

Zárójelentés a  
“Nemlineáris és lineáris modellek a reakciókinetikában”  
K68256 számú OTKA pályázathoz  
(2007. július 1. -2011. július 31.)

*A kutatás résztvevői:*

Dr. Turányi Tamás (témavezető)  
Dr. Zsély István Gyula  
Dr. Nagy Tibor  
Dr. Kovács Tamás

A kutatásban egy sor hallgató is részt vett, név szerint Lovrics Anna, Pál Ildikó, Varga László, Szabó Botond, Sedyó Inez, Varga Tamás és Danis Judit. A cikkek egy részében olyan eredményeket közöltünk, amelyek előzetes formában már megjelentek e hallgatók 9 TDK dolgozatában [17-25], öt szakdolgozatában [26-30] és egy PhD értekezésében [31].

A kutatások során belföldi együttműködő partnerek voltak még Novák Béla (BME), Csikász-Nagy Attila (BME), Sipos-Szabó Eszter (BME), Tóth János (BME), Zádor Judit (MTA KK), Lagzi István (ELTE), Lovas Róbert (MTA SZTAKI), Szépvölgyi János (MTA KK), Zempléni András (ELTE) és Cserhádi Mátyás (ELTE). Zárójelben az együttműködéskor érvényes munkahelyet jelölöm, hiszen többen közülük azóta már külföldön dolgoznak. Sikeres együttműködést folytattunk a stuttgarti DLR (Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt) következő kutatóival is: Sebastian Peukert, Marina Braun-Unkloff, Clemens Naumann és Uwe Riedel.

Elkészítettünk [8] egy áttekintő jellegű könyvet (Turányi Tamás: Reakciómechanizmusok vizsgálata, Akadémiai Kiadó, 2010), amely összefoglalja a részletes reakciómechanizmusok vizsgálatára alkalmazott módszereket. A könyv főbb témái a reakciókinetikai alapismeretek összefoglalása, a reakcióutak vizsgálata, az érzékenység- és bizonytalanságanalízis különféle módszereinek összefoglalása, az időskála-analízis, a reakciómechanizmusok redukciója és az érzékenységi függvények hasonlóságának tárgyalása. A könyv 263 oldal terjedelemben 464 közlemény anyagát dolgozza fel. Ez a könyv nem csak magyar nyelven újszerű, de ilyen témájú könyv eddig még más nyelven sem jelent meg. Jelenleg dolgozunk a könyv kibővített angol változatán, amely a Springer kiadónál fog megjelenni 2012-ben.

Többféle kémiai folyamatot vizsgáltunk, így égéseket ([2-4], [7], [9-14], [16]), légkörkémiái ([4-6], [10]) és pirolízis folyamatokat ([6], [9]), valamint biokémiai rendszereket ([1], [15], [17]). Mivel a kutatás célja a legtöbb esetben (de nem minden esetben) nem az egyes kémiai rendszerek jobb megismerése volt, hanem eszközök kifejlesztése reakciókinetikai modellek hatékonyabb vizsgálatára, ezért az alábbiakban a kutatási eredményeket a vizsgálati módszerek szerint

csoportosítva mutatom be. Valamennyi közlemény teljes szövege letölthető az alábbi Web oldalról:  
<http://garfield.chem.elte.hu/Turanyi/tpub.html>

## 1. Az érzékenységi függvények hasonlósága és ennek következményei

A reakciókinetikai modellek alapján véve nemlineárisak. A paraméterek megváltoztatása általában különbözőképpen hat az egyes koncentrációk lefutására kis és nagy reakcióidőknél. Korábban azonban több olyan kinetikai rendszert találtunk (ld. pl. I. Gy. Zsély, J. Zádor, T. Turányi: Similarity of sensitivity functions of reaction kinetic models, *J.Phys.Chem. A*, **107**, 2216-2238 (2003); J. Zádor, I. Gy. Zsély, T. Turányi: Investigation of the correlation of sensitivity vectors of hydrogen combustion models, *Int.J.Chem.Kinet.*, **36**, 238-252(2004); I. Gy. Zsély, J. Zádor, T. Turányi: On the similarity of the sensitivity functions of methane combustion models, *Combustion Theory and Modelling*, **9**, 721-738(2005)), amelyeknél a paraméterek megváltoztatása azonos módon hat a koncentráció–idő görbékre, tehát a kinetikai modell lineáris modellekhez hasonlóan viselkedik paraméterváltoztatásra. Az ilyen modellek érzékenységi függvényei hasonlóak és nagyon különböző paraméterkészletek esetén is csaknem azonos szimulációs eredményeket kaphatunk.

A jelen kutatás során számos reakciókinetikai modell érzékenységvizsgálatát elvégeztük és további példákat kerestünk az érzékenységi függvények hasonlóságára. Több olyan biokémiai - biológia modellt találtunk, amely ilyen tulajdonságú volt és részletesen megvizsgáltuk ezeket a rendszereket.

Chen és munkatársainak a sarjadzó élesztő sejtciklusát leíró biokémiai kinetikai modellje (*Mol. Biol. Cell*, **11**, 369–391(2000)) alapján számítható a sejtciklust szabályozó fehérjék koncentrációinak változása a sejtciklus során. Kiszámítottuk [1] a model minden változójának paraméterek szerinti érzékenységét. Számos érzékenységi függvényt vizsgálva ezeknek a függvényeknek a hányadosa időben állandó; az ilyen érzékenységi függvényeket globálisan hasonlóknak nevezzük. Ha két, egységnyire normált érzékenységi függvény különbségének az integrálját vesszük, akkor egyetlen számmal tudjuk jellemezni ezen függvények hasonlóságát. Az összes érzékenységi függvény hasonlóságát megadó mátrixot klaszteranalízisnek vetettük alá, és ennek alapján az érzékenységi függvényeket alakjuk szerint két fő csoportba tudtuk sorolni. Megmutattuk, hogy az érzékenységi függvények hasonlósága azt jelenti, hogy az egyik enzim hatékonyságának változását egy másik enzim hatékonyságának változása teljes mértékben kompenzálni képes, ezért biokémiai rendszerek esetén az érzékenységi függvények globális hasonlósága kapcsolatos az adott élőlény robusztusságával.

Csikász-Nagy Attila és munkatársai létrehoztak (*Biophysical Journal*, **90**, 4361-4379(2006)) egy úgynevezett általános sejtciklus modellt, amely egyszerre többféle élőlény (sarjadzó élesztő, hasadó élesztő, emlős) sejtciklusának viselkedését képes leírni úgy, hogy csak a használt paraméterek értékei térnek el az egyes élőlényekre vonatkozó modellekben. Elvégeztük mindhárom modell lokális érzékenységanalízisét. A nyers érzékenységi függvények ábrázolása után szembesültünk azzal a problémával, hogy az érzékenységi függvények maximális, illetve minimális értékei ciklusonként növekednek. A nyers érzékenységi függvényeket Sipos-Szabó Eszter és Tóth János (BME Matematikai Intézet) periodikussá transzformálták, ami lehetővé tette a függvények alakjának részletesebb vizsgálatát. A Chen-modellnél már alkalmazott módszerrel, klaszteranalízissel megkaptuk, hogy mely élőlények mely paraméterei között van globális hasonlóság. Az emlős sejtek esetén minden paraméter alakja hasonló volt, míg a hasadó élesztő és a sarjadzó élesztő esetében két fő csoportot és egy egyéb kategóriát különböztettünk meg. Megmutattuk, hogy a globálisan hasonló paraméterek egymás hatását képesek kompenzálni. A fenti eredmények részletes leírása Pál Ildikó szakdolgozatában [27] található. Az eredményekről egy cikk kézirat elkészült, jelenleg a szöveg finomítása folyik a társszerzők bevonásával, és hamarosan a beküldését tervezzük a *BMC Systems Biology* újságba.

A kemotaxis az a folyamat, amelynek során a sejtek észlelik a kémiai környezetük megváltozását és számukra kedvezőbb körülmények felé mozognak. A baktériumok kemotaxisát jeltovábbító hálózatok határozzák meg, amelyek ugyan viszonylag egyszerűek, de hasonlítanak az emberi szervezet jeltovábbító hálózataira. Az utóbbi működési zavarainak kulcsszerepe van a daganatok kialakulásánál. Az *Escherichia coli* és a *Bacillus subtilis* baktériumok kemotaxisának matematikai modelljeit vizsgáltuk érzékenységanalízissel. Megállapítottuk, hogy az érzékenységi függvények egy része globális hasonlóságot mutat. Olyan paramétercsoportokat azonosítottunk, amelyek tagjai egymás változásának hatását teljes mértékben kompenzálni tudják. A módosított modell a sejt pontosan ugyanolyan mozgását szimulálja, ha a vonzó molekulák koncentrációja megváltozik. Ez azt mutatja, hogy a modellekhez javasolt paraméterkészletek nem unikálisak, illetve hogy ezek a modellek robusztusak a paraméterek változtatására. Erről a munkáról eddig egy TDK dolgozat [23] és egy szakdolgozat [29] készült, valamint egy előzetes közleményünk [15] jelent meg. Egy bővebb közlemény kézirat elkészületben van.

## 2. Új reakciókinetikai modellek felállítása és alkalmazása

A Szaturnusz bolygó Titán nevű holdja légkörének alsó részében a hőmérséklet nagyjából 90 K, emiatt a gázfázisú reakciók sebessége a  $\text{CH}_4/\text{N}_2$  légkörben igen lassú. A körülmények azonban

alkalmasak arra, hogy a Titán légkörében villámok jöjjenek létre. A Titán légkörére vonatkozó, ma már igen pontos ismeretek alapján kiszámítottuk [6] egy 10 km magasan levő légcella hőmérsékletének időbeni változását villámlás után. Részletes reakciómechanizmust állítottunk össze, amely leírja a  $\text{CH}_4/\text{N}_2$  gázelegyenben, 90 K – 5000 K hőmérséklettartományban lejátszódó reakciókat. Ez a mechanizmus 185 anyagfajta 1829 reakcióját tartalmazza. Vizsgáltuk a koncentráció-változásokat és a főbb reakcióutakat, így megállapítottuk, hogy a villámlást követő kémiai reakciók főbb reakciótermékei a következők:  $\text{H}_2$ ,  $\text{HCN}$ ,  $\text{C}_2\text{N}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_2$ ,  $\text{C}_2\text{H}_4$ ,  $\text{C}_2\text{H}_6$ ,  $\text{NH}_3$  és  $\text{H}_2\text{CN}$ . Becsültük ezen anyagok éves termelődését a Titán légkörében a villámlások következtében.

Modelleztük [9] a széntetraklorid bomlását induktívan csatolt RF plazmareaktorban, inert  $\text{CCl}_4$ –Ar és oxidatív  $\text{CCl}_4$ – $\text{O}_2$ –Ar gázelegyenekben egy általunk létrehozott reakciómechanizmussal, amely 25 anyagfajta 134 reakciólépését tartalmazta. A szimulációk 67,0% és 97,9%  $\text{CCl}_4$  konverziót adtak a  $\text{CCl}_4$ –Ar illetve  $\text{CCl}_4$ – $\text{O}_2$ –Ar gázelegyenekre, ami közel van a kísérletileg talált 60,6% illetve 92,5% konverzióértékekhez. A számítások és a mérések is azt mutatták, hogy oxidatív környezetben sokkal hatékonyabb a  $\text{CCl}_4$ -nek, mint veszélyes vegyianyagnak a megsemmisítése.

A levegőminőségi számítások egyik célja lehet annak modellezése, hogy vegyi vagy radioaktív anyagok baleseti kibocsátásának mekkora a hatása a környező országrész levegőminőségének térbeli és időbeni változására. Fontos, hogy a számítások a baleset után azonnal elkezdődjenek és sokkal gyorsabban szolgáltatassanak eredményt, mint a valós időben zajló események. Ekkor a szimulációs eredményeket fel lehet használni a polgári védelmi munka tervezésére, például a lakosság evakuációjának ütemezésére. A szimulációk gyorsításának általunk alkalmazott módja [5] a reakció-diffúzió rendszert szimuláló hagyományos program átírása volt párhuzamosított programra a P-GRADE fejlesztői környezet felhasználásával. Az így kapott program futtatható lett számítógép-klasztereken és grideken.

### 3. Reakciókinetikai modellek redukciója

A reakciómechanizmusok redukciójának egyik módja a felesleges anyagfajták és felesleges reakciók törlése a mechanizmusból. A legtöbb eddig alkalmazott módszernél a redukált mechanizmus kiválasztása a kinetikai differenciálegyenlet-rendszer valamilyen linearizálásán alapult, emiatt ezek a módszerek nem voltak igazán hatékonyak. Az általunk kidolgozott SEM (Simulation Error Minimization) módszer [3] lineáris közelítések alapján több ezer lehetséges redukált mechanizmust ad meg, majd azokat szimulációval ellenőrzi. Ilyen módon egyszerre tudjuk kihasználni a lineáris közelítés gyorsaságát és a nemlineáris szimuláció pontosságát. Ezt az elvet anyagfajta redukcióra és reakcióredukcióra egyaránt felhasználtuk. Anyagfajta redukciónál (SEM-

CM módszer) a fontos (pl. mért koncentrációjú) anyagfajtákból indulunk ki, és az anyagfajták számát folyamatosan növeljük úgy, hogy minden megkívánt pontossági határhoz a legkisebb konzisztens mechanizmust állítsuk elő. Reakciók eltávolításánál (SEM-PCAF módszer) lineáris közelítés alapján kijelölünk együttesen elhagyható reakciókat, majd a választás helyességét szimulációkkal igazoljuk. Ezeket a módszereket több korábbi mechanizmusredukciós módszerrel összehasonlítottuk és megmutattuk, hogy az új módszer a leghatékonyabb közülük.

Számos mechanizmusredukciós módszer alapul a reakciókinetikai modellek időskála-analízisének. Az ilyen analízisek első lépése a kinetikai Jacobi-mátrix sajátérték–sajátvektor felbontása. Kimutattuk [4], hogy ha a Jacobi-mátrixnak legalább egy olyan sajátértéke van, amelynek geometriai multiplicitása kisebb mint algebrai multiplicitása, akkor az így meghatározott időskálák hamisak lehetnek. A Jacobi-mátrix Jordan-felbontása alapján javasoltunk egy eljárást, amely ebben az esetben is pontosan becsüli a reakciókinetikai model időskáláit. Ez az eljárás elsősorban részletes troposzférakémiai illetve egyes égéskémiai kinetikai modellek esetén fontos.

#### 4. Kinetikai modellek paramétereinek bizonytalansága és ennek következménye

Megvizsgáltunk [2] egy részletes reakciómechanizmust, amely az NO keletkezését írja le a metán oxidációja során. Elvégeztük a mechanizmus két változatának vizsgálatát lokális és Monte Carlo bizonytalanságanalízissel, amelynek során tanulmányoztuk a reakciósebességi együtthatók és a képződési entalpiák bizonytalanságának hatását a számított NO koncentrációra jólkevert reaktor kísérleti körülményeknél. A számításokból megállapítható volt, hogy az NCN-gyök reakcióinak figyelembe vétele jelentősen javította az egyezést a kísérleti adatokkal. A számított NO koncentráció bizonytalanságát csak mintegy 20 reakciólépés sebességi együtthatója, valamint az NNH és HCCO gyökök képződési entalpiáinak bizonytalansága okozza. Monte Carlo analízissel vizsgáltuk az NO négyféle képződési útjának arányát, és ennek az aránynak a függését a reakció körülményeitől és a model paramétereitől. Megállapítottuk, bizonyos körülmények között egyes NO-termelési reakcióutak az NO fogyását is okozhatják.

A reakciókinetikai adatbázisok több ezer elemi reakcióra tartalmazzák az Arrhenius-paraméterek ajánlott értékét, a sebességi együttható  $f$  bizonytalansági paraméterének hőmérsékletfüggését és azt a hőmérséklettartományt, amelyen az előző két információ érvényes. A bizonytalansági paraméter máshogyan határozzák meg a magas hőmérsékletű rendszerek (pl. égések) adatait tartalmazó gázkinetikai adatbázisok, és az IUPAC és JPL légkörkémiai adatbázisok. Megvizsgáltuk [10] ezeket a bizonytalansági paraméter-definíciókat. Megállapítottuk, hogy a legtöbb esetben a sebességi együtthatókra vonatkozó bizonytalansági információ nem konzisztens az ugyanabban az

adatbázisban megadott Arrhenius-kifejezéssel. Ajánlásokat fogalmaztunk meg arra, hogyan kellene az Arrhenius-paraméterek bizonytalanságát megjeleníteni a jövőbeni reakciókinetikai adatbázisokban. Kidolgoztunk ([7], [10]) egy módszert arra, hogy a gázkinetikai adatbázisokban található bizonytalansági információból kiszámítsuk az Arrhenius-paraméterek kovarianciamátrixát. A módszert három különféle adatbázisból származó összesen hét reakciólépés adataival teszteltük. Ezek az eredmények felhasználhatók reakciókinetikai adatbázisok tartalmának pontosítására, reakciókinetikai modellek bizonytalanságanalízisének és reakciókinetikai paraméterek illesztésének kísérleti adatokhoz.

Az eddigi összes reakciókinetikai bizonytalanságvizsgálat során feltételezték, hogy a sebességi együtthatók relatív bizonytalansága nem változik a hőmérséklettel. Megmutattuk ([10], [12]), hogy ez a feltételezés ekvivalens azzal, hogy az egyes reakciólépések aktiválási energiáját pontosan ismertnek tételezik fel, ami szisztematikus hibát okoz nem állandó hőmérsékletű reakciókinetikai rendszerek bizonytalanságanalízisének.

A fenti eredmények a matematikai statisztika és a lineáris algebra eszközeinek együttes alkalmazásával születtek és a legtöbb vegyész számára nehezen áttekinthetők. Emiatt a fenti témát feldolgoztuk [11] olyan módon is, hogy a paraméterek bizonytalanságát Monte Carlo számításokkal szimuláltuk, és illesztéssel határoztuk meg az Arrhenius-paraméterek eloszlását. A kapott eredmények pontosan egyeztek az előző cikkekben levezetett eredményekkel. Új eredményeket kaptunk, amikor azt vizsgáltuk, hogy a várható értéktől távoli, de még reális Arrhenius-paraméterek értékei a hőmérséklettől függően változó módon hogyan járulnak hozzá a sebességi együttható értékének számításához.

Az előbbi cikkekben azt is megállapítottuk, hogy a reakciókinetikai adatbázisok tartalma alapján gyakran nem lehet jól becsülni az Arrhenius-paraméterek bizonytalanságát. Ezt az információt azonban elő lehet állítani az eredeti kísérleti közlemények áttekintésével. A hidrogén–oxigén égési reakciórendszer elemi reakcióiról közölt kísérleti cikkek alapján vizsgáltuk a mérési adatok bizonytalanságát a hőmérséklet függvényében, és ennek alapján becsültük az az Arrhenius-paraméterek bizonytalansági tartományát. Egy konferenciacikket közzeltünk [13], amelyben a következő elemi reakciók sebességi paramétereinek bizonytalansági tartományát adtuk meg:  $H+O_2+M = HO_2+M$ ,  $HO_2+H = H_2+O_2$ ,  $OH+H_2 = H_2O+H$ ,  $H+O_2 = O+OH$ ,  $O+H_2 = H+OH$ ,  $H_2O_2+H = H_2+HO_2$ ,  $OH+OH=H_2O+O$  és  $H+HO_2=OH+OH$ . Ebben a témában egy részletesebb közlemény előkészületben van.

A reakciókinetikai szimulációs programok mind alkalmasak arra, hogy adott reakciókörülményeknél kiszámítsák a megoldást és azok paraméterek szerinti érzékenységét. Ugyanakkor több száz mérési adatpont reprodukciójánál egy ilyen számítás rendkívül sok emberi időt és erőfeszítést igényel. További probléma, hogy a mérési körülmények kódolása a szimulációs

programok számára hozzáértést és ugyancsak sok emberi időt igényel. Az utóbbira megoldás a PrIME adatbázis-formátum (<http://www.primekinetics.org/>) használata, amely XML kódolással tartalmazza a mérési körülményeket és eredményeket. Elkészítettünk egy programot, amely beolvassa a PrIME adatfile tartalmát, elvégzi a szimulációt és az érzékenységanalízist, valamint ábrákon összehasonlítja a mért és a számított eredményeket. Erről a munkáról egy TDK dolgozat [22] és egy konferenciacikk [14] készült.

Minden reakciókinetikai adatbázis elemi reakciónként külön-külön adja meg a sebességi együttható bizonytalanságát. Kidolgoztunk egy módszert, aminek segítségével mérési adatok feldolgozása alapján több elemi reakció Arrhenius-paramétereinek együttes bizonytalanságát tudjuk számítani. A módszert elsőként Peukert és munkatársai mérési adataira alkalmaztuk, akik egy cikket közöltek (*Int.J.Chem.Kinet.*, **43**, 107-119(2010)) arról, hogy ciklohexán (c-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>) és 1-hexén (1-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>) hőbomlását vizsgálták lökéshullámcső-kísérletekben. A kétféle kiindulási anyagra 16 illetve 23 mérést végeztek, és mérésenként 1000, összesen 39000 adatpontot kaptak. A mérések során H-atom koncentrációprofilokat mértek visszavert lökéshullám mögött ARAS módszerrel az 1250–1550 K hőmérséklet és az 1,48–2,13 bar nyomástartományban. A megkapott mérési adatokat PrIME formátumban kódoltuk, majd a fentebb leírt programmal azonosítottuk [16] a mérési adatokra illeszthető sebességi paramétereket. A következő hat elemi reakció Arrhenius-paramétereit lehetett meghatározni a mérési adatokból: R1: c-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> = 1-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>, R2: 1-C<sub>6</sub>H<sub>12</sub> = C<sub>3</sub>H<sub>5</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, R4: C<sub>3</sub>H<sub>5</sub> = aC<sub>3</sub>H<sub>4</sub> + H; R5: C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> = C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> + CH<sub>3</sub>; R6: C<sub>3</sub>H<sub>7</sub> = C<sub>3</sub>H<sub>6</sub> + H; R8: C<sub>3</sub>H<sub>5</sub> + H = C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>. Ezek a reakciók a benzin égésének fontos elemi reakciói. Az illesztésnél felhasználtuk Fernandes és munkatársai (*J. Phys. Chem. A*, **109**, 1063-1070(2005)) mérési adatait is az R4 reakcióra. Az illesztés további eredménye az összes illesztett paraméter kovarianciamátrixa. A sebességi együtthatókra vonatkozó szórásokat átszámítottuk a kinetikai adatbázisokban szokásosan használt  $f$  bizonytalansági paraméter értékekre, azokat a hőmérséklet függvényében megadva.

Összefoglalásképpen elmondható, hogy a támogatott kutatómunka során részletes reakciómechanizmusokkal leírt égési, légkörkémi, biokémiai és pirolitikus rendszerekbeni folyamatokat vizsgáltunk. Számítottuk a modellek megoldásának érzékenységét a paraméterváltoztatás hatására. Több esetben azt találtuk, hogy ezek az érzékenységi függvények hasonlóak egymáshoz, aminek számos következménye van a modellek unicitása, robusztussága és paramétereinek meghatározhatósága szempontjából. Új, az eddigieknél sokkal hatékonyabb eszközöket fejlesztettünk ki reakciómechanizmusok redukciójára, tehát az eredetnél sokkal kisebb, csaknem azonos szimulációs eredményeket adó modell megtalálására. Vizsgáltuk a paraméterek bizonytalanságának hatását a szimulációs eredmények bizonytalanságára. Elsőként foglalkoztunk annak vizsgálatával, hogy milyen kapcsolat van az Arrhenius-paraméterek bizonytalansága és az

azokból számított reakciósebességi együttható hőmérsékletfüggő bizonytalansága között. Több elemi gázreakció esetén becsültük az Arrhenius-paraméterek együttes bizonytalanságát.

Minden vizsgálatunkban központi szerepet játszott az, hogy a reakciókinetikai modellek erősen nemlineárisak, de egyes modellek bizonyos körülmények között lineárisan viselkednek, más modelleknél pedig az eredeti model lokális linearizálása útján lehet tudományos és gyakorlati szempontból hasznos eredményekre jutni.



## Irodalomjegyzék

- [1] A. Lovrics, I. Gy. Zsély, A. Csikász-Nagy, J. Zádor, T. Turányi, B. Novák:  
Analysis of a budding yeast cell cycle model using the shapes of local sensitivity functions  
*Int.J.Chem.Kinet.*, **40**, 710-720 (2008)
- [2] I. Gy. Zsély, J. Zádor, T. Turányi:  
Uncertainty analysis of NO production during methane combustion  
*Int.J.Chem.Kinet.*, **40**, 754-768 (2008)
- [3] T. Nagy, T. Turányi:  
Reduction of very large reaction mechanisms using methods based on simulation error minimization  
*Combustion and Flame*, **156**, 417-428 (2009)
- [4] T. Nagy, T. Turányi:  
Relaxation of concentration perturbation in chemical kinetic systems  
*Reaction Kinetics and Catalysis Letters*, **96**, 269-278 (2009)
- [5] I. Lagzi, T. Turányi, R. Lovas:  
Development of a grid enabled chemistry application  
*Int. J. Computational Science and Engineering*, **4**, 195-203 (2009)
- [6] T. Kovács, T. Turányi:  
Chemical reactions in the Titan's troposphere during lightning  
*Icarus*, **207**, 938-947 (2010)
- [7] T. Nagy, T. Turányi:  
Uncertainty analysis of varying temperature chemical kinetic systems  
*Procedia Social and Behavioral Sciences*, **2**, 7757-7758 (2010)
- [8] Turányi T.:  
Reakciómechanizmusok vizsgálata  
Akadémiai Kiadó, Budapest, 2010
- [9] T. Kovács, T. Turányi, J. Szépvölgyi:  
CCl<sub>4</sub> decomposition in RF thermal plasma in inert and oxidative environments  
*Plasma Chemistry and Plasma Processing*, **30**, 281-286 (2010)
- [10] T. Nagy, T. Turányi:  
Uncertainty of Arrhenius parameters  
*Int. J. Chem. Kinet.*, **43**, 359-378 (2011)
- [11] L. Varga, B. Szabó, I.Gy. Zsély, A. Zempléni, T. Turányi:  
Numerical investigation of the uncertainty of Arrhenius parameters  
*J. Math. Chem.*, **49**, 1798-1809 (2011)
- [12] T. Nagy, T. Turányi:  
Determination of the uncertainty domain of the Arrhenius parameters needed for the investigation of combustion kinetic models  
*Reliab. Engng. Syst. Safety*, in press, 2012, doi:10.1016/j.res.2011.06.009

- [13] I. Sedyó, T. Nagy, I. Gy. Zsély, T. Turányi:  
Uncertainty of the Arrhenius parameters of important elementary reactions of the hydrogen–oxygen system  
*Proceedings of the European Combustion Meeting*, 2011
- [14] T. Varga, I. Gy. Zsély, T. Turányi:  
Collaborative development of reaction mechanisms using PRiMe data files  
*Proceedings of the European Combustion Meeting*, 2011
- [15] J. Danis, T. Turányi:  
Sensitivity analysis of bacterial chemotaxis models  
*Procedia Computer Science*, **7**, 233-234 (2011)
- [16] I. Gy. Zsély, T. Varga, T. Nagy, M. Cserháti, T. Turányi,  
S. Peukert, M. Braun-Unkhoff, C. Naumann, U. Riedel:  
Determination of rate parameters of cyclohexane and 1-hexene decomposition reactions  
*Energy*, *in press*, 2012

**A kutatáshoz kapcsolódó TDK dolgozatok, szakdolgozatok és PhD dolgozat:**

- [17] Pál Ildikó:  
Egy általános sejtciklus-modell vizsgálata érzékenységtanálízissal  
témavezető: Zsély István Gyula és Turányi Tamás  
Házi TDK konferencia, 2008. november  
OTDK-ra átdolgozott változat, 2009. április
- [18] Varga László:  
Arrhenius-paraméterek bizonytalansága  
témavezető: Turányi Tamás, Zsély István Gyula és Zempléni András  
Házi TDK konferencia, 2008. november  
OTDK-ra átdolgozott változat, 2009. április, III. helyezett
- [19] Danis Judit:  
*E. coli* kemotaxis modelljének érzékenységtanálízise  
témavezető: Turányi Tamás  
Házi TDK konferencia, 2009. december
- [20] Sedyó Inez:  
Néhány gázkinetikai reakció paramétereinek bizonytalanságának hőmérsékletfüggése  
témavezető: Turányi Tamás, Zsély István Gyula  
Házi TDK konferencia, 2009. december
- [21] Szabó Botond:  
Arrhenius paraméterek becslése közvetett és közvetlen mérések alapján  
témavezető: Turányi Tamás, Zsély István Gyula  
Házi TDK konferencia, 2009. december

- [22] Varga Tamás:  
Részletes reakciómechanizmusok automatizált szimulációja és érzékenységanalízise  
a Prime adatbázis alapján  
témavezető: Turányi Tamás, Zsély István Gyula  
Házi TDK konferencia, 2009. december
- [23] Danis Judit:  
Bakteriális kemotaxismodellek érzékenységanalízise  
témavezető: Turányi Tamás  
Házi TDK konferencia, 2010. december  
OTDK-ra átdolgozott változat, 2011. április, III. helyezett
- [24] Sedyó Inez:  
A hidrogén égésénél fontos reakcióparaméterek bizonytalanságának hőmérsékletfüggése  
témavezető: Turányi Tamás, Zsély István Gyula  
Házi TDK konferencia, 2010. december  
OTDK-ra átdolgozott változat, 2011. április, III. helyezett
- [25] Varga Tamás:  
Reakciókinetikai szimulációk a PRIME adatbázis alapján  
témavezető: Turányi Tamás, Zsély István Gyula  
Házi TDK konferencia, 2010. december  
OTDK-ra átdolgozott változat, 2011. április
- [26] Varga László:  
Arrhenius-paraméterek bizonytalansága  
ELTE alkalmazott matematikus szakdolgozat, 2009  
témavezető: Turányi Tamás
- [27] Pál Ildikó:  
Egy általános sejtciklus-modell vizsgálata a paraméterek rendszeres megváltoztatásával  
ELTE biológus szakdolgozat, 2010  
témavezetők: Zsély István Gyula és Turányi Tamás
- [28] Sedyó Inez:  
Néhány gázkinetikai reakció paramétereinek bizonytalanságának hőmérsékletfüggése  
ELTE Kémia BSc szakdolgozat, 2010  
témavezetők: Turányi Tamás és Zsély István Gyula
- [29] Danis Judit:  
Baktériumok kemotaxisának molekuláris modelljei  
ELTE Biológia BSc szakdolgozat, 2011  
témavezető: Turányi Tamás
- [30] Varga Tamás:  
Részletes kémiai mechanizmusok optimalizációja  
ELTE Kémia BSc szakdolgozat, 2011  
témavezetők: Turányi Tamás és Zsély István Gyula
- [31] Nagy Tibor  
Reakciókinetikai modellek bizonytalanságanalízise és redukciója  
PhD értekezés, ELTE Kémiai Doktori Iskola, 2009