagy modellek FEM szimulációja memóriaigényes lehet, a gyakorlati tapasztalat azt mutatja, hogy sokszor a memória a szűk keresztmetszet.

### 3.4. MESH szerepe a szimulációkban

A FEM modellezés egyik kulcskérdése, hogy hogyan osztjuk elemekre az adott geometriai objektumot (melyen a megoldást keressük), vagyis a szimulációkban milyen MESH-t (rács, háló) alkalmazunk. Ezzel a konvergenciát, a közelítés pontosságát, valamint a számítások erőforrásigényét is nagyban befolyásolhatjuk.

Ha kevesebb részre bontjuk az objektumot (durvább felbontást alkalmazunk), akkor nagyobb a numerikus közelítés hibája, mintha finomabban bontanánk. A halmozódó numerikus hibák hatására még az is előfordul, hogy a numerikus megoldó nem konvergál, a szimuláció nem fut le. Így kézenfekvőnek tűnhet, hogy jó nagy felbontást válasszunk, akkor biztosan megkapjuk a helyes megoldást. A MESH sűrítésével azonban mind a számítási, mind a tárkonyoltság a gyakorlatban erősen nő.

Akkor mégis mekkora felbontást válasszunk? Ennek megválaszolása egyrészt a számítási és tárkonyoltság, másrészt a futás biztonsága és fontossága közötti kompromisszumot igényel. Részletesebben, azt a legkisebbet, amellyel a szimulációk stabilan lefutnak, és a numerikus módszer hibája számunkra is elfogadható. Arra, hogy mégis mekkora ez a szám, inkább tapasztalati szabályok léteznek, de általában nekünk magunknak kell kikísérletezni, hogy milyen MESH-sel tudjuk a vizsgált rendszert modellezni (természetesen ez nagyban függ attól, hogy stacionárius vagy időfüggő szimulációt végzünk). Nem muszáj, hogy az objektumot egyenlő nagyságú elemekre bontsuk (ekvi-

disztáns MESH), hanem az is lehetséges, hogy csak a kritikus zónában, ahol a *solver* mindig elakad, növeljük meg a felbontást. (Ilyenkor a szimulációk nem lassulnak le annyira.)

Kiemelendő, hogy egy-egy környezetre mind matematikai, mind tárterületi információk alapján az irodalomban fellelhető heurisztikák problémamentesen nem átültethetők.

Sav-bázis diódák numerikus modellezése esetén ezt a kritikus zónát általában a reakciózóna (gélben elhelyezkedik valahol egy zóna, ahol alapvetően a sav-bázis reakció zajlik) jelenti, az esetek nagy részében a *solver* itt akad el, ezért itt van szükség a legnagyobb MESH sűrűsége (MESH sűrűség alatt én mindig azt értem, hogy hány szakaszra kéne osztani az egész 1 mm hosszú gélt ahhoz, hogy az adott kritikus zónában ugyanakkora felbontást kapjunk). Ennek az az oka, hogy ebben a zónában, ahol a sav-lúg reakció zajlik, változik legmeredekebben az egyes komponensek koncentrációja és a potenciál (gradiensek a legnagyobbak), ezért nem megfelelő felbontás esetén itt a legnagyobb a numerikus közelítés hibája, aminek következtében a numerikus megoldó gyakran nem konvergál.

Stacionárius modellezés esetén a reakciózóna helye fix, így bőven elég csak ott a kritikus zónában megnövelni a felbontást. Az időbeli modellezés nehézségét azonban épp az okozza, hogy a reakciózóna a gélben vándorol (az idő függvényében mindig máshol helyezkedik el), tehát emiatt mindig máshol kell a MESH sűrűséget megnövelni. Azt az erőforrások korlátozottsága miatt általában nem tehetjük meg, hogy a szükséges felbontást alkalmazzuk az egész gél mentén, vagy akár csak azon az elemen, ahova a reakciózóna eljuthat (néhány olyan esetben, amikor a reakciózóna nem utazik túl sokat, akkor ez jó megoldás lehet).

## 3.5. Adaptív hálógenerálás

Az adaptív hálógenerálás, vagy adaptív hálósűrités a numerikus analízisben ismert technika, melynek célja a szimulációs idő csökkentése. Ennek során a modellezett rendszerben csak ott és akkor növeli meg a szimulációs program a felbontást, ahol arra szükség van.

### 3.5.1. Az adaptív hálógenerálásról általában

Alapvetően a FEM modellezéshez kapcsolódó adaptív technikák három csoportba oszthatók [17] *r-sűrités* vagy mozgó MESH, *h-sűrités* vagy más néven hierarchikus hálófinomítás, továbbá a *p-sűrités*, ahol lokálisan a bázisfüggvé-

nyek számát növeljük.

- A *p-sűrítés* véleményem szerint nem is tartozik szorosan az adaptív hálógenerálási technikákhoz, a háló nem változik, csak a kritikus elemeken az alappolinomok számát lehet megnövelni, melyek lineáris kombinációjából a közelítés előáll.
- A *h-sűrítés* esetén van egy fix háló, mely nem mozog, nem is változik, és ezen felül szükség szerint a problémás zónákba plusz elemeket lehet beszúrni. Ebből következően a szimuláció során az elemszám nem állandó.
- Az *r-sűrítés*, mozgó MESH esetén viszont az elemszám egy állandó érték, és a hálópontok helyzete változik dinamikusan.

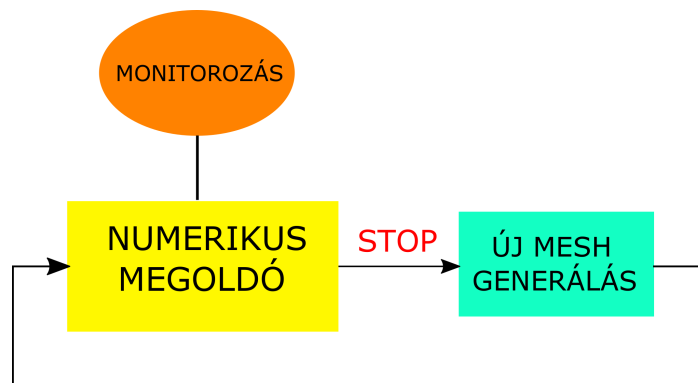
Természetesen ezen adaptív technikák bármilyen kombinációja is elképzelhető.

A *h-sűrítés* és a *p-sűrítés* irodalma bővebb, erről néhány könyv is megjelent már (pl. [28]). Az *r-sűrítés*, vagyis mozgó MESH ezzel szemben sokkal kevésbé kifejlesztett technika, ugyanis a hálópontok mozgásának leírásához igen nehéz megfelelő vezérlő egyenletet találni. Ennek ellenére ezen adaptív technika alkalmazása olyan szempontból mindenképp ígéretes lehet, hogy ezzel az elemszám változtatásával fellépő problémák (globális hiba számítás esetén az egyes elemek súlya az összesített hibában változhat, [36]) mind kiküszöbölhetőek.

Amit minden adaptív technika alkalmazásakor érdemes figyelembe venni, hogy MESH váltáskor, ha az túl drasztikus, szintén nagyon-nagy numerikus hibát lehet vinni a rendszerbe, mely könnyen a szimuláció "elakadásához" (nem konvergál) vezethet.

Az adaptív hálógenerálási algoritmusok működéséhez (3.2. ábra) szükség van egy **monitorozó függvényre**, mellyel a MESH minősége (kellő sűrűsége, és az aktuálisan kritikus helyekhez való illeszkedése) folyamatosan követhető. A monitorozó függvény leggyakrabban a változók első vagy második deriváltja, esetleg ezek kombinációi. Amennyiben a MESH már nem megfelelő, a szimulációt meg kell állítani, új MESH-t kell generálni, majd azzal a szimulációt továbbfolytatni (újraindítani).

A kritikus zónát az jellemzi, hogy valamilyen tulajdonságában a többi zónától elkülönül.



3.2. ábra. Adaptív hálógenerálási algoritmusok általános működése.

### 3.5.2. Alkalmazása a sav-bázis diódában

Sav-bázis diódákhoz hasonló differenciálegyenlet-rendszerekkel leírható rendszerek adaptív hálógenerálással való modellezéséhez is készültek már algoritmusok. (Az irodalomban az  $r$ -, a  $h$ - ill. a  $p$ - sűrítésre is találunk példát.)

Ezek közül jelen alkalmazás szempontjából kiemelkedő jelentőséggel bír Šnita és csoportjának (ők foglalkoznak még sav-bázis diódákkal) algoritmus, mellyel szintén (sószennyezés nélküli) sav-bázis diódák tranziens modellezését tették lehetővé. Algoritmusuk az  $r$ -refinement (mozgó MESH) típusú adaptív technikák csoportjába tartozik.

A monitorozó függvényük viszonylag bonyolult, ezért az időléptetés<sup>3</sup> során nem is értékeli ki minden alkalommal. A monitorozó függvény kiértékelési idejét alapvetően a transzportidők alapján becsülik, mivel az adott beállítások, ionmozgékonyosság, feszültséggradiens alapján jól becsülhető, hogy a kritikuszóna (reakciófront) mennyit tud elmozdulni.

Ezen adaptív algoritmusnak számomra csak például szolgálhat arra, hogy majdnem ugyanazt a differenciálegyenlet-rendszert nagyon hasonló peremfeltételekkel (így hasonlóan nagy mozgó gradiensek alakulhatnak ki) 1000 elem alkalmazásával oldja meg.

Az általuk használt numerikus algoritmus nagyon sok empirikus állandót tartalmaz, hogy nem eléggé robusztus, ezért félok, hogy az általuk vizsgált szimulációs beállításokon kívül nem igazán működőképes.

<sup>3</sup>Időfüggő végeelem-módszer esetén a térbeli diszkretizáció nem egy algebrai egyenletrendszer (3. fejezet) hanem egy közönséges (már csak időfüggő) differenciálegyenletrendszerhez vezet. Ezek megoldása pl. az Euler-módszerhez hasonlóan (léptetés) történik, végül ez is lineáris algebrai egyenletrendszerré vezethető vissza.



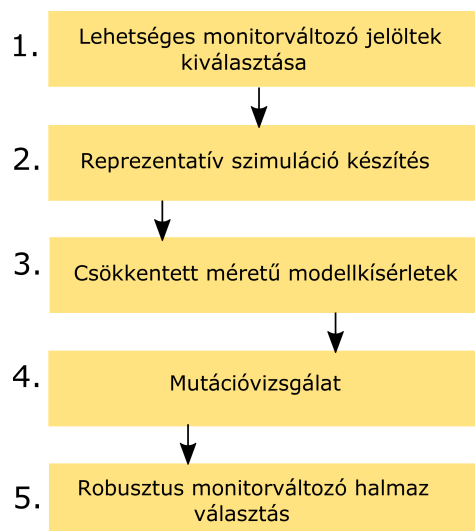
## 4. fejezet

# Vizsgálati módszertan

TDK munkám célja az volt, hogy egy már meglévő, sav-bázis diódák transziens FEM modellezéséhez empirikusan készített, és igen robusztussá tett adaptív hálógenerálási algoritmus gyorsítási lehetőségeit megvizsgáljam, és olyan adaptív MESH-es technikára tegyek javaslatot, mely más, a diódához hasonló FEM modellekben is sikerrel alkalmazható.

### 4.1. Tervezett munkafolyamatok

Az elvégzett vizsgálatok a fő lépésekben a következők (4.1. ábra):



4.1. ábra. A tervezett munkafolyamatok.

**Jelöltek kiválasztása** Azon változóhalmaz (leírók) kiválasztása a szakterületi ismeretek alapján, mely a tervezett algoritmus során, mint a hálósűrűség meghatározását segítő, MESH minőséget monitorozó függvény, vagy a kritikus tartomány pozíciójának becslésével a MESH generálást segíti.

**Reprezentatív szimuláció készítés** Egy előre kiválasztott reprezentatív szimulációs beállítás esetén ultra finom fix, ekvidisztáns MESH-sel, az én példámban a szokásosan néhány ezres helyett (500 000 elem) való számítás készítése annak érdekében, hogy egy viszonylag pontos referenciamegoldásunk legyen. Ezt természetesen csak a metodika kikísérletezésénél kell elvégezni, a későbbi ismételt futtatásoknál semmiképp.

**Csökkentett méretű modellkísérletek** Különböző felbontású adaptív MESH-ekkel a reprezentatív szimuláció ismételt futtatása során a szóba jöhető változók viselkedésének, illetve a szimulációhoz szükséges időnek a vizsgálata. Az itt kapott megoldás helyessége és pontossága, ellenőrzése az előbbi lépésben bemutatott referenciamegoldással való egybevetéssel. A viselkedés megértéséhez az összes szóba jöhető változó (leíró) értékének naplózása annak érdekében, hogy a lényeges információt hordozóakat kiválaszthassuk.

**Mutációvizsgálat** Korábbi szimulációs eredmények közül (melyek nagyon hasonló MESH-sel készültek) olyan adatsor kinyerése, mely a kiválasztott referenciaszimulációtól gyökeresen különböző szimulációs beállítások esetén mutatja a kiválasztott leírók közötti kapcsolatot.

**Robusztus monitorváltozó halmaz választás** Cél a leírók ill. MESH közötti kapcsolat felderítése. Tekintettel arra, hogy a szóba jöhető monitorozó változók viselkedése előzetesen nem becsülhető, ezek közötti kapcsolatok felderítését a következő módszerekkel végeztem:

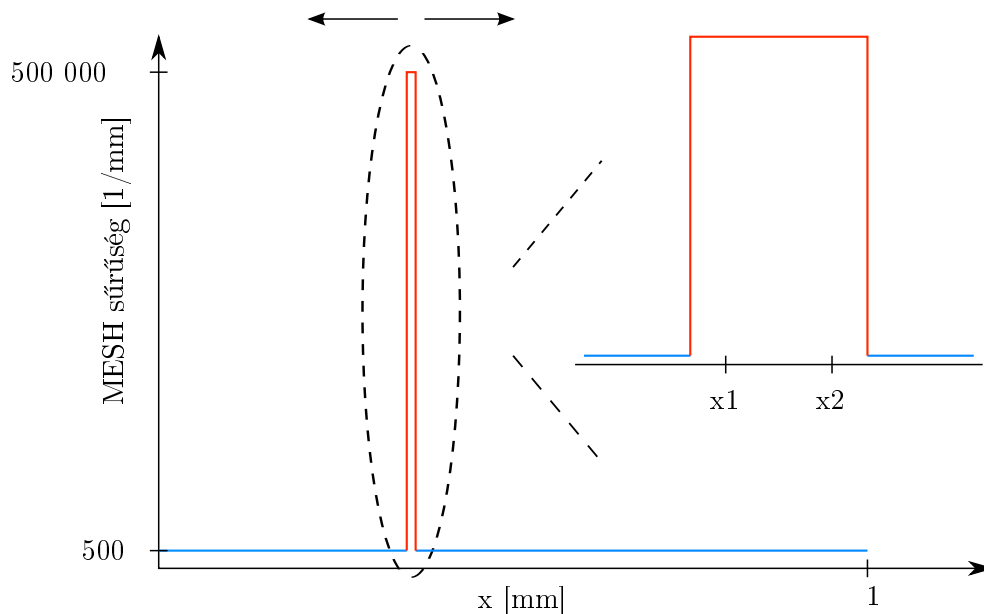
- Közelítő statisztikai modell megalkotása (Mondrian).
- Egzakt statisztikai analízis (Statistica).
- Az adatelemzés folyamatát teljesen automatizáló IBM Watson Analytics program.

A különböző módszerekkel kapott eredményeket egymással összevettem.

#### 4.1.1. Sav-bázis dióda példája

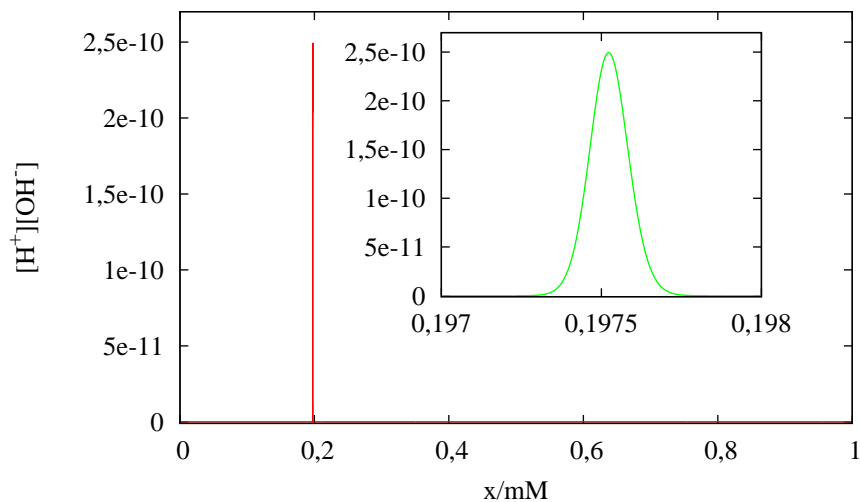
A dióda egy nagy felbontású (kritikus zóna) és egy kis felbontású zónára (dióda többi része) van osztva (4.2. ábra). A két zónán belül egymástól függetlenül megválasztva egyenlő nagyságú elemeket használ, ezért az algoritmusnak alapvetően két bemenő paramétere van: hány elem kerüljön a kritikus zónába ill. hány a dióda többi részére. A nagy felbontású zóna szélessége a futás közben nem változik, nagy valószínűséggel jóval szélesebb, mint a kritikus zóna, annak érdekében, hogy azt jelentősebb alakváltozás (pl. szétterülés) esetén is biztosan lefedje.

A kritikus zóna (más néven reakciózóna) helyzetét egy pilot változó ( $[H^+] \cdot [OH^-]$  szorzat<sup>1</sup>) segítségével monitorozza (4.3. ábra), mivel ennek értéke csak a kritikus zónában tér el egy egyensúlyi értéktől. Amint ennek értéke a nagy felbontású zóna szélein szignifikánsan eltér az egyensúlyi értéktől, akkor a kritikus zóna haladási irányának megfelelően a nagy felbontású zónát a szoftver automatikusan áthelyezi.



4.2. ábra. A tranziens modellezéséhez használt MESH.

<sup>1</sup>Ez nem más, mint a víziószorzat, melynek értékéből kémiai reakció jelenlétére lehet következtetni.



4.3. ábra. A használt pilot változó ( $[H^+] \cdot [OH^-]$ ) értéke.

## 4.2. Általános vizsgálati környezet bemutatása

az általános szimulációs környezet célja a modellszámítások elvégzése (4.4. ábra). A vizsgált rendszer modellezéséhez használt szimulációs keretprogram JAVA-ban készült, a COMSOL a FEM algoritmusokat biztosítja.

Az általam írt program [?] teljesen automatizáltan végzi a bemenő adatok, mint szimulációs beállítások (pl. szennyezés mértéke), valamint a szükséges MESH paramétereinek feldolgozását, a teljes szimulációs folyamat végrehajtását (pl. kezdeti- és határfeltételek számítása), valamint az eredmények szisztematikus (megoldások) folyamatos mentését. A program ezenkívül a 4.1.1. fejezetben bemutatott adaptív MESH-es algoritmust is tartalmazza.

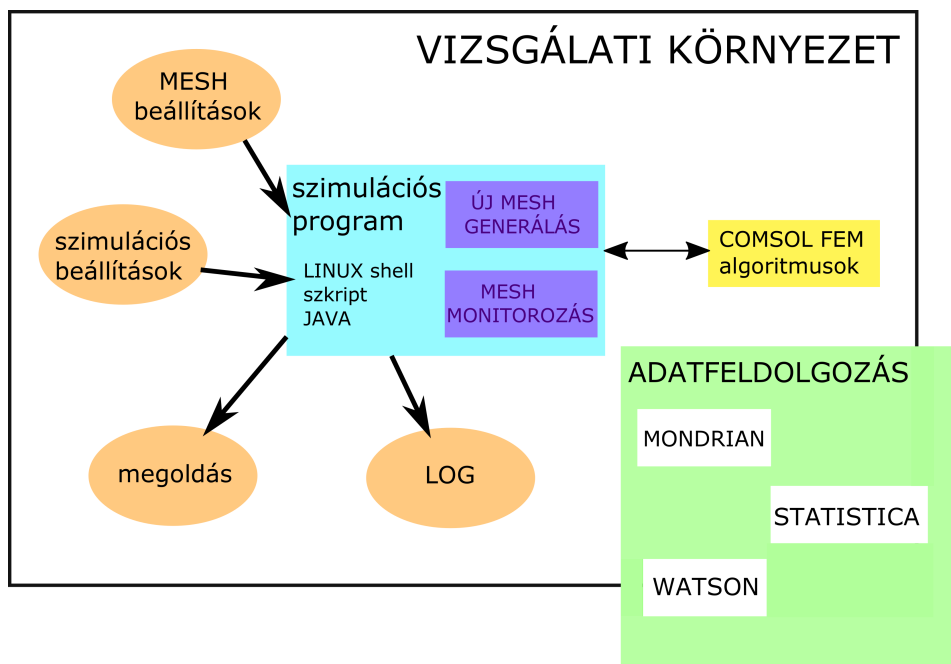
Ezenfelül a program folyamatosan naplófájlokat generál, mellyel a szimuláció előrehaladását követni lehet, továbbá hibakeresésre is alkalmas.

Sorozat szimulációk indítását a rendszer shell szkriptekkel támogatja, épp ezért az egész szoftver csak UNIX alapú operációs rendszeren működőképes.

A futatókörnyezetet egy virtualizált (VMWare vSphere Hypervisor 5.5) LINUX szerveren alakítottam ki, melyen SUSE-Linux Enterprise 11 64 bites operációs rendszer fut.

A virtuális gép 6 magos processzorral, valamint 32 GB memóriával rendelkezik.

A tényleges fizikai számítógépben X3470 Xeon(R) 3 GHZ-es CPU, valamint



4.4. ábra. A vizsgálati környezet.

Kingston DDR3 1333 MHz-es ECC Registered DIMM memória található.

#### 4.2.1. Adatfájlok előállítása

A szimulációs program az előre definiált időpillanatokban egy szövegfájlba menti ki a differenciálegyenlet-rendszer megoldását (profilokat). Egy fájl egy-egy tranzien szimulációnak feleltethető meg, egy időponthoz tartozó profilok egy tömbben található. Az így nyert adatfájlok MATLAB-bal ill. GNU PLOT-tal könnyen feldolgozhatók, így a változók megoldásai egyszerűen ábrázolhatók.

PYTHON 2.7 szkriptek gondoskodnak arról, hogy a COMSOL által gyárilag szolgáltatott naplók, és az általam kinyert információk egységes, tovább feldolgozható formátumba kerüljenek. Kiemelendő, hogy a COMSOL nem támogatja az algoritmusok finoman hangolását. Például, a belső iterációk számai nem kinyerhetők, csak a végeredmény. Ennek megfelelően a vizsgálatok során nem az elméleti számítási bonyolultságot használom hatékonysági mértéknek, hanem csak a futási időt, mint gyakorlati metrikát tudtam naplózni. Hasonlóan a felhasznált memória nagysága szolgál a tár bonyolultság becslésére.

### 4.3. Leírók kiválasztása

Az irodalomban különböző módszerek léteznek a kritikus zóna pontos helyzetének becslésére, majd a hálógenerálásra. Ezek egy-egy, jellemzően a szerző által dominánsnak vélt hatáshoz kapcsolódnak. A választást azonban a szakirodalom nem indokolja, néhol más alternatívát említ ugyan, azonban az ezek közötti kapcsolatot nem vizsgálták.

Az adaptív hálógenerálási algoritmus gyorsítása során a szóba jöhető faktorok halmazának meghatározásához figyelembe vettem az irodalmi ajánlásokat (változók deriváltjai), valamint olyan további változókat is kiválasztottam, mely a diódához nagyon hasonló rendszerek adaptív FEM modellezésében kulcsszerepet játszott. Ezek mellé hozzávettem a korábban (4.1.1. fejezet) a már sikeresen alkalmazott pilot változót is, melynek értéke, ha eltér az egyensúlytól, az kémiai reakció jelenlétére utal. Az irodalomban annak jelét nem találtam, hogy másmilyen kémiai reakcióval is kapcsolatos folyamat adaptív FEM modellezésénél reakcióra utaló faktorokat használtak volna akár a kritikus zóna detektálásában, akár a MESH előállításához szükséges paraméterek meghatározására.

A kiválasztott változóhalmazt viszonylag tágnak választottam, így nagy valószínűséggel tartalmazhat, már csak a fizikai-kémiai folyamat lefutása miatt is redundáns információt. Ezt a rákövetkező statisztikai vizsgálat könnyen kimutatja, és így eltávolíthatóak. Megjegyzendő, hogy általánosságban a változók közötti asszociáció nem ismert előre, így a redundáns változók meghatározása feladatfüggő, és csak a futási eredmények ismeretében végezhető el.

A monitorváltozó jelöltek halmazában a differenciálegyenletekben szereplő változókön kívül a kémiai folyamat ismerete alapján olyan származtatott változókat is szerepeltettem, melyek utalnak a zónahatárokra és a reakciózónára. Ez lényegében szimulálja azt a fajta kísérleti megközelítést, mely a gyakorlatban gyakran kivitelezhetetlen, amely a reakciókat szakterületen szokásos általános fogalmakkal jellemzi.

Ezeket figyelembe véve a következő változókat választottam:

- **phix**: feszültség ( $U$ ) első hely szerinti deriváltja
- **phixx**: feszültség ( $U$ ) második hely szerinti deriváltja
- **hx**:  $H^+$  (savból származik) koncentráció első hely szerinti deriváltja
- **ohx**:  $OH^-$  (lúgból származik) koncentráció első hely szerinti deriváltja
- **kx**:  $K^+$  (lúgból ill. a szennyező sóból is származhat) koncentráció első

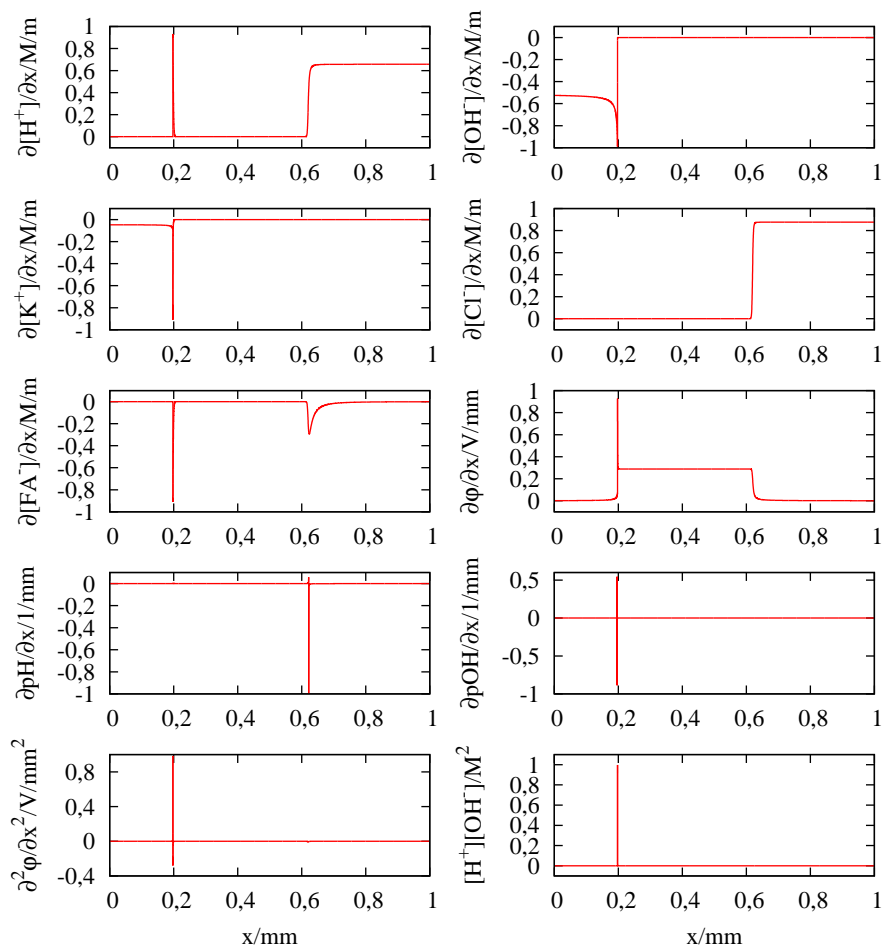
hely szerinti deriváltja

- **clx**:  $\text{Cl}^-$  (savból ill. a szennyező sóból is származhat) koncentráció első hely szerinti deriváltja
- **c\_fax** vagy **c0\_fax**:  $\text{FA}^-$  (ezeket az összekötőelem, vagyis a gél tartalmazza) koncentráció első hely szerinti deriváltja.
- **pHx**: a pH első hely szerinti deriváltja ( $\text{pH} = -\lg([\text{H}^+])$ )
- **pOHx**: a pOH első hely szerinti deriváltja ( $\text{pOH} = -\lg([\text{OH}^-])$ )
- **hoh**:  $[\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-]$  szorzat a gél mentén

A kiválasztott változók alakját, elhelyezkedését egy jellemző tranziens szimuláció kiindulásánál a 4.5. ábra mutatja. A kritikus zóna kb.  $x = 0,2$  mm-nél helyezkedik el. A legtöbb monitorváltozó jelölt élesen különböző értéket vesz fel a kritikus zónában, mint a dióda többi részén.

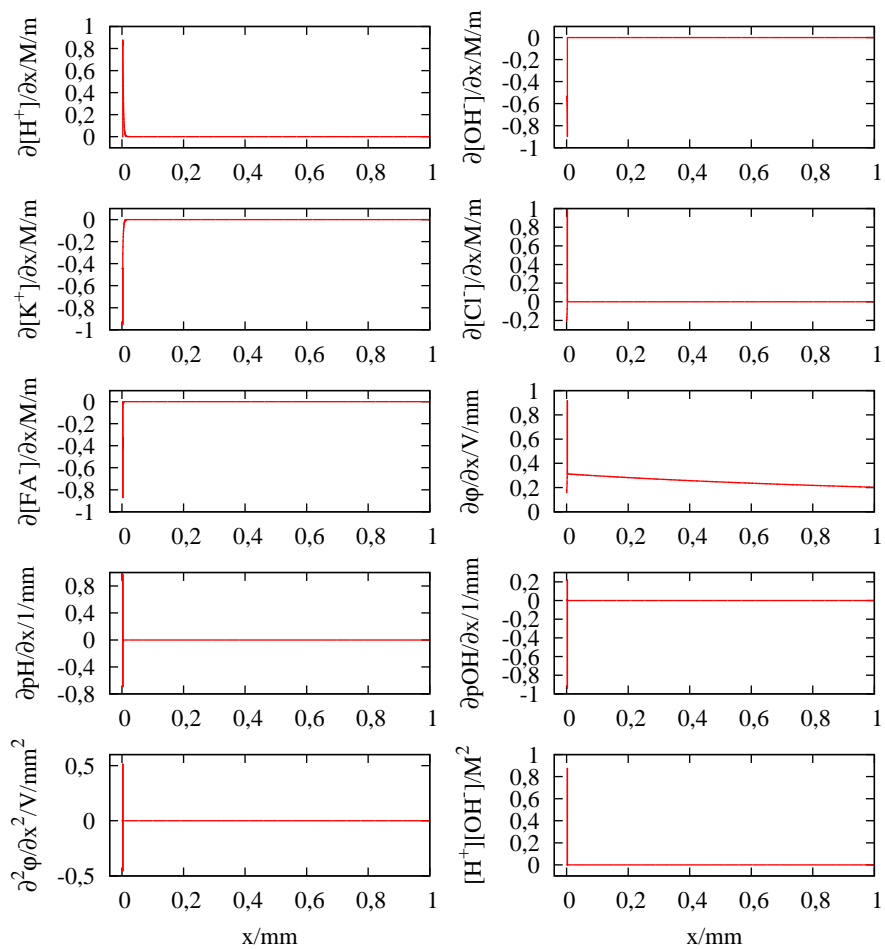
A rendszerben bekövetkező modellezett fizikai-kémiai átalakulások miatt ezen változók kinézete drasztikusan megváltozhat, így előfordulhat, hogy egy idő után épp alkalmassá vagy alkalmatlanná válik a kritikus zóna detektálására. A diódára jellemző átalakulás (dióda átütése) során pl. minden kiválasztott változó lehetséges monitorozó függvényé vált (4.6. ábra). A kritikus zóna a dióda szélére került.

Ugyanakkor számos változó más kísérletmutációk esetén egyszerűen elveszítheti hatékonyságát.



4.5. ábra. Kritikus zóna detektálására kiválasztott változók egy szimuláció kezdetén. A függvényeket normálva ábrázolom. (Maximális függvényérték 1, minimális -1).





4.6. ábra. Kritikus zóna detektálására kiválasztott változók egy jellemző szimuláció közben. A függvényeket normálva ábrázolom. (Maximális függvényérték 1, minimális  $-1$ ).

## 5. fejezet

# A szimulációs eredmények feldolgozása

TDK munkám célkitűzése az volt, hogy megvizsgáljam annak lehetőségeit, hogyan lehet a fent ismertetett adaptív MESH-es algoritmust gyorsítani. Ehhez először kiválasztottam néhány lehetséges leíró (potenciális monitorozófüggvényt), ezek könnyen generálható függvények, pl. egyes változók deriváltjai, melyekből a szükséges MESH sűrűséget számítani szeretném (4.3. fejezet).

Kiválasztottam egy reprezentatívnak tekinthető szimulációs beállítást, melyet többféle MESH beállítással lefuttattam, ún. MESH kísérleteket végeztem. Ehhez készítettem egy ultra finom felbontású referencia szimulációt (ez tekintetem hibátlan megoldásnak). Ezzel összehasonlítva vizsgáltam a MESH hatását az eredmény minőségére, hibájára, valamint a szimulációhoz szükséges időre. Ennek során részletesen ismertetem, hogy hogyan jártam el, majd az eredményeket többféle ("klasszikusnak" tekinthető, majd statisztikai) módszerrel kívánom értékelni.

Annak biztosítására, hogy az adaptív hálógenerálási algoritmus robusztusan (sokféle szimulációs beállítás, "mutáció" esetén) működhessen, a korábbi eredmények közül is kiválasztottam néhányat, melyekből további elemzésre alkalmas adatfájlokat készítettem. Ennek során kétféleképpen jártam el:

1. Az egyes mutációkra (más feszültség, sókoncentráció, változó zavarás) különböző időpillanatokban kigyűjtöttem ezen leírók kritikus zónában lévő szélsőértékeit (minimum vagy maximum) egy külön adatfájlba. A szélsőértékek jelezhetik a kritikus zóna pozícióját, hiszen itt vannak a környezethez képest nagy eltérések és változások. (A különböző mennyiségekhez tartozó szélsőértékek lokálisan nem feltétlenül esnek

teljesen egy helyre.) Az ezen változók közötti függőség redundanciára utal.

2. Néhány szimulációs beállítás esetén bizonyos időpontokban kiexportáltam a differenciálegyenlet-rendszer megoldását (egyes változók értékei), valamint a kiválasztott leírók értékeit. Ebben az esetben lokálisan összetartozó értékeket kaptam. Célom az, hogy az egyes leírók közötti összefüggéseket felderítsem, valamint vizsgáljam, hogy csak ezen értékek alapján, hogy ez a pont a kritikus zónához tartozik-e vagy sem, eldönthető-e.

Ezen adatfájlokat alapvetően statisztikai módszerekkel (feltáró és bizonyító adatanalízis, integrált adatanalízis) vizsgálom. Ennek során *Mondrian*, *Statistica* valamint *IBM Watson Analytics* szoftvereket használok.

## 5.1. MESH "kísérletek"

Egy kiválasztott reprezentatív szimulációt nagyon sokféle MESH beállítással elvégeztem, annak érdekében, hogy a szimulációs időt és a MESH hatását a megoldásra vizsgáljam.

Az egyes MESH beállítások esetén mértem, hogy mennyi a szimulációhoz szükséges idő, adott időpillanatokban kimentettem a megoldást, valamint kiszámítottam a rendszeren átfolyó áram nagyságát (ez lenne a kémiai kísérletekben is mérhető mennyiség). Az adott MESH beállításokkal végzett szimulációs eredményekből meghatároztam az adott közelítés abszolút és relatív hibáját.

### 5.1.1. Hálóelemek száma – szimulációs idő

Adaptív MESH alkalmazása esetén ugyanannak a szimulációnak az elvégzése jóval kevésbé időigényes, mint extrém sűrűségű ekvidisztáns MESH-sel (5.1. táblázat), így használatával a számítási idő nagyon sokat csökkenthető.

Továbbá megfigyelhető, hogy az elemszám csökkentésével a szimulációkhoz szükséges idő is csökkenthető.

### 5.1.2. Szimulációs hiba számítása

Ideális esetben, ha az adott közelítést behelyettesítjük az eredeti, nullára rendezett differenciálegyenlet-rendszerbe, akkor a nullától való eltérést tekint-

Alap elemszám	Elemzészám a kritikus zónában	Szimulációs idő (óra)
500	70	0,7
500	100	0,6
500	250	0,9
500	500	1,3
1000	70	1,0
1000	100	1,3
1000	200	1,1*
1000	300	1,3*
1000	400	1,5*
1000	500	1,7*
1000	750	2,1
1000	1000	2,4
1000	2000	3,5
1000	3000	4,2
1000	4000	3,2
1000	5000	3,7
Referencia (500000)		423

5.1. táblázat. A referenciamodell különböző MESH beállításokkal. \*-gal jelölt beállítások esetén a hibát nem számítottam ki, mert a kereskedelmi megoldó egy hibája miatt a megoldás nem mindig jó időpillanatban lett kimentve.

hetjük a hiba mértékének<sup>1</sup> Sajnos ezen adatok a COMSOL FEM szimulációs szoftverből nem kinyerhetők.

Ezek alapján készítettem egy referencia szimulációt nagyon-nagyon sűrű MESH-sel (500 000 ekvidisztáns pont). A hibaszámításnál ezt tekintettem hibátlan megoldásnak. Ebből minden egyes MESH beállításhoz a kimentett pontokban (10000 pont, 150 időpillanat) kiszámítottam a megoldás hibáját ill. a két megoldás közötti differenciát. (A hiba és a különbség számítását PYTHON szkriptek segítségével végeztem.)

A klasszikus módon végzett hibaszámítás rámutat a módszer egy fogyatékoságára, ugyanis az így kalkulált hiba és az alkalmazott MESH között gyakorlatilag semmilyen kapcsolatot sem létesíthetünk. Lebegőpontos számokkal végzett aritmetikai műveletek során, jellemzően a nullához közeli tartományban, keletkezhet akkora numerikus hiba, mely százalékosan hatalmas eltéréseket eredményez. Ugyanakkor a szimuláció konvergenciájára, valamint az

<sup>1</sup>Pontosabban az egyes változókat besorozhatjuk egy ún. súlyfaktorról - skálafaktorról, és ezeket összegezve kaphatjuk meg a megoldás hibáját. Ennek az a jelentősége, hogy a különböző nagyságrendbe eső lebegőpontos számok súlya az összesített hibában kb. hasonló lesz.

eredmények elfogadhatóságára semmilyen hatással nincs. A számítás során adott változó néhány elemen az összesített hibában alul van súlyozva.

### 5.1.3. Szimulációs eredmények validálása

Numerikus analízisben mindig felmerül a kérdés, hogy a kapott eredmények valóságosak-e, a szimulációkból ténylegesen következtethetünk-e a modellezett rendszer viselkedésére, vagy csak valamilyen numerikus hibát szeretnénk valós effektusnak látni.

Épp ezért (a tényleges fizikai kísérletek elvégzése nélkül is) a szimulációs eredményeket muszáj validálni. Ennek első, és legfontosabb lépése, hogy a kapott eredményeket (megoldásokat) ellenőrizzük, hogy ezek a valóságnak, fizikai törvényeknek megfelelnek-e (pl. kémiai rendszerek modellezése esetén amennyiben az egyik változó koncentráció, akkor annak negatív értéke - "antianyag" - nem lehetséges). Ha a talált ellentmondás csak nagyon kicsiny (numerikus hiba), akkor még a modellt elfogadhatjuk. A fizikai törvényeknek teljesen ellentmondó eredmény esetén viszont a szimulációs folyamatot újra kell kezdeni.

Ez az informatikában használt hihetőségvizsgálat egy speciális esete.

Természetesen előfordulhat olyan, de szerencsére igen ritka, hogy a fizikai törvényeknek ugyan nem ellentmondó, de mégsem a valós viselkedést tükröző megoldást kapunk. FEM modellezés esetén ennek kiszűrésére (amikor a szimuláció célja valamilyen egy rendszer kvalitatív viselkedésének felderítése) érdemes a szimulációt másmilyen (sűrűbb, ekvidisztáns stb.) is elvégezni, majd az eredményeket összevetni. Ez alapvetően azonos programozókkal, de eltérő konfigurációkat használva az N-verziós programozás ötletének részleges implementációja.

A hibaelemzés megmutatta, hogy a MESH sűrűsége és a megoldás elfogadhatósága között éles választóvonal van. Egy kritikus hálónomság alatt ugyanis a numerikus hiba klasszikusan felugrik. A kiválasztott referencia szimuláció validálása során azon eredmények tekinthetők hibamentesnek, ahol a kritikus zóna legalább 2000 elemet tartalmaz. Ennél kevesebb elem alkalmazása esetén az alacsony felbontás szabad szemmel észrevehető eltéréseket okoz.

#### A referenciamegoldás hibája

Meglepő módon az extrém sűrű MESH-sel készült megoldásba is, ráadásul épp a kritikus zónában némely időpillanatban hiba csúszott. Ennek oka, hogy a COMSOL általános célú numerikus megoldója [18] egy közelítés aggregált

hibájának meghatározásánál a teljes vizsgálati térre számol súlyozás nélküli hibatagot:

$$err = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{|E_i|}{W_i}\right)^2}, \quad (5.1)$$

ahol  $E$  vektor az adott  $U$  közelítés becsült hibáját jelöli,  $N$  jelenti a közelítés szabadsági fokainak számát (ebben az esetben a MESH elemek száma szorozva a bázisfüggvények számával).  $W_i = \max(|U_i|, S)$ , ahol  $S$  a numerikus megoldó által előre meghatározott, vagy előre manuálisan megadott skálafaktor (változóként).

A numerikus megoldó egy-egy időpontban a közelítést addig iterálja, míg az általa számított hiba kisebb nem lesz egy előre beállított értéknél (tolerancia).

Ekvidisztáns MESH esetén a kritikus zónában található elemek száma 5000, míg a vizsgált tér 500 000 elemet tartalmaz, így a kritikus zónában fellépő hiba az aggregált hibában csak 1 %-os súllyal szerepel, vagyis teljesen alulreprezentált. Ugyanakkor adaptív hálógenerálással elérhető, hogy a kritikus zóna (ahol a szimuláció szempontjából izgalmas folyamat zajlik) az összesített hibában sokkal nagyobb súllyal jelenjen meg.

Az adaptív MESH-sel számolt szimulációs eredménnyel a numerikus közelítés hibájának szempontjából egyenértékű megoldást még a tervezettnél is sokkal sűrűbb MESH-sel lehetne csak kapni, ami azt jelenti, hogy adaptív algoritmus használatának még a becsülnél is nagyobb gyorsító hatása van.

A fenti jelenség nyilvánvalóan igaz minden olyan probléma vizsgálatokor (2.3. fejezet), amikor a vizsgálat szempontjából érdekes jelenség a modellezett tér csak kis részében történik.

## 5.2. Statisztikai adatelemzés

Jó ötlet-e egy differenciál-egyenlet rendszer változóinak megoldását, a változók deriváltjait esetleg második deriváltjait, más kémiai reakciót jelző tagot, esetleg a megoldás becsült hibáját statisztikai módszerekkel elemezni? Mivel igen-igen sok a feldolgozásra váró adat (és ehhez csak néhány jellemző szimulációs beállítás lett kiválasztva), valamint a differenciálegyenlet-rendszer erősen nemlineáris, ezért az adatok mögött rejlő mélyebb összefüggések felderítéséhez – melyek az adaptív MESH-es algoritmus gyorsítását lehetővé

teszik – ez is szükséges. A statisztikai adatelemzést a *Statistica*, *IBM Watson Analytics* valamint a *Mondrian* szoftverrel végeztem.

A fejezet nagyon sok ábrát, táblázatot tartalmaz, melyek egy része csak a Függelékben található (7.3. fejezet).

### 5.2.1. Leírók szélsőértékeinek elemzése

A kiválasztott leírók minimumai vagy maximumai, melyek első ránézésre mind alkalmasak lehetnek a kritikus zóna detektálására, a gél mentén nagyon közel esnek egymáshoz (mind a kritikus zónában található), azonban mégsem pontosan ugyanazon a helyen vannak. Egy tranziens szimuláció során ezek nagysága folyamatosan változik, mégis van-e ezek között valamiféle kapcsolat? Ehhez egy olyan adatfájlt állítottam elő, ahol nagyon sok tranziens szimuláció (sószennyezéssel kapcsolatos, feszültség ugrás stb.) néhány jellemző időpillanatban kimentettem ezen értékeket. Ezen adatfájl viszonylag kevés, pontosan 64 rekordot tartalmaz. Van, ahol egy-két adat hiányzik, ennek az az oka, hogy annak az értéke ott (pl. numerikus hiba miatt) értelmezhetetlen. Az adatfájl a 4.3. fejezetben bemutatott leírókon kívül még egy oszlopot tartalmaz (descriptor néven), mely arra utal, hogy az adott rekord pontosan milyen szimulációs mutációból származik.

Az adatok nagyon különböző nagyságrendűek, így ezeket összehasonlítani nem érdemes, továbbá az adatok utólagos skálázásával sem foglalkoztam. A kiválasztott leírók között nincs igazán ok-okozati összefüggés, minden oda-vissza összefügg egymással.

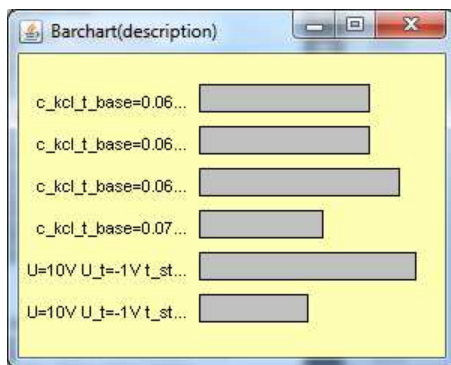
### Vizuális adatanalízis

Az adatsorok pontosan hatféle különböző szimulációs beállításkból származnak, beállításonként az elemszám különböző (5.1/a. ábra).

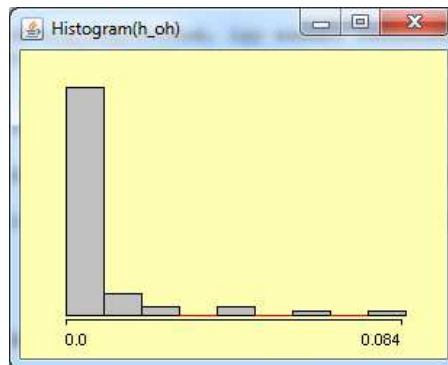
Az adatok vizuális analízise alapján is megállapítható, hogy azok nagy valószínűséggel nem normális eloszlásúak. Ezt a hoh változó példáján mutatom be (5.1./b ábra).

A kiválasztott leírók egy jó része között valamilyen kapcsolat, korreláció lehet, mivel a parallel ábrázolásmód (5.2. ábra) esetén az arányosságra jellemző "legyező alakok" jelennek meg.

A boxplot-os ábrázolásból (5.3. ábra) kiderül, hogy a leírók szinte kivétel nélkül tartalmaznak outlier-eket. Ezen outlier-ek egy speciális szimulációs



(a) Elemszám - szimulációs mutáció



(b) A hoh leíró hisztogramja.

5.1. ábra

mutációból származnak, ahol előfordulhat, hogy az adott leíró extrém értékeket vehet fel.

### Statisztikai elemzés

A kiválasztott leírók átlagát, szórását, minimumát és maximumát, valamint az elemszámot (N) a 7.2. táblázat tartalmazza.

Az adatok normalitásának (annak eldöntésére, hogy normális eloszlású-e) vizsgálatához egy statisztikai tesztet (Kolmogorov-Smirnov teszt) végeztem.

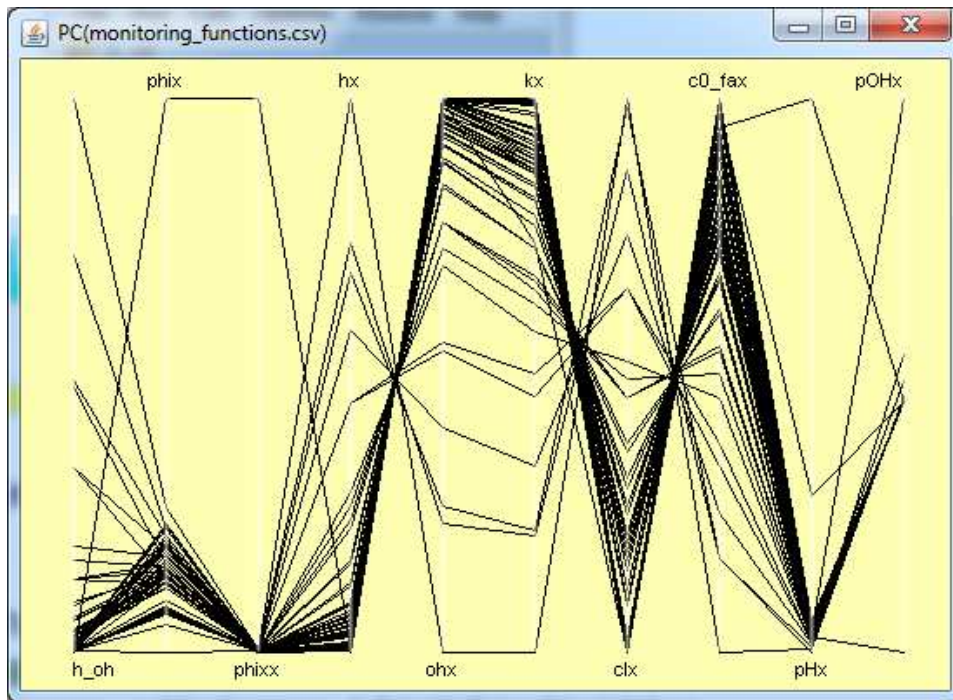
A teszt alapján egyik adatsor sem normális eloszlású, mely teljes összhangban van a vizuális analízis eredményével. Az adatok korrelációs mátrixa a 7.3. táblázatban található.

A korrelációs együtthatók alapján néhány változó (hx, ohx, kx, clx, c0\_fax valamint phox, phixx igen erőteljesen korrelálnak egymással. 1-hez közeli korrelációs együttható pozitív, míg -1-hez közeli érték negatív korrelációra utal.

A lehetséges leírók közül kiválasztottam egyet (pl. hoh), amit függő változónak (többet függetlennek) tekintve regressziószámítást végeztem. Ez alapján hx ill. c\_fax tekinthető szignifikánsnak hoh értéke ( $R^2=0,995$ ).

Ezután egy, az adathalmazzal kevésbé jól korreláló (pl. pHx) változót választottam függő változónak. Ebben az esetben a regressziószámítás alapján pHx értéke a többi leíró értékéből nem igazán jósolható ( $R^2=0,294$ ).





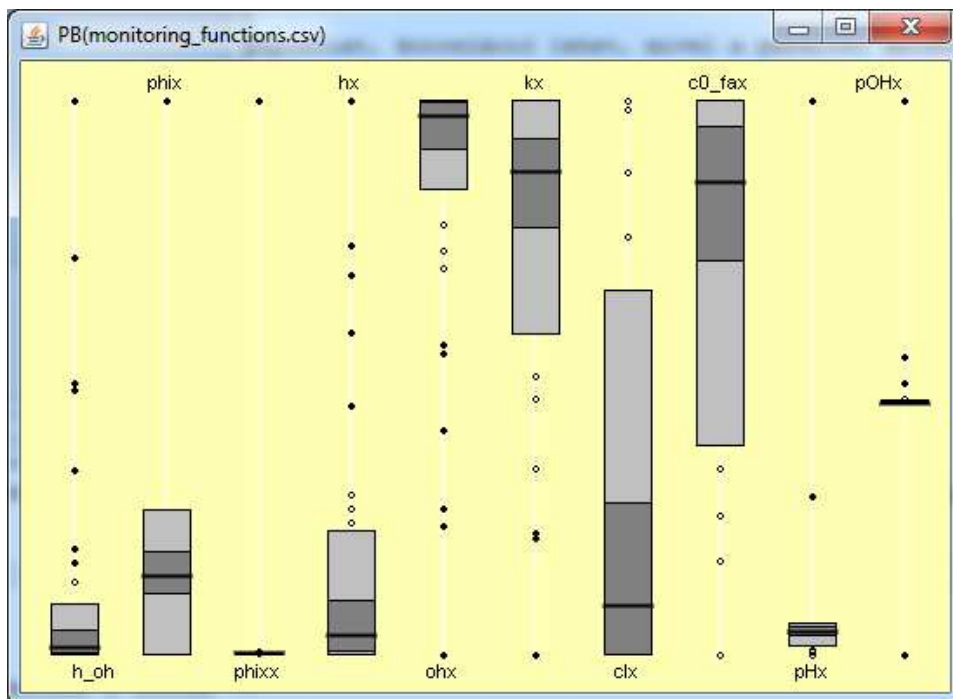
5.2. ábra. A lokálisan nem összefüggő leírók parallel ábrázolása. Parallel coordinates.

### Watson Analytics

A korrelációs mátrixszal teljes összhangban a *Watson Analytics* szoftver a változók között a következő függőségeket találta az egyes változók között. A  $hx$ ,  $ohx$ ,  $kx$ ,  $clx$ ,  $c0\_fax$  és  $hoh$  változók között kölcsönösen erős korreláció figyelhető meg (7.1. ábra és 7.2. ábra). Például a  $c0\_fax$  és  $clx$  változók közötti negatív korreláció a (5.4. ábra) teljes összhangban van a két változó közötti korrelációs együtthatóval.

Néhány esetben (pl.  $c0\_fax - clx$ ,  $ohx - hx$ ) a változók közötti összefüggés lineárisnak látszik (legalábbis a vizsgált tartományban).

Az ábrákon jól látható, hogy az adathalmazok nem szimmetrikusak. Jellemzően az abszolút értékben kisebb tartományokban jóval több adat található. Ennek az az oka, hogy ezek az értékek csak bizonyos szimulációkban (már az új stacionárius állapot környékén) fordulhatnak elő (jellemzően dióda átütése nagy feszültségen nagy sémennyiséggel). Az ilyen fajta szimulációk viszont az adathalmazban picit alulreprezentáltak. Ezt mutatja be a 5.5. ábra. *Mondrian* szoftverrel a  $c0\_fax - clx$  adatpárok vannak ábrázolva, pirossal az outlier-ek vannak kiemelve. Az ábrán a barchart mutatja, hogy ezek az adatok pontosan mely szimulációkból származhatnak (description változó).

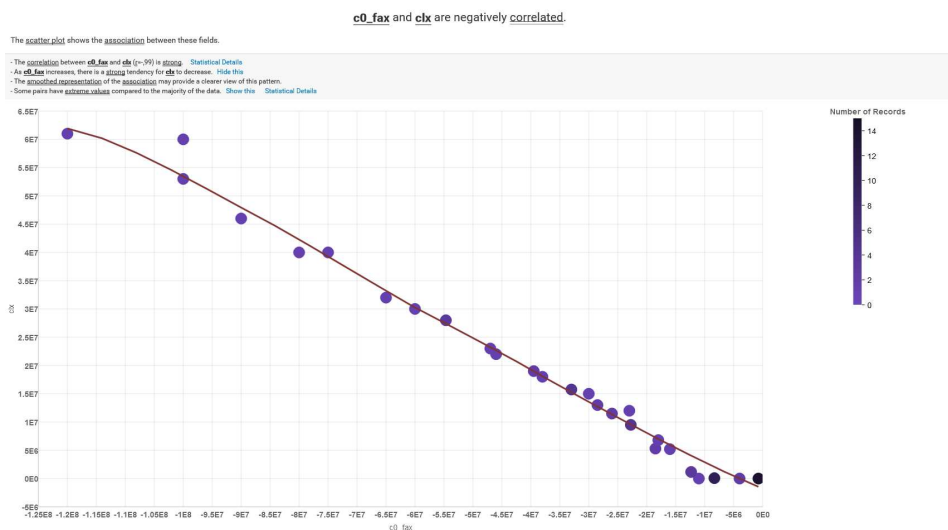


5.3. ábra. A lokálisan nem összefüggő leírók boxplotjai.

Jól láthatóan a phix – phixx adatpár között az összefüggés nem igazán állapítható meg (7.2/g ábra). Ennek az az oka, hogy az adathalmaz tartalmaz egy outlier-t (kiugróan magas phixx érték), amire nem sikerült elfogadható (fizikai-kémiai modellel összhangban lévő) magyarázatot találni. Valószínűleg az adatfájl előállításába valamilyen hiba csúszott, és ezen értékek így kerültek bele. Ezért ezt az adatsort töröltem<sup>2</sup>. Ennek hatására a változók közötti további függőségekre is fény derült. A hx, ohx, kx, clx, hoh, c0\_fax csoporttal a phixx is elkezdett korrelálni, bár gyengébben, mint a csoport tagjai egymással. A megjelenő új korrelációk a 7.3. ábrán láthatók. (A többi korrelációt nem ábrázolom még egyszer, mivel azon adatpárok esetén az outlier törlésének hatása elhanyagolható.)

Ami érdekesség, hogy a várakozással ellentétben a pHx és a pOHx változók nem korrelálnak semmivel sem, pedig ezek, és a hx és ohx változók között szoros kapcsolat van (4.3. fejezet). Ezen kívül a szoftver néhány leíró esetében a description (szimulációs beállításra utal) változóval is valamilyen kapcsolatot talált.

<sup>2</sup>A már feltöltött adatfájlok az *IBM Watson Analytics* programmal utólag módosíthatók, a program lehetővé teszi változók (vagy változók egy halmazának) törlését, és az új adathalmaz további elemzését. Ez a funkció azonban nálam nem működött tökéletesen. A módosított adatfájlt sikerült létrehozni, viszont ennek elemzése során a már törölt outlier-rel még mindig számolt a program



5.4. ábra. Watson Analytics által felderített korreláció két leíró (c0\_fax – clx) között.

Vizsgáltam továbbá, hogy egy kiválasztott leíró függő változónak tekintve (mint pl. regressziószámításnál) ennek értékét mennyire lehet a többi alapján jóslani (*Watson Analytics/Prediction*). Azt tapasztaltam, hogy amennyiben az egymással jól korreláló változók közül választok egyet, akkor az ezzel összefüggésben lévők igen jól jósolják ennek értékét. Például a hoh változót választva a legjobban a hx, clx, ohx változó (közel mindegyik 56 %-ban), míg két predictor esetén gyakorlatilag ezen változók mellé a phix-et érdemes választani, mellyel 88%-os hatékonyságot lehet elérni (5.7. és 5.8. ábra).

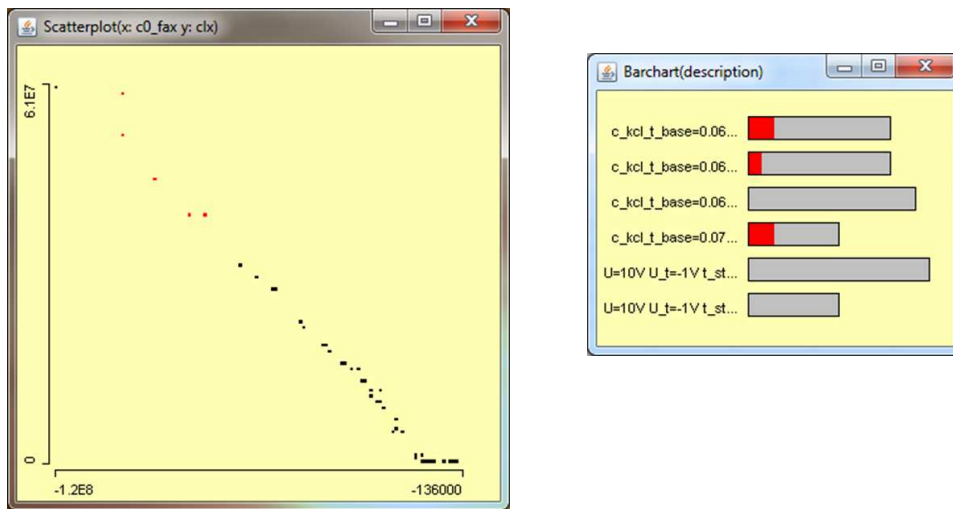
Amennyiben egy semmivel sem korreláló változót, pHx-et választjuk a predikció függő változójának, akkor egy független változó esetén nagyon rossz jóslást kapunk. Még a description változó bizonyult a legjobbnak, de ezzel is csak 22 %-ot lehet elérni (5.9. ábra). Két változó segítségével viszont kiváló, 96 %-os jóslási hatékonyság érhető el (5.10. ábra).

## Összefoglalás

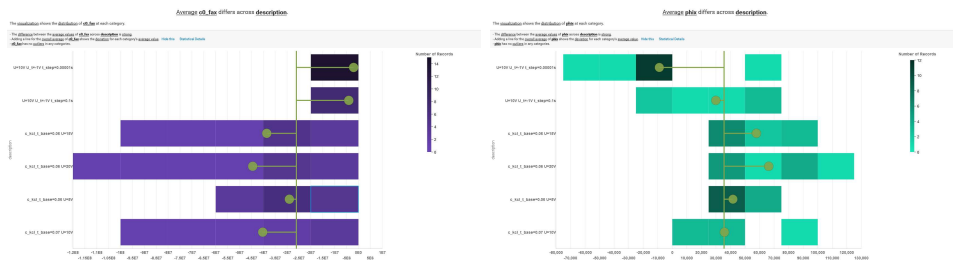
Alapvetően a háromféle módszerrel végzett adatfeltárás eredményei teljesen összhangban vannak egymással. Mindhárom esetben jó néhány változó között igen erős korrelációt, valamilyen függőséget tapasztaltunk, mely egyértelműen az adathalmaz redundanciájára utal.

A legfontosabb megállapítások a következők:

- A hx, ohx, kx, clx, c0\_fax és hoh változók között igen erős korreláció



5.5. ábra. A scatterplot-on a Watson által outlier-ként detektált néhány pont. Ezek abból származnak, hogy az adott szimulációs beállítás alulreprezentált.



(a)  $c0\_fax$  értéke szignifikánsan függ a (b)  $phix$  értéke szignifikánsan függ a szimulációs beállítástól

5.6. ábra. Leírók és a szimulációs beállítás közötti összefüggések

figyelhető meg.

- Egy outlier (adatfájl előállításánál) során valamilyen hibából származik) törlése után újabb korrelációk ( $phix$  gyengén korrelál  $hx$ ,  $ohx$ ,  $kx$ ,  $clx$ ,  $c0\_fax$ ,  $hoh$  és  $phix$  változókkal).
- Az egymással jól korreláló változók értékei egymás segítségével igen jól jósolhatók.
- Az adatfájl tartalmaz néhány változót ( $pHx$ ,  $pOHx$ ), mely gyakorlatilag semmivel sem hozható kapcsolatba.
- Az alacsony adatszám (néhol hiányzó adatok) miatt érdemes volna a későbbiekben hasonlóan generált (a kritikus zónában a lehetséges leírók szélsőértékei, melyek helyileg nem esnek teljesen egybe) jóval

What influences  $h_{oh}$ ?



5.7. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a  $h_{oh}$ .

több rekordot tartalmazó adatfájlt is előállítani, és azzal kvantitatív elemzést végezni.

### 5.2.2. Leírók lokálisan összefüggő értékeinek elemzése

A kiválasztott leírók értékeit, továbbá a differenciálegyenlet-rendszer változóinak (ezek rendre:  $h$ ,  $oh$ ,  $k$ ,  $cl$ ,  $c0\_fa$ ,  $\phi$ ) értékeit néhány szimulációs beállítás esetén jellemző időpillanatokban kimentettem. Az adatfájlban a szimulációs beállításra jellemző plusz változók, valamint a helykoordináta ( $x$ ). Továbbá generáltam egy `reaction_zone` nevű klasszifikáló változót, mely abban az esetben, ha az adott rekord a kritikus zónához tartozik 1, különben 0 értéket vesz fel. Attól függően, hogy a klasszifikáló változó milyen algoritmussal generálok, kétféle adathalmazt állítottam elő. Az egyikben a kritikus zónát jóval szélesebbnek, míg a másikban keskenyebbnek feltételeztem.

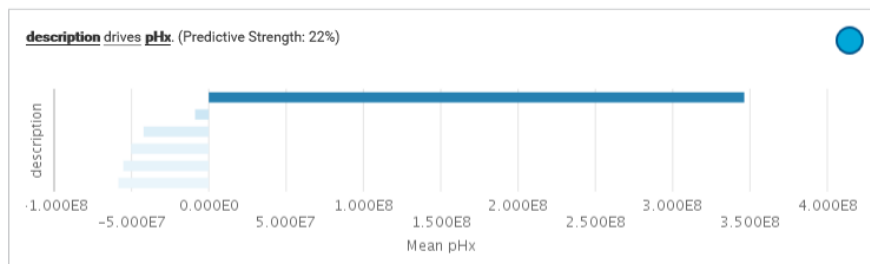
Az így előállított adatfájl kb. 260 000 rekordot tartalmaz. A Watson Analytics programmal való elemzéshez, mely csak 100 000 rekordot képes kezelni, ezt az adatfájlt mintavételezni kellett. Ebben az esetben úgy jártam el, hogy

What influences h<sub>oh</sub>?



5.8. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a h<sub>oh</sub>.

What influences pH<sub>x</sub>?

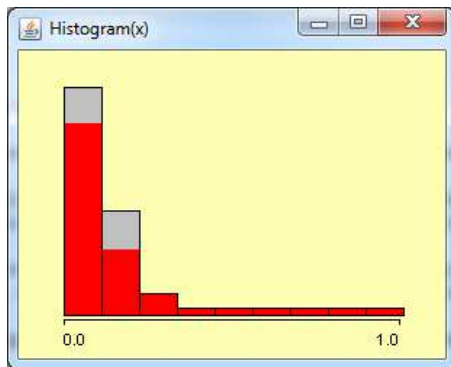


5.9. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a pH<sub>x</sub>.

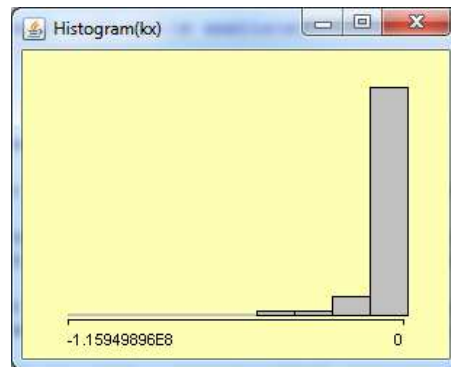
What influences pHx?



5.10. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a pHx.



(a) A  $x$  változó hisztogramja.



(b) A  $kx$  változó hisztogramja.

5.11. ábra

csak minden harmadik adatot hagytam meg. Ebben az esetben ez a lépés a mintavételezési törvény alapján gyakorlatilag információvesztés nélkül megtehető.

### Vizuális analízis

Az adatfájl a négy kiválasztott szimulációs beállítás függvényében mind-egyikre azonos számú rekordot tartalmaz.

Azon rekordok száma, mely az adott szimulációs beállítás során a kritikus zónához tartozik, abszolút túlereprezentált (5.11/a. ábra).

Az adatok a felrajzolt hisztogramok alapján nem normális eloszlásúak (5.11/b. ábra).

A parallel ábrázolásmódot alkalmazva (5.12. ábra) a leírók között sajnos semmilyen összefüggés nem állapítható meg. Ennek egyrészt az is az oka, hogy az adatfájl túl sok rekordot tartalmaz.

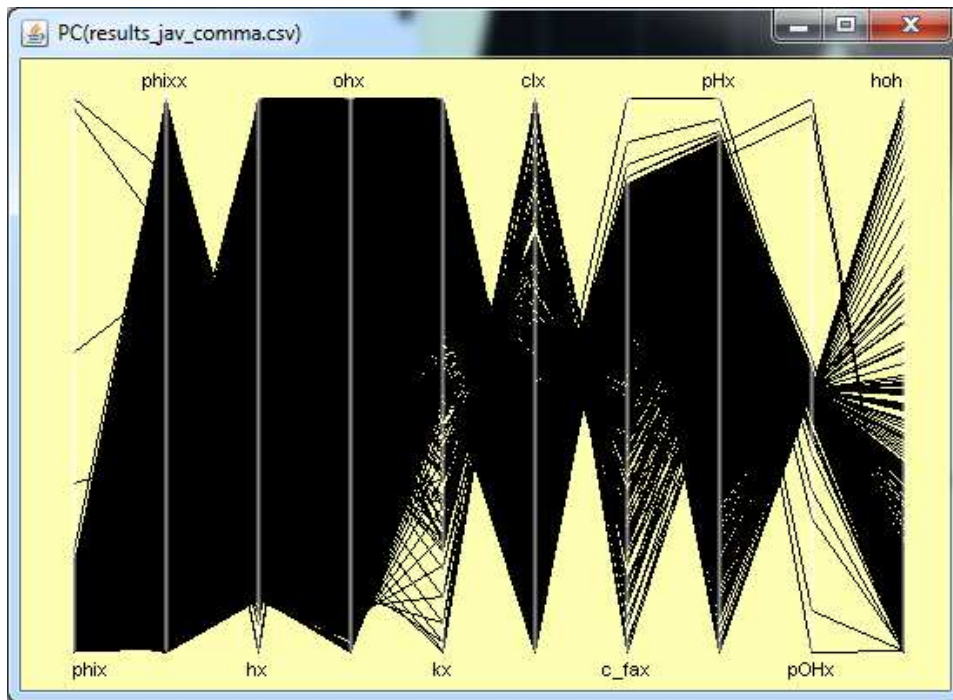
Az egyes leírók között számos outlier van (5.13. ábra). Nagy valószínűséggel ezek a kritikus zónából származó, majd annak detektálására felhasználandó szélsőértékek.

### Statisztikai módszerek

Az egyes változók átlagát, szórását, minimumát és maximumát a 7.4. táblázat tartalmazza.

Vizsgáltam, hogy az adatok normális eloszlásúak-e, ehhez szintén Kolmogorov-





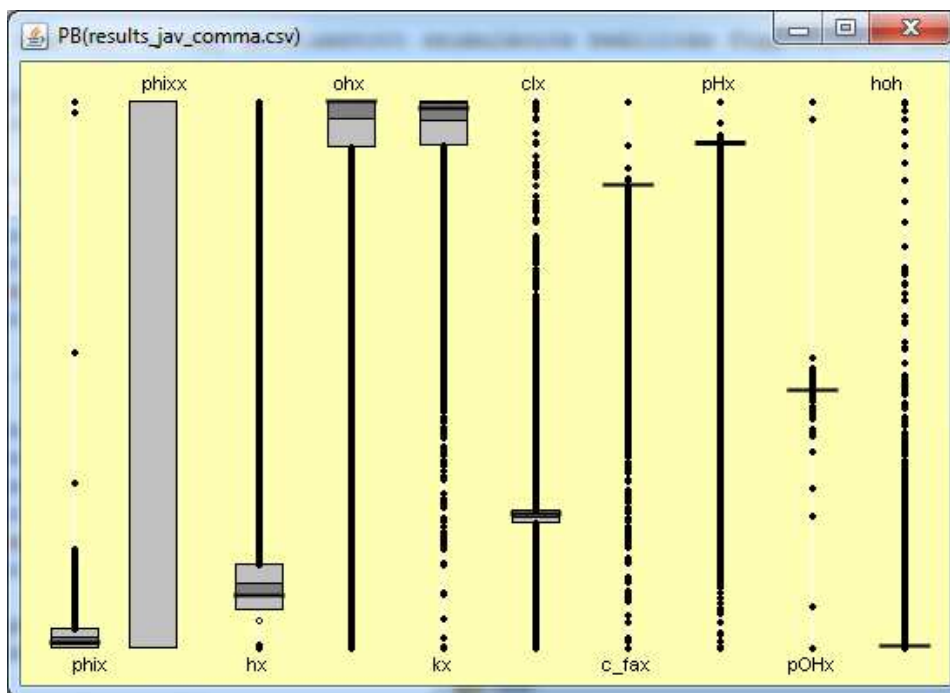
5.12. ábra. A lokálisan összefüggő leírók értékeinek parallel ábrázolása. (Parallel coordinates)

Smirnov tesztet végeztem. A statisztikai teszt eredménye (valamint vizuális analízis) alapján kijelenthető, hogy az adatok nem normális eloszlásúak.

A adatok (leírók ill. generált reaction\_zone klasszifikáló változó) korrelációs együtthatói (7.5. táblázat) viszonylag kicsik, így feltételezhető, hogy a kiválasztott leírók lokálisan összefüggő értékei között alig van valamilyen kapcsolat. Ennek ellenére a szoftver jó néhány korrelációt szignifikánsként jelölt meg.

Az egyes leírók alkalmazhatóságát a kritikus zóna helyének megállapítására **lineáris diszkriminancia-analízissel** is vizsgáltam [29]. A diszkriminancia-analízis egy klasszifikáló módszer, mely azt jelenti, hogy a függő változó kategorikus (pl. adott pont a kritikus zónához tartozik-e), míg a független változók folytonosak. A módszer lényege, hogy a független változók egy csoportjából (lineáris kombináció) olyan klasszifikáló függvényt szeretne készíteni az algoritmus, mely a függő változók alapján kialakított csoportokat minél jobban elkülöníti.

Sajnos az analízis mindkétféle klasszifikáció (szélesebb, szűkebb kritikus zóna feltételezés) esetén rosszul kondicionált mátrixokhoz vezetett (ilyen mátrixok esetén a hiba kiemelten nagy lehet, így a kapott eredményeket némi fenntar-



5.13. ábra. A lokálisan összefüggő leírók boxplot-ja.

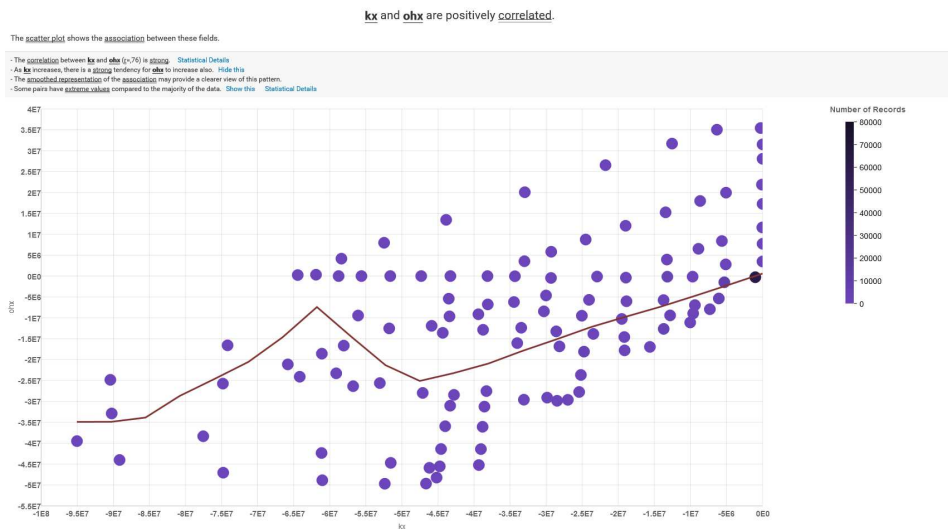
tással kell kezelni. ráadásul nagyon jól működő klasszifikáló függvényt nem is sikerült találni. Bár a diszkrimináló függvényekben hoh leíró jelentős súllyal szerepel.

### Watson Analytics

Mivel az előállított adatfájl nem csak a leírókat, hanem a differenciálegyenlet-rendszer megoldásait, mint plusz információkat is tartalmazza, így a *Watson Analytics* program az ezek ill. a leírók és megoldások közötti függőségeket találta meg (7.4. ábra), ezek nagyon általában semmilyen jelentéssel nem bírnak. A leírók közül egyedül a kx és ohx között talált (elég gyengének tekinthető) valamilyen kapcsolatot (5.14. ábra).

A lokálisan teljesen összefüggő leírók között (a korrelációs mátrixszal teljes összhangban) alig van bármilyen összefüggés.

Ezek alapján nem meglepő, hogy egy kiválasztott leírót (pl. hoh) függő változónak tekintve nem igazán sikerült megfelelő prediktorokat találni. Egy változóval nem is sikerült, kettővel is csak nagyon rossz (32 %-os) hatékonyságot sikerült elérni (5.15. ábra). (Itt meg kell jegyezni, mivel az adatfájl a megoldásokat és nem csak a leírókat tartalmazta, a független változók hal-



5.14. ábra. A Watson Analytics által feltárt asszociáció a lokálisan összefüggő kx és ohx leírók között.

mazát a Watson-nal pedig nem sikerült csökkentenem, ezért a potenciális prediktorok közé ezek is, nem csak a leírók bekerültek. Ebből egyet, a h-t meg is talált a szoftver.)

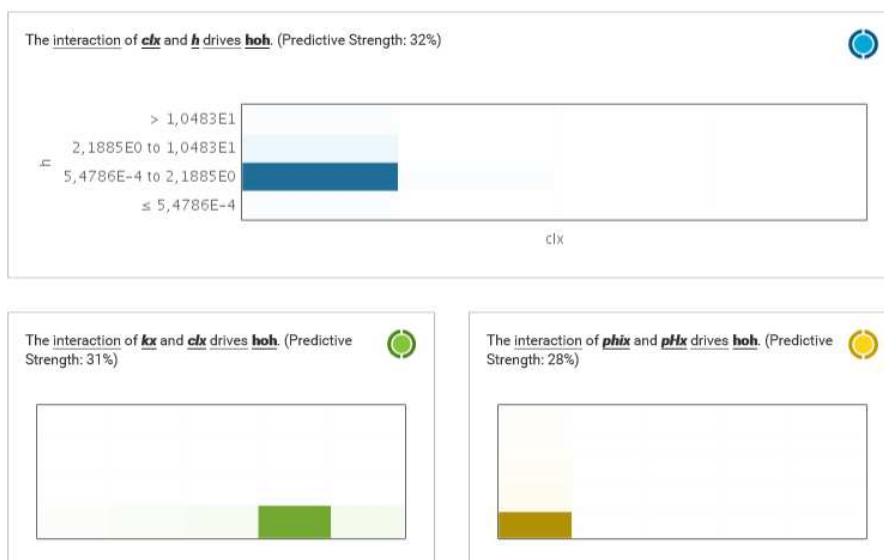
A kétféle módon generált `reaction_zone` változót (értéke kritikus zónához tartozó pontok esetén 1, különben 0) is kiválasztottam függő változónak, és vizsgáltam, hogy ennek értéke kiválasztott leírók, esetleg a megoldás alapján mennyire jól jósolható, és ez alapján mik lehetnek a kritikus zóna detektálására leginkább alkalmas függvények.

Amennyiben a kritikus zónához tartozónak tekintek igen sok pontot (hasonló szélességben, mint a már működő algoritmus esetén), akkor a kiválasztott leírók közül a hoh biztosítja a legjobb becslést, de ez is csak 15% (5.16. ábra). A hatékonyság több prediktor változó kiválasztásával sem javul számottevően.

Ha viszont a kritikus zónát jóval keskenyebbnek feltételezem ("tűskéket" még bőven fedi), akkor a predikciós hatékonyság sokat javul (5.17. és 5.18. ábra). A Watson Analytics ebben az esetben is a hoh-t találja legalkalmasabbnak a detektálásra (72 %), míg további egy független változóval (`c0_fax`) ez tovább javítható (83 %).

Ezek alapján kijelenthető, hogy a hoh leíró kiválóan alkalmas a reakciózóna helyzetének detektálására.

What influences hoh?



5.15. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a hoh.

## Összefoglalás

A háromféle megközelítéssel való adatelemzés eredményei nagyrészt összhangban vannak egymással. A lokálisan egy ponthoz tartozó leírók között nincs függőség, így ezek nem igazán hordoznak redundáns információt.

Ezen felül az adatelemzés eredményei azt mutatják, hogy az előzetesen kiválasztott leíró halmazból a hoh (kémiai reakcióval kapcsolatos faktor) a legalkalmasabb a kritikus zóna helyzetének monitorozására.

### 5.2.3. Hibafájlok elemzése

A MESH "kísérletekből" származó fájlokat a leírókkal, megoldással, a számított hibával és differenciával minden beállításra egyesítettem, melyből egy hatalmas, 12 GB-os, kb. 19 millió rekordot tartalmazó adatfájl, melynek elemzése több szempontból sem egyszerű feladat:

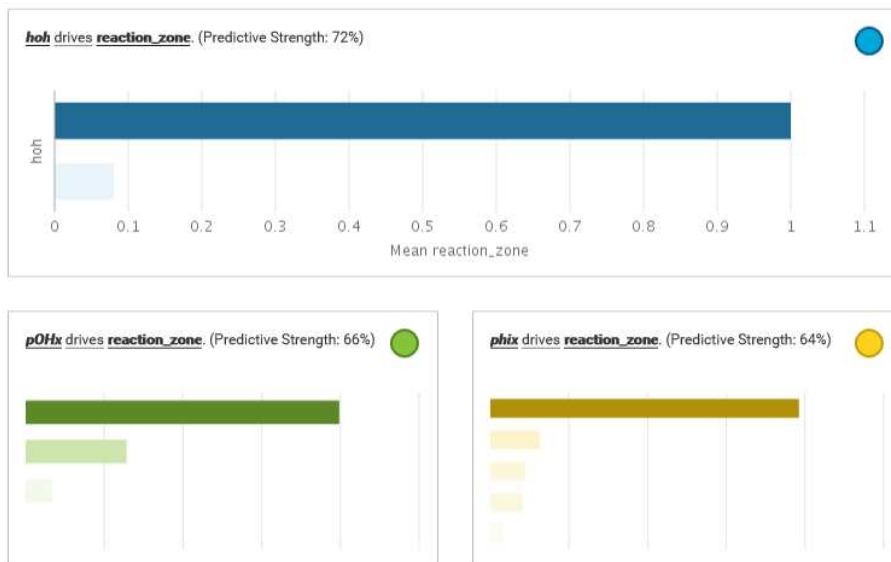
- Egyik, általam használt adatfeldolgozást segítő szoftver sem képes ennyi adattal elboldogulni. Ezért az adathalmazt mintavételezni kell.

What influences `reaction_zone`?



5.16. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a `reaction_zone` klasszifikáló változó, ahol széles lefedést feltételeztek.

What influences reaction\_zone?



5.17. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a reaction\_zone klasszifikáló változó, ahol keskeny lefedést feltételeztek.

What influences reaction\_zone?



5.18. ábra. Watson Analytics-szel készült predikció. A függőnek tekintett változó a reaction\_zone klasszifikáló változó, ahol keskeny lefedést feltételeztek.

- Ilyen mennyiségű adat reprezentatív mintavételezése sem triviális feladat.

Továbbá az adatfájlban található számított hibát tartalmazó változók függőségek felderítésére, valamint kvantitatív analízisre alkalmatlanok.

Mindenesetre a 19 millió rekordot tartalmazó adatfájlt sikerült (valószínűleg rossz mintavételezési stratégiával) feldolgozható méretűvé szűkíteni. Ennek előzetes feldolgozása semmilyen eredményre nem vezetett.

### 5.3. Javaslatok az adaptív algoritmus gyorsítására

A benchmark-ként használt algoritmus igen robusztusra lett készítve, hogy a konkrét szimulációk biztosan konvergáljanak. A feltétlenül szükségesnél a nagy felbontású zóna jóval szélesebb. A nagy felbontású zóna kiterjedését érdemes volna az adott szimulációs kísérlet dinamikájához illeszteni. Ugyanis a szimulációs beállítástól (mutációtól) függően a kritikus zóna kiterjedése nőhet és csökkenhet is.

Érdemes a drasztikus felbontásváltást elkerülni, helyette folytonosan változó sűrűségű MESH-t használni. Ezzel további gyorsulás érhető el, másrészt a MESH váltáskor fellép numerikus hibát is jobban kézben tarthatjuk.

A kritikus zóna helyzetének detektálására használt hoh változó kifejezetten alkalmasnak bizonyult az algoritmus monitorozó függvényének. A kémiai reakciót detektáló faktor adaptív algoritmusokban való alkalmazhatósága kiemelt jelentőséggel bírhat kémiai hullámok, térben mozgó reakciófrontok FEM modellezésében.



## 6. fejezet

# Összefoglalás, további tervek

### 6.1. A dolgozat tartalmának rövid összefoglalása

A dolgozat az adaptív MESH-es technikát, mint FEM szimulációkat gyorsító módszert vizsgálja. Legfontosabb eredményeim a következők:

- Bizonyítottam, hogy adaptív hálógenerálási technika alkalmazásával a szimulációs idő drasztikusan csökkenthető.
- Bemutattam, hogy adaptív MESH használatával a megoldás a kritikus zónában jóval pontosabb lehet, mint a "brutális erő" elvének, vagyis a rendszer egészén extrém nagy felbontásával való modellezése esetén.
- Adaptív hálógenerálási technikák tudatos tervezéséhez a szóba jöhető paraméterek, faktorok számának csökkentését, ezek között a redundancia és függőségek felderítését egy kiválasztott mintaalkalmazáson keresztül mutatom be.
- Ezen felül a konkrét adaptív algoritmus gyorsítási lehetőségeire teszek javaslatot.

A szimulációtervezés első fázisában a vizsgált folyamathoz illeszkedő jelölt monitorváltozók széles halmazából (cél a pontosság, robusztusság, megfigyelhetőség) megfelelő monitorváltozót (vagy változókat) kell kiválasztani. Ezen elemzés melléktermékként olyan, az algoritmustervezés során invariáns tulajdonságát is szolgáltatotta a változóknak, mely a tárgyi terület (fizikai kémia) szintjén további vizsgálatokat eredményezhet.

Munkám során alkalmam nyílt a három statisztikai megközelítés összehasonlítására is, melynek során a következő megállapításokra jutottam.

- Az elemzésekhez használt három metodika közül az EDA (exploratory data analysis) egy durva becslést szolgáltató feltáró elemzés, mely hatékonyan segíti a statisztikai módszerekkel kapott eredmények interpretálását.
- Az alkalmazott statisztika (Statistica szoftver) mellett ígéretesnek tűnik az *Algorithm as a Service* (AaaS) típusú rendszerek használata. Ezek igen hatékonyan tudnak működni, hiszen nagy méretű adathalmazról is igen rövid idő (néhány perc) alatt komplex összefüggéseket szolgáltatnak.
- A két számításon alapuló módszert egybevetve nem csak az időráfordításban jelenik meg jelentős különbség, hiszen a Watson Analytics még az ingyenes verziójával is a 100 000 rekordot tartalmazó adathalmaz kiértékelését néhány percen belül elvégezte. A Watson a méretkorlátos ingyenes verzióval, a Statistica a méretkorlát nélküli teljes verzióval futott. A Watson előnye, hogy egy távoli nagy teljesítményű cloudban fut, míg a Statistica teljesítményét behatárolja az, hogy lokális gépet használ.
- Kiemelendő ugyanakkor, hogy a Watson jelentős belső statisztikai műveltséggel rendelkezik, így mindazt a statisztikailag aktív tudást, amelyet a statisztikai elemzéshez használnom kellett, a Watson beépítve tartalmazza. Miután az eredmények megértéséhez így elsődlegesen a tárgyterületi szaktudásra van szükség, a módszer potenciális felhasználói köre is kiszélesedik, hiszen ezen megközelítésben a kiértékelési feladat szinte az eredmények tárgyterületi szintű redukálásra egyszerűsödik. (Ellenőrzésként viszont a Watson megadja az egzakt statisztikai támpontokat is.)

Összességében egy jövőbeli, numerikus algoritmus hangolási feladata felépíthető arra, hogy egy vizuális analízisen alapuló durva elemzést követően AaaS-sal automatizálva az algoritmus működését befolyásoló paraméterek hatásait felderítsük.

## 6.2. További terveink

Jelen megközelítés legnagyobb hibája, hogy a rendkívül erőforrás igényes extrém finom felbontású modell megoldását nem tekinthetjük hibátlannak. Amennyiben a bázisfüggvény együtthatók kinyerhetők lennének, nem is volna erre a szükség, a hibát az eredeti differenciálegyenletekbe való visszahelyettesítéssel mi is számíthatnánk.

Problémát jelent ugyanakkor az is, hogy a zártnak tekinthető numerikus

megoldó az aggregált hibaszámolásnál a szimuláció szempontjából kritikusnak nem tekinthető zónát túlsúlyozhatja. Másrészt a változók értékei igen sok nagyságrendet átfognak, így lehetnek olyan zónák, ahol egyes változók egyszerűen csak rosszul skálázódnak.

Erre jó megoldás lehet, ha az olyan rendszerek modellezését, melyek részenként más megközelítést igényelnek, részekre bontjuk (többféle domain definiálása). A részek alapvetően a közös határfeltételeken keresztül csatlakoznak egymáshoz.

Összességében ezek az elvek, bár egy kémiai példán keresztül lettek bemutatva, de alkalmazásuk igen sok problémaosztály vizsgálatára alkalmas lehet.

## 7. fejezet

# Függelék

### 7.1. Kémiai kisokos

Néhány, nem feltétlen hétköznapi kémiai fogalom pontos definíciója [24] alább található:

- **oldat:** Többkomponensű homogén rendszereket oldatoknak vagy elegyeknek nevezünk. Abban az esetben beszélünk oldatokról amikor az egyik komponens mennyisége (oldószer) nagy a másikéhoz, vagy másikkéhoz képest (oldott anyag). Oldatot készítünk amikor sózzuk a téztafőző vizet, az oldott anyag a nátriumklorid míg az oldószer a víz.
- **sav:** Savakról akkor beszélünk, mikor egy vegyület erősen poláros kötésben levő hidrogén atomot tartalmaz, amely vizes oldatban könnyen leválhat a molekuláról pozitív ion ( $H^+$ ) formában. Az ilyen vegyületeknek savanyú a kémhatása, pH értékük 7-es alatti. Tipikus példája a sósav (HCl).
- **bázis:** Bázisok (vagy lúgok) olyan vegyületek, melyek szinten vizes oldatban hidroxidionokat ( $OH^-$ ) képeznek, miközben a molekulából egy pozitív ion, kation képződik. Ezen vegyületeknek bázikus a kémhatás, pH értékük 7-es feletti. Ilyen például a KOH, vagy NaOH (nátronlúg).
- **ion:** Bizonyos atomokból könnyen távolíthatóan el elektronok, mások könnyen vehetnek fel extra elektronokat. Ezáltal az atom eredeti semlegessége megszűnik, pozitív illetve negatív ionok keletkeznek. Ezek sokszor jól oldódnak vízben.
- **diffúzió:** A diffúzió egy anyagáramlási jelenség, melynek hajtóereje a kémiai potenciálkülönbség. Az anyagáramlás sebessége a kémiai poten-

ciálkülönbség gradienssel arányos és ezzel ellentétes irányú. A leggyakoribb oka a kémiai potenciálkülönbség kialakulásának a koncentrációkülönbség, mint amikor citromot csöppentünk a teába. Ha nem keverjük meg a teát, a citrom akkor is egyenletesen eloszlik az italban a diffúzió hatására.

- **detektor:** Detektornak nevezzük az olyan érzékelőt vagy szenzort amely a merendő tulajdonságtól függő jelet szolgáltat.
- **analitikai kémia:** A kémiának azon ága amely a különböző atomok és molekulák minőségi és mennyiségi meghatározásával foglalkozik.
- **gél:**
- **reakció:** Olyan átalakulás mely során kémiai kötések szakadnak fel és új kémiai kötések jönnek létre.
- **só:** Az olyan vegyületeket, amelyek egy sav és egy bázis kölcsönhatásából jönnek létre, sóknak nevezzük. A só a savból származó anionból és a bázisból származó kationból áll. A legismertebb ilyen vegyület a konyhasó, nátriumklorid, amely egy klorid aniont és egy nátrium kationt tartalmaz.

## 7.2. A szimulációkhoz felhasznált adatok

A számításokhoz használt anyagi állandók értékeit (7.1. táblázat) a korábbi kutatásokból [10] és referenciaadatokból [20] vettem.

Gél hossza	$L$	1 mm
Hőmérséklet	$T$	298,15 K (= 25 °C)
Fixált töltések koncentrációja	$c_{\text{fix}}$	$4 \cdot 10^{-3}$ M
Víz ionszorzata	$K_v$	$10^{-14}$ M <sup>2</sup>
Fixált töltés savi disszociációs állandója	$K_{\text{fix}}$	$10^{-4}$ M <sup>2</sup>
Diffúziós állandók (vízben)	$D_{\text{H}^+}$	$9,31 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
	$D_{\text{OH}^-}$	$5,28 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
	$D_{\text{K}^+}$	$1,96 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
	$D_{\text{Cl}^-}$	$2,04 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
	$D_{\text{Na}^+}$	$1,33 \cdot 10^{-9} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$
Reakciósebességi állandók	$k_v$	$1,3 \cdot 10^{11} \frac{1}{\text{M} \cdot \text{s}}$
	$k_{\text{fix}}$	$6 \cdot 10^9 \frac{1}{\text{M} \cdot \text{s}}$
Dielektromos állandó	$\varepsilon$	$6,954 \cdot 10^{-10} \frac{\text{As}}{\text{Vm}}$

7.1. táblázat. A szimulációkban felhasznált állandók értékei

## 7.3. További ábrák, táblázatok

### 7.3.1. Leírók szélsőértékének elemzése

### 7.3.2. Leírók lokálisan összefüggő értékeinek elemzése

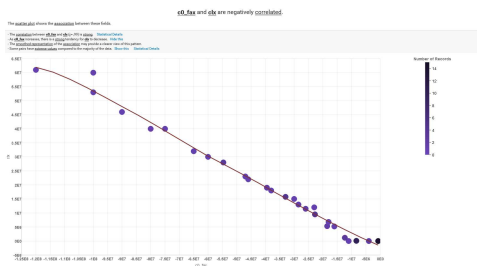
	N	Átlag	Minimum	Maximum	Szórás
h_oh	64	6,436E-03	1,950E-08	8,40E-02	1,49E-02
phix	64	4,520E+04	-6,45E+04	6,50E+05	8,51E+04
phixx	63	1,175E+13	-5,30E+08	7,00E+14	8,81E+13
hx	64	4,183E+06	2,50E+04	3,80E+07	7,49E+06
ohx	64	-7,588E+06	-6,50E+07	-5,18E+05	1,31E+07
kx	58	-2,349E+07	-1,20E+08	-5,18E+05	2,53E+07
clx	64	1,173E+07	0,00E+00	6,10E+07	1,57E+07
c0_fax	64	-2,608E+07	-1,20E+08	-1,36E+05	2,82E+07
pHx	64	2,484E+06	-1,20E+08	2,00E+09	2,63E+08
pOHx	61	6,484E+07	-4,50E+09	5,50E+09	9,24E+08

7.2. táblázat. A kiválasztott leírók (lokálisan nem összefüggő értékek) átlaga, szórása, minimuma, maximuma és elemszáma.

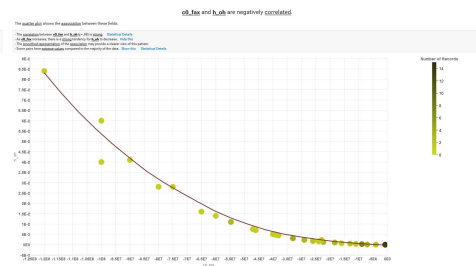
	h_oh	phix	phixx	hx	ohx	kx	clx	c0_fax	pHx	pOHx
h_oh	1,0000	0,1188	-0,05290	<b>0,9854</b>	<b>-0,9856</b>	<b>-0,9394</b>	<b>0,8715</b>	<b>-0,8778</b>	-0,1429	0,0018
phix	0,1188	1,0000	<b>0,9175</b>	0,1010	-0,0997	-0,2390	0,0340	-0,0798	-0,0149	-0,0058
phixx	-0,0530	<b>0,9175</b>	1,0000	-0,0682	0,0690	-0,0590	-0,1093	0,0932	-0,0153	-0,0072
hx	<b>0,9854</b>	0,1010	-0,0682	1,0000	<b>-0,9996</b>	<b>-0,9746</b>	<b>0,9386</b>	<b>-0,9426</b>	-0,1705	-0,0057
ohx	<b>-0,9856</b>	-0,0997	0,0691	<b>-0,9996</b>	1,0000	<b>0,9737</b>	<b>-0,9375</b>	<b>0,9411</b>	0,1715	0,0085
kx	<b>-0,9394</b>	-0,2390	-0,0591	<b>-0,9746</b>	<b>0,9737</b>	1,0000	<b>-0,9578</b>	<b>0,9707</b>	0,1949	0,0056
clx	<b>0,8715</b>	0,0340	-0,1093	<b>0,9386</b>	<b>-0,9375</b>	<b>-0,9578</b>	1,0000	<b>-0,9945</b>	-0,2226	-0,0090
c0_fax	<b>-0,8778</b>	-0,0798	0,0932	<b>-0,9426</b>	<b>0,9411</b>	<b>0,9707</b>	<b>-0,9945</b>	1,0000	0,2201	0,0038
pHx	-0,1429	-0,0149	-0,0153	-0,1705	0,1715	0,1949	-0,2226	0,2201	1,0000	-0,0087
pOHx	0,0018	-0,0058	-0,0072	-0,0057	0,0085	0,0056	-0,0090	0,0038	-0,0087	1,0000

7.3. táblázat. A kiválasztott leírók (lokálisan nem összefüggő értékek) korrelációs mátrixa. A korrelációs mátrix számításakor azon adat-sorok, ahol valamilyen adat hiányzott, ki lett törölve. A kiemelt korrelációk tekinthetők szignifikánsnak.

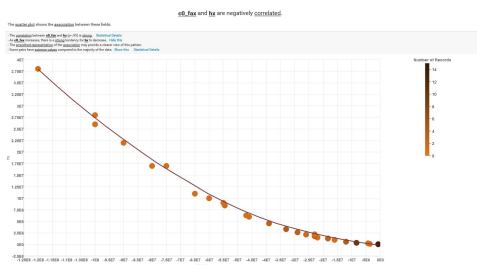




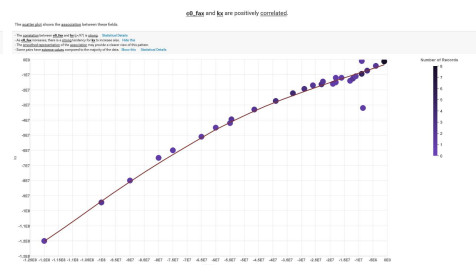
(a)  $c0\_fax - clx$  scatterplot



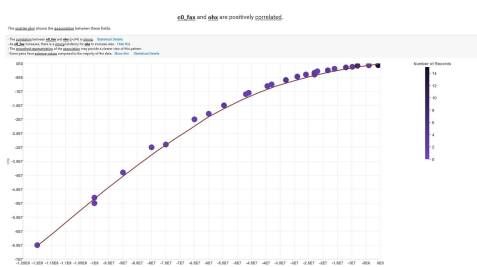
(b)  $c0\_fax - hoh$  scatterplot



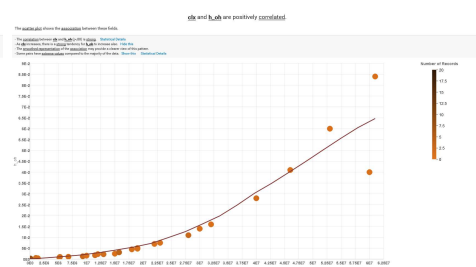
(c)  $c0\_fax - hx$  scatterplot



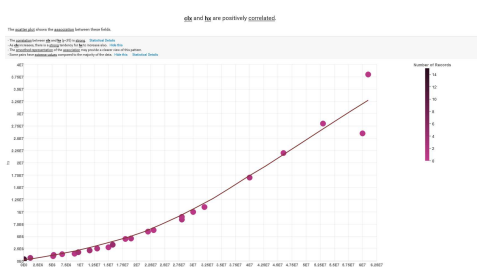
(d)  $c0\_fax - kx$  scatterplot



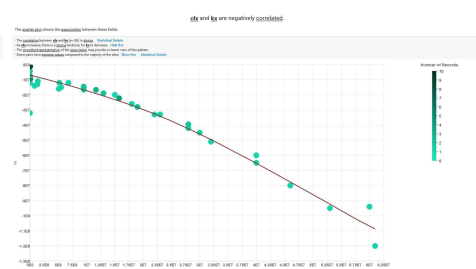
(e)  $c0\_fax - ohx$  scatterplot



(f)  $clx - hoh$  scatterplot

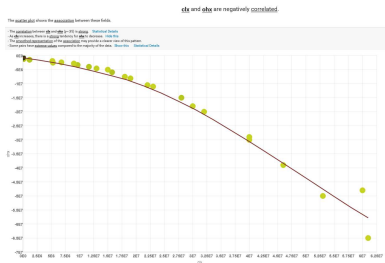


(g)  $clx - hx$  scatterplot

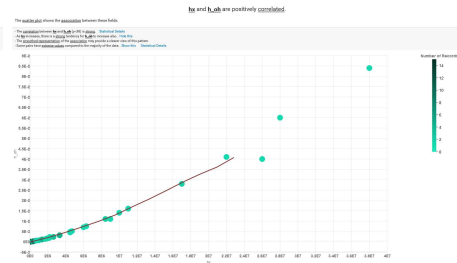


(h)  $clx - kx$  scatterplot

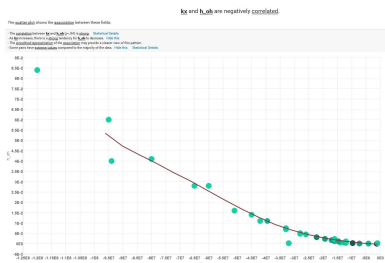
7.1. ábra. Egymással jól korreláló változók (leírók kritiku zónabeli szélsőértékei) a teljes adathalmazban 1.



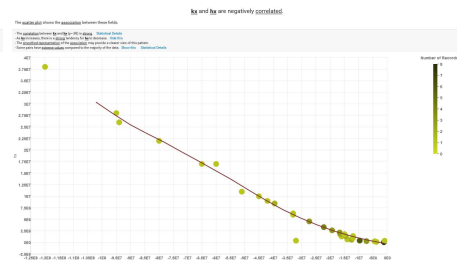
(a)  $clx - ohx$  scatterplot



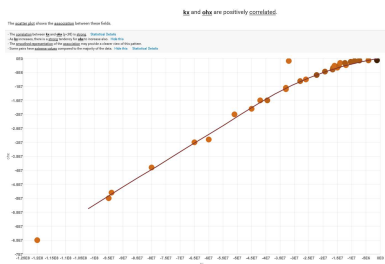
(b)  $hx - hoh$  scatterplot



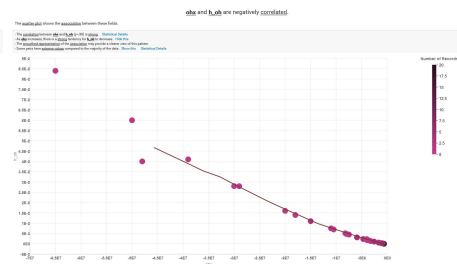
(c)  $kx - hoh$  scatterplot



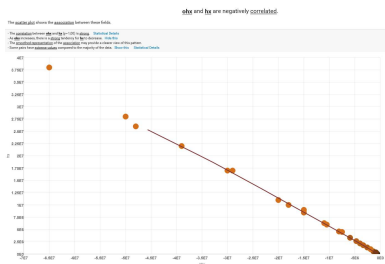
(d)  $kx - hx$  scatterplot



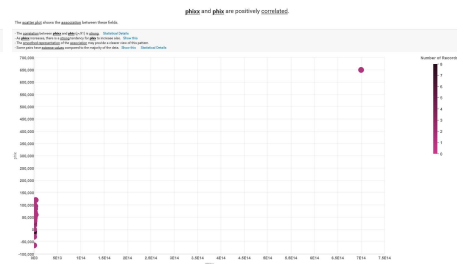
(e)  $kx - ohx$  scatterplot



(f)  $ohx - hoh$  scatterplot

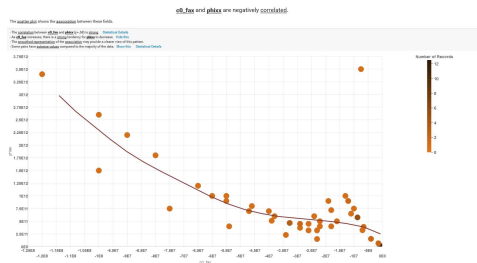


(g)  $ohx - hx$  scatterplot

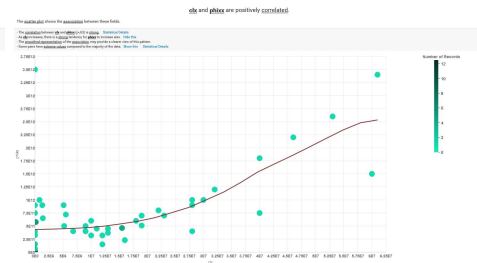


(h)  $phixx - phix$  scatterplot

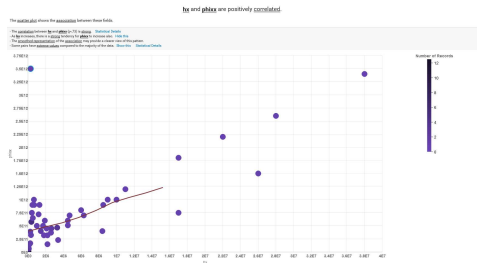
7.2. ábra. Egymással jól korreláló változók (leírók kritiku zónabeli szélsőértékei) a teljes adathalmazban 2.



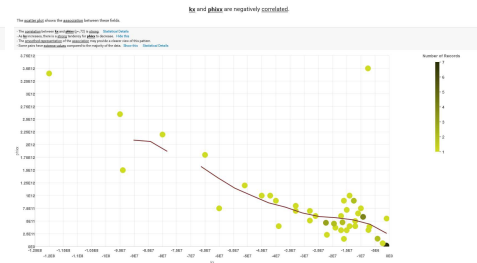
(a)  $c\_fax - phixx$  scatterplot



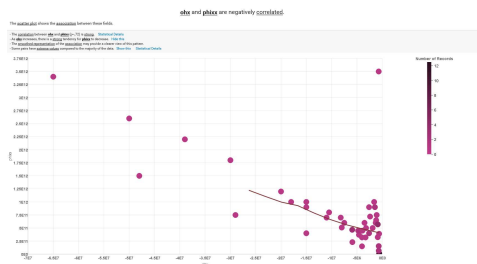
(b)  $clx - phixx$  scatterplot



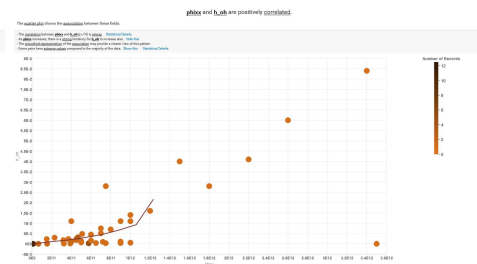
(c)  $hx - phixx$  scatterplot



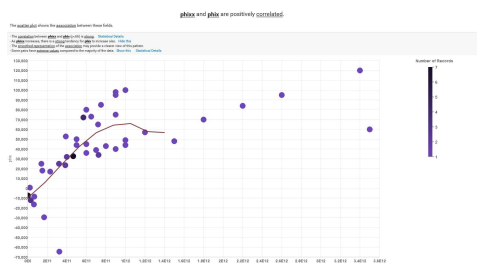
(d)  $kx - phixx$  scatterplot



(e)  $ohx - phixx$  scatterplot



(f)  $phixx - hoh$  scatterplot



(g)  $phixx - phix$  scatterplot

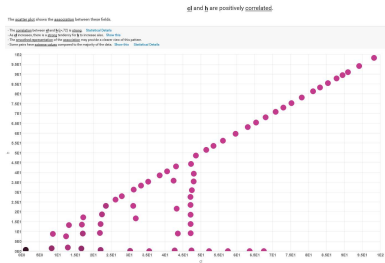
7.3. ábra. Egy outlier törlése után megjelenő új korrelációk.

	N	Átlag	Minimum	Maximum	Szórás
x	261570	1,451E-01	0,00E+00	1,00E+00	1,99E-01
h	261570	7,549E+00	1,01E-10	1,00E+02	1,60E+01
oh	261570	7,000E+00	-3,86E-03	9,88E+01	1,56E+01
k	261570	1,866E+01	-3,40E-18	1,72E+02	2,78E+01
cl	261570	1,727E+01	1,18E-20	10,00E+01	1,78E+01
c_fa	261570	1,934E+00	4,00E-03	4,00E+00	1,91E+00
phi	261570	1,173E+00	0,00E+00	2,00E+01	3,49E+00
phix	261570	1,000E+04	4,47E+01	6,62E+05	1,08E+04
phixx	261570	8,595E+09	-2,95E+12	6,95E+14	1,83E+12
hx	261570	9,034E+05	-3,88E+06	3,75E+07	2,33E+06
ohx	261570	-2,522E+06	-6,503E+07	6,20E+04	5,87E+06
kx	261570	-4,300E+06	-1,16E+08	3,26E-13	7,87E+06
clx	261570	-5,501E+05	-1,96E+07	6,11E+07	2,51E+06
c_fax	261570	-3,239E+05	-1,16E+08	2,12E+07	2,64E+06
pHx	261570	-8,518E+05	-1,19E+08	9,90E+06	4,76E+06
pOHx	261570	8,288E+05	-5,22E+09	5,89E+09	2,28E+07
hoh	261570	3,825E-05	8,32E-11	8,39E-02	9,20E-04
U	261570	1,228E+01	5,00E+00	2,00E+01	5,80E+00
t	261570	1,930E+01	0,00E+00	1,50E+02	4,07E+01
reaction_zone	261570	8,51E-01	0,00E+00	1,00E+00	3,56E-01

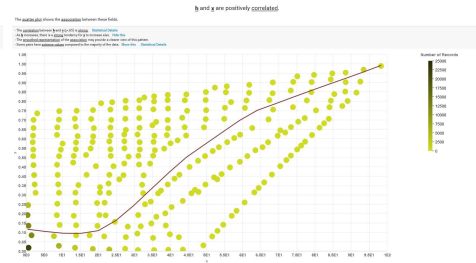
7.4. táblázat. A lokálisan összefüggő leírók (mely még plusz oszlopokat is tartalmaz, amely a szimulációs beállításra utal, ill. a rendszer változóinak megoldása) elemszáma, átlaga, szórása, minimuma valamint maximuma

	phix	phixx	hx	ohx	kx	clx	c_fax	pHx	pOHx	hoh	reaction_zone
phix	1,000	<b>0,180</b>	<b>0,147</b>	<b>0,029</b>	<b>-0,071</b>	<b>0,151</b>	<b>-0,276</b>	<b>-0,119</b>	<b>0,042</b>	<b>0,145</b>	<b>-0,100</b>
phixx	<b>0,180</b>	1,000	<b>-0,010</b>	-0,0011	<b>-0,011</b>	-0,000	<b>0,024</b>	-0,000	-0,002	<b>-0,008</b>	0,002
hx	<b>0,147</b>	<b>-0,010</b>	1,000	<b>0,155</b>	<b>-0,168</b>	<b>0,171</b>	<b>-0,123</b>	<b>-0,026</b>	0,054	<b>0,141</b>	<b>0,146</b>
ohx	<b>0,0288</b>	-0,001	<b>0,155</b>	1,000	<b>0,922</b>	<b>0,636</b>	<b>0,057</b>	<b>0,186</b>	0,000	<b>-0,091</b>	<b>-0,174</b>
kx	<b>-0,071</b>	<b>-0,011</b>	<b>-0,168</b>	<b>0,922</b>	1,000	<b>0,562</b>	<b>0,246</b>	<b>0,186</b>	<b>-0,032</b>	<b>-0,223</b>	<b>-0,222</b>
clx	<b>0,151</b>	-0,000	<b>0,171</b>	<b>0,636</b>	<b>0,562</b>	1,000	<b>-0,532</b>	<b>-0,247</b>	<b>0,053</b>	<b>0,410</b>	<b>-0,099</b>
c_fax	<b>-0,276</b>	<b>0,024</b>	<b>-0,122</b>	<b>0,057</b>	<b>0,246</b>	<b>-0,532</b>	1,000	<b>0,354</b>	<b>-0,097</b>	<b>-0,721</b>	<b>-0,051</b>
pHx	<b>-0,119</b>	-0,000	<b>-0,026</b>	<b>0,186</b>	<b>0,186</b>	<b>-0,247</b>	<b>0,354</b>	1,000	<b>-0,050</b>	<b>-0,242</b>	<b>-0,075</b>
pOHx	<b>0,042</b>	-0,002	<b>0,054</b>	0,000	<b>-0,032</b>	<b>0,053</b>	<b>-0,097</b>	<b>-0,050</b>	1,000	<b>0,051</b>	<b>0,015</b>
hoh	<b>0,145</b>	<b>-0,008</b>	<b>0,141</b>	<b>-0,091</b>	<b>-0,223</b>	<b>0,450</b>	<b>-0,721</b>	<b>-0,242</b>	<b>0,051</b>	1,000	<b>0,017</b>
reaction_zone	<b>-0,100</b>	0,002	<b>0,146</b>	<b>-0,174</b>	<b>-0,222</b>	<b>-0,099</b>	<b>-0,051</b>	<b>-0,075</b>	<b>0,015</b>	<b>0,017</b>	1,000

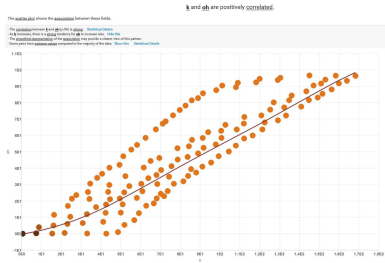
7.5. táblázat. A lokálisan összefüggő leírók korrelációs mátrixa. A kiemelt korrelációk tekinthetők szignifikánsnak.



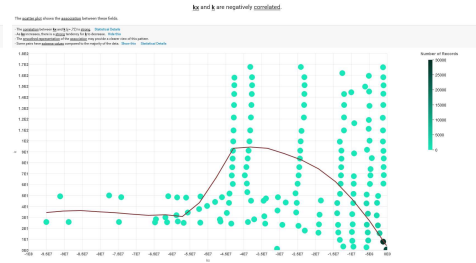
(a)  $cl - h$  scatterplot



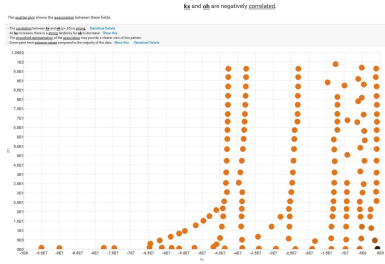
(b)  $h - x$  scatterplot



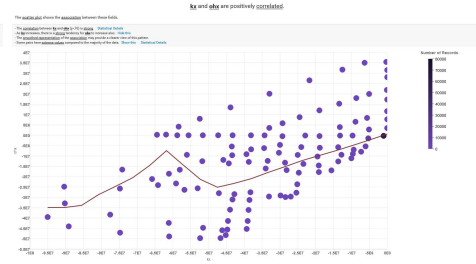
(c)  $k - oh$  scatterplot



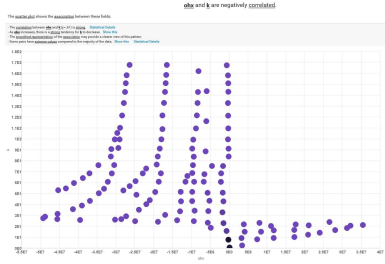
(d)  $kx - k$  scatterplot



(e)  $kx - oh$  scatterplot



(f)  $kx - ohx$  scatterplot



(g)  $ohx - k$  scatterplot

7.4. ábra. Lokálisan egybefüggő változók közötti korrelációk.

# Irodalomjegyzék

- [1] Z. Noszticzius, A. Schubert: Electrolyte diode I. Analysis of isothermal transport processes in the interfaces of aqueous solution of acids and bases, *Periodica Polytechnica*, **17**, pp. 165-177 (1973).
- [2] A. Schubert, Z. Noszticzius: Electrolyte diode – an experimental study, Part II, *Periodica Polytechnica*, **21**, pp. 279-283 (1977).
- [3] L. Hegedűs, N. Kirschner, M. Wittmann, P. L. Simon, Z. Noszticzius, T. Amemiya, T. Ohmori and T. Yamaguchi: Nonlinear effects of electrolyte diodes and transistors in a polymer gel medium, *CHAOS*, **9**, 283 (1999).
- [4] N. Kirschner, L. Hegedűs, M. Wittmann and Z. Noszticzius: Nonlinear salt-effect in an electrolyte diode. Theory and experiments, *ACH Models in Chemistry*, **135**, pp. 279-286 (1998).
- [5] L. Roszol, A. Várnai, B. Lorántfy, Z. Noszticzius and M. Wittmann: Negative salt effect in an acid-base diode. Simulations and experiments, *The Journal of Chemical Physics*, **132**, 064902 (2010).
- [6] M. Svoboda, Z. Slouka, J. Lindner, D. Šnita: Direct evidence of concentration and potential profiles in the electrolyte diode, *Chemical Engineering Journal*, **135**, S203 (2008).
- [7] K. Iván, N. Kirschner, M. Wittmann, P. Simon, V. Jakab, Z. Noszticzius, J. H. Merkin, S. K. Scott: Direct evidence for fixed ionic groups in the hydrogel of an electrolyte diode, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **4**, pp. 1339-1347 (2002).
- [8] L. Hegedűs, N. Kirschner, M. Wittmann and Z. Noszticzius: Electrolyte transistors: Ionic reaction diffusion system with amplifying properties, *J. Phys. Chem. A* **102**, 6491 (1998).
- [9] K. Iván, P. Simon, M. Wittmann, Z. Noszticzius: Electrolyte diodes with weak acids and bases I. Theory and analytical approximation, *The Journal of Chemical Physics*, **123**, 164509-1-9 (2005).

- [10] K. Iván, M. Wittmann, P. Simon, Z. Noszticzius, D. Šnita: Electrolyte diodes with weak acids and bases II. Numerical model calculations and experiments, *The Journal of Chemical Physics*, **123**, 164510-1-7 (2005).
- [11] L. Hegedűs, M. Wittmann, N. Kirschner and Z. Noszticzius: Reaction, diffusion, electric conduction and determination of fixed ions in a hydrogel, *Prog. Colloid Polym. Sci.*, **102**, 101 (1996).
- [12] J. H. Merkin, P. L. Simon and Z. Noszticzius: Analysis of the electrolyte diode. Electro-diffusion and chemical reaction within a hydrogel reactor, *J. Math. Chem.*, **28**, pp. 43-58 (2000).
- [13] J. Lindner, D. Šnita and M. Marek: Modelling of ionic systems with a narrow acid-base boundary, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **4**, 1348-1354 (2002).
- [14] D. Šnita, M. Paces, J. Lindner, J. Kosek and M. Marek: Nonlinear behaviour of simple ionic systems in hydrogel in an electric field, *Faraday Discuss* **120**, 53-56 (2002).
- [15] K. Iván, M. Wittmann, P. Simon, Z. Noszticzius, J. Vollmer: Electrolyte diodes and hydrogels. Determination of concentration and pK value of fixed acidic groups in a weakly charged hydrogel, *Physical Review E*, **70**, pp. 061402-1-11 (2004).
- [16] L. Hegedűs, Z. Noszticzius, Á. Papp, A. Schubert and M. Wittmann: Polarization phenomena in hydrogel membranes. Experimental realization of an electrolyte diode, *ACH Models in Chemistry*, **132**, 207 (1995).
- [17] M. Příbyl, D. Šnita and M. Kubíček: Adaptive mesh simulations of ionic systems in microcapillaries based on the estimation of transport times, *Computers and Chemical Engineering*, **30**, pp. 674-685 (2006).
- [18] Comsol Multiphysics Reference Guide.
- [19] L. Roszol, T. Lawson, V. Koncz, Z. Noszticzius, M. Wittmann, T. Sarkadi and P. Koppa: Micropatterned Polyvinyl Butyral Membrane for Acid-Base Diodes, *Journal of Physical Chemistry B*, **114** (43), pp 13718-13725 (2010).
- [20] Yizhak Marcus: Ion properties, Marcel Dekker (1997).
- [21] I. Farmaga, P. Shmigelsky, P. Spiewak, L. Ciupinski: Evaluation of Computational Complexity of Finite Element Analysis, *11th International Conference The Experience of Designing and Application of CAD Systems in Microelectronics (CADSM)* (2011).
- [22] William B. J. Zimmerman: Multiphysics Modelling with Finite Element



- Methods, ISBN-10: 9812568433 (2006).
- [23] Koncz Viktória: Sav-bázis diódák időfejlődésének modellezése c. diplomamunka (2012).
- [24] Veszprémi Tamás: Általános kémia (2008).
- [25] H. M. Antia: Numerical methods for scientists and engineers, ISBN 3-7643-6715-6 (2002).
- [26] Mark S. Gockenbach: Understanding and Implementing the Finite Element Method, ISBN 0-89871-614-4 (2006).
- [27] J. N. Reddy: An introduction to Nonlinear Finite Element Analysis, ISBN 978-0-19-852529-5 (2004).
- [28] CH. Schwab:  $p$ - and  $hp$ -Finite Element Methods, ISBN 0 19 850390 3 (1998).
- [29] Horvai György: Sokváltozós adatelemzés (Kemometria), ISBN 963 19 2114 X (2001).
- [30] Martin Theus, Simon Urbanek: Interactive Graphics for Data Analysis, ISBN 978-1-58488-594-8 (2008).
- [31] Rózsa Pál: Bevezetés a mátrixelméletbe, ISBN 978 963 279 028 2 (2009).
- [32] <https://www.comsol.com/>
- [33] J. Martínez-Frutos, P. J. Martínez-Castejón, D. Herrero-Pérez: Fine-grained GPU implementation of Assembly-Free Iterative Solver for Finite Element Problems, *Computers & Structures*, **157**, pp. 9-18 (2015).
- [34] D. Komatitsch, G. Erlebacher, D. Göddeke, D. Michéa: High-order finite-element seismic wave propagation modeling with MPI on a large GPU cluster, *Journal of Computational Physics*, **229**, pp. 7692–7714 (2010).
- [35] T. J. Lehman: OptimalGrid: middleware for automatic deployment of distributed FEM problems on an Internet-based computing grid, *IEEE International Conference on Cluster Computing*, ISBN 0-7695-2066-9 (2003).
- [36] W. Huang, Y. Ren and R. D. Russell: Moving Mesh Partial Differential Equations (MMPDES) Based on the Equidistribution Principle, *SIAM Journal of Numerical Analysis*, **31**, pp. 709–730 (1994).