

# Kvalitatív elemzésen alapuló reakciómechanizmus meghatározás

**Varga T.**

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

Veszprém, H-8200 Egyetem u. 10.

## ÖSSZEFOGLALÁS

*A vegyipari rendszerek tervezése során az egyik legfontosabb feladat a konvertáló alrendszer tervezése, amely esetén a legfontosabb szempontok az optimális, de emellett biztonságos üzemmenet biztosítása. Ennek érdekében, már a tervezéskor fel kell tárni azon folyamatokat és ezek sebességét, amelyek az üzemeltetés során befolyásolják az alrendszer működését.*

*Valamely kémiai reakciórendszer mechanizmusán azon elemi folyamatok összességét értjük, amelyek során a kiindulási anyagok a végtermékké alakulnak. A reakciómechanizmus vizsgálatának tehát az a célja, hogy leírja azokat a közbenső állapotokat, amelyek során a rendszer a kezdeti állapotából a végállapotba jut. A kidolgozandó eszköz a szükséges tapasztalatok hiányában nyújthat segítséget a reakciómechanizmusok megismerésében és az egyes elemi reakciók sebességi egyenleteinek definiálásában.*

*Az utóbbi feladat a paraméteridentifikálás, míg az előző a struktúraidentifikálás tématerületéhez tartozik. A struktúra identifikációt a mért és a számított trajektóriák kvalitatív elemzése alapján végezzük, ugyanis ily módon a kialakuló trendek könnyen*

összehasonlíthatók. A kapott struktúra, illetve már ismert mechanizmus alapján a paraméteridentifikálás során megfogalmazott korlátos szélsőérték keresési feladat megoldásához, pedig evolúciós stratégiát alkalmazunk.

(Kulcsszavak: reakciómechanizmus, kvalitatív elemzés, paraméter identifikáció)

## **ABSTRACT**

### **Qualitative analysis based reaction mechanism identification**

T. Varga.

University of Pannonia, Faculty of Engineering, Department of Process Engineering

Veszprém, H-8200 Egyetem u. 10.

*One of the most important tasks during the design process of a chemical technology is the engineering design of the conversion subsystem based on the aspect of optimal and safe operation. Hence, before the design the rate of processes which have impact on the dynamic behavior of the subsystem must be identified.*

*The reaction mechanism of a reaction system represents all the elementary reaction steps which are required to convert the reagents into products. The aim of the reaction mechanism analysis is the identification of the route how the system goes from its initial to the end state. The developed tool can be applied to identify of an unknown reaction mechanism without the necessary chemist experience. Beside, the tool can be used to determine the parameters of the rate equations of each identified chemical reaction.*

*The first task requires structure while the second one requires parameter identification. The developed structure identification method is based on the qualitative analysis of measured and calculated state-variables trajectories, since the trends in the change of components can be easily compared based on the resulted sequences. To solve the constraint optimization*

*problem during the parameter identification process evolutionary strategy method is applied.*

(Keywords: reaction mechanism, qualitative analysis, parameter identification)

## **BEVEZETÉS**

A vegyipari rendszerek tervezése során az egyik legfontosabb feladat a konvertáló alrendszer tervezése, amely esetén a legfontosabb szempontok az optimális, de emellett biztonságos üzemmenet biztosítása. Ennek érdekében, már a tervezéskor fel kell tárni azon folyamatokat és ezek sebességét, amelyek az üzemeltetés során befolyásolják az alrendszer működését. A konvertáló alrendszer legkritikusabb eleme a reaktor, amelyben a korábban labor körülmények között elvégzett kísérletek során gyűjtött ismereteink alapján igyekszünk kézben tartani a lejátszódó folyamatokat. Az itt lejátszódó folyamatok jellegét tekintve lehetnek fizikai, kémiai, illetve fizikai-kémiai folyamatok is. Ebben a munkában a reaktorokban lejátszódó kémiai folyamatok, azaz a reakciók, megismerésének támogatására dolgoztunk ki egy lehetséges módszert.

Számtalan könyv és folyóirat cikk foglalkozik azzal, hogy lehetséges megoldásokat nyújtsanak a reakciómechanizmusok feltérképezéséhez. Mivel mindig lesznek olyan folyamatok, melyek mechanizmusának megismerése egy tervezési feladat első lépése, ezért ezen a tudományterületen elvégzett munka mindig aktuális lesz. Ennek érdekében, hogy megismerjük a feladat összetettségét, először az alapfogalmakat kell tisztáznunk (*Schwetlick, 1978; Turányi, 2010; Delvin, 2002; Grossman, 2003*).

Valamely kémiai reakció mechanizmusán azon elemi folyamatok összességét értjük, amelyek során a kiindulási anyagok a végtermékké alakulnak. A reakciómechanizmus vizsgálatának tehát az a célja, hogy leírja azokat a közbenső állapotokat, amelyek során a rendszer a kezdeti állapotából a végállapotba jut. Természetesen még ma sem vagyunk képesek arra, hogy teljes

részletességgel leírjuk a reakciókban résztvevő összes molekula mozgását, ezért csak egy olyan képet tudunk megfogalmazni, amely nagyszámú molekula viselkedésének összességéből adódik. Emellett a reagáló rendszer csak néhány kitüntetett állapotát jellemezhetjük. Ilyen kitüntetett állapotok a reakció során az átmeneti állapotok és a köztitermékek.

Köztitermékeknek azokat a kémiai képződményeket (molekulákat, atomokat, gyököket, ionokat, stb.) értjük, amelyek a reakció folyamán elvileg kimutatható, bár bizonyos körülmények között ezek csak igen kis mennyiségben képződnek, és amelyek az adott reakciókörülmények között végtermékké alakulnak át. A reakciók túlnyomó része egy, vagy több köztiterméken keresztül játszódik le, ezért ezeket többlépcsős reakciónak is nevezik, amelyek elemi reakciók sorozatából állnak. Az egy elemi reakcióban részt vevő molekulák számát a reakció molekularitásának nevezzük, amely a reakció rendűségét adja meg. A reakció sztöchiometriája írja le, hogy adott komponensek milyen szerepet töltenek be egy reakcióban, ami alapján megkülönböztetünk reagenseket, illetve termékeket. Ezentúl pedig megadja azt is, hogy milyen mennyiségben vesznek részt az egyes komponensek a reakcióban.

Egy adott reakció átmeneti állapotai és közbenső termékei számos módszerrel vizsgálhatók, e módszerek feloszthatók kinetikaira és nem kinetikaira (*Friess*, 1963). A reakciómechanizmus vizsgálatának és elemzésének feltétele az összes reakciótermék, és köztitermék pontos azonosítása és kvantitatív meghatározása. Ennek hiányában a reakció sztöchiometriáját egyértelműen és teljes bizonyossággal nem tudjuk meghatározni. A reakciótermékek jellege és eloszlása is lehetőséget nyújt a reakció mechanizmusának feltérképezésére, persze ehhez elengedhetetlen alapos és általános kémiai ismeret. A kidolgozandó eszköz a szükséges tapasztalatok hiányában nyújthat segítséget a reakciómechanizmusok megismerésében és az egyes elemi reakciók sebességi egyenleteinek definiálásában.

Az utóbbi feladat a paraméteridentifikálás, míg az előző a struktúraidentifikálás

tématerületéhez tartozik. A paraméteridentifikálás lényege egy feltételes szélsőérték feladat megoldása, amely esetünkben a feltételezett reakciókinetika összefüggésekkel számolt és a mért adatok összehasonlításával kapott modellhiba minimalizálását jelenti, a kinetikai paraméterterek módosításával. A struktúraidentifikálás feladata a változók közötti összefüggések feltárása és formalizálása, ami esetünkben a mérési adatok alapján, az egyes komponensek közötti kapcsolatok feltárását, azaz a reakciómechanizmus meghatározását jelenti.

A tervezett eszköz mindkét feladatban segítséget nyújthat. A struktúra identifikációt a mért és a számított trajektóriák kvalitatív elemzése alapján végezzük, ugyanis ily módon a kialakuló trendek könnyen összehasonlíthatók. A kapott struktúra, illetve már ismert mechanizmus alapján a paraméteridentifikálás során megfogalmazott korlátos szélsőérték keresési feladat megoldásához, pedig evolúciós stratégiát alkalmazunk.

A kidolgozott módszer kvalitatív trend analízis alkalmazásán alapul, melynek lényege, hogy a vizsgálandó idősort primitív epizódokra bontjuk, az alapján, hogy az első, illetve második deriváltak előjele milyen (*Cheung and Stephanopoulos, 1990*). Az első és második deriváltak előjele alapján, hét primitív epizódot különböztethetünk meg, ahogy ez az 1. ábrán látható.

### **(1. ábra helye!)**

Amennyiben olyan idősorok elemzését végezzük, amelyek egymástól nem függetlenek, akkor a kapott szekvenciákban megmaradnak azok a rendszer dinamikájára vonatkozó információk, amelyek alapján annak struktúráját feltárhatjuk. Képzeljük el, hogy az elemezni kívánt adatok egy kinetikai mérés eredményei, amiről elmondható, hogy az abban lévő idősorok, amik a komponensek koncentrációinak időbeli változását jelentik, egymással szorosan összefüggnek. A kvalitatív elemzést elvégezve egy ilyen adatsor, azonosíthatjuk azon trendeket, amelyekben esetleg két komponens koncentrációja csökken, miközben egy harmadiké nő, azaz a mérés azon szakaszában egy olyan reakció dominált, amelyben az első két komponens reagensként,

míg a harmadik termékként vett részt. Természetesen ez csak egy egyszerű példa volt, és ha több reakció játszódik le a rendszerben, azok egyszerre fejtik ki hatásukat.

A bevezetőt követően az Anyag és módszer fejezetben részletesen bemutatjuk a kidolgozott algoritmust, amely alkalmas a kitűzött cél megvalósítására. Az Eredmények és értékelésük fejezetben egy esettanulmányon mutatjuk be, az eszköz működését, majd a Következtetések fejezetben foglaljuk össze az elért eredményeket és mutatjuk be a jövőbeni terveket, elképzeléseket.

## **ANYAG ÉS MÓDSZER**

A munka során a célkitűzés egy olyan eszköz fejlesztése, amely segítheti ismeretlen reakciórendszerek struktúrájának feltárását, majd a feltárt reakciók sebességi egyenleteinek identifikációját. Annak érdekében, hogy egy ilyen eszközt megalkossunk először egy algoritmust dolgoztunk ki, mely az 2. ábrán látható.

### **(2. ábra helye!)**

Az első lépés a mért adatok feldolgozása, mely az egyes komponensek koncentrációjának időbeli változását kell tartalmazza. A feldolgozás itt annyit jelent, hogy az egyes idősorokat egyszerű kvalitatív trend analízist alkalmazva primitív epizódok szekvenciájára alakítjuk. Ennek eredményeképpen minden olyan komponenshez, melyhez tartozott mérési adat, egy szekvenciát rendelünk, s ezen szekvenciák együttese adja az adott reakciórendszert jellemző ujjlenyomatot. A reakciómechanizmus identifikáció során, azokat a struktúrákat fogjuk keresni, melyeket ugyanezen ujjlenyomattal tudunk jellemezni. Természetesen, ha szükséges a kvalitatív elemzést megelőzheti az adatok szűrése, amennyiben arra szükség van.

A mérési adatok feldolgozását követően a komponenslista összeállítására van szükség,

melyben olyan komponensek is szerepelhetnek, melyekhez nem tartozik mérési adat. A komponenslistában szereplő molekulák összegképlete, illetve molekula tömege alapján előállíthatók azon reakciók, melyek lejátszódhatnak a vizsgált rendszerben. Amennyiben az így kapott reakciólistában szereplőreakciók közül a független reakciókat is azonosítjuk, abban az esetben már az elemi reakciólépéseket kapjuk eredményül. A független reakciókat szűrését úgy végezzük, hogy az összes olyan reakciót, amit a többi reakció lineáris kombinációjaként előállítható, töröljük a halmazból. Az algoritmus ezen lépésén alapuló programrészlet további programozást igényel, ugyanis a szűrés még nem tökéletes. Az eredmények fejezetben bemutatott esettanulmányban ezért a független reakciók szűrését végző lépését kihagyva ismertetjük az algoritmus további lépéseit.

A következő lépésben a tisztított reakciólista alapján, a kombinatorikus úton lehetséges összes reakciómechanizmust állítjuk elő, természetesen itt is végezhetünk szűrést. Ebben a lépésben elvégzett szűrés lényege az olyan mechanizmusok törlése a listából, amelyekben a mérési adatok feldolgozása során szerzett tapasztalatoknak nem felelnek meg. Ennek lényege, hogy a keresett ujjlenyomatban, azon komponensek, amelyek fogynak, azaz legalább egy reakcióban reagensként vesznek részt, csak olyan reakciómechanizmusok figyelembevételét teszik szükségessé, amelyben ez a komponens legalább egy reakcióban fogy. Természetesen az ujjlenyomatban szereplő, növekvő koncentrációval jellemezhető komponensek esetén is továbbsszűrhetjük a lehetséges reakciómechanizmusokat. Az eredményül kapott reakciómechanizmus listában szereplő struktúrák már minden feltételnek eleget tesznek, s ezek között van az a mechanizmus is, amellyel a vizsgált rendszerben lejátszódó reakciókat jellemezhetjük. A következő lépésben az összes lehetséges reakciómechanizmus alapul véve dinamikus szimulációt végzünk és a szimuláció eredményeként kapott koncentráció trajektóriák kvalitatív elemzésével minden reakciómechanizmushoz egy ujjlenyomatot rendelünk.

A fizikai kísérleteket, melyekből mérési adatok származhatnak, általában egy lombikban végzik, amelybe a reagensek bemérését követően, katalizátor hozzáadásával, vagy anélkül,

időnként mintát véve és azt elemezve, követik nyomon a reakciórendszer okozta változásokat. Persze, ennél jóval kifinomultabb megoldások is léteznek, ahol már a reakciók okozta hőmennyiségek detektálása is megtörténik, illetve a nyomás és a hőmérséklet mérésével, már ezen paraméterek hatását is tudják vizsgálni a lejátszódó reakciók sebességére, esetleg a struktúrájára. Esetünkben a legegyszerűbb esetet vettük alapul, azaz egyelőre olyan adatok feldolgozására van csak lehetőség, amelyek egy lombikban, vagy szakaszosan üzemeltetett laboratóriumi reaktorban elvégzett kísérlet során kerültek összegyűjtésre. Szakaszos rendszerről lévén szó, a komponens tömegre felírt mérleg az alábbi módon egyszerűsödik:

$$\frac{dc_i}{dt} = R_i \quad i = \{A; B; C; \dots\}, \quad (1)$$

ahol  $c_i$  az  $i$ -edik komponens koncentrációját jelöli [ $\text{mol}/\text{dm}^3$ ]; az  $R_i$  az  $i$ -edik komponensre vonatkozó komponensforrást adja meg [ $\text{mol}/\text{dm}^3\text{s}$ ]; amelyet az alábbi módon számíthatunk:

$$R_i = \sum_{j=1}^n \nu_{ij} \cdot r_j, \quad (2)$$

ahol  $j$  jelöli a reakció számát;  $\nu_{ij}$  az  $i$ -edik komponens sztöchiometriai állandóját jelöli a  $j$ -edik reakcióban [-]; míg  $r_j$  a  $j$ -edik reakció reakciósebességét adja meg [ $\text{mol}/\text{dm}^3\text{s}$ ], amit az alábbi összefüggéssel számíthatjuk:

$$r_j = k_j \prod_{i=\{A; B; C; \dots\}} c_i^{n_{ij}}, \quad (3)$$

ahol  $k_j$  a  $j$ -edik reakció reakciósebességi állandóját jelöli, amely mértékegysége a reakció rendűségétől függ;  $n_{ij}$  pedig abban az esetben, ha az  $i$ -edik komponens a  $j$ -edik reakcióban fogy, akkor az  $i$ -edik komponens  $j$ -edik reakcióra vonatkozó sztöchiometriai tényezőjének abszolút értékével egyezik meg, amennyiben viszont az  $i$ -edik komponens nem fogy a  $j$ -edik reakcióban, akkor az értéke 0.

A felírt egyszerű dinamikus reaktor modellt MATLAB programcsomagban implementálva lehetővé vált a sztöchiometriai mátrix és a reakciók sebességi együtthatóinak ismeretében, a reakciók okozta változások időbeli nyomon követése. Az algoritmus ezen lépésében, a korábban generált lehetséges reakciómechanizmusokat, a reakciósebességi állandókra



definiált tartományokban a reaktor modell felhasználásával vizsgáltuk. A számított állapotváltozó trajektóriákat az egyes esetekben primitív epizódokból álló szekvenciákra bontjuk, amely az adott mechanizmust, az adott reakciósebességi állandók esetén jellemzi.

A reakciósebességi állandókra vonatkozó tartományokat, amelyek száma természetesen a mechanizmust alkotó reakciók számával egyezik meg, egyenlő részekre osztva, majd a lehetséges kombinációkat előállítva, a teljes reakciósebességi állandók által definiált térben megvizsgálható az adott reakciómechanizmus. Ennek eredményeképp megkapjuk azt, hogy a vizsgált reakciómechanizmus milyen ujjlenyomattal jellemezhető, köszönhetően az egyes reakciók sebességének egymáshoz való viszonyának. Minden reakciómechanizmus esetén elvégezve ezt a számítást, egy adatbázist kapunk eredményül, melyből kiválogathatók, azon mechanizmusok, melyek a keresett ujjlenyomatot adták eredményül.

Emellett, hogy a mechanizmust alkotó reakciók sebességi állandóinak azonosítását segítsük, minden mechanizmus esetén hozzárendelésre kerül az, hogy a keresett ujjlenyomatot mely reakciósebességi állandókra vonatkozó tartományban eredményezi. Ez azért fontos, ugyanis így a paraméter azonosítás során alkalmazott, korlátos szélsőérték kereső módszer, korlátait tudjuk definiálni. A következőkben egy egyszerű példán keresztül mutatjuk be a fentiekben ismertetett algoritmus lépéseit.

## **EREDMÉNYEK ÉS ÉRTÉKELÉSÜK**

A következőkben egy egyszerű példán keresztül mutatjuk be az előzőekben ismertetett algoritmus lépéseit. A példa kedvéért tekintsük az etán (A) dehidrogénezését (D), ahol termékként acetilént (C) szeretnénk előállítani, azonban közbenső lépésben etilén (B) is keletkezik. A két említett reakciólépés játszódhat csak le a rendszerben, illetve ezeken kívül a hidrogénezési lépéseket képzelhetjük még itt el, elemi reakciólépésekként. Az elvégzett kinetikai kísérlet, amely esetünkben most csak egy szimulációs vizsgálat eredménye, látható a

3. ábra baloldalán. A négy komponens tömegének változása látható az idő függvényében. A mérési adatok kvalitatív analízisének eredménye látható a 3. ábra jobb oldalán. Jól látható, hogy míg az etán (A) tömege folyamatosan csökken, ezt az egyetlen epizódból álló szekvencia: 'C'. Ezzel együtt az acetilén (C) és a hidrogén (D) mennyisége folyamatosan nő, amit a szintén egyetlen epizódból álló szekvenciák jelölnek: 'A'.

### **(3. ábra helye!)**

A közbenső lépésben keletkező etilénhez (B) tartozó szekvencia az előzőektől eltérően már összetettebb, köszönhetően annak, hogy a két reakciólépés sebességének aránya az idő előrehaladtával megváltozik és több etilén dehidrogéneződik, mint amennyi keletkezik az etán dehidrogénezésével. A négy komponens tömegének változását leíró szekvenciák összessége lesz a keresendő ujjlenyomat, s a cél, hogy megtaláljuk azt a mechanizmust, amely ezt az ujjlenyomatot eredményezi.

Az algoritmus következő lépésében azon reakciólépéseket azonosítjuk be, amelyek mind a tömegmérleget, mind az atomok számára felírt mérleget kielégítik. Ahogy az előző fejezetben jeleztük, mivel a független reakciók szűrése még nem tökéletes, így egyelőre az összes, a mérlegek kielégítő reakciót figyelembe vettük, ahogy ez az 1. táblázatban látható. A sorok jelölik a reakciókat, s látható, hogy egyensúlyra vezető reakciókat feltételezve összesen nyolc reakció képzelhető el. Természetesen, ha a lehetséges reakciókat tartalmazó táblázatot, mind mátrix kezeljük és annak rangját meghatározzuk, azt az értéket kapjuk vissza, amit fejezet elején, a rendszer ismertetésénél is meghatároztunk, azaz a mátrixban két egymástól független sor van. Az első és a negyedik sorban lévő reakciók azok, amelyeket keresünk, a többi sorban szereplő reakció ezek lineáris kombinációjával előállítható.

### **(1. táblázat helye!)**

Az algoritmus következő lépésében a reakciólistából lehetséges összes reakciómechanizmust generáljuk le, amely esetünkben maximálisan három reakciólépésből álló mechanizmust feltételezve 1128 darab mechanizmust jelent. Az algoritmus következő lépéseiben a generált mechanizmusok esetén számítjuk ki az egyes komponensekhez tartozó koncentráció változásokat, majd ezek alapján a lehetséges struktúrákat jellemző ujjlenyomatokat.

A 4. ábra két példán keresztül mutatja be az egyes mechanizmusokhoz tartozó ujjlenyomatokat és az ezekhez tartozó reakciósebességi állandókra vonatkozó korlátozásokat, melyeket a reakciók sebességének számítására alkalmazott összefüggések ismeretlen paramétereinek meghatározásánál alkalmazhatunk. A két bemutatott mechanizmus mindössze az utolsó reakcióban különbözik, azonban a hozzájuk tartozó ujjlenyomatok eltérnek egymástól, azaz ily módon beazonosíthatók a reakciórendszerek mögött lévő struktúrák.

**(4. ábra helye!)**

A javasolt algoritmus alapján egy eszköz fejlesztése is megkezdődött MATLAB GUI programot alkalmazva. Az eszköz egyelőre magyar és angol nyelven készül, ez persze könnyen bővíthető egyéb nyelvekkel, ha arra szükség lesz.

**(5. ábra helye!)**

## **KÖVETKEZTETÉSEK**

Valamely kémiai reakciórendszer mechanizmusán azon elemi folyamatok összességét értjük, amelyek során a kiindulási anyagok a végtermékké alakulnak. A reakciómechanizmus vizsgálatának tehát az a célja, hogy leírja azokat a közbenső állapotokat, amelyek során a rendszer a kezdeti állapotából a végállapotba jut. A kidolgozandó eszköz a szükséges tapasztalatok hiányában nyújthat segítséget a reakciómechanizmusok megismerésében és az egyes elemi reakciók sebességi egyenleteinek definiálásában.

A javasolt reakciómechanizmus identifikációs algoritmus a mért és a számított trajektóriák kvalitatív elemzése alapján végezzük, ugyanis ily módon a kialakuló trendek egyszerűen összehasonlíthatók. A kidolgozott algoritmus alapján megkezdjük az eszköz fejlesztését MATLAB programcsomagban. Azonban, hogy ez minden célunkat megvalósítsa, illetve a független reakciók kiszűrése lépése is megfelelően működjön, további fejlesztő munka elvégzésére van szükség.

## **KÖSZÖNETNYÍLVÁNÍTÁS**

Köszönetet mondok a TAMOP-4.2.2-08/1/2008-0018 (Élhetőbb környezet, egészségesebb ember - Bioinnováció és zöldtechnológiák kutatása a Pannon Egyetemen, MK/2) projekt anyagi támogatásáért.

## **IRODALOMJEGYZÉK**

Schwetlick, K., (1978), Reakciómechanizmusok kinetikai vizsgálata, Műszaki Könyvkiadó,

Budapest.

Turányi, T., (2010), Reakciómechanizmusok vizsgálata, Akadémiai Kiadó, Budapest.

Delvin, S., (2002), Organic Reaction Mechanism, Sarup & Sons, New Delhi.

Grossman, R.B., (2003), The Art of Writing Reasonable Organic Reaction Mechanisms,  
Springer, New York.

Friess, S.L., Lewis, E.S., (1963), Investigation of Rates and Mechanisms of Reactions, John  
Wiley & Sons, New York.

Cheung, J.T., Stephanopoulos, G., (1990), Representation of process trends. Part I. A formal  
representation framework, Computers and Chemical Engineering, 14, 495-510.

Levelezési cím (*corresponding author*):

**Tamás Varga**

Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék

H-8200 Veszprém, Egyetem út 10.

*University of Pannonia, Department of Process Engineering*

*8200 Veszprém, Egyetem út 10.*

Tel.: +36 88-624-447, Fax: +36 88-624-171

e-mail: [vargat@fmt.uni-pannon.hu](mailto:vargat@fmt.uni-pannon.hu)

## 1. Táblázat

### A lehetséges reakciók

	<b>A</b> (30 g/mol)	<b>B</b> (28 g/mol)	<b>C</b> (26 g/mol)	<b>D</b> (2 g/mol)
<b>r01</b>	-1	1	0	1
<b>r02</b>	-1	0	1	2
<b>r03</b>	-1	2	-1	0
<b>r04</b>	0	-1	1	1
<b>r05</b>	0	1	-1	-1
<b>r06</b>	1	-2	1	0
<b>r07</b>	1	-1	0	-1
<b>r08</b>	1	0	-1	-2

*Table 1: The possible reactions*

1. Ábra

Primitív epizódok

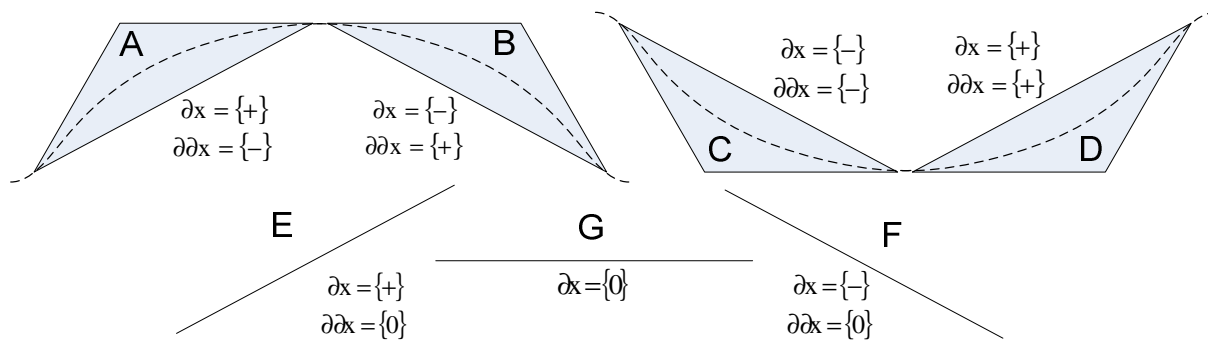


Figure 1: Primitive episodes



## 2. Ábra

### Reakciómechanizmus identifikáció támogatására kidolgozott algoritmus

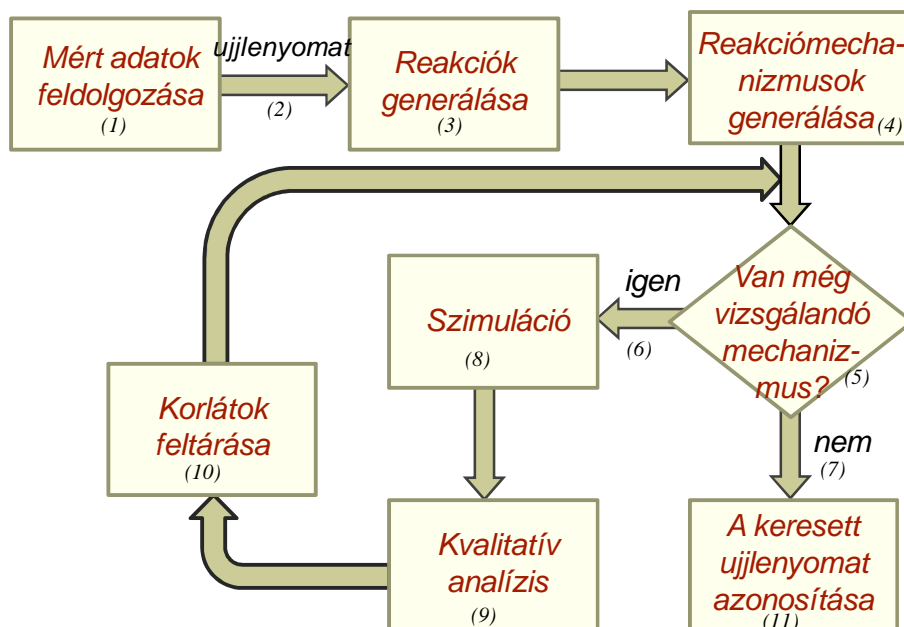


Figure 2: The developed algorithm to support the reaction mechanism identification process

Processing of measured data(1), Fingerprint(2), Generating of reactions(3), Generating of reaction mechanism(4), Is there any more reaction mechanism?(5), Yes(6), No(7), Simulation(8), Qualitative analysis(9), Determining the constraints(10), Identifying the unknown fingerprint (11)

### 3. Ábra

#### A mért adatsor és a keresett ujjenyomat

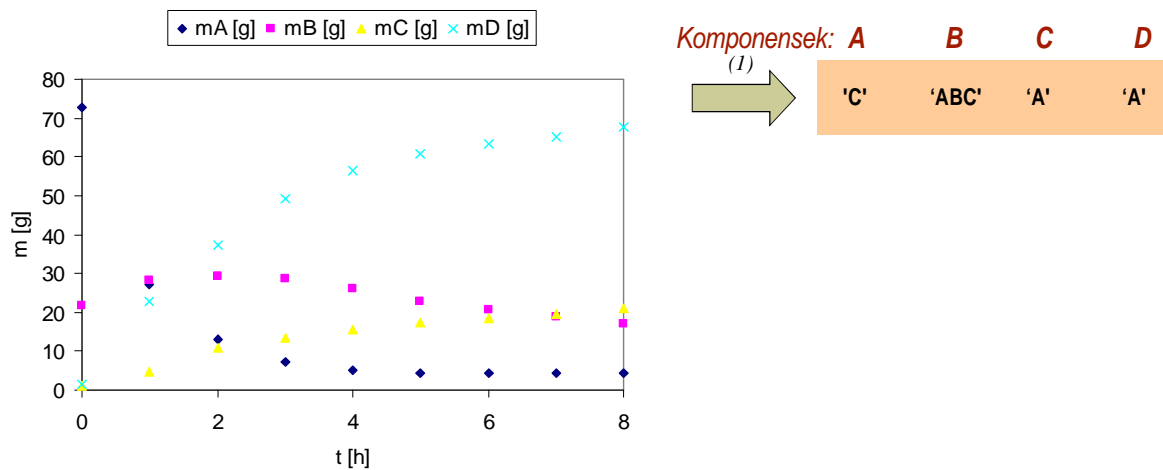


Figure 3: The measured data and the unknown fingerprint

Components(1)

## 4. Ábra

### Két lehetséges reakciómechanizmus összevetése

A vizsgált reakciómechanizmus:(1)

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 2 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

A reakciómechanizmus eredményezte ujjlenyomatok:(2)

'BC' 'C' 'A' 'A'  
'C' 'C' 'A' 'A'  
'C' 'BC' 'A' 'A'

'C' 'DA' 'A' 'A'  
'BC' 'DA' 'A' 'A'  
'C' 'A' 'A' 'A'

A reakciósebességi állandókra vonatkozó korlátozások: (3)

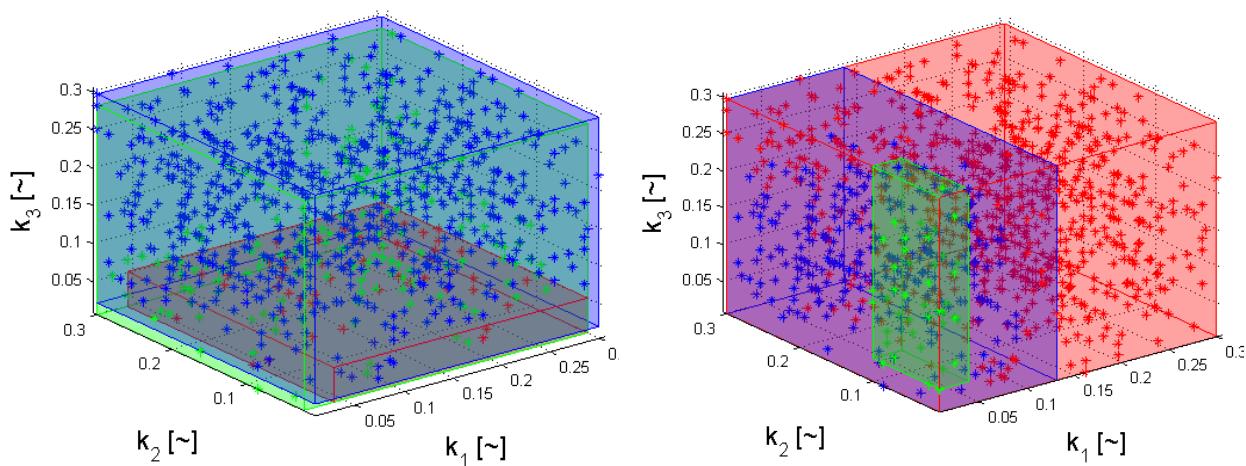


Figure 4: Compare of two possible reaction mechanism

The analyzed reaction mechanism(1), The resulted fingerprints(2), The determined constraints for the reaction rate constants(3)

## 5. Ábra

### A reakciómechanizmus identifikációját támogató eszköz

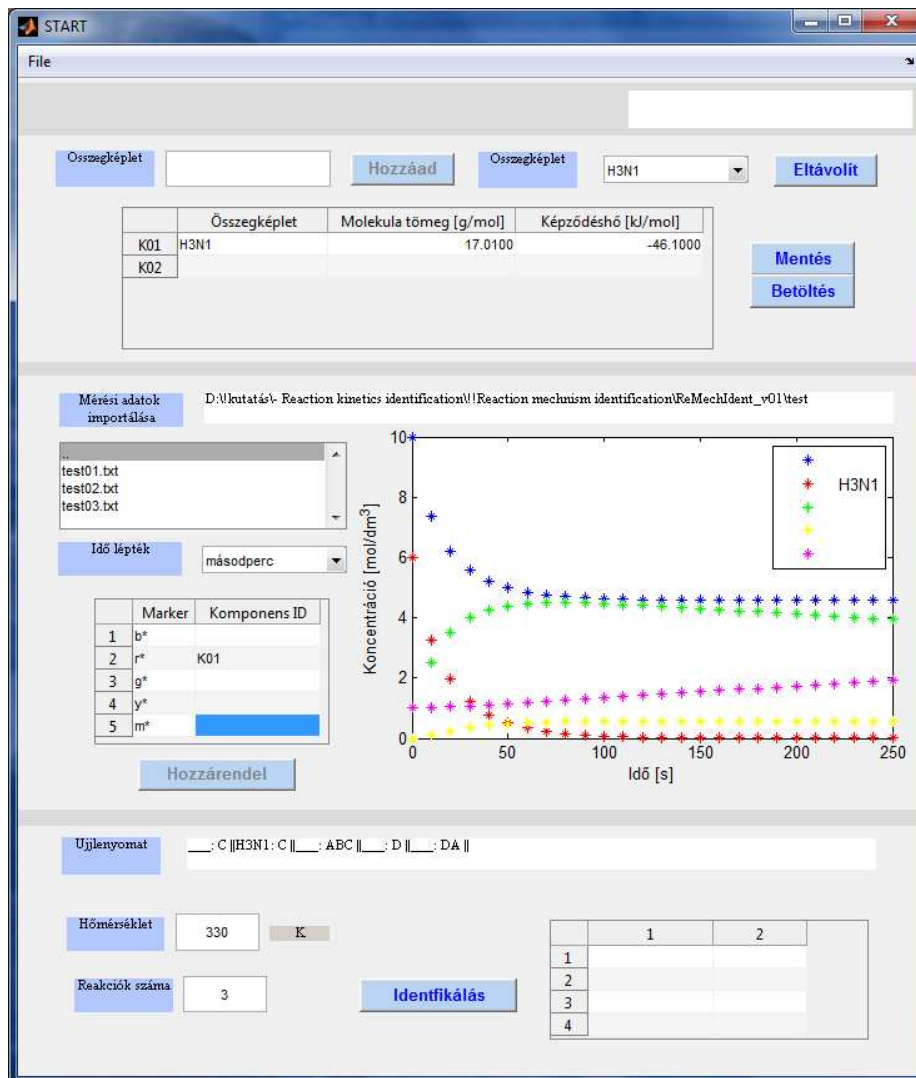


Figure 5: The developed tool to support the reaction mechanism identification process