
ENTSCHEIDUNGSUNTERSTÜTZUNG IN DER CHEMIEANLAGENPLANUNG

*Richard Welke, Karl-Heinz Küfer, Anton Winterfeld, Fraunhofer ITWM,
Norbert Asprion, BASF SE*

7. Symposium „Informationstechnologien für Entwicklung und Produktion in der Verfahrenstechnik“,
Aachen, 25. März 2010



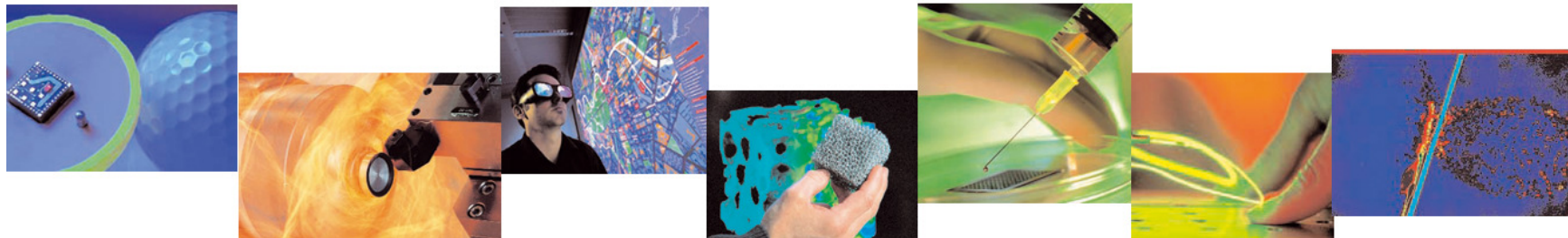
ENTSCHEIDUNGSUNTERSTÜTZUNG IN DER CHEMIEANLAGENPLANUNG

- Multikriterielle Optimierung
 - Gewichtsbasierter Ansatz
 - Navigation (Entscheidungsunterstützung)
- Software-Demonstrator zur Entscheidungsunterstützung
- Anwendungsfälle
- Nutzen der Entscheidungsunterstützung
- Offene Forschungsfragen

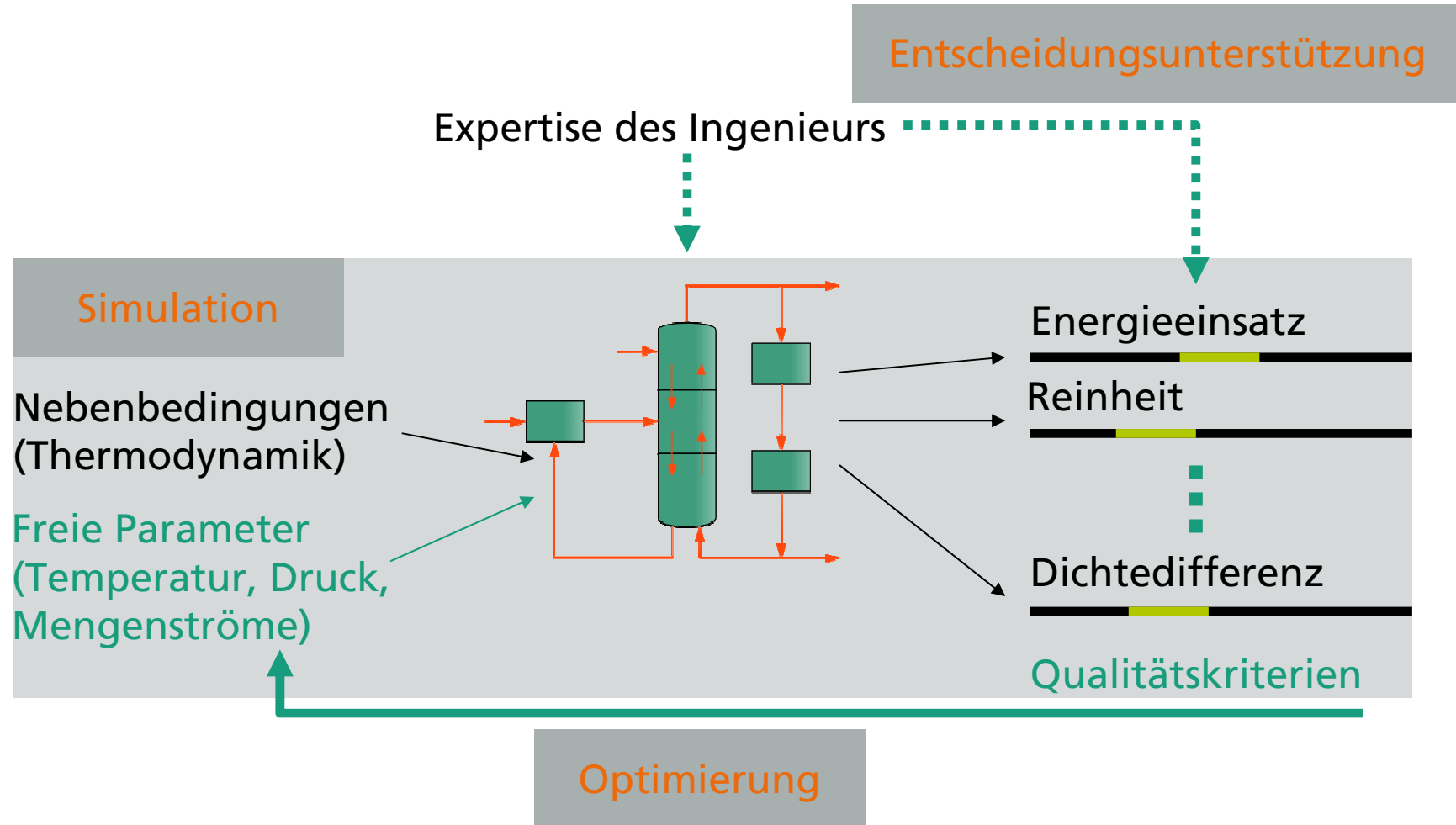
Das Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM

Gründung 1995, seit 2001 Fraunhofer-Institut

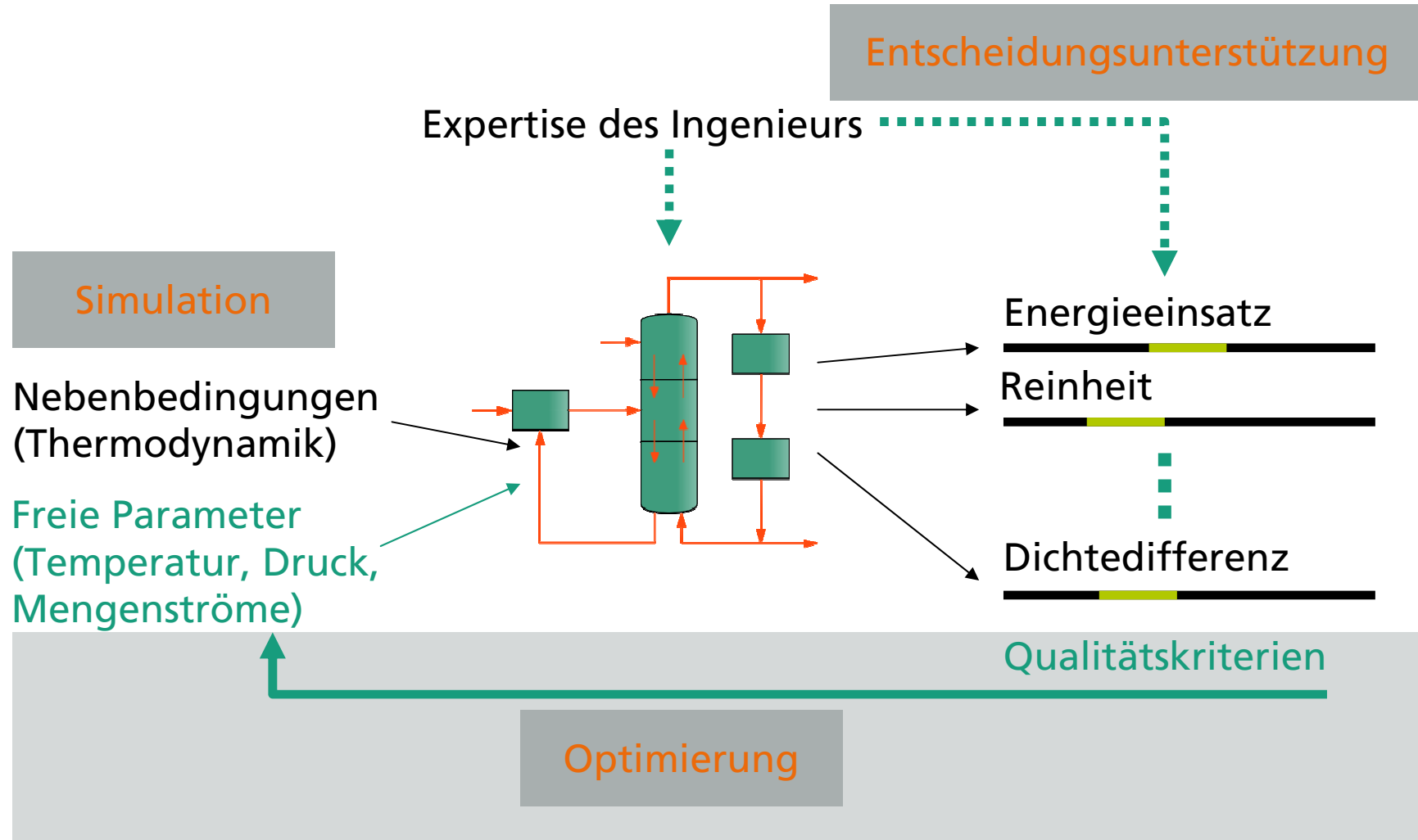
- Erstes Fraunhofer-Institut mit Fokus auf angewandte Mathematik
- 8 Abteilungen, darunter **Optimierung**
- ~200 Mitarbeiter, ~150 Teilzeitkräfte
- Standort: Kaiserslautern
- Teil der Fraunhofer-Gesellschaft
 - 60 Institute, 17100 Mitarbeiter, 1,7 Mrd. € Forschungsvolumen



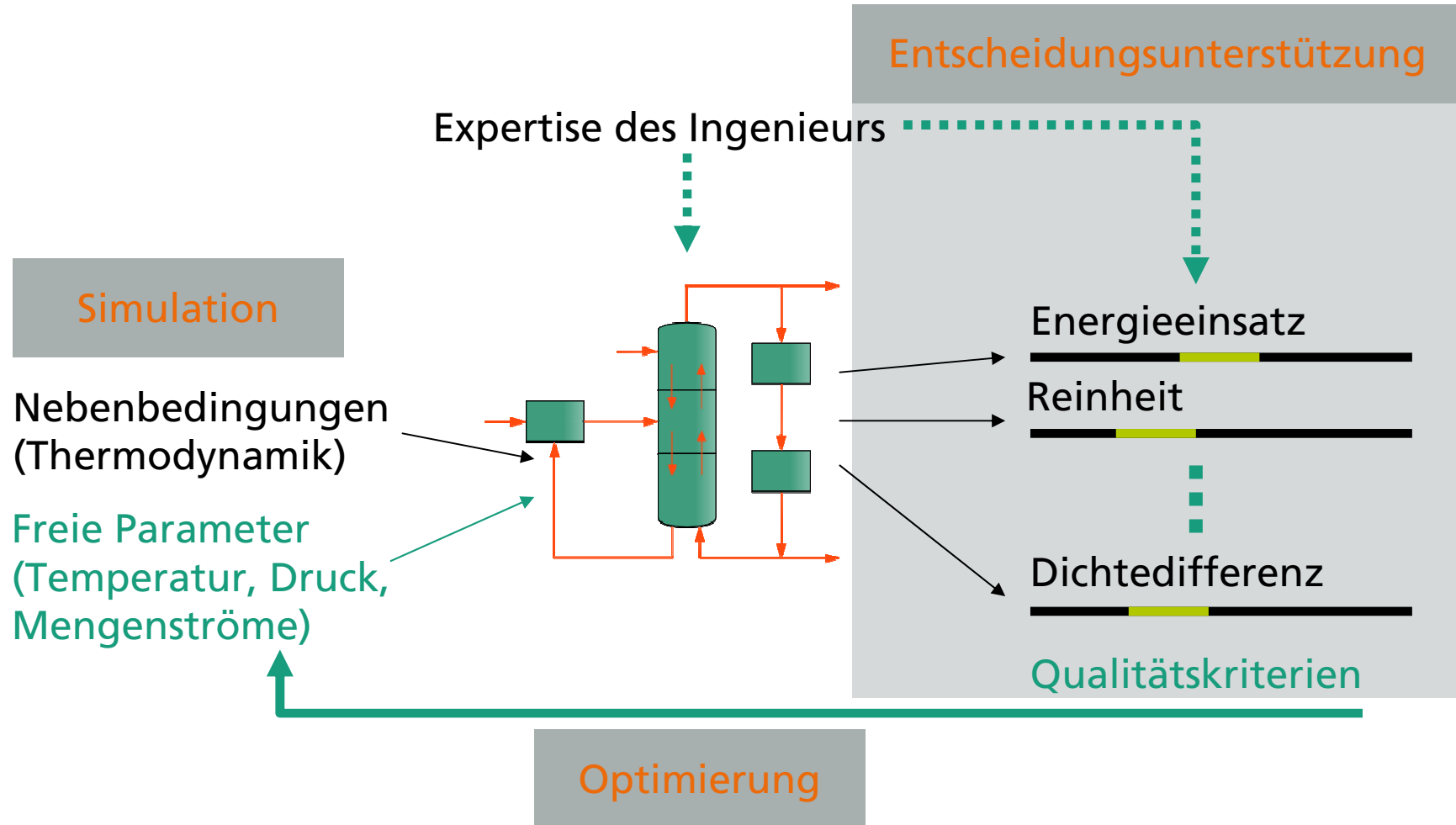
Multikriterielle Optimierung



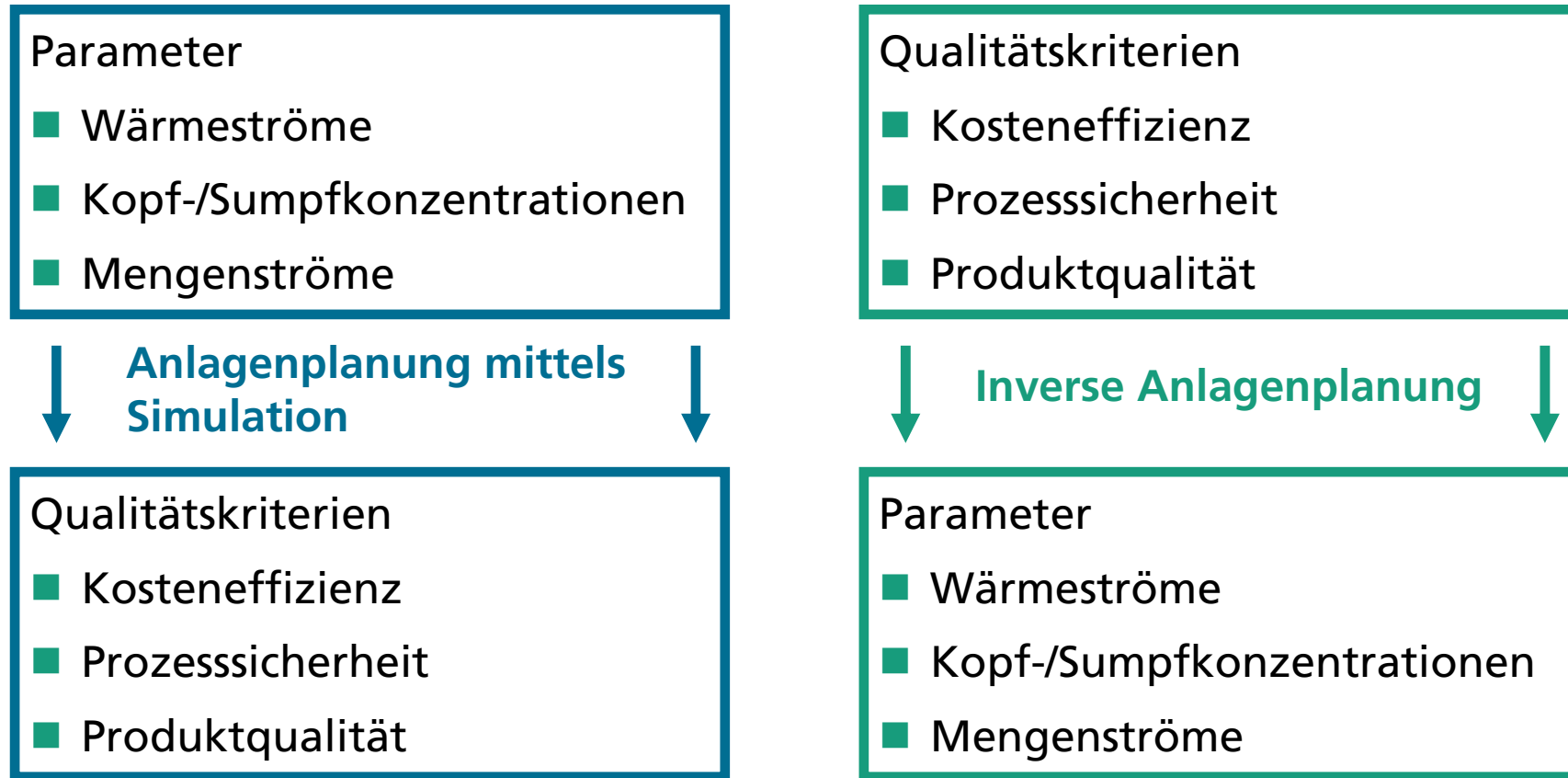
Multikriterielle Optimierung



Multikriterielle Optimierung



Planung von Chemieanlagen als inverses Problem



Multikriterielle Optimierungsprobleme

Finde eine Auslegung $x \geq 0$ der Chemieranlage, sodass

$$\frac{g^E}{RT} = \sum_i x_i \ln \gamma_i$$

$$\sum_i x_i z_i = 0$$

⋮

$$\sum_i |\nu_i| E_i = \sum_j |\nu_j| P_j$$

Modellgleichungen

$$F = (F_1, F_2, \dots, F_n) \longrightarrow \min$$

Unabhängige Zielfunktionen
(Qualitätskriterien)

Pareto-Optimalität

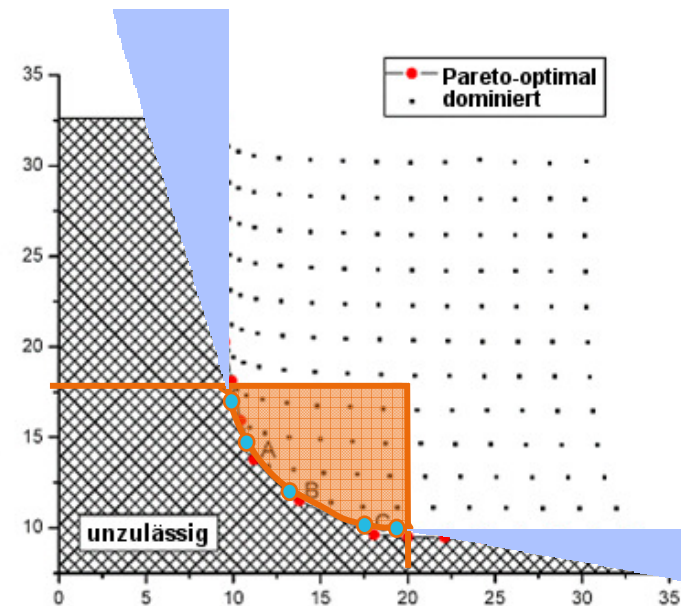
Eine Anlagenauslegung $x \geq 0$ heißt Pareto-optimal, wenn eine Verbesserung in einem beliebigen Ziel F_i eine Verschlechterung in einem Ziel F_k nach sich zieht.

Probleme:

- Zu viele schlechte Lösungen
- Zu schlechte Kompromisse enthalten

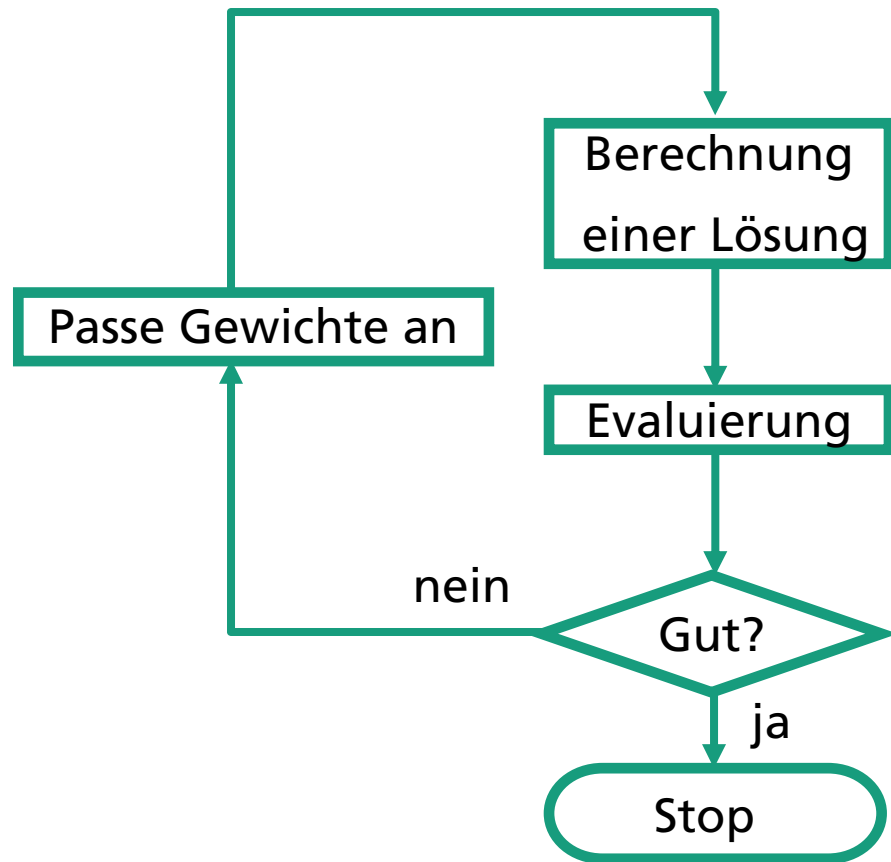
Zur Beschränkung auf relevante Werte:

- Einfache Schranken
- Beschränkte lokale Abwägung

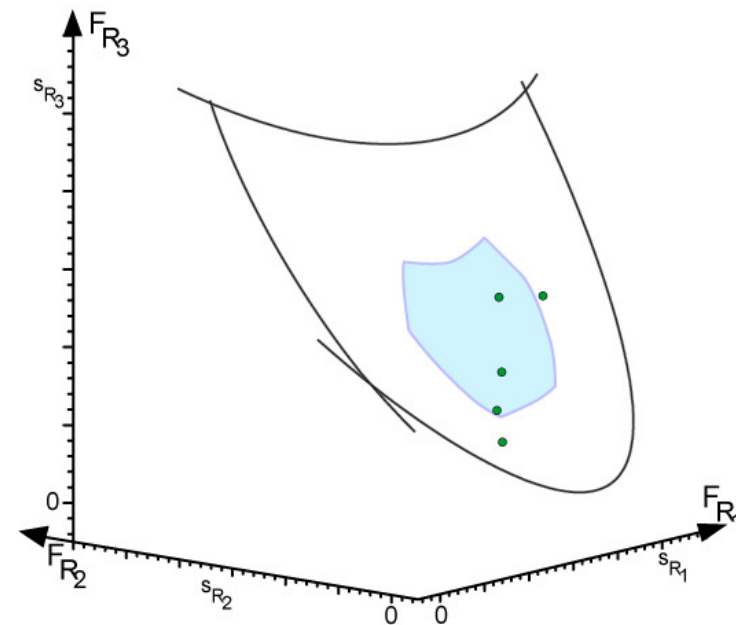


Klassischer Ansatz: Gewichte und menschliche Schleife

$$F(x) := w_1 F_1(x) + w_2 F_2(x) + \dots + w_n F_n(x)$$



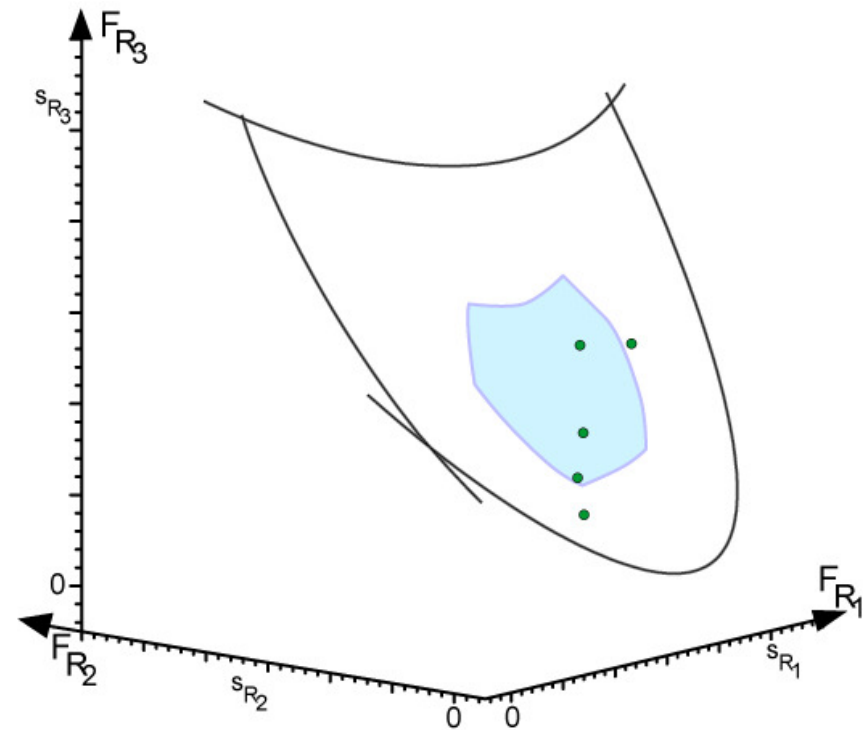
Entscheidungsraum



Probleme des gewichtsbasierten Ansatzes

Probleme:

- Gewichte setzen nach Versuch und Irrtum
- Gewichte oft sehr sensitiv
- Keine Kontrolle über die Optimalität
- Keine fundierte Analyse der Abwägungsentscheidung möglich

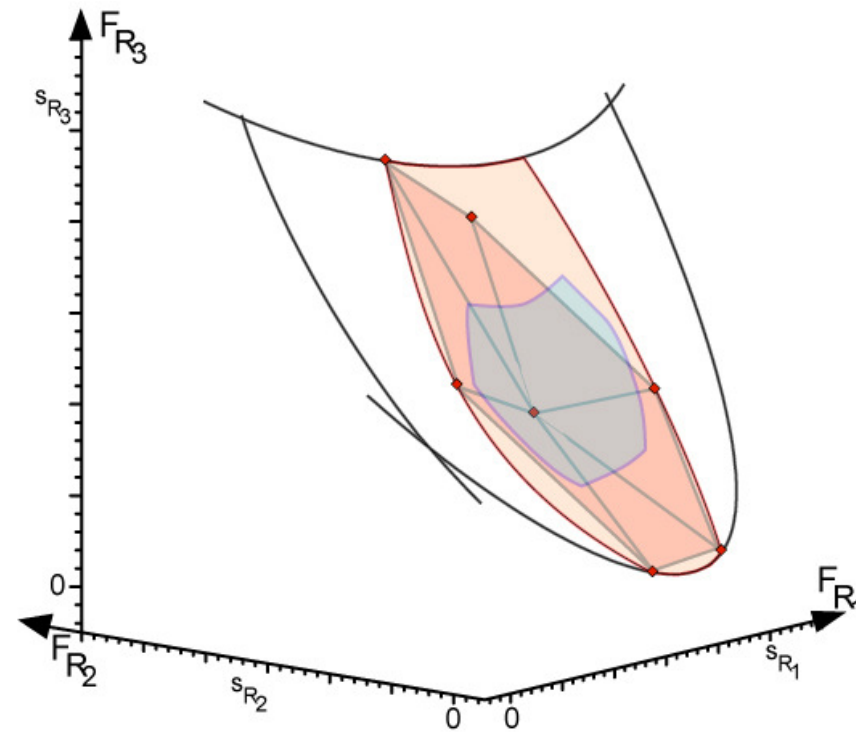


Neue Strategie

Multikriterielle Optimierung

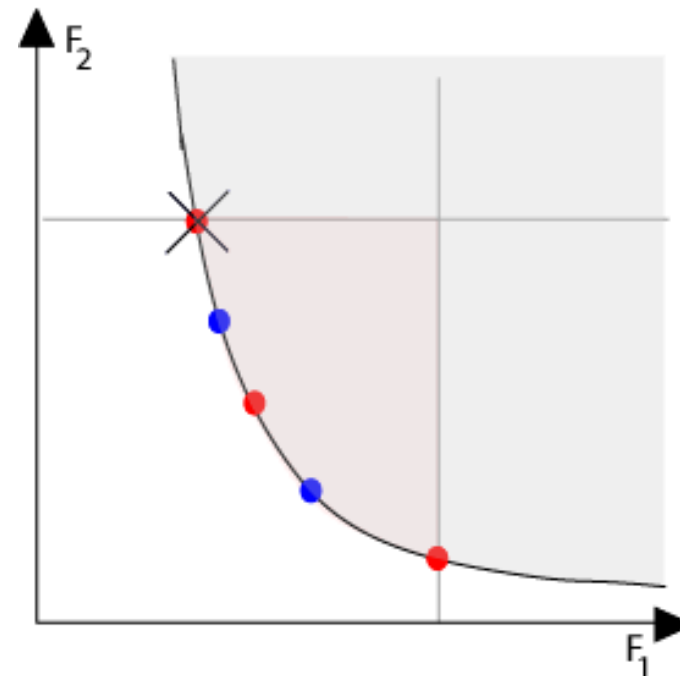
- systematisch ausgewählter
- vorberechneter
- Pareto-optimaler Lösungen

➔ Verschiebe die Entscheidung, bis die Möglichkeiten und Grenzen bekannt sind

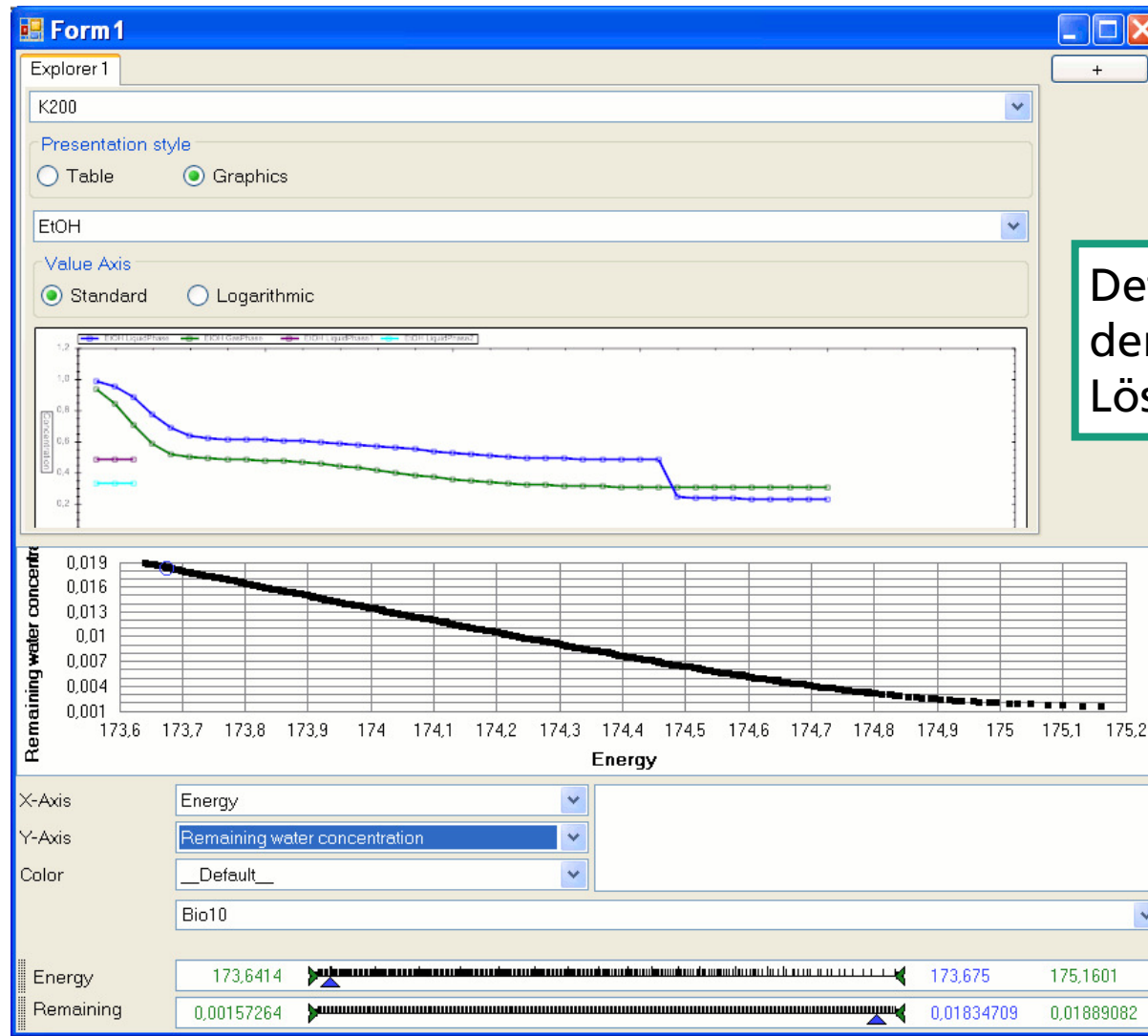


Vorberechnen einer Lösungsdatenbank

- Finde eine ausgewogene Startlösung (unter Einhaltung der Schranken)
- Einschränkung des Entscheidungsraums (aufgrund sinnvoller Erfahrungswerte)
- Erkunde den Entscheidungsraum (berechne Extremkompromisse)
- Fülle den Entscheidungsraum (berechne Lösungen auf Gitter)



Navigation durch eine Lösungsdatenbank



Detailinformationen
der aktuell gewählten
Lösung

Navigation durch
Lösungen

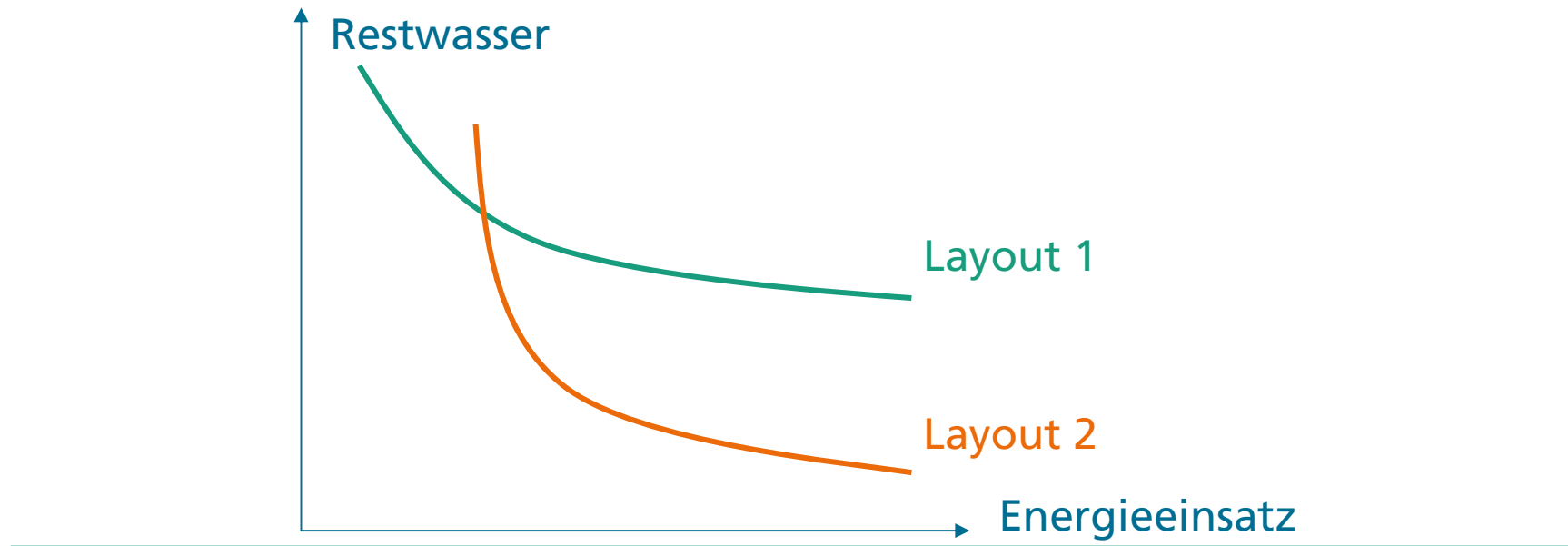
Anwendungsfall: Bestimmung optimaler Parameter für eine Chemieanlage mit festem Layout

Layout einer Anlage gegeben, gesucht ist passende Auslegung

- Zielkriterien vorgeben
- Lösungsdatenbank vorberechnen
- Intuitive Navigation durch die berechneten Pareto-optimalen Lösungen

Anwendungsfall: Optimale Layoutwahl mittels Navigation

- Vergleich mehrerer Layouts ist schwierig
 - Jedes Layout hat Stärken und Schwächen
- Navigation ermöglicht fundierte Layoutwahl
 - Layouts nur vergleichbar bei jeweils optimalen Parametern



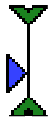
Vorteile der Navigation

Klassische Optimierung: Einzellösungen

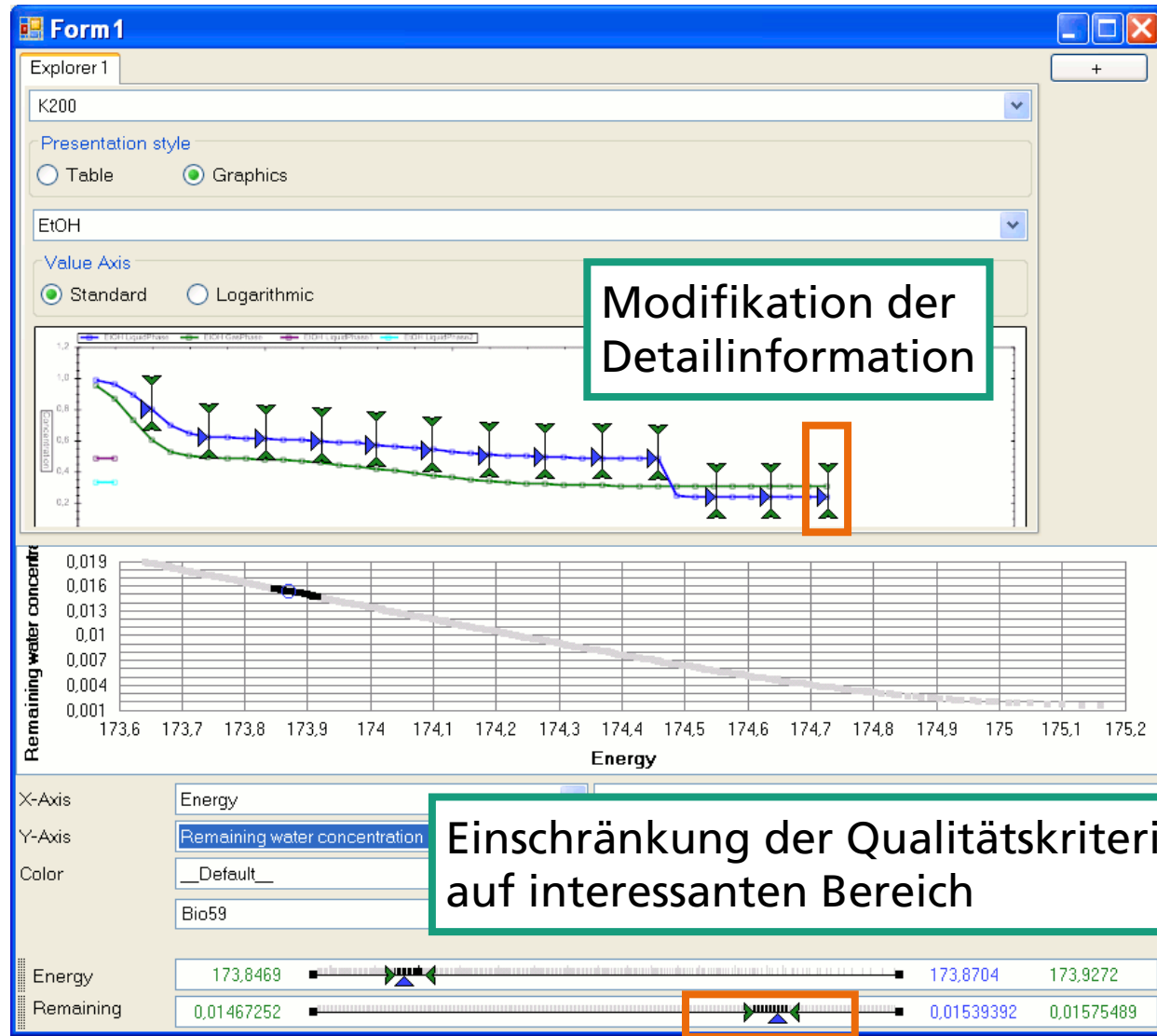
Navigation: Gesamtschau aller relevanten Lösungen

- Hierarchische Information
 - Qualitätskriterien: Reinheit, Energieeinsatz, ...
 - Ebene darunter: Feininformationen für Experten
- Nutzung aller Informationen ermöglicht optimale Entscheidung
 - Fixiere begrenzten Bereich für Qualitätskriterien, der akzeptabel
 - Arbeite innerhalb dieses Bereichs auf Feininformationen

Arbeiten mit hierarchischer Information



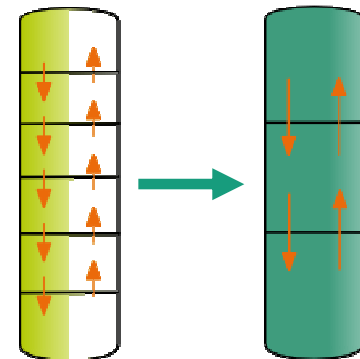
Slider ermöglichen
Einschränkung
und Modifikation
von Werten



Voraussetzungen für die Entscheidungsunterstützung

Ideal wäre Online-Berechnung, also Optimierung in Echtzeit

- Auch mit Offline-Vorbereitung schon nützlich
 - Vorberechnungen automatisiert, „über Nacht“
 - Navigation ermöglicht neue Einblicke
- Verschiedene Steigerungen der Performance denkbar:
 - Bessere Verzahnung von Optimierung und Simulation
 - Optimierunggetriebene adaptive Diskretisierung
 - Modellhierarchien: grobe Ersatzmodelle, Feinsimulation nahe Optimum



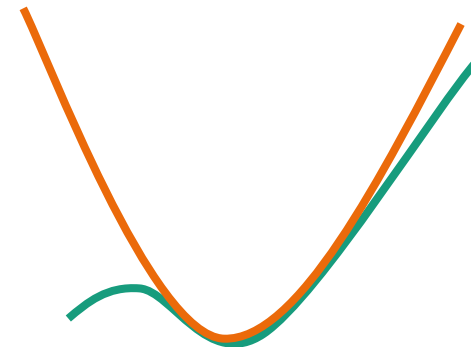
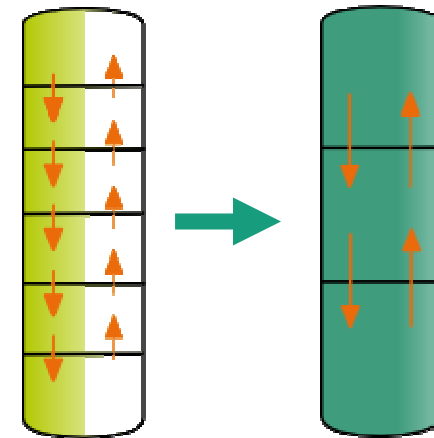
Echte Integration von Optimierung und Simulation

Optimierung bisher meist durch wiederholte Simulation

- Wunsch: Erschließung von weiteren guten Lösungen durch Integration von Optimierungs- und Simulationsalgorithmen
 - Optimierungsalgorithmus steuert Simulation
 - Optimierung auf adaptiven Modellen
- Mathematische Schwierigkeiten
 - Beispiel: Phasenzерfall ist globales Optimierungsproblem, somit zweistufiges Optimierungsproblem
 - Wenige Aussagen über Modellfunktionen möglich

Ersatzmodelle

- Thermodynamische Berechnungen zeitaufwändig und mathematisch komplex
- Ersatzmodelle ermöglichen schnellere, robustere Optimierung
 - Grobe Sicht des Ersatzmodells für die globale Sicht
 - Feinsimulation mit Originalmodell nahe optimaler Lösung



Interpolation

- Bisher: diskrete Lösungsmenge vorberechnet



- Abdeckung des Lösungsraums abhängig von Rechenzeit
- Werte in der Regel stetig abhängig von kleinen Änderungen
 - Sonderfälle wie Phasenzерfall intelligent behandeln
- Durch Interpolation kontinuierliche Lösungsvielfalt möglich



- Deutliche Rechenzeiterparnis bei vergleichbarem Resultat

Fazit

Chemieanlagenplanung **ist** multikriterielle Optimierung

Wert der Optimierung ist abhängig von Verfahren

- Gewichtete Zielfunktionen können nicht überzeugen
- Navigationsansatz
 - Gesamtschau aller relevanten Lösungen
 - Wertvolle Hilfe für Auslegung und Layoutvergleiche
 - Praxistauglich in Geschwindigkeit und intuitiver Bedienung
- Potential kann noch besser genutzt werden, Gegenstand der Forschung