

Kvalitatív elemzésen alapuló reakciómechanizmus meghatározás

Varga Tamás

Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézet Tanszék

*IX. Alkalmazott Informatika Konferencia ~ AIK 2011 ~
Kaposvár, Február 25.*



Tartalom

BEVEZETŐ

KVALITATÍV ANALÍZIS

ALGORITMUS BEMUTATÁSA

KIDOLGOZOTT ESZKÖZ

ÖSSZEFOGLALÁS

Reakciómechanizmusok vizsgálata

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

Méretnövelés

Labor



Pilot-plant üzem



Gyártó üzem

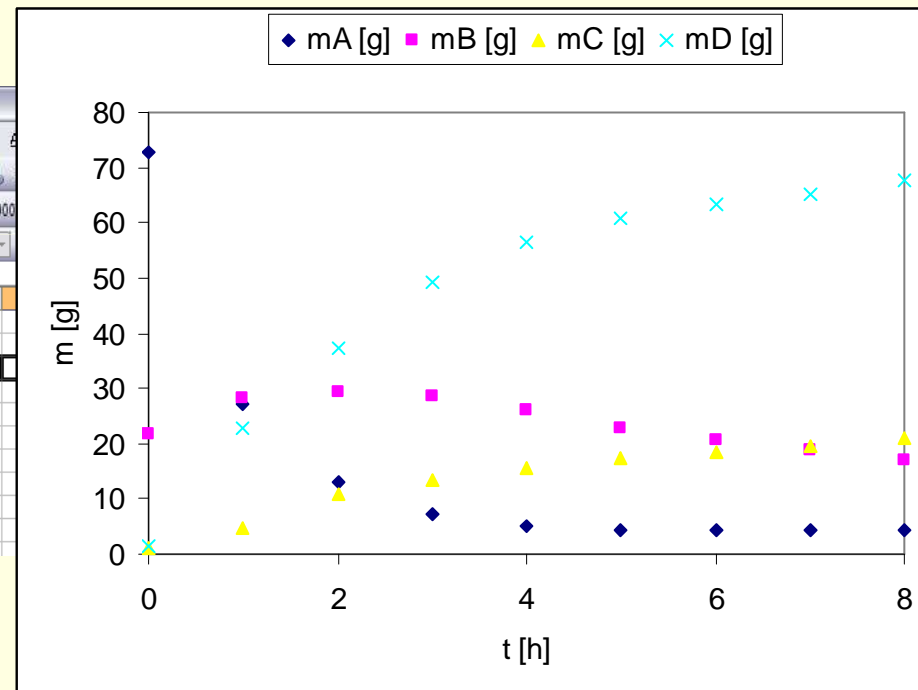


CÉL: OLYAN ESZKÖZ FEJLESZTÉSE, AMELY SEGÍTHETI EGY REAKCIÓRENDSZER STRUKTÚRÁJÁNAK MEGISMERÉSÉT.

Rendelkezésre álló információk

- *fizikai kísérletek során gyűjtött analitikai eredmények és a kísérleti körülmények:*

	A	B	C	D	E	F
1	t [h]	mA [g]	mB [g]	mC [g]	mD [g]	
2	0	72.686	21.863	0.978	1.34	
3	1	27.276	28.075	4.7	22.81	
4	2	12.94	29.42	10.72	37.23	
5	3	7.34	28.5	13.312	49.14	
6	4	5	25.89	15.7	56.65	
7	5	4.4	22.92	17.47	60.91	
8	6	4.2	20.62	18.584	63.28	
9	7	4.49	18.79	19.53	65.21	
10	8	4.515	17.105	20.96	67.81	
11						

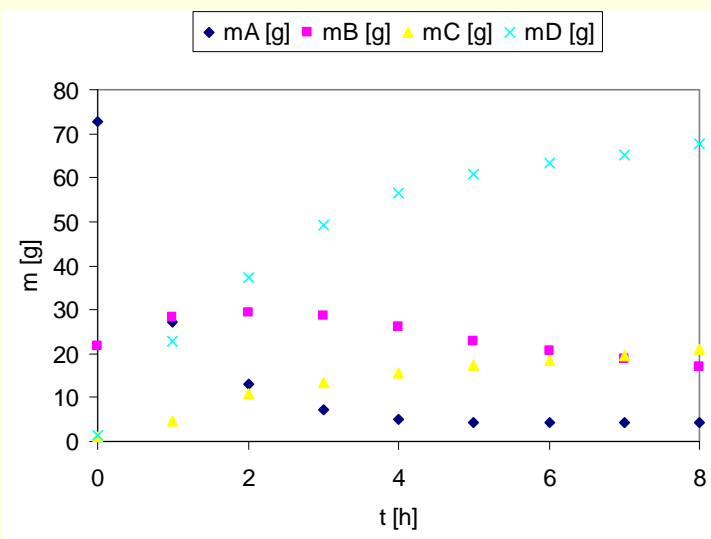
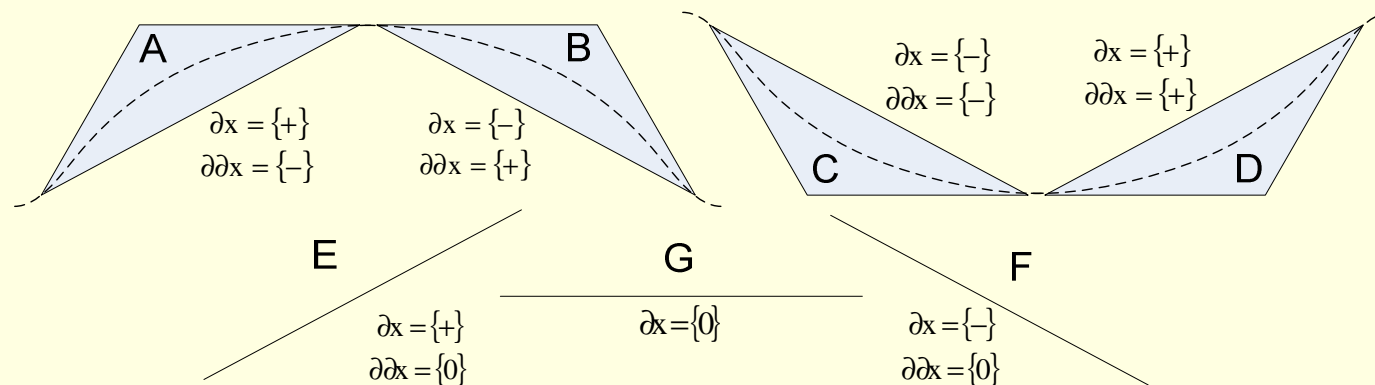


- *kalorimetriás mérések eredménye;*
- *molekula tömegek, képződéshők, ...*

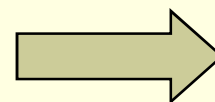
Kvalitatív trend analízis

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

Primitív epizódok (Cheung és Stephanopoulos)



A keresett „ujjlenyomat”
Komponensek: A B C D

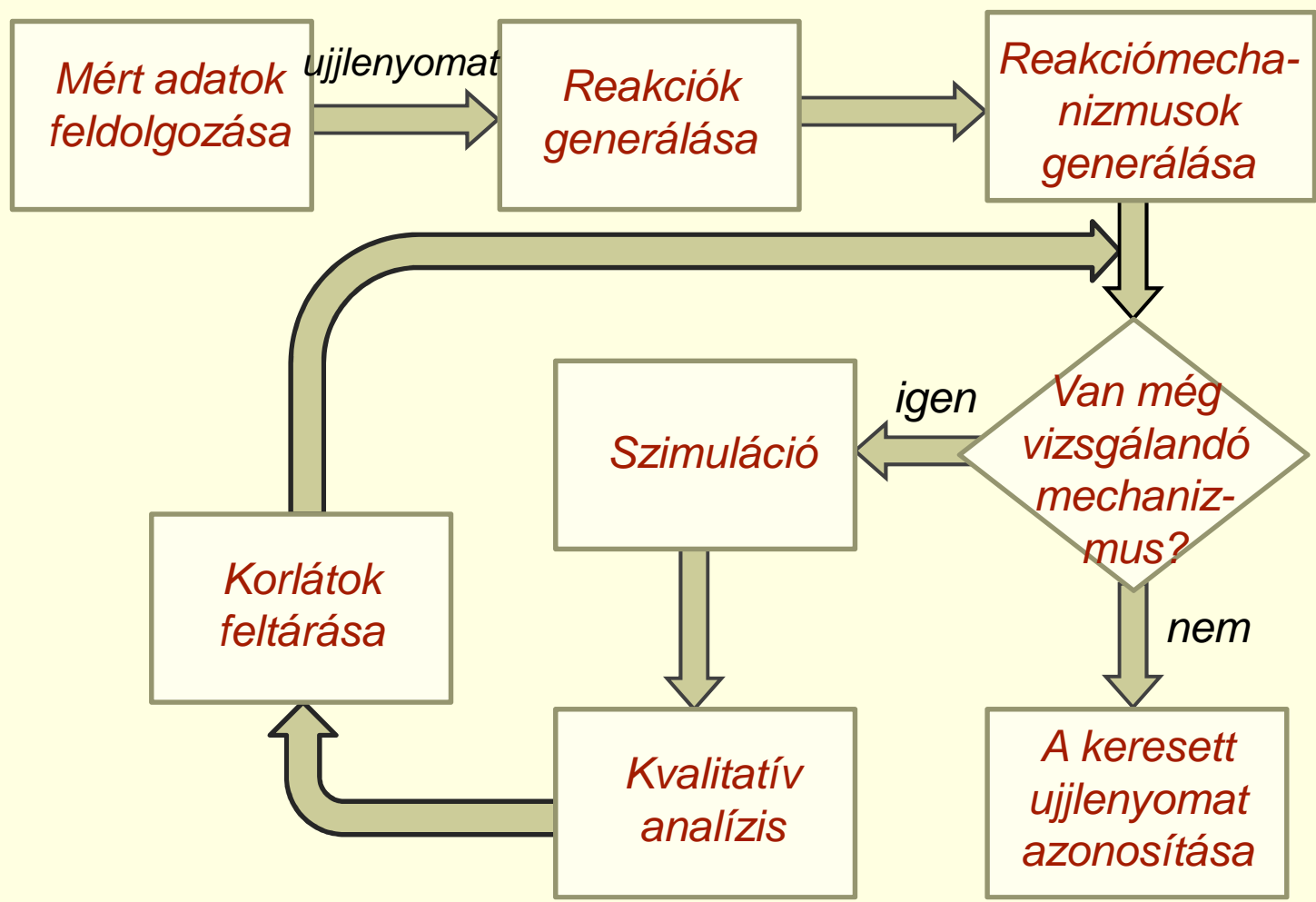


'C'	'ABC'	'A'	'A'
------------	--------------	------------	------------



- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA**
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

A kidolgozott algoritmus





A lehetséges reakciók feltérképezése

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

- *négy komponens esetén;*
- *a sztöchiometriai koefficiens abszolút értéke legfeljebb kettő – felhasználó adja meg;*
- *a reakciók szűrése az atomok számára felírt mérleg alapján;*

	A (12 g/mol)	B (20 g/mol)	C (32 g/mol)	D (32 g/mol)
r01	-1	-1	0	1
r02	-2	-2	1	1
r03	-1	-1	1	0
r04	-1	-1	-1	2
r05	-1	-1	2	-1
r06	0	0	-1	1
r07	0	0	1	-1
r08	1	1	-2	1
r09	1	1	-1	0
r10	1	1	0	-1
r11	1	1	1	-2
r12	2	2	-1	-1

Fejlesztési lehetőség: • *a reakciók további szűrése, az azokat jellemző szabadenergia változás alapján;*



A lehetséges reakciómechanizmusok feltérképezése

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

- legfeljebb három reakció – **felhasználó adja meg**;
- a vizsgált rendszer ujjlenyomata alapján a nem lehetséges mechanizmusok kiszűrése; *pl. az A komponens esetén csak C epizódunk van, így az összes olyan mechanizmus kizárható, amiben A legalább egy reakcióban nem fog.*

A lehetséges reakciókból az összes lehetséges reakciómechanizmus generálása:

egy reakció két reakció három reakció 1464 db

SC = [12x4 double] [264x4 double] [3960x4 double]

	1	2	3	4	5
1	-1	-1	0	1	
2	-2	-2	1	1	
3	-1	-1	1	0	
4	-1	-1	0	1	
5	-2	-2	1	1	
6	-1	-1	-1	2	
7	-1	-1	0	1	
8	-2	-2	1	1	
9	-1	-1	2	-1	
10	-1	-1	0	1	
11	-2	-2	1	1	
12	0	0	-1	1	
13	-1	-1	0	1	
14	-2	-2	1	1	
15	0	0	1	-1	
16	-1	-1	0	1	
17	-2	-2	1	1	



Reakciómechanizmusok alapján dinamikus szimuláció elvégzése /1

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

- **modell elképzelés:** - szakaszos reaktor;
- izoterm;
- egyfázisú.

- **reaktor modell:** $\frac{dc_i}{dt} = R_i \quad i = \{A;B;C;\dots\}$

$$R_i = \sum_{j=1}^n \nu_{ij} \cdot r_j$$

$$r_j = k_j \prod_{i=\{A;B;C;\dots\}} c_i^{n_{ij}}$$

- **a vizsgált reakciósebességi állandók tartománya:**

LB =	1,00E-02	1,00E-02	1,00E-02
UB =	1	1	1

Reakciómechanizmusok alapján dinamikus szimuláció elvégzése /2

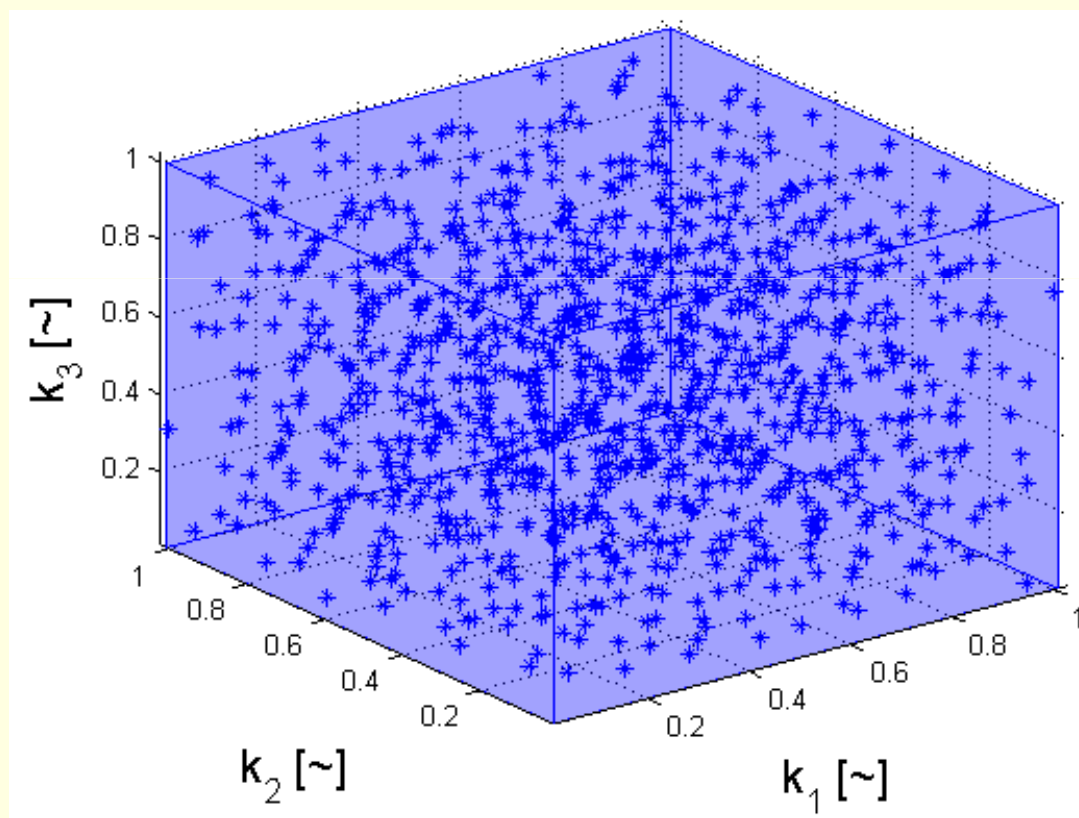
- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

A vizsgált reakciómechanizmus:

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

A lehetséges szekvenciák:

'C' 'C' 'A' 'A'



Reakciómechanizmusok alapján dinamikus szimuláció elvégzése /3

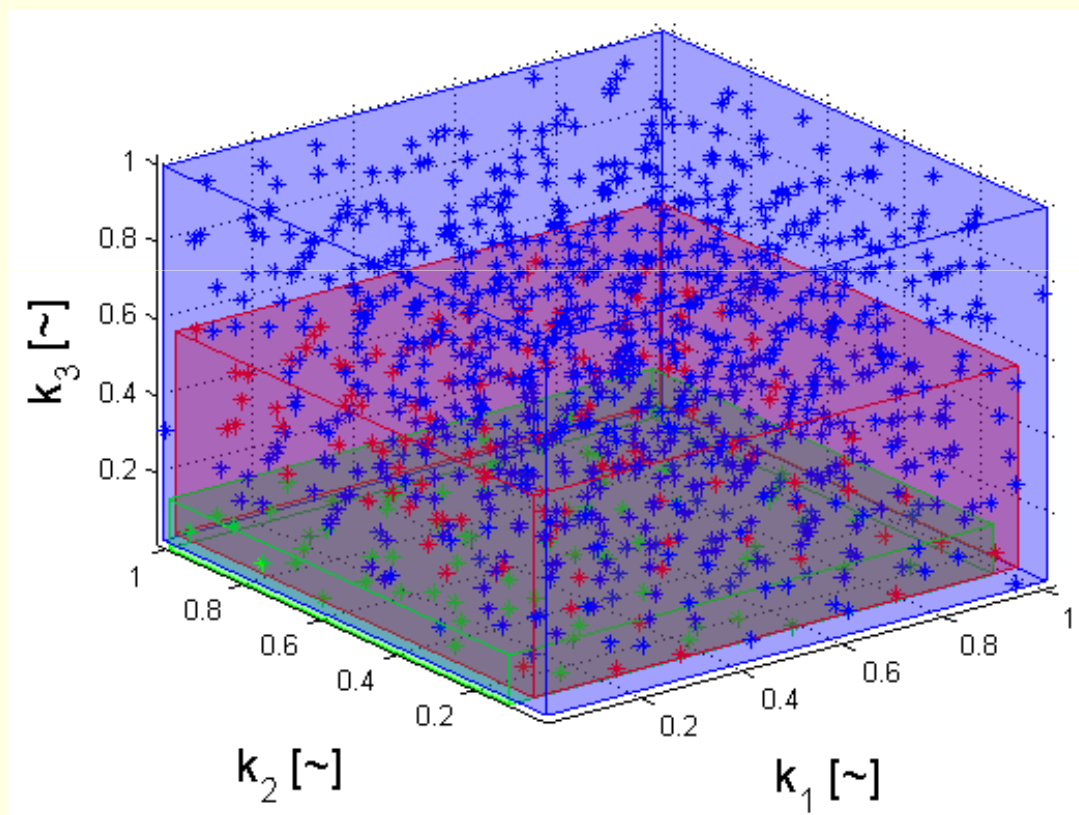
- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA**
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

A vizsgált reakciómechanizmus:

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

A lehetséges szekvenciák:

'C'	'C'	'C'	'A'
'C'	'C'	'A'	'A'
'C'	'C'	'B'	'A'



Reakciómechanizmusok alapján dinamikus szimuláció elvégzése /4

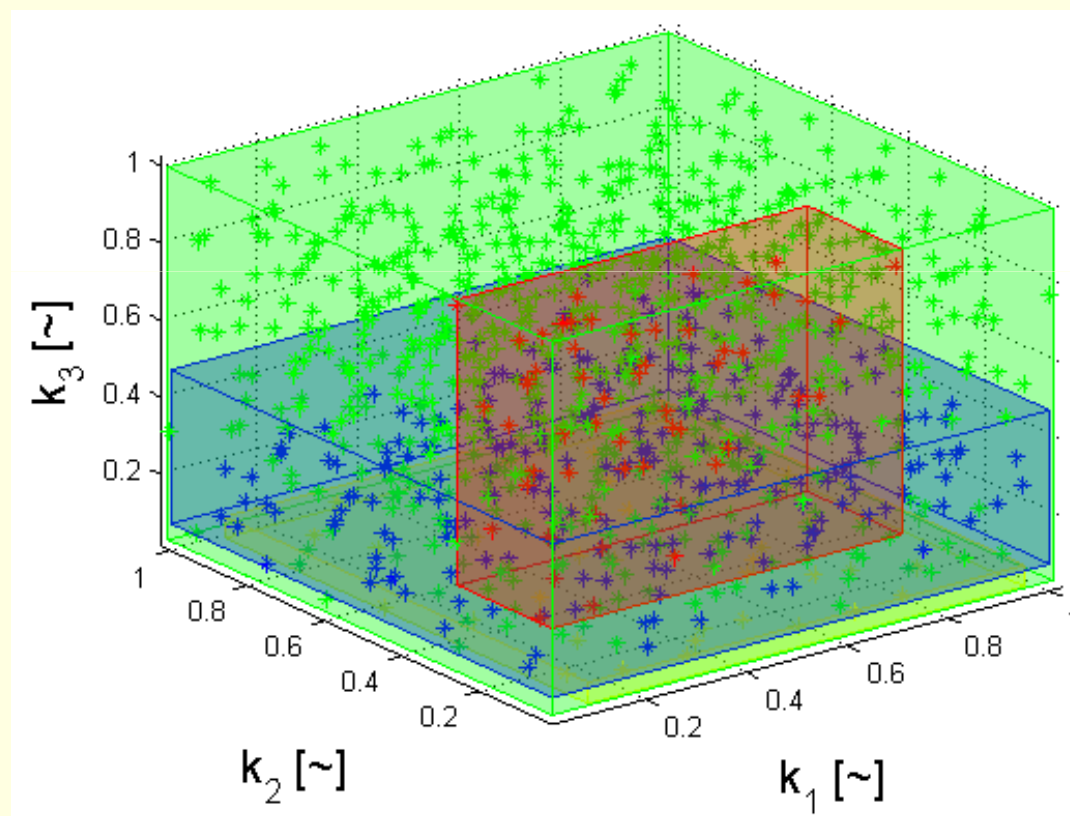
- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

A vizsgált reakciómechanizmus:

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

A lehetséges szekvenciák:

'C'	'C'	'A'	'B'
'C'	'C'	'A'	'C'
'B'	'B'	'A'	'C'
'C'	'C'	'A'	'A'



Reakciómechanizmusok alapján dinamikus szimuláció elvégzése /5

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

Reakciómechanizmus 1.:

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

A lehetséges szekvenciák:

'C' 'C' 'A' 'A'

Reakciómechanizmus 2.:

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

A lehetséges szekvenciák:

'C' 'C' 'C' 'A'
 'C' 'C' 'A' 'A'
 'C' 'C' 'B' 'A'

Reakciómechanizmus 3.:

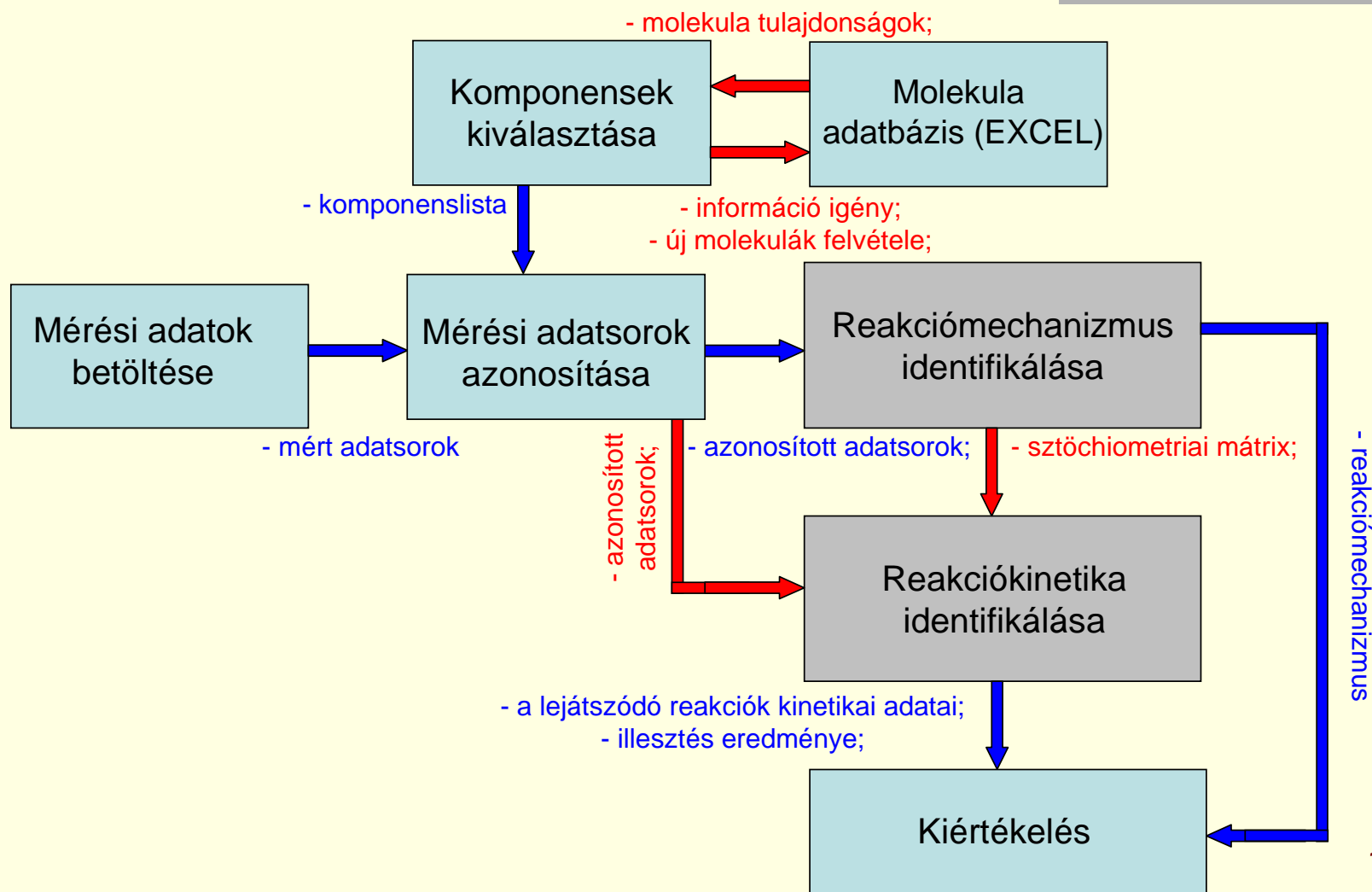
$$\begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 & 1 \\ -2 & -2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

A lehetséges szekvenciák:

'C' 'C' 'A' 'B'
 'C' 'C' 'A' 'C'
 'B' 'B' 'A' 'C'
 'C' 'C' 'A' 'A'

A tervezett eszköz funkcionális felépítése

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS





Az eszköz jelenlegi kialakítása

- BEVEZETŐ
- KVALITATÍV ANALÍZIS
- ALGORITMUS BEMUTATÁSA
- KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
- ÖSSZEFOGLALÁS

START

File

Osszegképlet Hozzáad Osszegképlet H3N1

	Osszegképlet	Molekula tömeg [g/mol]	Képződéshő [kJ/mol]
K01	H3N1	17.0100	-46.1000
K02			

Mérési adatok importálása D:\kutatas\ Reaction kinetics identification\Reaction mechnism identification\ReMechIdent_v01\test

test01.txt
test02.txt
test03.txt

Idő lépték: másodperc

Marker	Komponens ID
1	b*
2	r*
3	g*
4	y*
5	m*

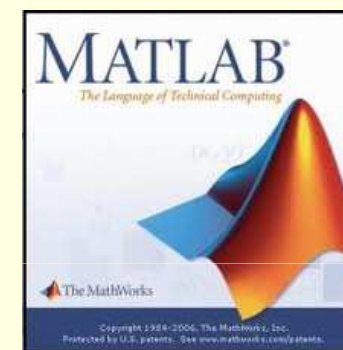
Ujjenyomat

Hőmérséklet K

Reakciók száma

	1	2
1		
2		
3		
4		

Fejlesztés



MATLAB GUI



Összefoglalás

BEVEZETŐ
KVALITATÍV ANALÍZIS
ALGORITMUS BEMUTATÁSA
KIDOLGOZOTT ESZKÖZ
ÖSSZEFOGLALÁS

- Bemutattam egy kvalitatív trend analízisen alapuló módszert, amely alkalmas lehet, reakciómechanizmusok meghatározásának támogatására.
- A módszer könnyebb és szélesebb körben történő alkalmazása végett, egy eszköz fejlesztése kezdődött meg, MATLAB programcsomagot használva.
- A mért értékek analízisével kapott „ujjlenyomat” alapján, a generált reakciómechanizmusok további szűrése.
- Az eszköz nulladik verziójának befejezése, majd tesztelése.



Köszönetnyilvánítás

Pénzügyi támogatás:

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.

Köszönöm a figyelmet!