

# Szakdolgozat

## Üzemanyagcellák matematikai modellezése

Városi Kristóf

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Matematika BSc

Elemző szakirány

2009



Témavezetők:

Dr. Faragó István

Tanszékvezető egyetemi docens

Szabó Tamás

PhD hallgató

Eötvös Loránd Tudományegyetem

Természettudományi Kar

Matematikai Intézet

Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék

# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>3</b>
<b>2. Üzemanyagcellák - történelmi áttekintés</b>	<b>5</b>
<b>3. Üzemanyagcellák - fizikai modell</b>	<b>8</b>
<b>4. Üzemanyagcellák - matematikai modell</b>	<b>12</b>
4.1. Állandó vezetési együtthatós modell . . . . .	13
4.1.1. Modellépítés . . . . .	13
4.1.2. Kanonikus alak . . . . .	19
4.2. Idő- és helyfüggő vezetési együtthatós modell . . . . .	20
4.3. Az állandó-, valamint az idő-, és helyfüggő modellek kapcsolata	24
<b>5. Adekvát numerikus algoritmus kiválasztása</b>	<b>26</b>
5.1. A rendszer vizsgálata . . . . .	26
5.2. 1. megközelítés - IMEX-módszer . . . . .	28
5.3. 2. megközelítés - IMEX- $\vartheta$ -módszer . . . . .	29
5.4. Az algoritmus - Gauss-, vagy inga-módszer . . . . .	30
5.5. A megoldhatóság kérdése . . . . .	32
<b>6. Összefoglalás</b>	<b>37</b>

# 1. fejezet

## Bevezetés

Akár azt is hihetnénk, hogy minket nem érintenek a környezetszennyezéssel kapcsolatos kérdések, de elég ha körülnézünk: Budapesten, ha valaki sportolni akar, vagy edzőterembe megy vagy a Margit-szigetre, de mindenképpen zöldövezetet keres. A vidékiek - mint jómagam is - megdöbbentő különbséget éreznek a vidéki és a fővárosi levegő tisztasága között. Még Budapesten belül is érezhető ez az óriási különbség, gondoljunk csak a Margit-hídra és a Margit-szigetre, illetve a Moszkva térre és a János-hegyre. Mindenki látja, hogy itthon, egy ilyen kicsi, kevésbé iparosodott országban is fejtörést okoz a levegő minőségének javítása - de még csak a szinten tartása is. Nem csoda tehát, hogy a világ károsanyag kibocsátásának 50 százalékát adó két országban - U.S.A. és Kína - ennek megoldása sürgető fontosságúvá vált.

Ha mindez még nem győzött volna meg mindenkit a fosszilis üzemanyagokról a környezetbarát, megújuló, vagy részben megújuló energiahordozókra való átállásáról, akkor az ugyancsak egyre gyakrabban elhangzó energiaválság szó minden kételyt eloszlathat.

Napjaink egyik sokat vitatott elmélete a globális felmelegedés. Jóllehet nem magát a fogalmat vonják kétségbe hanem azt, hogy egyáltalán van-e elég (fosszilis) energiaforrás ahhoz, hogy a kutatók által megjósolt, beláthatatlan következményekkel járó károk egyáltalán bekövetkezzenek. Persze kérdéses az is, hogy egyáltalán az emberiség okozza-e a globális felmelegedést, ám a

környezetvédelem fontosságát ez nem enyhíti.

A 2008-as év elején fedezték fel Dél-Amerika eddigi legnagyobb kőolaj-, és földgáz lelőhelyét, amely a világ lelőhelyeinek "toplistáján" a 18. helyet foglalja el, készleteit tekintve. Ám még egy ilyen óriási lelőhely teljes "kifacsarása" esetén is, a kinyert üzemanyag mindösszesen 25-35 évre elegendő csak Dél-Amerikának. Ha ehhez még hozzávesszük azt, hogy a világ kevésbé iparosodott, elmaradottabb országai találhatóak a kontinensen, akkor kérdésessé válik az energiahordozók ezen csoportjának jövője. Ezt a helyzetet ismerte fel több fejlődő, illetve feltörekvő ország is. Ennek köszönhetően gőzerővel folynak a kutatások az energia okosabb hasznosítására, újrahasznosítására, valamint alternatív energiaforrások keresésére nézve.

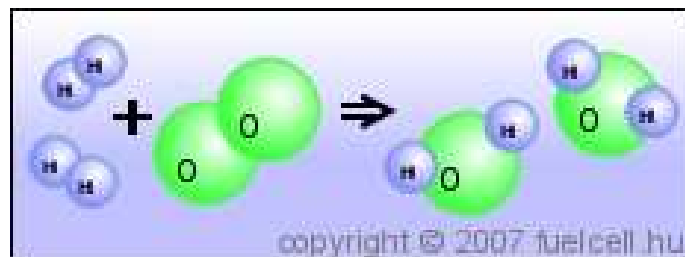
Az újrahasznosításnak óriási szerepe van a környezetvédelemben csakúgy, mint az energiaválságból való kiút megtalálásában. Erre is, mint sok minden másra, a média tudja a leghatékonyabban felhívni a figyelmet, például plakátok, szelektív hulladékgyűjtők, reklámok, híradások figyelemfelkeltő és "térítő" mivolta, de ami az én véleményem szerint az egyik legfontosabb, legnagyobb befolyással bíró médium az maga a környezetszennyezés. Gondolok itt arra, hogy - ha csak a jogszabályok betartása miatt is, de - az autógyárak dollár milliókat fektetnek be környezetkímélő megoldások bevezetésébe, illetve a velük kapcsolatos kutatásokba.

## 2. fejezet

# Üzemanyagcellák - történelmi áttekintés

Egy lehetséges alternatíva a bevezetésben szereplő problémák megoldására az üzemanyagcellák használata, melyek közül egyes fajtáknak a gyakorlati hatásfoka meghaladhatja a 65 százalékot, tehát az üzemanyagcellák jóval hatékonyabbak a feljavított, például KERS-el (Kinetic Energy Recycle System) ellátott Otto- vagy dízelmotoroknál. Fontos tehát, hogy a fosszilis tüzelőanyagok által működtetett erőforrások hatásfoka felülről korlátozott, míg az üzemanyagcelláké nem.

A cellákban lejátszódó folyamat, a William Nicholson és Antony Carlisle által felfedezett, vízbontási folyamat reverzibilisére, azaz az oxigén és hidrogén durránógáz-reakciójára alapul (1.ábra).



1. ábra (forrás: <http://www.fuelcell.hu>)

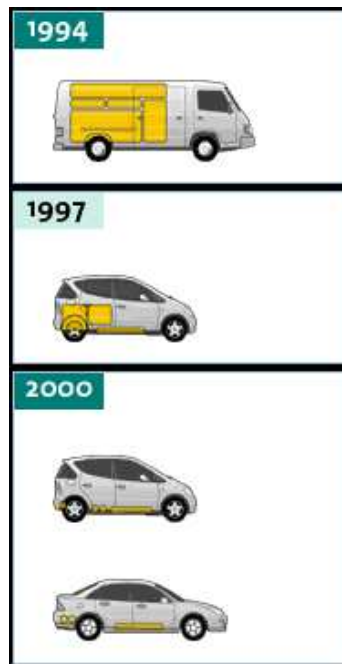
Ez a folyamat az ugyancsak 1800-ban Alessandro Volta által felfedezett,

folyamatosan elektromos áramot termelni képes berendezésre épült. A gond csak az volt, hogy a kívánt reakció 600 °C körül volt csak képes végbe-menni, ami a való életben, például járművekben nem alkalmazható hatéko-nyan. Megjegyzendő ugyanakkor, hogy egyes hasonló hőmérsékleten működő fajták erőművekben alkalmazhatóak (6.ábra). Sir William Robert Grove jött rá 1838-ban, hogy akár szobahőmérsékleten is igen jó hatásfokkal működtet-hetőek a cellák. Majd a csaknem 100 évig tartó jelentősebb eredmény nélküli kutatások után az igazi áttörést Francis Thomas Bacon munkássága hozta meg, no és persze az U.S.A. és az akkori Szovjetunió között dúló hidegháború. Ez utóbbiban főleg az űrhajózási- és fegyverkezési versenyzés, és az ebbe ölt dollármilliárdok hozták meg az eredményt az üzemanyagcellák fejlődésének történetében. A cellák előnyei, hogy nem tartalmaznak mozgó alkatrészeket, szilárd elektrolitos változataik működésére nincs hatással a gravitáció.

Az ötlet tehát egyáltalán nem újkeletű, jóllehet az akkori technológiai színvonal hiányosságai miatt nem vált lehetővé a hatékony fejlesztése, de az innovációjukhoz szükséges technológiák rendelkezésre állásától kezdve újabb-nál újabb fejlesztések, azóta nap, mint nap jelennek meg elsőként a terve-zőasztalon, majd a gyakorlatban csakúgy, mint a hétköznapi életben is.

Az üzemanyagcellák részben megújuló, de legalábbis mesterségesen előál-lítható üzemanyagokat, így vizet, hidrogént, biogázt, levegőt stb. használnak működésük során. Tehát pusztán üzemanyagcellákat alkalmazva teljesíte-nénk a globális felmelegedést kutató tudósok által behatárolt károsanyag-kibocsátás mennyiségének csökkenésére vonatkozó kritériumokat. Ez a ha-tásfokokat és a működtető energiahordozókat tekintve teljesíthető lenne, de tény, hogy sajnos még nem sikerült az Otto- vagy a dízelmotorokéhoz hasonló erő kifejtése egyetlen üzemanyagcellából, noha méretei drasztikusan csökken-tek az utóbbi 15 évben (2.ábra). A maximálisan elérhető energiaszint növelé-sének problémája további fejlesztésre ösztönzi a kutatócsoportokat. További probléma még az egyes típusokhoz katalizátorként használt platina mennyi-ségének végelessége, míg más típusoknál a cellák drágább előállítása, valamint az üzemanyag, főként a hidrogén logisztikája. A szükséges hidrogén vízből

való kinyerésének problémája is fejtörést okoz(ott), de ennek megoldását a szél-, víz- és napenergiának hasznosításában látják.



2. ábra (forrás: <http://www.foek.hu>)

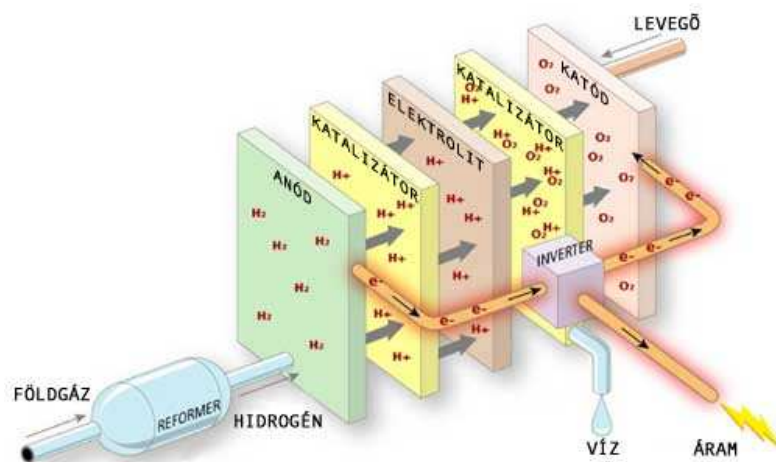
Fontos megjegyezni, hogy számítások szerint a mai technológiával előállítható lenne a szükséges áram, illetve energia különböző erőművekben, de a megfelelő helyre való szállítás már jóval nagyobb fejtörést okoz.

## 3. fejezet

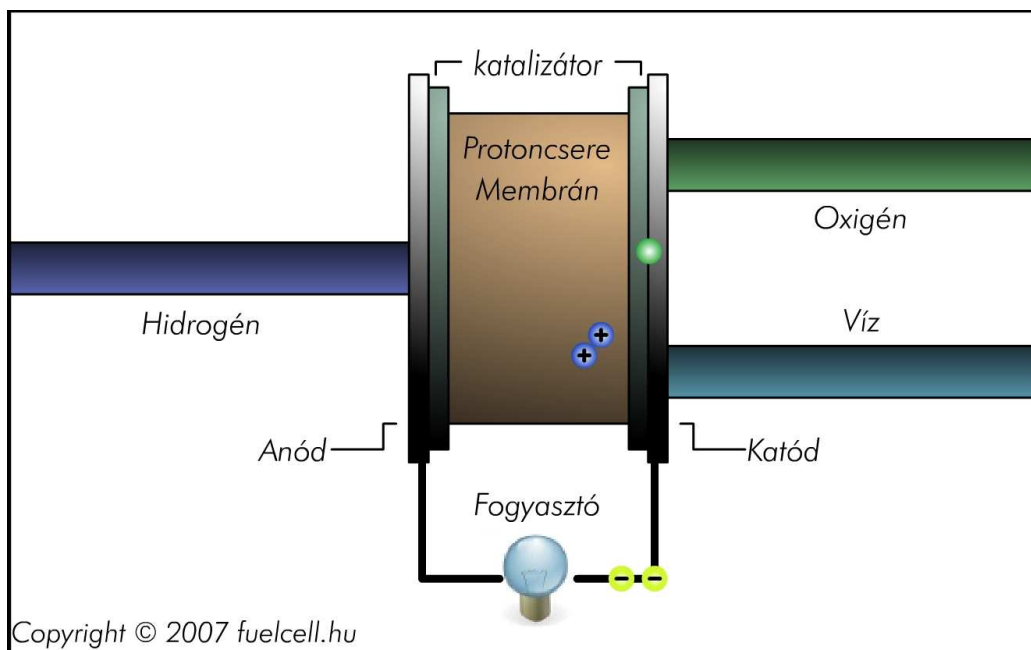
# Üzemanyagcellák - fizikai modell

Az üzemanyagcellák kémiai reakciók lefolyása alatt elektromos energiát állítanak elő, de a leginkább az különbözteti meg például az elemektől, hogy míg azok teljesen használhatatlanná válnak lemerülésükkor, míg a cellák addig adnak nekünk elektromos energiát, amíg folyamatos az üzemanyagellátásuk.

Az üzemanyagcellák vagy tüzelőanyag-elemek, egy anódból és egy katódból, valamint a köztük található elektrolitból és katalizátorból állnak (3.ábra). Katalizátorként főként platinát használnak, és ezek a katalizátorok teszik lehetővé, hogy hatékonyabban tudjuk a hidrogént protonná és elektronná bontani. Majd a protonokat az elektroliton átvezetjük, míg az elektronokat elektromos áramként használhatjuk fel (4.ábra). A protonok és az elektronok a cella katód oldalán az oxigénnel reakcióba lépve víz jön létre, amely távozik a rendszerből (1.ábra).

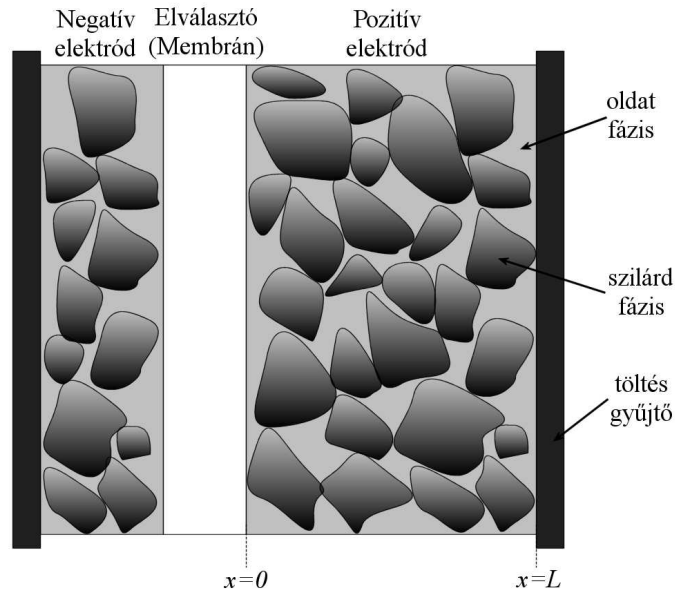


3. ábra (forrás: <http://www.foek.hu>)



4. ábra (forrás: <http://www.fuelcell.hu>)

Sir William Robert Grove 1838-as modelljétől a mai akár 100 MW-ot is termelő üzemanyagcellákig hosszú és rögös volt az út, a rengeteg fejlesztés közül voltak, melyek kevésbé, és voltak, amelyek gyökeresen megváltoztatták a kinyerhető energia nagyságát. Ezek közül a leglátványosabb változást a pórusos elektródok (5.ábra) felfedezése és alkalmazása hozta.



5. ábra (forrás: <http://www.fuelcell.hu>)

Az üzemanyagcellák teljesítményét a reakció sebessége, valamint az elektród felületének nagysága szabja meg, hiszen maga a kémiai reakció a két fázis (szilárd - mátrix - és folyékony - oldat -) határán játszódik le. Ezt az ötletet a kutatók a természetből merítették, gondoljunk csak a tüdő kosárlabdapályányi felületére, a bélbolyhok felület növelőmivoltára: ezek mind-mind az élő szervezetek pórusos elektródjai. A másik nagy fejlődést hozó újítás a katalizátorok bevezetése, innovációja volt. Ez utóbbi ugyanis az aktiválási energia csökkentésére ad módot, ezáltal kevesebb energiát kell használnunk a kívánt folyamat beindításához, illetve végbemeneteléséhez.

Az üzemanyagcellákat két nagy, ezen belül több kisebb csoportra lehet osztani (6.ábra). A két nagy osztály celláit a működési hőmérsékletük alapján különböztethetjük meg egymástól, ez meghatározza ugyanakkor azt is, hogy hol használhatóak. Míg a kisebb hőmérsékleten működő cellák az autókban használhatóak, addig a nagyobb hőmérsékleten működők különféle erőművekben. Előbbiek jól tűrik a ki-, és bekapcsolásokat, míg utóbbi érzékenyebb az efféle műveletekre.

Üzemanyagcella típusa	Elektrolit	Működési hőmérséklet	Elektromos hatásfok	Üzemanyag	Felhasználási terület
<b>AFC</b> alkáli elektrolitos cella	30% kálium-hidroxid oldat, gél	80 °C	elméleti: 70% gyakorlati: 62%	- tiszta H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub>	- járműipar - hadiipar
<b>PEMFC</b> membránú cella	protonáteresztő membrán	80 °C	elméleti: 68% gyakorlati: 50%	- tiszta H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> - levegő	- blokkfűtő erőmű - járműipar - hadiipar
<b>DMFC</b> direkt metanol membrán	protonáteresztő membrán	80 °C-130 °C	elméleti: 30% gyakorlati: 26%	- metanol - O <sub>2</sub> - levegő	- mobiltelefon - laptop, stb. áramforrása
<b>PAFC</b> foszforsavas cella	tömény foszforsav	200 °C	elméleti: 65% gyakorlati: 60%	- tiszta H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> - levegő	- blokkfűtő erőmű - áramforrás
<b>MCFC</b> alkáli-karbonátsó cella	lítium-karbonát, kálium-karbonát	650 °C	elméleti: 65% gyakorlati: 62%	- H <sub>2</sub> - földgáz - széngáz - biogáz - levegő - O <sub>2</sub>	- gőzturbinás, kétlépcsős blokkfűtő erőmű - áramforrás
<b>SOFC</b> oxidkerámia cella	yttrium-cirkon oxidkerámia	800 °C- 1000 °C	elméleti: 65% gyakorlati: 62%	- H <sub>2</sub> - földgáz - széngáz - biogáz - levegő - O <sub>2</sub>	gőzturbinás, kétlépcsős blokkfűtő erőmű - áramforrás

6. ábra (forrás: <http://www.foek.hu>)

## 4. fejezet

# Üzemanyagcellák - matematikai modell

A mindennapi életben is a matematikai modellek megalkotása több okból is elengedhetetlen, nincs ez másképp az üzemanyagcelláknál sem. Az első - és talán legfontosabb - ezen okok közül, az az, hogy már egy-egy cella megépítése is komoly költségekkel járhat, annak ellenére, hogy már nem prototípus. A kísérleti stádiumban lévő elemek gyártása még ennél is jóval drágább. A második példa az, hogy a kutatóknak nem áll rendelkezésére korlátlan mennyiségű idő, sőt általában nagyon is szűk határidőkhöz vannak kötve, így a lassabb felépítés helyett a gyorsabb szimulációs módszerek, modellépítések sok szempontból hatékonyabbak.

Most, hogy már látjuk a matematikai modell fontosságát, nézzük meg, hogy mire is jó a matematikai megközelítés. A működési elvet a 3. fejezetben ismertettük, ám azt nem emeltük ki külön, hogy a számunkra lényeges, az energiát adó folyamat a cella katód részében (4.ábra) megy végbe, itt játszódik ugyanis le az újraegyesülés (1.ábra) - ezáltal energia szabadul fel. A katódon belül a pórusos elektródban (5.ábra) van jelen az elektron-, illetve a protonáram. Ennek a két mennyiségnek a különbsége adja a számunkra fontos mennyiséget, a többletáramot, azaz a felhasználható energiát. Tehát ezt, a katódon belüli folyamatot vizsgáljuk, modellezük, a cellában fennálló

fizikai törvényszerűségek, illetve azok következményei alapján.

## 4.1. Állandó vezetési együtthatós modell

### 4.1.1. Modellépítés

Az üzemanyagcellák általunk vizsgált rétegeiben zajló folyamatokat leíró egyenleteket szeretnénk megkapni, majd ezeket matematikailag megvizsgálni. Első közelítésben tegyük fel, hogy a modellben szereplő rétegekben a vezetési együtthatók térben és időben állandóak.

Felírható tehát az Ohm-törvény az üzemanyagcellákban játszódó folyamatokra, ami az állítja, hogy  $U = IR$  állandó, azaz  $I = \frac{U}{R}$ .

A szilárd és a folyékony fázisokban mért potenciálokat, vagyis az elektród- illetve a protonáramot jelölje  $\phi_1(t, x)$ - illetve  $\phi_2(t, x)$ .

$$\phi_i(t, x) : \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad i = \{1, 2\}.$$

Itt  $t$  az időváltozót, míg  $x$  a helyváltozót jelöli.

(Ezen szakdolgozat ennek egy speciális formájával foglalkozik részletesen, nevezetesen  $n = 1$ , azaz az 1 dimenziós esettel.)

Vezessük be továbbá a  $\sigma_{eff}$  és  $\kappa_{eff}$  jelöléseket a szilárd- illetve a folyékony fázisok vezetőképességére. Az Ohm törvény felhasználásával kapjuk, hogy a két fázis áramerőssége, azaz  $i_1$  és  $i_2$  nem más, mint:

$$i_1(t, x) = -\sigma_{eff} \partial_x \phi_1(t, x) \tag{4.1}$$

$$i_2(t, x) = -\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x). \tag{4.2}$$

Mivel az üzemanyagcellában az elektronok és protonok száma állandó és megegyezik egymással - hiszen ezen a téren nem történik külső beavatkozás - ezért fennáll az elektroneutralitás elve, azaz felhasználhatjuk, hogy:

$$-\partial_x i_1 = \partial_x i_2 \tag{4.3}$$

$$j_n := -\frac{1}{a} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x)) \tag{4.4}$$

ahol  $j_n$  a felületi áramsűrűség, azaz a mátrixban a szilárd részecskék felületén lévő áram nagysága. A fizikai törvényszerűségek alapján felírható az egyenlet, ami kimondja, hogy a kettősréteg feltöltődésének megváltozása nem más, mint a felületi-áramsűrűség megváltozásának és a kémiai reakcióból származó elektromos áramnak, azaz a faradikus áramsűrűségnek az összege, azaz matematikailag:

$$-\partial_x(\kappa_{eff}\partial_x\phi_2(t,x)) = aC_{dl}\partial_t(\phi_1(t,x) - \phi_2(t,x)) + ai_0e^{\alpha\frac{F}{RT}(\phi_1(t,x)-\phi_2(t,x))}. \quad (4.5)$$

Itt  $a$  a specifikus határfelületi terület,  $C_{dl}$  a kettősréteg kapacitása,  $i_0$  a csereáramsűrűség,  $\alpha$  az aktiválási energia,  $F$  a Faraday állandó,  $R$  az univerzális gázállandó, végül  $T$  pedig a hőmérséklet.

Jelölje  $\eta(t,x)$  a két potenciál különbségét, azaz:

$$\eta(t,x) := \phi_1(t,x) - \phi_2(t,x). \quad (4.6)$$

Ekkor (4.5) miatt:

$$aC_{dl}\partial_t(\eta(t,x)) = -\partial_x(\kappa_{eff}\partial_x\phi_2(t,x)) - ai_0e^{\alpha\frac{F}{RT}\eta(t,x)}. \quad (4.7)$$

Jól látható, hogy a (4.7) egyenlet tartalmaz  $\eta(t,x)$ -től, és  $\phi_2(t,x)$ -től függő tagot is, a továbbiakban a cél a (4.7) egyenletet felírni (csak)  $\eta(t,x)$  függvényében, ezáltal valóban egy parciális differenciálegyenletet kapva. Kiegészítő felek is megadhatóak az egyenlethez, mégpedig egyrészt kezdeti feltételek, másrészt pedig Neumann-típusú peremfeltételek. A kezdeti feltétel a következő:

$$\phi_i(0,x) = 0, \quad i = \{1, 2\}. \quad (4.8)$$

Ezért:

$$\eta(0,x) = 0, \quad \forall x \in (0, L). \quad (4.9)$$

Ez pontosan az jelenti, hogy a kezdeti túlfeszültségünk zérus. A Neumann-típusú peremfeltételek pedig a következők:

$$i_1(t,0) = I(t) = i_2(t,L) \quad (4.10)$$

$$i_1(t, L) = 0 = i_2(t, 0). \quad (4.11)$$

Itt  $I(t)$  ismert függvény, egészen konkrétan ez az általunk az üzemenyagcellára - annak peremére - vezetett áram nagysága.

(4.1), (4.10) illetve (4.11) egyenletekből adódnak a következő összefüggések:

$$-\sigma_{eff}\partial_x\phi_1(t, 0) = I(t) = -\kappa_{eff}\partial_x\phi_2(t, L) \quad (4.12)$$

$$-\kappa_{eff}\partial_x\phi_2(t, 0) = 0 = -\sigma_{eff}\partial_x\phi_1(t, L). \quad (4.13)$$

Ezért

$$\partial_x\eta(t, 0) = -\frac{1}{\sigma_{eff}}I(t) \quad (4.14)$$

illetve

$$\partial_x\eta(t, L) = \frac{1}{\kappa_{eff}}I(t). \quad (4.15)$$

Itt  $I(t)$  ismert függvény.

$$\eta^*(t, x) := \alpha \frac{F}{RT}\eta(t, x) \quad (4.16)$$

jelöléssel jól látható, hogy:

$$\partial_t\eta^*(t, x) = \alpha \frac{F}{RT}\partial_t(\eta(t, x)). \quad (4.17)$$

(4.16) és (4.17) összefüggéseket a (4.7) egyenletbe visszahelyettesítve:

$$aC_{dl}\frac{RT}{\alpha F}\partial_t\eta^*(t, x) = -\partial_x(\kappa_{eff}\partial_x\phi_2(t, x)) - ai_0e^{\eta^*(t, x)} \quad (4.18)$$

összefüggést. Így (4.18) átírható a következő alakba:

$$\partial_t\eta^*(t, x) = -\frac{\alpha F}{aC_{dl}RT}\partial_x(\kappa_{eff}\partial_x\phi_2(t, x)) - \frac{\alpha F}{C_{dl}RT}i_0e^{\eta^*(t, x)}. \quad (4.19)$$

Kitérőként tekintsük az új  $\eta^*(t, x)$  függvényre vonatkozó feltételeinket. (4.9) és (4.16) alapján a kezdeti feltétel

$$\eta^*(0, x) = \alpha \frac{F}{RT}\eta(0, x) = 0 \quad (4.20)$$

egyenlőségre, míg a peremfeltételek (4.13) és (4.16) alapján

$$\partial_x\eta^*(t, 0) = -\frac{\alpha F}{\sigma_{eff}RT}I(t) \quad (4.21)$$

$$\partial_x \eta^*(t, L) = \frac{\kappa F}{\sigma_{eff} RT} I(t) \quad (4.22)$$

alakúak az  $x = 0$  illetve az  $x = L$  pontokban.

Térjünk vissza a (4.19) egyenletre, annak alakításásra.

Vezessünk be új időváltozót, nevezetesen  $\tau$ -t.

$$\tau := \frac{t}{aC_{dl}\left(\frac{1}{\kappa_{eff}} + \frac{1}{\sigma_{eff}}\right)L^2} := \frac{t}{p}. \quad (4.23)$$

Tudjuk, hogy  $t \geq 0$  esetet vizsgáljuk, így ennek következményeképpen  $\tau \geq 0$  is fennáll.

Most vezessük be a következő jelölést:

$$U(\tau, x) := \eta^*\left(aC_{dl}\left(\frac{1}{\kappa_{eff}} + \frac{1}{\sigma_{eff}}\right)L^2\tau, x\right) = \eta^*(p\tau, x). \quad (4.24)$$

Számítsuk ki a  $\partial_\tau U(\tau, x)$  parciális deriváltat.

Mivel  $\tau$  a  $t$  függvénye, ezért alkalmazzuk a láncszabályt, azaz (a fizikusok körében elterjedt jelölésmóddal élve) a következő összefüggéshez juthatunk:

$$\frac{\partial U(\tau, x)}{\partial \tau} = \frac{\partial \eta^*(p\tau, x)}{\partial t} \frac{\partial t}{\partial \tau} = \partial_t \eta^*(p\tau, x)p. \quad (4.25)$$

(4.19)-es egyenletünk (4.24) és (4.25) okán

$$\partial_t \eta^*(p\tau, x) = -\frac{\alpha F}{aC_{dl}RT} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(p\tau, x)) - \frac{\alpha F}{C_{dl}RT} i_0 e^{\eta^*(p\tau, x)} \quad (4.26)$$

alakban írható fel a  $p\tau \equiv t$  helyen. Ezért:

$$\frac{1}{p} \partial_\tau U(\tau, x) = -\frac{\alpha F}{aC_{dl}RT} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(p\tau, x)) - \frac{\alpha F}{C_{dl}RT} i_0 e^{U(\tau, x)} \quad (4.27)$$

egyenletet kapjuk. Itt  $p$ -vel felszorozva

$$\partial_\tau U(\tau, x) = -\frac{p\alpha F}{aC_{dl}RT} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(p\tau, x)) - \frac{p\alpha F}{C_{dl}RT} i_0 e^{U(\tau, x)}. \quad (4.28)$$

Vezessük be az alábbi jelölést:

$$\nu^2 := \frac{p\alpha F}{C_{dl}RT} i_0 = aC_{dl} \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} + \frac{1}{\sigma_{eff}} \right) L^2 \frac{\alpha F}{C_{dl}RT} i_0 = a \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} + \frac{1}{\sigma_{eff}} \right) L^2 \frac{\alpha F}{RT} i_0. \quad (4.29)$$

Ezzel a (4.28) egyenlet a következő alakra hozható  $U(\tau, x)$ -re nézve:

$$\partial_\tau U(\tau, x) = -\frac{p\alpha F}{aC_{dl}RT} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(p\tau, x)) - \nu^2 e^{U(\tau, x)}. \quad (4.30)$$

Ebből az alakból - mivel  $\sigma_{eff}$  és  $\kappa_{eff}$  állandó (ezt az utolsó lépésnél fogjuk kihasználni) - (4.1), (4.2) és (4.3) felhasználásával  $\phi_2(t, x)$  kiküszöbölhető.

Ugyanis:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\kappa_{eff}} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x)) + \frac{1}{\sigma_{eff}} \partial_x ((\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x))) \stackrel{(4.2)}{=} \\ & \stackrel{(4.2)}{=} \frac{1}{\kappa_{eff}} \partial_x ((\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x))) - \frac{1}{\sigma_{eff}} \partial_x i_2(t, x) \stackrel{(4.3)}{=} \\ & \stackrel{(4.3)}{=} \frac{1}{\kappa_{eff}} \partial_x ((\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x))) + \frac{1}{\sigma_{eff}} \partial_x i_1(t, x) \stackrel{(4.1)}{=} \\ & \stackrel{(4.1)}{=} \frac{1}{\kappa_{eff}} \partial_x ((\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x))) - \frac{1}{\sigma_{eff}} \partial_x ((\sigma_{eff} \partial_x \phi_1(t, x))) = \\ & = \partial_{xx} \phi_2(t, x) - \partial_{xx} \phi_1(t, x) = \partial_{xx} \eta(t, x). \end{aligned} \quad (4.31)$$

Ezért (4.16) és (4.31) alapján:

$$\begin{aligned} & \alpha \frac{F}{RT} \left( \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x)) \right) + \left( \frac{1}{\sigma_{eff}} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x)) \right) \right) = \\ & = \alpha \frac{F}{RT} \partial_{xx} \eta(t, x) = \partial_{xx} \left( \alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x) \right) = \partial_{xx} \eta^*(t, x). \end{aligned} \quad (4.32)$$

A (4.30)-as számú egyenlet jobb oldalának első tagja az előző egyenlet, azaz (4.32) miatt felírható a következő alakban:

$$\begin{aligned} & -\frac{p\alpha F}{aC_{dl}RT} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x)) = \\ & = aC_{dl} \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} + \frac{1}{\sigma_{eff}} \right) L^2 \frac{\alpha F}{aC_{dl}RT} \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x)) = \\ & = \frac{\alpha F}{RT} \left( \frac{1}{\kappa_{eff}} + \frac{1}{\sigma_{eff}} \right) L^2 \partial_x (\kappa_{eff} \partial_x \phi_2(t, x)) = L^2 \partial_{xx} \eta^*(t, x). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Tehát (4.30) átírható a következő alakba:

$$\partial_\tau U(\tau, x) = L^2 \partial_{xx} \eta^*(p\tau, x) = \nu^2 e^{U(\tau, x)}. \quad (4.34)$$

Ez (4.24) alapján nem más, mint:

$$\partial_\tau U(\tau, x) = L^2 \partial_{xx} U(\tau, x) - \nu^2 e^{U(\tau, x)}. \quad (4.35)$$

Tekintsük most a kiegészítő feltételeket az elvégzett átalakítások tükrében.

Ugyancsak  $U(\tau, x)$  definíciójából, azaz (4.24)-ből - és, mert a helyváltozóban, azaz  $x$ -ben még nem végeztünk el átalakításokat - adódóan a következő összefüggéseket kapjuk:

$$U(0, x) = \eta^*(0, x) = 0 \quad (4.36)$$

$$\partial_x U(\tau, 0) = \partial_x \eta^*(p\tau, 0) = -\frac{\alpha F}{\sigma_{eff} RT} I(p\tau) \quad (4.37)$$

$$\partial_x U(\tau, L) = \partial_x \eta^*(p\tau, L) = \frac{\alpha F}{\kappa_{eff} RT} I(p\tau). \quad (4.38)$$

Így tehát egy másodrendű, állandó együtthatós, parabolikus típusú parciális differenciálegyenlethez, a (4.35) egyenlethez jutottunk. A folyamat a  $x \in [0, L]$  tartományon van értelmezve, továbbá az időváltozó nemnegatív, azaz  $\tau \geq 0$ .

A vizsgált folyamatra igazak a (4.36), (4.37), (4.38) kezdeti- és peremfeltételek. A differenciálegyenlet, a kezdeti feltétel, a két peremfeltétel és az értelmezési tartományok rendre a következő alakban írhatóak fel:

$$\partial_\tau U(\tau, x) = L^2 \partial_{xx} U(\tau, x) - \nu^2 e^{U(\tau, x)}$$

$$U(0, x) = \eta^*(0, x) = 0$$

$$\partial_x U(\tau, 0) = \partial_x \eta^*(p\tau, 0) = -\frac{\alpha F}{\sigma_{eff} RT} I(p\tau)$$

$$\partial_x U(\tau, L) = \partial_x \eta^*(p\tau, L) = \frac{\alpha F}{\kappa_{eff} RT} I(p\tau)$$

$$x \in [0, L], \tau \geq 0.$$

### 4.1.2. Kanonikus alak

Vezessük be a következő két jelölést:

$$X := \frac{x}{L} \quad (4.39)$$

$$u(\tau, X) := U(\tau, LX). \quad (4.40)$$

Ekkor rendre az első- és másodrendű parciális deriváltakra a következő alak adódik:

$$\partial_x U(\tau, LX) = \frac{1}{L} \partial_X u(\tau, X) \quad (4.41)$$

$$\partial_{xx} U(\tau, LX) = \frac{1}{L^2} \partial_{XX} u(\tau, X). \quad (4.42)$$

(4.35) alapján kaphatjuk a következő összefüggést:

$$\partial_\tau U(\tau, LX) = L^2 \partial_{xx} U(\tau, LX) - \nu^2 e^{U(\tau, LX)}. \quad (4.43)$$

Ahonnét (4.40) és (4.42) alapján a parciális differenciálegyenletünk kanonikus alakjához juthatunk. Nevezetesen:

$$\partial_\tau u(\tau, X) = \partial_{XX} u(\tau, X) - \nu^2 e^{u(\tau, X)}. \quad (4.44)$$

Itt természetesen  $\tau \geq 0$ , továbbá  $X \in [0, 1]$ .

A kiegészítő feltételek is hasonló módon átalakíthatóak a (4.39) és a (4.40) jelölésekkel élve. Mégpedig a kezdeti feltétel (4.36) és (4.40) alapján:

$$u(0, X) = U(0, LX) = 0 \quad (4.45)$$

valamint a peremfeltételek (4.37) illetve (4.38) és (4.40), (4.41) alapján:

$$\partial_X u(\tau, 0) = L \partial_x U(\tau, 0) = -L \frac{\alpha F}{\sigma_{eff} RT} I(p\tau) \quad (4.46)$$

$$\partial_X u(\tau, 1) = L \partial_x U(\tau, L) = L \frac{\alpha F}{\kappa_{eff} RT} I(p\tau). \quad (4.47)$$

Összefoglalva tehát a kanonizált parciális differenciálegyenlet rendszerünk, azaz az egyenlet, a kezdeti feltétel, a két peremfeltétel és az értelmezési tartomány rendre a következőképpen írható fel:

$$\partial_\tau u(\tau, X) = \partial_{XX} u(\tau, X) - \nu^2 e^{u(\tau, X)}$$

$$\begin{aligned}
u(0, X) &= 0 \\
\partial_X u(\tau, 0) &= -L \frac{\alpha F}{\sigma_{eff} RT} I(p\tau) \\
\partial_X u(\tau, 1) &= L \frac{\alpha F}{\kappa_{eff} RT} I(p\tau) \\
X &\in [0, 1], \quad \tau \geq 0.
\end{aligned}$$

## 4.2. Idő- és helyfüggő vezetési együtthatós modell

Tekintsük a 4.1. alfejezetben leírt modellünk általánosabb alakját, azt az esetet, amikor a szilárd, illetve a folyékony fázisban mérhető vezetőképesség  $\sigma_{eff}(t, x)$ , valamint  $\kappa_{eff}(t, x)$  alakban adható meg.

4.1. fejezethez hasonlóan felírható az Ohm-törvény, azaz:

$$i_1(t, x) = -\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_1(t, x) \quad (4.48)$$

$$i_2(t, x) = -\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_1(t, x). \quad (4.49)$$

Ahogy az előző modellben, 4.1. fejezetben, (4.6) egyenlethez hasonlóan itt is:

$$\eta(t, x) := \phi_1(t, x) - \phi_2(t, x) \quad (4.50)$$

azaz a potenciálkülönbség, vagy más néven túlfeszültség a keresett mennyiség. Itt  $t \in (0, T)$  és  $x \in (0, L)$ .

Megjegyezzük, hogy (4.6)  $\equiv$  (4.50) hiszen ezt nem befolyásolja a vezetési együtthatók állandó, avagy idő és hely függvényében változó mivolta. A vizsgált egyenlet (4.7) egyenlethez hasonlóan itt is a következő:

$$aC_{dl} \partial_t \eta(t, x) = -\partial_x (\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) - ai_0 e^{\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x)}. \quad (4.51)$$

A kezdeti feltétel pedig a (4.9) mintájára:

$$\eta(0, x) = 0, \quad x \in (0, L). \quad (4.52)$$

Továbbá a Neumann típusú peremfeltételek is megadhatóak (4.14) és (4.15) módjára. Nevezetesen:

$$\partial_x \eta(t, 0) = \frac{1}{\kappa_{eff}(t, 0)} I(t) \quad (4.53)$$

$$\partial_x \eta(t, L) = -\frac{1}{\sigma_{eff}(t, L)} I(t) \quad (4.54)$$

alakban. Mindkét esetben  $t \in (0, T)$ .

4.1. részhez hasonlóan most is egy, csak  $\eta(t, x)$ -től függő egyenlethez szeretnénk jutni az átalakítások során. Ehhez segítségképpen kapható összefüggés az elektroneutralitás elve értelmében fennálló egyenlet, hasonlóan (4.3)-hoz, mégpedig:

$$\partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_1(t, x)) = -\partial_x (\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)). \quad (4.55)$$

(4.50) és (4.55) egyenletekből kapható, hogy:

$$\begin{aligned} \partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) + \kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) &= \\ &= \partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) - \partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_1(t, x)) = \\ &= \partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \eta(t, x)). \end{aligned} \quad (4.56)$$

Előkészületként az  $\eta(t, x)$ -re vonatkozó egyenlet felírása okán alakítsuk át a (4.55) jobboldalának  $(-1)$ -szeresét, azaz az egyenlet

$$\partial_x (\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) \quad (4.57)$$

alakú komponensét hozzuk szebb formára. Mégpedig elsőként bontsuk össze,

majd használjuk a (4.56) azonosságot. Jelesül:

$$\begin{aligned}
& \partial_x (\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) = \\
& = \partial_x \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) + \right. \\
& \left. + \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) \right) = \\
& = \partial_x \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) (\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) + \\
& + \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \cdot \\
& \cdot \partial_x (\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) + \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) = \\
& = \partial_x \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \int \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \eta(t, x) dx - \\
& - \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \eta(t, x)). \tag{4.58}
\end{aligned}$$

Vizsgáljuk meg most, hogy

$$\int \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \eta(t, x) dx \tag{4.59}$$

határozatlan integrál mivel egyenlő, azaz melyik primitív függvény szerepel itt, ehhez elsőként számoljuk ki a 0-ban felvett értékét. Ehhez segítségképpen

$$\begin{aligned}
& \kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) + \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) = \\
& = \frac{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x)} \kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) \stackrel{(4.49)}{=} \\
& \stackrel{(4.49)}{=} - \frac{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x)} i_2(t, x) \tag{4.60}
\end{aligned}$$

összefüggést is használjuk fel, hiszen ekkor (4.53) és (4.54) Neumann-típusú

peremfeltételek alapján:

$$\begin{aligned}
& \left. \kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) + \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) \right|_{x=0} = \\
& = \frac{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x)} \kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x) \Big|_{x=0} = \\
& = - \frac{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x)} i_2(t, x) \Big|_{x=0} = \\
& = - \frac{\kappa_{eff}(t, 0) + \sigma_{eff}(t, 0)}{\kappa_{eff}(t, 0)} I(t). \tag{4.61}
\end{aligned}$$

Tehát (4.60) alapján (4.58) felírható a következő alakban:

$$\begin{aligned}
& \int \sigma_{eff}(t, x) \partial_x \eta(t, x) dx = \\
& = - \frac{\kappa_{eff}(t, 0) + \sigma_{eff}(t, 0)}{\kappa_{eff}(t, 0)} I(t) + \int_0^x \sigma_{eff}(t, s) \partial_x \eta(t, s) ds. \tag{4.62}
\end{aligned}$$

(4.57)-be visszahelyettesítve (4.61)-et kapjuk, hogy:

$$\begin{aligned}
& \partial_x (\kappa_{eff}(t, x) \partial_x \phi_2(t, x)) = - \partial_x \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \\
& \left( \frac{\kappa_{eff}(t, 0) + \sigma_{eff}(t, 0)}{\kappa_{eff}(t, 0)} I(t) - \int_0^x \sigma_{eff}(t, s) \partial_x \eta(t, s) ds \right) - \\
& - \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \eta(t, x)). \tag{4.63}
\end{aligned}$$

Ezért (4.51) egyenletünk a következő alakban írható fel:

$$\begin{aligned}
& aC_{dl} \partial_t \eta(t, x) = \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \partial_x (\sigma_{eff}(t, x) \partial_x \eta(t, x)) + \\
& + \partial_x \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \left( \frac{\kappa_{eff}(t, 0) + \sigma_{eff}(t, 0)}{\kappa_{eff}(t, 0)} I(t) - \right. \\
& \left. \int_0^x \sigma_{eff}(t, s) \partial_x \eta(t, s) ds \right) - ai_0 e^{\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x)}. \tag{4.64}
\end{aligned}$$

Tehát (4.52), (4.53), (4.54) és (4.64) összefüggések alapján az egyenletünk, a kezdeti feltételünk, a peremfeltételek és az értelmezési tartomány

rendre a következők:

$$\begin{aligned}
aC_{dl}\partial_t\eta(t, x) &= \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \partial_x(\sigma_{eff}(t, x)\partial_x\eta(t, x)) + \\
&+ \partial_x \left( \frac{\kappa_{eff}(t, x)}{\kappa_{eff}(t, x) + \sigma_{eff}(t, x)} \right) \left( \frac{\kappa_{eff}(t, 0) + \sigma_{eff}(t, 0)}{\kappa_{eff}(t, 0)} I(t) - \right. \\
&\left. \int_0^x \sigma_{eff}(t, s)\partial_x\eta(t, s) ds \right) - ai_0 e^{\alpha \frac{F}{RT}\eta(t, x)} \\
\eta(0, x) &= 0
\end{aligned}$$

$$\partial_x\eta(t, 0) = \frac{1}{\kappa_{eff}(t, 0)} I(t)$$

$$\partial_x\eta(t, L) = -\frac{1}{\sigma_{eff}(t, L)} I(t).$$

Itt valamennyiszer  $x \in [0, L]$  és  $t \geq 0$ .

### 4.3. Az állandó-, valamint az idő-, és helyfüggő modellek kapcsolata

Természetes elvárás ezek alapján, hogy a 4.1. alfejezetben tárgyalt modell speciális esete legyen a 4.2. alfejezetben tárgyalt modellnek, lássuk most ennek levezetését.

(4.35)-öt alakítsuk át, lépegessünk vissza az elvégzett átalakítások sorozatában, elsőként (4.24), azaz  $\eta^*(t, x)$  definíciója alapján kapjuk, hogy:

$$\partial_\tau\eta^*(p\tau, x) = L^2\partial_{xx}\eta^*(p\tau, x) - \nu^2 e^{\eta^*(p\tau, x)}.$$

Ebből az összetett függvény deriválási szabály miatt elvégezve a baloldalon szereplő függvény (parciális) deriválását, valamint (4.23) miatt a következőhöz jutunk:

$$p\partial_t\eta^*(t, x) = L^2\partial_{xx}\eta^*(p\tau, x) - \nu^2 e^{\eta^*(p\tau, x)}.$$

Ezért (4.23), azaz  $\tau$  és  $p$  definíciói miatt:

$$L^2 a C_{dl} \frac{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}}{\kappa_{eff} \sigma_{eff}} \partial_t \eta^*(t, x) = L^2 \partial_{xx} \eta^*(t, x) - \nu^2 e^{\eta^*(t, x)}.$$

Ez pedig  $\nu^2$  definíciója, azaz (4.29) miatt nem más, mint:

$$L^2 a C_{dl} \frac{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}}{\kappa_{eff} \sigma_{eff}} \partial_t \eta^*(t, x) = L^2 \partial_{xx} \eta^*(t, x) - L^2 a i_0 \frac{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}}{\kappa_{eff} \sigma_{eff}} \alpha \frac{F}{RT} e^{\eta^*(t, x)}.$$

Ami pedig az  $\eta^*(t, x)$  definíciójából, azaz (4.16)-ból adódóan nem más, mint:

$$\begin{aligned} L^2 a C_{dl} \frac{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}}{\kappa_{eff} \sigma_{eff}} \alpha \frac{F}{RT} \partial_t \eta(t, x) &= \\ &= \alpha \frac{F}{RT} L^2 \partial_{xx} \eta(t, x) - L^2 a i_0 \frac{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}}{\kappa_{eff} \sigma_{eff}} \alpha \frac{F}{RT} e^{\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x)}. \end{aligned}$$

Végül  $L^2 \alpha \frac{F}{RT}$ -tel egyszerűsítve, valamint  $\frac{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}}{\kappa_{eff} \sigma_{eff}}$ -val felszorozva, egyszerűsítve (a felszorozás után) a következőhöz jutunk:

$$a C_{dl} \eta(t, x) = \frac{\kappa_{eff} \sigma_{eff}}{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}} \partial_{xx} \eta(t, x) - a i_0 e^{\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x)}. \quad (4.65)$$

Most tekintsük (4.64) egyenletet, nézzük meg, hogy mi változik, ha mind  $\sigma_{eff}$ , mind  $\kappa_{eff}$  állandó. Elsőként vegyük észre, hogy a jobboldali első parciális derivált eltűnik, hiszen állandó deriváltja 0, így a jobboldal első tagja teljesen eltűnik. Vegyük továbbá észre, hogy a második tag parciális deriváltjában  $\sigma_{eff}$  kivihető a zárójelen kívülre. Ezekkel a következő alakra hozható (4.64):

$$a C_{dl} \eta(t, x) = \frac{\kappa_{eff}}{\kappa_{eff} + \sigma_{eff}} \sigma_{eff} \partial_{xx} \eta(t, x) - a i_0 e^{\alpha \frac{F}{RT} \eta(t, x)}. \quad (4.66)$$

Vegyük észre, hogy (4.65)  $\equiv$  (4.66), tehát a 4.1. alfejezetben tárgyalt állandó vezetési együtthatós modell az egy speciális esete a 4.2. alrészben tárgyalt modellnek, ahogyan ezt el is vártuk.

## 5. fejezet

# Adekvát numerikus algoritmus kiválasztása

### 5.1. A rendszer vizsgálata

A 4.1. alfejezetből, azaz az állandó vezetési együtthatós modellből kapott rendszerünkre vonatkozó egyenletek megoldásának a menete a következő: megoldjuk a differenciálegyenletet az adott kezdeti feltételre, figyelembe véve a peremfeltételeket is a kanonizált függvényekre nézett tartományunkon, így  $u(\tau, X)$  már ismertté válik. Ezután (4.40) összefüggés alapján meghatározható az általánosított tartományon is. Majd további összefüggés, nevezetesen (4.24) alkalmazásával meghatározzuk  $\eta^*(t, x)$ -et az általánosított tartományon, majd ezt felhasználva, továbbá figyelembe véve az átalakítások során bevezetett (4.16) képletünket, meghatározzuk a keresett  $\eta(t, x)$  függvényt, azaz a túlfeszültséget az eredeti tartományunkon.

Vizsgáljuk meg a parciális differenciálegyenletünket (kvalitatív vizsgálat).

**1. Állítás.** *Legyen  $u : \mathbb{R}_0^+ \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$  olyan megfelelően sokszor folytonosan differenciálható függvény, amelyre:  $\partial_t u(t, x) - \partial_{xx} u(t, x) < 0$ , amely  $D := \mathbb{R}^+ \times (0, 1)$  tartományon van értelmezve. Ekkor  $u(t, x)$  függvénynek nem lehet maximuma a  $D = \mathbb{R}^+ \times (0, 1)$  tartományon.*

**Bizonyítás.** Indirekt tegyük fel, hogy  $(t_0, x_0) \in D$  és ott lokális maxi-

muma van, ekkor nyilvánvalóan

$$\partial_t u(t_0, x_0) = \partial_x u(t_0, x_0) = 0$$

egyenlőség fennáll. Továbbá tudjuk a következőket:

$$\partial_{xx} u(t_0, x_0) \leq 0 \Rightarrow \partial_t u(t_0, x_0) - \partial_{xx} u(t_0, x_0) \geq 0.$$

Így ellentmondásra jutottunk, azaz a tételünk bizonyítást nyert.  $\square$

**Következmény.**

$$\partial_t u(t, x) - \partial_{xx} u(t, x) = -\nu^2 e^{u(t, x)}$$

egyenletet kielégítő függvények a maximumot a határon, azaz a kanonizált tartományra nézve  $x = 0$ -ban, vagy  $x = 1$ -ben veheti, veszi fel.

Hasonlóan igaz, hogy a

$$\phi_1(t, x) - \phi_2(t, x) = \eta(t, x)$$

függvény is a két végpont valamelyikében veheti fel a maximumát. Ez azért igaz, mert végig lineáris transzformációkat hajtottunk végre.

Térjünk vissza a 4.1. fejezetben tárgyalt állandó vezetési együtthatós egyenletrendszerünkre, annak kanonikus alakjára, és vizsgáljuk meg a numerikus megoldását. Tehát a továbbiakban a:

$$\partial_t u(t, x) = \partial_{xx} u(t, x) - \nu^2 e^{u(t, x)} \quad (5.1)$$

$$u(0, x) = 0 \quad (5.2)$$

$$\partial_x u(t, 0) = g_1(t) \quad \partial_x u(t, L) = g_2(t) \quad (5.3)$$

$$x \in (0, 1) \quad t > 0$$

feladat numerikus megoldásával foglalkozunk.

## 5.2. 1. megközelítés - IMEX-módszer

A rácsháló generálása a következő módon történik:

$$h := \frac{1}{N}, \quad \Delta t > 0.$$

Jelölje továbbá:

$$y_j^n := u(jh, n\Delta t)$$

ami nem más, mint a pontos megoldás értékét a rácshálónk  $(j, n)$  pontjában, itt  $j = 0..N$ , valamint  $n = 0, 1..$

Alkalmazzuk az IMEX-módszert, azaz a diffúziós részt implicit módon, míg a nemlineáris rész explicit módon közelítsük. Tehát:

$$\frac{y_j^n - y_j^{n-1}}{\Delta t} = \frac{y_{j+1}^n - 2y_j^n + y_{j-1}^n}{h^2} - \nu^2 e^{y_j^{n-1}} \quad (5.4)$$

$$j = 1, 2..N-1, \quad n = 0, 1..$$

Továbbá:

$$y_j^0 = 0, \quad j = 0, 1..N \quad (5.5)$$

$$\frac{y_1^n - y_0^n}{h} = g_1(n\Delta t); \quad \frac{y_N^n - y_{N-1}^n}{h} = g_2(n\Delta t), \quad n = 1, 2.. \quad (5.6)$$

(5.4) - (5.5) - (5.6) egyenleteket írjuk fel mátrixos alakban.

$$\mathbf{A}\mathbf{y}^n = \mathbf{f}(\mathbf{y}^{n-1}) \quad (5.7)$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$(\mathbf{y}^n)_j := y_j^n; \quad g := \frac{\Delta t}{h^2}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -g & 1+2g & -g & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \dots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -g & 1+2g & -g \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(N+1) \times (N+1)} \quad (5.8)$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{y}^{n-1}) = \begin{pmatrix} -hg_1(n\Delta t) \\ y_1^{n-1} - \nu^2 e^{y_1^{n-1}} \\ \vdots \\ y_{N-1}^{n-1} - \nu^2 e^{y_{N-1}^{n-1}} \\ -hg_2(n\Delta t) \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N+1} \quad (5.9)$$

$$\mathbf{f} : \mathbb{R}^{N+1} \rightarrow \mathbb{R}^{N+1}$$

$$\mathbf{y}^n = \begin{pmatrix} y_0^n \\ y_1^n \\ \vdots \\ y_{N-1}^n \\ y_N^n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N+1}. \quad (5.10)$$

### 5.3. 2. megközelítés - IMEX- $\vartheta$ -módszer

A fenti IMEX-módszer általánosabb alakját az IMEX- $\vartheta$ -módszert is alkalmazható a numerikus megoldás előállítására. Ez mindösszesen annyi eltérést mutat a 5.2. (al)részben tárgyalt algoritmustól, hogy a numerikus sémánkban a diffúziós, vagy másnéven stiff, azaz merev tagot a  $\vartheta$ -módszerrel közelítjük. Itt  $\vartheta \in [0, 1]$  paraméter. Így a közelítés sémája a következőre módosul:

$$\frac{y_j^{n+1} - y_j^n}{\Delta t} = \left( \vartheta \frac{y_{j+1}^{n+1} - 2y_j^{n+1} + y_{j-1}^{n+1}}{h^2} + (1 - \vartheta) \frac{y_{j+1}^n - 2y_j^n + y_{j-1}^n}{h^2} \right) - \nu^2 e^{y_j^n}. \quad (5.11)$$

**Definíció.** Egy feladat stabil, ha a megoldások egyenletesen folytonosan függenek a célfüggvénytől.

Megjegyezzük, hogy  $\vartheta \equiv 1$  esetén a 5.2. alfejezetbeli algoritmust kapjuk vissza, továbbá  $\vartheta \geq 0.5$  esetén a módszer stabil lesz, ekkor csak  $\mathbf{A}$  és  $\mathbf{f}$  alakja változik meg (könnyen kiszámítható módon).

## 5.4. Az algoritmus - Gauss-, vagy inga-módszer

A tridiagonális mátrixok egy speciális csoportja által meghatározott lineáris algebrai egyenletrendszerek rendelkeznek a hatékony, gyors megoldhatóság tulajdonságával, az ilyen típusú egyenletrendszerek megoldását az úgynevezett inga-, vagy másnéven Gauss-módszerrel végezzük. A tridiagonális mátrixok által meghatározott lineáris algebrai egyenletrendszerek közül az inga-módszerrel megoldható feladatok kritériuma tehát az, hogy a:

$\mathbf{Q}\mathbf{x} = \mathbf{u}$  lineáris algebrai egyenletrendszerben szereplő  $\mathbf{Q}$  mátrix az alábbi alakú legyen:

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} b_1 & -c_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -a_2 & b_2 & -c_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \dots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -a_{n-1} & b_{n-1} & -c_{n-1} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -a_n & b_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}. \quad (5.12)$$

Itt mind  $a_i$ , mind  $b_i$ , mind  $c_i$  pozitív  $\forall i = 1..n$ -re. Feltesszük még továbbá, hogy:

$$b_i \geq a_i + c_i, \quad i = 1..n.$$

Valamint  $\exists j$  index, melyre:

$$b_j > a_j + c_j.$$

Megjegyezzük, hogy ezen feltevésekhez inicializálni kell  $a_1$ , valamint  $c_n$  értékeket. Rövid meggondolással adódik, hogy  $a_1 = c_n := 0$  választás jóldefiniált, azaz a fenti kifejezéseknek értelmet adnak  $i = 1$  és  $i = n$  esetén.

Vegyük észre továbbá, hogy az (5.8) képlettel definiált  $\mathbf{A}$  mátrixunk éppen ilyen alakú, ha (5.6) alapján állítjuk össze a (5.7) rendszert, ez azt vonja maga után, hogy a lineáris algebrai egyenletrendszer numerikus megoldást végezhetjük az inga módszer segítségével.

Az inga-módszer menete a  $\mathbf{Q}\mathbf{x} = \mathbf{u}$  lineáris algebrai egyenletrendszerre

nézve a következő: Keressük  $x_{i-1}$ -et:

$$x_{i-1} = \alpha_i x_i + \beta_i \quad (5.13)$$

alakban, ahol  $\alpha_i$  és  $\beta_i$   $i = 1..n$  ismeretlen számok. Az  $\mathbf{u}$  vektorunknak az  $i$ . komponense, azaz  $u_i \equiv (\mathbf{u})_i$  sora ( $i = 1..n$ ) a következő módon írható fel, ha elvégezzük a mátrix-szal való beszorzást:

$$-a_i x_{i-1} + b_i x_i - c_i x_{i+1} = u_i, \quad i = 1..n. \quad (5.14)$$

Most (5.13) behelyettesítve (5.14)-es egyenletbe, majd mindezt átrendezve a következőhöz juthatunk:

$$(b_i - a_i \alpha_i) x_i = u_i + a_i \beta_i + c_i x_{i+1}. \quad (5.15)$$

Tegyük fel, hogy:

$$b_i - a_i \alpha_i \neq 0.$$

Ekkor ezzel leosztva a következő kifejezéshez jutunk (5.15) alapján:

$$x_i = \frac{u_i + a_i \beta_i}{b_i - a_i \alpha_i} + \frac{c_i}{b_i - a_i \alpha_i} x_{i+1}. \quad (5.16)$$

Természetesen igaz (5.13) alapján, hogy:

$$x_i = \alpha_{i+1} x_{i+1} + \beta_{i+1}. \quad (5.17)$$

Így a fenti, (5.17)-es összefüggést (5.16)-ba visszahelyettesítésével kapjuk, hogy:

$$\alpha_{i+1} = \frac{c_i}{b_i - a_i \alpha_i}; \quad \beta_{i+1} = \frac{u_i + a_i \beta_i}{b_i - a_i \alpha_i}, \quad i = 1..n - 1. \quad (5.18)$$

Az első egyenletből, azaz:

$$b_1 x_1 - c_1 x_2 = u_1$$

összefüggésből adódik a következő:

$$\alpha_2 = \frac{c_1}{b_1}; \quad \beta_2 = \frac{u_1}{b_1}. \quad (5.19)$$

Tekintsük most  $\alpha_1$  és  $\beta_1$  értékét. (5.18)-ból kiderül, hogy  $\alpha_i$  és  $\beta_i$  rekurzióját az  $i = 1$  helyen nézve éppen (5.19) egyenletet kapjuk eredményül, ha  $\alpha_1 = \beta_1 = 0$  -t helyettesítünk be, azaz  $\alpha_1 \equiv \beta_1 \equiv 0$  a jó kezdőérték.

Hasonló okfejtés végezhető el  $i = n$ -re is, nevezetesen (5.13) és az utolsó egyenlet miatt:

$$u_n = -a_n x_{n-1} + b_n x_n = -a_n(\alpha_n x_n + \beta_n) + b_n x_n$$

Tehát megkapható a rekurzió egy általános  $i$  tagjának képlete a következő alakban:

$$x_n = \frac{u_n + a_n \beta_n}{b_n - a_n \alpha_n}. \quad (5.20)$$

Vegyük észre, hogy (5.18)-ban  $i \equiv n$  helyen

$$\beta_{n+1} = \frac{u_n + a_n \beta_n}{b_n - a_n \alpha_n} \stackrel{(5.20)}{=} x_n.$$

Tehát az algoritmus menete a következő:

$$\alpha_1 = \beta_1 \equiv 0$$

(5.18) alapján  $i = 1..n - 1$ -re kiszámoljuk  $\alpha_2.. \alpha_n$  és a  $\beta_2.. \beta_n$  értékeket, valamint  $\beta_{n+1}$ -et.

Ezután visszafelé lépegetve -ugyanis  $x_n \equiv \beta_{n+1}$  már ismert-  $i = n..2$ -re meghatározzuk az  $x_{n-1}..x_1$  értékeket (4.13) formula segítségével. Ezzel megkapjuk a lineáris algebrai egyenletrendszerünk ismeretlen  $\mathbf{x}$  vektorát.

## 5.5. A megoldhatóság kérdése

Elvárás ennél a gyakorlati alkalmazásnál, hogy legyen megoldás és annak egyértelműségét a kezdeti-, és peremfeltételek biztosítsák. Következőekben a megoldhatóság kérdésének vizsgálatával foglalkozunk.

**Definíció.** Azt mondjuk, hogy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  diagonálisan domináns mátrix, ha  $\forall i = 1..n$ -re igaz az, hogy:

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1; j \neq i}^i |a_{ij}| = R_i.$$

A dominancia szigorú, ha

$$|a_{ii}| > R_i \quad \forall \quad i = 1..n.$$

**2. Tétel(Gersgorin).** Legyen  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{k \times k}$  tetszőleges mátrix és

$$R_i := \sum_{j=1; j \neq i}^k |a_{ij}|$$

$$G_i := \{z \in \mathbb{C} : |z - a_{ii}| \leq R_i\}.$$

Ekkor  $\mathbf{A}$  valamennyi sajátértéke a  $G := \cup_{i=1}^k G_i$  körökön belül helyezkedik el.

**Bizonyítás.** Az  $\mathbf{A}$  mátrix tetszőleges sajátértékéhez tartozó sajátvektort jelölje  $\mathbf{v}$ . Legyen továbbá

$$|\mathbf{v}_i| := \max_{j=1}^k |\mathbf{v}_j| = \|\mathbf{v}\|_\infty.$$

Ekkor az  $(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I})\mathbf{v} = \mathbf{0}$   $i$ . sorát felírva kapjuk a következőt:

$$(a_{ii} - \lambda)\mathbf{v}_i + \sum_{j=1; j \neq i}^k a_{ij}\mathbf{v}_j = 0.$$

Átrendezve és abszolútértéket véve:

$$|a_{ii} - \lambda||\mathbf{v}_i| = \left| \sum_{j=1; j \neq i}^k a_{ij}\mathbf{v}_j \right| \leq \sum_{j=1; j \neq i}^k |a_{ij}||\mathbf{v}_j| \leq \sum_{j=1; j \neq i}^k |a_{ij}||\mathbf{v}_i|.$$

Ezzel beláttuk a tételt, hiszen  $v_i$ -vel leosztva kapjuk a kívánt egyenlőséget:

$$|a_{ii} - \lambda| \leq \sum_{j=1; j \neq i}^k |a_{ij}| = R_i. \quad \square$$

**Következmény.** Ha  $\mathbf{A}$  szigorúan diagonálisan domináns, akkor  $\lambda = 0$  nem sajátértéke  $\iff \mathbf{A}$  mátrix reguláris, azaz invertálható, így az  $\mathbf{A}$  mátrix által adott lineáris algebrai egyenletrendszer megoldható. Ám a fenti numerikus megoldásra a tétel közvetlenül nem alkalmazható, mert az első és az utolsó sorai miatt  $\mathbf{A}$  nem szigorúan diagonálisan domináns.

**Definíció.** Azt mondjuk, hogy az  $\mathbf{A}$  mátrix irreducibilis, azaz felbonthatatlan, ha az ő gráfja összefüggő.

Ez a tulajdonság a numerikus megoldás vizsgálatával kapott (5.8) mátrixra is igaz, azaz a mátrixunk irreducibilis.

Az ilyen típusú mátrixokra a **Gersgorin-tétel** egy gyengített változata érvényes.

**3. Állítás.** *Tegyük fel, hogy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  irreducibilis mátrix diagonálisan domináns és  $\exists$  (legalább egy)  $i$  sora, melyre a dominancia szigorú. Ekkor  $\mathbf{A}$  reguláris.*

**Bizonyítás.** Indirekt tegyük fel, hogy  $\mathbf{A}$  szinguláris, ekkor  $\exists$  (legalább egy)  $\lambda$  sajátértéke, melyre  $\lambda = 0$  fennáll. **Gersgorin-tétel**ből következik, hogy létezik (legalább) egy kör, amelyben a  $\lambda$  sajátérték bennefekszik, azaz  $\lambda \in G$ , de ez a diagonális dominancia miatt nem fekédkhet minden körön belül, ezért csak az képzelhető el, hogy a körök uniójának határán helyezkedik el, mindez **Taussky tétele** alapján azt jelentené, hogy  $\partial G_i \equiv 0$ , de ez lehetetlen, hiszen az  $i$ . sorban a dominancia szigorú volt a mátrixban, ezzel ellentmondásra jutottunk, tehát a tételt bebizonyítottuk.  $\square$

**Következmény.** A (5.8) mátrix invertálható, azaz (5.7)-nek mindig létezik egyértelmű megoldása.

**Definíció.** Egy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mátrixot nem szinguláris M-mátrixnak nevezünk, ha  $a_{ij} \leq 0 \quad \forall \quad i, j$ , feltéve, hogy  $i \neq j$ , valamint  $\exists$  olyan  $\mathbf{g} > 0$ ,  $\mathbf{g} \in \mathbb{R}^n$ , hogy  $\mathbf{A}\mathbf{g} > 0$ .

**4. Állítás.** *Ha  $\mathbf{A}$  egy M-mátrix, akkor  $\mathbf{A}$  reguláris és inverze nemnegatív elemekből áll.*

**Bizonyítás.** Legyen  $\mathbf{g} > 0$  olyan vektor, hogy  $\mathbf{A}\mathbf{g} > 0$ , továbbá  $\mathbf{G} := \text{diag}(\mathbf{g}_i)$  álló mátrix. Ekkor igaz az, hogy  $\mathbf{G} \geq 0$ , diagonális és reguláris mátrix.

$$\mathbf{A}\mathbf{g} = \mathbf{A}\mathbf{G}\mathbf{e} = \bar{\mathbf{A}}\mathbf{e} ; \quad \mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T.$$

$$\mathbf{A}\mathbf{g} = \bar{\mathbf{A}}\mathbf{e} > 0.$$

Ezért  $\mathbf{A}$  és  $\bar{\mathbf{A}}$  előjelei megegyeznek, ezért  $\bar{\mathbf{A}}$  főátlója domináns:

$$0 < (\bar{\mathbf{A}}\mathbf{e})_i = \bar{a}_{ii} + \sum_{j=1; j \neq i}^m \bar{a}_{ij} = \bar{a}_{ii} - \sum_{j=1; j \neq i}^m |\bar{a}_{ij}|.$$

Ezért:

$$\bar{a}_{ii} > \sum_{j=1; j \neq i}^m |\bar{a}_{ij}| > 0.$$

Így  $\bar{\mathbf{A}}$  egy diagonálisan domináns mátrix így a **Hadamard-tétel**ből következően, mind  $\mathbf{A}$  mind  $\bar{\mathbf{A}}$  reguláris. Továbbá használjuk fel a

$$\sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{B} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}$$

összefüggést, azaz a **Neumann-sor** összegképletét, valamint:

$$\bar{\mathbf{D}} = \text{diag}(\bar{a}_{ii}) \quad \mathbf{B} = \mathbf{I} - \bar{\mathbf{D}}^{-1}\bar{\mathbf{A}}$$

jelöléseket. Ekkor  $\mathbf{B} \geq 0$  és hasonlóan  $\bar{\mathbf{D}} \geq 0$ , továbbá  $\bar{\mathbf{D}}$  reguláris és inverze nemnegatív elemekből áll. A fentiek miatt:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{B} \geq 0 \quad \implies \quad (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1} \geq 0.$$

Továbbá:

$$\bar{\mathbf{A}} = \bar{\mathbf{D}}(\mathbf{I} - \mathbf{B}) \quad \iff \quad \bar{\mathbf{A}}^{-1} = (\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\bar{\mathbf{D}}^{-1}.$$

Itt a jobboldalon mindkét mátrix inverze nemnegatív elemekből áll, tehát:

$$\bar{\mathbf{A}}^{-1} \geq 0.$$

Továbbá:

$$\bar{\mathbf{A}} = \mathbf{A}\mathbf{G} \quad \implies \quad \mathbf{A} = \bar{\mathbf{A}}\mathbf{G}^{-1} \quad \implies \quad \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{G}\bar{\mathbf{A}}^{-1}.$$

Mivel mind  $\mathbf{G}$ , mind  $\bar{\mathbf{A}}^{-1} \geq 0$ , ezért  $\mathbf{A}$  nemcsak reguláris, de inverze nemnegatív is.  $\square$

Fontos megjegyezni, hogy (5.8) mátrix egy nem-szinguláris M-mátrix azaz alkalmazható rá a fenti tétel, hiszen  $\mathbf{e} = (1, 1, \dots, 1)^T$ -al beszorozva egy pozitív vektorhoz jutunk.

Ha  $\mathbf{A}$  egy M-mátrix, akkor éljünk a  $\mathbf{A} \in \mathcal{K}$  jelöléssel.

**Definíció.** Egy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  mátrixot M-mátrixnak nevezünk, ha  $\exists \varepsilon \geq 0$  szám, melyre  $\mathbf{A} + \varepsilon \mathbf{I} \in \mathcal{K}$ . Az ilyen tulajdonságú mátrixok osztályát jelölje  $\mathcal{K}_0$ . Természetesen  $\mathcal{K} \subset \mathcal{K}_0$ .

**5. Állítás.** *Tegyük fel, hogy  $\mathbf{A} \in \mathcal{K}_0$ . Ekkor  $\mathbf{A} \in \mathcal{K} \iff \exists \mathbf{A}^{-1}$ .*

Ezen jelölésekkel és definíciókkal, valamint állításokkal térjünk át az (5.8) mátrixunk kvalitatív vizsgálatára.

**6. Állítás.** *(5.8) alakban adott mátrix egy M-mátrix, azaz  $\mathbf{A} \in \mathcal{K}$ .*

**Bizonyítás.** Legyen  $\varepsilon > 0$  tetszőleges, ekkor

$$\mathbf{A} + \varepsilon \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 + \varepsilon & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -q & 1 + 2q + \varepsilon & -q & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \dots & \ddots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -q & 1 + 2q + \varepsilon & q \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 + \varepsilon \end{pmatrix}$$

továbbá

$$(\mathbf{A} + \varepsilon \mathbf{I})\mathbf{e} = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ 1 + \varepsilon \\ \vdots \\ 1 + \varepsilon \\ \varepsilon \end{pmatrix} > \mathbf{0}.$$

Tehát  $\mathbf{A} + \varepsilon \mathbf{I} \in \mathcal{K}_0$ , továbbá **3. Állítás** -ből adódó **Következmény**-ből adódóan láttuk, hogy invertálható is, ugyanis M-mátrix  $\implies \mathbf{A} \in \mathcal{K}$ .

Másrésről pedig megmutattuk, hogy (5.8) mátrix egy reguláris. Tehát összességében igaz, hogy (5.8) egy reguláris M-mátrix.  $\square$

## 6. fejezet

# Összefoglalás

A Föld szennyezésének visszaszorítását a fosszilis üzemanyagokról a megújuló energiaforrásokra való áttérésben látják. Ennek egyik - ha nem a legfontosabb - alternatívája az üzemanyagcellák használata. Roppant fontos tehát a bennük lejátszódó folyamat megismerése, ezáltal fejlesztésük útjának megtalálása. Ehhez nyújt alapvető segítséget a cellák matematikai modellezése. Már az egyszerűbb, 4.1 részben tárgyalt modell megismerése is óriási előrelépést jelent a kutatásokban, ugyanis az üzemanyagcellák hatásfokának jelentős javítása érhető el, mivel ez utóbbi felülről nem korlátozott, ezért az erre irányuló fejlesztések kulcsfontosságúak. A dolgozat célja az állandó, és az idő-, valamint helyfüggő esetek bemutatása volt a fizikai modellen keresztül. Fontos volt, hogy nem csak elméleti, de numerikus közelítések is adhatóak az egyes modellekre, hiszen pusztán elméleti eredményekkel nem lehet kísérleteket végezni az eleinte költségigényesen megépített cellákon. A numerikus megoldás ismerete - még ha csak az állandó vezetési együtthatóval bíró modell esetében is, de - fontos és helyes irányt ad a cellák fejlesztésére nézve. Elmondható tehát, hogy a matematikai, numerikus kísérletek elvégzése előfeltétele egy hatékony üzemanyagcella gyors és költséghatékony fejlesztésének, kivitelezésének. Ezt az alapvető szerepet minden - üzemanyagcellák fejlesztésével foglalkozó - cég felismerte és napjainkban a matematikai szimuláció legalább annyira fontos, mint a fizikai vagy a kémiai modell.

# Irodalomjegyzék

- [1] I. Faragó, G. Inzelt, M. Korniyik, Á. Kriston, T. Szabó, *Stabilization of a numerical model through the boundary conditions for the real-time simulation of fuel cells/ Innovations and Advanced Techniques in Systems, Computing Sciences and Software Engineering*, Springer Verlag, (2008) 489-494.
- [2] Izsák F., Faragó I., Szabó T., *Üzemanyagcellák modellezése helyfüggő vezetési együtthatók esetén*, kézirat, Budapest, (2009).
- [3] Stoyan G., Takó G., *Numerikus módszerek 1.*, TypoTex, Budapest, (2005).
- [4] Freud R., *Lineáris algebra*, ELTE Eötvös Kiadó, Budapest, (2006).
- [5] Kiss E., *Bevezetés az algebrába*, TypoTex, Budapest, (2007).
- [6] I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series, and Products*, Academic Press, San Diego, (2000) 1110.
- [7] O. Taussky-Todd, *A Recurring Theorem on Determinants*, Amer. Math. Monthly 56, (1949) 672-676.
- [8] FuelCell.hu, <http://www.fuelcell.hu>.
- [9] Független Ökológiai Központ Alapítvány, <http://www.foek.hu>.