KONFERENCIA KIADVÁNY

CONFERENCE PROCEEDING

Műszaki Kémiai Napok 2019
Chemical Engineering Conference 2019

2019. április 16-18.
Pannon Egyetem, Veszprém, Egyetem u. 10.

A konferencia rendezői:
Pannon Egyetem Mérnöki Kar
Biomérnöki, Membrántechnológiai és Energetika Kutatóintézete

honlapcím: https://mkn.uni-pannon.hu

A kiadványt összeállította és szerkesztette: **Balogh András és Klein Mónika**
ISBN 978-963-396-121-6

Műszaki Kémiai Napok 2019

Tudományos Bizottság

Elnök
Bélafiné Bakó Katalin

Tagok
Abonyi János
Chován Tibor
Guttman András
Gyenis János
Hajós Péter
Hanák László
Hancsók Jenő
Hodur Cecília
Holló András
Horváth Krisztián
Mika T. László
Modla Gábor
Németh Áron
Németh Sándor
Rippelné Pethő Dóra
Szalai István
Szépvölgyi János
Varga Csilla
Varga Tamás
Vonderviszt Ferenc

Szervező bizottság

Titkár:
Klein Mónika

TARTALOMJEGYZÉK

MODERN TÖMEGSPEKTROMETRIÁS MÓDSZEREK AZ ORVOSI DIAGNOSZTIKÁBAN – A KLINIKAI MIKROBIOLÓGIÁTÓL A SEBÉSZETIG 9
Takáts Zoltán

KINETICS EVALUATION OF DEGRADATION OF PHENOL USING BIOCATALYZED MIXING TANK REACTOR AND MEMBRANE BIOREACTOR 11
Ahmed Musa Jaffar, Endre Nagy, Mónika Meiczinger

ÚJ HETEROGÉN FOTOKATALIZÁTOROK SZINTÉZISE ÉS ALKALMAZÁSA VESZÉLYES FESTÉKEK LEBONTÁSÁBAN 12
Asfandyar Khan, Zsolt Valicsek, Ottó Horváth

PROGRAMMABLE STRUCTURE BASED ANALYSIS OF HYDROGEN SUPPLY CHAINS 13
Mónika Varga, Catherine Azzaro-Pantel, Béla Csukás

CATALYTIC CO-PYROLYSIS OF WASTE POLYMERS TO OBTAIN VALUE ADDED PRODUCTS 14
Bahmed Fekhar, Norbert Miskolczi, Zoltán Eller

TOWARD BUILDING USER INTERFACE FOR AGRO-ENVIRONMENTAL PROCESS MODELS 15
Sándor Balogh, Mónika Varga, Béla Csukás

BÚZAKORPA KÉTLÉPCSŐS SAVAS HIDROLÍZISÉNEK VIZSGÁLATA XILIT ÉS ARABINÓZ ELŐÁLLÍTÁSA CÉLJÁBÓL 17
Bedő Soma, Rozbach Margaréta, Fehér Anikó, Fehér Csaba

POLIELEKTROLIT MULTIRÉTEGŰ NANOSZŰRŐ MEMBRÁNOK SZEPARÁCIÓS TULAJDONSÁGAI 18
Bóna Áron, Galambos Ildikó, Nemestóthy Nándor

CIKLODEXTRIN-GLIKOZILTRANSZFERÁZ ENZIM ELŐÁLLÍTÁSA KÜLÖNBÖZŐ FERMENTÁCIÓS TECHNIKÁKKAL 19
Czinkóczky Réka, Németh Áron

DIGITÁLIS IKER A GYÁRTÁSI FOLYAMAT OPTIMALIZÁCIÓBAN 20
Dániel Csereklei, Tamás Ruppert, János Abonyi

HIBADIAGNOSZTIKAI ÉS STRUKTURÁLIS MEGFIGYELHETŐSÉG SZEMPONTJÁBÓL OPTIMÁLIS SZENZORHÁLÓZAT TERVEZÉSE HŐCSERÉLŐ HÁLÓZATOKBAN 26
Dörgő Gyula, Abonyi János

TERÁPIÁS ANTITESTEK IONCSERÉS ELVÁLASZTÁSÁNAK LEHETŐSÉGEI 27
Farsang Evelin, Fekete Szabolcs, Horváth Krisztián

TERANOSZTIKAI ÉS TERÁPIÁS GYÓGYSZERHORDOZÓ NANORÉSZECSKÉK **28**
Feczkó Tivadar

KUKORICAROST ENZIMES ÉS SAVAS FRAKCIONÁLÁSÁNAK ÖSSZEHASONLÍTÁSA BIOETANOL ELŐÁLLÍTÁS SZEMPONTJÁBÓL **29**
Fehér Anikó, Rozbach Margaréta, Bedő Soma, Fehér Csaba

TIO2 MÓDOSÍTÁSA NITROGÉNNEL: EGY LÁTHATÓ FÉNYBEN AKTÍV FOTOKATALIZÁTOR **30**
Fonyó Máté, Szabóné Bárdos Erzsébet, Horváth Ottó, Zsirka Balázs, Juzsakova Tatjána, Kristófné Makó Éva, Jakab Miklós

FORGÓCELLÁS ADAGOLÓ PÁRHUZAMOS PROGRAMOZÁSSAL TÁMOGATOTT DISZKRÉTELEM MÓDSZER SZIMULÁCIÓJA **31**
Füvesi Balázs, Ulbert Zsolt

KÍSÉRLETEK A KATÓDOS VÉDELEM KINETIKAI KRITÉRIUMÁNAK A KIDOLGOZÁSÁRA **32**
Gősi Gabriella

A PROGRAMOZHATÓ STRUKTÚRÁK MÓDSZERÉN ALAPULÓ TÓGAZDASÁGI MODELL A JELENLEGI ÉS VÁRHATÓ KLIMATIKUS VISZONYOK MELLETT **38**
Gyalog Gergő, Berzi-Nagy László, Varga Mónika

DISZPERZER TÖBBCÉLÚ OPTIMALIZÁLÁSA NUMERIKUS ÁRAMLÁSTANI SZIMULÁCIÓK SEGÍTSÉGÉVEL **39**
Gyurik Lívia, Egedy Attila, Ulbert Zsolt

KÉN-HIDROGÉN SZELEKTÍV ABSZORPCIÓJÁNAK VIZSGÁLATA FÖLDGÁZBÓL KINETIKAI MODELLT ALAPUL VÉVE **40**
Hamadi Omar Péter, Molnár Éva, Rippelné Pethő Dóra, Bocsi Róbert, Bobek Janka, Varga Tamás

KOMPATIBILIZÁLÓ ADALÉKOK TULAJDONSÁGAINAK VIZSGÁLATA KÜLÖNBÖZŐ ANALITIKAI MÉRÉSEKKEL **41**
Hangyási Krisztina, Benkő Bence, Varga Csilla

ENZIM NANORÉSZECSKÉK KINETIKAI VIZSGÁLATA **42**
Hegedüs Imre, Vitai Márta, Meiczinger Mónika, Nagy Endre

MÁGNESES FOLYADÉKOK ÉS SZUSZPENZIÓK VISELKEDÉSE KÜLSŐ MÁGNESES TÉRBEN **43**
Horváth Barnabás, Guba Sándor, Szalai István

ADSZORPCIÓS IZOTERMÁK MODELLMENTES MEGHATÁROZÁSA INVERZ MÓDSZER SEGÍTSÉGÉVEL **44**
Horváth Szabolcs, Horváth Krisztián, Szakács Máté

EGY REKOMBINÁNS FEHÉRJE AUTOINDUKCIÓS TERMELÉSÉNEK NÖVELÉSE BATCH FERMENTÁCIÓVAL 46
Ivanics Balázs Ágoston, Dr. Németh Áron

FLAGELLIN ALAPÚ ARZÉN- ÉS NIKKELKÖTŐ ÉRZÉKELŐ RÉTEGEK LÉTREHOZÁSA ÉS KÖTŐTULAJDONSÁGUK VIZSGÁLATA 47
Jankovics Hajnalka, Szekér Patrik, Lábadi Zoltán, Tóth Éva, Kalas Benjamin, Saftics András, Fried Miklós, Petrik Péter, Vonderviszt Ferenc

BIOANALITIKAI MÓDSZEREK FEJLESZTÉSE GLIKÁNOK KAPILLÁRIS ELEKTROFORÉZIS ALAPÚ ANALÍZISÉHEZ 48
Járvás Gábor, Mészáros Brigitta, Borza Beáta, Hajba László, Döncző Boglárka, Kovács Zsuzsanna, Szarka Máté, Szigeti Márton, Guttman András

LINEÁRIS ÉS ELÁGAZÓ FUNKCIÓS POLIMEREK ELŐÁLLÍTÁSA ÉS BIONANOTECHNOLÓGIAI ALKALMAZÁSI LEHETŐSÉGEIK 49
Kasza György, Fecske Dóra, Stumphauser Tímea, Gyulai Gergő, Szarka Györgyi, Horváti Kata, Bősze Szilvia, Domján Attila, Kiss Éva, Iván Béla

SZINTETIKUS CSURGALÉKVÍZ TISZTÍTÁSA KOAGULÁCIÓ, FLOKKULÁCIÓ ÉS ULTRASZŰRÉS ALKALMAZÁSÁVAL 50
Kiss Zsolt László, Galambos Ildikó

LIPID-SZÉNHIDRÁT RENDSZEREK VIZSGÁLATA 51
Kovács Anikó, Badakné Dr. Kerti Katalin, Dr. Somogyi László

NANO-MŰANYAG ÖKOTOXIKUS HATÁSÁNAK VIZSGÁLATA 52
Kováts Nóra, Eck-Varanka Bettina, Békéssy Zsófia, Diósi Dorina, Hubai Katalin, Korponai János

ANALYTIC HIERARCHY PROCESS (AHP) - BASED NETWORK REPRESENTATION OF MULTIOBJECTIVE DECISION 57
Edina Kulcsár, Tamás Csiszér, János Abonyi

GENETIKUS PROGRAMOZÁS ALAPÚ REAKTOR ELFUTÁSI KRITÉRIUM IDENTIFIKÁLÁSA 58
Kummer Alex, Varga Tamás, Abonyi János

KARBONSAVAK ÉS SZERVETLEN ANIONOK ANALITIKAI ELVÁLASZTÁSA KRIPTAND ALAPÚ IONCSERE-ÁLLÓFÁZISON 59
Lukács Diána, Horváth Krisztián, Hajós Péter

PHOTOCATALYTIC HYDROGEN PRODUCTION ON MODIFIED CDS-ZNS SEMICONDUCTOR 61
Maali Amel Mersel, Lajos Fodor, Ottó Horváth

ANTIMICROBIAL AGGREGATES: FOOD COLOURS CONTROL MECHANISM OF A BACTERICIDAL PEPTIDE 62
Maria Ricci

ÖNSZERVEZŐDÉSSEL KÉPZŐDŐ NANORENDSZEREK 63
Miskolczy Zsombor, Biczók László, Megyesi Mónika, Tőke Orsolya
HIGH TEMPERATURE PYROLYSIS OF REAL WASTES POLYMERS FOR HYDROGEN RICH SYNGAS PRODUCTION 64
Mohammed Al-asadi, Norbert Miskolczi, Viktória Zsinka
CHLORELLA ZOFINGIENSIS HETEROTRÓF FED-BATCH FERMENTÁCIÓS KÍSÉRLETEI 65
Nagy Balázs József, Dr. Németh Áron
PET/PA BLENDEK MECHANIKAI TULAJDONSÁGAINAK VIZSGÁLATA OLEFINMALEINSAV- ANHIDRID KOPOLIMER ALAPÚ ADALÉKOK JELENLÉTÉBEN 66
Nagy Bianka, Varga Csilla
DESCRIPTION OF MASS TRANSPORT THROUGH AN ASYMMETRIC, BIOCATALYTIC MEMBRANE REACTORS 67
Endre Nagy, Mónika Meiczinger, Imre Hegedüs, Marta Vitai
BOROSTYÁNKŐSAV FERMENTÁCIÓ VIZSGÁLATA 68
Németh Áron
KARBONÁTOK ÉS MÁGNESES NANORÉSZECSKÉK NUKLEÁCIÓJA ÁSVÁNYOKON ÉS BIOLÓGIAI FELÜLETEKEN 69
Pósfai Mihály, Husztiné Nagy Georgina, Molnár Zsombor, Fodor Melinda, Ható Zoltán, Kristóf Tamás, Pekker Péter, Vonderviszt Ferenc
AKTÍV SZÉN–DIATÓMAFÖLD KOMPOZIT ADSZORBENS ALKALMAZÁSA NEM SZTEROID GYULLADÁSCSÖKKENTŐ GYÓGYSZERKÉSZÍTMÉNYEK ELTÁVOLÍTÁSÁRA 70
Pozsgai Emília, Kovács Barbara, Gerencsér-Berta Renáta, Galambos Ildikó
AGRÁR-ÖKOSZISZTÉMÁK MODELLEZÉSE VÁLTOZÓ KÖRNYEZETI FELTÉTELEK MELLETT I. - PÉLDA ÉS PROBLÉMA FELVETÉS 71
Rásó János, Csukás Béla, Varga Mónika
SÖRTÖRKÖLY SAVAS ÉS ENZIMES HIDROLÍZISÉNEK VIZSGÁLATA 73
Rozbach Margaréta, Bedő Soma, Fehér Anikó, Fehér Csaba
PROTEIN LIBRARY DESIGN FOR THE DIRECTED EVOLUTION OF SPECIFIC BINDER FLAGELLIN VARIANTS 74
Juhi Siddiqui, Hajnalka Jankovics, Ferenc Vonderviszt
KOMPLEX MINTAKEVERÉKBŐL SZÁRMAZÓ KOMPONENSEK EREDETÉNEK MEGHATÁROZÁSA ÉS VIZSGÁLATA ALTERÁCIÓS ANALÍZISSEL 75
Simon József, Rédei Csanád, Zelenyánszki Dóra, Felinger Attila

HULLADÉK ELASZTOMER TÍPUSÚ ŐRLEMÉNY SZEMCSEMÉRETÉNEK HATÁSA A MECHANIKAI JELLEMZŐKRE POLIMER BLENDEKBEN **76**
Simon-Stőger Lilla, Kéri Kitti, Varga Csilla

HANGOLHATÓ MÉRETŰ ARANY NANORÉSZECSKÉKET TARTALMAZÓ ENZIM SZUBSZTRÁT KONJUGÁTUMOK – LEHETSÉGES SZENZORIKAI ALKALMAZÁSOK **77**
Szabó Tamás, Csupor Barbara, Pekker Péter, Mészáros Gábor, Keresztes Zsófia

VÍZOLDHATÓ, MEMBRÁNAKTÍV FOLDAMEREK SZINTÉZISE ÉS JELLEMZÉSE **78**
Szigyártó Imola Csilla

MAXIMÁLIS FORRÁSPONTÚ AZEOTRÓP ELEGYEK ELVÁLASZTÁSA EXTRAKTÍV DESZTILLÁCIÓVAL **79**
Szilágyi Botond, Tóth András József

BIOGÁZ ELŐÁLLÍTÁSA ELEKTROFERMENTÁCIÓS ÚTON **80**
Takács Piroska, dr. Nemestóthy Nándor

EGY IPARI MÉRETŰ BIOGÁZ GYÁRTÓ FERMENTOR TARTÓZKODÁSI IDŐ ELOSZLÁS MÉRÉSÉNEK ELEMZÉSE **81**
Tankovics András, Takács Dávid, Szendefy Judit, Varga Mónika, Csukás Béla

HOMOGENIZÁLÓDÁS VIZSGÁLATA SPECIÁLIS GEOMETRIÁJÚ TARTÁLYOKBAN **83**
Tarcsay Bálint Levente, Bobek Janka, Egedy Attila, Rippel-Pethő Dóra

NEMLINEÁRIS OPTIMALIZÁLÁSI ALGORITMUSOK ÖSSZEHASONLÍTÓ ÉRTÉKELÉSE PSZEUDOKOMPENSEKBŐL ÁLLÓ REAKCIÓHÁLÓZATOK IDENTIFIKÁLÁSA SORÁN **89**
Till Zoltán, Varga Tamás, Chován Tibor

ALKOHOL-VÍZ ELEGYEK ELVÁLASZTÁSI ELJÁRÁSAINAK ÖSSZEHASONLÍTÁSA: DESZTILLÁCIÓ ÉS PERVAPORÁCIÓ **95**
Tóth András József, Haáz Enikő, Fózer Dániel, André Anita, Nagy Tibor

AROMAKOMPONENSEK BIOKATALITIKUS GÁZFÁZISÚ ELŐÁLLÍTÁSA **96**
Tóth Gábor, Nemestóthy Nándor, Bélafiné Bakó Katalin

TELEPÜLÉSI HULLADÉK SZELEKTÍV GYŰJTÉSI ÉS VÁLOGATÁSI MEGOLDÁSAINAK ELEMZÉSE A FOLYAMAT PROGRAMOZHATÓ STRUKTÚRA MODELLJE SEGÍTSÉGÉVEL **97**
Trenyik Tamás, Varga Mónika

BIOGÉN AMIN HORDOZÓ FINOMHANGOLHATÓ POLARITÁSÚ SZUPRAMOLEKULÁRIS VINIL ALKOHOL KO-POLIMEREK SZINTÉZISE GYŰRŰNYÍTÓ METATÉZIS POLIMERIZÁCIÓVAL **99**
Deme János, Gyetvai Eszter, Kovács Ervin, Merza Gabriella, Szolnoki Gábor, Kiss Virág, Szarka Györgyi, Iván Béla, Huszthy Péter, John A. Gladysz, Tuba Robert

ÚJ KOPOLIMER ALAPÚ KOMPATIBILIZÁLÓ ADALÉKOK SZEREPE MŰANYAG ÉS GUMI HULLADÉKOK HASZNOSÍTÁSÁBAN **101**
Varga Csilla, Bartha László

AGRÁR-ÖKOSZISZTÉMÁK MODELLEZÉSE VÁLTOZÓ KÖRNYEZETI FELTÉTELEK MELLETT II. - A PROGRAMOZHATÓ STRUKTÚRÁK IMPLEMENTÁLÁSA **102**
Varga Mónika, Balogh Sándor, Rásó János, Csukás Béla

KLUYVEROMYCES MARXIANUS ERGOSZTERIN TARTALMÁNAK VIZSGÁLATA **103**
Vidra Aladár, Dr. Németh Áron

KÉN-HIDROGÉN ADSZORPCIÓJA MÓDOSÍTOTT FELÜLETŰ SZÉN ALAPÚ SZORBENSSEL **104**
Virág Lilla, Bocsi Róbert, Rippelné Pethő Dóra

PREPARATION AND CHARACTERIZATION OF NITROGEN DOPED TIO2 CATALYST **105**
Abdul Wafi, Erzsébet Szabóné Bárdos, Ottó Horváth, Miklós Jakab, Balázs Zsirka

TIO2 IMMOBILIZATION WITH POLYACRYLAMIDE – POSTER I. **106**
Abdul Wafi, Erzsébet Szabóné Bárdos, Ottó Horváth, Balázs Zsirka

FORMATION OF HYDROXYL RADICALS BY USINGTIO2 COATED GLASS SLIDE – POSTER II. **107**
Abdul Wafi, Erzsébet Szabóné Bárdos, Ottó Horváth

SZTIROL-DVB KOPOLIMER DUZZADÁSI MODELLJÉNEK MEGALAPOZÁSA **108**
Wirnhardt Ádám, Berzeviczy Gergely, Rippelné Pethő Dóra, Varga Tamás

Modern tömegspektrometriás módszerek az orvosi diagnosztikában – a klinikai mikrobiológiától a sebészetig

Modern mass spectrometric methods in clinical diagnostics – from microbiology to surgery

Takáts Zoltán

Imperial College London

Department of Surgery and Cancer, South Kensington Campus, London, UK

Összefoglaló/ Summary

Tömegspektrometriás módszereket az 1970-es évek óta egyre nagyobb mértékben alkalmaznak klinikai diagnosztikában, hagyományosan a klinikai kémia területén. Tipikus példa erre az anyagcsere-betegségek diagnosztikája, amely gázkromatográfiás-tömegspektrometriás vagy folyadékkromatográfiás-tömegspektrometriás módszerrel történik. Az elmúlt évek során azonban számos új technika került kifejlesztésre, némelyik kifejezetten orvosi diagnosztikai céllal. Az előadás ezen utóbbi csoportba tartozó, elsősorban közvetlen ionizációs módszerek bemutatását célozza.

A közvetlen ionizációs (direct vagy ambient ionisation) módszerek közös sajátossága, hogy nem igénylik a minta előkészítését a vizsgálatot megelőzően. Az első ilyen módszer az ún. deszorpciós electrospray ionizáció volt, amely 2004-ben került bevezetésre. A DESI sok tekintetben forradalmasította a tömegspektrometria használatát, különös tekintettel az in-situ alkalmazások területén. A DESI, amellett, hogy képes pl. emberi bőr közvetlen vizsgálatára ill. nyálkahártyák közvetett vizsgálatára, elsősorban kémiai képalkotó eszközként van elterjedőben. A DESI-alapú kémiai képalkotás elméletileg képes helyettesíteni a jelenlegi gyakorlatban használt szövettani módszereket, kémiai információval helyettesítve az eredetileg szöveti morfológián alapuló besorolást. A kémiai képalkotás – amellett hogy kiküszöböli az emberi tényezőből fakadó problémákat – képes olyan szöveti fenotípusok felismerésére is amelyek egyébként csak immunohisztokémiai módszerekkel kimutathatóak. Összességében a kémiai képalkotáson alapuló patológiai megközelítés lényegesen pontosabb diagnosztikát tesz lehetővé, különösen rosszindulatú daganatos betegségek esetében.

Bár a DESI módszer és különféle változatai tényleges áttörést hoztak a tömegspektrometria klinikai alkalmazhatóságában, számos területen továbbra is áthághatatlan problémákba ütköztek, különösen a valós idejű, beavatkozás közbeni vizsgálatok esetében. Ezen problémák áthidalása érdekében került sor a gyors elpárologtatáson alapuló ionizáció (REIMS) kifejlesztésére. A REIMS technika lényegében sebészetben használatos szöveti ablációs technikák tömegspektrometriás ionforrásként történő használata. A módszer ennélfogva különösen előnyösen alkalmazható műtéti vagy endoszkópiás környezetben végzett szövettani vizsgálatok elvégzésére, ahol az információra valós időben van szükség. A sebészeti alkalmazások mellett a közelmúltban a REIMS technikát sikeresen alkalmazták számos egyéb klinikai diagnosztikai feladat megoldására, így például klinikai mikrobiológiai izolátumok gyors meghatározására is.

Mass spectrometric methods have been introduced into the clinical diagnostic field from the 1970's and since then they have become one of the core technology platform in this area. Typical examples include the diagnostics of metabolic diseases, which is mostly performed using GC-MS and LC-MS approaches. Recently, however, a number of new MS-based technologies were developed, some directly aimed at solving long-standing clinical diagnostic problems such as real-time histological analysis in surgical environment.

Direct or ambient ionization methods do not require sample preparation by any means, the sample can be analysed directly in its native form. The first ambient ionization method was desorption electrospray ionization introduced in 2004. DESI has revolutionized the application of mass spectrometry in many aspects, with particular emphasis on in-situ applications. DESI, besides capable of the direct examination of intact human skin or the indirect analysis of mucosal membranes, has found its most important application area in molecular imaging. DESI imaging can – in principle – replace current histological approaches using the chemical composition of tissues as a basis for classification in contrast to cellular morphology used by the traditional approach. Molecular imaging can provide improved accuracy by eliminating the human factor from the classification process and can also detect such phenotypic changes which are only detectable by immunohistochemistry or molecular genetics. In conclusion, molecular imaging can provide more accurate diagnostic and prognostic information in a shorter timeframe than classical histopathology approaches.

While DESI and related techniques brought a real breakthrough regarding the clinical deployment of mass spectrometry, these techniques still suffered from a number of shortcomings especially in case of in-vivo deployment when real-time information is needed. To tackle these problems, a new generation of ambient ionisation methods was developed generally termed as Rapid Evaporative Ionization Mass Spectrometry (REIMS). REIMS is practically the utilization of surgical tissue ablation methods as ion sources for mass spectrometry. Consequently, REIMS is directly deployable in surgical and other medical interventional

environments where direct, real-time tissue identification is needed. More recently a number of other clinically relevant applications of REIMS have been developed including the rapid identification of clinical microbiology isolates.

Kinetics evaluation of degradation of phenol using biocatalyzed mixing tank reactor and membrane bioreactor

Ahmed Musa Jaffar[1], Endre Nagy[2], Mónika Meiczinger[3]
Research Institute of Biomolecular and Chemical Engineering
University of Pannonia, Hungary
Email: [1]aadmeral@yahoo.com , [2]nagy@mukki.richem.hu , [3]meiczinger@mukki.richem.hu

Summary

The bioactive contaminates, as micro pollutants, occurring in the surface of water or industrial waste water like phenol or its chlorinated compounds or other bioactive components, can cause series problems in the health of human and also of other living organisms. The degradation of these materials is essential for the environmental protection. Mixing tank reactor and for comparison membrane bioreactor were used for degradation of phenol, with aim to predict the kinetics of the decomposition process using enzyme(s) as biocatalyst(s). Horseradish peroxide (HRP), hydrogen peroxides H_2O_2, phosphate buffer (at pH=6) and phenol were used in our first experiments. Horseradish peroxide is one of the best enzyme for degradation of phenol and its derivatives as it is shown in the literature. The relation between concentration and time function was measured with different conditions. The substrate concentration change was measured as a function of the reaction time. The concentration change was measured by HPLC instrument. This presentation will show the experimental and also the first kinetic results of this decomposition process. The main task of this study to analyze the difference of bioreaction efficiency between the conventional mixing tank reactor and the biocatalytic membrane reactor.

Keywords: phenol, degradation, environmental, Horseradish peroxides, biocatalyst, reactor

References:
1- Buchanan, I. (1996). Kinetic modelling of horseradish peroxidase catalyzed phenol removal for reactor development(Doctoral dissertation, McGill University Libraries).
2- Bhunia, A., Durani, S., & Wangikar, P. P. (2001). Horseradish peroxidase catalyzed degradation of industrially important dyes. Biotechnology and bioengineering, 72(5), 562-567.
3- Bayramoğlu, G., & Arıca, M. Y. (2008). Enzymatic removal of phenol and p-chlorophenol in enzyme reactor: horseradish peroxidase immobilized on magnetic beads. Journal of hazardous materials, 156(1-3), 148-155.

Új heterogén fotokatalizátorok szintézise és alkalmazása veszélyes festékek lebontásában

Synthesis of novel heterogeneous photocatalysts and their application for the degradation of hazardous dyes

Asfandyar Khan, Zsolt Valicsek, Ottó Horváth
Department of General and Inorganic Chemistry, Faculty of Engineering
University of Pannonia, Veszprém – Hungary
Email: asfandyarkhan100@gmail.com

Abstract

The rapid growth in the world's population, urbanization and industrialization imposed a serious threat to living organisms, especially aquatic life because of consuming contaminated water. Researchers are in continuous quest to develop efficient, fast, cheap, and eco-friendly techniques for water decontamination. Heterogeneous Fenton Type systems have been used for the removal of hazardous synthetic dyes and pigments from effluents in textile dyeing, printing, finishing, paper, leather, pharmaceutical, and ink industries. This research work reports the synthesis, characterization, and application of iron(II) doped copper ferrites nanoparticles (NPs). The NPs were synthesized via simple co-precipitation technique. The precipitates were purified using ethanol and water followed by drying for 1 hour at 100°C. For further enhancement in the crystal structure the NPs were calcined for 4 hours at 400°C. The calcined NPs were characterized using XRD, SEM, Raman spectroscopy, and EDS techniques. The photocatalytic performances of the NPs were evaluated using methylene blue (model hazardous dye) in the presence of hydrogen peroxide and visible light irradiation. The photocatalytic activities were determined due to the continuously measured UV-visible spectra of MB during the irradiation. During the photocatalytic process a continuous decrease in the maximum wavelength (λ_{max}) was observed. The effect of three known determinants of the Heterogeneous Fenton system i.e. pH, concentration of NPs and H_2O_2 were also investigated. Finally, the reusability of the NPs was measured under five cycles of photolysis. It can be confidently concluded, based on the photocatalytic results, that iron(II) doped copper ferrites can be used as novel heterogeneous catalysts in water decontamination.

Acknowledgement
This work was supported by the Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00016 and the EFOP-3.6.1-16-2016-00015.

References

[1] Kirankumar, V.S., Sumathi, S., *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 29, 8738-8746 (2018).

[2] Zhu, Z., Li X., Zhao Q., Li Y., Sun C., Cao Y., *Materials Research Bulletin*, 48, 2927-2932 (2013).

[3] Singh, C., Goyal, A., Singhal, S., *Nanoscale*, 6, 7959-7970 (2014).

Programmable Structure based analysis of Hydrogen Supply Chains

Hidrogén ellátási láncok elemzése a Programozható Struktúrák módszerével

Mónika Varga[1], Catherine Azzaro-Pantel[2], Béla Csukás[1]

[1]Kaposvar University, Institute of Methodology, Kaposvar, Hungary

[2]Laboratoire de Genie Chimique, INPT, Universitet de Toulouse, Toulouse, France

Summary

Renewable resource based hydrogen energy could be a prospective sustainable option in the future, in spite of the still existing technological and economic shortcomings. To overcome difficulties, model based optimal design, planning and operation of Hydrogen Supply Chains (HSC) became an actual research topic that incites also the realization of practical implementations. In this work, we introduce the application of a non-conventional modeling and simulation framework for HSC.

Besides the well-developed mathematical programming based optimization methods, the design and operation of large scale, long-term processes may optionally require also easily extensible, flexible generic modeling based dynamic simulation methods. Programmable Structure of process models can be generated from the description of an (optionally geographically determined and multiscale) process network of HSC, as well as from two general functional meta-prototypes. The case-specific, actual functional prototypes can be derived and edited from the meta-prototypes, and they are associated with locally executable declarative programs in a graphical editor. Simultaneously, the actual state and transition elements are parameterized and initialized, concerning their case-specific prototypes.

The execution of the Programmed Structures is solved by a general purpose code generating kernel program, while the actual model elements are executed by the respective local prototype programs. In the proposed model representation, the detailed description of possibility (design) space, as well as the components of the evaluating functions may be embedded in the actual state and transition elements, communicating via specific model elements. The application of methodology, developed in other fields, will be illustrated by a fictitious example for a Hydrogen Supply Chain.

Support of TÉT_16-1-2016-0116 French-Hungarian bilateral project is acknowledged.

Összefoglaló

A megújuló erőforrásokon alapuló hidrogén energia a jövő egyik ígéretes lehetősége, a jelenleg még fennálló technológiai és gazdasági nehézségek ellenére. A hidrogén ellátási láncok modell alapú elemzése, tervezése és üzemeltetése a nemzetközi szakirodalomban is aktuális téma, mely a jövőbeli gyakorlati megvalósítást is előmozdíthatja. Munkánkban egy nem konvencionális modellezési és szimulációs rendszer alkalmazását mutatjuk be hidrogén ellátási láncok elemzésére.

A bevált, matematikai programozáson alapuló, optimálási módszerek mellett felmerül az igény az összetett, térben és időben nagyléptékű folyamatok generikus modelljének könnyen változtatható létrehozására, illetve a flexibilis modellek dinamikus szimulációjára is. A Programozható Struktúrákon alapuló módszer esetében a folyamat modelljét a hidrogén ellátási lánc tényleges és lehetséges elemeit figyelembe vevő hálózat (térben és időben többskálás) leírásából, valamint a módszer két alapelemét definiáló állapot és változás meta-prototípusból generáljuk. A folyamatok funkcionalitásait leíró, lokális programokat tartalmazó, alkalmazás specifikus prototípusokat szintén a meta-prototípusokból kiindulva szerkeszthetjük meg. Ezzel egyidejűleg adjuk meg a modell kezdeti értékeit és paramétereit.

A szimulációs modell generálását és végrehajtását egy általános kernel program végzi, mely a végrehajtás során a modell állapot és változás elemeit a funkcionalitásaikat leíró lokális program prototípusok alapján számítja ki. A javasolt modellben az optimáláshoz szükséges lehetőségtér és az értékelések megadása is az aktuális állapot és változás elemekbe építhető, illetve speciális állapot és változás elemek segítségével kommunikálhat külső alklamazásokkal. A más területen fejlesztett módszer alkalmazását egy fiktív hidrogén ellátási lánc példáján keresztül mutatjuk be.

A munkát a TÉT_16-1-2016-0116 francia-magyar TéT projekt támogatta.

Catalytic co-pyrolysis of waste polymers to obtain value added products

Bahmed Fekhar, Norbert Miskolczi, Zoltán Eller

University of Pannonia, Faculty of Engineering, Institute of Chemical Engineering and Process Engineering, MOL Department of Hydrocarbon & Coal Processing, H-8200, Veszprém, Egyetem u. 10, Hungary; tel. +36 88 624 000

Summary

Pyrolysis has been the subject of several studies for the biomass and waste plastics valorisation. In general, the decomposition of the polymeric wastes is taken under the effect of heat in an inert atmosphere to obtain gases, hydrocarbon oils and char. The type and amount of catalyst, the temperature, the reaction time, etc. has a great effect to the process layout, the main operation units and the product properties. Many types of technologies have been developed for the production of high value pyrolysis oils, which offer an alternative way for the reduction of environmental problems generated by the waste streams or saving the fossil fuel reserves. However, the application of waste sourced hydrocarbons as fuel is limited because of their disadvantageous properties: e.g. in case of biomass containing raw materials, the heating value should be low or the products rich in oxygenated compounds, such as aldehyde, ketone, alcohol, carboxylic acid, etc. Beside the pyrolysis oil contains many problematic compounds the interest of the pyrolysis processes is still increasing. Catalytic pyrolysis is a promising way to improve bio-oil quality by removing of oxygenated compounds, increasing the heating value, lowering viscosity, and increasing the stability. In the last decade, both the in-situ and post-situ catalytic quality improving of pyrolysis products have been investigated over zeolite based catalysts.

This paper focuses to the effect of different catalysts to the hydrocarbon yield and composition obtained by waste polymer pyrolysis. Mixture of real waste plastics and organic wastes was used as raw material, while the composition of products was investigated by GC-FID, GC-TCD, HPLC and other standardized methods. It was concluded, that the catalysts has a significant effect to the product properties. Furthermore, the yield of valuable fractions are increased, while the level of contaminants could be drastically decreased.

Acknowledgments

The work was also supported by EFOP-3.6.1-16-2016-00015 Smart Specialization Strategy (S3) - Comprehensive Institutional Development Program at the University of Pannonia to Promote Sensible Individual Education and Career Choices project.

Toward building user interface for agro-environmental process models

Az agrár-környezeti folyamatmodellek felhasználói interfészének körvonalai

Sándor Balogh, Mónika Varga, Béla Csukás

Kaposvar University, Institute of Methodology, Kaposvár, Hungary

Summary

Building and running of various environmental models, especially for the very complex agro-environmental process systems, require large amount of structured input data. This dataset consist of model describing and configuration data, as well as time independent (static) and time dependent (dynamic) operational data. Running of models produces another large output dataset, in relation with respective input. The consistent maintenance of these datasets is a challenging task.

The important role of user interfaces is to support the overview and configuration of the necessary input and required output data, as well as to help users (and developers) in consistent and user friendly description of the initial data, parameters and required output, based on the definition of model structure.

Our long term plan is to develop a separate full featured web and desktop application, however in short term we prefer a faster and upgradeable (sub)solution.

The model input is described with the YAML language. YAML is a human-readable (and editable), structural data serialization language. In the first version these editable text files describe the input. Because of availability of free open source YAML parsers, creating, processing and transforming of these input files is relatively easy. This input description can be the basis of the more complex applications, later on.

The module, providing input interface to the generation and execution of Programmable Structures, supports the communication of user and user declared outer sources through user friendly prepared consistent text files. Such communication is needed for description of single and multiple (grouped) run, for consulting with meteorological dataset and with other outer data sources, as well as for the connection of the application with an optimizing program (e.g. with a genetic algorithm). Declaration of the actual output demand is also solved through the input interface.

The module, providing output interface for the Programmable Structure, supports the smart visualization of output data after the execution, and later on also in runtime.

Final objective is to connect the model generating and executing application with popular frameworks (like Excel, Jupyter, Octave, R, etc.) to utilize their input and output capabilities with a short “glue code”.

Support of EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projects is acknowledged.

Összefoglaló

A különböző környezeti modellek, különösen az agrár-környezeti modellek kialakításához és futtatásához nagy mennyiségű strukturált input adatra van szükség. Ez az adathalmaz modell leíró és modell konfigurációs adatokból, idő-invariáns (statikus) adatokból, valamint időfüggő (dinamikus) adatokból tevődik össze. A modell futása során új output adatok képződnek, amelyek relációban vannak az input adatokkal. Az ilyen adatrendszerek konzisztens kezelése bonyolult feladat.

A felhasználói felület alkalmazásának fontos szerepe, hogy támogassa a modellezéshez szükséges input, illetve a modell végrehajtás eredményeként keletkező output konfigurálását, és segítsen a felhasználónak (valamint a fejlesztőknek) a modell struktúrájának definíciójára alapozott kezdeti értékek és paraméterek, valamint a szükséges kimeneti adatok felhasználóbarát megadásában.

Hosszú távon egy komplex webes és asztali alkalmazás fejlesztésén a dolgozunk, de rövid távon egy gyorsabban megvalósítható és fejleszthető (rész)megoldás felé indultunk el.

A modell input jellemzőinek leírását a YAML nyelv segítségével adjuk meg. A YAML egy emberbarát formátumú, strukturált adat leíró nyelv. Az első verzióban ezen szerkeszthető szöveg fájlok szolgálnak modell inputként. Nyílt forráskódú YAML parserek felhasználásával az adatok létrehozása, feldolgozása és transzformálása viszonylag egyszerűen megoldható, ami a komplexebb alkalmazások alapját is megadja.

A Programozható Struktúrák paraméterezett folyamat modelljeit generáló és futtató alkalmazás input adatainak megadását támogató modult első közelítésben úgy készítjük fel, hogy támogassa az alkalmazás külső kommunikációját a jelenleg is alkalmazott szöveges input állományok konzisztens és felhasználóbarát létrehozásával. Ilyen kommunikáció például a csoportos futások előírása, a meteorológiai és egyéb feltételeket tartalmazó segéd állományok megadása vagy az optimáló alkalmazással (például genetikus algoritmussal) való kapcsolattartás, valamint az aktuális output igények kijelölése.

A kijelölt output adatok megjelenítését segítő modul a Programozható Struktúra szimulációs üzemmódjában kiküldött adatainak futást követő, később futás közbeni megjelenítését segíti.
Végső célunk a modell generáló és futtató alkalmazás "glue code" segítségével való összekapcsolása ismert keretrendszerekkel (Excel, Octave, Jupyter, R, stb.), azok meglévő input és output kezelő funkcióinak felhasználása érdekében.

Köszönet az EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projekt támogatásának.

Búzakorpa kétlépcsős savas hidrolízisének vizsgálata xilit és arabinóz előállítása céljából

Investigation of two-step acidic hydrolysis for arabinose and xylitol production from wheat bran

Bedő Soma, Rozbach Margaréta, Fehér Anikó, Fehér Csaba

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, Biofinomító Kutatócsoport

H-1111 Budapest, Műegyetem rpt. 3.

Összefoglaló

A lignocellulóz alapú biomassza hasznosítása nagyon fontos a mai világban. Az ilyen típusú biomassza (fő összetevői a cellulóz, hemicellulóz illetve lignin) feldolgozásával bioüzemanyag és számos értéknövelt termék állítható elő. A biofinomító elven való feldolgozás egy megfelelő módszer lehet ezen nyersanyagok hasznosítására. A biofinomítás során a biomassza minden komponensét értékes termékké alakítjuk, hulladék termelése nélkül. Biofinomítóban való feldolgozásra alkalmas agro-ipari melléktermék lehet a búzakorpa. A búzakorpa a malomipar egyik melléktermére, amely a liszt gyártása során keletkezik. A búzakorpa nagy szénhidráttartalommal bír, amelynek főbb összetevői a keményítő, cellulóz valamint az arabinoxilán frakció. Azonban ahhoz, hogy ezekhez a frakciókhoz hozzá tudjunk férni és át tudjuk őket alakítani hasznos termékekké mindenképpen előkezelésre van szükség. Ezek közül az egyik általánosan használt módszer a termokémiai előkezelés.

Kutatásunk során egy olyan kétlépcsős híg savas frakcionálást sikerült kidolgozni, amelynek segítségével egy arabinózban, egy xilózban és egy cellulózban gazdag frakció állítható elő. Az arabinózban gazdag frakción biotisztítás végeztünk, annak érdekében, hogy a keletkezett hidrolizátumban előforduló egyéb cukrok koncentrációja minimálisra csökkenjen. A xilózban gazdag hidrolizátumon xilit fermentáció vizsgálatát hajtottuk végre. Az arabinóz biotisztítást és a xilit fermentációt egy Magyarországon izolált élesztő segítségével, *Ogataea zsoltii*-val (MIMNG, Budapest) végeztük.

Summary

Utilization of lignocellulosic biomass is very important nowadays. Many value-added products and biofuels can be produced from lignocellulose-based biomass (mainly consists of cellulose, hemicellulose and lignin). The biorefinery approach is a good way to utilize the biomass, because the aim of this concept is producing wide range of value-added bio-products without the formation of waste. Wheat bran, an agro-industrial by-product, can be suitable for biorefining. Wheat bran is a by-product of the milling industry which is produced during the production of the flour. Wheat bran has high carbohydrate content, in which the main ingredients are starch, cellulose and arabinoxylan fraction. However pre-treatment is always needed to be able to transform these fractions into useful products. Thermochemical pre-treatment is commonly used method.

In this research, a two-step dilute acid hydrolysis was developed to produce different fractions which were rich in arabinose, xylose or cellulose. Arabinose biopurification was performed on the arabinose-rich hydrolysate to minimize the concentration of other sugars. Xylitol fermentation was investigated on the xylose-rich hydrolysate. Arabinose biopurification and xylitol fermentation were performed with *Ogotaea zsoltii* yeast which was isolated in Hungary (NCAIM, Budapest).

Polielektrolit multirétegű nanoszűrő membránok szeparációs tulajdonságai

Separation properties of polyelectrolyte mulitlayer nanofiltration membranes

Bóna Áron[1,2], Galambos Ildikó[2], Nemestóthy Nándor[1]

[1] Pannon Egyetem, Biomérnöki, Membrántechnológiai és Energetikai Kutatóintézet
Veszprém, Egyetem u. 10.
2 Pannon Egyetem, Soós Ernő Víztechnológiai Kutató-Fejlesztő Központ
H-8800 Nagykanizsa, Zrínyi M. u. 18.

Összefoglaló

Napjainkra a vékony film kompozit (TFC) RO és NF membránokkal végzett szeparációs műveletek a víz- és vegyiparban nélkülözhetetlenné váltak kedvező áruk és robosztusságuk révén. Ezzel szemben az üreges szálas ultraszűrőkre felhordott polielektrolit multirétegen (PEM) alapuló nanoszűrő membránok még csak kuriózumként vannak jelen a piacon, noha számos előnyös tulajdonságuk miatt (kémiai ellenállóság, hidrofilicitás, kedvező geometria) sok területen célszerű lenne az alkalmazásuk. Felhasználásuknak részben az alkalmazástechnikai információk korlátozottsága áll az útjában.
Egyszerű szervetlen sók és illékony szerves savak sóinak szűrési paraméterei (visszatartási tényező és fluxus) segítségével mutatjuk be a PEM membránok alapvető különbségeit a TFC nanoszűrő membránokhoz képest. Nagymértékben különböző betáp-koncentrációk esetén radikálisan eltérő szeparációs tulajdonságokat láthatunk a PEM membránok esetén, a TFC membránokkal ellentétben.

Ciklodextrin-glikoziltranszferáz enzim előállítása különböző fermentációs technikákkal

Production of cyclodextrin glycosyltransferase enzyme with different fermentation techniques

Czinkóczky Réka, Németh Áron

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

H-1111 Budapest, Műegyetem rpt. 3.

Összefoglaló/ Summary

A ciklodextrin-glikoziltranszferáz (CGTáz) által előállított ciklodextrineket (CD) széleskörűen alkalmazzák a gyógyszeriparban a gyógyszerhatóanyagok oldhatóságának javításánál és az oxidáció elleni védelem során. Az enzim használata a kozmetikai iparban is jelentős. A CGTáz enzim az α-amiláz enzimcsalád tagja, amely a nem-Leloir glikoziltranszferázok csoportjába tartozik. Az enzim katalizálta transzglikozilációs reakciók során ciklizációs, összekapcsolási és diszproporcionálási folyamatok mehetnek végbe. A CGTáz enzimet leginkább ciklodextrinek előállítására használják fel. A CGTáz enzim aktivitása során állítja elő a különböző méretű, az alkotó glükopiranóz egységek számától függően (6, 7 és 8 egység), α-, β- és γ-CD-eket a transzglikozilációs reakció során. [1]

A CGTáz enzimet biokonverziókhoz is fel lehet használni. Ilyen példa az alternatív édesítőszerek fejlesztése, ahol is a szteviol-glikozidok enzimes biokonverziója során a termék keserű utóíze csökken, ezáltal egy még édesebb és kedvezőbb tulajdonságokkal rendelkező anyagot kaphatunk. [2]

Kutatásom során CGTáz enzimet állítottunk elő különböző fermentációs technikákat felhasználva annak érdekében, hogy az egyes eljárások során termelt CGTáz enzimek aktivitását és mennyiségét összehasonlítsuk a későbbiekben tervezett léptéknöveléshez. A vizsgálatok során *Bacillus licheniformis* DSM13 törzset használtam, amely extracellulárisan termelte a CGTáz enzimet. A kísérletek során a szakaszos, a rátáplálásos szakaszos, valamint egy félfolytonos fermentációs technikát hasonlítottam össze enzimtermelés szempontjából. Az összes termelési eljárást 1 l-es asztali laboratóriumi fermentorban végeztem el.

Köszönetnyilvánítás: A kutatási munka a Richter Gedeon Nyrt. által létrehozott Richter Gedeon Talentum Alapítvány támogatásával, Richter Gedeon PhD ösztöndíj keretében készült.

Cyclodextrins produced by cyclodextrin glycosyltransferase (CGTase) are widely used in the pharmaceutical industry to improve the solubility of drug substances and also protect them against oxidation. The use of the enzyme in the cosmetics industry is also significant. CGTase is an enzyme in the α-amylase family, which is belonging to the group of non-Leloir glycosyltransferases. The enzyme catalysed transglycosylation reactions may involve cyclization, coupling, and disproportionation processes. The CGTase enzyme is mostly used to produce cyclodextrins (CD). CGTase can produce α-, β-, and γ-CDs during the transglycosylation reaction, depending on the number of involved glucopyranose units (6, 7 and 8 units). [1]

The CGTase enzyme also can be used for the enzymatic bioconversion. An example of this is the development of alternative sweeteners, where the bitter aftertaste of the product is reduced during the enzymatic bioconversion of the steviol glycosides, thereby obtaining an even sweeter and more advantageous material. [2]

In my research, we produced CGTase enzyme using different fermentation techniques to compare the activity and amount of CGTase enzymes produced in each process for the subsequent planned scale up. In our studies, *Bacillus licheniformi*s strain DSM13 was used, which produced the CGTase enzyme extracellularly. During the experiments the batch, fed-batch and semi-continuous fermentation techniques were compared for enzyme production. All cultivation processes were carried out in a desktop lab scale fermenter.

Acknowledgement: This work was supported by the Richter Gedeon Talentum Foundation, founded by Richter Gedeon Plc (Richter Gedeon PhD fellowship).

[1] Veen, B. A. Van Der, Alebeek, G. W. M. Van, Uitdehaag, J. C. M., Dijkstra, B. W. "The three transglycosylation reactions catalyzed by cyclodextrin glycosyltransferase from Bacillus circulans (strain 251) proceed via different kinetic mechanisms", *665*, pp. 658–665. 2000.

[2] Li, S., Li, W., Xiao, Q. Y., Xia, Y. "Transglycosylation of stevioside to improve the edulcorant quality by lower substitution using cornstarch hydrolyzate and CGTase". *Food Chemistry*, *138*(2–3), pp. 2064–2069. 2013. DOI:10.1016/j.foodchem.2012.10.124

Digitális iker a gyártási folyamat optimalizációban

Digital Twin in process-flow optimization

Dániel Csereklei, Tamás Ruppert, János Abonyi

MTA-PE Lendület

Komplex Rendszerek Figyelemmel Kísérése Kutatócsoport

Összefoglaló

Napjaink egyik legmeghatározóbb jelensége a rohamosan gyorsuló technológiai fejlődés, mely hatásásra a termelő- és ellátó láncok nem csak hatékonyabbá, hanem egyre komplexebbé is. válnak, komoly kihívásokat támasztva a rendszereket üzemeltető és optimáló szakemberek elé. A versenyképesség megőrzése érdekében a gyáraknak rugalmasnak kell lenniük, a változásokra gyorsan kell reagálniuk. Ezen célok érdekében a jövő gyárainak alkalmaznia kell a kibontakozóban lévő és széleskörűen terjedő Ipar 4.0 vívmányait. Ennek technológiai alapját az úgynevezett kiber-fizikai rendszerek (cyber-physical system - CPS) alkotják, melyen az informatikai, szoftvertechnológiai, valamint mechanikai- és elektronikai elemek egységbe kapcsolását értjük. A kommunikációt az összekapcsolt elemek között az IoT (Internet of Things), azaz a dolgok internete teszi lehetővé. A kiber-fizikai rendszer része a beltéri pozícionáló rendszer (RTLS – realt-time location system) is, melynek segítségével valós időben tájékozódhatunk a gyártósoron zajló eseményekről. A kiber-fizikai rendszerek új kapukat nyitnak a folyamat szimuláció területén is. A szimulációs vizsgálatok során alkalmazott modelleket közvetlenül a gyártósorról, a terméktől kapott adatokkal paraméterezhetjük, így gyártásütemezési feladatokat végezhetünk, fejlesztési javaslatokat elemezhetünk és értékelhetünk, mielőtt bármilyen változtamtást hajtanánk végre a valós környezetben. Ehhez azonban nagyszámú és releváns információt kell kinyernünk a vizsgálni kívánt folyamatokból. Kutatásunkban ennek gyakorlati megvalósíthatóságát vizsgáltuk, módszertanunkat a már említett RTLS szenzorokkal felszerelt termékekre és gyártórendszerre alapoztuk. A pozíció- és rezgésadatok feldolgozásával azonosítottuk az egyes megmunkáló állomások helyét, valamint a hozzájuk tartozó termék specifikus szerelési időket. Ezeket az adatokat a szimulációba integráltuk és létrehoztunk egy dinamikusan felépülő és adaptívan működő modellt, vagyis a gyártósor valós idejű digitális mását (Digital Twin). A létrejött módszertan és keretrendszer fontos jellemzője, hogy ezáltal elérhetővé válik a folyamat automatikus szenzor alapú leképezése. Ez lehetővé teszi, hogy szimulációk futtatásával megtaláljuk az optimális lehetőségeket például a gyártás és karbantartások ütemezésére, vagy akár váratlan gyártásközi esemény esetén a gyártás lehető legkisebb kiesés melletti átszervezésére. A korszerű folyamat szimulációs módszerek tehát jelentősen segítik a „Mi lenne ha…” típusú kérdések gyors és hatékony megválaszolását.

Summary

Accelerating technological development opens new gates for the industries. Manufacturing is becoming more and more complex, and the factories need to be extremely flexible and respond quickly to changes. To achieve these goals, the factories of the future will have to apply the Industry 4.0 achievements, so they will have to become Smart Factory. This concept means an environment, in which the manufacturing and equipment organize themselves, even without human intervention. The cyber-physical system means: the integration of IT, software technology, mechanical and electronic components, and the connected elements communicate by the IoT (Internet of Things). This concept is the base elements of our methodology. Collecting a large number of relevant information is needed to analyze the processes. Our research is based on manufacturing systems with RTLS (Real-time location system) sensor networks. Position and accelerating data can be identified the location of the machining station, the product-specific process times and the process flow. The Digital Twin is the digital copy of the production system. The Real-time Digital Twin is based on an adaptive model, where the explored information is integrated into the simulation software, and this is automatically created. The adaptive process simulation will be available with the developed methodology, thanks for the process- and data mining techniques and RTLS data. This allows the simulation to find optimum solutions, such as scheduling production or even reorganizing production in the event of an unexpected interruption. The modern process simulation methods can help you quickly and efficiently answer the "What if…" questions.

Irodalmi áttekintés

A gyártóiparban a folyamatosan megjelenő egyre nagyobb termékválasztékkal párhuzamosan a költségeket folyamatosan csökkenteni kell. A trend az elmúlt időszakban azt mutatja, hogy az általánosságban vett tömeggyártás egyre inkább a háttérbe szorul és helyét átveszik az egyéni vevői igényekre szabott termékek széles választéka [1]. A gyártásnak, a logisztikának és a mérnökségnek is egy folyamatosan bővülő, rendkívül komplex gyártási rendszert kell átlátniuk és folyamatosan azonnal kell beavatkozniuk. Ezen döntéseket már nem elég hagyományos módszerekkel megtámogatni, hanem szükséges egy olyan eszközkészlet, amivel a döntések tesztelhetők és validálhatók. Ezeknek az eszközöknek megbízhatónak, valós idejűnek és pontos leképezésnek kell lenniük. A döntések támogatására széles körben vezetik be a szimulációs módszertanokat [2,3].

Az iparban kiemelt szerepe van az eseményvezérelt szimulátoroknak (DES - Discrete event simulator) [4]. A DES modell állapotváltozók és események hálózata, melyben az állapotváltozók diszkrét időközönként változtatják állapotukat. A rendszer állapotváltozása valamilyen változást idéz elő a rendszer erőforrásaiban, ami lehet a rendszerben lévő anyag mozgatása, megmunkálása, összeszerelése, tárolása stb. Az Ipar 4.0 egyik alappillérének számító kiber-fizikai rendszerben központi szerepet kap az ú.n. digitális iker (Digital Twin) koncepció. Ez a fogalom felfogható úgy is, mint a szimulációk következő generációja, amely azontúl, hogy egy (az adott feladatnak megfelelő) nagy pontosságú reprezentációja az adott folyamatnak, berendezésnek, képes a vizsgált rendszerről beérkező szenzorokat feldolgozni és valósidőben feldolgozni a szimulációs vizsgálatok során.

A digitális ikreket legtöbbször olyan komplex folyamatok modellezésére hozzák létre, melyek teljes működését, pontos eredményeit kiemelten nehéz lenne megjósolni. A virtuális másként működő rendszer a gyártósorra szerelt szenzorok adatait – gépek viselkedési karakterisztikáit, termék sajátosságokat (méret, szín, összetétel stb.), vagy éppen a gyár működési körülményeit – folyamatosan, valós időben gyűjti és elemzi. Az így gyűjtött adathalmazból pedig idővel betekintést enged az adott folyamat működési anomáliáiba, esetleg a termelés szempontjából előnytelen trendekbe [5,6]. A digitális iker koncepcióhoz elengedhetetlen, hogy a rendszerből kinyerjük a releváns adatokat valós időben. Az Ipar 4.0 koncepciója magában foglalja a dolgok hálózatosítását, kiber-fizikai rendszerbe csatolását.

A dolgok internete (IoT - Internet of Things) elérte a gyártó vállalatokat is (ipari dolgok internete - IIoT Industrial Interne of Things), ezáltal az eddig is használt szenzoradatokon túl - amelyek a gép kritikus paramétereit mérték és ellenőrizték - megjelentek olyan információk is a gyártásról, amelyek gyűjtése eddig túl magas költségekkel jártak volna. Ide sorolhatók pl. a gyorsulási szenzorok, amelyekkel rezgésdiagnosztikákat és további viselkedéseket lehet vizsgálni. A szenzoradatokon túl szükséges magáról a munkadarabról, félkész termékről is a folyamatos információ. Amennyiben minden megmunkált darabról tudjuk, hogy melyik időpillanatban, melyik munkaállomáson tartózkodott, akkor már összetudjuk kapcsolni a szenzoradatokat magával a termékkel is.

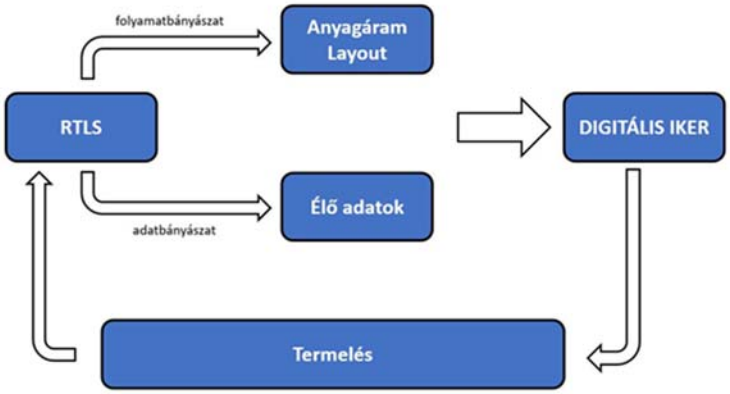
A valós idejű helymeghatározó rendszer (Real-time location system - RTLS) az egyik olyan technológia, amely észleli az adott objektum jelenlegi földrajzi elhelyezkedését általában épületen vagy valamilyen zárt területen belül [7]. Ez az objektum lehet egy járműtől kezdve a gyárban lévő terméken át, akár egy személyig is. Ezt a lokalizációs rendszert egyre szélesebb körben használják, beleértve az ellátási lánc menedzsmentet, az egészségügyi ellátást, a katonai, kiskereskedelmi, postai és futárszolgálatokat [8-10].

Az egyre növekvő számú adathalmaz gyűjtésén túl komplex feladat ezeknek az adatoknak a hatékony feldolgozása és vizualizációja is. Az elmúlt évtizedek rengeteg sikeres adatbányász projekt és cég jött létre a bank szektorban. Az ipari adatok megjelenésével új kihívások és területek nyíltak meg ezen a területen. Az irodalomban több áttekintő cikket találni, amelyek kifejezetten a gyártásban alkalmazható adatbányászati megoldásokat tekinti át. Ilyenek többek között a termelési rendszerek, karbantartás, döntés támogatás és a minőségbiztosítási fejlesztések [11]. A folyamatmodellek eseménynapló alapú identifikálása nem egyszerű feladat. Ennek oka egyrészt a terjedelmes adatmennyiség, másrészt a folyamatok bonyolultság. Ezen komplex feladat megoldására alakult ki az adatbányászat egy speciális ágaként a folyamatbányászat tudományterülete. A folyamatbányászat [12] egy olyan technika, amellyel eseménynaplókból strukturált folyamatleírást készíthetünk, abból a célból, hogy feltárjuk, monitorozzuk és javítsuk a már meglévő valós folyamatainkat. A digitális iker másik fontos adatkészlete az egyes folyamatlépések megmunkálási ideje. Ezeket az időket feltárhatjuk a rezgésdiagnosztika segítségével a gyorsulási szenzoradataira hagyatkozva.

Munkánk során egy olyan eszközrendszert és módszertan dolgoztunk ki, amely a szenzoradatokon alapuló automatikus modell építéssel és paraméterezéssel elősegíti a folyamat szimulációs eszközök alkalmazását ipari környezetben. A következő fejezetben bemutatjuk ennek a módszertannak az alapjául szolgáló RTLS rendszer adatait és azok feldolgozásának módszertanát, majd egy ipari esettanulmányon mutatjuk be a felhasználhatóságát.

Adaptív folyamat szimuláció

Folyamat- és adatbányászati eszközök felhasználásával a már meglévő, valamint a RTLS által kapott adatok felhasználásával széleskörű információhalmazt lehet az adott gyártórészlegről feltárni. Ezáltal lehetőség nyílik a gyártósor és környezetének folyamatos monitorozására, és a digitális iker szenzoradatokon alapuló generálására, adaptív működtetésére, melynek segítségével a megfelelő visszacsatolásokon keresztül hatékonyan irányíthatjuk a termelést (1.ábra).



1. ábra. A digitális iker generálásának folyamata. A szimuláció két fő bemenete az anyagáramlás (folyamat modell) és az egyes lépések paraméterei, melyek az RTLS online adatain alapulnak, ezáltal egy folyamatosan naprakész szimulációt hozunk létre, amely segíti a termelési folyamatok optimálását.

A termelési paraméterek, elrendezések gyakran változnak, ezért fontos, hogy a szimulációs modelleket, eszközöket úgy kell megalkotni, hogy azok a lehető legkevesebb módosítással és rövid idő alatt igazíthatók legyenek az esetleges változásokhoz. Ennek érdekében a jövő folyamatszimulációs modelljeinek az alábbi szempontoknak kell megfelelnie:

- A paramétereket MES-ből (Manufacturing Execution System) kell feldolgoznia
- A modell struktúráját és az anyagáramlást valós időbeni szenzoradatokon alapulva kell feldolgoznia
- A modell elemeinek automatikusan generálhatónak és objektum-orientáltnak kell lennie

A módszertan kidolgozása során az autóipari esettanulmányban vizsgált egyedi megmunkáló gyártócellák területén kiépített RTLS rendszert tekintettük. A rendszer pozíció- és gyorsulásadatokat rögzít konfigurálható frekvencián. Ezeket az adatokat ú.n. TAG-el méri, amelyeket felhelyezhetünk bármilyen a vizsgált területen elhelyezkedő eszközre, tárgyra, de akár személyre is. Esetünkben ezeket a TAG-eket két csoportra osztjuk, attól függően, hogy milyen eszközre helyeztük fel azokat: fix- és mozgó TAG.

A fix TAG-ek a gyártócellákon, míg a mozgó TAG-ek a gyártott terméken kerülnek rögzítésre. A fix TAG-ek feladata kettős, egyrészt meghatározzák a gyártócellák pontos helyét a csarnokban (pozícióadatok), másrészt a rezgésekből (gyorsulásadatok) következtethetünk a gép működésére. A mozgó TAG-ek végigkísérik a munkadarabokat a folyamat elejétől egészen a csomagolásig, és folyamatosan információt szolgáltatnak annak pontos helyéről. A munkaállomásokon lévő fix TAG-ek rezgéseiből következtethetünk arra, hogy az adott eszköz dolgozik-e éppen. Ezt az információt pedig párosítjuk az éppen megmunkált munkadarab adataival (a munkadarabon lévő mozgó TAG segítségével). Erre alapozva lehetőség nyílik termékspecifikus szerelési idők mérésére.

A munkadarabokra felhelyezett TAG-ek segítségével feltárható és folyamatosan megfigyelhető a gyártási rendszer pontos folyamata, anyagáramlása. Pozíció adatokon alapulva minden egyes legyártott termékről pontos információnk van, hogy melyik munkaállomásokon került feldolgozásra. Így valós képünk lesz az ezek a munkaállomások közötti kapcsolatról is. Ezen adatok alapján a gyártási folyamatmodell feltárható RTLS alapon, folyamatbányászati eszközökkel.

A folyamatszimulációra a Siemens Plant Simulation szoftvert javasloljuk, mely egy diszkrét eseményvezérelt szimulációs rendszer [13]. A szoftver objektum-orientált, tehát az egyes gyártócellákat azok minden sajátosságával együtt önálló objektumként tudja modellezni. Így amikor egy gyártósor modellje kerül felépítésre, elegendő csupán megadni az objektum egyedi azonosítóját és a cella helyének koordinátáit. A szoftver tulajdonságait figyelembevéve a pozíció és gyorsulásadatokon feltárt anyagáramlás, folyamatmodell és szerelési idők alapján már generálható a gyártósor szimulációs modellje. A következő fejezetben egy előkészítő gyártási területen mutatjuk be a kidolgozott módszertan használhatóságát.

Gyártócellák adatokon alapuló szimulációja

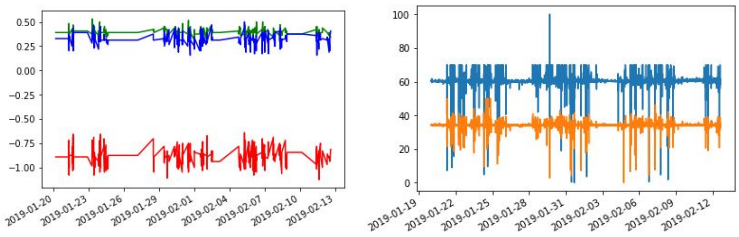
A kidolgozott keretrendszert egy autóipari beszállító gyártóterületén alkalmaztuk, ahol egyedi megmunkáló állomások helyezkednek el és a gyártás batch rendszerben történik. A folyamat az előgyártmány tárolótól indul, ahonna három szerelőasztalon kerülnek elosztásra melyeken azonos műveleteket végeznek. Majd ideigelenes tárolóra kerülnek, ami után gépi megmunkáláson esnek át és végül ismét a három szerelőasztalon készülnek el és kerülnek a késztermék tárolóra (5. ábra).

A vizsgálat során rezgés-, valamint pozícióadatok álltak rendelkezésünkre, melyekből egy mintahalmaz a 2. ábrán látható. Az ábráról leolvasható, hogy a 1263-as azonosítójú TAG két dimenziós pozíció és három irányú gyorsulás adatait tartalmazza.

TagID	1263		Gyorsulás		
Dátum	X pozíció	Y pozíció	X	Y	Z
2018.12.10 14:39	51,9855	34,7755	61	7	0
2018.12.10 14:38	52,0075	34,7721	61	8	0
2018.12.10 14:38	52,0659	34,7448	61	7	0
2018.12.10 14:37	51,9845	34,7827	61	7	0
2018.12.10 14:37	52,0389	34,8596	61	7	0
2018.12.10 14:37	52,1387	34,8836	63	9	10
2018.12.10 14:37	52,141	34,838	61	7	1
2018.12.10 14:37	52,0877	34,8686	61	6	0
2018.12.10 14:37	52,0817	34,8325	59	7	4

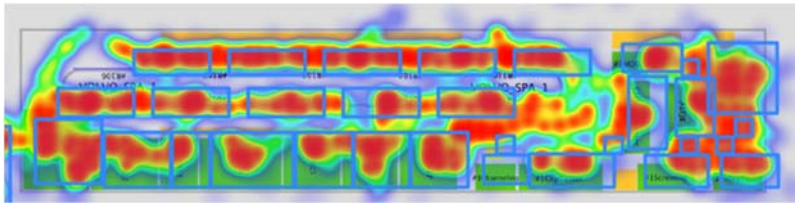
2. ábra. Pozíció és rezgésadatok táblázata. A pozíció adatok két dimenzióra vonatkoznak, míg a gyorsulási adatok lefedik, mind a három dimenziót.

A rezgésadatokból tudjuk feltárni az adott munkaállomás működését, ehhez a gyorsulási adatok kilengéseit vesszük alapul és egy meghatározott (gép specifikus) küszöb segítségével döntünk, hogy az adott gép éppen üzemel, vagy pedig áll. Egy TAG gyorsulás-, valamint pozíció adatait mutatja a 3. ábra.



3. ábra. Gyorsulás- (baloldal), és pozícióadatok (jobboldal). Látható, hogy megkülönböztethetünk két külön sávot a frekvenciák alapján, a kis kitérések jellemzik a gépállást, míg a nagyobb kilengések a működést.

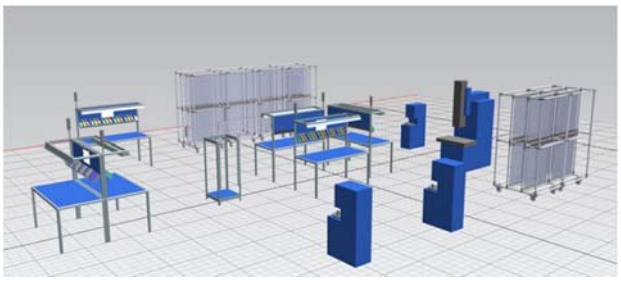
Az egyes zónákban töltött idők alapján a szerelési időket is azonosítottuk. A gyűjtött adatokat hőtérképen ábrázolva jól látható, hogy mely helyeken töltötték el a legtöbb időt a gyártósoron (4.ábra). A munkadarabok adatainak feldolgozására folyamatbányászatot alkalmaztunk, a PROM szoftver segítségével [14]. Az így feltárt anyagáramlást Excel táblába gyűjtöttük, majd a Plant Simulation szimulációs szoftverben fejlesztett keretrendszer segítségével importáltuk. Az anyagáramlást definiáló táblázat első oszlopában az aktuális állomás neve található, mellette a termékek melyek az állomáson áthaladnak, az utolsó oszlopban pedig a célállomás.



4. ábra. Szerelési idők eloszlása, jól láthatók a szerelési nagyobb csomópontok. Ezek az adatok alapján tudunk szerelési időket becsülni.

A Plant Simulation saját programnyelvében fejlesztett rendszerünk a bemeneti adatok (állomások pozíció adatai, anyagáramlás, szerelési idők) alapján automatikusan generálja a modellt, melyhez az egyes folyamatok ideje szintén szükséges. Az adott megmunkáló állomás és a termék típusának megfelelő szerelési időket tártuk fel a pozíció- és rezgésadatok segítségével. Az automatikusan feltárt és paraméterezett szimulációs modellel (5. ábra) lehetőség nyílik olyan feladatok megoldására, mint:

- layoutok automatikus optimálása
- erőforrás optimalizálás
- gépkihasználtság növelés
- folyamatoptimalizálás



5. ábra. A vizsgált terület Plant Simulation modellje. A modell automatikusan generálható és futtatható, így mindig valós képet kapunk a szenzoradatokon alapulva.

Összefoglalás

Kutatásunk során kidolgoztunk egy módszertant, melyben a digitális iker generálását valósidejű szenzoradatokra alapoztuk. A gyártósorról érkező pozíció és rezgésadatok feldolgozásával információt nyertünk a munkaállomások helyéről, működéséről, valamint a gyártási anyagáramlásról. Ezeket az adatokat szimulációs szoftverbe importáltuk, létrehoztuk a gyártósor adaptív mását a digitális ikert, mellyel a gyártás valós időben monitorozható és a változások dinamikusan kezelhetők.

Köszönetnyílvánítás

A publikáció a 2018-1.3.1-VKE-2018-00048 azonosító számú „Meglévő üzemekbe implementálható intelligens termelésoptimalizáló Ipar 4.0. megoldások fejlesztése” című projekt keretében készült.

Irodalomjegyzék

[1] Pil, Frits K and Holweg, Matthias, *Linking product variety to order-fulfillment strategies*. Informs, 394-403 (2004)

[2] Klingstam, Par and Gullander, Per, *Overview of simulation tools for computer-aided production engineering*, Elsevier, 173-186 (1999)

[3] Pegden, C Dennis, *Advanced tutorial: overview of simulation world views*, Winter Simulation Conference, 210-215 (2010)

[4] Misra, Jayadev, *Distributed discrete-event simulation*, ACM, 39-65 (1986)

[5] Uhlemann, Thomas H-J and Lehmann, Christian and Steinhilper, Rolf, *The digital twin: Realizing the cyber-physical production system for industry 4.0*, Elsevier, 335-340 (2017)

[6] Boschert, Stefan and Rosen, Roland, *Digital twin—the simulation aspect*, Springer, 59-74 (2016)

[7] Mautz, Rainer, *Overview of current indoor positioning systems*, Taylor and Francis, 18-22 (2009)

[8] Boulos, Maged N Kamel and Berry, Geoff, Real-time locating systems (RTLS) in healthcare: a condensed primer, BioMed Central, 1-25, 2012

[9] Li, Heng and Chan, Greg and Wong, Johnny Kwok Wai and Skitmore, Martin, *Real-time locating systems applications in construction,* Elsevier, 37-47 (2016)

[10] Tamás Ruppert, Szilárd Balaskó, Tibor Holczinger, János Abonyi, *Enabling Technologies for Operator 4.0: A Survey*, MDPI, 1-19 (2018)

[11] Harding, JA and Shahbaz, M and Kusiak, A and others, *Data mining in manufacturing: a review*, American Society of Mechanical Engineers, 969-976 (2006)

[12] Wil M.P. van der Aalst, *Process Mining*, Springer, Book (2011)

[13] Steffen Bangsow, *Tecnomatic Plant Simulation*, Springer, Book (2015)

[14] Van Dongen, Boudewijn F and de Medeiros, Ana Karla A and Verbeek, HMW and Weijters, AJMM and van Der Aalst, Wil MP, *The ProM framework: A new era in process mining tool support*, Springer, 444-454 (2005)

Hibadiagnosztikai és strukturális megfigyelhetőség szempontjából optimális szenzorhálózat tervezése hőcserélő hálózatokban

Fault Detection and Structural Observability based Optimal Sensor Placement for Heat Exchanger Networks

Dörgő Gyula, Abonyi János

MTA-PE Lendület Komplex Rendszerek Figyelemmel Kísérése Kutatócsoport
Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló

Habár a tárgyak internete (*Internet of Things*) forradalomnak köszönhetően a vegyiparban alkalmazott szenzorok száma jelentős növekedési tendenciát mutat, továbbra is alapvető problémának számít, hogy mely technológiai változókat mérjük és hova kerüljenek a szenzorok annak érdekében, hogy a szenzorhálózat robosztus és költséghatékony módon biztosítsa a folyamatok kézbentartását. Ez a probléma kiemelten fontos a hőcserélő hálózatokhoz hasonló, integrált technológiai felépítésű rendszerekben. Munkánk során a hibadiagnosztikai szempontból robosztus hálózatok tervezésére egy többcélú optimalizálási megoldáson alapuló szenzor elhelyezési módszertant dolgoztunk ki, mely a hálózatok megtervezése során figyelembe veszi a technológia struktúráját és a hőcserélők dinamikus modelljét. A fejlesztett algoritmus a hálózatelméletben elterjedt módon az állapottér modell irányíthatósági és megfigyelhetőségi elemzésén alapul. Felismerve a szenzorelhelyezés során definiált célok gyakran versengő és ellentmondó jellegét, többcélú optimalizálási feladatként definiáltuk a problémát, ahol a főbb optimalizálási célok a hálózat költsége és megfigyelhetősége, illetve hibadetektálhatósága, valamint a mérleghiba-kiegyenlítés pontossága voltak. Az optimalizálás során a széles körben elterjedt Non-dominated Sorting Genetic Algorithm-II (NSGA-II) genetikus algoritmust alkalmaztuk, a módszertan hatékonyságát pedig több mintaalkalmazáson keresztül mutatjuk be.

A kutatást támogatta a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alap az OTKA–116674 pályázaton keresztül (Természettudományos kutatás és technológiafejlesztés folyamatbányászati és deep learning algoritmusokkal).

AZ EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTÉRIUMA ÚJ NEMZETI KIVÁLÓSÁG PROGRAMJÁNAK TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT

Summary

Although thanks to the IoT revolution, the number of sensors in chemical production plants is increasing significantly, it is still a crucial problem what to measure and how to place the sensors as such the resulted sensor network be robust and cost-effectively provide the required information. This problem is especially relevant in integrated heat exchanger networks (HENs). For the fault detection and isolation-relevant design of sensor networks, we propose a multiobjective sensor placement methodology that utilizes the advantages of the structural properties of the dynamic models of heat exchangers. The algorithm is based on the network-science based controllability and observability analysis of the state-space model of the network. Realizing the often conflicting nature of the key objectives of sensor placement, the problem is formulated as a multi-objective optimization task taking into consideration the cost, estimation accuracy, observability and fault detection performance of the designed networks and simultaneously seeking for the optimal solutions for fault detection, isolation, and state estimation performance. The effectiveness of the Non-dominated Sorting Genetic Algorithm-II (NSGA-II)-based solution of the defined problem is demonstrated through benchmark examples.

The research has been supported by the National Research, Development and Innovation Office - NKFIH, through the project OTKA-116674 (Process mining and deep learning in the natural sciences and process development)

SUPPORTED THROUGH THE NEW NATIONAL EXCELLENCE PROGRAM OF THE MINISTRY OF HUMAN CAPACITIES

Terápiás antitestek ioncserés elválasztásának lehetőségei

Possibilities of ion-exchange separation of monoclonal antibodies

Farsang Evelin[1], Fekete Szabolcs[2], Horváth Krisztián[1]

[1]Pannon Egyetem, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10
[2]University of Geneva, 1211 Geneva 4, Rue Michel Servet 1., Svájc

Összefoglaló

A terápiás monoklonális fehérjék kationcserés elválasztása (Cation Exchange Chromatography, CEX) általában klasszikus só- (2-morfolino-etánszulfonsav (MES) puffer + NaCl) vagy kereskedelmi forgalomban kapható pH-gradiens puffer alkalmazásával valósítható meg. Munkánk célja olyan alternatív puffer rendszerek kifejlesztése volt monoklonális antitestek nagyhatékonyságú folyadékkromatográfiás (HPLC) CEX elválasztásához, amivel megfelelő szelektivitás és csúcsalak érhető el. A vizsgált puffer rendszerek közül a (MES)/1,3-diamino-2-propanol (DAP) és a citromsav/2-(ciklohexilamino)etánszulfonsav (CHES) bizonyultak ígéretesnek, főleg enyhe, nátrium-kloriddal létrehozott só-gradiens alkalmazásával. A MES/DAP puffer rendszerrel lineáris pH-gradiens állítható elő $5 \leq pH \leq 10$ tartományban, míg a citromsav/CHES rendszer kisebb, $3 \leq pH \leq 9$ tartományban használható. Az ezzel a két puffer rendszerrel elérhető elválasztás teljesítményjellemzői összemérhetők a hagyományosan alkalmazott mozgófázisokéval.

Célunk volt továbbá, hogy pH- és só-gradiens együttes alkalmazása során meghatározzuk az elválasztáshoz szükséges optimális paramétereket. Vizsgáltuk a hőmérséklet, a B eluens sótartalmának és a pH-gradiens meredekségének hatását emésztett antitestek retenciós viselkedésére. A három paraméter közül a hőmérsékletnek nincs hatása a fehérjék ioncserés viselkedésére, így a só koncentráció és a gradiens program változtatásával, 6 kezdeti mérésre alapozva ($2\ t_G \times 3c_s$) optimalizáltuk a módszert. Egy modellező szoftver (DryLab) segítségével lehetőség van a monoklonális antitestek CEX elválasztásának megtervezésére 6 óra alatt.

Teranosztikai és terápiás gyógyszerhordozó nanorészecskék

Theranostic and therapeutic nanoparticles for drug delivery

Feczkó Tivadar

[1]*MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag-és Környezetkémiai Intézet*
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

[2]*Pannon Egyetem, Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet*
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló

Az ideg növekedési faktor (NGF) a kolinergiás neuronok legfontosabb növekedés-stimuláló faktora, eképp az Alzheimer-kór kezelésének ígéretes ágense. Továbbá fontos szerepet játszik a sejt-regenerálásban agyi sztrók után. Azonban az NGF transzportja az agyba elhanyagolható mértékű a vér-agy gáton keresztül. Sztrók kezelése érdekében deszolvatációval NGF-et és cérium-ammónium-nitráttal stabilizált vas-oxid nanorészecskéket tartalmazó humán szérum albumin teranosztikus nanokompozitot állítottak elő. A részecskék felszínét apolipoprotein E-vel funkcionalizálták, hogy az agyi aktív transzportot lehetővé tegyék. A formulálás optimalizálása, illetve fizikai és kémiai jellemzése után a nanokompozitokat in vitro és in vivo vizsgálatoknak vetették alá. A mikrokapszulázott NGF bioaktivitását és biokompatibilitását patkány mellékvesevelő-daganat sejtekben (PC12) igazolták, ugyanis a nanorészecskék neurit növekedést indukáltak, és nem mutattak szignifikáns citotoxicitást. Az NGF transzportját az agyba in vitro bEnd3 egér agysejteken igazolták. A nanohordozókat az U0126 kismolekulájú mitogén-aktivált protein kináz (MEK) gátlóval együtt hatékony kombinációt alkotott in vivo sztrók modellben.
A sorafenib multikináz inhibitor az FDA által kizárólagosan engedélyezett hatóanyag előrehaladott állapotú hepatocelluláris karcinóma (HCC) esetén, mely az ötödik leggyakoribb rosszindulatú rákfajta a világon. A sorafenib antitumor hatékonysága alacsony a gyógyszerrezisztencia miatt. A sorafenib nyújtott hatóanyagleadását biztosítani képes nanomedicinát állítottak elő hangolható polaritású, jól definiált vinil-alkohol kopolimer nanohordozóval nanoprecipitációs módszerrel. Bioreleváns in vitro vizsgálatban 24 órán át tartó nyújtott hatóanyagleadást értek el. A sorafenib hordozó nanorészecskék koncentráció-függő citotoxicitást mutattak HT-29 humán rák sejtvonalban.

Summary

Nerve growth factor (NGF) is the most important growth stimulating factor of the cholinergic neurons and, hence it is a promising agent for treatment of Alzheimer's disease. It also plays a major role in cell regeneration after ischemic stroke. However, the delivery of NGF to the brain across the blood brain barrier is negligible. Human serum albumin theranostic nanocomposite containing NGF and cerium ammonium nitrate-stabilized iron oxide nanoparticles was prepared by desolvation for the treatment of stroke. The surface was functionalized by apolipoprotein E to enable the active transport of the drug into the brain. After formation optimization and physical and chemical characterization, the nanocomposites were evaluated in vitro and in vivo. Bioactivity and biocompatibility of microencapsulated NGF was confirmed in rat pheochromocytoma (PC12) cells, since the nanoparticles induced neurite outgrowth without exhibiting significant cytotoxicity. The transport of NGF into the brain was verified in vitro in bEnd3 mouse brain cell study. Effective combination of the nanocarriers with the small-molecular mitogen-activated protein kinase (MEK) inhibitor U0126 was shown in an in vivo model of stroke.
Sorafenib is a multikinase inhibitor that is the only one drug approved by the FDA against advanced hepatocellular carcinoma (HCC) which is the fifth most common malignant cancer in the world. The efficiency of sorafenib on tumor elimination is low due to drug resistance. Well-defined vinyl alcohol-copolymer with fine-tuneable polarity was used as nanocarrier to prepare nanomedicine for the sorafenib sustained drug release. The nanocomposites have been formed by nanoprecipitation. In in vitro biorelevant test the active agent release was sustained for 24 h. Sorafenib-loaded nanoparticles triggered concentration-dependent cytotoxicity in HT-29 human cancer cell line.

Köszönetnyilvánítás

A szerző köszönetet mond a GINOP-2.3.2-15-2016-00017 számú GINOP program és az Alexander von Humboldt Alapítvány (azonosítók: 3.3-UNG/1161203 STP, 3.3-1161203-HUN-HFST-E) támogatásáért.

Kukoricarost enzimes és savas frakcionálásának összehasonlítása bioetanol előállítás szempontjából

Comparison of enzymatic and acidic fractionation of corn fibre for bioethanol production

Fehér Anikó, Rozbach Margaréta, Bedő Soma, Fehér Csaba

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszeripari Tanszék
Biofinomító Kutatócsoport
1111 Budapest, Műegyetem rakpart 3-9.

Összefoglaló

A kukorica nedves őrléses feldolgozásából származó kukoricarost ideális alapanyag lehet számos értéknövelt termék biofinomító koncepcióban történő előállítására. Fő összetevője a lignocellulóz (41,2% hemicellulóz, 16,8% cellulóz, 7,9% Klason lignin), de emellett jelentős mennyiségű keményítőt (17,8%) is tartalmaz. Jelen tanulmányban kísérleti munkánk célja a kukoricarost cellulóz tartalmából történő bioetanol előállítás. Kukoricaroston enzimes és kétlépcsős savas frakcionálást [1] végeztünk glükózban gazdag hidrolizátum előállítása céljából. A kétlépcsős savas hidrolízist követő Cellic CTec 2-vel végzett enzimes cellulóz hidrolízis során 64g/L glükózt tartalmazó hidrolizátumot állítottunk elő. Az enzimes frakcionálás 25 g/L glükóz tartalmú hidrolizátumot eredményezett. Etanol fermentációt végeztünk a kétlépcsős savas hidrolízist követő cellulóz enzimes hidrolízisével előállított hidrolizátumon *Saccharomyces cerevisiae*-vel (*Lesaffre, Hungary)* és *Candida boidinii*-vel *(NCAIM Y.01308, Budapest)* két konfigurációban. Az alkalmazott két konfiguráció a szimultán cukrosítás és fermentáció (SSF, Simultaneous Saccharification and Fermentation) és a szeparált hidrolízis és fermentáció (SHF, Separated Hydrolysis and Fermentation) volt. Összehasonlítva a két törzzsel végzett fermentációt megállapítottuk, hogy a *Saccharomyces cerevisiae* gyorsabban fogyasztotta el a rendelkezésére álló glükózt, azonban a keletkezett etanol hozam megegyezett a *Candida boidinii*-vel végzett fermentáció hozamával (az elméleti maximum 79%-a).

Summary

Corn fibre is a by-product of the corn wet milling process and a promising raw material to produce bioethanol in bio-refinery concept. Enzymatic and acidic fractionations were performed on corn fibre to enhance the production of glucose-rich hydrolysates. After a two-step acidic fractionation [1] of corn fibre, cellulose hydrolysis on the solid residue resulted in a supernatant containing 64 g/L glucose, 3.8 g/L xylose and 0.4 g/L arabinose. The enzymatic fractionation process of corn fibre resulted in a glucose solution of 25 g/L. Therefore ethanol fermentation experiments were performed on the hydrolysate that is derived from cellulose hydrolysis after two-step acidic fractionation of corn fibre. The fermentations were faster in the case of *Saccharomyces cerevisiae (Lesaffre, Hungary)* compared to the fermentations by using *Candida boidinii (NCAIM Y.01308, Budapest)*, however, the amounts of produced ethanol were similar.

Keyword: Lignocellulocis biomass, Pretreatment, Bioethanol production

[1] C. Fehér, Z. Gazsó, B. Gál, A. Kontra, Z. Barta, and K. Réczey, “Integrated Process of Arabinose Biopurification and Xylitol Fermentation Based on the Diverse Action of Candida boidinii,” *Chem. Biochem. Eng. Q.*, vol. 29, no. 4, pp. 587–597, 2015.

TiO_2 módosítása nitrogénnel: egy látható fényben aktív fotokatalizátor

Nitrogen doped TiO_2: a visible light active photocatalyst

Fonyó Máté[a], Szabóné Bárdos Erzsébet[a], Horváth Ottó[a], Zsirka Balázs[b], Juzsakova Tatjána[b], Kristófné Makó Éva[c], Jakab Miklós[c]

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Általános és Szervetlen Kémia Intézeti Tanszék[a] Környezetmérnöki Intézet[b], Anyagmérnöki Intézet[c] 8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

A heterogén fotokatalízis évtizedek óta széleskörűen kutatott terület sokrétű alkalmazhatóságának köszönhetően. A katalizátorként leggyakrabban használt TiO_2 hatékonyan alkalmazható vízbontásra, víz- és légtisztításra, fertőtlenítésre és akár öntisztuló felületek létrehozására. A módszer hátránya, hogy a TiO_2 tiltott sávja széles, így a napfény energiájának csak kis hányadát tudja hasznosítani. Ahhoz, hogy a katalizátor látható fénnyel is gerjeszthető legyen, csökkenteni kell a gerjesztési küszöbenergia értékét. Elterjedt módszer, hogy különböző elemekkel adalékolják a TiO_2-ot, így a keletkező hibahelyek energiaszintjét kihasználva kisebb gerjesztési energia is elegendő az elektron-lyuk pár létrehozásához.

Munkánk során nitrogénnel módosított titán-dioxidot állítottunk elő titán(IV)-izopropoxid és tömény ammónia oldat alkalmazásával alacsony hőmérsékleten. A katalizátorok fázisösszetételét Raman spektroszkópiával és röntgendiffrakcióval vizsgáltuk. Diffúz-reflexiós színképek alapján meghatároztuk a gerjesztési küszöbenergia értékeket, valamint pásztázó elektronmikroszkóp segítségével vizsgáltuk az előállított minták morfológiáját. A katalizátorok fajlagos felületét N_2 adszorpciós-deszorpciós módszerrel mértük.

A fotokatalitikus lebontási kísérletekben modellvegyületként a kumarint alkalmaztuk. A fotoindukált folyamatokat a bevilágított oldatok fényelnyelési és emissziós színképének felvételével követtük.

A 450 °C-on kalcinált, csak anatáz módosulatot tartalmazó minták morfológiai vizsgálatakor egyes szemcsék SEM felvételein különleges, furatos szerkezet volt megfigyelhető. A nitrogénnel módosított katalizátor fajlagos felülete 49,9 m^2/g-nak adódott.

Az előállított N-TiO_2 jelentős aktivitást mutat látható fénnyel történő bevilágítás mellett: a 7-hidroxi-kumarin köztitermék kezdeti képződési sebessége több mint 10-szerese a referencia Degussa P25 TiO_2 esetén mért értéknek.

A kutatás az EFOP-3.6.1-16-2016-0001 projekt és az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-1 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság programjának támogatásával készült.

Forgócellás adagoló párhuzamos programozással támogatott diszkrételem módszer szimulációja

Parallel programming supported discrete element method simulation of rotary valve

Füvesi Balázs, Ulbert Zsolt

Pannon Egyetem

8200 Veszprém Egyetem u. 10.

Összefoglaló

Szilárd szemcsés anyagok silóból történő szabályozott elvételére a legelterjedtebb megoldás cellás adagolók alkalmazása, melyet nem csak a vegyiparban, de szinte minden olyan területén használnak, ahol szilárd, szemcsés anyagok adagolására van szükség, mint például gyógyszer-, élelmiszer-iparban, mezőgazdaságban, bányászatban, vagy akár szilárd tüzelésű erőműveknél stb. Mivel a cellás adagolókat szilárd anyagok kontrollált mozgatására használják, fontos, hogy azok működési paraméterei ismertek legyenek, jól irányíthatók legyenek.

A berendezések kísérleti vizsgálata sokszor nehézségekbe ütközhet, mivel a méréshez használt eszközök megváltoztathatják a berendezés működését. A Diszkrét Elem Módszer segítségével a szilárd szemcsés anyagok viselkedése hatékonyan szimulálható, vizsgálható, ugyanakkor a szemcsék számának növekedésével a számítási igénye jelentősen növekszik. A napjainkban egyre inkább fejlődő, viszonylag olcsón és egyszerűen elérhető sokszor HPC-s teljesítményre is képes videókártyák segítségével ezek a szimulációk a berendezés komplexitásától és részecskeszámtól függően gyorsan elvégezhetők, a korábbi soros végrehajtású programok több hetes futási ideje néhány órára rövidíthető párhuzamos végrehajtású programok alkalmazásával.

A kutató munka során forgócellás adagoló geometriai és műveleti paramétereinek hatását vizsgáltuk az adagoló tömegáramára. A cellás adagoló átmérőjének és fordulatszámának változtatásán kívül vizsgáltuk a siló kúpszögének hatását a tömegáramra. A fordulatszám változtatásával sikerült kimutatni egy lineáris tartományt, ami egy adott fordulatszám utána maximumot ér el, ennek fontos szerepe lehet a cellás adagolók irányításában. Valamint a vizsgálatok alapján egy adott tömegáram eléréséhez meghatározható egy optimális adagoló átmérő, aminél a tömegáram pontosan szabályozható. A szimulációkat általunk fejlesztett GPU-ra optimalizált szoftverrel végeztük.

Kulcsszavak: siló, forgócellás adagoló, szimuláció, diszkrételem módszer, DEM, párhuzamos programozás, GPU

Summary

The most common solution for controlled withdrawal of solid particulate materials from silos is the use of rotary valves, which are used not only in the chemical industry, but in almost all areas where solid, granular materials are frequently processed, such as pharmaceutical, food, agriculture, mining, or for solid fuel plants, etc. Since rotary valves are primary used to control of withdrawal of solids, it is important that their operating parameters and ranges are well defined.

The experimental studies of the equipment require extensive work, the results obtained from experiments are usually incomplete due to the limitation of measurement technique and the difficulties of placement of scientific measurement inside the equipment without changing its operation characteristics. Using Discrete Element Method, the behavior of solid particulate materials in the equipment can be effectively simulated and analyzed, although the number of particles increases, the computational demand increases significantly. Nowadays, with the development of relatively low-cost GPU cards, these simulations can be performed quickly depending on the complexity of the equipment and the number of particles, and the long running time of previous serial-executed programs can be advantageously shortened to a few hours using parallel programming.

In this research work, the effects of the geometric and operational parameters of the rotary valve on the mass outflow from the silo were investigated. We examined the effects of diameter, and rotation speed of the rotary valve and the silo half angle on the mass outflow. Increasing the rotation speed of rotary valve the mass outflow initially varies linearly with the rotation speed, which is a suitable range for control objectives, then the mass outflow reaches a maximum after a given rotation speed. In addition, an optimal rotary valve diameter can be determined at which the specified mass outflow can be the best controlled. The simulations were performed with our software developed and optimized for GPU.

Keywords: silo, rotary valve, simulation, discrete element method, DEM, parallel programming, GPU

Kísérletek a katódos védelem kinetikai kritériumának a kidolgozására

Experiments for the establishment of a kinetic cathodic protection criterion

Gősi Gabriella

Pannon Egyetem, Fizikai Kémia Intézeti Tanszék

8200. Veszprém, Egyetem utca 10.

Összefoglaló

A katódos védelem a korrózióvédelem egyik módszere, amit elsősorban földalatti fémszerkezetek (csővezetékek, tartályok) védelmére alkalmaznak. A katódos védelem tipikusan megbízható és robosztus, rosszul beállítva azonban hatástalan lehet, sőt felgyorsíthatja a korróziót. A katódos védelemnek több kritériumát ismerjük, ezek kivétel nélkül a rendszer potenciálviszonyaihoz kötődnek, és bizonyos esetekben ezeknek a kritériumoknak az alkalmazása mellett is súlyos korróziós károk keletkezhetnek. Az ilyen esetek megelőzése céljából egy olyan kritérium lehetőségét keressük, amely a rendszer kinetikai (áram-feszültség) és pH-viszonyait is figyelembe veszi.

A katódos védelemben a felületi pH értéke meghatározó, azonban a mérése valós terepi körülmények között gyakorlatilag lehetetlen, ugyanakkor a katódos polarizáció, ami a felület védelmét biztosítja a folyamat során, a felület pH-ját bizonyítottan a lúgos irányba tolja el. Kísérleteimben azt vizsgáltam, hogy a felület pH-ja, áram- és potenciálviszonyai, valamint impedancia spektroszkópiai paraméterei hogyan alapozhatnak meg egy új katódos védelmi kritériumot.

Summary

Cathodic protection is a technology for protecting underground metal structures (tanks and pipelines) from corrosion. Cathodic protection is typically a robust technology, but in case of improper settings it can be inefficient or even harmful. A number of cathodic protection criteria have been established in the past decades, but these are all potential-related ones and, unfortunately, in some cases serious damages have developed on protected structures, in spite of meeting the respective criteria. In order to avoid such cases, research is focused on the possibility of a kinetic-based (current-potential) criterion also considering the pH of the protected surface.

In cathodic protection the surface pH is an important factor, but its measurement under field/plant conditions is practically impossible. This is a serious problem because the cathodic polarization is proven to shift the pH of the surface towards the alkaline range. In my experiments I studied the possibility of a new cathodic protection criterion based on the surface pH, current-potential characteristics and impedance spectroscopy measurements.

Bevezetés

A katódos védelem a korrózióvédelem egyik módszere, amit elsősorban földalatti fémszerkezetek (csővezetékek, tartályok) védelmére alkalmaznak. Lényege, hogy a védendő objektumot egy egyenáramú áramforrás negatív kivezetésére kapcsolják, és az áramkört egy alkalmasan megválasztott földelőanódon keresztül zárjuk. A katódos védelem tipikusan megbízható és robosztus, rosszul beállítva azonban hatástalan lehet, sőt felgyorsíthatja a korróziót. Ezekben az estekben beszélünk elégtelen, illetve túlvédelemről. A katódos védelemnek több kritériumát ismerjük, ezek kivétel nélkül a rendszer potenciálviszonyaihoz kötődnek. A különböző alkalmazási területekre született számos kritérium többnyire a gyakorlatban is bevált, azonban ismerünk olyan esettanulmányokat, melyekben a beállítások megfelelőek és jól dokumentáltak voltak, ennek ellenére súlyos korróziós károk keletkeztek a védett objektum felületén. Az ilyen esetek megelőzése céljából egy olyan kritérium lehetőségét keressük, amely a rendszer kinetikai (áram-feszültség) és pH-viszonyait is figyelembe veszi. Erre azért van szükség, mert a katódos védelem mechanizmusa alapvetően kinetikai jellegű.

A talaj lehet savas, semleges, illetve bázikus jellegű. A savas jelleget gyakran a bikarbonát-ion jelenléte okozza a talajban, de okozhatja kén-hidrogén vagy szerves vegyületek, például huminsavak jelenléte is. A talaj savanyúságának kifejlődését a nedves, nyirkos körülmények között történő mállás is eredményezheti. A bázikus jelleget a karbonát-ionok, illetve a pH-t stabilizáló kalcium-karbonát valamint az ammónia tartalmú vegyületek okozhatják, amelyek a nitrifikáló baktériumok jelenlétére utalnak. A talajösszetétel és -pufferkapacitás alapvetően meghatározza azt, hogy a katódos védelem milyen mértékben képes lúgos irányban eltolni a fém-elektrolit határfelületi kettősréteg pH-ját.

A talaj korrozivitásának egyik legfontosabb tényezője az elektromos vezetőképesség. A vízoldható sók minősége és mennyisége, valamint a talaj nedvességtartalma nagyrészt meghatározza a talaj elektromos vezetőképességét.

A korróziós folyamat során a korróziós potenciálon a fém anódos oldódása mellett párhuzamosan fut a redukciós reakció, azonos sebességgel (amennyiben nincs külső polarizáló áram). A katódos védelem célja, hogy a korróziós folyamatban résztvevő fémszerkezet katódos (negatív irányú) polarizációjával ennek az anódos fémoldódásnak a sebességét lecsökkentsük. A polarizáció eredményeképpen a fémoldódás gyorsaságának csökkenésével párhuzamosan a víz, vagy a hidrogénionok redukciója felgyorsul, vagyis több hidrogén fejlődik a folyamat során. A folyamattal párhuzamosan a fémfelület kémhatása lúgos irányba tolódik el, aminek következtében a korróziós folyamatok tovább lassulhatnak. Ez utóbbi folyamat szerepét sokáig csak másodlagosnak tekintették, azonban az utóbbi időkben született közlemények feltételezik, hogy bizonyos esetekben a felületi lúgosodás jelentősége meghatározó lehet. Erre utalhatnak azok az eredmények, amelyek szerint jelentős pufferkapacitású, hidrogénkarbonátos talajokban a hagyományos, potenciál-alapú védelmi kritériumok szerint jól beállított katódos védelem is elégtelen lehet.[1]

A katódos védelem szempontjából a pH tehát fontos paraméter. Ha a talaj pH-ja és pufferkapacitása engedi, akkor viszonylag alacsony védőáram is eredményezhet jelentősebb pH-érték növekedést. Ez a növekedés lelassítja az anódfolyamatot a fém felületén, ami csökkenti a korróziót. A modell alapvetően termodinamikai és kinetikai adatokra épül, amelyek magyarázzák, hogy érdemes számolni a pH-érték változással a katódos védelem során.[2]

A külső áramforrású katódos védelemben a kimenő feszültség vagy más néven kapocsfeszültség az az érték, amelyet a katódállomás negatív és pozitív kimenetei között bekapcsolt állapotban mérni tudunk. Ha a védett szerkezet és a talajfelszínre helyezett referencia elektród között mérjük a potenciált, akkor az úgynevezett szerkezetpotenciál értékét kapjuk meg. Az a szerkezetpotenciál, amelyet a katódállomás bekapcsolt állapotában mérünk, a bekapcsolt potenciál. Ennek az értéke erősen függ attól, hogy a talajfelszínen hol helyezzük el a referencia elektródot. A mért potenciálértéket alapvetően két tényező határozza meg, amelyek közül az egyik a szerkezet és a talaj határfelületén kialakult potenciálkülönbség, másik pedig a talajban folyó áram hatására fellépő ohmikus potenciálesés, aminek az értéke hozzáadódik a cső és a talaj határfelületén kialakult potenciálkülönbséghez, ily módon egy, a referencia elektród elhelyezésétől függő „önkényes” értéket ad hozzá a mért potenciálhoz, egy jelentős mértékű mérési bizonytalanságot eredményezve.

A védettségi kritériumok változatossága mögött az áll, hogy míg a védettség maga egy kinetikai állapotot (az elektrokémiai reakció anódos részfolyamatának visszaszorulását) jelent, a védett szerkezetről nem, vagy csak nagyon korlátozottan szerezhetőek kinetikai információk, ezért áttételesen, a potenciálviszonyok alakulása alapján

következtetnek a védettségre. Ezért indokolt a védett szerkezetek kinetikájának a további kutatása abból a célból, hogy egy, a kinetikával szorosabb kapcsolatban álló védettségi kritériumot lehessen felállítani. A kinetikai kritérium kialakításának egyik jelentős akadálya, hogy katódos védelmi hibahelyen nem tudunk áramot mérni, ugyanakkor a katódos védelmi hibahelytől két különböző távolságban lehelyezett referencia elektród potenciálkülönbsége egy ismeretlen konstans szorzófaktor erejéig megegyezik a hibahelybe folyó árammal. Ez lehetővé teszi az áram-feszültség karakterisztika felvételét és a görbék alakjai utalhatnak a védettség szintjére. Ezt feltételezve alkalmaztam az impedancia spektroszkópiai méréseket a felületi állapot változásainak a követésére.

Kísérleti körülmények

A katódosan védett rendszerben lezajló folyamatokat egy laboratóriumi elektrokémiai cellában modelleztem. A cella összeszerelése előtt kimértem körülbelül 500 g tisztára mosott, légszáraz homokot, amelyet a mérés során terveztem felhasználni, illetve alapelektrolit céljára készítettem 1 g/l-es NaCl oldatot. A méréshez használt 1M Ag/AgCl referencia elektród elektrolitikus csatlakozásához használt Luggin-kapillárist is ezzel az oldattal töltöttem meg, a feltöltéshez használt oldathoz forrón 1% agar-agart adtam. A potenciáladatokat minden esetben a katódos védelemben általánosan használt telített réz/réz-szulfát referencia elektród értékére átszámítva adtam meg. A cellába a munkaelektróddal szemben egy lapos kialakítású SENTEK P-17 típusú pH elektródot helyeztem el, a munkaelektródtól néhány mm távolságra. Előzőleg a pH-elektródot semleges (pH=7) és enyhén lúgos (pH=9,2) puffer oldatra kalibráltam. A pH mérőkészülékkel semleges állapotban +1,2 mV, míg az enyhén lúgos puffer oldatban -126,8 mV feszültséget mértem. A mért potenciáladatok közötti különbség nagyon jól egyezik az elméletileg számíthatóval. A kalibrálást a méréssorozat után is elvégeztem, és a kapott értékek nem változtak jelentősen.

A cella feltöltéséhez végül 400 g homokot használtam fel (ennyi fért bele). A feltöltés során a homokot és az 1 g/l koncentrációjú NaCl oldatot felváltva adagoltam a cellába, hogy végeredményképpen egy nagyjából homogén eloszlású rendszert kapjak. A nedvesítéshez körülbelül 50 cm^3 NaCl oldatot használtam. A DIN ST-52 anyagminőségá, szénacél munkaelektród hengeres alakú, 6 mm átmérőjű, 30 mm hosszú munkaelektród felülete 6 cm^2 volt.

Mivel az előzetes mérések alkalmával a rendszer ellenállása nagyon nagynak bizonyult és ezért a méréshez használt potenciosztát instabilnak mutatkozott, ezért a cellába a mérések előtt még további 50 cm^3 1 g/l koncentrációjú NaCl oldatot töltöttem.

A kísérlet egy 10 napos méréssorozatból állt, amelyben az egymást követő napokon más-más értékeken polarizáltam, illetve depolarizáltam az elektródot, miközben stacionárius potenciál, impedancia-spektroszkópiai és pH méréseket végeztem. Az impedancia-spektroszkópiai mérésekből alapvetően az ohmikus oldatellenállás értékét határoztam meg, de ha lehetséges volt, akkor a polarizációs ellenállás értékét is számítottam. A méréssorozat két részből állt. Az első részben periodikusan polarizáltam és depolarizáltam a rendszert abból a célból, hogy tanulmányozhassam az ohmikus potenciálesés és a pH korrelációját. A kísérlet második részében körülbelül 3 napon keresztül polarizáltam a rendszert a védettség állapotának empirikusan (a hagyományos potenciálkritériumok szerint) biztosan megfelelő -1160mV potenciálon, majd 50mV-os lépcsőkkel depolarizáltam és az egyes lépcsőfokokon impedancia spektroszkópiai méréseket végeztem. A kapott adatok vizsgálatával

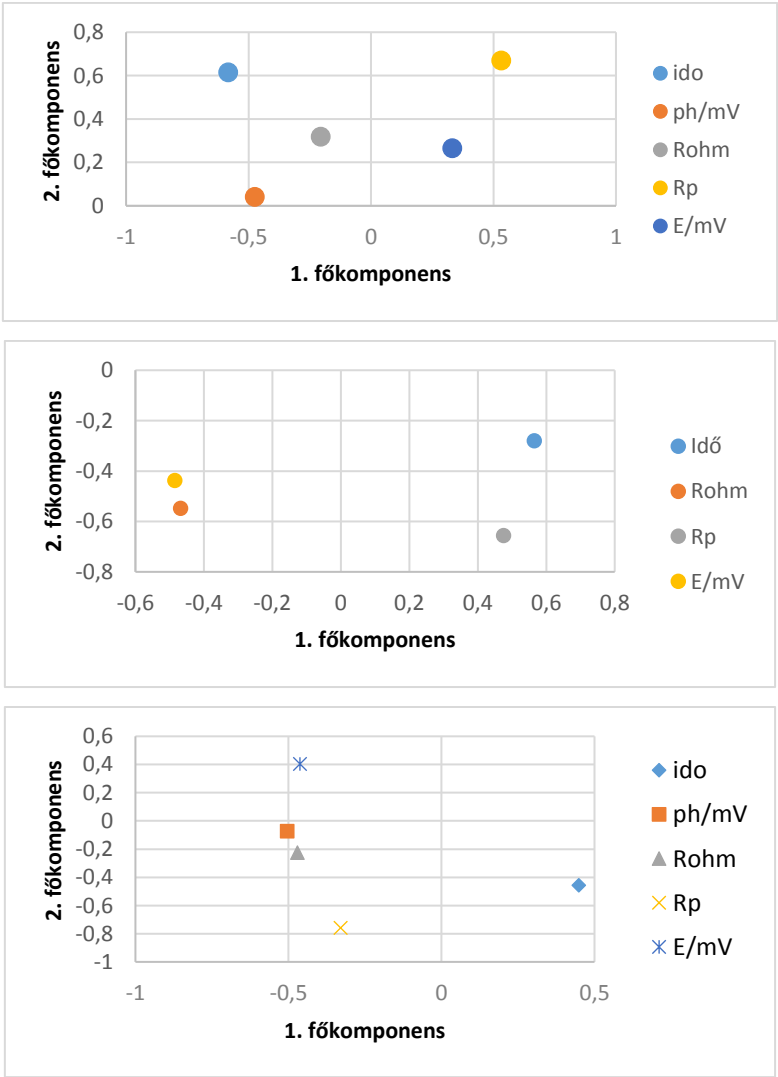
következtetéseket terveztem levonni a polarizáció (védettség) mértéke és az impedancia spektroszkópiai görbék alakja között.

1. táblázat: A mérés leírása naponként lebontva

Mérési nap száma	**Mérés leírás**
1. nap	Az első nap folyamán, a cella összeállítása után nyílt áramköri EIS méréseket végeztem, hogy vizsgálja a rendszer impedancia görbéjének alakulását a homogenizálódás során.
2. nap	A rendszeren a pihentetés után nyílt áramköri méréseket végeztem, majd polarizálni kezdtem -1164mV-on. A folyamatos polarizáció közben EIS, tranziens és pH-méréseket végeztem. A mérési nap végén gyengébb polarizáción is ismételtem a méréseket (-940mV, -850mV, -710mV).
3. nap	A rendszeren nyílt áramköri méréseket végeztem, majd polarizáltam egész nap -1164mV-on, közben tranziens és pH méréseket végeztem. A polarizáció után hagytam depolarizálódni a cellát és közben nyílt áramköri tranzienseket mértem.
4. nap	A nyílt áramköri méréseket után elkezdtem lassan polarizálni a cellát -760mV-tól -1160mV-ig 100mV-os léptékben. Minden értéknél elvégeztem a megfelelő méréseket. Majd a cellát egész éjszakára polarizáció alatt hagytam -1160mV-on.
5. nap	A cellát hagytam depolarizálódni majd közben ugyanazon az értékeken nyílt áramköri méréseket végeztem -760mV-ig.
6. nap	Nem történt mérés.
7. nap	Nem történt mérés.
8. nap	A két napos depolarizálódás után nyílt áramköri méréseket végeztem, majd egész napos polarizáció után (-1160mV), polarizált állapotban elvégeztem a tranziens, EIS és pH méréseket.
9. nap	A cellát egész estés polarizáció után tovább polarizáltam -1160mV-on, majd közben 1-2 óránként elvégeztem a méréseket.
10. nap	A mérési sorozat utolsó napján a cellát hagytam depolarizálódni és közben -1160mV és -760mV között 100-as léptékben méréseket végeztem. A cellát az utolsó mérések után szétszereltem.

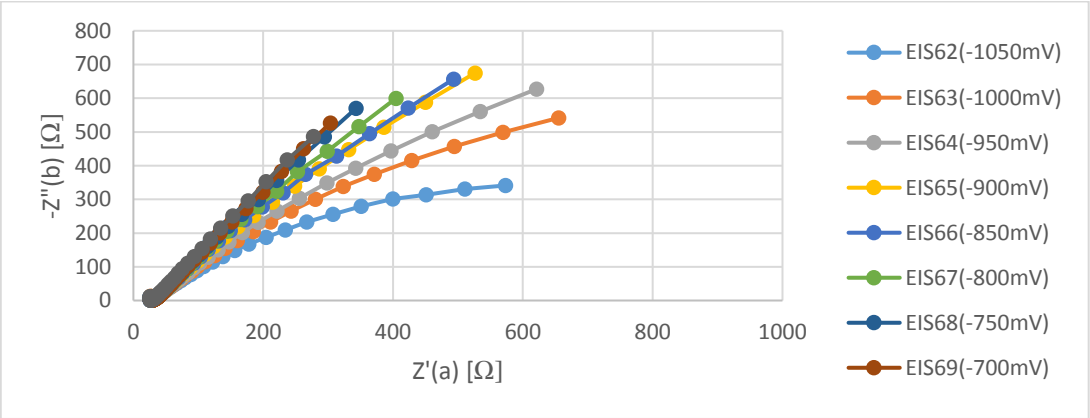
Az eredményeket statisztikai módszerrel, főkomponens elemzéssel értékeltem [3]. A főkomponens-elemzés nagy mérési bizonytalanságokkal, illetve nem azonosított és véletlen(nek tekinthető) faktorokkal terhelt, feltételezhetően multilineáris összefüggésekkel rendelkező adatmátrixok elemzésére és a lineáris összefüggések meghatározására szolgáló statisztikai eljárás. Az M*N adatmátrixot (ahol M a mérési pontok, N a mért adattípusok száma) előállítjuk az ún. Score és Load mátrixok szorzataként, ahol a Score mátrix P darab M hosszúságú, a Load mátrix P darab N hosszúságú, páronként ortogonális vektorból áll. P a számítás során feltételezett főkomponensek száma, ami bizonyos mértékig önkényes lehet. A rendszerben tapasztalható variancia legnagyobb részét az első, majd csökkenő mértékben a további főkomponensek hordozzák. A Score mátrix értékei az egyes adatpontok, a Load mátrix értékei az egyes adattípusok individuális tulajdonságait képviselik. Az egyes adattípusok közötti összefüggések tanulmányozására leginkább a Load mátrix adatai alkalmasak. Az adatok közötti lineáris összefüggések létére vonatkozó legbiztosabb indikáció az, ha a Load mátrix azonos adattípusokra vonatkozó értékei az 1. és a 2. főkomponensek síkjában történő ábrázoláskor relatíve közel vannak. (A relatív közelség a centrált, normált adatokra vonatkozik.)

Kísérleti eredmények és értékelésük



1. ábra. A főkomponens elemzés eredményei, a Load mátrixok adatainak a feldolgozása.

A főkomponens elemzés eredményei 1. a-c ábrában láthatók. Az 1.a ábrában azok az adatok szerepelnek amelyhez pH-adatok is tartoznak. Látható, hogy a pH és az oldatellenállás értékek egymáshoz közel vannak, tehát ezek erősebben korrelálnak egymással. Mint a többi adatok. Figyelemre méltó az 1.b ábrában az ohmikus potenciál esés és az elektródpotenciál közötti szoros összefüggés, ami újfent megerősíti azt, hogy a rendszer pH-ja és védettsége között szoros összefüggés áll fenn. A 1.c ábrán a kísérlet sorozat végén a fokozatos depolarizációhoz tartozó értékeket ábrázoltuk. Ezek az adatok is alátámasztják a pH és az oldatellenállás közötti erős korrelációt. Ez megalapozza az elvi lehetőségét annak, hogy bizonyos feltételek mellett – akár terepi körülmények között is – az oldatellenállás változásaiban következtessünk a pH-változására.



2. ábra: Az impedancia görbék változása hosszabb polarizáció után történő depolarizáció során.

Az impedancia mérések 2. ábrán látható eredményei azt mutatják, hogy a katódos polarizáció határán az EIS görbék alakja jelentősen megváltozik és huzamosabb ideig tartó polarizáció az impedancia-görbét „kiegyenesíti". Ettől nyilván nem függetlenül a katódos polarizáció számottevő és jól dokumentálható pH-változást eredményez, amivel az ohmikus potenciálesés változásai is jól korrelálnak. Mindkét jelenség arra utal, hogy a katódos védettség és a rendszer kinetikája (az impedancia-görbék alakja, paraméterei) között lehet összefüggést kimutatni.

További kísérletek szükségesek különböző minőségű, összetételű és víztartalmú talajokban, annak a meghatározására, hogy ezek az összefüggések elég robosztusan érvényesüljenek-e ahhoz, hogy egy alkalmazható új katódos védelmi kritérium alapjának szolgáljanak.

Köszönetnyilvánítás
A közlemény a GINOP-2.3.2-15-2016-00053 („Molekulaszerkezetében nagy hidrogéntartalmú, cseppfolyós üzemanyagok kifejlesztése (hozzájárulás a fenntartható mobilitáshoz)") keretében készült.

Irodalmi jegyzék:

[1] : Handbook of cathodic protection, Theory and Practice of Electrochemical Protection Processes, Third Edition, W. von Baeckmann, W. Schwenk, and W. Prinz, Editors, Gulf Publishing Company, Houston, TX, 1997
[2] : Cathodic protection criteria: A discussion of their historic evolution, Markus Büchler, Ueli Angst and Bruce Ackland
[3] : Sokváltozós adatelemzés (Kemometria), Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 2001, szerk.: Horvai György

Programmable Structure based modelling of pond aquaculture under present and forecasted climate conditions

A Programozható Struktúrák módszerén alapuló tógazdasági modell a jelenlegi és várható klimatikus viszonyok mellett

Gergő Gyalog[1], László Berzi-Nagy[1], Mónika Varga,[1,2]

[1]NARIC Research Institute for Fisheries and Aquaculture, Szarvas, Hungary

[2]Kaposvar University, Institute of Methodology, Kaposvar, Hungary

Summary

Changing input market conditions and growing scarcity of resources stimulates farmers for cost efficient input management in Hungarian pond aquaculture. In order to identify optimal farming technology, a dynamic simulation model was developed using the methodology of Programmable Structures. The model encompasses daily processes in the pond food web, impacts of actual meteorology and daily managerial interventions (including feeding, stocking, manuring). The model was validated on data from a private farm (Szegedfish) for the period of 2006-16. Based on model simulations, unit cost minimizing and profit maximizing farming technologies were identified. Simulation results show that economic optimum of input management are characterized by relatively high stocking densities (300-450 kg/ha) and intensive cereal feeding (3-4 t/ha). Unit costs can be kept under 550 HUF/kg by the optimized technological settings. The impact of climate change on carp yield and production costs was modelled by long-term dynamic simulations, using forecasted climate data of the NORESM RCP4.5 and RCP8.5 scenarios. Simulation results show that global warming may generally increase carp yields. However, different farming technologies will unequally benefit from climate change: farming technologies, applying low stocking densities and intensive feeding will be impacted more beneficially than the other technological options.

Support of CLIMEFISH (EU-H2020- 677039-2) and EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projects is acknowledged.

Összefoglaló

A változó piaci környezet és az erőforrások korlátozottsága a hazai halastavi pontytermelést is az inputok költséghatékony használatára ösztönzi. A gazdaságilag optimális technológia azonosítása a tógazdasági termelés jellemzőit figyelembe véve nehéz feladat, hiszen a termelés nagy mértékig beágyazott a mesterségesen szabályozott vízi ökoszisztémába. Munkánkban a Programozható Struktúrák módszerét használva a tavi tápláléklánc folyamatait, valamint a technológiai beavatkozásokat és a napi szintű időjárási hatásokat figyelembe vevő dinamikus tógazdasági folyamatmodell kialakításával vizsgáltuk a pontyhozamok alakulását a takarmány használat és tenyészanyag kihelyezés függvényében. A dinamikus szimulációk alapján kerestük azokat a takarmányozási és tenyészanyag kihelyezési technológiákat, amelyek i) a minimális fajlagos termelési költséget, illetve ii) maximális hektáronkénti eredményt (profitot) biztosítanak. Ezenfelül a folyamatmodell segítségével (a NORESM klímamodell RCP 4.5 és RCP8.5 szcenárióját használva bementi adatokként) a klímaváltozásnak a halastavi hozamokra és a termelési költségekre gyakorolt hatásait is elemeztük. A tógazdasági folyamatmodellt a szeged-fehértói halastavak tónaplóiban szereplő adatok alapján a 2006 és 2016 közötti időszakra validáltuk. A modellszámítások azt mutatják, hogy az önköltséget csak intenzívebb takarmányozási technológiával (3-4 t/ha) és intenzív tenyészanyag kihelyezéssel (300-450 kg/ha) lehet leszorítani az 500-550 Ft/kg körüli szintre. Megállapítottuk, hogy a várható klímaváltozás mellett (az input költségek állandó arányát feltételezve) alapvetően az alacsonyabb tenyészanyag kihelyezéssel, ugyanakkor a magasabb takarmányozási intenzitással jellemezhető technológiai megoldások kedvezőbbek.

Köszönet a CLIMEFISH (EU-H2020- 677039-2) és az EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projektek támogatásának.

Diszperzer többcélú optimalizálása numerikus áramlástani szimulációk segítségével

Multi-objective optimization of a disperser by CFD modelling

Gyurik Lívia, Egedy Attila, Ulbert Zsolt

Pannon Egyetem

8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

Összefoglaló

Két, nem elegyedő folyadék keverésére alkalmas eszköz lehet többek között a folyadék-folyadék diszperzer, mely egy olyan berendezés, ahol a diszpergált fázist egy koncentrikus csőbe elhelyezett eloszlató elem (diszperzerfej) segítségével juttatjuk be a folytonos fázisba. A megfelelő keveredést nagyban befolyásolja a diszperzerfej geometriája, melynek optimális kialakítása kritikus az optimális működés biztosítására.
Kutatásunkhoz egy laboratóriumi méretű, cső a csőben elrendezésű diszperzer teljes geometriáját képeztünk le COMSOL Multiphysics áramlástani szoftverben. A modellt kísérletek segítségével validáltuk, a modellbeli tartózkodási idő jó egyezést mutat a kísérleti indikátor injektálásos eredményekkel. A kísérleti kialakításon túlmutató esetek kvantitatív elemzésére részecskekövetési módszereket alkalmaztunk, melyek során a két bemenetre helyezett 5-5000 részecske útvonalát követtük, majd a kilépő peremre becsapódottakkal távolságalapú keveredés vizsgálatot végeztünk. A keveredés mellett fontos cél, hogy a kilépő perem minél nagyobb felületére területjenek el a részecskék. Az optimalizálás során így a kevertséget és a szemcsék által elfoglalt területet is figyelembe vettük. A furatok számának és dőlésszögének változtatásával különböző kimeneti mintázatot kapunk. Az adatelemzés alapján javaslatot tettünk a kettős célnak legmegfelelőbb geometriára.

Kulcsszavak: diszperzer, keveredés, optimalizálás, CFD, részecskekövetés

Abstract

Mixing of two immiscible fluids can be carried out by a fluid-fluid disperser, which is a device for introducing the dispersed phase to the continuous phase by a disperser block (nozzle) placed into a concentric pair of tubes. The sufficient mixing is strongly influenced by the geometry of the nozzle; its optimal design is essential to ensure the optimal operation.
In the current study, we defined the whole geometry of a laboratory-scale tube-in-tube type disperser in COMSOL Multiphysics software. The model is validated by experiments, the residence time in the model is in good agreement with the results of the indicator injection measurements. Further designs, differing from the experimental construction are quantitatively studied by Particle Tracing, where 5-5000 particles released at the inlets are tracked, and distance based mixing study is carried out by the particles arrived at the outlet boundary. Besides mixing, the highest possible occupation of the outlet area is also required. Thus the optimization is multi-objective. Changing the number and the angle of the nozzles results in different patterns at the outlet. The most appropriate design fulfilling the objective of the mixing and the occupation is suggested according to data processing.

Keywords: disperser, mixing, optimization, CFD, particle tracing

Kén-hidrogén szelektív abszorpciójának vizsgálata földgázból kinetikai modellt alapul véve

Kinetic model-based analysis of hydrogen sulfide selective removal from natural gas

Omar Péter Hamadi, Éva Molnár, Dóra Rippelné Pethő, Róbert Bocsi, Janka Bobek,Tamás Varga

Pannon Egyetem

8200, Veszprém Egyetem u. 10.

Summary

One of the main objectives of the energy industry is producing increasingly cleaner source of energy, and at the same time satisfying the rising global demand for energy. The main purposes of the usage of cleaner fuels are to reduce pollution, and to avoid the corrosion of pipelines and equipment. The most vital and clean source of energy is the natural gas, which contains methane, light and heavier hydrocarbons as well as contamination compounds of CO2 and H2S. In accordance with the industrial requirements, a number of situations can occur when, only one of the components has to be removed before the utilization.

In this work published experimental data [1] are reprocessed on the simultaneous absorption of H2S and CO2 from simulated natural gas, using alkali solution in varying concentration. The neutralization reactions were performed in a fix bed column. Gas flow rate (150 and 250 l/h), inlet CO2 load (25; 50; 75 v/v %) and the strength of the alkali solution (1; 3; 6 w/w %) were the parameters of the scrubber system. Another article contains measurements [2] which were performed in a JET reactor using the same alkali solutions and simulated natural gas for further analysis.

The objective of our work is to develop a mathematical model to identify the occurring physical and chemical processes. The model describes with a great accuracy the behavior of the absorber, which is capable to absorb hydrogen sulfide and carbon dioxide simultaneously from natural gas. Based on the developed simulator and the measurement data, the kinetic parameters of the considered processes were determined using a non-linear optimization to reduce the model error. The published article contains the optimal contact time for a JET reactor, thus one of our goal is to compare this contact time to the contact time calculated with the developed dynamic model.

Acknowledgement

We acknowledge the financial support of Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00053.

Irodalomjegyzék

[1] Institute of Chemical and Process Engineering, Department of Chemical Engineering Science, University of Pannonia et al., ‘Benefits of Jet Reactor Application in Alkaline Gas Purification’, Periodica Polytechnica Chemical Engineering, 2016.

[2] É. Molnár, T. Varga, D. Rippel-Pethő, R. Bocsi, J. Bobek, and G. Horváth, ‘Optimization of the Sodium Hydroxide–Assisted Hydrogen Sulfide Selective Removal from Natural Gas’, Chemical Engineering Communications, vol. 204, no. 8, pp. 974–981, Aug. 2017.

Kompatibilizáló adalékok tulajdonságainak vizsgálata különböző analitikai mérésekkel

Studying the properties of compatibilizers by analytical measurements

Hangyási Krisztina, Benkő Bence, Varga Csilla

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar,
Vegyészmérnöki- és Folyamatmérnöki Intézet
MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló

Napjainkban egyre nagyobb gondot okoz a különböző forrásból származó műanyag és gumi hulladékok kezelése és környezetbarát módon történő újrahasznosítása. Megoldást jelenthet megfelelő kémiai és fizikai tulajdonságokkal rendelkező műanyag kompozitok előállítása, melyekben általában heterogén fázisok vannak, és közöttük határfelületek alakulnak ki, amelyeknek az alkotóelemek jellemzői mellett igen fontos szerepük van a végtermék tulajdonságainak alakulásában. Kompatibilizáló adalék alkalmazásával létrehozható kémiai „híd" a műanyag kompozit alkotóelemei között, amelynek feltétele, hogy az adalék csoportjai közül legalább egy legyen olyan, amelyik képes kölcsönhatásba lépni a polimer funkciós csoportjaival, és még legalább egy funkciós csoportja legyen, mely reakcióképes egy másik polimer, szál vagy töltőanyag valamely felületi kémiai csoportjaival.

Kísérleti munkánk során tanszéki fejlesztésű, különböző szerkezetű olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer típusú kompatibilizáló adalékok analitikai vizsgálatával foglalkoztunk. Az analitikai vizsgálatok részben klasszikus mérési módszereket jelentettek, mint a savszám, valamint elszappanosítási szám meghatározás, amelyek alapján az adalékban lévő funkciós csoportok egyes típusainak aránya jó közelítéssel megadható. Ezen mérések mellett műszeres analitikai vizsgálatokat is alkalmaztunk (infravörös spektroszkópiás analízis, folyadék kromatográfia, reológia), amelyek közül az infravörös spektroszkópiás mérésekkel kapcsolatos eredményeket és a módszer alkalmazhatóságát mutatjuk be elsősorban. A kompatibilizáló adalékok tényleges szerkezetének feltárása a különböző típusú hulladék műanyagot és/vagy elasztomert tartalmazó anyagi rendszerekben kialakuló kölcsönhatás feltérképezésére, az adalékszelekcióhoz feltétlenül szükséges.

Enzim nanorészecskék kinetikai vizsgálata

Investigation of kinetics of enzyme nanoparticles

Hegedüs Imre, Vitai Márta, Meiczinger Mónika, Nagy Endre

Pannon Egyetem, Bio-Nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Kémiai és Biokémiai Műveletek Kutatólaboratórium; e-mail: nagy@mukki.richem.hu

8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló

Az iparban használatos enzimek leghatékonyabb körülmények közötti alkalmazásához alapvető fontosságú azok kinetikai jellemzése [1]. A korábbi években enzim nanorészecskéket állítottunk elő különböző enzimekből [2], amelyek kinetikai tulajdonságai még ismeretlenek. Összehasonlítottuk enzim nanorészecske formájában előkezelt és természetes, előkezelés nélküli borjú hasnyálmirigyből izolált α-kimotripszin enzimek viselkedését kevert tankreaktorban, hogy meghatározhassuk az újonnan enzim nanorészecske formájában stabilizált enzimek kinetikai állandóit (K_M és v_{max}). Modell enzimnek az α-kimotripszint használtuk, mivel szerkezete és tulajdonságai jól ismertek [3].

Az enzim katalitikus ipari műveletek hatékonyságát tovább növelheti, ha membrán segítségével a terméket folyamatosan elválasztjuk a reakcióelegyből [4]. Ezért poli(szulfon)-poli(amid) membrán támasztórétegébe gyenge fizikai kölcsönhatások segítségével (adszorpcióval) α-kimotripszin enzimet rögzítettünk biokatalitikus membrán reaktort létrehozva. Az előadásban összehasonlítjuk az enzim működését kevert tankreaktorban és enzim katalitikus membrán bioreaktorban.

Summary

Kinetical characterization of enzymes is principal thing for its optimal industrial usage [1]. Enzyme nanoparticles had been synthesized from different enzymes during the last years [2] and their kinetical parameters are not known. Pretreated enzymes (stabilized as enzyme nanoparticles) and native (not pretreated) enzymes are compared in mixed tank reactor to characterize their kinetical parameters (K_M és v_{max} values). α-chymotrypsin was used as model enzyme for these investigations because its structure and characteristics are well-studied [3].

The effectivity of the enzyme catalytic processes could highly increase when the product is continuously separated from the reaction mixture by membrane process [4]. For this reason enzyme catalytic membrane bioreactor are synthesized by immobilization of α-chymotrypsin enzyme into the support layer of poly(sulfone)/poly(amide) membrane by weak physical interactions (by adsorption). The lecture will compare the effectivity of mixed tank reactor and biocatalytic membrane reactor.

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal GINOP-2.3.215-2016-00017 és 20385-3/2018/FEKUSTRAT projektjei támogatják.

Irodalomjegyzék

[1] Papamichael, E.M., Stamatis, H., Stergiou, P.Y., Foukis, A., Gkini, O.A., *Advances in Enzyme Technology*, Elsevier, 71-104 (2019)

[2] Hegedűs, I., Nagy, E., *Chemical Engineering Science*, 64 (5), 1053-1060 (2009)

[3] Verma, S. K., Ghosh, K. K. *Journal of Chemical Sciences*, 125 (4), 875-882 (2013)

[4] Pino, M.S., Rodríguez-Jasso, R.M., Michelin, M., Flores-Gallegos, A.C., Morales-Rodriguez, R., Teixeira, J.A., Ruiz, H.A. *Chemical Engineering Journal*. 347, 119-136 (2018)

Mágneses folyadékok és szuszpenziók viselkedése külső mágneses térben

Response of magnetic fluids and suspensions in external magnetic field

Horváth Barnabás, Guba Sándor, Szalai István

Pannon Egyetem Fizika és Mechatronika Intézet

8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló

A külső mágneses térrel befolyásolható intelligens anyagok változatos anyagcsaládot alkotnak. Ide tartoznak a különböző mágneses folyadékok, mint pl. a nanométerű részecskéket tartalmazó ferrofluidumok, valamint a magnetoreológiai (MR) folyadékok, amelyeknél a diszpergált részecskék mérete a mikrométeres nagyságrendbe esik. Ezeken kívül léteznek mágneses gélek, elasztomerek, és mágneses szuszpenziók is. Közös jellemzőjük, hogy a mágneses tér hatására reverzibilis szerkezeti átalakuláson mennek keresztül, ami változást okoz az anyag makroszkopikus tulajdonságaiban.

Célunk különböző mágneses folyadékok és mágneses szuszpenziók szerkezetének, valamint néhány gyakorlati felhasználás szempontjából fontos fizikai tulajdonságának kísérleti vizsgálata. A legfontosabb jellemzők közé tartoznak a mágneses tulajdonságok, mint pl. a mágneses szuszceptibilitás, amely ezeknél az anyagoknál gyakran mutat nemlineáris jelleget. A külső mágneses tér hatására bekövetkező szerkezeti átalakulás (láncképződés) a válaszidővel jellemezhető, amely a szuszceptibilitás változás alapján is meghatározható. Mágneses szuszpenziók esetén a szerkezetváltozás elsősorban a reológiai viselkedést befolyásolja, ami döntő jelentőségű az anyag alkalmazása során (feldolgozhatóság, injektálhatóság, stb.). Mágneses folyadékcseppek inhomogén mágneses térben való manipulálhatósága függ a cseppre ható erő nagyságától, amely egyes orvosbiológiai célú alkalmazásoknál meghatározza a biológiai szövetek és a folyadékcsepp közötti kölcsönhatást. Amennyiben a mágneses folyadékcsepp szilárd felülettel érintkezik (pl. mikrofluidika, Lab-On a Chip rendszerek) a külső térrel a nedvesítési tulajdonságok is módosíthatóak, amiket a folyadék-szilárd és a folyadék-gőz fázisok kölcsönhatásai szabnak meg.

Munkánk során egy olyan berendezést fejlesztettünk, amely mágneses folyadékok szuszceptibilitását méri az idő függvényében, időben statikus, illetve váltakozó mágneses tér hatásideje alatt. Méréseket végeztünk vizes közegű, magnetit nanorészecskéket tartalmazó folyadékok mágneses szuszceptibilitásának meghatározására AC gerjesztés mellett. A folyadék mágneses viselkedését a nemlineáris szuszceptibilitás magasabb rendű komponenseivel jellemeztük, és vizsgáltuk a felharmonikusok mágneses térerősségtől és a tér frekvenciájától való függését. A szuszceptibilitás változás mérésével meghatároztuk különböző ferrofluidumok (magnetit alapú, szerves, és vizes közegű folyadékok) és MR fluidumok válaszidejét. Összefüggést állítottunk fel a válaszidő és a mágneses térerősség között. Mágneses szuszpenziók reológiai tulajdonságainak homogén mágneses térben való vizsgálatához magnetit/hidroxiapatit kompozitokat állítottunk elő. Mágneses folyadékok és biológiai szövetek közötti kölcsönhatások modellezése érdekében inhomogén mágneses térben vizsgáltuk biokompatibilis ferrofluidum cseppek viselkedését. Meghatároztuk a cseppekre ható erő magnetit koncentrációtól, és mágneses térerősségtől való függését. A kísérleti eredményeket egy módosított Langevin elméleti modellel írtuk le. Különböző szilárd felületekre helyezett mágneses folyadékcseppek alakváltozása alapján, a szilárd felület és a csepp közötti kontaktszög mérésével vizsgáltuk a mágneses térerősség és a felületi feszültség kapcsolatát.

Ez a munka a BIONANO-GINOP-2.3.2-15-2016-00017 projekt támogatásával készült.

Adszorpciós izotermák modellmentes meghatározása inverz módszer segítségével

Unbiased determination of adsorption isotherms by inverse method in liquid chromatography

Horváth Szabolcs, Horváth Krisztián, Szakács Máté

Pannon Egyetem, Kémia Intézet

8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

Összefoglaló

Izoterma meghatározására széles körben alkalmazott eljárás az inverz módszer, melynek során a komponens túltelített csúcsalakjából határozzák meg az izotermát a folyadékkromatográfiás tömegmérleg egyenlet iteratív megoldásával [1]. A módszer sikeres alkalmazásához szükséges egyrészt egy megfelelő algoritmus a kromatográfiás tömegmérleg egyenlet pontos megoldásához, másrészt előzetes feltételezés az izoterma alakjáról, típusáról (Langmuir, BET stb.).

Munkánk során olyan numerikus eljárást dolgoztunk ki az inverz módszer továbbfejlesztésére, mely nem igényel előzetes feltételezést az izoterma alakjáról. A fejlesztett módszert Python programnyelvben implementáltuk. Továbbfejlesztettük az úgynevezett Martin-Synge algoritmust [2] olyan módon, hogy előre meghatározott izoterma egyenlet helyett izoterma pontokra illesztett splineokból számolja ki a kromatográfiás csúcs alakját. Meghatároztuk az izoterma pontok számának és eloszlásának szükséges mértékét ahhoz, hogy az izoterma splineokkal történő becslésének hibája minimális legyen. A fejlesztett numerikus módszer inverz kromatográfiás alkalmazhatóságát és pontosságát szintetikus „benchmark" csúcsok segítségével, valamint butil-benzoát izotermájának meghatározásával igazoltuk, majd az eredményeket összehasonlítottuk a frontális analízis módszerével kapott izotermával.

Irodalomjegyzék

[1] Guiochon, G., Felinger, A., Shirazi D. G., Katti, A. M., *Fundamentals of Preparative and Nonlinear Chromatography*, Academic Press, Amsterdam, (2006)

[2] Horváth, K., Fairchild, J. N., Kaczmarski, K., Guiochon, G., *Journal of Chromatography A*, 1217, 8127-8135, (2010)

Köszönetnyilvánítás

A kutatás infrastruktúrális hátterét az OTKA PD 104819 sz. téma biztosította.

Summary

The inverse method is a widely used technique for the determination of adsorption isotherms in liquid chromatography. In this method, isotherm is determined from the overloaded peak profile of the component by the iterative solution of the mass balance equation of liquid chromatography [1]. Successful use of this method requires a proiri assumption of type of isotherm (Langmuir, BET etc.).
In this work, the inverse method was improved in order to able to use it without any assumptions on the form of the adsorption isotherm. The developed algorithm was implemented in Python programming language which can be used for solution of the mass balanced equation of chromatography. The Martin-Synge algorithm [2] was modified in order to be able to determine overloaded peak profiles from splines fitted to isotherm points. The number and distribution of the isotherm points were optimized for minimizing the error. The accuracy of the developed numerical method was verified with the help of synthetic benchmark peaks and determination of isotherm of buthyl-benzoate. Then precision of this method is compared to the method of frontal analysis.

References

[1] Guiochon, G., Felinger, A., Shirazi D. G., Katti, A. M., *Fundamentals of Preparative and Nonlinear Chromatography*, Academic Press, Amsterdam, (2006)
[2] Horváth, K., Fairchild, J. N., Kaczmarski, K., Guiochon, G., *Journal of Chromatography A*, 1217, 8127-8135, (2010)

Acknowledgement

The research was supported by the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA PD104819).

Egy rekombináns fehérje autoindukciós termelésének növelése batch fermentációval

Improving a recombinant protein production with autoinduction in batch fermentation

Ivanics Balázs Ágoston, Dr. Németh Áron

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

Összefoglaló

Számtalan helyen foglalkoznak rekombináns fehérje termeléssel, E.coli mikroorganizmusok felhasználásával. Bizonyos kutatásokban felmerül az igény, a rekombináns fehérjék multigrammos mennyiségére. Ez egyszerre jelenti a célfehérje termelés hatékonyságának fokozását és léptéknövelését. A legelterjedtebb laboratóriumi protokoll szerint LB tápközegben IPTG-vel indukálják a fehérjetermelést. Ez a molekula a mikroba számára bonthatatlan, az aktuális anyagcsere folyamatoktól és a környezeti körülményektől szinte függetlenül indukálja a fehérje termelést. Hátránya karcinogén mivolta és drágasága, amely a léptéknövelésnél hátráltató tényező lehet. Egy lehetséges alternatíva, a lacoperon alapú expressziós rendszerek laktózzal való indukálása. A laktózt glükózzal kombinálva, a katabolikus represszió révén időzíthetővé válik a célfehérje termelés időszaka az E.coli tenyészetben (külső beavatkozás nélkül). Ezt a jelenséget, illetve folyamatot hívják autoindukciónak. Hátránya, hogy a laktóz természetes szubsztrátja a mikrobának, így emésztése szigorú szabályozási rendszerek része, amelyek bizonytalanabbá teszik az expressziót. Mégis, előnyei miatt folyamatosan keresik a lehetőségét az IPTG laktózra való cserélésének.

Az autoindukció egy összetett folyamat, amelyben kiemelt szerepet játszik a mikrobák számára elérhető oxigén mennyisége, továbbá a katabolikus represszióban résztvevő és egyéb szubsztrátok mennyisége is. Kísérleteimben egy ipari szempontból értékes fehérje termelésével foglalkoztam. Két lényeges paraméter hatásának nagyságát mértem fel. Ezek a levegőztetés mértéke és a kiindulási laktóz koncentráció. Összességében elmondható, hogy a fehérjetermelés hatékonyságán jelentősen sikerült javítani. A kísérleti termelések kezdetén alkalmazott LB tápközeg produktivitásához képest a sejttömeg hozama 3,5-szer nagyobb, az elért fajlagos termék mennyiség pedig 3-5,5-szer nagyobb a kipróbált beállításokkal. Méréseim szerint a kihozatal növekedés legalább kilencszeres.

Summary

Many laboratories working with Eserechia coli, for the purpose of making recombinant proteins. In some cases, multigramm of the target protein needed. This also means the need of enhancement of the productivity and a scale up process. In the most common protocoll of protein production, E.coli microbes growth in liquid LB media and the expresssion inducer is IPTG. This molecule is not consumable for the organism, and it's role almost dependent from the enviroment and the actual metabolic process. The main disadvantages of the IPTG, it's price and carcinogenic behavior, and this attributes can affects the scale up process. A potential alternative is inducing the lac-operon based expression systems with lacose. Combinating lactose with glucose, we can set the period of target protein production (without external manipulation). This phenomena, this process called autoinduction. Lactose is a natural substrate of E.coli, and becouse of this, lactose consumption rate belongs to a strict regulation in the metabolism of sugars. And this is also the main disadvantage of autoinduction, which is making the expression more unstable. Because of the advantages, many laboratories still searching for the possibillity of replacing IPTG with lactose.

Autoinduction is a complex procedure, and the amount of dissolved oxygen play a main role along with sugars used in catabolic repression. In my studies, I worked with a protein which has interest in industry and market. I tryed to investigate the impact of two main parameter. The first was oxygen intake and second was lactose amount. We have successfully increased the productivity and the yield of the protein production. Compared to our early fermentations with LB media, we produced 3,5 times more biomass in the same volume and 3-5,5 times more target protein per gramm biomass. According my measurement, the overall productivity is 9 times more than we reached with our early trying.

Flagellin alapú arzén- és nikkelkötő érzékelő rétegek létrehozása és kötőtulajdonságuk vizsgálata

Construction of Flagellin-based Arsenic- and Nickel-binding Sensing Layers and the Study of Their Binding Ability

Jankovics Hajnalka[1], Szekér Patrik[1], Lábadi Zoltán[2], Tóth Éva[1], Kalas Benjamin[2], Saftics András[2], Fried Miklós[2], Petrik Péter[2], Vonderviszt Ferenc[1]

[1]Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Pannon Egyetem 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

[2]MTA EK Műszaki Fizikai és Anyagtudományi Intézet, 1121 Budapest, Konkoly Thege M. út 29-33.

A Salmonella baktérium mozgásszervét alkotó fő fehérje komponens, a flagellin egy önszerveződésre, és ezáltal hosszú filamentumok kialakítására képes protein. A polimerizációban a filamentumba épülő monomer egységeknek csak a terminális régiói vesznek részt, a polipeptidlánc közepe által kódolt D3 domén a polimer felszínén jelenik meg. Korábbi kutatásaink igazolták, hogy a D3 domén módosítható, vagy bizonyos korlátok között helyettesíthető például kötő tulajdonságú peptidekkel, fehérjékkel a polimerizációs képesség megőrzése mellett. Ezáltal például olyan nagy kötőhely sűrűségű nanocsövek hozhatók létre, melyek felületükön azonos lokális környezetben a kötőhelyeknek akár több tízezer kópiáját is hordozhatják. A módosított flagellinekből a polimerizációs folyamat precíz kontrollálásával kívánt méretű, nagy felületi kötőhely sűrűségű nanorudakat is építhetünk, amelyekből szenzorok felületén érzékelő réteget hozhatunk létre. Ezekben a receptor rétegekben a célmolekula kötődése miatt bekövetkező változások megfelelő módszerekkel valós időben egyszerűen detektálhatók.

A D3 domén helyére korábban génsebészeti módszerekkel ismert specificitású kisméretű nehézfém kötő fehérjéket illetve oligopeptideket építettünk be, és így olyan flagellin variánsokat hoztunk létre, amelyek képesek pl. Ni(II) vagy As (III) felismerésére. A különböző variánsokat filamentum formában keresztkötő ágenssel (DSP) kovalensen rögzítettük szenzor felületén és a fémkötő sajátságot ciklikus voltammetriával követtük. A Ni(II)-kötő fehérjét tartalmazó szenzor kimutatási határa 5μM [Ni(II)] körül volt, a szenzort EDTÁ-val könnyen tudtuk regenerálni és meglehetősen stabilnak bizonyult (legalább két hónapig változatlan hatékonysággal működött). Az As(III)-kötő szenzor esetén azt tapasztaltuk, hogy az az egészségügyi határérték ötszörösének megfelelő koncentrációnál a voltamogram szignifikáns megváltozását eredményezi. A mérési határérték javítása érdekében az As-kötő motívumot más elrendezésben tartalmazó flagellin variánsokat készítettünk.

Kutatásainkat a BIONANO_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 és az OTKA NN117849 projekt támogatta.

Bioanalitikai módszerek fejlesztése glikánok kapilláris elektroforézis alapú analíziséhez

Development of capillary electrophoresis based bioanalytical methods for glycan analysis

Járvás Gábor, Mészáros Brigitta, Borza Beáta, Hajba László, Döncző Boglárka, Kovács Zsuzsanna, Szarka Máté, Szigeti Márton, Guttman András

Transzlációs Glikomika Kutatócsoport, Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Pannon Egyetem
8200 Veszprém Egyetem utca 10.

Összefoglaló

A „Bionanotechnológiai kutatások betegségek hatékony kimutatása, újfajta hatóanyagok kifejlesztése és bioinspirált intelligens nanoanyagok előállítása érdekében„ című projekt keretei között a Transzlációs Glikomika Kutatócsoport molekuláris diagnosztikai módszereket fejleszt. A nemzetközi trendekhez illeszkedően a fejlesztések központjában a humán sejtfelszíni és a vérplazmában megtalálhat glikoproteinek valamint a terápiás fehérjék összetett szénhidrát struktúráinak (glikánok) vizsgálata áll. A csoport az elmúlt évben világszinten is kiemelkedő jelentőségű munkát végzett többek között a glikomikai vizsgálatok mintaelőkészítési protokolljának kidolgozásában, a mintaelőkészítéséhez szükséges automata pipettahegyben használható funkcionalizált nanopórusos mikrorészecskék alkalmazásában, a prosztata specifikus antigén újszerű diagnosztikájának fejlesztésében, a lakosság széles körét érintő tüdőbetegségekhez köthető glikán alapú biomarkerek vizsgálatában, valamint a kapilláris elektroforézis elválasztások elméleti hátterének feltárásában. Ezen túlmenően ugyancsak fontosak a csoport bioinformatikai területen valamint kapilláris elektroforézis-tömegspektrométer kapcsolás témakörben végzett tevékenységei is. Az előadásban a kutatócsoport legérdekesebb eredményei kerülnek bemutatásra.

Lineáris és elágazó funkciós polimerek előállítása és bionanotechnológiai alkalmazási lehetőségeik

Synthesis of linear and branched functional polymers and their bionanotechnological application possibilities

Kasza György[1], Fecske Dóra[1,2], Stumphauser Tímea[1], Gyulai Gergő[3], Szarka Györgyi[1], Horváti Kata[4], Bősze Szilvia[4], Domján Attila[5], Kiss Éva[3], Iván Béla[1]

[1]Polymer Chemistry Research Group, IMEC, RCNS, HAS
H-1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2, Hungary
[2]Institute of Chemistry, Eötvös Loránd University, 1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/A
[3]ELTE Eötvös Loránd University, Laboratory of Interfaces and Nanostructures
1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/A
[4]MTA-ELTE Research Group of Peptide Chemistry, 1117 Budapest Pázmány Péter sétány 1/A
[5]NMR Research Laboratory, Instrumentation Center, RCNS, HAS
H-1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2, Hungary

Összefoglaló/ Summary

A bionanotechnológiai kutatásokban és fejlesztésekben jelentős figyelem irányul a különféle szerkezetű funkciós polimerekre és blokk-kopolimerekre. A hiperelágazásos poliglicidol (HbPG) egy poliéter poliol, mely számos primer és szekunder hidroxil-csoporttal rendelkezik, vízoldhatósága kimagasló és igazoltan biokompatibilis. Munkánk során egy másik biokompatiblils poliéter, a poli(tetrahidrofurán) (PTHF) felhasználásával HbPG-PTHF-HbPG ABA triblokk-kopolimereket állítottunk elő. Vizsgáltuk az így kapott amfifil karakterű blokk-kopolimerek felületaktív viselkedését és önszerveződési tulajdonságait. Tanulmányoztuk továbbá az előállított blokk-kopolimerek lehetséges gyógyszerhordozó rendszerekként történő alkalmazását, egy természetes, vízben oldhatatlan hatóanyag, a kurkumin segítségével. Igazoltuk, hogy a blokk-kopolimerek nagy mennyiségű hatóanyag felvételre képesek. Az így kapott kurkuminnal töltött polimer nanorészecskék nagy stabilitással rendelkeznek és elnyújtottan adják le a hatóanyagot, amelynek vizsgáltuk biológiai aktivitását is.
N,N-dietil-akrilamid és glicidil-metakrilát szabadgyökös kopolimerizációjával olyan random kopolimereket állítottunk elő, melyek termoreszpozív tulajdonsággal rendelkeznek, azaz vizes oldatukban egy bizonyos hőmérséklet felett kicsapódnak, és emellett további reakcióra képes epoxi-oldalcsoportokat tartalmaznak. Igazoltuk, hogy a hőmérséklet érzékeny viselkedés a komonomerek arányával befolyásolható. A kopolimereket α-kimotripszinnel reagáltattuk, mellyel enzim-polimer nanorészecskéket hoztunk létre. Vizsgáltuk az így előállított nanorészecskék enzimaktivátásának pH és hőmérséletfüggését.

In bionanotechnology research and developments, there has been significant attention on functional polymers and block copolymers with various architectures. Hyperbranched polyglycerol (HbPG) is a polyether polyol which contains a large number of secondary and primary hydroxyl groups, and it has outstanding water solubility and approved biocompatibility. In our work, by using another biocompatible polyether poly(tetrahydrofuran) (PTHF), HbPG-PTHF-HbPG ABA triblock copolymers were synthesized. The surface active properties and self-assembly behavior of the produced amphiphilic block copolymers were investigated. Moreover, the potential application of the block copolymer nanoparticles as drug delivery systems was also studied by solubilization of a natural, water insoluble drug, curcumin. We confirmed that the block-copolymers encapsulate high amounts of curcumin, and the curcumin-loaded nanoparticles show high stability and sustained drug release. In addition, biological activity of the drug loaded nanoparticles was also studied.
Random copolymers were synthesized by free radical copolymerization of N,N-diethylacrylamide and glycidyl methacrylate. These macromolecules contain reactive epoxide side groups and have a thermoresponsive character, i.e. it precipitates in aqueous solution above a certain temperature. We proved that this critical temperature can be influenced by the comonomer ratio. The copolymers were reacted with α-chymotrypsin to obtain enzyme-polymer nanoparticles. The pH and temperature dependence of the enzyme activity of the produced nanoparticles was investigated.

Köszönetnyilvánítás/ Acknowledgement
A kutatás a BIONANO_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 projekt támogatásával valósult meg.
This work was supported by the BIONANO_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 project.

Szintetikus csurgalékvíz tisztítása koaguláció, flokkuláció és ultraszűrés alkalmazásával

Synthetic leachate treatment by using coagulation, flocculation and ultrafiltration techniques

Zsolt László Kiss, Ildikó Galambos

University of Pannonia, Soós Ernő Water Technology Research and Development Center, Zrínyi Miklós Str. 18, 8800 Nagykanizsa, Hungary

Summary

Landfill leachates are considered as heavily polluted industrial wastewaters, presenting significant time and great variations of their chemical parameters. Therefore special care is required for their efficient treatment and disposal. One of the widely used techniques are coagulation–flocculation, which is a relatively simple physical–chemical technique in treatment of different type of leachate. However the efficiency of coagulation-flocculation method could improve by combine with membrane separation technique.

Study was conducted to investigate the efficiency of coagulation and flocculation processes for removing turbidity, chemical oxygen demand (COD), total dissolved solid from a synthetic young landfill leachate. Two types of polyaluminium coagulant, ferric (III) chloride, ferric (III) sulphate coagulants and polyacrilamid flocculants were studied by using standard jar test apparatus. The supernatant of the gravitaly settled leachates were further treated by using ultrafiltration membrane.

Acknowledgements:

We acknowledge the financial support of FIK Project 20385-3/2018/FEKUSTRAT.

Lipid-szénhidrát rendszerek vizsgálata

Examination of lipid-carbohydrate systems

Kovács Anikó, Badakné Dr. Kerti Katalin, Dr. Somogyi László

Szent István Egyetem, Élelmiszertudományi kar, Gabona és Iparinövény Technológiai Tanszék

1118 Budapest, Villányi út 29-43.

Összefoglaló

A zsiradékok kristályosodási jelenségeinek tanulmányozása elengedhetetlen az élelmiszeripari termékek szempontjából. Azonban az édes és sütőipari termékekben a zsiradékok nem önmagukban vannak csak jelen, hanem más alkotókkal együtt, jellemzően egyszerű vagy összetett szénhidrátokkal. Ezen alkotók együttesen felelnek a termékek fizikai és termikus tulajdonságaiért.

A munka célja a lipid-szénhidrát rendszerek komplex viselkedésének vizsgálata. Ezen belül a különböző cukrok hatásának feltérképezése a zsiradék-cukor rendszer állományára, viszkozitására és termikus tulajdonságaira. A munka során lágy pálmazsírt és cukor 50-50 %-os keverékét vizsgáltam. A minták közötti különbséget a felhasznált cukor szemcseméretе illetve fajtája adta. Ezek alapján a kontroll zsírhoz viszonyítva 3 féle rendszert vizsgáltam: egy kristálycukorral, egy porcukorral, valamint egy kristályos fruktózzal készültet.

A mérési eredmények alapján megállapítható, hogy a különböző szemcseméretű cukor jelenléte befolyásolja a modellrendszer tulajdonságait. Az állománymérés során a szacharózzal készült minták esetében, a finomabb szemcseméret hatására a minták keménysége csökkent. Ezek az eredmények visszavezethetők a szemcseméretek okozta különbségekre, illetve a keverés során a rendszerbe bekerülő levegőre. Azonban a fruktózzal készült minta esetében eltérő eredményt kaptam. A lágy pálmazsírhoz viszonyítva fruktóz hozzáadása megnövelte a keménység értékét.

A viszkozitás mérés esetében a cukor hozzáadásával a látszólagos viszkozitás értékek csökkentek a pálmazsírhoz képest. Azonban itt nem figyelhető meg egyértelmű összefüggés a mérési eredmények és a szemcseméret között.

A minták termikus viselkedésének tanulmányozásakor meghatározó a felhasznált zsír fizikai és kémiai tulajdonsága. Az eredmények alapján a cukor hozzáadása befolyásolta a zsiradék kristályosodását, illetve olvadását.

A kutatási eredmények alapján érdemes lehet további vizsgálatokat elvégezni. Feltérképezni, hogy a cukor csökkentés, illetve a cukor helyettesítés, hogyan befolyásolja a zsiradék-szénhidrát rendszer technofunkcionális tulajdonságait.

Summary

Studying the crystallization phenomenon of fats is essential for food products. However, in sweet and bakery products, the fats are not present alone, but together with other ingredients, typically simple or complex carbohydrates. These components are together responsible for the physical and thermal properties of the products.

The aim of this study is to examine the complex behaviour of lipid-carbohydrate systems, especially the effect of different sugar molecules on the texture, viscosity and thermal properties of fat-sugar systems. In this work 50-50% mixture of soft palm oil and carbohydrates were studied. The difference between the samples was given by the particle size or the type of sugar. 3 different systems were investigated: palm fat with crystalline sucrose, with powdered sugar (sucrose), and with crystalline fructose.

Based on the results of the measurements, the presence of different particle sized sugar affects the properties of the model systems. In the case of sucrose samples the finer particle size reduced the hardness of the samples measured with texture analyser. These results can be traced back to the particle size differences and the air entering the system during mixing. Adding fructose to soft palm oil however, increased the hardness value.

The apparent viscosity values decreased with the addition of sugar. However, there is no clear correlation between measurement results and particle size.

Studying the thermal behaviour of the samples, the physical and chemical properties of the fat are determinative. Based on the results, the addition of sugar affected the crystallization and the melting of the fat.

This study could be a starting point for further research such as investigations about how the sugar reduction and sugar substitution effects of the technofunctional properties of the fat-carbohydrate systems.

Nano-műanyag ökotoxikus hatásának vizsgálata

Assessment of the ecotoxicity of nano-sized plastic particles

Kováts Nóra[*], Eck-Varanka Bettina[*], Békéssy Zsófia[*], Diósi Dorina[*], Hubai Katalin[*], Korponai János[*§]

[*]*Pannon Egyetem Környezettudományi Intézet*
8200 Veszprém Egyetem u. 10

[§]*Sapientia Erdélyi Magyar Tudományegyetem Környezettudomány Tanszék*
400193 Cluj-Napoca, Calea Turzii nr. 4, jud. Cluj, România

Összefoglaló/ Summary

A mikro- és nanoműanyagok megjelenése a vízi környezetben (belértve édesvízi, tengeri ökoszisztémákat, ill. az üledéket) világszerte egyre fokozódó probléma. Számos kutatás foglalkozik azokkal a hatásokkal, amelyeket a műanyag részecskék az élővilágra kifejtenek. A fő expozíciós útvonal a tápláléklánc, kísérletes körülmények között már kimutatták pl. zooplankton fogyasztó halak agyában a műanyag részecskék megjelenését, és az ennek következtében fellépő agytevékenység károsodását. A megjelent közlemények ugyanakkor elsősorban a fizikai hatásokra hívják fel a figyelmet. Jelen tanulmányban nanoméretű (50 nm) plasztik részecskék ökotoxikus hatását vizsgáltuk a *Vibrio fischeri* biolumineszcencia gátláson alapuló teszttel. Kimutattuk, hogy már a környezetben fellelhető koncentráció is kivált ökotoxikus hatást. Vizsgálatunkat 'screening' jelleggel alkalmaztuk, eredményeink ugyanakkor felhívják a figyelmet a vízi ökoszisztémát reprezentáló egyéb tesztszervezeteken történő tesztek elvégzésének szükségességére.

Presence of plastic particles of micro- and nanosize in aquatic environments (including freshwater and marine ecosystems and their sediments) is a world-wide increasing problem. A wide range of studies have addressed the ecological effects these particles pose on the biota. The main exposure pathway is the food chain; for example, under laboratory conditions these particles accumulated in the brain tissues of zooplankton-feeding fish, causing brain damage. These studies, however, report mainly on the physical effects. In order to establish actual ecotoxicological effects, nanoplastic particles (50 nm) were assessed using the *Vibrio fischeri* bioluminescence inhibition bioassay. Our results showed that even environmentally relevant concentrations might trigger ecotoxicological effects. This study can be considered as a first screening, however, results indicate the need of more complex testing on a battery of aquatic test organisms.

Bevezetés

A mikro- és nanoméretű műanyag részecskék által okozott szennyezés egyre növekvő, világméretű probléma [1]. A szennyezés veszélyezteti mind az édesvízi, mind a tengeri ökoszisztémákat [2, 3]. Az élővilágra gyakorolt kockázat elsősorban amiatt keletkezik, hogy a tápláléklánc különböző szintjein álló élőlények lenyelik ezeket a részecskéket. A zooplanktonikus, fontos táplálékszervezetként ismert vízibolhákról (Daphnia fajok) pl. kimutatták, hogy táplálékként elfogyaszthatnak nano- és mikroméretű (20 nm - 70 μm) részecskéket [4]. Ezek elfogyasztása elsősorban fizikai kockázattal jár: az állatok gyakorlatilag éheznek, ami természetesen a fizikai állapot leromlásához vezet. A tápláléklánc alsóbb szintjein levő szervezetek által elfogyasztott műanyag részecskék ráadásul a táplálékláncban felfelé mozognak, ilyen módon ragadozó állatok, pl. halak is ki vannak téve a szennyezésnek [5]. Laboratóriumi kísérletekben kimutatták, hogy ilyen módon zooplankton szervezeteket fogyasztó halak agyszövetében felhalmozódhat a mikroműanyag, agyi károsodást okozva [6].

Laboratóriumi körülmények között a legtöbb vizsgálatot Daphnia teszszervezeten végezték. Kimutatták, hogy a nanopolisztirol részecskék (Nano-PS) fogyasztása következtében csökkent a testméret, továbbá leromlott a reprodukciós hatékonyság [7]. Legnagyobb hatást az 52 nm átmérőjű részecskék váltották ki, ezek pl. Cui et al. [8] kísérletében gátolták a reprodukciót, továbbá abnormális embrionális fejlődést indukáltak.

A legtöbb tanulmány a mikro- és nanoműanyag káros fizikai hatásával foglalkozik. Tényleges toxicitásukról ugyanakkor kevés információ áll rendelkezésre, pedig ezek a szemcsék felületükön megköthetnek potenciálisan toxikus anyagokat is [9].

Célunk az volt, hogy egy széles körben alkalmazott ökotoxikológiai teszttel megvizsgáljuk, a nanoműanyag rendelkezik-e valós toxicitással. A teszt a *Vibrio fisheri* biolumineszcens, tengeri baktérium lumineszcencia gátlásán alapul, amely valójában a mintában jelenlevő potenciálisan mérgező anyag által kiváltott enzimgátlás következménye. A tesztszervezet az újabb rendszertani besorolás szerint átkerült az *Aliivibrio* nemzetségbe [10], viszont mivel a vonatkozó szabványok és a szakirodalom meghatározó része a *Vibrio fischeri* elnevezést alkalmazza, mi is ezen a néven hivatkozunk rá.

A biolumineszcencia gátlása műszeresen pontosan mérhető, maga a teszt gyors eredményt ad. Mindezek okán számos környezeti alkalmazása ismert [11-13]. Lappalainen et al. [14-15] a tesztnek egy kinetikus változatát fejlesztette ki, amelyet később szabványosítottak (ISO 21338:2010: Water quality - Kinetic determination of the inhibitory effects of sediment, other solids and coloured samples on the light emission of *Vibrio fischeri* /kinetic luminescent bacteria test/). Ennek a protokollnak az a lényege, hogy a baktériumokat olyan szuszpenzióban tartják, amelyben a teszszervezetek folyamatos kontaktusban vannak a potenciálisan toxikus, szilárd részecskékkel. A kinetikus mérés során a kapott jel alapján a zavarosság okozta fénykibocsátás gátlás világosan elkülöníthető a toxikus hatástól, itt ugyanis az első a készülék nem egy abszolút kontrollhoz képest viszonyítja a mintában megfigyelhető fénykibocsátást, hanem leolvassa a baktériumszuszpenzió fénykibocsátását a minta hozzáadásakor (referenciaállapot) és a beállított expozíciós idő leteltével. Az Ascent Luminométer (Flash rendszer) folyamatosan rögzíti az első 30 mp-es jelet, ilyen módon már az első 30 mp alatt indikációt kapunk a minta esetleges toxikus hatásáról [16].

Anyag és Módszer

Méréseinket az Aboatox által forgalmazott Ascent Luminométeren végeztük. Teszszervezetként a Hach Lange által forgalmazott NRRL-B-11177 *V. fischeri* törzset használtuk. A folyadékból szárított, előzetesen mélyhűtőben -18° C-on tartott baktériumok rekonstituciója a gyártó előírásai szerint történt. A toxicitás mérését az ISO 21338:2010 szabvány szerint végeztük.

A méréshez 50 nm átmérőjű műanyag gyöngyökből álló szuszpenziót használtunk (forgalmazó Thermo Scientific). Mivel még nem áll rendelkezésre olyan adat, amely alapján meghatározhattuk volna azt a koncentrációt, amelynél már jelentkezik a vizsgált tesztszervezeten valamilyen toxikus hatás, egy több nagyságrenden átívelő hígítási sort alkalmaztunk. A három választott koncentráció (1 g/l, 1 mg/l és 1 µg/l) mindegyikéből 11 tagú felező hígítási sort készítettünk, ami így az 1 g/l-es koncentrációtól 1 ng/l-ig terjed a teljes tartományt lefedve.

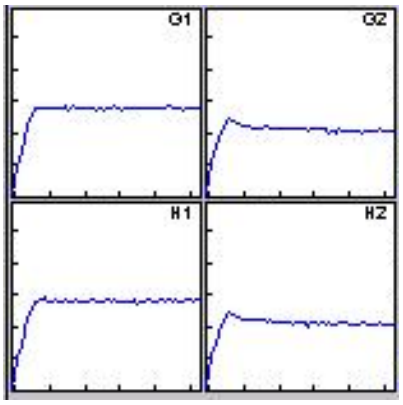
A beállított, 30 perces expozíciós idő után a szintén az Aboatox által forgalmazott Ascent szoftver segítségével kiszámítottuk az EC_{20} értékeket (azaz azt a koncentrációt, amely 20%-os fénykibocsátás gátlást okoz).

Eredmények és Értékelés

Az 1. táblázatban láthatók a számított EC_{20} értékek. Az 1 ng/l koncentráció esetében diagram illusztrálja az első 30 mp alatt kapott lumineszcencia csökkenést (1. ábra).

1. táblázat. EC_{20} értékek a három vizsgált koncentráció esetében.

Koncentráció	1 g/l	1 µg/l	1 ng/l
EC_{20}	5.2	17.31	30.51



1. ábra. Az 1 ng/l mintára kapott Flash diagram. A minta hozzáadása után a fénykibocsátás csökken, a készülék ezt az első 30 mp alatt folyamatosan rögzíti. G1, H1: kontroll; G2, H2: minta (a mérést két párhuzamossal végezzük)

A toxikológiai gyakorlatban az EC_{20} értéket tekintik a toxicitás alsó határának, azaz a 20%-nál nagyobb mértékű toxicitást kiváltó koncentráció jelent a környezetre tényleges kockázatot [17]. Eszerint már az 1ng/l kiindulási koncentrációból készített koncentrációsor elemzése alapján is számítottunk olyan EC_{20} értéket, amely tényleges, kimutatható toxicitást jelez.

Nagyon kevés tényleges adat áll rendelkezésre nano- ill. mikroműanyagok mért, környezeti koncentrációját tekintve. Ennek egyik oka feltehetőleg az, hogy nem állnak rendelkezésre egységes, szabványosítható mérési, kimutatási technikák. Eriksen et al. [18] amerikai édesvizekre 0.4–34 ng/L becslést ad, Besseling et al. [7] szerint tengervíz esetében a legmagasabb becsült koncentráció 0.51 mg/L. A *V. fischeri* teszt eredményei szerint tehát már a jelenlegi környezeti koncentráció is kiválthat ökotoxikus hatást. A toxicitás feltételezhető mechanizmusa lehet pl. a reaktív oxigén formák (ROS) megjelenése, bár ezt egyelőre leginkább algák esetében mutatták ki [9].

Ugyancsak kevés információ áll rendelkezésre nano- ill. mikroműanyagokkal végzett tényleges ökotoxikológiai tesztekről. Cui et al. [8] *Daphnia galeata* tesztszervezettel végzett kísérletet: a vízibolhákat 52 nm-es plasztik szemcséknek tette ki, az alkalmazott koncentráció 5 mg/L volt. Két napos expozíció után már megnövekedett mortalitást tapasztaltak, viszont ezt kiválthatta a szemcsék által okozott fizikai sérülés is.

Konklúzióképpen elmondható, hogy a *V. fischeri* teszttel kapott eredmények mindenképpen figyelemfelkeltőek, főleg akkor, ha tekintetbe vesszük, hogy egy akut, rövid expozíciós idővel végzett tesztről van szó. Egyrészt szükség lenne olyan tesztek elvégzésére, amelyek a vízi ökoszisztéma több faját reprezentálják, lehetőleg nemcsak akut, hanem krónikus expozíciós idő figyelembevételével. Ugyancsak a valóságos viszonyokra történő extrapolációt segítené elő, ha a tesztelést nem intakt gyöngyökkel végeznénk, hanem potenciálisan toxikus anyagokat már megkötött plasztik részecskékkel.

Köszönetnyilvánítás

Munkánkat a BIONANO_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 azonosítójú projekt anyagi támogatása tette lehetővé.

Irodalomjegyzék

[1] Dris, R., Imhof, H., Sanchez, W., Gasperi, J., Galgani, F., Tassin, B., Laforsch, C., Beyond the ocean. Contamination of freshwater ecosystems with (micro-) plastic particles. *Environmental Chemistry*, 12 (5), 539-550 (2015)

[2] Cole, M., Lindeque, P., Halsband, C., Galloway, T.S., Microplastics as contaminants in the marine environment: a review. *Marine Pollution Bulletin*, . 62 (12), 2588-2597 (2011)

[3] Dris, R., Gasperi, J., Rocher, V., Saad, M., Renault, N., Tassin, B., Microplastic contamination in an urban area: a case study in Greater Paris. *Environmental Chemistry*, 12, 592-599 (2015)

[4] Rosenkranz, P., Chaudhry, Q., Stone, V., Fernandes, T.F., A comparison of nanoparticle and fine particle uptake by *Daphnia magna. Environmental Toxicology and Chemistry,* 28, 2142–2149, (2009)

[5] Avio, C.G., Gorbi, S., Regoli, F.,Plastics and microplastics in the oceans: From emerging pollutants to emerged threat. *Marine Environmental Research,* 128, 2-11 (2017)

[6] Mattsson, K., Johnson, E.V., Malmendal, A., Linse, S., Hansson, L.A., Cedervall, T., Brain damage and behavioural disorders in fish induced by plastic nanoparticles delivered through the food chain. *Scientific Reports,* 7 (1), 11452 (2017)

[7] Besseling, E., Wang, B., Lürling, M., Koelmans, A.A., Nanoplastic Affects Growth of *S. obliquus* and Reproduction of *D. magna. Environmental Science & Technology*, 48, 12336−12343 (2014)

[8] Cui, R., Kim, S.W., An, Y.J., Polystyrene nanoplastics inhibit reproduction and induce abnormal embryonic development in the freshwater crustacean *Daphnia galeata. Scientific Reports*, 7, *12095* (2017)

[9] Cedervall, T., Hansson, L.A Mattsson, K., Nano-plastics in the aquatic environment. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 17 (10), 1712-1721 DOI: 10.1039/c5em00227c (2015)

[10] Urbanczyk, H., Ast, J., Higgins, M.J., Carson, J., Dunlap, P.V., Reclassification of *Vibrio fischeri*, *Vibrio logei, Vibrio salmonicida* and *Vibrio wodanis* as *Aliivibrio fischeri* gen. nov., comb. nov., *Aliivibrio logei* comb. nov., *Aliivibrio salmonicida* comb. nov. and *Aliivibrio wodanis* comb. nov. *International Journal of Systematic and Evolutionary Microbiology,* 57 (12), 2823-2829 (2007)

[11] Girotti, S., Ferri, E.N., Fumo, M.G., Maiolini, E., Monitoring of environmental pollutants by bioluminescent bacteria. *Analytica Chimica Acta,* 608, 2–29 (2008)

[12] Ma, X.Y., Wang, X.C., Ngo, H.H., Guo, W., Wu, M.N., Wang, N., Bioassay based luminescent bacteria: Interferences, improvements, and applications. *Science of the Total Environment,* 468–469, 1–11 (2014)

[13] Abbas, M., Adil, M., Ehtisham-ul-Haque, S., Munir, B., Yameen, B., Ghaffar, A. et al., *Vibrio fischeri* bioluminescence inhibition assay for ecotoxicity assessment: A review. *Science of the Total Environment*, 626, 1295–1309 (2018)

[14] Lappalainen, J., Juvonen, R., Vaajasaari, K., Karp, M., A new flash method for measuring the toxicity of solid and colored samples. *Chemosphere,* 3, 1069-1083 (1999)

[15] Lappalainen, J., Juvonen, R., Nurmi, J., Karp, M., Automated color correction method for *Vibrio fischeri* toxicity test. Comparison of standard and kinetic assays. *Chemosphere,* 45, 635-641 (2001)

[16] Mortimer, M., Kasemets, K., Heinlaan, M., Kurvet, I., Kahru, A., High throughput kinetic bioluminescence inhibition assay for study of toxic effects of nanoparticles. *Toxicology in Vitro,* 22, 1402-1417 (2008)

[17] Ventura, S.P.M., Silva, F.A. Gonçalves, A.M.M., Pereira, J.P., Gonçalves, J.P., Coutinho, J.A.P. Ecotoxicity analysis of cholinium-based ionic liquids to *Vibrio fischeri* marine bacteria. *Ecotoxicology and Environmental Safety,* 102, 48–54 (2014)

[18] Eriksen, M., Mason, S., Wilson, S., Box, C., Zellers, A., Edwards, W., et al. Microplastic pollution in the surface waters of the Laurentian Great Lakes. *Marine Pollution Bulletin, 77*, 177–182 (2013)

Analytic Hierarchy Process (AHP) - based network representation of multiobjective decision

Edina Kulcsár, Tamás Csiszér, János Abonyi

MTA-PE Komplex Rendszerek Figyelemmel Kísérése Kutatócsoport, Óbudai Egyetem
Pannon Egyetem
Veszprém, Egyetem u. 10, 8200

Multiobjective decision making, and optimisation problems often arise in engineering and business development. Risk assessment is an integral part of these multiobjective problems. Among risk assessment techniques the Failure Mode and Effect Analysis is a widely used method, particularly in the automotive industries. FMEA is a method to identify and fully understand the potential failure causes and the effects of failure on the system or end users, for a given product or process. An FMEA should serve as a guide to the development of a complete set of actions that will reduce risk associated with the system subsystem, and component or manufacturing/assembly process it an acceptable level. FMEA is a subjective, multi-criteria decision-making process. The FMEA team decides the evaluation of the failure modes based on their experience and knowledge. Therefore, different engineers can give different assessments. Besides, the FMEA can be a very complex problem. It is complicated to see through the whole FMEA for example if it is a multi-component product. It is stated that subjective judgment always have some per cent inconsistency and just the common decision can avoid it. In the FMEA the difficulty of the classification and the long-term evaluation can reduce the logical analysis.
Our key idea is to apply Analytic Hierarchy Process (AHP) method to ensure consistency and to help the risk assessment by pairwise comparisons. The original version of APH structures judgments the form of paired comparisons in a hierarchy. The first level represents the overall goal. The second level is the criteria which contribute to the target, while the third level includes the alternatives evaluated in terms of the criteria in the second level. The results of the pairwise evaluations are stored in a matrix. The analysis of this matrix highlights the inconsistencies and priorities which information is used for relating the elements of the decision problem according to the fulfilment of the overall goals, and for evaluating alternative solutions.

Our work aims to give a more precise determination of severity, occurrence and detection numbers and improve the e□ectiveness of the FMEA with a paired comparison based method. The proposed approach is applied to determine the inconsistency of the FMEAs and support the classification of the severity, occurrence and detection numbers.

Genetikus programozás alapú reaktor elfutási kritérium identifikálása

Genetic Programming based identification of reactor runaway criteria

Alex Kummer, Tamás Varga, János Abonyi

University of Pannonia, Department of Process Engineering

10, Egyetem St. Veszprém, H-8200

Összefoglaló

Ma már sokféle kritérium alkalmazását javasolják a reaktor elfutás jelzésére, amely megállapításból következik, hogy nincs egyértelmű, általánosan alkalmazható definíció arra vonatkozóan, mit értünk reaktor elfutás alatt. Jelen munka célja, hogy a rendelkezésre álló kritériumok közül a legtöbbször hivatkozott kritériumok együttes „tudását" tömörítsük kevesebb számú összefüggésbe. Az új, integrált reaktor elfutási kritérium identifikálásához, genetikus programozáson alapuló módszer alkalmazására tettünk javaslatot. Az irodalomban található reaktor elfutási kritériumok (például divergencia vagy Maxi kritérium) pusztán az elfutás bekövetkezését jelzik, de nem feltétlen jelent ez üzembiztonsági kockázatot, ugyanis utóbbi esetén egy fontos paraméter, a maximális hőmérséklet. Magasabb hőmérsékleten nagyobb reakciósebességgel lehet üzemeltetni a reaktort, vagyis a produktivitást növelni lehet, de ehhez szükség van olyan összefüggésre (elfutási kritérium), ami figyelembe veszi az adott rendszer esetén maximálisan megengedett hőmérsékleti értéket. A véletlenszerűen generált üzemeltetési paraméter kombinációk alkalmazása mellett számított állapotok kapcsán, az irodalomban található kritériumok együttes kiértékelésével döntöttünk, hogy elfutott, vagy nem elfutott állapot az aktuálisan vizsgált. Az így generált tanítási mintákat vettük alapul a genetikus programozáson alapuló elfutási kritériumok konstruálása során. Az elfutási kritériumok mellett, egyéb tervezési szempontokat is figyelembe lehet venni (pl. maximálisan megengedett hőmérséklet) a kritériumok létrehozása során, s így a fals jelzések aránya csökkenthető. A módszert két különböző esettanulmányon teszteltük (szakaszos és folyamatos üzemű üstreaktor) és különböző kritikus egyenleteket generáltunk, hogy a termikus elfutás bekövetkezését megfelelően és korán jelezzük.

Summary

Nowadays several runaway criteria are proposed to detect the development of thermal runaway, which follows that there is no a general definition of thermal runaway. The aim of this work is to integrate the knowledge of common applied runaway criteria in fewer equations. This contribution proposes a Genetic Programming (GP) based reactor runaway criterion construction. Common thermal runaway criteria (for instance divergence criterion or Maxi criterion) indicate the development of thermal runaway, although it may not result operation risk, because the criteria do not take into account the Maximum Allowed Temperature (MAT) and the maximum process temperature. Higher the temperature higher the reaction rate and the productivity can be increased if there is a runaway criterion which indicates runaway only if the process temperature would exceed MAT. Reactor operations and their states were generated with varying operation parameters, and the states were considered runaway or non-runaway by evaluating the different thermal runaway criteria. Training set was generated in this way, and this data were applied to generate different runaway criteria by GP. Different design specifications can be considered in the training set generation (for instance MAT) to construct critical equation, hence the false runaway indications can be decreased significantly. The methodology was tested on two case studies (batch and continuous stirred tank reactor) and different critical equations were constructed to indicate thermal runaway correctly and early.

Karbonsavak és szervetlen anionok analitikai elválasztása kriptand alapú ioncsere-állófázison

Analytical separation of carboxylic acids and inorganic anions on cryptand-based ion exchange stationary phase

Lukács Diána, Horváth Krisztián, Hajós Péter

Pannon Egyetem, Kémia Intézet

8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

Összefoglaló

A különféle mintamátrixokban előforduló szerves és szervetlen komponensek elválasztása és azonosítása számos kérdésre választ adhat a környezeti kémia, élelmiszer kémia, valamint a gyógyszeripar területén. A vizsgálandó minták változatos összetétele következtében folyamatos igény mutatkozik az analitikai módszerek fejlesztésére. A mintaspecifikus módszerfejlesztés sikerességének alapja – a megfelelő kromatográfiás állófázis megválasztása mellett – az elválasztandó komponensek retenciós viselkedésének ismerete. [1-3]

A kriptand alapú kromatográfiás állófázisok – a hagyományos ioncserélő töltetekkel szemben – több előnyös tulajdonsággal is rendelkeznek. Mivel a legtöbb kriptand molekula elektromosan semleges, a kation makrociklikus gyűrűbe való komplexálódása révén egy pozitív töltésű funkciós csoport jön létre, amely nagy szelektivitású anioncserélőként viselkedik. Ezen rendszer esetében az eluens koncentráció változtatásával egyszerűen szabályozható a retenció, valamint a mozgófázis kation (Li^+, Na^+, K^+) megválasztásától függően – az ioncserekapacitás változása révén – az oszlop szelektivitásának módosítására is lehetőség van [4,5].

Munkánk során, szerves és szervetlen anionok makrociklus alapú állófázison való visszatartásának leírására alkalmas retenciós modellt dolgoztunk ki. A modell használatával az adott komponens, különböző elválasztási körülmények esetén mutatott retenciós tényezője előre jelezhető. A modell levezetése és helyességének igazolása során 19 karboxilát és 7 szervetlen anion retenciós tényező értékeit használtuk fel. A komponensek elválasztása egy n-decil-2.2.2 kriptand funkciós csoportot tartalmazó anioncserélő állófázison történt, az elúció körülményeinek szisztematikus változtatása mellett.

Vizsgáltuk azon jellemző tulajdonságokat, alifás illetve aromás jelleg, mintakomponensek töltése, kriptand molekulákra jellemző komplexképződési, protonálódási és ioncsere egyensúlyi állandók, melyek meghatározzák a makrociklus alapú ioncserélőkön történő elválasztás hatékonyságát. Leírtuk a különböző szerkezetű karboxilát és szervetlen anionok eltérő elúciós körülmények között mutatott retenciós viselkedését. Eredményeink hasznos elméleti és gyakorlati információval szolgálnak a különböző mintamátrixokban vizsgálandó szerves és szervetlen komponensek hatékony elválasztására alkalmas folyadékkromatográfiás módszerek fejlesztéséhez.

Irodalomjegyzék

[1] Bruzzoniti, M., Mentasti, E., Sarzanini, C., Hajós, P., *J. Chromatogr A*, 770, 13-22 (1997)

[2] Hajós, P., Nagy, L., *J. Chromatogr B*, 717, 27-38 (1998)

[3] Hajós, P., Horváth, O., Denke, V., *Anal. Chem.*, 67, 434-441 (1995)

[4] Bruzzoniti, M. C., Hajós, P., Horváth, K., Sarzanini, C., *Acta Chim. Slov.*, 54, 14-19 (2007)

[5] Bruzzoniti, M. C., De Carlo, R. M., Horváth, K., Perrachon, D., Prelle, A., Tófalvi, R., Sarzanini, C., Hajós, P., *J. Chromatogr. A*, 1187, 188-196 (2008)

Köszönetnyilvánítás

A kutatást a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Hivatal FK128350 számú projektje, és az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-3 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programja támogatták.

Summary

Separation and identification of organic and inorganic compounds in a wide variety of complex matrices had been used to study processes in the field of environmental chemistry, food chemistry and pharmaceutical industry. Due to the diverse composition of the samples, there is a continuous need for the development of efficient analytical methods. The successful method optimization for specific samples based on the selection of a suitable stationary phase and also on the understanding of retention behavior of compounds to be separated. [1-3]
Cryptand based chromatographic stationary phases offer several advantages over conventional ion-exchange packing materials. Since most cryptands are neutral molecules, a positively charged functional group is generated, when the cation is bound by the macrocycle, which then provides the site for anion exchange with high selectivity. The system provides a convenient control of retention by the eluent concentration and allows the selectivity control of the separation column by the choice of mobile phase cation (Li^+, Na^+, K^+) through the change in ion-exchange capacity. [4,5]
In our work we developed a retention model which can be used for description of retention of organic and inorganic anions on macrocycle based stationary phase. By using this model, retention factors of compounds are predictable under different separation conditions. The development and verification of the model based on retention data of 19 carboxylates and 7 inorganic anions. The compounds were separated on an anion exchanger containing covalently bound n-decyl-2.2.2 cryptand, by changing the elution conditions systematically.
The major factors, aliphatic or aromatic nature, charge of solutes, complexation, protonation and ion exchange equilibria of the cryptand molecules that determine the efficiency of separation on macrocycle based ion-exchangers are discussed. Our study effectively characterizes the retention behavior of wide range of carboxylates and inorganic anions under different elution conditions. Our results have theoretical and practical importance in developing high-performance liquid chromatographic methods for the separation of organic and inorganic compounds in a wide variety of complex matrices.

References

[1] Bruzzoniti, M., Mentasti, E., Sarzanini, C., Hajós, P., *J. Chromatogr A*, 770, 13-22 (1997)
[2] Hajós, P., Nagy, L., *J. Chromatogr B*, 717, 27-38 (1998)
[3] Hajós, P., Horváth, O., Denke, V., *Anal. Chem.*, 67, 434-441 (1995)
[4] Bruzzoniti, M. C., Hajós, P., Horváth, K., Sarzanini, C., *Acta Chim. Slov.,* 54, 14-19 (2007)
[5] Bruzzoniti, M. C., De Carlo, R. M., Horváth, K., Perrachon, D., Prelle, A., Tófalvi, R., Sarzanini, C., Hajós, P., *J. Chromatogr. A*, 1187, 188-196 (2008)

Acknowledgement
The research was supported by the Hungarian National Research, Development and Innovation Office (NKFIH FK128350), and the ÚNKP-18-3 New National Excellence Program of the Ministry of Human Capacities.

Fotokatalitikus hidrogénfejlesztés módosított CdS-ZnS félvezetőn

Photocatalytic Hydrogen Production on Modified CdS-ZnS Semiconductor

Maali Amel Mersel, Lajos Fodor, Ottó Horváth

University of Pannonia

H-8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Summary

Lately, photocatalytic hydrogen production from H_2S has been one of the most investigated applications in photochemistry due to its environmental and economic advantages. It offers sustainable energy production and abatement of environmental pollution, besides, photocatalytic splitting of H_2S is energetically more favorable than that of water. The recovery of both hydrogen and sulfur from H_2S is an interesting alternative to the manufacture of sulfur alone by the Claus process.

In a typical photocatalytic process, photocatalysts absorb the incident light to generate electron-hole pairs, which can be separated and transferred to the surface for redox reactions.

Sulfide-based materials, as semiconductor photocatalysts, are regarded as good candidates for hydrogen evolution because they possess suitable conduction band edge and narrow band gap for sunlight absorption. In our research, we focused on the use of CdS-ZnS composite because of its controllable band gap width and excellent performance for hydrogen evolution under visible light irradiation. We mainly investigated the effect of several modifications on this type of photocatalysts on their hydrogen production activity.

First, we synthesized CdS-ZnS (1:3 molar ratio) composite with an enhanced photocatalytic activity for hydrogen production, than studied the influence of its modification on the surface with PdS (0.1 %), platinum (0.1%) and/or NiS (0.1%, 0.2%, 0.5% and 1%). It was found that PdS and Pt as co-catalysts didn't remarkably influence the photocatalytic activity, while the small amount of NiS increased the initial H_2 production with about 20%. Modification of catalyst with NiS was also investigated, not only on the surface but in the bulk as well. We also studied the effect of some main parameters (like the initial concentration of sulfide or the amount of catalyst) on the rate of hydrogen production. Subsequently, we investigated the reuse of our different photocatalysts, to see their economic profitability. TEM, SEM, EDS and DRS analyses were also made, to reveal the structural changes of the most efficient photocatalysts during the illumination with visible light.

Antimicrobial Aggregates: Food Colours Control Mechanism of a Bactericidal Peptide

Maria Ricci

Institute of Materials and Environmental Chemistry, Research Centre for Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences

Magyar tudósok körútja 2., Budapest, H-1117, Hungary

Due to the rapid increase of resistant bacterial infections, novel solutions for antibacterial treatment are highly desired. Natural antimicrobial peptides (AMPs), and sequences derived from them may offer several beneficial properties, such as e.g. little to no resistance developed against them during their million years presence [1]. However, despite intensive research, several challenging questions related to their *in vivo* interactions, mechanistic function, and often observed lower activity remain unanswered. Related, it is also hard to track how diet and additional external effects may manipulate *in vivo* function of these species, limiting their rational design.

Here we demonstrate that the human salivary AMP-derived DHVAR4 forms complexes with commonly used anionic food colours, such as tartrazine (TZ), which progresses into formation of cationic aggregates. The process leads to increased toxic activity against both Gram-positive and Gram-negative bacteria, but not to mammalian cells. In contrast to synergistic effects observed for mixed antibacterial compounds, this is a new mechanism, where TZ acts on the AMP in principle as a non-covalent stapling agent, increasing its helicity when on a lipid bilayer. This results in an altered action mechanism on the head-group region in lipid bilayers, manifesting in more controlled bilayer fusion mechanism and bacterial agglutination. The sequence similarity of cationic AMPs and the conformation-inducing effect observed recently [2] suggests that there may be a general mechanism where *in vivo* bioactivity of host defense peptides could be manipulated in a controlled manner by other compounds present at infection points. This offers a key strategic concept for future design of antimicrobials.

[1] Haney, E. F., Straus, S. K., & Hancock, R. E. (2019). Reassessing the Host Defense Peptide Landscape. Frontiers in chemistry, 7.

[2] Zsila, F., Bősze, S., Horváti, K., Szigyártó, I. C., & Beke-Somfai, T. (2017). Drug and dye binding induced folding of the intrinsically disordered antimicrobial peptide CM15. RSC Advances, 7(65), 41091-41097.

Önszerveződéssel képződő nanorendszerek

Self-assembled nanosystems

Miskolczy Zsombor, Biczók László, Megyesi Mónika, Tőke Orsolya

MTA TTK Anyag és Környezetkémiai Intézet

1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

Összefoglaló/ Summary

Elnyújtott hatóanyag felszabadulást biztosító rendszerek tervezéséhez alapvető fontosságú feltárni a nanohordozóból kilépés kinetikáját befolyásoló tényezőket. Nagy pontosságú módszert dolgoztunk ki a biokompatibilis kukurbit[7]uril (CB7) üregéből végbemenő disszociáció sebességi együtthatójának meghatározására. [1] Farmakológiai fontosságú alkaloidok szubsztituenseinek szisztematikus változtatásával feltártuk a molekulaszerkezet és a CB7 nanokapszulához kötődés aktiválási paraméterei közötti kapcsolatot. [2, 3]

Megállapítottuk, hogy az 1-alkil-6-alkoxi-kinolinium kationok szubsztituenseinek változtatása miként befolyásolja különböző makrociklus méretű szulfonátokalixarénekhez kötődés termodinamikai paramétereit és a keletkező asszociátumok szerkezetét. [4] Felületaktív kationok és szulfonátokalix[6]arén önszerveződésével szabályozható tulajdonságú nanorészecskéket állítottunk elő. Hidrofil fejcsoportot tartalmazó amfifil vegyületek alkalmazásakor a hőmérséklet változtatásával vezérelhető reverzibilis nanorészecske–szupramolekuláris micella átalakulást tudtunk elérni. [5]

Pirén származék polianionok és felületaktív kationok elegyítési arányának módosításával befolyásolható méretű és felületi töltésű nanorészecskéket szintetizáltunk. A nagyobb, negatív töltésű aggregátumok hőfejlődéssel járó folyamatban keletkeztek, míg a kisebb, pozitívan töltött részecskék entrópiavezérelt módon képződtek. Vizsgáltuk, hogy a komponensek önszerveződése milyen körülmények között eredményez szupramolekuláris micellákat nanorészecskék helyett. [6]

1-Tetradecil-3-metil-imidazolium bromid felületaktív ionos folyadék vizes oldatban micellákat alkotott entrópianövekedés által előidézett folyamatban. A kritikus micellaképzési koncentráció aminosavak jelenlétében csökkent. Legnagyobb hatást a triptofán okozott bázikus oldatban. [7]

For the rational design of delayed release, the knowledge of the effects influencing the kinetics of the exit from nanocarriers is essential. We developed an accurate method for the determination of the rate constant of the dissociation from the biocompatible cucurbit[7]uril (CB7) cavitand. [1] By systematic variation of the substituents of pharmaceutically important alkaloids, the relationship between the structure of the guest molecule and the activation parameters of the reversible binding to CB7 nanocapsule was revealed. [2, 3]

We unravelled how the alteration of the substituents in 1-alkyl-6-alkoxy-quinolinium cations influences the thermodynamics of the binding to sulfonatocalixarenes of various macrocycle sizes and the structure of the created associates. [4] Tailor-made nanoparticles were prepared by the self-organization of positively charged surfactants with sulfonatocalix[6]arene. Highly reversible temperature-responsive nanoparticle−supramolecular micelle transformation could be attained with surfactants containing hydrophilic headgroup. [5]

Polyanionic pyrene derivatives associated with cationic surfactants to nanoparticles whose diameter and surface charge could be tuned by changing the mixing ratio of the constituents. The larger negatively charged aggregates were produced in exotherm processes, whereas the assembly to smaller positive nanoparticles was entropy-controlled. We unveiled the conditions under which supramolecular micelles are formed instead of nanoparticles. [6]

1-Tetradecyl-3-methyl-imidazolium bromide surface-active ionic liquid assembled into micelles in water due to entropy gain. Addition of amino acids brought about critical micelle concentration diminution. The most substantial effect was observed in the presence of L-tryptophan at pH 12. [7]

Irodalomjegyzék

[1] Miskolczy, Zs., Biczók, L., Jablonkai, I., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 19, 766–773 (2017)
[2] Miskolczy, Zs., Biczók, L., Lendvay, Gy., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 20, 15986–15994 (2018)
[3] Miskolczy, Zs., Megyesi, M., Toke, O., Biczók, L., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 21, 4912 – 4919 (2019)
[4] Wintgens, W., Lorthioir, C., Miskolczy, Zs., Amiel, C., Biczók, L., *ACS Omega* 3, 8631-8637 (2018)
[5] Wintgens, V., Harangozó, J. G., Miskolczy, Zs., Guigner, J.M., Amiel, C., Biczók, L., *Langmuir* 33, 8052-8061 (2017)
[6] Miskolczy, Zs., Takahashi, Y., Kobayashi, N., Nakabayashi, S., Loukanov, A., Biczók, L., *Coll. Surf. A* 552, 161-168 (2018)
[7] Pavez, P., Rojas, M., Miskolczy, Zs., Biczók, L., *J. Phys. Org. Chem.* 32 (2019) e3814

Köszönetnyilvánítás A szerzők köszönik a BIONANO GINOP-2.3.2-15-2016-00017 számú pályázatra nyújtott anyagi támogatást.

High temperature pyrolysis of real wastes polymers for hydrogen rich syngas production

Mohammed Al-asadi, Norbert Miskolczi, Viktória Zsinka

University of Pannonia, Faculty of Engineering, Institute of Chemical Engineering and Process Engineering, MOL Department of Hydrocarbon & Coal Processing, H-8200, Veszprém, Egyetem u. 10, Hungary; tel. +36 88 624 000

Summary

Waste polymers (plastic, biomass, etc.) generate serious environmental challenge; however our everyday life is unmanageable e.g. without plastics. Furthermore, the rapid growth of the world population results rapid increases in the amount of waste polymers. Plastics have a unique role within the waste streams, because they are non-biodegradable and their chemically resistance is excellent. On the other hand, the world's energy consumption is heavily depending on non-renewable sources such fossil fuels especially for transportation, industry and residence. Hence, waste to energy processes should be an alternative and attractive way to minimize the amount of waste plastics and produce renewable energy.

Various techniques have been applied on waste plastic treatment in order to reduce the amount of plastics disposed by landfilling and saving the environment from such problems. Chemical recycling, such as pyrolysis is considered as one of the most suitable technique for converting of waste plastics/biomass into high value product. Using high temperature, catalysts, high value products, such as hydrogen and syngas should be obtained. Regarding the catalysts, synthetic zeolites loaded by transition metals are widely investigated. Especially the nickel based catalysts have enhanced properties for syngas production.

In this work, the mixtures of waste polymers were pyrolyzed at high temperature using tubular furnace reactor. Transition metal loaded ZSM-5 catalysts were synthetized by wet impregnation and tested to increase the syngas yields. The effects of catalyst type and reaction temperature on syngas production were also investigated. Products were followed by GC-FID and GC-TCD analyses.

Acknowledgments

The authors acknowledge the financial support of the project of the Economic Development and Innovation Operative Program of Hungary, GINOP-2.3.2-15-2016-00053: Development of liquid fuels having high hydrogen content in the molecule (contribution to sustainable mobility) and the project of Széchenyi 2020 under the EFOP-3.6.1-16-2016-00015: University of Pannonia’s comprehensive institutional development program to promote Smart Specialization Strategy. The Project is supported by the European Union and co-financed by Széchenyi 2020. The work was also supported by EFOP-3.6.1-16-2016-00015 Smart Specialization Strategy (S3) - Comprehensive Institutional Development Program at the University of Pannonia to Promote Sensible Individual Education and Career Choices project.

Chlorella zofingiensis heterotróf fed-batch fermentációs kísérletei

Heterotrophic fed-batch cultivation experiments with Chlorella zofingiensis

Nagy Balázs József, Dr. Németh Áron

BME Alkalmazott Biotechnológiai és Élelmiszertudományi Tanszék

1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.

Összefoglaló

A karotinoidok negyven szénatomból álló terpének, amelyek főleg növényekben, gombákban és algákban természetes pigmentekként vannak jelen. Valamennyiről tudjuk, hogy jól alkalmazhatók festőanyagokként, illetve antioxidáns tulajdonsággal is rendelkeznek, ezért számos felhasználási területen előfordulnak, főleg a kozmetikumiparban és a táplálékkiegészítők gyártásánál. A legnagyobb figyelemre az asztaxantin tett szert, amelynek 2016-os világpiaci forgalma 555 millió dollár volt, és előállítását az utóbbi években két algafajjal is vizsgálták. A Haematococcus pluvialis-t már ipari léptékben is szaporítják nyitott, kényszeráramlásos medencékben vagy fotobioreaktorokban, és asztaxantin-termelése csaknem negyvenszerese vetélytársának, a Chlorella zofingiensis-nek. Ennek ellenére az utóbbi algafaj vizsgálata is indokolt, hiszen annak biomassza-produktivitása és végső sejttömege sokszorosa a Haematocuccus-nak.

Kísérleteimben heterotróf, fénymentes környezetben vizsgáltam a Chlorella (Chromochloris) zofingiensis (SAG 211-14) karotinoid-termelését. Heterotróf tenyésztési eljárással szabályozottabb és kiszámíthatóbb termelést lehet kivitelezni az autotróf, fotobioreaktoros tenyésztésekhez képest. A megvilágítás limitáló hatásának híján az elérhető biommasszakoncentráció is lényegesen magasabb. A tenyésztési körülmények (hőmérséklet, pH, oxigénellátás) változtatásával és a mikroalgákra tett különféle stresszhatásokkal (sóstressz, nitrogénhiány) próbáltam eltolni az össz-karotinoidarányt az asztaxantin-termelés irányába.

Rátáplálásos fermentációs kísérleteim során, glükózt és acetátot tartalmazó táptalajon, nitrogénhiányos környezetben a szakirodalommal megegyező (0,71 mg karotinoid/g száraz biomassza) eredményeket sikerült elérném. Fejlesztéseim a magasabb biomassza- és asztaxantinhozam és -produktivitás irányába tartanak.

PET/PA blendek mechanikai tulajdonságainak vizsgálata olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú adalékok jelenlétében

Investigation of mechanical properties of PET/PA blends in the presence of olefin-maleic-anhydride copolymer based additives

Nagy Bianka, Varga Csilla

Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

Az elmúlt néhány évtizedben jelentős innováció vette kezdetét a polimer kompozitanyagok területén. Kihasználva a kompatibilizációs technológia fejlődését, kiemelkedő teljesítményű polimer blendek kerültek piacra és sikeres alkalmazásuknak köszönhetően a mindennapi élet számos területén megjelentek. A PET hulladék szerepe jelentős ezen a területen, mivel műszaki műanyagokkal alkotott blendjei megoldást nyújthatnak a globális műanyag hulladék által okozott környezetszennyezés enyhítésére.

Kísérleti munkánk során olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú adalékok hatásait vizsgáltuk PET/PA blendekben. Elsődleges célunk olyan PET/PA blendek előállítása volt, melyek megfelelő mechanikai tulajdonságokkal rendelkeznek, mint például megfelelő húzószilárdsággal, szakadási nyúlással és húzó modulusszal. A megfelelő mechanikai tulajdonságokkal rendelkező blendek előállítása során a legnagyobb figyelmet az elegyedés mértékének javítására szükséges fordítani, ezért a két különböző típusú műszaki műanyag összeférhetőségének javításához kompatibilizáló adalékok alkalmazására volt szükség. A blendek előállítása során további problémát okozott a makromolekulák termikus és hidrolitikus degradációja, azaz a polimer láncok felhasadása, melynek következtében csökkent a molekulatömeg, ezáltal a mechanikai tulajdonságok romlása következett be. A hidrolitikus degradáció mértéke az alapanyag előzetes kondicionálásával csökkenthető volt. A kiválasztott PET/PA blendek mechanikai jellemzőit négy kompatibilizáló adalék felhasználásával tanulmányoztuk, egy kereskedelmi, és három különböző szerkezetű, tanszéki fejlesztésű olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú adalékkal, utóbbit többféle adalék koncentráció mellett. A megfelelő adalék felhasználásával előállított blendeket extrúzióval és fröccsöntéssel egyaránt feldolgoztuk, a granulátumokból és a próbatestekből meghatároztuk a blendek mechanikai tulajdonságait húzóvizsgálattal és Charpy-féle ütővizsgálattal, illetve információt gyűjtöttünk a reológiai tulajdonságokra.

Description of mass transport through an asymmetric, bio-catalytic membrane reactors

Endre Nagy[1], Mónika Meiczinger, Imre Hegedüs, Marta Vitai

Chemical and Biochemical Procedures Laboratory, Institute of Biomolecular and Chemical Engineering, University of Pannonia,
Veszprem, Hungary, nagy@mukki.richem.hu

Abstract

The substrate transport accompanied by biochemical reaction has some special transport and operational properties, which can strongly affect the reaction efficiency of a bio-catalytic process. The biocatalyst is mostly immobilized in a porous, relatively thick support layer in an asymmetric membrane. It is assumed that the biocatalysts, which can be native enzyme or pre-treated, e.g. it is bound to nanoparticle for increasing its stability, is uniformly and densely distributed in the membrane and the reaction can be considered as a pseudo-homogeneous process.

The differential substrate balance equation for this process should contain diffusion-, convection-, due to transmembrane pressure, if it exists, and reaction terms. The first two terms can have constant or concentration/space coordinate dependent diffusion coefficient, convective velocity. Main points of this presentation are as follows: i) presenting the inlet and the outlet mass transfer rates and concentration distribution by constant parameters (diffusion coefficient, convective velocity, reaction rate constant) using flat-sheet membrane with skin layer; the reaction kinetics used is the general Michaelis-Menten kinetics, as well as first and zero-order reactions as its limiting cases; it is also discussed how the convective velocity can improve the reaction rate, and thus the reaction efficiency ii) discussion of the effect of concentration dependent diffusion coefficient; a general approach solution of the differential balance equation will be shown, which can be used in case of the nonlinear Michaelis-Menten kinetics, as well.

Moreover, it was prepared and investigated the properties of thermosensitive polymer components which then can be used, to our hope work, as drug carrier;

It was also investigated the biocatalytic enzyme nanoparticles in mixed tank reactor as well as in biocatalytic membrane reactor by its immobilization in an asymmetric membrane layer. Determination of the kinetic parameters of the bioreaction is in progress.

This research was supported finantially by National Development Agency grant GINOP-2.3.215-2016-00017 and 20385-3/2018/FEKUSTRAT.

Borostyánkősav fermentáció vizsgálata

Investigations on Succinic acid fermentation

Németh Áron

BME Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

H-1111 Budapest, Szt. Gellért tér 4.

Összefoglaló/ Summary

A borostyánkősav (succinic acid, SA) egy fontos vegyipari intermedier, amelyből finom kemikáliákat (pl detergensek), adalékokat (gyógyszer, élelmiszer (íz), növénystimulátorokat) illetve további fontos vegyipari intermediereket (malonsav-anhidrid, succinimid, 2-pirrolidinon, dimetil-szukcinát) lehet előállítani. Mivel a sejtek centrális anyagcseréjének (citrátkör) résztvevője, így az életfolyamatokban is kulcsfontosságú, ami a biológiai előállítás lehetőségét hordozza. Mivel a citrát körben az SA pont „fél úton" van, ezért CO_2 kilégzéssel és CO_2 fixálással is előállítható. Utóbbi jelentősége, hogy a CO2 mennyiségével a termék mennyisége is befolyásolható, mivel sztöhiometrikusan 1 CO2 tud beépülni 1 SA létrehozásakor. Vizsgálataink során *Actinobacillus succinogenes* esetén tanulmányoztuk a tápközeg összetétel, pH szabályozó ágensek, és az inert gáz minőségének hatását a termékmennyiségére, valamint fermentorban a magasabb cukor koncentráció hatását.

Succinic acid (SA) is an important chemical intermedier, from which fine chemicals (like detergents), additives (for pharmaceuticals, fodd(taste), plant stimualnts) as well as further important intermediers (maleic anhydride, succinimide, 2-pyrrolidinone, dimethyl-succinate) can be manufactured. Since SA is involved in the central metabolism of cells (in tricarboxilic acid cycle), it is a key-player in biochemistry of life, which carry the potential of biotechnological production. Since SA is formed in the „middle" of the TCA cycle it can be formed by both CO_2 release and fixation. The significance of the latter is that the amout of the product can be controlled wit hthe availability of CO_2, since stohiometrically 1 CO_2 is fixed into 1 SA. In our studies with *Actinobacillus succinogenes* media composition, the role and effect of pH regulator compounds as well as the effect of inert gas atmosphere was investigated in term of product amount. Furthermore in fermenter experiments the application of higher sugar concentration was also studied.

Karbonátok és mágneses nanorészecskék nukleációja ásványokon és biológiai felületeken

Nucleation of carbonates and magnetic nanoparticles on minerals and biological surfaces

Pósfai Mihály [1], Husztiné Nagy Georgina[2], Molnár Zsombor[1], Fodor Melinda[1], Ható Zoltán[3], Kristóf Tamás[3], Pekker Péter[2], Vonderviszt Ferenc[2]

[1]Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Föld- és Környezettudományi Intézeti Tanszék, Veszprém
[2]Pannon Egyetem, Bio-nanotechnológiai és Műszaki Kémiai Kutatóintézet, Veszprém
[3]Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Fizikai Kémiai Intézeti Tanszék, Veszprém

Összefoglaló

A kristályos anyagok képződésének első lépése a kristálycsírák kiválása, azaz nukleációja. Az úgynevezett „klasszikus nukleációs elmélet" több mint száz évig alkalmas elméleti keretet adott a nukleációs folyamatok értelmezéséhez. Az utóbbi 10-15 év kutatásai azonban rávilágítottak arra, hogy vizes oldatokból általában „nem-klasszikus" úton válnak ki a kristálycsírák: az oldatban stabil „prenukleációs klaszterek" jönnek létre, majd ezek aggregálódva nagyobb egységeket hoznak létre, melyek heterogén rendszerekben a felületekre adszorbeálódva hozhatják létre az új szilárd fázist. Kutatásunk során az új ismereteket felhasználva karbonátásványok és mágneses nanorészecskék felületeken történő kiválását vizsgáljuk, kettős céllal: egyrészt a természetben (pl. tavakban és bioásványok képződése során) lejátszódó jelenségeket kívánjuk megérteni, másrészt célunk olyan nanostruktúrák létrehozása, amelyek mágneses tulajdonságaik révén felhasználhatók gyakorlati alkalmazásokban. Munkánk során természetes rendszerekből származó minták elektronmikroszkópos vizsgálatát, laboratóriumi kristályosítási kísérleteket és molekuladinamikai számításokat végzünk.

A bakteriális flagellumot alkotó flagellin fehérje génsebészeti módosításával olyan szálas morfológiájú sablonokat állítottunk elő, amelyek specifikusan a vas oldatból való megkötésére, illetve a magnetit nanorészecskék szuszpenzióból történő „befogására" alkalmas kötőhelyeket tartalmaznak. A vaskötő helyekkel rendelkező filamentumokon 2–5 nm nagyságú magnetit nanorészecskék képződtek. Feltételezzük, hogy ezek amorf szerkezetű, voltaképpen sűrű folyadékfázis cseppeket alkotó prekurzorai még az oldatban képződtek, majd a filamentumokra kötődve kristályosodtak magnetitté. A magnetit részecskék megkötésére tervezett filamentumokat különböző morfológiájú – többségében oktaéderes illetve kocka – alakú részecskék megkötésére használtuk, feltételezve, hogy a különböző atomi struktúrájú felületek között különbségeket fogunk észlelni. A várakozásokkal ellentétben mindkét morfológiájú részecske megkötődött a filamentumokon. A nanoszálak részecskékkel való borítása azonban egyenetlen, ezért a kísérleti körülmények további finomítása szükséges ahhoz, hogy valamilyen gyakorlati alkalmazáshoz használható mágneses nanoszálakat kapjunk.

A Balaton és a Fertő-tó vizéből néhány mikrométeres, Mg-tartalmú kalcit- és dolomitkristályok válnak ki, amelyek a szmektitcsoportba tartozó agyagásványok nanométeres méretű foszlányaihoz tapadnak. A kalcitképződést laboratóriumi körülmények között, különböző agyagásványok jelenlétében reprodukáltuk, és azt tapasztaltuk, hogy a szmektit agyagásványok jelentősen megnövelik a kivált kalcit mennyiségét, befolyásolják a képződő kristályok alakját és szemcseméretét. Bizonyos esetekben kisebb túltelítettségnél indul meg a kalcitképződés a szmektit jelenlétében, mint a homogén oldatban vagy kaolinit jelenlétében. A kísérleti eredmények összhangban vannak mind a molekuladinamikai számításainkkal – amelyek szintén arra utalnak, hogy a szmektit negatívan töltött felülete hatékonyan köti meg az oldatban képződő klasztereket –, mind a prenukleációs klaszterek jelenlétét feltételező új kristályosodási elméletekkel. A továbbiakban a megismert folyamatokat felhasználjuk genetikailag módosított filamentumokon végzendő karbonát-kristályosítási kísérletekben, melyeknek célja a kiváló karbonát szerkezetének (polimorfizmusának) szabályozása.

Ez a munka az NKFIH K116732 és NN117849, valamint a BIONANO-GINOP-2.3.2-15-2016-00017 projekt támogatásával készült.

Applying a carbon–diatomite earth composite adsorbent for non-steroidal anti-inflammatory drug removal
Aktív szén–diatómaföld kompozit adszorbens alkalmazása nem szteroid gyulladáscsökkentő gyógyszerkészítmények eltávolítására

Emília Pozsgai, Barbara Kovács, Renáta Gerencsér-Berta, Ildikó Galambos

University of Pannonia, Soós Ernő Water Technology and Research Center
Zrínyi Miklós Str. 18., 8800 Nagykanizsa

Summary

Due to their intensive use, non-steroidal anti-inflammatory drug residues are significant micropollutants in the aquatic environment. In this study, a new carbon–diatomite earth composite adsorbent was taken for diclofenac and naproxen removal. High performance liquid chromatography was performed for revealing the adsorption efficiency of the carbon-diatomite earth composite adsorbent. The diclofenac, naproxen and diclofenac:naproxen 1:1 model solutions in different concentrations, and the composite adsorbent in different amounts were applied. Our investigations confirm a high micropollutant removal efficiency for this novel adsorbent.

Összefoglaló

A nem szteroid gyulladáscsökkentő gyógyszerkészítmények széleskörű használatuk következtében jelentős mikroszennyezőként vannak jelen a vízi környezetben. Dolgozatunkban egy új aktív szén–diatómaföld kompozit adszorbenst alkalmaztunk diklofenák és naproxen eltávolítására. Nagy hatékonyságú folyadékkromatográfos vizsgálatokat végeztünk az aktív szén–diatómaföld kompozit adszorpciós hatékonyságának meghatározására. Különböző koncentrációjú diklofenák, naproxen és diklofenák:naproxen 1:1 modelloldatokat, valamint különböző mennyiségű kompozit adszorbenst alkalmaztunk. Az új adszorbenssel végzett vizsgálataink magas mikroszennyező-eltávolítási hatékonyságot igazolnak.

We acknowledge the financial support of Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00016.
Köszönjük a támogatást a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 azonosító számú „Vízbázis-védelem, moduláris, mobil vízkezelő rendszerek és szennyvízkezelő technológiák fejlesztése a Pannon Egyetem bázisán hazánk dinamikus export növekedésének elősegítése érdekében” című projektnek.

Modeling of agro-ecosystems in changing environment I. – example and problem statement –

Agrár-ökoszisztémák modellezése változó környezeti feltételek mellett I. - példa és probléma felvetés -

János Rásó[1], Béla Csukás[2], Mónika Varga[2]

[1]NARIC Forest Research Institute, Dept. of Plantation Forestry, Püspökladány, Hungary
[2]Kaposvar University, Institute of Methodology, Kaposvar, Hungary

Summary

Preparing for and adapting to the effects of climate change is a major challenge. The analysis and design of spatially and temporally multiscale systems increasingly requires the use of engineering methods. This presentation mainly focus on the problem statement of complex interactions in agro-ecological systems.
According to climate predictions, short-term effects prevail basically through the change of surface layer's water balance, that affects further on soil utilization and primer biomass production. The emergence of more and more frequent extreme climatic characteristics in the last decades, the hotter and drier summers, the extreme temperature and precipitation adversely affect natural vegetation and the condition of forests. Decreasing productivity became a real problem also in the agricultural sector, reducing both the quality and quantity of agricultural production, as well as the production safety.
There is a close relationship between climate and vegetation, as forest vegetation is not only a climate indicator, but also a global climate influencing factor. Forest has increased cooling effect on its environment, compared with other vegetation. It is caused by its larger leaf area index that expressed in higher transpiration and assimilation. Global warming is moderated by forest carbon capture, as this balance is positive in the temperate zone.
Forest cover in Hungary is currently around 21%, which should be increased to 27% within a few decades. This goal cannot only be achieved by afforestation, but the so called non-forest plantations can also have important role in the future. These systems are particularly important in the more efficient use of less-favored agricultural areas, because in this way forest coverage can be increased with the synergic increase of agricultural production, also with utilizing of agricultural subsidies.
Traditional, but almost forgotten land use modes are becoming more and more prevalent today, due to their economic, nature conservation, or landscape protection aspects. Agroforestry shelterbelt systems belong to these old-new land use modes. Main characteristic of shelterbelt systems is the conscious combination of woody perennials with agricultural crop production. These multifunctional systems have favorable return on investment, and they also provide important ecosystem services, such as carbon sequestration, water and soil protection and biodiversity conservation. At the same time, besides mitigating the adverse climatic effects and ecological-environmental benefits, they contribute to production of biomass energy, and reduce the demand load on forest stocks.

Support of EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projects is acknowledged.

Összefoglaló

A klímaváltozás hatásaira való felkészülés és az ahhoz való alkalmazkodás jelentős kihívás. A térben és időben nagy léptékű rendszerek elemzése és tervezése ezért egyre inkább feltételezi a mérnöki módszerek felhasználását. Jelen előadásban ezekben az összetett agrár-ökológiai rendszerekben megjelenő problémák felvetésére fókuszálunk.
A klímaváltozással kapcsolatban készült előrejelzések arra utalnak, hogy a rövidtávú hatások elsősorban a termőréteg vízháztartási viszonyainak változásán keresztül érvényesülnek a talajhasználatra és a primer biomassza termelésre. Az utóbbi évtizedekben fokozódó jelleggel tapasztalható szélsőséges klimatikus jellemzők megjelenése, az egyre forróbb és szárazabb nyarak, a szélsőséges hőmérséklet és csapadék előfordulása kedvezőtlenül befolyásolják a természetes vegetációt, az erdők állapotát. A csökkenő termőképesség valódi problémaként jelentkezik az agrárszektorban is, csökkentve a mezőgazdasági termelés minőségi és mennyiségi paramétereit, az agrárágazat termelésbiztonságát.
A növénytakaró és az éghajlat között szoros kapcsolat áll fenn, ugyanis az erdővegetáció nemcsak klímaindikátor, hanem globális klímabefolyásoló tényező is. Az erdőnek, a többi vegetációformánál magasabb a levélfelületi indexe, így transpirációja és asszimilációja is nagy, amely a környezetére hűtő hatást fejt ki. A globális felmelegedésre fékezőleg hat az erdő szénmegkötése, melynek a mérlege pozitív a mérsékelt éghajlati övben.

Magyarország erdősültsége jelenleg közel 21 százalék, amelyet indokolt lenne néhány évtizeden belül 27 százalékra emelni. Ez a cél nem csak erdőtelepítéssel érhető el, a jövőben fontos szerepet kaphatnak az ún. erdőn kívüli fásításokként létrehozott rendszerek. Ezek különösen a kedvezőtlen adottságú mezőgazdasági területek eredményesebb hasznosításának vonatkozásában jelentősek, ugyanis ezzel az ország fával, faállománnyal való borítottsága úgy növelhető, hogy közben a mezőgazdasági termelés is fenntartható, és az agrártámogatások is igénybe vehetők.
Az egykor széles körben elterjedt gyakorlatnak számító, de ma már szinte feledésbe ment tájhasználati módok napjainkban mind gyakrabban kerülnek ismét előtérbe gazdasági, természetvédelmi és tájvédelmi vonatkozásaik következtében. Ezen tájhasználati módok közé tartozik a mezővédő erdősávok alkalmazása is.
Az erdősávok jellegzetessége, hogy egyazon területen a fás vegetációt tudatosan kombinálják mezőgazdasági haszonnövény kultúrákkal. Az így nyert multifunkcionális rendszer kedvező gazdasági megtérülési mutatókkal rendelkezik, valamint olyan fontos ökoszisztéma-szolgáltatásokat nyújt, mint például a szénmegkötés, a víz- és talajvédelem, illetve a biodiverzitás megőrzése. Ugyanakkor a kedvezőtlen klimatikus hatások mérséklése és ökológiai-környezetvédelmi pozitívumai mellett hozzájárul az egyre növekvő energia célú biomassza igény kielégítéséhez, ezzel pedig enyhíthető az erdei faállományaink ilyen irányú terhelése.

Köszönet az EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projekt támogatásának.

Sörtörköly savas és enzimes hidrolízisének vizsgálata

Investigation of acidic and enzymatic hydrolysis of brewer's spent grain

Rozbach Margaréta, Bedő Soma, Fehér Anikó, Fehér Csaba

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem, Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék, Biofinomító Kutatócsoport

1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3-9.

Összefoglaló

Az áztatott árpamaláta vagy más néven sörtörköly (brewer's spent grain (BSG)) a söriparban nagy mennyiségben keletkező lignocellulóz alapú melléktermék. Míg világszerte több mint 2 billió hektoliter sört állítanak elő évente, addig Magyarországon három nagy sörgyárban több mint 6 milló hektoliter az éves termelés. Száz liter sör előállítása során hozzávetőleg 20 kg BSG keletkezik. Fehérje összetételének és rost tartalmának köszönhetően jelenleg értékes takarmányként tartják számon, azonban nagy nedvesség tartalma miatt nehezen szállítható és tárolható. Ezért olyan régiókban, ahol a sörüzem vonzáskörzetében nincs állattartó gazdaság, a BSG nyereséges felhasználása nem megoldott. Ugyanakkor nagy cellulóz- és hemicellulóz tartalmának köszönhetően potenciális nyersanyaga számos értéknövelt termék, mint pl xilit, arabinóz, xilooligoszacharidok vagy bioetanol, biofonomító szemléletű előállításának. Kutató munkánk során vizsgáltuk a sörtörköly savas és enzimes bonthatóságát, valamint a kapott hidrolizátumokat mono- és oligoszacharid összetételre nézve.

Summary

Brewer's spent grain (BSG) is generated as a by-product from the beer brewing industry. Worldwide, more than 2 billion hectolitres of beer are being produced every year. In Hungary 6 million hectolitres of beer is produced by three major brewer companies. Per 100 litres of beer, 20 kg of BSG accrue. BSG is mainly utilized as an advantageous animal feed because its high protein and fibre content but on the other hand due to its high moisture content, it can't be stored or transported over large distances. That's why in regions with low demand for cattle feed there is currently no profitable use of BSG. However, due to its high content of cellulose and hemicellulose, BSG has huge potential as a feedstock for bio-based manufacturing processes and sustainable production of value-added products for example xylitol, arabinose and xylooligosaccharides or bioethanol. In our research, we investigated the acid and enzymatic degradability of the BSG through analysing the hydrolysates for the mono- and oligosaccharide composition.[1][2][3]

Irodalomjegyzék

[1] S. I. Mussatto, G. Dragone, and I. C. Roberto, *Brewers ' spent grain : generation , characteristics and potential applications*, vol. 43, pp. 1–14, (2006)

[2] K. M. Lynch, E. J. Steffen, and E. K. Arendt, *Brewers ' spent grain : a review with an emphasis on food and health*, no. July, pp. 553–568, (2016)

[3] Magyar Sörgyártók Szövetsége, *Éves jelentés 2017*, (2017)

Protein library design for the directed evolution of specific binder flagellin variants

Juhi Siddiqui, Hajnalka Jankovics, Ferenc Vonderviszt

Research Institute of Biomolecular and Chemical Engineering,University of Pannonia
8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Natural evolution has produced a great diversity of proteins that can be harnessed for numerous applications in biotechnology and pharmaceutical science. Commonly, specific applications require proteins to be tailored by protein engineering. Directed evolution is a type of protein engineering that yields proteins with the desired properties under well-defined conditions and in a practical time frame. Novel selection strategies, the ribosome display technology, and the symbiosis of rational design approaches and directed evolution continue to advance protein engineering. Ribosome display utilizes formation of the mRNA–ribosome–polypeptide ternary complex in a cell-free protein synthesis system to link genotype (mRNA) to phenotype (polypeptide).

Flagella are the locomotive organelles of bacteria. The helical filaments of bacterial flagella extend over the surface of the cell membrane and are made up of several thousand copies of the flagellin protein. Flagellar filaments are self-assembling systems, i.e, under suitable conditions flagellin monomers can spontaneously assemble into native-like filaments. Only the conserved terminal regions of flagellin are involved in filament formation while the central region, which forms the D3 domain, is exposed on the filament surface. As it has been demonstrated earlier, the hypervariable D3 domain itself has a stable structure, thus it could be used as a scaffold protein. Since the three loop regions of D3 are positioned ideally to form a binding pocket, amino acid sequence of its L1-L3 surface loop regions will be randomly mutated to generate a huge number of D3 variants. Molecular modelling studies have shown that the best for this modification are the GLGG motif in L1, GGTGK in L2 and TS in L3. Random mutation of these 11 amino acids theoretically results in about the 10^{15} order of magnitude variant library, from which specific binders for a particular target molecule will be selected by ribosome display technology.

In my talk I would like to talk about how we designed the DNA library of the D3 variants suitable for ribosome display. The first step was the construction of the DNA library encoding the D3 variants, which includes the specification of the nucleotides to be mutated. Furthermore, the construct of the DNA template must include the T7 promoter region, Shine Dalgarno sequence, which is the ribosome binding site, a restriction enzyme cleavage site to make the D3 gene transportable to another plasmid, followed by the start codon of translation, and the coding sequence of the DNA library, followed by another restriction enzyme recognition sequence. Stop codon must be omitted to avoid dissociation of the translated protein from the ternary complex. Finally, supporting the proper folding of the D3 variants, coding sequence of a linker protein/peptide must be fused to the construct. At the pretty unstable mRNA level, the construct could be further protected against RNases by the incorporation of a so called stem loop regions on both ends of the sequence.

The project is supported by BIONANO_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 and OTKA NN117849.

Komplex mintakeverékből származó komponensek eredetének meghatározása és vizsgálata alterációs analízissel

Determining the origin of components from complex sample mix and testing it with alteration analysis

Simon József[1,2], **Rédei Csanád**[2], **Zelenyánszki Dóra**[2], **Felinger Attila**[2,3]

[1]*Pannon Egyetem, Analitikai Kémia Intézeti tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10.*
[2]*Pécsi Tudományegyetem, Analitikai és Környezeti Kémia Tanszék, 7624 Pécs, Ifjúság u. 6.*
[3]*MTA-PTE Molekuláris Kölcsönhatások az Elválasztástudományban Kutatócsoport, 7624 Pécs, Ifjúság u. 6.*

Összefoglaló

Egy analitikai vizsgálat során általában nem foglalkozunk vele, hogy a minta komponensei honnan származnak. A kromatogram értékelésekor csupán az adott vételezési helyen begyűjtött minta összetételét tudjuk megállapítani. Ahhoz hogy a komponensek eredetét is megtudjuk, további kutatások szükségesek. Vannak azonban olyan esetek, amikor kromatogramok alapján a komponensek különböző eredetét ki tudjuk mutatni.
Ha van egy mintakeverékünk, ahol a mért komponensek kettő vagy több mintából származnak, az eredetük eltér, akkor az egy-egy csoportba tartozó csúcsok egy méréssorozat során eltérő viselkedést mutathatnak. Amennyiben a sorozat felvétele közben változik a minta összetétele vagy valamilyen egyéb paraméter, akkor ezek a különböző viselkedések detektálhatók, elkülöníthetők és azonosíthatók. Ennek a kimutatására tökéletesen alkalmas az általunk kifejlesztett alterációs analízis. Ezzel a módszerrel a kromatogram sorozatból előállítunk olyan alterációs térképeket, amelyek lehetővé teszik a változások egyszerű és hatékony vizsgálatát. A térképek megmutatják, hogy az egyes kromatográfiás csúcsokon milyen és mekkora változások mennek végbe. A különböző mintából származó csúcsok képe pedig elkülöníthető lesz. Így az alterációs analízis alapján kimutatható, hogy az adott kromatogram csúcsai, hány különböző mintából származnak, melyik csúcs melyik mintához tartozik, valamint ezek hogyan változnak a méréssorozat alatt.
Ezzel a módszerrel nemcsak offline mérés végezhető el, folyamatok monitorozása is lehetséges. Ebben az esetben az alterációs térképek számolásához felhasznált kromatogramokhoz online mindig az aktuális mérést hozzáadjuk. A módszer előnye, hogy a térképek csak a változást mutatják, így a legapróbb eltérések is könnyen, azonnal detektálhatók lesznek.

Hulladék elasztomer típusú őrlemény szemcseméretének hatása a mechanikai jellemzőkre polimer blendekben

Effects of waste elastomer's particle size on the mechanical properties in polymer blends

Simon-Stőger Lilla, Kéri Kitti, Varga Csilla

Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

H-8200, Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló

Az egyre növekvő mennyiségű gumi hulladékok újrahasznosítása területén komplex kihívással nézünk szembe, hiszen a gumik felületén nincsenek funkciós csoportok, nem olvadnak meg, térhálós anyagok, felületük tagolt és szinte bármely anyaggal szemben kis adhézióval rendelkeznek. A hulladék elasztomer típusú anyagok újrahasznosítása céljából ugyanakkor kedvező megoldást jelenthet a mechanikai újrahasznosítás a gazdasági, ökológiai és technológiai szempontokat is figyelembe véve.

A mechanikai újrahasznosítás egyik lehetséges módja a hulladék elasztomer őrlemények polimer mátrixba való beépítése, amely kísérleti munkánk során kereskedelmi nagysűrűségű polietilén (HDPE) volt. A hulladék elasztomert illetően az etilén-propilén-dién monomerre (EPDM) esett a választásunk, amelyet annak különböző szemcseméret-tartományokba (<0,25 mm; 0,25-0,40 mm; 0,40-0,63 mm; 0,63-1,00 mm; 1,00-1,25 mm és >1,25 mm) való frakcionálása után a valószínűségszámítás alapvető módszereivel vizsgáltunk. Az előbbi alapján kiválasztott tartományokba eső elasztomer őrleményeket kevertük a poliolefin mátrixhoz. Az eltérő szemcseméret-tartományok bekeverése által gyakorolt hatást a blend két különböző összetételében is tanulmányoztuk, egyrészt a 90/10 HDPE/EPDM másrészt a 70/30 HDPE/EPDM összetételekben, hiszen célkitűzésünk között minden esetben szerepel a blendek hulladék-tartalmának maximalizálása. Az optimális szemcseméret-tartomány kiválasztását követően - amely a 0,4 mm alatti tartománynak adódott - a polimer és az elasztomer fázis közötti határfelületi adhézió fokozását kísérleti olefin-maleinsav-anhidrid kopolimer alapú kompatibilizáló adalékok hozzáadásával kívántuk megvalósítani, amely nedvesítő, feszültségcsökkentő, illetve összekötő elemként egyaránt funkcionálhat a komponensek között.

Hangolható méretű arany nanorészecskéket tartalmazó enzim szubsztrát konjugátumok – lehetséges szenzorikai alkalmazások

Tunable size gold nanoparticle - enzyme substrate conjugates : possible sensor applications

Szabó Tamás[1], Csupor Barbara[1], Pekker Péter[2], Mészáros Gábor[1], Keresztes Zsófia [1]

[1] Functional Interfaces Research Group, Institute of Materials and Environmental Sciences, Research Centre for Natural Sciences, Hungarian Academy of Sciences, 1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2., Hungary

[2] Research Institute of Biomolecular and Chemical Engineering University of Pannonia, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10., Hungary

Összefoglaló/ Summary

A nanorészecskék kialakításában szerepet játszó, klaszterképző peptid szerkezet kombinálható a mesterséges enzim-szubsztrátokban alkalmazott enzim specifikus aminosav sorrenddel. A cél az arany klaszterek méretfüggő jelentési funkciójának alkalmazása az enzimatikus folyamatok kimutatásában.

Cluster forming peptide structure can be combined with enzyme specific aminoacid sequence used in artificial enzyme substrates. The aim is to use the size dependent reporting function of gold clusters in the detection of enzymatic processes.

A szubnano mérettől 50 nanométerig terjedő méretű arany nanoklasztereket és nanorészecskék állítottunk elő peptid-konjugátumként. A konjugátumok fehérjebontó enzim által hasítható specifikus aminosav sorrendű szerkezeteket is hordoznak. A klaszterek és nanorészecskék méretfüggő fotolumineszcens és UV-Vis abszorbancia jellemzőit spektroszkópiai módszerekkel értékeltük, a méreteloszlást transzmissziós elektronmikroszkóppal igazoltuk.

A nanorészecske-peptid konjugátumokat a későbbiekben felület érzékeny detektálási technikákban szeretnénk alkalmazni. Különböző felületi rögzítési stratégiákat, önszerveződési folyamatokat és kémiai kötési lehetőségeket vizsgáltunk, annak érdekében, hogy optimalizáljuk a felszínhez kötött konjugátumok mennyiségét és elhelyezkedését.

Elektrokémiai méréstechnikákkal, így például a ciklikus voltammetriával és a differenciál impulzus voltammetriával vizsgáltuk a felületen rögzített peptidkonjugátumok elektrokémiai aktivitását. Fehérjebontó enzimek kinetikai vizsgálatával tanulmányoztuk a klaszterek és nanoszerkezetek alkalmazhatóságát specifikus enzimatikus hasítási folyamatok jelzőszerkezetként.

A kutatómunkát a BIONANO_GINOP-2.3.2-15-2016-00017 és a FORMILK 690898 H2020-MSCA-RISE-2015 projekt támogatta.

Vízoldható, membránaktív foldamerek szintézise és jellemzése

Synthesis and characterization of water soluble membrane active foldamers

Szigyártó Imola Csilla

MTA Természettudományi Kutatóközpont, Anyag-és Környezetkémiai Intézet

1117 Budapest, Magyar tudósok krt. 2

Összefoglaló/ Summary

A fehérjékhez hasonló nem természetes komplex szerkezetek tervezése egyre inkább a tudományos érdeklődés középpontjába került, köszönhetően a széles körben - az orvostudománytól a bionanotechnológián át az organokatalízisig - terjedő alkalmazhatóságnak. Váltakozó oldallánc-kiralitású β^3-aminosavakból szintetizált foldamerek lipo- és hidrofil viselkedését vizsgáltuk. Ezen molekulák vízben, spontán nanométeres oligomereket alkotnak, a hidrofób oldalláncokkal befele, a hidrofil oldalláncokkal kifele. A lipid membránokkal való kölcsönhatás következtében ezek a struktúrák képesek a hidrofób részt kívülre fordítani, és a lipid kettős réteg felszínére vagy belsejébe elhelyezkedni. Az általunk előállított vízben oldódó foldamerek alkalmasnak bizonyultak teljesen hidrofób, nem vízoldható molekulák bezárására és szállítására, hasonlóan a retinol kötő fehérjékhez.

Design of increasingly complex non-natural protein-like assemblies receives intensive scientific attention, as these constructs could reach widespread applicability from medicine through bionanotechnology to organocatalysis. Foldamers synthesized from β^3- amino acids with alternating side chain chirality as well as their lipo- and hidrophilic behaviours were investigated. These resulted molecules self-assembling to low-nanometer scale oligomers in water, with hydrophobic core inside and hydrophilic part outside. Upon interacting with lipid membranes, these scaffolds are able to turning the hydrophobic part outside and associate or insert into the bilayer. The water soluble scaffold is also able to readily host and carry fully hydrophobic non-water soluble molecules, similarly as e.g. retinol binding proteins.

Maximális forráspontú azeotróp elegyek elválasztása extraktív desztillációval

Szilágyi Botond, Tóth András József

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Összefoglaló

Erősen nem-ideális elegyek desztillációval történő elválasztása összetett és komplex folyamat. Munkánk során egy új eljárást, az extraktív heteroazeotróp desztillációt (EHAD) mutatjuk be három-, illetve négykomponensű hulladék oldószerelegyek elválasztásán keresztül. Ez a technika az extraktív- és a heteroazeotróp desztilláció kombinációja: extraktív ágensként vizet adagolunk a kolonna legfelső tányérjára és egy fázisszeparátor segítségével választjuk el a fejtermékben keletkező heteroazeotrópot. Maximális forráspontú azeotrópot tartalmazó elegyek desztillációs elválasztását vizsgáltunk folyamatszimulátor környezetben. Megállapítottuk, hogy az EHAD-eljárás alkalmas a víz-aceton-kloroform-metanol elegy esetében aceton-kloroform és metanol-víz párok kialakítására.

A publikáció az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4-BME-209 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának, a Nemzeti Tehetség Program NFTÖ-18-B-0154 pályázatának, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíjnak, az 112699-es és az 128543-as számú OTKA pályázatok támogatásával készült. A kutató munka az Európai Unió és a magyar állam támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával, a GINOP-2.3.4-15-2016-00004 projekt keretében valósult meg, a felsőoktatás és az ipar együttműködésének elősegítése céljából.

Irodalomjegyzék

[1] Andras Jozsef Toth, Botond Szilagyi, Eniko Haaz, Szabolcs Solti, Tibor Nagy, Ariella Janka Tarjani, Nora Valentinyi, Peter Mizsey: Separation of mixture containing maximum boiling azeotrope with extractive heterogeneous-azeotropic distillation, *Chemical Engineering Transactions*, 69, 2018, pp. 571-576.

[2] Andras Jozsef Toth, Agnes Szanyi, Katalin Angyal-Koczka, Peter Mizsey: Enhanced separation of highly non-ideal mixtures with extractive heterogeneous-azeotropic distillation, *Separation Science and Technology*, 51/7, 2016, pp. 1238–1247.

[3] Andras Jozsef Toth*, Agnes Szanyi, Eniko Haaz, Peter Mizsey: Separation of process wastewater with extractive heterogeneous-azeotropic distillation, *Hungarian Journal of Industry and Chemistry*, 44/1, 2016, pp. 29–32.

Biogáz előállítása elektrofermentációs úton

Production of biogas by electrofermentation

Takács Piroska, dr. Nemestóthy Nándor

Pannon Egyetem Mérnöki Kar

Biomérnöki, Membrántechnológiai és Energetikai Kutatóintézet

8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

Összefoglaló

Az elektrofermentáció a hagyományos fermentációs technológiát elektrokémiai rendszerrel ötvöző eljárás, melynek lényege, hogy egyfajta mediált elektrontranszfer révén elősegíti különböző vegyületek mikrobiális átalakítását. A fermentorban elhelyezett elektródokkal számunkra kedvező módon befolyásolhatjuk a fermentációs közeg redox-potenciálját, ezen keresztül pedig a mikroorganizmusok NADH/NAD^+ egyensúlyát, ami jelentős hatással van a keletkező termékek összetételére, növelhető az atomhatékonyság, illetve a mikrobiális növekedés is serkenthető.

Az elektrokémia és a fermentáció ilyen jellegű összekapcsolásával csupán az utóbbi néhány évtizedben foglalkoztak a kutatók. Bár a kezdeti eredmények igen ígéretesnek bizonyultak, számos tisztázandó kérdés és megoldásra váró probléma merül fel a technológiával kapcsolatban.

Kutatásom témája a biogáz elektrofermentációval történő előállítása. Munkám során az elektrokémiai folyamatoknak a termékösszetételre és a termelés hatékonyságára gyakorolt hatását vizsgálom a hagyományos fermentációt használva kontrollként.

Summary

Electrofermentation is a complex process that combines traditional fermentation technology with electrochemistry. The main point of this method is a type of mediated electron transfer which assists the microbial conversion of different chemical compounds. The redox potential of the fermentation medium - and thus the NADH/NAD^+ balance of microorganisms - can be adjusted with electrodes added into the fermenter. This process may have a positive effect on the composition of the products, the atom efficiency can be increased, and the microbial growth can be stimulated.

Such a combination of electrochemistry and fermentation was investigated only in the last few decades. Although the initial results seem to be very promising, there are several questions to clarify and problems to solve regarding the technology.

The issue of this research is the production of biogas by electrofermentation. The effect of the electrochemical processes on the composition of the products and on the efficiency of the production were investigated. The traditional fermentation was used as a control system.

A kutatómunkát a GINOP-2.3.2-15-2016-00016 nyilvántartási számú, „Vízbázis-védelem, moduláris, mobil vízkezelő rendszerek és szennyvízkezelő technológiák fejlesztése a Pannon Egyetem bázisán hazánk dinamikus export növekedésének elősegítése érdekében” című projekt támogatta.

EMBERI ERŐFORRÁSOK MINISZTÉRIUMA Az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-2 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának támogatásával készült.

Residence time distribution based analysis of an industrial scale biogas fermenter

Egy ipari méretű biogáz gyártó fermentor tartózkodási idő eloszlás mérésének elemzése

[1]András Tankovics, [1]Dávid Takács, [2]Judit Szendefy, [1]Mónika Varga [1]Béla Csukás

[1]Kaposvar University, Institute of Methodology, Kaposvár, Hungary

[2]Hungarian Sugar Ltd, Biogas Plant, Kaposvár, Hungary

Summary

Kaposvar Sugar Factory of Hungarian Sugar Ltd. developed an internationally straightforward anaerobic fermentation technology to generate in-site used and surplus energy with decreasing waste emission, by producing fuel gas of high methane content from pressed sugar beet slice. In a former PhD Thesis a simplified simulation model was developed and validated for an approximately perfectly mixed pilot unit, considering 9 pseudo-groups of bacteria, applying the available early version of the modelling methodology. The further development of the model for the industrial scale needs more detailed knowledge about the hydrodynamic conditions of the appropriately compartmentalized volume. The objective of this work was to measure and to analyse Residence Time Distribution of an industrial unit by lithium tracer technique.

The industrial fermenter is a cylindrical unit with a diameter of 25 m and a height of 28 m. The effluent is removed from the volume of cca. 13500 m^3 at the level of 26 m. The spatially uniform feeding and the appropriate mixing is ensured by a recycle flow from a point at 20 m height of the unit, fed into the annularly placed 6 subsequent bottom segments with cyclic changes. The pressed sugar beet slice is fed also into this recycle flow via a screw feeder. The mixing is enhanced significantly by the upward increasing upstream flow of generated biogas, and by three mechanical agitators. Considering the geometrical arrangement, the produced biogas flow, as well as the cyclically changing recycle flow; we generated various mixing models with different compartmentalization and flow structure, by applying the method of Programmable Structures.

The quantity of the lithium chloride tracer (50 kg), as well as the sampling of the effluent during the measurement of Residence Time Distribution (RTD) were designed by some preliminarily studied mixing models. The outlet lithium concentration was measured 2 hourly in the first period, and daily or more rarely during a period of 30 days. The lithium concentration was analyzed by ICP measurement technique.

For the simulation based approximate identification of the mixing model we used a heuristic approach, considering multiple structures with changing mixing flows. We tried to find a model of advantageously less number compartments and parameters, which satisfies the measured Residence Time Distribution. The results suggest the intensive mixing of upper levels, with limitedly mixed lower part that causes the long tail of RTD.

Support of EFOP-3.6.1-16-2016-00007 project is acknowledged

Összefoglaló

A Magyar Cukor ZRt. Kaposvári Cukorgyára saját felhasználású és többlet energia termelésére, valamint hulladék kibocsátásának csökkentése érdekében egy nemzetközi viszonylatban is élenjáró megoldást alkalmaz a préselt répaszelet anaerob fermentációjával előállított, magas metán tartalmú fűtőgáz gyártására. Egy korábban készített PhD értekezésben egy teljesen kevertnek tekinthető kísérleti üzemre az akkor elérhető modellezési eszközökkel elkészült a folyamat 9 baktérium csoportot figyelembe vevő egyszerűsített szimulációs modellje. A modell üzemi rendszerre való továbbfejlesztése azonban feltételezi a kompartmentekre bontott fermentor áramlási viszonyainak közelítő ismeretét. Jelen munka keretében az üzemi fermentor tartózkodási idő eloszlását vizsgáltuk meg lítium nyomjelzéssel.

A vizsgált üzemi fermentor egy 25 méter átmérőjű, 28 méter magas hengeres készülék. A mintegy 13500 m^3 térfogatú készülékekből az effluens elvezetése 26 méter magasságban történik. A térben egyenletes beadagolás, illetve a keveredés támogatása úgy valósul meg, hogy 20 méter magasságból a hengeres palást egy pontjáról recirkulációs áramot vezetnek el, amit egy időben váltakozó szivattyúzási stratégiával a hengeres készüléktest alján körkörösen elhelyezkedő 6 szegmens valamelyikébe vezetnek vissza. A nyersanyag beadagolása is ebbe a recirkulációs áramba történik. A készülék keveredéséhez hozzájárul három mechanikus keverő, valamint jelentős

mértékben a felfelé áramló nagy mennyiségű biogáz (aminek mennyisége a magasság mentén növekszik). A rendszer fizikai kialakítását, valamint a termelt biogáz mennyiségét és a recirkulációs áramot figyelembe véve a Programozható Struktúrák módszerével különféle térbeli felbontásokon és a térrészek között feltételezett áramokon alapuló keveredési modelleket generáltunk.

A beadagolt mintegy 50 kg lítium-klorid mennyiségét és a tartózkodási idő eloszlás mérését egy előzetesen feltételezett áramlási struktúra alapján terveztük meg. A lítium koncentráció méréséhez a beadagolást követő napon kétóránként, majd a következő időszakban egy hónapig napi gyakorisággal történt a mintavétel. A minták laboratóriumi elemzésénél a lítium koncentráció meghatározása ICP módszerrel történt.

A fermentor keveredési modelljének közelítő identifikálásához heurisztikus módszerrel, különféle keveredési struktúrákat és paramétereket feltételezve szimuláltuk a rendszer tartózkodási idő eloszlását és kerestük a mérés eredményeit jól megközelítő, de lehetőség szerint kevés térrészt és paraméter tartalmazó megoldást. Az eredmény a felső zónák intenzív keveredése mellett az alsó zóna korlátozott keveredésével indokolja a hosszan elnyúló tartózkodási idő eloszlás függvényt.

A munkát az EFOP-3.6.1-16-2016-00007 projekt támogatta.

Homogenizálódás vizsgálata speciális geometriájú tartályokban

Investigation of homogenization in tanks with special geometry

Bálint Levente Tarcsay, Janka Bobek, Attila Egedy, Dóra Rippel-Pethő

University of Pannonia

8200, Veszprém, Egyetem street 10.

Összefoglaló

A keverés a kulcsfontosságú vegyipari folyamatok egyike, mivel a megfelelő homogenitás alapelvárás minden ipari alapanyaggal és termékkel szemben. Adott elegyben az anyagok elkeveredésének mértékét, a homogenitást a keverőegységben kialakuló áramlási viszonyok határozzák meg. A munka során egy külső recirkulációs keverést alkalmazó speciális geometriájú tartályban vizsgáltuk az áramlási képet. A rendszer áramlási körülményeit különböző tartálygeometriák mellett egységugrás vizsgálójelre adott válaszfüggvényekből értékeltük. A kialakuló válaszfüggvényt ideális áramlási modellek összekapcsolásával közelítettük. Az illesztett modellekből következtetéseket vontunk le az áramlási tér, valamint a geometria összefüggésével kapcsolatban.

Summary

Mixing is one of the most crucial processes in the chemical industry. Homogeneity is a requirement for all feedstocks and industrial products. The degree of mixing depends on the hydrodynamic properties of the fluid in the tank. Flow properties were investigated in a tank with special geometry. Homogenization was achieved through external recirculation of the mixture. Flow properties were investigated under varying tank geometries by using the Heaviside-function in step-response experiments. The flow properties in the tank were approximated by fitting a combination of ideal flow models onto the Heaviside response functions of the outlet. By evaluating the fitted models, a relation was established between the flow properties in the tank and the tank geometry.

Introduction

During chemical processes, the homogeneity of products and raw materials is vital, both for production and quality. In the case of fluids, homogenization can be achieved through the application of mixers in the device. The optimal type and geometry of the mixed tanks can be approximated by specific models which take the properties of the materials to be mixed, the desired degree of homogeneity, etc. into consideration [1]. In the case of homogenisation of huge liquid bodies (100-200 m^3, petrochemical and radiochemical industry), external recirculation can be more advantageous since it presents considerably lower costs for both installation and operation. The flow properties in mixed units have been thoroughly investigated by using mathematical and experimental methods however mixing achieved by external recirculation is poorly researched [2]. Optimization of the mixing process to achieve the most homogenous product possible in an external recirculation tank can only be achieved after the flow profile of the unit is known. The aim of the research was to analyze the flow properties in a tank with special geometry and external recirculation and define a connection between the flow properties and the tank geometry. Flow properties can be analyzed either by Computational Fluid Dynamics (CFD) simulations or step-response RTD experiments [3,4,5].

Step-response experiments are a widely accepted and simple way to determine the flow properties of a chemical or mixing unit [6]. During these experiments, the input of the system is a tracer fed according to the Heaviside-function. The time evolution of the tracer concentration in the output of the tank holds information regarding the flow and mixing properties of the system. The Heaviside-function is the integral form of the Dirac delta function $\delta(t)$ which is used as an input in pulse response experiments [6]. The Heaviside-function is defined as shown in Equation 1. $\varepsilon(t)$, defines the Heaviside function as a function of time, which takes on a value of 0 if the

investigated time (t) is less than the time of the tracer feed (t^*) and value of 1 in the moment and after the time of feed.

$$\varepsilon(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t)dt = \begin{cases} 0, ha, t < t^* \\ 1, ha, t \geq t^* \end{cases} \quad (1)$$

The Heaviside-function is shown in Figure 1. as a function of dimensionless time (θ). Dimensionless time, in this case, is specified as the quotient of the current time compared to the residence time in the unit.

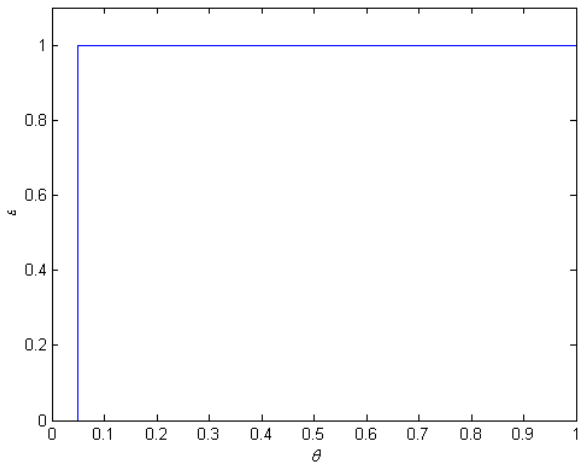


Figure 1. The Heaviside-function

After experimental data was collected on the response function of the system, the residence time distribution function (RTD) can be calculated. The RTD function approximates the probability that the residence time of the fed tracer agent is less than a specified residence time (t) [4]. The residence time distribution function (F) was evaluated using the response function of the system (C) in a discrete time step (t) using Equation 2. Here C_{steady} and C_0 are the function values of the response function in the steady state and at the beginning of the experiment respectively.

$$F_t = \frac{C_t - C_{t-1}}{C_{steady} - C_0} \quad (2)$$

By analyzing the RTD curve in the studied unit, mixing and flow can be characterised and can be compared to the flow properties of ideal hydrodynamic models [7, 8]. In this study, the ideal hydrodynamic models which were used for describing the response include the plug flow reactor (PFR) moreover the tanks in a series model.

The PFR model is useful for modelling systems with continuous flow in cylindrical geometry. It works under the assumption that the flow through a PFR is perfectly mixed in the radial direction but not in the axial direction. It is also assumed that the residence time of each fluid particle within the system is equal to the mean residence time. Because of these conditions, the step-response function of a system with plug flow is identical to the step function which was used as an input but with a time delay which equals the mean residence time in the unit. The tank in series model is an extension of the continuously stirred tank model (CSTR) which defines a system that is perfectly mixed and therefore homogeneous. Upon entering the unit the tracer gets dispersed within the whole tank, therefore, it immediately appears in the output without time delay. The tanks in series model examines a series of CSTR units. The RTD function in this model is dependent on the number of tanks that have been linked. The RTD function of the tanks in series model is tended to the PFR model with the increase of the

number of units, and it leans to the CSTR shape with the decrease of the number of units. One tank returns the RTD function of a CSTR and as the number of tanks in series approaches infinity the RTD function approaches that of the PFR model. The RTD curve of the CSTR model is shown in Figure 2. the time of feed is 0.05 dimensionless time units. The RTD curve of the PFR unit is identical to the step function which can be seen on Figure 1 [9].

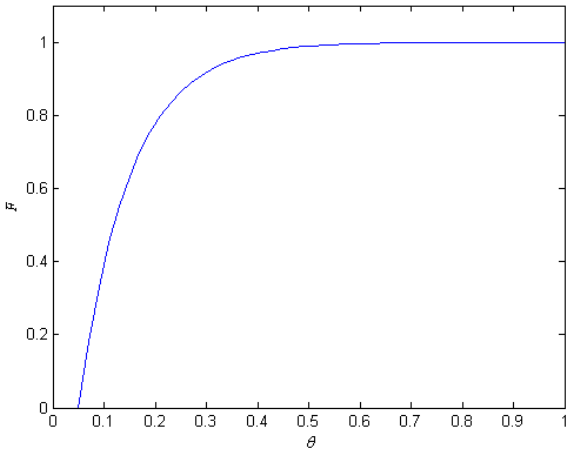


Figure 2. RTD of a CSTR unit in a step-response experiment, feed time is 0.05

Method of experimentation

The geometry of the investigated tank is shown in Figure 3. a.). The tank consists of 5 cylinder units integrated continuously. A removable wall was created which makes it possible to create the desired number of cylinders from the main tank. Therefore the number of cylinder units can be changed between 1 and 5. The residence time, calculated from inlet flowrate and liquid volume, was 3 h in any cases of geometry. Therefore the inlet flowrate was changed with the liquid volume and cylinder number. To obtain the response function of the system, a Heaviside-function was used. The utilized tracer was a low concentration (6,24 g l^{-1}) borax solution. The tracer was fed into the tank which contained a high concentration (29,16 g l^{-1}) borax solution. To monitor the change of concentration within the system and to obtain the response function conductivity measurement was utilized. The experimental equipment is shown in Figure 3. b.).

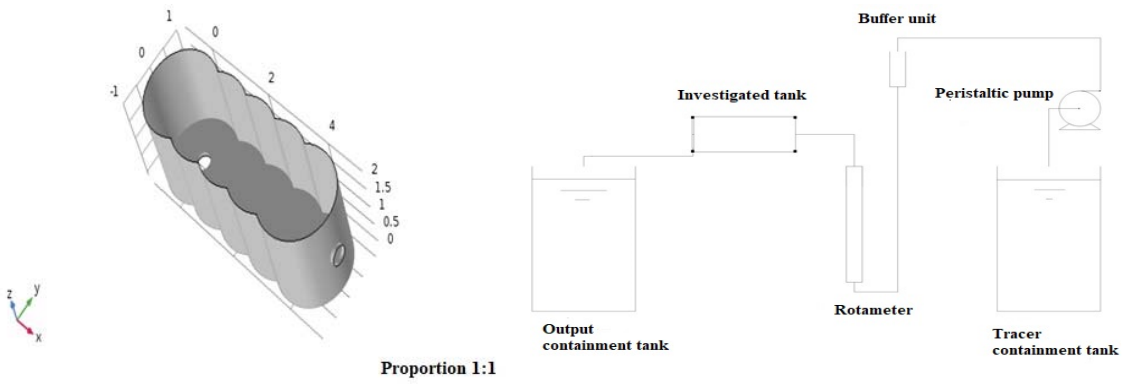


Figure 3.a.) The investigated tank **Figure 3.b.)** Setup of the experimental equipment

Experimental and modelling results

The RTD curves of three different tank geometries were investigated. The number of cylinder units integrated into the tank was 1, 3 and 5. After experimentally obtaining the data by the RTD curves, transfer-function models were fitted to the experimental results. The fitted function was a black box convolution model of the PFR and tanks in series models. The general form of the transfer function that was identified to model the system is shown in Equation 3, where k is the order and λ_i is a parameter of the transfer function.

$$G_{fitted} = \frac{\lambda_0}{\sum_{i=1}^{k+1} \lambda_i s^{k+1-i}} e^{-s\lambda_{k+2}} \tag{3}$$

The fitted RTD curve (F_{fitted}) was defined as the step response of the system to the transfer function G_{fitted}.

The order and overall parameters of the transfer function were determined by numerically solving a minimalization problem. The minimalization problem is denoted in Equation 4. E is a function denoting the sum of the squared difference of the experimental and fitted RTD functions divided by the sum of the square of the experimental RTD curve. As such E is a function similar to the relative error of the fitting which is dependent on the parameters of the transfer function G_{fitted}.

$$min\big(E(k,\lambda)\big) = \frac{\Sigma\left(F_{experimental} - F_{fitted}(k,\lambda)\right)^2}{\Sigma\left(F_{experimental}\right)^2} \tag{4}$$

For the minimalization of the function, the interior-point method has been applied in MATLAB R2011. Constraints have been defined for the upper and lower boundaries of the parameters (0 and 100 for all parameters respectively). The fitting algorithm was modified to favor transfer functions with the smallest possible order and small relative error. To evaluate the proposed fitting algorithm, a custom defined transfer function was analyzed. This reference transfer function (G_{ref}) is defined in Equation 5.

$$G_{ref} = \frac{1}{1.6s^2+2.6s+1} e^{-5s} \tag{5}$$

The step response function for this transfer function was used as reference data. The extrema of function E was numerically determined by using the devised algorithm. The fitted transfer function is shown in Equation 6.

$$G_{ref} = \frac{1}{1.58s^2+2.59s+1} e^{-5s} \tag{6}$$

Figure 4. shows the fit of the response of the identified transfer function to the reference response function.

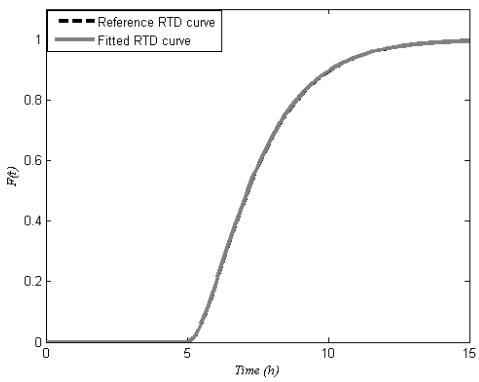


Figure 4. The results of the algorithm validation

Both the figure and the numerical results for the parameters show that the algorithm has precise fitting capacities and is, therefore, suitable to identify transfer functions for the system. After validating the fitting method, transfer functions were identified for the tank by using the experimental RTD curves.

The results of the fittings can be seen in Figure 5. for all three, investigated tank geometries.

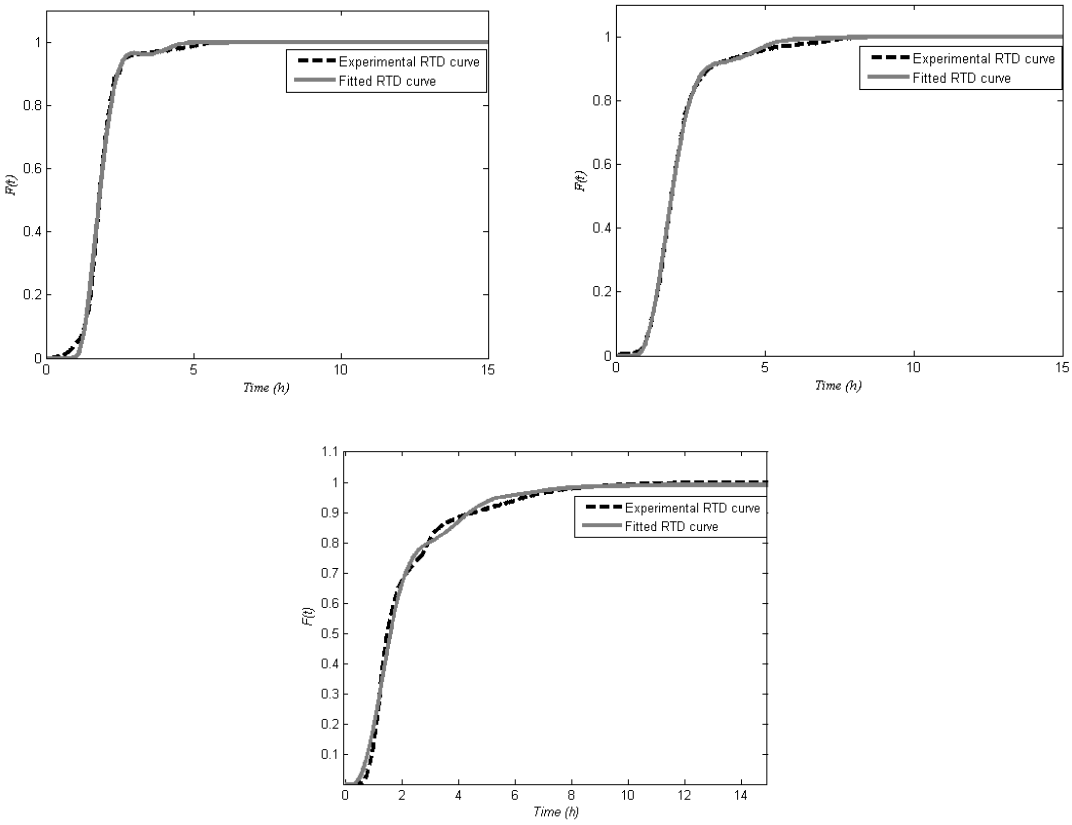


Figure 5. The fit of the identified RTD curves to the experimental RTD curves
(1 cylinder, 3 cylinder, 5 cylinder units)

The parameters of the fitted transfer functions can be seen in Table 1. for all investigated tank geometries where λ_0 is referred to as K and λ_{k+2} is denoted as t_d (time delay).

Table 1. The order and parameters of the fitted transfer functions

	Parameters							
Number of cylinders	***k***	***K***	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	t_d ***(h)***	***Goodness of fit (%)***
1	3	1	0.08	0.32	1.01	1	0.89	93.43
3	3	1	0.22	0.6	1.52	1	0.58	94
5	3	0.98	0.31	0.68	1.97	1	0.65	85.76

The 5 cylinder geometry was originally modelled using a second order transfer function that had the best fit for the experimental RTD curve. However to compare the parameters of the fitting and characterise the system it was more favorable to fit a third order transfer function here as well since it describes the other two RTD curves best. Table 1. shows that as the number of cylinder units increases so do the numerical values of the model

parameters, except the time delay which do not have the same correlation. The K parameter difference in neglegable (0.02), and practically it is the same for the three systems.

Conclusion

In this paper, the flow properties of a tank with special geometry were investigated. In order to discover the relation between the flow profile and tank geometry step-response experiments were conducted. The RTD curves of the system were measured under varying tank geometries. By analyzing the experimental RTD curves, a model was proposed to be fit onto the results. The transfer function of the system was optimized by minimalizing the square difference of the experimental and fitted RTD curves. The interior-point algorithm was applied for minimalization of the difference. Conclusions were drawn from the fitted RTD curves. It can be established that all tank geometries can be described with third order transfer functions with increasing model parameters with the number of cylinders. Further investigations to characterise the reason for such behaviour will be carried out by using CFD methods. Simultaneously different step-response experiments will be conducted to observe the behaviour of the system.

References

[1] Nienow, A. W., Edwards, M. F., & Harnby, N. *Mixing in the process industries* (1997)

[2] Blais, B., Lassaigne, M., Goniva, C., Fradette, L., & Bertrand, F. *Development of an unresolved CFD–DEM model for the flow of viscous suspensions and its application to solid–liquid mixing*. Journal of Computational Physics, 318, 201-221. (2016).

[3] Blazek, J. *Computational fluid dynamics: principles and applications*. Butterworth-Heinemann. (2015).

[4] Toro, E. F. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*–Springer. *Heidelberg,* 624. (1999).

[5] Pawlowski, S., Nayak, N., Meireles, M., Portugal, C. A. M., Velizarov, S., & Crespo, J. G. *CFD modelling of flow patterns, tortuosity and residence time distribution in monolithic porous columns reconstructed from X-ray tomography data.* Chemical Engineering Journal, 350, 757-766. (2018).

[6] Levenspiel, O. *Chemical reaction engineering*. Industrial & engineering chemistry research, 38(11), 4140-4143. (1999)

[7] Fazli-Abukheyli, R., & Darvishi, P. *Combination of axial dispersion and velocity profile in parallel tanks-in-series compartment model for prediction of residence time distribution in a wide range of non-ideal laminar flow regimes.* Chemical Engineering Science, 195, 531-540. (2019).

[8] Haag, J., Gentric, C., Lemaitre, C., & Leclerc, J. P. *Modelling of Chemical Reactors: From Systemic Approach to Compartmental Modelling.* International Journal of Chemical Reactor Engineering, 16(8). (2018).

[9] Danckwerts, P. V. *Continuous flow systems. Distribution of residence times.* Chemical engineering science, 50(24), 3857-3866. (1995)

Nemlineáris optimalizálási algoritmusok összehasonlító értékelése pszeudokompensekből álló reakcióhálózatok identifikálása során

Comparing nonlinear optimization algorithms in the identification of lumped reaction networks

Zoltán Till, Tamás Varga, Tibor Chován

University of Pannonia, Department of Process Engineering

10, Egyetem St. Veszprém, H-8200

Összefoglaló

Számos nemlineáris optimalizálási algoritmus áll rendelkezésre, melyekkel az összetett reakcióhálózatok kinetikai paramétereinek identifikálása elvégezhető, amennyiben rendelkezésre áll a kísérleti rendszer megfelelő modellje. Jelen munkánkban 23, MATLAB programnyelven elérhető algoritmust hasonlítunk össze és vizsgáljuk a teljesítményüket egy, vákuumgázolaj hidrokrakkolását pszeudokomponensek alkalmazásával leíró reakcióhálózat kinetikai paramétereinek identifikálása során. Az ilyen típusú modellek főként azért adhatnak okot az érdeklődésre, mert az identifikálandó paraméterek tényleges értékére nem áll rendelkezésre semmilyen referencia. Bár nem létezik olyan algoritmus, mely körülményektől függetlenül a legjobban alkalmazható, egy ilyen vizsgálat eredményeiből egyrészt becsülhető az alkalmazott modell varianciája, másrészt az identifikált globális minimumokhoz tartozó paraméterek statisztikai vizsgálatával számszerűsíthető a modell bizonytalansága. Ezen felül azonosíthatóak olyan üzemeltetési paraméterek, amelyek esetében ez a bizonytalanság magas, ez pedig lehetőséget nyújt további célzott kísérletek elvégzésére és a modell pontosítására.

Summary

There are several nonlinear optimization algorithms applicable to solve kinetic parameter identification problems, given that an adequate mathematical model of the experimental system is available. Here we consider 23 algorithms implemented in MATLAB, evaluating their performance on a lumped kinetic model for vacuum gas oil hydrocracking; this particularly raised our interest as the kinetic parameters have no true reference value in such models. While there is not one best algorithm, the results from such study can be used to estimate the model variance; moreover, the statistical analysis of the identified minimum values can also quantify its uncertainty. By using multiple algorithms we can also identify key operating parameters where the applied kinetic model shows the highest sensitivity to the identified parameters; opening up the possibility to further reduce the uncertainty by targeting additional experimental work or by refining the identification problem.

Introduction

A wide variety of optimization algorithms are applied in the literature to solve complex identification problems [1], [2]. In most works dealing with algorithm comparison different benchmark problems were used, e.g. Rios and Sahinidis provided an extensive comparison of more than 20 derivative-free solvers on convex and non-convex test problems, reaching the similar conclusion that there is no solver that dominates all the others [3]. In case of kinetic identification problems, it is not common to use multiple algorithms on one problem and it is even rarer to compare them; usually only the results of the leading algorithm were accepted, such as in the case of the VGO hydrocracking study of Zhang et al. [4]. Nevertheless, such works can be found, e.g. Baker et al. analyzed four popular global optimization methods in estimating the parameters of the upper part of glycolysis, emphasizing that balance has to be found between success and computational time [5].

In this paper, we deal with the advantages of applying different nonlinear optimization algorithms on the same problem and with the processing of the information we can obtain this way. We suggest that the different performance of the algorithms can be related to the model variance. These results can be used to estimate the total model error as well. Moreover, the level of agreement between the kinetic parameters identified by different

algorithms can quantify the uncertainty of the model. We propose the application of Kendall's W for this purpose.

The investigated kinetic model for vacuum gas oil hydrocracking

The kinetic model investigated in this paper is from the field of the so-called discrete lumping. The specific example is a lumped kinetic model for vacuum gas oil (VGO) hydrocracking, proposed by Sadighi et al. [6], [7], consisting of 6 lumps (VGO, diesel (D), kerosene (K), heavy naphtha (HN), light naphtha (LN) and gaseous products (G)) and 15 (VGO-15) or 5 (VGO-5) reactions between them (Figure 1). You can find all the details necessary to reproduce our simulations in their work.

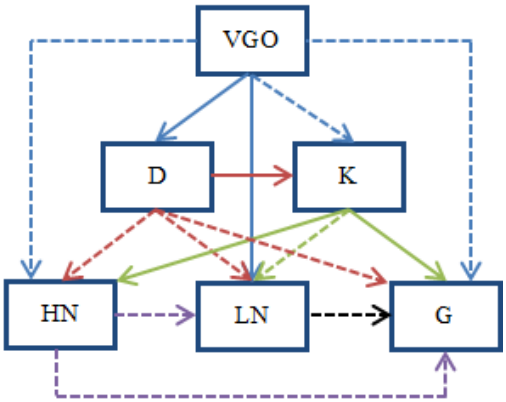


Figure 1. Lumped kinetic network for VGO hydrocracking. Dashed lines indicate reactions only present in the VGO-15 model.

Previously, we argued that it is possible to eliminate some of the reactions in a way that the remaining reduced reaction network becomes observable in terms of control theory [8]. Back then we focused on working out a reaction network reduction strategy to describe that exactly which reactions should be excluded. Now, these two reaction networks gained our attention regarding global nonlinear optimization. The better observability of the reduced network means that hypothetically we have a better chance to identify the kinetic parameters of these five reactions by finding the global minimum of the optimization problem.

Nonlinear optimization algorithms

We chose a number of algorithms for comparison based on the following considerations:

- It is considered as a global optimization method or a metaheuristic one. If not, it was already applied in solving kinetic parameter identification problems in the literature. For example, the Levenberg-Marquardt algorithm is widely used in such works (e.g. [9]–[11])
- For the sake of simplicity, we have only investigated algorithms readily compatible with our MATLAB code. In a broader sense, the aim is to look for some (not necessarily this many) optimization algorithms expected to be well applicable and treat the results complementary to each other, regardless of the programming environment.

The algorithms we have chosen are: Active-Set Optimization (active-set), Biogeography-Based Optimization (BBO), Bees Algorithm (BeA), Cultural Algorithm (CA), Evolution Strategy with Covariance Matrix Adaptation (CMA-ES), Controlled Random Search with local mutation (CRS2), SCH Evolutionary Algorithm (ESCH),

Enhanced Scatter Search (eSS), Firefly Algorithm (FA), Genetic Algorithm (GA), Harmony Search (HS), Interior Point Algorithm (interior-point), Improved Stochastic Ranking Evolution Strategy (ISRES), Levenberg-Marquardt (LM), Nonlinear Optimization with Mesh Adaptive Direct Search (NOMAD), MATLAB Particle Swarm Optimization (particleswarm), Pattern Search (patternsearch), Constrained Particle Swarm Optimization (psopt), Particle Swarm Pattern Search (PSWARM), Shuffled Complex Evolution (SCE-UA), Constrained Simplex Method (simplex), Simulated Annealing (simulanneal), Sequential Quadratic Programming (sqp). For the sake of keeping the size of the comparison study at bay, we did not make a considerable effort in tuning the algorithms and left most options on their default values. This way we are able to compare the "raw" efficiency of the algorithms investigated.

Results and discussion

We compared the solutions of the applied optimization algorithms from a fixed-target viewpoint. This target, hereafter called success, is defined as:

$$\text{success} = \left(1 - \frac{f(\underline{x}^n) - f(\underline{x}^n)_{min}}{f(\underline{x}^n)_{max} \quad f(\underline{x}^n)_{min}}\right) \cdot 100\% \tag{1}$$

We deemed an algorithm 100 % successful if the value of the objective function had reached zero $\left(f(\underline{x}^n)_{min} := 0\right)$, meaning there was no error between the experimental results and the model. This provides a joint reference, making the comparison of the results from the two different lumped reaction networks possible. The success of the algorithm is 0 % if the value of the objective function is abundantly high $\left(f(\underline{x}^n)_{max} := 20\right)$. That would mean that the success of an algorithm can be negative; however, this was not the case with the best results, as you can see in Figure 2 where the 1-success (kind of misfortune) of the algorithms are plotted as a function of the computational time taken to achieve that result.

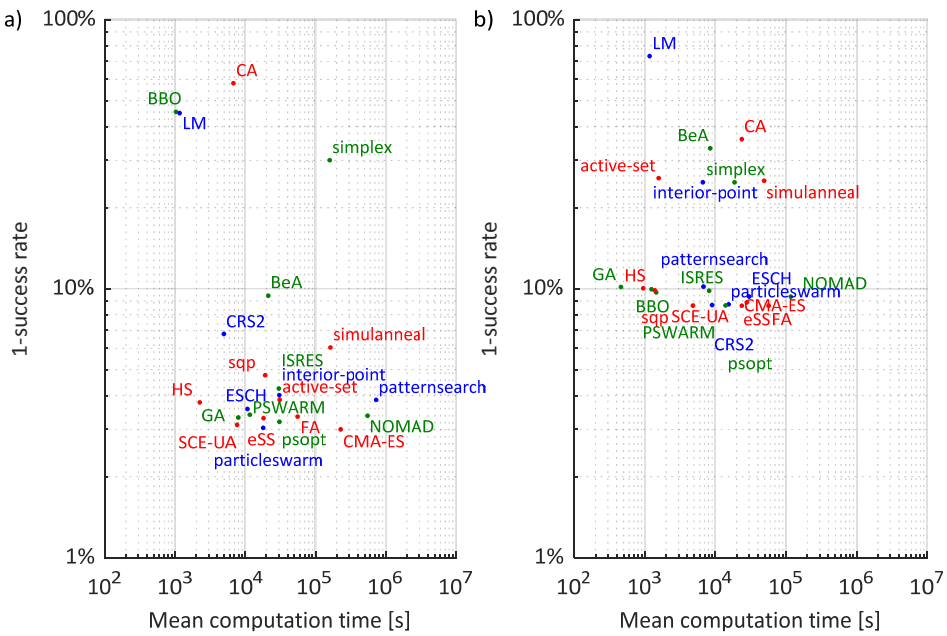


Figure 2. Overall success rate of different algorithms for VGO hydrocracking a) full reaction network b) reduced network.

In Figure 2, there is a large gap in success. Below that we deem an algorithm overall successful (that can be identified with ~10 % maximum ordinate value). Figure 2 has two interesting features to discuss. Firstly, noticeably more algorithms were successful in case of the full reaction network. The explanation presents itself from the kinetic modeling viewpoint: if we assume more reactions taking place in the system, we will be able to describe the experimental data more accurately. We can also observe the bias-variance tradeoff in the relation of the two different kinetic models. If we take each successful solution as a different realization of the model, it will become apparent that the variance of the kinetic model with the full reaction network is significantly higher that is in line with its higher complexity. On the other hand, the bias is lesser as the applied algorithms were able to reach higher success values in general. Assuming a normal distribution of the success rate, we can state that the total error of the algorithms is 4.2±1.6 % and 9.3±0.6% in cases of the full reaction network and the reduced reaction network, respectively.

On this basis of the estimation of the total error, we can associate this with the actual global minimum of the objective function. If any solution of any algorithm reaches this error value, it will indicate that the identification process was successful; otherwise, we will not find the global optimum of the objective function. Consequently, by the application of multiple global nonlinear optimization algorithms we obtain a numerical indicator of the global minimum (namely, the total error value) that is far more reasonable than the suggestion whether the agreement of the experimental and calculated data is satisfactory or not.

We can also characterize the uncertainty of the two models based on the global minimum values. From the different methods and runs, we had 109 and 92 successful runs in cases of the VGO-15 and VGO-5 model, respectively. Theoretically, if we found exactly the same minimum for a given model every time, the correlation matrix of the identified kinetic parameter sets would be an identity matrix. Consequently, a high correlation between the identified kinetic parameters indicates more similarity in the results while near zero correlation suggests that we found more different parameter sets, all capable to describe the concentration changes of the pseudocomponents in the system. Graphical representations of the obtained correlation matrices in the case of the VGO-15 and VGO-5 models can be seen in Figure 3. It can be seen that the correlation values are reasonably higher in case of the reduced reaction network. Compared to the full reaction network reported in the literature where the correlation is close to zero, we consider the reduced model obtained by the authors earlier a definite improvement.

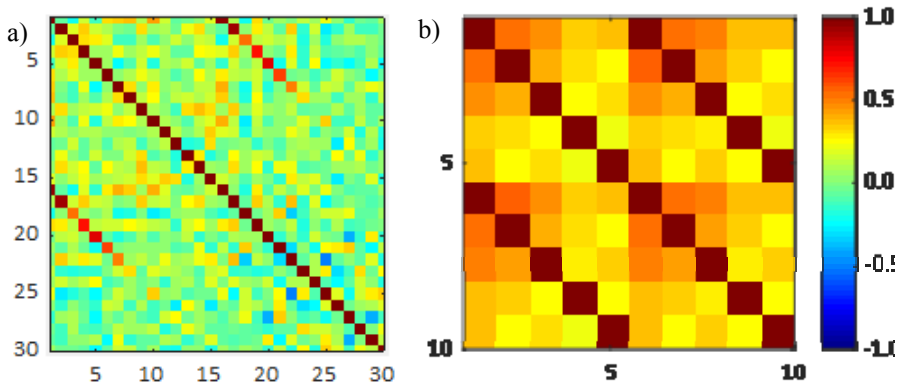


Figure 3. Correlation between the identified parameters in the case of the a) VGO-15 and b) VGO-5 model.

A single numeric indicator on the agreement of the identified kinetic parameters is Kendall's coefficient of concordance (Kendall's W), the value of which is 0.177 for the VGO-15 model and 0.327 for the reduced model,

the latter showing a higher agreement between the identified kinetic parameters associated with the global minima, even if it is not so convincing in itself.

In order to better understand the difference between the identified kinetic parameters corresponding to the different global minima, we have calculated the standard deviation of the simulated pseudocomponent mass concentrations in case of the VGO-5 model:

$$S = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}\left(y_i^{cal} - \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} y_j^{cal}\right)^2} \tag{2}$$

where N is the number of observations; i.e. the number of calculated mass concentrations from each global minimum at a given temperature and LHSV value.

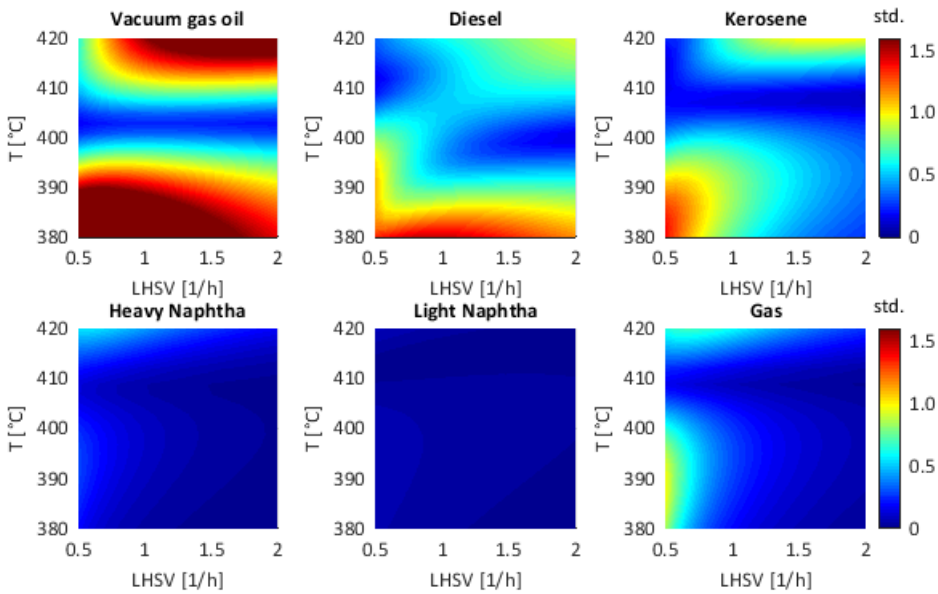


Figure 4. Standard deviation of mass concentrations calculated using kinetic parameters at different global minima.

The resulting standard deviations are mapped out in Figure 4. You can see that, even though the value of the objective function is nearly the same, the calculated mass concentrations can differ considerably under certain operating conditions. While in case of the naphtha components, all kinetic parameter sets represent effectively the same product concentrations; this is apparently not the case for the feedstock.

Conclusions and next steps

Studies assessing the performance of nonlinear optimization algorithms in kinetic model identification are scarce in the literature and the reason behind this is simple: there is not one "best" algorithm for all cases. Even in the case of the identification problems discussed here, there are some algorithms that performed well in one case and not so well in the other. On the other hand, we think imperative to provide some guidelines for non-mathematicians dealing with similar problems, i.e. which algorithms to choose from. The answer is simple but peculiar on second thought: never choose only one. Applying completely different NLP solvers to the same problems might as well provide you valuable insight into your problem regarding the uncertainty of the solution or even of your model. In the next step, we would like to further quantify the latter, especially how the relations

between similar minima describes the variance of the given model. It appears to be equally interesting to find out how the characteristic of the objective function contributes to the uncertainty of the solution of the identification problem. Still, the most important thing is to keep the practical approach in mind.

Acknowledgement

We acknowledge the financial support of Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00053. The proposed identification methodology can be applied to support the development of catalytic production technology of high hydrogen content (in molecular structure) fuels.

References

[1]Li, K.-Y., Huang, X., Fleischmann, C., Rein, G., Ji, J., *Energy & Fuels*, 28 (9), 6130–6139 (2014)

[2] Blanquero, R., Carrizosa, E., Jiménez-Cordero, A., Rodríguez, J. F., *Computers & Chemical Engineering*, 93, 52-62 (2016)

[3] Rios, L. M., Sahinidis, N. V., *Journal of Global Optimization*, 56 (3), 1247-1293 (2013)

[4] Zhang, T., Leyva, C., Froment, G. F., Martinis, J., *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 54 (3), 858-868 (2015)

[5] Baker, S. M., Schallau, K., Junker, B. H., *Journal of Integrative Bioinformatics*, 7 (3), 254-262 (2010)

[6] Sadighi, S., Ahmad, A., Irandoukht, A., *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 43 (2), 174-185 (2010)

[7] Sadighi, S., Reza Zahedi, G., *Bulletin of Chemical Reaction Engineering & Catalysis*, 8 (2), 125-136 (2013)

[8] Till, Z., Varga, T., Szabó, L., Chován, T., *Energy & Fuels*, 31 (11), 12654-12664 (2017)

[9] Becker, P. J., Celse, B., Guillaume, D., Costa, V., Bertier, L., Guillon, E., Pirngruber, G., *Fuel*, 164, 73-82 (2016)

[10] Müller, D., Esche, E., Wozny, G., *Computers & Chemical Engineering*, 71, 94-103 (2014)

[11] Wang, H., Dai, F., Yang, Y., Li, Z., Li, C., Zhang, S., *Energy & Fuels*, 31 (4), 4353-4360 (2017)

Alkohol-víz elegyek elválasztási eljárásainak összehasonlítása: desztilláció és pervaporáció

Tóth András József, Haáz Enikő, Fózer Dániel, André Anita, Nagy Tibor

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
1111 Budapest, Műegyetem rkp. 3.

Összefoglaló

A finomkémiai iparokban, főként a gyógyszeriparban a gyártástechnológia során nagy mennyiségű folyékony hulladék, ipari hulladékoldószer keletkezik. Ezek kezelése kiemelten fontos, hiszen ártalmatlanításuk sokszor az egész technológia költségének a legnagyobb hányadát teszi ki. Így olyan oldószer regenerálási eljárások kidolgozására van szükség, amelyek anyagilag kedvezőek a gyár számára és lehetőleg van az adott technológiában vagy esetleg máshol újra felhasználni a hulladék oldószert. Az előadásban a pervaporációt és a desztillációt hasonlítom össze, különböző alkohol-víz elegyek elválasztásán keresztül. Laboratóriumi kísérleteken alapuló modellillesztéseket végzek, mind hidrofil, mind organofil pervaporáció esetére. Rangsorolom az eljárásokat egy új, gőz-folyadék egyensúlyon alapuló értékelési módszerrel. Ezekből az átfogó vizsgálatokból lehet levonni a következtetéseket, hogy mely esetben célravezetőbb, hatékonyabb a desztilláció, vagy a pervaporáció alkalmazása ipari hulladékvizek hasznosítására.

A publikáció az Emberi Erőforrások Minisztériuma ÚNKP-18-4-BME-209 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának, a Nemzeti Tehetség Program NFTÖ-18-B-0154 pályázatának, a Bolyai János Kutatási Ösztöndíjnak, az 112699-es és az 128543-as számú OTKA pályázatok támogatásával készült. A kutató munka az Európai Unió és a magyar állam támogatásával, az Európai Regionális Fejlesztési Alap társfinanszírozásával, a GINOP-2.3.4-15-2016-00004 projekt keretében valósult meg, a felsőoktatás és az ipar együttműködésének elősegítése céljából.

Irodalomjegyzék

[1] Andras Jozsef Toth, Peter Mizsey: Methanol removal from aqueous mixture with organophilic pervaporation: Experiments and modelling, *Chemical Engineering Research and Design*, 98/6, 2015, pp. 123–135.

[2] Andras Jozsef Toth, Anita Andre, Eniko Haaz, Peter Mizsey: New horizon for the membrane separation: Combination of organophilic and hydrophilic pervaporations, *Separation and Purification Technology*, 156/2, 2015, pp. 432–443.

[3] Eniko Haaz, Nora Valentinyi, Ariella Janka Tarjani, Daniel Fozer, Anita Andre, Selim Asmaa Khaled Mohamed, Rahimli Fuad, Tibor Nagy, Peter Mizsey, Csaba Deak, Andras Jozsef Toth: Platform molecule removal from aqueous mixture with organophilic pervaporation: experiments and modelling, *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*, 63/1, 2019, pp. 138–146.

[4] Andras Jozsef Toth, Eniko Haaz, Nora Valentinyi, Tibor Nagy, Ariella Janka Tarjani, Daniel Fozer, Anita Andre, Selim Asmaa Khaled Mohamed, Laszlo Racz, Szabolcs Solti, Peter Mizsey: Selection between separation alternatives: Membrane Flash Index (MFLI) to compare pervaporation and flash distillation, *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 57/33, 2018, pp. 11366–11373.

Aromakomponensek biokatalitikus gázfázisú előállítása

Biocatalytic production of aroma compounds in gas phase

Tóth Gábor, Nemestóthy Nándor, Bélafiné Bakó Katalin

Pannon Egyetem, Biomérnöki Membrántechnológiai és Energetikai Kutató Intézet

8200 Veszprém, Egyetem utca 10.

Summary

Nowadays, most flavours are either extracted from plant sources or synthesized by chemical means. A great number of chemical compounds, belonging to different classes (e.g. alcohols, esters, aldehydes, organic acids, etc.), are involved in the development of food flavour. Recently, due to consumer's increased interest in natural products, a great interest towards natural aroma compounds has a risen compared to the chemically synthesised ones. Related to this trend, bioconversion systems have developed as promising substitutes to produce natural arom a compounds and encourage research and development of alternative processes for flavour synthesis via biotechnology.

Solid state fermentation (SSF) has attained much relevance in this context during the last one decade as SSF processes offer potential environmental benefits. Based on several studies, aroma compounds can be produced by SSF with a higher yield compared to submerged fermentation (SmF).

The use of agro industrial residues and by products as feedstock in SSF processes on one hand adds economic value to these wastes, or by products, and on other hand it solves the problem of their disposal.

The aim of the present article is to review the current state of art of production of aroma compounds and the perspectives on the development of bioprocesses and products in SSF.

The microorganisms and the solid matrix used in SSF will be described briefly followed by the presentation of aroma compounds produced in SSF processes such as lactones, esters, terpenes, pyrazines, aldehydes, alcohols and carboxylic acids.

Összefoglaló

Az aroma és illatanyagok világviszonylatban is jelentős helyet foglalnak el az élelmiszeripar, gyógyszeripar, kozmetikaipar és a vegyipar piacán. 21,4 milliárd USA dollárról (2014) 25 milliárd USA dollárara (2018) emelkedett. Az íz és aromaanyagok kialakításában számos kémiai vegyület, csoport vesz részt melyek legfőbb képviselőik az észterek, aldehidek, alkoholok, szerves savak stb. A világviszonylatban felhasznált aroma és illatanyagok jelentős részét jelenleg kémiai szintézis útján állítják elő, kisebb hányadát természetes forrásból extrakcióval.

Ugyanakkor a fogyasztók egészségtudatosságának köszönhetően, az érdeklődés fokozatosan a kémiai úton szintetizált termékek felől, a természetes úton előállított komponensek felé irányult. Ez az emelkedő trend a kutatókat alternatív, biokonverziós folyamatok kidolgozására ösztönözte.

Az alternatív biotechnológiai megoldások közül elsősorban a folyadékfázisú és a gázfázisú biokatalízis emelkedett ki, melyek közül a gázfázisú fermentáció bizonyult eredményesebbnek, köszönhetően termelékenységének és a rendszer stabilitásának és hosszabb élettartamának. Ráadásul számos környezetvédelmi és hulladékkezelési előnyt eredményezhet az élelmiszeripari hulladék, mint szubsztrát alkalmazása a gázfázisú rendszerben.

Az előadás célja, az aromakomponens-előállítás jelenlegi helyzetének áttekintése, különös tekintettel a gázfázisú fermentációban rejlő lehetőségek, perspektívák feltérképezésére, továbbá olyan alternatív biotechnológiai utak bemutatása, mellyel a különböző aromakomponensek, mint a laktonok, észterek, terpének stb. előállítása eredményesen versenyezhet a kémiai szintézissel.

Programmable Structure based analysis of methods for selective municipal waste collection and processing

Települési hulladék szelektív gyűjtési és válogatási megoldásainak elemzése a folyamat Programozható Struktúra modellje segítségével

Tamás Trenyik, Mónika Varga

Kaposvar University, Institute of Methodology, Kaposvár, Hungary

Summary

The Hungarian waste management public service system has gone through significant progress over the last decades, but meeting the new recycling goals requires tremendous additional efforts. Accordingly, it is worth to review all the possible elements of waste collection and waste processing, systematically, regardless of whether they are currently used and / or licensed or not.

Considering this, the conceivable household collecting forms and the primary separation possibilities were collected, systematically. Starting from the quantity and composition of the municipal waste of a typical rural area comprising 10,000 households, the possible waste collection, transportation and local, micro-regional and regional scale treatment were declared. Also estimated cost coefficients were associated with all activities.

Starting from the formal declaration of state and transition elements of the underlying process networks, and associated them with the respective parameters and cost coefficients, the methodology of Programmable Structures was applied to generate the dynamic process model for the possible set of separation structures. This model structure was supplemented with local program prototypes, calculating the amount and cost of separation and transportation processes. Next the method was tried for generation and simulation of individual test scenarios.

Finally, the individual codes of the possible collection and separation schemes were synthesized, making possible the simplified simulation-based evaluation of these schemes. This allows to evaluate one or more features at annual level for the analysis of all solutions (or of a suitably selected subset). Case studies were examined the effect of some characteristic parameters (e.g. the distance between the regional center and the collection area) on the cost and on the rate of selection, determining the ranking of the alternative methods.

In summary, it can be concluded that the analysis of waste collection and separation alternatives, supported by process modeling, is a perspective approach. Considering the urgent fulfillment of more and more strict and rigorous objectives, it is advisable to continue this research. Further studies should be extended to a detailed analysis of the efficiency and purity of the separations, as well as the dynamic consideration of the seasonal effects.

Összefoglaló

A magyar hulladékgazdálkodási közszolgáltatási rendszer az elmúlt évtizedekben jelentős fejlődésen ment keresztül, ám az újrahasznosításra vonatkozó célok teljesítése még további, jelentős erőfeszítéseket kíván. Ennek érdekében célszerű szisztematikusan áttekinteni a begyűjtés és feldolgozás összes lehetséges elemét, valamint a belőlük kialakítható begyűjtési és elválasztásai megoldásokat, függetlenül attól, hogy jelenleg használatosak és/vagy engedélyezettek-e.

Ezt segíti a racionálisan elképzelhető háztartási gyűjtési formák és elsődleges elválasztási lehetőségek rendszerezése. A számítások kiindulási alapja egy 10 000 háztartást magában foglaló tipikus vidéki térség lakossági hulladékának jellemző mennyisége és összetétele, valamint a kapcsolódó házi válogatások, szállítások, valamint a lokális, kistérségi és regionális hulladékkezelési megoldások áttekintése, a tevékenységekhez tartozó becsült költségek megadásával.

A folyamathálózatok elemeinek és kapcsolatainak formális definíciója, valamint az elemekhez rendelhető paraméterek és költségek leírása alapján a Programozható Struktúrák módszerével generáltuk a lehetséges folyamathálózatok teljes modelljét. Ezt kiegészítettük az elválasztások és szállítások mennyiségét és költségét számító lokális program prototípusokkal. A módszert először egyedi modellek generálására és szimulációjára próbáltuk ki.

Ezt követően folyamat hálózatok elemeinek definíciójából kiindulva generáltuk a lehetséges begyűjtési és elválasztási megoldások kódját, valamint kialakítottunk egy olyan egyszerűsített szimulációs megoldást, amely a kód alapján néhány jellemző éves szintű értékelését számítva lehetővé teszi akár az összes megoldás (vagy azok egy célszerűen választott részhalmazának) elemzését. Esettanulmányokkal vizsgáltuk néhány jellemző paraméter (pl. a regionális központ és a begyűjtési térség közötti távolság) hatását a költségekre, illetve ezen keresztül a gazdaságos megoldások sorrendjére.

Az eddigi tapasztalatokat összefoglalva megállapítható, hogy a hulladék begyűjtési és elválasztási alternatívák folyamatmodellezéssel támogatott elemzése perspektivikus megoldás. Figyelembe véve a szigorodó célkitűzések egyre sürgetőbb teljesítését, mindenképpen célszerű a kutatások folytatása. A további vizsgálatokat célszerű kiterjeszteni az elválasztások hatásfokának és tisztaságának részletes elemzésére, valamint a szezonális hatások dinamikus követésére.

Biogén Amin Hordozó Finomhangolható Polaritású Szupramolekuláris Vinil Alkohol Ko-polimerek Szintézise Gyűrűnyító Metatézis Polimerizációval

Synthesis of Supramolecular Vinyl alcohol (VA) Co-polymers via Ring-Opening Metathesis Polymerization (ROMP) for Biogenic Amine Delivery

János Deme, Gyetvai Eszter, Ervin Kovács, Gabriella Merza, Gábor Szolnoki, Virág Kiss, Györgyi Szarka, Béla Iván, Péter Huszthy, John A. Gladysz, Robert Tuba

MTA Természettudományi Kutatóközpont Anyag- és Környezetkémiai Intézet

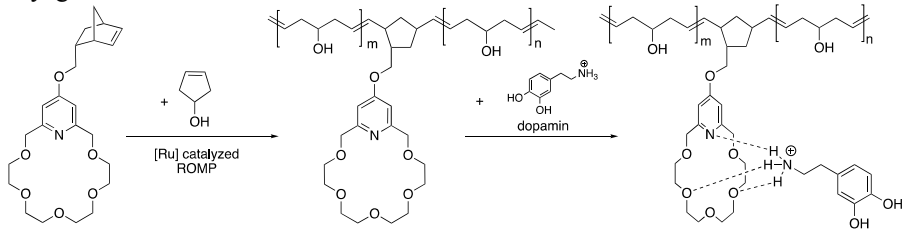
1117 Budapest, Magyar tudósok körútja 2.

Összefoglaló

A poli(vinil-alkohol) (PVA) alapú hidrofil szintetikus polimerek számos gyógyszerhordozó és implantátum kompozit alapanyagai. A PVA ko-polimer polaritása a polimerláncon található hidroxil csoportok számának változtatásával finomhangolhatóvá válik. Az ilyen ko-polimer alapú gyógyszerhordozók vagy implantátumok alkalmazásával a hatóanyag felszabadulás szabályozható és hosszan fenntartható.

A kémiailag jól definiált ko-polimerek előállítása klasszikus polimerizációs eljárásokkal bonyolult. Az elmúlt időszakban egyre szélesebb alkalmazási területet nyernek az olefin metatézisen alapuló polimerizációs eljárások, amelyek jól definiált, különböző funkcionalitással rendelkező polimerek széles spektrumának szintézisét teszi lehetővé. Az olefin metatézis új lehetőséget nyújt a funkcionált polimerek, különösen a PVA ko-polimer alapú biopolimerek szintézisében. Különböző hidroxil csoportot tartalmazó cikloolefinek gyűrűnyító metatézis polimerizációja (ROMP) piridin tartalmú norbornén funkcionalizált koronaéterekkel olyan biodegradábilis polimerek szintézisét teszik lehetővé, amelyek szupramolekuláris részegységeket is tartalmaznak. Ezek a típusú gyógyszerhordozó anyagokok lehetővé teszik hidrofil biogén aminok (pl. dopamin) nanokapszulázását finomhangolható polaritású (szemipoláris) vinil alkohol ko-polimerekbe. A lipofil környezetben történő hidrofil vegyületek nanokapszulázása megteremti a lehetőségét például a dopamin vér-agy gáton történő transzportjára, amely a Parkinson kór kezelésének az egyik közvetlen módszere lehet.

Kutatásaink során különböző arányú hidroxilcsoportot tartalmazó, finomhangolt polaritású PVA ko-polimereket szintetizáltunk OH-szubsztitulált cikloolefinek ruténium katalizált (Grubbs-komplexek) ROMP-jával, illetve aciklikus diének metatézis polimerizációjával (ADMET). Ezek a polimerek akár kémiailag kötött vagy egyszerűen csak fizikailag beágyazott hatóanyagokat is "hordozhatnak". Fluoreszceint (fluoreszkáló nyomjelző), valamint sorafenibet (tumor angiogenezisére és proliferációjára ható multikináz inhibitor) beágyazva modelleztünk hatóanyag felszabadulást. In vitro kísérleteink során a polimerbe ágyazott fluoreszcein felszabadulását nyomon követve bebizonyítottuk, hogy a láncon található hidroxil csoportok száma meghatározza a polimer polaritását és ez által előre definiálja a hatóanyagleadást. A nanokompozit szintézisre kiválasztott ko-polimer nanorészecskékbe sorafenib került beágyazásra nanoprecipitációval. Az eljárás során szokatlan kocka alakú nanorészecskék keletkeztek. A sorafenibet tartalmazó nanokompozitok folyamatos hatóanyag felszabadulást mutattak 24 órán keresztül és koncentrációfüggő citotoxicitást a HT-29 rákos sejtekkel szemben. A tapasztalt jelenségeket a hatóanyag elnyúlt felszabadulásaként értelmezzük. A megfelelően "hangolt" polimerek alkalmazásával lehetőség nyílik precíziós - időben és térben meghatározott - célzott gyógyszerhatóanyag felszabadulására.



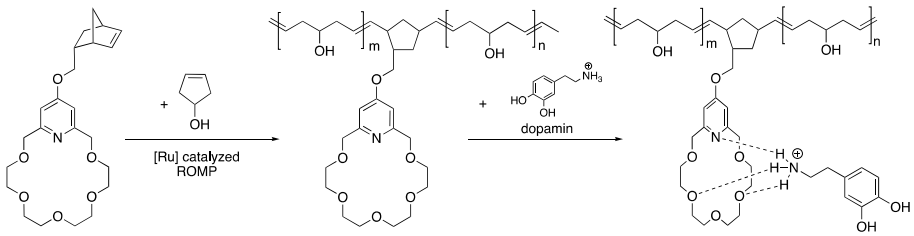
1. Ábra. Jól definiált, finomhangolható polaritású szupramolekuláris PVA ko-polimerek szintézise.

Summary

Co-polymers of vinyl alcohol (VA) are hydrophilic synthetic macromolecules having prominent biomedical applications, such as drug carrier or implant composite material. The concentration of hydroxyl groups along the VA polymer chain determines its polarity. By using such co-polymer based drug carriers or implants, drug release can be controlled and prolonged.

The production of well-defined co-polymers is difficult by classical polymerization processes. Lately, olefin metathesis-based polymerization processes have become increasingly widespread, allowing the synthesis of a broad spectrum of well-defined polymers with different functionalities. The olefin metathesis also provides a new opportunity for the synthesis of functionalized polymers, in particular, PVA co-polymer based biopolymers. Catalyst systems, which can produce well-defined VA co-polymers with adjustable polarities, are of great pharmaceutical interest. For example, fine-tuning the polarity of VA co-polymers used in drug delivery applications can control targeted drug release. Ring-opening metathesis polymerization (ROMP) or acyclic diene metathesis polymerization (ADMET) using well-defined ruthenium catalyzed systems are one of the most promising synthetic tools to fabricate such polymers. Co-polymerization of pyridine containing ROMP-ready, norbornene functionalized crown-ethers with hydroxyl-functionalized cycloolefins results in biodegradable polymers bearing supramolecular moieties. Pyridine donor groups render crown ethers more fundamental than all oxygen analogs, affording stronger adducts with protonated biogenic amines than with sodium or potassium cations under physiological conditions. Encapsulation of hydrophilic amines into semipolar biodegradable supramolecular polymers should facilitate for example the transport of highly polar dopamine through the blood-brain barrier making possible an alternative treatment of Parkinson diseases.

PVA co-polymers with fine-tuned polarity were synthesized with different ratios of hydroxyl groups by ROMP or ADMET of OH-substituted cycloolefins catalyzed by ruthenium. The active agents can either be chemically bonded or physically embedded into these polymers. Fluorescein (fluorescent tracer) and sorafenib (multinuclease inhibitor for tumor angiogenesis and proliferation) were embedded into co-polymers for model drug release experiments. *In vitro* fluorescein release experiments showed that the polarity of the polymer is determined by the number of hydroxyl groups on the chain thus predetermines drug release. Sorafenib was embedded into selected co-polymer nanoparticles by nanoprecipitation resulting in unusual cubic shaped nanoparticles. Sorafenib-containing nanocomposites showed continuous drug release for 24 hours and concentration-dependent cytotoxicity against HT-29 cancer cells. This was interpreted as the extended release of the active agent. Precise and targeted drug release is possible by using appropriately tuned co-polymers.



Scheme 1. Synthesis of supramolecular PVA biopolymers having fine-tunable polarity via ring-opening metathesis polymerization

Új kopolimer alapú kompatibilizáló adalékok szerepe műanyag és gumi hulladékok hasznosításában

Novel types of copolymer based compatibilizing additives in recycling of plastic and rubber wastes

Varga Csilla, Bartha László

Pannon Egyetem, Vegyészmérnöki és Folyamatmérnöki Intézet, MOL Ásványolaj- és Széntechnológiai Intézeti Tanszék

8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló/ Summary

A 21. sz. hulladékgazdálkodásának egyik legnagyobb kihívása a műanyag és gumi hulladékok sikeres újrahasznosítása. Az újrahasznosítás fontos gazdasági megoldásnak tekinthető, nem csupán környezetvédelmi szempontból érdekes, hiszen mind az energiafogyasztás, mind pedig az alapanyag felhasználás csökkentését lehetővé teszi.

A mechanikai újrahasznosítás területén a nehézségeket elsősorban a műanyag és gumi hulladékok sokfélesége okozza. Az eltérő mechanikai és fizikai tulajdonságok mellett kémiai szerkezetükben is különböznek, ez pedig általában gyenge mechanikai stabilitással jellemezhető végtermékeket eredményez a hulladékok együttes feldolgozása esetén. Számos stratégiát kidolgoztak már arra, hogyan lehet a nagyon különböző kémiai szerkezetű polimer típusú anyagok mechanikai újrahasznosításával kapcsolatos hátrányokat kiküszöbölni. Az egyik a lehetőségek közül, hogy kompatibilizáló adalékot alkalmazunk, amely képes megfelelőképpen homogenizálni két vagy több műanyagot, és/vagy töltőanyagot. Kereskedelmi forgalomban ugyanakkor viszonylag kevés adalékszerkezet típus kapható, másrészt hatékonyságukat sok esetben korlátozza az, hogy az adalék szerkezete nem igazítható a különböző kémiai szerkezetű műanyagokhoz/gumikhoz, amelyeket együttesen dolgozunk fel.

Ebből kifolyólag kutatómunkánk célja alapvetően adalékfejlesztés, amely a legkülönbözőbb újrahasznosításra váró műanyagok és/vagy gumik összeférhetőségének javításán keresztül megfelelő homogenitással rendelkező kompozitokat vagy blendeket eredményez. Anyagtársításaink közül a poli(etilén-tereftalát) (PET), valamint a poliolefin (polietilén, polipropilén) alapú rendszerekben elért eredményeket mutatjuk be.

Modeling of agro-ecosystems in changing environment II. – implementation of Programmable Structures –

Agrár-ökoszisztémák modellezése változó környezeti feltételek mellett II. - a Programozható Struktúrák implementálása -

Mónika Varga[1], Sándor Balogh[1], János Rásó[2], Béla Csukás[1]

[1]*Kaposvar University, Institute of Methodology, Kaposvár, Hungary*

[2]*NARIC Forest Research Institute, Dept. of Plantation Forestry, Püspökladány, Hungary*

Summary

Agroforestry needs flexible dynamic models for planning and operation of the underlying processes, affected by changing external conditions. The objective of this work is to apply the recently developed methodology of Programmable Structures for dynamic simulation of an example agroforestry in Földes, Hungary.

The development of Programmable Structures has been motivated by the fact that modeling and simulation of agro-environmental processes require easily modifiable, extensible and connectable models, with unified representation of functional and structural features. Programmable Structures propose: two, unified building blocks (so called state and transition meta-prototypes), the meta-prototypes based formation of state and transition elements of the underlying processes and of their functional prototypes, as well as the automatic model generation of the unified process structures.

In agroforestry models we generate specific state elements in various compartments (e.g. leave, branch, bole, main root, fine root, xylem and phloem for tree compartments, or organic residues, humus, inorganic solid and solution for soil compartments). Typical examples for transition prototypes are: photosynthesis, evapotranspiration, growth, respiration, nutrient uptake, etc. in plants; evaporation, precipitation, diffusion, humification, demineralization, etc. in soil. In the lowest level we calculate the dynamic balance of C, O, H, N, P and other optional atoms, considering the characteristic stoichiometries. According to the temporary results, Programmable Structure seems to be a feasible approach to generate dynamic models of medium complexity, with relatively limited data demand. In addition it gives an interesting example for testing the methodology of complex multiscale process system.

Support of EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projects is acknowledged.

Összefoglaló

A változó környezeti feltételekhez való alkalmazkodás szükségessége miatt egyre inkább előtérbe kerülnek a rugalmasan alkalmazkodó és fenntartható agrár-ökoszisztémák. Az ilyen rendszerek tervezése és üzemeltetése flexibilis modelleket igényel. Jelen munka célja a Programozható Struktúrák módszerének egy földesi agrárerdészeti területre való implementálása a folyamatok modellezéséhez és szimulációjához.

A módszer fejlesztését az motiválta, hogy az agrár és környezeti rendszerek modellezése könnyen módosítható, bővíthető, összekapcsolható és újra felhasználható modell elemeket igényel, a vizsgált folyamatok struktúrájának és a funkcionalitásainak egységes kezelésével. A Programozható Struktúra két egységesített modell elemből (az állapot és változás meta-prototípusból) kiindulva, egy egységes szintaxissal leírt folyamathálózatra biztosítja a struktúra automatikus generálását, valamint a funkcionalitásokat tartalmazó prototípusok kialakítását.

Az agrárerdészeti folyamatok modelljének elkészítésénél különféle térbeli kompartmentekben generáljuk a folyamat állapot elemeit (pl. levél, ág, törzs, fő- és finomgyökér, xylem, phloem a fákra, illetve növényi maradvány, humusz, oldott és szilárd komponensek, valamint víz a talajra). A folyamatok funkcionalitásait leíró fontosabb változás elemek: pl. a fotoszintézis, az evapotranspiráció, a növekedés, a respiráció, a tápanyagfelvétel, stb. a növényekre, vagy a párolgás, humifikáció, diffúzió, stb. a talajra vonatkozóan. A modell a legalsó szinten a folyamatok C, O, H, N, P atomjainak dinamikus mérlegeit is számolja a vonatkozó sztöchiometriák alapján. Az előzetes eredmények azt mutatják, hogy a módszer jól alkalmazható az atommérlegeken alapuló folyamat hálózat generálására. Az így kialakított modellek mérsékelt adatigénnyel biztosítják a teljes rendszer számítását. Mindez egyúttal egy érdekes példát nyújt a módszer komplex, többskálás folyamatokra való kipróbálásához.

Köszönet az EFOP-3.6.2-16-2017-00018 projekt támogatásának.

Kluyveromyces marxianus ergoszterin tartalmának vizsgálata

Examination of the ergosterol content in Kluyveromyces marxianus

Vidra Aladár, Dr. Németh Áron

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék

1111, Budapest Műegyetem rakpart 3.

Összefoglaló/ Summary

Az egészséges szervezet megfelelő működéséhez szüksége van vitaminokra. A D_2-vitamin sem kivétel ez alól, melynek fontos szerepe van a homeosztázis fenntartásában. Elegendő mennyiség termelődik a szervezetben azonban a bioszintézis lejátszódásához napsugárzás szükséges. Ebből kifolyólag hiánytünetek léphetnek fel az őszi és téli hónapokban, vagy amikor nincs elég ideig behatása a napsugaraknak. Ilyen esetekben pótolni kell a D_2-vitamint valamilyen külső forrásból. A D_2 vitamint az iparban általában fotokémiai úton, UV-B sugárzással szintetizálják ergoszterinből. Az ergoszterin az élesztőkben, illetve egyes gomba- és növényfajok membránjában tölti be a fő szterol szerepét. Nagy mennyiségben vagy penicillin és citromsav gyártásból maradt micéliumokból nyerik ki vagy élesztő fermentációval állítják elő. A micéliumok ergoszterin tartalma alacsony ezért manapság az élesztő fermentációt használják. Az ergoszterin fontos szerepet játszik a sejtmembránok felépítésében: elsősorban a membrán integritását, fluiditását és permeabilitását határozza meg, illetve befolyásolja a membránkötött enzimek működését. Fontos szerepe van a különböző külső hatások, például etanol stressz vagy erős nyíróerőkkel szembeni védekezésben. Kísérleteink során egy centrál kompozit kísérletterv segítségével vizsgáltuk a hőmérséklet, az oldat kémhatásának és az etanol koncentrációnak a hatását a *Kluyveromyces marxianus* szaporodására illetve a sejtek ergoszterin tartalmára. A mért eredmények alapján az etanol hatása volt szignifikáns, míg a másik két faktor a vizsgált tartományban nem mutatott szignifikáns hatást. Ergoszterin tartalom szempontjából 3% etanol hozzáadása eredményezte a legnagyobb értéket. Ergoszterin tartalom és sejtszaporodás szempontjából az alacsonyabb 25°C körüli hőmérséklet bizonyult megfelelőnek. A legalacsonyabb ergoszterin tartalmat a kémhatás függvényében, a vizsgált tartomány közepén, pH 5,5-nél mértük. Ettől savasabb körülmények között több volt a sejtek ergoszterin tartalma azonban kevesebb biomassza keletkezett. Ezzel szemben a pH 6,5 körüli értéknél mind a biomassza mennyisége, mind a sejtek fajlagos ergoszterin tartalma nagyobb lett. 10% alkohol jelenlétében a sejtek nem tudtak jelentősen szaporodni és emiatt fajlagos ergoszterin tartalmat sem lehetett meghatározni, tehát ekkora etanol stresszt már nem voltak képesek elviselni.

A healthy body requires vitamins for proper functioning. This also includes vitamin D_2, which plays an important role in the maintaining of homeostasis. However, sufficient amounts are produced in the body, solar radiation is required for the biosynthesis, therefore, deficiency symptoms may occur during the autumn and winter months, or when there is not enough time to penetrate the sun rays. In such cases, vitamin D_2 should be complemented by an external source. In industrial production of vitamin D_2 is usually synthesized from ergosterol by photochemical method with UV-B radiation. Ergosterol acts as a major sterol in membranes of yeasts and of some fungal and plant species. It is obtained in large quantities either from residual mycelium of penicillin and citric acid production or from yeast fermentation. The ergosterol content of mycelium is low so yeast fermentation is used. Ergosterol plays an important role in the construction of cell membranes: it primarily determines the membrane integrity, fluidity and permeability, and influences the function of membrane bound enzymes. It has an important role in controlling various external impact such as ethanol stress or strong shear forces. In our experiments, the effect of temperature, pH of the solution and ethanol concentration on cell growth of *Kluyveromyces marxianus* and ergosterol content was studied using a central composite experimental design. Based on the results, the effect of ethanol was significant, while the other two did not show significant effects in the examined range. The addition of 3% ethanol gave the highest value for ergosterol content. The lower temperature, around 25°C proved to be appropriate for ergosterol content and cell growth. The lowest ergosterol content was measured at pH 5.5 in the center of the examined range. However, under more acidic conditions, the ergosterol content of the cells was more but less biomass was produced. In contrast, at pH 6.5, both the amount of biomass and the ergosterol content of the cells increased. In the presence of 10% alcohol, the cells were not able to grow significantly and there was no ergosterol content could be determined, so 10% ethanol was too much for the cells to tolerate.

Kén-hidrogén adszorpciója módosított felületű szén alapú szorbenssel

Hydrogen sulphide adsorption on modified surface of activated carbon

Virág Lilla, Bocsi Róbert, Rippelné Pethő Dóra

Pannon Egyetem

8200 Veszprém, Egyetem u. 10.

Összefoglaló

A kén-hidrogén számos vegyipari folyamat melléktermékeként előfordulhat. Eltávolítása sokféle módon lehetséges, melyek közül az adszorpció egy igen gyakran használt művelet a 10 (v/v)% alatti kén-hidrogén tartalmú gázkeverékek esetén. Adszorbensként főként fém-oxidok és aktív szén alapú szorbensek alkalmazhatóak.

Ezeknek a kulcskomponens megkötésére szolgáló anyagoknak a hatásfokát különféle kémiai módszerekkel intenzifikálni lehet. Például az aktív szén felülete a nagyobb hatékonyság elérése érdekében különböző vegyületek impregnálásával módosítható. Erre a célra főként bázikus vegyületek vagy különböző fém-oxidok alkalmazhatóak. Az impregnálási technikák közül a legelterjedtebb módszer az adott komponensek oldatból történő impregnálása, de egyéb impregnálási módszerek is alkalmazhatók.

A munkám során három különböző vegyülettel impregnált aktív szén adszorbenst vizsgáltam meg. A cinkkel, rézzel és e két komponens keverékével együtt impregnált aktív szén szorbensek előkészítése -klasszikus impregnálási módszer esetén- különféle szárítási módszerek alkalmazásával került elvégzésre. Vizsgáltam, hogy az eltérő fém vegyületekkel impregnált szorbensek közül melyik típus a legnagyobb hatékonyságú, illetve, hogy a különféle szárítási mechanizmusok következtében kialakult felülete a szorbenseknek hogyan befolyásolja az adszorpciós kapacitást. A minták szárítására szárítószekrényben és fagyasztva szárító berendezésben került sor.

Az eredmények azt mutatják, hogy az impregnálás következtében növekedett az aktív szén kén-hidrogén megkötő kapacitása. A legnagyobb kapacitást a réz-tartalmú minták esetében lehetett elérni. A minták közül a liofilizálással előkészített minták adszorpciós kapacitása nagyobbnak bizonyult, ami a szorbens felületének az impregnálás következtében kialakult szerkezete okoz.

Kulcsszavak: adszorpció, kénhidrogén megkötés, impregnált aktív szén, liofilizálás

Preparation and Characterization of Nitrogen Doped TiO_2 Catalyst

Abdul Wafi[a], Erzsébet Szabóné Bárdos[a], Ottó Horváth[a], Miklós Jakab[b], Balázs Zsirka[c]

[a]Department of General and Inorganic Chemistry, [b]Institute of Materials Engineering,
[c]Department of Environmental Engineering
University of Pannonia, H-8200 Veszprem, POB. 158, Hungary

The pure TiO_2 photocatalysts can only be excited by ultraviolet (UV) light because of their wide bandgap (3.2 eV for anatase phase), which is rather inefficient for the photo-conversion of solar energy. Therefore, considerable efforts have been made during the past decades, aimed to obtain visible-light active materials through chemical modification of TiO_2.

Numerous nonmetal elements, including N, F, S, C, and P, have been explored, which proved to be appropriate dopants being able to extend the light absorption edge of TiO_2 to the region of visible light, hence, to improve the activity of this photocatalyst. In particular, nitrogen has been intensively used as dopant for the modification of titanium dioxide materials, due to its marked thermal stability and cost-effectiveness.

In this work, visible-light active nitrogen-doped TiO_2 nanoparticles were synthesized by sol-gel methods using titanium(IV) isopropoxide as an economical precursor and amonium hydroxide as a nitrogen source. The effects of the synthesis sequence and the reaction temperature (0, 10, 25 °C) on the morphological, structural, optical and photocatalytic properties of the N-doped TiO_2 were investigated. The resulting materials were characterized by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy with energy dispersive X-ray spectroscopy (SEM-EDX), and Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR). Also the band gaps of these photocatalysts were measured by recording diffuse reflectance spectra (DRS).

In order to test the activity of these modified photocatalysts, the degradation of coumarin was studied. The photoreactor applied was equipped with a Vis LED (□>420 nm).

Our results unambiguously indicated that the photoactivity of these photocatalysts significantly depended on both the sequence of the synthesis steps and the reaction temperature. The rate of its hydroxyl radical generation was higher than that for the standard P25 TiO_2.

This work was supported by the Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00016 and the EFOP-3.6.1-16-2016-00015.

Keywords: N-doped TiO_2, synthesis sequence, reaction temperature, visible-light activity

(Poster 1)

TiO_2 Immobilization with Polyacrylamide

Abdul Wafi[a], Erzsébet Szabóné Bárdos[a], Ottó Horváth[a], Zsirka Balázs[b]

[a]Department of General and Inorganic Chemistry, [b]Department of Environmental Engineering
University of Pannonia, H-8200 Veszprem, POB. 158, Hungary

The continuously increasing number of environmentally risky chemicals strongly demands the developments of new procedures which can be successfully deployed against a wide range of man-made contaminants. Heterogeneous photocatalysis as one of the advanced oxidation processes (AOPs) satisfies this requirement. TiO_2 is a photoactive semiconductor widely used for this purpose, mostly in suspension form. One of the main drawbacks of this method is that the phase separation after the water treatment is very difficult and expensive. This problem can be eliminated if the catalyst is immobilized. But, unfortunately, this method is not free of disadvantages. Immobilization decreases the active surface area of the catalyst, diminishing its efficiency.

TiO_2 immobilized in polyacrylamide (PAM/TiO_2) composite hydrogel was synthesized through polymerization in an aqueous solution with N,N-methylenebisacrylamide as a crosslinker, potassium peroxydisulfate as an initiator, acrylamide as a monomer, and a commercially available TiO_2 photocatalyst (Degussa P25) as a functional filler. The effects of the amount of TiO_2 (5, 10, 50 %) on its swelling and drying behavior, as well as its stability under irradiation were also investigated.

The composite was characterized by scanning electron microscopy and Raman spectroscopy. The production of hydroxyl radicals by the composite was evaluated in coumarin solution under solar-light irradiation, where PAM/TiO_2 10% showed a highest fluorescence intensity of 7-hydroxycoumarin.

The adsorption and photodegradation properties were investigated using methylene blue (MB) as a model dye under UV-light irradiation. In the dark condition, The PAM/TiO_2 10% composite adsorbed 49.5% of MB (in 5 ppm solution) within 60 min, and also showed up to 95 % MB photodegradation under irradiation for 150 min. The reusability of PAM/TiO_2 10% composite was investigated in 3 reaction cycles, and indicated a good reproducibility, i.e., constant efficiency.

This work was supported by the Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00016 and the EFOP-3.6.1-16-2016-00015.

Keywords: Immobilized TiO_2, Polyacrylamide, Methylene Blue, Photodegradation

(Poster 2)

Formation of hydroxyl radicals by usingTiO_2 coated glass slide

Abdul Wafi, Erzsébet Szabóné Bárdos, Ottó Horváth

University of Pannonia, Institute of Chemistry, Department of General and Inorganic Chemistry, H-8200 Veszprem, POB. 158, Hungary

Heterogeneous photocatalysis is an advanced oxidation process (AOP) which has been successfully used for degradation of organic pollutants. Titanium dioxide (TiO_2) is the major semiconductor using for such a photocatalytic process, due to its photo-stability, non-toxicity, and high abundance. However, the separation of TiO_2 powder from treated water is very difficult, which hinders its practical application. To solve the separation problem, some researchers immobilized TiO_2 nanoparticles onto various substrates such as polymers, ceramics, stainless steel, and glass.

Glass substrate is commonly used as a support material, owing to its low cost, high transparency to the UV radiation, resistance to high temperature and corrosive environment, good adherence to support TiO_2 powder, and chemical inertness with both catalyst and pollutant molecules.

This work used a simple dip-coating technique to immobilize a commercially TiO_2 photocatalyst (Degussa P25) on glass slide. Three different TiO_2 coatings have been fabricated and characterized by scanning electron microscopy (SEM). The results indicated that multi-coating increased the TiO_2 coverage on the surface of glass slide.

Hydroxyl radicals play an important role in this photocatalytic system due to their are chemically reactive species and can oxidize many types of molecules. Coumarin was used as a model compound to investigate the generation of hydroxyl radicals by the catalyst films, where coumarin reacts with hydroxyl radicals to form fluorescent 7-hydroxycoumarin.

The effects of the number of TiO_2 layers on the generation of hydroxyl radicals and the photodegradation efficiency were also investigated. The three-layer TiO_2 coating on glass slide revealed the highest efficiency for hydroxyl radical generation and photodegradation under UV irradiation. The catalyst films showed a good reproducibility and a high stability in 5 reaction cycles.

This work was supported by the Széchenyi 2020 under the GINOP-2.3.2-15-2016-00016 and the EFOP-3.6.1-16-2016-00015.

Keywords: TiO_2 coating on glass, dip-coating technique, hydroxyl radical generation

Sztirol-DVB kopolimer duzzadási modelljének megalapozása

Development of a swelling model for Styrene-DVB copolymer system

Wirnhardt Ádám, Berzeviczy Gergely, Rippelné Pethő Dóra, Varga Tamás

Pannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, Vegyipari Műveleti Intézeti Tanszék

8200 Veszprém, Egyetem utca 10

Összefoglaló

A sztirol-DVB kopolimer egyik felhasználása az ioncserélő gyanta előállítás, ahol valamilyen funkciós csoporto(ka)t építenek a polimerbe (pl. kationcserélő gyanták esetén szulfo-csoport). A funkciós csoportok hatékonyabb beépítése érdekében, az inert polimer mátrixot duzzasztják. Egy ilyen technológia fejlesztése során, alapvető, hogy minden egyes folyamatról megfelelő minőségű és mennyiségű információval rendelkezzünk. Jelen munkánkban célunk a sztirol-DVB kopolimer duzzadásának egy a priori modellel való leírása és a modellben szereplő ismeretlen paraméterek mérések alapján történő identifikálása.

A vizsgálatunk során sztirol-divinilbenzol (8 m/m%) kopolimert, illetve duzzasztószerként 1,2 diklóretánt használtunk. A kísérleteket 20, 30, 40, 60 és 80 °C-on végeztük, minden esetben a duzzadás maximális értékének eléréséig. A speciálisan kialakított kísérleti berendezésben, a polimergyöngyök körül folyamatosan biztosítva volt a duzzasztószer jelenléte. A hőmérséklet nem csak a duzzadás mértékére, hanem annak sebességére is jelentős hatást gyakorolt.

A modell kidolgozása során, mind a szemcsét, mind az azt körülvevő környezetet homogénnek tekintettük. A szemcséket gömbként kezeltük. Ezek alapján egy 1D modellt dolgoztunk ki, amely alkalmas arra, hogy adott időpillanatban kiszámítsuk egy polimergyöngy térfogatát, a gyöngy és a környezete között egyszerű komponensátadást feltételezve. A polimerben lévő duzzasztószer koncentráció egy egyensúlyi koncentrációhoz tart, amit mérések alapján határoztunk meg.

A hőmérsékletfüggést a modellben a komponensátadási tényezőben, illetve a növekedés mértékét befolyásoló egyensúlyi duzzasztószer koncentrációban vettük figyelembe. A kidolgozott modell ismeretlen paramétereit, a számított és a mért szemcse halmaz térfogatok hibanégyzet összegének minimalizálásával határoztuk meg.

Summary

One of the major consumption of styrene-DVB copolymer is the production of ion exchange resin, where functional group is built into the polymer (e.g. sulfo functional groups in cationic exchange resin). The polymer matrix is swelled to increase the efficiency of the incorporation of functional groups. In the development such a technology it is necessary to have the information with appropriate quality and quantity about all the crucial processes. Our aim in this work was to create an a priori model of swelling of the styrene-DVB copolymer system and to identificate the unknown parameters in the developed model according to measurements.

Styrene-DVB (8 m/m%) copolymer, and 1,2 dichloro-ethane as swelling agent were used in the experiments. The effect of temperature on swelling was investigated at 20, 30, 40, 60 and 80 °C. The experiments were finished when the polymer reached the maximum swelling degree. The presence of the swelling agent around the polymer beads was secured by the specially designed experimental equipment. The temperature had a significant impact on the swelling degree and on the rate of the swelling also.

The environment and the inner structure of the polymer beads were considered homogeneous at this phase of the model development. All the beads were considered as sphere. The connection between the polymer and liquid phase was described with a simple component mass transfer. A 1D model was developed based on these model assumptions, which can be applied to compute the volume of the polymer bead at specific time. The concentration of the swelling agent in the polymer increase to an equilibrium concentration, that were determined by experiments.

The effect of the temperature to swelling was built into the component mass transfer coefficient and in the equilibrium concentration of swelling agent in the polymer beads. The unknown parameters of the developed model were identified with the minimization of the sum of squared errors between the measured and calculated values.

Köszönetnyilvánítás:

Köszönetünket fejezzük ki a Széchenyi 2020, GINOP-2.2.1-15-2017-00059 pályázat keretein belül nyújtott anyagi támogatásért.