

Statikus módszerektől az adaptív tanulásig: hatékonyabb kísérlettervezés a vegyipari folyamatoptimalizálásban

From rigid plans to adaptive learning: modernizing design of experiments in chemical process optimization

TÁLOSI Gréta^{1,2}, KUMMER Alex¹, ELLER Zoltán², TARCSAY Bálint Levente¹

¹Pannon Egyetem, Mérnöki Kar, Folyamatmérnöki Intézeti Tanszék, 8200 Veszprém, Egyetem u. 10., www.uni-pannon.hu

²MOL Magyar Olaj- és Gázipari Nyrt., 1117 Budapest, Dombóvári út 28., www.mol.hu

ABSTRACT

Industrial process development is increasingly constrained by cost and time pressures, while demanding accurate and robust optimization. Traditional Design of Experiments (DOE) offers structured, interpretable results but is limited in highly nonlinear or complex systems. This study benchmarks classical DOE against model-based strategies using Bayesian Optimization in a simulated first-order exothermic batch reaction. Reactor temperature, wall temperature, and initial concentration defined the design space, and Gaussian Process surrogate models enabled consistent evaluation across all designs. Performance was assessed via predictive accuracy, global uncertainty, optimization reliability and experimental cost. Classical DOE methods showed low uncertainty only in the vicinity of the sampled points, while failing to reliably identify the global optimum even with more experimental runs. In contrast, model-based DOE outperformed classical designs, yielding 27% lower global predictive uncertainty and achieving a 50% reduction in the distance between the predicted and true optimum, demonstrating superior predictive accuracy and optimization reliability. These findings underscore the potential of adaptive, model-guided DOE to accelerate process development under stringent industrial constraints.

Keywords: Design of Experiments, Bayesian Optimization, Gaussian Process, surrogate modelling, chemical process optimization

ÖSSZEFOGLALÓ

A vegyipari folyamatfejlesztés egyre nagyobb költség- és időnyomás alatt áll, miközben pontos és robusztus optimalizálásra van szükség. A hagyományos kísérlettervezési (Design of Experiments - DOE) módszerek strukturált és értelmezhető keretet adnak, de erősen nemlineáris vagy komplex rendszerekben korlátozottak. Jelen tanulmány a klasszikus DOE módszereket és a modell vezérelt Bayesi optimalizálást hasonlítja össze egy elsőrendű exoterm reakció szimulációjában. A tervezési tér a reaktor- és falhőmérsékletből, valamint a kiindulási koncentrációból állt, az eredmények konzisztens vizsgálatát pedig Gauss-folyamat közelítő modellek illesztése biztosította valamennyi módszerre. A klasszikus DOE-módszerek csak a kísérleti pontok környezetében mutattak alacsony bizonytalanságot, miközben a globális optimumot még több kísérleti futás árán sem találták meg megbízhatóan. Ezzel szemben a modell vezérelt DOE 27%-kal alacsonyabb globális bizonytalanságot és 50%-kal kisebb eltérést ért el az optimumtól, bizonyítva nagyobb prediktív pontosságát és megbízhatóságát az optimumkeresésben. Ez kiemeli az adaptív, modell vezérelt megközelítés robusztusságát és adat-hatékonyágát, alátámasztva alkalmazhatóságát az ipari folyamatfejlesztés gyorsításában.

Kulcsszavak: Kísérlettervezés, Bayesi optimalizáció, Gauss-folyamat, közelítő modellezés, vegyipari folyamatoptimalizálás