



BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
VEGYÉSZMÉRNÖKI ÉS BIOMÉRNÖKI KAR
OLÁH GYÖRGY DOKTORI ISKOLA

POLIMERIZÁCIÓS ÉS DEGRADÁCIÓS FOLYAMATOK MODELLEZÉSE ÉS SZÁMÍTÓGÉPES SZIMULÁCIÓJA

Tézisfüzet

Szerző: Farkas Eszter
Témavezető: Dr. Mészéna Zsolt
Konzulens: Dr. Marosi György

BME, Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar,
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék

2009

1. Bevezetés és célkitűzések

A mindennapi életben körülvesznek minket a műanyag termékek: csomagolóanyagok, közlekedési eszközök, különböző védőrétegek, festékek vagy egyéb építőipari anyagok. Speciális felhasználási területek speciális tulajdonságokat követelnek meg. Ahhoz hogy eleget tudjunk tenni ezeknek a magas követelményeknek, célzott anyagtervezés, speciális módszerek szükségesek. A hosszas és költséges kísérletsorozatokat modellezéssel tudjuk gyorsabbá, olcsóbbá tenni.

Dolgozatomban két speciális polimertípus legfontosabb tulajdonságainak modellezését tűztem ki célul: speciális molekulatömeg-eloszlású polimerek felépülésének, valamint égésgátolt és kezeletlen polimerek lebomlásának folyamatát követem nyomon számításaimmal.

A speciális műanyagtulajdonságokat döntően meghatározza a bennük található különböző hosszúságú láncok egymáshoz való aránya. Élő anionos homolimerizáció modellezésénél arra kerestem a választ, milyen eszközökkel, milyen berendezéssel valósítható meg egy olyan folyamatos termelés, amely segítségével széles határok között tervezhető a kívánt termék molekulatömeg-eloszlása. Számos eljárás ismert, amellyel a kiindulási anyagok és mennyiségek ismeretében a reakció eredményeként kapott polimer összetétele – azaz molekulatömeg-eloszlása meghatározható. Ezek a módszerek többnyire a reakciómechanizmusra felírt differenciálegyenlet-rendszer megoldásán alapulnak^{1,2}. Az egyenletrendszer komplexitásából adódóan ezeknél az eljárásoknál a szokásos számolási irányt megfordítani nehézkes vagy lehetetlen, a molekulatömeg-eloszlásból az előállításához szükséges reaktorkonfiguráció illetve monomer- és iniciátor koncentráció-profil meghatározása matematikai szempontból rosszul kondicionált feladat.

Az élő polimerizációs folyamatoknál a reakció viszonylag egyszerű mechanizmusa teret nyithat az alapanyagok koncentrációi és a keletkezett polimer molekulatömeg-eloszlása közt egy egyszerűsített, invertálható kapcsolat felírásához, amely segítségével a polimer tulajdonságaiból kiindulva vonhatunk le következtetéseket a szükséges alapanyagok mennyiségére. Az anionos polimerizációs reakció egy iniciálási (1) és egy láncnövekedési

¹ Ray, W. H.: On the mathematical modelling of polymerization reactors. J. Macromol. Sci.-Rev. Macromol. Chem., C8, 1-56 (1972).

² Wulkow, M. (1993). PREDICI simulation package, Computing in Technology GmbH, 200 Oldenburger Str., Rastede, Germany

lépésből (2) áll, a lánczáródási vagy láncátadási lépések elhanyagolhatóak. Az egyes iniciátor-molekulákból keletkezett reakció-centrumok folyamatosan növekednek, kvázi „élnek” amíg a monomer el nem fogy a rendszerből, vagy deaktiválják a láncvégi aktív centrumokat egy protondonor molekula, általában valamilyen alkohol hozzáadásával:



Az (1-2) reakciósémában k_{pn} az n monomer-egység hosszúságú polimer láncnövekedési lépésének sebességi állandója, k_i az iniciálási reakcióhoz tartozó sebességi állandó, I az iniciátor valamint a későbbiekben iniciátorkoncentráció, M hasonlóan a monomer és koncentrációja. P_n az n egység hosszúságú polimerlánc, a mérlegegyenletekben pedig a reakcióelegybeli koncentrációját jelöli.

Az iparban nagy mennyiségben állítanak elő anionos polimerizációval elasztomereket, termoplasztokat. Az olyan, a mindennapi életben szinte mindenhol fellelhető műanyagok polimerizációja is történhet anionos mechanizmussal, mint például a poliamidok, polisztirol. Gyors iniciálás mellett a reakció rendkívül keskeny, jól definiálható molekulatömeg-eloszlást eredményez, ezért ezt a polimertípust kutatási célokra, például csillag-polimerek vizsgálatára is használják modell-polimerként.

Az anionos élő polimerizáció matematikai modellezésére kutatóhelyemen korábban kidolgozott monodiszperz láncnövekedés módszere gyors és hatékony alapot kínált a további fejlesztésekhez³. Ez egyértelműen előnyösebbnek ígérkezett, mint az irodalomból eddig ismert eljárások, amelyek csak iteratív eljárásba ágyazva képesek tervezési céloknak megfelelni. Célul tűztem ki egy olyan tervezési eljárás megalkotását, amelynek segítségével felderíthetőek a gyártási lehetőségek és feltérképezhetőek a korlátok, amiket az egy vagy több reaktorból álló rendszer kínál. Vizsgálatom a folyamatos kevert tartályreaktorból kiindulva egészen a többreaktoros kaszkád rendszerig terjed. A kaszkád rendszerre egy olyan polimerizációs eljárás kidolgozását tűztem ki célul, amelynek segítségével tetszőleges reaktorszámra megadhatók azok a gyártási paraméterek, amellyekkel - a rendszer korlátait is figyelembevéve - a legjobban illeszkedő molekulatömegeloszlás állítható elő.

³ Meszena, Z. G.; Viczian, Z.; Gosden, R. G.; Mohsin, M. A.; Johnson, A. F.: Towards tailored molecular weight distributions through controlled living polymerisation reactors: a simple predictive algorithm. *Polym React Eng*, 7(1), 71-95 (1999)

A polimerek égésének modellezésénél a molekuláris szintről egy lépést távolodva a vizsgálat fókuszja áthelyeződik az anyag- és hőtranszport folyamatokra. Hogyan viselkedik az anyag különböző hőhatásokra, mekkora az éghetőanyag-kibocsátása egy adott módosított tulajdonságú polimernek, azaz milyen esetleges veszélyforrást rejthetnek magukban ezek az anyagok, ha tűz üt ki közvetlen közelükben. Az anyagok égési tulajdonságait már a múltban is sokan kutatták – számos szabványos mérési eljárást dolgoztak ki, ezáltal az anyagok összehasonlíthatóvá váltak. Viszont ezek a mérések nem képesek választ adni azokra a kérdésekre, amelyek a tényleges kockázatelemzés során felmerülnek: például hogyan változik a felszabaduló hő mennyisége és intenzitása nagyobb tömegű és kiterjedésű polimer-rétegeknél, hogyan reagál a polimer a megváltozott égési körülményekre stb.

Munkámban a cone kaloriméteres vizsgálat során fellépő hő- és anyagáramok modellezését tűztem ki célul. A modell nemcsak arra ad választ, hogy hogyan viselkedik egy polimer-réteg a vizsgálttól eltérő körülmények között, hanem segíthet megérteni a különböző anyag-specifikus bomlási mechanizmusokat, a vizsgálatok során jelentkező különbségeket. Az évek során egyre bonyolultabb és komplexebb modellek kerülnek publikálásra. Még a manapság oly fejlett számítástechnikai háttér mellett is elmondható, hogy komplex rendszerek esetén nem elég nagy a számolási kapacitás, ezért további egyszerűsítő feltételekkel kell élnünk, hogy egy folytonos mozgásban lévő rendszert leíró modellt megoldhassunk. A besugárzott hő hatására jelentkező degradációt leggyakrabban pillanatszerű reakciónak kezelik az irodalomban, amely a bomlás során keletkezett elsődleges porózus váz és az ép polimer határfelületén játszódik le⁴. A bomlás sebességét a határréteg két oldalán jelentkező hőtranszport egyensúlya szabja meg. A degradáció sebességére hatást gyakorló másik folyamat a keletkező gáz kiáramlása és a minta feletti belobbanása. A reakciózóna felett található elszenesedett porózus rács a gáz kiáramlását akadályozza. Ez a gázvisszatartó hatás egy nyomásprofil épít fel a mintában, amely a rácsszerkezet szilárdságának szemszögéből vizsgálva támpontot adhat arra, hogy egyes anyagoknál mikor, milyen nyomásnál sérül a rácsszerkezet, és ez milyen viszonyban áll a rács fizikai tulajdonságaival. Általánosságban elmondható továbbá, hogy a modellek csak nagyon ritkán veszik figyelembe a minta feletti égést, mint a rendszerben jelentkező újabb hőforrást, és a legegyszerűbb esetben a láng által kibocsátott hőt konstansnak tekintik⁵.

⁴ Staggs JEJ. Heat and mass transport in developing chars, *Polymer Degradation and Stability* 2003;82:297–307.

⁵ Hopkins Jr D and Quintiere JG. Material Fire Properties and Predictions for Thermoplastics. *Fire Safety Journal* 1996;26:241-268.

Ezekre az ismeretekre építve egy olyan modellt kívántam felállítani, amely a Szerves Kémia és Technológia Tanszék ML cone kaloriméteres vizsgálatainak leírására alkalmas, kezeli egyaránt a minta hő- és anyagmérlegét, valamint tartalmazza a fejlődő gázok begyulladásából és égéséből adódó plusz hőforrás hatását.

2. Kísérleti és számítási módszerek

Az anyagok éghetőségének jellemzésére leggyakrabban használt gyulladási idő („ignition time”), tömegvesztés („mass loss”) és a hőfelszabadulás mértéke („heat release rate” HRR) mass loss típusú cone kaloriméteres („mass loss calorimeter” MLC) vizsgálattal került meghatározásra. Az elvégzett vizsgálatok az ISO 13927 szabványnak megfelelően 50 kW/m² besugárzott hő mellett történtek. A vizsgált minták polimer mátrixa Eporezit AH-16 típusú epoxigyanta, Eporezit T-58 típusú aminnal térhálósítva. Égésgátló adalékként egy szintetikus foszfortartalmú reaktív amin, a TEDAP került felhasználásra.⁶

A cone kaloriméter modellezéséhez Matlab környezetben saját programot fejlesztettem, amely a minta anyag és hőmérlegét leíró parciális differenciálegyenlet-rendszert különböző numerikus módszerek kombinálásával oldja meg.

A molekulatömeg-eloszlás tervezésére kidolgozott eljárás példáit Excel környezetben számítottam.

3. Eredmények

A kutatómunkámban az élő anionos homopolimerizáció modellezésére és ezen belül a polimer karakterét döntően befolyásoló molekulatömeg-eloszlás célzott tervezésére dolgoztam ki eljárást. A módszerem a monodiszperz láncnövekedés módszerén alapul, amely elhanyagolja a láncnövekedés okozta kiszélesítő hatást, és a reaktorba betáplált anyag koreloszlását tekinti az eloszlás képét döntően meghatározó faktornak. Emellett feltételezi, hogy a reaktorban a monomer-koncentráció közelítőleg állandó értéken tartható. E feltételezések alkalmazásával a keletkezett eloszlás, az eddig ismert módszerekkel szemben, kis számítási igény mellett meghatározható.

⁶ Toldy A, Tóth N, Anna P, Keglevich Gy, Kiss K, Marosi Gy. Flame retardancy of epoxy resin with phosphoruscontaining reactive amine and clay minerals. Polym. Adv. Technol. 2006;17:1–4.

Módszerem másik nagy előnye gyorsasága mellett, hogy invertálható, tehát az reakció eredményeként kapott eloszlásból lehet visszaszámolni az előállításához szükséges reakció-körülményeket. Munkám során megvizsgáltam milyen különböző molekulatömeg-eloszlások állíthatóak elő egyes reaktortípusokban. Olyan új tervezési eljárást dolgoztam ki folyamatos kevert tartályreaktorok sorbakötésével létrehozott kaszkád rendszerben történő polimerizációra, amellyel állandósult állapotú termeléssel is jól közelíthető a kívánt eloszlás. Az állandósult állapotú reaktorok vannak a legközelebb a valós ipari esetekhez, hiszen a bonyolult, időben erősen változó monomer és iniciátor beadagolás nehezen megvalósítható. Félfolyamatos termeléssel viszont kis mennyiségben, laborkörülmények között, az alapanyagok célzott, komplex beadagolásával az előállítható MTE spektruma kiszélesedik, és különleges, szokatlan eloszlások is előállíthatóak.

A monodiszperz láncnövekedés módszerének tervezési eredményeit más független számolási eljárással ellenőriztem, amely kevesebb egyszerűsítő feltételezést használ. Bebizonyítottam, hogy a módszeremben elhanyagolt hatások csak csekély mértékben befolyásolják a becsült molekulatömeg-eloszlását, viszont nagyon jelentősen egyszerűsítik a számítást és növelik gyorsaságát.

Munkám másik részében degradációs folyamatokat modelleztem a Szerves Kémia és Technológia Tanszék Gyógyszer-, Környezet- és Biztonság- Technológiai Anyagok Kutató-csoportjával együttműködésben. A felépített egydimenziós modell egy konstans besugárzásnak kitett polimer-réteg hő- és nyomásviszonyait írja le, a degradációt ez a besugárzás indukálja, amikor a felület eléri a kritikus hőmérsékletet. A degradációs front végighalad az egész polimer-rétegen, ahol a polimer gázzá és elszenesedett polimer-rácsá (char) alakul át pillanatszerű reakcióban. Az olvadt polimert és a chart ez a reakciózóna élesen és egyértelműen kettéválasztja, azaz nem létezhet polimer és gáz egy és ugyanazon fizikai térben.

A felszabaduló gáz áramlásának számítását a Navier-Stokes egyenletre alapoztam. Modellemben a rács struktúrája térben állandó, és az áramlást csőben áramló gázokhoz hasonlóan kezelem. Ennek egy speciális formája a Darcy-egyenlet, amit kombináltam a tömeg-megmaradási egyenlettel és korrigáltam a rácsban felhalmozódó gáz mennyiségével (3).

$$\frac{dm''}{dt} = -(1-r)\rho_p \frac{ds}{dt} - \int_{s(t)}^l \phi \frac{d\rho_g}{dt} dy \quad (3)$$

A (3) egyenletben m'' az egységnyi felületű mintát elhagyó éghető gázok tömege, y helykoordináta, t időkoordináta, ρ a gáz (g) és a rács (c) sűrűsége, ϕ a rács porozitása, r a szenesedés mértéke (char tömegarány), $s(t)$ pedig a reakciózóna helye.

A hőtranszport modellben a minta felső felületén háromféle mechanizmust vettem figyelembe: hővezetés (4. egyenlet bal oldala), hőátadás (4. egyenlet jobb oldal második tag), és a forró felület hősugárzása (4. egyenlet jobb oldal harmadik tagja).

$$k_{eff} \frac{\partial \hat{T}}{\partial y} = \frac{\varepsilon \dot{q}_0''}{T_a} + h_1 (\hat{T}_{fl} - \hat{T}) + \varepsilon \sigma T_a^3 (\hat{T}_{fl}^4 - \hat{T}^4) + \frac{\phi \varepsilon H_c}{T_a} \frac{dm''}{dt} \quad (4)$$

A (4) egyenletben \hat{T} relatív hőmérséklet, T_a a környezet hőmérséklete, T_{fl} a láng hőmérséklete, \dot{q}_0'' a cone kaloriméter által besugárzott hő, k_{eff} a gáz-szilárdanyag rendszer effektív hővezetési együtthatója, H_c a gázok égéshője, ε a porózus felület emisszióképessége, σ Stephan-Boltzmann állandó, h_1 pedig a besugárzott felület hőátadási tényezője.

A láng hőforrását legegyszerűbb esetben a cone hőforráshoz analóg módon a felszabaduló gáz mennyiségével lineárisan növekvő mennyiségként veszem figyelembe, ahol egy a bomlás ideje alatt állandó paraméterrel (ϕ) határozom meg, hogy az elméleti égéshő hány százaléka jut vissza a mintába. Számításaim során alkalmaztam egy komplexebb, a láng dinamikus változását leíró nemlineáris lángmodellt is a visszasugárzott hő becslésére. A két modell hasonló eredményt szolgáltatott, paramétereik pontosabb illesztése további vizsgálatokat igényel.

Az elszenesedett rácsban a hőtranszport hővezetéssel és a kiáramló bomlástermék gáz közti hőátadással történik, amelyet a rács-gáz rendszer hőfelvételével kiegészítve kapjuk az (5) hőmérleget:

$$(\phi \rho_g c_g + (1 - \phi) \rho_c c_c) \frac{\partial \hat{T}}{\partial t} + \rho_g c_g q \frac{\partial \hat{T}}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(k_{eff} \frac{\partial \hat{T}}{\partial y} \right) \quad (5)$$

ahol q a teljes mintafelületre vonatkoztatott gáz-kiáramlási sebesség, c a gáz (g) és rács (c) hőkapacitása.

A számításokhoz erre a célra Matlab környezetben programot írtam. Megvizsgáltam, hogy a modellegyenletekhez felhasznált numerikus módszerek megválasztása valamint az idő és hely szerinti felbontás hogyan befolyásolja az eredmény pontosságát. A mozgó határfelület

problémájának kezelésére Landau transzformációt alkalmaztam. Számításaim meghatározzák a roncsolódott felületről távozó gáz mennyiségét, amelyet összevettem az Eporezit AH-16 típusú epoxigyanta kaloriméteres kísérleteivel. Modellem segítségével illesztettem az anyag hővezetési tényezőjét és fajlagos hőkapacitását, és meghatároztam közelítőleg a bomlás során a mintában jelentkező hőmérséklet és nyomásviszonyokat.

4. Tézispontok

1) Számítási algoritmust és gépi megvalósítást dolgoztam ki polimerek égésének léptéknövelésre is alkalmas modellezésére, amely a polimer teljes vastagságában meghatározza hőmérsékletét és nyomását, valamint az égés sebességét, s így alapot szolgáltat méretezési számításokhoz. (F2, F3, K10, K11, K14)

2) Számítási módszeremet alkalmaztam cone kaloriméterben égetett polimer minta állapotváltozásának leírására. Az eredményeket mérésekkel összevetve meghatároztam egy égésgátolt polimer rendszer hővezetési és hőkapacitás jellemzőit a vizsgálat hőmérséklet-tartományában, és megállapítottam hogy a gyulladási időt döntően az anyag hővezetése határozza meg azonos belépő hőmennyiség mellett. (F2, F3, K14)

3) A monodiszperz láncnövekedés módszerének alkalmazásával gyors, hatékony számítási algoritmust és gépi megvalósítást dolgoztam ki molekulatömeg-eloszlás közelítő számítására izoterm folyamatos kevert tartályreaktor kaszkádban végzett élő polimerizáció esetén. Megállapítottam, hogy élő polimerizáció molekulatömeg-eloszlását állandó monomerkoncentráció mellett döntően az iniciátor adagolási stratégia és a reaktor tartózkodási időeloszlás függvénye határozza meg. (F1, F4, F5, K2, K3, K4, K5, K7)

4) A monodiszperz láncnövekedés módszerének invertálásával tervezési algoritmust dolgoztam ki adott molekulatömeg-eloszlással jellemezhető polimer előállításához szükséges gyártási paraméterek számítására izoterm folyamatos kevert tartályreaktor kaszkádban végzett élő polimerizáció esetén. (F4, K6, K7, K8, K9, K12, K13)

5) Megállapítottam, hogy egy folyamatos kevert tartályreaktorban végzett gyártás esetén tetszőleges iniciátor-profil alkalmazásával is csak Schulz-Flory molekulatömeg-eloszlású termék állítható elő, ha a gyártási paramétereket periodikusan változtatjuk. (F1, F5, K2, K3, K4)

6) A molekulatömeg-eloszlás tervezési eljárás alkalmazásával megadtam egy bimodális molekulatömeg-eloszlással jellemezhető polimer előállításához szükséges gyártási stratégiát négyelemű folyamatos kevert tartályreaktor kaszkád esetén. (F4, K1, K13)

5. Az eredmények hasznosításához kapcsolódó tevékenységek

Az állandósult állapotú reaktorkaszkádra kidolgozott módszerem egyszerű, állandó sebességű anyagbetáplálásokat használ, ezért az élő anionos polimerizáció ipari méretű megvalósítása során is jól alkalmazható. A dolgozatban ismertetett sorba-kapcsolt reaktorok számítása mellett módszerem alkalmas tetszőleges reaktor-kapcsolások gyors számítására is.

A molekulatömeg-eloszlás tervezésére és dinamikus számítására kidolgozott eljárásom alkalmas különleges polimerek előállításának megtervezésére, és ezáltal egyes anyagok tulajdonságainak feltérképezésére is lehetőséget ad. A polimer molekulatömeg-eloszlásának irányított változtatásával az eljárás akár optimalizálási feladatokra is alkalmazható.

Eljárásom gyorsasága és invertálhatósága teret nyit a szabályozási feladatok irányába is. A kidolgozott számítási módszert folyamatirányító algoritmusokkal kombinálva, kívánt céltulajdonságok megbízható beállítására alkalmas adaptív és prediktív szabályozást tesz lehetővé. Munkám során ezt a lehetőséget részletesen nem vizsgáltam, módszerem kiterjesztése erre a területre további kutatást igényel.

Degradációs modellem a cone kaloriméteres vizsgálatok eredményeire támaszkodva elsődleges becslést adhat új égésgátolt anyagok hővezetési és hőraktározási tulajdonságairól a felmelegedés és égés körülményei között, s ezzel olyan információt szolgáltat, amely mérés nélkül, vagy csak nagy nehézségek árán határozható meg. Az anyag pontos fizikai-kémiai paraméterei ismeretében modellem alapját képezheti egy olyan eljárásnak, amely égésgátolt polimerek tulajdonságainak, bomlási mechanizmusuk becslésére szolgál, és felhasználható tűzveszélyes konstrukciók (épületek, közlekedési eszközök) műszaki tervezése során.

6. A témakörben megjelent saját publikációk

Idegen nyelven megjelent publikációk:

- F1** E. Farkas; Z. G. Meszena; A. F. Johnson: Molecular Weight Distribution Design with Living Polymerization Reactions. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2004, 43, 7356-7360 (Imp.Fact. 1,424)
- F2** E. Farkas, Z.G. Meszena, A. Toldy, S. Matkó, B.B. Marosfői and G.Y. Marosi Modelling of transport processes in a developing char, chars, *Polymer Degradation and Stability* 2008, 93,1205–1213 (Imp.Fact. 2,073)
- F3** E. Farkas, A. Toldy, S Matkó, B. B. Marosfői, G. Marosi, Z. G. Meszena Degradation of Neat and Flame Retarded Polymer – Comparison of Simulation and Experimental Results, *Chemie Ingenieur Technik* 2008, 80, No.9 1430 (Imp.Fac. 0,401)
- F4** E. Farkas, Z. G. Meszena, MWD design in a series of CSTRs with living polymerisation reactions *Periodica Polytechnica* 2009, (submitted)

Magyar nyelven megjelent publikáció:

- F5** E. Farkas; Z. G. Meszena Molekulatömeg-eloszlás tervezése élő polimerizációs reakciónál *Acta Agraria. Kaposváriensis* 7(3), 119-133., 2003

Konferenciakiadványok

- K1** Farkas, E., Meszéná, Z., G. Tailored molecular weight distribution for anionic homopolymerization – possibilities and barriers of a reactor cascade system (Proc. of 28th ChEM Conference, p.22-25, ISBN 978-963-420-960-7 Meissen, Germany, (2008)

Konferenciárészvételek

- K2** Farkas E., Meszéná Z.: Molekulatömeg-eloszlás tervezése kevert tartályreaktor illetve csőreaktor esetén, Műszaki Kémiai Napok, Veszprém (2003)
- K3** Farkas E., Meszéná Z.: Molekulatömeg-eloszlás tervezése élő polimerizációs reakciónál (poszter), Alkalmazott Informatikai Konferencia , Kaposvár (2003)
- K4** E. Farkas, Z. G. Meszena: Molecular weight distribution design with living polymerisation reactions (poszter), Polymer Reaction Engineering: Modelling, Optimisation and Control Conference, Lyon France (2003)

- K5 Farkas E.,** Meszéna Z.: Méretre szabott molekulatömeg-eloszlás folyamatos kevert tartályreaktorban és csőreaktorban IX. Nemzetközi Vegyészkonferencia, Kolozsvár, Románia (2003)
- K6 Farkas E.,** Meszéna Z.: Polimerizációs reakció modellezése kaszkád rendszerben, Műszaki Kémiai Napok, Veszprém (2004)
- K7 E. Farkas,** Z. G. Meszena: MWD design with tubular and cascade reactors (poszter), 8th International Workshop on Polymer Reaction Engineering, Hamburg Germany (2004)
- K8 Farkas E.,** Meszéna Z.: Polimerizációs reakció modellezése kaszkád rendszerben, II. Alkalmazott Informatikai Konferencia, Kaposvár (2004)
- K9 Farkas E.,** Meszéna Z.: Molekulatömeg-eloszlás számítása csőreaktorban és kaszkád rendszerben (poszter) Műszaki Kémiai Napok, Veszprém (2005)
- K10 E. Farkas,** Z. G. Meszena: Temperature profile calculation in a polymer degradation process, 10th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Budapest Hungary (2005)
- K11 E. Farkas,** Z. G. Meszena: Modelling of transport processes in developing char, 26th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics Bad Honnef Germany (2006)
- K12 Meszena Z.G.,** Johnson A.F., **Farkas E.,** Control of Polymerisation Processes: A dial-a-polymer concept and the practical challenges presented (poszter) 19th Int. Symposium on Chem React Eng, Berlin, Germany (2006)
- K13 Farkas, E.,** Meszéna, Z., G. Tailored molecular weight distribution for anionic homopolymerization – possibilities and barriers of a reactor cascade system , 28th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Meissen, Germany, (2008)
- K14 E. Farkas,** A. Toldy, S Matkó, B. B. Marosfői, G. Marosi, Z. G. Meszena Degradation of neat and flame retarded polymer – comparison of simulation and experimental results (poszter), ProcessNet Jahrestagung, Karlsruhe, Germany (2008)