

Doktori (PhD) értekezés tézisei

**Az algoritmus fejlesztése reakció- és összetétel-jellemzésre
többkomponensű elegyekben**

Hamadi Omar Péter

Pannon Egyetem
Vegyésmérnöki és Anyagtudományok
Doktori Iskola

Témavezetők:
Dr. Varga Tamás
Dr. Kummer Alex



Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék
Veszprém
2024.

1 Bevezetés és célok

A modern vegyipari tevékenység alapvető részét képezik a különböző berendezéseket leíró matematikai modellek. Összetettségétől függően, egy rendszer leírható néhány egyenlettel, de sok esetben a leírás csak komplex matematikai kifejezésekkel lehetséges. Kémiai reaktorok esetén, a leíró egyenleteknek tartalmaznia kell a megfelelő termodinamikai és kinetikai összefüggéseket is. A legösszetettebb kinetikai modell tartalmazza az összes komponens minden reakcióját. Sok-komponensű rendszerek esetében egy ilyen összetett modell felírása rendkívül nehéz feladat, a modell validálása pedig szinte lehetetlen. Még ha mérhető is az egyes komponensek koncentrációjának változása a reakciórendszerben, a különböző reakciók hatásainak elkülönítése egy adott komponens koncentrációjára csak nagy bizonytalansággal lehetséges. Ennek a problémának a megoldására az elmúlt évtizedekben két fő megközelítést dolgoztak ki: az *“összevont”* (*lumped*) és a molekuláris modelleket, ahol a modellek egyszerűsítése, a komplexitásuk csökkentése vált központi kérdéssé. Ezt a központi kérdést alapul véve, munkámban olyan modelleket mutatok be melyek alkalmasak sok-komponensű rendszerek leírására. A vizsgált módszerek közül az első az úgynevezett *“összevont”* megközelítés, melynek diszkrét és folytonos változatát alapul véve meghatároztam a hidrokrakkolás folyamatát leíró egyenleteket. Diszkrét megközelítés esetén a modellegyenleteket a katalizátor dezaktiválódással, a folytonos változatot pedig újfajta hozameloszlási függvényekkel bővíttem. A következőkben javaslatot tettem a hidrogén oldhatóságának becslésére használt termodinamikai módszer kiválasztására, valamint a különböző módszerek becslésének optimalására. Mindezek mellett kidolgoztam egy módszert mely lehetővé teszi a kromatográfias elemzésekben fellépő retenciósido-eltolódás csökkentését. A kidolgozott módszert alapul véve egy, a műanyag hulladék katalitikus pirolízését vizsgáló kísérlet sorozat termékelegeiben megjelenő komponenseket azonosítottam, a számolt átlagos Kováts retenciós indexek és különböző molekuláris hasonlósági mértékek felhasználásával.

2 Tézisek

Tézis #1. A diszkrét-csoportosított („*discrete-lumped*”) modellezési megközelítést katalizátor-deaktivációs modellek beépítésével bővítettem, hogy részletesebb képet kapjak a katalizátorok szennyeződéséről.

- Napraforgóolaj és kerozin elegyének hidrokrakkolása esetén vizsgáltam a katalizátorok deaktivációs folyamatait. A munka során csoportosított („*lumped*”) modelleket fejlesztettem a rendszer kémiájának leírására, majd a katalizátor-deaktivációs modelleket integráltam a kinetikai modellbe a becslési pontosság javítása érdekében.

Kapcsolódó publikáció: 1

Tézis #2. A folyamatos-csoportosított („*continuous-lumped*”) modellezési módszert továbbfejlesztettem, hogy pontosabban leírjam a hidrokrakkoló reaktorban végbemenő térbeli és időbeli változásokat.

- Egy új, folyamatos csoportosítási megközelítést dolgoztam ki a hidrokrakkolás reakcióinak modellezésére, amely lehetővé teszi az idő- és térbeli változások leírását. A modellel optimalizálható a tartózkodási idő és a szelektivitás, így növelhető a folyamat hatékonysága.
- Továbbá egy Gauss-keverék modellt fejlesztettem ki, amely segít a hidrogén oldhatóságának modellezésében változó üzemi körülmények között.

Kapcsolódó publikációk:2,5

Tézis #3. Új számítási módszert fejlesztettem ki a katalitikus pirolízis termékelegyének kvalitatív elemzésére, amely molekuláris hasonlósági mértékeket és retenciós indexeket felhasználva képes az elegy összetételének pontosabb becslésére.

- Egy gyors és egyszerű klaszterező algoritmust fejlesztettem ki, amely a kromatogramok közötti időeltolódásokat kompenzálja.

- Ezt alapul véve, egy lineáris programozási feladatot írtam fel és oldottam meg, amellyel a molekuláris hasonlósági mértékeket és a Kováts-retenciós indexeket felhasználva a az összetétel becslésének pontosságát további javítottam.

Kapcsolódó publikációk: 3, 4

3 Eredmények hasznosítása és jövőbeli célok

A dolgozat kiemeli az innovatív számítási technikák és a fejlett modellezési megközelítések fontosságát a fenntartható energiaellátás és hulladékgazdálkodás terén, a vegyészmérnöki tudományágon belül. Minden fejezet egyedi módszerekkel és eredményekkel járul hozzá a kémiai folyamatok környezeti és gazdasági szempontból fenntartható optimalizálásához.

Jövőbeli célok között szerepel egy új modell bevezetése, amely a fejlesztett új típusú folyamatos-csoportosítási megközelítést és a hidrogén oldhatóságára kidolgozott becslési módszert ötvözi. E két megközelítés kombinálása egy olyan pontos modellt eredményezhet, amely a rendszer nyomásfüggését is képes figyelembe venni. Ezen túlmenően a kifejlesztett molekuláris összetétel-becslési módszer alapját képezheti egy új, „single-event” típusú modellezési megközelítésnek, amelyben az összetétel becslésére épülő reakcióút-azonosítás válik lehetővé.

4 Tézishez kapcsolódó publikációk

Külföldi folyóiratban megjelent publikációk:

1. Hamadi, Omar & Varga, Tamás & Till, Zoltán & Eller, Zoltán & Hancsók, Jenő. (2019). Model based investigation of catalyst fouling in case of special hydrocracking of sunflower oil and kerosene mixture. *Energy & Fuels*. 33. 10.1021/acs.energyfuels.8b04085.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 3.74

2. Hamadi, Omar & Varga, Tamás. (2023). Novel distributed parameter model-based continuous lumping approach: An application to a pilot-plant hydrocracking reactor. *Chemical Engineering Science*. 271. 118572. 10.1016/j.ces.2023.118572.

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 4.435

3. Hamadi, Omar & Varga, Tamás. (2024). Computational Insights into Catalytic Pyrolysis: Refining Molecular Composition Estimates using Kovats Retention Index and Molecular Similarities. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 10.1021/acs.iecr.4c03040

Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 3.914

Hazai folyóiratban megjelent publikációk

4. Hamadi, Omar & Varga, Tamás. (2022). Semi-supervised Clustering Algorithm for Retention Time Alignment of Gas Chromatographic Data. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*. 66. 10.3311/PPch.18834.

Scimago Journal Ranking: Q3, Impact factor: 1.573

Konferencia megjelenések

5. Hamadi, Omar & Varga, Tamás & Abonyi, János. (2020). Application Domain Discovery of Thermodynamic Models by Mixture of Experts Learning. 10.1016/B978-0-12-823377-1.50066-5.

Scimago Journal Ranking: Q4, Impact factor: 0.734