



PROF. DR. KARL-HEINZ KÜFER
BEREICHSLEITER

PD DR. MICHAEL BORTZ
ABTEILUNGSLEITER



INTERAKTIVE ENTSCHEIDUNGSUNTERSTÜTZUNG AUF BASIS VON MODELLEN UND DATEN

Zentrale Aufgabe des Bereichs 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 unsere Arbeit durch ein Zusammenspiel von Datenanalyse, Simulation, Optimierung und Entscheidungsunterstützung geprägt. Unter Simulation verstehen wir dabei die wissens- und datenbasierte Bildung mathematischer Modelle unter Einbeziehung von Design-Parametern, Restriktionen und zu optimierenden Qualitätsmaßen sowie Kosten.

Die Kernkompetenzen unseres Bereichs sind die Entwicklung und Implementierung von anwendungs- und kundenspezifischen Optimierungsmethoden. Diese berechnen bestmögliche Lösungen für das Design von Prozessen und Produkten. Alleinstellungsmerkmale sind die Integration von Datenanalyse, Simulations- und Optimierungsalgorithmen, die spezielle Berücksichtigung mehrkriterieller Ansätze sowie die Entwicklung und Implementierung interaktiver Werkzeuge für die Entscheidungsunterstützung.

Insgesamt verstehen wir Optimierung weniger als mathematische Aufgabenstellung, sondern vielmehr als kontinuierlichen Prozess, welchen wir durch die Entwicklung passender Tools unterstützen. Besonderes Augenmerk liegt auf der adäquaten Wahl des Modells hinsichtlich Menge und Qualität der verfügbaren Daten. Wir ziehen Methoden des Machine Learnings zur Aufbereitung der Daten und zur Kalibrierung von Modellen heran, aber auch zur Modellergänzung und Erklärung nicht explizit modellierbarer Phänomene.

Kontakt

karl-heinz.kuefer@itwm.fraunhofer.de

michael.bortz@itwm.fraunhofer.de

www.itwm.fraunhofer.de/opt

SCHWERPUNKTE

Operations Research

- Produktions- und Ablaufplanung
- Anordnungs- und Zerlegeprobleme
- Versorgungsnetzwerke

Technische Prozesse

- Verfahrens- und Prozesstechnik
- Planung in der Medizin
- Maschinelles Lernen und hybride Modelle





© Fraunhofer IWM



© Fraunhofer IWM

MODELLPARAMETER SCHÄTZEN MIT TIEFEN NEURONALEN NETZEN

1 Das neue lasergestützte Glasbiegeverfahren ermöglicht exakt definierte, kleinste Biegeradien, mit denen sogar Verbundicherheitsglas »um die Ecke« hergestellt werden kann. Die Glasscheiben im Bild sind drei Millimeter dick.

2 Mit dem neuen Glasbiegeverfahren hergestellter Prototyp einer Isolierglasscheibe

Unser Institut besitzt langjährige Erfahrung in einer auf die jeweilige Fragestellung angepassten Modellierung sowie im Training der Modelle mittels Daten aus der Praxis. Modellierung, Simulation und Optimierung setzen wir so um, dass eine fortwährende Verbesserung der Modellparameter durch Vergleich der Modellvorhersagen mit der realen Praxis erfolgt.

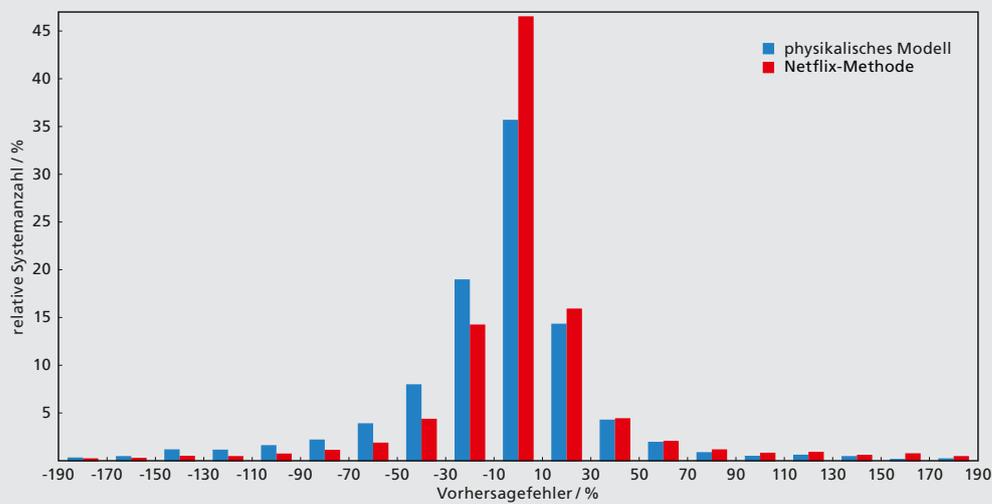
Regressionsprobleme identifizieren Parameter

Mathematische Modelle von realen Prozessen hängen von vielen Parametern ab. Ein einfaches Beispiel ist ein geschossener Ball. Dessen Bahnkurve hängt neben den Anfangsbedingungen (Abschussposition, Betrag, Richtung der Abschussgeschwindigkeit) vom Luftwiderstand und von der Erdbeschleunigung ab. Während hier die Parameter gut bekannt sind, ist dies bei komplexeren Prozessen nicht unbedingt der Fall – sei es das Schmelzen von Glas, die Polymerbildung bei gekoppelten Reaktionen oder die Trennung von Stoffgemischen.

In einer solchen Situation werden Regressionsprobleme formuliert, um den Wert der Modellparameter genauer zu bestimmen und so das Modell zu kalibrieren. Eine gebräuchliche Regressionsaufgabe besteht im Minimieren der Abweichungsquadrate von Modellvorhersage und Messwert als Funktion der Modellparameter. Die Herausforderung bei diesem nichtlinearen, nicht konvexen Optimierungsproblem besteht darin, das Optimum zu finden.

Deep Neural Networks in Kombination mit wissensbasierter Expertise

Tiefe neuronale Netze (DNN) unterstützen dabei. Eine einfache Idee besteht darin, den Raum der Modellparameter zu diskretisieren und die Modellfunktionen an den Diskretisierungspunkten vorzuberechnen. Wählt man als Eingang die Werte der Modellfunktionen und als Ausgang die quadratische Abweichung in der Schätzung der Modellparameter, so trainiert man das Netz auf eine verlässliche Vorhersage der Parameter, wenn die Modellvorhersagen bekannt sind. Es zeigt sich jedoch, dass diese Herangehensweise bei Mehrdeutigkeiten scheitert, wie sie z. B. bei der Glasbiegung auftreten. In einem Forschungsprojekt zusammen mit dem Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM haben wir eine erhebliche Verbesserung in der Güte der Modellvorhersagen mit den geschätzten Modellparametern erzielt. Dazu wurde das Netz nicht basierend auf der quadratischen Abweichung der geschätzten Modellparameter, sondern auf einer Abweichung der aufgrund dieser Schätzung gemachten Modellvorhersage trainiert. Auf diese Weise setzen wir wissensbasierte Expertise beim Netztraining ein. Im Ergebnis sind die so erreichten geschätzten Modellvorhersagen erheblich verlässlicher.



1

MASCHINELLES LERNEN ZUR VORHERSAGE THERMODYNAMISCHER EIGENSCHAFTEN

Zuschauer, die diese Serie gucken, gefällt auch diese Serie? Nach welchem Prinzip schlägt ein Portal wie Netflix Filme für seine Zuschauer vor? Oder Amazon seine Ware? Oder Facebook seine Seitenempfehlungen? Und was kann man aus der Anwendung dieser Algorithmen über die thermodynamischen Eigenschaften von Mischungen lernen? Das sind Fragen, auf die wir dank interner Fraunhofer-Förderung in einer Kooperation mit Prof. Dr. Hans Hasse, Jun.-Prof. Fabian Jirasek und Prof. Dr. Marius Kloft und von der TU Kaiserslautern vielversprechende erste Antworten gegeben werden konnten.

1 *Histogrammdarstellung des Vorhersagefehlers für die Ergebnisse der Netflix-Methode verglichen mit den Ergebnissen einer etablierten physikalischen Methode*

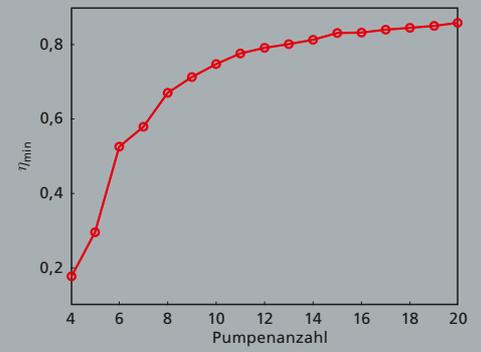
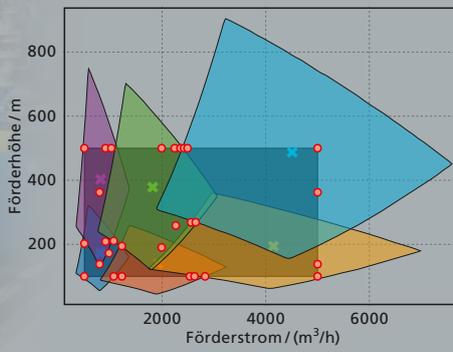
Durch Personalisierung ihrer Services wollen Netflix, Amazon Prime Video, Maxdome und Co. ihren Zuschauern helfen, noch schneller passende Inhalte zu finden. Diese Empfehlungssysteme vervollständigen lückenhaft besetzte Matrizen. Die Zeilen so einer Matrix sind dabei die Zuschauer, die Spalten sind die Filme. Ein Matrixeintrag besteht in der Bewertung eines Films durch einen Nutzenden. Allerdings gibt es erheblich weniger besetzte Matrixelemente als unbesetzte. Die Kernidee besteht im Auffüllen der unbesetzten Matrixelemente, so dass die Zeilen bzw. Spalten möglichst ähnlich sind. Dies wird beispielsweise durch ein Auffüllen erreicht, das die Singulärwerte der vervollständigten Matrix minimiert.

Empfehlungssystem für Mischprobleme

Bei der Beschreibung thermodynamischer Eigenschaften von binären Mischungen gibt es ein ganz ähnliches Problem: Die Zeilen der Matrix sind in diesem Fall die Lösungsmittel, und die Spalten die gelösten Stoffe. Bildlich gesprochen ziehen sich Lösungsmittel und gelöster Stoff an (wie Wasser und Ethanol) oder stoßen sich ab (wie Wasser und Öl). Diese Wechselwirkung wird durch Aktivitätskoeffizienten beschrieben, die die Inhalte der Matrix bilden. Experimentell vermessen sind aber, bezogen auf die Gesamtmenge an Stoffen, nur verhältnismäßig wenige. Das Vervollständigen dieser Matrix stellt also ein analoges Problem dar – wie Zuschauern Filme vorzuschlagen.

In ersten Anwendungen von Empfehlungssystemen auf das Mischungsproblem zeigte sich, dass die Qualität der Vorhersagen vergleichbar ist mit denen, die aus involvierten, physikalische motivierten, semi-empirischen Gruppenbeitragsmethoden resultieren, s. Abb. 1. Aktuell wird daran gearbeitet, physikalisches Wissen bei der Matrixvervollständigung zu berücksichtigen. Diese Arbeiten sind nicht nur ein schönes Beispiel interdisziplinärer Kooperation, sondern zeigen auch das Potenzial von maschinellen Lernverfahren, eingesetzt in neuen Domänen.





1 *Transportpumpen*

2 *Betriebsfenster optimal ausgelegter Transportpumpen über einem Rechteck von Kundenspezifikationen. Das Optimierungsverfahren verwendet nur wenige der eigentlich unendlich vielen Spezifikationen (rote Punkte).*

3 *Konflikt zwischen Größe und Effizienz des Produktportfolios*

Wie wir gemeinsam mit Unternehmen Produktportfolios optimieren – am Beispiel von Transportpumpen für die Wasserversorgung via semi-infiniter Optimierung.

Die Auslegung des Produktportfolios ist eine existenzielle Entscheidung für jeden produzierenden Betrieb. Es geht darum, den Spagat zwischen zufriedenen Kundinnen und Kunden sowie niedrigen Herstellungskosten zu meistern. Während die Frage der Auswahl aus einer endlichen Variantenvielfalt schon seit Langem mathematisch untersucht wird, findet sie bei der Produktion von Maschinen, die über skalierbare Eigenschaften wie Abmessungen oder Drehzahlen definiert werden, bislang wenig Beachtung.

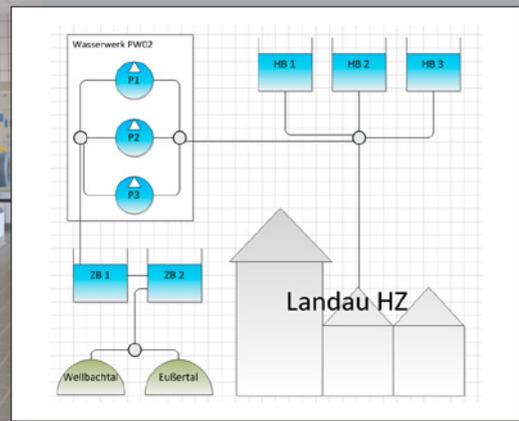
Herausforderung Transportpumpen: Welche Pumpe unter welchen Bedingungen?

Am Beispiel von Transportpumpen haben wir uns an dieses Problem gewagt und ein neues mathematisches Abdeckungsmodell entwickelt. Die Herausforderung ist hierbei, eine zusammenhängende Menge an Anforderungen der Endkunden/innen durch wenige, aber schmale Pumpenbetriebsfenster abzudecken. Praktisch bedeutet das, dass für alle betrachteten Kriterien eine hoch-effiziente Pumpe bereitsteht, während gleichzeitig die Portfoliogröße niedrig gehalten wird.

Das Abdeckungsmodell beschreibt das Problem über die betrachteten Mengen. Auf diese Formulierung lassen sich übliche Optimierungsverfahren nicht anwenden. Die Sprache der semi-infiniten Optimierung dient hier als Übersetzer. Grundlegende Lösungsansätze für die entstehenden Probleme gibt es auch bereits. Durch eine geschickte Kombination zweier solcher Ansätze haben wir ein Verfahren entwickelt, mit dem wir das semi-infinite Optimierungsproblem zur Produktportfoliooptimierung zügig näherungsweise lösen können.

Expertise nutzen: Methode zur Optimierung der Edelsteinproduktion übertragen

Unser Ansatz in der Produktportfoliooptimierung bestätigt eine Beobachtung aus einem früheren Projekt, dem Packen von Schmucksteinen in Rohedelsteine: Die semi-infinite Optimierung ist eine mächtige Sprache, um auf Mengen basierende Optimierungsaufgaben zu modellieren. Probleme dieser Art treten in der Industrie an vielen Stellen auf, besonders dort wo kontinuierliche Stellschrauben Produktionsprozesse mitbestimmen. Durch Fortentwicklungen theoretischer Lösungsverfahren für semi-infinite Probleme schöpfen wir dieses Potenzial weiter aus.



© ESW

COpt₂ – OPTIMIERUNG KOMPLEXER TRINKWASSER-VERSORGUNGSNETZE

Im Rahmen des Projektes COpt₂ knüpfen wir an das erfolgreiche BMBF-Projekt H2Opt an, mit dem Ziel Energie und Kosten im Betrieb und bei der Planung der Trinkwasserversorgung zu sparen. Das Projekt wird durch den Europäischen Fonds für Regionale Entwicklung (EFRE) und das Land Rheinland-Pfalz gefördert. Wir vereinfachen und verbessern den Arbeitsablauf der Wasserversorgungsunternehmen und entwickeln neue Ideen, einem Trinkwasserausfall vorzubeugen.

Im Vordergrund steht die Weiterentwicklung des Prototyps, der bereits in Worms eine Energieersparnis von etwa 30 Prozent nachweist. Neue Herausforderung ist die Erweiterung auf komplexere Trinkwassernetzwerke.

Wir untersuchen gemeinsam mit dem Lehrstuhl für Strömungsmechanik und Strömungsmaschinen der TU Kaiserslautern die Trinkwassergebiete der Wasserversorgung Germersheimer Südgruppe (WGS) rund um Jockgrim und das Versorgungsgebiet der EnergieSüdWest GmbH (ESW) in Landau. Neben der Entwicklung neuer Modellierungskonzepte beantworten wir Fragestellungen, die für die jeweiligen Versorger besonders interessant sind.

Kluge Algorithmen für Pumpenbetrieb

Die ESW fragt nach einer klugen Bewirtschaftung der Trinkwasserzweischenspeicher. Denn, reichen die natürlichen Wasserressourcen im Sommer nicht aus, muss auf das Trinkwasser aus benachbartem Brunnengebiet zurückgegriffen werden. Das bedeutet mehr Energieaufwand. Auch möchte der Versorger eine Vermischung von Trinkwasser unterschiedlicher Qualität vermeiden, was wiederum mehr Aufwand bei der Überwachung bedeutet.

Das aus 13 zusammengeschlossenen Netzwerken bestehende Versorgungsgebiet der WGS ist aufgrund seiner Größe besonders interessant. Es erstreckt sich über mehr als 20 km in Nord-Süd-Richtung. Um den Trinkwassertransport zu steuern, bedarf es mehrerer Wasserwerke. Diese beeinflussen gegenseitig den Betrieb, was zu neuer Komplexität führt. Entsprechend passen wir die Algorithmik an, die notwendig ist, möglichst schnell und exakt beste Pumpenbetriebspläne zu berechnen.

1 Pumpenhalle eines Wasserwerks beim Projektpartner ESW

2 Beschreibung der Topologie der Trinkwasserversorgung der Landauer Hochzone mit Drag-and-Drop-Funktion des H2Opt-Prototypen



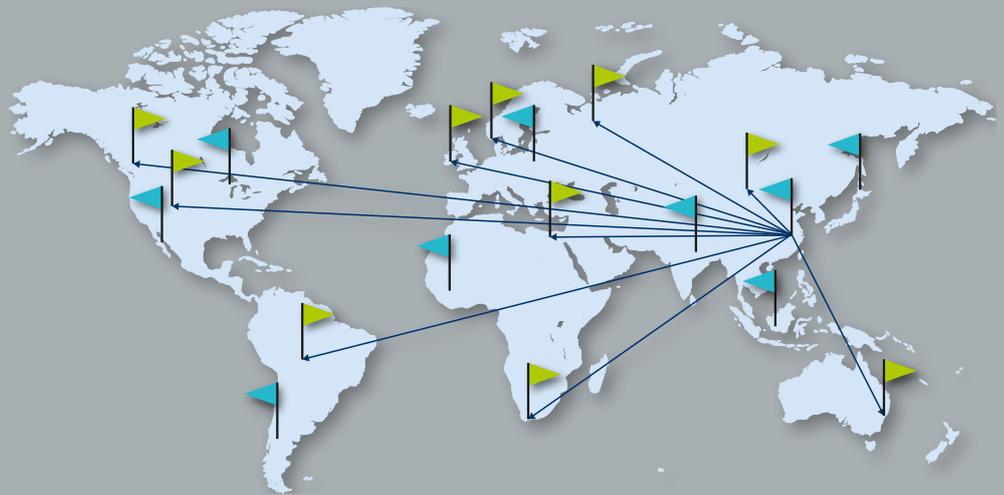
EUROPÄISCHER FONDS FÜR REGIONALE ENTWICKLUNG



Rheinland-Pfalz

COpt₂ wird von der Europäischen Union aus dem Europäischen Fonds für regionale Entwicklung und dem Land Rheinland-Pfalz gefördert.





© istockphoto/Konuvaliuk

ROBUSTE PRODUKTIONSPLANUNG UNTER UNSICHERHEIT

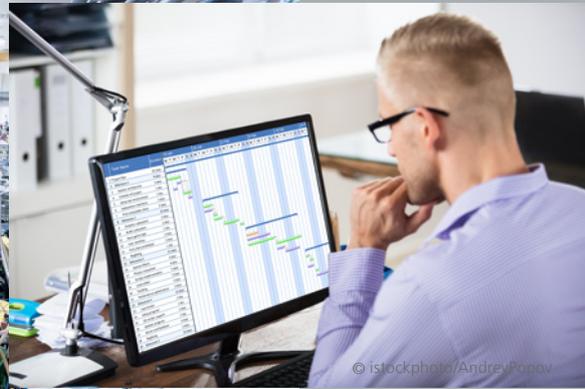
1 Strategische Standortplanung

Moderne Unternehmen agieren in hochdynamischen Systemen und kurze Lieferzeiten sind ein entscheidender Wettbewerbsvorteil. Planungs- und Steuerungsentscheidungen, die sie treffen, müssen robust und flexibel sein sowie gleichzeitig unterschiedliche Planungsaspekte berücksichtigen. Wir entwickeln für Unternehmen individuelle Lösungen in Form von Softwaretools und mittels mathematischer Optimierung.

Effiziente Produktionsabläufe sind neben anderen Faktoren wesentliche Voraussetzung für den wirtschaftlichen Erfolg produzierender Unternehmen. Die Produktionsplanung leistet dazu einen wichtigen Beitrag, da ein Betriebsoptimum in der Regel erst durch die ganzheitliche Koordination aller Abläufe erreicht wird. Dabei genügt es jedoch nicht, dass Augenmerk auf den nächsten Tag zu richten. Vielmehr müssen alle Planungshorizonte von der nahen bis in die ferne Zukunft kontinuierlich adressiert, optimiert und auf einander abgestimmt werden:

- **Strategische Planung:** Der Ausbau der Produktionskapazitäten muss langfristig und vorausschauend geplant werden. Der Bau einer neuen Produktionslinie oder eines zusätzlichen Standorts benötigt schließlich viel Vorlauf. Da die zu tätigen Investitionen groß sind, die Planungsgrundlage oftmals jedoch vage, müssen Entscheidungstragende ihre Investitionen im Lichte unterschiedlicher Zukunftsszenarien bewerten.
- **Taktische Planung:** Im Rahmen der gegebenen Produktionskapazitäten müssen sie Produktionsressourcen, dazu zählen Mitarbeitende, Vorprodukte und Rohstoffe, entsprechend der Absatzprognose beschaffen, vorhalten und mit entsprechendem Vorlauf einplanen. Darüber hinaus müssen mit Kundinnen und Kunden belastbare Liefertermine besprochen werden.
- **Operative Planung:** Es gilt Produktionsaufträge unter Berücksichtigung diverser technischer und organisatorischer Randbedingungen optimal einzuplanen. Die Produktionsressourcen sollen adäquat ausgelastet werden; Rüstzeiten vermieden werden; Synergien durch optimale Bündelung von Aufträgen gehoben werden.
- Und zu guter Letzt müssen sie Produktionspläne derart gestalten, dass kleinere Störungen problemlos kompensiert werden können und keine größere Neuplanung nach sich ziehen.

Die konkreten Herausforderungen einzelner Firmen unterscheiden sich zwar mitunter erheblich und erfordern individuelle Herangehensweisen. Gemeinsam haben sie jedoch die Frage nach dem



© istockphoto/yoh4nn

Umgang mit Unsicherheiten auf den verschiedenen Planungsebenen. Diese können in vielfältiger Weise auftreten, zum Beispiel in Hinblick auf die langfristige Entwicklung der Nachfrage, des mittelfristigen Kapazitätsbedarfs, in Form von kurzfristigen Schwankungen im Auftragsvolumen, der Verfügbarkeit der Maschinen und Rohstoffen, Rohstoffpreisen und des Auftretens von Störungen. Zu letzterem zählen insbesondere Maschinenausfälle und Qualitätsprobleme, die unmittelbare Maßnahmen erfordern.

2 *Produktionshalle*

3 *Beim Planer*

Entwicklung und Implementierung von kundenindividuellen Optimierungsverfahren

Im Allgemeinen sucht man in solchen Situationen nach robusten Produktionsplänen. Also solchen, die auch im Fall von Abweichungen von den Planungsannahmen zu guten Ergebnissen führen. Beziehungsweise solche, die mit wenig Aufwand angepasst und nachoptimiert werden können. In unserer Abteilung »Operations Research« haben wir in den vergangenen Jahren für verschiedene produzierende Unternehmen individuelle Lösungen für ihre Produktionsplanungsprobleme entwickelt. Das heißt:

- Auf der Basis von What-If-Szenarien bewerten wir Alternativen für den Kapazitätsausbau und beraten Unternehmen mithilfe dieser Analysen bei strategischen Entscheidungen. Wir zeigen auf, unter welchen Voraussetzungen sich eine Investition rentiert und welche flankierenden Maßnahmen die Investition gegebenenfalls absichern können.
- Wir haben Monte-Carlo Simulationen zum Lösen taktischer Planungsprobleme entwickelt und in die betriebliche Praxis gebracht. Dazu treffen wir im Dialog mit unseren Kunden Annahmen über die Verteilung der Auftragseingänge und analysieren, ob im Rahmen der planerischen Freiheitsgrade, effiziente Abläufe realisiert werden können.
- Wir haben Softwarewerkzeuge für die tägliche operative Planung entwickelt mit deren Hilfe unsere Kunden Produktionsreihenfolgen und den Materialeinsatz optimieren können. Dabei setzen wir je nach Anforderung individuelle Scheduling-Algorithmen und Verfahren zum Lösen von Packungsproblem ein.

Unsere Erfahrungen in diversen Branchen zeigen, dass sich die Entwicklung individueller Lösungen für Unternehmen auszahlt. Dies gelingt insbesondere, weil unsere maßgeschneiderte Lösungen, die die spezifischen Herausforderungen eines Unternehmens explizit adressieren, in der Regel die Ergebnisse von Branchenlösungen übertreffen.



FlexEuro – WIRTSCHAFTLICHE OPTIMIERUNG FLEXIBLER STROMINTENSIVER INDUSTRIEPROZESSE

Die wirtschaftliche Nutzbarmachung von Flexibilitätspotential in Zeiten volatilerer Energieangebote ist ein wichtiger Baustein für den Erfolg der Energiewende. Im BMWi geförderten Projekt FlexEuro wird am Beispiel des deutschen Aluminiumherstellers TRIMET die Bietstrategie an der Strombörse unter flexiblen Energiebedarfen optimiert. Dabei konzentrieren wir uns zunächst auf den Day-Ahead Markt. Wir betrachten das Problem mehrkriteriell und zeigen den Entscheidungsraum bezüglich Chancen und Risiken der resultierenden Kosten auf. Im Projekt arbeiten wir gemeinsam mit der Abteilung »Finanzmathematik«.



ONCORELIEF – DIGITAL UNTERSTÜTZTE NACHSORGE BEI KREBSPATIENTINNEN UND -PATIENTEN



Ziel des EU-Projekts ONCORELIEF ist die Entwicklung eines intelligenten digitalen Assistenzsystems für die posttherapeutische Verbesserung des Wohlbefindens und Gesundheitsstatus von Krebspatienten. Dieser digitale Schutzengel soll die Lebensqualität von Patientinnen und Patienten anhand der relevanten Einflussfaktoren bewerten, Interventionsbedarf durch Big Data-Analyse frühzeitig erkennen und geeignete Supportmaßnahmen mittels künstlicher Intelligenz identifizieren, welche die Person selbst oder eine ihn betreuende Person durchführt. In diesem Projekt kooperiert der Bereich Optimierung mit Partnern aus Medizin, Wissenschaft und Industrie aus sieben Ländern.

IDSAIR – ENTWICKLUNG VON INSTRUMENTEN FÜR DIE DYNAMISCHE SYSTEMANALYSE IN DER RESILIENZ-FORSCHUNG

Das Deutsche Resilienz Zentrum (DRZ) unter der Leitung von Prof. Dr. Klaus Lieb hat mit unserem Institut 2019 einen Kooperationsvertrag geschlossen. Basierend darauf haben wir eine Zusammenarbeit im Projekt IDSAIR zur Aufbereitung von Daten und zur Vorbereitung von Entscheidungsunterstützung in der Vorbeugung und der Behandlung psychischer Krankheitsbilder begonnen. Der Bereich »Optimierung« bringt ihre Erfahrungen zur daten- bzw. modellbasierten Entscheidungsunterstützung bei der Behandlung komplexer Krankheitsbilder ein. Gemeinsam mit Kolleginnen und Kollegen vom DRZ und der Universitätsmedizin Mainz arbeiten wir an Softwarekomponenten zur Visualisierung von patientenbezogenen Daten. Diese unterstützen im klinischen Alltag bei schnellen und patientenindividuell optimalen Diagnosen und Therapieempfehlungen.