

Opponensi vélemény

Till Zoltán

„Továbbfejlesztett módszerek heterogén katalitikus folyamatok bizonytalanságának csökkentésére”

(Advanced Methods in the Design of Heterocatalytic Processes under Uncertainties)
című PhD dolgozatáról

Jelölt a dolgozatban pszeudo-reakciókat (lumped reactions) tartalmazó reakciórendszerek kinetikai együtthatóinak meghatározására, ilyen reakciórendszerek egyszerűsítésére, illetve összehasonlítására számos példát és módszert mutat be.

A kinetikai együtthatók meghatározásán túl vizsgálta ezek megbízhatóságának jellemzését, a figyelembevett pszeudo-reakciók számának hatását, valamint módszereket dolgozott ki az identifikált kinetikai együtthatók megbízhatóságának növelésére.

Munkájának kiindulópontja, hogy a gyakorlatban használt, identifikált reakciórendszerek sok esetben túl sok paramétert tartalmaznak az illesztéshez használt kísérleti adatokhoz képest. Ilyen esetben az identifikáció eredményeként kapott paraméter-együttes jól reprodukálja a kísérleti adatokat, de sok más, esetleg nagyon eltérő paraméter-együttes is megteszi ezt, tehát az illesztett paramétereknek nagy a bizonytalansága.

Jelölt az illesztett kinetikai paraméterek bizonytalanságának pontos, kvantitatív megfogalmazására, és a bizonytalanság mértékének csökkentésére dolgozott ki több módszert.

Többféle szempontból vizsgálta az alábbi folyamatokat, és többféle modellt készített az alábbi reakciórendszerek és reaktorkonfigurációk leírására:

- műanyagok szakaszos pirolízise
- VGO hidro-krakkolás, H₂ fogyás figyelembevételével, illetve anélkül, csőreaktorban
- HCl oxidáció csőreaktorban
- Etán pirolízis csőreaktorban

A kidolgozott algoritmusokat a szakirodalomban közölt kísérleti adatok értelmezésére és modellezésére használta fel, és számítási eredményeit a kísérleti adatokkal való összevetéssel ellenőrizte.

A dolgozat témája korszerű, aktuális, a kidolgozott módszerek több ponton újszerűek, és a gyakorlatban hasznosíthatóak.

A jelölt a dolgozatban közölt tudományos eredményeit 7 nemzetközi folyóiratban, valamint 8 nemzetközi konferencia-kiadványban megjelent közleményben publikálta.

273 oldalas dolgozatát angol nyelven készítette el, 293 irodalmi hivatkozást használt fel. A tárgyalt anyag kifejezetten sok témát érint, amelyeket jól rendszerezve, a megoldott kutatási feladatok szerint csoportosítva, érthetően mutat be.

A dolgozatban jól elkülönülnek az előzmények (1. fejezet: bevezetés, 2. fejezet: irodalmi összefoglalás) illetve a jelölt munkája (4-11. fejezetek). A 3. fejezet (reaktor modellek) előzményeket és saját eredményeket egyaránt tartalmaz, de ezek egyértelműen elkülönülnek, jól áttekinthető, melyik rész hova tartozik.

A dolgozat sok témakört érintő, nagy volumenű munkát mutat be. Ennek ellenére az egyes fejezetek logikusan kapcsolódnak egymáshoz, bemutatva, hogy az egyes kutatási részfeladatok hogyan következnek egymásból, illetve hogyan épülnek egymásra.

A kidolgozott módszereket, az elért eredményeket a feldolgozott irodalom tükrében is értékeli, kiemeli az egyes újszerű megközelítéseket.

Jelölt munkáját a dolgozat munkahelyi vitájára felkért előbírálóként korábban megismertem. Az előbírálatban tett kérdéseimet, megjegyzéseimet jelölt megválaszolta, illetve a dolgozatot azoknak megfelelően kiegészítette.

Kifejezetten hasznosnak találom a dolgozat végén azoknak a témáknak, ötleteknek a felsorolását, amelyek a megoldott feladatok továbbgondolásából következnek, de megvalósításukra nem került sor. Ezek egyrészt tágabb kontextusba helyezik a tárgyalt anyagot, illetve segítik a téma kutatásának folytatását.

A jelölt által ismertetett tézispontokat elfogadom új tudományos eredményeknek, és a közölt munka alapján a PhD-fokozat odaítéléséhez a dolgozatot

elfogadásra javasolom.

Budapest, 2020. november 17.



dr Meszéna Zsolt vegyészmérnök
a kémiai tudomány kandidátusa