



Dr. Volker Maag, Dr. Michael Bortz, Dr. Maksym Berezhnyi, Jasmin Kirchner, Dr. Alexander Scherrer, Esther Bonacker, Diana Ackermann, Dr. Tino Fleuren, Anna Hoffmann, Neil Jami, Dr. Rico Walter, Gregor Foltin, Prof. Dr. Karl-Heinz Küfer, Grete Kaffenberger, Dr. Neele Leithäuser, Dr. Peter Klein, Dr. Michael Schröder, Bastian Bludau, Dr. Heiner Ackermann, Dr. Kai Plociennik, Andreas Dinges, Dr. Jan Schwientek, Dr. Sebastian Velten, Rasmus Schroeder

OPTIMIERUNG

▪ MEDIZINISCHE THERAPIEPLANUNG

Entwicklung neuer Methoden für die klinische Therapieplanung auf Basis mehrkriterieller Optimierung

▪ OPTIMIERUNG IM VIRTUAL ENGINEERING

Modellierung physikalischer Zusammenhänge und technischer Prozesse und ihre Abbildung in Computerprogrammen in den Ingenieursdisziplinen

▪ OPTIMIERUNG VON UNTERNEHMENSSTRUKTUREN UND -PROZESSEN

Modellierung logistischer und organisatorischer Planungssysteme sowie die Entwicklung individueller Software-Komponenten

▪ MODELLIERUNG, SIMULATION UND OPTIMIERUNG IN DER VERFAHRENSTECHNIK

Individuelle Entwicklung von Software-Komponenten vom konzeptionellen Verfahrensentwurf über Prozess- und Apparatedesign bis zu Steuerungs- und Regelungsfragen





Zentrale Aufgabe der Abteilung Optimierung ist die Entwicklung individueller Lösungen für Planungs- und Entscheidungsprobleme in Logistik, Ingenieur- und Lebenswissenschaften in enger Kooperation mit Partnern aus Forschung und Industrie. Methodisch ist die Arbeit durch die enge Verzahnung von Simulation, Optimierung und Entscheidungsunterstützung geprägt. Unter Simulation wird dabei die Bildung mathematischer Modelle unter Einbeziehung von Design-Parametern, Restriktionen und zu optimierenden Qualitätsmaßen und Kosten verstanden. Die Entwicklung und Implementierung anwendungs- und kundenspezifischer Optimierungsmethoden zur Berechnung bestmöglicher Lösungen für das Design von Prozessen und Produkten sind Kernkompetenzen der Abteilung. Alleinstellungsmerkmal ist die enge Verzahnung von Simulations- und Optimierungsalgorithmen unter spezieller Berücksichtigung mehrkriterieller Ansätze sowie die Entwicklung und Implementierung interaktiver Entscheidungsunterstützungswerkzeuge. Insgesamt wird Optimierung weniger als mathematische Aufgabenstellung verstanden, sondern vielmehr als kontinuierlicher Prozess, welchen die Abteilung durch die Entwicklung adäquater Werkzeuge unterstützt. Die Forschungsschwerpunkte sind:

Optimierung von Unternehmensstrukturen und -prozessen

Das Portfolio umfasst Beratung und Unterstützung bei der Modellierung logistischer und organisatorischer Planungssysteme sowie die Entwicklung individueller Softwarekomponenten. Mit Optimierungsmethoden in eigenen Softwaretools werden Lösungsvorschläge zur Entscheidungsunterstützung erstellt, die den besten Kompromiss zwischen den konkurrierenden Planungszielen »Minimierung der Kosten« versus »Maximierung der Planqualität« bieten. Methodisch basiert auf ereignisdiskreter Simulation und kombinatorischer Optimierung beschäftigt sich dieser Schwerpunkt mit effizienten Strategien für die Transportlogistik, mit Layoutfragen, mit der Planung und Steuerung von Produktions- und F&E-Prozessen und mit Modellen und Algorithmen zur Planung und Disposition von Prozessabläufen im Krankenhaus und im Gesundheitswesen.

Optimierung in der medizinischen Therapieplanung

Die Abwägung zwischen der Aussicht auf Heilung von schwerer Krankheit und der Vermeidung von Nebenwirkungen bei der Therapieplanung stellt Mediziner im Alltag vor schwere Planungsaufgaben. Der Forschungsschwerpunkt Interaktive Therapieplanung entwickelt für die klinische Therapieplanung neue Methoden auf Basis mehrkriterieller Optimierung. Die Gruppe entwickelt innovative Planungskomponenten für die ionisierende Strahlentherapie, die Ultraschalltherapie, die Radiofrequenzablation und die systemische Therapie in der Senologie, welche medizinischen

Physikern bzw. den behandelnden Ärzten in einer besonders einfachen Weise die Abwägung zwischen Chancen und Risiken der Behandlung gestattet.

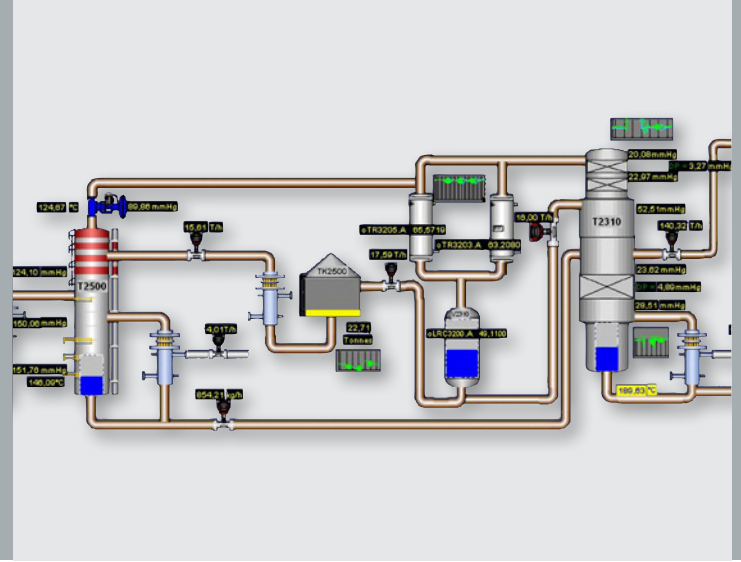
Optimierung im Virtual Engineering sowie Modellierung, Optimierung und Simulation in der Verfahrenstechnik

Der Einsatz mathematischer Optimierungsmethoden in den Ingenieursdisziplinen setzt auf einer Modellierung von physikalischen Zusammenhängen und technischen Prozessen und ihrer Abbildung in Computerprogrammen auf. Optimierung unterstützt Ingenieure dabei, Produkte und Prozesse so auszulegen, dass sie Zielvorstellungen bezüglich Qualität und Kosten bestmöglich erfüllen. In den Projekten entstehen jeweils Softwarekomponenten zur simulationsgestützten Optimierung, welche die hochdimensionalen Aufgabenstellungen unter Nutzung speziell entwickelter Integrationstechniken von Simulations- und Optimierungsalgorithmen lösen. Mehrkriteriell optimierte Produkt- bzw. Prozesslayouts werden den Entscheidern in interaktiven Entscheidungsunterstützungswerkzeugen zur Begutachtung und Auswahl vorgestellt.

Das Jahr 2014 war für die Abteilung von Wachstum und hervorragendem wirtschaftlichem Erfolg geprägt; besonders hervorzuheben sind

- Start des Forschungs- und Entwicklungsprojekts HyDisC zum konzeptionellen Verfahrensentwurf unter Berücksichtigung von Kristallisationsprozessen im Auftrag der BASF SE
- Start des Verbundprojekts H2OPT zur energieeffizienten Auslegung und Steuerung von Pumpen in der Trinkwasserversorgung in Förderung durch das BMBF
- Fertigstellung des »RescueAnalyzer«, einer strategischen Analyse- und Simulationssoftware für Standortstrukturen im Notarztwesen, im Auftrag des Landes Rheinland-Pfalz
- Start einer Forschungskooperation mit der Merck KGaA in Darmstadt zur End-to-end-Simulation von Wertströmen in der Medikamentenproduktion

Im wissenschaftlichen Bereich zählt neben drei abgeschlossenen Promotionen die Genehmigung des BMBF-Projekts H2OPT zu den wesentlichen Erfolgen.



INES – INTERFACE BETWEEN EXPERIMENTS AND SIMULATION

1 *Chemische Produktionsanlage in Ludwigshafen*

2 *Screenshot eines Prozessleitsystems mit aktuellen Messwerten an den Messstellen*

Inhalt des Projekts INES – Interface between Experiments and Simulation – ist die Bereitstellung von Werkzeugen, für die datenunterstützte Modellierung und Simulation chemischer Anlagen. Die Zielstellung besteht darin, Parametereinschätzungen auf Grundlage von archivierten Daten zu machen. Dazu sollen aus vorhandenen Daten die verlässlichsten ausgewählt werden, um aufgrund dieser eine sinnvolle Modellanpassung vornehmen zu können. Dieses angepasste Simulationsmodell steht dann zur Verfügung, um das Design chemischer Prozesse zu optimieren.

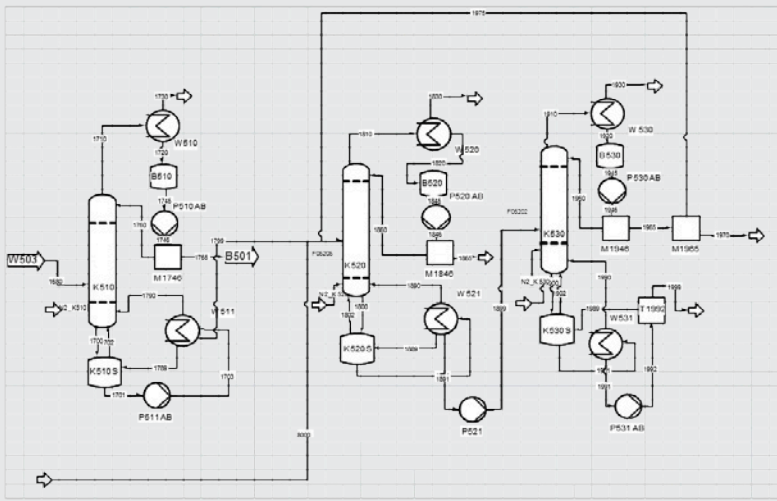
Die Verlässlichkeit der Daten wird in diesem Rahmen durch drei Kriterien beurteilt:

- keine Ausreißer
- stationäre Intervalle
- Erfüllung von Massenbilanzen

Ausreißer werden interaktiv entfernt, indem um den Median einer Zeitreihe ein Fenster definiert wird, das proportional zur Streuung des Medians (median absolute deviation) gewählt ist. Dies erlaubt dem Nutzer eine auf den jeweiligen Kontext (Messgerät, Fehlerquellen) angepasste Ausreißerkennung. Stationäre Intervalle können mittels einer heuristischen Segmentierung der Datenreihe gewonnen werden. In diesem Zugang werden sogenannte Breakpoints dort gesetzt, wo sich die Mittelwerte benachbarter Intervalle statistisch am signifikantesten unterscheiden. Für diese Intervalle werden statistische Stationaritätstests mit anpassbaren Signifikanzniveaus durchgeführt.

Die Erfüllung von Massenbilanzen wird im Rahmen eines interaktiv konfigurierbaren Datenausgleichs behandelt. Für die vom Nutzer definierten Kontrollvolumina werden – sofern aufgrund einer redundanten Datenlage möglich – Massenbilanzen gerechnet. Ist keine Redundanz in den Daten vorhanden, kann diese entlang unterstützender Vorschläge der Software hergestellt werden, beispielsweise durch die Einrichtung weiterer Messstellen für definierte Ströme. Ist Redundanz erreicht, wird ein Datenausgleich basierend auf komponentenweisen Massenbilanzen durchgeführt. Die Statistik der Unterschiede zwischen den ausgeglichenen Größen und den ursprünglichen Messwerten kann Hinweise für systematische Fehler liefern.

Verschiedene Zeitintervalle können aufgrund dieser verschiedenen Kriterien untersucht und verglichen werden. Dieser Vergleich ermöglicht den Einsatz einfacher Methoden des Data Minings, um Zusammenhänge zwischen aggregierten Werten der verschiedenen Zeitintervalle – beispielsweise Mittelwerte oder Varianzen – zu erkennen. Diese aggregierten Größen werden auch in einem von der Simulation lesbaren Format zur Verfügung gestellt.



Der Prozesssimulator kann dann genutzt werden, um eine Modellanpassung vorzunehmen. Dieses angepasste Modell steht anschließend für eine weitergehende Optimierung zur Verfügung. In diesem Projekt wurde dafür auch ein Robustheitsmaß gegenüber noch verbliebenen Unsicherheiten in den Modellparametern entwickelt. Ein wesentlicher Beitrag für die erfolgreiche Durchführung der verschiedenen Optimierungsaufgaben wird durch eine Sensitivitätsanalyse geleistet. Verschiedene Methoden der Sensitivitätsanalyse wurden umgesetzt, um sowohl qualitative als auch quantitative Aussagen über den Einfluss von Modellparametern auf Ausgabefunktionen der Simulation zu machen. Beispielhaft seien hier Differenzenquotienten, das Faktordesign oder varianzbasierte Methoden genannt. Für die vom Nutzer ausgewählte Methode werden für vordefinierte Betriebspunkte Unsicherheitsbereiche berechnet, die auf die Unsicherheitsbereiche ausgewählter Parameter zurückgehen. Auf diese Weise werden die einflussreichsten Parameter und die am stärksten betroffenen Ausgabegrößen identifiziert. Darüber hinaus können, insbesondere bei den varianzbasierten Verfahren, statistisch relevante Aussagen über die Unsicherheitsbereiche der Ausgabefunktionen gemacht werden.

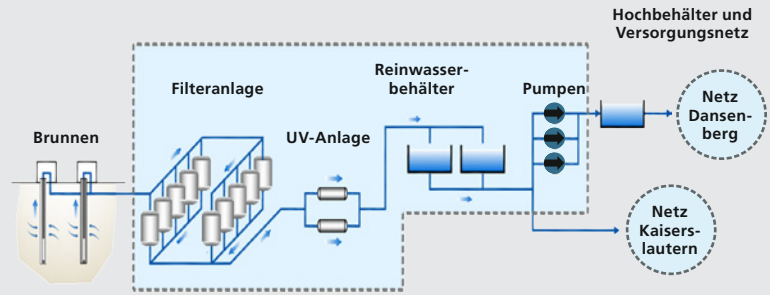
Schließlich können die Prozessparameter so gewählt werden, dass die Unsicherheitsbereiche entweder möglichst klein oder möglichst groß werden. Kleine Unsicherheitsbereiche sind erwünscht, wenn das Design möglichst robust gegenüber Unsicherheiten in den Modellparametern sein soll. Für ein experimentelles Design hingegen werden große Sensitivitäten in messbaren Ausgabefunktionen bezüglich zu schätzender Modellparameter vorgezogen. In der Praxis hat sich herausgestellt, dass die Minimierung oder Maximierung des Unsicherheitsbereichs eines von mehreren Gütemaßen ist. Daher ist ein mehrkriterieller Zugang hier besonders geeignet. Die Verwendung von nicht-lokalen Sensitivitätsmaßen hat sich hier als vorteilhaft für das Konvergenzverhalten des Optimierungssolvers erwiesen und wurde standardmäßig in diesem Projekt umgesetzt.

3 Modell einer Anlage in einem stationären Fließbildsimulator



1

2



H2OPT: STEIGERUNG DER ENERGIEEFFIZIENZ IN DER TRINKWASSERVERSORGUNG

1 *Transportpumpen im Wasserwerk Bürstadt der EWR*

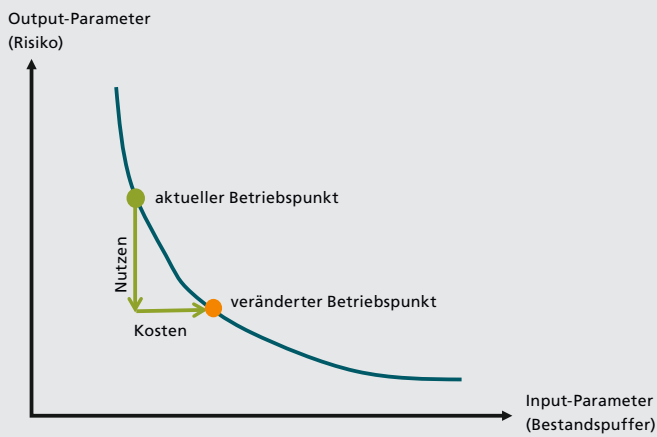
2 *Schema einer Trinkwasserversorgungsanlage am Beispiel des Wasserwerks Rote Hohl Kaiserslautern*

Auf die Trinkwasserversorgung entfällt ein wesentlicher Teil der kommunalen Stromausgaben. Dabei geht man davon aus, dass Einsparungen im zweistelligen Prozentbereich durch eine auf den Verbrauch angepasste Pumpenauswahl und -fahrweise möglich ist. Dieses Einsparpotenzial zu erschließen, ist das Ziel des vom BMBF geförderten Projekts H2Opt, das neben dem ITWM den Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungsmaschinen der TU Kaiserslautern, die Stadtwerke Kaiserslautern SWK, die EWR Netz GmbH Worms und das Planungsbüro Obermeyer einschließt.

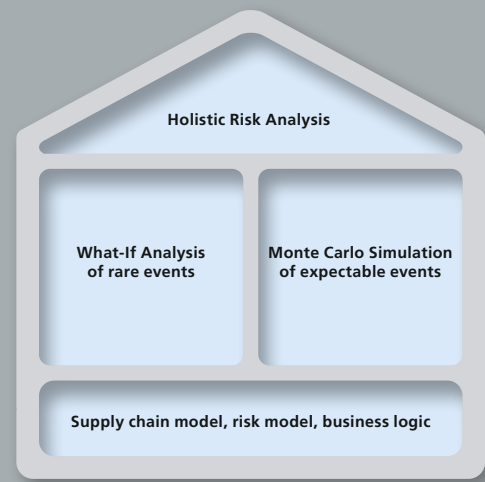
Der Abteilung Optimierung des Fraunhofer ITWM fällt hierbei die Aufgabe zu, eine prototypische Software zu entwickeln, die Wasserversorgungsunternehmen in energieeffizientem Betrieb und Auslegung ihrer Anlagen unterstützt. Der Workflow der Software ist in drei Teile gegliedert. Im ersten Schritt wird ein anpassbares Wassernetzmodell aufgesetzt, das die Gesetze der Strömungsmechanik berücksichtigt. Die Konfiguration erfolgt adaptiv und interaktiv. Daraufhin wird ein typisches Verbrauchsprofil ausgewählt, das für den jeweiligen Tag charakteristisch ist, wobei beispielsweise zwischen Werk- und Feiertagen, Schul- und Ferientagen sowie trockenen und nassen Sommertagen unterschieden wird. Der letzte Schritt erfolgt über eine Anzeige berechneter Lösungen, über die der Planer unterstützend eine Lösung finden kann, die den aktuellen Anforderungen genügt.

Der Kerngedanke zur Steigerung der Energieeffizienz liegt in dem konsequenten Einsatz von Kennlinien des Verbrauchernetzes und der Pumpen. Kennlinien des Verbrauchernetzes ordnen einem Volumenstrom eine Förderhöhe zu, die mit dem Wasserdruck im Netz korrespondiert. Diese beiden Werte, Volumenstrom und Förderhöhe, beschreiben den Betriebszustand einer Pumpe eindeutig. Insbesondere folgt daraus ein für diesen Betriebszustand charakteristischer Wirkungsgrad, der von der jeweiligen Pumpe abhängt. Im Idealfall sollte dieser Wirkungsgrad nahe dem Maximalwert für die verwendete Pumpe liegen.

Durch das Hinterlegen von Datenbanken für typische Verbrauchsprofile und für auf dem Markt verfügbare Pumpen wird durch angepasste Suchalgorithmen eine Lösungsvielfalt erzeugt, die dem Planer eine Übersicht über geeignete und ungeeignete Pumpen verschafft. Ferner stehen als Freiheitsgrade noch die Pumpenfahrpläne zur Verfügung. Diese werden im Prototypen zeitdiskretisiert auf die jeweilige Verfügbarkeit und Dimension von Hochbehältern angepasst. In einer ersten Anwendung bei dem Wormser Projektpartner konnten bereits Vorschläge für Pumpenfahrpläne mit einer signifikanten Energieeinsparung gemacht werden. Einer der nächsten Schritte wird die Unterstützung in der Auswahl neuer Pumpen für das Brunnengebiet Ost der SWK sein.



1



2

SIMULATION UND PROGNOSE IM SUPPLY CHAIN RISK MANAGEMENT

Unternehmen verringern zunehmend ihre Wertschöpfungsanteile und übernehmen stattdessen immer speziellere Aufgaben für eine Vielzahl an Produkten. Dieser Trend, kombiniert mit der Vernetzung der Unternehmen über alle Kontinente hinweg, führt zu immer komplexeren, weltweit vernetzten und damit störungsanfälligeren Lieferketten. So können nicht nur lokale Naturkatastrophen globale Auswirkungen haben, sondern auch Rohstoffverknappung, Betriebsunterbrechungen bei Grundstofflieferanten oder politische Unruhen an Transportweg-Stationen können die Produktionsfähigkeit von Unternehmen erheblich beeinträchtigen. In der Studie »Supply Chain Resilience 2014« (The Business Continuity Institute) gaben 81 % der befragten Unternehmen an, dass mindestens ein Vorfall zu Produktionsausfällen führte. Der Bedarf nach dem aktiven Management solcher Risiken ist groß und Unternehmen sind bereit, substantziell in die Risikominimierung entlang ihrer Lieferketten zu investieren.

Im Supply Chain Risk Management (SCRM) spielen aufgrund der Komplexität und Stochastik von Lieferketten-Risiken mathematische Modelle eine große Rolle. Supply Chains sind komplexe vernetzte Strukturen und Risiken bestehen überall: in Regionen, bei Lieferanten, für Transportwege und bei einzelnen Transporten. Seltene, katastrophale Ereignisse und Alltagsrisiken sind auf unterschiedlichen zeitlichen und räumlichen Skalen angesiedelt. Proaktives statt reaktives Umgehen mit diesen Risiken setzt deren qualitative und quantitative Abschätzung voraus. Aus mathematischer Sicht kommen je nach Anwendung unterschiedliche Werkzeuge zum Einsatz. Störungen, die einer gewissen Regelmäßigkeit unterliegen, können mit Markovketten, Markovschen Entscheidungsprozessen, Monte-Carlo-Simulationen usw. untersucht werden. Damit können Risiken abgeschätzt und die Auswirkungen von Gegenmaßnahmen prognostiziert werden. Seltene Großschadensereignisse hingegen werden mit Szenario-Analysen adressiert.

Im BMWi-Projekt VILOMA (Visual Logistics Management) forscht ein von VW geführtes Konsortium unter Beteiligung des ITWM an Modellen und entscheidungsgerechten Visualisierungen logistischer Prozesse. Logistische Wetterkarten und logistische Kennlinien sollen zukünftig helfen, drohende Probleme frühzeitig zu erkennen und optimale Betriebspunkte in Supply Chains im Ausgleich von Risiken und SCRM-Kosten, beispielsweise durch Bestandspuffer, zu finden. In einem Projekt mit Procter & Gamble werden sowohl seltene Großschadensereignisse bei Zulieferern als auch regelmäßige, kurz anhaltende Lieferausfälle untersucht. Das zufällige Auftreten letzterer kann dabei gut mit stochastischen Verteilungen beschrieben werden. Erklärtes Ziel ist zunächst die Quantifizierung der Risiken. Daraus können dann Handlungsempfehlungen in Bezug auf die Größe und Positionierung von Material sicherheitsbeständen abgeleitet werden. Das Projekt adressiert primär strategische und taktische Planungshorizonte.

1 *Logistische Kennlinien helfen bei der Suche nach dem optimalen Betriebspunkt einer Supply Chain im Widerstreit von Risiken und SCRM-Kosten (z.B. für Bestandspuffer).*

2 *Das Methodengebäude im Projekt mit Procter & Gamble*