

Számítógéppel támogatott folyamatmérnökség - hazai és nemzetközi eredmények, a jövő kihívásai

Abonyi János^{a,*} és Hangos Katalin^{b,c}

^aPannon Egyetem, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, Egyetem utca 10, 8200, Veszprém

^bMTA SZTAKI Folyamatirányítási Kutatócsoport, Kende utca 13-17, 1111, Budapest

^cPannon Egyetem, Villamosmérnöki és Információs Rendszerek Tanszék, Egyetem utca 10, 8200, Veszprém

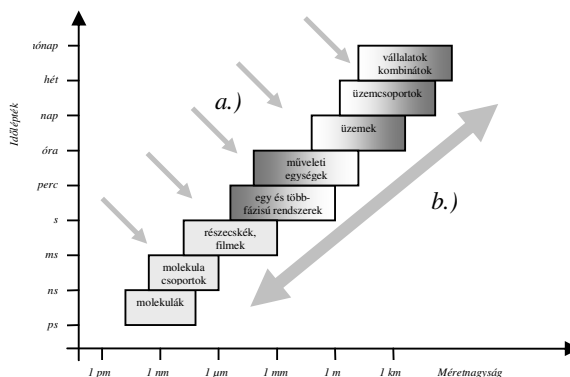
1. Bevezetés

A számítógéppel támogatott folyamatmérnökség a Magyarországon nagy hagyományokkal rendelkező vegyészmérnöki tudományból nőtt ki, és vált fokozatosan önállóvá. Ezen tudományterület hazai létrehozói és első művelői között olyan kiemelkedő, már körünkből sajnálatosan eltávozott személyiségeket találhatunk, mint Árva Péter, Benedek Pál, Blickle Tibor, Fonyó Zsolt, és Pallai Iván, akik a ma e területen működő tudományos iskolák alapítói is egyben. Az Ő emléküknök ajánljuk ezt a közleményt, amely áttekinti és elemzi az utóbbi tíz év hazai, számítógéppel támogatott folyamatmérnöki területen végzett kutatásokat, és jelzi a jövő lehetséges kihívásait.

1.1. A számítógéppel támogatott folyamatmérnöki terület jellemzői

Az 1850-es évek környékén kikristályosodó vegyészmérnöki tudomány a II. világháborút követően egy új területtel gazdagodott. A tervezés során előtérbe kerültek a rendszerek szisztematikusan leírását támogató matematikai modellek és Angliában az egyre fontosabbá váló operációkutatás fejlesztésébe a vegyészmérnökök is bekapcsolódtak. Nem csoda, hiszen a vegyipar is olyan kérdésekkel küzdött, illetve küzd a mai napig, hogy mi az az optimális folyamat, illetve folyamatot megvalósító rendszer, amivel adott célokat adott feltételek mellett minimális költséggel lehet elérni.

A folyamatmérnökség mára meta-tudományként foglalja magába az összes olyan komplex rendszer és folyamat tervezéséhez és optimális üzemeltetéséhez szükséges ismeretet, ahol az anyag fizikai, kémiai és/vagy biológiai átalakuláson megy keresztül. Az elmúlt ötven év során körvonalazódott, hogy a folyamatmérnökök elsődleges feladata az, hogy integráltan kezeljék a vásárlói igények által mozgatott komplex termelő szervezetek rendkívül széles idő és mérettartományban jelentkező mérnöki, illetve természettudományos háttérű fejlesztési és üzemeltetési problémáit (lásd 1. ábra).



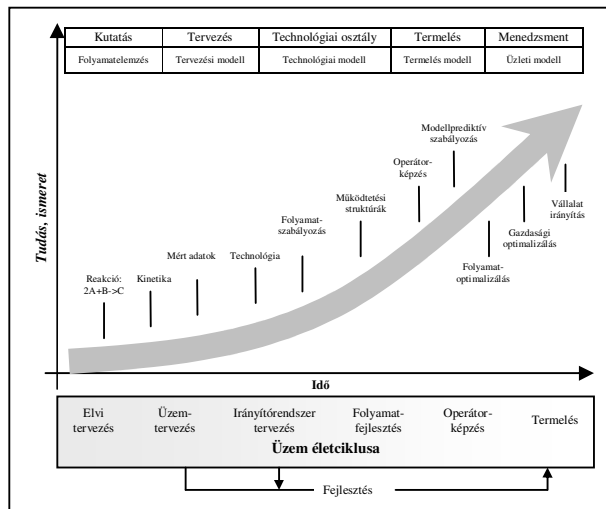
1. ábra. A folyamatmérnökség területe és fejlődési iránya¹

E cél alapján, ahogy az 1. ábra is mutatja, a folyamatmérnöki tudomány két fontos irányban fejlődik².

a.) Az első fejlesztési irány az eltérő méret- és időtartományokban értelmezett alrendszerek modellezésére és ezeknek az alrendszereknek a tervezése és üzemeltetése során jelentkező problémák (modell alapú) megoldására irányul.

b.) A termék- és technológiafejlesztés hatékonysága a gazdasági versenyképesség rendkívül kritikus tényezője. A számítógéppel támogatott folyamatmérnöki munka hatékonyságának fontos záloga hogy adott méret, illetve időtartományokban definiált problémamegoldás során keletkező információ miként hasznosulhat más jellegű problémák kezelése során. Az információátvitel és a többléptékű, komplex rendszereket integráltan kezelő problémamegoldás szükségessége jelenti mára a legfontosabbá váló kihívást. Ez, a második fejlesztési irány a komplexitás növekedésével együtt járó hiányos ismeretek és bizonytalanság kezelésére alkalmas eszközök fejlesztését is igényli³.

* Főszerző. Tel.:+36-88-624209; fax:+36-88-624171; e-mail: abonyij@fmt.uni-pannon.hu



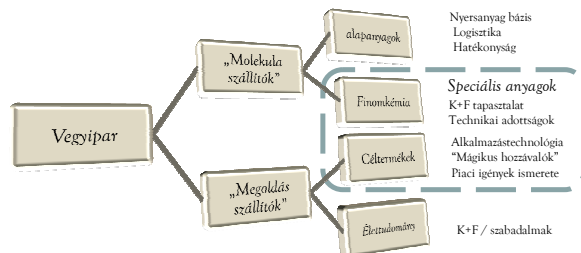
2. ábra "Modell életciklus" integrált modellezés alapú tudásmenedzsment során. A technológiafejlesztés minden lépése modellekre épül. E modellek az adott részproblémák megoldásán túl az egyes lépések közti információátvitel során is felhasználásra kerülnek. Amennyiben ez az információátvitel sikeres, joggal mondható el, hogy a koncepcionális tervezéstől a működő technológia optimalizálásáig a modell integrálja a szervezetet.

Ez a koncepció legkorábban a piacvezető vegyipari vállalatok mérnökeiben és vezetőiben kristályosodott ki „a modell integrálja a teljes szervezetet” jelmondatban. A vezető nemzetközi piaci szereplők (DuPont, Dow Chemical, Bayer Technology Services) komolyan hittek és hisznek abban, hogy az adatoknak, az információknak és a tudásnak a kutatás kezdeti munkafázisaitól a gyártási folyamat optimalizálásáig végig kell követniük a termék illetve a technológia fejlődését (2. ábra). A jelentős erőfeszítések ellenére e koncepció jelenleg inkább csak elérendő célként, ajánlasként értelmezhető, ugyanakkor, ahogy a következő fejezetben látni fogjuk, a gazdasági környezet kikényszeríti az integrált szemléletmód alapú működést, fejlesztést⁴.

1.2. A folyamatmérnöki terület gazdasági fontossága

A vegyipar rendkívül fontos szerepet tölt be az Európai Unió gazdaságában. Ezt a fontos területet a gazdasági világválság rendkívül mélyen érintette, termelési értéke 2008-ban kb. 5%-al, 2009-ben pedig 10%-al esett vissza. Bár a 2010-es évre 5%-os fejlődést prognosztizálnak, a jövőben rendkívül erős verseny várható. Becslések szerint 2015-re a világ 200 krakküzeméből 40 gazdaságtalanná válik, és ebből a 40-ből 14 európai üzem lesz⁵. A nyersanyagigényes tömegtermelés Európában ugyanis egyre kevésbé rentábilis, így a piac jelentős átstrukturálódása várható.

Kitörési lehetőség, illetve a fenntartható fejlődés záloga, ha az európai vegyipar olyan termékek előállítására fókuszál, melyek hozzáadott értéke jelentős, termékei mellé alkalmazástechnikai szolgáltatásokat nyújt, illetve a tömegtermelést megvalósító technológiáit olyan mértékben fejleszti és integrálja, hogy azok alacsony logisztikai költsége ellensúlyozhatja a távol-keleti piacra jellemző nyersanyag, energiaár, és szállítási költségből származó előnyöket (3. ábra)⁶.



3. ábra Vegyipar diverzifikálódása által definiált fejlesztési irányok

A működés hagyományos, nagyon fontos, de nem egyetlen jósági kritériuma a gazdaságosság. Elengedhetetlen további feltétel a biztonság, a dolgozók egészségvédelme is. Ha több, hasonló termék előállítása, vagy többféle nyersanyag felhasználhatósága is követelmény, úgy a rendszer jó flexibilitása is lényeges szempont. Legújában pedig, a fenntartható fejlődés megvalósítása érdekében az ökológiai követelmények betartása: az anyagtakarékosság, a környezet szennyezésének minimálisra történő csökkentése, sőt kizárása is, a folyamat-tervezés fontos kritériumává vált^{7,8}.

1.3. A számítógéppel segített folyamatmérnöki kutatások hazai műhelyei

A számítógéppel segített folyamatmérnöki kutatásokat az MTA Kémiai Osztályán a Műszaki Kémiai Bizottság keretein belül működő Folyamatmérnöki Munkabizottság fogja össze, ugyanis a terület rendkívül szorosan kötődik műszaki kémiának is nevezett vegyészmérnöki tudományhoz.

E kötődés egyik gyökere Benedek Pál és László Antal (1964) a műveletek elméleti alapjairól írt úttörő monográfiája, míg a „klasszikus” művelettan első átfogó magyar tankönyve Fonyó Zsolt és Fábry György nevéhez fűződik (Vegyipari művelettan, 1998). A művelettan számítástechnika (kibernetika) területének indulását Almásy Gedeon, Árva Péter, Fejes Pál, Holderith József, Jedlovsky Pál, Pallai Iván, és Varga Károly segítették.

Ma már számos hazai kutató műhely foglalkozik a tágabb értelemben vett folyamatmérnökséggel, ugyanis a matematikai modellezés, a rendszerelmélet, az irányítástechnika, a szabályozástechnika, és a számítástudomány eredményei a vegyiparban is rendkívül gyorsan alkalmazásra találnak.

Bár az előbb említett területeken rendkívül aktív és eredményes munka folyik hazánkban, tanulmányunk keretei sajnos csak a szűkebben értelmezett vegyipari folyamatmérnökség műhelyeinek rövid ismertetését teszik lehetővé, azokat, melyek aktív tagjai az MTA Folyamatmérnöki Munkabizottságnak, illetve nevükben is deklarálták elsődleges elkötelezettségüket e tudományterület iránt.

Napjainkban Budapesten a Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen (BME) több kutatócsoport is dolgozik a számítógéppel segített folyamatmérnöki területen. A BME-n elsősorban a Kémiai és Környezeti Folyamatmérnöki Tanszéken folyik ilyen irányú kutatómunka, amelyből Mizsey Péter, Lang Péter és Rév Endre kutatócsoportjai emelkednek ki. Ők elsősorban szétválasztási műveletek tervezésével, optimalizálásával és energiahatékonysági kérdéseivel foglalkoznak.

Szintén a BME-hez kötődik Kollárné Hunek Klára, akinek kutatási területe többkomponensű kémiai rendszerek számítógépes modellezése és élelmiszer érzékszervi vizsgálatok informatikai támogatása.

Az MTA SZTAKI Folyamatirányítási Kutatócsoportjában Hangos Katalin és Szederkényi Gábor irányításával folynak nemzetközi szintű modellezési és folyamatirányítási kutatások. Ugyanitt megmaradási elveken alapuló modell alapú intelligens diagnosztikával, valamint atomerőművi ipari alkalmazásokkal is foglalkoznak.

Veszprémben a Pannon Egyetemen a folyamat-szintézis, tervezés és optimalizálási területen Friedler Ferenc és Jiri Klemes alakított ki erős kutatási bázist. Friedler Ferenc csoportja a folyamatszintézis és tervezés, valamint folyamat-ütemezés témaköreivel foglalkozik, míg Klemes és munkatársai az energiaintegráció, illetve környezeti szempontokat figyelembe vevő technológiafejlesztési módszertanok fejlesztésével kapcsolatban értek el nemzetközi szinten is elismert eredményeket.

Szintén a Pannon Egyetemen, az Árva Péter által 1977-ben alapított Folyamatmérnöki Intézet Tanszéken Szeifert Ferenc és Chován Tibor szakaszos technológiák és ipari környezetben alkalmazható modell alapú szabályozó algoritmusok fejlesztésével, Nagy Lajos folyamatirányítással, Németh Sándor polimerizációs technológiákkal, Lakatos Béla többfázisú műveleti egységek modellezési és szimulációs vizsgálataival, Abonyi János pedig adatbányászat és számítási intelligencia alkalmazásával foglalkozik elsősorban.

Kaposvári Egyetem már nyolc éve ad otthont az *Alkalmazott Informatikai Konferenciának* melynek Folyamatinformatikai Szekciója évről évre nemcsak a szűkebben értelmezett vegyészmérnöki munkát támogató folyamatmérnöki eszközök fejlesztését, hanem a mezőgazdasági, termelésirányítási alkalmazási lehetőségeket is áttekinti. A szervező Csukás Béla csoportja leginkább többcélú evolúciós algoritmusokkal és az azokkal integrált célirányos szimulátorok fejlesztésével foglalkozik.

A folyamatirányítás gyakorlati kérdéseit fogja össze a Miskolci Egyetemen évente szervezett *DCS találkozók*, mely ma már klasszikus folyamatirányításon túl a folyamatinformatika teljes területét is lefedi, és tudományos munkákat ismertető szekcióval is kiegészült.

Gödöllőn, a Szent István Egyetem Folyamatmérnöki Intézete az energiaátalakítási folyamatok fejlesztési lehetőségeit, a Szegedi Tudományegyetem Gépészeti és Folyamatmérnöki Intézete pedig a többváltozós adatelemzés kísérletek tervezésében, valamint műveleti paraméterek optimalizálásában való alkalmazását kutatja.

E tanulmányban az előzőekben ismertetett műhelyek elmúlt 10 évben megjelenő nemzetközi publikációiban megjelenő eredményeit próbáljuk összefoglalni, elemezve, hogy ezek az eredmények miként járulhatnak, illetve járultak hozzá, hogy a folyamatmérnökség megfelelő eszközökkel és módszertanokkal felvértezve felelhessen meg a vegyipart érintő kihívásoknak.

2. Modellezés, modell analízis és szimuláció

A folyamatrendszerek matematikai modelljeinek felállítása és vizsgálata alapvető fontosságú a többi folyamatmérnöki tudományterület szempontjából is. Magyarországon hagyományosan erős a folyamatrendszerek modellezésének területe, több kutatócsoport is nemzetközi szinten és igen eredményesen műveli ezt a szerteágazó, az alkalmazás igényeitől erősen függő területet.

2.1. Fehér doboz modellezés fizikai és kémiai elvek felhasználásával

A folyamatrendszerek dinamikus modelljei a termodinamika I. főtételéből származó megmaradási egyenletekből vezethetők le, amelyek megoldásai a termodinamika II. főtétele alapján egyenlőségi és optimalitás típusú egyenlőtlenségi korlátozásoknak tesznek eleget. Ezen megközelítés lehetővé teszi, hogy a folyamatról rendelkezésünkre álló mérnöki tudást felhasználjuk a folyamatrendszerek modelljei szerkezetének és tulajdonságainak meghatározására. A megmaradási elveken alapuló folyamatmodellezés és modell analízis legerősebb hazai iskolája Hangos Katalin vezetésével alakult ki az MTA SZTAKI Folyamatirányítási Kutatócsoportjában⁹, ahol a folyamatrendszerek modellezés-elméletén¹⁰ túlmenően a modellezési transzformációk formális leírásával és hatásuk analízisével^{11,12}, többléptekű modellezéssel¹³, minimális modellekkel¹⁴, valamint a felállított modellek kiszámíthatósági¹⁵ és dinamikus analízisével¹⁶ is foglalkoznak. A folyamatrendszerek modellezésével és modeljeinek analízisével kapcsolatos utatási eredményeiket egy nagyszerű könyvben is összefoglalták¹⁰.

Komplex többfázisú folyamatrendszerek modellezésével a Pannon Egyetemen (a továbbiakban PE) foglalkozik Lakatos Béla hosszú idő óta eredményesen munkatársaival. Az elmúlt tíz év munkáiból kiemeljük a diszperz rendszerek populációs mérlegekre épülő modellezését^{17,18}, valamint a többszintű dinamikus modellezés elméletével foglalkozó közleményeket^{19,20}. A kifejlesztett modellekkel dinamikus analízist, pontosabban stabilitásvizsgálatot is végeztek²¹.

A Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetemen (a továbbiakban BME) több kutatócsoport is aktív a számítógéppel segített folyamatmérnöki területen. A fizikai és kémiai elveket felhasználó fehér doboz modellezés területén elsősorban szétválasztási folyamatokkal foglalkoznak folyamattervezési és optimalizálási célból. A modelleket a szétválasztási folyamatok megvalósíthatósági analízisére használta Lang Péter munkatársaival heterogén szakaszos²², illetve nyomás lengéses (pressure swing) szakaszos desztillációs folyamatokra^{23,24}. Mizsey Péter és csoportja is foglalkozik desztillációs folyamatok dinamikus analízisével^{25,26}, bár az Ő munkájuk inkább ezen folyamatok energia-optimalizálási kérdéseire koncentrálnak (lásd később).

2.2. Szimulációs technikák és alkalmazások

A komplex folyamatrendszerek modelljei analitikusan általában nem megoldhatóak, így a megoldást numerikusan, szimulációval állítjuk elő. A szimuláció segítségével előállított megoldás alkalmazható előrebecslésre, szabályozó tervezésre, optimalizálásra, operátorok képzésére, és számos más mérnöki és gazdasági feladatra.

Lang Péter és munkatársai (BME) maximum azeotrópok homoazeotrópos desztillációját vizsgálták szimulációs módszerekkel²⁷ szakaszos desztilláció esetén.

Kristályosító rendszerek modellezésével és szimulációjával foglalkozott Ulbert Zsolt (jelenleg Kaposvári Egyetem) és Lakatos Béla (PE), akik a kristályosítók dinamikus szimulációjára alkalmas eljárást fejlesztettek ki mozgó véges elemek módszerével²⁸, valamint elvégezték ezen folyamatrendszerek modellezését és szimulációját nem tökéletes mikro-keveredési körülmények között²⁹. Ugyanez a kutatócsoport ipari krakkoló berendezése modellezésével és szimulációjával is eredményesen foglalkozott³⁰.

A folyamatrendszerek megmaradási elveken alapuló modellezési módszerét, és a MATLAB környezetben elérhető szimulációs technikákat használta Hangos Katalin és kutatócsoportja³¹ (SZTAKI) a Paksi Atomerőmű primér körének irányítástechnikai célú dinamikus modellje elkészítésére.

Az Árva Péter és Szeifert Ferenc által kidolgozott hierarchikus modellezési koncepció³² az ipari gyakorlatban a 90-es évektől olyan formában került alkalmazásra, amikor már egy-egy konkrét technológiai fejlesztési feladat megoldására dolgoztak ki célszoftvereket a PE Folyamatmérnöki Tanszék munkatársai. Az első „termékek” a BorsodChem Zrt MDI üzemének és a TVK Nyrt PP-III üzemének dinamikus szimulátorai voltak. A szimulátorokat fel lehetett használni a termékváltások optimalizálására, egyes berendezésekben lejátszódó folyamatok dinamikus nyomon követésére, üzemvitel elemzésére. A BorsodChem Zrt számára dolgozták ki a PVC-CAD programcsomagot, amely a polimerizációs kinetika, a keveredési viszonyok tanulmányozására, a laboratóriumi kísérletek adatainak feldolgozására, valamint a laboratóriumi és az ipari reaktor közötti információ átvitelben nyújtott segítséget a vállalat szakemberi számára.

A BorsodChem, illetve a TVK több üzemére is készítették cél szimulátorokat (vinil-klorid üzem reaktorai, MDI, HDPE, PP-II, PP-4, LDPE-II üzemek)³³.

A szakaszos technológiák fejlesztését támogató matematikai modell megalkotása számos nehézségbe ütközik. A PE Folyamatmérnöki Intézeti Tanszéken kidolgozott módszer és eszközcsoport biztosítja egy fejlesztési szempontból optimális méretű modell megalkotását, a kinetikai paraméterek hatékony meghatározását és a technológia fejlesztés során szükséges vizsgálatok elvégzését. A szimulációs módszert számos gyógyszeripari és más (pl. szakaszos polimerizációs) vegyipari technológia kapcsán alkalmazták; a fejlesztési eredmények visszaigazolták a módszer előnyeit³⁴.

3. Modellezés – adatelemzés

A folyamatrendszereket leíró modelleket nem csak megmaradási, fizikai és kémiai elvek alapján lehet megalkotni, hanem a rendszerről rendelkezésre álló adatok és heurisztikus tapasztalatok is felhasználhatóak ilyen célra. Az ilyen, úgynevezett adatvezérelt modellezés méltán népszerű és elterjedt a bonyolult ipari folyamatoknál, így a folyamatrendszerek esetén is. Az adatvezérelt módon felállított modelleket *fekete doboz modelleknek* is nevezik, azok a modellek pedig, amelyeknek a struktúráját mérnöki elvek alapján, paramétereiket pedig az adatokból határozzuk meg, az úgynevezett *szürke doboz modellek*.

3.1. Identifikáció

A dinamikus rendszerek paramétereinek és struktúrájának becslését valós mért adatok felhasználásával azonosításnak nevezik a rendszer- és irányításméleti szakirodalomban. A folyamatmérnöki szakirodalomban a szürke doboz modellek ismeretlen paramétereinek becslése végezhető el azonosítási módszerekkel, ezt a műveletet modell kalibrációnak¹⁰ is mondhatjuk.

Komplex ipari rendszerek irányítástechnikai és diagnosztikai célú modelljeit szinte mindig kalibrálni kell, hiszen ezek egyszerűsített módon írják le a végbemenő bonyolult folyamatokat. Ennek egy szép példáját láthatjuk a Paksi Atomerőmű primér köre esetén, ahol irányítástechnikai célú dinamikus modell paramétereit becsülték meg ipari mért adatok felhasználásával³⁵.

3.2. Technológiai adatok elemzése (adatbányászat)

Egy komplex termelőfolyamatban rendkívül sok változó befolyásolja a végtermék minőségét. Amennyiben ezeket szervezett módon feltárjuk, akkor jelentős gazdasági előnyhöz juthatunk. A különböző jellegű információforrások más-más modellezési keretrendszerben kezelhetők hatékonyan (pl. *a priori* ismeretek algebrai-differenciál egyenletrendszerekkel, adatokban rejtett ismeretek fekete doboz modellekkel melyekhez regressziós, ill. osztályozási feladatok megoldása során jutunk, szakértői ismeretek pedig nyelvi szabályokkal, szabálybázisokkal, bizonytalansággal terhelt esetekben fuzzy modellekkel).

Ezért fontos terület a fuzzy³ modellezés, illetve azok speciális csoportosítási algoritmusok³⁶ melyek segítségével ezek a heterogén információforrások közös keretrendszerben kezelhetők.

Ezek a technikák legsikeresebben a végtermékek minőségének szabályozásában alkalmazhatók³⁷, hiszen itt a szabályozás minőségének kis mértékű javítása jelentős gazdasági előnyhöz juttathatja a vállalatot a versenytársaival szemben. Kemény Sándor és Deák András ezen a téren magyar nyelven is elérhető Kísérletek tervezése és kiértékelése című könyve nagyon jó áttekintést nyújt e technikák alkalmazásában rejlő lehetőségekről³⁸.

4. Folyamatirányítás és szabályozás

A folyamatirányítás és szabályozás témakörébe nemcsak a folyamatrendszerek szabályozóinak tervezése és vizsgálata, hanem a rendszerek szabályozási célú dinamikus analízisének eszközei és módszerei, valamint a tágabb értelemben vett irányítások, azaz indítási, leállási, működési mód váltási stb. eljárások tervezésének módszerei is beletartoznak. Ezen a területen adott áttekintésünkre különösen érvényes, hogy e fejezet csupán a vegyészmérnöki tudományterületet érintő eredményekre fókuszál.

A folyamatrendszerek dinamikus modelljeinek struktúráját használták optimális szabályozó-struktúra tervezésre az MTA SZTAKI-ban Hangos Katalin és Tuza Zsolt gráfelméleti módszerekkel³⁶, Szederkényi Gábor és munkatársai pedig folytonos fermentorok nemlineáris analízisére és szabályozására alkalmas módszereket dolgoztak ki⁴⁰. Ugyanez a kutatócsoport jelentette meg e nemlineáris folyamatrendszerek analízisével és irányításával foglalkozó nagysikerű könyvet is 2004-ben⁴¹.

A szabályozók tervezésének alapvető feltétele, hogy a rendszer irányítható legyen, ami a rendszer modelljének elméleti vizsgálatával állapítható meg. A folyamatrendszerek irányíthatósági analízisének kihívásait tekintette át Fonyó Zsolt és Mizsey Péter (BME) számos munkatárssal együtt írott áttekintő közleménye⁴².

A modell prediktív szabályozás (MPC) a többváltozós folyamatok szabályozásában egy bevett alkalmazással nötte ki magát, mára az ipari, többváltozós folyamatok szabályozásában az esetek több mint 90 %-ban ezt a megoldást alkalmazzák. E siker egyik titka az MPC megoldások azon sajátossága, hogy segítségével kezelhetők a többváltozós rendszerek bemeneti és kimeneti korlátai. A megnövekedett verseny eredményeként az MPC gyártók a termékekbe immáron olyan lehetőségeket implementáltak, mint a többszintű optimalizálási problémák kezelése különböző prioritású szabályozási célok figyelembevételével, rugalmas megoldások a gyártások optimalizálása a gazdasági célok egyidejű kezelésére, a modell bizonytalanságának kézben tartására (roboztus szabályozó tervezés) és magas szintű modell identifikációs algoritmusok alkalmazása. Az előbb említett klasszikus MPC technikát alkalmazták sikerrel a Pannon Egyetemen Rédey Ákos és munkatársai szennyvíztisztítási folyamatok oldott oxigéntartalmának szabályozására⁴³.

Az alapszintű irányítási algoritmusok mellett a szakaszos technológiai rendszerek irányításának meghatározó eleme a rugalmas gyártási eljárások hatékony vezetését biztosító receptúra-alapú eljárásvezérlés. A szakterületre vonatkozó S88.01 (MSZ EN 61512-1) irányítási szabvány pontosan megfogalmazza az ilyen irányítási feladatok megfelelő dekompozícióját és strukturális modellekkel történő leírását. A PE Folyamatmérnöki Intézeti Tanszéke számos ipari projekt ill. saját oktató-kutató laboratóriumában egy laboratóriumi és egy félüzemi automatizált szakaszos reaktor rendszer irányítása kapcsán foglalkozik az irányítási struktúra tervezésével, az alapszintű irányítási algoritmusok kidolgozásával és az eljárás irányítás ill. receptúra tervezés kérdéseivel⁴⁴. A szakaszos irányítási feladatok megoldásának igen fontos lépése a batch analízis, melynek kidolgozója - a tanszékkel ezen területeken közösen dolgozó - Molnár Ferenc (BatchControl Kft).

5. Folyamatfelügyelet, hibadetektálás és diagnosztika

A komplex ipari folyamatrendszerek felügyelete, a hibák detektálása és a folyamat diagnosztika egyaránt számítógépes támogatást, és speciális, a rendszerek sajátosságaihoz illeszkedő módszereket igényel.

5.1. Modell alapú diagnosztika

A dinamikus modellek felhasználásán alapuló diagnosztika a rendszer- és irányításméletben is igen népszerű, gyorsan fejlődő terület. A folyamatrendszerek modell alapú diagnosztikája a rendszerek speciális szerkezetét és tulajdonságait az alkalmazott modell segítségével írja le.

Szederkényi Gábor és munkatársai (SZTAKI) hőcserélők szürke doboz állapotér modelljét használták fel paraméterbecslésen és predikción alapuló diagnosztikai eljárások kifejlesztésére és vizsgálatára⁴⁵. Ugyanitt a hibás működési módokat is leíró, mérnöki elveken felépülő dinamikus állapotér modellt színes Petri háló modellé alakítva használták biztonsági eljárások modell alapú verifikációjára Hangos Katalin és munkatársai⁴⁶, akik a Paksi Atomerőmű primér és szekunder köre közötti hűtőközeg átfolyási hibaeseményt detektáló eljárást vizsgálták.

A komplex folyamatrendszerek leírásának egy napjainkban kifejlődő hatékony módszere az úgynevezett többléptékű (multi-scale) modellek alkalmazása¹⁰. Az ilyen modellek különösen előnyösen alkalmazhatók modell alapú diagnosztikára, amelynek szép példái az MTA SZTAKI Hangos Katalin vezette, és a University of Queensland Ian Cameron vezette csoportjainak együttműködéséből születtek^{47,48}.

Üzemanyag cellák monitorozására és állapotuk szabályozására is kiválóan alkalmazhatók a folyamatmodellek, ilyen célra Inzelt György és munkatársai (ELTE) fejlesztettek ki speciális szimulációs módszereket⁴⁹.

5.2. Operátorokat támogató rendszerek (OSS)

Az operátorok sikeres munkájának egy sarokköve a kritikus helyzetek megfelelő kezelése és a felelős döntéshozatal minden problémás szituációban. A gyors és sikeres döntéshozatal egyik kulcsa az, hogy a megfelelő adatok szükséges mennyiségben és könnyen elérhetőek legyenek. Az operátortámogató rendszerek alkalmazásának köre az egész szervezetet felöleli nem pedig különálló üzemi egységekre, feladatokra fókuszál, emellett funkciójuk nem merülhet ki csupán az adatelemzésben hanem fontos feladatuk az ember-gép kapcsolat megteremtése is⁵⁰.

5.3. Ütemezés, ellátási láncok

Ebben a törekény és változó gazdasági helyzetben az ipari termelési lépések tervezése és hosszú időtávú előrejelezése kiemelt fontosságú terület. Ehhez megfelelő optimalizálási eszközök szükségessé válnak az üzleti lehetőségek meghatározására. Ezért az AspenTech az ipar igényei szerint fejlesztette a PIMS (Process Industrial Modelling System) nevű optimalizálási keretrendszerét. Ebben az üzemeket (vegyipari gyárakat, olajfinomítókat) egy-egy lineáris egyenlet és egyenlőtenségrendszer reprezentálja. A PIMS a lineáris programozás eszközeit használva biztosítja a globális szélsőérték elérését finomítók, petrokémiai rendszerek működtetésének optimalizálásakor. Az ütemezési feladatok megoldásánál használt keretrendszerek a napi termelést és logisztikai feladatok ellátását segítik, miközben szem előtt tartják az optimalizálásakor meghatározott célt. Különböző elemzések alapján azt mondhatjuk, hogy egy általános (ezzel egyidejűleg komplex) modell alkalmazása helyett ezen a területen is az egyre nagyobb komplexitásúknak köszönhetően a hierarchikus modellezési elveket követő többszintű modellek alkalmazása várható a közeljövőben.

A hazai kutató műhelyek e céloknak megfelelően fogaladjak a gráf alapú probléma reprezentációkon alapuló⁵¹, illetve korlátok kezelésére alkalmas algoritmusok⁵² fejlesztésével és környezeti szempontokat is figyelembe vevő ellátási rendszerek optimalizációjával⁵³.

5.4. Termeléstámogató rendszerek

A termeléstámogató (MES) rendszereket általában a vállalatirányítási rendszerek (ERP) és a folyamatirányító rendszerek közé pozícionálják. Céljuk az üzleti folyamatok optimalizálása, a termékminőség és a folyamat megbízhatóságának javítása a vevői panaszok és validálási procedúra munkai igényének csökkentése mellett. Az iparban a következő termelésirányítási rendszerek terjedtek el széles körben: az ABB cég IT production planning, Honeywell Experion PKS-Optivision, Metso DNA MES, Tietoenator TIPS and Siemens Simatic IT-Systems. E területen fontos megemlíteni az ISA-95 szabványt melynek célja, hogy megfelelő útmutatót adjon a termelő vállalatok számára az előbb említett termeléstámogató és folyamatirányító, illetve a vállalatirányítási rendszerek integrálásához. Ezt az integrációt támogatják a teljes vállalatot átfogó adattárházak (mint például az OsiSoft PI rendszere), melyek integrálják a különböző adatforrásokat megfelelő információkat szolgáltatva a döntéshozók számára⁵⁴.

6. Folyamatszintézis és tervezés

A folyamatrendszerek tervezése, azaz a műveleti sorrendeknek és az optimális műveleti paramétereknek a meghatározása egymással szorosan összefüggő, esetenként komplex, rendkívül sok korlátot és akár ellentmondó célfüggvényeket figyelembe vevő optimalizációs feladatként is értelmezhető. Az energia- és anyagtakarékos, azaz környezetbarát kémiai technológiai rendszerek tervezése alkalmas módszereket, illetve a kapcsolódó matematikai optimalizálási technikákat nagyon jól áttekintik Inczédy János e folyóiratban korábban megjelent tanulmányai^{7,8}.

6.1. Automatikus szintézis és optimalizációs algoritmusok

A folyamatszintézis a tervezési folyamat legelső tevékenysége, melynek célja, hogy olyan struktúrákat vagy folyamatábrákat hozzon létre, melyek megfelelnek a tervezés céljainak. Természetesen a folyamat tervezője arra törekszik, hogy az eredményül kapott folyamathálózatok ne csak technikailag legyenek megvalósíthatóak, de egyben teljesítsék az összes technikai, társadalmi, környezetvédelmi, és/vagy jogi előírást és követelményt is. Mindkét megközelítésnek (konceptcionális és algoritmikus) létjogosultsága, sőt meghatározott helye van a folyamattervezés különböző stádiumában¹.

A szintézis során elvileg minden potenciálisan generált megoldást (különböző konfigurációk, kapcsolási sorrendek, eltérő típusú elválasztási eljárások, segédanyagok alkalmazása) meg kell vizsgálni. A lehetséges kombinációk nagy száma miatt, e gyakran megvalósíthatatlannak tűnő számítást olyan "szuperstruktúra" és olyan különleges algoritmus segítségével lehet csak megvalósítani, melyben minden számbajóható művelet típus, minden kapcsolati lehetőség, stb. hatékonyan kezelhető. Nem véletlen, hogy e nem triviális, összetett feladat megoldását támogató eszközök kutatása rendkívül aktív terület. Az S- és P-gráfokat⁵⁵ kidolgozó Friedler Ferenc által vezetett műhelyben folyamatosan születnek hazai eredmények a szétválasztási hálózatok szintézise⁵⁶, a hőcserélő hálózatok szintézise⁵⁷, kémiai reakciók mechanizmusainak meghatározása⁵⁸ területeken, melyekhez használt lineáris és nemlineáris vegyes egész matematikai programozási feladat megoldók (MINLP = mixed integer nonlinear programming) kidolgozása is kapcsolódik^{59,60}.

A garantált optimumot nyújtó optimalizációs algoritmusok fejlesztésén túl a problémák komplexitása miatt felmerül a heurisztikus keresési eljárások alkalmazása is. Ezen a téren evolúciós algoritmusok kerültek előtérbe⁶¹, melyek egy speciális változata a nehezen definiálható és ellentmondó célok kezelésére is alkalmas⁶².

6.2. A részletes tervezés kérdései

A környezetbarát eljárások kifejlesztése az utóbbi évtizedben a folyamatszintézis új vezérlővel lett, vagyis a hangsúly eltolódott a keletkezett kémiai hulladékok kezeléséről a hulladék keletkezésének csökkentésére.

Ezek a fejlesztési irányok szintén igénylik a folyamatmérnökség eszköztárát:

- az áttérés a hulladékszegény^{63,64} és energiatakarékos folyamatok alkalmazására (pl. elválasztási rendszerek fejlesztése⁶⁵)
- keletkezett anyag- és energiahulladékok célirányos újrafelhasználása és visszaforgatása, az anyag- és energia-átalakító folyamatok mind teljesebb integrációjával.

7. Összefoglalás, a jövő kihívásai

A számítógéppel támogatott folyamatmérnökség eddigi nemzetközi és hazai fejlődése azt mutatta, hogy ez a már születésekor a számítástechnika és a vegyészmérnökség határán elhelyezkedő tudományterület, a jövőben még inkább interdiszciplinárisra válik. Az elmúlt két évtizedben olyan újabb tudományterületek eredményeit és megközelítési módjait integrálta magába, mint a számítástudomány, a mesterséges intelligencia, a rendszer- és irányításmélt, a jelfelforgozás, rendszer-biológia, környezettudomány, ökológia, és a menedzsment, hogy csak a legfontosabbakat említsük.

A jövő legfontosabb tudományos kihívásait a fent említett erős interdiszciplináris jelleg és annak tartalmi változásai hozzák létre. Ezeket a kihívásokat jellegük szerint csoportosíthatjuk.

- A már említett, különböző léptékszinteken vagy különböző technikákkal különféle feladatosztályokra felállított modellek, elért eredmények integrált kezelését és értelmezését célzó kutatások tartoznak az integrációs kihívások közé.
- Az új, a számítógépes folyamatmérnökség területén eddig még gyökeret nem eresztett társ-tudományterületek eredményeinek alkalmazása, illetve a számítógéppel segített folyamatmérnöki területen kifejlesztett módszerek és eszközök rokon tudományterületeken történő alkalmazása, valamint az ezekkel elérhető szinergetikus hatás szintén érdekes kihívásokat eredményezhet. Kezdeti, de még nagymértékben feltáratlan szinergetikus kihívást jelent a számítógéppel segített folyamatmérnökség és a környezettudomány, a rendszer-biológia, az ökológia, és általában az élettudományok kapcsolata.

A növekvő mértékű és viszonylag gyorsan változó összetételű interdiszciplináris jelleg nemcsak a tudományterület művelőinek és az eredmények alkalmazóinak jelent kihívást, hanem a tudományterületeket összefogó és menedzselő szervezeteknek is.

J. Patton pontosan e kihívásokra világít rá: „Folyamatmérnökként a következő kihívással kell szembenéznünk: az informatikus közösséggel szorosan együttműködve annak új tudományos eredményeire támaszkodva olyan módszertanokat kell kidolgoznunk, melyek a felhalmozott információból alkalmasak a maximális tudástöbblet kiaknázására. Ezzel egyidőben nem szabad elvesztenünk a folyamatmérnök szemléletünket, illetve a (vegyszmérnöki) szakmai tudást.”⁶⁶

Mindez természetesen további kihívásokat állít elénk. P.V. Dankwerts 1966-ban megfogalmazott szavaival élve: „Nagy hiba azt gondolni, hogy a vegyszmérnöki tudományok állandók. Valójában állandóan változnak.”⁶⁷

Bízunk benne, hogy e tanulmányban sikerült felvázolnunk a műszaki kémia, illetve a vegyszmérnöki tudományokhoz szorosan kapcsolódó folyamatmérnökség területén milyen eredmények születtek az elmúlt évtizedben, és mik a további fejlődés mozgató rugói. Ezzel reményeink szerint egy kicsit hozzájárulhattunk a számítógéppel segített folyamatmérnökség további hazai fejlődéséhez, és eredményeinek népszerűsítéséhez.

Köszönetnyilvánítás

A kutatómunkát részben a TÁMOP-4.2.2-08/1/2008-0018 (Élhetőbb környezet, egészségesebb ember - Bioinnováció és zöldtechnológiák kutatása a Pannon Egyetemen, MK/2) projekt és az OTKA támogatta a K67625 számú kutatási pályázattal.

Hivatkozások

1. Fonyó, Zs., *A Vegyipari folyamatvezetés koncepcionális kihívásai*, MTA Akadémiai r.tag, székfoglaló előadás, **2004**.
2. Charpentier, J., *Chemical Engineering Journal*, **2005**, 107, 3–17.
3. Abonyi, J., *Fuzzy Model Identification for Control*, Birkhauser Boston, **2003**.
4. Bausa, J.; Dünnerbier, G., *European Symposium on Computer Aided Process Engineering-16*, 3 - 8., **2006**.
5. KPMG International; *The Future of the European Chemical Industry*, **2010**.
6. Flecht, U.-H., *Chemical Engineering: Visions of the Word*. Elsevier, 41-66, **2003**.
7. Inczedy, J., *Magyar Kémiai Folyóirat*, **2007**, 113(1), 13-19.
8. Inczedy, J., *Magyar Kémiai Folyóirat*, **2007**, 113(2), 77-82.
9. MTA SZTAKI Folyamatirányítási Kutatócsoport, <http://daedalus.scl.sztaki.hu/PCRG/>
10. Hangos, K.M.; Cameron, I.T., *Process Modelling and Model Analysis*. Academic Press, London, UK., **2001**.
11. Hangos, K. M.; Cameron, I. T., *Computers & Chemical Engineering*, **2001**, 25(2-3), 237 - 255.
12. Hangos, K. M.; Szederkényi, G.; Tuza, Z., *Computers & Chemical Engineering*, **2004**, 28(1-2), 129 - 137.
13. Ingram, G.; Cameron, I. ; Hangos, K., *Chemical Engineering Science* **2004**, 59(11), 2171 - 2187
14. Lakner, R.; Hangos, K. ; Cameron, I., *Chemical Engineering Science* **2005**, 60(4), 1127 - 1142.
15. Leitold, A. ; Hangos, K. M., *Computers & Chemical Engineering* **2001**, 25(11-12), 1633 - 1646.
16. Szederkényi, G.; Kristensen, N. R.; Hangos, K. M. ; Jørgensen, S. B., *Computers & Chemical Engineering*, **2002**, 26(4-5), 659 - 670.

17. Lakatos, B. G., *Chemical Engineering Science*, **2008**, 63(2), 404 – 423.
 18. Lakatos, B. G.; Mihálykó, C. ; Blickle, T., *Chemical Engineering Science*, **2006**, 61(1), 54 – 62.
 19. Lakatos, B. G. *Chemical Engineering Science*, **2001** 56(2), 659 - 666.
 20. Lakatos, B. G.; Mihálykó, C. ; Blickle, T. *Chemical Engineering Science* **2006** 61(1), 54 – 62.
 21. Lakatos, B. G.; Sapundzhiev, T. J. ; Garside, J. *Chemical Engineering Science* **2007** 62(16), 4348 - 4364.
 22. Lang, P. ; Modla, G. *Chemical Engineering Science* **2006** 61(13), 4262 - 4270.
 23. Modla, G. ; Lang, P. *Chemical Engineering Science* **2008** 63(11), 2856 - 2874.
 24. Modla, G.; Lang, P. ; Denes, F. *Chemical Engineering Science* **2010** 65(2), 870 – 881.
 25. Mizsey, P.; Hau, N.; Benko, N. ; Kalmar, I.; Fonyo, Z., *Comp. Chem.Engng*, **1998**, 22, S427-434.
 26. Kencse, H.; Mizsey, P. *In 17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*; V. Plesu ; P. S. Agachi, Ed.; Elsevier, **2007**, pp. 883 – 888
 27. Lang, P.; Modla, G.; Kotai, B.; Lelkiz, Z.; Moszkowicz, P., *Computers & Chemical Engineering* **2000**, 24(2-7), 1 429 - 1435.
 28. Ulbert, Z.; Lakatos, B. G., *European Symposium on Computer Aided Process Engineering-12*, **2002**, pp. 985 - 990.
 29. Ulbert, Z.; Lakatos, B., *Chemical Engineering Science*, **2005**, 60(13), 3525 - 3536.
 30. Gál, T.; Lakatos, B. G. *European Symposium on Computer-Aided Process Engineering-14*, **2004**, 655 - 660.
 31. Fazekas, C.; Szederkényi, G.; Hangos, K. *Nuclear Engineering and Design* **2007**, 237(10), 1071 - 1087.
 32. Árva, P.; Szeifert, F., *Magyar Kémikusok Lapja*, **1981**, 36, 648-654.
 33. Balasko, B.; Nemeth, S.; Janecska, A.; Nagy, T.; Nagy, G.; Abonyi, J. *17th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*; **2007**, pp. 895 - 900.
 34. Chován, T.; Markovits, I.; Farkas, B.; Nagy, K.; Nagy, L.; Nyíri, K.; Szeifert, F., *In 16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*; **2006**.
 35. Fazekas, C.; Szederkényi, G.; Hangos, K. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, **2008**, 55, 2643-2653.
 36. Abonyi, J.; Feil, B., *Cluster analysis for data mining and system identification*; Birkhauser, **2007**.
 37. Dióspatonyi, I.; Syposs, Z.; Viczián, Z.; Kollár, G. & Láng-Lázi, M. *Computers & Chemical Engineering* **2000**, 24(2-7), 1031 - 1036.
 38. Kemény, S.; Deák A., *Kísérletek tervezése és értékelése*, Műszaki Könyvkiadó, **2000**.
 39. Hangos, K.; Tuza, Z. ; *Computers & Chemical Engineering*, **2001**, 25, 1521 - 1536
 40. Szederkényi, G.; Kristensen, N. R.; Hangos, K. M.; Jørgensen, S. B. ; *Computers & Chemical Engineering*, **2002**, 26, 659 - 670
 41. Hangos, K.M. ; Bokor, J. ; Szederkényi, G. ; *Analysis and Control of Nonlinear Process Systems*. Springer-Verlag, London, **2004**.
 42. Mizsey, P.; Emtir, M.; Racz, L.; Lengyel, A.; *European Symposium on Computer Aided Process Engineering-13* **2003**, 491 - 496.
 43. Holanda, B.; Domokos, E.; Rédey, Á. ; Fazakas, J. ; *Computers & Chemical Engineering*, **2008**, 32, 1270 - 1278
 44. Madár, J.; Szeifert, F.; Nagy, L.; Chován, T. & Abonyi, J. (2003), *Symposium on Computer Aided Process Engineering-13*, Elsevier, , pp. 467 - 472.
 45. Weyer, E.; Szederkényi, G.; Hangos, K.; *Control Engineering Practice* **2000**, 8, 121 – 131.
 46. Németh, E.; Bartha, T.; Fazekas, C.; Hangos, K.; *Reliability Engineering & System Safety* **2009**, 94, 942 - 953
 47. Németh, E.; Cameron, I. ; Hangos, K.; *Computers & Chemical Engineering* **2005**, 29, 783 - 796
 48. Németh, E.; Lakner, R.; Hangos, K. ; Cameron, I. ; *Information Sciences* **2007**, 177, 1916 - 1930
 49. Kriston, Á.; Inzelt, G.; Faragó, I. ; Szabó, T. ; *Computers & Chemical Engineering*, **2010**, 34, 339 - 348
 50. Pach, F. P.; Feil, B.; Nemeth, S.; Arva P.; Abonyi, J., *IEEE Trans. On Systems, Man and Cybernetics, Part – A*, **2006**, 36 (1), 136-153
 51. Hegyháti, M.; Majozi, T.; Holczinger, T. & Friedler, F. *Chemical Engineering Science* **2009**, 64(3), 605 - 610.
 52. Farkas, T.; Valentinyi, Z.; Rév, E. & Lelkes, Z., *18th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, **2008**, 205 - 210.
 53. Lam, H. L.; Varbanov, P. S. & Klemes, J. J. *Computers & Chemical Engineering* **2010**, 34(5), 782 - 792.
 54. Abonyi, J., *Adatbányászat – a hatékonyság eszköze*, Computerbooks kiadó, **2006**.
 55. Brendel, M. H.; Friedler, F. & Fan, L. T. , *Computers & Chemical Engineering* 2000, 24(8), 1859 - 1864.
 56. Heckl, I., F. Friedler, and L. T. Fan, *Computers & Chemical Engineering*, **2010**, 34(5), 700-706.
 57. Heckl, I., F. Friedler, and L. T. Fan, *Heat Transfer Engineering*, **2005**, 26(5), 25-41.
 58. Fan, L. T., B. Bertok, and F. Friedler, *Computers and Chemistry*, **2002**, 26, 265-292.
 59. Szitkai, Z., Lelkes, Z., Rév E., Fonyó, Z., *Computers and Chemical Engineering*, **2002**, 26, 1501-1506.
 60. Farkas, T.; Rev, E. & Lelkes, Z. *Computers & Chemical Engineering* **2005**, 29(10), 2180 - 2197.
 61. Csukas, B.; Balogh, S. *11-th European Symposium on Computer Aided Process Engineering* **2001** 381 - 386.
 62. Madar, J.; Abonyi, J. & Szeifert, F., *Computers & Chemical Engineering* **2005**, 29(7), 1591 – 1597
 63. Mizsey P., Fonyó Zs., *Magyar Kémikusok Lapja*, **1997** 457-465.
 64. Mizsey, P., A. Szanyi, A. Raab, J. Manczinger, Z.Fonyo, *Computer Aided Chemical Engineering*, **2002** 10, 121-126.
 65. Emtir, M., Rev, E., Fonyo, Z., *Applied Thermal Engineering*, **2001** 21(13-14)1, 299-1317
 66. Jack Ponton, *Chemical Engineering Science*, **1995**, 50(24) 4045-4059.
 67. K. Wintermantel, *Chemical Engineering Science*, **1999**, 54 1601–1620.
-

Computer-aided process engineering – an overview of the Hungarian and international results, and the challenges of the future

The term ‘Process Systems Engineering’ may be traced back at least as far as the early 1960s. Process engineering covers all the necessary knowledge required for defining, designing, implementing and optimizing any process where physical, chemical and/or biological transformation of materials occur.

It is a cross-disciplinary science organized around fundamental subjects (mass and heat transfer, fluid mechanics, chemical reactors theory, mass and heat balances, distillation, filtration and other separation methods...). But it is also concerned with the development of specific methods (coupled transport phenomena, modeling, process control, systemic approach...). Initially developed in response to the needs of the oil industry, process engineering is concerned with a diversity of other branches today:

- fine chemistry and related activities,
- agri-food, biology, pharmacy and cosmetics industries,
- specialized materials (glass, cement, paper...) and materials for microelectronics,
- the protection of the environment and water treatment.

During the last decade, a major shift has begun in the chemical and process industry, since there is an urgent need for new tools which are able to support the optimization of already operating and new production technologies. Approaches of this shift differ from company to company but one common feature is that it requires the intensive communication between design, manufacturing, process control, marketing and management. Such communication should be centred on modelling and simulation, which integrates not only the whole product and process development chain, but all the process units, plants, and subdivisions of the company. Hence, engineers and directors of leading companies, e.g. DuPont and Dow Chemical, think that “model integrates the whole organization”. They believe that the extensive use of models is the way that data, information, and knowledge should be conveyed from research to engineering, to manufacturing, and on to the business team. According to that, modelling and simulation will have a much greater role in bio-, chemical, and process engineering; it is prognosticated as a key feature of modern process maintenance in the future. Officials of AspenTech and other companies dealing with simulation technologies talk about “life-cycle modelling” and integrated modelling technology, i.e. a model that is applied at every level of a technology.

Nowadays, the task of process engineers is to design, construct and operate complete systems. By complete systems we mean both processes and plants that produce products that fully meet the customers needs. Both the needs of customers as well as the society as a whole have an important effect on the process industry – these needs largely determine what products are produced and how they are produced. These needs determine the challenges that chemical and process engineering have to face and the know-how process engineers need to have.

In the words of P.V. Danckwerts in 1966: ‘It will be a great mistake to think of the content of chemical engineering science as permanently fixed. It is likely to alter greatly over the years in response to the changing requirements of industry and to new scientific discoveries and ideas for their application’.

As an engineering discipline based on scientific principles, chemical (and process) engineering has two main tasks:

a.) to model subsystems using the theoretical and methodological scientific knowledge. In this respect, chemical engineering is not different from the natural sciences.

b.) to develop methods and procedures, which allow real systems in all their complexity to be designed and constructed even if not all of the subsystems have been precisely modelled due to a lack of a thorough knowledge of the underlying physics and chemistry.

Nowadays there is a need for further development both in the descriptions of subsystems and also in the methods and tools for designing overall systems.

The research area of computer-aided process engineering has emerged from chemical engineering science, that has a long-lasting and successful past in Hungary. The paper overviews the results and achievements over the past 10 years of the Hungarian schools in the area founded by the Hungarian pioneers of computer-aided process engineering, Péter Árva, Pál Benedek, Tibor Blicke, Zsolt Fonyó and Iván Pallai.

The results are described along the topics of computer-aided process engineering that are actively and successfully cultivated by the Hungarian schools: modelling and model analysis including first principles and data-driven modelling, identification, process data mining, process control, process monitoring and diagnosis, together with process synthesis, design and optimization. An extensive reference list complements the paper.