

Reakciókinetikai szimulációk a PrIME adatbázis alapján

Varga Tamás, III. évf. Kémia Bsc.

ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Témavezetők: **Turányi Tamás** egyetemi tanár
ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék
Zsély István Gyula egyetemi adjunktus
ELTE TTK Kémiai Intézet, Fizikai Kémiai Tanszék

Összetett reakciómechanizmusok vizsgálata esetén fontos feladat egy mechanizmus tesztelése különböző kísérleti körülmények között. E folyamat során az egyik legfontosabb lépés az egyes kísérletekhez tartozó reakciókinetikai szimulációk összeállítása. Szerencsés esetben a kísérleti eredmények elektronikus formában rendelkezésre állnak. Rosszabb esetben táblázatból kell begépelni őket, vagy esetleg egy publikációban megjelent ábráról visszaolvasni (ez a jellemző régebbi kísérletekesetén). A mérés körülményeit viszont kézzel kell a közlemények alapján a szimulációs programcsomagok bemeneti fájljaiba beírni. Ez sok tapasztalatot és időt igénylő munka, amelynek során sok a hibalehetőség. Jelen munka egyik célja ennek megkönnyítése és automatizálása. Az elmúlt években kifejlesztették a PrIME elektronikus reakciókinetikai adatbázist [1], amelynek felhasználásával a fenti munkafolyamat teljesen automatikussá tehető.

A mechanizmusvizsgálatban hasznos és hatékony eszköz az érzékenységvizsgálat [2], [3]. Az érzékenységvizsgálat segítségével megtudható, hogy mely paraméterek megváltoztatása mekkora változást idéz elő adott körülmények között egy szimulációs eredményben. Ennek segítségével kiválaszthatók azok a paraméterek, melyek jobb megválasztásával az adott körülmények között a mechanizmus pontosabban fogja leírni a tapasztalati értékeket.

Munkám során elkészítettem egy programot, amely a Prime adatbázisban található, kísérleteket leíró adatfájlok alapján automatikus elvégzi a szimulációt, és emellett a mechanizmus paraméterein érzékenységvizsgálatot hajt végre. Dolgozatomban ennek a programnak a működését mutatom be Prime kísérleti adatfájlok feldolgozásán keresztül közül.

A program segítségével sokkal jobban használható a Prime adatbázis és felhasználásával sokkal gyorsabbá és egyszerűbbé vált az összetett gázkinetikai reakciómechanizmusok fejlesztése és tesztelése.

[1] Bonzel, H.P., Bradshaw, A.M., Ertl, G., *Physics and Chemistry of Alkali Metal Adsorption*. Elsevier, Amsterdam, 125-135 (1989)

[2] Kjurkchiev, N., Andreev, A., *Serdica*, 15 (3), 302-311 (1990)

[1] <http://www.primekinetics.org/>

[2] A. Saltelli, T.H. Andres, T. Homma, *Computational Statistics & Data Analysis*, 15, 211-238 (1993)

[3] A. Saltelli, M. Scott, K. Chen, *Sensitivity analysis*. 2000, Chichester, Wiley.