



MISKOLCI
EGYETEM
UNIVERSITY OF MISKOLC



BorsodChem
Chemistry for generations

MISKOLCI EGYETEM

KERPÉLY ANTAL ANYAGTUDOMÁNYOK ÉS TECHNOLÓGIÁK DOKTORI ISKOLA

ANYAG- ÉS VEGYÉSZMÉRNÖKI KAR

PROF.DR. MERTINGER VALÉRIA

Ph.D. Értekezés Tézisei

Adataalapú Modellezési Megközelítés a Heterogén Katalízis Kutatásban

Jakab-Nácsa Alexandra

TÉMAVEZETŐ

PROF.DR. VISKOLCZ BÉLA

BORSODCHEM TÉMAVEZETŐ

FARKAS LÁSZLÓ

KÉMIAI INTÉZET

MISKOLC, MAGYARORSZÁG

2024

1. BEVEZETÉS

Looking at the centuries-old history of the science of catalysis, the hope of fully recognising and understanding it seems to be slipping away. Despite today's technological tools, which allow a more detailed study of the phenomenon, the infinite pile of accumulated data creates confusion in clear vision. However, artificial intelligence has opened new horizons on data transformation into information and into knowledge¹. Catalyst design is an area in which computational chemistry and machine learning techniques lead to outstanding results².

My doctoral dissertation aims to emphasize the data-driven catalyst design. The objective is to elevate the catalyst basic research results to the next level on the path to industrial application by using them in a practice-oriented way.

My research work is based on two pillars, whose database was built from more than 15.000 data points published in scientific literature. The first pillar is the establishment of MIRA21 (**MI**skolc **RA**nking 20**21**) model, a functional and practical mathematical model of catalyst characterization and exact comparison of each other. The second pillar of our research is the application of EDA (Exploratory Data Analysis), which refers to preliminary work on predicting catalyst composition through machine learning.

2. CÉLKITŰZÉSEK



1.ábra Adatoktól a tudás megszerzéséig – doktori munka sematikus ábrája

My doctoral thesis summarizes my research in the field of data-based catalyst design and contributes to new methods of catalyst research. The goal is to build a hierarchy of data-information-knowledge from the data point through various methods and achieve catalyst design strategies in advance (**Hiba! A hivatkozási forrás nem található.**). The main objective of catalyst design is to optimize catalyst composition through analysing literature and experimental data, using various mathematical models and computer software to predict and apply catalyst composition.

During literature research, the structure of specialized literature publications, how research results are discussed, and the data content of publications became known. It was determined which parameters are useful for extracting information from publications and which are appropriate for the characterization of catalysts.

The literature contains inconsistent data that are difficult to compare each other directly. Since data sets are difficult to handle in this way, in collaboration to the University of Miskolc Catalyst Group, a database was created and then standardized with the MIRA21 model into a single quantifiable data per catalyst. The catalysts have thus become rankable and classable. In the next step of information collection, data were cleaned up and parameters selected, and the correlation between parameters and factors influencing the composition of optimal catalysts were investigated. As the process of exploring data analysis continued, data appeared to be very well used by artificial intelligence, especially in machine learning. Thus, catalyst design guidelines and machine learning data sets were created as a result of data analysis processes before machine learning.

Throughout my doctoral studies, new knowledge was gained in the field of catalysis informatics, which helps to promote the use of artificial intelligence in the design of catalysts. Given our considerable accumulation of knowledge on the semantic aspects of publications based on human learning, this research also forms a solid basis for utilizing the potential of semantic searches.

3. MÓDSZEREK

3.1. MIRA model

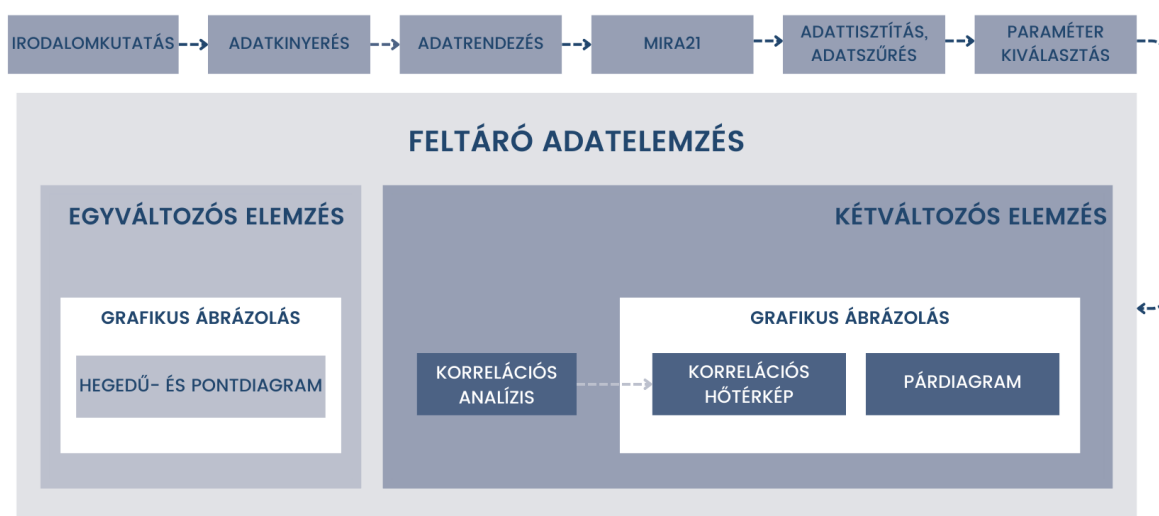
The Miskolc Ranking 2021 (MIRA21) methodology is a multi-step process for comparing catalysts employed in a specific reaction and identifying new patterns among parameters characterizing catalytic processes. This is a systematic approach to create a

simple, general parameter from parameter vectors for the comparison and analysis of catalysts data.

The main purpose of the MIRA21 model is to provide a standard for assessing the “goodness” of a catalyst with objective numerical data and to compare and classify it accordingly. The classification promotes the efficient selection of appropriate links relevant to support the design of a new catalyst or improve existing ones. The comparison of special catalysts for a reaction allows the monitoring of trends in research and development. Standardization of access data in MIRA21 will also promote accurate and consistent data in future publications.

The application field of the model has been reduced to catalytic reactions, mainly heterogeneous catalytic reactions. This methodology was developed using the hydrogenation reaction of aromatic nitrogen compounds.

3.2. Process of EDA in this study



2.ábra A feltáró adatelemzés folyamata

The aim of the study is also to investigate how to obtain conscious data analysis from the collection of data guided by chemical intuition and to obtain results suitable for the construction of machine learning algorithms.

Exploratory data analysis (EDA) is the application of several statistical techniques aimed at investigating, describing, and summarizing the nature of data³. This allows us to identify possible errors, reveal the existence of an outlier, check the relationship between variables (correlations) and their possible redundancy, and conduct a descriptive analysis

of data using graphical representations and summaries of the most important aspects⁴. EDA of previous catalytic data reveals the exploration of correlations between the physicochemical properties and performance of catalysts⁵⁻¹¹.

Data analysis can be described in a multi-step process, as a result of which the necessary database is prepared for machine learning and a catalyst design strategy can be compiled (**Hiba! A hivatkozási forrás nem található.**). The EDA was carried out in python programming environment by using NumPy, Pandas, Seaborn, and Matplotlib libraries¹²⁻¹⁵.

4. ÚJ TUDOMÁNYOS EREDMÉNYEK

1. EGY MATEMATIKAI KERETRENDSZER KERÜLT KIFEJLESZTÉSRE KATALIZÁTOROK JELLEMZÉSÉRE EGYETLEN KVANTITATÍV ADATTAL.



Figure T 1 MIRA szám vizualizációja

A kutatás eredményeként létrejött a MIRA (Miskolc RANking) modell, amely a tudományos kutatásokban katalizátorok egyetlen kvantitatív adattal történő jellemzésére használható. 13 paramétert tartalmazó deskriptor rendszer került meghatározásra, melynek minden paramétere számszerűsíthető adattal jellemezhető. A paraméterek négy csoportba sorolhatók: katalizátor teljesítményt, reakciókörülményeket, katalizátor fizikai tulajdonságait leíró paraméterek, valamint fenntarthatóságra vonatkozó paraméterek.

A munka során egy matematikai eljárás kifejlesztésére került sor, amely lehetővé teszi a katalizátorok könnyű azonosítását és összehasonlítását. Az eljárás során az adatokat normalizáljuk, majd csoportonként súlyozzuk, majd a MIRA számot matematikai formulák segítségével generáljuk. A rangsorolt és osztályozott katalizátorok a MIRA szám alapján összehasonlíthatóvá válnak.

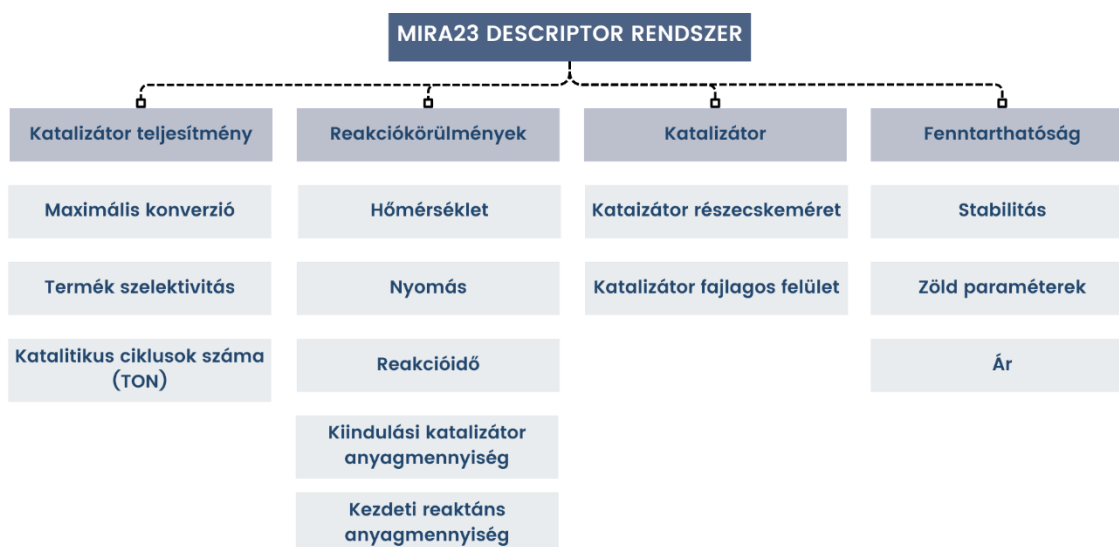


Figure T 2 A modell dekszriptor rendszere

2. A DESZKRIPTOR RENDSZERT ÉS AZ EGYEDI SÚLYOZÁSI TÉNYEZŐKET FELÜLVIZSGÁLTUK ÉS MEGÁLLAPÍTOTTUK, HOGY ÁLTALÁNOS SÚLYOZÁSI TÉNYEZŐKKEL EGYÉRTELMŰVÉ TEHETŐ A KATALIZÁTOROK RANGSOROLÁSA ÉS OSZTÁLYOZÁSA.

A doktori munka során, feltáró adatelemzés módszere révén felülvizsgáltuk a deszkriptor rendszert. A kiértékelést alapján a MIRA21 modell kismértékű módosításával létrejött a MIRA23 verzió. Az összes paraméter súlyozása validálásra került.

A rendszer alkalmas a nitrobenzol és a dinitrotoluol hidrogénezésére szolgáló katalizátorok egyértelmű jellemzésére és rangsorolására^{16,17}, továbbá alkalmazható más heterogén katalitikus rendszerek esetében is.

3. A MIRA KATALIZÁTORMINŐSÍTŐ RENDSZER KOMBINÁLVA A GÉPI TANULÁSSAL, ALKALMAS ÚJ KATALIZÁTOR TERVEZÉSI STRATÉGIÁK KIDOLGOZÁSÁRA.

A doktori értekezésben létrejött folyamat új katalizátor tervezési stratégiát biztosít. Ennek első lépése a MIRA modell alkalmazása, ezt követi a feltáró adatelemzés, végül pedig a gépi tanulás módszereinek alkalmazása következik.

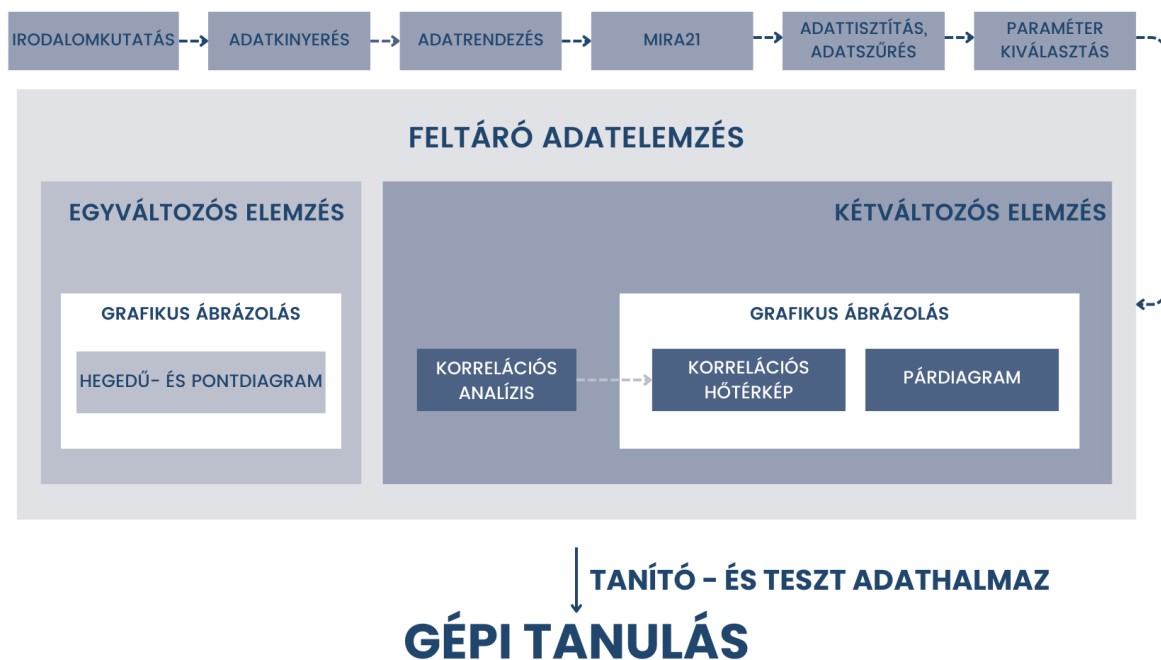


Figure T 3 Katalizátor-tervezési stratégia

4. A SPECIFIKUS AKTÍV FÉMEK ESETÉBEN LEHETSÉGES MEGHATÁROZNI AZT A KONCENTRÁCIÓTARTOMÁNYT, AMELY EGY BIZONYOS SZINT FELETTI KONVERZIÓ ELÉRÉSÉHEZ SZÜKSÉGES.

A kifejlesztett többváltozós módszer deskriptor rendszerének vizsgálata alapján, kémiai információ került előállításra a feltáró adatelemzés segítségével. A grafikus elemzések alapján különböző összetételek és teljesítményjellemzők csoportjai különböztethetők meg a katalizátor összetételtől függően. A T4-es ábra alapján a vas aktív komponens esetében több, mint 70%-os konverzió érhető el 20-22%-os fémtartalomnál.

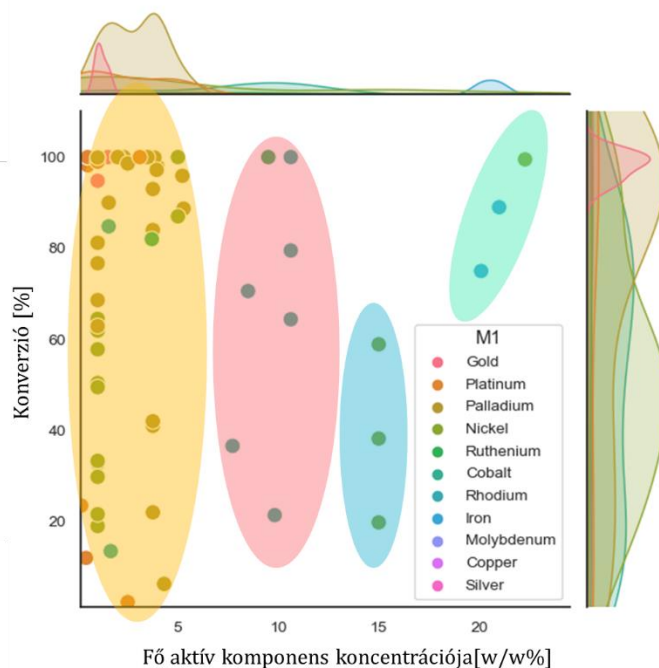


Figure T 4 Aktív komponens koncentráció (M12 w/w%) és konverzió diagramja a katalizátor aktív komponens típusa alapján osztályozva (M1)

5. ELŐSZÖR HATÁROZTUNK MEG A KATALIZÁTOR KUTATÁS SORÁN MATEMATIKAI ELJÁRÁSOK SEGÍTSÉGÉVEL, KATALIZÁTOROKAT LEÍRÓ FENNTARTHATÓSÁGI PARAMÉTEREKET.

Table T 1 Fenntarthatósági paraméterek

Sustainability parameters	IV.	11.	STAB	Stabilitás	-	0-tól n-ig, ahol 0 azt jelenti, hogy nincs információ a stabilitásról, 1 azt jelenti, hogy a stabilitást vizsgálták, 2,3... pedig a ciklusok száma, amíg a konverzió 90% felett marad.
		12.	Zöld paraméterek	Toxicitás	-	Aktív komponens rangsora a toxicitás alapján ¹⁸
				Veszélyeztetett elemek	-	Aktív komponens rangsora a veszélyeztetett elemek meghatározása szerint ¹⁸
				Életciklus-értékelés (LCA)	-	Aktív komponens rangsora az életciklus-értékelés szerint ¹⁸
13.	PR	Ár	EUR/g	1 gramm katalizátor ára euróban az aktív komponensre vonatkoztatva		

5. ÖSSZEFOGLALÁS

UTAZÁS A „HAGYOMÁNYOS” IRODALOMKUTATÁSTÓL A GÉPI TANULÁSIG

Az itt álló kifejezés a legjobb összefoglalása a kutató munkám során megtett utamnak. A doktori kutatásom az aromás nitrovegyületek katalitikus hidrogénezési folyamatának fejlesztésével kezdődött, és a hozzá kapcsolódó hidrogénező katalizátorok feltérképezésével folytatódott. A „hagyományos” irodalomkutatás során számos kérdés merült fel, amely az adatgyűjtés elkezdéséhez vezetett.

Az adatok halmaza egy átfogó katalizátor-adatbázissá alakult át. Az adatok összehasonlítása a MIRA (Miskolc Ranking) modell létrejöttéhez, míg az adatelemzés az úgynevezett feltáró adatelemzéshez vezetett (Exploratory Data Analysis). Később ez a folyamat a gépi tanulásban látszott kiteljesedni.

A katalizátor-adatbázis jelenleg több, mint 15.000 adatot tartalmaz, amely 450 különböző katalizátor kombinációt és kísérleti hidrogénezési tesztet ír le aromás nitrovegyületekre. Kiterjed az adatok tudományos forrásaira, azok minőségére, a publikálás körülményeire, a katalizátorok összetételére, előállítására, katalizátort jellemző paraméterekre.

Az adatbázis paraméterei, valamint a benne foglalt adathalmaz alkotják a MIRA modell alapját. A MIRA egy többlépcsős módszer, amely olyan új információ azonosítására szolgál az adott katalitikus reakcióra vonatkozó adatok révén, amely potenciálisan felhasználhatók a katalizátorfejlesztésben és tervezésben. Ez a funkcionális és gyakorlatias matematikai keret segít az egzakt katalizátorjellemezésben és azok összehasonlításában. A modell egy 15 paraméteres deskriptor rendszerből épül fel, amelynek segítségével megvalósítható a katalizátorok jellemezése. Az adatok normalizálása és a paraméter szerinti súlyozás után egy matematikai formula szerint kiszámítható a MIRA szám. A katalizátorok ez alapján rangsorolhatók és osztályozhatók, ez által könnyebbé téve az összehasonlítást. A modell jelen alkalmazásban a nitrobenzol és a dinitrotoluol katalitikus hidrogénezésére használt katalizátorokra terjed ki.

Az adatok átfogó felülvizsgálata feltáró adatelemzéssel történt. Ennek során az adathalmaz átvizsgálásra került, adattisztításon és adatszűrésen esett át. Korrelációs analízis segítségével megvizsgálásra kerültek a paraméterek közötti kapcsolatok és erősségeik. Az addigi tapasztalatok és az elemzés eredményeképpen módosított

adatgyűjtéssel egy kibővített adatbázis létrehozására került sor, szintén a nitrobenzol hidrogénezésére vonatkozóan. A kibővített adatbázis katalizátorainak adatelemzését követően megtörtént a MIRA21 modell felülvizsgálata és kismértékű módosítással létrejött a MIRA23 modell. A MIRA23 szerinti minősítést követően meghatározásra kerültek a legjobb katalizátor kombinációk. A páronkénti adatelemzés során mintázatok fedezhetők fel, amelyek új információként szolgálnak a különböző katalizátor kombinációkról. Az adattisztításon és szűrésen átesett adathalmaz felhasználásának kiterjesztése a továbbiakban a gépi tanulásban való alkalmazásra terjedt ki. Ennek során az adathalmazt, mint tanuló és teszt adathalmazt használja az algoritmus, hogy prediktáljon általunk kiválasztott tulajdonságokat a bemeneti paraméterek alapján. A kutatási munka jelenleg is folyamatban van.

A doktori értekezés az adatokból történő értékes kémiai információk kinyerésére irányult, melynek révén új ismeret szerezhető. Számomra ez a négy év a többváltozós adatelemzés és a mesterséges intelligencia tudományának, inkább egy szeletének, megismerését eredményezte, valamint alkalmazási lehetőségeinek végtelen tárházat mutatta be. Ezzel egyidejűleg bizonyítva azt is, hogy már a gépi tanulás kiindulási adathalmazának megválasztásánál is rengeteg kérdés merül fel, amely további komplex előkészítési folyamatokat igényel. Emellett tudásom szélesedett azáltal, hogy az aromás nitrovegyületek hidrogénezésére alkalmas katalizátorok fejlesztési irányvonalait és kutatási eredményeit is megismertem.

Ezenfelül a doktori munkám további pozitív hozadékkal járt. A MIRA létrehozása rávilágított arra, hogy a kortárs publikációs gyakorlat meglehetősen rendszertelen és hiányos. A MIRA alkalmazásával a Kémiai Intézet publikációi sokkal átláthatóbb és precízebb módon kerülnek megírásra. A modellt továbbá volt lehetőség egyetemi hallgatók segítségével is tesztelni, amely nemcsak a MIRA továbbfejlesztését támogatta, hanem a hallgatók számára is betekintést nyújtott a modell alkalmazási lehetőségeibe. Jelenleg is folyik kutatási munka, melynek során a metanol szén-dioxidból történő gyártására adaptáljuk a rendszert. A doktori értekezés tovább erősítette a Kémiai Intézet és a mesterséges intelligencia tudományában jártas egyetemi szakemberek együttműködését kémiai kutatási témákban, amelyben szeretnék a továbbiakban is részt venni.

Összefoglalva tehát elmondható, hogy a doktori munka összefoglalja az aromás nitrovegyületek hidrogénező katalizátorainak legfrissebb és legígéretesebb kutatási eredményeit és új, adatalapú kutatásra épülő katalizátor tervezési stratégiát mutat be. Emellett egy olyan eszköz, amely az ipari katalizátorok fejlesztésében is előnyt jelenthet, hiszen áthidalja azokat a réseket, amelyek a tudományos kutatás és a gyakorlati alkalmazás között jelentkeznek. A fenntarthatósági paraméterek figyelembevételével például egyértelműen az ipari megvalósíthatóságra kerül a hangsúly. Ezenfelül az adatelemzés és a mesterséges intelligencia integrációja egy ipari katalizátorfejlesztésbe jó példaként szolgál a vegyipari innovációs lehetőségekre.

6. KÖZLEMÉNYEK

DOKTORI TÉMÁHOZ KAPCSOLÓDÓ KÖZLEMÉNYEK

1. Alexandra Jakab-Nácsa, Emőke Sikora, Ádám Prekob, László Vanyorek, Milán Szőri, Renáta Boros Zsanett, Károly Nehéz, Martin Szabó, László Farkas, Béla Viskolcz, Comparison of Catalysts with MIRA21 Model in Heterogeneous Catalytic Hydrogenation of Aromatic Nitro Compounds, *MDPI Catalysts*, 2022, 12 (5), 467, <https://doi.org/10.3390/catal12050467>, **IF 3.9**
2. Alexandra Jakab-Nácsa, Viktória Hajdú, László Vanyorek, László Farkas, Béla Viskolcz, Overview of Catalysts with MIRA21 Model in Heterogeneous Catalytic Hydrogenation of 2,4-Dinitrotoluene, *MDPI Catalysts*, 2023, 13(2), 387, <https://doi.org/10.3390/catal13020387>, **IF 3.9**
3. Alexandra Jakab-Nácsa, Attila Garami, Béla Fiser, László Farkas, Béla Viskolcz, Towards Machine Learning in Heterogeneous Catalysis—A Case Study of 2,4-Dinitrotoluene Hydrogenation, *MDPI International Journal of Molecular Sciences*, 2023, 24 (14), 11461, <https://doi.org/10.3390/ijms241411461>, **IF 5.6**

TOVÁBBI KÖZLEMÉNYEK

1. Viktória Hajdu, Alexandra Jakab-Nácsa, Gábor Muránszky, István Kocserha, Béla Fiser, Tibor Ferenci, Miklós Nagy, Béla Viskolcz, László Vanyorek, Precious-Metal-Decorated Chromium(IV) Oxide Nanowires as Efficient Catalysts for 2,4-toluenediamine Synthesis, *International Journal of Molecular Science*, 2021, 22(11), 5945, <https://doi.org/10.3390/ijms22115945>, **IF 6.2**
2. Alexandra Jakab-Nácsa, Dávid Stomp, László Farkas, George Kaptay, Large NaCl-Effect on the Decomposition Rate of Chlorate Ions in HCl-Containing Brine Solutions and Its Consequences for Chlor-Alkali Industry, *Periodica Polytechnica – Chemical Engineering*, 2021, 65 (2), 238-242, <https://doi.org/10.3311/PPch.14634>, **IF 2022 1.3**

DOKTORI TÉMÁHOZ KAPCSOLÓDÓ SZÓBELI ELŐADÁSOK**1. Borsodi Vegyipari Napok**

Rangsorolhatók-e a kémiai reakciók katalizátorai?

17 November 2021, Miskolc, Hungary

2. XXVIII. Nemzetközi Vegyészkonferencia

Katalizátorok összehasonlíthatósága a MIRA21 modell alapján

27-29 October 2022, Nagyvárad, Romania

3. International Conference on Chemical Engineering

Classification of Catalysts with MIRA21 Model in Heterogeneous Catalytic Hydrogenation of Aromatic Nitro Compounds

March 20-21, 2023, Rome, Italy

DOKTORI TÉMÁHOZ KAPCSOLÓDÓ POSZTERELŐADÁSOK**1. 26th International Congress of Chemical and Process Engineering**

Utilization of laboratory testing and a mathematical model for the purpose of selecting a heterogeneous hydrogenation catalyst

21-25 August, 2022, Prague, Czech Republic

2. 4. MKE Nemzeti Vegyészkonferencia

Aromás nitrovegyületek katalitikus hidrogénezésére alkalmas katalizátorok fejlesztése az iparban

10-12 July, 2023, Eger, Hungary

DOKTORI TÉMÁHOZ KAPCSOLÓDÓ POSZTERELŐADÁSOK**1. 12th European Congress of Chemical Engineering**

Wastewater Treatment Optimization of Nitration of Aromatics

15-19 September, 2019, Florence, Italy

2. 26th International Congress of Chemical and Process Engineering

Cooperation of cities and local companies for climate change adaptation

21-25 August, 2022, Prague, Czech Republic

3. 4. MKE Nemzeti Vegyészkonferencia

Ipari szürkevíz visszaforgatási lehetőségek vizsgálata a LIFE projekt keretén belül

10-10 July, 2023, Eger, Hungary

7. IRODALOMJEGYZÉK

1. Medford AJ, Kunz MR, Ewing SM, Borders T, Fushimi R. Extracting Knowledge from Data through Catalysis Informatics. *ACS Catal.* 2018;8(8):7403-7429. doi:<https://doi.org/10.1021/acscatal.8b01708>
2. Ess D, Gagliardi L, Hammes-Schiffer S. Introduction: Computational Design of Catalysts from Molecules to Materials. *Chem Rev.* 2019;119(11):6507-6508. doi:<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00296>
3. Morgenthaler S. Exploratory data analysis. *Wiley Interdiscip Rev Comput Stat.* 2009;1(1):33-44. doi:10.1002/WICS.2
4. A Practical Introductory Guide to Exploratory Data Analysis | datos.gob.es. <https://datos.gob.es/en/documentacion/practical-introductory-guide-exploratory-data-analysis>. Accessed April 17, 2023.
5. Zavyalova U, Holena M, Schlögl R, Baerns M. Statistical analysis of past catalytic data on oxidative methane coupling for new insights into the composition of high-performance catalysts. *ChemCatChem.* 2011;3(12):1935-1947. doi:10.1002/cctc.201100186
6. Schmack R, Friedrich A, Kondratenko E V., Polte J, Werwatz A, Kraehnert R. A meta-analysis of catalytic literature data reveals property-performance correlations for the OCM reaction. *Nat Commun.* 2019;10(1). doi:10.1038/s41467-019-08325-8
7. Yang Q, Skrypnik A, Matvienko A, Lund H, Holena M, Kondratenko E V. Revealing property-performance relationships for efficient CO₂ hydrogenation to higher hydrocarbons over Fe-based catalysts: Statistical analysis of literature data and its experimental validation. *Appl Catal B Environ.* 2021;282:119554. doi:10.1016/J.APCATB.2020.119554
8. Fedorov A, Linke D. Data analysis of CO₂ hydrogenation catalysts for hydrocarbon production. *J CO₂ Util.* 2022;61:102034. doi:10.1016/J.JCOU.2022.102034
9. Keith JA, Vassilev-Galindo V, Cheng B, et al. Combining Machine Learning and Computational Chemistry for Predictive Insights into Chemical Systems. *Chem Rev.*

- 2021;121(16):9816-9872. doi:10.1021/acs.chemrev.1c00107
10. Ras EJ, McKay B, Rothenberg G. Understanding catalytic biomass conversion through data mining. *Top Catal.* 2010;53(15-18):1202-1208. doi:10.1007/s11244-010-9563-z
 11. Rodríguez-Pérez R, Bajorath J. Feature importance correlation from machine learning indicates functional relationships between proteins and similar compound binding characteristics. *Sci Rep.* 2021;11(1):1-9. doi:10.1038/s41598-021-93771-y
 12. Harris CR, Millman KJ, van der Walt SJ, et al. Array programming with NumPy. *Nature.* 2020;585(7825):357-362. doi:10.1038/S41586-020-2649-2
 13. Waskom M. seaborn: statistical data visualization. *J Open Source Softw.* 2021;6(60):3021. doi:10.21105/JOSS.03021
 14. Hunter JD. Matplotlib: A 2D graphics environment. *Comput Sci Eng.* 2007;9(3):90-95. doi:10.1109/MCSE.2007.55
 15. McKinney W. *Python for Data Analysis: Data Wrangling with Pandas, NumPy, and IPython.*; 2017.
 16. Jakab-Nácsa A, Hajdu V, Vanyorek L, Farkas L, Viskolcz B. Overview of Catalysts with MIRA21 Model in Heterogeneous Catalytic Hydrogenation of 2,4-Dinitrotoluene. *Catal 2023, Vol 13, Page 387.* 2023;13(2):387. doi:10.3390/CATAL13020387
 17. Jakab-Nácsa A, Garami A, Fiser B, Farkas L, Viskolcz B. Towards Machine Learning in Heterogeneous Catalysis-A Case Study of 2,4-Dinitrotoluene Hydrogenation. *Int J Mol Sci.* 2023;24(14). doi:10.3390/IJMS241411461
 18. Bystrzanowska M, Petkov P, Tobiszewski M. Ranking of Heterogeneous Catalysts Metals by Their Greenness. *ACS Sustain Chem Eng.* 2019;7(22):18434-18443. doi:10.1021/acssuschemeng.9b04230

8. KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS/ACKNOWLEDGEMENTS

Nagy tisztelettel és hálával szeretném kifejezni köszönetemet Prof. Dr. Viskolcz Béla úrnak, a Kémia Intézet igazgatójának, aki számomra nem csupán egy egyszerű témavezető volt, hanem inkább egy iránytű a tudományos kutatások labirintusában. Az általa nyújtott szakmai segítség és iránymutatás felbecsülhetetlen értéket képvisel számomra. Mély hálával tartozom inspiráló beszédeiért, melyek a legnehezebb pillanatokban is erőt adtak, és segítettek kitartani a kutatás során. Őszinte köszönettel adózom elképesztő menedzseri készségeiért, melyek rendszerezetté és gördülékennyé tették a munkafolyamataimat.

Nem hagyhatom figyelmen kívül Farkas László, Manager Technology Support, ipari konzulensem kiemelkedő szerepét és befolyását az utam alakulásában. Ő volt az, aki rábírta arra, hogy ne csak a kényelmes mederben haladjak, hanem vállaljam fel a doktori képzés kihívásait. Ahogy a doktori képzés kanyargó útjain haladtam, mindvégig mellettem állt, értékes gondolatokkal és mélyreható tanácsokkal látott el. Mindig rendelkezésemre állt, türelmesen válaszolt kérdéseimre, meghallgatta aggodalmaimat, és bátorított arra, hogy ne féljek a változástól vagy a nehézségektől. Hálával és köszönettel tartozom neki mindazért, amit értem tett.

Külön köszönettel tartozom Garami Attilának, az Energia-, Kerámia- és Polimertechnológiai Intézet adjunktusának, aki az adatelemzés és a mesterséges intelligencia módszereinek alkalmazásával támogatta kutatásomat. Világossá tette továbbá számomra az összetettebb problémákat és megnyitotta az ajtót azok megértéséhez. Ő volt az, akinek a segítségével az elméleti alapoktól a gyakorlati alkalmazásig sokat tanulhattam.

Hálával tartozom a Kémiai Intézet katalitikus hidrogénezéssel foglalkozó csoportjának, akik hozzájárultak a doktori munkám tárgyát képező MIRA21 modell létrehozásához. Köszönöm, Vanyorek László, Sikora Emőke, Prekob Ádám és Hajdú Viktória segítségét és együttműködését. Köszönöm Dr. Fiser Bélának és Dr. Szőri Milán egyetemi munkatársaknak, akik támogattak és értékes észrevételeket tettek.

Köszönettel tartozom Dr. Nehéz Károlynak, az Informatikai Intézet igazgatójának, valamint Szabó Martin tanársegédnek a MIRA adatbázis webalapú fejlesztésében való

közreműködésért. Hálásan köszönöm továbbá Dr. Bánhidi Olivér, címzetes egyetemi tanár támogatását és online tanóráit, amelyek bevezettek az adatelemzés világába.

Az oktatók és nem oktató munkatársak a Kémiai Intézetben kulcsfontosságúak voltak az utam során. Mindig segítőkészen álltak rendelkezésemre, legyen szó akár technikai kérdésekről, akár szakmai támogatásról. Hálával tartozom értük!

Nem tudom eléggé kifejezni, milyen hálás vagyok a férjemnek. Mindvégig mellettem állt ezen az úton, türelmesen meghallgatta az aggodalmaimat és örömet, és mindig biztatott a kitartásra. Ő mindig ott volt az oldalamon, hogy erőt adjon, amikor szükségem volt rá, és örömökre osztozzon az eredményeimben. A férjem szeretete és támogatása a legnagyobb kincs az életemben.

Az én két kisgyermekemnek is hálával tartozom, amiért megértéssel fogadták, amikor nem tudtam velük lenni, és támogattak engem azzal, hogy maguk is erőt adtak. Az ő ártatlan örömeik és szeretetük folyamatos inspirációt nyújtanak, és mindig emlékeztetnek arra, hogy miért is vállaltam mindezt. A családomnak mély hálával tartozom mindazért, amit értem tettek. Az ő segítségük nélkül jóval bonyolultabb lett volna az utam.

Végül, de nem utolsósorban, hálával tartozom a Technológiai Támogatás összes munkatársának, akik rugalmas együttműködésükkel, készséges segítségükkel és hozzáértésükkel hozzájárultak a sikeres eredmények eléréséhez.

Hálásan köszönöm Purzsa Tamás Vice President Úrnak, hogy lehetővé tette számomra, hogy elkezdhessem Ph.D. képzésemet munkám mellett.

I am deeply grateful to Mr. Zhao Nan for enabling me to successfully complete my doctoral studies.

I appreciate the opportunity provided by Wanhua-BorsodChem to conduct my Ph.D. Study.

Prepared with the professional support of Doctoral Student Scholarship Program of the Co-operative Doctoral Program of the Ministry of Innovation and Technology financed from the National Research, Development, and Innovation Fund.

The project with identification number 2020-1.1.2-PIACI-KFI-2020-00121 is implemented with the support of the Ministry of Innovation and Technology from the National Research, Development, and Innovation Fund.

