

# Diskrete Optimierung in der chemischen Produktion

Josef Kallrath

BASF-AG, ZX/ZC, Kaiser-Wilhelm-Str. 52, 67056 Ludwigshafen

**Abstract.** In diesem Beitrag werden nach einer Einführung in die mathematische Optimierung zwei typische Anwendungen der diskreten Optimierung in der chemischen Produktion vorgestellt, die eine exakte Bestimmung des Optimums zulassen. Das erste, nur kurz skizzierte Modell, beschreibt die Berechnung optimaler Mischungsrezepturen unter Berücksichtigung eines Zähl- und eines Auswahl-Problems; das zweite, ausführlicher dargestellte Modell, die Optimierung eines Mehrprodukt-Mehrstandort-Produktionsverbundes. Beide Probleme werden mathematisch als gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme mit einem auf LP-Relaxation beruhenden Branch & Bound-Verfahren gelöst.

Durch **Stoff-Mischung** hergestellte Produkte müssen diverse Qualitätskriterien erfüllen, d.h. bestimmte Stoffeigenschaften dürfen nur in definierten Grenzen variieren. Solche Stoffeigenschaften können z.B. Siedepunkt, Viskosität oder wie im vorliegenden Fall Konzentrationen sein. Logistische Nebenbedingungen ergeben sich aus der Notwendigkeit, bestimmte Tanks, z.B. infolge von Haltbarkeitsbeschränkungen, zu leeren, oder aus der Tatsache, daß einige Stoffe zwar nicht notwendigerweise teuer, aber vielleicht schwierig zu beschaffen sind. Aus technischen Gründen kann nicht mehr als eine vorher spezifizierte Zahl von Stoffen bei der Mischung berücksichtigt werden, oder die Zahl zu verwendender Container soll beschränkt werden. Zu minimieren sind die Rohstoffkosten und Arbeitskosten beim Mischungsvorgang.

Die **Optimierung des weltweit agierenden Produktionsverbundes** basiert auf einem Produktionsplanungsmodell für drei Produktionsanlagen in drei verschiedenen Kontinenten. Jede Anlage kann drei verschiedene Produkte produzieren; die Qualität der Produkte ist auf allen Anlagen gleich. Das Modell beschreibt ein Szenario mit orts- und produktabhängigen Umrüstzeiten, Minimalanforderungen für die während eines Jahres zu produzierenden Mengen, beschränkten Transportkapazitäten und unterschiedlichen Transportzeiten unter Einbeziehung von Marktprognosen. Umrüstentscheidungen und Mindestauslastungsrestriktionen sowie minimale Transportmengen führen auf nicht-lineare Modellstrukturen. Die zu maximierende Zielfunktion (Erlöse minus variable Kosten) berücksichtigt neben Erlösen die Kosten für Lager und Zusatzlager, Zukauf, Umrüstungen, Transport und Produktion. Die mathematische Optimierung bietet hier ein Einsparpotential in der Größenordnung einiger Prozent des vorliegenden Deckungsbeitrages.

Um auch bei komplexen Systemen, in denen nicht nur einige Hundert diskrete Variablen, sondern eher einige Tausend oder gar Zehntausende diskrete Variablen auftreten, exakte Optimierungsverfahren erfolgreich einsetzen zu können, initiierte die BASF-AG im Rahmen des von der Europäischen Gemeinschaft gefördertes ESPRIT-Projektes

das Projekt *PAMIPS* mit einem aus 4 Industriepartnern und 3 Universitäten bestehenden Konsortium. In diesem Projekt werden mit paralleler gemischt-ganzzahliger Optimierung u.a. Problemstellungen aus der Produktionsplanung, Produktionsablaufplanung und Netzwerk-Design bzw. Netzwerk-Kapazitätsplanung untersucht.

## 1. Einleitung

Auf mathematischen Modellen basierende Optimierung kann in fast allen Bereichen der chemischen Industrie [1] wertvolle Beiträge leisten: beginnend mit der Anregung und Bewertung neuer Ideen in Forschung und Entwicklung über Prozeßoptimierung, Steuerung in Produktion und Logistik, Erstellung von Marktprognosen, optimale Preisfindung, bis zur strategischen Planung. **Optimierung** bedeutet die Bestimmung des Maximums oder Minimums einer bestimmten Funktion, die auf einem (beschränkten) Bereich  $S$  oder Zustandsraum definiert ist. Die **mathematische Optimierung** kann sowohl die *Optimalität* als auch die Erfüllung sämtlicher Randbedingungen, d.h. die *Zulässigkeit* der Lösung garantieren. Die klassische Optimierungstheorie (Differentialrechnung, Variationsrechnung, Optimale Steuerung) behandelt die Fälle, in denen  $S$  kontinuierlich, d.h. zusammenhängend ist. Die **gemischt-ganzzahlige, kombinatorische** oder kurz **diskrete Optimierung**, bis vor wenigen Jahren noch ein Randgebiet der mathematischen Optimierung, gewinnt zunehmend an Bedeutung [2]. Der Definitionsbereich  $S$  ist teilweise diskret, d.h. einige Variablen sind auf ganze Zahlen beschränkt. Die Ganzzahligkeit der Problemstellungen rührt z.B. daher, daß sogenannte Null-Eins-Entscheidungen — etwa die Entscheidung, ob ein Arbeitsschritt von einem bestimmten Mitarbeiter zu einem Zeitpunkt bearbeitet wird oder nicht — zu treffen sind oder Größen - z.B. Standort, Stufenzahl einer Kolonne, Containerart — nur ganzzahlige Werte annehmen können. Viele praktische Fragestellungen lassen sich als lineare gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme beschreiben. Deshalb wird in Kapitel 2 ein kurzer Überblick über derartige Ansätze und mathematische Algorithmen zu ihrer Behandlung gegeben.

In der chemischen Industrie gibt es eine breite Palette von Einsatzfeldern diskreter Optimierung, z.B. :

- Mischungsprobleme (Produktion, Logistik)
- Produktionsplanung (Produktion, Logistik, Marketing)
- Scheduling-Probleme (Produktion, Ablaufplanung)
- Prozeß-Design (Verfahrenstechnik)
- Depot-Auswahl-Probleme (Planung, Strategie, Lokalisierung)
- Netzwerk-Design (Planung, Struktur)

Typisch für die chemische Industrie, in abgewandelter Form aber auch für die Mineralöl- oder Nahrungsmittelindustrie, sind in natürlicher Weise **Mischungsprobleme**, die in den verschiedensten Varianten und meist in Verbindung mit speziellen logistischen Randbedingungen auftreten; ein Beispiel hierfür wird in Kapitel 3 diskutiert. Gerade bei Unternehmen, die die Vorteile eines komplexen Produk-

tionsnetzes ausnutzen können, sind **Produktionsplanungs-** und **Scheduling-Probleme** (Ablaufplanung, Maschinenbelegungsplanung) auf dem Hintergrund mehrerer verbundener Standorte (Kapitel 4) und/oder mehrstufiger Produktionsanlagen [3] zu sehen. Fast ausnahmslos sind **Umrüstproblematiken** mit einzubeziehen. Scheduling-Probleme tauchen natürlich auch in anderen Industriezweigen auf; ihre Lösung liefert Anlagenbelegungspläne oder die Antwort auf Personalzuordnungsprobleme. Sie gehören zu den schwierigsten Problemen der kombinatorischen Optimierung überhaupt. Typisch sind auch Mindest-Produktionsmengen, -Anlagenauslastungswerte oder -Schiffsladungen, die auf semi-kontinuierliche Variablen führen. Die Frage, wie bei Gegebenheit von Datenverkehrsaufkommen ein Telekommunikationsnetzwerk aufgebaut und genutzt werden sollte, führt, ebenso wie die Frage, welche Straßen und Verbindungsmöglichkeiten bei prognostizierbaren Transport- und Verkehrsaufkommen bereitgestellt werden sollten, auf ein **Netzwerk-Design-Problem**. Die genannten Anwendungsgebiete lassen sich meist noch mit Hilfe linearer gemischt-ganzzahliger Optimierungsmethoden behandeln. Die im **Prozeßdesign** chemischer Verfahrenstechnik auftretenden Probleme führen jedoch unvermeidlich auf nichtlineare diskrete Probleme.

Zwei konkrete Beispiele sollen im folgenden einen Eindruck von der Vielfalt der Einsatzmöglichkeiten linearer gemischt-ganzzahliger Modelle in der Produktion vermitteln. Das erste der Modelle beschreibt die Berechnung optimaler Mischungsrezepturen, das zweite liefert einen optimalen Produktionsplan in einem Mehrprodukt-Mehrstandort-Produktionsverbund. Beide Probleme werden mathematisch als gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme mit Hilfe eines exakten Optimierungsverfahrens (Branch&Bound, [4]) gelöst. Das zweite Problem wird sehr ausführlich beschrieben, um der Bedeutung der Modellbildung [5] zur Lösung gemischt-ganzzahliger Optimierungsmodelle Rechnung zu tragen.

In einer zusammenfassenden Diskussion werden Lösungsansätze für noch wesentlich komplexere Probleme diskutiert und insbesondere Parallelisierungsstrategien für den kombinatorischen, aber auch für den linearen Optimierungsteil aufgezeigt.

## 2. Einige Grundlagen linearer gemischt-ganzzahliger Optimierung

Bei gegebenen Freiheitsgraden  $x = (x_1, \dots, x_n)$ , Zielfunktional  $f(x)$  und Beschränkungen oder Constraints  $g(x)$  und  $h(x)$  heißt ein Optimierungsproblem

$$\min \{ f(x) \mid g(x) = 0, h(x) \geq 0, x \in X \} \quad (1)$$

**diskretes Optimierungsproblem**, wenn der Grundbereich  $X$  diskret, d.h. ganzzahlig ist, z.B.  $X = \mathbf{N} = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$ . Ein Vektor  $x$  heißt *zulässige Lösung* des Optimierungsproblems (1), wenn er den Bedingungen  $g(x) = 0, h(x) \geq 0, x \in X$  genügt. Er heißt *optimale Lösung*, wenn er zulässig ist und für alle zulässigen Lösungen  $x', x' \neq x$  gilt:  $f(x) \leq f(x')$ . Als Beispiel möge das Problem

$$\min \{ 3x_1 + 2x_2^2 \mid x_1^4 - x_2 - 15 = 0, x_1 + x_2 - 3 \geq 0, x_1 \in \mathbf{N}, x_2 \in \mathbf{N} \} \quad (2)$$

mit optimaler Lösung  $x^* = (x_1, x_2)^* = (2, 1)$  und  $f(x^*) = 8$  dienen; eine zulässige Lösung ist z.B. mit  $x_1 = 3$  und  $x_2 = 66$  gegeben.

Eine spezielle Klasse diskreter Optimierungsaufgaben mit großer Praxisrelevanz sind lineare gemischt-ganzzahlige Probleme der Form

$$\min \{ c^t \cdot x \mid x \in S \} , \quad S := \{ x \mid Ax = b , \ x_1, \dots, x_r \in \mathbf{N} , \ x_{r+1}, \dots, x_n \in \mathbf{R}_0^+ \} . \quad (3)$$

Dürfen die diskreten Variablen  $x_1, \dots, x_r$  nur die beiden Werte 0 und 1 annehmen, so spricht man auch von binären Variablen. Zur Lösung von (3) stehen Heuristiken und exakte Verfahren [4] zur Verfügung. Erstere generieren Lösungen ohne Optimalitätsnachweis und sollen hier nicht weiter betrachtet werden. Zu den exakten Verfahren gehören Schnittebenen- und Entscheidungsbaumverfahren, die sich in vollständige Enumeration, begrenzte Enumeration (z.B. Branch&Bound) und dynamische Optimierung unterteilen. Sie erlauben die Bestimmung einer optimalen Lösung. Auf dynamische Optimierung soll hier nicht eingegangen werden, da sie sich nur für spezielle Probleme eignet. *Vollständige Enumeration* generiert alle Lösungen und selektiert daraus die optimale Lösung. Da der Aufwand zur Berechnung aller Lösungen exponentiell steigt, ist dieses Verfahren nur für kleinere Probleme sinnvoll anwendbar. *Branch&Bound*-Verfahren dagegen schränken den Suchbaum durch geeignete Verzweigung eines Problems in mehrere Unterprobleme (Branching) und Berechnung der Lösung von Unterproblemen (Bounding) ein. Zunächst wird eine hinsichtlich der Ganzzahligkeitsbedingung relaxierte Variante von (3) gelöst. Dieses Problem  $P^0$

$$\min \{ c^t \cdot x \mid Ax = b , \ x_1, \dots, x_n \in \mathbf{R}_0^+ \} . \quad (4)$$

wird als LP-Relaxierung bezeichnet.

Das nachfolgende Beispiel zeigt, daß sich gemischt-ganzzahlige lineare Probleme und deren LP-Relaxierung drastisch unterscheiden können und daher auch mit einfachen Rundungsmechanismen aus relaxierten Programmen keine optimalen Lösungen für das diskrete Problem

$$\max Z ; \quad Z = x_1 + x_2 , \quad (5)$$

$$\begin{aligned} -2x_1 + 2x_2 &\geq 1 \\ -8x_1 + 10x_2 &\leq 13 \quad x_1 \in \mathbf{N} , \ x_2 \in \mathbf{N} \end{aligned} \quad (6)$$

gefunden werden können. Mit Hilfe einer einfachen Graphik können mit Hilfe der Geraden

$$g_1 : x_2 = x_1 + \frac{1}{2} ; \quad g_2 : x_2 = 0.8x_1 + 1.3 \quad (7)$$

die Lösungen  $Z_{LP} = 8.5(4, 4.5)$  und  $Z_{IP} = 3(1, 2)$  bestimmt werden, die sich offenbar sehr deutlich sowohl hinsichtlich des Lösungsvektors als auch hinsichtlich des Zielfunktionswertes unterscheiden. Damit scheiden einfache Rundungsverfahren zur Lösung diskreter Probleme aus. Beim Branch&Bound-Verfahren kann man die LP-Relaxierung jedoch in folgender Weise ausnutzen:

Ist bei der Lösung eines Unterproblems  $P^k, k = 0, 1, 2, \dots$  der Wert  $\bar{x}_j$  einer diskreten Variablen,  $x_j, 1 \leq j \leq r$ , nicht ganzzahlig, so werden zwei disjunkte

Unterprobleme  $P^{k+1}$  bzw.  $P^{k+2}$  erzeugt, indem zum Problem  $P^k$  die Ungleichungen  $x_j \leq d$  bzw.  $x_j \geq d + 1$  hinzugefügt werden, wobei  $d$  die größte ganze Zahl kleiner  $x_j$  ist. Bei der Lösung der Unterprobleme  $P^{k+1}$  und  $P^{k+2}$  kann auf die bekannte Lösung  $P^k$  zurückgegriffen werden, indem die zusätzlichen Ungleichungen hinzugefügt werden und dann der *duale Simplex-Algorithmus* eingesetzt wird.

Die Untersuchung eines beliebigen so erzeugten Unterproblems bzw. Knotens  $P^k$  führt auf drei attraktive Fälle, die den Suchbaum nicht erweitern:

1. Für die Lösung  $x^k$  von  $P^k$  gilt:  $x^k \in S$ ; Vergleich mit einer anderen eventuell schon existierenden Lösung von (3).
2. Das Problem  $P^k$  hat keine zulässige Lösung.
3. Für die Lösung  $x^k$  von  $P^k$  gilt:  $x^k \notin S$  und  $c^t \cdot x^k$  ist größer als der Zielfunktionswert einer eventuell schon existierenden Lösung von (3).

Andernfalls werden durch Hinzufügung weiterer Ungleichungen wieder zwei Unterprobleme generiert. Sowohl mit Hilfe der *Variablenwahl* als auch mit Hilfe der *Knotenwahl* läßt sich der Algorithmus steuern und die Effizienz der Methode steigern. Die LP-Relaxierung und die im Suchbaum gefundenen Lösungen von (3) dienen als untere und obere Schranken  $Z_u$  und  $Z_o$ . Alle aktiven Knoten mit einer Bewertung  $Z \geq Z_o$  brauchen nicht weiter untersucht zu werden. Sind alle aktiven Knoten abgearbeitet, so ist entweder eine optimale Lösung von (3) bestimmt oder nachgewiesen, daß (3) keine Lösung besitzt.

Abschließend sei bemerkt, daß das vorgestellte Branch&Bound-Verfahren kein besseres als exponentielles Laufzeitverhalten garantiert, sich aber in der Praxis bewährt hat.

## 2.1. Lösungsverfahren linearer Optimierungsprobleme

Die Güte eines Verfahren zur Lösung linearer gemischt-ganzzahliger Programme hängt wesentlich von den Eigenschaften des inneren Optimierungskerns, dem *LP-solver* ab. Zur Lösung der Unterprobleme, d.h. der linearen Programme, werden derzeit in kommerzieller Software *revidierte Simplex-Verfahren* [6] und *Innere-Punkt-Methoden* [7] verwendet.

### 2.1.1. Simplex-Verfahren

Bei einem linearen Programm sind sowohl die Zielfunktion als auch die Beschränkungen in linearer Form gegeben. Demzufolge hat der Lösungsraum die Form eines Polyeders. Infolge der Konstanz des Gradienten liegt die Lösung in einer der Ecken. Das klassische Simplex-Verfahren nach Dantzig nutzt diese Eigenschaft aus, indem es von Ecke zu Ecke iterativ die optimale Ecke bestimmt. In der Sprache der linearen Algebra wird das geometrische Element Ecke durch den Begriff der Basis

ersetzt. Die wesentlichen algorithmischen Komponenten des Simplex-Verfahrens sind der Optimalitätstest, die Wahl einer aufzunehmenden Basisvariablen und die Elimination einer Basisvariablen, sowie der Pivotschritt, der geometrisch die Bewegung von einer Ecke zu einer benachbarten Ecke beschreibt. Beim *revidierten Simplex-Verfahren* greifen diese algorithmischen Schritte direkt auf die Eingangsdaten  $(A, b, c)$  zurück. Sämtliche zur Berechnung der Austauschschritte erforderlichen Größen werden aus der Inversen der Basismatrix berechnet. Bei großen linearen Systemen bietet dieses revidierte Verfahren den Vorteil eines erheblich reduzierten Rechen- und Speicheraufwandes.

### 2.1.2. Innere-Punkt-Methoden

Innere-Punkt-Methoden (IPM) sind spezielle Algorithmen zur Lösung nichtlinearer beschränkter Optimierungsprobleme. Ausgehend von einer zulässigen Startlösung, die im Inneren  $\mathcal{S}$  des zulässigen Bereichs  $S$  liegen muß, bestimmen diese Algorithmen iterativ die Lösung, und nähern sich in  $\mathcal{S}$  asymptotisch der bei linearen Programmen auf dem Rand liegenden Lösung an. Mit Hilfe der notwendigen und hinreichenden Bedingungen für die Existenz lokaler Optima, d.h. der Karush-Kuhn-Tucker-Bedingungen [8], wird dieses Problem auf die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems reduziert. Dieses kann z.B. mit Hilfe des Newton-Verfahren gelöst werden.

In der linearen Programmierung eignen sich die IPM insbesondere für große, dünn-besetzte Systemmatrizen oder solche, die nahezu entartet sind. Hier lassen sich erhebliche Rechenzeitgewinne erzielen. Hinsichtlich der Lösungsstrategie können diese Algorithmen in primäre, duale und primär-duale Verfahren unterteilt werden, wobei primär-duale Verfahren die effizientesten sind. Um die wesentlichen Eigenschaften von Innere-Punkt-Methoden zu erläutern, sei die *logarithmische Barrieremethode* etwas genauer betrachtet. Ein gegebenes lineares Programm der Form

$$LP : \min\{ c^t x \mid Ax = b, x \geq 0, x \in \mathbf{R}^n, b \in \mathbf{R}^m \} \quad (8)$$

(durch Einführung von Schlupfvariablen kann jedes lineare Programm auf diese Gestalt geführt werden) mit Lösungsvektor  $x^*$  wird wie folgt modifiziert

$$P^k : \min\{ Z(x) \mid Ax = b, x \geq 0; Z(x) = c^t x - \mu \cdot \sum_{j=1}^n \ln x_j, \mu = \mu^k \}, \quad (9)$$

wobei  $\mu$  ein Skalierungs- oder Wichtungsfaktor ist, der bei jedem Iterationsschritt  $k$  neu gewählt wird; bei der Formulierung des Problems  $P$  hätte man natürlich auch Ungleichungen  $A_j x_j \leq b_j$  durch Terme der Form  $\ln(b_j - A_j x_j)$  berücksichtigen können. Ein wichtiger Implementierungsaspekt des Verfahrens ist hierbei natürlich, wie  $\mu$  in jedem Iterationsschritt  $k$  gewählt wird. Durch Wahl von  $\mu^k$  wird somit eine

Folge  $P^k$  von Minimierungsproblemen konstruiert, wobei asymptotisch

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mu^k \cdot \sum_{j=1}^n \ln x_j = 0 \quad (10)$$

gelten muß, d.h.

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \operatorname{argmin}(P^k) = \operatorname{argmin}(LP) = x^* . \quad (11)$$

Eine übliche Wahl der  $\mu^k$  besteht in der in [7] gegebenen Heuristik

$$\mu = \frac{c^t x - b^t y + u^t w}{\varphi(n)} , \quad (12)$$

wobei  $n$  wieder die Zahl der Unbekannten und  $\varphi(n)$  die Hilfsfunktion

$$\varphi(n) = \begin{cases} n, & n \leq 5000 \\ n^3, & n \geq 5000 \end{cases} \quad (13)$$

darstellt.

Die Probleme  $P^k$  werden in der Praxis nicht exakt gelöst, sondern man begnügt sich bei Lösung mit Newton-Verfahren mit einem einzigen Newton-Schritt. Bezeichnet  $x^k$  die Lösung, d.h. den Minimalpunkt des Problems  $P^k$ , so bildet die Folge  $x^k$  der Minimalpunkte den *zentralen Pfad* (Central Path) des Problems  $LP$ .

Bis hierhin führen sämtliche Betrachtungen erst auf den primären Ansatz. Um zum dualen, und schließlich zum primär-dualen Ansatz zu gelangen, seien die zu  $P$  gehörenden Karush-Kuhn-Tucker (KKT)-Bedingungen betrachtet, die aus der Lagrange-Funktion

$$L = L(x, y) = Z(x) - y^t \cdot (Ax - b) = c^t x - \mu \cdot \sum_{j=1}^n \ln x_j - y^t \cdot (Ax - b) \quad (14)$$

folgen. Mit den Bezeichnungen

$$e = [1, \dots, 1]^t \in \mathbf{R}^n , \quad X = \operatorname{diag}(x_1, \dots, x_n) , \quad X^s = \operatorname{diag}(x_1^s, \dots, x_n^s) \quad (15)$$

lauten die KKT:

$$\frac{\partial L}{\partial x} = c - \mu \cdot X^{-1} \cdot e + A^t y = 0 , \quad (16)$$

$$\frac{\partial L}{\partial y} = A \cdot x - b = 0 , \quad (17)$$

$$x \geq 0 . \quad (18)$$

Wegen des Auftretens von  $X^{-1}$  handelt es sich bei (16-18) um ein nichtlineares Gleichungssystem. Derartige Systeme  $f(z^*) = 0$  werden beim Newton-Verfahren aufbauend auf der Linearisierung und Jacobi-Matrix  $J$

$$0 = f(z^*) = f(z + \Delta z) = f(z) + J(z) \cdot \Delta z ; \quad J(z) = \frac{\partial f}{\partial z}(z) \quad (19)$$

gemäß

$$\Delta z = -J^{-1} \cdot f(z) \quad (20)$$

gelöst. Dieser Ansatz führt bei (2.05) auf das lineare Gleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \mu X^{-2} & A \\ A & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c - \mu X^{-1} \cdot e + A^t y \\ Ax - b \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Die Auflösung dieses Gleichungssystems stellt den zentralen Aufwand bei den Iterationen der Innere-Punkt-Verfahren dar.

Bis hierhin vorgenommene Beschreibung gibt den primären Ansatz wieder. Aktuelle und effizientere Algorithmen beruhen jedoch auf einem *primär-dualen Schritt*, der formal eine ähnliche Basis hat und aus dem analog zu obigem Vorgehen die Linearisierung und der Newton-Schritt formuliert werden.

Für gegebenes  $\mu$  bzw.  $\mu^k$  wird der Algorithmus solange fortgeführt bis das relative *duality gap*  $\Delta$  der Bedingung

$$\Delta := \frac{c^t x - b^t y + u^t w}{1 + |b^t y - u^t w|} < \epsilon \quad (22)$$

genügt, wobei  $u$  und  $w$  im dualen Problem auftretende Größen beschreiben.

### 2.1.3. Innere-Punkt-Methoden versus Simplex-Algorithmus

Zur Zeit sind die besten Simplex-Verfahren und die besten Innere-Punkt-Methoden (IPM) miteinander vergleichbar. Es hängt sehr vom Problem ab, welches Verfahren das effizientere ist. Einige allgemeine Eigenschaften lassen sich nach Nemhauser [9] in den folgenden Punkten zusammenfassen :

Der Simplex-Algorithmus braucht recht viele Iterationen, die aber jeweils sehr schnell sind. Die Zahl der Iterationen wächst approximativ linear mit der Zahl der Constraints (Zeilen).

IPM benötigen meist nur etwa 20 bis 30 Iterationen; diese Zahl wächst schwach mit der Problemgröße. Allerdings ist jede Iteration sehr kostspielig. Der zentrale Rechenaufwand für ein Problem mit  $n$  Variablen besteht in der Lösung eines  $n \cdot n$  linearen Gleichungssystems. Daher ist es wesentlich für den Erfolg der IPM, daß dieses System nur dünn besetzt ist.

Wenngleich die Problemabhängigkeit eine wesentliche Rolle bei der Bewertung der Effizienz von Simplex-Verfahren und IPM spielt, scheinen die IPM bei großen, dünn besetzten Problemen Vorteile zu haben.

Insbesondere für große Systeme scheinen Hybridalgorithmen sehr effizient zu sein. In der ersten Phase ermitteln diese eine nahezu optimale Lösung mit Hilfe einer IPM, d.h. bestimmen eine Lösung nahe des Polyederrandes. In der zweiten Phase wird mit Hilfe des Simplex-Verfahrens daraus eine Basis abgeleitet und schließlich diese zur optimalen Basis iteriert.

Im Zusammenhang mit dem oben skizzierten Branch&Bound-Verfahren haben IPM derzeit noch den Nachteil, daß sie keine effizienten Warmstarts erlauben, so



daß sich ihr Einsatz bei linearen gemischt-ganzzahligen Programmen auf die Hybridansätze beschränkt.

### 3. Optimale Stoffmischung unter logistischen Randbedingungen

Wie bei vielen anderen Mischungen –z.B. in der Mineralöl- oder Nahrungsmittelinindustrie– wird auch bei Stoffmischungen in der chemischen Produktion davon ausgegangen, daß sämtliche beteiligten Stoffe sich chemisch inert verhalten, d.h. miteinander keine Reaktionen eingehen und daß lineare Mischungsgesetze vorliegen. Sollten bei Stoffeigenschaften wie Viskosität oder Siedetemperatur scheinbar nichtlineare Mischungsgesetze erforderlich sein, so ist zu beachten, daß mit Hilfe logarithmischer Transformationen oder Ausnutzung von Monotonieeigenschaften des Dampfdruckes äquivalente und nunmehr lineare Beziehungen hergestellt werden können.

Mit Hilfe des nachfolgenden Beispiels soll verdeutlicht werden, welche Problemstellungen auf gemischt-ganzzahlige Modelle führen können; das zugehörige mathematische Modell ist ausführlich in [3] beschrieben.

Zu lösen ist ein Mischungsproblem mit Qualitätsbeschränkungen, wobei die Kosten der Rohstoffe, Mischanalysen, Abfüll- und Lagerbewegungen sowie die des Containerhandling minimiert werden sollen. Die Problematik der Abfüllbewegungen umfaßt die Suche nach einer Auswahl von Containern, mit denen möglichst effizient alle zu bearbeitenden Aufträge durchgeführt werden können. Die zur Auswahl stehenden **Bestandscontainer** werden durch die folgenden Parameter und Eigenschaften charakterisiert:

- Füllstand
- Konzentrationen verschiedener Inhaltsstoffe und andere Qualitätsparameter

Beim **Mischverfahren** wird die lineare Mischbarkeit der Bestandschargen zu einer Auftragsmischung vorausgesetzt. Konzentrationsgrenzen dürfen nicht unterschritten und aus Kostengründen nur so geringfügig wie möglich überschritten werden. Gefordert wird ferner die Einhaltung der Auftragsmenge  $A_j$  und eventuell die Verwendung einer Mindestmenge an Sonderrohstoffen sowie die Fixierung von Zusatzstoffen. Aus logistischen Gründen kann die Zahl der maximal zu verwendenden Container begrenzt sein. **Aufträge** werden beschrieben durch:

- Auftragsnummer, Auftragsmenge und Konzentrationsgrenzen

Als **technische Randbedingungen** sind folgende Aspekte zu beachten:

- Bestandscontainer können zu Befüllcontainern werden.
- Ein Container darf rechnerisch nicht vollständig entleert werden, da beim Abfüllen Verluste entstehen. Es muß daher unter Abzug einer Restmenge optimiert werden. Wird ein Bestandscontainer befüllt, so wird die Restmenge positiv berücksichtigt.

- Normalerweise wird eine Auftragsmischung aus mehreren Bestandscontainern in einen leeren Container abgefüllt, wobei Kosten durch den An- und Abtransport von Containern zum Ort der Mischung entstehen, die durch Befüllung eines Bestandscontainers anstelle eines zu befüllenden leeren Containers reduziert werden

können. Dieser Bestandscontainer darf jedoch wegen der nicht quantifizierbaren Abfüllverluste an keinen weiteren Mischungen beteiligt sein.

- Entsteht eine Auftragscharge durch Mischung, so wird eine Analyse (Nachuntersuchung) erforderlich, die Zusatzkosten verursacht.

**Ziel** ist es, durch optimale Bestimmung der Entnahmemengen aus bestimmten Bestandscontainern die Kosten des Rohstoffeinsatzes und des Mischungsablaufs zu minimieren. Desweiteren könnten noch

- verschiedene Lagerorte eines Bestandscontainers,
  - detaillierte Beschreibung von Abfüllverlusten sowie
  - mehrperiodische Aspekte und Auswahl von Aufträgen
- berücksichtigt werden.

Das mathematische Modell ist ausführlich in [3] dokumentiert und wird mit Hilfe des in XPRESS-MP, einer kommerziellen Software [11] zur Lösung gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme, enthaltenen Modellgenerators übersetzt und mit einem auf LP-Relaxierung beruhenden Branch&Bound-Verfahren innerhalb weniger Minuten gelöst.

Bei einem ähnlichen Problem innerhalb der BASF wurde eine erhebliche Kostenersparnis erzielt. Zusätzliche Vorteile sind in diesem Fall die schnelle und flexible Reaktion auf Kundenanfragen, das Aufspüren völlig neuer Rezepturen und die sinnvolle Verwendung von ansonsten zu entsorgenden Nebenprodukten.

## 4. Optimierung eines weltweiten Produktionsverbundes

In diesem Abschnitt wird ein Produktionsplanungsmodell zur Optimierung eines weltweiten Produktionsverbundes mit drei produzierenden Anlagen in drei Kontinenten vorgestellt. Das Modell beschreibt ein Szenario mit orts- und zeitabhängigen Umrüstzeiten, Minimalanforderungen für die während eines Jahres zu produzierende Warenmenge, beschränkten Transportkapazitäten und verschiedenen Transportzeiten und Marktanforderungen. Die zu maximierende Zielfunktion (Einnahmen minus Kosten) enthält produktspezifische Lagerkosten, Zusatzlagerkosten, Zukaufskosten, Umrüstungskosten, Transportkosten und Herstellungskosten sowie einen Erlösterm. Es wird schließlich die Frage beantwortet, welche Menge eines jeden Produktes auf einer bestimmten Anlage produziert werden soll, um bei Berücksichtigung der Marktnachfragen den Deckungsbeitrag zu maximieren.

### 4.1. Problembeschreibung: Produktionsverbund

Zu lösen ist ein Produktionsplanungsproblem für einen Verbund aus drei Anlagen an drei verschiedenen Standorten, auf denen jeweils drei verschiedene Produkte qualitätsgleich produziert werden, um vorliegende Nachfragen zu befriedigen. Jedem Standort ist ein Lager und ein Verkaufsbereich (Europa, Amerika, Asien) zugeordnet. Die Standorte können via Schiffstransport Ware austauschen. Es ist eine

Vorausschau über ein Jahr erwünscht. Die **Anlagen** sind charakterisiert durch

- produkt- und ortsabhängige Kapazitäten ( Tonnen / Jahr )
- produkt- und ortsabhängige Umrüstzeiten für Produktwechsel (Tage)
- Mindestauslastung. Die Qualität der Produktion kann nur garantiert werden, wenn die Anlagen mit mindestens 50% ausgelastet sind. Andernfalls wird die Produktion eingestellt.

• Da Produktwechsel bzw. Umrüstungen mit einem Anfahren der Anlage verbunden sind und diese Aktion ein gewisses Risiko darstellt, sind Umrüstungen sehr unerwünscht und deshalb explizit beschränkt, z.B. auf höchstens 5 pro Jahr. Für die Modellbildung wird weiter noch die vereinfachende Annahme genutzt, daß je Monat höchstens eine Umrüstung stattfindet. Für die **Lager** gilt:

- Jedem Standort ist ein Lager bestimmter Kapazität zugeordnet.
- Zusatzlager können kurzfristig angemietet werden.
- Zur Erhaltung der Lieferbereitschaft dürfen bestimmte Mindestmengen im Lager nicht unterschritten werden. **Aufträge** werden beschrieben durch
- Auftragsnummer, Produktname, Monat und Auftragsmenge  $D_{ijk}$ . Die Aufträge liegen auf Monatsbasis vor. Sie sollten möglichst vollständig erfüllt werden.
- Möglich sind Zukäufe von Produkten im Falle eines Produktionsengpasses.

**Ziel** ist es, Produktions-, Umrüst-, Verschiffungs-, Lager- und Verkaufspläne derart zu bestimmen, daß sämtliche Nachfragen erfüllt werden und der Deckungsbeitrag (Erlös minus Kosten für Produktion, Umrüstung, Lager, Zukauf und Transport) maximal wird.

Das nachfolgende deterministische, mehrperiodische Modell wurde gemeinsam mit Dr. Max Wagner erarbeitet.

#### 4.2. Mathematisches Modell

Betrachtet wird ein Szenario aus  $N_A = 3$  Anlagen bzw. Standorten  $i$ ,  $N_P = 3$  Produkten  $j$  und  $N_L = 3$  Zielländern  $z$ . Zur Erstellung des Belegungsplanes wird eine zeitliche Diskretisierung des gesamten Produktionszeitraumes  $T_P = 1$  Jahr (360 Tage) in  $N_T = 12$  äquidistante Zeitintervalle der Größe  $\Delta T = 30$  Tage vorgenommen; als weitere Zeiten werden orts- und produktabhängige Umrüstauern  $\Delta U_{ij_1j_2}$  zwischen 2 und 8 Tagen vorgegeben, während der im Falle einer Umrüstung auf Anlage  $i$  von Produkt  $j_1$  nach Produkt  $j_2$  keine verkaufsfähige Ware produziert wird.

Der Belegungsplan wird durch die  $N_A \cdot N_P \cdot N_T = 108$  binären Variablen  $\delta_{ijk}$  beschrieben, die angeben, ob am Ende des Zeitintervalls  $k$  auf der Anlage  $i$  das Produkt  $j$  hergestellt werden kann ( $\delta_{ijk} = 1$ ) oder nicht ( $\delta_{ijk} = 0$ ).

Desweiteren seien nichtnegative Unbekannte  $m_{ijk}$  (produzierte Mengen) sowie nichtnegative Unbekannte  $p_{ijkz}$  eingeführt, die für  $z \neq i$  angeben, welche Menge von Produkt  $j$  vom Standort  $i$  zur Zeit  $t$  in das Zielland  $z$  abgeschickt wird und für  $z = i$  die Verkaufsmenge am Standort  $i$  darstellen.

Zunächst muß garantiert werden, daß nicht zwei Produkte gleichzeitig produziert

werden, d.h.

$$\sum_{j=1}^{N_P} \delta_{ijk} = 1 \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad . \quad (23)$$

Die Variablen  $\xi_{ij_1j_2k}$  beschreiben, ob Anlage  $i$  von Produkt  $j_1$  auf ein Produkt  $j_2$  im Zeitintervall  $k$  umgerüstet wird. Aus modelltechnischen Gründen findet eine Umrüstung, falls sie vorgenommen wird, nicht an den Monatsgrenzen statt. Durch die nachfolgenden Ungleichungen

$$\xi_{ij_1j_2k} \geq \delta_{ij_1k-1} + \delta_{ij_2k} - 1 \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad \forall j_1 \quad \forall j_2 \text{ mit } j_2 \neq j_1 \quad (24)$$

wird die Kopplung des  $k$ -ten Zeitintervalls an die beiden benachbarten Produktionsabschnitte gewährleistet. (24) garantiert zusammen mit (23) und (39) bereits, daß die  $\xi_{ij_1j_2k}$  nur die Werte 0 oder 1 annehmen; die Ersparnis an Rechenzeit gegenüber der expliziten Deklaration als binäre Variablen ist erheblich. Nehmen die binären Entscheidungsvariablen in aufeinanderfolgenden Zeitabschnitten den Wert Null an, d.h.  $\delta_{ijk-1} = \delta_{ijk} = 0$ , so bedingt dies, daß das Produkt  $j$  im Zeitintervall  $k$  nicht produziert werden kann. Dies wird durch

$$m_{ijk} \leq C_{ik} \cdot \delta_{ijk-1} + C_{ik} \cdot \delta_{ijk} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad (25)$$

ausgedrückt. Fällt in ein bestimmtes Zeitintervall  $k$  keine Umrüstung, so kann ein Produkt mit voller theoretischer Kapazität  $C_{ik}$  produziert werden, sonst nur mit der reduzierten Kapazität

$$\bar{C}_{ij_1j_2k} = C_{ik} - \frac{\Delta U_{ij_1j_2}}{\Delta T} \cdot C_{ik} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j_1 \quad \forall j_2 \text{ mit } j_2 \neq j_1 \quad \forall k \quad . \quad (26)$$

Mit Hilfe der Fixierung  $C_{ik} = 0$  kann eine geplante Stilllegung einer Anlage beschrieben werden.

Die Summe der hergestellten Produkte während eines Zeitintervalls  $k$  darf natürlich nicht größer sein als die gegebenenfalls reduzierte Kapazität, d.h.

$$\sum_{j=1}^{N_P} m_{ijk} \leq C_{ik} + \sum_{j_1=1}^{N_P} \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^{N_P} [\bar{C}_{ij_1j_2k} - C_{ik}] \cdot \xi_{ij_1j_2k} \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad . \quad (27)$$

Die Gesamtzahl der Umrüstungen während des gesamten Produktionszeitraumes am Ort  $i$  kann in einfacher Weise durch eine vorgegebene Schranke  $U_i$

$$\sum_{k=1}^{N_T} \sum_{j_1=1}^{N_P} \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^{N_P} \xi_{ij_1j_2k} \leq U_i \leq N_T \quad ; \quad \forall i \quad (28)$$

beschränkt werden.

Produzierte, zugekaufte, gelagerte, verkaufte und verschifft Mengen werden durch die folgenden Lagerbilanzen verknüpft, die zeitlich rekursive Relationen ausnutzen. Die Größen  $\ell_{ijk}$  definieren den Lagerbestand des  $j$ -ten Produktes am Standort  $i$  am Ende des  $k$ -ten Zeitintervalls. Infolge der Positivität der  $\ell_{ijk}$  und durch die Bilanzgleichung

$$\ell_{ijk} := \ell_{ijk-1} + b_{ijk} + m_{ijk} - \left[ \sum_{z=1}^{N_L} p_{ijkz} - \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq i}}^{N_L} p_{sj\tau i} \right] , \quad \ell_{ij0} = B_{ij} ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k . \quad (29)$$

ist sichergestellt, daß nicht mehr exportiert oder verkauft wird als es der Lagerbestand  $\ell_{ijk-1}$  zuzüglich der im Laufe des Zeitintervalls  $k$  dem Lager  $i$  zugefügten Menge (Produktion, Zukauf, eingegangene Transportware) eines Produktes  $j$  zuläßt. In diesen Gleichungen sind die Produktion  $m$ , die Versendung in andere Zielländer und die Anlieferung  $p$  von einem anderen Standort, Zukaufsmengen  $b$ , die ebenfalls gelagert werden können, der Anfangslagerbestand  $B_{ij}$  sowie der Verkauf  $p$  ebenfalls mitberücksichtigt. Der Index  $\tau$  kennzeichnet das Zeitintervall, in dem das Produkt  $j$  vom Standort  $s$  in das Zielland  $i$  abgeschickt wurde, d.h.  $\tau = t - \Delta(s, i)$ , wobei  $\Delta(s, i)$  die diskrete Transportdauer vom Ort  $s$  zum Ort  $i$  bezeichnet. Berücksichtigt werden natürlich nur die Summanden, für die  $\tau > 0$  ist. Die zugekauften Mengen  $b_{ijk}$  erlauben es, auch bei Kapazitätsengpässen die Nachfrage zu decken. Sie müssen allerdings den Beschränkungen

$$b_{ijk} \leq B_{ijk}^+ \cdot \mathcal{B}_{ij} ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad (30)$$

genügen; hierbei geben die  $B_{ijk}^+$  maximal zulässige Mengen an, während die  $\mathcal{B}_{ij}$  nur durch vorgegebene Werte 0 oder 1 spezifizieren, ob überhaupt Zukäufe zugelassen sind.

Gleichzeitig ist sicherzustellen, daß ein Mindestbestand für Produkt  $j$  bei Anlage  $i$  garantiert ist, d.h.

$$\ell_{ijk} \geq M_{ij} ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k . \quad (31)$$

Soweit der Lagerbestand betroffen ist, muß auch sichergestellt werden, daß die lokale Lagerkapazität  $\mathcal{L}_{ij}$  nicht überschritten wird, d.h.

$$\ell_{ijk} \leq \mathcal{L}_{ij} ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k . \quad (32)$$

Einige Untersuchungen zeigten, daß diese Einschränkung die Güte der Lösung stark beeinflußt. Insbesondere wurde klar, daß eine Bereitstellung größerer Lagerkapazitäten die Bedarfsdeckung und vor allem den Gewinn erheblich vergrößert. Aus diesem Grunde lag es nahe, weitere Variablen  $y_{ijk}$  einzuführen, die weiteres Lager mit besonderen Kosten, das z.B. durch Anmietung bereitgestellt werden kann, repräsentieren und somit statt auf (40) auf die weichere Bedingung

$$\ell_{ijk} \leq \mathcal{L}_{ij} + y_{ijk} ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad (33)$$

führen, wobei die Kapazität der Zusatzlager jedoch beschränkt ist, etwa durch

$$y_{ijk} \leq Y_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad . \quad (34)$$

Die Nachfrage  $D_{ijk}$  für Produkt  $j$  am Standort  $i$  zur Zeit  $k$  soll notfalls durch Zukäufe gedeckt werden, es soll aber auch nicht mehr ausgeliefert werden als durch die Nachfrage  $D_{ijk}$  angefordert wird, d.h.

$$p_{ijki} \leq D_{ijk} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad . \quad (35)$$

Hinsichtlich der Versendung von Ware in andere Zielländer sind Mindest-Schiffsladungen zu beachten. Die Relationen

$$p_{ijkz} = 0 \quad \vee \quad P^- \leq p_{ijkz} \leq P^+ \quad , \quad z \neq i \quad (36)$$

können in XPRESS-MP durch semi-kontinuierliche Variablen  $\sigma_{ijkz}$  dargestellt werden, die der Bedingung

$$\sigma_{ijkz} = 0 \quad \vee \quad 1 \leq \sigma_{ijkz} \leq \sigma^+ \quad , \quad z \neq i \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad \forall z \quad (37)$$

genügen. Die Kopplung zwischen den  $p_{ijkz}$  und  $\sigma_{ijkz}$  leistet die Transformation

$$p_{ijkz} = P^- \cdot \sigma_{ijkz}, \sigma^+ = P^+ / P^-, \quad z \neq i \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad \forall z \quad . \quad (38)$$

In die Zielfunktion werden die Herstellungs-, Umrüst-, Lager- und Transportkosten aufgenommen. Zunächst erhält man mit den anlagen- und produktspezifischen Umrüstkosten  $U_{ij_1j_2}$  die gesamten Umrüstkosten gemäß

$$K_U := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{j_1=1}^{N_P} \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^{N_P} U_{ij_1j_2} \cdot \xi_{ij_1j_2k} \quad . \quad (39)$$

Mit den Lagerkosten  $K_{ij}$  je Mengeneinheit und Zeitintervall  $\Delta T$  für Produkt  $j$  bei Anlage  $i$  ergeben sich die Lagerkosten  $K_L$  bzw. die Zusatzkosten  $K_M$  für ein mögliches zugemietetes Lager mit spezifischen Lagerkosten  $M_{ij}$  zu

$$K_L := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} (K_{ij} \cdot \sum_{k=1}^{N_T} \ell_{ijk}) \quad , \quad K_M := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} (M_{ij} \cdot \sum_{k=1}^{N_T} y_{ijk}) \quad . \quad (40)$$

Die gesamten Transportkosten ergeben sich mit den individuellen Kosten  $T_{iz}$  für den Transport einer Mengeneinheit von Standort  $i$  nach Standort  $z$  zu

$$K_T := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{\substack{z=1 \\ z \neq i}}^{N_L} T_{iz} \cdot p_{ijkz} \quad . \quad (41)$$

Schließlich sind noch die variablen Produktionskosten  $V_{ij}$ , bzw. in Summe

$$K_P := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} V_{ij} \cdot m_{ijk} \quad (42)$$

sowie die durch Zukäufe mit Kaufkosten  $K_{ijk}$  verursachten Kosten  $K_Z$

$$K_Z = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} K_{ijk} \cdot b_{ijk} \quad (43)$$

zu berücksichtigen. Die Einnahmen  $E$  berechnen sich aus den Verkaufserlösen zu

$$E = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} E_{ijk} \cdot p_{ijk} \quad (44)$$

Damit ergibt sich die zu maximierende Zielfunktion als der Deckungsbeitrag

$$Z(\delta, \xi, m, p, y, b) = E - (K_U + K_L + K_M + K_T + K_P + K_Z) \quad (45)$$

#### 4.3. Realisierungsaspekte und Resultate

Das Modell führt auf ein gemischt-ganzzahliges lineares Optimierungsproblem mit 72 binären und 248 semi-kontinuierlichen Variablen, sowie 1401 kontinuierlichen Unbekannten und schließlich 976 linearen Nebenbedingungen. Es wird mit XPRESS-MP auf einem 80386 PC innerhalb weniger Minuten gelöst; wesentlich war hierfür bereits in der Formulierungsphase die Anpassung der Modellstruktur (gemischt-ganzzahliges Programm) an die algorithmischen Grundlagen der Software, um die numerischen Eigenschaften optimal auszunutzen. Im vorliegenden Fall wird nur die erste zulässige (gemischt-ganzzahlige) Lösung beim Branch&Bound-Verfahren bestimmt, die —wie sich mit Hilfe der LP-Relaxierung in den meisten Fällen zeigen läßt— höchstens ein oder zwei Prozent vom Optimum abweicht.

### 5. Parallelisierungsaspekte gemischt-ganzzahliger Optimierung

Die angeführten Beispiele zeigen, daß in einzelnen Fällen mathematische Problemlösungen bereits erfolgreich in der BASF eingesetzt werden. Dem steht jedoch ein schier unerschöpfliches, chancenreiches, aber bisher ungenutztes Potential zur Reduzierung der Kosten, zur Steigerung der Effizienz und der Ressourcenschonung bei gleichzeitig höherer Flexibilität gegenüber. Allerdings übersteigen viele Probleme die Komplexität der behandelten Beispiele um ein Vielfaches. In manchen Fällen muß auf den Optimalitätsnachweis verzichtet werden; statt dessen ist man bemüht, sichere Schranken abzuleiten, die die Qualität der Lösung bewerten. Ein anderes

in der BASF untersuchtes Verfahren zur Lösung von Scheduling-Problemen [12] ist die aus der Künstlichen-Intelligenz-Forschung bekannte Technik der Constraint-Netze und Constraint-Propagierung [13]. Um aber auch bei komplexen Systemen, in denen nicht mehr nur einige Hundert, sondern eher einige Tausend oder gar Zehntausend diskrete Variablen auftreten, gemischt-ganzzahlige Optimierungsverfahren erfolgreich einsetzen zu können, initiierte die BASF das von der Europäischen Gemeinschaft geförderte ESPRIT-Projekt *PAMIPS* mit einem aus 4 Industriepartnern und 3 Universitäten bestehenden Konsortium. In diesem Projekt werden mit paralleler gemischt-ganzzahliger Optimierung u.a. Problemstellungen aus Reihenfolgeplanung (Scheduling), Produktionsablaufplanung sowie Netzwerk-Design bzw. Netzwerk-Kapazitätsplanung untersucht.

Exakte Verfahren zur Lösung gemischt-ganzzahlig Optimierungsprobleme bieten zwei Ansatzpunkte für die Parallelisierung:

- der kombinatorische Teil des Algorithmus
- der lineare Optimierungskern des Algorithmus

Der kombinatorische Teil besteht entweder aus einem *Branch&Bound*- oder einem *Branch&Cut*-Verfahren. In beiden Fällen sind zahlreiche Unterprobleme auszuwerten, die in der Lösung eines linearen Programmierungsproblems der Form (3) bestehen. Es ist naheliegend, die Auswertung der unabhängigen Unterprobleme, die als Knoten in einem Baum geführt werden, von einem Netz paralleler Prozessoren oder Workstations auswerten zu lassen; die Unterprobleme sind voneinander weitgehend entkoppelt und ermöglichen eine einfache Parallelisierung mit grober Granularität. Derartige Versuche [14] sind bereits auf einem Transputersystem mit 8 slave- und einem master-Prozessor durchgeführt worden; dabei wurde ein fast-linearer Speed-Up erzielt. Schwieriger wird die Parallelisierung des linearen Optimierungskerns. Zur Lösung der linearen Programme werden, wie in Kapitel 2 beschrieben, derzeit in kommerziellen Software

- revidierte Simplex-Verfahren
- Innere-Punkt-Methoden

verwendet. Das Simplex-Verfahren wurde zwar schon parallelisiert, jedoch mit unzufriedenen Resultaten, d.h. niedrigen Speed-Ups. Verbreitet ist daher die Ansicht, daß sich Innere-Punkt-Methoden eher für eine erfolgreiche Parallelisierung eignen. IPM führen in ihrem Kern auf die Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme. Die Linearisierung innerhalb eines Newton-Ansatzes führt auf zu lösende lineare Gleichungssysteme. Auf diesem Gebiet liegen Erfahrungen mit Parallelisierungsansätzen vor.

## 6. Zusammenfassung und Perspektiven

Die mathematische Optimierung, im speziellen die diskrete Optimierung, bildet neben direkten Anwendungen in der Produktion eine wertvolle Grundlage für Entscheidungen bei *Ausweitung/Begrenzung* von Aktivitäten, im Rahmen der *In-/Devestitionsplanung*, bei der Beurteilung von Märkten, Produktspektren und vielem mehr



[15].

Je höher jedoch der Realitätsgrad der zugrundeliegenden Modelle ist, desto größer wird auch die mathematische Komplexität der Optimierungsprobleme. Aus Gründen der Akzeptanz ist es darüber hinaus oft erforderlich, z.B. bei der Berechnung von Maschinenbelegungsplänen, daß das Ergebnis der Optimierungsrechnungen innerhalb weniger Minuten verfügbar ist. Beide Schwierigkeitsgrade –hohe mathematische Komplexität und geringe Rechenzeiten– erfordern eine intelligente Modellbildung und eine effiziente Software. Dazu werden neben den bisher vorgestellten Ansätzen in Zukunft die folgenden Verfahren miteinbezogen:

- Branch&Cut-Verfahren,
- spezialisierte Branch&Cut-Verfahren für Scheduling-Probleme,
- Parallele Branch&Bound- und Branch&Cut-Verfahren,
- Parallele Simplex-Algorithmen und
- Parallele Innere-Punkt-Methoden.

Diese Entwicklungen werden sicherlich eine Vielzahl heute noch nicht lösbarer Aufgabenstellungen einer Lösung zuführen und auch die Akzeptanz diskreter Optimierung nicht nur in der chemischen Industrie erhöhen. Dennoch ist beim Einsatz mathematischer Methoden und Techniken stets zu bedenken, daß diese weder menschlichen Erfindergeist noch unternehmerische Entscheidungen ersetzen können. Dagegen kann eine wohlverstandene Aufgabe und Leistung der mathematischen Optimierung darin bestehen, komplexe Systeme besser zu verstehen und zu beherrschen und Entscheidungen quantitativ abzusichern.

## References

- [1] Schrieck A.: Mathematische Modellierung, Simulation und Optimierung in der Chemischen Industrie. Interner Report, BASF-AG, (1994), Ludwigshafen.
- [2] Grotschel, M. , Lovász L.: Combinatorial Optimization. in: Graham R., Grotschel M. & Lovász L. (eds.) *Handbook on Combinatorics*, (1982), North Holland.
- [3] Kallrath J. : Diskrete Optimierung in der chemischen Industrie. in: Mathematik in der Praxis - Fallstudien aus Industrie, Wirtschaft, Naturwissenschaften und Medizin. Springer Verlag, Heidelberg, 1995.
- [4] Nemhauser, G.L. , Wolsey, L.A.: Integer and Combinatorial Optimization. John Wiley & Sons, (1988), New York.
- [5] Williams, H.P.: Model Building in Mathematical Programming. 3.Auflage, John Wiley & Sons, (1993), Chichester.
- [6] Neumann K. & Morlock M. : Operations Research. Carl Hanser Verlag, (1993), München.
- [7] Lustig I.J., Marsten R.E. & Shanno D.F. : Computational experience with a primal-dual interior point method for linear programming. *Linear Algebra Appl.* 152, (1991), 191-222.
- [8] Spelluci P. : Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung. Birkhauser Verlag, (1993), Basel.
- [9] Nemhauser G.L. : The Age of Optimization: Solving Large-Scale Real World-Problems. *Operations Research* 42(1), (1994), 5-13.

- [10] Reuter, B.: Mischungsplanung—eine Anwendung aus der pharmazeutischen Industrie. Studienarbeit, TH Darmstadt, (1994), Darmstadt
- [11] Ashford R.W. , Daniel R. : Some Lessons in Solving Practical Integer Problems. J. Opl. Res. Soc. **43**(5) (1992), 425–433.
- [12] Heipcke, S.: Optimales Scheduling mit Hilfe von Constraint Netzen. Diplomarbeit, Katholische Universitat Eichstatt (1994)
- [13] Bucker M. : Ein allgemeines Konzept zur Modellierung und Losung diskreter Optimierungsprobleme. Habilitationsschrift, Fakultat fur Wirtschaftswissenschaften der Universitat Karlsruhe, Karlsruhe, 1995.
- [14] Ashford R.W., Connard P. & Daniel R. : Experiments in Solving Mixed Integer Programming Problems on a Small Array of Transputers. J.Opl Res.Soc **43**(5), (1992), 519-531.
- [15] Kallrath J. , Schreieck A.: Discrete Optimisation in Organisation and Production. Conference Proceeding EITC94, (1994), Brussels.