Doktori (PhD) értekezés tézisei

A digitális ikrek megbízható működésének biztosítása surrogate-alapú és online tanulással támogatott flowsheet modellkarbantartással

Palotai Balázs

Pannon Egyetem
Vegyészmérnöki és Anyagtudományok
Doktori Iskola

Témavezetők:
Dr. Takács-Bárkányi Ágnes
Dr. Kis Gábor

Konzulens:
Dr. Chován Tibor



Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék
Veszprém
2026

1. Előzmények és célkitűzés

A folyamatiparban a növekvő gazdasági, energetikai és fenntarthatósági elvárások egyre nagyobb igényt teremtenek a modellalapú döntéstámogató rendszerek alkalmazására. A jelenlegi megoldások azonban gyakran elkülönülő, nehezen integrálható modellekre épülnek, amelyek korlátozzák az információk hatékony felhasználását és a modellek újrahasznosítását. Erre a problémára kínál átfogó megoldást a digitális iker koncepciója, amely egységes keretben kapcsolja össze a különböző modelleket, adatforrásokat és alkalmazásokat, miközben biztosítja, hogy a virtuális modell folyamatosan együtt fejlődjön a valós technológiai rendszerrel.

A folyamatiparban a flowsheet modellek különösen alkalmasak digitális ikrek megvalósítására, mivel fizikai törvényszerűségeken alapulnak, validáltak, jól interpretálhatók, és a mérnökök számára magas fokú bizalmat biztosítanak. Ugyanakkor pontosságuk az üzemeltetési körülmények, a berendezések állapotváltozásai és a modelldrift következtében idővel romlik, ezért folyamatos karbantartást igényelnek. Ennek automatizált megvalósítása jelenleg nem megoldott, ami a flowsheet-alapú digitális ikrek széles körű ipari alkalmazásának egyik legfontosabb akadálya.

Kutatásom célja olyan módszertani keretrendszer kidolgozása volt, amely biztosítja a flowsheet modellek hosszú távú, automatizált karbantartását, ezáltal támogatva a digitális ikrek megbízható működését. Ennek érdekében feltártam a digitális ikrek ipari bevezetésének fő akadályait, surrogate-alapú kalibrációs módszert fejlesztettem a flowsheet modellek hatékony frissítésére, online tanulási eljárást dolgoztam ki a surrogate modellek folyamatos adaptációjára, majd ezeket egy egységes, integrált modellkarbantartási keretrendszerben egyesítettem.

2. Tézisek

I. Kialakítottam a digitális ikrek ipari adaptációját támogató keretrendszert. Megállapítottam, hogy a digitális ikrek sikeres bevezetésének és hosszú távú működtetésének egyik legkritikusabb eleme az alkalmazott flowsheet modellek automatizált karbantartásának biztosítása.

A digitális ikrek folyamatipari elterjedését vizsgálva megállapítottam, hogy a korlátozott ipari alkalmazhatóság elsődleges oka nem egyetlen technológiai hiányosság, hanem az integráció, az életciklus-kezelés és a modellkarbantartás összetett problémaköre.

Eredményeim alapján egy életciklus-orientált keretrendszert dolgoztam ki a digitális ikrek ipari bevezetésének támogatására, amely meghatározza a digitális modelltől a teljesen integrált digitális ikerig vezető fejlődési szakaszokat, valamint az ezekhez kapcsolódó technológiai és szervezeti követelményeket és feladatokat. A keretrendszer bemutatja a DevOps, DataOps, MLOps és model engineering módszertani elemeinek szerepét a modellek integrációjában, újrahasznosíthatóságában és életciklus-kezelésében.

Megállapítottam, hogy a folyamatiparban a flowsheet modellek fizikai megalapozottságuk, validálhatóságuk és interpretálhatóságuk révén megfelelő alapot biztosítanak a digitális ikrek megvalósításához. Kimutattam ugyanakkor, hogy a digitális ikrek hosszú távú megbízható működésének egyik legfontosabb előfeltétele a flowsheet modellek automatizált karbantartása, mivel a modellpontosság időbeli romlása közvetlenül veszélyezteti a digitális iker megbízhatóságát és alkalmazhatóságát.

Kapcsolódó publikációk: 1, 7, 8, 9, 10, 11

II. Megállapítottam, hogy a kidolgozott surrogate-alapú kalibrációs módszertannal nagyságrendekkel csökkenthető a számítási igény, növelhető a kalibráció robusztussága, miközben megőrizhető a szükséges pontosság, ezáltal hozzájárul a flowsheet modellek hatékony alkalmazásához digitális iker rendszerekben.

Megállapítottam, hogy a flowsheet modellek pontossága az üzemeltetés során bekövetkező folyamatváltozások – például a berendezések öregedése, a hőcserélők foulingja, a katalizátorok deaktiválódása vagy a nyersanyag-összetétel változása – következtében fokozatosan romlik, ezért rendszeres újrakalibrálásuk elengedhetetlen. Kimutattam, hogy a hagyományos, közvetlen flowsheet-alapú kalibráció nagy számítási igénye és korlátozott robusztussága jelentősen akadályozza a flowsheet alapú digitális ikrek automatizált modellkarbantartását.

Egy surrogate-alapú kalibrációs módszertant dolgoztam ki, amelyben az optimalizáció során a nagy számítási igényű flowsheet modellt neurális háló alapú surrogate modell helyettesíti. A módszert egy olyan összetett célfüggvénnyel egészítettem ki, amely egyesíti a mérnöki prioritások súlyozását és a mérési bizonytalanságok figyelembevételét, ezáltal növelve a kalibráció robusztusságát.

Az esettanulmány eredményei igazolták, hogy a kidolgozott módszer 96%-kal csökkentette a kalibráció számítási igényét, miközben megőrizte a szükséges pontosságot és zajos mérési adatok mellett is robusztus működést biztosított. Eredményeim igazolták, hogy a surrogate-alapú kalibráció hatékony megoldást nyújt a flowsheet modellek automatizált karbantartására, ezáltal megteremtve a digitális ikrek hosszú távú és megbízható működésének egyik alapvető feltételét.

Kapcsolódó publikációk: 2, 5

III. Bebizonyítottam, hogy az online (inkrementális) tanulás lehetővé teszi a surrogate modellek folyamatos adaptációját az új üzemi körülményekhez, miközben a modellek megőrzik a rendszerről korábban megszerzett globális tudást. Beláttam, hogy a modellek frissítésének időzítése és a felhasznált adatok köre egymástól független döntések, ezért a módszerek szabadon kombinálhatók.

Megállapítottam, hogy az offline tanított surrogate modellek pontossága romolhat, amikor a valós folyamat eltér az eredeti tanító adathalmaz által lefedett működési tartománytól. Az offline tanító adathalmaz kialakításának célja egy teljes működési tartományra érvényes, globális surrogate modell létrehozása, ezért a modell nem feltétlenül biztosít megfelelő pontosságot azokban a lokális üzemi tartományokban, amelyek a valós üzemeltetés során később válnak meghatározóvá.

Egy online tanulási keretrendszert dolgoztam ki, amely a valós üzemeltetés során folyamatosan gyűjtött új adatok felhasználásával lehetővé teszi a surrogate modellek inkrementális frissítését. Kimutattam, hogy az offline tanítóhalmazból származó minták kontrollált visszakeverésével a modellek képesek alkalmazkodni az új üzemi körülményekhez, miközben megőrzik korábban megszerzett globális tudásukat, ezáltal elkerülhető a catastrophic forgetting jelensége.

Bebizonyítottam továbbá, hogy a modellek frissítésének időzítése és a frissítéshez felhasznált adatok köre egymástól független tervezési döntések, ezért a különböző online tanulási stratégiák szabadon kombinálhatók. Az esettanulmány igazolta, hogy a kidolgozott módszer folyamatosan javította a lokális predikciós pontosságot, miközben hosszú távon is megőrizte a surrogate modell globális prediktív teljesítményét.

Kapcsolódó publikációk: 3, 12, 13

IV. Megalkottam egy integrált keretrendszert, mely a surrogate alapú flowsheet modell kalibrációit és a surrogate modellek online tanulását egyesíti, ezáltal csökkentve a flowsheet modell futtatás igényt és növelve a kalibráció hatékonyságát, ezáltal hatékonyan támogatva a flowsheet modellek adaptációját digitális iker rendszerekben.

Megállapítottam, hogy a surrogate-alapú kalibráció és az online tanulás önálló alkalmazása nem elegendő a flowsheet modellek hosszú távú adaptációjának biztosítására. Bár a surrogate modellek jelentősen csökkentik a kalibráció számítási igényét, pontosságuk idővel romolhat, ha a valós üzemeltetés eltér az eredeti offline mintatérről.

Egy integrált, zárt hurkú keretrendszert dolgoztam ki, amelyben a surrogate-alapú flowsheet kalibráció és a surrogate modellek online tanulása egymást kölcsönösen támogatja. A flowsheet modell minden sikeres kalibrációja új tanítóinformációt szolgáltat a surrogate modell számára, amely online tanulással folyamatosan alkalmazkodik az aktuális üzemi körülményekhez, miközben megőrzi korábban megszerzett globális tudását.

Az esettanulmány igazolta, hogy a kidolgozott integrált módszer 92%-kal csökkentette a közvetlen flowsheet kalibrációk számát, miközben hosszú távon is fenntartotta a surrogate modell prediktív pontosságát. Eredményeim alapján a surrogate modell már nem statikus közelítő modellként, hanem a flowsheet modellel együtt fejlődő, folyamatosan karbantartott modellként működik, amely hatékonyan támogatja a flowsheet modellek hosszú távú adaptációját és a digitális ikrek megbízható működését.

Kapcsolódó publikációk: 4, 6, 14, 15

3. Hasznosítási lehetőségek és jövőbeli célok

A kutatás eredményei közvetlenül hasznosíthatók olyan ipari digitális iker rendszerekben, ahol a flowsheet-alapú folyamatmodellek és a gépi tanulási elemek együttműködése valós idejű döntéstámogatást szolgál. A surrogate-alapú kalibráció és az online tanulás integrációja lehetővé teszi a fizikai modellek gyors és megbízható frissítését, miközben jelentősen csökkenti a számítási költségeket. Ez különösen előnyös olyan technológiai egységeknél, ahol a hőcserélő fouling, a katalizátor-öregedés, a nyersanyag-változás vagy más nemlineáris jelenségek miatt gyakran szükséges a modellparaméterek újraillesztése. A módszer rugalmassága miatt a megközelítés könnyen átültethető hőcserélő hálózatokra, desztillációs rendszerekre, reaktorokra és egyéb berendezésekre, amelyeknél a modellkarbantartás kulcsfontosságú.

A digitális ikrekre épülő döntéstámogatási rendszerekben a fejlesztett megközelítés lehetővé teszi a megbízhatóbb üzemi optimalizációt, a termelési költségek csökkentését és a berendezések állapotfüggő működtetését. A modellfrissítés automatizált, adatvezérelt folyamata elősegíti, hogy a rendszer gyorsan reagáljon a környezeti, gazdasági vagy technológiai változásokra anélkül, hogy manuális modellbeavatkozásra lenne szükség. A folyamatosan tanuló surrogate modellek alkalmazása továbbá lehetőséget teremt olyan prediktív funkciók kialakítására is, mint az üzemzavarok korai felismerése, a karbantartási intervallumok optimalizálása vagy alternatív üzemállapotok gyors kiértékelése.

A módszertan további hasznosítási lehetősége más ipari alkalmazásokban rejlik, ahol a surrogate–flowsheet szinergia új értéket teremthet. Egy folyamatosan karbantartott, online frissített surrogate modell alkalmas lehet nagy számításigényű feladatok – például operációs tér feltérképezés, üzemeltetés-optimalizálás,

többszempontú gazdasági optimalizáció vagy gyors what-if analízis – hatékony előkalkulációjára. Ebben a keretrendszerben a flowsheet modell egyfajta fizikai „ellenőrző pontként” működhet, amely validálja a surrogate által generált javaslatokat, biztosítva a fizikai konzisztenciát és a mérnöki hitelességet. Ez a kettős modellstruktúra nemcsak gyorsabb és megbízhatóbb döntéstámogatást tesz lehetővé, hanem potenciálisan kiterjeszthető új üzemintenzifikálási, beruházástervezési vagy prediktív karbantartási feladatokra is.

Publikációs lista

A doktori értekezés alapját képező közlemények

Referált folyóiratban publikációk:

1. B. Palotai, Á. Bárkányi, G. Kis, and J. Abonyi. Moving Towards Digital Twins: Overview of Key Challenges in the Process Industry. *Heliyon, 12 (14) (2026) e45350.*
   Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 3.6

2. B. Palotai, G. Kis, J. Abonyi, and Á. Bárkányi. Surrogate-based flowsheet model maintenance for digital twins. *Digital Chemical Engineering, 15 (2025) 100228.*
   Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 5.4

3. B. Palotai, G. Kis, T. Chován, and Á. Bárkányi. Online learning for surrogate model maintenance. *Hungarian Journal of Industry and Chemistry, 53 (2) (2025) 37–43.*
   Scimago Journal Ranking: Q4, Impact factor: 0.8

4. B. Palotai, G. Kis, T. Chován, and Á. Bárkányi. Online learning supported surrogate-based flowsheet model maintenance. *Digital Chemical Engineering, (2025) 100287*. Scimago Journal Ranking: Q1, Impact factor: 5.4

Nemzetközi konferencia teljes megjelenés:

5. B. Palotai, Á. Bárkányi, G. Kis, and J. Abonyi. Operationalization management: Enhancing life cycle management of digital twins. *Computer Aided Chemical Engineering, 53 (2024) 3025–3030*.

6. B. Palotai, G. Kis, J. Abonyi, and Á. Bárkányi. Synergies of adaptive learning for surrogate-based flowsheet model maintenance. *ESCAPE 35 – European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Ghent, Belgium, 6–9 July 2025. ISBN: 978-9-492859-36-5*.

Nemzetközi konferencia:

7. B. Palotai, G. Kis, Z. Mathe. Unlocking value through operationalization and advanced digital twin applications in downstream. *Emerson User Exchange EMEA 2024, Düsseldorf, Germany, 2024*.

8. B. Palotai, G. Kis, Z. Mathe. Digital twins in action: Joint effort of Hysys and DeltaV to make profit real. *Emerson Exchange 2025, San Antonio, Texas,USA, 19–22 May 2025*.

9. B. Palotai, G. Kis, L. Grad-Gyenge, Z. Máthé, T. Chován, and Á. Bárkányi. Toward transparent decision support: Building fully integrated digital twin for refinery operations. *Advances 2025, Manchester, UK, 16–17 October 2025*.

10. B. Palotai, G. Kis, L. Grad-Gyenge, Z. Máthé, T. Chován, and Á. Bárkányi. Building a fully integrated digital twin for refinery operations. *IChemE Process Management and Control Special Interest Group Webinar, Online, 27 March 2026.*

Hazai konferencia:

11. B. Palotai. Moving towards digital twins in the process industry. *30th Process Control Systems Meeting (PCS), Miskolc-Lillafüred, Hungary, 14–16 October2024*.

12. B. Palotai, G. Kis, T. Chován, and Á. Bárkányi. Online learning for surrogate model maintenance. *Műszaki Kémiai Napok'25, Veszprém, Hungary, 15–17April 2025.*

13. B. Palotai, G. Kis, T. Chován, and Á. Bárkányi. Exploring AI and Machine Learning-Based Decision Support Systems for Real Chemical Processes. *University Research Scholarship Program (EKÖP) Institutional Conference, University of Pannonia, Veszprém, Hungary, June 25, 2025*.

14. B. Palotai, G. Kis, T. Chován, and Á. Bárkányi. Maintenance of flowsheet models in digital twins through real-time data-driven learning in the chemical industry. *Műszaki Kémiai Napok'26, Veszprém, Hungary, 21–23 April 2026*.

15. B. Palotai, G. Kis, T. Chován, and Á. Bárkányi. Exploring AI and Machine Learning-Based Decision Support Systems for Real Chemical Processes. *University Research Scholarship Program (EKÖP) Institutional Conference, University of Pannonia, Veszprém, Hungary, June 25, 2026*.