

Ph.D. értekezés tézisei

**Kémiai és bioipari adatrendszerek és
folyamatok minőségellenőrzésének
informatikai eszközei**

Viczián Gergely

okleveles villamosmérnök-közgazdász

Témavezető:

Kollárné Dr. Hunek Klára

Konzulens:

Molnárné Dr. Jobbágy Mária

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Kémiai Informatika Tanszék, 2003.

Bevezetés és célkitűzés

A kémiai, vegyi és bioipari adatrendszerek minőségellenőrzésének bőséges irodalma van, mint ahogyan azt a téma jelentősége meg is kívánja. Igen fontos, hogy a készülékek, folyamatok tervezésénél és irányításánál minden esetben konzisztens és megfelelően pontos adatokat, adatrendszereket használjunk.

A számítógépes grafikának az utóbbi évtizedben történt robbanásszerű fejlődésével a korábbi – elsősorban statisztikai tesztértékeket megadó – vizsgálatokon kívül ill. mellett – különösen ipari felhasználások esetén – egyre inkább előtérbe kerültek az adat-megfelelőségre vonatkozó számítógépes vizualizációs módszerek. Gyors, és sokszor az interaktivitást is biztosító visszajelzést jelentenek ezek a kiinduló adatpontok mérésétől kezdve, az adatrendszerek összehasonlításán át, egészen az ipari folyamatirányításig, beleértve ebbe a modern folyamatszempléltű minőségirányítás legfontosabb pontjait is.

Villamosmérnök-informatikusként és közgazdászként, a BME Vegyészmérnöki Karának Kémiai Informatika Tanszékén töltött 3 év alatt, doktori munkám céljával tűztem ki, hogy azokat az informatikai eszközöket - elsősorban szoftvereket és módszereket - fejlesztem, amelyek a kémiai és bioipari adatrendszerek és folyamatok minőségellenőrzésének ill. minőségirányításának szempontjából jelentősek. E témákban a három legfontosabb fejlesztésem:

- Terner rendszerek robbanási határgörbéinek pontos jellemzését és az idetartozó mérési adatsorok minőségbiztosítási szempontból legjobb - online adatok alapján - kézikönyv szerkesztési módszerét.
- Különböző hőmérsékleten ill. nyomáson mért terner robbanási határgörbék alapján a robbanási határfelület megjelenítésére tervezett és módosított módszeremet.
- Végül az ISO900X:2000 szabványcsaládban kiemelten támogatott folyamatszempléltű minőségirányítás legfontosabb input/output elemeinek, a vevői követelményeknek ill. a vevői megelégedettségnek a regisztrálására és vizsgálatára kialakított Internetes lehetőségeket tárgyalom néhány példán.

A terner rendszerek robbanási tartományainak vizsgálatához az adatokat a berlini Bundesanstalt für Materialforschung- und prüfung (BAM) szolgáltatta, ahol magam is részt vettem egyes mérések kivitelezésében. A folyamatszempléltű minőségirányítás I/O rendszerének Internetes vizsgálatában a statisztikai szempontból és a számítógépes feldolgozás jellemzőinek kijelölése szempontjából megfelelő elemszámú minta érdekében a fizikai-kémiai és

informatikai adatrendszerek vizsgálatán túl elsősorban élelmiszeripari alkalmazásokat vontam be.

A munka rövid összefoglalása

A minőségbiztosítási módszerek alkalmazása az olyan adatbázisok esetében a legfontosabb, ahol az adatbázis adatai mérésekből származnak, az adatbázis felhasználása pedig potenciálisan életveszélyes vagy súlyos gazdasági következményekkel járó helyzetekhez történik. Tipikusan ilyen – potenciálisan életveszélyes – helyzetekre vonatkozó eset például a robbanásveszélyes anyagok adatbázisa. Súlyos gazdasági következményeket vonhat például maga után egy-egy nem megfelelően alkalmazott piackutatási módszer vagy adatfeldolgozás.

Vizualizációval kapcsolatos kutatásaim gyakorlati alkalmazására nyílt lehetőség a berlini BAM intézet által karbantartott terner gázelegyek robbanási-tartomány adatbázisán. A témakör közelebbi megismerése céljából laboratóriumi méréseket végeztem (lánghossz-megfigyeléses módszerrel, a prEN1839T eljárás alapján robbanáshatár görbéket mértem), majd az intézetben alkalmazott minőségbiztosítási-vizualizációs Triangle szoftver bővítését végeztem, végül pedig háromszögön értelmezett felületek megjelenítésére készült programunkat alkalmaztam robbanási-tartomány vizualizációra.

A berlini BAM-ban fejlesztett Triangle szoftver az éghetőgáz/oxidátor/insertgáz terner rendszerek mérési adatainak feldolgozásához nyújt segítséget. A határgörbe a robbanási tartomány körül a mérési pontok közötti interpolációval jön létre. A határgörbe létrehozása után lehet meghatározni a doktori értekezésemben bemutatott karakterisztikus egyeneseket és jellemzőket, és lehet ábrázolni az adatokat derékszögű és szabályos háromszög diagramokban.

A Triangle programot a BAM munkatársai kezdték fejleszteni a CHEMSAFE[®] adatbank adatbevitelére számára. A helyi adottságoknak megfelelően ez egy Microsoft Excellel működő Visual Basic for Applications program formájában jött létre. Ezt a programot fejlesztettem tovább doktori munkámban több, elsősorban a vizualizációnak és az adatok egyéb minőségbiztosítási szempontjainak igényei szerint. Kiegészítettem a programot a minőségbiztosítási célokat szolgáló sztöchiometriai arányt meghatározó és ábrázoló részekkel. Az eredetileg kifejlesztett VBA program felhasználása során számos síkgörbe közelítési probléma merült fel, ezek feltérképezése és megoldása is doktori munkám keretében történt.

A robbanáshatár-görbe pontjainak kimérésekor segítséget nyújt, mint becsült kiindulási érték, hogy a sztöchiometriai egyenes általában keresztülhalad a robbanáshatár-görbe fordulópontján. a sztöchiometriai koncentráció elméleti úton való kiszámításával előzetes becslést lehet kapni, hogy az alsó illetve felső robbanási határokat milyen értékek közelében keressük. Ugyanilyen jelentőségű a sztöchiometriai koncentráció ismeretének adatbázis-minőségellenőrzésben

való alkalmazása. Már létező adatsorok ellenőrzése során, ha a robbanáshatár-görbe és a sztöchiometriai egyenes nincs a fent leírt viszonyban, az adatok részletesebb ellenőrzése vagy ellenőrző újra mérés ajánlott.

A Triangle programban végrehajtott bővítéseim során végül igény merült fel egy, a CHEMSAFE[®] adatbázis alapján készítendő nyomtatott kézikönyv létrehozására. Ennek érdekében olyan módon kellett kiegészítenem a Triangle programot, hogy több adatbázis eredményét egy szerkeszthető és később nyomtatható dokumentumba tudja összefűzni. E kiinduló feladat azonban a program egyéb vonatkozásaiban is további kiegészítéseket jelentett, mint például a háromszög és derékszögű diagrammok továbbfejlesztését.

A program automatikus vezérlése révén lehetőség nyílt nagy számú adatrendszer összehasonlítását igénylő adatbázis-minőségi vizsgálatok elvégzésére. Így például egy vizsgálati módszert dolgoztam ki a fordulópont-pótlás jóságának vizsgálatára a különböző görbeillesztési módszerek alkalmazása esetén. A vizsgálathoz egy valóságos, és teljes mérési rendszert módosítottam úgy, hogy elhagytam belőle egy, majd két további pontot a görbe fordulópontja közelében. Összehasonlítottam a különböző interpolációs eljárások és fordulópont-beszűrési módszerek eredményeként kapott eredményeket.

A terner rendszerek robbanáshatár-görbéinek megjelenítésekor felmerült a lehetőség, hogy amennyiben azonos rendszerekről különböző hőmérsékleteken vagy különböző nyomásokon több méréssorozat is rendelkezésre áll, egy, háromszögön értelmezett felületek megjelenítésére vezetésemmel korábban készült program, a Trigon segítségével a méréssorozatok által definiált robbanási határ felületet is megjelenítsük. A program kis módosításokkal bármilyen terner rendszer vizualizációjára alkalmas, munkám során a kémiai vizualizáció két területén alkalmaztam: terner gőz-folyadék egyensúlyi adatok, valamint háromkomponensű robbanáshatár felületek megjelenítésére. Ez utóbbi alkalmazásnál a fordulópont környékének leírásában egy új megoldást dolgoztam ki.

A Trigon program vezérlésének 3 szintje van:

- Turbo Vision (ablak/menü/egér vezérlésű) felhasználói interfész
- Parancssori vezérlés
- Külső program általi (pl. web szerveren való) vezérlés

A web-szerver vezérlési mód ad lehetőséget arra, hogy Internet oldalak segítségével a felhasználók távirányíthassák a programot. A távirányítható programok több szempontból is előnyösek, ezeknek természetesen csak egy része érvényesül az adott alkalmazás esetében, így e fejlesztésnek legfőképpen elvi jelentősége van.

Doktori munkám minden szoftverezési részéhez olyan dokumentálásnak kellett kapcsolódnia, amely a szoftverek ipari célú alkalmazását is lehetővé teszi. Ahhoz, hogy egy adott ipari szektor ilyen jellegű igényeit megfelelően lehessen kielégíteni, figyelembe kellett vennem a minőségbiztosítás, minőségirányítás idevonatkozó szabványait, azokat teljes komplex felépítésükben és alkalmazásukban tekintve. A kémiai és bioipari adatbázisok felépítése nem csak kísérleti mérésekkel lehetséges, doktori munkámban a marketingkutatáshoz tartozó igényfelmérési és adatgyűjtési feladatok egy élelmiszeripari célra készült, de általánosan alkalmazható informatikai megoldását is kidolgoztam.

Az Interneten történő adatgyűjtés során azonban sérül a reprezentativitás mintavételi feltétele, ezeket a torzulásokat vagy kontrollcsoport létrehozásával, vagy az elemzéskor korigálni kell. Doktori munkám keretében több olyan projektben is részt vettem, ahol az adatbázisok marketingkutató eredményeivel kerültek feltöltésre. Ezen projekteknél az adatbevitel minőségbiztosítása legjobban számítástechnikai megoldások alkalmazásával valósítható meg, így feladatom az informatikai háttér megteremtése volt.

Új tudományos eredmények

1. Algoritmust dolgoztam ki terner gázelegyek robbanáshatár-görbéinek interpolációs közelítésére, paraméteres vektor-spline függvényeket alkalmazva. A berlini BAM által kifejlesztett TRIANGLE programba az algoritmus által meghatározott függvényeket és szubrutinokat beépítettem, azok működését számos mért adatsoron pozitív eredménnyel teszteltem.
2. Terner robbanáshatár-görbék ábrázolásánál megvizsgáltam a különböző görbeillesztő és becselő eljárások hatását hiányzó fordulópontok esetén. Megállapítottam, hogy a hiányzó fordulópont extrapolációs közelítése általánosan nem megengedhető. Harmadfokú Hermit interpoláció.
3. A TRIANGLE program szabályos-háromszög-diagram outputjába beépítettem a sztöchiometriai koncentrációt meghatározó egyenes megjelenítésének választási lehetőségét.
4. A háromkomponensű gőz-folyadék egyensúlyi rendszerek tulajdonságainak megjelenítésére szolgáló, a BME Kémiai Informatika Tanszékén irányításom mellett kifejlesztett TRIGON programot Interneten keresztül vezérelhetővé fejlesztettem. A program nem Internetes verzióján alapuló, ugyancsak irányításom mellett kifejlesztett terner elegyek gáz-robbanás határfelületeinek megjelenítését végző TRIGON verzióra megoldottam a fordulópont környéki vizualizáció problémáját.
5. Internetes szoftver-megoldásokat fejlesztettem ki az ISO 9001:2000 minőségirányítási rendszer szabványban a folyamat-szemléletű minőségirányítás input és output elemeiből a legfontosabbak között felsoroltaknak, a vevői követelményeknek és megelégedettségnek az egzakt mérésére és regisztrálására. Ezen szoftver-megoldásaimat sikeresen alkalmazták a Magyarország szempontjából kiemelt jelentőségű agrár-élelmiszer ágazat öt különböző területén (áruházláncok, gyorséttermi hálózatok, zöldség és gyümölcs termelői vélemény-kutatások, zöldség, gyümölcs és hús fogyasztói magatartás-kutatások, rezisztens almafajta-vizsgálatok).
6. Ugyancsak a vevői követelmények kielégítésének és a vevői megelégedettség szem előtt tartásának céljából a TRIANGLE programhoz ipari szempontból megfelelő dokumentum könyvalakú automatikus nyomtatását terveztem meg, az ennek megfelelő szoftver-modulokat kifejlesztettem és a programba beépítettem.

Az eredmények gyakorlati hasznosítása

A munkám során kidolgozott megoldások nagy része máris alkalmazásra került a gyakorlatban.

A Triangle program általam továbbfejlesztett változatát adatgyűjtési folyamat részeként használják a Berliini Bundesanstalt für Materialforschung- und prüfung intézetben. A minőségbiztosított publikációs rendszerrel közel 200 adatrendszerrel tartalmazó kiadvány készítéséhez használták.

A marketingkutatáshoz kidolgozott automatizált Internetes megoldásaimat valóságos agrár-élelmiszeripari ágazatban végzett felmérések során alkalmazták a Szent István Egyetem Árukezelési és Áruforgalmazási tanszék kutatási projektjeiben.

A Trigon program táv-vezérelhető változata kísérleti jelleggel elérhető volt a Kémiai Informatika Tanszék Web-szerverén.

Köszönetnyilvánítás

Köszönetet mondok értékes tanácsaiért elsősorban témavezetőmnek, Kollárné Dr. Hunek Klárának (Kémiai Informatika Tanszék) és konzulensemnek, Molnárné Dr. Jobbágy Máriának (BAM), valamint az adatgyűjtési-feldolgozási és szoftverezési munkákban való együttműködésért diplomázóimnak: Kápolna Beátának és Heszberger Jánosnak. Munkámat sokan segítették tanácsokkal, ezért köszönettel tartozom a BME Kémiai Informatika Tanszék munkatársainak, a Villamosmérnöki Kar Elméleti Villamosságtechnika Tanszékéről Dr. Cséfalvay Klárának, a Berliini BAM Intézet Biztonságtechnikai Részlegében dolgozóknak és a Szent István Egyetem Árukezelési és Áruforgalmazási Tanszék munkatársainak.

Végül pedig munkám anyagi támogatásáért köszönetet szeretnék mondani a BME Vegyészmérnöki Kar Varga József Alapítványának, és az OTKA-nak (T033005, T030241).

Megjelent közlemények

Közlemények

1. Tóth, N., **Viczián, G.**, Viczián, Zs., Dióspatonyi, I.: Computer Network in Chemistry - Problems and results at the Chemical Engineering Faculty of the TU Budapest, Hung. Journal of Ind. Chem., Vol 27, p57-60, 1999
2. Dióspatonyi I., Horvai Gy., Tóth N, **Viczián G**, Schay D.: Computer network in education and research at the Chemical Engineering Faculty, TUB, Computers & Chemical Engineering, Vol 23. p116-119, 1999
3. Láng-Lázi M., Dióspatonyi I., **Viczián G.**, Heszberger J.: Thermodynamic consistency calculations on Internet, Hung. Journal of Ind. Chem., Vol. 27, p317-320, 1999
4. **Viczián G.**, Láng-Lázi M, Heszberger J, Dióspatonyi I., Kollár-Hunek K.: Graphic software for 3D consistency testing in thermodynamics, Hung. Journal of Ind. Chem., Vol 28, p311-318, 2000
5. **Viczián G.**, Molnárné-Jobbágy M., Heszberger J., Kollár-Hunek K.: Explosion areas of flammable substances and their numerical approximation, Hung. Journal of Ind. Chem., Vol 29, p143-148, 2001
6. Kollár G., Syposs Z., **Viczián G.**, Mészáros L., Kollár-Hunek K.: Quality management system as a tool of process control for food and agro industries, Hung. Journal of Ind. Chem., Vol 29, p135-138, 2001
7. Kollár G., **Viczián G.**, Syposs Z., Mészáros L., Hunek K.: Postharvest aspects in quality management system for fruit and vegetable production, Fruit, Nut and Vegetable Production Engineering, Inst. für Agrotechnik Bornim e.V. ISBN 3-00-008305-7, p351-355, 2001
8. Molnárné-Jobbágy, M., **Viczián, G.**: Software solution to produce the handbook "Explosion Range of Gas Mixtures – based on the CHEMSAFE® Database", Interner Report der Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung, Berlin, 2002
9. **Viczián G.**, Molnárné-Jobbágy M.: Gázelegyek robbanási területének és ezzel kapcsolatos jellemzők megjelenítésének informatikai problémái, Proc. of Műszaki Kémiai Napok '02, KE MÜKKI, ISBN 963-7172-95-5, p102-106, 2002
10. Kollár G., **Viczián G.**, Syposs Z., Mészáros L., Hunek K.: Aspekte der Nachernte Prozesse von Obst und Gemüse in Qualitätsmanagement Systemen, Obstbau, Ed.: Organ der Fachgruppe Obsbau im Bundesausschuss Obst und Gemüse, Bonn, Z-4055E, Vol. 27, 2002 (elfogadva)
11. Kápolna B., Szabó R., **Viczián G.**, Kollár G.: Internet based survey as I/O support in process approached QMS of food/agro industries, Hung. Journal of Ind. Chem., Vol 30, p229-234, 2002
12. **Viczián G.**, Molnárné-Jobbágy M., Kollár-Hunek K.: Gázelegyek robbanáshatár-mérési adatainak minőségellenőrzése informatikai eszközökkel, Proc. of Nemzetközi Vegyészkonferencia, Kolozsvár, ISBN 973-85809-8-6, p350-354, 2002
13. Kápolna B., Szabó R., Kollár G., **Viczián G.**, Kollár-Hunek K.: Élelmiszer fogyasztói szokások Internet alapú vizsgálata, Proc. of Nemzetközi Vegyészkonferencia, Kolozsvár, ISBN ISBN 973-85809-8-6, p146-150,2002

14. Molnárné-Jobbágy M., Bulin M., **Viczián G.**, Kollár-Hunek K.: TRIANGLE - ein Computer-Programm zur Darstellung und Auswertung der Explosionsbereiche von Dreistoffsystemen, Technische Überwachung Springer-VDI Verlag, Bd.44, Nr.1/2, S32-35, 2003

Előadások és poszterek nemzetközi konferenciákon

1. Tóth, N., **Viczián, G.**, Viczián, Zs., Dióspatonyi, I.: Computer Network in Chemistry - Problems and results at the Chemical Engineering Faculty of the TU Budapest, 4th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Bad Honnef, Germany, 1998
2. Dióspatonyi I., Horvai Gy., Tóth N, **Viczián G**, Schay D.: Computer network in education and research at the Chemical Engineering Faculty, Escape-9 Conference, Budapest, 1999
3. Láng-Lázi M., Dióspatonyi I., **Viczián G.:** Thermodynamic consistency calculations on Internet, 5th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Bad Honnef, Germany, 1999
4. Kollár, G., Syposs Z., **Viczián, G.**, Mészáros L., Kollár-Hunek, K.: Quality Management System as a tool of process control for food and agro industries, 8th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Bad Honnef, Germany, 2001
5. Molnárné-Jobbágy, M., **Viczián, G.**, Kollár-Hunek, K.: Explosion envelopes of flammable substances and their numerical approximation. 8th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Bad Honnef, Germany, 2001
6. **Viczián, G.**, Molnárné-Jobbágy, M., Heszberger J., Kollár-Hunek, K.: 3D visualization of T or P dependence in explosion surfaces, 8th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Bad Honnef, Germany, 2001
7. Kollár, G., **Viczián, G.**, Syposs Z., Mészáros L., Hunek, K.: Postharvest aspects in quality management system for fruit and vegetable production, 6th International Symposium on Fruit, Nut, and Vegetable Production Engineering, Potsdam, Germany, 2001
8. Kollár, G., **Viczián, G.**, Syposs Z., Kollár-Hunek, K., Kápolna B.: Information technology for Quality Management in process control of food and agro industries, Workshop on QM of special DS and Process Engineering in Chemistry and AGRO-Biotechnology, Berlin-Budapest, 2001
9. Molnárné-Jobbágy, M., **Viczián, G.**, Kollár-Hunek, K.: Explosion limits of flammable substances and their approximation – the Triangle program, Workshop on QM of special DS and Process Engineering in Chemistry and AGRO-Biotechnology, Berlin-Budapest, 2001
10. **Viczián, G.**, Molnárné-Jobbágy, M., Heszberger J., Kollár-Hunek, K.: Information technology of triangular surfaces in chemical database – the Trigon program, Workshop on QM of special DS and Process Engineering in Chemistry and AGRO-Biotechnology, Berlin-Budapest, 2001

11. Kápolna B., Kollár G., **Viczián G.**, Kollár-Hunek K.: I/O support in process approached QM systems of food/agro industries, 9th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Bad Honnef, Germany, 2002
12. Szabó R., **Viczián G.**, Kollár-Hunek K.: Internet based survey of meat consumption patterns in Hungary, 9th International Workshop on Chemical Engineering Mathematics, Bad Honnef, Germany, 2002

Előadások és poszterek hazai konferenciákon

13. Dióspatonyi I., **Viczián G.**: Kémiai és fizikai információs rendszerek az Interneten, BME Ipari Nyílt Nap, Budapest, 1999
14. Láng-Lázi M., **Viczián G.**, Heszberger J.: Termodinamikai ellenőrzés és a matematikai vizualizációs programok, MKN 2000 (Veszprém), p106, 2000
15. **Viczián, G.**, Molnárné-Jobbágy, M., Kollár-Hunek, K.: Háromkomponensű rendszerek robbanáshatár-görbéjének numerikus közelítési problémái, MKN 2001 (Veszprém), p106, 2001
16. Molnárné-Jobbágy, M., Heszberger J., **Viczián, G.**, Kollár-Hunek, K.: A Trigon program kiterjesztése robbanáshatár-felületek megjelenítésére, MKN 2001 (Veszprém), p92, 2001
17. **Viczián G.**, Kollár G., Kápolna B., Kollár-Hunek K.: Folyamatszemplélet a minőségirányításban – az I/O rendszer Internetes támogatása, MKN 2002 (Veszprém), p162, 2002
18. **Viczián G.**, Molnárné-Jobbágy M., Kollár-Hunek K.: Informatikai és matematikai eszközök alkalmazása gázelegyek robbanáshatár-méréseinek minősítésében, MKN 2003 (Veszprém), elfogadva, 2003
19. Kápolna B., **Viczián G.**, Kollár G., Kollár-Hunek K.: Informatikai eszközök az agrár-élelmiszer ágazat minőségirányításában, MKN 2003 (Veszprém), elfogadva, 2003

