

Válasz doktori (PhD) értekezés bírálatára

Opponens: Dr. Till Zoltán

Dolgozat címe: Model-Based Analysis and Optimization of Industrial MDI Manufacturing

Jelölt: Horváth Gergely

Témavezetők: Dr. Varga Tamás, Dr. Kummer Alex

Tisztelt Dr. Till Zoltán!

Nagyon szépen köszönöm az alapos és tartalmas véleményét a disszertációm formai és tartalmi részei kapcsán, észrevételei és javaslatai nagy mértékben hozzájárultak ahhoz, hogy a dolgozatom minőségét tovább emelhessem és elnyerhesse végleges formáját.

Az 5. fejezetben a neuronok számának rétegenkénti változtatása egy érdeemben vizsgálható hiperparaméter lenne a neurális hálózatok összehasonlítása során?

Köszönöm a kérdést!

Igen, egyértelműen, hiszen a neuronok száma közvetlenül befolyásolja a modell teljesítményét, tanulási képességét és számítási igényét. A neurális hálózatok rétegei és az egyes rétegekben található neuronok száma alapján közvetlenül következtethetünk a modell komplexitására, ezáltal annak potenciális teljesítőképességére, a regresszió pontosságára. Nagyobb neurális hálózatok esetén a modell tanítása lassabb folyamat, több erőforrást igényel és jóval nagyobb a túltanulás veszélye is, de amennyiben ezen hátrányokat a modellező kezeli, úgy jó eséllyel kaphat pontosabb modellt egy több rétegből és több neuronból álló neurális hálóval, mint egy egyszerűbb struktúrával - amennyiben a feladat komplexitása megköveteli azt. Ha egy egyszerű modell már kellően pontos, akkor a nagyobb háló nem feltétlenül lesz pontosabb. A hiperparaméter optimalizáló algoritmusok, például Bayes-optimalizáció esetén is van lehetőség a neuronok számának hiperparaméterként történő vizsgálatára.

Az 5. fejezetben bemutatott vizsgálatok – laboratóriumi léptékű kísérleti eredményekből kiindulva – nem tartalmaznak holtidő vizsgálatokat (ezt a koncepciót egyfajta továbblépésként a 6. fejezet vezeti be). Ezt szem előtt tartva, a Jelölt véleménye szerint az azonosított optimális modell struktúrák továbbvihetőek-e egy, a 6. fejezethez hasonló vizsgálatra, vagy csak a lefektetett alapelvekből kiindulva, inkább az alapoktól kellene elkezdeni a probléma megoldását?

Köszönöm az észrevételt!

Az 5. Fejezetben alapvetően azért nem alkalmaztam holtidő vizsgálatot, mert a laboratóriumi kísérletek során a függetlenül változók, vagyis a szintézis paraméterek előre meghatározottak voltak és állandók a kísérlet ideje alatt, a függő paraméterek, vagyis az MDA minőségi paraméterei pedig a reakció végeztével kerültek csak elemzésre, ilyen értelemben pedig a holtidő mint paraméter felesleges volt, munkapont módosítás nem történtek a kísérletek alatt. Ipari rendszerek esetén a műveleti egységek paraméterei jóval dinamikusabban és szélesebb tartományban mozognak, illetve a munkapont váltások is jóval gyakoribbak mint egy laboratóriumi kísérlet esetén, ezáltal a holtidő, mint kulcsparaméter szerepe is jóval fontosabb ipari szinten.

A 6. Fejezethez hasonló holtidő vizsgálatra MDA ipari gyártása esetében is sor került már ahogyan az utolsó kérdésre adott válaszómban is kifejttem, azonban ez a modell a disszertációmban még nem került bemutatásra. Holtidő nélkül az ipari rendszer munkapont-váltásainak dinamikája nehezen és pontatlanul lenne csak követhető, amely nem minden esetben elfogadható, kiemelten gyakran változó munkapontú rendszerek esetén.

Úgy gondolom, hogy ilyen különböző léptékű és koncepciójú gyártási folyamatok, mint a laboratóriumi és ipari szint megfelelő kezelése érdekében inkább javasolt a lefektetett alapelvek megtartása, de a modellezési folyamat alapoktól történő újratekintése.

A meghatározott (a bíráló számára nem ismert) kulcsparamétereket vissza lehetett csatolni az MDI gyártáshoz kapcsolódó a priori ismeretekhez vagy az üzemben ismert ökölszabályokhoz?

Köszönöm a kérdést!

A legtöbb esetben sikerült a priori ismeretekhez kapcsolni és magyarázható módon elemezni a modell eredményeit, például:

- foszégnező reaktorok magas hőmérsékletének negatív hatásai;
- tartózkodási idő jellegű mennyiségek (cirkulációk, tartály- és kolonna szintek, anyagáram visszaadások a rendszer egy korábbi pontjára, stb.);
- minőségjavító rendszerek egyéb paraméterei (pl. MDI termékelegy reaktív desztillációja során a HCl gázzal történő sztrippelés paraméterei).

Előfordultak azonban olyan kulcsparaméterek is, amelyek korábban nem álltak közvetlen monitorozás alatt (pl. kolonna nyomásesések egyes helyeken, mely az illékony komponensek kihajtásának minőségére utalhat). A legérdekesebb és részletesen megvitatott rész – melyet az üzemi tapasztalatok szintén alátámasztottak – a 72. ábrán látható PDP-k voltak. A 72. ábra eredményeinek megerősítése céljából több olyan múltbéli üzemállapot is felderítésre került, ahol csak 1-2 üzemeltetési paraméter mozgatása történt (ugyanabba az irányba, pl. minden esetben a hőmérséklet emelése történt), de a paraméterek közötti keresztkorrelációk miatt ezen paraméter mozgatások hatása a 72. ábrának megfelelően egyes esetekben pozitív, egyes esetekben pedig negatív hatással voltak az MDI színére. Igazolható volt tehát, hogy az egyedi paraméterek finomhangolása nem elégséges az MDI színének optimális értékre történő beállításához, a teljes rendszer paraméterkészletét szükséges optimalizálni.

Milyen szinergiákat lát az 5. és 6. fejezetekben bemutatott eredmények között (tekintettel arra, hogy az MDA összességében egy köztitermék)?

Általánosságban kijelenthető, hogy az MDA köztitermék gyűrűeloszlása is befolyásolja az MDI végső elérhető szín értékét, ugyanis minél nagyobb arányban vannak jelen magasabb gyűrűszámú molekulák az elegyben, annál alacsonyabb maximális szín érték érhető csak el az MDI elegyben. A polimer-jellegű MDI termékek érzékenyebbek a színváltozást okozó mellékreakciókra, melyet empirikus üzemi tapasztalatok és előzetes modell eredmények is igazolnak. Fontosnak tartom azonban kiemelni, hogy bár az MDA gyűrűeloszlása is bizonyítottan hatással van a végső MDI elegy színére, a legjelentősebb hatást azonban az MDA elegy foszégnező folyamatának optimalizációjával, illetve a foszégén felesleg megfelelő kigázosításával, kihajtásával lehet elérni.

Az értekezésben megfogalmazott alkalmazhatósági szempontok mellett milyen további kutatási irányok fogalmazhatóak meg az egyes fejezetekhez kapcsolódóan?

Köszönöm a kérdést!

Véleményem szerint a hasonló adatalapú megközelítések a vegyiparban is egyre fontosabbá válnak majd, támogatva a gyártási és döntéshozatali folyamatokat.

A házi védésem alkalmával említettem, hogy a disszertációmban található modellekhez hasonló gépi tanulási modelleket jelenleg is fejlesztünk a BorsodChemnél, amelyek – az akkori ütemtervünk szerint – várhatóan 2026 első negyedévében kerülnek sikeresen bevezetésre és éles tesztelésre. Az első ilyen gépi tanulási modell azóta implementálásra került, folyamatosan felügyelhető a teljesítménye, valamint lehetővé vált a laboratóriumi mérések és a modell becsléseinek valós idejű összehasonlítása is. Ezen gépi tanulási modell célja az MDA-gyűrű eloszlásának becslése ipari üzemeltetési adatok alapján, ami közvetlenül kapcsolódik a disszertációm 5. fejezetéhez. Következő lépésként szeretném implementálni ipari szinten az MDI színbecsléső modellt is, mivel ez egy olyan paraméter, amelyet nagyon nehéz számítani vagy becsülni ahogyan azt a disszertációm 6. fejezetében is bemutattam.



Kazincbarcika, 2026.04.09.

Horváth Gergely