



Pannon Egyetem



Mérnöki Kari
Tudományos Diákköri Konferencia

2012. április 26.

Konferencia kötet

A kötetet szerkesztette:

Dr. Boda Dezső

Pannon Egyetem

Veszprém

2012

Tartalomjegyzék

A konferencia programja	2
Szekció-zsűrik	3
Biológia szekció	4
Kémia és Vegyipari szekció, 1. tagozat	9
Kémia és Vegyipari szekció, 2. tagozat	17
Műszaki szekció, 1. tagozat	23
Műszaki szekció, 2. tagozat	29

A konferencia programja

Időpont: 2012. április 26.

Helyszín: Veszprém, Pannon Egyetem, B épület

8:30	Regisztráció a szekció-termekben a zsűrik jegyzőkönyv-vezetőinél
9:00-10:00	Szekcióülések (B202-208)
10:00-10:10	Szünet
10:10-11:30	Szekcióülések (B202-B208)
13:00	Eredményhirdetés (B206)
15:00	Tudomány a kocsnában (Felső kampusz - Detox Lounge)

Szekció-zsűrik

Biológia Szekció

Elnök: Dr. Padisák Judit

Tagok: Seress Gábor

Selmeczy Géza Balázs

Kémia és Vegyipar Szekció, 1. tagozat

Elnök: Dr. Horváth Attila

Tagok: Dr. Marton Aurél

Dr. Vastag Sándor

Ható Zoltán

Kémia és Vegyipar Szekció, 2. tagozat

Elnök: Eniszné Dr. Bódog Margit

Tagok: Dr. Varga Tamás

Szentes Adrienn

Tóth László Richárd

Műszaki Szekció, 1. tagozat

Elnök: Dr. Nagy Lajos

Tagok: Dr. Tímár Imre

Dr. Németh Csaba

Medvegy Tibor

Műszaki Szekció, 2. tagozat

Elnök: Dr. Ulbert Zsolt

Tagok: Rippelné Dr. Pethő Dóra

Dr. Fodor Dénes

Rádi György

Biológia szekció

B204 terem

Idő	Szerző(k)	Cím	Témavezető(k)
9:00-9:20	Bárdos Gergő	Az amuri kagyló (<i>Anodonta woodiana</i>) filtrációs kapacitásának vizsgálata a hőmérséklet függvényében	Hubai Katalin Eszter
9:20-9:40	Henn Bernadett	Magyarországi patakok élőbevonatának kovaalga összetétele és a vízfolyások fizikai- és kémiai paraméterei	Dr. Stenger-Kovács Csilla
9:40-10:00	Pálmai Tamás	Az <i>Arthrospira fusiformis</i> és a <i>Picocystis salinarum</i> fotoszintézisének karakterisztikái különböző fényintenzitásokon és hőmérsékleten	Dr. Üveges Viktória
10:00-10:10	Szünet		
10:10-10:30	Szalay Gyula	A Kab-hegyi időszakos kistavak fitoplankton flórájának szezonális vizsgálata	Hubai Katalin Eszter

Amuri kagyló (*Anodonta woodiana*) filtrációs kapacitása, összefüggése az inváziós képességgel

Készítette: Bárdos Gergő

Környezettudományi Intézet, Limnológia Tanszék

Témavezető: Hubai Katalin Eszter

Az amuri kagyló (*Anodonta woodiana* vagy *Sinanodonta woodiana*) valószínűleg a kínai növényevő halak 1962-es telepítéskor került be a magyarországi vizekbe, először 1985-ben írták le. Az állat eredeti géncentrumának a Távol-Keleti nagy folyamokat, az Amurt és a Jangce-t tekintik. Magyarországon invazív fajnak számít és már az egész ország területén megtalálható. Igen gyors növekedésű, nagytestű kagylófaj, akár a 30cm-es hosszúságot is elérheti. Az őshonos kagylófajoknál ellenállóbb és szélesebb ökológiai tűrőképességű faj, így az őshonos fajokra veszélyt jelenthet.

Munkám során az amuri kagyló filtrációs kapacitását vizsgáltam, párhuzamosan egy hazai vizekben megtalálható fajjal, a tavi kagylóval (*Anodonta anatina*). A mérésekhez 3 méretcsoportot alakítottam ki (kicsi 7-9 cm, közepes 10-12 cm, nagy 13-15 cm). A filtráció mérésére ismert koncentrációjú háztartási élesztő (*Saccharomyces cerevisiae*) oldatot használtam, aminek a koncentráció csökkenését kezdetben óránként, majd kétóránként ellenőriztem, reggel 9 és délután 17 óra között, illetve másnap reggel, 24 óra elteltével. A kísérletet 11-13 °C-os, 18-20 °C-os, és 23-25 °C-os vízhőmérsékleten végeztem.

Méréseim során azt tapasztaltam, hogy az amuri kagyló szűrési kapacitása minden hőmérsékleten nagyobb mértékű volt. Mindkét faj esetén legnagyobb filtrációs kapacitást a 23-25 °C-os vízhőmérséklet esetén tapasztaltam, legkisebb szűrési kapacitást a 11-13 °C-os vízhőmérséklet esetén mértem.

Megállapítható, hogy az amuri kagyló elterjedésével együtt járhat az őshonos kagylófajok visszaszorulása, amennyiben azonos niche-ért folyik a verseny. Azonban további kutatásokra van szükség annak megállapítására, hogy milyen ökológiai változásokat okoz a faj elterjedése.

Magyarországi patakok élőbevonatának kovaalga összetétele és a vízfolyások fizikai- és kémiai paraméterei

Szerző: Henn Bernadett
Környezettudományi Intézet, Limnológia Tanszék

Témavezető: Dr. Stenger-Kovács Csilla

Az utóbbi évtizedekben a vízfolyások vízminőségük romlása miatt fokozott figyelmet kaptak, fontossá vált ökológiai állapotuk felmérése és nyomon követése.

Az Európai Unió programja a Víz Keretirányelv (VKI) célja, hogy 2015-re a vízfolyások elérjék a jó ökológiai és kémiai állapotot. Az Európai Unió tagállamai a kisvízfolyások vízminőségének vizsgálatához több élőlénycsoport mellett a kovaalgák ökológiáján alapuló minősítési rendszert részesítik előnyben, mert ez a csoport nagyon jól reagál az antropogén hatásokra, s ez által alkalmas a vízminőség megállapítására.

Kutatásom elsődleges célja a hazai kisvízfolyások kovaalga flórájának és összetételének feltérképezése, valamint a víz fizikai és kémiai paramétereinek felmérése. 34 magyarországi patak kovaalga összetételét, valamint a patakok fizikai- és kémiai paramétereit vizsgáltam. A mintavételekre 2010 augusztusában került sor. A feldolgozott 34 mintában 113 fajt azonosítottam, ezek közül 27 fajt tekintettem dominánsnak, (pl. *Amphora pediculus*, *Achnanthydium minutissimum*, *Cocconeis placentula*, *Navicula cryptotenella*, *Rhoicosphenia abbreviata*, *Gomphonema olivaceum*, *Fragilaria capucina* var. *vaucheriae*, *Navicula gregaria*). Az azonosított fajok kozmopoliták és a mezotróf, eutróf vizekre jellemzők.

A mintavételi helyek fizikai- és kémiai paraméterek mérése által információt kaptam a vízfolyásokat ért terhelésekről.

Az *Arthrospira fusiformis* és a *Picocystis salinarum* fotoszintézisének karakterisztikái különböző fényintenzitásokon és hőmérsékleten

Készítette: Pálmai Tamás

Környezettudományi Intézet, Limnológia Tanszék

Témavezető: Dr. Üveges Viktória

Afrikai trópusi sós tavak esetében megfigyelték, hogy az *Arthrospira fusiformis* fonalas kékalga kezd visszaszorulni egy zöld pikoalga megjelenése és intenzív növekedése miatt. Az *A. fusiformis* a kis flamingók (*Phoenicopterus minor*) egyik fő tápláléka, melyhez a víz szűrése révén jutnak hozzá. A flamingók a piko mérettartományba eső *Picocystis salinarum*-ot nem képesek szűrni, melynek eredményeképp már több tó esetében megfigyelték a flamingók elvándorlását. A két faj fotoszintetikus aktivitását azonos feltételek mellett még nem vizsgálták. Annak megértésére, hogy miként képes a *P. salinarum* rövid idő alatt kiszorítani élőhelyéről egy fonalas kékalgát, így megbontani a táplálékláncot, kísérletek elvégzése szükséges. Munkám során trópusi tóból származó *A. fusiformis* és *P. salinarum* tenyészetek fotoszintetikus aktivitását vizsgáltam laboratóriumi körülmények között. A méréseket 15-45 °C között 7 különböző hőmérsékleten és 9 különböző fényintenzitáson (0-1230 $\mu\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-1}$) végeztem oldott oxigén koncentráció változásának nyomon követésével. A mért adatokból megszerkesztett fotoszintézis-fényintenzitás görbék és fotoszintézis modellek segítségével meghatároztam a fotoszintetikus paramétereket. A biomasszára vonatkoztatott maximális fotoszintézis mértéke (PB_{max}) mindkét faj esetében a hőmérséklet növekedésével nőtt. 45 °C-on az *A. fusiformis* aktivitása a 35 és 40 °C-os aktivitáshoz képest csökkent, de jelentős volt az alacsonyabb hőmérsékletekhez viszonyítva. A *P. salinarum* fotoszintetikus aktivitása 45 °C-on drasztikusan lecsökkent, a fényátlás mértéke jelentősen megnőtt a magasabb fényintenzitás tartományban. Eredményeim azt mutatják, hogy mindkét faj fotoszintézisének a 30-40 °C hőmérséklet tartományban van az optimuma, a fényátlást is figyelembe véve ez az optimum 30-35 °C közé szorul. Jelentős különbség volt a fajok fényadaptációja között. A *P. salinarum* fényadaptációs paramétere nagyon alacsony, így valószínűsíthető, hogy jól tűri más fajok árnyékolását. Az *A. fusiformis* magasabb fényintenzitásokhoz adaptálódott. Eddigi eredményeim alapján látható, hogy sem a hőmérséklethez, sem a fényhez nem alkalmazkodott jobban a *P. salinarum*, ami további változók vizsgálatát teszi szükségessé.

A Kab-hegyi időszakos kistavak fitoplankton flórájának szezonális vizsgálata

*Készítette: Szalay Gyula
Környezettudományi Intézet, Limnológia Tanszék*

Témavezető: Hubai Katalin Eszter

Az időszakos kistavak ökológiai szempontból rendkívül fontos, de sérülékeny élőhelyek. Csak az utóbbi néhány évtizedben kezdtek figyelmet kapni, így meglehetősen kevés ismeretünk van róluk a permanens tavakhoz képest. Magyarországon mintegy 4000 időszakos és állandó kistó található, ezek közül tíz, a Kab-hegyen található időszakos tavat vizsgáltam. Kutatásom célja, az volt, hogy nyomon kövessem a tavak fitoplankton fajösszetételének és biomassza-mennyiségének évszakonkénti alakulását, illetve ezt összevetsem a vízkémiai paraméterekkel. Három mintavétel történt, 2010. november 19-én egy őszi, 2011. április 28-án egy tavaszi, és 2012. január 11-én egy téli (nyáron kiszáradnak a tavak). A lugollal tartósított minták algaflóráját fordított mikroszkóppal határoztam meg, majd Opticount programmal biomasszát számoltam. A vízkémiai méréseket a Limnológia Intézeti Tanszék vízkémiai laboratóriumában végeztem el. Méréseim során rendkívül fajgazdag, eutróf tavakra jellemző flórát kaptam. A hazai kistavak jellemző domináns fajai, mint a *Cryptomonas marssonii*, *Synura uvella*, *Pinnularia viridis*, *Peridinium sp.* mellett Magyarországon ritkán előforduló fajok is megtalálhatóak voltak, például *Quadrigula closteroides*, a *Pteromonas aequiciliata*, és a *Pleurochrysis carterae*. A vizsgált tavakban a tavaszi időszakban $60000 \mu\text{g l}^{-1}$ biomassza értéket mértem. A tavak fitoplankton flórája összetételének vizsgálata során több mint 40 fajt sikerült azonosítanom. Megállapítható, hogy a vizsgált tavak kis méretűk, és időszakos kiszáradásuk ellenére fontos és különleges élőhelyek.

Kémia és Vegyipari szekció

1. tagozat

B206 terem

Idő	Szerző(k)	Cím	Témavezető(k)
9:00-9:20	Bagi Nárcisz Mária	Tiofenol katalitikus oxidációja dioxigénnel	Dr. Speier Gábor
9:20-9:40	Kiss Melitta Patrícia	Vízoldható szamárium(III)-porfirinek képződésének vizsgálata	Dr. Valicsek Zsolt, Dr. Horváth Ottó
9:40-10:00	Kontos János	Többkomponensű rendszerek párolgásának modellezése	Dr. Dallos András, Járvás Gábor
10:00-10:10	Szünet		
10:10-10:30	Kovács Róbert	Szelektív iontranszport számítása póruson keresztül a Nernst-Planck egyenlethez csatolt Lokális Egyensúlyi Monte Carlo szimulációval	Dr. Boda Dezső
10:30-10:50	Matuz Andrea	Flavonol- és kinolin-származékok vaskatalizált dioxigénezési reakciója	Dr. Kaizer József, Dr. Speier Gábor
10:50-11:10	Papp Máté	Kettős karbonilezés hordozóhoz rögzített palládium katalizátorokkal	Skodáné Dr. Földes Rita
11:10-11:30	Tresztenyák Alíz	Biológiailag aktív vegyületek szintézise átmenetifém komplexekkel katalizált hidrogénezéssel	Dr. Bakos József, Balogh Szabolcs, Farkas Gergely

Tiofenol katalitikus oxidációja dioxigénnel

Készítette: Bagi Nárcisz Mária

Kémia Intézet, Szerves Kémia Tanszék

Témavezető: Dr. Speier Gábor

A ma ismert enzimek közel egyharmada tartalmaz fémiont vagy fémionokat, amelyek többféle funkciót is elláthatnak. Amennyiben a fém aktívan részt vesz a katalízisben, ezeket metalloenzimeknek nevezzük. Az oxidoreduktázok (vagyis szerves molekulák redox átalakítását elősegítő enzimek) legtöbbször is metalloenzim, ahol egy redoxaktív fém tölt be kulcsszerepet az elektronátviteli reakcióban. Léteznek azonban olyan képviselőik is, amelyek nem tartalmaznak fémiont, ilyenkor szerves molekularészek (pl. a tirozin fenolos hidroxilcsoportja, a redukált FAD (flavin-adenin-dinukleotid) flavinja) töltik be az elektronátvivő szerepet.

Ezen enzimekkel párhuzamba állíthatók az egyre elterjedtebben alkalmazott szerves katalizátorok, amelyek számos esetben helyettesíthetik a drága és kevésbé környezetbarát fémeket homogénkatalitikus folyamatokban.

Biológiai rendszerekben a tiolokból FAD közreműködésével is képződhet diszulfid-híd. Kutatásunk célja ennek mintájára olyan fémmentes katalitikus rendszer tanulmányozása volt, ahol a FAD szerepét az általunk előállított oxazafoszfol heterociklus tölti be. Katalitikus rendszert dolgoztunk ki tiofenol oxidációjára dioxigénnel, oxazafoszfol jelenlétében, majd a reakciót kinetikai módszerekkel vizsgáltuk és javaslatot tettünk a mechanizmusra.

Vízoldható szamárium(III)-porfirinek képződésének vizsgálata

Készítette: Kiss Melitta Patrícia

Kémia Intézet, Általános és Szervetlen Kémia Tanszék

Témavezetők: Dr. Valicsek Zsolt, Dr. Horváth Ottó

Az oxigént a növények fotoszintézisük során a napfény energiája és az azt megkötő porfirin-komplexek segítségével termelik. A porfirint négy pirrolgyűrű alkotja, melyeket metilidin hidak kötnek össze, így kialakul egy síkban konjugált kötésrendszert tartalmazó váz. Ennek üregébe a négy nitrogénhez fémion koordinálódhat. A természetben leggyakrabban ezek a vas- és a magnéziumion, de meg kell említeni a vanádium- és réziont is.

Külön figyelmet érdemelnek azok a fémionok, melyek nem férnek bele az üregbe, ilyenek például a lantanoidák. Az így kialakuló síkon-kívüli („out-of-plane”, OOP vagy „sitting-atop”, SAT) komplexben megváltozik a szimmetria, átellenes oldalról a porfirin támadhatóvá válik, így létrejöhetnek bonyolultabb szendvicsszerkezetek.

A SAT komplexek katalizátorként is felhasználhatók redoxi reakciókban, mivel fény hatására a ligandumról töltésátvitel valósul meg a fémionra, mely redukálódik, ionsugara megnövekszik, így kiszorulhat a komplexből, és erős redukálószerként viselkedhet. A lantanoida(III)ionok redukált formája két kivétellel (Eu^{2+} és Yb^{2+}) nem stabilis, a vizet is bonthatja.

Munkám során szamárium(III)-porfirinekkel foglalkoztam a komplexek képződésének kinetikai oldaláról megvilágítva a témát. A komplexek kialakulása spektrofotometriásan követhető a látható fény tartományában. A kemény lantanoida(III)ionoknak a N-donor porfirin ligandum koordinációs üregébe történő épülése vizes oldatban lassú és összetett folyamat. Kétféle ionerősség-szabályzó iont használtam, acetátot és kloridot. Előbbi axiálisan a fémionhoz koordinálódva gátolta egy további porfirin megkötődését, így monoporfirin komplex keletkezett. A kloridionnak kezdetben csak szemlélődő szerepet tulajdonítottunk, melynek megfelelően alacsony kloridkoncentrációnál biszporfirin komplex képződött. Azonban nagyobb koncentráció mellett kiderült, hogy hasonló szerepe van, mint az acetátionnak. Ezen kívül tanulmányoztam magának az ionerősségnek és a hőmérsékletnek a hatását is. Megállapítottam, hogy a komplexálódás sebességmeghatározó lépése a fémion és a porfirin asszociációja, melyet a ligandum torzulása kísér. Ehhez jelentősen hozzájárul a fémion akvakomplexének, illetve oligomerformáinak elődisszociációs reakciója is. Ezen bonyolult reakciómechanizusból adódóan eltérés mutatkozott a két ionerősség-szabályzó ion között a különböző oligomerizációfokok miatt.

Többkomponensű rendszerek párolgásának modellezése

*Készítette: Kontos János
Kémia Intézet, Fizikai Kémia Tanszék*

Témavezetők: Dr. Dallos András, Járvás Gábor

A bioetanol napjaink egyik legnagyobb mennyiségben előállított megújítható energiaforrása. Az EU 2009/28/EK irányelv 2020-ig 10 % bio-komponens bekeverését írja elő az üzemanyagokban a tagállamok számára. Ennek következtében az etanol-benzin üzemanyagkeverékek vizsgálata rendkívüli jelentőséggel bír.

A motorbenzin és etanol keverék fizikai-kémiai szempontból változó összetételű reális többkomponensű elegy, amely modellezésével és párolgási jellemzőinek előreszámításával az idő- és költségigényes kísérleti munka mennyisége csökkenthető. Munkám célja egy olyan folyadék-csepp párolgásra vonatkozó modell létrehozása volt, amely többkomponensű, reális rendszerek esetén is megbízhatóan alkalmazható, és nem tartalmaz az adott elegyre jellemző illesztendő paramétereket.

A kifejlesztett párolgási modell kvázi-egyensúlyi lépéseken keresztül képes a párolgó csepp fizikai-kémiai paramétereinek időbeli változásainak számításaira. Az intermolekuláris kölcsönhatások modellezésére és a folyadékfázis reális viselkedésének leírására a COSMO-RS elméletre épülő COSMOtherm kvantumkémiai programot használtam. A molekulák gázfázisbeli transzportjának szimulációjához a Maxwell-Stefan féle diffúziós és konvekciós elméletet alkalmaztam. A párolgási tömeg fluxus számításához szükséges parciális differenciálegyenletek megoldására, illetve a környezet felől a cseppbe vezetéssel közölt hő mennyiségének meghatározásához a COMSOL Multiphysics programcsomagot alkalmaztam, mely a végelemek módszerén alapul. A számítások elvégzéséhez és a különböző szoftverplatformok közötti kapcsolat kialakításához saját fejlesztésű Matlab keretprogramot készítettem.

A létrehozott csepp-párolgási modellt kísérleti adatok felhasználásával validáltam. Az érvényesítés során megállapítottam, hogy a modell alkalmas többkomponensű folyadék-elegyek cseppjei párolgásának becslésére annak ellenére, hogy a szimulációkba bevont rendszerek igen változatos összetételűek voltak. A validált modell segítségével különböző összetételű (0-100 m/m%) benzin és bioetanol elegyét tartalmazó cseppek párolgását szimuláltam. A számítások során kapott eredmények összhangban voltak a kísérleti tapasztalatokkal.

Szelektív iontranszport számítása póruson keresztül a Nernst-Planck egyenlethez csatolt Lokális Egyensúlyi Monte Carlo szimulációval

*Készítette: Kovács Róbert
Kémia Intézet, Fizikai Kémia Tanszék*

Témavezető: Dr. Boda Dezső

A dolgozat célja ionok póruson keresztüli transzportjának tanulmányozása egy molekuláris modell alapján. Az általunk megfigyelt rendszer egy biológiai példa: egy modell-kalciumcsatorna szelektivitását vizsgáljuk. Kiszámítjuk, hogy különböző összetételű NaCl-CaCl₂ elegyből hány darab Na⁺ illetve Ca²⁺ ion halad át a csatornán. Feltesszük, hogy a transzport diffúzió és hogy azt a Nernst-Planck egyenlet (NP) írja le. A feladat megoldásához szükségünk van a koncentráció és az elektrokémiai potenciál között egy összefüggésre, amit jelen esetben a Lokális Egyensúlyi Monte Carlo (LEMC) szolgáltat számunkra (NP+LEMC módszer).

Az NP+LEMC rendszerben iteratív módon kapjuk a megoldást, ahol az iteráció alapját az képezi, hogy a kontinuitási egyenletnek (az anyagmegmaradásnak) teljesülnie kell. Eredményeink rávilágítanak arra, hogy a kalciumcsatorna szelektivitása (a Ca²⁺ és Na⁺ ionok fluxusaránya) egyszerre függ attól, hogy a különböző ionok milyen valószínűséggel adszorbeálódnak a pórusba, illetve hogy melyik mennyire mozgékony a csatornában. Megvizsgáljuk a kialakított geometriai rendszer paramétereinek változtatásának hatását a kialakuló koncentráció és kémiai potenciál profilokra.

Az irodalomban megtalálható, pórusra vonatkozó Dinamikai Monte Carlo adatokat felhasználva eredményeinket ellenőrizzük és összehasonlítjuk.

Flavonol- és kinolin-származékok vaskatalizált dioxigénezési reakciója

Készítette: Matuz Andrea

Kémia Intézet, Szerves Kémia Tanszék

Témavezetők: Dr. Kaizer József, Dr. Speier Gábor

Az egymagvú $\text{Fe}^{\text{III}}(\text{O-bs})(\text{salen})$ ($\text{salenH}_2 = 1,6\text{-bis}(2\text{-hidroxifenil})\text{-}2,5\text{-diazahexa-}1,5\text{-dién}$; $\text{O-bsH} = \text{O-benzoilszalicilsav}$) komplex előállítása szintetikus enzim-depside modellként történt, jellemzőit spektroszkópiai módszerekkel (IR, UV-VIS) és röntgen krisztallográfiával adtuk meg, összetételét elemanalízissel igazoltuk. A flavonol (flaH) és a 3-hidroxi-4-kinolin (kinH_2) származékok dioxigénezési reakciója a fent említett komplex felhasználásával történt, amelyet katalizátorként alkalmaztunk a heterociklikus gyűrű oxidatív bomlási folyamatában. A reakció termékeként a megfelelő *O*-benzoilszalicilsav és antranilsav származékot, valamint szénmonoxidot kaptunk. A részletes reakciókinetikai mérések eredményeként kapott mechanizmus alapján a vastartalmú flavonol és a kofaktor-függő 3-hidroxi-4(1H)-kinolin 2,4-dioxigenáz enzim funkcionális modelljeihez jutottunk.

Kettős karbonilezés hordozóhoz rögzített palládium katalizátorokkal

Készítette: Papp Máté

Kémia Intézet, Szerves Kémia Tanszék

Témavezető: Skodáné Dr. Földes Rita

Az elmúlt években sok cikk jelent meg a hordozóhoz rögzített ionfolyadék katalizátorokkal kapcsolatban, de aminokarbonilezési reakciókat még nem vizsgáltak ilyen körülmények között. A Szerves Kémia Intézeti Tanszéken korábban végeztek aminokarbonilezési reakciókat ionfolyadékokban, azonban a termékek elválasztása és a katalizátor recirkulációja könnyebben megvalósítható, ha az ionfolyadékot szilárd hordozóhoz rögzítjük, és erre visszük fel a katalizátort. Munkám során tehát célul tűztem ki ilyen katalizátorok előállítását és tesztelését aminokarbonilezési reakciókban.

A katalizátorok rögzítése során kétféle ionfolyadékot alkalmaztam. Pd(0)- és Pd(II)-vegyületeket is használtam kiindulási anyagként, katalizátorokat készítettem további ligandumok hozzáadása nélkül és foszfán ligandumokkal is.

Az előállított katalizátorokkal jódbenzol és morfolin reakciójában, DMF oldószerben, CO-nyomás alatt, bázis jelenlétében jó hozammal és nagy szelektivitással nyertem kettős karbonilezett terméket. Megállapítottam, hogy a katalizátor 4-5-ször recirkuláltatható aktivitás csökkenés nélkül. Vizsgáltam továbbá a reakció hőmérséklet- és nyomás-függését. A reakciót többféle aminnal elvégeztem, és megállapítottam az amin szerkezetének a reakció szelektivitására gyakorolt hatását.

A hozamok megállapítása és a termékek szerkezetének tisztázása GC, illetve GC-MS alapján történt.

Biológiailag aktív vegyületek szintézise átmenetifém komplexekkel katalizált hidrogénezéssel

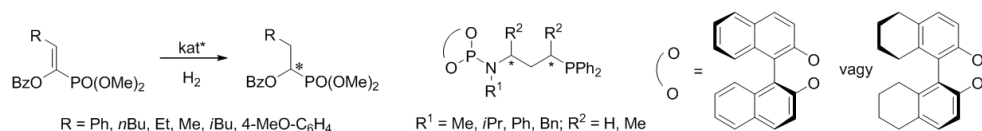
Készítette: Tresztenyák Alíz

Kémia Intézet, Szerves Kémia Tanszék

Témavezetők: Dr. Bakos József, Balogh Szabolcs, Farkas Gergely

Az aszimmetrikus hidrogénezés az egyik legkényelmesebb módszer optikailag tiszta vegyületek előállítására. Az eljárás kiválóan alkalmas ipari méretű szintézisekhez, hiszen rendkívül kis mennyiségű királis katalizátort használ, továbbá melléktermék a reakció során egyáltalán nem, vagy csak kis mennyiségben keletkezik. Ily módon nagy atomhasznosítás érhető el, elegendő téve a zöld kémia egyik, talán legfontosabb alapelveinek. A területen elért forradalmian új eredmények teljes egészében megváltoztatták a szintetikus szerves kémia módszereit. Ezek után érthető, miért van olyan nagy jelentősége az ideális hidrogénező katalizátorok előállítására irányuló kutatásoknak és miért fontos ezen új vegyületek katalitikus tulajdonságainak megismerése, működési körülményeik optimalizálása.

Munkám során a laboratóriumunkban korábban előállított királis hibrid foszfán-foszforamidit típusú ligandumokat (P-NP)¹ teszteltem α , β -telítetlen-enolészter-foszfónátok enantioszelektív hidrogénezési reakciójában. E szubsztrátumok biológiailag aktív vegyületek (pl. fenilalanin-, tirozin-, L-DOPA-származékok stb.) szintézisének kulcsfontosságú intermedierjei².



A katalitikus reakciók során különböző szerkezetű ligandumoknak a reakció optikai hozamára és aktivitására gyakorolt hatását tanulmányoztam és ezen keresztül vizsgáltam a katalizátorok szerkezete és katalitikus tulajdonságai közötti összefüggést. Eredményeimet összehasonlítottam az irodalomban található, hasonló szerkezetű foszfán-foszforamidit típusú ligandumokkal elért eredményekkel.

¹ Sz. Balogh, G. Farkas, J. Madarász, Á. Szöllősy, J. Kovács, F. Darvas, L. Üрге, J. Bakos, *Green Chemistry* **2012**, DOI:10.1039/C2GC16447G.

² B. Lejczak, P. Kafarski, E. Makowiecka, *Biochem. J.* **1987**, 242, 81-88.

Kémia és Vegyipar szekció

2. tagozat

B208 terem

Idő	Szerző(k)	Cím	Témavezető(k)
9:00-9:20	László Gergely	Extrakciós kísérletek algaminták lipidtartalmának kinyerésére összetett szolvensek alkalmazásával (összehasonlítás)	Bocsi Róbert, Hodai Zoltán, Dr. Horváth Géza
9:20-9:40	Ludányi András	Hulladék zsiradékok motorhajtóanyag célú hidrogénezése	Dr. Hancsók Jenő, Baladincz Péter
9:40-10:00	Szabó Tamás	Lipidtermelésre szaporított mikroalga szuszpenziók sűrítése membránszeparációs eljárásokkal	Dr. Horváth Géza, Dr. Hanák László, Bocsi Róbert, Hodai Zoltán
10:00-10:10	Szünet		
10:10-10:30	Szluka Nikoletta	Biológiailag lebomló töltőanyagot tartalmazó PP kompozitok előállítása és mechanikai tulajdonságainak vizsgálata	Dr. Varga Csilla
10:30-10:50	Szilágyi Botond	A hidroxipatit csapadékos kristályosítással való előállításának matematikai modellezése	Dr. Lakatos Béla

Extrakciós kísérletek algaminták lipidtartalmának kinyerésére összetett szolvensek alkalmazásával (összehasonlítás)

Készítette: László Gergely

Vegyésmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Vegyipari Műveleti Tanszék

Témavezetők: Bocsi Róbert, Hodai Zoltán, Dr. Horváth Géza

Az emberiség növekvő energiaéhségének kielégítésére a ma feladata alternatív technológiák kidolgozása.

A Pannon Egyetem Mérnöki Karának Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszékén kutatócsoportunk a mikroalgák termesztésének, feldolgozásának, és e növények lipidtartalmának különböző szolvensekkel való kinyerésének optimalizálását tűzte ki célul.

Munkánk során vizsgáljuk az egyes fajok növekedési-, lipidtermelési képességét természetes és mesterséges fényben, különböző tápoldatokban. Ezáltal kiválaszthatjuk az éghajlaton leggazdaságosabban termesztendő, legigénytelenebb és legnagyobb lipidhozammal rendelkező fajokat biodízel keverőkomponensek, illetve egyéb értékes anyagok kivonásához.

ITDK dolgozatom a széles körben folyó munkából is főként az extrakciós kísérletekre fókuszál. A teljes technológia áttekintése után az egyszerű- és összetett szolvensek összehasonlítása mellett szó esik az egyszerű oldószeres kivonás, a Soxhlet-extrakciós műveletek és a szuperkritikus extrakció lehetőségeiről is.

Hulladék zsiradékok motorhajtóanyag célú hidrogénezése

Készítette: Ludányi András

Vegyésmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet

MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék

Témavezetők: Dr. Hancsók Jenő, Baladincz Péter

Napjainkban a mobilitás biztosítása az egyik legfontosabb célunk, hiszen ez gazdaságaink mozgatórugója. A XX. században ezt a célt alapvetően fosszilis eredetű motorhajtóanyagok előállításával és alkalmazásával érték el, amire a nagy kereslet erősen csökkenő nyersanyagkínálattal válaszolt. Ezért a fejlett és fejlődő államokban egyaránt kutatásokat végeznek, hogy csökkentsék a kőolajtól mint nyersanyagtól való függőségüket. A legújabb környezetvédelmi direktívák által szabályozott szabványok figyelembevételével mellett az alternatív motorhajtóanyagok kifejlesztése és alkalmazása az egyik megoldás a hagyományos motorhajtóanyagok egy részének kiváltására. Az ehhez tartozó kutatások esetén mindig meg kell vizsgálni a gazdaságosságot és a nyersanyag megfelelő rendelkezésre állását.

Az alternatív motorhajtóanyagok közé tartoznak a hulladék növényi olajokból (pl. használt sütőolajból), illetve állati eredetű zsiradékokból (pl. vágóhídi hulladék zsiradékból) előállítható bio-motorhajtóanyagok is. Ezen alapanyagok heterogénkatalitikus hidrogénezésével és oxigéneltávolításával előállított normál- és izoparaffinok elegyét biogázolajnak nevezzük. A triglicerid-tartalmú hulladékokból előállított kiváló minőségű, második generációs biomotorhajtóanyag jelentős nyereséget jelenthet és fontos jövedéki adó forrás az állami költségvetés számára is. Ráadásul a biogázolaj számos pozitív tulajdonsággal rendelkezik a jelenleg elterjedt biodízzellel (növényolaj-zsír-sav-metilészterrel) szemben.

Kísérleti munkám során alternatív komponenst (biogázolajat) tartalmazó gázolajok előállítási lehetőségét vizsgáltam. Ennek során tanulmányoztam gázolajpárlat és hulladék zsiradék elegyek katalitikus hidrogénezését, illetve annak összefüggéseit. A rendelkezésemre bocsátott katalizátor alkalmazása mellett, a műveleti paraméterek (hőmérséklet: 300-380 °C, nyomás: 40-80 bar, folyadékterhelés: 1,0 h⁻¹, hidrogén/alapanyag arány: 600 Nm³/m³) termékhozamra és termékminőségre gyakorolt hatását vizsgáltam. A kapott eredmények alapján meghatároztam a kedvező technológiai paramétereket.

Lipidtermelésre szaporított mikroalga szuszpenziók sűrítése membránszeparációs eljárásokkal

Készítette: Szabó Tamás

Vegyésmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Vegyipari Műveleti Tanszék

Témavezetők: Dr. Horváth Géza, Dr. Hanák László, Bocsi Róbert, Hodai Zoltán

Napjaink energiapolitikájának része, a biológiai eredetű energiaforrások előállítása és felhasználása, a környezetvédelmi előírások szigorodása miatt. A hajtóanyaggyártásban kiemelt szereppel bír a természetes eredetű lipidek átalakítása biodízellé vagy dízel keverőkomponensekké. Ezek a vegyületek nem csak hagyományos mezőgazdasági termékek, hanem mikroalgák termesztésével és feldolgozásával is előállíthatók.

A Pannon Egyetem Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszékén algatechnológiai kutatások folynak, melyek fő céljai a mikroalga-kultúrák lehetséges sűrítési módszereinek összehasonlítása, illetve energetikai hasznosítási lehetőségeinek vizsgálata.

A dolgozatban bemutatom a teljes algatechnológia általános lépéseit, áttekintem az alkalmazható sűrítési technikákat, majd az általam használt membránszeparációs módszert. A méréseket a Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszéken rendelkezésre álló, PLC vezérléssel ellátott ultraszűrő berendezéssel végeztem. Munkám során különböző minőségű és sűrűségű algaszuszpenziókat dolgoztam fel. Értékeltem a mért hatásfok-, illetve teljesítmény jellegű adatokat, és a membrán fő paramétereinek változásait különböző körülmények között. Vizsgáltam a különböző áramok hasznosítási lehetőségeit.

Biológiailag lebomló töltőanyagot tartalmazó PP kompozitok előállítása és mechanikai tulajdonságainak vizsgálata

Készítette: Szluka Nikoletta

*Vegyéssz mérnöki és Folyamatmérnöki Intézet
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Tanszék*

Témavezető: Dr. Varga Csilla

A biológiailag lebomló műanyagok és kompozitok igen intenzív kutatási területet jelentenek napjainkban, mert a hulladékok mennyiségének csökkentése fontos kérdéssé vált az elmúlt években. Egyik megoldás a biológiailag lebomló termékek előállítása, amelyek hasznos életük végén részben vagy teljes egészében környezetre ártalmatlan komponensekké alakulnak vagy alakíthatók. Felhasználási területük széles, elsősorban olyan termékek készülnek biológiailag lebomló kompozitokból, amelyekkel szemben nem kell magas mechanikai követelményeket támasztani.

Kísérleti munkám során polipropilénben biológiailag lebomló töltőanyagokat alkalmaztam. A tanszéki előkísérletek során megállapított feldolgozási és mechanikai tulajdonságok szempontjából előnyös koncentráció tartományon belül változtattam a biológiailag lebomló komponensek arányát, majd a mechanikai tulajdonságok és a minták homogenitásának változását vizsgáltam.

A hidroxapatit csapadékos kristályosítással való előállításának matematikai modellezése

Készítette: Szilágyi Botond

Vegyéssz mérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Folyamatmérnöki Tanszék

Témavezető: Dr. Lakatos Béla

A hidroxapatit egy szervesetlen bioanyag, amely felhasználási területe a kristályszerkezetétől függően széles skálán mozog. Kiemelt szerepe van a nano méretű hidroxapatitnak. Alapvető fontosságú tehát olyan előállítási módszerek kidolgozása, amely lehetővé teszi jól meghatározott szerkezetű hidroxapatit előállítását. Előállításra több lehetőség van, köztük az egyik leggazdaságosabb a csapadékos kristályosítással történő előállítás $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$ és $(\text{NH}_4)_2\text{HPO}_4$ reakciójával. Az ipari szintű gyártáshoz elengedhetetlen a folyamat matematikai modelljének ismerete, mint az optimális gyártási paraméterek felderítéséhez, mint a kristályosító vezérléséhez. A hidroxapatit csapadékos kristályosításának matematikai modellezése kevesek által kutatott téma, amit a kevés rendelkezésre álló irodalmi adat bizonyít. A kristályosítás populáció mérleg egyenletekkel modellezhető (amihez hozzáadódnak a megfelelő mérleg egyenletek, mint az anyagmérleg). Ezen populáció mérlegek megoldása momentum egyenletekké alakítással történt, ami egy egyszerűsített alak, viszont a mérnöki gyakorlatban sok esetben elégséges az így nyerhető információ mennyisége. A momentumokból kiszámítható a fajlagos felület, az átlagos részecskeátmérő és következtetni lehet a részecskeméret eloszlásra is.

Műszaki szekció

1. tagozat

B202 terem

Idő	Szerző(k)	Cím	Témavezető(k)
9:00-9:20	Hanák Barbara	Reflexiós spektrumok főkomponens-analízise és világítástechnikai alkalmazása	Dr. Kránicz Balázs
9:20-9:40	Katona Róbert	Számítógéppel vezérelt mozgóágyas elválasztás (SMB) tervezése	Dr. Hanák László
9:40-10:00	Nagy Klaudia	Bicikli Menetdinamikán Alapuló Blokklásgátló Szabályozó Fejlesztése	Dr. Fodor Dénes
10:00-10:10	Szünet		
10:10-10:30	Németh József	A DENSO Kft. jelenlegi fém-felületkezelő - feketítő - műveletsora vízfelhasználás, szennyvízterhelés csökkentési lehetőségének vizsgálata	Dr. Kárpáti Árpád, Gärtner Szilvia
10:30-10:50	Szabó Attila, Varga Márton	CVT (fokozatmentes sebességváltó) szerkezeti és nyomatékátviteli vizsgálata, az elektrohidraulikus vezérlés szimulációs és fizikai kivitelezésével	Dr. Horváth Pál

Reflexiós spektrumok főkomponens-analízise és világítástechnikai alkalmazása

*Készítette: Hanák Barbara
Fizika és Mechatronika Intézet*

Témavezető: Dr. Kránicz Balázs

A dolgozat témája olyan matematikai módszer bemutatása, amellyel olyan elméleti LED-es fényforrást hozunk létre, amely gyakorlatilag megegyező színvisszaadást biztosít a napjainkban használatos fényforrásokkal. Kitérünk az izzólámpa forgalomból való kivonásának okaira, majd bemutatjuk a helyettesítő fényforrásokat. A színminták tulajdonságaira vonatkozó mennyiségek és összefüggések ismertetése után egy konkrét példán keresztül bemutatjuk az alkalmazott matematikai módszert: a főkomponens-analízist.

A szakirodalmi összefoglalót követően reflexiós minták analízisének eredményeit dolgozzuk fel. Két módszert mutatunk be arra vonatkozóan, hogy hogyan állítható elő olyan LED-es fényforrás, amellyel helyettesíthetjük az elméleti CIE A és D65 megvilágítókat. A két módszer között az a különbség, hogy míg az egyik esetben az összes mintát felhasználjuk a LED-keverék súlyainak kiszámításához, a másik esetben csak a főkomponens-analízis nyomán kapott absztrakt vektorokat használjuk fel.

Tapasztalataink alapján az absztrakt vektorokkal kiszámított LED-súlyozásokat alkalmazva a színes mintáknak a fényforrás alatti megjelenése csak kis mértékben változik, tehát a két fényforrás ebből a szempontból gyakorlatilag azonosnak mondható.

Számítógéppel vezérelt mozgóágyas elválasztás (SMB) tervezése

Készítette: Katona Róbert

Vegyéssz mérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Vegyipari Műveleti Tanszék

Témavezető: Dr. Hanák László

Napjainkban a gyógyszeriparnak új kihívásokkal kell szembenéznie a gyógyszer hatóanyagok kutatása, fejlesztése és gyártása területén. Mind a piaci versenyben, mind a szigorodó minőségi előírásoknak meg kell felelniük a gyógyszergyártó cégeknek. Fontos hogy a készítmények piacra kerülési ideje a lehető legrövidebb legyen és a hatóanyagok a lehető legnagyobb tisztaságúak legyenek. Ebből következik, hogy nagyon fontos az iparnak hogy milyen technológiát alkalmaznak. Manapság már elkerülhetetlen és gazdaságtalan egy olyan technológia alkalmazása, amelyben egy folyamat működtetése, adatgyűjtése, elemzése ne számítógéppel vagy valamilyen folyamatirányító berendezéssel történjen.

A TDK dolgozatomban az oszlopos kromatográfiás elválasztási módszerek rövid elméleti áttekintését követően a szimulált mozgóágyas módszert ismertetem. A munka folytatásaként annak egy laboratóriumi méretű négyoszlopos SMB berendezést terveztem speciális Valco HPLC csapokkal. Elkészítettem a berendezést egy lehetséges számítógépes vezérlését. Ezt követően az SMB technikák legkorszerűbb változatára (MCSGP - *Multicolumn Countercurrent Solvent Gradient Purification*) készítettem egy kapcsolási sémát. Ehhez is meg felelő Valco HPLC csapokat választottam katalógusból. A munkám során elsősorban a működési, kapcsolás technikai és kivitelezési lehetőségekkel foglalkoztam, a kromatográfiás eljárás vegyészmérnöki (belső folyamatok) vizsgálatára nem tértem ki a dolgozatomban.

Bicikli menetdinamikán alapuló blokkolásgátló szabályozó fejlesztése

Készítette: Nagy Klaudia

Gépészmérnöki Intézet, Alkalmazott Gépészet Tanszék

Témavezető: Dr. Fodor Dénes

Napjainkban a növekvő kényelmi és biztonsági követelményeket kielégítendő menetstabilizáló rendszerek egyre fejlettebbé és elterjedtebbé válnak. Ezen rendszerek a legtöbb motorral szerelt gépjármű esetén már elérhetőek, ugyanakkor biciklik esetén még csak kezdetleges és kevés, többnyire mechanikus elven működő próbálkozás volt kifejlesztve. Ugyanakkor ezen járművek esetén is fontos lehet ilyen rendszerek alkalmazása, hogy megelőzhetőek legyenek az átfordulásos illetve kicsúszásos balesetek.

A dolgozat célja egy a hidraulikus fékrendszerrel felszerelt biciklik esetén alkalmazható menetdinamikán alapuló ABS (blokkolásgátló rendszer) vezérlőalgorithmus kifejlesztése, mely képes külön-külön illetve összehangolva is szabályozni a kerekekhez tartozó féknyomást, valamint a kerekek csúszását. Ezen cél érdekében elkészült egy motorbicikliknél alkalmazott ABS aktuátor részén alapuló prototípus, illetve komplett teszt környezet, mely magába foglalja a bicikli hidraulikus rendszerének módosítását, a szükséges szenzorok felszerelését, illetve a vezeték nélküli és CAN hálózaton alapuló kommunikációs rendszer kiépítését.

Tanulmányozásra került a kerékpárok menetdinamikai jellemzőit vizsgáló nemzetközi szakirodalom, mely alapján felállítódott egy olyan matematikai modell, mely képes megfelelően leírni a kerékpár mozgását és kinyerhetőek belőle mindazon fizikai paraméterek, amelyek szükségesek egy kerékpár ABS vezérlőalgorithmus kidolgozásához. A tapasztalati és fizikai paraméterek alapján MATLAB/Simulink illetve LabVIEW környezetben létre lett hozva egy vezérlőalgorithmus, mely a szelepp állapotok közvetlen szabályozásával képes megakadályozni a kerekek megcsúszását.

A vezérlőalgorithmus valódi, tesztpályán végrehajtott többféle manőver során kipróbálásra került, melynek folyamán bebizonyosodott, hogy a prototípuson futó algorithmus működőképes, és a szerzett tapasztalatok alapján megtörtént a paraméterek finomhangolása, és új fejlesztési célok is kitűzésre kerültek.

A DENSO Kft. jelenlegi fém-felületkezelő – feketítő – műveletsora vízfelhasználás, szennyvízterhelés csökkentési lehetőségének vizsgálata

Készítette: Németh József

Környezetmérnöki Intézet, Környezetmérnöki Tanszék

Témavezetők: Dr. Kárpári Árpád, Gärtner Szilvia

A munka célja, hogy egy autóiipari beszállító speciális technológiájának vízgazdálkodását megvizsgálja, a keletkező szennyvizet a jelenlegi víztartalomnál koncentráltabb állapotba hozza. Továbbá a tisztított vizet a technológiák valamelyikében újrahasznosítsa. Ezáltal jelentős költségcsökkentés lehetőségére tegeyen javaslatot.

Az ipari szennyvízkezelés jelentős költséggel és veszéllyel jár. Az említett speciális technológia (a feketítés folyamata) által kibocsátott szennyvízbe jelentős mennyiségű olyan víz is kerül, amely igen kis koncentrációban tartalmaz alkáli detergenseket. Környezetvédelmi és technológiai szempontból is előnyös, ha az ártalmatlanításra kerülő szennyvízbe nem vezetjük bele az olyan elhasznált öblítő- és mosófolyadékokat, amelyek kis ráfordítással, egyszerűbben is megtisztíthatóak és újra felhasználhatóak. Az így visszanyert víz újabb öblítő-, vagy mosófolyadékok készítésére is felhasználható, csökkentve ezzel a vállalat vízfelhasználási költségeit.

A dolgozatban ismertetem a gyártó szervezetet, valamint a korrózióvédelmi eljárását. Részletesen bemutatom a feketítő folyadék, valamint az elfolyó szennyvíz összetételét. Javaslatot teszek a keletkező szennyvíz lehetséges hasznosítási módszereire. Jellemzem a különböző módszereket a megtérülési idő, valamint a vízfogyasztás és a termelés fajlagos mutatóival.

CVT (fokozatmentes sebességváltó) szerkezeti és nyomatékátviteli vizsgálata, az elektrohidraulikus vezérlés szimulációs és fizikai kivitelezésével

*Készítette: Szabó Attila, Varga Márton
Gépészmérnöki Intézet, Géptan Tanszék*

Témavezető: Dr. Horváth Pál

A gépjárműipar történetében elengedhetetlenül fontos a motor nyomatékának átvitele a kerekekre, melyben kiemelkedő fontosságú szerepet játszanak a sebességváltók sokrétű családjai.

A tudományos munkánk keretein belül a GM által gyártott CVT-t, - ismertebb nevén fokozatmentes sebességváltót – vizsgáltuk. Első lépésként megismertük a sebességváltó mechanizmusát, annak elektrohidraulikus vezérlési- és fogaskerék áttétel szegmenseit. Második lépésben szükséges volt egy megfelelő anyagminőségű és szerkezetű vázra, melyre rögzíthető a sebességváltó test, eleget téve vizsgálati és kísérleti szempontoknak. Harmadik lépésben elkészítettük a sebességváltó elektromos vezérlőegységét, mely feladat során a Transmission Control Module-t helyettesítettük, a PIC18F2550-es mikrokontrolleres kapcsolással. Végrehajtottuk a vezérlőegység működésének ellenőrzését Proteus nevű programban, majd megvizsgáltuk a helyes jelalakokat.

A vezérlőegység (TCM) pótlása után, - mely sem fizikai, sem részletes írásos formában nem állt rendelkezésünkre - összeállítottuk a komplett vizsgálati egységünket, mely a következőt jelenti:

- Egy 2kW-os motor rögzítettünk a fent említett állványzatra, amit a vizsgálandó sebességváltóval ékszíjhajtással kapcsolunk össze.
- Kialakítottuk a nyomaték széles spektrumú vizsgálatának második előfeltételét, mikor a féltengely kivezetésre kapcsolunk egy gépjárművekben alkalmazott Valeo típusú 12V-os generátort, annak tengelyénél fogva.
- Kapcsolási lehetőséget alakítottunk ki a változtatható terheléses vizsgálatra egy megközelítőleg 800W ellenálláshuzal-, és 4 db egyesével kapcsolható, egyenként 55W-os gépjármű izzó terhelésekkel.

Mindezen összeállítás után elkezdjük a kiértékelést, mely a be- és kimeneti, áram- és feszültségvizsgálata volt, változtatható terhelések mellett, amit Microsoft Excel táblázatban összesítettünk. Matlab programban megközelítést végeztünk a nyomatékátvitelre a motor és a sebességváltó bemeneti tengelye között. Lehetséges továbbfejlesztési módok elméleti kidolgozását elkezdjük.

Műszaki szekció

2. tagozat

B203 terem

Idő	Szerző(k)	Cím	Témavezető(k)
9:00-9:20	Bartos Anikó, Cseresnyés Adrienn	Új hasonlóság mérték alapú megoldások gyakori elemhalmazok feltárására, elemzésére és vizuális megjelenítésére	Dr. Abonyi János
9:20-9:40	Fábián Balázs	Hidrogén szelektív membrán-reaktorok matematikai modellezése	Dr. Varga Tamás
9:40-10:00	Farsang Barbara	Csörgedező ágyas reaktor vizsgálata technológiai szimulátor és mérleghiba-kiegyenlítési technika alkalmazásával	Dr. Abonyi János, Dr. Németh Sándor
10:00-10:10	Szünet		
10:10-10:30	Ruppert Tamás	Logisztikai folyamatok tervezését támogató szimulációs keretrendszer fejlesztése	Dr. Abonyi János
10:30-10:50	Molnár Bálint	Heterokatalitikus reaktorok áramlástan modell alapú szimulációs vizsgálata	Dr. Varga Tamás, Egedy Attila

Új hasonlóság mérték alapú megoldások gyakori elemhalmazok feltárására, elemzésére és vizuális megjelenítésére

*Készítette: Bartos Anikó, Cseresnyés Adrienn
Vegyésszmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Folyamatmérnöki Tanszék*

Témavezető: Dr. Abonyi János

A mérnöki gyakorlatban egyre gyakrabban alkalmazott adatbányászati technikák célja a technológiák üzemeltetése és a termékfejlesztés során keletkező adatokból potenciálisan hasznos, előzetesen nem ismert információk feltárása. A kutatás során olyan jellegű információ feltárását céloztuk meg, amely segítségével a lehető legtágabb értelemben vett eseménysorozatok és az ezekhez kapcsolódó komplex folyamatok hatékonyan jellemezhetőek.

A vásárlói kosár elemzés teljesen újszerű továbbfejlesztéseként nem csupán termékek és a fogyasztók szimultán elemzését tűztük ki célul, hanem az adatbányászat eredményének értelmezését megkönnyítendő a generált gyakori elemhalmazok szemléletes ábrázolását is. A javasolt megoldás elvi háttéréként alkalmazott gyakori elemhalmazok feltárására az irodalomban számos jól alkalmazható célirányos algoritmus található, melyek közül az Apriori az egyik legismertebb és legszélesebb körben alkalmazott. Tudományos munkánk során ennek a könnyen értelmezhető és implementálható algoritmusnak a továbbfejlesztésére tettünk kísérletet.

A gyakori elem párok kinyerésére az elemek leszámlálása helyett egy kevésbé ismert Bittable reprezentációt segítségül hívva alapvető mátrix és vektorműveletekre támaszkodó algoritmus készíthető. A TDK dolgozatunk egyik fontos eredménye ennek a Bittable algoritmusnak a továbbfejlesztése. Felismertük, hogy megfelelő mátrix műveletekkel becslést adhatunk a tranzakciók információ tartalmára, mely alapján az algoritmus keresési tere jelentősen csökkenthető, azaz a gyakori elemhalmaz keresés hatékonysága növelhető.

A Bittable, azaz a vásárlói tranzakciókat tartalmazó mátrix megjelenítésére a Visual Assessment of (Cluster) Tendency algoritmus átértelmezésén alapuló megoldásra tettünk javaslatot a feltárt zárt elemhalmazokon számított Tanimoto hasonlóság mérték felhasználásával. A generált megoldások a manapság aktívan kutatott biclustering eszközök fejlesztésének irányába mutatnak. Munkánk eredményeként tehát új algoritmusokat dolgoztunk ki a gyakori elemhalmazok feltárására és vizualizációjára, mely algoritmusokat MATLAB fejlesztői környezetben implementáltuk, és benchmarking és folyamatmérnöki problémákon generált eredmények értékelésével teszteltük.

Hidrogén szelektív membrán-reaktorok matematikai modellezése

Készítette: Fábán Balázs

Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Folyamatmérnöki Tanszék

Témavezető: Dr. Varga Tamás

A membrán-reaktorokat tipikusan kémiai egyensúly-gátolt reakciók lejátszatásához használjuk, oly módon eltolva az egyensúlyt, hogy a termék oldalon lévő valamely komponenst elvonjuk a reagens-elegyből. Amennyiben a termékoldalon hidrogén keletkezik, ez nagy hatékonysággal, és szelektivitással megoldható. Mindemellett a membrán segítségével nagy tisztaságú hidrogént nyerünk, melyet reagensként felhasználhatunk úgy, hogy a főreakciónk mellé egy társreakciót csatolunk. Amennyiben ezt a két reakciót a membrán két oldalán egyidejűleg játszadjuk le, célszerűen az endoterm dehidrogénezési reakciónk mellé valamilyen exoterm hidrogénező eljárást választunk, így egy autoterm reaktort kapva, a membrán hőcserélő felületként is funkcionál. A fázisok tényleges érintkezése nélkül érhető el az együttgyártási eljárások legtöbb előnyös tulajdonsága, többlet elválasztási költségek nélkül.

Az eddig bemutatott szempontok alapján választottam ki az etil-benzol fixágyas, heterokatalitikus dehidrogénezésével történő sztírol monomer előállítását. A főreakció, és mellékreakciók reakciókinetikája részletesen ismert, számtalan matematikai modell született a membrán-reaktorok leírására, napjainkban is folyamatosan finomítják ezeket, amit a témában folyamatosan megjelenő cikkek bizonyítanak. Ezek mindegyike stacioner modell, általában 2D-s, melyekben a különböző diffúziós kölcsönhatásokat is figyelembe veszik, azonban a sokkomponensű elegy diffúziós kölcsönhatásainak pontos leírása bonyolult probléma.

Munkásságom célja az eddig megalkotott modelleket alapul véve pontosabban szimulálni a membrán-reaktorokban lezajló folyamatokat, az egyre inkább előtérbe kerülő CFD szimuláció segítségével. Töreksem arra, hogy egy olyan részletességű modellt alkossak meg, amely segítségével akár 3D-ben is tanulmányozhatjuk a reaktor felépítést, vagy dinamikus szimulációs vizsgálatokat végezhetünk. A célul kitűzött szimulátor így alkalmas lehet az ipari termelés számára tervezési, optimalizálási, vagy operátori feladatok támogatására.

Csörgedező ágyas reaktor vizsgálata technológiai szimulátor és mérleghiba-kiegyenlítési technika alkalmazásával

Készítette: Farsang Barbara

Vegyéssz mérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Folyamatmérnöki Tanszék

Témavezetők: Dr. Abonyi János, Dr. Németh Sándor

Az energiafelhasználás és a környezeti terhelés csökkentésének egyik kulcsa a működő technológiák hatékonyságának növelése. A vegyipari folyamatok fejlesztése során gyakran alkalmaznak technológiai szimulátorokat. A szimulátor felhasználható az üzemeltetési paraméterek optimalizálására, a technológia szűk keresztmetszetének feltárására, illetve az Operátor Tréning Szimulátorok (OTS) használatával a kezelők egy virtuális felület felhasználásával készülhetnek fel leendő feladataikra. E feladatok ellátásának sikeressége elsősorban a technológiai szimulátor, illetve a benne leképezett modell pontosságán múlik. Az előadásban ismertetett kutatás célja e modellek fejlesztését és validálását támogató módszertan kidolgozása a technológiai adatsorok és a szimulátorok integrált alkalmazásával.

A javasolt megközelítésmód alapja a mérleghiba-kiegyenlítés technikája, amely lehetővé teszi, hogy ellenőrizzük méréseink elfogadhatóságát, javítsuk a mérési eredmények pontosságát, miközben azt is biztosítjuk, hogy a korrekcióval nyert eredmények kielégítsék modelljeink alapját képező mérlegegyenleteket.

A megközelítést egy csörgedező ágyas ipari reaktor vizsgálatán keresztül mutatom be. Az előadásban részletesen ismertetem a technológiát, a reaktor modellt, a szimulátort, és a mérleghiba-kiegyenlítés módszerét.

Logisztikai folyamatok tervezését támogató szimulációs keretrendszer fejlesztése

Készítette: Ruppert Tamás

Vegyésszmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Folyamatmérnöki Tanszék

Témavezető: Dr. Abonyi János

A logisztikai tevékenységek hatékony végrehajtása az üzleti, logisztikai és technológiai (termelési) folyamatok optimalizálását követeli meg. Ennek fontos eszközei a lejátszódó folyamatok monitoringja és a számítógépes szimuláció, amelyek sikeres alkalmazásához elengedhetetlen a megfelelő bevezetést és alkalmazást támogató módszertan kidolgozása, amely lehetővé teszi a szimuláció implementálását a ténylegesen lejátszódó folyamatokhoz, valamint annak integrálását a vállalatirányítási rendszerhez.

A kutatás tárgya a logisztikai rendszerek kapacitásainak, teljesítményének és költségének jellemzésére alkalmas szimulációs keretrendszer kidolgozása, mely megfelelő adatelemzési és optimalizációs technikákkal kiegészítve javaslatokat tehet a vizsgált folyamatok fejlesztésére.

A javasolt módszertan a folyamatok felmérésén alapul, amely során meghatározásra kerülnek az egyes logisztikai folyamatok jellemzői, továbbá felhasználásra kerülnek a vállalatirányítási rendszerből kinyerhető, az adott logisztikai folyamat szempontjából lényeges adatok. Az így kapott folyamatmodellt és folyamat jellemzőket felhasználva számítógépes szimuláció segítségével válaszolhatunk a vizsgált logisztikai folyamat átszervezésére vonatkozó „mi lenne ha” típusú kérdésekre.

TDK munkámban az e feladat ellátására alkalmas keretrendszert dolgoztam ki a megfelelő folyamatmodellezési eszközök megválasztásával, a kapcsolódó folyamatmodellek elkészítésével, és az elkészített folyamatmodellek Simul8 keretrendszerbe történő implementálásával. A tervezési, elemzési tevékenység támogatása érdekében Excel interfészt készítettem.

A logisztikai folyamatok között számos véletlenszerű folyamat található. A tanulmányban rávilágítok arra, hogy e tekintetben az elemzést a Monte-Carlo szimulációval célszerű végrehajtani, amelynek során a folyamatot befolyásoló véletlenszerű tényezők generálásával, számítógépes szimulációval értékeljük a folyamat átszervezésére vonatkozó javaslatokat. A dolgozat a kidolgozott módszertan alkalmazhatóságát, az EON Gazdasági Szolgáltató Kft. raktározási logisztikai folyamatainak elemzése kapcsán illusztrálja.

Heterokatalitikus reaktor áramlástanai modell alapú szimulációs vizsgálata

Készítette: Molnár Bálint

Vegyésszmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, Folyamatmérnöki Tanszék

Témavezetők: Dr. Varga Tamás, Egedy Atilla

Egy reaktor tervezésénél mindig ügyelni kell a benne lejátszódó folyamatokra (hőátadás, komponensátadás, reakció lejátszódása), az optimális üzemeltetési paraméterekre. A cél ebben a dolgozatban egy működő, ipari heterogén-katalitikus csőköteges reaktor matematikai modellezésének a numerikus áramlástan (CFD – Computational Fluid Dynamics) módszereivel való megközelítése, és a módszer adta előnyök feltárása, összefoglalása.

A heterogén katalízis olyan katalitikus folyamat, amely az egymással érintkező, különböző fázisú katalizátor és reagáló anyag határán zajlik le. A gáz- vagy folyadékfázisú, esetleg oldott anyagok katalízise a szilárd halmazállapotú katalizátor teljes felületén (kontakt katalízis) vagy csupán egy részén, az úgynevezett aktív centrumokon megy végbe. A heterokatalitikus reaktorok fontos szerepet játszanak a vegyipari termelésben, elsősorban olyan technológiákban, melyben nagy mennyiségek előállítása a cél.

A dolgozatban egy ecetsav előállító technológiákban is gyakran használt heterokatalitikus reaktor modelljének kidolgozása alapján mutatom be, egy komplex reakciómechanizmussal jellemezhető állóágyas reaktor modelljének kidolgozását és alkalmazását, mérnöki problémák megoldásában. A kidolgozott modell, egy részletes kinetika alapján készült¹. A modell validálását irodalomban fellelhető mérési adatok alapján végeztem el. A validált modell felhasználásával az ipar számára is fontos feladatok támogatására, szimulációs vizsgálatokat (reaktorelfutás, szelektivitás, konverzió vizsgálata) végeztem, melyeket a dolgozatban részletesen bemutatok.

¹ Rahman F., Loughin F. K., Al-Saleh M. A., Saeed M. R., Tukur N. M., Hossain M. M., Karim K., Mamedov A., in „Applied Catalysis A. General” Vol. 375, Issue 1, p.17-25. Kinetics and mechanism of Partial oxidation of ethane to ethylene and acetic acid over MoV type catalysts (2010)