

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
ÚNKP Konferencia
2020. május 27.

 Új Nemzeti
Kiválóság Program


MŰEGYETEM 1792


NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI
ÉS INNOVÁCIÓS HIVATAL


INNOVÁCIÓS ÉS TECHNOLÓGIAI
MINISZTERIUM

Absztraktfüzet

Előszó

Az Új Nemzeti Kiválóság Program (ÚNKP) a Kormány által a nemzeti felsőoktatási kiválóság támogatására alapított ösztöndíjprogram. A Műegyetemen a 2019/2020-as tanévben 199 pályázó nyert ÚNKP ösztöndíjat.

Az egyes pályázati kategóriák szerinti ösztöndíjasok számát 2019-ben az alábbi táblázat mutatja:

Pályázati kategória	Műegyetemi ÚNKP ösztöndíjasok száma (fő)
Felsőoktatási Alapképzés Hallgatói Kutatói Ösztöndíj	12
Felsőoktatási Mesterképzés Hallgatói Kutatói Ösztöndíj	31
Felsőoktatási Doktori Hallgatói, Doktorjelölti Ösztöndíj	86
Bolyai+ Felsőoktatási Fiatal Oktatói Kutatói Ösztöndíj	50
„Tehetséggel fel!” Felsőoktatást Megkezdő Kutatói Ösztöndíj	20

A BME 2019/2020. tanévi ÚNKP Konferenciájának célja, hogy ösztöndíjasaink előadásokban ismertessék a kutatási tervükben vállalt feladatok megvalósítását, illetve az ösztöndíjas támogatással elért kutatási eredményeiket. Az eredményekről ösztöndíjasaink a Konferencia 18 szakmai szekciójában adnak számot. A bemutatásra kerülő kutatások témái és a vonatkozó szakmai szekciók a műszaki tudományok, természettudományok, informatikai tudományok, társadalomtudományok, építészet és művészetek egyes területeit jelenítik meg. A rendezvény online formában kerül megtartásra.

A szekciók felsorolása:

Szekció neve		Szekcióelnök	
ÉMK 1	Építőmérnöki tudományok	Dr. Bagi Katalin	egyetemi tanár
ÉMK 2	Víztudomány	Dr. Hajnal Géza	egyetemi docens
ÉPK	Építészmérnöki tudományok, művészet	Dr. Várkonyi Péter	egyetemi docens
GPK 1	Gépészet 1	Dr. Insperger Tamás	egyetemi tanár
GPK 2	Gépészet 2	Dr. Hős Csaba	egyetemi docens
GPK 3	Anyagtudomány	Dr. Szabó Péter János	egyetemi tanár
GTK	Társadalomtudomány	Dr. Zilahy Gyula	egyetemi tanár
KJK	Közlekedés- és járműtudomány	Dr. Török Ádám	egyetemi docens
TTK 1	Fizika 1	Dr. Virosztek Attila	egyetemi tanár
TTK 2	Fizika 2	Dr. Varga Imre	egyetemi docens
TTK 3	Matematika	Dr. G. Horváth Ákos	egyetemi tanár
TTK 4	Kognitív tudomány	Dr. Zimmer Márta	egyetemi docens
VBK 1	Bio-, környezet- és vegyészmérnöki tudomány 1	Dr. Huszthy Péter	egyetemi tanár
VBK 2	Bio-, környezet- és vegyészmérnöki tudomány 2	Dr. Nyulászi László	egyetemi tanár
VBK 3	Biológia, kémia, agrártudomány	Dr. Vértessy Beáta	egyetemi tanár
VIK 1	Informatika 1	Dr. Imre Sándor	egyetemi tanár
VIK 2	Informatika 2	Dr. Horváth Gábor	egyetemi tanár
VIK 3	Villamosmérnöki tudomány	Dr. Bíró József	egyetemi tanár

Tartalomjegyzék

Felsőoktatási Alapképzés Hallgatói Kutatói Ösztöndíj

Bajcsi Levente.....	7	Rávai Bettina	13
Hegedűs Noémi	8	Rendes Szilveszter Koppány	14
Marosvölgyi Martin.....	9	Szekeres Dániel.....	15
Molnár Balázs	10	Varnyú Dóra	16
Papp Ádám.....	11	Vitanov George	17
Papp Marcell	12	Zsiros Ádám János.....	18

Felsőoktatási Mesterképzés Hallgatói Kutatói Ösztöndíj

Borsi Márton.....	20	Máté Balázs	36
Csáky Richárd Krisztián.....	21	Megyeri Mária.....	37
Csizovszky Anna	22	Móznér Orsolya.....	38
Dargó Gyula.....	23	Nagy Márton.....	39
Fersch Dávid László	24	Papp Bálint.....	40
Gulyás Eszter.....	25	Paulics Lilla.....	41
Hertner-Horváth Anna	26	Pejtsik Diána	42
Horváth András Máté	27	Rávai Bettina	43
Horváth Hanna Zsófia.....	28	Reizinger Patrik	44
Juhos Attila.....	29	Szomolányi Orsolya Réka.....	45
Krammer Réka Melinda.....	30	Varga Géza.....	46
Laczka Áron.....	31	Varga László József	47
Lukáts Gergely Dániel.....	32	Vincze Anna.....	48
Lükő Gabriella.....	33	Virág Ábris Dávid	49
Madarász Lajos	34	Zsiros Ádám János.....	50
Márton Anna	35		

Felsőoktatási Doktori Hallgatói, Doktorjelölti Kutatói Ösztöndíj

Asztalos Lilla.....	52	Lévay Sára.....	100
Babicsné Horváth Mária.....	53	Litauszki Katalin.....	101
Benedek Zsolt.....	54	Lóránt Bálint.....	102
Béri Bence.....	55	Molnár Csenge Andrea.....	103
Bingler Arnold.....	56	Molnár Dániel.....	104
Biró András.....	57	Molnár Vince.....	105
Csemány Dávid Béla.....	58	Molontay Roland.....	106
Csóré András.....	59	Nagy Sándor.....	107
Dávid Dóra.....	60	Németh Gábor.....	108
Deichler Tímea.....	61	Okvátovity Zoltán.....	109
Domán Andrea.....	62	Orosz Gergely Imre.....	110
Domján Júlia.....	63	Papp Dávid.....	111
Domokos András.....	64	Paudics Adrien.....	112
Farkas Balázs.....	65	Polyák Péter.....	113
Farkas Rebeka Krisztina.....	66	Renkó József Bálint.....	114
Fazekas Bálint.....	67	Rigó Petra Renáta.....	115
Fazekas Máté.....	68	Rónai Levente.....	116
Fehér Krisztina.....	69	Sánta Botond.....	117
Fényes Dániel.....	70	Sárdi Dávid Lajos.....	118
Fleit Gábor.....	71	Sóvári Dénes.....	119
Gáspár Orsolya.....	72	Surman Vivien.....	120
Geier Norbert.....	73	Szabó András.....	121
Golcs Ádám.....	74	Szabó Szentjóni Hajnalka.....	122
Graics Bence.....	75	Szagri Dóra.....	123
Grivalszki Péter.....	76	Szemenyei Márton.....	124
Gyenes Zoltán Bálint.....	77	Szentpéteri Bálint.....	125
Haja Dávid.....	78	Szilágyi Mariann.....	126
Hajdu Ákos.....	79	Szlancsik Attila.....	127
Hegedűs Tamás.....	80	Szóke Tamás.....	128
Henyecz Réka.....	81	Szücs Botond.....	129
Hidegh Gyöngyvér.....	82	Táczai István.....	130
Hortay Olivér.....	83	Tamás Alexandra.....	131
Horváth Dániel.....	84	Török Tímea Nóra.....	132
Horváth Flóra Diána.....	85	Ureczki Ágnes.....	133
Hubay Csanád Árpád.....	86	Varga Laura.....	134
Huzsvár Tamás.....	87	Vermes Brúnó György.....	135
Iványi Tamás.....	88	Virág Ábris Dávid.....	136
Jáger Bence.....	89	Zwillinger-Tripolszky Anna.....	137
Keglevich András.....	90		
Kemény Alexandra.....	91		
Kemény Dávid Miklós.....	92		
Kiss Ádám.....	93		
Kocsis Mátyás.....	94		
Kovács Ádám.....	95		
Kőrösi Márton.....	96		
Kustán Réka.....	97		
Lelkes János.....	98		
Lencsés Anita.....	99		

Bolyai+ Felsőoktatási Fiatal Oktatói, Kutatói Ösztöndíj

Beke Dávid.....	139	Gyarmati Benjámín.....	164
Benkő Zoltán.....	140	Heszberger Zalan.....	165
Cseh Ágnes.....	141	Holczbauer Tamás.....	166
Dr. Baranya Sándor.....	142	Hullám Gábor István.....	167
Dr. Bergmann Gábor.....	143	Kállay-Menyhárd Alfréd.....	168
Dr. Botzheim János.....	144	Kormos Márton.....	169
Dr. Csizmadia Péter.....	145	Kossa Attila.....	170
Dr. Gell Gyöngyvér Mónika.....	146	Lángi Zsolt.....	171
Dr. Gyires-Tóth Bálint Pál.....	147	Luspay Tamás.....	172
Dr. Horváth Csaba.....	148	Mireiszné Dr. Kiss Nóra Zsuzsa.....	173
Dr. Józsa Viktor.....	149	Németh Balázs.....	174
Dr. Kiss Sándor.....	150	Németh Kornél.....	175
Dr. Kmetty Ákos.....	151	Oláh Judit.....	176
Dr. Krammer Olivér.....	152	Pajkossy Péter.....	177
Dr. Kupai József.....	153	Péni Tamás Gábor.....	178
Dr. Majorosné dr. Lublói Éva Eszter.....	154	Pozsgai Balázs Sándor.....	179
Dr. Molnár György.....	155	Ráth Balázs.....	180
Dr. Molnár Kolos.....	156	Rucz Péter.....	181
Dr. Nagy Péter.....	157	Szalay Szilárd.....	182
Dr. Sepsí Adél.....	158	Takarics Béla.....	183
Dr. Suplicz András.....	159	Tófalvy Tamás.....	184
Dr. Szabó Judit Eszter.....	160	Török Ádám.....	185
Dr. Tettamanti Tamás.....	161	Vasáros Zsolt.....	186
Dr. Tóth András József.....	162	Vizer Máté.....	187
Dr. Vrana Péter.....	163	Zimborás Zoltán.....	188

“Tehetséggel fel!” Felsőoktatást Megkezdő Kutatói Ösztöndíj

Al-Hag Johanna Iman.....	190	Miski Gergő.....	201
Csépányi István.....	191	Orosz Dávid.....	202
Demény Petra.....	192	Svastits Domonkos.....	203
Elek Péter.....	193	Szakál Vince Abosa.....	204
Fitos Bence.....	194	Titkó Simon.....	205
Horváth Réka Anna.....	195	Varga Szonja.....	206
Kis Dávid.....	196	Weber Márton.....	207
Kocsis Márton.....	197	Zsiros Boldizsár.....	208
Krisztián Gergő.....	198		
Mészáros Márton.....	199		
Mészáros Péter.....	200		

Felsőoktatási Alapképzés Hallgatói Kutatói Ösztöndíj

Bajczi Levente

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék*

Többszálú programok memóriamodell-alapú verifikációja

A biztonságkritikus rendszerek egyre nagyobb szerepet játszanak az életünkben, azonban elsősorban egymagos eszközöket használnak ilyen célra a többmagos környezetek komplexitása miatt. A többmagos rendszerek általában hatékonyabb, számítási teljesítményükhöz képest kisebb erőforrásigényű eszközök, ami miatt hasznos lenne a biztonságkritikus világban való elterjedésük. A kutatási időszakban az ehhez szükséges ellenőrzési technikák fejlesztésével foglalkozom, különös tekintettel a többmagos rendszerek memóriamodelljei által okozott komplexitás leküzdésére.

A modern, többmagos architektúrák olyan komplex memóriakonvizisztencia-modellekkel rendelkeznek, amik az intuitív, programozó-centrikus nézettel ellentmondó viselkedést tesznek lehetővé az architektúra szintjén. A többmagos rendszerek helyességének igazolásához így szükséges egy ezt a jelenséget is figyelembe vevő, specializált verifikációs megközelítés.

Az elmúlt néhány évben több olyan tudományos cikk is megjelent, ami a fent vázolt problémakörrel foglalkozik, azonban ezek vagy közelítő megoldásokat javasoltak, vagy a probléma egy adott kis részleteivel foglalkoztak. A tavalyi évben bemutatott TDK-dolgozatomban formalizáltam a problémafelvetést és megadtam egy lehetséges közelítő megoldást, ami a kari- és az országos TDK-n is első helyet ért el (intézményi szinten rektori különdíjjal) valamint az ebből írt tudományos publikáció bemutatásra került az EMSOFT konferencián. Ezen kutatási projekt keretein belül céloim a probléma általánosabb és pontosabb megoldása egy olyan verifikációs megoldás kifejlesztésével, amivel többmagos rendszereken futó programok helyessége ellenőrizhető, ezzel elősegítve a többmagos rendszerek biztonságos használatát kritikus környezetben.

A kutatási téma fontosságát ipari szereplők is megerősítették: a megbízható többszálú működés jelentős költségmegtakarítást tenne lehetővé olyan területeken, ahol egy drágább, egy processzormagon nagyobb teljesítményt nyújtó processzort olcsóbb, több gyengébb maggal rendelkező CPU-val lehetne felváltani. A kutatás várható eredményei a megbízhatóság biztosítása szempontjából kulcsfontosságúak lehetnek.

Hegedűs Noémi

*Építőmérnöki Kar
Vízépítési és Vizgazdálkodási Tanszék*

Kúthidraulikai vizsgálatok kisminta- és numerikus modellezéssel

A 2018 óta folyó szivárgás- és kúthidraulikai laboratóriumi kismintaméréseket végeztünk, melynél egy szivattyúzott kút körül kialakuló áramlási viszonyokat vizsgáltunk. Az előállított adathalmazt (453 mérés) három különböző átmérővel készült perforációval, de egyaránt 5 %-os áteresztőfelülettel rendelkező termelőkúttal végeztük.

A laborban lévő kismintamodell megfigyelőkútjaival regisztrált adatok alapján átlagos szivárgási tényezőket számítottunk, amiket idősorba rendezve kimutathatóvá vált a szivárgási tényező időbeli változása. A kúton belül és a kútpaláston kívül kialakuló vízszinteket piezométerekkel regisztráltuk, így meg tudtuk határozni a termelőkútba belépő víz által elszenvedett súrlódási veszteséget. Az értékek alapján jól kirajzolódott, hogy a kúttellenállás nagysága arányos volt az anyakút perforációjának átmérőjével.

A szivárgási tényező változása és a kútbeli szakadás megléte eltérnek a homogén, lamináris áramlással jellemezhető idealizációktól. Ez szükségessé tette a modellben kialakuló áramlási viszonyok beható elemzését, mely alapján arra következtettünk, hogy a modellterben $Re=10$ -ig és 3 cm/s -os belépési sebességig az áramlás a lamináris tartományba esik, ezen értékek felett már átmeneti, illetve turbulens áramlásról beszélhetünk.

Eredményeink alapján feltételezhető volt, hogy a kút környezetében kialakulhat nemlineáris áramlás, ezt numerikus modell segítségével ellenőriztük, melyhez a Processing MODFLOW NLFP modulját használtuk. Az NLFP a Processing MODFLOW-nak egy olyan bővítménye, ami a Forchheimer-egyenleten alapul, ennél fogva a nemlinearitás kimutatására alkalmas programcsomag. A kis vízhozammal végzett simulációknál nem lehetett kimutatni a nemlinearitás jelenlétét a mért adatsorok alapján, viszont nagyobb hozamérték esetén sikerült bizonyítani a nemlineáris áramlás kialakulásának lehetőségét kisminta-modelünkben.

Korábbi kutatásunk folytatásával több, a szakirodalmi előzmények alapján is elfogadható eredményeket tudtunk kimutatni a szivárgás- és kúthidraulika területein. A továbbiakban a mérések folytatásával és a numerikus modell fejlesztésével a kialakuló áramlási viszonyok még teljesebb megismerését érhetjük el.

Marosvölgyi Martin

*Építőmérnöki Kar
Építőanyagok és Magasépítés Tanszék*

Hagyományos és innovatív épületszerkezeti kialakítások összehasonlítása energetikai szempontból II - Hőhidak

Az épület hőhidveszteségeivel fontos foglalkozni, mivel az utóbbi évek tendenciája azt mutatja, hogy a vonalmenti hőveszteség és a felületi hőveszteség hányadosa emelkedőben van (jelenleg a transzmissziós hőveszteség kb. 30-40%-a hőhídon keresztül történik). Ennek egyik legfőbb oka a felületek megfelelő szigetelése, mellyel a felületi hőveszteség jelentősen csökken, de a hőhidveszteségek jelentősége megnő. A hőhidak ismerete az épület állagvédelme szempontjából is fontos, a kritikus pontok ismeretében a penészedés elkerülhető.

A hőhidhatást általában hőtechnikai modellezéssel vizsgálják, de egyre nagyobb teret hódít az épületszerkezetek vizsgálatában a kapcsolt hő- és nedvességtechnikai modellezés alkalmazása. Kutatási munkám során megvizsgáltam, mekkora mértékben térnek el az így kapott eredmények a pusztán hőtechnikai szimuláción alapuló modellek eredményeitől. Az átfogó kép eléréséhez számos jellemző szerkezeti kialakítást is modelleztem, több építőanyag felhasználásával. A modelleket a COMSOL Multiphysics szoftver segítségével futtattam le a MSZ EN ISO 10211:2017 szabvány szerint.

Egy-egy csomóponton mindkét módszer segítségével meghatároztam a belső felület legalacsonyabb hőmérsékletét, a saját léptékben mért hőmérsékletet, a szerkezeten keresztülhaladó átlagos hőáramsűrűséget, valamint a vonalmenti hőátbocsátási tényező értékét. Először falsarok kialakításokkal foglalkoztam, majd egy kiválasztott új építésű családi ház csomópontjait vizsgáltam. Teljes épület léptékben összehasonlítottam az épületenergetikai rendelet szerinti egyszerűsített hőhid korrekciós tényezőket, a csak hőtechnikai és a hő- és páratechnikai modellezés eredményeit.

Ezek az eredmények felhasználhatóak egy hőhidkatalógus fejlesztéséhez. Erre azért van nagy szükség, mivel jelenleg Magyarországon csak néhány gyártó specifikus hőhidkatalógusa létezik. A pontosabb épületenergetikai számításokhoz viszont fontos a hőhidak figyelembe vétele. A legtöbb szakember az MSZ EN ISO 14683:2017 szabványt használja, de ez a dokumentum nagyon hiányos, sok szerkezeti kialakítást nem tartalmaz.

Molnár Balázs

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Lipofil oldallánccal szubsztituált cinkona alapú organokatalizátorok szintézise, alkalmazása és visszanyerése

Napjainkban gazdaságossági és környezetvédelmi szempontból különösen indokolt a reakciókban alkalmazott katalizátorok visszanyerése. Az aszimmetrikus reakciók komponenseinek hatékony, mégis egyszerű elválasztására manapság egyre népszerűbb módszer a komponensek oldhatóságának megváltoztatása. Ez lipofil csoport bevitelével érhető el, ami történhet egyrészt különböző organokatalizátorok egységeire, másrészt a katalizált reakció egyik reaktánsára. Ennek köszönhetően a reakcióelegy komponensei között jelentős különbség lép fel a polaritásban, ami lehetővé teszi, hogy azok egy extrakciós vagy egy oldószercserét követő szűrési lépéssel egyszerűen elválaszthatóak legyenek egymástól.

Célul tűztem ki, hogy kidolgozzak egy általánosítható, lipofil oldallánc bevitelét megvalósító szintetikus módszert. A lipofilizált katalizátorokat ezután aszimmetrikus reakciókban lehetne alkalmazni, majd a reakcióelegyből visszanyerni. Az oldószercserén kívül a visszaforgatást a jövőben úgy is meg lehetne oldani, hogy a lipofil oldalláncot tartalmazó katalizátorokat előzőleg mágneses nanorészecskéhez rögzített ciklodextrinnel kötnénk meg, és így azok egy egyszerű mágnes segítségével kinyerhetőek lennének a reakcióelegyből.

A lipofil csoport bevitelére alkalmas szintetikus építőelem kialakításához metil-gallátból indultam ki, ennek fenolos hirdoxilcsoportjait oktadecileztem. Az így kapott lipofil oldalláncokkal ellátott termék észtercsoportját lúgosan hidrolizáltam, így jutottam egy három oktadecilcsoportot tartalmazó karbonsavszármazékhoz. A savnak egy olyan cinkona-négyzetamid organokatalizátor aminocsoportjához való rögzítésének lehetőségét vizsgáltam, mely hidrokinninből állítható elő, 6'-helyzetben aminoetiloxi-szubsztituált, és korábbi aszimmetrikus *Michael*-addíciós reakciókban jó termelést, valamint kitűnő enantioszerektivitást értünk el vele. Az amidkapcsolást a legjobb termelés elérése érdekében optimalizáltam. Ehhez a karbonsavat savkloriddá alakítottam, és így reagáltattam a megfelelő aminnal. Emellett a szabad karbonsavat és az amint különböző kapcsolószerek jelenlétében is reagáltattam. A kapott lipofil oldalláncokkal ellátott cinkona-négyzetamid származékot különböző aszimmetrikus konjugált addíciós reakciókban tervezzük alkalmazni.

Papp Ádám

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Pénzügyek Tanszék*

Hatékony részvényportfóliók összeállítása a kockázat és az osztalékfizetés fényében, különös tekintettel a kriptovalutákra, mint potenciális befektetési lehetőségekre

A kockázatnak két fajtáját különböztetjük meg, a piaci és az egyedi kockázatot, az előbbi az, amit a befektetőnek fel kell vállalni, míg az egyedit diverzifikáció révén csökkenteni lehet. A diverzifikáció kapcsán az idők során többféle elmélet született arra nézve, hogy hány elemű is az ideális a portfólió, a legújabb eredmények alapján kialakult konszenzus szerint harminc fölötti elemszámú portfólió esetén az egyedi kockázatot már ki tudjuk küszöbölni. A hatékony portfóliót megalkotása után a befektetők tovább higit-hatják hitelviszonyt megtestesítő értékpapírokkal, aminek az a célja, hogy így olyan portfóliót kapjanak, mely adott szórás vagy elvárt hozam mellett hatékonyabb, mint a tisztán részvényekből álló.

A részvények kockázatosságának számszerűsítésére fejlesztették ki a Capital Asset Pricing Modellt, melynek különlegessége, hogy egy speciális, béta nevű változón keresztül viszonyítja egymáshoz a különböző részvényeket, s ez a béta arányszámként funkcionál, hogy megmutassa, a piaci portfólió változása hogyan hat az egyedére. A modell létrejötte óta számos kérdést vetett fel, az 1980-as években egyenesen az eltörlését szorgalmazták a befektetési szakértők, mert az akkori konjunkturális körülmények között nem tudta igazolni a valóságban történő tőkepiaci változásokat, ezen időszak elmúltával viszont újra szárnyra tudott kapni. Mivel kutatásomban a részvényeket elsődlegesen mint passzív jövedelemforrásokat vettem figyelembe, meg kell vizsgálni a különböző osztalékkifizetési modelleket is, hogy megérthessük a részvényesek motivációit, illetve a különböző tartási stratégiák közötti különbségeket. A hatékony portfólió összeállítása során éppen ezen fenti premisszából adódóan tizenöt – az online kérdőíves kockázatfelmérésem során ideálisnak tekinthető – S&P 500 és Dow Jones index vállalkozásból állítható össze a Markowitz-féle optimalizált portfólió. Maga az eljárás – a matematikai nehézségeket kiküszöbölendő – a Newton–Raphson módszeren alapul, amelynek lényege, hogy iterációs technikával adja meg a keresett portfóliót.

A 21. század talán legnagyobb pénzügyi kihívásaként tekinthetünk a kriptovalutákra, így dolgozatom sem mehetett el ezen instrumentumok mellett szó nélkül. Online kérdőíves felmérésemre támaszkodva vizsgáltam, hogy az általános befektetési hajlandóságot figyelembe véve szóba jöhetnek-e mint a portfólió lehetséges elemei, illetve a hazai közgazdasági és jogi környezet mennyiben tenné ezt lehetővé. A felmérésem konklúziója végül az lett, hogy a kriptovaluták ugyan hatalmas potenciált jelentenek, jelenleg azonban nem reális még rájuk a portfólió részeként tekinteni.

Papp Marcell

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*

Átmenetifém-ligandumok mechanizmus alapú racionális tervezése

A világ egyik legfontosabb mesterségesen gyártott ipari alapanyaga az ammónia, amelyből évente több mint 140 millió tonnát állítanak elő a több mint 100 éve kifejlesztett Haber–Bosch-folyamattal. A szintézist 400-500°C-on, 150-200 atmoszféra nyomáson végzik, ami a gyártást rendkívül energiaintenzív és költségessé teszi. Számos kutatócsoport állított elő olyan, a nitrogénáz enzim aktív centrumát utánzó, úgynevezett biomimetikus átmenetifém-komplexeket, amelyek katalizálták a nitrogén ammóniává történő redukcióját, azonban a katalizátorok átviteli száma és szelektivitása rendkívül alacsony az ipari elvárásokhoz képest. Az előző kutatásaink során az EPPP (E=B, Si) skorpionát komplexek katalitikus ciklusának reakciómechanizmusát, a fő reakció kritikus lépéseit, illetve a lehetséges mellékreakciókat vizsgáltuk kvantumkémiai módszerekkel. Jelen kutatás célja, hogy az alacsony átviteli számokért és a rossz szelektivitásért felelős kritikus reakciókat felderítsük. Ezt követően lehetőségünk nyílik a kulcsfontosságú mellékreakciók mechanizmusa alapján racionálisan megtervezni a katalizátor központi fématomját, pillératomját és ligandumait. A tervezés során úgy módosítjuk a katalizátor szerkezetét, hogy az általunk kritikusnak vélt mellékreakciók szabadentalpia-gátja minél nagyobb, a fő reakcióé minél kisebb legyen, így feltételezhetően javítva a katalizátor szelektivitását és élettartamát. Pontos összefüggést keresünk a kritikus intermedierek egyszerűen számolható termodinamikai paramétereit (például hidricitás, protonaffinitás) és a kérdéses szabadentalpia-gátak között. A racionális tervezés által rendelkezésünkre áll számos potenciális katalizátor szerkezete, melyeket szintézisre javasolhatunk. Az így tervezett katalizátorok élettartama és szelektivitása megközelítheti az ipari katalizátoroktól elvárt hatékonyságot.

Rávai Bettina

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Szimmetrikus, izoindolin α -aminofoszfin-oxidok előállításának tanulmányozása mikrohullámú reaktorban

Kutatómunkám során célul tűztük ki különböző szimmetrikus izoindolinon-foszfin-oxidok környezetbarát előállítását a 2-formil-benzoészav, szimmetrikus szekunder foszfin-oxidok és primer aminok Kabachnik-Fields-reakciót követő gyűrűzárásával.

Az izoindolinon alapvázat tartalmazó vegyületek nagy jelentőséggel bírnak a gyógyszeriparban, megtalálhatók többek között vérnyomáscsökkentőkben, daganatellenes és rákellenes szerekben. Az izoindolinon-foszfin-oxidokról az irodalomban eddig csak néhány közleményben tettek említést, főként citotoxikus vegyületek intermediereként.

Munkám első lépésben a 2-formil-benzoészav, difenilfoszfin-oxid és butil-amin modellreakcióját tanulmányoztuk. A hőmérséklet, a reakcióidő és a molarányok változtatásával kerestük az optimális paramétereket. A homogenitás biztosítása érdekében a reakciókat kis mennyiségű acetonitrilben végeztük. Azt tapasztaltuk, hogy melegítés nélkül, már szobahőmérsékleten, rövid idő alatt teljes konverzió érhető el. Az optimalizálást követően a kondenzáció vizsgálatát további primer aminokra (ciklohexil-, benzil-aminra), aromás (bisz(*p*-tolil)-, bisz(3,5-dimetilfenil)foszfin-oxidra), valamint alifás szekunder foszfin-oxidokra (dibutil-, dibenzilfoszfin-oxidra) is kiterjesztettük.

Elmondható, hogy egy hatékony, új eljárást dolgoztunk ki izoindolinon-foszfin-oxidok szintézisére, mely során szobahőmérsékleten katalizátor nélkül egy lépés után jutottunk a kívánt származékokhoz. Oszlopkromatográfiás tisztítás után kiváló termeléssel izoláltunk 15 új, az irodalomban eddig nem ismert vegyületet, melyek szerkezetét ^{31}P , ^1H és ^{13}C NMR spektroszkópiával, valamint HRMS vizsgálatokkal igazoltuk.

Rendes Szilveszter Koppány

*Építőmérnöki Kar
Tartószerkezetek Mechanikája Tanszék*

Mozgó teher dinamikai hatása falazott szerkezetű hidak esetén

A téglá- és kőboltozatú hídszerkezetek Európa vasúti hálózatának szerves részét képezik, mi sem bizonyítja ezt jobban, minthogy mindmáig közel 200 000 falazott hídszerkezet van használatban, amely a teljes hídállomány 60%-át képezi. A szerkezetek életkora jellemzően meghaladja a 100 esztendő, míg élettartamuk alatt a forgalmi terhek drasztikusan növekedtek: a tengelyterhelések mellett a szerelvények haladási sebessége is jelentős mértékben emelkedett. A vasúti szerelvények, mint mozgó teher tekintetbe vétele komplex vizsgálatot igényel: (a) egyrészt az alkalmazott modellnek nemcsak a boltozat, hanem a felette elhelyezkedő háttöltés és pályalemez hatását is figyelembe kell venni, (b) másrészt a szerelvény különböző sebességgel történő haladó mozgásából ébredő hatások dinamikai vizsgálat alkalmazását követelik meg.

A kutatás során a hídszerkezetet diszkrét elemes szoftverrel modelleztük, melyben a boltozat elemei különálló diszkrét blokkokként jelennek meg, míg a feltöltés rugalmas-képlékeny modell segítségével került figyelembe vételre. A kutatás során a korábban elkészített és kísérleti eredmények alapján kalibrált, a boltozatot és feltöltést egyaránt tartalmazó modellek felhasználásával a mozgó teher okozta dinamikai hatások kerültek vizsgálatra. A vizsgálat célja egy rögzített hídgeometrián különböző sebességgel áthaladó teher dinamikai vizsgálata. A vizsgálatban összehasonlításra kerültek a különböző sebességgel haladó terhek által keltett dinamikus elmozdulások az azonos teherhez tartozó statikus elmozdulásokhoz viszonyítva. Meghatározásra került a vizsgált hídhoz tartozó kritikus sebesség, amely megmutatja, hogy a dinamikus hatás mekkora sebességnél a legmagasabb a vizsgált teherelrendezés esetén.

A haladási sebesség függvényében ábrázolva a dinamikus tényezőt jól látható, hogy a mozgó teher intenzitásának növelésével a kritikus sebesség (melyhez a legnagyobb dinamikus tényező tartozik) csökken. A csökkenés hátterében a szerkezet egyre inkább lágyuló viselkedése áll, mely összhangban van a nemlineáris rendszerek rezgéseire vonatkozó szakirodalom megállapításaival. Kimutattuk, hogy a háttöltés növelése kedvezően hat a dinamikus tényező értékére, mivel a háttöltésmagasság növelésével a boltozat feletti talajréteg hatékonyabban tudja szétoszlatni a járműterhet, ezáltal a boltozat teherelrendezése kedvezőbb. A dolgozat keretében UDEC környezetbe implementáltuk egyszabadságfokú jármű modell esetére a jármű-szerkezet interakció figyelembe vételére alkalmas eljárást, azonban az eredmények azt mutatták, hogy a kapcsolati erő változása realiztikus terhek és jármű sebességek mellett elhanyagolható.

Szekeres Dániel

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék*

Komplex sztochasztikus rendszerek hatékony analízise szimbolikus és tenzor alapú algoritmusok alkalmazásával

A biztonságkritikus komplex kiberfizikai rendszerek helytelen működése emberi életet veszélyeztet, vagy nagy mértékű üzleti kárt okozhat. Az ilyen rendszerek tervezésekor különösen fontos a funkcionális követelményeken túl a különböző extra-funkcionális követelményeket is szem előtt tartani, mint a biztonság, a megbízhatóság, vagy a rendelkezésre állás. Ezen követelmények alapvetően kvantitatívak, azaz különböző mérőszámokra határoznak meg elérendő célértékeket. Teljesülésük biztosításával már a rendszertervezés fázisában is foglalkozni kell, amikor még nem áll rendelkezésre a működő rendszer, csak annak modellje. A megbízhatósági és rendelkezésre állási metrikák meghatározásához a rendszer viselkedésére jellemző véletlenszerűséget tartalmazó, sztochasztikus modelleket használunk.

A munkámban egy elterjedt sztochasztikus modellezési formalizmust, a hibafákat vizsgálom. Ez a formalizmus a rendszerszintű hiba dekomponálásán alapul: az egyes elemi komponensek meghibásodásának egy logikai függvényével írja azt le. A modellből a szükséges megbízhatósági mutatók, mint az első meghibásodásig tartó várható időtartam számításához egy alacsonyabb szintű, matematikailag kezelhető analízis modellt kell származtatni. Az analízis modell elkészítésekor és elemzésekor felvetődő probléma az állapotterrobbanás: bár a magas szintű mérnöki modell még kezelhető méretű lehet, a hozzá tartozó analízis modell mérete ennek exponenciális függvénye. Így az elterjedt explicit elemzési módszerek csak korlátozottan skálázhatóak.

A probléma egy lehetséges megoldása, hogy az elemzés során megoldandó lineáris egyenletrendszer tenzorrepresentációs módszerek segítségével, tömör közelítő formában tároljuk, és a megoldást is ebben a formában keressük. Munkám során a Tensor Train (TT) formátumú reprezentáció alkalmazhatóságát vizsgáltam a hibafák elemzésére, melyet a szimbolikus modelellenőrzésben elterjedt döntési diagram állapotter reprezentáció segítségével állítok elő. A számítások elvégzéséhez több különböző iteratív algoritmus áll rendelkezésre TT formátumú egyenletrendszerek megoldására. Munkám során ezeket hasonlítom össze, valamint egészítem ki a hibafákból származó problémák megoldására.

Varnyú Dóra

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Irányítástechnika és Informatika Tanszék*

Volumetrikus szűrők alkalmazása GPU-alapú PET rekonstrukcióban

A pozitronemissziós tomográfia (PET) napjaink egy meghatározó orvosi képalkotó technológiája. A páciensbe a vizsgálat elején egy kis mennyiségű radioaktív nyomjelző anyagot fecskendeznek, amely a fokozott anyagcseréjű szövetekben, mint például az agyban, a szívizomzatban, vagy rosszindulatú tumorokban felhalmozódik, azok aktivitásával arányos mértékben. A képalkotás során a feladat az érzékelt sugárzás alapján a nyomjelző háromdimenziós térbeli eloszlásának rekonstruálása.

A PET képalkotás egyik legnagyobb kihívását a magas zajszint jelenti. A rossz jel-zaj viszony a vizsgálat idejére és az alkalmazható radioaktív dózusra vonatkozó korlátozások, valamint a berendezés limitált érzékenységének következtében lép fel.

Noha a maximum-likelihood optimalizációs eljárással a jelvesztést okozó tényezők modellezhetőek, a rekonstruált kép az iterációk előrehaladtával egyre zajosabbá válik, mivel a rekonstrukciós probléma alapvetően alulhatározott. A zaj erősödését regularizációs tag bevezetésével lehet szabályozni, azonban a megfelelő paraméterek meghatározása kihívást jelent, mivel ezek optimális értékei nagyban függenek a konkrét mérési adatoktól és a rekonstrukció egyéb tényezőitől.

Alternatív megoldásként a zajt szűréssel is lehet csökkenteni, melyet akár csak a rekonstrukció végén, illetve az iterációs sémába építve minden iterációban is végre lehet hajtani. Ez utóbbi eljárás a sziták módszereként ismert, célja pedig az optimalizáció eredményének az elfogadható megoldások halmazán belül tartása. A leggyakrabban alkalmazott szűrő az egyszerűségének köszönhetően a Gauss-szűrő. Ez azonban nemcsak a zajt, hanem az éleket, kontúrokat is elmossa, amivel fontos klinikai információk veszhetnek el. Jobb alternatívát nyújthatnak helyette az éltartó simító szűrők, mint például a bilaterális szűrő.

Kutatásom során egy gyors éltartó simító operátort, az irányított szűrőt vizsgáltam PET képek zajcsökkentésére, aminek segítségével a simításon felül lehetővé válik CT vagy MRI felvételtől származó anatómiai információk és korábbi rekonstrukciós eredmények felhasználása a szövethatárok éleinek kiemelésére.

A módszert összehasonlítottam a medián szűrővel, a Gauss-szűrővel és a bilaterális szűrővel a rekonstruált kép minősége, valamint a futásidő szempontjából.

Statikus rekonstrukciónál kétcsatornás irányítót használtam, amelynek az egyik csatornája a bemeneti kép feljavított változata, a másik csatornája pedig az anatómiai felvétel által irányított bemenet volt.

Dinamikus rekonstrukciónál háromcsatornás irányítót javasoltam, amelynek csatornáit az időkeretek csoportosításával, majd az egyes csoportokhoz tartozó aktivitásképek összeadásával kapjuk. A módszer előnye, hogy megtartja azt az információt, hogy az egyes szövetekben mikor volt tapasztalható az aktivitás. A javasolt irányítók alkalmazásával az irányított szűrő számottevően szebb és élesebb eredményt adott, mint a vizsgált alternatív szűrők.

Vitanov George*Gépészmérnöki Kar**Mechatronika, Optika és Gépészeti Informatika Tanszék*

Kéttengelyes rotációs mozgás lekövető rendszer tervezése és szabályozása konvencionális és gépi tanulási módszerekkel

Amennyiben egy nagy objektívvel ellátott kamerával szeretnénk egy dinamikus cél követését megvalósítani úgy a piacon található berendezéseknél komplexebb rendszerre van szükség. ÚNKP munkásságom célja egy kameraforgató rendszer dinamikájának modellezése és szabályozási stratégiájának megvalósítása számítógépes szimulációs környezetben. A számítógépes modell támogatást nyújthat kameraforgató rendszerek tervezéséhez, illetve, igények szerinti személyre szabásukhoz.

A kamera rotációs rendszer dinamikáját mind Newtoni, mind másodrendű Laplace egyenletek segítségével lett levezetve az anyagi pont modellre. A modell linearizálása után a mintavételi frekvencia által megengedett leggyorsabb PD szabályozás lett tervezve a rendszerhez. Mivel a rendszer linearizálása során elhanyagoltuk a rendszerben bizonyos tulajdonságait, így a nemlineáris rendszerre alkalmazott PD szabályozás nemlineáris hatások által lesz befolyásolva: mint a gravitáció okozta nyomaték, és a keresztkapcsolat a dinamikai egyenletek között (giroszkópikus hatások).

A nemlineáris hatások csökkentésére bevezetett megoldás a rendszer linearizálása feed-forward szabályozás és adaptív PD segítségével. A gravitációs nyomaték okozta beállási hiba ezzel a módszerrel kiküszöbölhető, azonban az egyéb nemlineáris hatásokat csak csökkenteni sikerült. A nemlineáris hatások nagysága arányos a megkívánt pozicionálási gyorsaság és a mintavételezési frekvencia hányadosával.

A merevtest modell dinamikája is levezetése után a szabályozási algoritmus hatékonyságának vizsgálatára egy szimulációs metódus készült, mely során különböző kezdő- és végső-pozícióba párokra volt vizsgálva a pozicionálás gyorsasága. A gyorsaság mérésére egy pozicionálási hibahatár volt megszabva, és a pozicionálási idő meghatározása kettőhatványos szeleteléssel történt.

A szimulációk eredményeként megállapítható volt, hogy a feed-forward szabályozással linearizált adaptív PD szabályozás teljesítménye felülmúlja a sima feed-forwardal kiejtett gravitációs hatás és fix PD szabályozás hatékonyságát a merevtest modell esetén is. Ezek után egy genetikus algoritmus alapú PD paraméter optimalizáló eljárás lett elkészítve a rendszerhez, mely a 4 dimenziós (2 tengelyre PD) paraméterterben kereste a legjobb paraméterkombinációkat. Mivel a rendszer linearizálása az alacsony mintavételi frekvencia miatt nem tökéletes, így a genetikus algoritmus segítségével gyors konvergenciával található olyan PD érték pár mely eltér a megtervezett PD értékektől, és mellyel a rendszer teljesítménye javítható.

Összegzésként bemutatásra került egy tervezési metódus kéttengelyes kameraforgató rendszerek teljesítményének optimalizálására, és egy gyakorlati példán keresztül bemutatásra került, hogy a rendszer teljesítményének javítása érdekében érdemes gépi tanulási módszerek alkalmazása a szimulációs fázisban.

Zsiros Ádám János

Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Közgazdaságtan Tanszék

Egy- és többkulcsos adórendszer hatásai a jövedelemegyenlőtlenségekre

A gazdasági növekedés napjainkban még mindig kiemelt jelentőséggel bír a fejlődő és a fejlett országokban egyaránt, a környezeti, társadalmi és egyéb felmerülő gondok megoldása is ebben rejtőzhet. A növekedési számvitel elmélet alapján az egy főre jutó GDP értékével kerül szemléltetésre. A növekedésben központi szerep jut az állami jövedelemdisztribúciónak, hiszen az állam adókon keresztül szabályozza a jövedelmek újraelosztását [1,2]. Ez akár a társadalomra vonatkoztatva egységesen (pl. egykulcsos adórendszer) vagy különböző kedvezményezett csoportok kijelölésével valósulhat meg, a klasszikusan kedvezményezett csoportok közé tartoznak a szegények [3].

A makrojövedelem (GDP) időbeli leírásához a Solow-modell [4] kerül felhasználásra, az azt meghatározó tényezők a tőke, munka és a technológiai fejlettség. Ezt lehetséges kiegészíteni az oktatásfejlesztéssel, ezen kívül a kormányzati adóztatással is, továbbá a modellbe való implementálásra kerülhet a humántőke is, így adódik a Mankiw–Romer–Weil-modell [5]. Ennek segítségével határozható meg a befektetett humántőke és a befektetett munka közti különbség, amely a társadalmi jövedelmi és vagyoni különbségeket modellezi. A további számítások alapját ezen modellek és ismeretek képezik, a modell alkalmazásai valós példán, valamint a számítások elvégzése segítségével kerülhet alkalmazásra a modell a való élet problémáira. Ezek alapján a munka célja egy modell készítése, amely megfelelően közelíti a valós jövedelemalakulásokat, ez alapján összehasonlíthatóvá válnak különböző jövedelemadózási rendszerek a jövedelemredisztribúció bevonásával. Az oktatásfejlesztés időfüggésének vizsgálatával, valamint irodalomkutatással megállapítható, hogy az oktatásba történő investálás nem azonnal eredményez jövedelemtermelést, hanem egy bizonyos idő elteltével, ez a matematikai modellben időkéssleltetés segítségével valósulhat meg.

Irodalom:

- [1] Kovács, I. (2010). *A hazai jövedelemeloszlás és jövedelemegyenlőtlenség mérése és elemzése személyi jövedelembevallási adatok alapján (Vol. 2010) (No. 9). MTA Közgazdaságtudományi Intézet – Műhelytanulmányok MT-DP.*
- [2] Whitta-Jacobsen, H. J., & Sorensen, P. B. (2005). *Introducing advanced macroeconomics. The McGraw–Hill Companies.*
- [3] Cowell, F. A. (2007). *Income distribution and inequality. The Elgar Companion To Social Economics, 3–11.*
- [4] Agénor, P.-R. (2004). *Growth and technological progress: The Solow–Swan model (Second ed., Vol. The Economics of Adjustment and Growth). Cambridge: Harvard University Press.*
- [5] Knowles, S., & Owen, P. D. (1995). *Health capital and cross-country variation in income per capita in the Mankiw–Romer–Weil model. Economics Letters, 1995 (48), 100.*

Felsőoktatási Mesterképzés Hallgatói Kutatói Ösztöndíj

Borsi Márton*Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék*

Integrálható modellek áramoperátorainak vizsgálata

Az egydimenziós kvantummechanikai modellek egy széles osztályára igaz, hogy sajátérték problémájuk közelítések nélkül, egzaktul megoldható, ezeket integrálható modelleknek nevezzük. Közös tulajdonságuk, hogy rendelkeznek a rendszer méretével arányos számú megmaradó mennyiséggel, melyek jelenléte alapvetően határozza meg a megvalósuló dinamikai folyamatokat.

Ezen folyamatok leírására egy viszonylag újszerű eszköz az Általánosított Hidrodinamika (Generalized Hydrodynamics, GHD), mely a klasszikushoz hasonló hidrodinamikai képpel dolgozik, amiben a rendszerben megjelenő, komplex rapiditásokkal jellemzett kvázirészecskék szállítják a töltéseket. A jelenlegi kutatásokban fontos feladat a megmaradó mennyiségekhez tartozó áramok, illetve azok várható értékeinek vizsgálata. Bár a terület már kísérleti eredményekkel is rendelkezik, maradtak elméleti hiányosságok: az alapjául szolgáló várható értékek közti összefüggés csupán sejtésként került megfogalmazásra.

Az általam vizsgált XXX spinláncmodellben sok más integrálható rendszerhez hasonlóan a Bethe-Ansatz módszerrel konstruálhatók meg az egzakt sajátállapotok. Véges térfogatban a kutatócsoportomnak sikerült megmutatni, hogy az áramoperátorok várható értékei, a klasszikussal analóg módon, a jelenlévő kvázirészecskék átlagos sebességeinek és a töltések várható értékeinek szorzataként, a részecskékre való összegzéssel állnak elő.

A GHD szempontjából az összefüggés termodinamikai limesze érdekes, ennek vizsgálata a kutatásom fő célja. Sikerült megmutatnom, hogy az áramok várható értékei kifejezhetők a stabil aszimptotikus állapotokkal, melyek spinhullámok kötött állapotaként jelennek meg a Bethe-Ansatzban. Ennek ismeretében előállítható az összefüggés termodinamikai limesze: a végesdimenziós mátrixtranszformáció egy integrálegyenletté alakul. Az egzakt levezetéssel kapott eredmény igazolja az elmélet alapját képező sejtést.

Csáky Richárd Krisztián

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszék*

Neurális háló alapú dialógus modellek

A dialógusrendszer (chatbot) egy olyan program, mely az emberhez hasonlóan képes természetes nyelven összefüggő párbeszédet folytatni a felhasználóval. A kutatás tárgya egy általános célú chatbot fejlesztése, melytől elvárás, hogy bármilyen témáról lehessen vele beszélgetést folytatni. E chatbotok felhasználása széleskörű, kezdve a szórakoztatóipartól a különféle feladatorientált dialógus interfészek természetesebbé tételéig. Ilyen szoftverekkel egyre több cég vált fel emberek által ellátott ügyfélszolgálati feladatokat, vagy hoz létre személyi asszisztenseket, mint az Apple Siri, illetve a Microsoft Cortana. A program célja egy általános célú neurális háló alapú chatbot továbbfejlesztése jelenlegi kutatásaink és további ötleteink alapján annak érdekében, hogy a dialógus rendszer minél természetesebb kommunikációra legyen képes. A nagy adathalmazokon való neurális háló alapú konverzációs ágensek tanításának paradigmája fontos kérdéseket vet fel, mint az adatminőség kihatása ezen chatbotokra, és hogy milyen evaluációs módszerekkel tudjuk hatékonyan felmérni a betanított modellek teljesítményét. Ez a pályamunka megpróbál pár kérdésre választ adni, a releváns háttér feltárásával és egy új dialógus adathalmaz bemutatásával.

Létrehozunk egy új, nagy, és jó minőségű adathalmazt neurális dialógus modellezésre, és bemutatjuk előnyeit jelenlegi adathalmazokhoz képest. A dialógusok a Gutenberg Projekt online könyveiből vannak kinyerve. Egy részletes adatelemzést mutatunk be, és validáljuk adathalmazunk minőségét transzfer tanulási kísérletek keretében. Amellett érvelünk, hogy a mi adatunkon előtanítva jobb eredményeket lehet elérni kisebb downstream adatokon. Továbbá, az adathalmazunkat felhasználva tovább validáljuk előzőleg bemutatott módszerünket dialógus adathalmazok szűrésére. Végül analizáljuk a jelenlegi evaluációs metrikákkal felvetődő potenciális problémákat, és hogy ezek hogyan befolyásolják az eredményeink helyességét.

Csizovszky Anna

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Környezetgazdaságtan Tanszék*

Fenntarthatóság és klímaadaptáció gyakorlati összefüggései

Napjaink egyik leginkább embert próbáló kihívása a globális felmelegedés. Az elmúlt száz évben a globális átlaghőmérséklet $0,74^{\circ}\text{C}$ -kal, míg a tengerszint 17 cm-rel emelkedett és a növekedés gyorsuló tendenciát mutat. Amennyiben az üvegházhatású gázok kibocsátása nem csökken drasztikusan, úgy a társadalmi-, gazdasági- és környezeti rendszereket jelentősen megváltoztató irreverzibilis hatásokkal kell számolnunk. A klímaváltozás és annak hatásai - melyek már most is megnyilvánulnak éghajlati szélsőségek, villámár- vizek, hóhullámok formájában – befolyásolják a fenntarthatóság felé történő átmenetet, a megváltozott körülményekhez pedig alkalmazkodnunk kell. Ezt felismerve kerül előtérbe napjainkban a fenntartható fejlődés fogalma és célrendszere mellett a klímaadaptáció, így a globális politikában kulcsfontosságúvá válnak a mitigációs (kibocsátás csökkentő) stratégiák mellet az adaptációs (alkalmazkodást elősegítő) intézkedések is. A szakpolitikai és tudományos relevancia ellenére a két fogalom viszonya, egymásra gyakorolt hatása különösen gyakorlati szinten nem tisztázott.

A világ népességének több mint fele város lakó, ami 2050-re várhatóan meghaladja a Föld népességének kétharmadát. A közlekedés, kereskedelem és információáramlás csomópontjai a városok, valamint a gazdasági tevékenység és az innováció egyre növekvő része itt koncentrálódik, akár csak a felmelegedést kiváltó okok és a megoldandó problémák jelentős része. Következésképp a fenntarthatóság előre mozdításának és a megváltozott éghajlati viszonyokhoz történő alkalmazkodásnak kritikus tényezői a városok. A mitigációs és adaptációs intézkedések integrálása, egymásra gyakorolt hatásaiknak megértése kulcsfontosságú a nem várt negatív kimenetek, kompromisszumok elkerülésében, csökkentésében és szinergiák, felnagyított pozitív hatások létrehozásában. Azonban míg a városok dinamikusak, a beavatkozásokat tervezési, technológiai, megvalósítási döntésekből eredő kényszerpályák, valamint társadalmi normákból szokásokból, intézményi struktúrából fakadó tehetetlenségek korlátozzák. Amint az infrastruktúra, az alacsony sűrűségű városi forma, az intézményi és társadalmi gyakorlatokat megszokottá, elfogadottá váltak, akkor tartósak és nehezen változtathatók meg, az így létrejött berögződések („lock-in”) pedig a fenntarthatóság és alkalmazkodó képesség ellen hathatnak.

Rákosmente beavatkozásait ezeknek a szinergiáknak, kompromisszumoknak és berögződéseknek tükrében vizsgálva keresem a választ a fenntarthatóság és klímaadaptáció viszonyára, gyakorlati összefüggéseire.

Dargó Gyula

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Királis tionégyzetamid organokatalizátorok alkalmazásának lehetőségei enantioszelektív reakciókban

A gyógyszeriparban a hatóanyagok térbeli szerkezetének kiemelten fontos szerepe van, hiszen sok esetben az ellentétes konfigurációval rendelkező hatóanyagok más-más biológiai választ idéznek elő az élő szervezetben. Ebből kifolyólag mind gazdasági, mind környezetvédelmi tekintetből érdemes enantioszelektív szintéziseket alkalmazni, amelyek során csak a hatást kiváltó antipódot állítjuk elő nagy feleslegben. Kutatómunkám során célom volt, királis (tio)négyzetamid organokatalizátorok előállítása és alkalmazása aszimmetrikus reakciókban. *Rawal és munkatársai* elsőként alkalmazták az aromás karakterrel rendelkező, kétszeres hidrogénkötés donor típusú (tio)négyzetamid egységeket. Azt találták, hogyha a karbonilcsoportokat tiokarbonil csoportokra cserélik, a katalizátor savas karaktere növekszik és ez által jobb hidrogénkötés donorként viselkedhet.

ÚNKP pályázatom során célom volt olyan tionégyzetamidok előállítása, amelyekben a királis egység a természetben előforduló L-prolinból, vagy a kininből alakíthatók ki. Kiindulási pontként előállítottam a négyzetsav dimetil-észteréből a megfelelő királis négyzetamid organokatalizátorokat, és a kapott négyzetamidokat korábban a kutatócsoportunk által publikált módon foszfor-pentaszulfid piridin komplexével tionáltam. A tionálások során azt figyeltem meg, hogyha a királis egység mellett egy elektronszívó [pl. 3,5-bisz(trifluormetil)fenil] szubsztituenst tartalmaz a négyzetamid egység, akkor a reakcióban ditionégyzetamid nem, csak a monotio melléktermék keletkezik. A ditionégyzetamid előállítása céljából ezért egy kerülő útvonalat alkalmaztam, amely során előállítottam a ditionégyzetsav diciklopentil-észterét. A diciklopentil-észtert a megfelelő aminokkal reagáltatva előállíthatók az elektronszívó szubsztituenst is tartalmazó ditionégyzetamid organokatalizátorok.

Az előállított organokatalizátorokat aszimmetrikus, C–C kapcsolási reakcióban vizsgáltam. A *Michael*-addíciók során a megfelelő terméket jó termelés, és enantiomerfelesleg mellett kaptam ($\leq 78\%$ termelés, $\leq 75\%$ ee).

További célom a prolin alapú négyzetamid, illetve tionégyzetamid organokatalizátorok aktivitásának összehasonlítása enaminn katalizált *Diels–Alder*-reakcióban, amelynek kivitelezése még folyamatban van.

Fersch Dávid László

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Egy dinamikus rezolválási eljárás alkalmazása optikailag aktív amino-foszfóniumsók előállítására

Az optikailag aktív foszforvegyületek előállításának jelentőségét adja, hogy felhasználhatók enantioszelektív homogén katalitikus reakciókban, valamint organokatalízisben.¹ Kutatócsoportunkban *P*-szterogén centrumot tartalmazó vegyületek előállításával már évek óta foglalkoznak.² A foszforvegyületek körében is egyre inkább terjednek a dinamikus rezolválási eljárások, amelyekkel a racém vegyület teljes mennyisége a kívánt enantiomerré alakítható.³

A kutatómunkám keretein belül egy olyan dinamikus rezolválási eljárás kidolgozását terveztük, ami amino-foszfóniumsó diasztereomerek előállításán alapul. Eljárásunk során a racém foszfin-oxidból a megfelelő halogénezőszerezellel állítottunk elő halo-foszfóniumsót, amelynek enantiomerjei a reakció körülményei között egymásba alakulnak át, ami egy dinamikus rezolválási eljáráshoz elengedhetetlen. Ezt követően, a halo-foszfóniumsót királis aminnal reagáltatva a megfelelő amino-foszfóniumsóhoz jutottunk egy diasztereoszelektív reakcióban.

Munkánk első lépéseként a kutatócsoport által kidolgozott módszerrel, valamint irodalmi analógiák alapján előállítottuk a rezolváláshoz használt foszfin-oxidokat racém formában. Ezt követően egy modellreakción kidolgoztuk a rezolválási eljárás optimális reakciókörülményeit. Következő lépésben a nyers termék stabilitását és feldolgozási lehetőségeit vizsgáltuk. Munkánk részeként az optimális körülmények között több foszfin-oxidból kiindulva is megvalósítottuk a megfelelő amino-foszfóniumsók szintézisét, valamint számos királis amin alkalmazhatóságát is vizsgáltuk. A továbbiakban tervezzük teljes feldolgozási és tisztítási eljárás kidolgozását. Emellett terveink között szerepel az amino-foszfóniumsó diasztereomerek sztereospecifikus átalakítási lehetőségeinek vizsgálata más optikailag aktív foszforvegyületekké.

Referenciák:

¹ Quin, L. D. *A Guide to Organophosphorus Chemistry*; John Wiley & Sons: New York, **2000**.

² Bagi, P.; Ujj, V.; Czugler, M.; Fogassy, E.; Keglevich G. *Dalton Trans.*, **2016**, *45*, 1823.

³ Nikitin, K.; Rajendran, K. V.; Müller-Bunz, H.; Gilheany, D. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2014**, *53*, 1906.

Gulyás Eszter

*Építészmérnöki Kar
Ipari és Mezőgazdasági Épülettervezési Tanszék*

Az esztétikai nevelés kérdései a művészeti felsőoktatásban

A kutatás témája a formálódó ízlés, a szépségről alkotott képünk változása a művészeti oktatás tükrében. A témán belül a vizsgálatok az építész felsőoktatásban tanulóakra fókuszálnak és a hallgatók vizuális preferenciáit mérik az egyetemen töltött évek függvényében. A kutatás célja, hogy reagáljon az építész ízlés és a közízlés napjainkban egyre jobban elmélyülő kontrasztjára: hol válik szét a szakma és a „társadalom”, mi az, amiben különbözik az ízlésünk és mi az, amit képzettségtől függetlenül mindenki szépnek tart. A vizsgálatok az alapvető vizuális preferenciák változásait tárják fel síkbeli ábrák esetében: változik-e a hallgatók ízlése az oktatás hatására, vannak-e megfigyelhető mintázatok a változásokban, mennyire és milyen irányban befolyásolja az oktatás a „tetszést”.

A kutatás első fázisaként egy olyan mérési módszert és ábraanyagot dolgoztam ki, mely az alapvető vizuális preferenciákat síkbeli ábrákra képezi le. Az elvégzett vizsgálatok során a hallgatók ábrapárok közül választottak aszerint, hogy melyiket tartják szebbnek. A vizsgálatokat összesen hét hazai, építészeket képző felsőoktatási intézményben végeztem el és az eredményeket más, nem művészeti képzésben részt vevő hallgatók eredményeivel hasonlítottam össze. A kutatás a feltárt eredményeket követően a kapott válaszok összefüggéseire koncentrált: mely vizuális karakterizációk függhetnek össze az oktatással, hol húzódik az ösztönös és a tudatos preferencia határa. A kapott eredmények azt mutatják, hogy a felsőoktatás során bekövetkező ízlésváltozás hatalmas mértékben van jelen az építészhallgatók esetében, míg a vizsgált, nem művészeti képzésben részt vevő hallgatóknál lényegi változás nem következik be. A preferenciák változásának tárgya és iránya sok esetben homogén, így a kutatás további fázisai ezek elemzésére és az okok feltárására irányulnak.

Hertner-Horváth Anna

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

A politejsav modulusának becslése kristályszerkezeti tényezők alapján

A kutatómunkám célja a csoportunkban kidolgozott, modulus számítására alkalmas modellegyenlet továbbfejlesztése és validálása volt politejsav (PLA) esetére.

A szemikristályos polimerek modulusát a kristályosság mértéke és a lamellák vastagsága határozza meg. A Young-modulus és a kristályos szerkezet (kristályosság, lamellavastagság) között csoportunk egy empirikus összefüggést feltételez, melyben a következő paraméterek szerepelnek:

E_a és E_c a teljesen amorf és a teljesen kristályos polimer Young-modulusa (GPa). X a kristályossági fok (-), T_m az átlagos olvadási hőmérséklet, mely az átlagos lamellavastagsággal áll kapcsolatban (K), T_m^0 az egyensúlyi (termodinamikai) olvadáspont (K). Továbbá α , β és γ iteratív konstansok (-). E_c és E_a értékét az irodalomból nem ismerjük, ezáltal a kutatómunka során ezen paraméterek meghatározását is célul tűztük ki. Az α , β és γ konstansok PLA-ra még ismeretlenek.

A modell segítségével egyetlen differenciális pásztázó kalorimetria (DSC) görbe felvételével, a polimer kristályszerkezeti tényezői alapján megbecsülhető a polimerből fröccsöntött termék húzó rugalmassági modulusa.

A kísérleti munkám során fröccsöntött PLA próbatesteket készítettem, melyek kristályos szerkezetét DSC és szélesszögű röntgenszórás (WAXS) mérésekkel vizsgáltam. A minták egy részét hőkezelésnek vettem alá, melynek célja, hogy a minták kristályossági fok értékei minél szélesebb tartományban legyenek, így az egyenlet is szélesebb kristályossági fok tartományban lesz megbízhatóan alkalmazható. A minták modulus értékeihez szakítóvizsgálat eredményeképpen jutottam. A teljesen kristályos (orientáció mentes) PLA modulusának (E_c) meghatározásához az ultrahang longitudinális terjedési sebességén alapuló méréseket végeztem. A kísérleti eredményeim segítségével végeztem el a modellegyenlet validálását PLA esetére. Munkám során meghatároztam az egyenlet alkalmazásához szükséges anyagra jellemző konstansokat: E_a , E_c . Az egyensúlyi olvadáspontra (T_m^0) irodalmi értéket használtam. Az egyenlet alkalmazhatóságának ellenőrzésére másik típusú PLA granulátumból fröccsöntött mintákat készítettem, melyek ugyanolyan hőkezelési lépésen estek át, mint az egyenlet illesztéséhez felhasznált minták. Ezeket a mintákat is DSC, WAXS méréseknek és szakítóvizsgálatnak vettem alá. Az ezekkel a mintákkal mért Young-modulus értékeket összevettem az egyenlettel becsülhető modulus értékekkel, és megfelelő egyezést találtam. E_a , E_c , T_m^0 értékek és α , β , γ konstansok ismeretében az egyenlet megfelelően alkalmazható a gyakorlat szempontjából fontos kristályossági fok tartományban a modulus becslésére.

Horváth András Máté

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Anyagmozgatási és Logisztikai Rendszerek Tanszék*

Mobil Automatikus Targoncairányító Rendszer (MATiR) koncepció végleges kidolgozása, és a vezérlő rendszer megtervezése

A dokumentum, a Mobil Automatikus Targoncairányító Rendszer azaz a MATiR koncepció egy korábbi OTDK konferencián publikált dolgozat folytatása, a rendszer végleges kidolgozásával, és a vezérlés megtervezésével. A MATiR lényegében egy embert helyettesítő mechatronikus berendezés, mely már a KKV-k számára is megfizethető targonca automatizálási lehetőséget nyújt. A rendszer egyik fontos pontja és innovációja, hogy rövid idő alatt fel- és leszerelhető a targoncáról, így a gép használható automatizált, valamint manuális üzemben is. A másik fontos innovációja, hogy az automatizálás a kezelőszervek mozgatásával történik, így a targonca belső rendszerét nem kell megbontani, tehát az alapgép a garanciáját megőrzi. A költségeket jelentősen csökkenti, hogy akár használt gépek is átalakíthatók önjárótargoncává (AGV) a MATiR használatával. A MATiR az alkalmazott megoldásokkal, egy a gyártótól rendelt AGV-nek a harmadába kerül. A rendszer fejlesztése két fő pilléren alapszik: mechanikus és szoftveres.

A mechanikai fejlesztés három részre különíthető el:

- | | |
|--|---|
| <p>1. Kezelőszerveket mozgó berendezés fejlesztése:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Új joystick mozgó mechanizmus készítése. 2. Új joystick megfogó egység tervezése. <p>2. Emberi hibák fokozottabb figyelembevétele:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Rögzítési mód áttervezése. 2. Egy csatlakozáspontú váz. 3. A szerkezet stabilitásának fejlesztése. | <p>3. Rögzítés újra tervezése:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Komplex alkatrészek cseréje. 2. Additív technológiával készült tartóelemek, és véges elem analízisük. |
|--|---|

A szoftveres oldal is több részre osztható. A vezérlő program C++ nyelven, objektum orientáltan készült, különös figyelmet fordítva a(z):

1. Kommunikációra a PLC, a PC, és a perifériák között.
2. Szálkezelésre így, hiba esetén a kulcsfontosságú részek tovább működnek.
3. AGV irányítására, melyet egy egyedi készítésű CSV fájl szolgál.
4. Navigációra, mely szenzorfüzión alapul: egy 2D lidar és egy neuronhálón keresztül tanított képfeldolgozó egység együttesén.
5. Útvonal betanítására.
6. Kisegítő lehetőségekre, pl.: távoli irányításra.

A jelen kutatás nagy tudás és erőforrás igényű, mint pl.: CAD, VEM, C++, Python, neuronháló, képfelismerés stb., így több esetben a verifikáció és a validáció későbbi vizsgálatok tárgyát képezik. A kutatás során a MATiR koncepcióját a kivitelezhetőség közelébe fejlesztettem, mely új szabvány és termékcsoport alapját képezheti, mely nem csupán nagyvállalatok, hanem a KKV-k számára is elérhető.

Horváth Hanna Zsófia

*Gépészmérnöki Kar
Műszaki Mechanikai Tanszék*

Vontatmányok nem-sima mechanikai modelljei

A kutatásom során a kétkerekű vontatmányok kígyózó, pattogó mozgását vizsgáltam analitikus, numerikus és kísérleti módszerekkel. Mint köztudott, gyakran előfordul, hogy rosszul megválasztott rakomány-elhelyezés és sebesség mellett egy pótkocsi, félpótkocsi kígyózó, majd pattogó mozgásba kezd. Ennek érdekében, hogy ezt a veszélyes mozgást elkerüljük, rendkívül fontos a jelenség megfelelő modellezése és elemzése, hiszen egy jól terhelt és megfelelő sebességtartományban vontatott pótkocsival elkerülhetőek egyes közúti balesetek. A téma jelentőségét mutatja, hogy neves folyóiratokban gyakran kutatott terület.

Korábbi munkáimat folytatva, külön hangsúlyt fektettem a jelenség nemlineáris vizsgálatára. Ehhez analitikusan, illetve bifurkáció-követő szoftverek használatával végeztem el a modell bifurkáció-analízisét. Az eredmények azt mutatják, hogy az irodalomban található, síkbeli modellek esetén megfigyelt szubkritikus Hopf bifurkáció helyett szuperkritikus bifurkációt figyelhetünk meg kis vontatási sebességek esetén. A mérnöki szempontból veszélyesebb szubkritikus bifurkációt (mikor egy instabil periodikus pálya létezik együtt a stabil egyenes vonalú mozgással) csak szélsőséges körülmények (magasra helyezett tömegközéppont, nagy vontatási sebesség) mellett figyelhetjük meg. A bifurkáció-követő szoftverrel végzett vizsgálatokat szemi-analitikus módszerrel, a központi sokaság redukció módszerének alkalmazásával ellenőriztem. A numerikusan kapott eredményeket két paraméterkombinációra validáltam.

A szemi-analitikus és numerikus bifurkáció-analízis eredményeit numerikus szimulációk segítségével is ellenőriztem. Különböző kezdeti feltételek és paraméterértékek mellett futtattam szimulációkat. Elmondható, hogy a bifurkáció-analízis eredményei teljes mértékben megegyeznek a numerikus szimuláció eredményeivel.

Az elméleti eredmények validálásához laboratóriumi kísérleteket végeztem. Ehhez a vontatmány mechanikai modelljének megfelelő kísérleti berendezéshez megterveztem a felfüggesztés egyes elemeit (lengőkarokat, csatlakozó tagokat, tengelycsonkot), majd a megtervezett alkatrészek 3D nyomtatással kerültek legyártásra. A berendezésen kezdetleges méréseket végeztem, vizsgáltam egyes paraméterek hatását a kialakult mozgás amplitúdójára. A mérések alapján elmondható, hogy a stabilitási határok és kialakult amplitúdó nagysága nagyban függ a tömegközéppont elhelyezkedésétől.

Juhos Attila

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék*

Neurális hálózatok fizikai szimulációk tanulására

A napjainkban használt Röntgen-sugárzás alapú, orvosi céllal alkalmazott 3D képalkotó berendezések nagy hányada a területen jól ismert Szűrt Visszavetítés - FBP (Filtered Backprojection) - algoritmus segítségével rekonstruálja a mérések során megismert vetítésekből a térfogat csillapítási tényező-mezőjét. A legkülönbözőbb felvételi geometriák megválasztása esetén is nagy pontossággal - elméleti szinten (ideális körülmények között) akár tökéletesen - megvalósítható rekonstrukciós eljárás azonban nagymennyiségű sugárzásnak teszi ki a páciens testét. A sugárdózis redukciója kettős motivációval is rendelkezik: egyrészt, értelemszerűen csökkenteni szeretnék az élettani kockázatokat, másrészt nem elhanyagolható a berendezések amortizációja sem (pl. anód tárcsa kopása). A dózis redukciója lehetséges a projekciók számának csökkentésével. Ennek hatására azonban a szokásos, foton-elektronkölcsonhatásból származó inherens zajok mellett, leginkább a geometriai elrendezéstől függő rekonstrukciós artifaktok jelennek meg a visszaszámított csillapítási tényező-mezőben. Sejtésünk értelmében ugyanakkor a kapott képekre rátevődő rekonstrukciós zaj egy geometriafüggő valószínűségi eloszlásból származik, ennél fogva visszaszámítható lehet. Munkánk során tanulmányozzuk a klasszikus, compressed sensing alapú eljárásokat, illetve a konvolúciós neurális hálózatokra alapuló módszereket. Előbbiek azt a célt fogalmazzák meg, hogy alkalmasan válasszanak egy reprezentáció bázist, melyben kevés mérés elvégzésével is közel tökéletesen rekonstrukciót lehessen végrehajtani. Utóbbiak pedig alkalmasak arra, hogy egy jól meghatározott zajeloszlást megtanuljanak és egy regressziót állítsanak fel a bemeneti, rossz minőségű kép és a jó minőségű kimenet között.

Krammer Réka Melinda

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Új biomimetikus katalizátor család kifejlesztése gyógyszermetabolitok szintézisére

A gyógyszerkutatás során kiemelkedő jelentőségű a potenciális hatóanyagok metabolizmushoz kapcsolódó folyamatainak vizsgálata, hiszen azok nagymértékben befolyásolják a farmakológiai hatást, toxicitást. Hagyományosan a preklinikai metabolit vizsgálatokat *in vitro* májsejteken végzik, ahol a metabolitok alacsony koncentrációban, összetett biológiai mátrix mellett keletkeznek, amelyek zavarják az adott metabolit azonosítását, izolálását. Ezek kiküszöbölésére jelenthetnek megoldást az *in vitro* biomimetikus (élő szervezet folyamatait utánzó) módszerek. A szervezet egyik fő, gyógyszermetabolizmusért felelős enzimszere a citokróm P450 izoenzim család, melynek biokatalitikus működését szintetikus metalloporfirinek segítségével is helyettesíthetjük.

Kutatómunkánk célja egy jól szabályozható, robusztus metalloporfirin alapú katalizátorrendszer kifejlesztése volt, amely során a katalitikus aktivitással bíró vas-porfirint felületmódosított szilika, illetve szilikabevonattal rendelkező mágneses részecskékhez történő kapcsolással kívántuk stabilizálni. Kísérleteink során a hordozórendszer kialakításához mezopórusos szilika részecskék felületmódosítását hajtottuk végre 3-aminopropil-trimetoxiszilán, *N*-(2-aminoetil)-3-aminopropil-trimetoxiszilán és *N*¹-[3-(trimetoxiszilil)propil]-dietilén-triamin ágensekkel. A kialakított felületi linkerek eltérő hosszúságú és mozgékonyágú ionos kötőhelyeket biztosítottak a vízoldható *mezo*-tetra(4-szulfoniloxifenil)vasporfirin (FeTSPP) számára, amelyek várhatóan befolyásolják a rendszer katalitikus működését, hiszen a csoportok eltérő térkitöltése, hidrofóbitása, felületi sűrűsége mind befolyással lehet az adott katalizátor rendszer aktivitására. Az oldott fázisú porfirin, illetve a rögzített katalizátor családok hatékonyságát *kelorokvin* maláriaellenes szer biomimetikus oxidációjában vizsgáltuk szakaszos és folyamatos üzemben. A mágneses részecskékhez kapcsolt FeTSPP porfirin segítségével az *amiodaron* antiaritmiás szer biomimetikus átalakítását hajtottuk végre szakaszos és folyamatos üzemi mikrofluidikai chip-reaktorban. A keletkezett metabolitokat HPLC-DAD-MS technikával elemeztük és összevetettük a humán szervezetben keletkező bomlástermékekkel.

Összességében elmondható, hogy az *in vivo* FDA által elfogadott máj mikroszómális vizsgálatok alapján az FeTSPP minden esetben képes volt a humán major metabolitok előállítására és egyéb minor metabolitok szintézisére is mindkét vizsgált hatóanyag esetében. A porfirin immobilizációs kísérletei során kimutattuk, hogy a hordozó felületére bevitt linker hossza és flexibilitása szignifikáns hatással bír a porfirin biokatalitikus működésére. A szakaszos, rögzített porfirines rendszerek magas specifikus aktivitást mutattak, így alkalmasak lehetnek a metabolitok gyors és egyszerű azonosítására és előállítására, amely az új gyógyszerjelöltek feltérképezése során nagy jelentőséggel bírhat.

Laczka Áron*Építészmérnöki Kar
Középülettervezési Tanszék***Közterek, emlékezet, identitás. Az erdélyi nagyvárosok köztereinek identitás-
meghatározó szerepe a XX. század és napjaink változásainak tükrében**

Az erdélyi városok építészeti fejlődése az első világháborút követően számos, az emlékezetpolitikát hűen tükröző változáson ment keresztül. A trianoni békeszerződés, a második világháborút követő új politikai rendszer, vagy a változó korszakok építészeti beavatkozásai nagymértékben megváltoztatták a városok folytonosságon alapuló organikus fejlődését. Kiváltképp kitapinthatók eme változások és azok rétegzettsége, ha a köztereket vizsgáljuk. Az eltűnt vagy áthelyezett köztéri alkotások, a terek funkcionális átalakulásai, napjaink városfejlesztésének és térhasználatának új megközelítései vagy a kortárs építészeti beavatkozások mind olyan változások, melyek meghatározzák egy publikus városi tér és környezetének identitást kifejező kapcsolatát.

Ezek a változások számos erdélyi városban, így Temesvár, Szatmárnémeti vagy Kolozsvár példáján keresztül is megfigyelhetők, melyeknek építészeti karaktereit meghatározó közterek komplexitásukból, kulturális értékeikből és a hozzájuk köthető kollektív emlékezetből eredendően jelentősnek, és bizonyos értelemben a régióra jellemzőnek, tipikusnak mondhatók.

Napjainkban ezeknek a köztéri rétegeknek a felidézése és életben tartása, a kortárs városfejlesztésbe történő integrálása, a helyi közösséggel való megismertetése egy olyan építészeti szemléletet kíván, mely az innovatív és korszerű megoldások mellett egyaránt fontosnak tartja az adott hely múltjából fakadó építészeti identitás rétegzettségének megőrzését és gondozását.

Kutatásomat Kolozsvár nemrég és a közeljövőben tervezetten megújuló történeti hagyományú köztereire koncentrálok. Arra törekszem, hogy egyfajta „nagyítóként” használva egyes kolozsvári közterek átalakulásának mélyebb megismerését, az abból nyert tapasztalattal, mint vizsgálati módszerrel, más erdélyi közterekre is tipikusnak mondható változásokat tegyek érthetővé és értékelhetővé.

Az olyan kortárs építészeti beavatkozások, mint a kolozsvári Fő tér felújítása, a Farkas utca átalakítása vagy a Fellegvár területére tervezett beavatkozások koncepciója aktuálissá teszi a kérdést, hogy építészeti eszközökkel hogyan hozhatunk létre olyan fejlesztéseket, melyek napjaink sokszor semleges megoldásai helyett kifejezik a hely értékeinek rétegzettségét és gazdagítják a város és közösségének identitását.

Lukáts Gergely Dániel

*Természettudományi Kar
Sztochasztika Tanszék*

Az Oktatás Hallgatói Véleményezése és a jegyinfláció összefüggése, oktatási adatbányászat

A kilencvenes évek óta az Oktatói Munka Hallgatói Véleményezése (OMHV) egy népszerű eszközzé vált, amelyet az egyetemek túlnyomó többsége használ világszerte, hogy felmérjék az oktatóinak teljesítményeit, és hogy visszajelzést kapjanak a diákoktól a követelményrendszerrel és a tananyaggal kapcsolatban. Az egyetemek gyakran használják az OMHV eredményeket előléptetések és pénzügyi juttatások meghatározására, így napjainkban egyre fontosabb kérdés az OMHV megbízhatósága. Mivel az oktatók ösztönözve vannak, hogy jobb értékeléseket érjenek el, így felmerül a gyanú, hogy esetleg mepróbálják „megvásárolni” a hallgatókat, engedékeny osztályozással, ami jegyinflációhoz vezethet.

Az OHV és jegyinfláció kapcsolatának felderítése népszerű kutatási területté vált, és számos tanulmány kimutatta, hogy erős pozitív korreláció van a kiosztott jegyek és a kapott OHV értékelések között. Ennek ellenére nehezen állapítható meg, hogy a jobb jegyek engedékeny osztályozás miatt születtek-e, hiszen egy hatékony oktató diákjai is jobban teljesítenek, és jobb értékelést is adnak anélkül, hogy jegyinflációról lenne szó.

Ebben a kutatásban az volt a célunk, hogy megvizsgáljuk a jegyinfláció hatását az OHV eredményekre a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem (BME) 12 félévnyi adatán. A hatást mérjük általános regresszió (OLS) segítségével is, azonban ez a módszer nem veszi figyelembe az osztályzat változó endogenitását. Ennek kiküszöbölésére használunk fixhatás panelmodellt (FE) és kétlépcsős legkisebb négyzetek módszerét (TSL) is megfelelő instrumentális változó választással. A téma jelentős nemzetközi irodalommal rendelkezik, a jegyinfláció jelenségét számos tudományos publikációban feldolgozták, különösen egyesült államokbeli egyetemek adatai alapján. Legjobb tudomásunk szerint, ez az első ilyen jellegű kutatás magyar adatokon. A BME-s adatok olyan szempontból is egyediek, hogy míg a legtöbb egyetemen a vizsgák megírása előtt kell kitölteni az értékeléseket, a BME-n a hallgatók jelentős része a végső jegy ismeretében tölti ki az OHV-t.

Továbbá, az egyetemünkön az OHV rendszer reformálva lett 2017-ben. A kutatásunk keretein belül ennek a reformnak a hatásait is vizsgáltuk, a legutóbbi négy félév adatát használva az új kérdőív rendszerből. Regressziós módszerekkel vizsgáltuk a kérdőív skála változtatásából felmerülő torzításokat, és az újonnan bevezetett kedvezményes tárgyfelvétel hatásait az OHV megbízhatóságára.

Lükő Gabriella

*Építőmérnöki Kar
Vízépítési és Vizgazdálkodási Tanszék*

Sekély tavi légkör-víz határfelületen kialakuló impulzus- és hőáramok becslése örvény-kovariancia mérések alapján

A légkör-víz határfelületen kialakuló cserefolyamatok impulzus- és hőáramok formájában jelentkeznek, amelyek közvetlenül alakítják a tó hidro- és termodinamikai állapotát. Ezen folyamatok számszerű leírására számos mérési és becslési módszer található az oceanográfiai irodalomban. Friss kutatások azt mutatták, hogy az oceanográfiai mérések alapján levezetett összefüggések nem helytállóak kisebb léptékű és erősen meghajtási hossz limitált környezetben, ahol a kialakuló hullámok jellemzően fiatalabbak, így i) nagyobb meredekségűek, valamint ii) a fázissebességük is kisebb, mint az óceáni nyílt vízi környezetben. Terepi mérések adatsorai alapján kísérletet tettem új, sekély tavi, meghajtási hossz limitált körülményekre alkalmazható impulzus- és hőáram becselő összefüggések levezetésére. Jelen kutatás alapját a Balaton Keszthelyi-öblében telepített nagyfrekvenciájú nyomás-, áramlás- és vízszintmérővel kiegészített meteorológiai mérőállomások adatsorai képezik. Az összefüggésekhez nemcsak a légköri adatokat használtam fel, hanem a hullámozás hatását is figyelembe vettem, így sikerült az impulzusáram becsléshez szükséges paraméter, a vízfelszín jellemző érdességmagasság és a hullámkor kapcsolatát levezetnem. Két egyszerre működtetett mérőállomásnak köszönhetően a térbeli változékonyságot is vizsgálni tudtam.

Az eredmények azt mutatták, hogy a hagyományos lokális becselő összefüggések nem tudják figyelembe venni az impulzusáram térbeli változékonyságát, azonban a hullámkor bevonásával ez lehetséges. Az eredmények megbízhatóságának vizsgálata érdekében mindhárom turbulens áramot szigorú minőségi szűrés alá vettem. Felállítottam a tó energiamérlegét is, aminek köszönhetően részletesen megismerhettük a tó hőháztartásának szezonális alakulását, illetve ami alapján elvégeztem a szenzibilis és látens hőáramok korrekcióját. A levezetett összefüggésekkel lehetőségünk lesz a sekély tavakra alkalmazott hidrodinamikai modellek számára pontos peremfeltételek biztosítására, amelyek egy előrejelző-rendszer alapjául szolgálhatnak.

Madarász Lajos

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Képelemzés alapú szabályozás fejlesztése gyógyszertechnológiai folyamatokhoz

A jelenlegi gyógyszeripari gyártási folyamatok számos problémát a fejlesztési fázisból örökölnék, amelyek közül azonban sok kiküszöbölhető a Quality by Design (QbD) elvek figyelembevételével fejlesztett folyamatos technológiák alkalmazásával. Folyamatfelügyelő (Process Analytical Technology, PAT) eszközök telepítésével biztosítható a valós idejű minőségbiztosítás, továbbá a gyártás során keletkezett adatok segítségével növelhető a gyártás hatékonysága.

A folyamatos technológiák egy kritikus műveleti lépése a folyamatos poradagolás. Ennek fontossága alacsony dózisú, nagy erősségű (Highly Potent) hatóanyagok esetében tovább fokozódik, ahol akár néhány gramm/órás adagolási sebességekre is szükség lehet, amire a jelenleg piacon kapható gravimetrikus adagolók nem alkalmasak.

Munkám során céloom egy új, képelemzésen alapuló rendszer megalkotása volt, amely nagy pontossággal képes porok tömegáramának meghatározására extrém alacsony adagolási sebességek esetén is. Ezt követően céloom a fejlesztett rendszer felhasználásával a folyamat visszacsatolásos szabályozásának megvalósítása volt.

Ehhez szükség volt a megfelelő minőségű képek elkészítésére alkalmas rendszer összeállítására, valamint a képelemző szoftver megalkotására, ami alkalmas a nagysebességgel elkészített képek valós idejű elemzésére. Eredményeim közé tartozik, hogy a dinamikus képelemzésen alapuló eszköz megalkotása után sikeresen alkalmaztam azt porok tömegáramának nagy pontosságú becslésére, mind dozírozás, mind folyamatos adagolás esetében. Homogenizáló berendezések „digital twin”-jét alkalmazva vizsgáltam, hogy a fejlesztett rendszer miként viselkedne éles gyártás során. A képelemző berendezést felhasználva megvalósítottam a kiadagolt por tömegáramának szabályozását. Végül a kifejlesztett rendszert tömegáram mérés mellett párhuzamosan sikeresen alkalmaztam szemcseméret mérésre is. A mért szemcseméret eloszlások, illetve azok jellemző paraméterei kiváló korrelációt mutattak a referencia mérések eredményeivel. A kifejlesztett képelemzés alapú rendszerről elmondható, hogy sokoldalú alkalmazási lehetősége miatt számos gyógyszeripari folyamatba könnyen integrálható.

Márton Anna*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Szekunder foszfinoxid egységet tartalmazó koronaéterek előállítása és alkalmazása

Napjainkban a vegyiparban alkalmazott reakciók többségét katalizátorok alkalmazásával végzik. A katalizált reakciók kezelhetőségét jelentősen megkönnyíti, ha a katalizátor és a reaktánsok azonos fázisban vannak, azaz, ha homogén katalízist alkalmazunk. Az ilyen reakciók esetében gyakran használnak trivalens foszforvegyületeket katalizátor ligandumként rendkívül jó komplexképző tulajdonságuk miatt. A trivalens foszforvegyületek nagy hátránya, hogy könnyen oxidálódnak, így előállításuk, illetve felhasználásuk során mindvégig inert körülmények alkalmazása szükséges. Kiválthatóak azonban szekunder foszfinoxid típusú katalizátor ligandumok felhasználásával. Ezen vegyületek dinamikus egyensúlyt tartanak a pentavalens szekunder foszfinoxid és a trivalens foszfinossav formájuk között. Előbbinek köszönhetően nem érzékenyek az oxidációra, azonban utóbbi miatt pedig kiváló komplexképző tulajdonsággal rendelkeznek. Számos szekunder foszfinoxid típusú vegyületet előállítottak már, és sikeresen alkalmazták ezeket cikloaddíciós és cikloizomerizációs reakciókban, illetve hidrogénezés és hidroformilezés során is.

Az irodalomban nem ismeretesek olyan koronaéterek, amelyek a makrogyűrűben szekunder foszfinoxid egységet tartalmaznak. Ezen vegyületek előállítása során könnyen kialakítható kiralitáscentrum a gyűrűben, így kifejezetten alkalmasak lehetnek katalizátor ligandumként való alkalmazásra enantiomerszelektív reakciókban.

Az ÚNKP Program által támogatott időszakban megvalósuló kutatómunkám során három, a szakirodalomban eddig ismeretlen szekunder foszfinoxid egységet tartalmazó, a makrogyűrűn különbözőképpen szubsztituált királis koronaéter szintézisét valósítottam meg annak érdekében, hogy később hidroformilezési reakciók katalizátor ligandumaként történő felhasználásukat tanulmányozhassák. Ilyen módon vizsgálható a szekunder foszfinoxidok alkalmazásának előnye korábban előállított foszfin típusú makrociklusokhoz képest, illetve a makrogyűrűn elhelyezkedő szubsztituensek enantiomerszelektivitásra gyakorolt hatása is.

Máté Balázs

*Építészmérnöki Kar
Építészettörténeti és Műemléki Tanszék*

Árpád-kori rotundák – elterjedés vizsgálata

A Magyar Királyság Árpád-kori szakrális építészetének meghatározó elemei a rotundák, más néven a körtemplomok. A Kárpát-medence területén közel kétszáz emlékről van tudomásunk, amelyek a preromán kortól egészen a kora-gótikáig épültek. Emellett a közép-európai régióban szintén jelentős számban található meg ez az épülettípus.

A téma szorosan kapcsolódik a kereszténység elterjedéséhez az itt élő népek körében. Az ősi centrális elrendezés megidézi a természeti vallások formavilágát, de már a kereszténységhez kapcsolódó funkciók kapnak benne helyet. Kelet és Nyugat hatását ötvözve, de a pogány hagyományokat sem elfeledve alakulhattak ki a rotundák, melyek funkcionális változatossága és praktikussága segítette az elterjedésüket. Erre a konklúzióra jutottunk már a 2018-ban készített TDK dolgozatunkban, melyben részletesebben foglalkoztunk a forma elterjedésével és funkcionális változásával.

Kutatásunk folytatásához a korábbi tanulmányunk készítése közben több új irány kínálkozott, emellett a hipotéziseink mélyebb megvizsgálását is szükségesnek éreztük. Ez szilárd alapot jelentett az új vizsgálatok megkezdéséhez. Mivel kutatásunkat szorosan együttműködve végezzük, ezért ezen előadás a kutatótársam, Varga Géza által bemutatott eredményekkel együtt képez teljes egészet.

Az előadás a késői körtemplomok elemzésével foglalkozik. Ehhez az egyik alapot a kutatásunk egy fő célkitűzése, egy összefoglaló adatbázis elkészítése jelentette. Ennek a felhasználásával különböző szempontok alapján csoportosítottuk a rotundákat, és következtetéseket vontunk le a kapott adatokból. A késői rotundák alatt egy új építési hullámot értünk, mely a 12. század végén és a 13. században épült rotundákat foglalja magában. Ezért fontos megvizsgálunk a lovagrendek európai szentsírpítészetének az emlékeit és kapcsolatukat a körtemplomokkal. Továbbá – ettől a hatástól nem feltétlenül függetlenül – új típusai jelentek meg a körtemplomoknak, akár alaprajzi, akár funkcionális tekintetben, melyekre az előadásban bővebben kitérünk. Végezetül közelebbről is megvizsgáljuk ezeket a szakrális építményeket és megnézzük, hogy geometriájukat milyen szerkesztések eredményezték és ezek között milyen kapcsolat fedezhető fel, valamint a megépítésüket ez milyen szempontból befolyásolhatta.

Megyeri Mária

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Ergonómia és Pszichológia Tanszék*

Első szoftverhasználatot segítő (user onboarding) megoldások hatékonyságának vizsgálata

A szoftverergonómiai tervezési irányelvek figyelembevételével és felhasználó-központú kutatási módszerek alkalmazásával folyamatosan fejleszteni lehet a szoftvertermékeket a minél jobb felhasználói élmény elérése érdekében. A közkedveltség és gazdaságosság eléréséhez egy rendszernek nem elegendő a funkcionális elvárásokat teljesíteni, könnyen használhatónak is kell lennie. A használhatóságnak több összetevője van, amelyek hagyományosan a következő öt használhatósági paraméterekkel vannak összefüggésben (Nielsen, 1994): megtanulhatóság, hatékonyság, megjegyezhetőség, hibák és elégedettség.

A megtanulhatóság kérdésköréhez szorosan kapcsolódnak az onboarding – azaz az első szoftverhasználatot segítő – megoldások. A szoftverergonómia világára átvittetve onboardingnak nevezzük azt a rövid időszakot, amikor egy új felhasználó először kipróbál egy alkalmazást és megérti, hogy pontosan mire is való (Pásztor, 2016).

Jelen kutatás középpontjában így a különböző típusú user onboarding megoldások hatékonyságának vizsgálata áll. A dolgozat elméleti részében ezek a módszerek kerültek szakirodalmi alapozottsággal összegyűjtésre. A kutatás 18 fő bevonásával került lefolytatásra, a résztvevőknek a Paint 3D programban kellett végrehajtaniuk különböző feladatokat szemmozgás-követéssel támogatott használhatósági vizsgálat keretein belül. A 18 fő három csoportba lett besorolva: a referencia csoport résztvevői a használhatósági vizsgálat feladatait onboarding megoldás nélkül végezték el, míg a további 12 kísérleti személy (további két csoportra bontva) onboarding megoldások megtekintése, vagy használata után kezdett hozzá a feladatsorhoz. 6 felhasználó néhány a termékhasználatot bemutató (tutorial) videóval találkozott, míg 6 résztvevő pedig egy általam megalkotott kattintható, a fontosabb funkciókat elmagyarázó megoldással.

A referenciacsoport eredményei így összehasonlíthatóvá váltak az onboarding megoldásokkal támogatott eredményekkel. A vizsgálat során mért mutatók (sikeresség, időigény, érzelmi reakciók, hibák száma, a hőtésképekből kinyert adatok), illetve a vizsgálat után a tesztalanyokkal kitöltetett SUS teszt eredményei számszerűsítették a feladatmegoldásokat, így a különféle onboarding módszerek hatékonysága mérhetővé vált a statisztika eszközeivel is.

Az eredmények azt mutatják, hogy az onboarding módszerek hatékonyak bizonyulnak több mutató mentén is, így érdemes ezeket a megoldásokat alkalmazni szoftvertermékek esetében a könnyebb megtanulhatóság érdekében.

A használhatósági vizsgálat után a felhasználói vélemények is feltárásra kerültek az alkalmazott onboarding megoldásokkal kapcsolatban interjúsorozat keretein belül, amelyek útmutatást adhatnak az ipari szereplők számára is a megfelelő onboarding változat fejlesztése során.

Mózner Orsolya

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék*

Az ABCG2 membránfehérje természetes variánsainak jellemzése, a mutációk hatásmechanizmusának vizsgálata

Az ABCG2 membránfehérje egy a humán szervezetben számos szövetben megtalálható multidrog-transzporter. Kifejeződik például a vesében, a bélben, a vér-agy gáton és a placentán. Káros anyagokat, xenobiotikumokat szállít a sejtekből kifelé, ezáltal fontos védő funkciót tölt be a szervezetünkben. A fehérje széles körben transzportál gyógyszermolekulákat, valamint a húgysav kiválasztásában is részt vesz. Ez magyarázza, hogy a fehérje variánsait, mutációit hajlamosító tényezőként írták le a köszvényes megbetegedések esetén. Kutatásom során köszvényes betegekben megtalált, köszvényre hajlamosító tényezőként leírt ABCG2 mutációk vizsgálatát végeztem el az általam létrehozott ABCG2 különböző variánsait stabilan kifejező HeLa sejteken. Célom volt a sejtek által kifejezett ABCG2 fehérje mennyiségének vizsgálata, valamint az átlagostól eltérő fehérjeszintet eredményező mutációk hatásmechanizmusának kiderítése gátlószeres kezelések végzésével. A vad típushoz képest valamivel magasabb fehérjeszintet eredményező, prediktált ubikvitinációs helyen történő mutáció a K360del. Ennek vizsgálata érdekében a vad típusú, valamint K360del ABCG2-t kifejező sejteket E1 ubikvitin aktiváló enzim inhibitorral, valamint deubikvitináz enzim inhibitorral kezeltem. A fehérjeexpressziós vizsgálatok alapján nem detektálhatók fehérjeszinten az R147W és R383C variánsok. Ezeket az ABCG2 variánsokat kifejező sejteket MG132 proteaszóma-gátlószerrel kezeltem. A kezelés eredményeiből arra következtethetünk, hogy az utóbbi két mutáns esetén az ABCG2 fehérjeszinten kifejeződik, azonban a glikozilációs mintázat elnyerése előtt a proteaszómában lebontásra kerül. A fehérje szerkezeti modelljében ezek a mutációk nagyon közel helyezkednek el egymáshoz, ez alapján ez a régió kiemelten fontos a fehérje stabilitásának szempontjából. Eredményeim az ABCG2 természetesen előforduló, köszvényes megbetegedésre hajlamosító tényezőként leírt mutációk megismeréséhez járulnak hozzá.

Nagy Márton

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Gépjárműtechnológia Tanszék*

Amorf lágymágneses lemezek lézeres vágásakor fellépő hőhatásövezetének vizsgálata

A járműiparban jelenleg az új kibocsájtási előírások következtében folyamatosan csökken a belső égésű motorral gyártott autók piaci részesedése. A hibrid és a tisztán elektromos hajtások fokozatosan nyernek teret a piacon, aminek legnagyobb előnye a lokális emissziómentesség. Ezen cél elérése végett igény lett az elektromos autók nagyobb volumenű gyártására.

A nagy ipari gyártók folyamatosan keresik a megoldásokat az egyszerű konstrukciójú és nagyobb hatásfokú elektromotor minél termelékenyebb és olcsóbb gyártásához. Az elektromotorokban található álló rész (sztator) és forgó rész (rotor) hagyományosan, túlnyomóan FeSi ötvözetek, melynek szegmenseit jelenleg stancolással készítik.

Feladatomban volt egy korszerű lágymágneses anyag, a METGLAS alkalmasságának vizsgálata elektromotor részegységének gyártásához. A kiinduló alapanyag szerkezete amorf, ennek köszönhetően nagy keménység és ridegedésre való hajlam jellemzi.

A stancoló prés szerszámát nagyon koptatná az üvegfém, és a kivágott termék is könnyen megrepedhet, így más gyártási technológia bevezethetőségét kellett megvizsgálni.

A választás a lézersugaras vágásra és a szikraforgácsolási technológiára esett. A lézersugaras vágásnak hátránya a hőhatás, ami az amorf anyagok jelentős szerkezetváltozását okozhatja a hőhatásövezetben. Ezzel kedvezőtlen irányba módosulhatnak a mágneses és mechanikai tulajdonságai a legyártott lemezszegmensnek. A szikraforgácsolás bár nem egy produktív technológia az iparban, a vágás során elvileg kisebb hőhatásövezetet hoz létre, így szerkezetvizsgálati szempontból érdekes lehet a lézeres vágással történő összehasonlítása.

Mérési ütemterv alapján meghatározott méretű lágymágneses próbatestek lézeres vágás utáni hőhatásövezetének mikrokeménységi, törékenységi, metallográfiai, illetve röntgendiffrakciós, nagy felbontású, pásztázó elektronmikroszkópos vizsgálatát és átfogó mágneses mérését hajtottam végre. Az eredményeket összesítettem és feldolgoztam, ezáltal lehetett következtetni az ipari gyártásban való bevezethetőségére.

Papp Bálint*Gépészmérnöki Kar
Áramlástan Tanszék*

Épületekre ható dinamikus szélterhelés vizsgálata GPU alapú nagyörvény szimulációval

Kutatásom során az épület-aerodinamika tudományterületével, azon belül pedig az épületekre ható dinamikus szélterhelések számításával foglalkoztam. A kutatásban egy GPU alapú CFD szoftverben, az ANSYS Discovery Live-ban elkészített numerikus szélcsatorna modell validációját végeztem el szélcsatorna-mérésekhez, melyet kollégáim, a Karlsruhei Egyetem Hidromechanikai Intézetének (KIT IfH) munkatársai végeztek el határréteg-szélcsatornájukban.

Az irodalomkutatás során áttekintettem a témához kapcsolódó publikációkat, melynek során elsősorban a CFD szimulációk épület-aerodinamikai alkalmazásaira fókuszáltam. Megállapítottam a belépő peremfeltételek fontosságát, azoknak a modellekben fellépő jelentős különbségeit és bizonytalanságát, valamint vizsgáltam a skálafelbontó turbulenciamodellek jelentős számítási igényét és a numerikus áramlástan szimulációk GPU alapú felgyorsításának korábbi eredményeit.

Az általam létrehozott CFD modell képes a turbulens atmoszférikus határrétegre jellemző átlagsebesség-és (passzív örvénygenerátorok segítségével) a turbulenciaintenzitás-profilok előállítására. Kiemelendő, hogy a numerikus szélcsatorna méretei és szélprofiljai úgy lettek beállítva, hogy megegyezzenek a valós szélcsatornával. A szélcsatorna mérőterében és a CFD modellben egyaránt egy 20 cm oldalhosszú kockát (épületmodellt) helyeztünk el, melyen a felületi nyomásmérési pontok összehasonlítása jelenti a validáció alapját – időfüggő adatsorok keretében, 0° és 45° megfúvás esetén, összesen 350 mérési pontban.

Az épületmodell felületén kialakuló nyomáseloszlás átlagértékeit és ingadozásait kvalitatíve és kvantitatíve is összehasonlítottam a szélcsatorna-mérések eredményeivel, továbbá megvizsgáltam az objektumok leválási buborékában mérhető nyomásspektrumokat is. A validáció során a szélcsatorna- és CFD-eredmények mindhárom esetben jó egyezést mutattak. Az eredmények további, terepi mérésekkel való összevetése és az ott tapasztalt szintén jó egyezés rámutatott arra, hogy a numerikus szélcsatorna alkalmas a szögletes (nem áramvonalas) épületek átlagos és ingadozó szélterhelésének helyes előrejelzésére – mindössze néhány óra szimulációs idő alatt, a hagyományos, CPU alapú CFD szimulációknál és a szélcsatorna-méréseknél egy-két nagyságrenddel gyorsabban.

Eredményeimet a 2019/20/1 félévben TDK dolgozat keretében (34 oldal, BME Áramlástan szekció, I. helyezés, GHK különdíj) publikáltam, valamint Dr. Kristóf Gergely (BME Áramlástan Tanszék) és Dr. Christof Gromke (KIT IfH) társszerzőimmel közös angol nyelvű folyóiratcikket írtam (28 oldal), melynek kézírata jelen pillanatban beadás előtt áll.

Paulics Lilla*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Ergonómia és Pszichológia Tanszék*

Képekkel támogatott rendszer használhatósági skála (P-SUS) szoftveres változatának kialakítása és megbízhatósági vizsgálata

A System Usability Scale (SUS) egy Likert-skálás kérdőív, amely tíz kérdésen keresztül méri a rendszerek átfogó használhatóságát. Jelen kutatásban ennek a mérési eszköznek a képes változata (Picotrical System Usability Scale) került átrajzolásra, majd alkalmazásra szoftvertermékek használhatóságának a számszerű meghatározása érdekében. A kutatás középpontjában a Baumgartner és társai (2019) által - eredetileg a mobilalkalmazások érzékelt használhatóságának vizsgálatára - fejlesztett P-SUS kérdőív és annak megbízhatósági vizsgálata áll a Paint és a Paint 3D programok példáján keresztül, kérdőíves környezetben.

A kvantitatív vizsgálat részeként kiküldött kérdőíveket 362 fő töltötte ki. A kérdőív a grafikai programok ismeretét mérte, valamint a Paint termékcsaláddal kapcsolatos átfogó felhasználói véleményeket tárta fel. A kitöltők közül 349-en jelölték, hogy ismerik és használják a termékcsalád ismertebb tagját. A kérdőív kitöltése során Paint programot a válaszadók közül 241-en a hagyományos SUS, míg 108-an annak az általánosan számított gépes változatra adaptált P-SUS változata segítségével értékelték. A Paint3D esetében ezek a számok alacsonyabbak (SUS esetén 51, míg P-SUS esetén 21 fő értékelt), mivel a termékcsalád új tagját már jóval kevesebb kitöltő használta.

A két skálán elért SUS pontszámok már az átlagukat és szórásukat tekintve is különböző eredményeket mutattak, amely egyértelműen megkérdőjelezi a képes változat megbízhatóságát. A két skála által kinyert használhatósági értékek között szignifikáns különbség a Paint esetében ($n=349$) független mintás t , míg a Paint3D programnál ($n=72$) pedig Mann-Whitney próba segítségével volt igazolható a statisztika eszközeivel. A skála képes változata tehát kérdőíves környezetben alkalmazva jelen mintán nem bizonyult megbízhatónak, de mivel a használhatósági értékeket 10 állítás adja, így hasonló statisztikai próbák elvégzésével tovább vizsgálható volt, hogy a képes skála mely elemei megfelelőek, illetve mely elemei azok, amelyek fejlesztésre szorulnak.

A Paint 3D program értékelése során a skála 3-as, 5-ös, 7-es és 9-es elemei között nem volt szignifikáns a különbség, míg a Paint szoftver esetén ugyanez az 1-es, 5-ös és 9-es állításokból alkotott képek esetén volt igaz. Az eredmények alapján így elmondható, hogy nagymintán a P-SUS skála 1-es, 5-ös és 9-es elemei azok, amelyek ugyanúgy érthetőek a kitöltők számára, mint a hagyományos skála állításai, a többi mindenképpen fejlesztést igényel annak érdekében, hogy a P-SUS skála megbízható legyen.

Mivel a P-SUS skála jól értelmezhető nyelvismeret nélkül is, így a többi elem felhasználó-központú fejlesztése hozzájárul ahhoz, hogy ez a változat az ember-számítógép interakció tudományterületének egy jól alkalmazható nonverbális eszköze legyen, amely az ipari szereplők számára is használható a mindennapi munkájuk során.

Pejtsik Diána

*Természettudományi Kar
Kognitív Tudományi Tanszék*

A szorongásos jelleg mérési hatékonyságának növelése zebraadánió (*Danio rerio*) modellben

A szorongásos zavarok jelentős terhet jelentenek társadalmunkban, azonban a kialakulásuk háttérben álló mechanizmusok csak részben ismertek, mely feltételezhetően a laborállatok szorongás-szerű állapotát mérő modellek, illetve tesztek limitációira vezethető vissza. Míg a tesztek végpontjai a populáció szintjén korrelálnak egymással, azaz egy csoport állat egy tesztben mért viselkedése prediktív egy másikra nézve, ugyanez az egyed szintjén nem mondható el, vagyis ritkán tudjuk megjósolni egy állat viselkedését egy teszt alapján. Erre magyarázat lehet, hogy egy állat viselkedését egy aktuális, fluktuáló belső állapot irányítja, elfedve a preklinikai és transzlációs szempontból lényeges és a viselkedés háttérben álló vonás-szintű szorongást. A klinikai diagnosztika a vonásszorongáson alapul, így a preklinikai modellek transzlációs potenciálját növelné, ha ez állatmodellekben is mérhető volna. Rágcsálómodellekben kapott eredményeink alapján, a teszt típusok és tesztismétlések számának növelésével a különböző teszt-végpontok korrelációja erősödik, a vonásszorongás karakterizálható. Az ösztöndíjas időszakban céltom az általunk kifejlesztett eljárás kiterjesztése volt a farmakológiai szűrésekben legdinamikusabban teret nyerő zebraadánió modellre. Vizsgálataim során a szűréseken leggyakrabban alkalmazott lárva, és a felnőtt viselkedésrepertoárral rendelkező juvenilis állatokkal végeztem el a megközelítés-elkerülés konfliktuson alapuló Sötét-Világos-, Nyílt Tér-, valamint az általunk kifejlesztett Úszó Keresztpalló szorongásteszteket. Az állatokat egy héten (protokoll 1), vagy egy napon (protokoll 2) keresztül szemi-random elrendezésben teszteltem, minden állat háromszor vett részt minden tesztben. Végül a teszt típusok egyedi végpontjai, illetve a teszt típusok ismétléséből származó összegzőváltozók, típusok közötti korrelációját hasonlítottam össze egymással. A főkomponens elemzés alapján az összegzőváltozók a teljes variancia nagyobb részét magyarázzák, mint az egyszeri tesztelés, illetve a viselkedést irányító két független komponens a szorongás és a lokomóció. Ennek ellenére, a rágcsálómodellekkel ellentétben nem találtunk szignifikáns korrelációt a tesztek között egyik változó típus, korcsoport, vagy protokoll esetében sem. Az eltérést magyarázhatja, hogy 1) az egyes zebraadánió tesztek a vonásszorongás egymástól független korrelátumait mérik, mely hangsúlyozza az eltérő viselkedési dimenziók együttes vizsgálatának fontosságát. 2) A zebraadánió viselkedése az aktuális környezeti körülményekre reaktívabb, így a háromszori tesztelés kevésnek bizonyul a vonásszorongás felfedezésére. 3) Erősen szociális faj lévén a zebraadánió kevésbé alkalmas individuális tesztelésre, így jelenleg egy csoportos szorongásteszt kifejlesztésén dolgozunk. Összefoglalva, a zebraadánió jelenleg alkalmasabb a nagy-áteresztőképességű populációs szintű vizsgálatokra, míg az egyedszintű jellegek vizsgálata további tökéletesítést igényel.

Rávai Bettina

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Aszimmetrikus, izoindolin α -aminofoszfin-oxidok előállításának tanulmányozása mikrohullámú reaktorban

Kutatómunkám során célul tűztük ki különböző izoindolinon-foszfin-oxidok környezetbarát előállítását a 2-formil-benzoészav, a foszforatomon különböző helyettesítőket tartalmazó szekunder foszfin-oxidok és primer aminok Kabachnik-Fields-reakciót követő gyűrűzárásával. További céljaink között szerepelt az izoindolinon-foszfin-oxidok hasznosíthatóságának vizsgálata átmenetifém-komplexekben.

Az izoindolinon alapvázatot tartalmazó vegyületek nagy jelentőséggel bírnak a gyógyszeriparban, megtalálhatók többek között vérnyomáscsökkentőkben, daganatellenes és rákellenes szerekben. Az izoindolinon-foszfin-oxidokról az irodalomban eddig csak néhány közleményben tettek említést, főként citotoxikus vegyületek intermediereként.

Korábbi munkám során különböző szimmetrikus izoindolinon-foszfin-oxidok előállítását tanulmányoztuk, mely során szobahőmérsékleten, katalizátor nélkül, kis mennyiségű acetonitrilben, rövid idő alatt jutottunk a kívánt vegyületekhez. Ezen eredményeket alapul véve optimalizáltuk a modellreakciót, majd további származékokat állítottunk elő a 2-formil-benzoészav, különféle aszimmetrikus szekunder foszfin-oxidok és primer aminok reakciójával. Tanulmányoztuk továbbá egy szimmetrikus izoindolinon-foszfin-oxid deoxigénezését fenilszilán redukálószerrel, MW körülmények között. A hőmérséklet és a reakcióidő változtatásával teljes konverziót értünk el. Végül a kapott izoindolinon-foszfinat platina-komplex szintézisében hasznosítottuk.

A termékeket oszlopkromatográfiás tisztítás után izoláltuk, szerkezetüket ^{31}P , ^1H és ^{13}C NMR spektroszkópiával, valamint HRMS vizsgálatokkal igazoltuk.

Reizinger Patrik

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Irányítástechnika és Informatika Tanszék*

Akció- és állapotszelektív kíváncsiságmodellek vizsgálata mély megerősítéses tanulás modellekben

A megerősítéses tanulási paradigma a környezettel interakcióban lévő ágens számára visszacsatoláson keresztül biztosítja a tanulási folyamathoz szükséges jutalmat. Azonban valós szituációkban gyakori, hogy a ritka, illetve az adott feladat szempontjából nem megfelelő visszacsatolás jelentősen megnehezíti az adott cél elérését. A problémára a szakirodalomban számos, modell-alapú megoldás ismert, jelen munka az ún. kíváncsiság-modellek terén biztosít áttekintést, valamint a jelenlegi módszerek továbbfejlesztését. A paradigma lényegében egy, a környezettől független, belső modell definiálásával biztosítja, hogy a visszacsatolás – függetlenül a jutalom esetlegesen ritka voltától – minden lépésben rendelkezésre álljon.

Mindezek mellett, a modell-alapú megközelítésből kifolyólag, a kíváncsiság-vezérelt megoldások további előnye, hogy hozzájárul az általánosabb képességek elsajátításához, a belső visszacsatolás sok esetben ugyanis a környezet minél jobb modellezését ösztönzi – ami azonban kritikus környezetekben (pl. autonóm járművek) csak nagy körültekintéssel alkalmazható. Jelen munka a kíváncsiság-alapú megoldások esetében bevezeti a mély tanulás más területein sikerrel alkalmazott ún. figyelmi mechanizmust. Ezen valószínűségi megközelítés segítségével ugyanis a belső kíváncsiságmodell adaptívva tehető, vagyis az állapothoz, valamint az ágens akcióhoz kondicionálva azt segíthetik elő, hogy a belső modell ne torzítsa el az ágens által megtanult trajektóriát.

Jelen munkában ismertetett megoldások a Facebook AI Research PyTorch mély tanulási keretrendszerében kerültek megvalósításra, a forráskód pedig elérhető a GitHub portálon (<https://github.com/rpatrik96/AttA2C/>).

Szomolányi Orsolya Réka

Építőmérnöki Kar

Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszék

A VKI szerinti ökológiai minősítési rendszer validálása statisztikai módszerekkel, a növényi tápanyagokra vonatkozó kritériumok meghatározása a hazai víztípusokra

A kutatás célja a Víz Keretirányelv szerinti vízminősítési módszertan fejlesztése, ezáltal a víztestek osztályba sorolási megbízhatóságának javítása. A kutatás keretében az ökológiai állapotértékelés során alkalmazott vízminőségi osztályhatárokat statisztikai módszerekkel határoztam meg, ezáltal megkísértem a víztestek megbízható minősítési módszertanának megteremtését.

Korábbi elemzéseim rámutattak, hogy a víztestekre vonatkozó átlagértékek a lokális hatásokat elfedik, ezért új, mintavételi hely-szintű adatbázis felállításával és részletesebb elemzéssel pontosítottam a korábbi eredményeimet. Az elemzések egy útmutató alapján, statisztikai módszereket tartalmazó webprogram segítségével, regressziós és kategorikus modellek futtatásával készültek. A felhasznált adatok a magyarországi összes foszfor és összes nitrogén mintavételi adatok a 2007-2017 közötti időszakra vonatkozóan, valamint a biológiai minősítési elemek közül a fitoplanktonra és fitobentoszra vonatkozó EQR (Ecological Quality Ratio) értékek. A kutatás során vizsgáltam, hogy a statisztikai módszerek által becsült határértékekre hatással van-e, ha a kémiai mintavételi adatok közül is – a biológiai mintavételi adatokhoz hasonlóan – csak a vegetációs időszakbeli adatokat vesszem figyelembe, valamint ha a víztestek hidromorfológiára vonatkozó adatait (természetes állapotú/mesterséges/erősen módosított víztestek) figyelembe véve, kategóriák szerint külön is elemzésre kerülnek.

A mintavételi hely-szintű adatokkal történő elemzés kismértékben növelte a mintaszámot, azonban az EQR és a tápanyagok közötti kapcsolat nem javult számottevően a víztestekre vonatkozó átlagértékek használatához képest, az r^2 értéke továbbra is alacsony maradt, különösen fitobentosz vizsgálata esetén. Az egyes kategóriák szétválasztásával és külön elemzésével az alkalmazott statisztikai modellek által becsült határértékek egységesebbé váltak, az r^2 értéke javult.

A mintavételi hely-szintű, éves és vegetációs időszakra vonatkozó átlagokkal végzett elemzés eredményeit összehasonlítva elmondható, hogy ugyan vegetációs időszakbeli átlagokkal több esetben jutottam eredményre, azonban sem az r^2 értékek alapján, sem a módszerek által becsült határértékek egyöntetűsége alapján nem lehet egyértelműen kijelenteni, hogy a vegetációs időszakbeli átlagok használata javasolható. A statisztikai módszerek segítségével számos esetben tudtam javaslatot tenni határértékekre, melyek egy része megerősíti a 2015-ös Vízgyűjtő-gazdálkodási Tervben alkalmazott határértékeket, azonban szigorúbb és enyhébb határértékekre is született javaslat.

Varga Géza*Építészmérnöki Kar
Építészettörténeti és Műemléki Tanszék*

Árpád-kori rotundák - Kialakulás vizsgálata

A Magyar Királyság Árpád-kori szakrális építészetének meghatározó elemei a rotundák, más néven a körtemplomok. A Kárpát-medence területén közel kétszáz emlékről van tudomásunk, amelyek a preromán kortól egészen a kora-gótikáig épültek. Emellett a Közép-Európai régióban szintén jelentős számban található meg ez az épülettípus.

A téma szorosan kapcsolódik a kereszténység elterjedéséhez az itt élő népek körében. Az ősi centrális elrendezés megidézi a természeti vallások formavilágát, de már a kereszténységhez kapcsolódó funkciók kapnak benne helyet. Kelet és Nyugat hatását ötvözve, de a pogány hagyományokat sem elfeledve alakulhattak ki a rotundák, melyek funkcionális változatossága és praktikussága segítette az elterjedésüket. Erre a konklúzióra jutottunk már a 2018-ban készített TDK dolgozatunkban, melyben részletesebben foglalkoztunk a forma elterjedésével és funkcionális változásával. Kutatásunk folytatásához a korábbi tanulmányunk készítése közben több új irány kínálkozott, emellett a hipotéziseink mélyebb megvizsgálását is szükségesnek éreztük. Ez szilárd alapot jelentett az új vizsgálatok megkezdéséhez. Mivel kutatásunkat szorosan együttműködve végezzük, ezért ezen előadás kutatótársam, Máté Balázs által bemutatott eredményekkel együttesen képez teljes egészet.

A teljes Közép-Európai emlékkállomány elemzéséhez egy adatbázist készítettünk, amely alapján csoportokra osztottuk a körtemplomokat, ez segítségünkre volt az egyes korszakok jellemzőinek meghatározásában. Az előadás hangsúlya a rotundák kialakulásán és a korai építészeti hatások bemutatásán van. Az uralkodói központokban épült körtemplomok esetében az egyik elterjedt elmélet az Aacheni palotakápolnát nevezi meg a legfontosabb előképként. Az erős kapcsolatot már korábbi dolgozatunkba is megkérdőjeleztük, de ennek ellenére érdemes a kérdéskört funkcionális szempontból is megvizsgálni. Továbbá felmerül a bizánci térítés lehetséges hatása is a régióban, amely leginkább a szláv nyelvterületeken lehetett jelentős. Tehát fontosnak gondoljuk röviden áttekinteni és összevetni a rotundákkal a korábbi keresztény centrális épületek térszervezését, nagyobb hangsúlyt helyezve a környező népek preromán építészetére. Ezek után részletesen kitérünk a 11.-12. századra leginkább jellemző alaprajzi típus – az egy apszisos rotunda – geometriai és szerkesztési összefüggéseinek bemutatására, melyek alapjaiban meghatározták a mély szimbólumokat magában hordozó körtemplomokat.

Varga László József

*Gépészmérnöki Kar
Polimertechnika Tanszék*

Ataktikus polipropilén mátrixú önerősített kompozit fejlesztése

kutatás során 120, 140 és 160 °C-on állítottam elő önerősített kompozitokat Vestoplast® 708, 750 és 792 márkanéven forgalmazott ataktikus polipropilén (aPP) tartalmú ömledékragasztóból.

Az aPP kiváló folyóképességű, rendkívül ragadós anyag, ami a hagyományos technológiákkal történő feldolgozhatóságát jelentősen megnehezíti. A kompozitok gyártásának megkönnyítése érdekében olyan szövetvezető berendezést terveztem, amely a síkfólia gyártósorra szerelhető, és segítségével az erősítőszövetek vékony mátrixréteggel bevonhatók. E bevonatolt előgyártmányokat egymásra helyezve, majd megfelelő hőmérsékleten összepréselve az önerősített kompozitok egyszerűen előállíthatók. A kompozitok gyártása során kettős szalagprés (DBP) alkalmazásával további termelékenységnövekedés érhető el.

A kompozitok sűrűsége mindhárom mátrixanyag esetében növekvő préselési hőmérséklettel növekedett, azaz magasabb préselési hőmérsékleten javult a kompozitok konszolidációja. Ezt a lefejtővizsgálatok eredményei is megerősítették. A szakítóvizsgálatok során, szobahőmérsékleten a Vestoplast® 750 és 792 mátrixú kompozitok esetében 140, a Vestoplast® 708 mátrix esetében 120 °C préselési hőmérsékletnél adódtak a legnagyobb szakítószilárdság-értékek. -40 és 80 °C-os vizsgálati hőmérsékleten mindhárom mátrixanyag esetében a szakítószilárdság növekvő préselési hőmérséklettel csökkent. A szobahőmérsékletű vizsgálatokhoz viszonyítva -40 °C-on nagyobb, 80 °C-on kisebb szakítószilárdság-értékek adódtak. A kompozitok rugalmassági modulusait tekintve hasonló tendenciákat kaptam, ugyanakkor a kompozitok rugalmassági modulusa meglehetősen alacsony. Az ejtősúlyos vizsgálatok kimutatták, hogy a kompozitok perforációs energiái mindhárom mátrixanyag esetében a préselési hőmérséklet növekedésével csökkentek. A mechanikai vizsgálatokat jobb tulajdonságokkal rendelkező szövettel készült kompozitokkal is elvégezve kijelenthető, hogy jobb tulajdonságokkal bíró szövet alkalmazásával a kompozitok mechanikai tulajdonságai javíthatók.

Az eredmények alapján ataktikus polipropilén mátrix alkalmazásával a préselési hőmérséklet a random polipropilén kopolimer (rPP) mátrixú önerősített kompozitokhoz képest mintegy 30-40 °C-kal csökkenthető, és a vizsgált mátrixanyagok közül a Vestoplast® 792 tűnik a legígéretesebbnek, amely esetében az optimális préselési hőmérséklet 130 és 140 °C közötti. A szövetbevonatolásos eljárással az aPP-mátrixú kompozitok termelékenyen gyárthatók. Az előállított kompozitok kis sűrűséggel, jó szilárdsággal, valamint kiváló energiaelnyelő-képességgel rendelkeznek, ami miatt e kompozitok a jövőben munkavédelmi sisakok, sport-védőfelszerelések, energiaelnyelő burkolatok ideális alapanyagává válhatnak. A kompozitok merevsége azonban kicsi, amelynek fejlesztése (pl. szendvicsszerkezetek kialakításával) új irányt adhat a kutatás folytatásának.

Vincze Anna

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

A cornea-PAMPA modell fizikai-kémiai jellemzése

A szem hatékony gyógyszeres terápiájának megvalósítása a mai napig kihívást jelent gyógyszerformuláció szempontjából. A topikális formában (pl. szemcseppben) bejuttatott hatóanyagmennyiség biohasznosulása a szem védekező mechanizmusai, valamint a szaruhártya nehéz átjárhatósága miatt csupán kb. 5%. A cornea-PAMPA egy, a kutatócsoportunk által kidolgozott modell, mely segítséget nyújthat új, gyógyszerjelölt molekulák, vagy akár készítmények esetében a hatóanyagok szaruhártya-permeabilitásának előrejelzéséhez. ÚNKP kutatási munkámban megfogalmazott célom, hogy a cornea-PAMPA modellben nagyszámú hatóanyag mért permeabilitását korreláltassam fizikai kémiai tulajdonságaikkal (MW, $\log P$, $\log D_{7,4}$, PSA) és ezáltal vizsgáljam a modell fizikai kémiai hátterét. További célom, hogy a rifampicin, mint a szem gyulladással járó betegségeinek kezelésére alkalmazott antibiotikum poliaszpartamid nanoszálalás formáját elkészítsem szemészeti alkalmazásra, valamint a formulázott hatóanyag permeabilitását teszteljem a cornea-PAMPA modellen. A rifampicin vizes közegben csökkent kémiai stabilitású antibiotikum, melynek alkalmazása a mai napig csak magisztrális, mélyhűtőben tárolandó szemcsepp készítmény formájában lehetséges. A poliaszpartamidok alkalmas gyógyszerhordozók, hiszen biokompatibilis, biodegradálható polimerek, valamint tulajdonságaik finomhangolhatók szerkezetük egyszerű módosításával.

Munkám során sikeresen állítottam elő rifampicin tartalmú poliaszpartamid nanoszálakat, melyek alkalmasak lehetnek nyújtott hatóanyagleadású szemészeti inzert típusú felhasználásra. A formulázott rifampicin szaruhártya-permeabilitását azonban stabilitási okokból (4 órás, 35 °C-os inkubálás miatt) nem sikerült meghatároznom. Emellett 50 vegyület szaruhártya-permeabilitását sikeresen határoztam meg a cornea-PAMPA modellen, valamint bizonyítottam, hogy a molekulatömeg (MW), lipofilitás ($\log P$, $\log D_{7,4}$) és a poláros molekulafelszín (PSA) mint fizikai-kémiai leírók a szaruhártya-permeabilitással nem állnak direkt korrelációban.

Virág Ábris Dávid

*Gépészmérnöki Kar
Polimertechnika Tanszék*

Szöveterősítésű kompozit lapok deformációs és tönkremeneteli viselkedésének szálkötegcella-alapú modellezése

Napjainkban a szálerősített polimer kompozitok felhasználásának területe és mennyisége folyamatosan növekszik. A polimer kompozitok nagymértékű felhasználását mutatja többek között az a tény is, hogy például a Boeing 787 Dreamliner repülőgép 50 tömeg%-ban polimer kompozitból készül.

Éppen ezért egyre nagyobb igény van arra, hogy már a tervezési fázisban kellő pontossággal tudjuk modellezni a kompozit anyagok és termékek mechanikai viselkedését és tönkremenetelét. A terhelésre mutatott viselkedés megfelelő leírását jelentősen megkönnyíthetik azok az anyagmodellek, amelyek a szálas anizotrop szerkezeti tulajdonságok mellett képesek megjeleníteni a kompozit anyagokra jellemző tönkremeneteli viselkedést is. Egy ilyen módszer lehet a statisztikus szálkötegcellákat alkalmazó anyagmodell, az ún. FBC (Fibre Bundle Cell) modell is.

A kutatási program célja az FBC modellrendszer segítségével modellezni a szöveterősítésű kompozit lapok egytengelyű húzóvizsgálata során végbemenő deformációs és tönkremeneteli folyamatokat, illetve egyéb hatásokat vizsgálni, mint például az alkalmazott erősítőszövet befektetési irányának hatása a mechanikai tulajdonságokra.

A kutatás során egyrétegű, üvegszövet erősítésű, poliészter mátrixú kompozit lapok egytengelyű szakítóvizsgálatát végeztem el, majd elemeztem a szövetek befektetési irányának hatását a mechanikai tulajdonságokra. Ezt követően a szakítóvizsgálatok mérési eredményeiből meghatározott, simított átlaggörbét modelleztem a szálkötegcella-elmélet segítségével. A mérésekből meghatározott simított átlaggörbe és a szálkötegcella elmélettel számolt modellszámított átlaggörbe között a relatív átlagos négyzetes hiba minden esetben kisebb volt, mint 3,7%, sőt egy esetet leszámítva ez az érték kevesebb, mint 2,2% volt. Ezen eredmények alapján a modellezés kifejezetten jónak mondható, azaz megállapítható, hogy a modellezett görbe kellően jó fenomenológiai leírást ad a mérésekből meghatározott, simított átlaggörbére.

A jelen pályázatban elvégzett vizsgálatok és azok eredményei jelentős alapot szolgáltatnak az ipari gyakorlatban alkalmazott, rétegelt kompozitok deformációs és tönkremeneteli viszonyainak elemzésére, például a mátrixrepedés és a delamináció vizsgálatára, továbbá szerkezeti-mechanikai modellekkel történő leírására.

Zsiros Ádám János

*Gépészmérnöki Kar
Áramlástan Tanszék*

Mechanisztikus turbulenciamodell spektrumának vizsgálata

A turbulencia megértése az egyik legfontosabb mérnöki és matematikai feladat. A megértéshez olyan egyszerűsített modellekre is szükség van, amelyek a turbulencia egy-egy fontos tulajdonságát ragadják meg. Ilyen a Richardson kaszkádelmélete alapján nyugvó örvénykaszkád mechanisztikus modellje. A modell egy tömegek és rugók által alkotott, egyik végén rugóval, másik végén rugóval és csillapítással rögzített oszcillátorlánc. A modellben a tömegek mozgási energiája a turbulens örvények mozgási energiájának feleltethető meg, a rugók segítségével pedig az energia-áramlás valósul meg. Az energia disszipációját a csillapítások teszik lehetővé, ahogyan a turbulencia esetén a viszkozitás teszi ezt.

A kutatás során az oszcillátorlánc energiaspektruma került vizsgálatra, melyhez szükséges a rendszer mozgásegyenletét és megoldását felírni. Az energia kiszámítása során egy adott szint, illetve a teljes oszcillátor energiája kvadrátikus alakban meghatározásra került, így a teljes oszcillátorlánc energiaspektruma egy Rayleigh-hányados formájában lett meghatározva. Ezen Rayleigh-hányados segítségével számított spektrum a szakirodalomban található értékekkel egyezést mutat. A Rayleigh-hányados tulajdonságainak kihasználását megcélozva a kvadrátikus formákban található mátrixok sajátértékeit vizsgáltuk, azonban az eredmények nem mutattak azonos sajátértékeket a nevezőben, illetve a számlálóban található mátrixok esetében.

Az oszcillátorlánc egy diszkrét tömegekből álló rendszer, a tömegek számát növelve, azok végtelen határértékeként egy kontinuum rúdmodell tekinthető. Így a kutatás során egy újabb lehetőség került vizsgálatra, levezetésre került a diszkrét (oszcillátorlánc) modell kontinuum határértéke (rúdmodell), és annak longitudinális rezgéseinek, valamint energiaspektrumának vizsgálata került előtérbe.

A rúdmodell longitudinális rezgéseit egy idő- és hely szerinti másodrendű parciális differenciálegyenlet írja le, rugalmas, illetve rugalmas-viszkózus peremfeltételek írhatók fel a rúd végeire. A kezdeti- és peremérték probléma megoldása változók (idő és hely szerinti) szétválasztásával történt. Az idő- és helyfüggő részek külön-külön történő megoldása komplex lengésképeket eredményez, így a megoldás a rúd elmozdulásfüggvényére sor alakban áll elő. Az elmozdulásfüggvény segítségével felírható lett a rúd mozgási és helyzeti energiája is, ezáltal kiszámítható az energiaspektrum. A számítások elvégezhetők a rúd hossza mentén konstans, illetve exponenciálisan változó (növekvő, illetve csökkenő) rúdmervség esetén is, illetve összehasonlításra kerültek a Kolmogorov-spektrum $-5/3$ meredekségű egyenes szakaszával.

Felsőoktatási Doktori Hallgatói, Doktorjelölti Kutatói Ösztöndíj

Asztalos Lilla

Gépészmérnöki Kar

Anyagtudomány és Technológia Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Additívan és hagyományosan gyártott sztentek vizsgálata

Az additív gyártás egyre nagyobb teret hódít az orvostechnikai iparágban is. Az additív gyártás előnye a hagyományos gyártási módszerrel szemben, hogy a pácienseknek egyénre szabott implantátumokat lehet előállítani CT- és röntgenfelvételek alapján. A fémes ízületi implantátumok és polimer eszközök területén jelent meg először ez a gyártási technológia, a koszorúér- és perifériás sztentek gyártása a technológia korlátai miatt egyelőre háttérbe szorult.

Az eljárás korlátai, például por alapanyag esetén, amely a leginkább alkalmazott kiindulási termék fémgyártmányoknál, hogy a sztent kis bordavastagsága (60-80 μm) miatt nagyon kicsi szemcséket kell alkalmazni, hogy megfelelően homogén rétegek alakuljanak ki, megfelelő felületi minőséggel, viszont a nagyon kis szemcseméretű (10-20 μm) porok előállítása bonyolult és költséges. A kutatás keretein belül gyártott fémsztentek esetében is a gyártás utáni állapotban nagyon egyenetlen a minták felülete, amelyet a hagyományos gyártás esetén is alkalmazott elektropolírozással sem lehet teljesen egyenletessé tenni. Az additív gyártású próbatestek esetén problémát okoz továbbá a porozitás és a rétegek nem megfelelő összeolvadása, a mintákból készített csiszolatokon jelentős mennyiségű anyagfolytonossági hiány fedezhető fel. Ausztenites korrózióálló acélok esetében pedig az ausztenites szerkezet átalakulhat, ezáltal az eszköz mágnessé válhat, ami nem megengedett a szervezetbe ültetett orvostechnikai eszközök esetén. A hagyományos gyártástechnológiával előállított sztentek esetében is szükséges a lézersugaras vágás után hőkezelés elvégzése az implantátumokon, viszont az additívan gyártott minták hőkezelési folyamata sokkal összetettebb és időigényesebb. Az additívan gyártott sztentek radiális terhelhetősége jelentős mértékben függ az elektropolírozás és a hőkezelés mértékétől, viszont minden esetben nagyobb erő kellett az additív minták azonos mértékű alakváltozásához, mint a lézersugárral vágott, de azonos mintázatú sztentek esetében. Kis ciklusú fárasztóvizsgálatok végezve a mintán megállapítható, hogy ugyan a sztentek törése nem következett be, de több helyen, jellemzően a réteghatárokon, repedések keletkeztek. A radiális terhelhetőség értéke a fárasztott minták esetében kisebb, mint a gyártott állapotban, amit a mintákban keletkezett repedések is okozhatnak. A foszfát pufferoldatban fárasztott minták tömege jellemzően csökkent, valamint a hasonló közegben végzett korróziós mérésekkel is kis mértékű tömegcsökkenést figyeltem meg a nem elektropolírozott minták esetében.

A kutatás zárásaképp a megkezdett korróziós vizsgálatokat fejezem be, valamint az elérhető adatok alapján összehasonlítom az additív gyártástechnológia gazdaságosságát a hagyományos gyártástechnológiával.

Babicsné Horváth Mária

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Ergonómia és Pszichológia Tanszék
Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola*

Háromdimenziós szoftverek szemmozgáskövetéssel történő használhatósági vizsgálata – módszertani problémák és lehetséges megoldásuk

Az ember-számítógép interakció területén kutatók körében már elterjedt a használhatóság és UX kutatás. A kutatások alkalmával a hagyományos vizsgálatokat ki lehet egészíteni olyan módszerekkel, amik plusz információt adhatnak. Ilyen módszer a szemmozgáskövetés is. Jól működő módszer a mobil applikációk, honlapok és szoftverek fejlesztésének körében. Van azonban olyan szoftver, aminek alapja a háromdimenziós tér, mint a CAD szoftverek, ergonómiai elemző szoftverek és egyes számítógépes játékok. Ezek vizsgálatánál a szemmozgáskövetés egyes vizualizációs technikái nem, vagy csak korlátozottan használhatók. A honlapok tesztelésekor általában egy statikus kép van a felhasználók szeme előtt, viszont egy háromdimenziós szoftver tesztelésekor a felhasználók folyamatosan mozgatják, forgatják a teret, vagy közelíthetnek, távolíthatnak. Ilyen problémába ütköztek egy kutatásban, Portugáliában egy számítógépes játék tesztelésekor, valamint egy saját korábbi kutatásban is problémát jelentett. Ezeknél a kutatásoknál a heatmap, a gazeplot és az AOI (Area of Interest) nem értelmezhető. Kutatásom célja tehát feltárni a háromdimenziós szoftverek szemmozgáskövetéssel való tesztelésekor fellépő problémákat és megoldásokat találni rájuk. A vizsgálat tárgyául, a Catia szoftvert választottam. A jelenlegi vírushelyzet miatt a vizsgálat pilot tesztjét tudtam elvégezni, de amint lehetőségem lesz rá folytatom a kutatást. A protokollba beillesztettem olyan feladatokat, amiket a tér mozgatása nélkül kellett megoldaniuk a résztvevőknek. A pilot teszt alapján elmondható, hogy több használhatósági problémája is van a szoftvernek, ami magyarázható azzal is, hogy egy régebbi típus volt lehetőségünk tesztelni, de ezek főként a felhasználói felületre vonatkoznak. A módszertani eredményeket nézve egyáltalán nem okozott gondot a felhasználónak a tér mozgatása nélkül megoldani a feladatot. Az aggregált hő térképek és gaze plot-okról még nem tudok eredményeket mondani, de az egyéni hő térképek sokkal jobban értelmezhetők a belső térben ezzel a módszerrel.

Benedek Zsolt

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

A biomimetikus nitrogénfixálást kísérő nem kívánatos mellékreakciók mechanizmusának felderítése mikrokinetikai modellezéssel

Napjaink egyik legfontosabb alapvegyszerét, az ammóniát, évi több mint 140 millió tonnás mennyiségben állítják elő világszerte. Az ammóniaszintézis szinte kizárólagosan a Haber-Bosch eljárásen alapul, amely a magas energiaigénye miatt (több száz °C hőmérséklet és több száz bar nyomás szükséges) igen környezetbarát – becslések szerint az üvegházhatású gázok kibocsátásának kb. 3%-a erre a kémiai reakcióra vezethető vissza. Bő egy évszázaddal a tradicionális eljárás feltalálása után tehát egyre sürgetőbb egy új típusú, környezetbarát ammóniaszintézis kifejlesztése.

A természetes nitrogénáz enzimek működését utánzó biomimetikus katalizátorok, az ún. szintetikus nitrogénázok ígéretes alternatívát jelentenek, ugyanis ezekkel az átmenetifém-komplexekkel légköri nyomáson is ammóniává redukálható a dinitrogén (sav és redukálószer reagensek jelenlétében). Egy kutatócsoportnak sem sikerült még azonban gyakorlati célokra alkalmazható mesterséges katalizátort előállítani, mivel folyamatosan visszatérő probléma a szintetikus nitrogénázok alacsony szelektivitása (NH_3 mellett H_2 termék is keletkezik). A H_2 melléktermék képződésének mechanizmusa – annak ellenére, hogy ez a tudás nélkülözhetetlen lenne a katalizátorok racionális tervezéséhez - máig nem tisztázott. Jelen kutatásunk célja, hogy kvantumkémiai számítások révén felderítsük a főreakció (NH_3 -fejlődés) és a mellékreakció (H_2 -fejlődés) elemi lépéseinek egymással való kapcsolatát a négyfogú trifoszfino-E (E = borát, karbonil vagy szilil) ligandumokkal koordinált vaskomplexeken, melyeket jelenleg a legígéretesebb mesterséges nitrogénázoknak tartanak.

Kutatásunk során kiszámítottuk a szóba jöhető elemi lépések aktiválási szabadentalpiáját, melynek alapján felvázoltuk a legvalószínűbb reakciómechanizmusokat. A kapott elemireakció-hálózatból kiindulva elvégeztük a katalitikus elegy mikrokinetikai modellezését, azaz szimuláltuk az egyes intermedierek és termékek koncentrációinak időbeli lefutását. A kapott adatok alapján javaslatot tettünk a hidrogénfejlődés pontos reakcióútjára: elméletünk szerint egy autokatalitikus folyamatról van szó, melynek során a katalizátor vascentrumba egy H_2 molekulát köt meg, majd elősegíti annak protonálódását mindkét H atomon. Ez a folyamat végső soron két H_2 molekulát eredményez, melyek természetesen újabb vasatomokon kötődhetnek. A kapott mechanizmust figyelembe véve lehetővé válik a jelenleg használt átmenetifém-ligandum racionális áttervezése, mely újabb, hatékonyabb katalizátorok kifejlesztéséhez vezethet, és közelebb hozhatja a biomimetikus ammóniaszintézis ipari alkalmazhatóságát.

Béri Bence*Gépészmérnöki Kar**Műszaki Mechanikai Tanszék**Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola*

Környezetszimulációs kísérleti eszközzel emulált esztergálási és marási folyamat stabilitásának vizsgálata a munkadarab és a szerszám rugalmasságának figyelembevételével

Esztergálási/marási folyamatok során előre nem várt, öngerjesztett rezgések léphetnek fel, melyek a munkadarab és a szerszám rugalmasságához köthetők. Hogyha a szerszámot merevnek, a munkadarabot pedig rugalmasnak tekintjük, a munkadarab kis zavarás hatására rezegni kezd és a kialakuló rezgés rámásolódik a megmunkált felületre. Ezek, az iparban chatternek nevezett nagyfrekvenciájú rezgések nem csupán a felületi minőséget befolyásolják, de magát a szerszámot is károsíthatják. A megmunkálási folyamat stabilitásvizsgálata segítségül szolgál a technológiai paraméterek beállításában, amikkel a káros rezgések elkerülhetők az elérhető legmagasabb anyagleválasztási arány mellett.

A megmunkálási folyamat elméletileg ismert lineárisan stabil paraméter-tartománya az iparban kevésbé használt, mivel még mindig drága, idő- és munkaigényes feladat a stabilitási határ valós folyamat közbeni meghatározása. Így az elméleti számítások hitelessége sokszor megkérdőjeleződik az ipari gyakorlatban. Jelen kutatás az anyagleválasztási folyamat stabilitásvizsgálatát egy új szemszögből közelíti meg, ahol a szóban forgó folyamatot egy úgynevezett környezetszimulációs kísérleti berendezés (HIL) segítségével emuláljuk. A szerszám gép felépítését és így dinamikáját nem befolyásolva, de a fellépő forgácsolóerőt elektromágneses aktuátorokkal emulálva helyettesítjük a tényleges anyagleválasztást. A forgó munkadarab elmozdulását lézer szenzorokkal detektáljuk. Az úgynevezett felületi regeneratív hatás előidézése miatt pedig a munkadarab jelenlegi és egy fordulattal korábbi pozícióját is tároljuk. A megkívánt forgácsolóerő karakterisztikát nagy teljesítményű, valós idejű számítógép segítségével határozzuk meg.

Az emulált elektromágneses erő munkapont körüli degresszivitása, illetve a megmunkálási folyamat kísérleti stabilitásvizsgálata alapján kimutatható, hogy a fordulatszámfüggő dinamika mellett a rendszer domináns sajátfrekvenciája a virtuális forgács szélesség növekedésével csökkenni kezd. Ez a jelenség a fordulatszám és a virtuális forgács szélesség, mint technológiai paraméterek széles tartományán megfigyelhető és a forgó munkadarab releváns frekvenciatartományban történő söprő szinuszos gerjesztésével is kimutatható.

A mérési eredményeket a nemlineárisan változó elektromágneses forgácsolóerő és a fordulatszámfüggő dinamika figyelembevételével elméleti stabilitásvizsgálattal és a domináns módus változásának analitikus úton történő számításával igazoljuk.

Bingler Arnold

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Szélessávú Hírközlés és Villamosságtan Tanszék
Villamosmérnöki Tudományok Doktori Iskola*

Modell-redukció és érzékenységvizsgálat alkalmazása elektromágneses eszköztervezési feladatok megoldására

Az elektromágneses térszámítási problémák megoldására egy elterjedt numerikus módszer az ún. integrálegyenletek módszere. Ez a formalizmus kifejezetten előnyös azokban az esetekben, amikor a tér forrásai (áramok és töltések) felületszerű vagy vonalszerű objektumokon vannak lokalizálva, úgy mint fémfelületek vagy vékony vezető struktúrák. Ilyenkor a módszer számításigény tekintetében lényegesen előnyösebb, mint például a végeelem módszer (FEM), vagy az időbeli véges differenciák módszere (FDTD). Az integrálegyenleteken alapuló formalizmus alkalmazhatóságának azonban megvannak a korlátai, annak kiterjesztése általánosabb esetekre jelenleg is aktív kutatások részét képezi.

Az előző éves kutatásom során kidolgoztam egy integrálegyenlet módszert vékony vezetőkből álló struktúrák modellezésére kvázistacionárius Darwin-modell alkalmazása mellett. A modell alkalmas földelt fémsík felett tetszőleges alakban futó differenciális vezetékpár átviteli tulajdonságainak szimulációjára mind közös, mind differenciális módusban. A kutatás második felében ezen integrálegyenlet modell és áramköri modellek csatolási lehetőségeit vizsgáltam. Ennek eredményeként a numerikus diszkretizáció során kapott ún. elemegyenletek lokális módosításával figyelmebe lehet venni egy koncentrált paraméterű áramköri modellt, amit az integrálegyenlet módszerrel modellezett vezetékek közé iktatunk be.

Teszt példaként egy EMI (elektromágneses interferencia) szűrő áramköri modelljét vettem alapul, amit egy földsík felett futó differenciális vezetékparba csatoltam be. Ez egy egyszerű modellje annak az autóiipari problémának, amely során a beépítési környezet (kábelek, autó karosszéria) hatását vizsgáljuk az EMI szűrő csillapítási tulajdonságaira nézve. A vizsgálatból kiderült, hogy a beépítési környezet képes csökkenteni a szűrő beiktatási csillapítását, ezáltal nagyobb elektromágneses emissziót okozhat akár az ultrarövid-hullámú FM rádió sávban is.

Biró András

*Építőmérnöki Kar
Építőanyagok és Magasépítés Tanszék
Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola*

Betonadalékanyagok tűzre való minősítési módszerének kidolgozása

Egy tanszéki projektben nagyelemes tűzvizsgálatnál, melynél körüreges födempallók tűzállóságának javítása volt a cél, különböző betonreceptúrákkal végzett szilárdságvizsgálatok eredményeire alapozva az eredeti termékben alkalmazott dolomit adalékanyagot andezitre cseréltük. Ez a várt eredményektől eltérően csökkentette a födempalló tűzzel szembeni ellenállóképességét. Az eredmények utólagos értékelése alapján látható volt, hogy a gyártó által alkalmazott andezit adalékanyag minősége befolyásolta ilyen módon a szerkezet viselkedését. Más forrásból származott a laboratóriumi szilárdságvizsgálatoknál alkalmazott és a gyártó által az elemgyártásnál alkalmazott andezit a beszállítók kapacitáshiányának köszönhetően. Ez az eset is jó példája annak, hogy a betonadalékanyagok minősítése tűzre szükséges lehet olyan beton, vasbeton szerkezetek esetén, melyeknek tűzállósági követelményeknek is meg kell felelniük. Bár elvégezhető a kész beton vizsgálata minden esetben, de az adalékanyag minősége szállítmányonként változó lehet, így a felhasználás előtti minősítése gazdaságosabb megoldást jelenthet.

Ezen okból kifolyólag a betonadalékanyagok tűzre való előzetes minősítését tűztem ki célul a szemszerkezet és a halmazszilárdság megváltozása alapján. A vizsgálatok során elemeztem a szemszerkezet és a halmazszilárdság megváltozását magas hőmérséklet hatására. A vizsgálatokhoz kvarckavics, zúzott dolomitos mészkő és zúzott andezit adalékanyagokat vizsgálatam. A hőlépcsőket az egyes kőzetminták derivatográfus vizsgálatának eredményei alapján választottam meg, a halmazszilárdság minősítéséhez pedig Hummel-vizsgálatokat végeztem. Az egyes mintákat vizsgáltam elemanalízisre is alkalmas pásztázó elektronmikroszkóppal (SEM), hogy a változások hátterét jobban feltárjam.

A Hummel-vizsgálatokat a szemeloszlás megváltozása alapján értékeltem az adott terméket jellemző szemméret tartományra vonatkoztatott finomsági modulus segítségével. Az eredmények alapján a dolomitos mészkő esetén egy közel lineáris csökkenést tapasztaltam finomsági modulusban, az andezitnél kezdeti növekedést követően csak a legmagasabb hőlépcsőnél (800°C) volt látható visszaesés. A kvarckavics esetében bár a csökkenés közel azonos mértékű volt, mint a mészkő esetében, mégis az ismert térfogatnövekedéssel járó átizomerizálódás 573°C kedvezőtlené teszi betonban való alkalmazás során magas hőmérséklet, tűz esetén.

Csemány Dávid Béla

Gépészmérnöki Kar

Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Modellkorrekciók alkalmazása egyedi tüzelőanyagcsepp párolgásának méréses vizsgálatára

Folyadéktüzelés során a tüzelőanyagot porlasztással apró cseppekre bontják, majd a cseppeknek el kell párologniuk és keveredniük az égéslevegővel, mielőtt elérik a lángfrontot. Egy valós tüzelőanyag-permetben a nagyszámú apró cseppek jelenléte miatt a párolgás vizsgálata még lézeroptikai eszközökkel is nagy kihívást jelent, ezért a teljes tüzelőanyag-permet vizsgálata helyett gyakran felfüggesztésre helyezett, nyugvó egyedi cseppek párolgását elemzik. A kapcsolódó mérések azonban olyan ismert hibával terheltek, mint a cseppet körülvevő forró felületekről származó hőszugárzás és a csepp felfüggesztéseként szolgáló szálon keresztüli hővezetési hőáram.

Jelen kutatás célja az egyedi tüzelőanyagcsepp párolgásának méréses vizsgálata során fellépő, a párolgási folyamat intenzitását jelentősen befolyásoló zavaró hatások részletes feltárása numerikus modellezés segítségével. A kutatás során első lépésben ezen zavaró hatásokra vonatkozó korrekciókat építjük be a csepp hőmérsékletére koncentrált paraméterű modellben. Ezt követi a modellkorrekciók kiterjesztése kontinuum szemléletű modellekre, így a koncentrált paraméterű modell kvalitatív megállapításai finomíthatók. A mérési eredményekkel a felépített modellek eredményeit validáljuk, ezt követően széleskörű paramétervizsgálat segítségével a zavaró hatásokat leginkább jellemző peremfeltételek felderíthetők. Mivel a hőszugárzásra vonatkozó jellemzők igen korlátozottan állnak rendelkezésre, ezért annak hatását bizonytalansági határok segítségével értékelhetjük a hőszugárzás szempontjából szélsőséges kezdeti és peremfeltételek, mint hőmérséklet, cseppátmérő, emissziós tényező segítségével, így a kritikus, leginkább terhelt paramétertartományok beazonosíthatók. A felfüggesztésen keresztüli hővezetés esetében minél nagyobb a szálatmérő a kezdeti cseppátmérőhöz képest, annál jelentősebb a hővezetési hőáram mérést befolyásoló hatása a csepp élettartama során. Amennyiben hőmérséklet-szenzort használunk a csepp felfüggesztésére, melynek hővezetési tényezője jellemzően nagyobb, mint az általában felfüggesztésre használt kvarc mikroszál hővezetési tényezője, úgy várhatóan nagyobb csepphőmérsékletet fogunk mérni. A modellezés segítségével ez a hiba is becsülhető. A különböző szemléletű modellek összehasonlításával megalapozottabb javaslatok tehetők a méréses vizsgálatok számára a zavaró hatások minimalizálásához.

Csóré András

*Természettudományi Kar
Atomfizika Tanszék
Fizikai Tudományok Doktori Iskola*

Szilárdtestbeli kvantumbitek elméleti vizsgálata

Az átmeneti fématom (TM) ponthibák – ezen belül is a vanádium (V) és molibdén (Mo) ponthiba – szilícium-karbidban (SiC) ígéretesnek bizonyulnak kvantumtechnológiai alkalmazásokhoz közeli infravörös tartományba eső optikai emissziójuknak köszönhetően [1-4]. Mindkét ponthiba $S=1/2$ elektronikus alapállapotot valósít meg, azaz Kramers dublett rendszerek, ahol az egyetlen párosítatlan elektron az adott TM ponthiba erősen lokalizált, atomi jellegű d pályáján van jelen. A ponthiba szimmetriájának (C_{3v} pontcsoport) jelentős hatása van a kialakuló hullámfüggvény jellegére, illetve az elektron-fonon csatolásra, amely erős lehet az ilyen – ún. Jahn-Teller instabil – rendszerek esetén. Jelen projekt keretein belül sűrűségfüggvény elméleten alapuló számításokkal megmutatom, hogy az ilyen rendszerekben a szimmetria által vezérelt elektronspin-fonon csatolás jelentősen meghatározza a külső mágneses térrel való kölcsönhatást és ez eredményezi a kísérletileg már kimutatott óriási g -tenzor anizotrópiát [1, 3-4]. Az eredményeimet a 6H SiC-beli vanádium ponthibára mutatom be, ahol összesen 3 – eltérő lokális szimmetriával rendelkező – hibakonfigurációról beszélhetünk. Elemzem a lokális szimmetria hatásait a kapott eredmények fényében, illetve diszkutálom a kapcsolódó kísérleti eredményeket is. Végül kitérek az egyes hibakonfigurációk egyértelmű azonosítására a g -tenzorelemek és a felállított optikai gerjesztési sémákon keresztül és elemzem az egyfotonforrásként történő felhasználás lehetőségeit.

Irodalomjegyzék:

- [1] T. Bosma et al., npj Quantum Information 4, 48 (2018)
- [2] L. Spindlberger et al., Phys. Rev. Applied 12, 014015 (2019)
- [3] J. Baur et al., Physica Status Solidi (a) 162, 153 (1997)
- [4] G. Wolfowicz et al., arXiv: 1908.09817 [quant-ph] (2019)

Dávid Dóra

*Építészmérnöki Kar
Ipari és Mezőgazdasági Építélettervezési Tanszék
Építőművészeti Doktori Iskola*

Architectural Aid (?) - a siker titka

A globalizált világban egyre több figyelem fordul a különböző természeti, humanitárius katasztrófák, szükséghelyzetek következményeit elszenvedők megsegítésére. A segítségnyújtás sok esetben építészeti projektek keretein belül valósul meg, melyek általános célja, hogy az ilyen jellegű krízishelyzetekben szinte minden esetben károkat szenvedő lakókörnyezet és az alapvető infrastruktúra élhetőbb legyen, helyrálljon vagy egyáltalán kialakuljon. Ezek a kihívások jelentősen különböznek a hagyományos építészeti feladatoktól, ezért a rutinszerűen alkalmazott megoldások nem vezetnek igazán jó eredményre; a projektek sikeressége a probléma pontos meghatározásában és egyedi, innovatív megoldások kidolgozásában rejlik, melyhez általában több, különféle tudományterületen jártas szakember együttműködése szükséges.

A tanulmányban három eltérő jellegű szükséghelyzetre reflektáló két-két projekt háttérét vizsgálom: informális városrészek életminőségének javítását célzó beavatkozásokat, természeti katasztrófát követő újjáépítéseket, illetve a fejlődő országokban jelen lévő súlyos társadalmi leszakadás mérséklésére irányuló kezdeményezéseket. Az esettanulmányok alapját a projektek vezetőivel és résztvevőivel készített interjúk adják, melyek célja az eltérő léptékű és háttérű beavatkozások szakmai, finanszírozási háttérének, és az építészet vagy design mellett minden esetben hangsúlyosan megjelenő működési koncepciónak, a koncepció kialakítás folyamatának a feltérképezése. Az elemzések kitérnek a résztvevők szakmai háttérére, a projektek finanszírozására, lebonyolítására és az érintettekkel kialakított kapcsolatra.

A krízishelyzetek kezelésére létrehozott alkotások valós sikere abban mérhető, hogy egy adott mértékű anyagi, tudományos és emberi erőforrás befektetéséből létrejött beavatkozás milyen mértékben és mennyire hosszú távon tud pozitív hatást gyakorolni. A tanulmányban a leírt projekteknek ezt az összetett befektetés-hatás arányát ábrázolom és hasonlítom össze az egyes alkotások valós működését, utóéletét figyelembe véve. Az elemzés alapján a kifejezetten sikeres és a kevésbé célra vezető alkotói és háttér folyamatokat meghatározó munkamódszerekről és elvekről lehet következtetéseket levonni.

Deichler Tímea

*Építészmérnöki Kar
Középülettervezési Tanszék
Építőművészeti Doktori Iskola*

Integratív terek – A közösségi épületek új paradigmái

Ray Oldenburg 1989-es meghatározása alapján az „első hely” az otthon, a „második hely” az iskola és a munkahely, a „harmadik hely” pedig a kikapcsolódás, a szórakozás, a közösségi élet színtere. Az ebben a tiszta képletben szereplő, alapvetően diszjunkt halmazok az elmúlt évtizedekben a használók igényeire, társadalmi változásokra reagálva egyre nagyobb részben átfedésbe kerültek. E folyamat szerepe jelentős: amellett, hogy általuk új tértípusok, karakterek jöttek és jönnek létre a mai napig, olyan építészeti alapfogalmak, mint privát és publikus, külső és belső terek újradefiniálását is megkínálják.

Doktori tanulmányaim során ezeket a téri, használati átfedéseket vizsgálom, melyekben a felhasználók a hagyományos tértípusokhoz képest sokkal nagyobb szabadsággal rendelkeznek. ÚNKP-kutatásom a munka és tanulás tereire koncentráló rész kutatás, amelyben olyan építészeti eszközöket keresek, melyek a használat szabadságát, differenciáltságát optimálisan biztosítják.

Fontosnak vélem, hogy a témát – elméleti háttérének megismerése mellett – gyakorlati oldalról is megközelítsem. A kutatási program keretein belül 2019 októberében több, a témában releváns és előremutató brit felsőoktatási épületet bejártam (Blavatnik Kormányzati Kar, John Henry Brookes és Abercrombie Épülete, Oxfordi Egyetem Matematika Intézete, Oxfordi Egyetem Fizika Intézete). Saját tapasztalataim, illetve az intézmények munkatársaival folytatott beszélgetések alapján az épületeket különböző szempontok alapján elemeztem. Az aránylag magas számú egyesült királyságbeli példa három évtizede zajló átfogó kutatómunka eredményeként született, tanulságaik jelentős szerepet töltenek be a témát kutató szakirodalom területén, nemzetközi és hazai szinten is – így például a MOME Campus megvalósíthatósági tanulmányának is meghatározó részét képezték.

A kutatásom részeredményeinek publikációja mellett, a témában releváns szakirodalomra és megépült épületek tanulságaira alapozva jelenlegi tudásomat, kérdéseimet, motivációmat a jövő munkahelyét kereső nemzetközi tervpályázat keretein belül, pályázati tervben is összegezni kívánom.

Domán Andrea*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Grafén oxid (GO) származékok felületkémiai hatására réz-benzol-1,3,5-trikarboxilát 3D térháló kialakulására

Napjainkban kulcsfontosságú szerepet játszik a légszennyezés csökkentése és környezettudatos technológiák fejlesztése. Az adszorpciós gáztárolás megoldást jelenthet olyan tiszta-energia gázok (pl. CH_4 , H_2) biztonságos és gazdaságos tárolására, melyek alternatív üzemanyagként nagymértékben hozzájárulnának a közlekedési ágazat CO_2 kibocsátásának mérsékléséhez. A technológia megvalósításához új típusú adszorbensekre van szükség. A réz-benzol-1,3,5-trikarboxilát (Cu_3BTC_2 vagy HKUST-1) a fémorganikus térhálók (Metal-Organic Frameworks, MOFs) a metán és a hidrogén tárolását tekintve kiemelkedően ígéretes képviselője. Szerkezetében a rézionok koordinációs kötésekkel keresztül kapcsolódnak a szerves ligandumokkal. A kialakuló fém-karboxilát kötések egyik hátránya, hogy érzékenyek a tárolandó gázok nedvességtartalmára. A gyakorlati alkalmazáshoz szükséges pelletek kialakítása során alkalmazandó nyomás ugyancsak ronthatja a kristályszerkezetet. A HKUST-1 rossz hővezetőképessége is hátrányt jelent, mert a gáztárolás során felmelegszik, ill. a felhasználás során, pedig lehűl a rendszer.

Kutatásom célja olyan kétkomponensű adszorbens fejlesztése, amely kihasználja a HKUST-1 kiváló adszorpciós tulajdonságait, illetve a grafénoxid (GO) társító anyag várható kedvező hatásait. A GO egyrészt növelheti a kompozit rendszerek vízzel szembeni stabilitását, másrészt javíthatja mechanikai (nyomásállóság) és hővezetési tulajdonságait.

Különböző összetételű HKUST-1@GO társított rendszereket állítottam elő szolvotermális úton, a HKUST-1 prekursor oldatához adott GO tartalom szisztematikus változtatásával (1-2,5 mg/l). A termékek morfológiai és kémiai tulajdonságainak vizsgálata alapján megállapítottam, hogy a GO jelenléte a reakcióelegyben befolyásolja a keletkezett HKUST-1 kristályok méretét, a legnagyobb alkalmazott koncentráció esetén pedig eltérő kristályszerkezet kialakulásához vezet. Az utóbbi esetben feltehetően a GO-t felépítő, oxigént is tartalmazó grafénsík (hattagú gyűrűből felépülő szénatomrács) nagy mennyisége fizikailag is gátolhatta a kristálynövekedést. Ezzel egyidejűleg a grafénsík változatos kémiai tulajdonságú, sav/bázis karakterű oxigén tartalmú funkcionális csoportjai a pH eltolása révén hatással lehetnek a szerves trikarbonsav (H_3BTC) protonáltságára és így a kristályképződésre. A kialakuló pórusszerkezet, illetve a metán és hidrogén adszorpciós kapacitás tekintetében optimális összetételű HKUST-1@GO rendszer 2 mg/l GO koncentráció mellett keletkezett. Az ezen az anyagon végzett további kísérletek eredményei szerint a GO bizonyos fokú védelmet nyújt a vízgőzzel, ill. a pelletizálás során fellépő külső nyomással szemben.

Domján Júlia

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Biológiai hatóanyagok szilárd formulációja elektrosztatikus szálképzéssel

A monoklonális antitest alapú gyógyszerek elsősorban folyadék formában kerülnek forgalomba, amelynél a hatóanyag érzékenységének következtében gyakran stabilitási problémák léphetnek fel. Ennek javítására a szilárd gyógyszerforma előállítása jelenthet megoldást, amely nemcsak a termék eltarthatóságát, de a könnyebb szállíthatóságát is elősegíti. Kutatómunkám során egy olyan eljárás kifejlesztése volt a célom, amely jóval kíméletesebb és költséghatékonyabb szárítást tesz lehetővé, mint az iparban jelenleg alkalmazott fagyasztva szárítási technológia.

A készítménytechnológiában újszerűnek számító elektrosztatikus szálképzés alkalmas lehet érzékeny biohatóanyagok szilárd formulálására, mivel szobahőmérsékleten, gyors és kíméletes szárítást tesz lehetővé, valamint folytonosan is üzemeltethető. Munkám során a szálképzéshez a 2-hidroxi-propil- β -ciklodextrin (HP- β -CD) vizes mátrix rendszerét alkalmaztam, amely elősegítette a modell hatóanyag (infiximab) szilárd gyógyszerformájának kialakítását. Fontos szempont volt, hogy az ipari alkalmazhatóság érdekében minél nagyobb termelékenységet tudjak biztosítani. A méretnövelt, nagy sebességű szálképzési technológia alkalmazásával sikerült ~ 83 g/h termelési sebességgel infiximab tartalmú, homogén HP- β -CD nanoszál terméket előállítani. A kisméretű rekonstitúciós teszt elvégzésekor a szilárd anyag a megnövekedett fajlagos felületének következtében 2 percen belül teljesen feloldódott, tiszta oldatot eredményezve. Az analitikai vizsgálatok (méretkizárásos kromatográfia, gél elektroforézis) eredményei alapján az elektrosztatikus szálképzésnek nem volt káros hatása az infiximab stabilitására. A hatóanyag biológiai aktivitása nem változott meg szignifikánsan a szárítási folyamat során a referencia készítményhez képest, amelyet receptor kötődési (affinitás) vizsgálatokkal igazoltam. A kutatómunka eredményei azt mutatják, hogy a nagy sebességű elektrosztatikus szálképzés nagyon ígéretes alternatívája lehet a fagyasztva szárításnak monoklonális antitestek stabil, szilárd gyógyszerformájának előállítására.

Domokos András

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Folyamatos kristályosítás nagysebességű kamerával történő valós idejű követése

Az utóbbi években a különböző folyamatos technológiák fejlesztése nagy figyelmet kapott a gyógyszeripari kutatásokban. Alkalmazásukkal akár állandó termékminőség is elérhető, mivel kialakul egy állandósult állapot, mely során a folyamat- és termékjellemzők időben állandók. Ehhez azonban elengedhetetlen a megfelelő folyamatfelügyelő technikák kifejlesztése, melyekkel valós időben lehet a változásokat detektálni és a szükséges beavatkozást véghez vinni. A megfelelő minőségű termék előállítása különösen fontos a gyógyszeripari kristályosítás során, hiszen az előállított kristályforma tulajdonságai nagy befolyással vannak a további technológiai lépésekre és a végső gyógyszerforma biológiai hasznosulására is. Ennek köszönhetően a különböző gyógyszerhatóanyagok folyamatos üzemű kristályosítása az utóbbi évek egyik széles körben tárgyalt és kutatott területe. Ezen belül a folyamat megbízható követésére alkalmas technikai megoldásokra nagy tudományos érdeklődés tapasztalható.

Az ösztöndíjas időszak alatt sikeresen megvalósítottam egy gyógyszerhatóanyag folyamatos üzemű kristályosításának valós idejű, képelemzésen alapuló monitorozását. Az acetilszalicilsav hatóanyag kicsapószerrel és hűtéssel kombinált folyamatos kristályosítását alkalmaztam modell rendszernek. A folyamat követésére egy nagysebességű kamerát alkalmaztam, amellyel 100 kép/másodperc sebességgel tudtam képeket rögzíteni az objektív előtt elvezetett termék szuszpenzióról. Az elkészült képeken a kristályokat egy számítógépes algoritmus detektálta, majd kiszámolta a méretüket és az aktuális szemcseméret-eloszlást. A folyamat során mintákat vettem, így a képelemzéssel kapott eredményeket össze tudtam vetni hagyományos, kristályok vizsgálatára használt analitikai módszerekkel is. Az eredmények azt mutatták, hogy a kamerával a szemcseméret, a kristályok alakja, és a folyamatos kristályosítás trendje is pontosan követhető volt. Azonban a kamerával történő valós idejű monitorozás nagyságrendekkel több adatot és információt szolgáltatott, jelentősen növelve a módszer megbízhatóságát az egyéb vizsgálatokkal szemben. Összegzőképpen kijelenthető, hogy a kifejlesztett módszer kiváló alternatívája lehet a jelenlegi gyakorlatban a kristályosítás követésére használt módszereknek.

Farkas Balázs

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Egyen és váltóáramú elektrosztatikus szálképzési eljárások gyógyszertechnológiai alkalmazása

Napjaink gyógyszerkutatásában egyre fontosabb eszköz az amorf szilárd diszperziók képzése a vízben rosszul oldódó hatóanyagok kioldódásának és biohasznosulásának javítására. Ezek szilárd, legalább két-komponensű, legtöbbször polimer hordozós rendszerek, melyekben a hatóanyag amorf formában van elosztatva. Előállításukra a sokféle módszer közül kiemelkedik az elektrosztatikus szálképzés, mely során polimer oldatokból nagy fajlagos felületű nemszőtt szövedékek képezhetők nagyfeszültségű elektrosztatikus erőter hatására. A nagy fajlagos felületnek és a hatóanyag amorfizálásának köszönhetően a kioldódás és a biohasznosulás még tovább javítható. Az alkalmazott áramforrás szerint egyen- és váltóáramú módszereket különböztetünk meg. Az elterjedtebben használt egyenáramú módszer hátránya, hogy alacsony a termelékenysége és nehezen méretnövelhető. Ezzel szemben a váltóáramú módszerrel már laboratóriumi körülmények között többszörös termelékenységnövekedés érhető el és több olyan paraméter is módosítható (frekvencia és hullámjelalak), amelyek a termék morfológiájára és termelékenységére is hatással lehetnek.

Az ösztöndíjas időszak alatt végzett munka során a frekvencia és hullámjelalak változtatásának hatását vizsgálok a váltóáramú elektrosztatikus szálképzésre. Minél szélesebb frekvenciatartomány és többféle hullámjelalak tesztelése is a tervek között szerepel. Megvizsgálom, hogy a paraméterek módosításával a módszer termelékenysége növelhető-e. A kísérletek kivitelezéséhez egy új modellrendszert fejleszték az amorf szilárd diszperziók előállításánál népszerű, de váltóáramú elektrosztatikus szálképzéssel még nem feldolgozott polimer hordozóval, a PVPVA64-el, mely egy vízben jól oldódó vinil-pirrolidon-vinil-acetát kopolimer. Az optimalizált összetétellel többféle frekvencia és jelalak beállítás mellett végzek szálképzési kísérleteket, majd összehasonlítom a kapott szálak mintákat. A szálmorfológia vizsgálatához pásztázó elektronmikroszkóppal készítek felvételeket. A megfelelő beállítások mellett hatóanyag-tartalmú szálakat állítok elő egy vízben rosszul oldódó hatóanyag kioldódásának javítására. A tervek szerint a hatóanyag-tartalmú szálakon szilárdfázisú analitikai vizsgálatokat végzek röntgen diffrakcióval és differenciális pásztázó kalorimetriával. A hatóanyag-leadás követésére *in vitro* kioldódásvizsgálatokat alkalmazok.

Farkas Rebeka Krisztina

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Diverz viselkedésű tesztkészletek vizsgálata és generálása

Modell alapú fejlesztés során a rendszer és környezetének működését egy, a célnak megfelelő modellezési nyelven írják le, majd a későbbiekben ezen modell segítségével végzik el a szükséges mérnöki munkafolyamatokat, mint helyességellenőrzés, kapacitástervezés, kódgenerálás. Ezekre a feladatokra számos eszköz és algoritmus létezik, azonban az eszközök helyességének és hatékonyságának megbízható felmérése, összehasonlítása általánosságban még nem megoldott. Ez különösen igaz viselkedésmodellekre, ahol a jelenleg rendelkezésre álló teszt- és benchmarkkészletek nem adnak garanciát arra, hogy a tartalmazott modellek egymástól kellő mértékben különböznek, illetve hogy a lehetséges különböző viselkedéseket lefedik, így előfordulhat, hogy a meg nem vizsgált viselkedések által kimutatható hibák és teljesítmény-problémák az ellenőrzések után is rejtve maradnak.

Kutatásom célja módszertant adni annak a vizsgálatára, hogy egy teszt- vagy benchmark készlet mennyire diverz. Ehhez a korábbi publikációkban bemutatott strukturális távolságmetrikákat adaptáltam viselkedésmodellekre: a modelleket előzetesen kiegészítettem bizonyos új elemekkel, amik információt szolgáltatnak a modell viselkedéséről; majd az így kapott modelleken alkalmaztam a viselkedésmetrikákat. A módszert egy elterjedt formalizmuson illusztráltam: Petri-hálóok esetén többek között a P és T-invariánsok szolgáltatnak hasznos információt a modell állapotteréről. A validációhoz a Model Checking Contest adatait használtam fel, amely egy évente megrendezésre kerülő verseny Petri-háló modellekkel dolgozó verifikációs eszközök hatékonyságának összehasonlítására. Kimutattam, hogy a javasolt viselkedésmetrikák által hasonlónak titulált modelleken valóban hasonló hatékonysággal dolgoznak a modellellenőrők. Kutatásom eredményét a Software Engineering and Formal Methods 2020 konferencián tervezem bemutatni.

Fazekas Bálint

Gépészmérnöki Kar

Gép- és Terméktervezés Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

A Mullins-hatás mechanikai modellezése viszkoelasztikus elasztomereknél

Napjainkban az elasztomerek fontos szerepet töltenek be az iparban, köszönhetően a kedvező mechanikai tulajdonságaiknak valamint a nagy energia abszorpciók képességüknek. Ezekre az anyagokra a nagy rugalmas alakváltozások mellett jellemző az időfüggő (viszkózus) viselkedés, továbbá a Mullins-hatás, amely az anyagszerkezeti károsodásból adódóan merevségcsökkenéshez vezet. Ez az összetett anyagi viselkedés az ún. viszko-pszudoelasztikus anyagmodelllel írható le, amely Ogden és Roxburgh által kidolgozott pszudoelasztikus modell és a Prony-sorozat alapuló lineárisan viszkoelasztikus modell összekapcsolásával nyerhető. Az anyagmodell a legtöbb végelem szoftverben rendelkezésre áll, azonban a mérnöki gyakorlatban történő alkalmazása erősen korlátozott, elsősorban az anyagparaméterek meghatározásának nehézségei miatt.

Kutatásom során megvizsgáltam a viszko-pszudoelasztikus anyagmodell paramétereinek lehetséges meghatározási módjait, majd kidolgoztam egy olyan új módszert, amellyel a modellparaméterek mérési eredmények alapján nagy hatékonysággal azonosíthatók. A módszer alapja a konstitutív egyenletben szereplő nemlineáris konvolúciós integrál numerikus megoldása a főbb homogén igénybevételi módokra vonatkozóan (egytengelyű és kéttengelyű húzás/nyomás, tiszta és egyszerű nyírás). A módszer előnye, hogy tetszőleges hiperelasztikus modell, bemenő alakváltozás függvény és károsodási paraméter mellett alkalmazható. Továbbá több igénybevételi mód akár egyidejűleg is figyelembe vehető a paraméterillesztés során. A módszer hatékonyságának bemutatása érdekében egy 40 phr koromtartalmú EPDM gumin egytengelyű ciklikus húzó méréseket végeztem, majd az anyagmodell paramétereit illesztettem a kidolgozott feszültségmegoldások segítségével. A mért és a numerikusan számolt feszültségválaszok összevetése alapján elmondható, hogy a viszko-pszudoelasztikus modell az optimalizált anyagparaméterekkel nagy pontossággal képes leírni a gumi összetett anyagi viselkedését.

Fazekas Máté

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék
Kandó Kálmán Doktori Iskola*

Autonóm járművek állapotbecslési kérdéseinek vizsgálata AI módszerekkel kamera adatok felhasználásával

Az autóipar egyik meghatározó kutatási és fejlesztési területe az autonóm közlekedés. A kezdeti érzékelés és állapotbecslés fontos célkitűzés, hiszen az irányítási funkciók hatékony megoldásai gyakran ezeken alapulnak. Az állapotbecslés gyakorlati megvalósítása viszonylag olcsó és gyakran pontatlan GPS, inerciális mérőegység és kerék enkóderek felhasználásával történik. A teljesen autonóm funkciók megvalósításához azonban pontosabb és robusztusabb eszközök szükségesek. Ezek drágább szenzorokkal megvalósíthatók lennének, azonban ez irreálisan magas költségeket eredményezne. Új kutatási irány a környezetérzékelő szenzorok becslési módszerbe való bevonása. A tervezett kutatás fő célja kamerából származó információk állapotbecslésben való felhasználhatóságának vizsgálata.

Az állapotbecslési eljárások során kritikus feladat az abszolút orientáció pontos meghatározása. Költség-hatékony módon magnetorezisztív alapú magnetométerrel lehetséges a mérés, azonban ez számtalan hibával terhelt. Az irány pontos mérése alapvetően szükséges, hiszen az orientáció a pozíció és sebesség fizikánál, például IMU és GPS alkalmazásával is felhasználásra kerül. Továbbá paraméterbecslési és egyéb járműdinamikai jellemzők vizsgálatánál is kiemelt jelentőségű az orientáció ismerete.

A kamerák autóiipari felhasználása elsősorban az objektumok felismerése szempontjából fontos. Két időpillanat között megfelelően detektált jellemzők megváltozásából dinamikai tulajdonságok is becsülhetők. Egyetlen kamera alapján a sebesség egy ismeretlen skálázó faktorral terhelt, azonban a szenzor két pillanat közötti elfordulása egyértelműen meghatározható mindhárom koordináta irányában. A kutatás során a becslés megvalósíthatósága, pontossága és hibái kerülnek elemzésre. A jellemzők felismerése kritikus és bonyolult feladat, ami a képfeldolgozás témaköre, ezért egy megfelelően kialakított valós mérést használunk fel a kutatásban.

A kutatás célja egy kamera alapú skálázott sebesség és orientáció becslő algoritmus létrehozása, aminek felhasználásával a hagyományosan olcsó eszközökkel megvalósított állapotbecslés hibái kiküszöbölhetőek, a pontosság javítható és a robusztusság garantálható. Ez az algoritmus jól használható más állapotbecslést igénylő kutatási feladatokban is, mint például paraméter- és járműdinamikai jellemzők becslése.

Fehér Krisztina

*Építészmérnöki Kar
Építészettörténeti és Műemléki Tanszék
Csonka Pál Doktori Iskola*

Középkori boltozatok szerkesztésének kutatása 3D felmérési módszerek alkalmazásával

A középkori épületek nemzetközi kutatásában az utóbbi évtizedek komoly módszertani előrelépést jelentettek. A 3D felmérési és modellezési technikák minden eddiginél pontosabb méréseket tesznek lehetővé, és olyan részletek is leképezhetővé válnak, amikre eddig kevésbé figyelt fel a tudomány. Az ÚNKP kutatás során középkori boltozatok geometriai paramétereinek vizsgálata történik konkrét épületpélda és különböző történeti források (tervrajzok és traktátusok) elemzése és összevetése segítségével. A 13. századból Villard de Honnecourt vázlatkönyve, a 15-16. századból Lorenz Lechler Unterweisung című műve, Hans Hammer vázlatkönyve, és a Bécsi Képzőművészeti Akadémián őrzött néhány rajz árulkodik a gótikus boltozatok arányozási technikáiról, építésének praktikáiról. Már a reneszánszhoz szokás sorolni Rodrigo Gil de Hontañón vagy Philibert de l'Orme traktátusát, sőt Joseph Gelabert és Amédée-François Frézier traktátusa a 17-18. századból származnak, mégis rendkívül fontos információkkal szolgálnak a középkori boltozatok szerkesztéséről. Az ÚNKP kutatás során Eugen-Emmanuel Viollet-le-Duc és Robert Willis 19. századi művei is fontos forrásként szolgáltak. Az ezekből nyerhető ismereteket a Zsámbéki Romtemplom és Kőtár 3D felméréssel vettem össze, amelynek 13. és 15. századi boltozati maradványait is elemeztem. A felmérés két módszerrel történt: a romtemplom in situ boltozatait lézershkennerrel, a kőtárban lévő boltozati köveket pedig a részletgazdagság érdekében 3D fotogrammetriával mértem fel. Az elméleti ismeretek és a konkrét példa összevetéséből származó kutatási eredmények elsősorban a hazai építészettörténetben jelentenek módszertani és tartalmi előrelépést, de nemzetközi viszonylatban is relevánsnak mondhatók. Ilyenek a boltozatok formájának, csúcsívek szerkesztésének megértése, a bordaprofilok geometriai szerkesztésének visszakövetkeztetése és a tas-de-charge típusú boltvállképzés elemzése.

Fényes Dániel

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék
Kandó Kálmán Doktori Iskola*

Automatizált járművek robusztus irányítástervezése nagyméretű adathalmazok alapján

Manapság a járműipar egyik legnagyobb kihívása a teljesen automatizált más szóval autonóm járművek fejlesztése és megvalósítása. Ez a feladat számos technológiai terület kooperációját kívánja meg úgy, mint: érzékelés (radar, lidar, kamera technológiák), kommunikáció (V2V, V2X) és az irányítás és rendszerelmélet (a beavatkozások mögött rejlő algoritmusok). Az irányításelméletre különösen nagy felelősség hárul az autonóm járművek üzeme során, hisz a stabil, megbízható, balesetmentes közlekedés biztosítása ezen algoritmusok feladata.

Az irányítási algoritmusok fejlesztésének egy, a mai napig jelentős nehézségét a komplex nemlineáris jellemzőkkel rendelkező rendszerek irányítása rejti. Ilyen rendszerként írhatóak le a járművek mozgásai is, így irányításuk közel sem triviális feladat. Szerencsére az elmúlt évek folyamán az újabb és újabb gépjárművek több és több érzékelőkkel lettek felszerelve, amelyek képesek a járművek bizonyos jellemzőikről és a környezetükről folytonos információt nyújtani. Ezen információk nem csak közvetlenül a jármű fedélzetén használhatóak fel, hanem össze is gyűjthetőek és további elemzések alapját is képezhetik. A megfelelő adatbányászati és gépi tanulási eszközök alkalmazásával ezen adathalmazok felhasználhatóak modellek képzésére, amelyek az említett komplex nemlineáris rendszerek esetén pontosabb leírást adhatnak.

Az előadás során egy ilyen algoritmus kerül bemutatásra, amely a mért adathalmazok segítségével egy LPV (Linear Parameter Varying) alapú modellezési eljárással identifikálja egy adott gépjármű oldalirányú mozgását. Továbbá, bemutatásra kerülnek egy, irányítási algoritmus tervezésének a lépései, amelynek az alapja az említett technikával azonosított modellek.

Végül egy komplex szimulációs példán keresztül bemutatásra kerül a tervezett irányítási algoritmus implementációja, működőképessége és alkalmazhatósága a CarSim szimulációs szoftver környezetben.

Fleit Gábor

*Építőmérnöki Kar
Vízépítési és Vizgazdálkodási Tanszék
Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola*

Akusztikus és képfeldolgozáson alapuló mérési-adatfeldolgozási módszerek fejlesztése hajóhullámok hidromorfológiai hatásának vizsgálatára

A folyami hajózáshoz köthető hullámesemények ideje alatt a partközeli zónákban többszörösére növekedhetnek az áramlási sebességek, mely intenzívebb parterózióhoz, valamint a sekély vízű, alacsony áramlási sebességű élőhelyeket preferáló élőlények (pl. halivadékok, makrogerinctelenek) elsodrásához is vezethet. Az áramlási sebességnövekmények, valamint a megnövekedett turbulencia következtében a partközeli zónában jellemző, finomfrakciójú hordalék keveredik, mely további ökológiai és hidromorfológia következményekkel jár.

A kutatási program célja egy közelmúltban kidolgozott, akusztikus elven működő sebességmérőműszerekre (Acoustic Doppler Velocimetry, ADV) alapozott terepi mérési és adatfeldolgozási módszertan kiegészítése úgy, hogy az a hullámvázakhoz kapcsolódó hordaléktranszport folyamatok számszerű értékelésére is alkalmassá váljon. A kutatás keretein belül hazai és nemzetközi szinten is elsők közt kerül alkalmazásra egy akusztikus elven működő zavarosságmérőműszer (LISST-ABS), melynek nagy időbeli felbontása lehetőséget biztosít a hajóhullámok dinamikus hordalékfelkeverő hatásának részletes és számszerű vizsgálatára.

Párhuzamos, azonos pontban történő ABS és ADV mérések alapján kísérletet tettünk az ADV által rögzített, visszavert akusztikus jelerősség idősorokat indirekt módon felhasználva a pillanatnyi lebegtetett hordaléktöménység számszerűsítésére is. A módszer igazolását követően lehetőség nyílt az azonos mérési térfogatban rögzített, nagy időbeli felbontású áramlási sebesség és hordaléktöménység idősorok koherens elemzésére pusztán az ADV mérések alapján. Az elemzések így elvégezhetők az igazolást megelőző mérési kampányok adatsorai alapján is, ahol ABS mérések még nem álltak rendelkezésre. A különböző hullámesemények idősorainak elemzése rámutatott a hullámvázakhoz köthető, partra merőleges irányú hordaléktranszport folyamatok időbeliségére, valamint az elsődleges és másodlagos hullámok hordalék-szállításban játszott szerepére is.

Gáspár Orsolya

*Építészmérnöki Kar
Szilárdságtani és Tartószerkezeti Tanszék
Csonka Pál Doktori Iskola*

Kupolák geometriai optimalizációja – a jénai (I.) Zeiss-Planetárium eredeti koncepciója

Walther Bauersfeld, a jénai Carl Zeiss AG vezető mérnöke tervezte az 1922-ben megépült első (ideiglenes) jénai planetárium vékony vasbeton kupoláját, annak acél-rácshéj erősítésével együtt, mely az első megépült geodetikus kupolának tekinthető. A később lebontott kupola pontos geometriájáról kevés információ maradt fenn: néhány építés közbeni kép, illetve a tervező Zeiss-archívumban őrzött kéziratok. Bauersfeld az ikozaédert vette alapul a felosztásnál, ebből kiindulva, kissé ad hoc módon, azt a szakirodalom a később Buckminster Fuller által is alkalmazott, az ikozaéder sík lapját szabályos háromszögekre osztó, majd azt gnómiusan a gömbfelületre vetítő eljárással azonosítja. Ezért elkészítettük a kupola Fuller-féle elvi felosztásának 3-D rekonstrukcióját, ami azonban a képeken látható hálózattal rossz egyezést mutatott. A kézirat tanulmányozása során egy részletes számításokkal kísért tervvázlatra került elő, melynek modellje sokkal meggyőzőbb hasonlóságot mutatott a fotókkal. Jelen kutatás keretén belül azonosítottuk a felosztás koncepcióját, mely azonos területű gömbi háromszögek létrehozása volt. Bauersfeld több lehetőséget is megvizsgált, a célja minél egyenletesebb hálózat létrehozása volt. Sikerült igazolni, hogy mérőszámként a leghosszabb és legrövidebb él arányának a felosztás finomítása melletti lehetséges felső korlátját (η_{lim}) használta, ennek leszorítására törekedett az optimalizáció során. A végsőnek tekintett felosztáshoz tartozó határértéket nem találtuk a kéziratban, de a koncepció alapján meghatározható volt: $\eta_{\text{lim}}=1,188$. Ez az érték igazolja Bauersfeld kiváló mérnöki intuícióját: nem pusztán a geodetikus kupola megvalósításával, hanem a felosztás optimalizálására alkalmazott módszerrel, illetve annak eredményével is megelőzte a korát. η_{lim} topológia független elméleti minimumának felső korlátját, mely a meglehetősen közeli, 1,178-as érték, csak évtizedekkel később határozták meg.

Geier Norbert

Gépészmérnöki Kar

Gyártástudomány és -technológia Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Forgácsolt alaksajátosságok mikro- és makrogeometriai vizsgálata egyirányban szénszállal erősített polimer (UD-CFRP) kompozit anyagokban

A szénszállal erősített polimer (CFRP) kompozit anyagot jó fajlagos mechanikai tulajdonságai, jó méretstabilitása és jó korrózióállósága miatt előszeretettel alkalmazzák a „high-tech” iparágak szerkezeti anyagként (repülőgép ipar, hadipar, sportipar, űripár, energiaipar stb.). A gyártók ugyan igyekeznek a CFRP alkatrészeket egy műveletben készre laminálni, azonban a megkövetelt mikro- és makrogeometriai tűrések és az alkalmazott összeszerelési technológiák (szegecseles, csavarozás) miatt sokszor szükségserű ezen anyagok forgácsolása. A CFRP anyagok inhomogén és anizotóp mivolta, továbbá az erősítő szálak forgácsoló szerszámot koptató hatásai miatt nehezen forgácsolhatók. Napjainkban erősen kutatott téma a szénszállal erősített polimer kompozitok forgácsolásoptimalizálása, azzal a céllal, hogy termelékenyebben, fenntarthatóbban és gazdaságosabban lehessen minőségi alaksajátosságokat gyártani. A pályázott kutatásban CFRP anyagok forgácsolása során keletkező mikro- és makrogeometriai hibák vizsgálatát és osztályozását tűztem ki célul, mely kutatási eredményekre alapozva később neurális hálókval lehetne klaszifikálni a jellemző hibákat és ezen alapuló online forgácsolási folyamatfelügyeleti módszert fejleszteni.

Golcs Ádám

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Folyadékmembránban rögzített makrociklus alapú nagy áteresztőképességű enantiomerszeparációs eljárás kidolgozása

Régóta ismert tény, hogy a királis bioaktív vegyületek különböző enantiomerjei eltérő biológiai hatást képesek kiváltani a természetes királis vegyületekkel létesített kölcsönhatásaik útján, ezért a hatósági előírások napjainkban megkövetelik a biogén vegyületek sztereoiszomerjeinek szeparált vizsgálatát. Ugyanakkor a bioaktív anyagok szintézisére irányuló kutatások korai fázisában a származékok minél szélesebb vegyületkörének előállítását célzó eljárások ritkán szolgáltatnak enantiomertiszta termékeket. A tükörképi izomerek elválasztásának problémáját jellemzően az előzetes, specifikus módszerfejlesztésen alapuló királis HPLC technikák, valamint a nagyobb mintamennyiséget igénylő rezolválási eljárások segítségével oldják meg. Bár találhatunk pár szakirodalmi példát membrán alapú, kis mintamennyiség-, energia- és idő igényű enantiomerszeparációt célzó eljárásra, a nagy áteresztőképességű, kisléptékű enantiomerdúsítás problémája nem megoldott.

Kutatócsoportunkban számos alkalommal állítottak elő biogén amin típusú enantiomerekkel szemben jelentős sztereoselektív molekuláris felismerést mutató akridin egységgel rendelkező makrociklusokat, melyeket enantiomerszenzor-, illetve szelektormolekulaként alkalmaztak. Munkánk kapcsán sikerült a korábbi oldatfázisú vizsgálataink során optikailag aktív biogén aminok körében jelentős enantiomerfelismerést mutató makrociklusok lipofil származékait folyadékmembránban rögzíteni és plate-rendszerbe integrálni. Ezt követően vizsgáltuk az amin enantiomerek membránpermeációjának kinetikáját, szerkezet-hatás összefüggéseit, valamint elvégeztük a folyamat fizikokémiai paramétereinek optimalizálását. Vizsgálataink alapján a rögzített királis szelektormolekulák jelenléte enantiomerszelektív membránretenciót eredményezett a polimer plate donor-, illetve akceptor fázisai között, mely lehetővé tette különböző amin-, aminosav-, valamint egyéb neurotranszmitter származékok racém elegyből kiinduló milligrammos léptékű enantiomerdúsítását. A fejlesztett mikroplate-alapú folyadékmembrán-szeparációs eljárás segítségével sikerült megvalósítanunk néhány biogén modellvegyület 4-5 konszekutív membránpermeáció általi jelentős ($ee > 80\%$) enantiomerdúsítását, mely eljárás a későbbiek folyamán könnyedén integrálható automatizált folyadékkezelő, így különböző robotizált HTS-rendszerekbe. Az eljárás kiterjeszhetőségének vizsgálata jelenleg is folyamatban van.

Graics Bence

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Integrációs tesztek generálása kontraktusleírások alapján komponens alapú elosztott rendszerekhez

Napjaink informatikai rendszereinek komplexitása rohamosan nő, emiatt fejlesztéskor egyre nagyobb szerepet kapnak a modellvezérelt paradigmák. Ezek legfontosabb előnye, hogy a modellek nemcsak dokumentálják a rendszerkomponenseket, hanem a rendszer ellenőrzésére is felhasználhatók, illetve kódgenerálással az implementáció is automatikusan származtatható belőlük. Az elkészített rendszermodellek ellenőrzésére formális verifikáció (pl. modellellenőrzés), az implementáció ellenőrzésére pedig modell alapú tesztelés is alkalmazható. A formális verifikációs módszerek jellemzően rosszul skálázódnak, így lehetséges, hogy bizonyos biztonsági követelmények teljesülése formálisan nem igazolható a jelenlegi módszereinkkel. Emellett a rendszer ellenőrzésére jól alkalmazhatók a komponensek viselkedését rögzítő (magas szintű) *kontraktusok*, amelyek alapján komponens tesztek és integrációs tesztek generálhatók, így vizsgálva a megvalósított rendszer helyes működését.

A kutatásom célja olyan nyelvek, algoritmusok és módszerek fejlesztése, amelyek integrációs tesztek generálását támogatják komponens modellek és azok kontraktusleírásai alapján. Korábbi munkám eredményeképp elkészült a Gamma modellező keretrendszer, amely reaktív rendszerek komponens alapú tervezését és ellenőrzését támogatja. További kutatásaim alapját ez a keretrendszer adja.

Elsődleges célom a keretrendszer tervező nyelvének kiterjesztése *kontraktusok definiálásának lehetőségével*, amelyek kompakt formában rögzítik a komponensek viselkedésével kapcsolatos követelményeket. A kontraktusleírást több formalizmussal, állapotgépekkel, deklaratív módon, illetve összetettebb konstrukciókat is támogató szcenárió leíró nyelvvel (üzenet szekvencia diagram - MSC variáns) is lehetővé teszem. Megvizsgálom a kontraktusok kiterjesztésének lehetőségét *adaptív komponensek leírására* is. Az integrációs tesztek szisztematikus generálásához fedettségi metrikákat definiálok, amelyek a tesztekkel „lefedett” modell-, illetve viselkedési elemeket specifikálják. A kontraktusok ellenőrzésére és a *fedettségi metrikák* teljesítéséhez *tesztgeneráló algoritmusokat dolgozok ki*. Az előálló tesztkészlet méretének csökkentése érdekében *teszt optimalizálási algoritmusokat* is megvizsgálok. Az eredményeimet a nyílt forráskódú Gamma keretrendszerben implementálok.

Grivalszki Péter

*Építőmérnöki Kar
Vízépítési és Vizgazdálkodási Tanszék
Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola*

Hidrodinamikai jelenségek kisminta vizsgálata komplex geometriájú szerkezet környezetében

Napjainkban a numerikus szimulációk szerves részét képezik a mérnöki kutatómunkának, azonban gyakran bonyolult felépíteni és validálni olyan modelleket, amelyek komplex geometriájú vízépítési műtárgyak hatásait szolgáltatottak vizsgálni. Egy ilyen partvédőmű az úgynevezett CALTROPE, amely rendkívül összetett hatásmechanizmussal rendelkezik, ennek általános mérnöki módszerekkel való számszerűsítése pedig számos nehézségbe ütközik. A laboratóriumi kisminta-kísérletek lehetőséget biztosítanak a validálásra. Jelen tanulmányban nyílt forráskódú numerikus áramlástan, illetve laboratóriumi módszerek alkalmazási lehetőségeit tárom fel esettanulmány útján. Egy általánosan alkalmazható érzékenységvizsgálatot dolgoztam ki a számítási háló peremillesztésére és térbeli felbontására, majd az eredményeket a sebesség és a turbulencia paramétereinek függvényében elemeztem összevetve a laboratóriumi kismintán végzett mérési adatokkal. A kutatás eredménye egy olyan egyszerűen alkalmazható laborléptékű numerikus apparátus, ami további kutatások alapjául szolgálhat.

Gyenes Zoltán Bálint

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Irányítástechnika és Informatika Tanszék
Villamosmérnöki Tudományok Doktori Iskola*

Reaktív mozgástervezés mobilis robotok számára dinamikus környezetben

A mobilis robotok legfőbb célja, hogy egy kezdeti pozícióból a kívánt célpozícióba eljussanak. A cél megvalósítása nem könnyű feladat az ágens számára, amennyiben a robot munkaterében mozgó akadályok is jelen vannak, mivel a robotnak mozgása során biztosítania kell a saját és környezete épségét is. Ezen mozgás tervezésére szolgálnak a mozgástervező algoritmusok.

Amennyiben az akadályok minden információja kezdetben rendelkezésre áll, akkor globális mozgástervező algoritmusok alkalmazhatóak az ütközésmentes mozgástervezés megvalósítására. Amennyiben csak lokális szenzorinformációk érhetőek el az adott akadályok pozícióját és sebességvektorait illetően, akkor reaktív mozgástervező algoritmusok használhatóak.

A kutatás fő célja olyan valós időben futtatható mozgástervező algoritmusok kifejlesztése és vizsgálata, melyek a számos követelmények alapján szuboptimális megoldást szolgáltatnak különböző típusú mobilis robotok vagy járművek esetén. Kutatásom során a *Velocity Obstacles* reaktív mozgástervező algoritmus alapvető tulajdonságait felhasználva egy olyan mozgástervező algoritmus kifejlesztése a cél, amely a különböző akadályok esetén külön-külön figyelembe tudja venni, hogy az adott akadályról érkezett információ (pl. pozíció, sebesség) mekkora bizonytalansággal rendelkezik, ezt felhasználva választja ki minden mintavételi időegységnyi a robot számára legoptimálisabb sebességvektort a biztonságos célélérés érdekében. Kutatásom során az akadályok érzékelésekor fellépő szenzorbizonytalanságot felhasználva egy másik mozgástervező algoritmust is kifejleszttek, mellyel alapvető KRESZ szabályokat is figyelembe lehet venni. Feltételezhető, hogy a robot vagy jármű környezetének egy részét előre ismeri (pl. álló akadályok helyzetét térkép alapján), míg más akadályokról (pl. más mozgó járművekről) különböző típusú szenzorok segítségével gyűjt információt.

A mozgástervezés eredményét minden esetben szimulációban vizsgálom, a robot és az akadályok mozgásából videót is készítek.

A mozgástervező algoritmus alkalmazható autonóm járművek mozgásának tervezéséhez is, így a jövőben nagyon sok lehetőség nyílt a továbbfejlesztésre.

Haja Dávid

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Távközlési és Médiainformatikai Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Földrajzilag elosztott rendszer tervezése adatintenzív alkalmazások kiszolgálására

A hálózat és a virtualizációs technológiák fejlődésével a már hagyományosnak mondható felhő architektúrát felváltja egy új paradigma, a peremszámítás (edge computing), amely a hálózat szélein (a felhasználókhöz közel) helyez el és használ fel számítási erőforrásokat. A peremszámítás lehetőséget nyújt az olyan meglévő és jövőbeli szolgáltatásoknak, amelyek ki tudják használni a földrajzi szétterültségből származó előnyöket. Ezen szolgáltatásokat nyújtó számítási rendszer elvárt képességei közé tartozik, hogy képes legyen a körülöttünk lévő hatalmas mennyiségű adat hatékony feldolgozására, valamint megoldást nyújtson az elosztottságból fakadó nehézségekre. Világos ugyanis, hogy az új paradigma használata és a vele együtt járó, korábban nem látott szolgáltatások, új, megoldandó problémákat vonnak maguk után. Ezen problémák közé tartozik például a hálózati szempontból vett távolság és az egyes hálózati karakterisztikák folytonos változása a földrajzilag szétterült számítási erőforrások között.

A számítási és hálózati erőforrások menedzselésére számos megoldás megtalálható a világon, amelyek közül az egyik legelterjedtebb a Google által készített Kubernetes. Az elérhető erőforrásmenedzselők már bizonyítottan hatékonyan ütemezik a számítási erőforrásokat egy központosított adatközpontban, ahol a hálózati kihívások mértéke minimális. Azonban ezek a megoldások még nem készek egy földrajzilag elosztott topológiára, ahol a hálózat szerepe nagymértékben befolyásolja az alkalmazások teljesítményét. Kutatásom célja a földrajzi elosztottságból származó hálózati késleltetéssel összefüggő nehézségek realizálása a peremszámítási paradigmában, és egy lehetséges megoldás nyújtása azon problémákra, amelyek megnehezítik az alkalmazásokat segítő erőforrások hatékony menedzselését. Munkám során kiegészítem a Kubernetes ütemező komponensét a saját algoritmusommal, amely képes figyelembe venni a hálózati topológiában megjelenő késleltetés értékeit és az alkalmazások komponenseinek hálózati késleltetésre irányuló követelményeit az ütemezésük során, ezzel elősegítve a telepítendő alkalmazások működését. A megoldásom továbbá biztosítja az alkalmazások magas rendelkezésre állását, a késleltetési követelményeket megtartva, fizikai csomópont meghibásodása esetén is. Mindezekon felül egy új, dinamikus topológia klaszterező metódust is bemutatok, amely az alkalmazások késleltetés követelményét alapul véve lehetővé teszi akár az egész világra kiterjedő topológián az alkalmazás komponensek ütemezését.

Hajdu Ákos

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Hatékony ellenőrzési módszerek okosszerződésekhez

Decentralizált tranzakciós főkönyvek megvalósításának egyik egyre elterjedtebb módja a blokklánc-alapú rendszerek használata. Az Ethereum egy olyan platform, amely a tranzakciók rögzítése mellett végrehajtható kód - ún. okosszerződések - tárolását is lehetővé teszi. Az okosszerződés egy olyan program, amely adatváltozókat tárolhat a blokkláncon és függvényeket definiálhat, amelyek tranzakcióként végrehajtva az adatváltozókon dolgozhatnak és más szerződésekkel léphetnek interakcióba.

Mint minden programban, az okosszerződésekben is lehetnek hibák, amelyek komoly anyagi károkat okozhatnak, ugyanis a szerződések gyakran kriptovalutákat vagy más anyagi javakat kezelnek. A hibák korai detektálásának egy eszköze lehet a formális verifikáció (például statikus analízis vagy modellellenőrzés). A formális verifikáció használatához azonban az okosszerződések végrehajtási szemantikáját precízen kell definiálni. Az Ethereum platform esetén a legelterjedtebb okosszerződés nyelv a Solidity, amelynek bizonyos aspektusait már tanulmányozták, de a memóriamodell szemantikájára még nincs részletes és hatékony formalizálás.

A Solidity nyelv memóriamodelljében számos szokatlan és nemtriviális viselkedés található meg, amely könnyen hibákhoz vezethet. Az okosszerződések kétfajta memóriaterülethez férnek hozzá: egyrészt a blokklánc állapotát képező permanens tárhoz (adatváltozók), másrészt pedig a tranzakciók végrehajtása során egy lokális, tranziens memóriához (függvények). A tranziens memória nagyrészt szokásos heap szemantikájú, a permanens tár viszont tisztán érték szemantikával bír, de lokális környezetben megenged mutatókat. A heap és érték szemantikák keverése és interakciója miatt a memóriamodell formalizálása számos kihívást támaszt. Jelen munkában a memóriamodell logikai megoldók nyelvén kerül formalizálásra, amely precíz, hatékony és jól automatizálható. A formalizálás számos tesztetesen keresztül kerül demonstrálásra és összehasonlításra más Solidity analízis eszközökkel.

Hegedűs Tamás

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék
Kandó Kálmán Doktori Iskola*

Autonóm járművek előzési kérdéseinek vizsgálata neurális hálók alkalmazásával

Az utóbbi években az autonóm járművekhez kapcsolódó fejlesztések és kutatások igen nagy figyelemnek örvendtek. A végső cél a járművek teljes körű automatizálása, ami azt jelenti, hogy nem szükséges emberi beavatkozás a jármű irányítása során. A probléma igen sok területre bontható. A kutatási területem a járművek döntéshozó és irányító rétegeire terjed ki. Jelen kutatásban is az említett területtel foglalkoztam, ahol egy döntéshozó algoritmust került kidolgozásra. Több kutatás foglalkozik ezen területtel, azonban a legtöbb esetben a döntéshozatali, illetve irányító réteg egymástól elkülönítve, hierarchikusan helyezkednek el. Az általam kidolgozott algoritmus tervezése során az egyik fő cél, a két említett réteg egymásba ágyazása volt. Ezen döntéshozatali réteg bizonyos információkat felhasznál a trajektória tervező réteg paramétereitől, így nem csak a biztonságos manőver megválasztása a cél, hanem egyúttal a járműben tartózkodók kényelmi szempontjai is figyelembe lettek véve. Az így kidolgozott algoritmus képes egyszerre több lehetséges trajektóriáról információval szolgálni és kiválasztani az optimálisat. Fontos megjegyezni, hogy ez egy igen bonyolult optimalizálási problémára vezethető vissza amit valós időben nem lehet megoldani. Ezen probléma megoldására neurális hálóval lett az algoritmus kiegészítve, így csökkentve a kiértékelési időt. A kutatás során létrehozott algoritmus CarMaker dinamikai szoftver segítségével tesztelésre került, ahol a definiált forgalmi szituációt biztonsággal megoldotta, és a járművet végigvezette az előzetesen meghatározott trajektória mentén.

Henyecz Réka

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Rézkatalizált foszfor-szén keresztkapcsolási reakciók tanulmányozása

A kutatási terv teljesítése által részletes képet kaphattunk a könnyen megvalósítható és környezetbarát „ligandummentes” foszfor-szén keresztkapcsolási reakciók természetéről.

Először, elvégeztük aril-halogenidek rézkatalizált kapcsolási reakcióját $>P(O)H$ vegyületekkel a hagyományosan alkalmazott N -ligandumok hozzáadása nélkül, mikrohullámú (MW) körülmények között. Az átalakítások optimalizálása során különböző rézforrásokat (Cu^I , Cu^{II} -sókat és Cu^0 port), bázisokat és oldószereket próbálunk ki, valamint a hőmérsékletet és a reakcióidő változtatásának hatását is megvizsgáltuk. Megállapítottuk, hogy rézkatalizátorral a jódbenzol és diarilfoszfin-oxidok reakciója magas hőmérsékleten (150-165 °C) és viszonylag hosszú reakcióidő után (3-4 óra) játszódik le. Tehát, a rézkatalízis csupán reakcióképesebb vegyületek foszforilezése esetén lehet a palládium, vagy nikkelkatalizált kapcsolási reakciók jó alternatívája.

Emiatt a különböző aromás szubsztrátumok reaktivitását Pd-katalizált P–C kapcsolási reakciókban hasonlítottuk össze. A reakciókörülmények változtatása, illetve kompetitív reakciók végrehajtása után a $I>Br>OTf$ reakcióképességi sorrend rajzolódott ki. A brómbenzol foszforilezése egy ún. indukciós periódus után játszódott le, ami $Pd(OAc)_2$ -ből és a $>P(O)H$ vegyületből képződő aktív katalizátor kialakulására szolgált. A bróm-szubsztrátum reaktivitását szervesetlen adalékanyag (kálium-jodid) hozzáadásával tudtuk növelni. Végül pedig, méretnöveléssel a $Pd(OAc)_2$ katalizátor mennyiségének csökkentése mellett a P–C kapcsolt terméket grammos tételben is elő tudtuk állítani.

Megjegyzendő, hogy az előállított termékek biológiai aktivitásának mérése jelenleg is folyamatban van.

Hidegh Gyöngyvér

Gépészmérnöki Kar

Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Modell-tüzelőanyagok akusztikai és kemilumineszcens jelének statisztikai vizsgálata előkeveréses turbulens tüzelés esetén

A kókusz-metil-észter (CME) zsírsav összetétele arra enged következtetni, hogy érdemes a gázolaj alternatívájaként, illetve adalékaként foglalkozni vele. A rendelkezésünkre álló optikai és akusztikai mérőeszközök egy spektroszkóp és egy fotoelektron-sokszorozó (PMT), illetve egy mikrofon volt. A mérések során a tiszta gázolajon és CME-n kívül ezek különböző arányú keverékét is vizsgáltuk. Minden vizsgált tüzelőanyag (és keverék) esetében öt különböző porlasztási túlnyomáson (p_g) és levegő-előmelegítési hőmérsékleten (T_a) történtek a mérések. A spektroszkópot és a PMT-t fix pozícióban rögzítettük, az égőtér ugyan azon pontjára néztek, közvetlenül a keverőcső fölé.

A legalacsonyabb levegő-előmelegítési hőmérséklet (150 °C) a CME, és a 75 V/V\% CME-et és 25 V/V\% gázolajat tartalmazó keverék esetében nem volt elegendő ahhoz, hogy megfelelő párolgás és égőképes levegő-tüzelőanyag keverék jöjjön létre. T_a -t 50 °C -onként emeltük 350 °C -ig, miközben minden hőmérsékleten $p_g = 0,3\text{--}0,9$ bart állítottunk be $0,15$ -os lépésközzel. Az így adódó mérési pontokban három különböző üzemállapotot figyelhettünk meg a lángalak tekintetében. Kis T_a -n és nagy p_g -n egyenes lángalakot, míg nagy T_a -n levált a láng a keverőcső szájáról és az égőtér egy adott keresztmetszetét kitöltő térfogati égés jött létre. Előfordult, hogy olyan paraméterek kerültek beállításra, hogy egyik lángalak sem tudott stabilizálódni, ekkor egy átmeneti égési tartományt tudtunk definiálni, a lángalak csapkodó volt. A fixen rögzített optikai mérőeszközökkel csak az egyenes alakú lángok vizsgálatára volt lehetőség. Az égőtér tetején kialakított egyik szenzorfoglatba bevezetett füstgázmintavevő, és –hőmérő, illetve a mikrofon minden beállításban értékelhető adatokat rögzített.

A kemilumineszcens jelben a szénhidrogén lángokra leginkább jellemző OH^* , CH^* és C_2^* közül az OH^* rendre megtalálható volt a spektrumokban, azonban a CH és C_2 gyökökkel nagyrészt nem volt jellemezhető az égés. A füstgázmintavevő a CO és NO koncentrációkat rögzítette. A CO koncentráció minden beállításban nagyon alacsony volt ($7\text{--}45\text{ ppm}$). Az NO kibocsátás egyenes lángok esetén magas volt ($80\text{--}135\text{ ppm}$), míg térfogati égés esetén kifejezetten alacsony ($< 20\text{ ppm}$).

A PMT és a mikrofon jelek értékelésének első lépéseként transzformáltuk a jeleket frekvenciatartományba, és az így előállított spektrogramokat elemeztük. Mindkét mérőeszköz esetében a spektrogramokból egyértelműen következtethetünk az aktuális lángalakra. A spektrogramokon megjelennek kiugró frekvenciák, ezek fizikai jellemzőkkel való beazonosításával és értékelésével a későbbiekben foglalkozunk.

A hőfelszabadulás és az akusztikai hullámok kapcsolatát a Rayleigh-kritérium írja le. Ha a két jel fázisban van, az nem kívánt eseményekhez vezethet. A PMT és mikrofon jelek korrelációs vizsgálatával megállapítható, van-e köztük lineáris kapcsolat. Minden egyenes lánggal jellemezhető üzemállapotban a korrelációs együttható értéke közel 0, tehát a két jel korrelálatlan.

Hortay Olivér

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Környezetgazdaságtan Tanszék
Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola*

Likviditás mérése a villamosenergia-tőzsdén

Míg a tőkepiacok likviditási mutatóinak strukturálási lehetőségeiről és azok magyarázókéességéről széleskörű elméleti és empirikus szakirodalom áll rendelkezésre, a nyersanyagpiacok – és különösen a több szempontból speciálisnak tekinthető villamosenergia-piacok – likviditásával viszonylag csekély számú szerző foglalkozik. Azáltal, hogy egyre több ország liberalizálja villamosenergia-piacait és egyre több szereplő helyezi át pozícióit a bilaterális ügyletekről szervezett platformokra, a piacok hatékonysága és átláthatósága nő. A tapasztalat azonban azt mutatja, hogy a hagyományosan legnagyobb volumet bonyolító másnapi villamosenergia-piacokon is csaknem tízszer akkora volatilitás figyelhető meg, mint a részvénypiacokon. A nagy volatilitást részben az óriási ártüskék okozzák. Fontos kérdés, hogy ez mennyiben köszönhető kereskedési tökéletlenségeknek és mennyiben a többi jól ismert termékspecifikumnak (például tárolási nehézségek, növekvő megújuló kapacitások, erős hőmérsékletfüggés, műszaki sajátosságok, nemzetközi piacok összekapcsoltsága stb.)

A tőkepiacokkal és a határidős nyersanyagpiacok többségével szemben a másnapi villamosenergia-piacon nem folytonos a kereskedés, hanem napi aukciók vannak, így a hagyományos tőkepiaci likviditásmutatók többsége nem, vagy csak módosítással alkalmazható. Jelen kutatás a 2014 és 2018 közötti magyar másnapi villamosenergia-aukciók ajánlati görbéire számítja ki a hagyományos és alternatív likviditásmutatókat, majd egy logit modellben vizsgálja, hogy azok mennyiben magyarázzák az ártüskék kialakulását. Az eredmények alapján több vizsgált mutató jól magyarázza a szélsőségesen magas és alacsony árakat.

A kutatás fő újdonsága, hogy elsőként vizsgálja a magyar villamosenergia-tőzsde ajánlati görbéinek jellemzőit. Emellett fontos újítás, hogy összehasonlítja a görbék jellemzőire vonatkozó mutatók magyarázóerejét, ami fontos addicionális információt jelenthet az előrejelzési modellek további fejlesztéséhez.

Horváth Dániel

Gépészmérnöki Kar

Épületgépészeti és Gépészeti Eljárástechnika Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Szemcsés anyagalmaz diszkrételes szimulációs modelljének fejlesztése

Napjainkban már elfogadott és elterjedt módszer a tervezési, üzemeltetési és kutatási folyamatok numerikus szimulációkkal történő támogatása. Szemcsés anyagalmazok mozgásának modellezésére alkalmas eljárás a diszkrételes módszer (DEM), amely mikromechanikai szinten, diszkrét elemekből építi fel az szemcsealmazt. A DEM-en belül számos, a szemcsék közötti ütközéseket és különböző kapcsolatokat leíró, úgynevezett szemcsekapcsolati modell létezik. Az ütközések modellezhetőek különböző típusú rugókkal és viszkózus csillapításokkal, míg a szemcsék felületi nedvességéből létrejövő kohéziós erők például kötésekkel, vagy folyadékhidakkal. A hő- és anyagátadás szempontjából összetettebb művelet esetén, mint például szárítási folyamatok modellezésénél célszerű a kohéziós erők pontosabb leírása. A folyadékhidak a szemcsék egymáshoz viszonyított távolságának függvényében változó nagyságú erőket biztosítanak a szemcsék között és egy kritikus szakadási távolság esetén szakadnak el.

A szakirodalomban számos folyadékhíd egyenlet létezik, amelyeket analitikus módon, vagy a Young-Laplace egyenletből numerikus módon, illetve képanalízis alkalmazásával hoztak létre. A kutatók, főképp kettő darab gömb alakú szemcse közötti folyadékhidat jellemezték, viszont halmazszinten kevesen vizsgálták a létrehozott matematikai egyenleteket. Így kutatásom egy DEM szemcsekapcsolati modell fejlesztésével foglalkozik. Első lépésként az ütközéseket leíró szemcsekapcsolati rész matematikai háttere került kidolgozásra szakirodalmak alapján, majd az egyenletrendszert C++ nyelvre átírva egy nyílt forráskódú DEM szoftverbe implementáltam. A létrehozott szemcsekapcsolati modellel direkt nyíródobozos, rézsűszög és keverés szimulációkat végeztem, amelyeket laboratóriumi mérésekkel is validáltam. A numerikus szimulációk során fontos tényező a szimulációs időigény. A szakirodalmak alapján bevett szokás a szemcsék méretének növelése, így a validálásokat különböző szemcseméretű halmazokra is elvégeztem. Meghatározásra került egy maximális szemcseméret, amely felett már csak több mikromechanikai paraméter változtatásával modellezhető megfelelő pontossággal az egyes laboratóriumi mérések. Ezután összegyűjtöttem és rendszereztem a szakirodalmi folyadékhíd egyenleteket, amelyeket szintén beépítettem a DEM szoftverbe. Ezeket az egyenleteket hasonlítottam össze két szemcse kohéziójának vizsgálatával, több szakadási típus esetén. A kapott erő–szemcsetávolság diagramokon megfigyelhető, hogy a különböző egyenletek közel azonos jellegű függvényt hoztak létre. Végül kidolgoztam egy táblázat, amely összefoglalja a folyadékhíd egyenletekhez tartozó, szakirodalom által validált mérési tartományokat. Továbbá a táblázat tartalmazza, hogy a folyadékhíd egyenletek mely szakadási távolságot leíró egyenletekkel használhatóak.

Horváth Flóra Diána

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Izotaktikus polipropilén célzott szerkezetmódosítása szintetikus gócképzők alkalmazásával

Az izotaktikus polipropilén (iPP) napjaink egyik legnagyobb mennyiségben előállított és felhasznált polimere. Ennek oka – a kitűnő ár/érték aránya mellett – az, hogy tulajdonságai adalékanyagok hozzáadásával vagy társítással széles tartományban változtathatók az elérendő felhasználási célnak megfelelően. Kutatásom fókuszában az iPP kristályszerkezetének gócképző adalékokkal való módosítása, valamint a szerkezet-tulajdonság összefüggések felderítése áll.

Munkám során egy olyan, N,N'-diciklohexil-dikarbonsavamidokból álló vegyületcsalád előállításával és gócképző hatásának jellemzésével foglalkoztam, melynek tagjai egymástól az amid-csoportok között elhelyezkedő szénlánc hosszában térnek el. Az ösztöndíjas időszak alatt a vegyületcsalád három tagjának szintézisét és jellemzését tudtam sikeresen végrehajtani, ezek közül az N,N'-diciklohexil-pimelinsavamidot ezt megelőzően a kutatócsoportban még nem állítottuk elő, míg a másik két anyag (N,N'-diciklohexil-parafasavamid és N,N'-diciklohexil-szebacinsavamid) korábbi kísérleteink során hatékonynak bizonyult, így ezek esetén a részletesebb vizsgálatok elvégzése volt a célom.

Az ösztöndíjas időszak előtt és alatt elvégzett kísérleti munka eredményeit összefoglalva elmondható, hogy a szintézisek során a kívánt termékeket kaptam megfelelő tisztaságban, amit FTIR és ¹³C-NMR módszerekkel bizonyítottam. A reakciótermékek olvadási és bomlási hőmérséklete meghaladja a polimer feldolgozási hőmérsékletét, így elméletileg alkalmasak arra, hogy iPP-ben gócképzőként alkalmazhatóak legyenek. Hatékonyságukat a kristályosodási csúcshőmérséklettel jellemeztem, amelyet DSC-vel határoztam meg. A vegyületcsalád összes tagja mutatott kisebb-nagyobb mértékű gócképző hatást iPP-ben, de a fentebb említett két anyag bizonyult különösen hatékonynak, ezek emelték meg számottevő mértékben a polimer kristályosodási csúcshőmérsékletét. Ez a két anyag duális gócképző hatással bír, ugyanis jelenlétük – az α -iPP képződése mellett – elősegítette az iPP β -módosulatának megjelenését is, melynek köszönhetően az optimális koncentráció-tartományban (2500 ppm körül) a polimer ütésállósága a me-revség csökkenése nélkül növekedett. A szerkezetvizsgálatok (POM, SEM) során egy különleges, elágazó kristályszerkezetet figyeltem meg a mintákban, amely kisebb mértékben szintén hozzájárulhatott az ütésállóság növekedéséhez.

Hubay Csanád Árpád

Gépészmérnöki Kar

Áramlástan Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Carleman linearizáció alkalmazása mérnöki problémákra

A tudomány minden területén találkozhatunk nemlineáris jelenségekkel. Ilyenek például a dobhártyánk és hangszálaink rezgése, a populációdinamikai és közgazdasági modellek, és gépészmérnöki problémát is említve a szárnyrezgések és szerszámgéprezgések. Mindezeket a jelenségeket nemlineáris differenciálegyenletek írják le, melyeknek nem minden esetben létezik zárt alakú megoldása. Ezt kiküszöbölve a nemlineáris differenciálegyenletek megoldását linearizálással közelíthetjük.

Az ún. Carleman linearizáció segítségével egy nemlineáris autonóm differenciálegyenletet beágyazhatunk egy végtelen számú közönséges lineáris differenciálegyenletből álló egyenletrendszerbe. A lineáris differenciálegyenlet rendszer megoldását pedig zárt alakban ki tudjuk fejezni.

A kutatás első felében a Carleman linearizációval kapott rendszer lineáris algebrai tulajdonságait használtuk fel nemhiperbolikus egyensúlyi helyzetek kvalitatív tulajdonságainak meghatározása. Nemhiperbolikus egyensúlyi helyzetről beszélünk például az ún. Hopf-bifurkáció bekövetkeztekor, azaz a nemlineáris rendszer dinamikus stabilitásvesztésének esetén. A Hopf-bifurkáció eredményeként a rendszer határciklus oszcillációba kezd az egyensúlyi helyzet körül.

A Hopf-bifurkációnak két fajtája van, szuper-és szubkritikus. Mérnöki gyakorlatban a szubkritikus bifurkáció nagy veszélyt jelent, mivel a nagy amplitúdójú rezgések az elszenvedő szerkezet tönkremeneteléhez vezethetnek. Hopf-bifurkáció kritikalitását (fajtáját) az ún. Poincaré-Ljapunov konstansok előjeléből tudjuk megállapítani.

A Carleman linearizációval kapott Carleman mátrix magtér dimenziója kapcsolatban áll a Poincaré-Ljapunov konstansok értékével (egyenlőek zérussal vagy nem). Az összefüggések bizonyítására felhasználtuk klasszikus normál forma elméletet és a Fredholm alternatívát.

A kutatás második felében nemlineáris rezgőrendszerek periódusidejét vizsgáltuk. A rezgőrendszerek tervezésénél nagy szerepet játszik a rendszer periódusideje.

A periódusidő számítására alkottunk meg egy rekurzív, mások által is könnyen használható és programozható képletet. A képlet levezetéséhez felhasználtuk az Implicit függvény tételt és a kidolgozott példákban Carleman linearizációt alkalmaztunk.

Huzsvár Tamás

Gépészmérnöki Kar

Hidrodinamikai Rendszerek Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Ivóvízhálózatok robusztusságának növelése a hálózatok szegmensgráf struktúrájának optimalizációja által

Napjaink fejlett víziközmű hálózatai igen heterogén szerkezetűek és komplexek. Ez annak köszönhető, hogy e hálózatok az elmúlt több mint száz év során kisebb részhálózatok összekapcsolásából jöttek létre. E strukturális sajátosság okán, majdnem minden régióban találhatóak olyan hálózatok, ahol a fogyasztók nyomásingadozásokat, a szolgáltatók pedig üzemviteli nehézségeket tapasztalnak a hálózat működtetése során.

Jelen kutatás tárgyát e hálózati strukturális sajátosságok feltérképezése és hidraulikai jelentőségének megértése, valamint az ezen kapcsolatok alapján történő hálózati üzemviteli jellemzők robusztusságának növelési lehetőségeinek feltérképezése jelenti. E cél eléréséhez először a rendelkezésre álló valódi ivóvízhálózatok csomópont és ágelem specifikus hidraulikus jellemzőinek viselkedését vizsgáltuk a topológiai módosítások függvényében. E vizsgálatok kiemelték a csomóponti lokális nyomásérzékenység jelentőségét és rámutattak arra, hogy e mennyiség egyértelműen alkalmas azon hálózati egységek, zónák azonosítására, ahol kapacitási gondok jelentkeznek és lehetővé teszi azon cső átkötések kiválasztását, melyek e kapacitási szűkösseget a lehető leghatékonyabban enyhíti. Ezt követően a további vizsgálatok tárgyát a hálózatok szegmensgráf reprezentációjának – az ivóvízhálózatok legkisebb kiszakaszolható egységei és az egyes ilyen csoportokat egymáshoz kötő tolózárak rendszere – vizsgálata jelentette. E vizsgálati forma az egyes elemek és csomópontok helyett, a hálózati egységek vizsgálatát tette lehetővé. Ennek köszönhetően pedig, vizsgálhatóvá vált a hálózat csőtörések esetén bekövetkező viselkedése, és elemezhetővé a hálózatok strukturális robusztussága e károsodásokkal szemben. Így bebizonyosodott, hogy ezen mérőszámok nem csupán lehetővé teszik azon kritikus szegmensek azonosítását, melyek kiesése esetén a hálózat kataklizma szerű funkcióvesztése következik be, de azokat is melyek kiesése csupán a felhasználói igénykielégítésben okoz jelentős nehézséget.

Iványi Tamás

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Menedzsment és Vállalkozásgazdaságtan Tanszék
Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola*

Döntési folyamat vizsgálata a fesztiválturizmusban

Az elmúlt években az Y és a Z generáció számos tagja számára a nyári programjaik és utazásaik tervezése során a zenei, különösen a könnyűzenei fesztiválok központi helyet foglalnak el. A többnapos programok a fiatalok számára komoly anyagi kiadást jelentenek, így a döntési folyamatban számos faktort vesznek figyelembe és több forrásból is tájékozódnak. Az ÚNKP kutatás és az összefoglaló előadás célja, hogy megvizsgálja a fesztiválturizmus fogyasztóinak vásárlási és döntési folyamatát az információforrások és a különböző motivációk fontosságának szemszögéből. A szakirodalmi áttekintés mellett a kutatás során a korábbi években (2016-2018 között) és egy a kutatási időszak alatt lekérdezett kvantitatív (kérdőíves) megkérdezés eredményei kerülnek bemutatásra. Ez az időtartam longitudinális összehasonlításra is lehetőséget biztosít a Z generáció szokásait illetően. A kutatás vizsgálja az online információforrások használatát, a csoportbefolyásolás és a közösségi média jelentőségét, illetve a fesztiválok jellemzőit is.

A feltáró kutatás eredményeként elmondható, hogy a hagyományos turisztikai utazásokhoz (nyaralások, üdülések, városnézések) viszonyítva a fesztiválturizmus esetében a döntési fázis során a közösségi média, az ismerősök, a barátok befolyásoló hatása sokkal jelentősebb. Továbbá kiemelhető, hogy a zenei fesztiválok esetében a döntési fázisban a program és az előadók mellett kiemelten fontos tényezőként jelennek meg a társaság, a barátokkal való együttlét, az atmoszféra és a jó ár/érték arány is.

Az egyes csatornák fontosságát vizsgálva a kutatás során hierarchikus klaszteranalízist használva három fogyasztói csoportot sikerült beazonosítani: (1) a hagyományos böngészők csoportját, akik számára leginkább a hivatalos weboldalak és a keresőmotorok nyújtják az információkat, (2) a tapasztalatokra építők csoportját, akik a hagyományos böngészők forrásai mellett mások és saját múltbeli tapasztalataikra is jelentősen építenek, illetve (3) a közösségi média figyelőinek csoportját, akik a hagyományos böngészők és a tapasztalatokra építők forrásai mellett a közösségi média platformokról is számos információt gyűjtenek. A különböző események, fesztiválok szervezőinek különösen fontos megismerni a látogatóik összetételét az előbb ismerttetett csoportok alapján. A közösségi média egy hatékony információforrás lehet mindenki számára. Azonban a (2) és különösen az (1) csoportba tartozókat meg kell győzni a közösségi média platformok előnyeiről. Továbbá az összes csoport tagjai számára fontos az a kommunikációs üzenet, hogy ne csak átéljék az élményeket, hanem azokat osszák is meg. A közösségi média platformok csak ilyen módon tudnak fenntarthatóan hatékony információforrásként szolgálni a döntési folyamatban.

Jáger Bence

Építőmérnöki Kar

Hidak és Szerkezetek Tanszék

Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola

Acél trapézlemez-gerincű gerendák kifordulási ellenállásának vizsgálata, méretezési háttér fejlesztése

Az **acél trapézlemez-gerincű tartók** keresztmetszeti szintű lokális stabilitási és kölcsönhatásos viselkedése az acél anyag felhasználásának tekintetében kedvezőbb, mint a hagyományos síklemez-gerincű I-tartóké. Továbbá az acél trapézlemez-gerincű tartók **elemszintű stabilitási viselkedése** is kedvezőbben alakul, mint a hagyományos síklemez-gerincű tartók esetében. A nemzetközi és európai szabványok, ugyanakkor, nem adnak ajánlást az említett stabilitásvesztési módok figyelembevételére. Keresztmetszeti szintű vizsgálatokra a szakirodalomban már fellelhető kísérleti, numerikus és analitikus vizsgálatok alapján kidolgozott méretezési ajánlások, ugyanakkor, az elemszintű vizsgálatokkal csak nagyon csekély számú kutatás foglalkozott. Ezért a kutatási program célja az elemszintű stabilitási viselkedés vizsgálata és méretezési háttér fejlesztése.

A kutatások során részletes kiértékelésre kerül az a kísérleti program, melyben acél trapézlemez-gerincű gerendák kifordulási viselkedését vizsgáltam. A kísérletek kiértékelését fejlett numerikus szimulációk támogatásával is végrehajtom. A méretezés fejlesztési trendek azt mutatják, hogy a fejlett végeselemes modell alapú tervezés az egyre komplexebb szerkezetek alkalmazásával egyre inkább előtérbe kerül. Ennek támogatására egy fejlett numerikus modell kidolgozása szükséges, mely figyelembe tudja venni a valós szerkezet nemlineáris viselkedését és gyártásából származó tökéletlenségeit. A tökéletlenség milyenség és mérték alkalmazásának kulcsfontosságú szerepe van a virtuális modellen számított ellenállásra. A kísérleti és numerikus vizsgálatok eredményeként kifejlesztésre kerül egy új **hagyományos méretezési eljárás**, valamint egy **fejlett numerikus modell alapú méretezési eljárás** is.

Keglevich András

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Daganatellenes hatású Vinca alkaloid hibridek előállítása

Az ÚNKP pályázatomban kapcsolódó kutatási tevékenységemet az Alkaloidkémiai Kutatócsoportban végzem Dr. Hazai László vezetésével, ahol a rózsás meténg nevű növényből izolálható *Vinca* alkaloidok fejlesztésével foglalkozom. Ezen természetes vegyületcsalád néhány képviselője napjainkban is használt rákellenes szer, azonban súlyos mellékhatásaik vannak.

Munkám során a modern gyógyszerkutatásban is elterjedt hibridmolekulák szintézisével foglalkozom, amelyek alatt természetes és/vagy (fél)szintetikus vegyületek kombinációit értjük. A hibridek nagy előnye, hogy kettő, vagy több farmakofór (hatáshordozó) egység alakítható ki egy molekulán belül. Mindezek alapján olyan új *Vinca* hibrideket próbálok előállítani, amelyek hatásosabbak és/vagy kevésbé toxikusak, mint a jelenleg piacon lévő hasonló szerkezetű hatóanyagok. Alapvető céljaim közé tartozik a hibridmolekulákhoz vezető szintézisek kidolgozása és a kísérletek elvégzése, illetve a kapott vegyületek daganatellenes hatásának vizsgálata (kooperációs partnerek: National Institutes of Health, USA, Szegedi Tudományegyetem) és szerkezetük alátámasztása NMR-rel és MS-sel. Az NMR és MS spektrumok felvételét és értékelését a Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási Osztálya végzi.

A *Vinca* vegyületcsaládból kiemelten foglalkozom a monomer vindolinnal, amely önmagában nem citotoxikus, viszont információt adhat a tumorellenes dimer alkaloidok (vinblasztin, vinkrisztin) várható kémiai viselkedéséről. Aktuálisan szintetikus farmakofórok hatását vizsgálom, és mostanra sikeresen állítottam elő morfolinnal, piperazinnal, illetve N-metilpiperazinnal kapcsolt vindolinszármazékokat. Továbbá szintetizáltam már egy N-metilpiperazinnal kapcsolt vinblasztin-származékokat is. A biológiai vizsgálatok folyamatban vannak, az eddigi eredmények biztatóak, és azt mutatják, hogy a vindolin is válhat potenciálisan rákellenes szerré hibrid formában. Lehetőség szerint további vizsgálatokat tervezek végezni más szintetikus farmakofórokkal is. Az ÚNKP projekt végére az új vegyületek előállításán és azonosításán túl szeretnék egyértelmű képet kapni a szerkezet-hatás összefüggésekről is.

Kemény Alexandra

Gépészmérnöki Kar

Anyagtudomány és Technológia Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Fémhátrixú kompozit szerkezetek fárasztóvizsgálata

A fémhabok olyan cellás (nyitott vagy zárt) szerkezetű anyagok, amelyek nagy fajlagos energiaeinyelő képességgel, valamint a – kontinuum anyaghoz képest – kisebb sűrűséggel rendelkeznek. Ezt a tulajdonság együttest kihasználva ezek az anyagok megoldást nyújthatnak az iparban jelenlévő és a tömegcsökkentést célzó igény kielégítésére. A zártcellás fémhabok egy speciális típusa az úgynevezett szintaktikus fémhab, amelyben a cellákat egy második fázis hozza létre, ezek leggyakrabban közel szabályos elhelyezkedésű gömbhéjak. Kutatásom során építőipari expandált perlittel töltött ZA27 cink-alumínium mátrixú fémhabok fárasztóvizsgálatát végeztem kétoszlopos szerszámban különböző terhelési szinteken tönkremenetelig. A terhelési szinteket az anyag kvázi statikus nyomógörbéiből nyert platófeszültség alapján határoztam meg. A platófeszültség 90; 70; 50 és 30%-án végeztem a vizsgálatokat $R=0,1$ aszimmetria tényező és $f=10$ Hz mellett. Az egyes terhelési szinteken elért tönkremeneteli ciklusszámokat statisztikai úton elemeztem, a tönkremenetel módját pedig a minták keresztcsiszolati képei alapján vizsgáltam.

A kifáradási határt $2 \cdot 10^6$ ciklusnál, és a tönkremeneteli kritériumot 2%-os mérnöki alakváltozásnál definiáltam korábbi kutatások alapján. A méréseket $\varnothing 20 \times 30$ mm méretű próbatesteken végeztem ($H/D=1,5$ magasság-átmérő aránnyal). A kenést méhviasszal valósítottam meg az érintkező felületeken. A fárasztóvizsgálatokat Instron 8872 berendezésen végeztem 25 kN erőmérő cellával, az alakváltozást pedig a keresztfej elmozdulásából számítottam.

Minden terhelési szinten három-három próbatestet vizsgáltam a statisztikai kiértékelhetőség érdekében. Minden próbatestnél a 2%-os mérnöki alakváltozáshoz tartozó ciklusszámot értékeltem, amely alapján a tönkremenetelhez tartozó ciklusszámot a három mérési adat átlagaként kaptam terhelési szintenként. Ezekből az adatokból és a stair-case módszer alkalmazásával az anyagra jellemző Wöhler-görbéket állítottam elő.

Kemény Dávid Miklós

Gépészmérnöki Kar

Anyagtudomány és Technológia Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Additívan gyártott fém anyagok mikroszerkezeti vizsgálata

Kutatásom célja a biokompatibilis fémporból 3D nyomtatott próbatestek szövetszerkezetének vizsgálata, amelyeket hagyományos technológiával előállított, piacon elérhető alapanyagból kimunkált próbatestekkel hasonlítottam össze. Az általam vizsgált anyag 316L korrózióálló acél volt. Az EOS M100-as típusú DMLS technológiájú 3D nyomtató gyári beállításának módosítása nem volt indokolt, mert 99-100% volt a termékek tömörsége, illetve a homogenitása is megfelelő volt. Mikroszerkezeti vizsgálat során a 316L anyag 3D nyomtatást követően nem mutatott ausztenites szövetszerkezetet. Ez problémát jelenthet az orvostechikai alkalmazásban (pl.: MR vizsgálat). A mágnességét vizsgálva a 3D nyomtatott 316L esetében a max. mágneses indukció $B=0,013$ (T) és a max. mágneses térerősség $H=1,49 \cdot 10^4$ (A/m), míg a hagyományos alapanyagú próbatest esetében a max. mágneses indukció $B=0,034$ (T) és a max. mágneses térerősség $H=1,51 \cdot 10^4$ (A/m). Az értékek azonos nagyságrendben és az előírt erre vonatkozó határérték alatt vannak, így ezek alapján a 3D nyomtatott 316L fémporból készült eszközök az orvostechikában felhasználhatók. A kapott eredményeket követően szakcikkek alapján hőkezelési eljárást dolgoztam ki. A termikus kezelést 450°C -on 4,5 óráig és 1100°C -on 1 óráig végeztem különböző mintákon. A hőkezelést követően ismételtén a szövetszerkezeteket hasonlítottam össze. A vizsgálat során, az ausztenitre jellemző ikersíkok nem voltak láthatóak a 450°C hőmérsékleten hőkezelt 3D nyomtatott minta esetében és zárványok jelentek meg a szemcsehatárok mentén. Az 1100°C -on hőkezelt 3D nyomtatott minta esetében az újrakristályosodás folyamata végbement, aminek a következtében az ikersíkok megjelentek, viszont a szemcsén belül és a szemcsehatár mentén egyaránt zárványok is. Következtetésképpen, a nagyobb hőmérsékletű hőkezelést követően az anyagra jellemző ausztenites szövetszerkezet alakult ki. Ennek köszönhetően anyagszerkezet szempontjából a fáradással szembeni ellenálló képessége javult, viszont a zárványok megjelenése ezt a tulajdonságot gátolhatja. A szemcsékben és azok határain megjelent zárványok, nagyban károsítják az anyag integritását, amely jelentős mechanikai tulajdonságok romlásához vezet. A továbbiakban azt fogom vizsgálni, hogy miképp befolyásolják ezek az anyagfolytonossági térfogati hibák a 3D nyomtatott próbatestek mechanikai tulajdonságokait. A vizsgálatom során célom, hogy az anyagszerkezeti hibák létrejövésének megakadályozására megoldást találjak (további hőkezelések, gyártástechnológiai paraméterfejlesztés). Az eddigi vizsgálataim során fémmikroszkópos, pásztázó elektronmikroszkópos, keménységmérő és mágneses vizsgálatokat végeztem el. Kötelező vállalásaim: A BME ATT számára a kutatási tevékenységeim eredményeit elérhetővé tettem, illetve 2019. októberben a XII. Országos Anyagtudományi Konferenciára poszttert készítettem. A konferencia keretén belül, az addigi mért eredményeimből angol nyelvű cikket írtam 2020. tavaszán, amelyet lektorálásra benyújtottam.

Kiss Ádám

Gépészmérnöki Kar

Műszaki Mechanikai Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Marási folyamatok stabilitásának méréssel történő azonosítása

Munkám fő célja a késleltetett periódusos rendszerek dinamikus viselkedésének kvalitatív jellemzése az alapul szolgáló modell alapos ismerete nélkül. Ez a technika marási folyamatok során fellépő nemkívánatos rezgések előrejelzése és ezáltal történő elkerülése érdekében kerül alkalmazásra, ahol általában nem ismerjük megfelelően a megmunkálási folyamatot leíró pontos dinamikai modellt.

A fő ötlet az, hogy a rendszer domináns spektrális tulajdonságait kiemeljük az impulzusválasz alapján. Ennek leírására az úgynevezett impulzusválasz alteret használjuk, amely egy újonnan kifejlesztett hatékony módszer mechanikai szerkezetek automatikus paraméter illesztésére. A munkánk során módosítottuk ezt az eredeti módszert, hogy alkalmazhatóvá váljon a marást leíró periodikus rendszerekre egyaránt. A módszer segítségével jellemezzük egy rendszer stabilitási tulajdonságait anélkül, hogy ismernénk az alapjául szolgáló modell paramétereit.

A módszert és alkalmazhatóságát először egy periodikus késleltetett differenciálegyenlettel teszteltük, az úgynevezett késleltetett Mathieu egyenlettel. Ezt követően a módszer gyakorlati alkalmazását végeztük el marási folyamatok során, ahol a megmunkálási folyamat stabilitása a Floquet multiplikatórral jellemezhető. Ezen domináns multiplikatórok meghatározhatók a fent tárgyalt módszer alkalmazásával a megmunkálás során, amellyel stabilitási határ nagy pontossággal prediktálható, miközben a gyártási folyamat a biztonságos tartományban üzemeltethető.

Végül megvizsgáltuk és feltártuk a módszer alkalmazhatóságának korlátait az esetlegesen felmerülő nemlineáris viselkedés miatt.

Kocsis Mátyás

Természettudományi Kar

Fizika Tanszék

Fizikai Tudományok Doktori Iskola

Nemreciprocitás hangolása BiTeBr kristályban ionos-folyadék kapuzással; és egyéb nanostruktúrák ionos-folyadék kapuzása

A kétdimenziós anyagok valamint ezek spintronikai alkalmazásai napjaink egyik legdinamikusabban fejlődő kutatási területei. Ebből a szempontból érdekes a BiTeX ($X=I,Cl,Br$) anyagcsalád, mivel ezekben az anyagokban az egyik legerősebb a Rashba típusú spin-pálya kölcsönhatás. MSc diploma munkám részeként BiTeBr kristályokon végeztem méréseket, amiket a pályázat keretében kiértékeltem, az eredményekből kéziratot készítettem elő, melyben bemutatjuk hogyan hangolható a spin-pálya csatolás hatására kialakuló nem reciprokális ellenállás ionfolyadékos kapuval. A kristályokon végzett korábbi Raman mérések több különböző spektrumot mutattak, az eddigi irodalomban sem voltak egységesek az eredmények. Megvizsgáltam az eltérések lehetséges okait, EDS mérésekkel bizonyítottam hogy a mért spektrumok egy része nem BiTeBr kristályból származik. Az általam fejlesztett BiTeBr mintakészítési eljárást felhasználva, sikerült megmutatnunk, hogy BiTeBr alkalmas spin-polarizált áram injektálására grefénbe óriás Rashba spin-pálya kölcsönhatás következtében. A világjárvány miatt a tervezett külföldi laborban történő méréseket nem volt lehetőség kivitelezni. A felszabaduló időben szoftveres és hardveres fejlesztésekkel készültem reflektometriai és GHz-es mérőrendszerek kialakítására, az ehhez szükséges szupravezető rezonátorok prototípusait karakterizáltam.

Kovács Ádám

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Szemantikai elemzés gráf-transzformációkkal

A kutatási program tárgya a szemantikai elemzés, amelynek a célja, hogy természetes nyelvi adathoz készíthessünk szemantikai reprezentációt, így tudjuk modellezni a szöveg jelentését.

A kutatási program címe **Szemantikai elemzés gráf-transzformációkkal**. A népszerű szemantikai elemzést igénylő feladatokban ritkán használják a természetes nyelv szemantikájának reprezentációját. Ezek a rendszerek többnyire néhány száz dimenziós vektorokkal ábrázolják a szavak jelentését. Ezzel szemben a gráfokon alapuló szemantikai reprezentációk egy explicitebb vizsgálatot tesznek lehetővé, amelyek automatikus előállítása még sok szempontból korlátozott. A kutatási terv során a 4lang szemantikai elemzőrendszer továbbfejlesztése és kiértékelése volt a cél, ami a szöveget mint fogalmak irányított gráfját reprezentálja. Egy-egy szemantikai konstrukció közvetlenül nem, csak konkrét feladatokon keresztül értékelhető ki, mint például a főnévi frázisok nyelvek közötti automatikus megfeleltetése (*NP alignment*), vagy pedig a lexikális következtetés (annak a megállapítása, hogy egy szó következménye-e egy másiknak pl. narancs->gyümölcs). A kutatás során a szemantikai elemzőrendszer fejlesztéseit szerettük volna olyan feladatokon validálni, ahol a megfelelő adathalmaz híján a mélytanuló algoritmusok alkalmazására nincs, vagy kisebb a lehetőség. Illetve vizsgáltuk továbbá annak a lehetőségét, hogy a mélytanuló rendszerek gráf alapú algoritmusokkal kiegészítve jobb megoldáshoz vezethetnek.

Ezekhez szükséges volt a 4lang elemző kiegészítése, hogy tetszőleges nyelvek kezelésére képes legyen, továbbá a megfelelő definíciós szótárak automatikus létrehozása, amelyek szükségesek a gráf alapú struktúra létrehozásához. Terveink között szerepelt az eredmények publikálása a szakterület legjelentősebb nemzetközi konferenciáin és folyóirataiban, illetve az elkészült rendszerek közzététele. Az NP alignment feladatban elért eredményeink publikálásra kerültek a *Language Resources and Evaluation (LREC)* nemzetközi konferencián, ahol sikeresen kombináltunk szabályalapú módszereket és modern mélytanuló algoritmusokat a feladat megoldására. Ezen a feladaton bár kiértékeljük a 4lang hatását, de a gráf megoldások nélküli szabályalapú baseline-ok is olyan erős eredményt érnek el, hogy a 4lang beépítése már nem hozott plusz javulást. Ezért volt szükséges a vizsgálat egy másik feladaton is, amely a Lexikális következtetés.

A Lexikális következtetés feladaton elért eredményeinket pedig szándékunkban áll a *Empirical Methods in Natural Language Processing (EMNLP)* konferencián publikálni, ahol a 4lang rendszerrel sikerült egy magas pontosságú rendszer kifejlesztése. A rendszer a *Semeval 2020 Predicting Multilingual and Cross-Lingual Lexical Entailment* versenyre készült, ahol három nyelven indultunk, és ezek közül kettőn a legjobbak és egyen a második legjobbak voltunk. A megoldásunk gráfok közötti átfedést vizsgál, amely szótári definíciók alapján készült.

Kőrösi Márton

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Új oldódási és olvadási fázisegyensúly mérése nagynyomású rendszerben

A CO₂-ot alkalmazó műveletek esetén fontos a megvalósítható paraméterkombinációk ismerete. Ezek becslését szolgálják a változtatható térfogatú, látóüveges cellában végzett opálosodási pont mérések. Az ösztöndíjas időszakban a CO₂-ciklohexán-izopropil-acetát elegy viselkedését vizsgáltam oldott anyag nélkül, valamint oldott 3-klórmandulasav jelenlétében. A mért adatokat lineáris függvényekkel, valamint a Peng-Robinson állapotegyenlettel közelítettem. A 3-klórmandulasav (10⁻⁵ nagyságrendű móltört) jelenlétében végzett mérések megmutatták, hogy a kis mennyiségű oldott anyag több MPa-lal is eltolhatja az opálosodási nyomást. A 3-klórmandulasav ciklohexán-izopropil-acetát elegyből 40 °C-on CO₂-dal való kicsapásának vizuális megfigyelése során 7,7 MPa nyomáson jött létre a homogén oldószerkelet a kicsapódott szilárd fázis mellett. 20 MPa-on is jelen volt a kristályos termék. Az enantiomerkeverék-átkristályosításhoz választott 16 MPa, 40 °C tehát a megvalósítható paraméter-tartományba esnek. Ciklohexán és izopropil-acetát elegyoldószer használva (szintén közel telített oldatból) a szén-dioxid kicsapószerrel végzett enantiomerkeverék-továbbtisztítás hatékonysága hasonlóan alakult, mint korábban acetónitrilből kiinduló átkristályosítási kísérleteim során. Ennek oka, hogy, bár a két mérésorozat CO₂-szerves oldószer aránya erősen különbözött, a mérések során kialakuló túltelítettség hasonló lehet. A megfigyelt limitáló összetételt korábban az atmoszferikus, illetve tiszta CO₂ közegben rögzített királis fázisdiagramokkal vettem össze. Jelen munka keretében rögzítettem a 3-klórmandulasav 16 MPa nyomáson, CO₂ és acetónitril elegyében érvényes olvadási fázisdiagramját, mely gyakorlatilag változatlan eutektikus összetételt mutat. A ciklohexán és izopropil-acetát minden vizsgált nyomáson (8-16 MPa) a 3-klórmandulasav további olvadáspont-csökkenését okozza a tiszta CO₂-ban mért olvadási hőmérsékletekhez képest.

Kustán Réka

Gépészmérnöki Kar

Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Ideális munkaközeg választás organikus Rankine ciklushoz

Az expanderből kilépő közeg állapota jelentős hatással van az ORC kialakításra, hiszen ha az expanzió túlhevített gőz állapotban ér véget, akkor szükség van izobár hűtés alkalmazására annak érdekében, hogy a munkaközeg telített gőz állapotba kerüljön, azonban ennek hatására csökken a hatásfok, illetve megnövekszik a beruházási és üzemeltetési költség a rekuperatív hőcserélő miatt. Másrészt, ha az expanzió a kétfázisú, nedves mezőben ér véget, a megjelenő cseppek eróziós problémákat okozhatnak és a nedveségvesztés miatt ebben az esetben is csökken a hatásfok. Ezen problémák elkerülése érdekében fontos lenne olyan expanzió lépés tervezése, amelynek kezdeti és végpontja egyaránt telített gőz állapotban van és a folyamat végig a túlhevített gőz állapotban fut.

Azt követően, hogy kialakításra került az ideális „száraz” munkaközeg kiválasztására szolgáló módszer – az ideális adiabatikus (izentrópikus) expanzió szempontjából – egy adott hőforrás – hőnyelő pár számára, a következő lépés a valós expanziós utak vizsgálata volt, ahol az expanzió jóságát az expander belső hatásfoka jellemezte.

Az eredmények alapján egy új módszer került kidolgozásra az optimális munkaközeg – expander (belső hatásfokkal jellemezhető) pár meghatározására, adott hőforrás és hőnyelő számára a legegyszerűbb ORC elrendezéssel. Ezzel a módszerrel elkerülhetők a cseppek megjelenésével illetve a túlhevített száraz gőzzel kapcsolatos problémák az expanzió végpontjában, melynek hatására a beruházási és üzemeltetési költségek is csökkenthetők. Az expander hatásfokának figyelembevételével a nedvesítő közegek ORC munkaközegként való felhasználása is lehetségessé válik.

Lelkes János

Gépészmérnöki Kar

Áramlástan Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Áramló közegek által keltett rezgések vizsgálata

Aeroelasztikus jelenségek gyakran játszódnak le áramlásba helyezett karcsú, rugalmas szerkezetek esetén. Az aeroelasztikus jelenségek során az aerodinamikai, rugalmas és tehetetlenségi erők kölcsönhatása figyelhető meg. Egy kritikus szélességet elérve az aeroelasztikus szerkezetek elvesztik stabilitásukat, amely a szerkezet nagy amplitúdójú rezgéseiből és tönkremeneteléhez vezethet.

A kutatás első részében egy kétszabadságfokú aeroelasztikus szárnymodellt vizsgáltunk. A felhajtóerő tényezőt az effektív állásszög szakaszosan lineáris függvényével közelítettük. Az aeroelasztikus szárnymodell dinamikai viselkedésének megértéséhez lineáris alrendszereket alkalmaztunk az egyes állásszög tartományokban. Vizsgáltuk a rendszer stabilitását kis és nagy állásszögek esetén. A szélességet, mint bifurkációs paramétert változtattuk, és meghatároztuk a stabilitásvesztéshez tartozó kritikus szélesség értéket. A klasszikus nyereg-csomó bifurkáción kívül megfigyeltük a szakaszos rendszerekre jellemző határ-ütközés (border-collision bifurcation) és krízis (rapid bifurcation) bifurkációkat is. Jelen rendszerben a nyereg-csomó bifurkáció a szárnydivergencia, a határ-ütközés bifurkáció pedig a statikus átesés jelenségének felelt meg. A krízis bifurkáció során a stabil egyensúlyi állapot instabillá válik és határciklus oszcillációk jelennek meg. Ezen rezgés a dinamikus átesés körüli belebegés (stall flutter) jelenségével feleltethető meg.

A kutatás második részében egy lineáris rezgéscsillapító alkalmazhatóságát elemeztük. A lineáris rezgéscsillapítót a kétszabadságfokú aeroelasztikus szárnymodellen alkalmaztuk. A rezgéscsillapító paramétereinek hangolásával növelni tudtuk a krízis bifurkációhoz tartozó kritikus szélességet, illetve csökkentettük a határciklus oszcillációk amplitúdóját.

A kutatás harmadik részében periodikusan változó szélesség hatását vizsgáltuk a kétszabadságfokú szárnymodell esetén. A szélességet egy átlagolt és egy periodikusan fluktuáló komponensre bontottuk. A fluktuáló komponens paraméteres gerjesztés formájában jelenik meg a modellben. Az átlagolt és fluktuáló sebességkomponenseket választottuk bifurkációs paraméternek. Numerikus szimulációkkal és analitikus módon is meghatároztuk az aeroelasztikus rendszer stabil tartományait az átlagos és fluktuáló sebességkomponensek paraméter síkjában.

Lencsés Anita

*Természettudományi Kar
Kognitív Tudományi Tanszék
Pszichológia Doktori Iskola*

Traumás agysérült betegek prospektív emlékezeti teljesítményét meghatározó tényezők vizsgálata

Traumás agysérülést követően a jellemző fizikai, viselkedéses és érzelmi tünetek mellett maradandó sérülés alakul ki több kognitív területen is. A betegek hétköznapijait megnehezítő számos kognitív zavar közül az egyik leggyakoribb a prospektív emlékezet (prospective memory, PM) sérülése. A PM teszi lehetővé, hogy egy jövőre irányuló szándékot megőrizzünk, felelevenítsünk és a jövő egy adott időpontjában és kontextusában kivitelezünk. Ez az emlékezeti rendszer szükséges mindennapi életünk legalapvetőbb feladatainak ellátásához; úgy mint a találkozók észben tartása, gyógyszerek beszedése vagy a bevásárlás elintézése, hogy csak egy pár alapvető példát említsünk. A traumás agysérülést jellemző PM zavar jelentőségének ellenére viszonylag kevés empirikus kutatás született ezen emlékezeti rendszer működésének, és a károsodását befolyásoló tényezőknek a feltárására e körképben.

Kutatásunk célja az volt, hogy az említett betegcsoport PM teljesítményét mérjük fel egy komplex vizsgálati eljárás segítségével. Jelen előadás egy klinikai orientációjú, életszerű laboratóriumi PM feladat, a *Virtuális Hét* magyarra fordításának folyamatát és a feladat jellemzőit mutatja be. A *Virtuális Hét* egy társasjáték formájában, a mindennapi életben előforduló PM feladatokat szimulálja egy hét teendőinek keretében ágyazva. Összetettsége révén alkalmas a PM különböző jellemzőinek megragadása: idő- és esemény-alapú, szokásjellegű és epizodikus feladatokat egyaránt tartalmaz, továbbá a PM prospektív és retrospektív összetevőinek vizsgálatát is lehetővé teszi. Az előadás a magyar változat bemutatása után kitér egy egyetemisták körében végzett pilot kísérlet, illetve két traumás agysérüléssel diagnosztizált személy komplex vizsgálatának eredményeire is. A 19-25 év közötti, 16 fős egyetemista minta helyes válaszainak aránya a feladat minden mutatóján 90% körül volt, ami megfelel korábbi, fiatal felnőttekkel végzett kutatások eredményeinek. Agysérült személyeknél a *Virtuális Hét* mellett különböző neuropszichológiai háttértesztekkel és önjellemző kérdőívekkel mértük fel olyan tényezőknek a PM-re gyakorolt hatását, mint a végrehajtó funkciók, figyelem, epizodikus emlékezet, metakogníció, hangulati állapotok, alvásminőség és kronotípus, valamint a személyiségvonások.

Kutatásunk egyik hosszú távú célja, hogy további résztvevők bevonásával összehasonlítsuk traumás agysérült személyek PM teljesítményét a hozzájuk életkorban és iskolázottságban illesztett egészséges kontroll személyekével. További célunk, hogy a kapott eredmények alapján kidolgozzunk egy PM funkciók fejlesztésére épülő rehabilitációs eljárást, amely egyrészt segítené az agysérült személyek neuropszichológiai terápiáját, másrészt a klinikus kollégák számára elérhetővé tenne egy hatékony, terápiás célokra is alkalmazható eszköztárat.

Lévay Sára*Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék
Fizikai Tudományok Doktori Iskola*

Szemcsés anyagok rendeződése vékony tartály esetében

Kutatásom során szemcsés anyagokkal foglalkozom. Azt vizsgálom, hogy azonos méretű gömbök esetén mi az optimális elrendeződés egy keskeny tartályban, amely két- és három dimenzió közötti átmenetként értelmezhető. A rendszer nagyon jó alapot szolgáltat annak vizsgálatára, hogy a geometriai frusztráció milyen hatással van az egyensúlyi dinamikára, emellett lehetőséget biztosít a szemcsés anyagok statisztikus fizikájának tesztelésére.

Ha a tartály csak egy kicsit szélesebb a szemcsék átmérőjénél, akkor az optimális elrendeződés a kétdimenziós háromszögrács, melyben a szemcsék a harmadik dimenziót kihasználva optimalizálják a térkitöltést: a cella egyik majd másik falát érintő csíkokat alkotnak. Kísérleteink és diszkrét elem szimulációink során azt tapasztaltuk, hogy a rendszer rázás hatására e felé az alapállapot felé fejlődik, ám azt a megjelenő inkompatibilis doménstruktúrák miatt nem éri el.

A rendszer viselkedését viszonylag kevés lokális szemcsekonfigurációval írhatjuk le, mely lehetőséget biztosít Edwards elméletének tesztelésére. Alapvető fontosságú ugyanis, hogy a szemcsés anyagok dinamikáját nem befolyásolhatják termális fluktuációk, így az ismert statisztikus termodinamika nem használható a szemcsés rendszerek leírására. Ennek ellenére mégis lehetséges az ismert formalizmus analógiájára bevezetett mennyiségekkel leírást adni. Ezt az elméletet Edwards mutatta be, az energia helyett a szemcsék konfigurációjának térfogatát használva, a hőmérséklet helyett pedig a kompaktivitást bevezetve. Sajnos a módszert az előforduló szemcsekonfigurációk nagy száma miatt általában nehéz alkalmazni, az általunk vizsgált rendszerben viszont a releváns konfigurációk viszonylag kis száma miatt ez lehetséges.

Előadásomban Edwards elméletének a $2+\epsilon$ dimenziójú rendszerünkben való vizsgálatát mutatom be kísérleti eredmények, diszkrét elem szimulációk és analitikus számítások segítségével. Kitérek továbbá arra is, hogy mi történik akkor, ha két különböző tulajdonságokkal (cellavastagsággal) rendelkező alrendszert kapcsolunk össze, hogyan alkalmazható ez esetben Edwards elmélete.

A kísérletek a Wigner Fizikai Kutatóközpont Szilárdtestfizikai és Optikai Intézetének kutatócsoportjával és a magdeburgi Otto von Guericke Egyetem kutatócsoportjával együttműködésben történtek.

Litauszki Katalin

Gépészmérnöki Kar

Polimertechnika Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Fotodegradációs eljárás alkalmazhatósági vizsgálata szabályozott gyógyszerhatóanyag leadás céljából

Egy általam korábban kialakított szabályozott degradációs eljárással rámutattam arra, hogy a politejsav alapanyagban besugárzott energia hatására lánctördelődés következik be. E lánctördelődés a besugárzott polimer minta teljes keresztmetszetében jelentkezik és a lánctördelődés mértéke, azaz a molekulatömeg csökkenése a besugárzott energia mennyiségével szabályozható.

A molekulatömeg szabályozott csökkentése fontos lehetőségeket rejt magában, amelyre egy kiváló alkalmazhatósági példa a gyógyszerek előállításának területe, ahol széles körben megjelennek a polimerok, mint alapanyagok. A gyógyszer hatóanyagok biohasznosulásának javítása kiemelt fontossággal bír és jelenleg is aktívan kutatott tématerület. Az egyik jellemző polimer hordozó anyag a politejsav. Kedvező tulajdonságai közé tartozik biodegradálhatósága és felszívódási ideje széles határok között változhat. A polimer mátrixba ágyazott hatóanyag leadás sebessége függ az alkalmazott polimer fizikai tulajdonságától, a molekulatömegetől, a kristályosság fokától és az üvegesedési hőmérséklettől, továbbá az alkalmazott gyártástechnológiától.

A fentiek alapján jelen kutatásom során kiválasztottam a vizsgálatokhoz szükséges megfelelő polimer alapanyagot, illetve feltérképeztem a lehetséges hatóanyag típusokat. Ezt követően kialakítottam egy kísérletsorozat szempontjából megfelelő mintagyártási technológiát. Az előkísérleteket követően, véglegesítettem a felhasznált alapanyagok típusát, mennyiségét és azok gyártástechnológiáját. Lézeres energia besugárzással többféle molekulatömeg-eloszlású polimer mintát állítottam elő. A különböző molekulatömeg-eloszlású polimermintákat hatóanyag leadás szempontjából vizsgáltam. Az így létrehozott többféle módon fotodegradált polimer minták hatóanyag leadási képességét hasonlítottam össze és jellemeztem termikus és morfológiai szempontok szerint.

Lóránt Bálint

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Mikrobiológiai üzemanyagcellák fejlesztése szennyvizek kezelésére és monitorozására

A mikrobiális üzemanyagcellák (Microbial Fuel Cell – MFC) alkalmazása merőben új lehetőséget teremt megújuló elektromos energia („bioelektromosság”) előállítására exoelektrogén baktériumok felhasználásával. Az ilyen mikroorganizmusokból álló biofilm segítségével az MFC-ben közvetlenül szervesanyag lebontásából nyerhető elektromos energia. Ezt kihasználva az MFC-t szennyezés eliminációs rendszerekben (pl. biológiai szennyvíztisztítás) alkalmazva energiahatékony, illetve energia visszanyerésre alkalmas technológiák alakíthatók ki. Szintén komoly lehetőséget rejt magában a bioszenzorként történő alkalmazás, ugyanis a cella egyes elektromos jellemzői arányosak a minta biodegradálható szervesanyag tartalmával. Laboratóriumunkban teszteltem léptéknövelt (14 l hasznos térfogatú), tálcás kialakítású ún. légkatódos MFC rendszereket. Az általános üzemelési jellemzők feltérképezését követően magas szervesanyag tartalmú tejipari műszennyvíz kezelését végeztem a cellákkal, melynek során ~50-80 %-os szervesanyag eltávolítási hatékonyságot figyeltem meg. Az eredmények alapján további fejlesztést követően a technológia alkalmas lehet speciális szennyvizek hatékony előkezelésére, valamint ezzel kapcsolatban elektromos energia termelésére közvetlenül ipari kibocsájtóknál.

Munkám fő célja egy légkatódos MFC rendszer tesztelése volt bioszenzorként történő alkalmazásra, valós szennyvizek biokémiai oxigénigényének (BOI) meghatározására. A kísérleteket szakaszos mintaadagolással végeztem. Először különböző tulajdonságú modellszubsztrátokat (acetát, pepton, keményítő, tej) vizsgáltam. Az eredmények alapján a kidolgozott mérési módszer alkalmas oldott, koloid és lebegőanyag jellegű komplex szervesanyagokat is tartalmazó minták BOI értékének mérésére. Ezt követően kommunális és söripari szennyvízzel végeztem méréseket, az eredmények pedig alátámasztották, hogy valós szennyvizek BOI értéke is nagy pontossággal meghatározható, a szükséges mérési idő pedig a konvencionálisan alkalmazott respirometrikus mérési módszerhez (5 nap) képest jelentősen rövidebb (0,5-4 nap). Ezen felül feltételezésünk szerint a mérés során rögzített feszültségfutási görbék alakjából következtetni lehet a szervesanyag frakciók (oldott könnyen biodegradálható, ill. lebegőanyag jellegű lassan biodegradálható) arányára is, amit kutatásunk folytatása során tervezünk bizonyítani.

Molnár Csenge Andrea

Gépészmérnöki Kar

Műszaki Mechanikai Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Egyensúlyozó deszkán való egyensúlyozás robusztus stabilitása

Az emberi egyensúlyozás kutatása egyre nagyobb figyelmet kap az egyensúlyvesztéshez köthető balesetek növekvő számából adódóan. A baleseteket feltehetőleg a megnövekedett reakcióidő, az érzékszervek romlása, vagy az izomzat gyengülése okozza, viszont az egyensúlyozás pontos folyamata máig nem ismert. Az emberi egyensúlyozás kísérleti és elméleti vizsgálata segít megérteni, hogy a központi idegrendszer hogyan határozza meg az izmok szükséges működését az egyensúly fenntartása során.

Az egyik legalapvetőbb egyensúlyozási feladat az egy helyben állás. Az egy helyben állás nehezebbé tehető, ha a stabil talaj helyett egy instabil felületre, egy egyensúlyozó deszkára állunk. A kutatásban alkalmazott egyensúlyozó deszka síkbeli egyensúlyozást tesz lehetővé gördülő kerekeivel. A gyártás során többféle kerék készült, és lehetőség van a lap talajtól mért magasságát is változtatni a kerekeken található furatok segítségével. A változtatható paramétereknek az az előnye, hogy különböző feltételek mellett különböző nehézségű egyensúlyozási feladatokat lehet végrehajtani, és a paraméterek hatását matematikailag is lehet vizsgálni megfelelő mechanikai modell felépítésével.

A mechanikai modell két szabadsági fokú. Az emberi testet egy inverz inga modellezi, az egyensúlyozó deszka fizikai paraméterei az aktuális geometriából adódnak. A szem és a fül képesek az emberi test és az egyensúlyozó deszka környezethez viszonyított szögét, szögsebességét érzékelni, ezért a központi idegrendszert késleltetett PD szabályzóként modelleztem, ahol a konstans időkésés a reakcióidőnek felel meg. A szabályzó nyomaték a bokánál ébred, és négy konstans szabályzó paramétert tartalmaz. A rendszer numerikus stabilizálhatósági vizsgálatának eredménye, hogy minden keréksugár és lapmagasság kombinációhoz létezik egy kritikus időkésés. Ha egy személy reakcióideje ennél a kritikus időkésésnél nagyobb, akkor nem képes egyensúlyozni az adott geometriájú egyensúlyozó deszkán.

30 vizsgálati alannal végzett egyensúlyozási kísérletek azt mutatták, hogy nagyobb keréksugár és alacsonyabb lapmagasság esetén könnyebb egyensúlyozni. A stabilitásvizsgálat eredménye ezzel a tapasztalattal megegyezik, hiszen nagyobb keréksugárhoz és alacsonyabb lapmagassághoz nagyobb kritikus időkésés tartozik. A számítások eredménye szerint a központi idegrendszer szabályzásának pontossága 5%. Az egyensúlyozó személy tömege és magassága nem befolyásolják az egyensúlyozási képességet, viszont más szabályzó paraméterek szükségesek az egyensúlyozáshoz, amit a központi idegrendszer a mindennapi élet során „megtanul”. A kísérletek és a numerikus eredmények összehasonlításából becsült reakcióidő 130-180 ms, ami nagyon jó egyezést mutat más szakirodalmi adatokkal. A kutatás során sikerült egy olyan modellt felállítani az egyensúlyozó deszkán történő egyensúlyozás leírására, ami összhangban van a mérések tapasztalataival.

Molnár Dániel

Természettudományi Kar

Fizika Tanszék

Fizikai Tudományok Doktori Iskola

Hangolható memóriefunkciók megvalósítása mesterséges szinapszisokban

A RRAM eszközökben a meghajtó feszültség lineáris, kis mértékű hangolásával a kapcsolási sebesség exponenciálisan hangolható. Ezt kihasználva hangolható memóriefunkciókat lehet létrehozni olyan elrendezésben, ahol az információt pozitív pulzusokkal írjuk a memrisztoregységbe (tanítás), és egy negatív háttérfeszültség alkalmazása pedig a memrisztorkontaktus felejtését eredményezi. A felejtési idő (azaz a negatív háttérfeszültség) hangolásával elérhető az, hogy a fontos (azaz megfelelően intenzív) bemeneti információ esetén a rendszer hosszútávú memóriaállapotba kerüljön, az irreleváns információt viszont elfelejtse.

A projekt keretében egy olyan mérésvezérlő programot fejlesztettem, ami a meghajtási paramétereket automatikusan, előre definiált sémák szerint tudja állítani, így a lehető leggyorsabban lehet elvégezni egymás utáni méréseket, úgy hogy közben folyamatosan, adatvesztés nélkül követjük a memrisztorkontaktusok állapotváltozását. Először periodikus jeleket használva, a frekvencia, a pulzusamplitúdó és a negatív háttér változtatásával demonstráltam a hangolható memóriefunkció megvalósíthatóságát. Ezután a mérésvezérlő programot kiegészítettem komplex jelalakok kiadásának a lehetőségével, melynek segítségével demonstráltam, hogy a felejtési idő megfelelő hangolásával megvalósítható az, hogy egyetlen memrisztorkontaktus állapotváltozása alapján különbséget tegyünk a releváns bemeneti információ és az irreleváns bemeneti zaj között. Ezen eredmények általánosítása lehetőséget nyújthat újfajta, autonóm döntéshozásra alkalmas memrisztoreszközök fejlesztésére.

Molnár Vince

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Komponensalapú heterogén rendszerek hatékony formális verifikációja a modellalapú rendszertervezésben

Az informatikai rendszerek helyességének jelentősége egyre kevésbé korlátozódik a kritikus beágyazott rendszerekre: a hagyományos tesztelésalapú ellenőrzéseken felül mind több fejlesztő formális (azaz matematikai precizitású) ellenőrzési módszerek alkalmazásával is növelné termékei minőségét, végső soron hozzájárulva azok megbízhatóságához és stabilitásához.

A formális módszerek alkalmazása a legtöbb esetben magas szakértelmet igényel. Az ösztöndíjjal támogatott kutatásban ennek két okára kerestünk megoldást: 1) az ellenőrző algoritmusok speciálisak, azaz más-más esetekben alkalmazhatók jó eredménnyel (pl. elosztott protokollok vagy egyszálú programok esetén), illetve 2) az ellenőrzéshez szükséges matematikai modellek gyakran nem állnak rendelkezésre. Ezen két probléma kezelésével a formális módszerek alkalmazási köre tovább bővíülhet.

Az elterjedt algoritmusok közül két kiemelkedően sikeres módszer az ún. szaturáció algoritmus és az elenpéllda-alapú absztrakció finomítás. Míg az előbbi specialitása, hogy az ellenőrizendő rendszer szimmetriáit használja ki, addig utóbbi a vizsgált tulajdonság szempontjából szükségtelen információk elhagyásával tud hatékonyabb lenni az egyszerű megoldásoknál. A két algoritmust jelenleg külön-külön sikerrel alkalmazzák, azonban összekapcsolásukkal a hatékonyan ellenőrizhető rendszerek köre nagymértékben bővíthető. A kutatásban olyan módszert dolgoztunk ki, amellyel a két algoritmus – az előnyeik egyesítésével – együtt használható.

A kutatás másik fókusza a tervezést végző mérnökök által használt modellekhez kapcsolódik. A mérnökök jellemzően olyan, magasszintű modellekkel dolgoznak, amelyek közvetlen formális ellenőrzésére nincs lehetőség, így az ellenőrzéshez szükséges matematikai modelleket kézzel kell előállítani. A kutatás célja volt egy olyan köztes modellezési réteg kidolgozása, amelyre a magas szintű modellek automatikusan leképezhetők, és amelyen az ellenőrzést végző algoritmusok már közvetlenül végrehajthatók. A megközelítés implementációja a nyílt forráskódú Gamma keretrendszer, amely tehát lehetővé teszi a mérnöki modellek formális ellenőrzését.

A támogatott kutatás jól illeszkedik azon hosszútávú céljainkhoz, hogy a formális módszerek világában felhalmozott elméleti tudást és algoritmusokat hozzáférhetővé tegyük az ipari szereplők számára.

Molontay Roland

Természettudományi Kar

Sztochasztika Tanszék

Matematika- és Számítástudományok Doktori Iskola

Oktatási adatabányászat

Az adattudomány egyik ága az oktatási adattudomány, melynek célja a nagy mennyiségű oktatási adatkincsben rejlő érdekes és értékes információk kinyerése különféle matematikai (elsősorban statisztikai és gépi tanulási) algoritmusok segítségével. Jelen kutatás célkitűzése, hogy a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Neptun tanulmányi rendszeréből származó nagy adatkincsből matematikailag korrekt eszközök felhasználásával oktatáspolitikai, oktatásszervezési szempontokból releváns következtetéseket tudjunk levonni.

Vizsgáljuk, hogy az előtanulmányi rend (tantervi háló) struktúrája milyen hatással van a végzési időre, illetve mely tárgyak teljesítési arányának változása van a legnagyobb hatással a végzés várható idejére. A tantervi hálókat a hálózatelmélet és valószínűségszámítás eszköztárával, illetve diszkrét idejű szimulációk segítségével vizsgáljuk, továbbá Bayes-hálókat segítségével modellezzük, és olyan döntéstámogató rendszert dolgozunk ki, mely nagy segítséget nyújthat egy tantervreform esetén. A lemorzsolódó hallgatók korai szűrésére prediktív analitikai eszközöket fejlesztünk, modern gépi tanulási eszközökkel azonosítjuk a lemorzsolódásban veszélyeztetett hallgatókat. Megvizsgáljuk, hogy hogyan változik a prediktív erő, ha csak a felvétel pillanatában rendelkezésre álló adatok alapján végezzük a predikciót, illetve ha az első félév adatait is felhasználjuk. Külön hangsúlyt fektetünk a lemorzsolódásra leginkább ható tényezők gépi tanulási, illetve játékelméleti eszközökkel történő beazonosítására. Haladó ökonometriaival vizsgáljuk a matematika felzárkóztató tárgy hatékonyságát, illetve összevetjük a felzárkóztató tárgy két eltérő változatának mind rövid, mind hosszabb távú hatásait. Szintén vizsgáljuk a jegyinfláció és az oktatás hallgatói értékelésének összefüggéseit haladó ökonometriaival eszközökkel.

Kutatásunkban nagy hangsúlyt fektetünk arra is, hogy eredményeink a valós gyakorlatba minél hamarabb átültethetők, a döntéshozók számára minél inkább hasznosíthatóak legyenek.

Nagy Sándor

*Vegyésszépmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Poli(glicidil-metakrilát) hordozóhoz rögzített cinkona-négyzetamid organokatalizátor előállítás, alkalmazása aszimmetrikus reakciókban és visszaforgatása

Manapság a gyógyszeriparban nagy jelentősége van az aszimmetrikus szintéziseknek, mivel egy adott hatóanyag két enantiomerének akár teljesen eltérő hatása lehet. A rezolválásnál környezetvédelmi és gazdasági megfontolásokból is jobb megoldást nyújthatnak az aszimmetrikus szintézisek.

Munkám során célul tűztem ki olyan, hordozóhoz rögzített organokatalizátorok előállítását, melyek aszimmetrikus reakcióban történő alkalmazását követően visszaforgatva újra fel lehet használni.

Olyan katalizátor-hordozó előállítását valósítottam meg, mely kiindulási anyaga könnyen hozzáférhető, mechanikus behatásokra nem érzékeny és kémiai indifferens a katalitikus reakciókban, mégis olyan funkciós csoporttal rendelkezik, melyen keresztül könnyen módosítható. Ezért esett a választásom a poli(glicidil-metakrilát)-ra (PGMA), melyet glicidil-metakrilát (GMA) gyökös diszperziós polimerizációjával állítottam elő. Ez a PGMA 1 μm körüli szemcsék halmaza, melyet szűk méret-eloszlás jellemez és könnyen módosítható epoxi csoportokat tartalmaz; utólagos térhálósításával elértem, hogy az általam alkalmazni kívánt oldószerekben oldhatatlan anyagot kapjak.

Organokatalizátorként a kutatócsoportunkban már sikeresen alkalmazott cinkona-négyzetamidot választottam. A molekulát három különböző pozícióban módosítottam primer aminocsoportokkal, eltérő hosszúságú linkereket alkalmazva. Így mind a linker hosszúságának, mind pedig a módosítás helyének a próbareakciókra gyakorolt hatását vizsgálni tudtam. Ezen aminocsoportok segítségével rögzítettem a katalizátorokat a PGMA-hoz. Ezt követően vizsgáltam a katalizátorok aktivitását acetilaceton és β -nitrosztiról *Michael*-addíciós reakciójában, mely során a reakció optimalizálását követően a legjobbnak bizonyult katalizátorral 98%-os termelést és 96%-os enantioszelektivitást értem el. A katalizátorokat centrifugálás segítségével forgattam vissza, és a termelés és szelektivitás a katalizátorok ötszöri felhasználását követően sem változott jelentősen.

Németh Gábor*Építőmérnöki Kar**Hidak és Szerkezetek Tanszék**Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola*

Beágyazott trapézprofilal kialakított öszvérgerendák paramétereinek vizsgálata

Az acél trapézlemez profilok az elmúlt néhány évtizedben a hídépítésben is megjelentek, a magasépítési alkalmazásukból már ismert előnyeiknek köszönhetően. Acél trapézprofil alkalmazása öszvérszerkezetű hidak esetén is rendkívül előnyös lehet a megnövekedett horpadási ellenállás, keresztirányú merevség, és a harmonikahatás következtében lecsökkent hosszirányú merevség (feszített szerkezeteknél) következtében. A trapézlemez gerincű acélgerendával épülő öszvérhidak nyírt kapcsolatait gyakran a vasbeton lemezbe beágyazva alakítják ki, ezzel további előnyöket elérve.

Az ilyen módon kialakított szerkezeteket leginkább kísérlettel segített módon tervezik, azonban az egyszerű méretezésre való igény is megjelent. A Hidak és Szerkezetek Tanszék a szerkezeti viselkedés és a méretezés szempontjából fontos paraméterek vizsgálata érdekében egy nagyvolumenű, teljes léptékű kinyomó kísérletsorozatot hajtott végre 2017-18-ban. Ezekre a kísérleti eredményekre, és az ezekhez készült numerikus modellekre építve vizsgáltam az alapvető szerkezeti paraméterek változtatásának hatását. A numerikus szimulációk alapján a főbb paraméterek függvényében megfigyelhető a teherbírásértékek karakterisztikája, illetve összehasonlíthatók az egyes paraméterek teherbírásra gyakorolt hatása. A kísérleti és numerikus eredmények alapján egyértelműen kiolvasható, hogy a trapézprofil hajlítási szögének van a legnagyobb hatása a teherbírásra és a szerkezeti viselkedésre, míg a lemezmező-szélesség és beágyazási mélység csupán a teherátadó felület növekedésével járul hozzá a teherbírás növeléséhez.

A kísérleti próbatestek kialakítása úgy történt, hogy a beton menjen tönkre a terhelés következtében, azonban az öszvér kapcsolat acélszerkezeti része is vizsgálandó a nyírt kapcsolat teherbírásának számításához. A beton központú kinyomó kísérleteket kiegészítendő, az acél trapézgerinc vizsgálata numerikus modellek segítségével történt.

Okvátovity Zoltán

*Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék
Fizikai Tudományok Doktori Iskola*

Out-of-time-ordered korrelátorok vizsgálata lineáris diszperziós anyagokban

Kvantummechanikai rendszerekben unitér időfejlődés során egy egyszerű operátor viselkedése is nagyon bonyolulttá válhat, ami a lokális operátorokban tárolt információ elvesztéséhez vezet. Ezt a jelenséget „scrambling”-nek nevezzük, aminek jellemzésére egyik lehetséges mód az out-of-time-ordered kommutátorok (OTOC) vizsgálata. Az OTOC két operátor kommutátor négyzetének várható értéke, ami felírható a két operátor kommutátor várhatóérték négyzetének, és a kommutátor varianciájának összegeként. A projekt során meghatároztuk a spin korrelátor függvény és a hozzá tartozó OTOC időbeli függését egy dimenzióban, azonos spin komponensek esetére. Az időfejlődés során két specifikus energiaskála jelenik meg, a kémiai potenciál és a nagyenergiás levágás. A számolás során azt találtuk, hogy az utóbbi a domináns, emiatt csak két időbeli tartomány különböztethető meg. A korrelátor rövid időkre lineáris, hosszú idejű aszimptotikus viselkedése pedig $1/t^2$ -es csökkenést mutatott. Az OTOC mindkét tagja esetén a rövid idejű viselkedés t^2 -es, míg hosszú időkre itt is $1/t^2$ -es lecsengést mutat, ami a kommutátor varianciájából jön. A helyfüggést vizsgálva a két, a spin orientációjától függő eseteket különböztethetünk meg. Mindkét esetben megmarad rövid és hosszú idejű viselkedés időfüggése.

Ezek alapján a Dirac—Weyl rendszerek a lokális operátorokban tárolt információ elvesztése lassan megy végbe. A kapott eredmények jó alapot nyújtanak a „scrambling” jelenség vizsgálatához kölcsönhatás vagy rendezetlenség jelenlétében.

Orosz Gergely Imre

*Természettudományi Kar
Nukleáris Technika Tanszék
Fizikai Tudományok Doktori Iskola*

IV. generációs atomreaktor fűtőelemének hőtechnikai fejlesztése

A gázhűtésű gyorsreaktor (GFR) egyike a IV. generációs atomreaktor típusoknak, amelyeket a GIF (Generation IV International Forum, GIF) beválasztott a támogatandó reaktortípusok közé. A kemény neutronspektrum és a magas zóna kilépő hűtőközeg-hőmérséklet teszi ezt a reaktortípust különösen vonzóvá. Ám ezek a tulajdonságok jelentik a legnagyobb kihívást is, mivel komoly kritériumokat állítanak a reaktort felépítő anyagokkal szemben.

Az ÚNKP ösztöndíj alatt sikeresen elvégeztem a projektben kitűzött célokat. A dolgozat célja annak vizsgálata volt, hogy az ALLEGRO kísérleti gyorsreaktor kerámia fűtőelem-kazettájának hőmérsékleti maximuma hogyan csökkenthető különböző hűtőközeg keveredést elősegítő, a pálcák távtartórácsain kialakított keverőfülek alkalmazásával. A feladat megoldásához az ANSYS CFX Computational Fluid Dynamics szimulációs program 17-es verzióját használtam. A kerámia kazetta leírására háromdimenziós termohidraulikai modelleket dolgoztam ki.

Az alapos irodalomkutatásom alapján keverőfül modelleket hoztam létre, melyeket később a fülek optimalizálásánál felhasználtam. A modellel hálófüggetlenségi vizsgálatot végeztem, amellyel a szükséges diszkretizáció mértékét meghatároztam. A későbbiekben validációs modellt hoztam létre a MATIS-H kísérleti berendezésre, mellyel az előzőekben kidolgozott diszkretizációs hálósűrűséget és modellezési eljárást támogattam meg. Az általam megalkotott modell megfelelően képes reprodukálni a MATIS-H berendezésen mért kísérleti eredményeket. A keverőfül modellek segítségével összehasonlítottam négy különböző keverőfül-típusnak az ALLEGRO gázhűtésű reaktor üzemi paramétereire alatti hatékonyságát. Ezek a fülek a nemzetközi irodalomban „split”, „advanced”, „swirl” és „twisted” név alatt hivatkozott típusok voltak. A modelleredmények alapján a „twisted” fűtőtípust választottam ki a további vizsgálatokra, mert a számítások szerint ez bizonyult a leghatékonyabbnak. A „twisted” keverőfül dőlésszögét változtatva optimalizációs eljárást hajtottam végre, melynek célja a legnagyobb hőátadási és keveredési tényező elérése volt a lehető legkisebb többlet nyomással. Az utolsó feladatrészen az optimalizált „twisted” keverőfül típussal kibővített ráccsal modelleztem a teljes aktív hosszal az ALLEGRO kerámia kazettát. A modellek 4 darab távtartórácsot tartalmaznak. Két modellt hoztam létre két különböző keverőfül kiosztással, melyek eredményeit összevetettem a füleket nem tartalmazó modell eredményeivel. Az eredmények megmutatták, hogy a kazetta fala mentén kialakuló körbeáramlás megszünteti a kazettasarkokban kialakuló forrópontokat. Ezek a forrópontok a kazetta üzemvitel szempontjából korlátozó faktorok, így megszüntetésük kulcsfontosságú feladat.

A projektben elért eredmények alapján az ALLEGRO kerámia kazetta újra konfigurálható, és egy jobb kihasználtságú, biztonságosabb, alacsonyabb (üzemvitelt korlátozó) hőmérsékleti maximumokkal rendelkező kazetta hozható létre.

Papp Dávid

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Távközlési és Médiainformaticai Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Zero-shot Active Learning

Felügyelt gépi tanulási folyamat során a tanító állomány szolgál a modellépítés alapjául, éppen ezért fontos lépés a megfelelő tanító adathalmaz kiválasztása, felépítése a minél pontosabb becslések elérése érdekében. Sok esetben azonban csak véges számú címkézett tanító adat feldolgozására van lehetőség; illetve a címkék előállítására magas költségű, időigényes és nehéz feladat is lehet. Erre a problémára kínál megoldást az aktív tanulás, amely lehetőséget biztosít a tanuló rendszer számára, hogy maga válassza ki azokat az adat-példányokat, amelyekből tanulni szeretne. Ez egy iteratív folyamat során valósul meg, ahol minden lépésben egy címkézettlen példány annotálását kéri a rendszer. A folyamat kezdetén címkézettlen adatok (u) egy halmaza (U) áll rendelkezésre, amelyekből a tanuló rendszer lekérdezni tud, úgynevezett lekérdezési stratégiák alkalmazásával. Általános esetben az aktív tanuló algoritmusok azt feltételezik, hogy kiindulási állapotban az L címkézett halmaz nem üres, azaz $|L| > 0$. Ez azonban valós helyzetben csak ritkán kivitelezhető, így olyan eljárás szükséges, amely $|L| = 0$ kezdeti állapotból is képes elindulni. További nehézség, hogy csak azután leszünk képesek az egyes kategóriákba tartozó példányok információ tartalmának hatékony becslésére, amennyiben már minden osztályból van címkézett elemünk. Következésképpen zero-shot kiindulásnál fontos szerepet játszik L kiegyenlítetttsége is. A kutatásom során kidolgoztam az SCBS (Spectral Clustering Based Sampling) spektrális klaszterezés alapú lekérdezési stratégiát, amely során ClusterGAN neurális hálózat alapú klaszterezést applikálok a transzformált térben, majd a legnagyobb klaszter tagsági valószínűséggel rendelkező u elemet kérdezem le az U halmazból. Kifejlesztettem egy másik, új módszert, az OBEBS (Optimally Balanced Entropy Based Sampling) balansz vezérelt optimalizációs eljárást a mintakiválasztásra, amely zero-shot állapotból indítható és a kiegyenlítetttséget az L halmazon számított információs entrópia alapján determinálja. Továbbá megterveztem és megvalósítottam a multi-assignment (MA) és adaptive-assignment (AA) eljárásokat, amelyek alkalmazásával az OBEBS lekérdezési stratégia képes az U halmaz kiegyenlítetttségéből adódó problémák kezelésére, valamint a zero-shot kiindulási pontban végzett felügyelet nélküli tanulás, a klaszterezés eredményének korrekciójára. Kísérleti vizsgálatokkal igazoltam a kifejlesztett módszerek hatékonyságát és előnyeit a szakirodalmi stratégiákhoz képest. Az SCBS módszer működését és tesztelését összefoglaló tudományos dokumentációt a CSCS 2020 (The 12th Conference of PhD Students in Computer Science) konferenciára, valamint az OBEBS eljárás elméleti kidolgozását és a kísérleti eredményeket tartalmazó munkát a Pattern Recognition impact factoros (IF) folyóirathoz nyújtottam be bírálatra.

Paudics Adrien

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Grafénoxid nanoszerkezetek optikai spektroszkópiai jellemzése

A pályázat keretében a Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék Felületkémiai csoportjában előállított grafénoxid (GO) tulajdonságait vizsgáltam optikai spektroszkópiai módszerekkel. A GO mellett, hogy gazdaságos kiindulási anyaga lehet az ipari graféngyártásnak, önmagában is komoly anyagtudományi jelentőséggel bír, különleges fizikai és kémiai tulajdonságainak köszönhetően. Tulajdonságainak feltárása kulcsfontosságú a lehetséges alkalmazási területek (adszorpció, katalízis, szenzorok) szempontjából. A mi kutatásaink GO-alapú fluoreszcens kémiai szenzorok fejlesztéséhez kapcsolódtak, amelyekkel nem-fluoreszcens biomolekulákat lehet kimutatni.

Fluoreszcens indikátor kiszorításos (FID) assay-k fejlesztésének első lépéseként vizsgáltuk a GO és különböző fluoreszcens indikátorok (kationos és anionos jellegű) között kialakuló kölcsönhatásokat. A kölcsönhatások erősségét a Stern-Volmer állandókkal jellemeztük. Különböző pH-kon megismételve méréseinket, fel tudtuk bontani az adszorpciót a GO felületén előforduló funkcionális csoportok hozzájárulására. Időfelbontásos fluoreszcencia mérésekkel bizonyítottuk a kioltás statikus jellegét. További fluoreszcencia spektroszkópiai kísérletekkel meghatároztuk az adszorpció izotermáit. Így információt kaptunk a GO fajlagos felületéről.

Elindítottunk olyan kutatásokat is, amelyek FRET-típusú (Förster energia átadásos) nukleotid szenzor fejlesztésére irányulnak. Ennek érdekében megtörtént a kationos pillér[6]arénnel (AP6) módosított GO és különböző módokon redukált GO-ok előállítása. Előzetes vizsgálatok keretein belül információkat kaptunk a potenciális indikátorok-AP6 közötti kölcsönhatásról.

Polyák Péter

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

A poli(3-hidroxi-butirát) jellemzése és alkalmazása hatóanyag hordozó mátrixként

A fenntarthatóság, illetve a fenntarthatóság biztosításának problémája minden iparágat érint, ez alól a polimeripar sem kivétel. A fenntartható fejlődésnek leginkább az szab gátat hogy ezen iparág elsődleges alapanyagforrása jelenleg is a kőolaj. Ez a probléma orvosolható azonban, például természetes, megújuló alapanyagbázison előállítható biopolimerek alkalmazásával. A biopolimerek kategóriája rendkívül diverz, a pillanatnyilag egyik legintenzívebben kutatott anyagcsalád a mikrobiális poliészterek családja, melyeket bakteriumok szintetizálnak, illetve használnak sejten belüli anyag- illetve energiaraktárként. A mikrobiális poliészterek alkalmazása mellett – a megújuló alapanyagforráson történő fermentálhatóságon kívül természetesen – még számos más érv is szól: ilyen például ezen anyagok biokompatibilitása, élő szervezettel történő összeférhetősége. Sőt, az anyagcsalád egyes képviselői, például a poli(3-hidroxi-butirát) (PHB) 3-hidroxi-butánsavra bomlik le, mely az emberi vér természetes alkotóeleme, így a PHB *in vivo* alkalmazása semmiféle kockázatot nem jelent. Mindezek miatt a PHB kiválóan alkalmazható a gyógyászatban temporális esetleg hosszabb távú implantátumként, vagy akár hatóanyag-hordozó mátrixként is. Kutatásunk az ebben rejlő lehetőségek kiaknázását célozza: munkánk során különböző geometriájú, PHB-ből készülő hordozó mátrixokat állítunk elő, illetve töltjük meg azokat a vizsgálatok során használni kívánt modellhatóanyagokkal (pl. quercetin, fuchsine) illetve a gyógyászati célokra aktuálisan is alkalmazott hatóanyagokkal (pl. metronidazol). Az így elkészített hordozó mátrixokkal kivitelezett kioldásvizsgálatok eredményeit mennyiségileg is jellemezzük annak érdekében hogy képet kapjunk a folyamat sebességéről, illetve a kioldódás kinetikájáról. Bár a kvantitatív analízis jelentősége kétségtelen, amennyiben célunk egy *in vivo* körülmények között is biztonságosan alkalmazható mátrix kifejlesztése, a kioldódás folyamatának előre jelzésére, jóslására is képesek kell legyünk. Ennek megfelelően a hatóanyag-leadást a molekuláris diffúzió alapvetéseit leíró törvényszerűségekkel modellezzük: Fick II. törvényének partikuláris megoldásait egy MATLAB környezetben, e célból fejlesztett szoftverrel, numerikus úton keressük meg, illetve az így kapott, hely illetve idő függvényében változó koncentráció értékeket leíró $c(x, t)$ felületfüggvényekkel szimuláljuk a hatóanyag kioldódásának folyamatát.

Renkó József Bálint

Gépészmérnöki Kar

Anyagtudomány és Technológia Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Ferrites acél színes maratásának valós idejű megfigyelése

Fémes anyagok vizsgálatokor a mintakészítés elengedhetetlen lépése valamilyen maratási eljárás. Ennek célja, hogy előhívja a szövetszerkezetet a további mikroszkópos vizsgálatokhoz. A maratási eljárások egyik jellemző típusa a színes maratás. Színes maratás során a síkra polírozott minta felülete reakcióba lép a marószerszel, ennek hatására pedig a minta felületén egy vékony filmréteg alakul ki. A kialakult réteg át-tetsző, vastagsága pedig az idővel arányosan nő. A film vastagságától függően a réteg felületéről, ill. a fém felületéről visszaverődő fény interferenciájának következtében egy ciklikus színváltozást tapasztalhatunk. Fémek típusától függően különböző összetételű marószereket használhatunk. Mivel vizsgálatokat jellemzően ferrites anyagokon végeztük, így a használt marószert ennek megfelelően választottuk meg. A ferrites anyagokhoz használt Beraha I elnevezésű marószert anizotróp, vagyis a maratási sebessége nagyban függ az egyes szemcsék orientációjától. Emiatt a különböző orientációjú szemcsék más-más sebességgel maródnak meg és változtatják a színüket. Habár a marási sebességkülönbségek miatt a ferrit szemcsék eltérő színűek, az eljárás lehetőséget ad arra, hogy az egyes fázisokat elkülönítsük.

Munkánk során azt vizsgáltuk, hogy azonos körülmények között használt Beraha I. típusú marószert milyen módon lép reakcióba a különböző kémiai összetételű, ferrites szövetekkel. A vizsgálathoz továbbfejlesztettük a már meglévő mikrofluidika cellát és a mérési berendezést, majd kvalitatív összehasonlítást végeztünk a gömbgrafitos öntöttvas és a ferrites acél között. A vizsgálat megállapította, hogy a ferrites acéllal a Beraha I. marószert reakciója sokkal gyorsabban megy végbe, a vizsgált felületen a szemcsék akár már 90-120 másodperc után is túlmaródhatnak.

A vizsgálatok folytatásaként olyan speciális mikrofluidika cellát terveztünk, amely képes spektroszkópiai ellipszometria közben is folyamatosan biztosítani a minta felszínének monitorozhatóságát. Az új cellára azért volt szükség, mert az atomerő-mikroszkópos vizsgálatoknál a minta felületét ki kell szárítani, ami a kialakult vékonyréteg sérülését okozhatta. Ezzel a módosítással viszont in situ vizsgálhatjuk a maródó minta felületén a rétegepülést.

Rigó Petra Renáta

*Természettudományi Kar
Differenciálegyenletek Tanszék
Matematika- és Számítástudományok Doktori Iskola*

Belsőpontos algoritmusok és alkalmazásaik

Kutatási témám a lineáris optimalizálásra vonatkozó belsőpontos algoritmusok és alkalmazásaik. A lineáris optimalizálás számos területen a legjobb modellezési eszközt biztosítja. Gazdasági, ipari, mérnöki, logisztikai és más tudományos kérdések sokaságát lehet pontosan vagy közelítőleg lineáris programozási feladattal (vagy lineáris egészértékű programozási feladattal) modellezni. A lineáris programozási feladatok megoldásának egyik leghatékonyabb eszköze a belsőpontos algoritmusok használata. Kutatási céljaim közé tartozik lineáris programozási feladatokra új belsőpontos módszereknek a bevezetése és elemzése, illetve ezeknek a módszereknek kiterjesztése általánosabb feladatokra, pl. lineáris komplementaritási feladatokra vagy szimmetrikus optimalizálásra. Az egyik hatékony algoritmus osztály az ún. prediktor-korrektor belsőpontos algoritmusok osztálya, amely tanulmányozásával is foglalkozom.

A belsőpontos algoritmusok esetében fontos szerepet játszik a keresési irányok megválasztása. Kutatásom során a centrális út algebrailag ekvivalens transzformációját használom új keresési irányok előállítására céljából. Az új keresési irányokon alapuló belsőpontos algoritmusokat vezettem be. A kutatási eredményeimet, új belsőpontos algoritmusokat és az elemzéseiket a nemrég elkészült doktori (PhD) disszertációmban foglaltam össze. (A házi védésen már sikeresen túl vagyok.) A bevezetett új belsőpontos algoritmusok polinomiális komplexitása megegyezik a szakirodalomból ismert legjobb komplexitási eredménnyel. Hatékonyságukat számos tesztfeladaton vizsgáltuk.

További eredmények közé tartozik a bevezetett algoritmusok hazai és nemzetközi folyóiratokban való publikálása és nemzetközi konferencián való bemutatása. Megemlíteném a „Full Nesterov-Todd step feasible interior-point algorithm for symmetric cone horizontal linear complementarity problem based on a positive-asymptotic barrier function” című publikációt, amely az „Optimization Methods and Software” nemzetközi folyóiratban jelent meg. További két cikk került véglegesítésre, amelyek elbírálás alatt állnak. Az „Új keresési irányra épülő belsőpontos algoritmus lineáris optimalizálásra” című cikk az „Alkalmazott Matematikai Lapok”-ba, a „Feasible corrector-predictor interior-point algorithm for $P^*(K)$ -linear complementarity problems based on a new search direction” című publikáció a „Siam Journal on Optimization” folyóiratba lett benyújtva.

Kutatásaim számos új kérdést is felvetettek, amelyekkel a következő években szeretnék foglalkozni.

Rónai Levente

*Természettudományi Kar
Kognitív Tudományi Tanszék
Pszichológia Doktori Iskola*

Affektív működések és érzelemszabályozás egyénen belüli variabilitásának vizsgálata hálózatelemzéssel

A pszichopatológiai hálózatelemzés egy lehetséges módszere annak, hogy a mentális zavarokat meghatározó biológiai, kognitív és affektív tünetek komplex kovarianciáját modellezni tudjuk. Az idiografikus szemlélet egy-egy kutatási alany mélyreható és intenzív vizsgálatát célozza meg, így ezen a megközelítésen keresztül főképp egy adott személy pszichés folyamataira vonatkozóan keresünk szabályszerűségeket és vonunk le következtetéseket. Kutatásom céljaként azt tűztem ki, hogy a hálózatelemzés és az idiografikus szemlélet ötvözésével megvizsgáljam azt, hogy milyen mintázatok figyelhetők meg az egészséges és a patológiás affektív működésben az idő, a külső események, illetve különböző vonásszintű pszichológiai jellemzők vonatkozásában.

A kutatási program egyik részében egy egészséges személy affektív működését teszteltem ESM (Experience Sampling Method; Élményértékelő Mintavételi Eljárás) módszerrel. Az ESM módszer lehetővé teszi a résztvevők intenzív és mindennapi vizsgálatát, ezáltal pedig megfigyelhetővé válnak a mért pszichológiai folyamatok időbeli változása, dinamizmusa. A vizsgálat ideje alatt (2 x 35 nap) napi több alkalommal mértem a résztvevő pozitív, illetve negatív affektív állapotait, alkalmazott érzelemszabályozó stratégiáit, továbbá depressziós és szorongásos tüneteit. Az eredmények feldolgozása jelenleg folyamatban van. Egészséges személyek vizsgálatán kívül eredeti elképzelésem szerint major depressziós betegpopuláció adta volna a kutatás mintáját. Jelenlegi állás szerint borderline személyiségzavarral élő személyek vonhatók be a kutatásba, azonban a COVID-19 világjárvány miatt az adatfelvétel egyelőre nem indulhat el. A kutatási program másik részében egy nemzetközi együttműködés keretein belül sikeresen elkészítettük és publikáltuk szkizotípiás vonások keresztmetszeti hálózati modelljét egy egészséges személyek adatait tartalmazó jelentős méretű mintán.

A kutatások eredményeitől azt várom, hogy elősegítik az affektív működés egyedi mintázatainak felderítését, illetve hozzájárulnak az idiografikus szemléletű kutatási lehetőségek bővebb megismeréséhez, alkalmazásához. Továbbá a kutatási eredmények segíthetnek pontosabban megérteni az egészséges és a patológiás pszichés működés összetett rendszereit, illetve reményeim szerint az eredményekből levonható következtetések előmozdítják a személyre szabott pszichiátriai kezelések fejlődését.

Sánta Botond

Természettudományi Kar

Fizika Tanszék

Fizikai Tudományok Doktori Iskola

Átmenetifém-oxid memrisztorok zajvizsgálata

A pályázat keretében megvalósult kutatómunkám során átmenetifém-oxid rendszerek zajviszonyait tanulmányoztam, illetve hasonlítottam össze a kutatócsoportban korábban vizsgált ezüstalapú rendszerek zajviszonyaival. Kutatásomban időfelbontásos áramzajmérés segítségével STM (pásztázó alagútmikroszkópos) technikával kialakított Nb_2O_5 és Ta_2O_5 pontkontaktusok áramzaját vizsgáltam azok lineáris tartományában. Az adatok kiértékelése során kihívást jelent, hogy az ezüstalapú rendszereknél tapasztalt $1/f$ típusú zajspektrummal szemben az oxidalapú rendszerek zajspektrumának kiértékelése összetettebb modellt kíván a jellemző domináns fluktuátorok jelenlétének, és Lorentz-típusú zajspektrumának köszönhetően. Sztochasztikus megjelenésük miatt ezen fluktuátorok áramzajjárulékát statisztikai elemzésnek vettem alá, amely alapján kijelenthető, hogy járulékkuk ellenállás-független és relatív hozzájárulásuk az áramzajhoz 20-40% közötti.

Az oxidalapú rendszerek árammal normált áramzaj arányáról (zaj-jel arány) megállapítottam, hogy az ezüstalapú rendszerekhez hasonlóan igen erős ellenállásfüggést mutat, ugyanakkor az oxidalapú rendszerek akár egy nagyságrenddel kisebb zajt produkálnak. A kutatócsoportunk által ezüstalapú rendszereknél feltárt diffúzív-ballisztikus átmenet [1] az oxidalapú rendszerek esetében is megjelenik. Utóbbiaknál a korábbi modell alapján fizikailag két effektussal magyarázható az említett zajcsökkenés: az elektronok lecsökkent szabad úthossza és a dinamikus szórócentrumok sűrűségének csökkenése a filamentumban. Anyagtudományi szempontból e két effektus célzott alkalmazása igen hasznos receptnek bizonyulhat, amennyiben egy fizikai eszköz elektronikus zajának csökkentése vagy testreszabása a cél.

A lineáris tartományon túl vizsgáltam a Nb_2O_5 és Ta_2O_5 memrisztorok áramzaját a kapcsolási küszöb környékén is. A méréseim alapján a kapcsolási küszöb előtti nemlineáris tartományban szignifikáns zajnövekmény jelenik meg a lineárisban mérthez képest.

[1] B. Sánta et al. *Nanoscale*, **10**, 19290, 2018

Sárdi Dávid Lajos

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Anyagmozgatási és Logisztikai Rendszerek Tanszék
Kandó Kálmán Doktori Iskola*

Multikritériumos minősítési modell kidolgozása városi övezetek city logisztikai szempontú értékelésére

A kutatás során a célunk egy olyan multikritériumos minősítési modell kidolgozása volt, amellyel nem csak a korábbi city logisztikai kutatásunk során vizsgált egyes koncentrált igénypont-halmazokat (pl. bevásárlóközpontokat), hanem nagyobb kiterjedésű, önálló igénypontokat és koncentrált igénypont-halmazokat is tartalmazó városi övezeteket, területeket is tudunk értékelni a jelenlegi city logisztikai fejlettség, valamint a jövőbeli city logisztikai szempontú fejlesztési potenciálok szempontjából. A projekt első lépéseként részletes irodalomkutatást végeztünk, amely alapján megállapítottuk, hogy a city logisztikában használatos dokumentált minősítési modellek sokfélék, azonban ezek céljai egyik esetben sem egyeznek meg az általunk megfogalmazott kettős céllal, így **a tervezett minősítési modell egy teljesen új alkalmazás lehet**. A számos elérhető multikritériumos modell közül az AHP (Analytic Hierarchy Process) módszert választottuk ki, a kettős célrendszer kezelését pedig két AHP-modell együttes alkalmazásával valósítottuk meg, így egyszerre kaptunk választ a jelenlegi fejlettséggel és a fejlesztési potenciálokkal kapcsolatosan is. Mivel a korábbi kutatásaink során már egy részletes adatgyűjtési módszertan és egy mezoszkópikus szintű szimulációs modell is elkészült, így a szempontrendszer kidolgozása során ezeket is figyelembe véve négy szempontcsoportot határoztunk meg: **kérdőíves felmérésből származó adatokat, szimulációs úton előállítható adatokat, koncentráltági mutatókat, valamint a hálózat és a szabályozás jellemzőit**. A jelenlegi fejlettség vizsgálatához 43, a jövőbeli fejlesztési potenciálok meghatározásához 56 szempontot definiáltunk, a szempontrendszer súlyozását pedig a BME, a BKK és a Levegő Munkacsoport szakértőinek bevonásával végeztük el. A projektünk során formalizáltuk a kettős célrendszert kezelő AHP-modellt, majd **a szempontok súlyozása után teszteltük is annak működését négy zónára**, melyeket a korábbi kutatásunk eredményei szolgáltattak, négy bevásárlóközponttal kapcsolatosan már rendelkezésünkre álltak kérdőíves és szimulációs adatok is. A modell tesztelése során arra jutottunk, hogy nem elegendő az egyes zónákat egymáshoz mérni, mivel így torzulhatnak az eredmények. Emiatt **felvettünk egy úgynevezett fiktív zónát is**, amelyet optimális, illetve egzakt optimummal nem rendelkező paraméterek esetén elegendően jó tulajdonságokkal ruháztunk fel, ezzel együtt pedig már 5 zónára is lefuttattuk a teszteket, ennek köszönhetően realisabb eredményeket kaptunk. Természetesen megfogalmaztuk a kutatásunk következő lépéseit is: szeretnénk érzékenységvizsgálatokat végrehajtani, szeretnénk tesztelni a minősítési modellt a budapesti Váci utca bevásárlóövezet zónáin is, mivel ezzel kapcsolatosan is részletes adataink vannak, valamint a továbbiakban egy budapesti piac, valamint egyszerű igénypontokat tartalmazó városi övezetek felmérését és vizsgálatát is tervezzük a minősítési modell használatával.

Sóvári Dénes

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Új várhatóan fluoreszcens β -karbolinszármazékok

Számos, széles körben elterjedt fluoreszcens jelölőanyag ismert a szakirodalomban, ezeknek egy jelentős csoportja a difluorboranil-csoportot tartalmazó vegyületek. A difluorboranil-csoportot jellemzően vagy két nitrogén közé építik be, ilyenek a BODIPY származékok [1], amelynek analógiájára fluoreszcens, triptamin vázrészletet tartalmazó melatonin receptorra szelektív jelölővegyületet is szintetizáltak [2]. Ezen kívül nitrogén és oxigén koordinálta difluorboranil komplexek is ismertek, amelyekre példa a boroizokinolin vegyületcsalád [3].

Kutatómunkám során célul tűztük ki új fluoreszcens alkaloidszármazékokat előállítását difluorboranil-csoport beépítésével. Emellett vizsgálni kívánjuk az egyes szubsztituensek optikai spektroszkópiára gyakorolt hatását.

Ehhez előbb több lépésben szintetizáltam a β -karbolin vázvegyületeket, majd difluorboranil csoporttal láttam el azokat. Az így előállított módosulatokat fotospektroszkópiai jellemzőit is meghatároztam. A jellemző hullámhosszadatok mellett (abszorbancia, gerjesztési és emissziós hullámhossz maximum), a moláris abszorpciós koefficiens és kvantumhasznosítási tényezőket is meghatároztam, illetve vizsgáltam a vegyületek fotostabilitását is. Az eredmények alapján több származék is ígéretesnek mutatkozik a biológiai felhasználhatóság szempontjából.

[1] Loudet, A.; Burgess, K. BODIPY Dyes and Their Derivatives: Syntheses and Spectroscopic Properties. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 4891–4932.

[2] Marteaux, J.; Delagrangé, P.; Lefoulon, F.; Dufourny, L. Original Design of Fluorescent Ligands by Fusing BODIPY and Melatonin Neurohormone. *ACS Med. Chem. Lett.* **2014**, *5*, 158–161.

[3] Sóvári, D.; Kormos, A.; Demeter, O.; Dancsó, A.; Keserű, G.M.; Milen, M.; Ábrányi-Balogh, P. Synthesis and fluorescent properties of boroisoquinolines, a new family of fluorophores. *RSC Adv.* **2018**, *8*, 38598–38605.

Surman Vivien*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Menedzsment és Vállalkozásgazdaságtan Tanszék
Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola*

Munkaerőpiaci szereplők minőség szempontú, dimenzionálható elvárásainak feltárása 3 alapképzés mentén

Ahhoz, hogy a hallgatókért és támogatásért folytatott versenyt megnyerjék a felsőoktatási intézmények, a lehető legjobb minőséget kell nyújtaniuk az oktatási folyamatokban, ami sok esetben kihívás lehet. Ennek oka, hogy a szolgáltató szervezetek csak úgy tudnak hatékony és igényeket kielégítő szolgáltatást nyújtani, ha tudják kik a vevőik és mik ő az igényeik. A kutatás célja, hogy a munkaerőpiac, az oktatók és a hallgatók bevonásával meghatározásra kerüljenek különböző szolgáltatásminőség dimenziócsoporthoz az egyes működési szintekhez kapcsolódóan, illetve hogy a GM, NG és MM szakokhoz kötődő munkaerőpiaci jellemzők egy része azonosítható legyen. Ezek az eredmények pedig megalapozhatják egy, e szakokra összpontosító értékelő rendszer létrehozatalát.

A munkaerőközvetítő szervezetekkel készített 5 interjú alapján tisztán látszik, hogy a szervezeteknek csak a jelentkezők által elvégzett szakok és azok a készségek és képességek számítanak, amelyekkel bírnak. Az intézményekkel kapcsolatban csak ritkán merülnek fel elvárásaik, az elvégzett felsőoktatási kurzusokkal kapcsolatban pedig szinte egyáltalán nincsenek. Azonban az interjúalanyok azt is kiemelték, hogy a projektfeladat kurzusok – gyakorlati tudást adó kurzusok – elvégzése versenyelőnyt jelenthet a jelentkezők esetében, így az ilyen kurzusok teljesítését érdemes minél inkább kiemelni akár a CV-ben, akár a felvételi interjúk során. Véleményük szerint ezek elvégzése beszámítható a gyakorlati tapasztalatok közé. A GM, NG és MM szakok a legtöbb magyar felsőoktatási intézmény repertoárjában megtalálhatók. E szakok hallgatói és végzettjei igen rövid idő alatt találhatnak végzettségükhöz kötődő állást maguknak. 2 fókuszcsoport alapján a hallgatók számára is a szak volt elsődleges fontosságú a felsőoktatásba való jelentkezésnél, bár a szak kiválasztása után valamennyire az intézményeknek is utánanézték. Kurzusokra egyáltalán nem fektettek hangsúlyt, azonban, ha tudtak volna a projektfeladat kurzusokról, mindenképp versenyelőnynek tekintették volna. Hallgatók és oktatók véleménye alapján bizonyítást nyert, hogy intézmény működési szintenként különböző aspektusokra, dimenziókra kell figyelmet fordítani a szolgáltatásminőség mérés során, illetve ezeket mindenképp definiálni szükséges az értékelési rendszerekben, hogy az érintettek mindenképp ugyanazt értsék alattuk. Az aspektusok meghatározásához 1 hallgatók számára készített kérdőív és 5 hallgatókkal és oktatókkal folytatott fókuszcsoportos beszélgetés is kialakításra került. Végeredményként 9 szolgáltatásminőség dimenzió került azonosításra intézményi, 7 szak és 9 kurzus szinten.

Szabó András

Gépészmérnöki Kar

Hidrodinamikai Rendszerek Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Öngerjesztett áramlási lengések modellezése és analízise

A fúvós hangszerekben lejátszódó folyamatokra nem áll rendelkezésre megfelelő pontosságú koncentrált paraméterű modell. Jelen kutatásban a koncentrált paraméterű modellek egy elemével, az érzékenységgel modellezésével foglalkozunk, amely az akusztikus rezonátornak a szabadsugárra kifejtett hatását veszi figyelembe. A témával foglalkozó folyóiratcikkek mind a szabadsugár modellezését jelölték meg, mint a leginkább fejlesztésre szoruló elemet a koncentrált paraméterű modellek részei közül. A modell pontosítása azonban nehézkes, mivel ehhez mérések vagy az összenyomható áramlás direkt numerikus szimulációja szükséges, és ez a két módszer rendkívül időigényes.

A korábban a Hidrodinamikai Rendszerek Tanszéken modellt fejlesztettünk, amellyel összenyomhatatlan áramlás esetén figyelembe vehető az akusztikus gerjesztés hatása. Ezzel jelenetően csökkentett számítási igénnyel lehetséges az akusztikusan gerjesztett áramlás modellezése, és ez hozzájárulhat a fúvós hangszerek modelleinek pontosításához.

A kutatás során áttekintettük az akusztikusan gerjesztett szabadsugarak modellezésével kapcsolatos irodalmat. Felépítettünk egy szimulációs modellt, és kiszámoltuk a szabadsugár lengéseinek amplitúdóját és fázisát, valamint a lengések növekedési rátáját és fázissebességét. Eredményeinket a szakirodalomban található mérésekkel hasonlítottuk össze. Az összehasonlítás során részletesen elemeztük az eredményeket befolyásoló tényezőket, a szimulációk és mérések közti egyezés és eltérések okait, és kitérünk a lehetséges fejlesztési irányokra.

Szabó Szentjóni Hajnalka

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Foszfor heteroatomot tartalmazó koronaéterek előállításának és alkalmazása

Az utóbbi években megnőtt a hidrofornilezési reakciók enantiomerszelektív módon történő kivitelezésének jelentősége, a nem-szteroid gyulladáscsökkentők formil prekursorainak enantiomertiszta formában történő előállítása miatt. A trivalens foszforvegyületek kiváló komplex-képző tulajdonsággal rendelkeznek, jól koordinálódnak különböző fémekkel, emiatt elterjedten használják őket homogén katalitikus reakciókban katalizátor-prekursorokként, például hidrofornilezési reakciókban. Annak ellenére, hogy a különböző foszfin-ligandumok széles körben vizsgált vegyületek, mégis igen kevés olyan koronaéter alapú vegyületet ismert az irodalom, amely a makrogyűrűben tartalmazza a trivalens foszforatomot. Az ilyen típusú vegyületek kiemelkedő komplexképzési tulajdonságokkal rendelkezhetnek, valamint kifejezetten alkalmas lehetnek katalizátor-prekursoroként való alkalmazásra enantiomerszelektív reakciókban, hiszen előállításuk során könnyen kialakítható kiralitáscentrum a gyűrűben.

Kutatócsoportunkban korábban előállítottunk trifenilfoszfin egységet tartalmazó királis koronaétereket, melyekből a Pécsi Tudományegyetem Természettudományi Karán palládium és ródiom komplexeket képeztek, és vizsgálták ezek katalizátorként történő felhasználását sztirol hidrofornilezési reakciójában, mely során jó enantiomerszelektivitást sikerült elérni. Ezen munka folytatásaként állítottam elő az ösztöndíjas időszak alatt hat, új foszfin egységet tartalmazó királis makrociklust, melyeket a későbbiek folyamán szintén sztirol hidrofornilezésében szeretnénk vizsgálni katalizátor ligandumként. Az előállított makrociklusok segítségével vizsgálhatóvá válik, hogy milyen hatással van a katalizált reakcióban elérhető szelektivitás értékekre a koronaéterek gyűrűmérete, a kiralitáscentrumokon elhelyezkedő csoportok térkitöltése, valamint, hogy jelent-e előnyt a koronaéter típusú kétfogú ligandumok alkalmazása.

Szagri Dóra

Építőmérnöki Kar

Építőanyagok és Magasépítés Tanszék

Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola

Felújított kéthéjű hidegtetők higrotermikus monitoring vizsgálata és dinamikus numerikus szimulációs elemzése

Hazánkban az 1960-1980 között épült lakóépületek jelentős része iparosított technológiával épült. Legnagyobb arányban Budapesten találunk panellakásokat, itt a lakott lakások közel 30%-a ilyen technológiával készült. Ezen épületek esetében az általánosan előforduló egyenes rétegrend mellett, kéthéjű hidegtetőként készült szerkezeteket is alkalmaztak, mely nem csak az egymástól elválasztott csapadékvíz elleni szigetelés és hőszigetelés miatt kedvező, hanem páratechnikai szempontból is. Összességében elmondható, hogy a hazai épületállomány 70%-a felújításra szorul: a panel épületek nagy része mára elavult, valamint épületenergetikai teljesítményük miatt is esedékes a korszerűsítésük. Ezen épületszerkezetek komplex hő- és nedvességtechnikai viselkedése mélységében nem ismert, vizsgálataim során erre kívánok választ adni. Kutatásomban egy felújított kéthéjű lapostető energetikai és épületfizikai teljesítőképessége került részletes elemzésre, ahol az átszellőztetett légrést fűjt üveggyapottal hőszigetelték. A kutatás során a beépített hőszigetelés higrotermikus tulajdonságainak helyszíni és laboratóriumi vizsgálatát végeztem el, mellyel meghatározható az elkészült rétegrend minősége, épületfizikai viselkedése. A vizsgálati eredmények kiértékelésével meghatároztam a beépített anyag hőmérséklet- és nedvességkorrekciós tényezőit és az ebből következő energetikai teljesítőképességbéli csökkenését a vizsgált időtartam alatt. A helyszíni és laboratóriumi vizsgálatokkal meghatároztam a dinamikus higrotermikus szimulációhoz szükséges anyagtulajdonságokat, mellyel modelleztem a beépítés és az öregedés hatását a szerkezetben. A megállapított hő- és nedvességtechnikai tulajdonságok épületfizikai, épületenergetikai számításokhoz jelentenek hasznos adatokat, továbbá a megismert tulajdonságok és beépítési viselkedés az anyag továbbfejlesztése során és a meglévő épületállomány felújítása során is értékes információt ad.

Szemenyei Márton

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Irányítástechnika és Informatika Tanszék
Informatikai Tudományok Doktori Iskola*

Modell alapú ágens létrehozása kooperatív környezetekhez

A megerősítéses tanulás ágensek feladata, hogy komplex stratégiákat legyenek képesek megtanulni és végrehajtani dinamikus változó környezetekben. Erre számos megoldás létezik, melyek közül a modell alapú, és kíváncsiság vezérelt architektúrák nagy népszerűségnek örvendenek. A jelenlegi megoldások túlnyomó többsége azonban feltételezi, hogy az ágens környezetének aktuális állapota pontosan és teljesen ismert, ami a valóságban általában nem igaz. A kamerák látószöge, valamint az objektumdetektálás módszereinek tökéletlensége nagymértékben befolyásolja a környezetről rendelkezésre álló megfigyelések pontosságát.

A jelen kutatás célja, hogy olyan dinamikus megerősítéses tanulás környezeteket alkosson, amelyek a fent említett problémákat képesek megfelelően szimulálni, így ezekre megoldást kínáló ágens architektúrák is taníthatók legyenek. A kutatás során két környezetet alkottam: egy robotfoci szimulátort, valamint egy egyszerű önvezető autó környezetet, amely egyetlen városi kereszteződésből áll. Mindkét környezet támogatja a zajos, részleges megfigyeléseket, valamint több ágens interakcióját is.

A környezetek megvalósítására racionális kíváncsiság alapú modelleket is alkottunk, amelyek képesek a környezet feladatait megoldani. Ennek érdekében több újítást is kellett eszközölni a háló modelljén, melyek közül az egyik a visszacsatolt időbeli figyelem, amely a több időpontban érkező megfigyelések párosítását végzi, valamint a konvergenciát megkönnyítő időbeli entrópia regularizációs büntetőtag. Fontos eleme volt a kutatásnak, hogy a neurális háló képes legyen a részleges megfigyelésekből a saját pozícióját, valamint a teljes állapotot minél pontosabban rekonstruálni. A környezetek és a hozzá tartozó neurális háló modellek implementációja megtalálható a <https://github.com/szemenyeim/DynEnv> weboldalon.

Szentpéteri Bálint

Természettudományi Kar

Fizika Tanszék

Fizikai Tudományok Doktori Iskola

Spin-pálya kölcsönhatás grafén heterostruktúrákban

A *spin-pálya kölcsönhatáson* (SOI) alapuló spintronikai eszközök kiváló alternatívát jelenthetnek a jelenlegi töltés transzporton alapuló logikai eszközök mellett. Ilyen eszközök létrehozásához szükséges egy csatorna, melyben létrehozzuk a spinpolarizált áramot, melyre a grafén kiválóan alkalmas, valamint szükség van a spinek manipulálására is, melyhez a SOI-t hívhatjuk segítségül [1].

A spinek manipulálása mellett a másik kritikus lépés a spin áram létrehozása a csatornában (grafénben). A kutatásom során BiTeBr kristályt használtunk spin injektálására, mivel ebben az anyagban az egyik legnagyobb a tömbi Rashba-féle SOI [2]. Ennek érdekében grafént és vékony BiTeBr szeleteket állítottam elő a tömbi megfelelőikből mechanikai exfoliációval, majd ezekből a standard Van-der-Waals rétegszerkezet összeépítési eljárását alkalmazva Grafén/BiTeBr heteroszerkezeteket állítottam elő. Ezt követően ezekből elektronsugaras litográfiával nanoáramköröket készítettünk ferromágneses kontaktusokkal. Az így előállított mintákon spinszelep elrendezésben a BiTeBr kristályt használtuk spin injektálásra, és ferromágneses kontaktusokkal sikerült detektálni a nem-mágneses kontaktussal előidézett spináramot.

A spintranszport méréseket kiértékelve megállapítottuk, hogy a BiTeBr alkalmas anyag spin injektálásra grafénben, és ennek hátterében a Rashba-Edelstein effektus áll. Ehhez a grafén/BiTeBr heteroszerkezetben a spináramot egy alagútáram modellel vizsgáltam, mely kvalitatívan konzisztens eredményt adott a mérési eredményeinkkel.

[1] Han, W., Kawakami, R., Gmitra, M.*et al.* Graphene spintronics. *Nature Nanotech* 9, 794–807 (2014).

[2] M. Sakano, K. Ishizaka, et al. Strongly Spin-Orbit Coupled Two-Dimensional Electron Gas Emerging near the Surface of Polar Semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* 110, 107204 (2013)

Szilágyi Mariann

Építőmérnöki Kar
Vízépítési és Vizgazdálkodási Tanszék
Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola

Nádassziget körüli hullámozás vizsgálata terepi mérések és numerikus modellezés útján

A vízből kiemelkedő növényzetfoltok hatással vannak a szélre, az áramlásra és a felszíni hullámokra, továbbá befolyásolják a hordalékmozgást is. A vízben található lebegtetett hordalék leülepszik a növényzetfolt mögött, ami segíti a növény ebbe az irányba való terjedését. Fontos ennek a folyamatnak a megértése ahhoz, hogy előre jelezzük egy növényzettel tarkított sekély tó morfológiai változásait.

A vizsgálatunkat egy 100 m átmérőjű nádasfolton végeztük, ahol a felszíni hullámozást térképeztük fel terepi vizsgálatokkal és numerikus modellezéssel. A terület jellemző széliránya az É-ÉNy-i, azonban D-DK-i szelek is előfordulnak. A vízmélység még a sekélyebb részekben sem haladja meg a 1,5 métert. A vizsgálatunk célja, hogy a mérésekből és modellezésből kapott információk alapján a hullámozás dinamikáját jellemezzük a nádassziget körül, különös figyelmet fordítva a hullámjellemzőkre, úgy, mint a visszaverődésre, csillapodásra és az elhajlásra. Továbbá vizsgáljuk a hullámozás mederfenékre való hatását is a sziget körül, mely segítheti a hordalékmozgás megértését is. E jellemzőket és célokat figyelembe véve egyidejű szél, áramlás és hullázmérésrel vizsgáltuk a sziget körül megjelenő hullámjelenségeket különböző szélesemények alatt. Emellett egy kétdimenziós spektrális-alapú SWAN hullámozásmodellt (Booij et al. 1999) készítettünk a szigetre és a környékére. A modell már korábban igazolásra került sekély tavi környezetben (Homoródi et al. 2012), Suzuki et al. (2012) pedig alkalmazta mangrove fák hullámozásra gyakorolt hatásainak vizsgálatára.

Hivatkozások:

- Booij, N. R. R. C., Ris, R. C., & Holthuijsen, L. H. (1999). A third-generation wave model for coastal regions: 1. Model description and validation. *Journal of geophysical research: Oceans*, **104**(C4), 7649-7666.
- Homoródi, K., Józsa, J., & Krámer, T. (2012). On the 2D modelling aspects of wind-induced waves in shallow, fetch-limited lakes. *Periodica Polytechnica Civil Engineering*, **56**(2), 127-140.
- Suzuki, T., Zijlema, M., Burger, B., Meijer, M. C., & Narayan, S. (2012). Wave dissipation by vegetation with layer schematization in SWAN. *Coastal Engineering*, **59**(1), 64-71.

Szlancsik Attila

Gépészmérnöki Kar

Anyagtudomány és Technológia Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Alumínium mátrixú szintaktikus fémhabok anyagmodelljeinek vizsgálata

A kutatásom során kompozit fémhabokat állítottam elő kisnyomású infiltrálással. A fémhabok mátrixanyaga AlSi10MnMg volt, míg az erősítőanyag expandált (porózus) agyagkavics. Az AlSi10MnMg ötvözet egy, az autóiparban elterjedt kiválóan keményíthető alumínium ötvözet jó mechanikai és öntetési tulajdonságokkal, míg az agyagkavics, egy nagyon olcsó, és jó hőállósággal rendelkező, oxidokból álló töltőanyag. A mátrixanyag olvasztását indukciós kemencével végeztem 850°C-on és az öntéshez használt tégelyeket, amelyekbe előre bele voltak töltve a gömbhéjak, 500°C-ra melegítettem elő. Miután beleöntöttem az olvadt alumíniumot az öntőformába egy pipával lezártam, amelyen keresztül argon gázt vezettem be 400 kPa-os nyomással. Az így előállított fémhabok sűrűsége $1,30 \pm 0,03 \text{ gcm}^{-3}$ volt. Ezt követően kimunkáltam a zömítéshez szükséges próbatesteket a tömbből. A zömítéshez 14 mm átmérőjű és 14 mm magasságú hengeres próbatesteket használtam. A zömítés során 0,5 mm lépésközökkel megálltam és megmértem a próbatest magasságát és átmérőjét, valamint a gép folyamatosan regisztrálta az erő értékeket. Ezekből az adatokból meghatároztam a Shima-Oyane anyagmodell paramétereit. Ezt az anyagmodellt eredetileg szinterelt (kismértékű porozitással rendelkező) anyagokra dolgozták ki, viszont ez már beépítésre került a végelelemes szoftverekbe, így könnyen alkalmazható fémhabokra is (amelyek nagyobb porozitással rendelkeznek). Az anyagmodell nagy előnye, hogy figyelembe veszi a porozitást az anyagban, így képes a térfogatváltozás számolására is. Ez azért különösen fontos, mivel a hagyományos fémekben a térfogatállandóság teljesül (képlékeny alakváltozás esetén), azonban a fémhabok esetében ez nem igaz (a porozitás miatt).

Összefoglalásképpen elmondható, hogy sikeresen gyártottam agyagkavicsal erősített fémhabokat, majd a zömítésvizsgálatokból sikeresen meghatároztam a Shima-Oyane anyagmodell paramétereit, amely alkalmas a kompozit fémhabok viselkedésének (beleértve a tönkrementelt is) leírására.

Szóke Tamás

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Környezetgazdaságtan Tanszék
Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola*

Villamosenergia-fogyasztási szokások elemzése big data módszerekkel

A megújuló energiaforrások integrálása a liberalizált, piaci alapú és egyre inkább decentralizált villamosenergia-rendszerek nagy kihívása. Az ingadozó termelésű megújulók kiszabályozásának egyik módja – a rugalmas termelésű erőművi kapacitások és a tárolási kapacitások növelése mellett – az úgynevezett keresletoldali szabályozás. A kereslet oldali szabályozás lényege, hogy a fogyasztók a villamos energia rendszer igényeinek megfelelően változtatják fogyasztásukat. A háztartási fogyasztás nyújtotta potenciális keresletoldali válasz kapacitás felmérésében és a lehetséges piaci modellek kidolgozásában a háztartások eszközszintű fogyasztási mintázatainak ismerete jelentős segítséget nyújthat. A valós mérési adatok azonban jellemzően csak a háztartások teljes fogyasztásának szintjén állnak rendelkezésre, nagyon kevés az elérhető eszközszintű adat. A kutatás a nagyszámú fogyasztó esetén rendelkezésre álló villamosenergia-fogyasztási adatsorokból kinyerhető információ mennyiség növelésének lehetőségeit vizsgálja alacsonyfrekvenciás, elsősorban 15 perces mérési gyakoriságú adatokon. A szakirodalmi kutatómunka multidiszciplináris jellegű: az informatikai-számítástechnikai eredmények, algoritmusok alkalmazási lehetőségeit mutatja be nagyszámú mérési ponton, de alacsony mérési gyakoriságú adatok feltételezése mentén. Az eredmények további kutatások megalapozásához használhatóak fel. A tanulmány leginkább a több szakterületről érkező, interdiszciplináris kutatócsoport munkáját segíti azáltal, hogy áttekintést nyújt a legkönnyebben hozzáférhető alacsonyabb mérési frekvenciájú adatbázisok esetében alkalmazható módszerekről és algoritmusokról.

Szücs Botond

Gépészmérnöki Kar

Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Szén-dioxid semleges tüzelőanyagok vizsgálata

Az erőművi energetika egyik legjelentősebb kihívása napjainkban, a fosszilis eredetű szén-dioxid kibocsátás csökkentése. Az egyértelmű környezetvédelmi megfontolások mellett. A szén-dioxid kvóta rendszere gazdasági nyomást is helyez az energia szektorra, annak érdekében, hogy csökkentsék az üvegházhatású gáz kibocsátásukat. Egy reális alternatíva a szén-dioxid semleges tüzelőanyagok alkalmazása, amely hazai viszonylatban mezőgazdasági és háztartási hulladékok hasznosítását jelenti.

A kutatás középpontjában egy az EU által szabványosított ún. másodlagos tüzelőanyag az SRF állt. Az SRF kommunális hulladék alapú tüzelőanyag, amelyet fűtőérték, klór és egyéb szennyező anyag tartalom alapján az MSZ EN 15359:2012 szabvány 5 osztályba sorolja. A vizsgálatok során az SRF fluidizációs tüzelésű hasznosítását kutattam. Különböző gázsebességek és ágyanyagok esetén kísérleteket végeztem az ágyanyag és a tüzelőanyag közötti keveredés megismerésére. A vizsgálatok során 3 különböző közepes szemcseátmérőjű ágyanyagot vizsgáltam, úgy hogy a fluidágyat 3 részre osztottam (alsó, középső és felső). Az egyes cellákban megmértem a tüzelőanyag koncentrációját.

Az így előállt kísérleti eredményekhez CFD szimulációt illesztettünk Mohamed Al-Agha PhD-hallgatóval. Megállapítottuk, hogy az SRF szemcsék nem modellezhetőek gömbszerű szemcsékként. Ezek után kerestünk egy olyan gömbölyűség arányt, amivel a vizsgált SRF minta fluidágyas viselkedése leírható. Kísérleti és szimulációs úton megállapítottuk, hogy az adott modell 0,23 gömbölyűség arány esetén közelíti legjobban a kísérleti eredményeket.

Táczai István

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Villamos Energetika Tanszék
Villamosmérnöki Tudományok Doktori Iskola*

Stabilitásszámítási módszerek smart grid környezetben

Napjainkban a villamosenergia-rendszer a növekvő megújuló részarány, ellátásbiztonsági és minőségi igények, valamint az új technológiai lehetőségek hatására jelentősen átalakul. Az infokommunikációs technológiák, digitális megoldások jelentősen növelik a rendszerről rendelkezésre álló adat mennyiségét, minőségét, mely alapján új módszerek fejleszthetők a tervezés, irányítás és üzemeltetés támogatására, ideértve a stabilitásvizsgálatokat is. Irodalomkutatásom során két fő célt határoztam meg: kiemelni a stabilitás szempontjából lényeges fizikai folyamatokat és rendszerszinten tapasztalt változásokat (pl. inerciacsökkenés, elosztottság fokának növekedése a termelők között, terhelések feszültség- és frekvenciaérzékenységének változásai), valamint megtalálni azokat a smart grid eszközöket, melyek közvetlenül alkalmazhatók a számítások során. Különös figyelmet fordítottam a kiterjedt mérő- szenzorrendszerek adta lehetőségekre, mely a topológiafüggő stabilitási fogalmak, illetve adatalapú döntések meghozatalát teszik lehetővé. Korábbi kutatásom alapján a villamosenergia-rendszerek stabilitásvizsgálatának teljes módszertanára vonatkozóan új rendszerezési elvet fogalmaztam meg, melyhez a kutatás eredményei számos határfeltételt adnak meg, módszertani megközelítések tekintetében pontos leírásokat képeztem az egyes alkategóriákhoz. Az adatok felhasználásának fő célja a redukált modellek pontosítása, üzemállapot- és topológiafüggés reprezentálása.

Kutatásom fókuszába a forgó tömeg nélküli, decentralizáltan megjelenő villamosenergia-termelők rendszerstabilitásra gyakorolt hatásának kvantitatív elemezhetősége került. A stabilitásvizsgálati kategóriák kibővítésével jól definiált módszertani megkötésekkel rendelkező (esemény mérete, vizsgált rendszerem modellezési határfeltételei, időtáv, alkalmazható számítási elv) típusokat adtam meg. A kiterjedt mérési infrastruktúra által szolgáltatott adatok felhasználása hálózatredukációs módszerek során reprezentatív helyettesítőképekhez, gyakorlatban is jól értelmezhető kimenetekhez vezet, megőrizve az adatok hitelességét a vizsgált folyamat tekintetében. Célom a mérő- szenzorhálózatok alkalmazhatóságának bemutatása, illetve ezek konkrét esettanulmányokon keresztüli elemzése, melynek eredményeképp a stabilitásszámítás módszertana a felhasznált adatstruktúrán keresztül magába foglalja a smart grid adta lehetőségek kiaknázását. A kritikus zárlathárítási idők meghatározását választottam fókuszterületnek, illeszkedve a jelenlegi nemzetközi gyakorlathoz, ennek alternatíváit kitekintésként fogalmazom meg. A módszereket a tudományterületen széles körben alkalmazott sztenderd modelleken, illetve valós adatokon alapuló, saját fejlesztésű modelleken is értékelem, különös figyelmet fordítva az alkalmazhatóság elvi korlátaira. A számítások a bemeneti adatstruktúrák adta pontosítási lehetőségekkel egyedi módon határozzák meg a forgó tömeg nélküli termelők kritikus zárlathárítási időre gyakorolt hatásának számszerű értékeit.

Tamás Alexandra

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Menedzsment és Vállalkozásgazdaságtan Tanszék
Gazdálkodás- és Szervezéstudományi Doktori Iskola*

A DEA alkalmazási lehetőségeinek és korlátainak vizsgálata az államigazgatásban

Az üzleti szektor és a közszféra számos alapvető döntési kritériumban különbözik egymástól, ugyanakkor az államigazgatás feladatellátásának teljesítménymérése és a hatékonyság növelése a közszféra szervezeteinek működtetésében is fontos feladatként jelenik meg. A szervezeti egységek működésének értékelése és összehasonlítása, valamint a működés javítását célzó javaslatok megfogalmazása során ugyanakkor akadályokba ütközhetünk. Rendszerint nincs egyetlen olyan mutató, amely tartalmazná a szervezeti egységek eredményének valamennyi fontos elemét, a felhasznált adatok pedig multidimenzionálisak. A közszférában létrejövő szervezeti outputnak és a benne felhasznált inputnak ráadásul rendszerint nincs pénzügyi dimenziója, vagy ha van is, annak használata nem indokolt.

Kutatásunkban a szervezeti működés sajátosságainak figyelembevételét biztosító, komplex hatékonyságelemzésre lehetőséget adó relatív hatékonyságvizsgálat (DEA) módszerét alkalmazzuk a Magyar Államkincstár (MÁK) illetményszámfejtési tevékenységét ellátó megyei igazgatóságainak összehasonlítására. A kutatásunk célja, hogy a DEA eredményei alapján hatékonyságnövelő javaslatot fogalmazzunk meg a MÁK vezetői számára, melynek köszönhetően a humán erőforrás gazdálkodás jobban reagálhat az illetményszámfejtési feladatok mennyiségének változására. A bemutatásra kerülő hatékonyságvizsgálat a megyei igazgatóságoknál alkalmazott tényleges létszám és a számfejtett tételek kapcsolatára épült. Kutatásunkban egy teljes év havi bontásban rendelkezésre álló adatait használtuk fel. Inputorientált CRS radiális DEA modell segítségével határozzuk meg a hatékonyan működő megyei igazgatóságokat, valamint konkrét javaslatot teszünk a nem hatékony egységek bérszámfejtői létszámára vonatkozóan.

Kutatásunk eredményei a MÁK szakemberei számára számos, a gyakorlatban közvetlenül megvalósítható működési módosítást indokolhatnak: az eredmények rávilágíthatnak a nem hatékony működés okaira, segíthetik a feladatszétosztással és/vagy létszámgazdálkodással kapcsolatos szempontok átgondolását, továbbá információt szolgáltathatnak az illetményszámfejtés szervezeti és technológiai fejlesztésével kapcsolatos döntésekhez.

Török Tímea Nóra

Természettudományi Kar

Fizika Tanszék

Fizikai Tudományok Doktori Iskola

Neuromorfikus működésű rezisztív kapcsoló memóriák vizsgálata

A rezisztív kapcsoló memóriák – más néven memrisztorok – alapjaiban újszerű megoldást kínálnak neuromorfikus működésű logikai egységek, neurális hálózatok építésére. Ezen új működési elven nyugvó hálózatok előnye a klasszikus, von Neumann-elven felépülőkhöz képest gyorsaságukban és energiahatékonyságukban rejlik. Ennek oka, hogy rezisztív kapcsoló memóriákban az információtárolás fizikai alapja egy nanoskálán lezajló önszerveződő folyamat, amelyben egy pár nanométeres, vékony szigetelő rétegben vezető filamentum formálódik. A filamentum vastagsága – így az eszköz ellenállása, azaz a tárolt információ – a ráadott feszültséggel nagyságával és gyorsaságával hangolható, ami valódi analóg (többszintű) programozhatóságot jelent. A kutatási program során fém-oxid alapú rezisztív kapcsoló memóriák többszintű programozhatóságának lehetőségeit vizsgáltam, többféle kapcsolási eljárást kidolgozva a feladat megvalósítására. Nb_2O_5 -alapú rendszerek esetén szupravezető spektroszkópiás méréstechnikát alkalmazva már korábban feltártam, hogy a vezetőképesség kvantumának ($G_0=2e^2/h$) tartományában atomi méretskálán történik a filamentum összetételének változtatása. Jelen munkámban megmutattam, hogy Ta_2O_5 kapcsolók is ugyanígy viselkednek, és ezeket az eredményeket kiegészítettem a vizsgált anyagrendszerek többszintű programozhatóságának tanulmányával a néhány G_0 körüli, releváns vezetőképesség-tartományban. A kutatás másik fókusza Pt, illetve grafén elektródákkal rendelkező SiO_2 alapú rezisztív kapcsoló eszközök vizsgálata volt. Ezek a laterális geometriájú on-chip kontaktusok SiO_2 hordozón található, litográfias módszerrel készült vékony nanovezetékek kontrollált elégetésével készültek. A grafén elektródás rendszereken készült korábbi tanulmányokat kiegészítve a Pt elektródás eszközök kapcsolási jelenségeit jellemző időskálákat, kapcsolási küszöbfeszültségeket, tipikus ellenállásértékeket, és ezen mennyiségek eloszlásait térképeztem fel. Ezen eloszlások ismeretében már lehetőség nyílik egy több rezisztív kapcsoló memóriából álló eszköz, azaz egy neuromorfikus működésű logikai egység konstruálására.

Ureczki Ágnes*Gépészmérnöki Kar**Polimertechnika Tanszék**Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola*

Tribológiai felületek fejlesztése könyökimplantátumok fém-polimer csúszópárjaihoz

Endoprotézisek esetében a polimer alkatrészek kopása során képződő szemcsék az implantátum élettartamát csökkenthetik. Az UHMWPE (ultranagy-molekulatömegű polietilén) szemcsék méretükből adódóan komplex immunreakciót idéznek elő, ami osteolysishez és ezáltal a protézis kilazulásához vezet. Az alkalmazott Ti-6Al-4V és UHMWPE anyagpárosítás esetén a kopás mértéke 35%-kal nagyobb, mint CoCrMo ötvözet esetén. Az alacsonyabb kopásállóság ellenére a titán ötvözeteket előszeretettel használják implantátumok anyagaként a jobb biokompatibilitás miatt. Ugyanakkor az erőteljesebb koptató hatást különböző módszerekkel érdemes csökkenteni, mint a titán felületi módosítása.

Ennek hatására kísérleteimet a titán súrlódó felszín struktúrájának kialakításával kezdtem meg, cellás struktúra próbatesteken való kialakításával. A cellás szerkezet mellett átmenő furatokkal rendelkező próbatestet és viszonyítási alapként tömör titán próbatestet alkalmaztam. A pin-on-disc mérések esetében UHMWPE korongokon különböző szerkezettel rendelkező titán ötvözetek koptató hatását vizsgálom ízületi folyadék jelenlétében. Az előkísérlet során a méréseket 120 percen keresztül végeztem. A mért erő segítségével kiszámoltam a súrlódási erőt, ennek segítségével pedig a súrlódási tényezőt is. A mérést a Gép- és Terméktervezés Tanszék tribométerén végeztem. Az előkísérletek eredményei alapján a cellás és tömör titán próbatestek közel azonos eredményeket mutattak a mért és számított értékek tekintetében, viszont a furatokkal rendelkező minta esetén nagyobb súrlódási erő és súrlódási tényező tapasztalható. Mivel a furatokkal rendelkező mintánál kevésbé kedvező értékek adódtak, így a továbbiakban növelt időtartamú mérések során a vizsgálatát elhagytam. Ezek a mérések összesen 30 óra időtartamúak voltak próbatestenként. Mind a kis és nagyciklusú méréseknél a cellás szerkezet biztató eredményeket szolgáltatott. A nagyciklusú mérés során a kezdeti szakaszt követően alacsonyabb súrlódási erőt és kisebb súrlódási tényezőt regisztráltam, mint a hagyományos szerkezetű titán próbatest esetében. A koptatott UHMWPE tárcsák felületét elektronmikroszkóppal is megvizsgáltam. A cellás, illetve átmenő furatokkal rendelkező próbatestek esetében a keletkezett barázdák kevésbé szabályos mintázatot rajzolnak ki. A cellás próbatest okozta károsodás esetén a felszín delaminációja mérsékeltebb, mint tömör titán esetén, a felszakadásoknak a mérete kisebb, kevésbé válik el a felszíntől. Megállapítható, hogy a cellás szerkezet kopás csökkentésére gyakorolt hatása ígéretes.

A jövőre tekintve céljaim közé tartozik a tömegmérés elvén alapuló UHMWPE térfogatveszteség mérését lehetővé tevő tribométer használata, amely a szabványoknak is eleget tesz, illetve a biotribológia területére speciálisan alkalmazható. Továbbá szeretném vizsgálni a felületi bevonat és felületi textúra együttes hatását és emellett különböző mintázatok alkalmazásának eredményeit (mint például: félgömb, trapéz, ellipszis).

Varga Laura

Építőmérnöki Kar

Vízi Közmű és Környezetmérnöki Tanszék

Vásárhelyi Pál Építőmérnöki és Földtudományi Doktori Iskola

Regionális klímamodellek által szimulált napi csapadék idősorok időbeli leskálázhatóságának részletes, városléptékű vizsgálata

A csapadéktevékenység jövőben várható változásaira különböző regionális klímamodellek szolgáltatnak becsléseket. Ezek a szimulált idősorok azonban sem térben (10-25km), sem időben (napi lépték) nem kellően finom felbontásúak a városi csapadékvíz-elvezető hálózatok vizsgálatához, tervezéséhez. Megoldásként olyan sztochasztikus folyamatokon alapuló modellek kerültek kifejlesztésre, amelyek alkalmasak a csapadék idősorok térbeni és időbeni finomabb felbontásra alakítására (leskálázására). A modellek működése paramétereken alapul, melyek mért idősorokból származtathatóak. A paraméterek térbeli és időbeli alakulásának megismerése rendkívül fontos a modellek alkalmazásához.

A kutatás keretében egy teljes városra, névszerint Budapestre kiterjesztve vizsgáltam a paraméterek értékeit. A felhasznált leskálázó modellek kaszkád alapúak voltak (canonical és microcanonical). 38 csapadékmérő idősoraiból határoztuk meg a modellparamétereket. Az eredményekből modellenként és paraméterenként térképek és elemzések készültek. A paraméterek időbeli változékonyságát is kimutattuk. Húsz éves időszakot vizsgálva bizonyos paraméterek trendszerű változással írhatók le. A változások adódhatnak a csapadékok belső variabilitásából, illetve a változó éghajlat következményeként. A paraméterek számítása rámutatott a csapadékmérő kanálméretének szerepére is. A meghatározott paraméterekkel EURO-CORDEX regionális klímamodellek eredményeit bontottuk 10 perces időlépcsőkre, melyekből már csapadékmáximo-függvények is számíthatóak.

Vermes Brúnó György

Gépészmérnöki Kar

Polimertechnika Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Kompozitok gyártási vetemedésének megoldása analitikus, numerikus és kísérleti úton a nem-szimmetrikus rétegrendek ipari bevezethetősége érdekében

A kutatás célja a nem-szimmetrikus rétegrendű kompozitok (hő)vetemedésének csökkentése, illetve kiküszöbölése. Ez a lépés elengedhetetlen ahhoz, hogy az aszimmetrikus rétegrendek a gyakorlatban is használhatóak legyenek, és azokkal könnyebb és/vagy alakváltó kompozitokat tervezve növelhessük szerkezeteink (pl. repülőgépek, szélérőművek) működési hatékonyságát. A pályázati anyag leadásakor célként jelöltem meg egy ívelt szerszámlap alakjának numerikus optimalizálását, amiről adott hőterhelés hatására éppen a kívánt alakúra (síkra) tudna visszavetemedni az aszimmetrikus kompozit. Ezt a munkát azóta el is végeztem, az eredményeket kiértékeltem. A pályázott tevékenység második fele egy másik megközelítéssel foglalkozik, ahol anyagában hibrid rétegrendekkel igyekszünk kiküszöbölni a vetemedést. Az ehhez szükséges analitikus optimalizáló algoritmus első (részben validált) változata elkészült, a továbbfejlesztésen jelenleg is dolgozom.

A pályázat benyújtása után azonban egy harmadik lehetőség is felmerült a vetemedés csökkentésére, amit azóta mélységében meg is vizsgáltam analitikusan és kísérleti úton is. Ez a harmadik módszer a rétegrend homogenizálására épít és az eredmények egyértelműen mutatják, hogy rendkívül hatékonyan szabadul meg a vetemedéstől.

A kutatás eredménye, hogy megvizsgáltam és bizonyítottam mindhárom vetemedés-csökkentési módszer előnyeit és az alkalmazhatóságuk határait. Mivel az ipar szimmetrikus rétegrendekhez való ragaszkodásának oka a vetemedés megelőzése, ennek a kutatásnak az eredményei lényegesen közelebb vittek minket az aszimmetrikus rétegrendek iparba való bevezethetőségéhez, mint eddig bármikor. A vállalt angol nyelvű impakt faktoros eredményközlő cikket (Composites Science and Technology, IF=6.309, D1) benyújtottam 2020 márciusában, míg az ezen kívül vállalt egy darab egyéb publikáció (magyar nyelvű, Polimerek) megjelenés alatt van a folyóirat áprilisi számában. Azonban a kutatás a vártnál kedvezőbb és új eredményeket is hozott, ami miatt egy – a vállalatokon felüli – publikáció kerül benyújtásra május elején a Composites Part B: Engineering (IF=6.864, D1) folyóiratba.

Virág Ábris Dávid

Gépészmérnöki Kar

Polimertechnika Tanszék

Pattantyús Ábrahám Géza Gépészeti Tudományok Doktori Iskola

Nemszőtt textíliák és kompozitjaik deformációs és tönkremeneteli viselkedésének szálkötegcella-alapú modellezése

Manapság számos helyen alkalmazunk nemszőtt textíliákat a teafilterektől kezdve, a légszűrőkön át, egészen az orvostechnikai eszközökig (sebkötözők, maszkok). Egyre nagyobb jelentőséggel bírnak a nemszőtt textíliákkal erősített kompozit anyagok is, így egyre nagyobb igény van arra, hogy már a tervezési fázisban kellő pontossággal tudjuk modellezni a nemszőtt textíliákkal erősített kompozit anyagok és termékek mechanikai viselkedését és tönkremenetelét.

A nemszőtt műszaki textíliák egy jelentős részét nem hagyományos textilipari technológiákkal, hanem valamilyen egyéb technológiával, jellemzően elektro-szálképzéssel vagy ömledékfúvással állítják elő. Nemszőtt textíliák rétegeit és fóliarétegeket egymásra helyezve rétegelt kompozitok hozhatók létre, például préselési technológiával.

Kutatásom célja nemszőtt textíliák és a felhasználásukkal készült, polimer mátrixú kompozitok előállítására és egytengelyű szakítóvizsgálata, továbbá a vizsgálati eredmények szálkötegcella-alapú modellezése volt. A szálkötegcella-alapú modellezés a szál, anizotrop anyagok deformációs tulajdonságai mellett képes megjeleníteni a szál anyagokra és a felhasználásukkal készült kompozitokra jellemző tönkremeneteli viselkedést is. További célul tűztem ki egyéb, a nemszőtt textíliákat és kompozitjaikat jól jellemző paraméterek (pl. szálorientáció és porozitás mértéke) vizsgálatát.

Ömledékfúvással sikerült LLDPE alapanyagból, több, különböző vastagságú és alapvetően mikrométeres nagyságrendbeli átmérőjű szálakból álló, nemszőtt textíliát előállítanom. Ezekről a mintákról pásztázó elektronmikroszkópos felvételeket készítettem, és a felvételek alapján meghatároztam a kompozitgyártás szempontjából legmegfelelőbb nemszőtt textíliát. Extrúziós síkfóliagyártó berendezéssel sikerült átlagosan kb. 100 μm vastagságú, szintén LLDPE anyagú fóliákat előállítanom. A kialakult járványügyi helyzet miatt azonban a fóliák morfológiai vizsgálatára és minősítésére, továbbá a kompozitok előállítására és szakítóvizsgálatára már nem nyílt lehetőségem. Ezek helyett az eredetileg tervezettnél egy sokkal átfogóbb irodalomkutatást végeztem el, amelynek jelentős része a kutatási tervben vállalt cikk irodalomkutatását képezi. A kutatásom során előállított nemszőtt kelmékből és fóliákból készíteném, rétegelt kompozitokban a szál és a mátrix alapanyaga azonos (ezek úgynevezett önerősített kompozitok), ez pedig igen kedvező az újrahasznosíthatóság szempontjából. A nemszőtt textília szálainak a kis átmérőjükből következően nagy a fajlagos felülete, így a préselés során várhatóan kiváló lesz a konszolidáció, ebből következően pedig várhatóan jó szál-mátrix adhézió érhető majd el. A mikrométeres nagyságrendbe eső átmérőnek köszönhetően a szálak nagy fajlagos terhelések felvételére képesek (az adott területegységre eső kevesebb számú hibahely révén), ez várhatóan nagyon jó tömrege fajlagosított mechanikai tulajdonságokkal rendelkező kompozitok előállítását teszi majd lehetővé.

Zwillinger-Tripolszky Anna

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék
Oláh György Doktori Iskola*

Potenciális bioaktivitással rendelkező 1,2,3-triazolil-5-foszfónátok szintézise dominó reakcióval

Az 1,2,3-triazolok kutatási területe kiemelkedő figyelemnek örvend a vegyületcsalád széleskörű felhasználhatóságának köszönhetően. A számos alkalmazási területük közül kiemelkedő, a gyógyászatban betöltött szerepük. Biológiai aktivitásukat kihasználva, gombaellenes, rákellenes, vírusellenes vagy gyulladás-csökkentő szerként alkalmazzák őket.

Az 1,2,3-triazolok biológiai hatását nagymértékben befolyásolják a heterociklus oldalláncai. A triazol-származékok biológiai aktivitása például valamely szerves foszfortartalmú részlet beépítésével tovább növelhető. Az 1,2,3-triazolil-foszfónátok fontos építőelemek regiospecifikus antitestek és peptidek előállításánál, egyes származékaik pedig HIV-ellenes hatással rendelkeznek.

Mindezek figyelembevétel, kutatómunkám célja egy 1,2,3-triazolil-5-foszfónátokat tartalmazó, diverz molekulakönyvtár létrehozása volt, melynek képviselői gyógyszerkémiai szempontból releváns funkciócsoportokkal és potenciális bioaktivitással rendelkeznek. A vegyületek szintézisét fenil-acetilén, változatos azidok és dialkil-foszfitek réz(I)-katalizált dominó reakciójával valósítottuk meg.

Kutatómunkám során először a fenil-acetilén, benzil-azid, és dibutil-foszfitek modellreakcióját optimalizáltuk. Számos paraméter hatását tanulmányoztunk, úgymint az alkalmazott atmoszférát, hőmérsékletet, a katalizátor, bázis és oldószer minőségét vagy a kiindulási anyagok molarányát. Az optimális körülmények megtalálását követően, a reakció kiterjesztésével számos új 1,2,3-triazolil-5-foszfónátot szintetizáltunk, melyek ígéretes biológiai aktivitást mutatnak különféle rákos sejtvonalakon.

Bolyai+ Felsőoktatási Fiatal Oktatói, Kutatói Ösztöndíj

Beke Dávid*Természettudományi Kar
Atomfizika Tanszék***Kvantum objektumot tartalmazó multimodális szilícium-karbid nanopartikulum létrehozása új típusú, nanoszenzorokhoz és teranosztikai alkalmazásokhoz**

A kvantum-objektumok a mai ismert világunk forradalmi megváltoztatásának ígérését rejtik új típusú számítógépek, szenzorok, diagnosztikai és terápiás eszközök megjelenésének a formájában. A megfelelő kristály béli ponthibák alkalmazásával az elektromágneses tér, vagy a hőmérséklet nagy pontosságú, szubmikronos felbontással történő mérése is lehetséges, ami manifesztálódhat egyetlen molekula NMR vagy MRI mérésében. Ezáltal az élő sejteken és szervezeteken végzett szubmikronos felbontású roncsolásmentes vizsgálatok és képalkotási eljárások új lehetőséget nyitnak a sejtbiológiában, a genetikában és terápiás eljárások során. A szubmikronos felbontás azonban precíz felületkémiát és felületközeleli ponthibát igényel, míg az in-vivo alkalmazhatóság egyik feltétele a 10 nm alatti részecskeméret a nemkívánt akkumuláció elkerülése érdekében. Jelenleg az ilyen rendszerek létrehozása számos nehézségbe ütközik. A projekt célja, hogy a jelenlegi helyzeten változtatva stabil, 10 nm alatti SiC alapú kvantum-objektumot tartalmazó rendszert hozzon létre kémiai és fizikai módszerek kombinálásával egymolekulás mérések és teranosztikai alkalmazások érdekében.

A szilícium-karbid egy rendkívül ellenálló biokompatibilis anyag, számos ismert optikailag aktív vakanciával. A projekt során SiC és más jelölt anyagok felhasználásával kutatjuk azon módszereket amelyek megfelelő minőségben és mennyiségben képesek vakanciákat tartalmazó nanokristályokat létrehozni. Vizsgáljuk ezen rendszerek fizikai tulajdonságait és a biológiai környezetre gyakorolt hatásukat.

Benkő Zoltán

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*

Foszforgyökök stabilitása

A gyökös vegyületek nemcsak elméleti szempontból érdekesek, de számos alkalmazási területük is ismert, például polimerizációs reakciók iniciátoraként, spinjelző anyagként, illetve égésgátlás során is szerepet játszhatnak. Ezen vegyületek között fontosak a foszfort tartalmazó gyökök, melyek gyakran instabilak. Stabilizálásuk általában igen nehéz, ehhez megfelelő elektronikus és sztérikus hatások összhangja szükséges. Az előadásban a gyűrűs foszforgyökök stabilizálására vonatkozó legújabb kutatásaimat foglalom össze. Ismertetem a különböző tagszámú P-gyökök relatív stabilizálását, melynek számszerűsítésére egyrészt izodezmikus reakciókat másrészt dimerizációs reakciókat alkalmaztunk. A vizsgálat tárgyát képezi különféle gyűrű tagszám ($n = 3-7$) és különböző mértékű telítettség szisztematikus tanulmányozása, valamint a sztérikus faktorok feltérképezése. Fontos megjegyezni, hogy az endociklusos telítetlenségeken felül foglalkoztam az exo helyzetű kettős kötések szerepével, melyek új irányt mutathatnak ezen vegyületek stabilizálásában.

Ezek alapján fontos információkat nyerhetünk a lényeges hatások megértéséhez. A kiválasztott molekulák vizsgálata alapján javaslatot tehetünk új és várhatóan stabil P gyökök szintézisére, majd ezek tanulmányozására.

Cseh Ágnes

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Számítástudományi és Információelméleti Tanszék*

Fix méretű Pareto-optimális koalíciók

Játékelméleti értelemben koalíciónak tekintjük a játékosok egy csoportját, akik önszántukból, valamilyen saját érdeket követve egy csoportba rendeződnek. Egy koalíció mérete lehet előre rögzített, például párosítások esetében minden játékosnak pontosan egy párt kell találnia. Koalícióbeosztásnak nevezzük azt, ha minden játékos megtalálta a helyét valamelyik koalícióban. Egy koalícióbeosztást Pareto-optimálisnak nevezünk akkor, ha nincs olyan alternatív beosztás, amivel egyetlen játékos sem jár rosszabbul az előzőhöz képest, legalább egy játékos viszont jobban jár. Olyan koalícióformációs helyzeteket tanulmányozunk, ahol az egyes játékosoknak egymáson szigorúan rendezett preferencialistájuk van. Ilyen például egy kollégiumi szobabeosztás, ahol minden leendő kollégista rangsorolja a lehetséges szobatársait. A szobák előre meghatározott, fix méretűek. A végső szobabeosztásban egy hallgató elégedettségét kétféleképpen mérhetjük: a legkedvesebb és a legkevésbé kedvelt szobatárs alapján. Ez szinkronban van a játékelmélethez ismert best-hedonic és worst-hedonic fogalmakkal. Cikkünkben annak a számításméleti bonyolultságát vizsgáltuk, hogy milyen nehéz a két elégedettségi mérték szerinti Pareto-optimális szobabeosztást találni. Lényeges különbséget találtunk a teljes és a csonka preferencialitás eseteknél. A bonyolultságelméleti szempontból könnyű feladatokra a serial dictatorship mechanizmust átdolgozva adtunk konstruktív megoldást. A Fleiner Tamással és Harján Petrával közösen írt cikket a Journal of Mechanism and Institution Design c. folyóirat közölte.

Dr. Baranya Sándor

*Építőmérnöki Kar
Vízépítési és Vízgazdálkodási Tanszék*

Mederformák dinamikájának összekapcsolt szemcse- és makroléptékű vizsgálata kavicsmedrű folyókban

A folyókban vándorló hordalékot két fő csoportra oszthatjuk a mozgás jellemzői alapján: lebegtetett és görgetett hordalék. A lebegtetett, jellemzően finom frakciójú (agyag, iszap, finom homok) hordalék a vízoszlopban teljesen átkeveredve utazik a víz mozgásával megegyező sebességgel, míg a görgetett hordalék a durvább szemcsékből (durva homok, kavics, kő) álló, a mederfenék közelében változatosan mozgó frakció. A folyók főmedrének alakváltozása szempontjából a görgetett hordalék térbeli és időbeli alakulása játszik meghatározó szerepet, ezért számos folyógazdálkodási kérdésben szükséges a vándorló hordalék mennyiségének ismerete. A görgetett hordalékmozgás fizikai komplexitása és a vándorló hordalék mennyiségének nehéz mérhetősége miatt ismereteink korlátosak. A görgetett hordalék vándorlása ráadásul eltérő viselkedést mutat tisztán homokmedrű folyókban a homokoskavics-, kavicsmedrű folyókhoz képest. Előzőnél jellemzően mederformák, dűnék, hullámbarázdák folyamatos vándorlásának formájában mozog a meder közelében a hordalék, míg kavics esetében ez a mozgás általában szabálytalan, a kavicszemcsék méretétől és alakjától függően csúszó, gördülő vagy ugráló mozgás formájában megy végbe. Kimutatható azonban, hogy sok esetben, mint pl. a Duna felső-magyarországi kavicsos szakaszán a homokmederhez hasonlóan kialakulhatnak a mederfenéken mozgó mederformák, amik szintén részt vesznek a görgetett hordalék vándorlásában.

Ebben a kutatásban különböző innovatív vizsgálati eszközök segítségével tárjuk fel a kavicsos folyómederben kialakuló mederformák dinamikáját. Egy dunai mintaterület példáján keresztül felhasználjuk a múltbeli, hagyományos terepi hordalékmérés adatait, amit újszerű, a mederfenékről készített videófelvevételek új képelemző algoritmus segítségével való elemzésével egészítjük ki, továbbá egy számítógépes szimulációs modell célirányos tesztelését is végrehajtjuk. Utóbbi segítségével, annak megfelelő paraméterezése és terepi adatokkal való igazolása után, lehetőség nyílik olyan esetek szimulációjára, amire mérési adatokkal nem rendelkezünk, ráadásul a modell nagy felbontásának köszönhetően, mérésekkel nem feltárható részletességű elemzésre nyílik lehetőség.

Dr. Bergmann Gábor

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék*

Elosztott kollaboratív modellezés hozzáférésvédelemmel

Összetett ipari rendszerek modellvezérelt integrációja (pl. a modern járműelektronikában) változatos területeken jártas vállalatok és cégen belül is eltérő kompetenciájú szakértők együttműködését igényli. Mivel MDE esetén az elsődleges mérnöki tudáshordozó a modell, ezért a kollaboratív folyamat során az intellektuális tulajdon védelme, ill. a résztvevők felelősségi köreinek kijelölése az integrált rendszermodell feletti hozzáférésvédelemben keresztül valósítható meg. A szoftverfejlesztés elterjedt ipari megoldásaihoz (verziókezelők, pl. SVN, Git) ill. a kollaboratív adatbázishasználat lehetőségeihez képest a gráfstruktúrájú modellek hozzáférésvédelme bonyolultabb követelményeket szül (pl. állomány szintűnél finomabb szemcsézettségű hozzáférés-szabályozás).

Rendszermodellek, gráfadatbázisok finomszemcsézettségű hozzáférési szabályainak megfogalmazása tulajdonképpen egy adatbázis-lekérdezési probléma; online alkalmazások esetén ez inkrementális lekérdezési technikákkal valósítható meg hatékonyan. Különösen az ún. Datalog lekérdezések alkalmasak hierarchikus gráfmodellek feletti jogosultságviszonyok kifejezésére. Ugyanezen algoritmikai feladatra (inkrementális Datalog kiértékelés) vezethető vissza a szoftverek statikus helyességvizsgálásának problémája is.

Datalog lekérdezések inkrementális kiértékelésére három fő stratégia ismert, melyek közül azonban az egyik nehezen alkalmazható azokra a Datalog kiterjesztésekre (adatváltozók, aggregáció), amelyekre a fenti két alkalmazási területen szükség van. Ismert tény, hogy a maradék két módszer közül egyik sem egyetemesen jobb a másikonál: akármelyik sokkal hatékonyabbnak bizonyulhat a felhasználási mintázattól függően. Ezért kísérleti úton kell meghatározni, hogy adott környezetben melyik a jobb választás. Korábbi kutatásaimban szerzőtársaimmal adaptáltuk az egyik megközelítést, és elvégeztük a kiértékelését. Az ÚNKP pályázat időszakában a másik módszer adaptációját is elvégeztük, és kísérletekkel mutattuk meg, hogy ígéretes. Egyrészt a gyakorlatban hatékonyan bizonyult, másrészt rugalmasan adaptálható szokatlan rekurzív struktúrákra és szokatlan Datalog szemantikákra.

Dr. Botzheim János

*Gépészmérnöki Kar
Mechatronika, Optika és Gépészeti Informatika Tanszék*

Biológiailag inspirált mesterséges intelligencia módszerek alkalmazása az ember-robot interakcióban

A mesterséges intelligencia módszerek egyre nagyobb szerepet töltenek be a robotikában, és azon belül is az ember-robot interakcióban. Ezen módszerek és algoritmusok jó része követi azt a mérnöki gyakorlatot, mely a természetből merít és biológiai alapelvekre építve hoz létre mesterséges vívmányokat. Ezen módszerek hatékonyak és a számítástechnika fejlődésével egyre komplexebbnek és pontosabbnak bizonyulnak, továbbá letisztult változataik sok valós probléma megoldásában segítségünkre lehetnek. Ezeket a technikákat továbbfejlesztve könnyedén létrehozhatók olyan rendszerek, melyek a robotok és gépek emberi társadalomba való integrálását, az ember-robot interakciók könnyeddé tételét képesek megvalósítani. Az ilyen rendszerek képesek kognitív funkciókon (arc-, gesztus-, nyelvfelismerés, egyéb szenzoros bemenetek) alapuló, belső állapottól (érzelmi modellek, stresszállapot, belső szükségletek) függő válaszokat (gesztusok, döntések, verbális reakciók) adni a külvilág felé. E rendszerek célja az emberek komfortérzetének növelése a robotok közelében, miközben a tanulás és információáramlás az ember-robot és robot-ember irányban is megvalósul.

Az elért eredmények egy része a már ismert biológiailag inspirált algoritmusok továbbfejlesztése. A genetikus programozás technikáját sikerült jobbá tenni azáltal, hogy a keresztezés operátor végrehajtása során a keresztezésben résztvevő egyik egyed mindig az adott populáció legjobb egyede. Az elért eredmények másik része az algoritmusok tényleges alkalmazása az ember-robot interakcióban. Ennek során egy ember-robot kooperációs feladat kidolgozása kezdődött el. Ebben a kezdeti kísérletben egy robot egy átadásos feladatot hajt végre az operátorral. A munkafolyamatot az operátor értékeli, mely alapján a bakteriális evolúciós algoritmus igyekszik megtalálni a legjobb konfigurációt a mozgásra. Az operátor értékelését első körben nagyon kevés információ tartalommal vette figyelembe a rendszer (elégedettség 0-10, és szívritmusban lévő R-R távolság) azonban még így is több alanynál is viszonylag gyors beállítás során sikerült a közel maximális megoldást elérni.

Dr. Csizmadia Péter*Gépészmérnöki Kar
Hidrodinamikai Rendszerek Tanszék***Áramlástechnikai rendszerek vizsgálata nemnewtoni közegek esetén**

Jelen kutatás fő célja a víztől eltérő, nemnewtoni közegek szivattyúzásának, keverésének mélyebb megértése, és az eredmények alapján pontosabb méretezési irányelvek megfogalmazása. Ezzel biztonságosabb és energiahatékonyabb rendszerek tervezhetők, illetve üzemeltethetők. A kutatásba bevont hallgatók megismerkedhetnek a nemnewtoni folyadékokat vizsgáló laboratóriumi mérőrendszerekkel, és fejlett áramlástan (CFD) modellekkel. Ezenfelül a mérnöki, gyakorlatias szemlélettel karöltve a tudományos módszertant is elsajátítják. Ezen tudás és tapasztalat segíteni fogja őket akár az ipari, akár a tudományos pályát választják is.

A két féléves ösztöndíjas időszak alatt végzett tevékenységeimet az alábbiakban foglaltam össze.

A kutatási ösztöndíj témájában, az 1. félévben konzultációkat vezettem, amely keretében 3 BSc hallgató a szakdolgozatát és 1 MSc hallgató a diplomamunkáját megvédte.

A kutatási ösztöndíj témájában, a 2. félévben konzultációkat vezettem, amely keretében 1 BSc és 1 MSc hallgató a projektfeladatával, 2 BSc hallgató a szakdolgozatával, és 1 MSc hallgató a diplomamunkája „A” feladatával (1. félévével) dolgozik; mindegyikőjük megfelelően halad.

Három hallgatói csoportom tervez dolgozatot beadni a 2020-as TDK konferencián; a munkájukkal megfelelő ütemben haladnak.

Egy hallgatóm a közös munkánk eredményeivel részt vesz az OGÉT 2020 (online) konferencián (1. konferencia cikk).

Áramlástechnikai rendszerek c. tárgy előadója vagyok, és ennek keretében házi feladat konzultációkkal segítettem a hallgatók munkáját, és a témám iránt érdeklődőket pedig bevontam a kutatási munkába.

A 2019. szeptember 27-én megrendezésre kerülő „Kutatók éjszakája” című program keretében, a BME Áramlástan Tanszék Laboratóriumában, a kutatási témámmal kapcsolatos bemutatót tartottam, több mint 100 érdeklődő előtt.

A kutatásom szakirodalmi háttérét és módszertanát leírtam, és ezeket egy „élő”, valamint egy online videóprezentáció keretében ismerttettem, illetve megvitattam.

A Tanszékünk Tehetséggondozó Körének 2 darab, a vitával együtt 90 perces előadást tartottam. Továbbá, az Áramlástechnikai gépek és rendszerek című PhD szigorlati tárgy keretein belül egy 90 perces előadást tartottam.

A fenti szemináriumokon BSc, MSc, és PhD hallgatók vettek részt.

A kutatási munkám egy szegmensét ismerttettem az OGÉT 2020 (online) konferencián (2. konferencia cikk), ahol betöltöttem a felkért ülésvezetői szerepet.

Két ismeretterjesztő cikket publikálok tudományos és egyéb folyóiratban (CEEP és Vízmű Panoráma), amelyből az angol nyelvű már túl van az 1. bírálati körön.

Dr. Gell Gyöngyvér Mónika

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék*

Az alakor proteomikai és immunológiai vizsgálata a lisztérzékenység tükrében című Bolyai János Kutatási Ösztöndíjpályázat eredményeinek disszeminációja

A gabonafélékhez köthető immunológiai megbetegedések előtérbe kerülésével a növénykutatások egyik kiemelt célja lett az olyan gabonafajták, genotípusok azonosítása, melyek speciális lisztféherje összetétele a betegek számára is kedvező. Kutatásunk fő célja az ATK Mezőgazdasági Intézet Gabona Génbankja által rendelkezésünkre bocsátott, megközelítően 200 vad- és termesztett alakor genotípus magféherjéinek átfogó vizsgálata, a coeliákiához köthető immunológiai és proteomikai tulajdonságainak jellemzése.

Az alakor genotípusok részletes elemzésével kapott eredmények alapján további célunk olyan genotípusok azonosítása, amelyek hozzájárulhatnak alacsony antigén – illetve allergén fehérje tartalmú búza genotípusok nemesítéséhez.

Az előzetes szerológiai ELISA eredmények alapján a kiválasztott alakor genotípusok különböző fehérjekivonatait 2D-GE-vel elválasztottuk, majd humán szérumokkal immunoblot vizsgálatokat végeztünk. Búzához viszonyítva lényegesen kevesebb és alacsonyabb immunreaktivitású fehérjét találtunk, melyeket nanoLC-MS/MS segítségével azonosítottunk, a kapott adatokat kiértékeltek és illesztettük a kenyérbúza referencia genomjához. Az visszaazonosított immunreaktív fehérjéinek nagy része omega -és gamma-gliadin, LMW glutenin és inhibitor enzim volt. Meglepő, hogy a legfőbb, betegek számára kiemelten káros fehérjecsalád, az alfa-gliadinok nem szerepeltek az azonosított fehérjék között. A HPLC vizsgálatok, valamint SDS-PAGE profilok alapján egyértelmű, hogy a vizsgált alakor genotípusokban termelődnek alfa-gliadinok, azonban mennyiségük alacsony és valószínűleg a genetikai diverzitásnak köszönhetően, mely együtt jár a tartalékfehérje készletük változatosságával, nem tartalmazzák teljes szekvencia egyezéssel a tipikus alfa-gliadin epitópokat.

A szerológiai ELISA mérések alapján kiválasztott alacsony antigén tartalmú genotípusokat kontrollált klímakamrás kísérletsorozatban is vizsgáljuk, ahol emelt légköri CO₂ szint mellett virágzáskor, és szemtelítődés kezdeti fenofázisokban abiotikus stressz kezeléseket alkalmaztunk. Így szabályozott környezeti körülmények között lehetőségünk nyílt az alakor terméshozzáértésének, klímaadaptációs képességének vizsgálatára, és a coeliákiát –illetve gabona allergiát kiváltó tartalékfehérjék mennyiségi változásának nyomon követésére. A stressz adaptációs vizsgálatok eredményei rávilágítottak, hogy az általunk vizsgált alacsony antigén-, illetve allergén fehérje tartalmú alakor genotípusok egy része aránylag jól bírta az emelt széndioxid szint mellett alkalmazott szárazság stresszt, és megtartotta kedvezően alacsony immunreaktivitását, míg találtunk kifejezetten stressz érzékeny genotípusokat is.

Dr. Gyires-Tóth Bálint Pál

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Távközlési és Médiainformatikai Tanszék*

Több-skálás szekvenciális adatstruktúrák modellezése mély tanulással

A tudományterület új eredményeinek, továbbá az adatmennyiség és a számítási kapacitás növekedésének köszönhetően az elmúlt években az adatvezérelt megoldások egyre hangsúlyosabbakká váltak a szabályalapú modellekkel szemben. Az adatvezérelt rendszerekben gépi tanuló eljárások segítségével valós folyamatból gyűjtött minták alapján határozzák meg az adatokat legjobban leíró modellt. Számos valós életbeli folyamat – mint például a természetes nyelv, a DNS lánc, az EKG és EEG jelek, a pénzügyi idősorok, vagy például az emberi beszéd – szekvenciális adatstruktúrát követ, mely sok esetben különböző skálákon (felbontásokon) tartalmaz információt. A mély tanuló paradigmán alapuló mély neurális hálózatok napjaink egyik leghatékonyabb szekvencia modellező eljárása, azonban ezek jellemzően csak egy felbontást (skálát) kezelnek, vagy a több skálát implicit módon veszik figyelembe. Kutatásom ezért ezen módszerek jobb megértésére és javítására irányul. A pályázat keretében olyan strukturált és hibrid mély tanuló architektúra kidolgozását tűztem ki célul, mely explicit módon képes több skálán szekvenciális adatokat modellezni.

A szekvenciális adatokban előforduló skálák közötti átmenetek modellezését feltételezésem alapján segítik adott vagy változó hosszúságú szekvenciák előfordulási gyakoriságának, hasonlóságának, vagy más vonatkozó metrikájának (például Levenshtein-távolság) a figyelembevétel. A metrikák kiszámolása azonban már közepes méretű adatbázis esetén is jelentős számítási többletkapacitást igényel, mely bevezetésével a mély tanuló architektúrák tanítása olyan mértékben lelassul, hogy robusztus rendszerek kidolgozása gyakorlati korlátokba ütközik. Ezért olyan autoenkóder alapú megoldást dolgoztam ki, mely képes a célmetrikák minél pontosabb becslésére. Az autoenkóder alapú megközelítésnek előnye nem csak a gyorsabb számításban rejlik, hanem ezt egy másik, strukturált mély tanuló architektúra számítási gráfjának részeként is lehet használni.

A kutatómunka második részében a hasonlósági metrika becslését végző autoenkóder struktúra bevezetését vizsgálom rekurrens és konvolúciós mély tanuló architektúrákban. Céloom a strukturált számítási gráfok adott részei között az alacsonyabb és magasabb skálákról származó információk cseréjének vezérlése és ezáltal a több skála explicit modellezése. Hosszabb távú célom, és egyben a kutatás folytatását jelenti a megoldás különböző típusú szekvenciális adatokra (pl. idősorok, DNS szekvencia, szöveges adatbázisok) és architektúrákra való kiterjesztése.

Dr. Horváth Csaba

*Gépészmérnöki Kar
Áramlástan Tanszék*

Koaxiális Propfan Hajtóművek Aeroakusztikai Vizsgálata

Jelen pályázat előzményeként jelentős mértékben foglalkoztam koaxiális propfan repülőgép hajtóművek vizsgálatával. A kutatási eredményekből és a szerzett tapasztalatokból sokat tanultam a koaxiálisan elhelyezkedő ellenforgó lapátsorok zajforrásairól. Ezt a tudást szeretném továbbfejleszteni, valamint áttemelni a drón technológia területére. Kutatási terveimet azonban csak akkor tudom megvalósítani, amennyiben egy megfelelő csapat áll mögöttem, elősegítve munkámat.

A PhD, MSc, és BSc hallgatókból álló csapatom hatékony működése a közreműködők megfelelő képzettségén múlik. A jövőbeli doktoranduszaim felkészítését már a BSc és MSc képzések alatt elkezdem, kiválasztva azon hallgatókat kik érdeklődése és hozzáállása összefér a csapatoméval. Jelenleg számos BSc és MSc hallgató közreműködik kutatásaimban, készülve arra, hogy az MSc és PhD képzések keretein belül folytassuk a koaxiális propfan drón hajtóművek akusztikai tulajdonságainak kutatását. Jelen pályázat sikeresen teljesített céljai ezen közös kutatások elindítása és további hallgatók bevonása. A két fő kutatási téma, amely kihangsúlyozott szerepet kapott a támogatási időszakban: az ellenforgó légcsavarok nem tengelyirányú megfűvésének hatása, valamint a fordulatszám változtatásának hatása.

Dr. Józsa Viktor

*Gépészmérnöki Kar
Energetikai Gépek és Rendszerek Tanszék*

Alternatív folyékony tüzelőanyagok párolgásának és tüzelés során mért kemilumineszcens emissziójának vizsgálata

A tüzeléstechnikában az alkalmazott koncepciók közül az iparág csúcsa jelenleg az előkeveréses, tüzelőanyagban szegény keverékkel üzemelő perdületes égő, mely gáznemű és folyékony tüzelőanyagok eltüzelésére egyaránt alkalmas. A homogén éghető keverék képzése révén igen alacsony károsanyag (főként NO_x és CO) kibocsátás érhető el, azonban a túlzott mértékű szegényítés káros akusztikai folyamatokhoz vezet.

Egy ilyen típusú égőt vizsgáltunk egy mikrofon jele alapján spektrálisan és egyenértékű hangnyomásszintet alkalmazva, valamint spektrofotométer segítségével, értékelve a kemilumineszcens emisszió és a károsanyag kibocsátás közötti korrelációt. A támogatási időszak legjelentősebb eredménye a Keverék Hőmérséklet-Szabályzott (KHSz) tüzelési mód kifejlesztése, mely a szokványos előkeveréses tüzeléshez képest mintegy 80%-kal alacsonyabb NO_x kibocsátást sikerült elérni úgy, hogy a többi üzemi jellemző nem változott. A KHSz tüzelési mód szegény keverékkel működik igazán és mentes a jelentős akusztikus oszcillációktól, így várhatóan a szakmában igen nagy elismerés előtt áll.

A koncepciót dízelolajjal, kókusz, valamint pálma metilészterrel, illetve ezek keverékeivel vizsgáltuk azzal a konklúzióval, hogy a tüzelőanyag elpárolgása jelentős hatással bír a tüzelés módjára, így a KHSz tüzelési mód számottevően körülményesebben valósítható meg kevésbé illékony tüzelőanyagok esetén. A folyadékporlasztással kapcsolatosan pedig egy összefüggést állítottunk fel a levegő segédközeges porlasztás félkúpszögének meghatározására, valamint a teljes permetre vonatkozóan mintegy 400 millió egyedi csepp mérésén keresztül a cseppméter eloszlását legjobban követő valószínűségi sűrűségfüggvényeket kerestük és értékeltük. Az eljárás a permetképek értékelése szempontjából paradigmaváltáshoz vezethet, ugyanis az eddigi várható érték-jellegű egyetlen jellemző paraméter helyett 2-3 paraméter segítségével a teljes permet cseppméret eloszlása leírható, ami a modellezés szempontjából kritikus fontosságú.

Dr. Kiss Sándor*Természettudományi Kar
Algebra Tanszék*

Additív és kombinatorikus számelméleti problémák

Az additív számelmélet, amely különféle egész számokból álló halmazok összeadásra nézve érdekes tulajdonságait vizsgálja, a tizenkilencedik században kezdett rohamosan fejlődni a Waring-problémának, a Goldbach-sejtésnek, és más klasszikus problémáknak köszönhetően. A kombinatorikus számelmélet, amely számelméleti problémák kombinatorikai eszközökkel történő kezelését vizsgálja, a huszadik század első felében kezdett kialakulni. A huszadik század közepén, főként Erdős Pál és Turán Pál munkásságának köszönhetően a két terület összefonódásából kialakult az additív kombinatorika és kifejlődött az additív reprezentációfüggvények elmélete. Az additív reprezentációfüggvény a természetes számok adott tagszámú összegként vett olyan előállításainak a száma, amelyben az összeg tagjai egy adott természetes számokból álló halmazban vannak. Egy ilyen halmazt Sidon-halmaznak nevezünk, ha a hozzá tartozó reprezentációfüggvény legfeljebb egy, és aszimptotikus bázisnak, ha a hozzá tartozó reprezentációfüggvény valahonnan kezdve pozitív. A terület egyik leghíresebb, ma is megoldatlan problémája az Erdős--Turán-sejtés, miszerint aszimptotikus bázishoz tartozó reprezentációfüggvény nem lehet korlátos. A kutatás célja a fenti fogalmak közötti összefüggések mélyebb megértése, újabb összefüggések feltárása, az ehhez szükséges, főként analitikus, kombinatorikus és valószínűségi módszerek továbbfejlesztése. Az eredmények segítségével közelebb kerülhetünk az Erdős--Turán-sejtés és más, kapcsolódó megoldatlan problémák jobb megértéséhez és talán a megoldásukhoz is. Az elmúlt időszakban sikerült egy, a Waring-problémához kapcsolódó eredményt nyerni. Pontosabban, sikerült igazolni olyan, teljes hatványokból álló sűrű halmaz létezését, amihez tartozó reprezentációfüggvény-bizonyos feltételek mellett-korlátos. A bizonyítás a véletlen módszeren alapul. Hasonló eredmény adódott kétváltozós, pozitív definit kvadratikus alakokhoz tartozó reprezentációfüggvényekre is. A kutatás része Sidon-halmazok és aszimptotikus bázisok kapcsolatának vizsgálata is. A kutatás ebben az irányban-a valószínűségi módszer továbbfejlesztésével-jelenleg is folyik. Várhatóan sikerül bebizonyítani olyan Sidon-halmaz létezését, ami aszimptotikus bázis a kétszer akkora tagszámú reprezentációfüggvényre nézve.

Dr. Kmetty Ákos*Gépészmérnöki Kar
Polimertechnika Tanszék***Szintaktikus biopolimer habok energiaelnyelési tulajdonságainak vizsgálata**

A kutatás célja környezetbarát, komposztálható, szintaktikus polimer habszerkezet fejlesztése és tulajdonságainak széleskörű jellemzése. A kutatás megvalósításához biológiai úton lebontható polimereket (politejsav (PLA), szívósított politejsav), mint mátrix anyagokat, és hő hatására expandálni képes mikro-méretű gyöngyöt, mint fizikai hatáselv szerint működő habképzőszert választottam ki. Céлом volt a felhasznált alapanyagok segítségével különböző habképzőszert tartalommal rendelkező habszerkezetek előállítása, és azok morfológiai, dinamikus mechanikai és cellaszerkezeti tulajdonságainak feltárása.

Az alkalmazott politejsav mátrix anyag estén különböző D-laktid tartalmú PLA-t választottam ki, fókuszálva az anyagszerkezettani tulajdonságok (pl. kristályos részarány) és azok habképzési folyamatra gyakorolt esetleges hatásainak figyelembevételére. A politejsav önmagában egy rideg biopolimer, amelyet különböző mennyiségű poli(butilén-adipát-co-tereftalát) flexibilis biopolimer alapanyaggal társítottam, majd e blend és adott mennyiségű habképzőszert felhasználásával további habszerkezeteket állítottam elő. A kutatómunka során vizsgáltam az alkalmazott habképzőszert felépítését és működését; feldolgozási hőmérséklettartományát; az egyes mátrixanyagok jellemzőit; valamint a belőlük gyártott habszerkezetek tulajdonságait úgy, mint sűrűség, cellaszerkezet, dinamikus mechanikai tulajdonságok (pl. energiaelnyelés). Az eredményektől e biopolimer habok széleskörű tulajdonságainak feltárását és az alapanyagok-habképzési folyamat közötti kapcsolatok leírását várom. A kapott eredményeket biológiai úton nem lebontható polimerekre vonatkozó értékekkel kívánom összevetni.

Dr. Krammer Olivér

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Elektronikai Technológia Tanszék*

Elektronikai gyártástechnológiákban alkalmazott szuszpenziók reológiai tulajdonságainak modellezési aspektusai

Napjainkban az elektronikai eszközök tömeggyártását az automatizált felületszerelési technológia dominálja, melynél az alkatrészek rögzítésére az ún. újraömllesztéses forrasztást alkalmazzák. A modern áramkörökben az alkatrészméretetek folyamatosan csökkennek, hogy az áramköri paraméterek megfeleljenek a hordozható-, az IoT- (Internet of Things) és az 5G eszközök követelményeinek. Az alkatrészek csökkenő mérete (pl. a passzív alkatrészeknél $200 \times 100 \mu\text{m}$) komoly kihívást jelent a forrasztási technológia legkritikusabb lépésénél, a forraszpaszta (folyasztószer és forraszszemcsék szuszpenziója) felvitelére szolgáló stencilnyomtatás során. Kutatások szerint a gyártási hibák akár 50-60%-a is erre a folyamatra vezethető vissza. Ezért elengedhetetlen a nyomtatási folyamat alapos, új módszerekkel történő vizsgálata, az ún. „zero-defect”, nulla-hibás gyártás eléréséhez.

A kutatás célja olyan modellek létrehozása, amelyekkel lehetséges vizsgálni a legfontosabb folyamatparaméterek hatását a stencilnyomtatási folyamatra. A kutatásom keretében megvizsgálom, hogy különböző nyomtatási sebességek esetén milyen nyírési sebességtartományok alakulnak ki a forraszpasztában. A nyírési sebességtartomány-elemzés alapján azt is meghatározom, hogy a forraszpaszták reológiai mérésekor kapott eredményekre illesztett matematikai modellek (Cross ill. Carreau-Yasuda) paramétereinek hibája milyen hatással van különböző nyomtatási sebességek esetén a numerikus modell eredményeire. A numerikus modellezéssel szerzett tapasztalatok alapján, gépi tanuláson alapuló módszerrel becslem, hogy a stencilnyomtatás eredményére milyen hatással vannak a különböző folyamatparaméterek. A gépi tanulási módszernél a bemenő paraméterek: a nyomtatási sebesség, az apertúra mérete (terület-falfelület aránya), és a forraszpasztában lévő szemcseméret. A becsült paraméterek: a felvitt paszta térfogata (nyomtatási hatékonysága), illetve a forraszpaszta-lenyomatok területe és magassága.

Dr. Kupai József

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Cinkona alkaloid alapú organokatalizátorok szintézise, alkalmazása és visszaforgatása

A Bolyai Kutatói Ösztöndíj (2018–2021) keretében megvalósuló kutatásom célkitűzése, melyhez jelen Bolyai+ Felsőoktatási Fiatal Oktatói, Kutatói Ösztöndíj disszeminációs munka formájában kapcsolódik, új, cinkonaalkaloid egységet tartalmazó (tio)négyzetsavamidok, illetve tiokarbamidok előállítása, azok aszimmetrikus reakciókban történő alkalmazása, illetve különböző módszerekkel történő visszaforgatása. Kutatócsoportom legjellemzőbb katalizátor egysége a cinkona váz. Ezért elsősorban ennek szerkezetének optimalizálását tűztem ki célul, hogy az aszimmetrikus reakciók minél szélesebb körében és minél jobb hatékonysággal tudjam alkalmazni. Az elért eredményeket az open access *Materials* folyóiratban publikáltam. Az organokatalizátorokat nanomembránszűrővel terveztem visszaforgatni. A membrán a molekulákat méretük alapján választja szét. A katalizátor móltömeg megnövelésére egy lehetséges módszer, amikor egy központi maghoz több katalizátort rögzítünk. A pályázat keretében triszz(brómmetil)benzolhoz egy katalizátort (a 4-hidroxi-TEMPO-t) rögzítettem, majd alkalmaztam 5-hidroximetilfurfural szelektív elektrooxidációs reakciójában, és sikeresen visszaforgattam a nanomembránszűrő segítségével. Az elért eredményekből az open access *ChemSusChem* folyóiratba 2020. február 19-én beküldött cikk jelenleg elbírálás alatt van.

Egyik vállalásom volt, hogy egy nemzetközi (EuroCatalysis 2020, Amszterdam), illetve egy hazai (Balatonszemes) konferencián mutassam be az eredményeimet, de sajnos a koronavírus miatt ezek elmaradtak. Másik vállalásom volt a katalizátorok visszanyerésében rejlő technológiai lehetőségeket összefoglaljam. Az előadást meghirdettem az MSc-s évfolyamon, és április 20-án fogom online módon megtartani.

Harmadik vállalásom volt, hogy a kutatási eredményeimet egy 6 oldalas kivonatban foglalom össze, és mester, illetve doktori képzésben részt vevő hallgatóknak tartok egy kutatói szemináriumot. Ezt az előadást is online fogom megtartani április 27-én.

Három aktív hallgatói jogviszonnyal rendelkező doktoráns hallgató munkáját vezetem. Kisszékelyi Péter és Nagy Sándor befejezték a doktorihoz szükséges kísérleti munkát, épp a disszertációjukat írják, és 2020 májusára terveztük a házivedésüket, de a járvány miatt elhalasztottuk. 2020 februárja óta egy harmadik doktoránsom is van: Fehér Zsuzsanna. Emellett három mesteri képzésben (Dargó Gyula, Fehér Zsuzsanna, Kozma Petra), illetve nyolc alapképzésben résztvevő hallgatót (Molnár Balázs, Richter Dóra, Funda Lidya Görür, Vu Hai Dang, Diana Daicu, Zeller Bálint, Pósa Szonja, Kiss Johanna) irányítok. Fehér Zsuzsanna a kari TDK-n első helyezést ért el, majd Kozma Petra és Fehér Zsuzsanna megszerezte MSc diplomáját, Zeller Bálint és Vu Hai Dang pedig megvédték BSc-s szakdolgozatukat. Kis Dávid Tehetséggel fel! pályázatot nyert hallgató szakirodalomkutatási munkáját is lelkiismeretesen vezetem.

dr. Majorosné dr. Lubláy Éva Eszter

*Építőmérnöki Kar
Építőanyagok és Magasépítés Tanszék*

A betonösszetétel hatása a szerkezetek tűzállóságára

Elsőre ellentmondásosnak tűnhet, hogy a nagyobb betonszilárdság ronthat az épületszerkezetek tűzállóságán. Azonban, amennyiben a beton szilárdsága túllép egy felső korlátot, akkor a betonfelületek leválásának valószínűsége növekszik.

Az előregyártás során gyakran előfordul, hogy a tervezettnél nagyobb szilárdsággal készülnek el a szerkezeti elemek. A nagyobb betonszilárdság általában nem okoz teherbírás csökkenés, de a tűzterherre való méretezés esetében komoly problémát jelenthet.

A kutatás során két előregyártott elemet: egy TT panelt (födémeleget) és egy egyrétegű és kétrétegű falpanelet vizsgáltunk. A vizsgálat során egy-egy etalon elemet (jelenleg gyártásban lévő elemet) és egy-egy módosított betonösszetétellel készített elemet hasonlítottunk össze. A módosításban a beton réteges leválásának megelőzésére műanyagszálak adagolással vizsgáltuk a szerkezeteket.

Kísérleteink eredményeképp a szabványok szigorítását javasoljuk. Kísérletileg igazoltuk, hogy a vasbeton szerkezeteink tűzbiztonsága érdekében már alacsonyabb betonszilárdsági osztályban is elő kell írni a műanyag szálak adagolását, valamint a szerkezetek minősítése során tűzbiztonság szempontjából a felső szilárdsági korlát bevezetése indokolt. Kísérletileg igazoltam, hogy avasbeton szerkezeteink tűzbiztonsága érdekében már alacsonyabb C50/60 betonszilárdsági osztályban is elő kell írni a szálak adagolását, mert már ezen betonszilárdságtartományban bekövetkezik a betonfelületek réteges leválása.

Dr. Molnár György

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Műszaki Pedagógia Tanszék*

Fordított oktatáson és korszerű IKT-támogatott élménypedagógiai módszereken alapuló tanítási-tanulási megoldások szerepe és hatása a 21. században

A napjainkban jelentkező munkaerőpiaci változások, információs társadalmi igények és a digitális kultúra térnyerése az oktatási rendszer átalakulását is szükségessé tették (López-Pérez et al, 2011). Az egyes szituációkban alkalmazható módszerek megválasztását segítik az IKT eszközök és rendszerek, melyek egyre több lehetőséget teremtenek a tanulóközpontú és technológia-alapú tanításra, tanulásra (Hunya, 2014; Benedek, 2016). Ezek hatására mind jobban elterjednek különféle hazai és nemzetközi tendenciák, iskolai digitalizációs mikrotrendek - pl. Flipped Classroom, élménypedagógiai módszerek, e-tanulási terek - amely sokaknak jelentős kihívást jelent. A fiatalabb generációk számára a játékszoftverek alkalmazása kézenfekvő megoldás, de a hatékonyság vizsgálata nehézségekbe ütközik (Young, et al, 2012), míg más kutatók (Slitzemann, 2011; Wouters, 2013) megállapították, hogy a tanulók képességeinek fejlesztésére és az ismeretek átadására megfelelőek és hatékonyak a digitális játékok. A Flipped Learning Network értelmezése szerint (2014) a fordított oktatás olyan pedagógiai módszer, amelyben a közvetlen tanítás a csoportban történő tanulási térből az egyéni tanulási térbe helyeződik át, és ennek következtében a csoportban történő tanulási tér dinamikus, interaktív tanulási környezetté alakul, ahol tanulók alkalmazzák a megtanult ismereteket és kreatív módon foglalkoznak a tananyaggal. Napjainkban éppen a digitális átállás egyik jelentős korszakát éljük meg, amely nagyon gyors alkalmazkodást és váltást követel meg az oktatási rendszerektől is. Kutatásaim e szakaszában a fenti alapelvek, tendenciák, releváns szakirodalmi források és primer kutatások elemzését végeztem el. A jelenlegi helyzetben, a digitális átállás időszakában előtérbe kerülnek az online, digitális oktatási technológiák és módszerek mellett a fordított vagy más néven a tükrözött oktatási megoldások szerepe is. Vizsgálódásom középpontjában egyfelől a meghatározó főbb korszerű elméleteket ismertettem kutatói szemináriumokon, ahol az IKT-alapú élménypedagógiai módszereken alapuló tanítási-tanulási megoldásokat mutattam be, másfelől empirikus vizsgálatokat folytattam a fordított oktatás hasznosíthatóságáról három választott tavaszi nappali tagozatos tantárgyi kurzus oktatásán keresztül, illetve nagymintás kvantitatív felmérést végeztem a pedagógusok (N=3390) illetve tanulók (N=620) körében a digitális átállás szerepéről. Az eddig feldolgozott kutatási eredmények illetve tapasztalatok rámutattak az élménypedagógia módszerek egyértelmű fontosságára és hatékonyságára. A fordított oktatás módszerek alkalmazása pedig felértékelődött a digitális átállás folyamatában, ahol a fizikailag beszűkült tanulási térben jól hasznosítható, az új ismeretek feldolgozását egyértelműen támogató megoldásnak bizonyult. Az érintett hallgatók körében egyfajta rendszerességet, stabil és biztos pontot jelent a tanítás-tanulás folyamatában, amely a tisztán digitális tanulás hosszútávú monotonitását is képes feloldani.

Dr. Molnár Kolos

*Gépészmérnöki Kar
Polimertechnika Tanszék*

Új, kapilláris nélküli eljárások nanoszálak előállítására

A kutatás az elektro-szálképzés (ES) technológiájának továbbfejlesztésére fókuszál, különös tekintettel az eljárás termelékenységének növelésére és a nanoszálak szerkezetek morfológiájának és mechanikai viselkedésének mélyebb megértésére. Ezeket a nanoszálak szerkezeteket kiválóan lehet hasznosítani szenzorokban, gyógyszerkészítményekben és kompozitokban, valamint a COVID-19-világjárvány kapcsán hirtelen a tudományos élet fókuszába kerültek, mint kiváló szűrőanyagok.

A kutatás keretében egy saját szabadalmon alapuló technológiát fejlesztettem tovább. A találmány alapját képező, részben 3D nyomtatással készült, furat nélküli ES berendezés terveit egy MSc diplomázó hallgató segítségével átdolgoztuk, majd a készüléket legyártattuk, vagyis a kutatás keretében új eszköz született.

A furat nélküli ES eljárással polietilén-oxid, valamint politejsav nanoszálakat állítottunk elő a saját fejlesztésű ES eljárással, amihez különösen fontos volt reológiai méréseken keresztül megismerni az oldatok folyás- és viszkozitásgörbéit, valamint a polimer koncentráció és a molekulatömeg szálakra gyakorolt hatását. A reológiai adatokból látszott a molekulák áthurkolódásának hatása, így meghatározható volt, hogy milyen koncentráció tartományban végezhető el a szálképzés. Politejsavból és polietilén-oxidból egyaránt sikeresen állítottunk elő nanoszálak szerkezeteket.

A szálképzés során nagyon fontos ismerni a szálképző résben kialakuló feszültség- és alakváltozási állapotot, amelyet analitikai úton határoztunk meg. Emellett PhD és MSc hallgatóimmal közösen megvizsgáltuk a keletkezett szálak morfológiáját elektronmikroszkópiával és feltérképeztük a kristályos tulajdonságait is. Nanoszálak fonalakon szakítóvizsgálatokat is végeztünk és kimutattuk, hogy sodrással jelentős mértékben megnövelhető a szálak húzószilárdsága. Variacionális segítségével feltérképeztük a szálorientáció és a szálképzési paraméterek közötti kapcsolatot is.

Dr. Nagy Péter

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

Nagy pontosságú és hatékony elméleti kémiai módszerek fejlesztése és alkalmazása

Az elméleti és számításos kémiai módszerek mára alkalmazhatók kémiai folyamatok atomi és molekuláris szintű és akár a kísérletekkel összemérhető pontosságú megértésre. Ezekkel a kvantummechanikán alapuló, a gyakorlatban számításigényes „virtuális laboratóriumi” [1] szimulációk pl. molekula vagy reakció optimalizálási feladatokra, vagy akár kívánt tulajdonságokkal rendelkező anyagok tervezésére is alkalmasak. Munkánk során a kiemelkedő megbízhatóságú, „gold standard”-ként elismert, ún. CCSD(T) modell számításigényét akár tíz nagyságrenddel csökkentettük, így az 20-25 atom helyett pár ezer atomos rendszerekre is alkalmazható lett [2,3]. Számos közelítés bevezetése mellett sikerült megőrizni a módszer eredeti pontosságát és szisztematikus pontosíthatóságát, így a számolt mennyiségek hibáját becsülni is tudunk. A teljesen kari fejlesztésű [1] számítógépes algoritmusainkat és programjainkat optimalizáltuk [2,3] és a modern számítóközpontokban elvárt magas szinten párhuzamosítottuk [4]. Ezzel a CCSD(T) módszerünk jelenleg jóval hatékonyabb a konkurenseinél [2], ami korábban elérhetetlen alkalmazási területeket nyitott meg. A módszerünkkel először tudtunk igazoltan kémiai pontosságú fehérje-ligandum és összetett szupramolekuláris kölcsönhatási energiákat számítani [5], illetve használtuk ion-oldószer és ion-aminosav kölcsönhatási modellek fejlesztésére is [6]. Módszerünket kiterjesztettük nyílt héjú [7] és gerjesztett állapoti [8] rendszerek vizsgálatára is, így már fotokémiai folyamatokat, átmeneti-fém vegyületeket és gyökös reakciókat is tudunk nagy pontossággal szimulálni.

- [1] M. Kállay, P. R. Nagy és munkatársak: *J. Chem. Phys.* **152**, (2020) 074107
- [2] P. R. Nagy, G. Samu, M. Kállay: *J. Chem. Theory Comput.* **14** (2018), 4193
- [3] P. R. Nagy, M. Kállay: *J. Chem. Theory Comput.* **15** (2019), 5275
- [4] L. Gyevi-Nagy, M. Kállay, P. R. Nagy: *J. Chem. Theory Comput.* **16** (2020), 366
- [5] Y. S. Al-Hamdani, P. R. Nagy, M. Kállay, J. G. Brandenburg, A. Tkatchenko: (2020) beküldve
- [6] V. W. Fisher, Y. S. Al-Hamdani, P. R. Nagy, A. Tkatchenko, S. Varma: (2020) beküldve
- [7] B. Szabó, J. Csóka, M. Kállay, P. R. Nagy (2020) előkészületben
- [8] D. Mester, P. R. Nagy, M. Kállay: *J. Chem. Theory Comput.* **15** (2019), 5275

Dr. Sepsi Adél

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék*

A törpeséget okozó mutáns rht gének hatása a kenyérbúza hőstressztűrő képességére és fertilitására

Az alacsony növekedésű (törpe) búzafajták világszéles elterjedése lehetővé tette a kenyérbúza termésmennyiségének robbanásszerű növekedését és közel egy milliárd embert mentett meg az éhezéstől az 1950-es években kezdődött zöld forradalom idején. Jelen kutatásaink arra keresik a választ, hogy a ma már szinte valamennyi búzafajtában jelenlévő törpeség allélok (Rht-B1B és Rht-D1B) hogyan hatnak a búza hőstressz tűrésére.

A mai klímamodellek előrejelzései szerint 2050-re a tavaszi hőmérsékletek meghaladják a napi 30 °C-os maximumot. A természetben tavasszal zajlik a búza ivarsejtjeinek kialakítása, amely számfelező (meiótikus) sejtosztódással történik. Előzetes vizsgálataink jelezték, hogy a meiózis időszakában bekövetkező rövid ideig tartó hőstressz a törpe növekedésű búzák termékenységet fokozottabban csökkenti, mint magas növekedésű társaikét. A termékenység csökkenés okának feltárásához különböző törpeség allélokat hordozó közel-izogén búzavonalakat tettünk ki hőstressznek, majd vizsgáltuk a növényekből nyert meiótikus sejtek osztódását. A törpe búzavonalak meiótikus sejtosztódása során kromoszómakieséseket, sejtmag lefűződéseket és abnormális tetrád képződést figyeltünk meg, amelyek a genom egy részének elvesztéséhez és abnormális ivarsejt fejlődéshez vezettek. A következőkben a meiózis korai szakaszát vizsgáljuk immunjelöléssel, mivel ez megválaszolja mi eredményezi a nagyfokú genom eliminációt. Kísérleteink bizonyították, hogy a csökkent termékenységet a meiózis során kialakuló osztódási rendellenességek okozzák, ezzel fontos támpontot adva a búzanemesítő programok számára olyan búzafajták előállítására, amelyek képesek alkalmazkodni a megváltozott klimatikus viszonyokhoz.

Dr. Suplicz András*Gépészmérnöki Kar
Polimertechnika Tanszék***Technológiai paraméterek hatása a T-RTM eljárással előállított polikaprolaktám minták tulajdonságaira**

A polimereket és a polimer mátrixú kompozitokat korunk legdinamikusabban fejlődő és ezáltal a legsokoldalúbb anyagainak tekinthetjük. Egyre inkább teret hódítanak azok az alkalmazások, és így a kutatások is, amelyekben az erősítőanyagokat hőre lágyuló mátrixanyaggal társítják, szem előtt tartva az újrahasznosíthatóságot. Ezeket a kompozit anyagokat hagyományosan fröccsöntési technológiával dolgozzák fel, ami ugyan gazdaságos és termelékeny, de a töltött rendszerek nagy viszkozitása korlátozza azok feldolgozhatóságát. A poliamid 6 anionos gyűrűfelfnyitós polimerizációval való előállítása új lehetőségeket nyújthat a nagy mennyiségű töltő- és erősítőanyaggal társított polimer kompozitok területén. A folyamat során megfelelő aktivátorral és katalizátorral ellátott kis viszkozitású monomert (kaprolaktámot) kis nyomásokkal juttatunk az alakadó szerszámba, ahol emelt hőmérsékleten végbemegy a polimerizáció (in-situ polimerizáció).

A kutatás célja olyan poliamid 6 mátrixú kompozitok előállítása, amelyek a hagyományos technológiákkal feldolgozott hőre lágyuló kompozitoknál jóval nagyobb töltőanyag tartalommal rendelkezhetnek. Ehhez elsősorban megvizsgálom az ϵ -kaprolaktám anionos gyűrűfelfnyitós polimerizációs folyamatát és áttekintem az ehhez alkalmazható adalékanyagokat. Ezt követően egy kísérletterv alapján elemzem a T-RTM technológia paramétereinek hatását az in-situ polimerizációval létrehozott töltetlen polikaprolaktám mechanikai, morfológiai és termikus tulajdonságaira. Ezzel átfogó képet kapok a feldolgozáshoz szükséges ciklusidőről, illetve a polimerizációs hőmérséklet és az alkalmazott nyomás terméktulajdonságra gyakorolt hatásáról. További célom, hogy vizsgáljam a kaprolaktám és a funkcionális töltőanyagok társíthatóságát, és elemezzem a kapott termékek tulajdonságainak változását a töltőanyag tartalom függvényében.

A kidolgozott módszerek felhasználásával az autóiipari alkatrészek mellett olyan új, polimer alapú, innovatív eszközök válnak előállíthatóvá, amelyek gyártását az eddigi feldolgozástechnológiák korlátai nem tették lehetővé. Ilyen lehet például az energiacellák bipoláris lemeze, vagy a hővezető polimer eszközök, ahol a nagy töltőanyag tartalom elengedhetetlen a megfelelő hatásfok eléréséhez. Ezek az új, innovatív megoldások új kutatásokat indíthatnak el a tudományos életben.

Dr. Szabó Judit Eszter

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék*

Az uracil-DNS javítás és a horizontális géntranszfer összefüggései Staphylococcus aureus-ban

A *Staphylococcus aureus* az egyik legjelentősebb patogén baktérium. Az általa okozott megbetegedéseket különösen nehéz kontrolálni, mivel a baktérium különböző populációi képesek egymás között hatékonyan cserélgetni és terjeszteni olyan géneket, amik növelik fertőző képességüket vagy képessé teszik őket arra, hogy ellenálljanak az antibiotikumos kezelésnek. Ezek a gének általában ún. mobilis genetikai elemeken helyezkednek el. A folyamatot pedig, amiben a baktériumok a mobilis genetikai elemeket cserélgetik, horizontális géntranszfernek nevezzük.

Az uracil az egyik leggyakoribb hiba, ami előfordulhat a DNS-ben. A túl sok uracilt tartalmazó DNS-t az uracil-DNS javító enzimek túlzott bázis kivágó aktivitása károsíthatja. A DNS uracil tartalma és az uracil-DNS toxicitása a DNS építő anyagok előállításáért felelős nukleotid anyagcserétől, és az uracil-DNS hibajavító rendszertől függ.

A *S. aureus* baktériumból hiányzik az egyik fontos uracil DNS elkerülésért felelős fehérje, a dUTPáz. Ezzel szemben a baktérium bizonyos mobilis genetikai elemei hordozzák ezt az egyébként eszenciálisnak tartott gént, valamint más olyan géneket, amik az uracil-DNS hibajavító mechanizmusok kikerüléséért felelősek. Feltételezésünk szerint a mobilis genetikai elemek azért hordozzák ezeket a géneket, hogy elkerüljék DNS-ük károsodását a horizontális géntranszfer során. Emellett ezek a gének részben pótolhatják a *S. aureus*-ból egyébként hiányzó, hasonló funkciójú gének szerepét.

A kutatás első másfél évének eredményei alapján úgy tűnik, hogy valószínűbb, hogy a *S. aureus* mobilis genetikai elemek saját terjedésük elősegítésére hordoznak az uracil DNS hibajavítást befolyásoló fehérjéket. Annak bizonyítására, hogy a mobilis genetikai elemek saját terjedésük – és így az antibiotikum rezisztencia és patogenitási faktorok terjedése – elősegítése érdekében hordoznak az uracil DNS hibajavítást befolyásoló faktorokat, szeretnénk olyan *S. aureus* bakteriofágokat létrehozni, amiknek DNS-e különböző mértékben tartalmaz uracil-t. Ezt követően szeretnénk tesztelni, hogy a vad típusú, nem uracilos DNS-ű fágokhoz képest, mennyire hatékonyak ezek a fágok a baktérium sejtek fertőzésében, és az általuk hordozott gének átvitelében.

A kutatási eredményeink hozzá fognak járulni ahhoz, hogy megértsük, hogy a *S. aureus* mobilis genetikai elemek miért hordoznak az uracil DNS hibajavítást befolyásoló géneket. Ezzel egy lépéssel közelebb kerülhetünk az antibiotikum rezisztencia terjedésért felelős mechanizmusok megértéséhez is.

Dr. Tettamanti Tamás

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék*

Közúti közlekedési paraméterek mérése, becslése, ill. mikroszkopikus forgalomszimuláció kalibrálása

A Bolyai+ Ösztöndíjpályázatban a „Közúti közlekedési paraméterek mérése, becslése, ill. mikroszkopikus forgalomszimuláció kalibrálása” kutatási címmel végeztem kutatási tevékenységet. A tudományos program tárgya egyrészt a közlekedési paraméterek mesterséges intelligencia alapokon történő becslése volt. Másrészt kapcsolódva a paraméterek méréséhez/becsléséhez, egy valós időben futtatható (genetikus algoritmus alapú) kalibrációs algoritmust dolgoztam ki mikroszkopikus forgalomszimulációhoz.

Gyakori szituáció, hogy egy közlekedési hálózatnak csak egyes részein van lehetőség mérni (pl. hurokdetektorokkal). A hálózat más pontjai ugyanakkor ismeretlenek. Ennek a problémának a feloldására a mérések virtuális kiterjesztése alkalmazható mesterséges tanuló algoritmus segítségével. A cél, hogy a hiányos mérések alapján is egy teljes értékű forgalombecslést adhassunk egy adott közlekedési hálózatra.

A gyakorlati közlekedésmérnöki szakma egyik bevett gyakorlata, hogy a rendelkezésre álló alapadatok alapján lemodellezi az adott hálózatot mikroszkopikus forgalomszimulációs szoftverben. A modellezési folyamat egyik kritikus eleme a hangolás és végül a validálás. Ezt azonban jellemzően manuális megoldással, utólagosan végzik. Ennek a feladatnak egy innovatívabb megközelítése lehet a genetikus algoritmussal történő kalibráció, amelyet ráadásul kvázi valós időben is el lehet végezni, amennyiben a detektoradatok „online” elérhetőek. Ezzel a módszerrel - gyakorlatilag a „digital-twin” módszert követve - a valóság egy jól közelített modelljét is megalkothatjuk.

A kutatási eredmények jól alkalmazhatók oktatási és tudományos szempontból egyaránt. Egyrészt a 2018 őszén indult „Autonomous Vehicle Control Engineer” képzésben már lehet hasznosítani. Másrészt a BME KJK és a ZalaZONE autóiipari tesztpálya jövőbeli K+F tevékenységeihez nyújthat hatékony segítséget.

Dr. Tóth András József

*Vegyésszérmérnöki és Biomérnöki Kar
Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszék*

Technológiai hulladékvíz kezelési módszerek összehasonlítása: desztilláció és membrános eljárások

A pályázatban elvégzett kutatások két szakaszra oszthatók.

I. szakasz: Technológiai hulladékvizek kezelésének átfogó elemzése

Önálló szakkönyvet írtam a vegyipari hulladékokról. Az összeállítás a vegyiparban keletkező hulladékok bemutatásán és kezelésükön keresztül mutatja be a szektor törekvéseit a környezetvédelem területén. Hulladék fogalma alatt a szakkönyvben általánosan a vegyiparban keletkező folyékony, gáz- illetve szilárd halmazállapotú melléktermék értendő. Először a vegyipar és a környezetvédelem kapcsolatrendszeréről kerül bemutatásra, majd átfogó hulladékcsökkentési stratégiák felvázolását követi a zöld kémiai alapelvek részletes elemzése. Ezután végigkövethetjük a vegyipari hulladékok útját a gyűjtésüktől a kezelésükig. *Külön fejezetek foglalkoznak a kiemelten fontos vegyipari folyékony hulladékok, valamint gáznemű szennyezők bemutatásával, ajánlott hulladékkezelési eljárások felvázolásával.* A szakkönyv a fő vegyipari ágazatok jellegzetes hulladékait, valamint esetleges speciális kezelési eljárásukat is bemutatja. Végezetül ajánlásokat tartalmaz, amivel fejleszthető a vegyipari szektor hulladékgazdálkodása, környezetvédelme.

A munka elérhetősége: Hulladékgazdálkodás a vegyiparban, Typotex Kiadó, ISBN 978 963 493 084 6, 2020. https://www.interkonyv.hu/konyvek/toth_hulladeggazdalkodas

II. szakasz: Desztillációs és membrános eljárások összehasonlítása

A kutatás motivációja több, ipari elválasztástechnikai problémából ered. Professzionális folyamatszimulátor környezetben modellezést végeztem és optimalizáltam különböző kezelési eljárásokat. Főbb munkák, elválasztási feladatok voltak:

1. Izopropanol (IPA) gyógyszergyári hulladékvízből történő elválasztását elemeztem. A cél eléréséhez hibrid, desztillációs és hidrofíl pervaporációs (HPV) kezelési eljárást alkalmaztam. Az eredmények alapján tanúsíthatom, hogy a választott eljárás alkalmas az IPA és a víz elválasztására: 99,5 tömeg%-os terméktisztaságok érhetőek el.
2. A tetrahydrofuran technológiai hulladékvízből történő eltávolítását vizsgáltam extraktív desztillációval. Az eredmények azt igazolták, hogy a módszerrel elválasztható egymástól a tetrahydrofuran és a víz, 99,5 tömeg%, illetve 99,9 tömeg% tisztaságú termékeket kapva.
3. Az ún. ABE (acetone, butanol, ethanol) fermentációs termékek elválasztását vizsgáltam organofíl pervaporációval (OPV). Az eredményekből megállapítottam, hogy az OPV önmagában nem alkalmas az ABE fermentációs termékek vízből történő elválasztására.
4. Etanol és metanol tartalmú gyógyszergyári hulladékvíz elválasztását vizsgáltam desztillációs kolonnák és HPV kombinálásával. Megállapítottam, hogy mindegyik komponensre elérhető a szeparáció során a 99,5 tömeg%-os tisztaság.
5. Etil-acetát vízmentesítését vizsgáltam különböző pervaporációs eljárások kombinálásával, amely során 99,5 tömeg%-os terméktisztaságot értem el.

Dr. Vrana Péter*Természettudományi Kar
Geometria Tanszék***Relatív majorizáció erőforrás-elméleti vizsgálata**

Az információelméletben és a kvantum termodinamikában számos probléma megfogalmazható eloszlások illetve kvantumállapotok valamilyen feltételek melletti átképezhetősége segítségével. Például egy adott hőmérsékletű hőtartállyal kölcsönható klasszikus rendszerben lezajló folyamat során egy állapot pontosan akkor fejlődhet egy másik adott állapotba, ha létezik olyan Gibbs-állapotot megőrző sztochasztikus leképezés, amely az első állapotot a másodikba képezi. Ennek a relációnak egy általánosítása a Renes által bevezetett relatív szubmajorizáció, amely valószínűségekkel súlyozott kvantumállapot-párokat hasonlít össze teljesen pozitív leképezésekkel való átképezhetőség tekintetében, és olyan transzformációk vizsgálatát is lehetővé teszi, amelyek csak bizonyos valószínűséggel érik el a célállapotot. Ezen reláció aszimptotikus relaxációja azt méri, hogy a kiinduló állapot sok példányából a célállapot sok példányát milyen valószínűséggel érhetjük el. A kutatás célja karakterizálni az aszimptotikus relatív szubmajorizációt információ mennyiségek segítségével, amely lehetővé teszi a hibaexponensek közötti trade-off reláció meghatározását, általánosítva a hipotézisvizsgálati erős konverz exponens Mosonyi és Ogawa munkájában meghatározott kifejezését. Ehhez felhasználjuk Strassen rendezett félgűrűkről szóló tételét, amely a közelmúltban több információelméleti problémában is alkalmazásra talált. Ez a tétel elégséges feltételt ad arra, hogy az aszimptotikus rendezést valós értékű monoton homomorfizmusok karakterizálják. A valószínűségekkel súlyozott állapotpárok ekvivalenciaosztályainak a halmaza is ellátható rendezett félgűrű struktúrával, ahol az összeadást illetve szorzást a direkt összeg és tenzorszorzat műveletek adják, míg a rendezést a relatív szubmajorizáció definiálja. A kapott rendezés nem teljesíti Strassen tételének feltételeit, emiatt a kutatás másik célja a tétel általánosítása, amely a későbbiekben más problémák vizsgálatában is hasznos lehet.

Gyarmati Benjám

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

In situ gélesedő, várhatóan bioadhezív poliaminosav származékok

Jelen pályázat (cím: „*In situ* gélesedő, várhatóan bioadhezív poliaminosav származékok”) témájának alapját képező Bolyai pályázat programjának keretében új, poliaszparaginsav és poliaszpartamid alapú, gyógyászatban alkalmazható polimer származékokat állítottam elő, és jellemeztem fizikai-kémiai módszerekkel. A kutatás fókuszpontjában az *in situ* gélesedés jellemzése, a bioadhéziós tulajdonságok, az adhéziós sajátságok vizsgálatára alkalmas modellfelszín fejlesztése és a polimerek degradációs tulajdonságainak vizsgálata áll.

A Bolyai+ program keretében célom volt ezen területek legfontosabb eredményeit és a gyakorlati hasznosítás lehetőségeit átadni különböző képzési szinteken lévő egyetemi hallgatóknak, mely az ő látókörüket szélesíti és motiválhatja a kutatómunkában való bekapcsolódásra és elmélyülésre. Kislétszámú szemináriumok keretében ismertetem a kutatás módszertani alapjait, az adhézió elméleti hátterét, mérési lehetőségeit, az eredmények összehasonlíthatóságával kapcsolatos kérdéseket, valamint gyakorlati nézőpontból is beszélünk a mérések megvalósításáról és az eredmények kiértékeléséről. Nagyobb létszámú hallgatóság előtt beszélek a gélek, *in situ* gélesedő rendszerek szerkezetéről, főbb tulajdonságairól és alkalmazásukról a hatóanyag-leadás területén. A kutatás specifikusabb kérdéseiről nemzetközi konferencián számoltam be szóbeli előadás formájában, ahol elsősorban az általam tervezett polimerek fizikai-kémiai tulajdonságairól, különösen az *in situ* gélesedésről és a degradációs viselkedésről született eredményekre fektetve a hangsúlyt.

Heszberger Zalan

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Távközlési és Médiainformatikai Tanszék*

Útvonalválasztás komplex hálózatokban

A kutatás célja az emberi agy hálózatos modelljének mohó navigálhatóságát tanulmányozni. A mohó navigálhatóság azt jelenti, hogy ha adott egy hálózat, melynek csomópontjaihoz koordinátákat rendelünk, valamint a pontok távolságát Euklideszi távolságban mérjük, akkor egy adott csomópontból el lehet jutni egy hálózat bármely másik csomópontjába úgy, hogy minden lépésben közeledünk a végponthoz.

Korábbi eredményeim megmutatták, hogy egy átlagos agy (a mi esetünkben 5 személy átlagos agyhálózata) valóban tartalmaz egy mohó navigálható magot (GNC), az ehhez kapcsolódó csomópontokat pedig perifériaként foghatjuk fel. A GNC pontossága 89% körül mozog, tehát a tartalmazás szignifikánsnak bizonyul.

A félév során egy új adatbázissal dolgozom, mely már 40 személy 5 különböző felbontáson vett agyhálózatát elemzi. A cél megállapítani, hogy vajon a tartalmazás tulajdonság mennyire konzisztens, ill. hogy az azonosított hálózat részletek, mely paramétereikben mutatnak hasonlóságot. Vajon a GNC minden egyed esetén ugyanaz a hálózat, vagy pusztán a mohó navigálhatóság tulajdonsága jelenik meg mindenhol, mint egy hálózatevolúciós szükségszerűség? Mekkora ez a hálózat az egyes egyedekben, és mekkora varianciát mutat? Vajon a eredmény változik, ha növeljük a csomópont szintű felbontást? Ha igen, milyen irányban? Az eddigi eredmények biztatóak. Több link gyakorisági mutatót vizsgáltam meg, többnyire a hálózatok metszeteiből képzett agymodell mintákon. A közös rész ezekben az esetekben nagyfokú mohó navigálhatóságot mutatott. A tendencia abban az irányba mutatott, hogy ha felbontást növelve a tulajdonság mind kevésbé feltűnő. Ennek oka feltehetőleg, hogy egyre több olyan link kerül bele a vizsgált mintában, mely valószínűleg a perifériához tartozik.

Holczbauer Tamás

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*

Szilolid típusú vegyületek szerkezetének vizsgálata

A szilolok (szilaciklopentadiének) szilíciumot tartalmazó öttagú gyűrűs heterociklusos vegyületek, melyek vizsgálatával és új típusú vegyületek szintetizálásával évek óta foglalkoznak a BME Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszékén. A szilolok konjugált rendszerek építőelemeiként, OLED-ekben, OFET-ekben elektronszállító anyagként alkalmazhatóak. A telítetlen öttagú heterociklusok közül a szilolok esetében a legalacsonyabb a HOMO–LUMO átmenet energiája, ami a gyűrűn lévő helyettesítők változtatásával finomhangolható. A kutatócsoportban több, a szilol-gyűrű α -szenein foszfanil helyettesített származékot állítottak elő.

Évekkel ezelőtt ebbe a kutatási témába kapcsolódtam be, mivel a vegyületek tulajdonságainak finomhangolásához a szerkezetek vizsgálata elengedhetetlen volt. Munkám során a szintetizált szilaciklopentadién típusú heterociklusos vegyületek kristályosításával, szerkezetének meghatározásával és szupramolekuláris kölcsönhatásainak vizsgálatával foglalkoztam. Sokszor csak többszöri kristályosítással kaptunk röntgen-diffrakciós mérésre alkalmas kristályokat és a méréseket is meg kellett ismételni.

Először 2,5-bisz(diizopropil-foszfanil-szilolok (-P(iPr)₂), illetve származékainak (-PX(iPr)₂, X= O, S, AuCl) szerkezetét határoztam meg és vizsgáltuk a módosított szubsztituensek hatását a telítetlen szilol gyűrűre. Itt azonos szerkezetek különböző oldószer zárványait és polimorf szerkezeteit is vizsgáltuk. A kapott vegyületek UV-látható fény elnyelését is megvizsgáltuk, és az eredményekről számot is adtunk [1]. Ezt követően a diizopropil csoportokat terc-butil csoportokra cserélve a ter-butil-foszfanilokat állítottunk elő, amelyek vizsgálata jelenleg is folyamatban van.

[1] R. Mokrai, T. Holczbauer, Cs. Fekete, B. Volk, V. Dorcet, P. Bouit, L. Nyulászi, M. Hissler, I. Kovács, Z. Benkő. DOI: 10.1002/ejic.202000163

Hullám Gábor István

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék*

Többváltozós függőségi relációkban szereplő faktorok oksági és hatáserősségi jellemzőinek feltárása statisztikai adatok és háttértudás felhasználásával

Napjaink egyik jelentős kihívása számos tudományterületen a keletkező nagy mennyiségű mérési vagy megfigyelési adat elemzése, illetve ez alapján a jelenségek mögött meghúzódó mechanizmusok megértése, függőségi illetve oksági összefüggések feltárása. E kapcsolatok feltárását végző módszerek egyik jelenlegi korlátja, hogy korlátozott módon vagy egyáltalán nem teszik lehetővé a meglévő nagy mennyiségű háttértudás hatékony felhasználását. Holott biológiai tárgyterületeken kulcsfontosságú lenne a rendelkezésre álló heterogén háttértudás alkalmazása a mechanizmusokat leíró modellek megfigyelési adatokból történő tanulásakor, mivel a modellek pontosságát akár jelentősen javíthatná. Műszaki területeken pedig a rendelkezésre álló temporális, strukturális és hierarchikus információk integrálása eredményezhetne pontosabb modelleket. Ezért a kutatómunka egyik célkitűzése a háttértudást hatékonyan felhasználni képes függőségi kapcsolatokat feltáró módszerek fejlesztése. A függőségi mintázatok oksági értelmezése azonban korlátozott, ha csak megfigyelési adatok állnak rendelkezésre. Ok-okozati viszony megállapításához ekkor valamilyen háttértudás, például időbeliséget meghatározó információ szükséges. Ennek hatékony kezelése, különösen nagy dimenziójú adathalmazok esetén, a kutatómunka egy további céljaként szolgál. Mindemellett a többváltozós függőségi kapcsolatok vizsgálatánál kihívást jelent a változók közötti interakció jellegének meghatározása nagy dimenziójú adatok esetén. Lényegi kérdés a többváltozós hatáserősség mértékek kiértékelése és értelmezése. Ezért egy további cél olyan módszerek fejlesztése, melyek strukturális és parametrikus jellemzőket együttesen vizsgálva teszik lehetővé a többváltozós interakciók tipizálását. A kutatás eredményei közvetlenül hasznosulnak nagy dimenziójú biológiai adathalmazok elemzése terén. Kiemelt szerepet kap a NAP-2-SE Új Antidepresszív Gyógyszercélpont kutatócsoporttal együtt végzett kutatómunkában, különösen a depresszió és annak genetikai valamint környezeti faktorai közötti függőségei vizsgálata során, amely egy nagydimenziójú, több mint százezer mintát tartalmazó, valós adathalmaz elemzésén alapul.

Kállay-Menyhárd Alfréd

*Vegyésszérmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

Mennyiségi szerkezet-tulajdonság összefüggések meghatározása szemikristályos polimerekben

Napjainkban számos kristályos polimert használunk a mindennapi életben, melyek tulajdonságait elsősorban a komplex szerkezetük határozza meg. A kristályos szerkezet célzott módosításával tehát igen széles határok között változtathatjuk egyes kristályos polimerek tulajdonságait, ami az alkalmazási területeik kibővítését teszi lehetővé. A kristályos szerkezet és így a tulajdonságok módosítására az ipari gyakorlatban nagy hatékonyságú göcképző hatású adalékokat használnak. A jelen beszámolóban a 2019-2020 évben az ÚNKP-19-4-BME-419 számú pályázatomban elért eredményeket foglaltam össze, mely munka egyenes folytatása az előző évi ÚNKP Bolyai+ pályázatomban.

A munkám elsődleges célja, hogy a felhasználás szempontjából fontos tulajdonságok becslésére alkalmas modelleket dolgozzak ki melyekkel a kristályszerkezeti paraméterekből lehet jósolni egyes tulajdonságot. A munka három részterületre osztható fel. Az első terület a merevség becslése olyan kristályszerkezeti tényezők alapján, melyeket egyszerűen kalorimetriás módszerrel meghatározhatóak. A számításokhoz egy empirikus összefüggést használtam melyet a korábbi kutatásaink során állítottunk fel. A számításokhoz egy modellkísérlet során meg kell határozni az egyenlet anyagfüggő iteratív paramétereit minden polimerre, mely anyagfüggő állandókat az ideai munka során több polimerre is meghatároztam. A munka jelenlegi állása szerint a polipropilénen kívül a poliamidok és a politejsav merevségét tudjuk becsülni a módszerrel. A második téma a kristályos polimerek optikai tulajdonságainak, elsősorban a homályosságnak a modellezése. Az általunk kidolgozott szimulációs módszerrel a polikristályos polimerek homályossága becsülhető és a becslés vékony filmek esetén jó egyezést mutat a kísérleti értékekkel, de a vastagabb minták fény-szórását még nem tudjuk elég pontosan leírni. Ennek a modellnek a pontosításával foglalkoztam.

A harmadik terület szorosan kapcsolódik a másodikhoz, mert az optikai tulajdonságok előrejelzéséhez igen pontos szerkezeti (morfológiai) adatokra van szükség. Az optikai módszerek azonban nagyon kevésbé megbízhatóak, így kifejlesztettünk egy számítási módszert melyben a szferolitot szerkezetet egy Monte-Carlo szimulációval becsüljük primer kristályosodási adatok alapján. Az eredményeink igen jól közelítik a valóságban az adott körülmények között kialakuló szerkezetet.

Összefoglalás képpen olyan egyszerű szoftver fejlesztésébe kezdtünk bele, mely tartalmazza az összes számítási módszert és kísérleti eredményekből elvégzi a kiértékelést automatikusan. Az előadás befejezése képpen bemutatom az elvégzett kutatási eredmények disszeminációját, a vállalásaim teljesítését, mely adatokat a szakmai záró jelentésben is részletesen megadok.

Kormos Márton

*Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék*

Alacsony dimenziós kvantumrendszerek nemegyensúlyi dinamikája

A nemegyensúlyi kvantumrendszerek vizsgálata a közelmúltban a nemzetközi kutatás fókuszába került, nagy részben az ultrahideg atomi kísérletek szédületes fejlődésének köszönhetően. Ezek a kísérletek lehetővé teszik konkrét elméleti modellek „kvantum szimulációját” és a koherens kvantum dinamika közvetlen megfigyelését, miután a rendszert egyensúlyából kitérítettük és magára hagytuk.

Elméleti szempontból kiemelkedően fontos kérdés a nemegyensúlyi dinamika univerzális jellemvonásainak azonosítása. Egyensúlyban a kritikus pontok körül tapasztalunk univerzális viselkedést. Az egyensúlyi kritikus pontok egyensúlyon kívül is univerzalitáshoz vezetnek: a Kibble–Zurek (KZ) mechanizmus szerint egy kritikus ponton keresztül hajtott rendszerben számos fizikai mennyiség univerzális skálátörvényeknek tesz eleget. A kvantum kritikus pontok körüli dinamika kutatása jelenleg is az érdeklődés középpontjában van.

Munkámban ehhez a kérdéskörhöz járulok hozzá kvantumtérelméletek nemegyensúlyi viselkedésének numerikus és analitikus vizsgálatával. A térelméletek választását az indokolja, hogy a kritikus pontok körüli alacsony energiás jelenségek univerzális leírását térelméletek adják. A numerikus vizsgálatok egy nemperturbatív módszer, a Csonkolt Állapottér Módszer (TSA) segítségével történnek, amely alkalmas az integrálhatóság sértés hatásának vizsgálatára is.

A paradigmatis Ining térelmélet két dimenziós csatolási terében különböző irányok mentén lehet a kvantum kritikus ponton áthaladni, mely kitűnő lehetőséget ad a skálátörvények univerzális voltának és az integrálhatóság szerepének tanulmányozására. Megvizsgáljuk többek között a végzett munka és a mágneszettség eloszlását és időbeli skálázását, valamint az ún. Loschmidt-echót. A ferromágneses fázisban a keltett doménfalak bezáródása és a KZ mechanizmus összjátéka egzotikus, eddig nem vizsgált viselkedésre vezethet.

Kossa Attila

*Gépészmérnöki Kar
Műszaki Mechanikai Tanszék*

Vízálló adhéziós tapadást biztosító szintetikus mikrostruktúrák tervezése

A természet számos kiváló példát mutat arra, hogy az élővilág miképpen képes hatékonyan alkalmazni a Van der Waals-féle erőhatásokat annak érdekében, hogy különböző tapadási megoldásokat létesítsen. Talán a legtöbbet hivatkozott példa a gekkók tapadásának említése. Mára már köztudott, hogy a gekkók a végtajaik végén található apró lemezekből és sörtékből álló struktúráknak köszönhetően képesek akár a sima üveghez is kiválóan tapadni. Ezt a különleges képességet az ipar is igyekszik kamatoztatni és egyre több kutatás foglalkozik azzal, hogy mesterséges úton előállított mikrostruktúrákkal biztosítsanak tapadást különféle alkalmazásokban főként a robotika területén. Fontos kihangsúlyozni azonban az orvosi alkalmazásokat is, ahol a különféle sebtapaszkok ragasztó felőli oldalán kialakított struktúrák segítségével akár bőrfelülethez is tapadni képes – ragasztó nélküli – sebtapaszkokat lehet létrehozni.

Jelenleg több kutatócsoport is intenzíven foglalkozik a gekkók által ihletett adhéziós tapadó struktúrák mechanikai viszonyainak feltérképezésével és mesterséges mikro-struktúrák előállításával. Számos kísérleti eredmény áll rendelkezésünkre, melyek segítenek megérteni a mechanikai viszonyokat, de a numerikus szimulációk segítségével sok olyan jelenséget is vizsgálhatunk, melyeket kísérleti úton nehézkes, hosszadalmas és költséges lenne. Az egyik fontos kutatási irányzat jelenleg a víz alatti tapadást biztosító struktúrák tervezése és gyártása. A levegőben tapadást biztosító megoldások sok esetben kudarcot vallanak nedves környezetben. A kísérleti eredmények bebizonyították, hogy a víz (vagy más folyadék) jelenléte alapjaiban változtatja meg a mechanikai viszonyokat. A kutatás során elsődleges cél numerikus szimulációk segítségével magyarázatot találni a víz alatti tapadás során fellépő mechanikai jelenségekre. A numerikus számítások eredményei közvetlenül felhasználhatók a különleges mikrostruktúrák gyártásában.

Lángi Zsolt

Természettudományi Kar
Geometria Tanszék

Konvex geometriai problémák

A konvex testekkel kapcsolatos geometriai problémák az ókortól napjainkig a geometriai kutatás fókuszában vannak. Az elmúlt évben konvex testekre vonatkozó problémákkal foglalkoztam. Az előadás egy részében a kutatási munkám alatt elért eredményeket ismertetem. Ezen belül beszélek az alábbiakról.

1. A kutatási tervben megfogalmazott célkitűzésekkel összhangban Bezdek Károllyal közösen általánosítottuk a diszkrét geometria egyik hosszú ideje megoldatlan problémáját, a megvilágítási problémát gömbi térre. Ennek kapcsán meghatároztuk konvex testek egy mindenütt sűrű (a gömbi politópokat is magában foglaló) családjának a megvilágítási számát. A problémát kiterjesztettük konvex testek kombinatorikus osztályaira, és ezekre is hasonló állítást igazoltunk. Az eredményeinket közlésre elfogadták a *Monatshefte für Mathematik* folyóiratban.
2. Az elmúlt évben foglalkoztam monostabil poliéderekkel kapcsolatos problémákkal. Ennek kapcsán beláttam a poliedrikus Gömböc, azaz a mono-monostatikus poliéderek létezését. Az eredeti célkitűzés, vagyis azon konvex testek meghatározása, melyek tetszőleges pontossággal közelíthetők monostabil poliéderekkel, még jelenleg is kutatási munka tárgya.
3. Matthieu Fradelizivel és Artem Zvavitch-csal foglalkoztunk kompakt euklideszi halmazok vektorösszegének térfogatával. Egy ehhez kapcsolódó sejtés szerint tetszőleges kompakt halmaz önmagával vett Minkowski átlagainak térfogata monoton növekvő. Bár a sejtést nemrég cáfolták, mi igazoltuk kompakt, csillagszerű halmazok esetére az átlagban szereplő halmaz elegendően nagy darabszáma esetén, valamint több más speciális esetre. Az eredményeinket tartalmazó munka jelenleg bírálat alatt van.
4. Emellett Alexey Glazyrinnel és Dirk Frettlöh-vel dolgoztunk síkbeli hatszögfelbontások vizsgálatán. Megmutattuk, hogy ezekben legfeljebb véges sok olyan cellacsúcs van, mely egy másik cella egy élének belső pontja, és tetszőleges k pozitív egészre konstruáltunk olyan felbontást, melyben a fenti csúcsok száma k . Az eredményeinket alkalmaztuk arra is, hogy meghatározzuk a sík legalább hatszögekre vett felbontásaiban a hatnál több csúcsú cellák maximális számát. Az eredményeinket tartalmazó kézirat jelenleg bírálat alatt van.

A pályázatomban részben az elért kutatási eredmények disszeminációja is. Az előadásban ezen tevékenységemet is ismertetni fogom.

Luspay Tamás

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék*

Dinamikus rendszerek robusztus dekompozíciója

A kutatás célkitűzése dinamikus rendszerek robusztus szétcsatolása. Ennek során különböző bizonytalansági struktúrák kerültek megvizsgálásra. Első lépésként a politopikus bizonytalansággal leírt rendszerekre dolgoztam ki eljárást. Az előző években kidolgozásra került szétcsatolási algoritmus továbbfejlesztése történt meg a politopikus rendszerosztályra. Az eljárás szisztematikus módszertant biztosít arra, hogy az adott bizonytalansági struktúrát figyelembe véve a rendszer szétcsatolása megtörténjen. Ehhez olyan fűzős vektorokat definiálhatunk, melyek a rendszer be- és a kimeneti jeleit úgy kombinálják, hogy az irányítandó alrendszerrel a lehető legtöbb információt kapjuk, illetve az elérhető maximális beavatkozást érjük el, miközben a lecsatolandó alrendszer gerjesztése minimális legyen. Az eljárás konvex optimalizáláson és egy nem-konvex rangfeltételen alapul, mely megoldását egymást követő projekciók segítségével kaphatjuk meg. Numerikus példák segítségével megmutatható, hogy bizonytalan rendszer esetében a hagyományos (nominális rendszeren alapuló) szétcsatolás nem elegendő, azonban a kidolgozásra került robusztus algoritmus biztosítja a kívánt szétcsatolást. Második lépésként struktúrátlan bizonytalansági struktúrával foglalkoztam. Ebben az esetben a bizonytalan rendszer, a klasszikus $M-\Delta$ struktúrával adott. Megvizsgáltam, hogy a bizonytalansági blokkra vonatkozó normakorlátok mellett, hogyan változik a bizonytalan rendszer minimális érzékenysége. A levezetés alapján eljárást dolgoztam ki, amelyik az $M-\Delta$ struktúra esetében robusztus szétcsatolást biztosít. Idő- és frekvenciatartománybeli eredmények szemléltetik a kidolgozott módszer működését és hatékonyságát. Végül kvadratikus integrál korlátozásokkal leírt bizonytalansági struktúrákat vizsgáltam meg és felvázoltam az ilyen típusú komplex leírások figyelembevételének módját szétcsatolhatósági szempontból.

Mireiszné Dr. Kiss Nóra Zsuzsa

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Innovatív módszerek alkalmazása a foszfor- és heteroatomos kémián belül

Kutatómunkám elsősorban foszfortartalmú savak és savszármazékok előállítására irányul, új, innovatív, a zöldkémia szempontjait szem előtt tartó szintézismódszerek, úgymint mikrohullámú (MW) technika, fázistranszfer katalízis (PTC), alternatív oldószeres (ionos oldószeres, víz mint oldószer) alkalmazása, valamint folyamatos technikák, áramlásos kémiai rendszerek kidolgozásával. Az ionos folyadékokat nem feltétlenül oldószerként, hanem reakciót gyorsító adalékként / katalizátorként kívánjuk alkalmazni, hiszen eddigi tapasztalataink alapján a mikrohullámmal szinergikus hatást eredményeznek. Ez mind szakaszos, mind áramlásos rendszerben jól kihasználható.

Munkám során célul tűztem ki foszfor- és heteroatomos savszármazékok előállítását korszerű, környezetbarát szintézisutak kidolgozásával.

A kutatómunka során vizsgáltuk foszfinátok előállítási lehetőségét áramlásos MW reaktorban. Különböző ionos oldószereseket, mint a reakciót segítő adalékokat alkalmaztunk a jobb hozam érdekében. Ezután a kapott foszfinátokat alkoholízisnek vetettük alá először szakaszos, majd folyamatos rendszerben [1]. A direkt észterezés és alkoholízis reakciókon túl hidrolízisek monitorálásával is foglalkoztunk. Foszfortartalmú savakat nem csak hidrolízissel sikerült előállítanunk, hanem egy, a zöldkémia elvei szerint igen kedvező átrendeződési reakcióban is, amikor az atomhatékonyság 100%-os [2].

A kutatómunkába 3 BSc, 2 Msc és 2 PhD hallgató kapcsolódott be. Az eredményeket és a kutatáshoz kapcsolódó ismeretanyagot szemináriumok, oktatási kurzusok és konzultációk keretein belül ismerttettem hallgatókkal.

A kutatási eredményekből nemzetközi folyóiratcikkek is születtek.

Referenciák:

[1] Kiss, N. Z.; Henyecz, R.; Keglevich, G. *Molecules*, **2020**, *25*, 719.

[2] Rádai, Z.; Szabó, R.; Szigetvári, Á.; Kiss, N. Z.; Mucsi, Z.; Keglevich, G. *Curr. Org. Chem.* **2020**, *24*, 465.

Németh Balázs

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék*

Intelligens járműirányítás és közlekedésirányítás gépi tanulásra épülő robusztussági kérdései

Az előadás célja egy minőségi jellemzőire (performancia) nézve garantált, tanulás alapú ágensre épülő, energiagazdaságos jármű sebességszabályozási stratégia bemutatása. A tanulási ágens célja a jármű számára egy olyan optimális sebességprofil létrehozása, ami figyelembe veszi a jármű jövőbeli útvonalán lévő sebességkorlátozásokat és domborzati viszonyokat.

A tanulási ágens alkalmazásának motivációja abban rejlik, hogy a több külső információforrásra építő, komplex számítási műveleteket tartalmazó sebességprofil tervezési eljárás számításigénye nagy lehet, ami megnehezíti a módszer implementációját és online alkalmazását. Mintákra épülő, előzetes gépi tanulási folyamat eredményeképpen létrehozott ágens (pl. neurális háló) alkalmazásával azonban az energiagazdaságos sebességprofil képzésének online számításigénye csökkenthető. A megoldás hátránya, hogy a létrehozott neurális háló nem feltétlenül biztosít garanciákat az sebességképzés performanciáira nézve.

Az energiagazdaságos haladás mellett a járműirányítással szembeni egyik biztonsági szempontból fontos performancia követelmény a járműsebesség sebességkorlátozásokhoz képesti eltérésének előre definiált értékek között tartása. Az előadás egy olyan tervezési struktúrát mutat be robusztus irányítási módszerek segítségével, amivel a sebességprofilra nézve definiált performancia garantálható. A struktúra magában foglalja a gépi tanulási ágens által szolgáltatott sebességjel analízisét, valamint a robusztus sebességtartó irányítás tervezését. A módszer hatékonysága járműdinamikai szimulációkon keresztül kerül bemutatásra.

Németh Kornél

Természettudományi Kar
Kognitív Tudományi Tanszék

A veleszületett arcfelismerési zavar lehetséges alcsoportjai a neuropszichológiai és elektrofiziológiai vizsgálati eredmények tükrében

Az arcfelismerés gyors, automatikus, erőfeszítés nélkül működő összetett idegrendszer folyamat, de 100-ból 2-3 ember születésétől fogva képtelen felismerni akár önmagát is. Ezt hívjuk arcvakságnak.

Az arcfeldolgozás nagy egyéni eltéréseket mutat. A spektrum alján lévők folyamatos frusztrációval élnek, mely pszichoszociális stressz-forrás.

Vizsgálataink során felmértük az arcfelismerést, ill. kül. pszichológiai dimenziókat (depresszió, szociális szorongás, megküzdés, ill. kötődési stílus). Az arcvakok kisebb mértékű a társas szorongás, míg megküzdési stratégiáikban gyakrabban az elkerülést. Az elkerülő kötődésűek sajátos szemmozgás-mintázattal rendelkeznek.

Nagy elemszámú fejlődési diszlexiás csoportban teszteltük az arcfeldolgozást. A diszlexiások közel fele arcvak szintű károsodást mutat. Ezek alapján készítettünk egy, a vizuális kategorizációs folyamatok működését tesztelő kiváltott válasz EEG kísérletet.

Pályázati vállalások:

1. *legalább két ismeretterjesztő cikk vagy interjú folyóiratban (tudományos vagy egyéb folyóiratban, például egyetemi lapban)*

 - Brad Pitt és Bárdos András ugyanattól szenved (Klubrádió: Fülbevaló, 2019.07.30.)
 - Arcvakság, avagy egyesek a saját anyjukat sem ismerik fel (Éva Magazin, 2019.11.19.)
 - Az arcvakságról (Petőfi TV, 2019.11.26.) – 38p 42mp-től.
2. *Kutatók Éjszakáján önálló program megszervezése a témából (09.28)*

 - EEG a gyakorlatban - laborbemutató
 - Arcászat - ea.
3. *a fogadó felsőoktatási intézményen kívüli (hazai/nemzetközi) konferencián, egyéb szakmai rendezvényen a kutatás vagy (rész) eredményei ismertetése*

 - Bencze, D., Szöllősi, Á., Németh, K., Racsmány, M. Testing in the form of forced-choice recognition decreases false memory on morphed faces – 60th Annual Meeting of the Psychonomic Society, Montreal, Quebec, Canada (2019.11.07.)
 - Suri, K.M., Németh, K. A kötődési stílusok és az érzelmi arc-émlékezet kapcsolatának vizsgálata neurotipikus felnőtt mintán - MPT XXIII. Jubileumi Vándorgyűlés – Budapest, Hungary (2020.01.22-25.)
 - Suri, K.M., Németh, K. Investigating the relationship between attachment styles, emotion recognition and face-memory in a neurotypical adult sample – Ducog2020 – Dubrovnik, Horvátország (2020.05.28-31. törölve)
 - Németh K., Szöllősi Á., Lukács Á. Arcfelismerés fejlődési diszlexiában – Magyar Pszichológiai Társaság XXIX. Országos Tudományos Nagygyűlés – Budapest, Magyarország (2020.05.28-30. tervek szerint 2020 október 1-3-ra halasztva)
 - Varga, Zs., Németh K. Can eye-movement training improve face recognition performance in developmental prosopagnosia? – ECVF ZG2020 (43rd European Conference of Visual Perception) – Zágráb, Horvátország (2020.08.23-27. törölve)
4. *Legalább 2 aktív hallgatói jogviszonnyal rendelkező hallgató témavezetése.*

 - Suri Karolin Mária (Számítógépes és kognitív idegtudomány II.)
 - Varga Zsófia (Pszichológia II.)
 - Csernátorny Lilla (Számítógépes és kognitív idegtudomány II.)
 - Szekeres Rebeka (Számítógépes és kognitív idegtudomány I.)

Oláh Judit

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Alkalmazott Biotechnológia és Élelmiszertudományi Tanszék*

Fehérje kölcsönhatások szerepe a mikrotubuláris hálózat fiziológiás és patológias funkcióinak szabályozásában

A dinamikus mikrotubuláris hálózat az eukarióta sejtek sejtvázáinak egyik fő alkotóeleme, mely számos alapvető fiziológiás és patológias folyamatban játszik szerepet. A mikrotubuláris hálózat stabilitását és dinamikáját egyrészt poszt-transzlációs módosítások (pl. acetiláció), másrészt különböző fehérjékkel való kölcsönhatások szabályozzák. Ilyen mikrotubulus asszociált fehérje a kutatócsoportunkban (MTA TTK Enzimológiai Intézet Sejtarchitektúra csoport) azonosított Tubulin Polimerizációt Promótáló Protein (TPPP/p25), egy agyspecifikus, rendezetlen fehérje, mely a mikrotubuláris hálózat stabilitását és dinamikáját szabályozza. Hatását elsődlegesen a mikrotubulusokat kötegelő és acetilációjukat elősegítő aktivitásai révén fejt ki. A fehérje gátolja a tubulin dezacetilázok aktivitását (HDAC6, SIRT2), ami a mikrotubuláris hálózat hiperacetilációját eredményezi, mely alapvető fontosságú például a differenciáció illetve a kontrollált sejtosztódás biztosításához. A tubulin dezacetilázok ezért fontos gyógyszer-célpontok, a dezacetil gátlók potenciális anti-cancer ágensek.

A TPPP/p25 az idegrendszeri megbetegedések szempontból is kiemelkedő potenciával bír, mivel asszociációja az alfa-szinukleinnel meghatározó szerepet játszik a Parkinson-kórra és a multiszipstémás atrófiára jellemző neuronális és gliális zárványtestek kialakulásában. A két fehérje, melyek normál agyszövetben a neuronokban (alfa-szinuklein) illetve az oligodendrocitákban (TPPP/p25) fordul elő, együtt halmozódik fel és ko-lokalizál mindkét sejt típusban. Ezen felismerések vezettek egy új innovatív stratégia kidolgozásához, specifikus gyógyszer-célpont azonosításához, mely a patológias TPPP/p25-alfa-szinuklein komplex kialakulásának gátlásán/megszüntetésén alapszik.

A pályázat célja a neurodegeneratív betegségekben és a rákkutatásban kulcsfontosságú fehérjék (SIRT2, alfa-szinuklein, TPPP/p25) esetén alkalmazott biofizikai, biokémiai módszerek ismertetése és a terület elméleti hátterének bemutatása. A társadalom előregedésével a különböző neurodegenerációs betegségek egyre gyakoribbá válnak, az Alzheimer-kór után a Parkinson-kór a második leggyakoribb ilyen kórkép. A Parkinson-kór patomechanizmusa intenzíven kutatott terület, jelenleg csupán tüneti kezelés létezik, de a neurodegenerációs folyamatot hatékonyan befolyásoló terápia még nem ismert. Ezért a javasolt projekt (disszemináció) mind alap- mind alkalmazott kutatás szempontjából jelentős, lehetőséget biztosít új molekuláris és sejtszintű módszerek ismertetésére, betekintést nyújtva az alap kutatás alapvető fontosságára/szerepére a gyógyszerkutatásban.

Pajkossy Péter

*Természettudományi Kar
Kognitív Tudományi Tanszék*

Szemmozgás-követő berendezés alkalmazási lehetőségei az agyműködés és a kognitív folyamatok közti kapcsolat feltárásában

A bonyolult, sok kimenettel rendelkező mindennapi problémáink megoldása során számos tényező befolyásolja a döntést. Ilyen döntéshozatali változó lehet az egyes kimeneteknél elvárt pozitív vagy negatív következmények, jutalmak és büntetések nagysága illetve bekövetkeztük valószínűsége. A döntéshozatallal kapcsolatos idegtudományi kutatások alapján feltételezhető, hogy az idegrendszer valamilyen formában kódolja és számon tartja ezeket a döntéshozatali változókat. A Bolyai János Kutatási Ösztöndíj keretében végzett kutatásaimban azt vizsgálom, hogy a döntéshozatali változók idegrendszeri kódolása a pupilla méretében bekövetkező szisztematikus változásokban tetten érhető-e.

A pupilla mérete nem csak a szemet érő fény hatására változik, hanem bizonyos gondolkodási folyamatok által kiváltott idegrendszeri aktivitás is tükröződhet benne. A korábbi kutatásaimban már kimutattam, hogy a pupilla mérete megnő, ha egy inger jutalmazó jellege hirtelen megváltozik. A jelen előadásban azon új kísérleti adataimat szeretném bemutatni, melyek arra utalnak, hogy a korábbi eredményeim magyarázata az, hogy a pupilla mérete fordítottan arányos egy adott helyzetben a döntési opciók és a hozzájuk rendelt jutalmak közti kapcsolat valószínűségétől. Másképpen fogalmazva a pupilla mérete egy döntési helyzet bizonytalanságával arányosan nő. Mivel a pupilla méretének mérése relatíve költséghatékony módszer az agyi folyamatok nyomon követésére és vizsgálatára, az eredményeim hozzájárulhatnak a döntéshozatali folyamatok háttérében álló idegrendszeri folyamatok feltárásához.

Péni Tamás Gábor

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék*

Nemlineáris prediktív irányítások hatékony realizációja gépi tanulással

A kutatás célja korszerű, gépi tanulásra épülő prediktív irányítási módszerek kidolgozása. A pályázatban tett vállalásoknak megfelelően a kutatás két fő részből tevődik össze. Az első 5 hónapra vállalt feladatok megoldásaként módszert dolgozunk ki komplex városi, tömegközlekedési hálózat ágens szintű modellezésére és modell prediktív (MPC) irányítására, valamint annak korszerű számítási módszerekre (irányított, véletlen szimulációk, scenario methods) épülő stabilitás, robusztusság és performancia vizsgálatára. A kutatás második része, összhangban a második 5 hónap vállalásaival, gépi tanulásal létrehozott explicit MPC struktúra kialakítására irányul. Az eljárást elsőként többágensű, robotnavigációs feladatok megoldására alkalmazzuk. Mind a közlekedési, mind a robotirányítási feladat logikai feltételeket tartalmazó irányítási problémára vezet: az első esetben a modell tartalmaz ilyen korlátozásokat (a járművek viselkedését leíró végesállapotú automata), a másodikban a navigációs feladat (ütközésmentes mozgás akadályok között) matematikai megfogalmazása. Ennek megfelelően mindkét esetben a beavatkozási tervezését kevert egészértékű (mixed integer) optimalizálási feladatra vezetjük vissza. Annak érdekében, hogy az MPC jellegéből adódó online optimalizálást elkerüljük a második esetben az irányítást tanuló struktúrával (Gauss folyamat) approximáljuk, azaz egy közelítő explicit irányítást hozunk létre. A módszerek hatékonyságát szimulációs példákon vizsgáljuk. A kidolgozott módszerek számos továbbfejlesztési lehetőséget kínálnak, amelyek a hosszútávú kutatás lehetséges irányait is kijelölik.

Pozsgai Balázs Sándor

*Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék*

Integrálható modellek nemegyensúlyi dinamikája

Kutatási területem az ún. integrálható kvantummechanikai modellek dinamikája. Ezek olyan egy térbeli dimenzióban értelmezett sokrészecskés rendszerek, melyeknek egzakt megoldása lehetséges, ellenben a legtöbb fizikai elmélettel, melyeket csak közelítésekkel vagy számítógépes szimulációkkal tudunk megoldani. A konkrét kutatási kérdések ezeknek a modelleknek a transzportfolyamataira vonatkoznak: A cél annak meghatározása, hogy az egyes fizikai mennyiségek hogyan terjednek, áramolnak a kérdéses rendszerekben.

Egy bizonyos hidrodinamikai limeszben lehetséges a transzport folyamatok egzakt leírása, figyelembe véve a modellek összes megmaradó mennyiségét: ez az ún. Általánosított Hidrodinamika. Ennek az elméletnek az egyik fundamentuma az áramoperátorok várható értékeinek egzakt meghatározása. Két diplomamunkás hallgatóval (Pristyák Levente és Borsi Márton) még az ÚNKP pályázati időszak előtt bizonyítottuk ezt a központi állítást, mely korábban csak sejtés volt. Jelenleg az ÚNKP pályázati időszakban megadtam ennek az állításnak egy újabb, egyszerűsített bizonyítását, és rámutattam, hogy ez hogyan kapcsolódik az ún. hosszútávú deformációk elméletéhez. Ezzel a kutatómunkánk kapcsolatot teremtett a kvantumtérelméletekkel és az AdS/CFT megfeleltetéssel is, ugyanis egy későbbi cikkben Yunfeng Jiang-gal és Takács Gáborral rámutattunk, hogy a kérdéses áramoperátorok fontos szerepet töltenek be a kvantumtérelméletek ún. $T\bar{T}$ deformációinál is, mely egy aktívan kutatott terület.

Előadásomban ezeket az elért és publikált eredményeket mutatom be, illetve érinteni fogom a folyamatban lévő kutatásainkat is, melyeket Pristyák Levente PhD hallgatóval és Borsi Márton MSc diplomamunkással végzünk.

Ráth Balázs*Természettudományi Kar
Sztochasztika Tanszék*

Önszerveződő kritikus véletlen gráfok és korrelált perkolációs modellek

Jan Swart-tal (UTIA, Prága) és Terpai Tamással (ELTE) közösen a végtelen bináris fán értelmezett fagyott perkolációs modelltől bizonyítottuk be, hogy nem endogén. A modellt [Aldous, M.P.C.P.S., 2000] definiálta, és már az eredeti cikk 5.7-es fejezetében is felvetette az endogenitás kérdését. Később [Aldous, Bandyopadhyay, A.A.P., 2005] cikkében formalizálta az endogenitás elméletét, de az eredeti kérdés nyitott maradt. Cikkünkben az eredeti modell egy olyan variánsát definiáljuk, amely egyrészt rendelkezik egy olyan ön hasonlósági szimmetriával, amely megkönnyítette az endogenitás hiányának bizonyítását, másrészt bizonyítjuk, hogy a két modell endogenitása egymással ekvivalens. Cikkünk e sorok írásakor bírálás alatt volt. Szőke Mártonnal (BME matematikus MSc hallgató) közösen az ön hasonlósági fagyott perkolációs modell egy olyan módosítását vizsgáljuk, amelyben a leégési időpontok geometriai sorozatot alkotnak. Azon sejtésünk bizonyításán dolgozunk, ami szerint a geometriai sorozat kvóciensétől függően a modell endogén vagy nem-endogén is lehet.

Daniel Valesin-nel (Uni. Groningen) közösen a d dimenziós, R interakciós sugarú contact process (amelyet [Bramson, Durrett, Swindle, A.o.P., 1989] vizsgált) stacionárius eloszlásának perkolációs tulajdonságait vizsgáljuk. [Liggett, Steif, AIHP, 2006] 8. fejezetének 2. kérdésében veti fel a perkolációs fázisátmenet nem-trivialitásának kérdését az $R=1$ esetben. Az eredeti kérdést ugyan nem tudtuk megválaszolni, de nagy R esetén nemcsak azt láttuk be, hogy a perkolációs fázisátmenet nemtriviális, hanem a perkolációs küszöbérték határértékét is meghatározzuk, amint R végtelenhez tart. Cikkünk e sorok írásakor bírálás alatt volt.

Rucz Péter

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Hálózati Rendszerek és Szolgáltatások Tanszék*

Ajaksípos hangszerek fizikai modellezése hibrid technikákkal

Az aeroakusztikai tudományterület tárgya az áramló levegő által keltett hang modellezése, numerikus szimulációja. A terület aktívan kutatott témája az erősen csatolt problémák vizsgálata. Ilyen problémával állunk szemben, amikor az áramló levegőre számottevő visszacsatolással hat az akusztikai környezet. Példaként említhető a fúvós hangszerek hangkeltése, az ún. üreghangok jelensége, vagy a hűtő-, fűtő-rendszerek csővezetékeiben zajproblémákat okozó akusztikai visszacsatolás. Az ajaksípos hangszerek esetében a hangkeltés az oszcilláló légnyelv és a hangszertestbe zárt légoszlopban terjedő nyomáshullámok kölcsönhatásának eredményeként valósul meg. Pontosan ezek a kölcsönhatások és az ezek által létrejövő nemlineáris, csatolt rendszer kezelése jelenti a modellalkotás fő kihívásait. A hibrid modellezési technikák olyan új szimulációs eljárásokat jelentenek, melyek egyszerűsített, kis számításigényű analitikus modelleket kapcsolnak össze bonyolultabb, numerikus számítások eredményeivel. Az analitikus és numerikus modellek összekapcsolásával és a kétfajta módszertan előnyeinek kihasználásával a hibrid eljárások lehetőséget adnak olyan rendszerek vizsgálatára, melyek önmagában sem az analitikus, sem a numerikus technikákkal nem kezelhetők.

Jelen kutatás célkitűzése olyan hibrid áramlásakusztikai módszerek megalkotása és vizsgálata, melyek sikeresen alkalmazhatóak mind az ipari zajcsökkentés, mind a zenei akusztika területére jellemző erősen csatolt problémák elemzésére, megoldására. A beszámolómban ezért két különböző esetet mutatok be részletesen: egy áramlás által gerjesztett Helmholtz-rezonátor, illetve egy ajaksípos hangszer (furulya) vizsgálatát. Az akusztikai rezonátort előbbi esetben az üreg felett kialakuló nyíróréteg, míg utóbbi esetben a csatornából kilépő légnyelv gerjeszti. Mindkét rendszer esetén rámutatok az erős csatolás következményeként megjelenő önfenntartó oszcillációk kialakulásának feltételeire és az egyes paraméterek változtatásának hatására. Emellett 2D és 3D numerikus szimulációk segítségével mutatom be a végbemenő fizikai folyamatok részleteit. Végül az elméleti analízisből és számítógépes modellezésből adódó eredményeket mérési adatokkal hasonlítom össze, alátámasztva az általam javasolt módszerek helyességét.

Szalay Szilárd

*Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék*

Kvantumkorrelációk sokrész rendszerekben

A korreláció és az összefonódás központi fontosságúak a kvantumvalószínűség elméletben és az erősen korrelált kvantum soktest rendszerek fizikájában (a szilárdtest fizikában, kvantumkémiaiban). Az MTA Bolyai János Kutatási Ösztöndíj keretében végzett kutatási programom tudományos célja a sokrész kvantumkorrelációk és sokrész összefonódás elméletének kiteljesítése és alkalmazása. Az UNKP Bolyai+ Felsőoktatási Fiatal Oktatói, Kutatói Ösztöndíj keretében az ezzel kapcsolatos eredmények disszeminációját végzem, melynek kötelező vállalásairól és azok teljesítéseiről fogok beszélni. Az előadásomban ezen kívül bemutatom a kutatási program legfrissebb eredményeit a permutáció-szimmetrikus korrelációs és összefonódási tulajdonságokról és ezek mértékeiről. Ezek struktúráját Young-diagramokkal, és az ezeken megadott „finomítás” rendezéssel tudjuk leírni, melynek segítségével a sokrész összefonódás háromszintű rendezélméleti leírása egy-az-egyben alkalmazható a permutáció-szimmetrikus esetre. Ez az általános ránézés felfed néhány érdekes jelenséget, mint például a k -partícionálhatóság és a k -produkálhatóság dualitását, vagy egy új sokrész korrelációs tulajdonságot, a k -nyújthatóságot.

Takarics Béla

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedés- és Járműirányítási Tanszék*

Flexibilis légi járművek parametrikus kormányfelület- és Lineáris Változóparaméterű (LPV) modellezése és irányítása

A repülőgépek következő generációinak tervezésénél kiemelten fontos a repülőgép szerkezetének a súlycsökkentése, illetve a szárnyaknál a minél nagyobb fesztáv elérése. Ezzel hatékonyabb üzemanyagfogyasztás és alacsonyabb környezetszennyezés érhető el. Az ilyen repülőgépeknél viszont egyre dominánsabbá válik a repülőgéptörzs és a szárnyak flexibilitása, és az aeroelasztikus hatások, mint a flatter nevű dinamikai instabilitás, erősödése. A fokozott aeroelasztikus hatások aktív szabályozó technológiákkal küszöbölhetőek ki. A flatter elnyomó szabályozó hatásossága nagyban függ a repülőgép kormányfelületeinek nagyságától. A kormányfelületek nagysága hagyományosan iterációs eljárásban kerül meghatározásra. A felület nagyságát mérnöki megfontolások alapján szabják meg, majd a szabályozók csak ezután lesznek megtervezve. A flexibilis légijárművek esetében azonban a flexibilis- és merev-test dinamika csatolásából adódóan a kormányfelület méretezése is nehezebbé, a hagyományos iteratív méretezés hosszadalmassá válik. Egy lehetséges megoldás a parametrikus kormányfelület tervezés, amely már a tervezés folyamán figyelembe veszi a szabályozó hatásait. Ehhez egy parametrikus modellhalmaz szükséges, amely még a repülőgéptervezés korai szakaszában rendelkezésre áll. A parametrikus modellek alapján a szabályozó tervezés és a kormányfelület méretezése megfogalmazható egy közös optimalizációs feladaton belül. A kutatás célkitűzése a mini Multi Utility Technology Testbed (MUTT) flexibilis repülőgép parametrikus kormányfelületű aeroelasztikus modelljének előállításának és kiértékelése. Az aeroelasztikus modell az aerodinamikai, strukturális dinamikai és a merev-test dinamika összekapcsolásával kapható meg. Ahhoz, hogy az aeroelasztikus modell könnyen alkalmazható legyen szabályozótervezésre, szabályozás orientált, alacsony dimenziós, grid alapú és politópikus lineáris változóparaméterű (LPV) kerülnek kidolgozásra a „bottom-up” modellezési technika alkalmazásával.

Tófalvy Tamás

*Gazdaság- és Társadalomtudományi Kar
Szociológia és Kommunikáció Tanszék*

A magyar digitális média társadalomtörténete

Kutatásom során a magyarországi tartalomszolgáltatás korai szakaszában lezajlott technológiai, média-piaci és kulturális változásokat elemzem interdiszciplináris megközelítésben. A hazai digitális tartalomszolgáltatás és média két évtizedének eseményeit egyelőre még nem dolgozta fel a hazai tudományosság; az internet, a média, illetve az újságírás felől közelítve egyaránt hiányzó fejezete ez a magyarországi közelmúlt történetének, melynek pótlása a szakmai, közpolitikai közeg, és az oktatás számára is termékeny lehet. Kutatásomban annak megértéséhez szeretnék közelebb jutni, hogyan működtek együtt, hogyan hatottak egymásra a technológiai, üzleti és tartalomelőállítói közegek a magyar online média elmúlt évtizedeiben. Milyen társadalmi-kulturális tényezők határozhatták meg a fejlesztések irányát, és ezek a fejlesztések hogyan hatottak az online nyilvánosságra? A kutatás központi kérdései a kialakuló digitális média létrehozásában, használatában, társadalmiasulásában közreműködő emberek hálózataival, és az azokban megszülető kulturális jelentésekkel foglalkoznak. Többek között a két vezető online lap, az Index és az Origo kapcsolatával az elmúlt két évtizedben, és e két platform felhasználói tartalmakhoz való viszonyával; a print lapok lemaradásával a tartalomszolgáltatás hazai piacán. Illetve azzal, hogy hogyan változott a szórakoztató- és bulvártartalmak viszonya, hogyan alakultak ki az új újságírói műfajok, mint például a blogok, a videó- és adatújságírás. Továbbá az online médiaipar kulturális gyökereivel, a programozói-újságírói kooperációkkal, vagy éppen a platformok térnyerésével – mely utóbbi kérdésnek a megválaszolása a jelen digitális ökoszisztémájának jobb megértéséhez is közelebb vihet.

Török Ádám

*Közlekedésmérnöki és Járműmérnöki Kar
Közlekedésüzemi és Közlekedésgazdasági Tanszék*

Közúti közlekedési makromodellek nemzetközi kiterjesztése

Napjainkban a közúti közlekedésből származó károsanyag-kibocsátás és környezetterhelés jelentős problémát ró az emberiségre. Az elszigetelt nemzeti megoldások helyett a nemzetközi legjobb megoldások megtalálása és implementálása a hatékony és követendő megoldás. Ehhez az eltérő technológiai megoldásokat értékelni kell a gazdasági- és társadalmi fejlettség tükrében. Számos technológiai megoldás született már a közúti közlekedés emissziójának a csökkentésére, eltérő eredményességgel. Kutatási programomban elemezni kívánom az egyes országok károsanyag-kibocsátását, közlekedési teljesítménye és személygépjármű flottája közötti összefüggéseket, különös tekintettel a gazdasági teljesítőképesség és a társadalmi fejlettség tükrében. Különösen érdekes lehet az egyes országok egymásra hatása. Az első 5 hónapban a modelladatok felkutatása, tisztítása és pótlása történt meg. A modelladatok verifikációja folyamatban van. A jelenleg gyűjtött adatok alapján úgy vélem a kutatás tovább folytatandó, különös tekintettel a technológiai megoldások gazdasági elemzésére. Ennek érdekében 2020 márciusában Lendület kutatócsoport alapítását pályáztam meg.

Vasáros Zsolt

*Építészmérnöki Kar
Ipari és Mezőgazdasági Épülettervezési Tanszék*

Krízisépítészet. Társadalom, közösség, egyén - szerepek és helyzetek

A kutatás alapvető célja a Bolyai Ösztöndíj keretében végzett kompetenciafejlesztés. Jelen BOLYAI+/ÚNKP ösztöndíj a felsőoktatás különböző platformjain történő disszeminációt támogat. Az egyetem falain túlra mutató kutatások kezdeményezőjeként és résztvevőjeként arra törekedtem és törekszem, hogy a BME-hez méltó és kellően bonyolult, gazdagon árnyalható feladatokkal foglalkozhassunk. Ezek a graduális oktatás keretein túlmutató TDK, doktori vagy más kutatássá válnak idővel. Észrevehető, hogy a kreatív feladatokban, terepkutatásokban, vagy a tanulmányutakon résztvevő hallgatókkal a konzultáció és a tervezési folyamat gondolatokban, felvetésekben is sokkal gazdagabbá válik, ez minden bizonnyal a tájékozottságnak, az előhívható referenciáknak is köszönhető.

A témakörben végzett előzetes kutatások és tájékozódások elsősorban terepkutatásokhoz és a terjedelmes szakirodalom feldolgozásához köthetők. A kutatás kifejezett célja, hogy világos tájékozódást és útmutatást adjon szakirodalmi ismereteken és konkrét esettanulmányokon keresztül a krízisépítészet tárgykörében. Az ember okozta és a természeti katasztrófák, valamint más krízishelyzetek folyamatos jelenléte miatt – lásd a világméretű koronavírus járványt – a téma társadalmi szempontból sajnálatosan mindig aktuális, azonban a téma iránti érzékenység és a kutatásban felvetett racionális döntésképeség fejlesztése, elsősorban építészeti szempontból különösen fontosnak tűnik. Természetszerűleg merülnek fel a szakmánkhoz kapcsolható határterületek kérdései és problémái, ezek komplex, átfogó ismerete nélkülözhetetlen az alapvető folyamatok megértéséhez. A 2019/2020-as tanévben egy újabb szempontot helyeztünk előtérbe, a „Társadalom, közösség, egyén – szerepek és helyzetek” fókusszal elemezzük a témát. Cél, hogy az építészeti tervezésben, napjaink építészeti szerepvállalásában gyakran hangoztatott társadalmi érzékenység különböző aspektusait is vizsgáljuk, itt határozott különbséget tegyünk – ahol indokolt – a szociális építészet, a katasztrófaépítészet, a krízisépítészet, valamint a kríziskörnyezetben tervezett – sokszor jószándékú, de naív – esztétizáló építészet között. Mindezt továbbra is csak nemzetközi kitekintésben érdemes vizsgálni, erre hallgatóink alkalmasak, egyre többen örömmel és jó hatékonysággal vesznek részt programjainkban, graduális és posztgraduális szinten egyaránt.

A tanévben a vállalások alapján folytatódtak a specifikus TDK dolgozatok konzultációi, tanulmányutakat tettünk Szíriába, Mexikóba és Egyiptomba, doktori ösztöndíjas hallgatóink is folytattak a témában tematikus kutatást. A tanévben az egyiptomi terepmunkánk két riportkötete is megjelent, további publikációk folyamatban vannak. A tavaszi félévi krízisépítészet kurzuson a járványhelyzet okán a tematikán változtatva speciális tervezési feladatot oldanak meg a kurzuson résztvevők.

Vizer Máté

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Számítástudományi és Információelméleti Tanszék*

Extremális kombinatorika és kombinatorikus keresés

A tanév első felében extremális kombinatorikai problémákkal foglalkoztam.

A kutatási tervnek megfelelően (Kut. terv, célkitűzés: 1a) először új típusú Turán-típusú kérdésekkel kapcsolatban értem el eredményeket. A kérdést élrendezett gráfok esetén vizsgáltuk, mely egy újfajta általánosítása a klasszikus elméletnek. Itt általános strukturális (Erdős-Stone-Simonovits-tétel analogonja, illetve ehhez kapcsolódó kromatikus szám), illetve konkrét (kis körök, utak)eredményeket értünk el. Az elért eredmények publikáció született, ami beküldésre került.

Szintén extremális kombinatorikához kapcsolódóan értem el általánosított Turán-típusú eredményeket (Kut. terv, célkitűzés: 1b). Páros körök maximális számát vizsgáltuk bizonyos más páros körök tiltása esetén. Aszimptotikus, illetve nagyságrendi becsléseink vannak, az ehhez kapcsolódó cikk elfogadásra került. A tanév második felében kombinatorikus kereséssel kapcsolatos problémákon dolgoztam.

Erre a területre igaz, hogy a kérdések fő motivációi gyakorlati jellegű kérdésekből származnak, a legelső témabeli kérdés például második világháborúbeli hatékony vérteszteléshez kapcsolódik és a mostani koronavírus kapcsán felmerül csoportos tesztelés ötlete is innen jön.

A témakörhöz kapcsolódva ún. Plurality kérdéseken dolgoztam, a kapcsolódó cikk, a tanév végéigbenyújtásra kerül.

Zimborás Zoltán

*Természettudományi Kar
Analízis Tanszék*

Kvantumszámítógép-szimulátorok tesztelése és fejlesztése

Az előadás során bemutatom a „Kvantumszámítógép-szimulátorok tesztelése és fejlesztése” című Bolyai+ pályázat során végzett kutatást és a kapcsolódó disszeminációs tevékenységet. A témaválasztás rendkívül időszerű, hiszen az utóbbi években az egyes cégek (pl. IBM, Rigetti) által nyilvánosan elérhetővé és online programozhatóvá tett kvantumszámítógépek még sokáig viszonylag zajosak maradnak, ezáltal használhatóságuk erősen korlátozott. Így annak érdekében, hogy a kvantum-algoritmusok tanulmányozása szélesebb körben is lehetséges legyen, számos kvantumszámítógép-szimulátort készítettek, különböző programozási nyelvekhez, melyek lehetővé teszik a kvantum-algoritmusok futtatását klasszikus számítógépeket. Két diákkal megismerkedtünk két magas szintű (qubit kapu-alapú) kvantumprogramozási nyelvvel: az IBM által kifejlesztett Qiskit, illetve a Rigetti által kifejlesztett Forest nyelvvel. Több (kvantum-algoritmusokat és új kvantuminformációs protokollokat implementáló) kódot is kifejlesztettünk ezeken a nyelveken, továbbá teszteltük az általuk meghívott QASM alacsony szintű kvantumszámítógép-szimulátort. Emellett a fotonikus kvantumszámítógépeket szimuláló kódokkal is megismerkedünk (Strawberry Fields), majd az ilyen architektúrákra használható saját kódot is írtunk. A kutatási eredményeink áttekintő ismertetése után bemutatjuk, hogy milyen disszeminációs tevékenységet végeztünk, milyen előadásokat tartottunk, milyen összefoglalókat készítettünk, illetve hogyan tervezzük integrálni a tananyagban a szerzett ismereteket.

“Tehetséggel fel!” Felsőoktatást Megkezdő Kutatói Ösztöndíj

Al-Hag Johanna Iman

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*

A lipotoxicitás jelensége

Jóllakott állapotban a zsírsavak komplex lipidekben fordulnak elő az élő szervezetben, lipoproteinekbe csomagolva. Éhezés, fizikai aktivitás során valamint elhízáskor azonban szabad zsírsavakként (FFA: Free Fatty Acid) jutnak el a sejtekhez. Elhízáskor a túlhízott zsírsejtek gyulladása miatt a zsírraktárak mobilizálódnak és az FFA-k a vérplazmába kerülnek. A tartósan magas FFA-szint bizonyítottan felelős a 2-es típusú diabétesz, az inzulinrezisztencia és a nem alkoholos zsírmáj kialakulásáért. Azonban a különböző zsírsavak élettani hatása is különböző. Napjaink kutatásainak egyik fő célja, hogy feltérképezzék a betegségek hátterében álló biokémiai folyamatokat, továbbá az, hogy gyors és hatékony mérési technikákat fejlesszenek ki a zsírsavak és ceramidok mérésére, melyek használhatók az orvosdiagnosztikában. Munkám során források alapján elemeztem a telített és a telítetlen zsírsavak (cisz, transz) valamint a lipidintermedierek közül a ceramidok és a digliceridek mennyiségi és minőségi analizisére alkalmas analitikai módszereket, metabolizmusukat és toxicitásukat.

A zsírsavak meghatározására széles körben használt eljárás a gázkromatográfia (GC). A GC illékony, termikusan stabil vegyületek elválasztására alkalmas. Az illékonyság biztosítása érdekében a FFA-kat mérés előtt metil-észterekké alakítják. GC-vel akár a cisz-transz izomerek is elválaszthatók. Leggyakrabban lángionizációs detektort (FID) használnak.

Ha a zsírsavak metabolizmusának monitorozása a cél, akkor izotóppal jelölt molekulákat tartalmazó oldattal kezelik a sejt kultúrát és figyelik azok megjelenését a különböző anyagcseretermékekben. Ekkor nem alkalmazható FID, helyette tömegspektrométer (MS) használandó detektorként.

A ceramidok, digliceridek elválasztása és detektálása HPLC-MS/MS-sel (nagyhatékonyságú folyadékkromatográfia-tandem tömegspektrometria) történik. A mérések során megfigyelhető, hogy az egyes zsírsavak milyen hatékonysággal épülnek be az intermedierekbe, melyek kedveznek leginkább az akkumulálódásuknak.

A szakirodalom feldolgozása során több hatékony, rövid retenciós idejű, kis mintaigényű és bizonyítottan reprodukálható mérési eljárást értelmeztem, melyek alapja a fent leírt módszerek valamelyike. A vizsgált sejtenyészetekben a metabolitok és a különböző markerek monitorozása közelebb visz bennünket a betegségek hátterében álló folyamatok (pl. β -sejtek vagy májsejtek apoptózisa, ER-stressz indukálódása) megértéséhez, leírásához.

Csépányi István

*Természettudományi Kar
Fizika Tanszék*

Komplex, modellalkotást igénylő fizikai problémák vizsgálata

Kutatásom során a kettős inga kaotikus mozgásával foglalkoztam. Készítettem egy C++ nyelven írt számítógépes szoftvert, amely képes egy, az ingáról készült videó elemzésére, ennek segítségével ábrázolni tudtam a két szabad paraméter (az ingák függőlegessel bezárt szöge) időbeli változását. A szoftver RGB-kód alapú keresést alkalmaz, ezért az eszköz különböző pontjaira egymástól és a videó háttérétől jól elkülönülő színű, kis jelzéseket kell elhelyezni. Ezen jelzések pozícióinak képkockáról képkockára történő változása alapján határozhatóak meg a kettős inga helyzetét jellemző szögek, és azok idő szerinti deriváltjai. Lehetőség van az adott RGB-kódú pontok csak egy, a felhasználó által megadott, kis területen való keresésére is, ami növeli a szoftver hatékonyságát és csökkenti a valószínűségét a nem kívánt pontok megtalálásának. Ezek segítségével lehetőség van a különböző kezdeti feltételekkel indított mozgások elemzésére, különös tekintettel a közel azonos kezdeti helyzetből indított lengések egymáshoz való viszonyának vizsgálatára. Ezek alapján igazolhatóvá válik a mozgás kaotikus mivolta.

Demény Petra

*Vegyészmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

Nemesfém kolloidok leválasztása mezopórusos, fotoaktív bevonatokban

A TiO_2 az egyik legígéretesebb félvezető fotokatalizátor, mivel viszonylag nagy a reaktivitása, jó a termokémiai stabilitása, nem mérgező és alacsony az előállítási költsége. Azonban komoly hátránya, hogy az anatóz TiO_2 széles tiltott sávval (3,2 eV) rendelkezik, így a napfény energiájának csak kis mennyiségét (közelítőleg 3-5% az UV-tartományban) képes elnyelni, ezért kis hatásfokkal tudja csak hasznosítani. A széles tiltott sáv miatt a TiO_2 csak UV-fény besugárzás hatására válik fotokatalitikusan aktívvá, ezáltal elektron-, „lyuk” párok képződnek a felületén, amelyek képesek felületi redox folyamatok katalizálására. Ennek gyakorlati szempontból az öntisztuló felületek létrehozásában is nagy jelentősége van, mivel a TiO_2 - bevonattal ellátott felületre jutó organikus szennyeződések fotokatalitikusan (napfény hatásra) eltávolíthatók. A látható fényben történő alkalmazások elősegítése céljából érdemes a félvezető tiltott sáv energiáját csökkenteni, azaz a fényelnyelési tartományt növelni.

A fényelnyelési tartomány kibővítésekor érdemes egyszerre fizikai és kémiai utakat is kombinálni. Megoldások lehetnek a nanoszerkezetű (pl. inverz opál), illetve dopolt/adalékolt katalizátorok kifejlesztése. Az említett eljárások során különböző anyagok hozzáadásával próbálják közvetlen vagy közvetett módon a tiltott sáv szélességét csökkenteni, és a nagymértékű elektron-, „lyuk” rekombinációt akadályozni, illetve többszörös fényszóródást létrehozni, ezáltal kiterjeszteni a fényelnyelési tartományt és növelni a fotokatalitikus aktivitás hatásfokát. Megfelelő anyag lehet a TiO_2 adalékolására a szintén félvezető, keskenyebb tiltott sávval rendelkező Cu_2O , illetve a nemesfémek közül az Ag vagy az Au, amelyek képesek fokozni a felületen keletkező elektronok és „lyukak” szeparációját.

Irodalmi kutatásom célja az, hogy olyan lehetséges, a gyakorlatban is megvalósítható katalizátorfejlesztésre tegyek javaslatot, amely alkalmas látható fényben is fotoaktív bevonatok előállítására.

Elek Péter

*Természettudományi Kar
Fizika Tanszék*

Bevezetés az elektrodinamikába

A kutatásom során a klasszikus elektrodinamika keretein belül két fő jelenséggörte vizsgáltam. Elsőként ponttöltés mozgását elemeztem időben szinuszosan változó elektromágneses mezőben. Erre egyszerű példa a homogén, de időfüggő mágneses mezőben mozgó ponttöltés mozgásának vizsgálata, mely alapján megbecsülhető, hogy milyen határok között tehetjük meg a sugárzási effektusok elhanyagolását. A mozgás általános vizsgálatához egy programot kezdtem fejleszteni, mely adott irányú és erősségű elektromos és mágneses mező esetén követni tudja numerikusan a töltés trajektóriáját. A programot egy nagyon hosszú, egyenes tekercs elektromágneses terében mozgó ponttöltésre alkalmaztam, ha a tekercsben időben szinuszosan változó áram folyik. A Maxwell-egyenleteket a mágneses és az indukált elektromos térre analitikusan megoldva kiderül, hogy belül a homogén mágneses mező és a nulla elektromos térerősség csak közelítőleg igaz, az egzakt megoldás végtelen sorok segítségével adható meg. A kutatás során vizsgált második jelenséggörte a vezetési jelenségek alkotják. Vezető felületeken folyó árameloszlás esetén az elektrosztatikában jellemző Dirichlet-peremfeltétel helyett a Neumann-peremfeltétel a jellemző, melynek numerikus kezelése az általam használt módszerek esetén nehezebb. Ezen iteratív algoritmusok helyett a síkproblémák esetén mindenképpen célszerűbb a konform leképezések módszere. Felhasználva a Christoffel-Schwarz-formulát egzakt megoldást adhatunk egy sík négyzetlapon, illetve téglalapon kialakuló áram- és potenciál-eloszlására.

Fitos Bence

*Természettudományi Kar
Fizika Tanszék*

Nyílt végű problémák megoldása az elektromosságtan területén

A kutatásomban analitikus és numerikus eszközökkel ismerkedtem meg, valamint alkalmaztam azokat elektrosztatikai és magnetosztatikai peremérték-feladatok megoldására.

Az egyik peremérték-feladat egy vékony falú, töltött vezető henger töltéseloszlásának és kapacitásának meghatározása volt. A probléma megoldásához több különböző modellt használtam. Ezek matematikai komplexitásban, használhatóságban, pontosságban és eredményességben is különböztek egymástól. Az első modellben a henger folytonos töltéseloszlását diszkrét ponttöltésekkel közelítettem: a töltések a henger palástja mentén szabadon mozoghatnak, miközben taszítják egymást. Az alkalmazott modellek közül ez volt a legegyszerűbb és egyben legpontatlanabb módszer. Az optimális töltéseloszlást genetikus algoritmussal is meghatároztam. Ebben a megközelítésben a hengert a tengelyére merőleges gyűrűkre bontottam, majd a töltéseket úgy osztottam szét a gyűrűk között, hogy a gyűrűk azonos potenciálra kerüljenek. Harmadik megközelítésben lineáris algebrai módszereket használtam. Felhasználva az elektromágnesesség egyenleteinek linearitását, a szeletek optimális töltéssűrűségét egy lineáris egyenletrendszer segítségével is megkaphatjuk. Az ismertetett eljárások közül ez bizonyult a legpontosabbnak. Ezzel az utolsó eljárással meghatároztam a henger kapacitását a geometriai paraméterek (sugár és hossz) függvényében. A másik peremérték-feladat egy áramjárta (vékony falú) szupravezető henger mágneses terének meghatározása volt. Ez a probléma matematikai megfogalmazását tekintve hasonlít az elektrosztatikai feladatra, így a megoldáshoz alkalmazhatjuk az ott megismert módszereket.

Horváth Réka Anna

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szervetlen és Analitikai Kémia Tanszék*

Citromsav vizsgálata magnetit felületén számítógépes szimulációs módszerekkel

A magnetit nanorészecskék napjainkban számos tudományterületen kutatások tárgyát képezik, nagy jelentőséggel bírnak például elektromos eszközök fejlesztésében, valamint atomerőművekben lejátszódó korróziós folyamatokban. Jelentős potenciál rejlik orvosi felhasználásukban, nem csak MRI kontrasztanyagként, hanem radioaktív terápiákban, hipertermiás kezelések során, illetve mágneses térrel vezérelhető gyógyszerhordozókként is. Ez utóbbiak a jövőben hatékony módszerek lehetnek majd a rákos megbetegedések gyógyításában.

Ahhoz azonban, hogy a nanorészecskéket az élő szervezetben alkalmazhassuk, több feltételnek is teljesülnie kell, nevezetesen, hogy az előállított részecskéknek biokompatibilisnek, biodegradábilisnek, külső mágneses térrel irányíthatónak kell lenniük, valamint nem aggregálódhatnak, mivel ez trombózis kialakulásához vezethet. Ilyen tekintetben kulcsfontosságú a megfelelő felületi borítottság létrehozása, amely meggátolja e folyamatot mágneses tér hatása mellett is.

A feltételeknek megfelelő felületi borítások kialakítása tehát nagy körültekintést igénylő feladat, amelyhez jelentős segítséget nyújthat, ha az előállításra irányuló kísérletek elvégzése előtt a rendszereket elméleti módszerekkel is vizsgálják, különös tekintettel felületi tulajdonságaikra, a borítottság stabilitására.

A szakirodalomban jelenleg több magnetit modell is rendelkezésre áll, amelyek jó egyezést mutatnak a kísérleti adatokkal a második, illetve további adszorpciós rétegek tulajdonságait illetően. Nem számolnak azonban a közegben a magnetit felületén kemiszorbeálódó vízmolekulákkal, és ezáltal éppen a stabilitás szempontjából igen jelentős első adszorpciós réteg tulajdonságait helytelenül reprezentálják.

Csoportunkban jelenleg egy, a kemiszorpciót is figyelembe vevő potenciálmodell fejlesztése zajlik, amelynek elkészülését követően kutatásom során számítógépes szimulációs módszerekkel fogom vizsgálni különböző szerves anyagok, köztük citromsav adszorpcióját, a kialakuló felületi rétegek stabilitását, mennyiségi és energetikai tulajdonságait, valamint molekuláris dinamikai sajátosságait.

Kis Dávid

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

Cinkona egységet tartalmazó organokatalizátorok szintézise és alkalmazása

A szakirodalom kutatási feladat során az volt a célom, hogy megismerkedjek a cinkona egységet tartalmazó katalizátorok minél több előállítás és felhasználási módjával. Vizsgáltam a poli(etilén-tereftalát) (PET) lebontásának egyik organokatalízis segítségével történő módszerét, melynek során a PET polimerláncokat depolimerizálják bisz-(hidroxietil-tereftaláttá) (BHET) glikolos közegben, a metánszulfonsav (MSA) és triazabiciklodekén (TBD) reakciójában keletkező katalizátorral.

Kutatásomban kiemelt szerepet kapott a grafén-oxidok organokatalizátorral történő módosítása és az így kapott katalizátorok alkalmazása. A grafén-oxidok funkciós csoportjaihoz hidrogénkötések révén szerves katalizátorokat kapcsolhatunk, illetve a grafén-oxid rácsába Fe_3O_4 nanorészecskéket építhetünk. Az így nyert heterogén katalizátor a szintézis elvégzése után könnyen, mágnes segítségével elválasztható a terméktől, és számos alkalommal újrahasznosítható.

Foglalkoztam továbbá a tiokarbamid egységet tartalmazó *Takemoto*-katalizátor új enantioszelektív szintézisének megvalósításával. A *Takemoto*-katalizátor alkalmazásával különböző hattagú karbociklikus purin nukleozid analogonok nyerhetők kiváló termeléssel, jó diasztereoselektivitással, és kiváló enantioszelektivitással.

Ezen kívül a témáim közt volt a metil-TEMPO egy elektronos elektrokémiai oxidációjával nyerhető hatékony in situ elektrofil metilező reagens. A vizsgálatok alapján a metilezési reakció $\text{S}_{\text{N}}2$ mechanizmus szerint játszódik le.

A továbbiakban foglalkozom még cinkona típusú katalizátorokkal izocianoacetátok, alkinil-keetonok és gyűrűs béta-ketoészterek reakcióiban, továbbá cinkona származékok segítségével megvalósuló aszimmetrikus *Barton—Zard*-reakciók katalízisével.

Kocsis Márton

*Építészmérnöki Kar
Szilárdságtani és Tartószerkezeti Tanszék*

Billegő oszlopok térbeli mozgásának vizsgálata

A földrengések kutatása és az épületek tartószerkezeteinek földrengésre történő méretezése a tudományos világban sokat vizsgált téma napjainkban. Mindez elsősorban a szeizmikusan aktív országokban van előtérben. Magyarországon sokáig nem is volt előírás a földrengési hatás figyelembe vétele a tartószerkezeti méretezésnél, emiatt régi falazott szerkezeteinket különösen veszélyezteti egy esetlegesen bekövetkező rengés. Földrengés során a történeti épületeket alkotó falazott ívek, oszlopok, falak mozgása nagyban különbözik a rugalmas-képlékeny anyagú szerkezetek viselkedésétől. A téglá és kő elemekből álló szerkezetek esetén a gerjesztés hatására a repedések megnyílnak és záródnak, ezt a mozgást az irodalomban „rocking” mozgásnak nevezik.

Az eddigi kutatások nagy része e jelenséget síkbeli viselkedésként vizsgálta, a rocking mozgást, és az ütközések által elemésztett energiát leíró modell George W. Housner-től származik (1963). Ezen modell egy lehetséges finomítását mutatta be Ther és Kollár (2017). Vizsgálataik szerint a kísérleteknél az általánosan tapasztalt jelenség, hogy a Housner féle modell túlbecsüli a billegő elem energia elemésztését, alapvetően a felületek egyenetlenségének és így közbenső ütközési pontok jelenlétének köszönhető. A tetyszögletes négyszög alapú hasáb térbeli billegését Zulli, Contento és Angelo (2011) írták le. Modelljükben alapvetően a Housner által meghatározott közelítéssel élve tanulmányozták a térbeli billegés jelenségét. Ezt a jelenséget vizsgálta hengerek esetében, valamint 4 hengerre, mint kör keresztmetszetű oszlopra állított merev lap billegésénél Michalis F. Vassiliou (2017). Ezen analitikus és numerikus modellek mellett izgalmas felvetést mutat be Quincy munkája (2018), melyben a komplex dinamikai problémát egy fizikai motorral (Physics Engine) működő 3D modellező programban vizsgálja, és jó egyezést kap a szimulált és az analitikus megoldás között.

Kutatásom során az egy szabadságfokú mozgást leíró főbb irodalmakat és a kisszámú, térbeli mozgással foglalkozó irodalmakat ismertem meg. Célkitűzésem, hogy a témával foglalkozó tudományos értekezések eredményeit összegezve, a térbeli mozgás jellemzőit kísérletsorozat segítségével szisztematikusan megvizsgáljam és feltárjam a térbeli és síkbeli billegő („rocking”) mozgás közötti lényegi különbségeket és hasonlóságokat. Ehhez a Szilárdságtani és Tartószerkezeti Tanszék laboratóriumában számos eltérő geometriájú gránit elem billegését rögzítettük X-IMU szenzorok segítségével, az eredmények kiértékelése folyamatban van. Távlabbi célom, hogy a kísérleti adatokból online adatbázist hozzunk létre, amely alapjául szolgálhat a további, térbeli mozgást leíró modellek verifikálásához.

Krisztián Gergő

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszék*

Robotautók tervezése

A kutatás célja egy, a RobonAUT versenyen használt versenyeken használt robotautó elkészítéséhez szükséges ismeretek megszerzése. Ahhoz, hogy egy ilyen robot működjön sok elem együttműködése szükséges. Ezek az összetevők röviden: a robotot vezérlő mikrokontroller, az ehhez csatlakozó perifériák, és az azt vezérlő szoftver. Az előbbiek működésének és együttműködésének megértéséhez először megismertem általánosságban a mikrokontrollerekkel, azok architektúrai döntéseivel, mint például, hogy RISC architektúra elvei alapján épülnek a mikrokontrollerek. Ezen túl megismertem azokat a szempontokat, amiket figyelni kell, hogy optimálisan tudjak választani mikrokontrollert. A megszerzett ismeretek elmélyítése érdekében egy 8051-es mikrokontrolleren (Silicon Labs EFM8 Busy Bee kit) feladatokat oldottam meg Assembly szinten. A mikrokontrollerek belső működésének megismerése után, megismertem a mikrokontroller belső perifériáit, például a Timer-eket, és a Watchdog-ot, ezen túl a külső perifériákkal való kommunikáció módjait, egységeit. Az előzőek tudatában megismertem a hardver tervezés alapelveit, ennek alap lépéseit, és ezen túl milyen lehetséges hardvertervezési feladatok léteznek.

Későbbi cél azt megismerni, hogy hogyan reprezentálhatom egy modellben egy robot fizikai valóságbeli elhelyezkedését, mozgását.

Mészáros Márton

*Természettudományi Kar
Sztochasztika Tanszék*

Markov-láncok keverési ideje

A pályázathoz kapcsolódó munkám során, melyet 2019 szeptemberében kezdtem témavezetőm, Dr. Vető Bálint segítségével, a sztochasztika egyik fontos területével, a Markov-láncokkal foglalkoztam, kiemelt figyelmet szentelve a keverési idő vizsgálatára.

A Markov-lánc egy sztochasztikus folyamat, melynek legfontosabb jellemzője az, hogy (adott jelenbeli állapot mellett) a rendszer jövőbeli állapota nem függ a múltbeli állapotoktól. Ha egy lánc irreducibilis és aperiodikus, akkor fontos jellemzője a stacionárius eloszlás, amit az átmenetmátrix 1-hez tartozó bal oldali sajátvektoraként definiálunk, és amelyhez tart a lánc valószínűségi eloszlása, ahogy a láncon végrehajtott lépések száma tart a végtelenhez. Ehhez az eloszláshoz határozhatjuk meg a keverési időt, amely azt mondja meg, hogy a lánc eloszlása hány lépés után kerül megadott (általában elég kis) távolságba a stacionáriustól (a távolságot egy eloszlásokra vonatkozó norma, a teljes variációs távolság adja meg).

Kutatásom során főként a *Markov Chains and Mixing Times* című, D. A. Levin, Y. Peres és E. L. Wilmer által jegyzett angol nyelvű könyvre támaszkodtam, ennek fejezeteit dolgoztam fel (és ezt folytatom a hátralévő 3 hónapban is). Ennek során megismertem néhány alapvető példát Markov-láncokra, ezek tulajdonságait, stacionárius eloszlását, és néhány hasznos módszert, amelyek alsó, illetve felső becslést adnak a keverési időre.

A program során céloom a téma megismerése és feltérképezése, bizonyos technikák elsajátítása, amivel a pályázat ütemezésének megfelelően haladok (eddig az előírt szakirodalomból 7 havit dolgoztam fel), reményeim szerint a jelenlegi különleges helyzet ellenére kielégítően el fogom tudni végezni a vállaltakat.

Mészáros Péter

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszék*

Automatikus aláíráshitelesítés korszerű alkalmazásai

Az aláíráshitelesítés az egyik legáltalánosabb, legősibb biometrikus azonosítási mód. Mai napig széleskörűen alkalmazott és jogilag elfogadott. Ezért vált a kutatók számára érdekes kutatási területté az, hogy hogyan lehet az aláíráshitelesítési folyamatot automatizálni. A problémára sajnos máig nem ismert tökéletesen megbízható módszer, mert a téma rengeteg kérdést és kihívást rejt magában.

A kutatás célja az automatikus aláíráshitelesítés lehetőségeinek és korlátainak feltérképezése, megismerése volt. A kutatásom végén áttekintem és összefoglalom az alkalmazási területeit és a benne rejlő lehetőségeket.

A kutatási terület megismerését releváns szakirodalom feldolgozásával tettem. Témavezetőm segítségével olyan szakirodalmakat választottunk, amelyek segítettek feltérképezni a területet. Munkám során az aláíráshitelesítés két fő részterületével, az offline és az online aláíráshitelesítéssel is megismerkedtem. Mindkettőt külön-külön áttekintettem, megismertem a bennük felmerülő problémákat és ezekre adott megoldási módszereket, kísérleteket. Ezentúl megismerkedtem egy izgalmas alkalmazással, az online-offline fúzióval, amely a két részterület elemeit vegyíti.

Az online eseteknél azt figyeltem meg, hogy a DTW (Dynamic Time Warping) algoritmusra különös hangsúly esik. Azt is észrevettem, hogy a DTW-n alapuló megközelítések a legjobb hibaszázalékokat nyújthatják. Munkám utolsó szakaszában ezért önállóan választott cikkekkel a DTW-ben mélyedtem el. Munkám során az online aláíráshitelesítés területe és a DTW ragadott meg leginkább. Úgy gondolom, hogy a későbbiekben ebben az irányban szeretném folytatni a kutatást.

Miski Gergő

*Építőmérnöki Kar
Általános- és Felsőgeodézia Tanszék*

Helyzetmeghatározást végző eszközök, programok, alkalmazások, mérések pontosabbá, hozzáférhetőbbé tétele, funkcióbővítések a célzott programokban, használatuk hatékonyabbá tétele

A kutatás során megismerhettem az életünket meghatározó, pontos és folyamatos információt biztosító műholdas helymeghatározó rendszerek működésének alapjait.

Ezek ismeretében célul tűztem ki a költséghatékony helymeghatározó eszközökkel (okostelefonok, egyfrekvenciás GNSS vevők) elérhető pontosság vizsgálatát, mivel jelenleg az okostelefonok döntően a viszonylag pontatlan kód-méréssel történő abszolút helymeghatározást használják. Ugyanakkor az újabb Android operációs rendszerek már a nagyobb pontosságot biztosító fázismérési eredményeket is elérhetővé teszik a felhasználók számára.

Kutatásaim során megismertem a különféle navigációs és geodéziai célú GPS helymeghatározási technikákat. Ezt követően okostelefonnal, egyfrekvenciás alacsony árú GNSS vevővel végeztem tesztméréseket, amelyeket különféle technikákkal (abszolút helymeghatározás kód-méréssel, fázisméréssel, differenciális helymeghatározás, relatív helymeghatározás fázisméréssel) értékeltem ki a nyílt forráskódú RTKLIB szoftver segítségével.

A különféle technikákkal meghatározott koordinátamegoldásokat az Egységes Országos Vízzintes Alaphálózat (EOVA) egyes geodéziai alappontjain ellenőriztem.

Kutatásaim jó alapot nyújtanak ahhoz, hogy a továbbiakban a műholdas helymeghatározó szenzorokkal kapott helymeghatározási eredményeket az okostelefonokban megtalálható további mozgás és helyzetérzékelő szenzorok (gyorsulásmérők, giroszkóp, magnetométer) segítségével tovább vizsgáljam és pontosítsam.

Az általam vizsgált helymeghatározási eljárások lehetővé teszik, hogy olcsó eszközökkel, nagy mennyiségű – akár tömeges – helymeghatározó adatot gyűjtsünk, ezáltal pontosabb információval rendelkezünk a telefonhasználók mozgásáról.

Orosz Dávid

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Méréstechnika és Információs Rendszerek Tanszék*

Adatforrások magánjelleget megőrző gépi tanulási módszerek a gyógyszerkutatásban

A mesterséges intelligencia közelmúltban bekövetkezett fejlődése, illetve a nyilvánosan elérhető adatok mennyiségének gyarapodása a gyógyszerkutatásban új módszerek megjelenését tette lehetővé, illetve szükségessé. A gépi tanulási módszerek különféle alkalmazásai ezen a területen igencsak ígéretesek, hiszen sok esetben költséghatékonyabb és kevésbé időigényes alternatívákat kínálnak a hagyományos módszerekkel szemben. Munkám során fő célom a gyógyszerkutatásban használt adatrepresentációk és gépi tanulási módszerek megismerése, illetve az utóbbiak összehasonlítása volt, különös tekintettel a hatóanyag-célpont interakciók predikciójára alkalmas módszerekre.

Ennek érdekében egy olyan átfogó kutatást vizsgáltam meg, amely a ChEMBL-t, egy nyilvánosan elérhető, bioaktív-kismolekula-adatbázist használva hasonlít össze különféle gépi tanulási módszereket. A ChEMBL különböző molekulák bioaktivitását, szerkezetük gráf reprezentációját, illetve egyéb fizikai/kémiai tulajdonságaikat tartalmazza. Az említett kutatás a ChEMBL-ből előállított, közel félmillió vegyületet tartalmazó adatbázist használta a modellek tanítására és tesztelésére.

A főbb vizsgált gépi tanulási módszerek a neurális hálók különböző típusai (előrecsatolt mély neurális, illetve visszacsatolt és konvolúciós neurális hálók), az SVM (Support Vector Machine, egy statisztika-alapú osztályozási módszer), a Random Forests („véletlen erdők”, sok döntési fa együttes alkalmazása), a K-nearest-neighbour (az adatpontok távolságán és a legközelebbi „K” adatpont típusán alapuló osztályozás), a Similarity Ensemble Approach (a célfehérjék hasonlóságát kihasználó módszer), illetve a Naive-Bayes (Bayes-tételén alapuló módszer) voltak.

A gyógyszerkutatásban használt gépi tanulási módszerek alapjainak megértésén túl foglalkoztam a gyógyszer-újrpozicionálás (drug repositioning/repurposing) módszerével is, mely már meglévő hatóanyagokat használ az eredeti céljuktól eltérően, más betegségek kezeléséhez. Ez a terület az elérhető információk bősége miatt szintén ígéretes a mesterséges intelligencia és big data módszerek számára. Ehhez a témához kapcsolódva vizsgáltam a COVID-19 esetén potenciálisan bevethető gyógyszerekkel kapcsolatos predikciókkal foglalkozó kemoinformatikai és mesterséges intelligencia kutatásokat is. A problémán alkalmaztam egy ligand-alapú virtuális szűrést megvalósító tanszéki eszközt, mely hasonlóság alapú sorrendező eljárással keres előre meghatározott tulajdonságú molekulákat.

Svastits Domonkos

*Természettudományi Kar
Fizika Tanszék*

Klasszikus mechanikai problémák vizsgálata

Két vagy több, közel megegyező frekvenciájú mechanikus metronómot egy vízszintes asztallapra helyezve, vagy más módon összecsatolva azt tapasztalhatjuk, hogy a metronómok járása egy idő után szinkronizálódik. A kutatásom során ezt a jelenséget vizsgáltam analitikus és numerikus módszerekkel. Elsődleges célom az volt, hogy egy elméleti modell segítségével megmagyarázzam a kísérletileg megfigyelhető szinkronizálódást. Egy metronóm csillapított, gerjesztett rezgőmozgása többféle dinamikai egyenlettel is jól közelíthető. A modell felállításának első lépéseként meghatároztam, hogy ezen mozgásegyenletek közül melyikkel lehet magyarázni a szinkronizálódás jelenségét. Az elméleti modell felállítása után azt vizsgáltam numerikusan, hogyan jósolható a metronóm viselkedése a dinamikai egyenletben megjelenő paraméterek különböző értékei esetén. Vizsgáltam, hogy mi befolyásolja, hogy a szinkronizálódás befejeződése után azonos vagy ellentétes fázisban mozognak-e a metronómok. Vizsgáltam továbbá, hogy hogyan tart a stationárius értékhez a metronómok közötti fáziskülönbség, és hogy annak időbeli változása hogyan függ a rendszert jellemző paramétereitől, illetve a kezdeti feltételektől.

Szakál Vince Abosa

*Villamosmérnöki és Informatikai Kar
Automatizálási és Alkalmazott Informatikai Tanszék*

AR és VR felhasználása iparban és oktatásban

A virtuális és kiterjesztett valóság egyedülálló lehetőségeinek mélyebb megértése, feltérképezése és kiaknázása jelenleg is folyik. E két módszer alapjaiban változtatja meg azt, ahogy a technológiával és a világgal érintkezünk. Új felhasználó felületeket és alkalmazástervezést igényel, mivel a kiterjesztett valóság virtuális tartalmakat helyez a valós világba, a virtuális valóság pedig egy headset segítségével egy teljesen virtuális világot mutat a szemnek. Mindez pedig megannyi hardveres, szoftveres, ergonómiai és marketing kihívást rejt. A nehézségek ellenére úgy gondolom, ezek az új lehetőségek megannyi területen egyedülálló értéket képviselhetnek, és a jövőnk fontos részei lesznek. A célom a két legnagyobb lehetőségeket rejtő felhasználási területen, az oktatásban és az ipari felhasználásban elért eredményeket megismerni. Ezek alapján szeretnék képet kapni az iparág mai állásáról, majd a jövőbeli kutatásaimhoz jó lehetőségekkel kecsegtető irányokat választani. A feldolgozott szakirodalom alapján az iparban a betanítás és a design területén mutatkozik nagy érdeklődés, az oktatásban pedig főleg drága vagy veszélyes eszközök pótlására, illetve a szemléltetés élményszerűvé tételére alkalmazzák ezeket a technológiákat. Ugyanakkor a sikeres felhasználási területeken is vannak problémák, melyek megoldása kihatással lehet a technológia gyorsabb terjedésére.

Titkó Simon

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

Nanoszerkezetű, vízlepergető bevonatok kialakítása szol-gél-eljáráson alapuló, porlasztásos technikával

A vízlepergető tulajdonságot biztosító szuperhidrofobitás egy kisenergiájú felület hierarchikus, mikro- és nanoléptékű érdességén alapul. Ezeken a felületeken a vízperemszög legalább 150° -os, a peremszög hiszterézise pedig elhanyagolható mértékű (*lotus effect*).

Szuperhidrofób bevonatok alkalmazhatók fémek korrózióvédelmében, öntisztító felületek kialakításában, emulziók megtörésében, a víz- és olajfázisok szétválasztásában.

Az ilyen bevonatok elsődleges szerkezeti anyaga a szilícium-dioxid, mely lehetővé teszi nanorészecskék, -csövek és -kapszulák kialakítását. Ezen felül használhatók fém-sztearát, cink-oxid és titán-dioxid nanorészecskék is. A bevonatok előállíthatók porlasztásos technikával, ami a prekursor anyag szoljának a kiválasztott szubsztrátumra való porlasztásából, majd további hő- vagy felületkezelésből állhat.

Megfelelő felületkezelő anyag (perfluorozott szénláncú polimerek vagy alkil-klór-szilánok) alkalmazásával csökkenthető a felület energiája és akár omnifób, azaz poláris és apoláris tulajdonságú folyadékokkal szemben egyaránt nagy peremszöget mutató, folyadéklepergető bevonatokat is tervezhetünk.

Ha a felület a látható fény hullámhosszával összemérhető léptékű (rendezett) morfológiával rendelkezik, akkor interferencián alapuló, szerkezeti szín hozható létre, mely a funkcionalitás mellett esztétikai élményt is nyújt.

A kutatás témáját kiegészítettük az öngyógyító (*self-healing*) anyagok területének megismerésével, ezek lehetséges alkalmazásával szuperhidrofób bevonatok kialakításában. Ez pl. mag-héj szerkezetű mikro- vagy nanokapszuláknak a bevonatokhoz való hozzáadásával biztosítható. A kapszulákból a hidrofób tulajdonságot fenntartó molekulák folyamatosan, vagy csak a szuperhidrofób bevonat sérülésekor áramlanak ki. A kutatás célkitűzése a vízlepergető bevonatok előállításáról szóló szakirodalom feldolgozása, további, szuperhidrofób és öngyógyító felületi bevonatokkal kapcsolatos kísérleti-fejlesztő munka megalapozása.

Varga Szonja

*Gépészmérnöki Kar
Gép- és Terméktervezés Tanszék*

A legfőbb lakberendezési tárgyak az ókortól napjainkig

A kutatásom célja az, hogy mélyebben tájékozódhassak az emberiség során eddig létrejött legfőbb lakberendezési tárgyak megjelenéséről, fejlődéséről, ezzel egyfajta összefoglalást adva a tárgy- és formatervezés eddigi metódusaihoz, ugyanis ipari termék- és formatervező mérnöknek tanulok és érdekel a művészet világa.

A kutatásom során kezdetben foglalkoztam az egyetemes művészettörténettel, köztük Pomeii-el is, majd sorba vettem a korstílusok legfőbb jellegzetességeit és lakberendezési tárgyait, így eljutva napjaink világához, művészetéhez. A kutatásomhoz kapcsolódik egy számítógépes programmal létrejövő ún. „könyveszekrény”, amelynek az egyes polcain keresztül különböző korokra jellemző anyagokat, díszítéseket mutatok be vizuálisan.

Az ókorban nagy kiváltság volt a szék és az ágy, viszont már ekkor is több különböző székfajta volt jelen mind Egyiptomban, mind a görög világban. Ezek közül emelkednek ki a fáraók művészien megművelt ülőalkalmatosságai, a trónszékek. Az időben előre haladva egyre tágabb réteg számára elérhetővé váltak az ülőalkalmatosságok és mellettük egyéb lakberendezési tárgyak is, melyeknek a változásait igyekszem feltérképezni kutatásom során, így eljutva az egy kézzel készített, hatalmat szimbolizáló tárgytól egészen a tömegtermeléssel létrejött, a hétköznapi emberek számára is elérhető munkákig.

Weber Márton

*Vegyéssz mérnöki és Biomérnöki Kar
Szerves Kémia és Technológia Tanszék*

NMR spektroszkópiás fehérjekötődés-vizsgálatok a fragmensalapú gyógyszerfejlesztés szolgálatában

Új kismolekulás gyógyszerhatóanyagok fejlesztése általában nagy áteresztőképessű biokémiai szűrővizsgálattal indul: gyógyszerszerű vegyületek tízezreiből próbálnak kisszámú molekulát találni, amely a megcélzott fehérjével a kívánt kölcsönhatásba lép, majd ezen találatok szerves kémiai átalakításaival jutnak a gyógyszerjelölthöz. Az utóbbi 20 évben előtérbe került a jobb sikerrátával kecsegtető fragmensalapú megközelítés, ahol kisebb, 1-2 gyűrűs vegyületeknek a lehetséges kémiai teret jobban lefedő halmazából keresnek találatot ugyanerre a kötőhelyre, szintetikus továbbépítés céljára. A kisebb molekulák azonban jellemzően kisebb affinitással kötődnek, ennek kimutatása biofizikai technikákkal, például mágneses magrezonancia spektroszkópiával (NMR) oldható meg.

Munkám során a legfrissebb szakirodalom áttekintésével megismerkedtem a fehérjekötődés vizsgálatának és vegyülettárak szűrésének NMR alapú módszereivel.

A Richter Gedeon Nyrt. Szerkezetkutatási osztályán a kismolekula megfigyelésén alapuló méréseket részesítik előnyben, mert ezek izotópjelölés nélkül, alacsony (mikroM) fehérjekoncentrációnál használhatók. Az ^1H NMR relaxációs és NOE alapú technikákkal szemben a ^{19}F NMR alapú relaxációs mérések további szelektivitási, érzékenységi és mérésidő-hatékonysági előnyökkel bírnak.

Néhány hónap erejéig abba a gyakorlati kutatómunkába kapcsolódtam be, amelynek célja ^{19}F NMR kötődésvizsgálatok adaptálása és műszerspecifikus, anyagtakarékossági optimalizálása volt fluorozott referencialigandum felhasználásával, amelynek kizorításával nem fluoros kismolekulák erősebb kötődése is igazolható elegyekmintából, specifikusan a megcélzott kötőhelyre. A humán szérum albuminos előkísérleteinket követően a Richter originális gyógyszerfejlesztési projektjeiben fogják alkalmazni a kifejlesztett módszert, többek között a BME több kutatócsoportjában, kooperáció keretében szintetizált vegyületek fehérjekötődésének tesztelésére is.

Zsiros Boldizsár

*Vegyésmérnöki és Biomérnöki Kar
Fizikai Kémia és Anyagtudományi Tanszék*

Visszaforgatási módszerek vizsgálata az organokatalizátorok körében

A szemikristályos polimerek részben kristályos, részben amorf jellegű szerkezettel bírnak, melyet a hajtogatott lamella modell segítségével lehet leírni. Ezen polimerek anyagszerkezeti jellemzői, illetve mechanikai és optikai tulajdonságai közötti összefüggések általános érvényű leírására, számszerűsítésére törekszik az anyagtudomány.

A Szemikristályos polimerek szerkezet-tulajdonság összefüggéseinek modellezése című projekt célja az, hogy a szakirodalom által betekintést nyerjek az adott témával kapcsolatos eredményekbe, illetve az egyetemen zajló kutatási tevékenységbe. A program során ezért 10 db angol nyelvű, szakirodalomból vett szemelvényt tanulmányozok a témában.

A kristályos polimerekkel kapcsolatos alapismeretek megszerzése után műanyagok, elsősorban a polipropilén merevsége és szerkezete közti összefüggésekről szóló irodalmat tanulmányozom. A polimerek merevségét két szerkezeti paraméter, a kristályosság mértéke és a lamellavastagság határozza meg. A feldolgozott cikkekben különböző modelleket találhatunk, melyek leírják ezt az összefüggést és lehetővé teszik a kalorimetriás vizsgálatokból származó adatok alapján meghatározni ezen két paramétert. Így a szemikristályos polimerek modulusa számíthatóvá válik, jó esetben pedig a számolt eredmények összhangban vannak a mérttel.

Ezeket követik a polimerek optikai paramétereiről, különösen az átlátszóságukról szóló irodalmi szemelvények. Az átlátszóság és a polimer makroszerkezetét alkotó szferolitok nagysága között összefüggés található. Gócképző adalékanyagokkal előállíthatók különféle gócsűrűségű szemikristályos polimerek. Ezek szerkezete és átlátszóságuk közt elektronmikroszkópos és kalorimetriai mérések alapján modellezhetünk összefüggéseket.

Remélem, hogy a „Tehetséggel Fel” típusú ösztöndíjas programban így szerzett ismereteim hasznosak lesznek a későbbiekben.

Impresszum

Felelős kiadó: **Dr. Józsa János**

Felelős szerkesztő: **Dr. Csákány Anikó**

Tördelés és grafika: **Faragó Dénes, Pethő Luca**

A kézirat lezárva: 2020. április 30.

