

Diskrete Optimierung in der chemischen Industrie

Josef Kalrath

1 Einleitung

Auf mathematischen Modellen basierende Optimierung kann in fast allen Bereichen der chemischen Industrie [2] 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 [3]. 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 **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 Produktionsnetzes ausnutzen können, sind **Produktionsplanungs-** und **Scheduling-Probleme** (Ablaufplanung, Maschinenbelegungsplanung) auf dem Hintergrund mehrerer verbundener Standorte (Kapitel 4) und/oder mehrstufiger Produktionsanlagen (Kapitel 5) 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** in der chemischen Verfahrenstechnik auftretenden Probleme führen jedoch in der Regel auf nichtlineare diskrete Probleme.

Drei konkrete Beispiele sollen im folgenden einen Eindruck von der Vielfalt der Einsatzmöglichkeiten linearer gemischt-ganzzahliger Modelle vermitteln. Das erste der Modelle beschreibt die Berechnung optimaler Mischungsrezepturen, das zweite liefert einen optimalen Produktionsplan in einem Mehrprodukt-Mehrstandort-Produktionsverbund und das dritte die Bestimmung eines kostenminimalen Belegungsplans einer mehrstufigen Produktionsanlage. Alle drei Probleme werden mathematisch als gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme mit Hilfe eines exakten Optimierungsverfahrens (Branch&Bound, [4]) gelöst. Die beiden ersten Probleme werden sehr ausführlich beschrieben, um dem technisch interessierten Leser einen Einstieg in die Modellbildung gemischt-ganzzahliger Optimierungsmodelle zu ermöglichen.

In einer zusammenfassenden Diskussion wird aufgezeigt, welche Lösungsansätze für noch wesentlich komplexere Probleme in Frage kommen.

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

$$\min \{ f(x) \mid g(x) = 0, h(x) \geq 0, x \in X \} \quad (2.1)$$

diskretes Optimierungsproblem, wenn der Grundbereich X diskret, d.h. ganzzahlig ist, z.B. $X = \mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$. Ein Vektor x heißt *zulässige Lösung* des Optimierungsproblems (2.1), wenn er den Bedingungen $g(x) = 0, h(x) \geq 0, x \in X$ genügt; die Menge aller zulässigen Lösungen bildet den *zulässigen Bereich*. Der Vektor x heißt *optimale Lösung* oder *globales Minimum*, wenn er zulässig ist und für alle zulässigen Lösungen x' gilt: $f(x) \leq f(x')$. Als Beispiel möge das Problem

$$\min \{ 3x_1 + 2x_2^2 \mid x_1^4 - x_2 - 15 = 0, x_1 + x_2 - 3 \geq 0, x_1 \in \mathbb{N}_0, x_2 \in \mathbb{N}_0 \} \quad (2.2)$$

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 (MILP)** der Form

$$\min \{ c^t \cdot x \mid x \in S \}, \quad S := \{ x \mid Ax = b, x_1, \dots, x_r \in \mathbb{N}_0, x_{r+1}, \dots, x_n \in \mathbb{R}_0^+ \}. \quad (2.3)$$

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 (2.3) stehen Heuristiken und exakte Verfahren [4] zur Verfügung. Erstere generieren zulässige Lösungen ohne Optimalitätsnachweis und sollen hier nicht weiter betrachtet werden. Zu den exakten Verfahren gehören dynamische Optimierung und Schnittebenen- sowie Entscheidungsbaumverfahren, die sich in vollständige Enumeration und begrenzte Enumeration (z.B. Branch&Bound) 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 und Interpretation aller Lösungen im Entscheidungsbaum 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 (2.3) gelöst. Dieses Problem P^0

$$\min \{ c^t \cdot x \mid Ax = b, x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}_0^+ \} . \quad (2.4)$$

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

$$\max Z ; Z = x_1 + x_2 , \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} -2x_1 + 2x_2 &\geq 1 \\ -8x_1 + 10x_2 &\leq 13 \end{aligned} \quad x_1 \in \mathbb{N}_0, x_2 \in \mathbb{N}_0 . \quad (2.6)$$

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

$$g_1 : x_2 = x_1 + \frac{1}{2} ; g_2 : x_2 = 0.8x_1 + 1.3 \quad (2.7)$$

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 \bar{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 Unterproblems bzw. Knotens P^k führt auf drei attraktive Fälle, die den Suchbaum nicht erweitern und zu einem Abbruch im betrachteten Baumsegment führen:

1. Für die Lösung x^k von P^k gilt: $x^k \in S$; Vergleich mit einer anderen eventuell schon existierenden Lösung von (2.3).
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 (2.3).

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 (2.3) 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 (2.3) bestimmt oder nachgewiesen, daß (2.3) keine Lösung besitzt. Falls aus Gründen der Komplexität nicht der ganze Baum abgearbeitet wird, kann mit Z_u und Z_o die Qualität der vorliegenden Lösung bewertet werden.

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 Verfahrens 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 (2.4), werden derzeit in kommerzieller Software *revidierte Simplex-Verfahren* [5] und *Innere-Punkt-Methoden* [6] verwendet.

Simplex-Verfahren Der zulässige Bereich linearer Programme hat 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.

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 [7], wird dieses Problem auf die Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems reduziert. Dieses kann z.B. mit Hilfe des Newton-Verfahrens gelöst werden. In der linearen Programmierung eignen sich die IPM insbesondere für große, dünnbesetzte Systemmatrizen oder solche, die nahezu entartet sind.

3 Optimale Stoffmischung und Logistik

Nachfolgend soll eine spezielle Anwendung der optimalen Stoffmischung betrachtet werden. Dabei soll wie bei vielen anderen Mischungen z.B. auch in der Mineralölindustrie, davon ausgegangen werden, daß sämtliche beteiligten Stoffe sich chemisch inert verhalten, d.h. miteinander keine Reaktionen eingehen, und daß lineare Mischungsregeln vorliegen. Sollten bei Stoffeigenschaften wie Viskosität oder Siedetemperatur scheinbar nichtlineare Mischungsregeln erforderlich sein, so ist zu beachten, daß mit Hilfe logarithmischer Transformationen oder Ausnutzung von Monotonieeigenschaften des Dampfdruckes oft äquivalente und nunmehr lineare Beziehungen hergestellt werden können.

Im vorliegenden Fall unterliegt die Mischung einem System physikalischer Bedingungen und auch logistischer Einschränkungen. Zu minimieren sind die Kosten, die sich aus Materialkosten, den durch die Mischvorgänge verursachten Arbeitskosten und Restmengenkosten zusammensetzen; dies führt zu einem Zählproblem und einem Container-Auswahlproblem, und damit auf ein diskretes Optimierungsproblem, das nachfolgend in gekürzter Form erläutert werden soll.

3.1 Problembeschreibung: Mischungsproblem mit diskreten Eigenschaften

Zu lösen ist ein Mischungsproblem mit Qualitätsbeschränkungen, wobei die Kosten der Rohstoffe, der Mischanalysen und 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 F_i
- Konzentrationen K_{ei} bezüglich des Stoffes e 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
- Eigenschaften des Auftragsproduktes bzw. Konzentrationsgrenzen
- Fixierung von Sonderstoffen

Als **technische Randbedingungen** sind 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 nicht quantifizierbarer 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. Es sei **bemerkt**, daß folgende Aspekte nicht berücksichtigt wurden:

- Verschiedene Lagerorte eines Bestandscontainers.
- Detaillierte Beschreibung von Abfüllverlusten.
- Mehrperiodische Aspekte und Auswahl von Aufträgen.

Das nachfolgende deterministische einperiodische Mehrproduktmodell mit Ressourcenbeschränkung wurde gemeinsam mit Boris Reuter und Prof. Dr. Stadtler (TH Darmstadt) erarbeitet.

3.2 Mathematisches Modell

Betrachtet wird eine Menge von N_A Aufträgen mit Auftragsmengen A_j . Die Aufträge tragen als Attribut untere und obere Grenzen K_{ej}^- und K_{ej}^+ für die Konzentrationen der N_E Inhaltsstoffe e .

Die Auftragsmischung kann aus maximal $N_C = 60$ Bestandscontainern i mit Füllstand F_i erstellt werden, in denen die Stoffe e mit einer Konzentration von K_{ei} vorliegen. Damit schreiben sich die **Inhaltsstoff-Restriktionen** in der Form

$$K_{ej}^- \cdot A_j \leq \sum_{i=1}^{N_C} K_{ei} \cdot x_{ij} \leq K_{ej}^+ \cdot A_j + s_{ej} \quad ; \quad \forall j, \quad \forall e \quad , \quad (3.1)$$

wobei mit x_{ij} die Entnahmemenge aus Container i für Auftrag j bezeichnet ist. Die oberen Schranken in (3.1) sind keine festen Schranken, Überschreitungen s_{ej} werden durch den Strafkostenterm

$$C^S := \sum_{e=1}^{N_E} \sum_{j=1}^{N_A} C_e^s \cdot s_{ej} \quad (3.2)$$

in der Zielfunktion penalisiert. Die gesamte Auftragsmenge ergibt sich aus der Summe der Entnahmen aus Bestandschargen x_{ij} , den verwendeten Mengen t_j der Sonderwirkstoffe und diversen, in Z_j konstant zusammengefaßten Zusatzstoffen. Dies führt schließlich für die Entnahmemengen auf die **Bilanzgleichung**

$$\sum_{i=1}^{N_C} x_{ij} + t_j + Z_j = A_j \quad ; \quad \forall j \quad . \quad (3.3)$$

Die Durchführbarkeit eines Auftrages kann durch zu starke Verdünnung mit Zusatzstoffen gefährdet werden, d.h. die Konzentrationsanforderungen (3.1) können nicht mehr eingehalten werden; diese

Problematik wird ausführlich in [8] behandelt. Für die Sonderwirkstoffe sind schließlich noch die Grenzwerte T_j^- und T_j^+ zu beachten, d.h.

$$T_j^- \leq t_j \leq T_j^+ \quad ; \quad \forall j \quad . \quad (3.4)$$

Aus den Entnahmemengen lassen sich die Kosten für die Ausgangsstoffe gemäß

$$C^X := \sum_{i=1}^{N_C} \sum_{j=1}^{N_A} C_i \cdot x_{ij} \quad (3.5)$$

berechnen; die Kosten für Sonderwirkstoffe und Zusatzstoffe werden als vernachlässigbar angesehen. Die bisher eingeführten Variablen unterliegen noch weiteren Beschränkungen, z.B. darf aus Container i für Auftrag j nur eine maximale Menge X_{ij}^+

$$x_{ij} \leq X_{ij}^+ \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad (3.6)$$

entnommen werden; $X_{ij}^+ = 0$ sperrt den Container i für Auftrag j .

Soweit vorgestellt, handelt es sich um ein gewöhnliches, d.h. lineares Mischungsproblem, das mit Hilfe der linearen Programmierung gelöst werden kann.

Zur Modellierung der Kosten, die sich aus dem Arbeitsablauf des Mischens herleiten, sowie der Bedingungen, die die Anzahl der für die Mischung verwendeten Container beschränken, werden binäre Variablen mit folgender Bedeutung eingeführt:

$$\delta_{ij} := \begin{cases} 1, & \text{Container } i \text{ ist Befüllcontainer für Auftrag } j \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad , \quad (3.7)$$

$$\alpha_i := \begin{cases} 1, & \text{Container } i \text{ wird verwendet} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad , \quad (3.8)$$

$$\gamma_{ij} := \begin{cases} 1, & \text{Container } i \text{ wird für Auftrag } j \text{ gebraucht} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.9)$$

und zudem noch die semi-kontinuierliche Variablen

$$\beta_i := \begin{cases} \geq 1, & \text{wenn in Bestandscontainer } i \text{ mehr als } M_i \text{ verbleibt} \\ = 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad . \quad (3.10)$$

M_i bezeichnet die Mindestmenge, die im Container i enthalten sein muß, damit er als Bestandscontainer weitergeführt wird. Diese Variablen werden mit den Entnahmemengen durch die Beziehungen

$$\sum_{j=1}^{N_A} x_{ij} \leq F_i \cdot \alpha_i \quad ; \quad \forall i \quad , \quad x_{ij} \leq F_i \cdot \gamma_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad (3.11)$$

verknüpft. Eine Auftragsmischung wird normalerweise in einen leeren Container eingefüllt. Wird statt dessen ein Bestandscontainer um die fehlenden Entnahmen aus anderen Bestandscontainern aufgefüllt, so muß er mit seiner vollständigen Menge F_i verwendet werden. Aufgrund der Abfüllverluste ist eine Befüllung nach einer Entnahme nicht zulässig. Die genannte Bedingung kann durch

$$x_{ij} \geq F_i \cdot \delta_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad (3.12)$$

garantiert werden. Andererseits kann für einen Auftrag höchstens ein Befüllcontainer eingesetzt werden

$$\sum_{i=1}^{N_C} \delta_{ij} \leq 1 \quad ; \quad \forall j \quad (3.13)$$

und ein Container i kann nur für einen Auftrag Befüllcontainer sein, d.h.

$$\sum_{j=1}^{N_A} \delta_{ij} \leq 1 \quad ; \quad \forall i \quad . \quad (3.14)$$

Da der Raum im Abfüllbereich begrenzt ist, wird durch A^+ die Anzahl der zu nutzenden Container je Auftrag nach oben beschränkt werden, d.h.

$$\sum_{j=1}^{N_A} \gamma_{ij} \leq A^+ . \quad (3.15)$$

Einem verwendeten Container ($\alpha_i = 1$) können nun drei Schicksale widerfahren: Teilentleerung, vollständige Entleerung oder Befüllung. Im ersten Falle ($\sum_j \delta_{ij} = 0 \wedge \beta_i \geq 1$) ist der verbleibende Rest größer als die geforderte Mindest-Einlagermenge M_i ; der Container wird wieder ins Lager gebracht. Im zweiten Falle ($\sum_j \delta_{ij} = 0 \wedge \beta_i = 0$) wird der Container restentleert (Verschwendung des Bodenstandes B_i). Der Behälter steht nach der Restentleerung und eventueller Reinigung als Leercontainer zur Verfügung. Schließlich wird der Container im dritten Falle ($\sum_j \delta_{ij} = 1 \wedge \beta_i = 0$) befüllt; die Beziehung $\sum_j \delta_{ij} = 1$ erzwingt automatisch $\beta_i = 0$. So wird durch Verwendung als Befüllcontainer oder vollständige Entleerung verhindert, daß ein Bestandscontainer mit einem Füllstand weitergeführt wird, der die Mindestmenge M_i unterschreitet. Mathematisch realisiert werden die drei genannten Möglichkeiten durch die Beziehung

$$F_i - \sum_{j=1}^{N_A} x_{ij} - B_i \cdot (1 - \sum_{j=1}^{N_A} \delta_{ij}) = (M_i - B_i) \cdot \beta_i ; \quad \forall i . \quad (3.16)$$

Wird ein Bestandscontainer befüllt, so führt dies zur vollständigen Verwendung des Inhaltes dieses Containers. Der Bodenstand B_i , d.h. der anfallende Stoffverlust bei vollständiger Entleerung eines Containers, wird zu nutzbarem Material für die Mischung. Er wird deshalb mit seinem Materialwert $C_i \cdot B_i$ bzw. in Summe

$$C^B := \sum_{i=1}^{N_C} \sum_{j=1}^{N_A} (C_i \cdot B_i) \cdot \delta_{ij} \quad (3.17)$$

bewertet und gutgeschrieben. Die nachfolgend betrachteten Arbeitskosten begründen sich allein aus dem Arbeitsablauf des Mischens. Sie bestehen aus den fixen Kosten für An- und Abtransport der Container. Die Beiträge für den Transport der verwendeten Bestands- und Leercontainer betragen C_1^T bzw. C_2^T mit spezifischen Kosten C^t je Container und

$$C_1^T := \sum_{i=1}^{N_C} C^t \cdot \alpha_i , \quad C_2^T := C^t \cdot N_A - \sum_{i=1}^{N_C} \sum_{j=1}^{N_A} C^t \cdot \delta_{ij} . \quad (3.18)$$

In C_2^T ist berücksichtigt, daß als Befüllcontainer nicht nur Leer-, sondern auch Bestandscontainer fungieren können, deren Transportkosten bereits in C_1^T einkalkuliert sind. Somit ergeben sich die gesamten Transportkosten zu

$$C^T := C_1^T + C_2^T . \quad (3.19)$$

Für Bestandscontainer, die befüllt werden ($\delta_{ij} = 1$), fallen keine Wechselkosten C^w je Container für das Ein- und Aushängen in das bzw. aus dem Mischgestell an. Die Wechsel- und Reinigungskosten an Bestandscontainern, die nicht befüllt werden, betragen

$$C^W := C^w \cdot \sum_{i=1}^{N_C} (\alpha_i - \sum_{j=1}^{N_A} \delta_{ij}) . \quad (3.20)$$

Wird ein Container in das Mischgestell eingehängt, können mehrere Aufträge aus ihm bedient werden. Jede Abfüllung beinhaltet einen manuellen Abfüllvorgang sowie einen Rangiervorgang, bei dem der zu befüllende Auftragscontainer unter den Entnahmecontainern befördert wird. Eine Abfüllung bzw. die Entnahme der Menge x_{ij} aus Bestandscontainer i für Auftrag j entspricht der Verwendung des Containers i für Auftrag j , die durch $\gamma_{ij} = 1$ und $\delta_{ij} = 0$ gekennzeichnet wird.

Für Befüllcontainer entfällt dieser Vorgang. Die Kosten für Abfüllen und Rangieren betragen je Container C^r und somit insgesamt

$$C^R := C^r \cdot \sum_{i=1}^{N_C} \sum_{j=1}^{N_A} (\gamma_{ij} - \delta_{ij}) . \quad (3.21)$$

Hinzu kommen noch die Kosten C^d für die Reinigung eines Auftragscontainers und Dokumentation eines Auftrags, d.h. in Summe

$$C^D = N_A \cdot C^d \quad (3.22)$$

sowie die durch qualitätsichernde Maßnahmen (Nachuntersuchungen) entstehenden Kosten. Eine Nachuntersuchung fällt jedoch nur dann an, wenn ein Auftrag aus mehr als einer Bestandscharge gemischt wird. Zum Zweck der Identifikation einer Mischung wird die binäre Variable

$$\sigma_j := \begin{cases} 1, & \text{wenn Auftrag } j \text{ eine Mischung ist} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.23)$$

eingeführt. Über die Verknüpfung

$$\sum_{i=1}^{N_C} \gamma_{ij} - (A^+ - 1) \cdot \sigma_j \leq 1 \quad ; \quad \forall j \quad (3.24)$$

wird erreicht, daß im Falle einer Mischung ($\sum_i \gamma_{ij} \geq 2$) σ_j gleich 1 wird —d.h. es fallen Nachuntersuchungskosten an—, gleichzeitig aber die Anzahl der verwendeten Container kleiner bleiben muß als die Obergrenze A^+ der zu verwendenden Container. Im Fall, daß ein Auftrag aus einer Teilmenge eines einzigen Bestandscontainers ($\sum_i \gamma_{ij} = 1$) besteht, bleibt $\sigma_j = 0$ und die damit verbundenen Nachuntersuchungskosten entstehen nicht. Die Summe der Nachuntersuchungskosten ist somit

$$C^N := \sum_{j=1}^{N_A} C^n \cdot \sigma_j , \quad (3.25)$$

wobei C^n die Kosten einer einzelnen Nachuntersuchung bezeichnet. Damit nimmt das zu minimierende **Zielfunktional** die Gestalt

$$Z = C^X + C^S - C^B + C^T + C^W + C^D + C^R + C^N \quad (3.26)$$

an und beschließt die mathematische Formulierung des Modells.

3.3 Aspekte der mathematischen und numerischen Problemlösung

Die oben vorgelegte natürliche Formulierung des Modells muß im Hinblick auf das Lösungsverfahren (Branch&Bound mit LP-Relaxierung) nicht unbedingt die bestmögliche sein. Eine "gute" Modellformulierung ist eine solche, die einen möglichst streng eingegrenzten Lösungsraum liefert, so daß sich das Polyeder des kontinuierlichen Problems (LP) möglichst eng um die konvexe Hülle der zulässigen Punkte des diskreten Problems (IP) legt. Dies kann durch die Einführung zusätzlicher Nebenbedingungen, die einerseits Variablen gegenseitig verknüpfen und andererseits enge obere und/oder untere Schranken für Variablen festlegen, erreicht werden ([4], S.18; [9], S.213). Das Modell mit verschärften Modellbedingungen ist in [8] beschrieben. Durch geeignete Wahl von Variablen kann auch die Besetzungsdichte der Systemmatrix verringert und somit der *revidierte Simplex-Algorithmus* beschleunigt werden. Schließlich wurden innerhalb des Branch&Bound-Verfahrens durch die Reihenfolge $(\sigma, \alpha, \delta, \gamma, \beta)$ der Variablenauswahl, durch die Verzweigungsrichtung eines ausgewählten Knotens und durch die Auswahl eines Knotens die Rechenzeiten erheblich reduziert. Die Entscheidungsvariablen δ_{ij} wurden via $\sum_i \delta_{ij} = 1$ zu *Special Ordered Sets* [10] zusammengefaßt; damit wurde eine weitere Verbesserung der Branch&Bound-Eigenschaften erzielt.

3.4 Realisierungsaspekte und Ergebnisse

Das mathematische Modell wird mit Hilfe des in XPRESS-MP, einer kommerziellen Software [10] zur Lösung gemischt-ganzzahliger Optimierungsprobleme, enthaltenen Modellgenerators übersetzt und mit Hilfe eines auf LP-Relaxierung beruhenden Branch&Bound-Verfahrens innerhalb weniger Minuten auf einem PC gelöst.

Bei einem ähnlichen Problem innerhalb der BASF wurde eine erhebliche Kostenersparnis erzielt. Von zusätzlichem Nutzen 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 Schifftransport 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/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-, Verschiffs-, 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 Umrüstedauern $\Delta U_{ij_1j_2}$ 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 δ_{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 k in das Zielland z abgeschickt wird und für $z = i$ die Verkaufsmenge am Standort i darstellen.

Zunächst muß garantiert werden, daß nicht zwei Produkte auf einer Anlage gleichzeitig produziert werden, d.h.

$$\sum_{j=1}^{N_P} \delta_{ijk} = 1 \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad . \quad (4.1)$$

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

$$\xi_{ij_1j_2k} \geq \delta_{ij_1k-1} + \delta_{ij_2k} - 1 \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad \forall j_1 \quad \forall j_2 \text{ mit } j_2 \neq j_1 \quad (4.2)$$

wird die Kopplung des k -ten Zeitintervalls an die beiden benachbarten Produktionsabschnitte gewährleistet. (4.2) garantiert zusammen mit (4.1) und (4.17) 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

$$m_{ijk} \leq C_{ik} \cdot \delta_{ijk-1} + C_{ik} \cdot \delta_{ijk} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad (4.3)$$

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

$$\bar{C}_{ij_1j_2k} = C_{ik} - \frac{\Delta U_{ij_1j_2}}{\Delta T} \cdot C_{ik} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j_1 \quad \forall j_2 \text{ mit } j_2 \neq j_1 \quad \forall k \quad . \quad (4.4)$$

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.

$$\sum_{j=1}^{N_P} m_{ijk} \leq C_{ik} + \sum_{j_1=1}^{N_P} \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^{N_P} [\bar{C}_{ij_1j_2k} - C_{ik}] \cdot \xi_{ij_1j_2k} \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad . \quad (4.5)$$

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

$$\sum_{k=1}^{N_T} \sum_{j_1=1}^{N_P} \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^{N_P} \xi_{ij_1j_2k} \leq U_i \leq N_T \quad ; \quad \forall i \quad (4.6)$$

beschränkt werden.

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

$$\ell_{ijk} := \ell_{ijk-1} + b_{ijk} + m_{ijk} - \left[\sum_{z=1}^{N_L} p_{ijkz} - \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq i}}^{N_L} p_{sj\tau i} \right] \quad , \quad \ell_{ij0} = B_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad (4.7)$$

ist sichergestellt, daß nicht mehr exportiert oder verkauft wird als es der Lagerbestand ℓ_{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 τ kennzeichnet das Zeitintervall, in dem das Produkt j vom Standort s in das Zielland i abgeschickt wurde, d.h. $\tau = k - \Delta(s, i)$, 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

$$b_{ijk} \leq B^+_{ijk} \cdot \mathcal{B}_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad (4.8)$$

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.

$$\ell_{ijk} \geq M_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad . \quad (4.9)$$

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

$$\ell_{ijk} \leq \mathcal{L}_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad . \quad (4.10)$$

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 jeweils ein weiteres Lager mit besonderen Kosten, das z.B. durch Anmietung bereitgestellt werden kann, repräsentieren und somit statt auf (4.10) auf die weichere Bedingung

$$\ell_{ijk} \leq \mathcal{L}_{ij} + y_{ijk} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad (4.11)$$

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

$$y_{ijk} \leq Y_{ij} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad . \quad (4.12)$$

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.

$$p_{ijk} \leq D_{ijk} \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad . \quad (4.13)$$

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

$$p_{ijkz} = 0 \quad \vee \quad P^- \leq p_{ijkz} \leq P^+ \quad , \quad z \neq i \quad (4.14)$$

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

$$\sigma_{ijkz} = 0 \quad \vee \quad 1 \leq \sigma_{ijkz} \leq \sigma^+ \quad , \quad z \neq i \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad \forall z \quad (4.15)$$

genügen. Die Kopplung zwischen den p_{ijkz} und σ_{ijkz} leistet die Transformation

$$p_{ijkz} = P^- \cdot \sigma_{ijkz}, \sigma^+ = P^+ / P^-, \quad z \neq i \quad ; \quad \forall i \quad \forall j \quad \forall k \quad \forall z \quad . \quad (4.16)$$

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

$$K_U := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{j_1=1}^{N_P} \sum_{\substack{j_2=1 \\ j_2 \neq j_1}}^{N_P} U_{ij_1j_2} \cdot \xi_{ij_1j_2k} \quad . \quad (4.17)$$

Mit den Lagerkosten K_{ij} je Mengeneinheit und Zeitintervall ΔT 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

$$K_L := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} (K_{ij} \cdot \sum_{k=1}^{N_T} \ell_{ijk}) \quad , \quad K_M := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} (M_{ij} \cdot \sum_{k=1}^{N_T} y_{ijk}) \quad . \quad (4.18)$$

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

$$K_T := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{\substack{z=1 \\ z \neq i}}^{N_L} T_{iz} \cdot p_{ijkz} \quad . \quad (4.19)$$

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

$$K_P := \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} V_{ij} \cdot m_{ijk} \quad (4.20)$$

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

$$K_Z = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} K_{ijk} \cdot b_{ijk} \quad (4.21)$$

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

$$E = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_P} \sum_{k=1}^{N_T} E_{ijk} \cdot p_{ijki} \quad . \quad (4.22)$$

Damit ergibt sich die zu maximierende Zielfunktion als der Deckungsbeitrag

$$Z(\delta, \xi, m, p, y, b) = E - (K_U + K_L + K_M + K_T + K_P + K_Z) \quad . \quad (4.23)$$

4.3 Realisierungsaspekte und Ergebnisse

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 Kostenminimaler Belegungsplan einer zweistufigen Produktion

Dieses Scheduling-Problem enthält im Zusammenhang mit der Beschreibung der Umrüstungen einige der bereits im vorangegangenen Beispiel beschriebenen Strukturen; auf diese soll daher hier nicht weiter eingegangen werden. Neu sind dagegen Modellblöcke, die feste chemische Rezepturen oder Verzugskosten beschreiben.

5.1 Problembeschreibung: Zweistufige Produktion

Zu lösen ist ein Maschinenbelegungsproblem für ein bestimmtes Anlagensystem, auf dem nach vorgegebenen Verfahren unter gewissen technischen Randbedingungen produziert wird, um vorliegende Aufträge abzuarbeiten. Es ist eine Vorausschau über einen Monat in Tageseinheiten erwünscht. Als **Anlagensystem** stehen 3 Vorproduktanlagen (VPA) und 11 Endproduktanlagen (EPA) zur Verfügung. Es existieren verschiedene **Verfahren** (Rezepturen) zur Herstellung eines Endproduktes aus Vorprodukten. 35 verschiedene Endprodukte werden aus einem bzw. zwei der insgesamt 5 Vorprodukte hergestellt. Die Rezepturen unterscheiden sich durch Anzahl und Anteile der Vorprodukte und in der Auswahl der EPA für die Produktion der Endprodukte. Die Produkte sind nur auf bestimmten EPA mit unterschiedlichen maximalen Durchsätzen produzierbar. Monatlich liegen etwa 250 **Aufträge** vor, charakterisiert durch

- Auftragsnummer, Produktnummer, Termin und Terminüberschreitungskosten.

Es sind folgende **technische Randbedingungen** zu beachten:

- Auf 3 gleichen Vorproduktanlagen können 5 Vorprodukte produziert werden.
- Eine Änderung des Durchsatzes sowie eine Umrüstung der Vorproduktanlagen auf ein anderes Vorprodukt verursacht Kosten und einen Produktionsverlust.
- Vorprodukte können nicht zwischengelagert werden.
- Eine Änderung des Durchsatzes einer Endproduktanlage verursacht keine Kosten. Bei Umrüstung der EPA auf ein anderes Produkt fallen Kosten und Umrüstzeiten an.
- Während der Umrüstung einer EPA auf ein anderes Produkt laufen die restlichen EPA bei unverändertem Durchsatz weiter. Erst wenn eine umgerüstete EPA wieder ihre Arbeit aufnimmt, werden bei Produktänderung die Durchsätze der anderen EPA beeinflusst.
- Die Durchsatzgrenzen für die Endproduktanlagen sind produktabhängig.
- Endprodukte können mit produktabhängigen Lagerkosten gelagert werden.
- Es entstehen Strafkosten bei Überziehung eines Fertigstellungstermines. **Ziel** ist es, eine solche Belegung der VPA und EPA zu finden, daß die Kosten (Terminverzugs-, Umrüst- und Lagerkosten) minimiert werden. Mit Hilfe von Gewichtungsfaktoren soll der Einfluß der verschiedenen Kostenarten untersucht werden. **Bemerkung** : Nur selten enthalten die Aufträge Endprodukte, für deren Herstellung die Vorprodukte 4 und 5 benötigt werden. Daher wurde ein vereinfachtes Modell betrachtet, in dem den Vorprodukten 1, 2 und 3 jeweils eine VPA fest zugeordnet ist und die Vorprodukte 4 und 5 nicht vorkommen. Damit entfallen Kosten und Umrüstzeiten für die VPA.

5.2 Mathematisches Modell

Gegeben sind $N_V = 3$ Vorprodukte, N_V VPA, $N_A = 35$ Endprodukte und $N_X = 11$ EPA. Hinsichtlich des mit ihr fest verknüpften Vorproduktes j kann die VPA j mit einer bestimmten Geschwindigkeit bzw. Ausstoßrate gefahren werden und somit bestimmte, zwischen M_j^- und M_j^+ variierende und durch die Rechnung zu bestimmende Mengen m_j produzieren.

Zur Erstellung des Belegungsplanes soll nun eine zeitliche Diskretisierung des gesamten Produktionszeitraumes T_P in $N_T = 30$ äquidistante Zeitintervalle der Größe $\Delta t = T_P/N_T$ vorgenommen werden.

Der Belegungsplan kann durch die binären Variablen $\delta_{ikl} \in \{0, 1\}$ charakterisiert werden, die angeben, ob im Zeitintervall k auf der EPA l das Endprodukt i hergestellt wird ($\delta_{ikl} = 1$) oder nicht ($\delta_{ikl} = 0$); sie sollen zunächst aber noch nicht berücksichtigt werden. Mit x_{ik} ist die Ausstoßrate

des Endproduktes i im Zeitintervall k beschrieben. Die Ausstoßraten des Endproduktes i ergeben sich aus den Produktionsraten y_{ikl} der einzelnen EPA, d.h.

$$x_{ik} = \sum_{l=1}^{N_X} \Omega_{il} \cdot y_{ikl} \quad , \quad \Omega_{il} \in \{0,1\} \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad , \quad (5.1)$$

wobei die Konstanten Ω_{il} angeben, ob das Endprodukt i auf der EPA l hergestellt werden kann oder nicht. Die x_{ik} sind zur Beschreibung des Problems bequemer; als Unbekannte werden aber die y_{ikl} verwendet.

Bezeichnen m_{jk} die Ausstoßraten des Vorproduktes j im Zeitintervall k , so können die Produktionsgeschwindigkeiten M_j^- und M_j^+ der einzelnen VPA durch

$$M_j^- \leq m_{jk} \leq M_j^+ \quad ; \quad \forall j \quad \forall k \quad . \quad (5.2)$$

berücksichtigt werden. Zu produzieren ist im Zeitintervall k eine bestimmte Menge

$$p_{jk} = \sum_{i=1}^{N_A} V_{ij} \cdot x_{ik} = \sum_{i=1}^{N_A} V_{ij} \cdot \sum_{l=1}^{N_X} \Omega_{il} \cdot y_{ikl} \quad (5.3)$$

des Vorproduktes j ; die V_{ij} sind bekannte Koeffizienten, die angeben, wieviel Prozent des Vorproduktes j im Endprodukt i enthalten sind. Produziert werde nun eine bestimmte Menge m_{jk} dieses Vorproduktes. Bei Änderung des Durchsatzes entsteht jedoch erfahrungsgemäß ein Produktionsverlust, der proportional zur Betragsdifferenz $d_{jk+1} := |m_{jk} - m_{jk+1}|$ der Ausstoßraten ist. Damit ergibt sich

$$m_{jk} - C_j \cdot d_{jk} = p_{jk} \iff \sum_{i=1}^{N_A} V_{ij} \cdot x_{ik} - m_{jk} + C_j \cdot d_{jk} = 0 \quad ; \quad \forall j \quad \forall k \quad , \quad (5.4)$$

wobei die Strafkosten C_j vorgegeben werden. Diese Nebenbedingung ist linear in allen Unbekannten. Die Betragsbedingungen $d_{jk+1} = |m_{jk} - m_{jk+1}|$ können durch die Ungleichungen

$$d_{jk+1} \geq m_{jk} - m_{jk+1} \quad , \quad d_{jk+1} \geq m_{jk+1} - m_{jk} \quad ; \quad \forall j \quad \forall k \leq N_T - 1 \quad (5.5)$$

umgesetzt werden. Nimmt man die d_{jk} additiv und mit einem Faktor W^D geeignet gewichtet in eine zu minimierende Zielfunktion auf, so werden automatisch die Beträge approximiert. Die Schranken

$$d_{jk} \leq M_j^+ - M_j^- \quad ; \quad \forall j \quad \forall k \quad (5.6)$$

verbessern die Approximationsgüte. Schließlich sind noch Kapazitätsschranken für die EPA zu berücksichtigen, d.h.

$$y_{ikl} \leq C_{il}^+ \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad \forall l \quad . \quad (5.7)$$

Natürlich darf es nicht passieren, daß auf einer EPA zu einem bestimmten Zeitintervall k mehrere Endprodukte hergestellt werden. Erst durch

$$\sum_{i=1}^{N_A} \delta_{ikl} \leq 1 \quad ; \quad \forall k \quad \forall l \quad (5.8)$$

wird dies verhindert. Die Bedingungen $y_{ikl} \leq C_{il}^+$ in (5.7) sind zu ersetzen durch

$$C_{il}^- \cdot \delta_{ikl} \leq y_{ikl} \leq C_{il}^+ \cdot \delta_{ikl} \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad \forall l \quad . \quad (5.9)$$

Die Zustandsvariablen δ_{ikl} müssen ähnlich wie im vorangegangenen Beispiel wieder mit Umrüstvariablen $\xi_{i_1 i_2 k l}$ in Verbindung gebracht werden.

Durch die Kundenaufträge ist der zeitliche Abfluß L_{ik} des Endproduktes i bekannt. Produkt-abhängige Verzugskosten K_i^V entstehen, wenn die Verzugs Mengen z_{ik} , d.h. die Differenzen

$$z_{ik} := L_{ik} - x_{ik} \quad ; \quad \forall i \quad \forall k \quad (5.10)$$

positiv werden. In die zu minimierende Zielfunktion werden Verzugskosten

$$K_V := \sum_{i=1}^{N_A} C_i^V \sum_{k=1}^{N_T} z_{ik} \quad (5.11)$$

aufgenommen und in den Nebenbedingungen die Ungleichungen

$$z_{ik} + \sum_{n=1}^k x_{in} \geq \sum_{n=1}^k L_{in} \iff z_{ik} + \sum_{n=1}^k \sum_{l=1}^{N_X} \Omega_{il} \cdot y_{inl} \geq \sum_{n=1}^k L_{in} \quad ; \quad \forall i \quad \forall l \quad (5.12)$$

berücksichtigt. Infolge der Minimierungsbedingung werden die z_{ik} automatisch Null, wenn es nicht zu Verzügen kommt, oder nehmen andernfalls den Wert

$$z_{ik} = \sum_{n=1}^k L_{in} - \sum_{n=1}^k x_{in} \quad (5.13)$$

an. Mit ähnlicher Bilanz ergeben sich die Lagerkosten K_L zu

$$K_L := \sum_{i=1}^{N_A} C_i^L \sum_{k=1}^{N_T} z_{ik} + \sum_{i=1}^{N_A} C_i^L \sum_{k=1}^{N_T} \sum_{n=1}^k (x_{in} - L_{in}) \quad (5.14)$$

Zu beachten ist, daß für negative Terme $\sum_n (x_{in} - L_{in})$ diese gerade wegen (5.8) durch z_{ik} neutralisiert werden und somit nichts zu den Lagerkosten beitragen. Weiter läßt sich die Doppelsumme über k und n noch zu

$$K_L = \sum_{i=1}^{N_A} C_i^L \sum_{k=1}^{N_T} z_{ik} + \sum_{i=1}^{N_A} C_i^L \sum_{k=1}^{N_T} (N_T - k + 1)(x_{ik} - L_{ik}) \quad (5.15)$$

vereinfachen. Für die Zielfunktion spielt der konstante Term L_{ik} keine Rolle. Damit ergibt sich die Zielfunktion als Summe aus Verzugs- und Lagerkosten und der mit W^D gewichteten Einbeziehung der d_{jk} zu

$$Z := \sum_{i=1}^{N_A} (C_i^V + C_i^L) \sum_{k=1}^{N_T} z_{ik} + \sum_{i=1}^{N_A} C_i^L \sum_{k=1}^{N_T} (N_T - k + 1) \cdot x_{ik} + W^D \cdot \sum_{j=1}^{N_V} \sum_{k=1}^{N_T} d_{jk} \quad (5.16)$$

In der Zielfunktion wären wie im vorangegangenen Beispiel Umrüstkosten zu berücksichtigen. Darauf soll hier aber nicht weiter eingegangen werden.

5.3 Ergebnisse

Das oben beschriebene Modell zeigt schon in groben Zügen gute Übereinstimmung mit den realen Produktionsbedingungen. Jedoch ist der numerische Aufwand zur Lösung dieses Problems erheblich größer als für das in Kapitel 4 vorgestellte Produktionsplanungssystem. Selbst auf einer Workstation vom Typ *RS/6000* dauern die Rechnungen einige Stunden.

6 Zusammenfassung und Perspektiven

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 [11] ist die aus der Künstlichen-Intelligenz-Forschung bekannte Technik der Constraint-Netze und Constraint-Propagierung [12]. Um aber auch bei komplexen Systemen, in denen nicht mehr nur einige Hundert, sondern eher einige Tausend oder gar Zehntausende 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.

Die mathematische Optimierung, im speziellen die diskrete Optimierung, wird neben direkten Anwendungen in der Produktion zunehmend eine wertvolle Grundlage für Entscheidungen bei *Ausweitung/Begrenzung* von Aktivitäten, im Rahmen der *In-/Devestitionsplanung*, bei der Beurteilung von Märkten, Produktspektren und vielem mehr [13] sein.

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.
2. Schrieck A.: Mathematische Modellierung, Simulation und Optimierung in der Chemischen Industrie. Interner Report, BASF-AG, (1994), Ludwigshafen.
3. Grötschel, M. , Lovász L.: Combinatorial Optimization. in: Graham R., Grötschel M. & Lovász L. (eds.) *Handbook on Combinatorics*, (1982), North Holland.
4. Nemhauser, G.L. , Wolsey, L.A.: Integer and Combinatorial Optimization. John Wiley & Sons, (1988), New York.
5. Neumann K. & Morlock M. : Operations Research. Carl Hanser Verlag, (1993), München.
6. 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.
7. Spelluci P. : Numerische Verfahren der nichtlinearen Optimierung. Birkhäuser Verlag, (1993), Basel.

8. Reuter, B.: Mischungsplanung einer pharmazeutischen Produktion. Studienarbeit, TH Darmstadt, (1994), Darmstadt.
9. Williams, H.P.: Model Building in Mathematical Programming. 3.Auflage, John Wiley & Sons, (1993), Chichester.
10. Ashford R.W. , Daniel R. : Some Lessons in Solving Practical Integer Problems. J. Opl. Res. Soc. **43(5)** (1992), 425–433.
11. Heipcke, S.: Optimales Scheduling mit Hilfe von Constraint Netzen. Diplomarbeit, Katholische Universität Eichstätt (1994)
12. Bückner M. : Ein allgemeines Konzept zur Modellierung und Lösung diskreter Optimierungsprobleme. Habilitationsschrift, Fakultät für Wirtschaftswissenschaften der Universität Karlsruhe, Karlsruhe, 1995.
13. Kallrath J. , Schreieck A.: Discrete Optimisation in Organisation and Production. Conference Proceeding EITC94, (1994), Brussels.