



OPTIMIERUNG

Mehrkriterielle Optimierung und interaktive Entscheidungsunterstützung der Prozessplanung auf Basis von Modellen und Daten sowie die Unterstützung von Design of Experiments (DoE) zur Beschleunigung und Verbesserung von Produkten sind Kernaktivitäten in Forschungs- und Entwicklungsaufträgen der BASF unter dem Dach des Kaiserslauterer Leistungszentrums »Simulations- und Software-basierte Innovation« im Verbund mit der Technischen Universität und geführt vom Fraunhofer ITWM.



INTERAKTIVE ENTSCHEIDUNGSUNTERSTÜTZUNG AUF BASIS VON MODELL UND DATEN

Zentrale Aufgabe der Abteilung Optimierung ist die Entwicklung individueller Lösungen für Planungs- und Entscheidungsprobleme in Logistik, Ingenieur- und Lebenswissenschaften in enger Kooperation mit Partnern aus Forschung und Industrie.

Methodisch ist unsere Arbeit durch ein Zusammenspiel von Simulation, Optimierung und Entscheidungsunterstützung geprägt. Unter Simulation wird dabei die Bildung mathematischer Modelle unter Einbeziehung von Design-Parametern, Restriktionen und zu optimierenden Qualitätsmaßen und Kosten verstanden.

Kernkompetenzen der Abteilung sind die Entwicklung und Implementierung von anwendungs- und kundenspezifischen Optimierungsmethoden zur Berechnung bestmöglicher Lösungen für das Design von Prozessen und Produkten. Alleinstellungsmerkmale sind die Integration von Simulations- und Optimierungsalgorithmen, die spezielle Berücksichtigung mehrkriterieller Ansätze sowie die Entwicklung und Implementierung interaktiver Entscheidungsunterstützungswerkzeuge.

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

Kontakt

karl-heinz.kuefer@itwm.fraunhofer.de

www.itwm.fraunhofer.de/opt

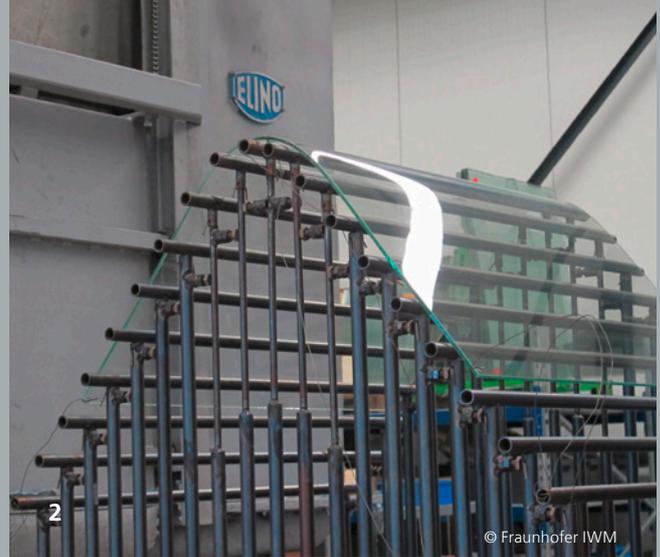


SCHWERPUNKTE

- Verfahrens- und Prozesstechnik
 - Medizinische Therapieplanung
 - Model Learning und Smart Data
 - Produktionsplanung und Ressourcen-effiziente Produktion
 - Anordnungs- und Zerlegeprobleme
 - Supply-Chain-Netzwerke
-



1 Planare Glasplatte vor dem Biegeprozess



2 Aufgeständerte Glasplatte nach dem Biegeprozess

MIT MACHINE LEARNING DATEN UND MODELLE NUTZBAR MACHEN

Modellbasierte Optimierung von Produktionsprozessen spart erheblich an Produktionskosten, und das bei gleicher oder sogar verbesserter Produktqualität. Voraussetzung dazu sind verlässliche Modelle. In der Praxis ist oft Expertenwissen vorhanden. Dieses Wissen resultiert in einem Expertenmodell, das aber meist lückenhaft ist, so dass eine Gesamtprozessoptimierung nicht möglich ist. An diesem Punkt setzen die Arbeiten unserer Abteilung im Themenkomplex »Machine Learning« an.

Methoden des überwachten und unüberwachten Lernens

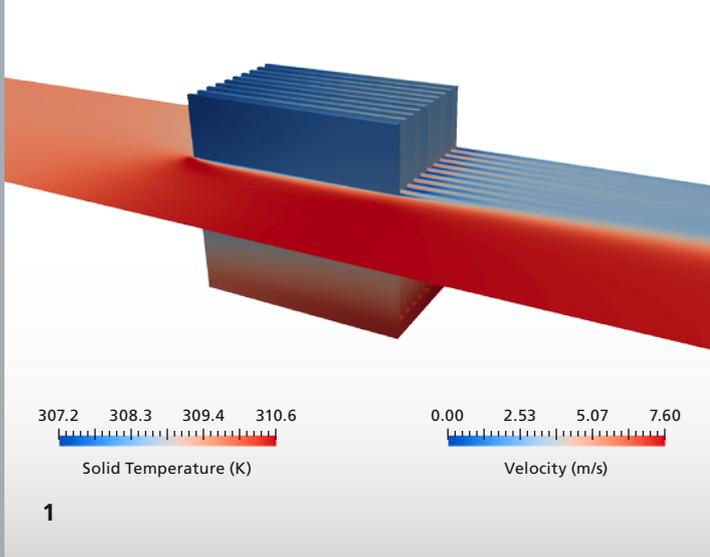
Neben dem Expertenwissen werden Produktionsprozesse mit Sensorik überwacht und der zeitliche Verlauf des Betriebszustands gespeichert. Bei chemischen Produktionsanlagen sind dies beispielsweise Druck- und Temperaturmessstellen oder in Trinkwasserversorgungsanlagen die Messung von Druck sowie Strommengen oder Füllstände von Hochbehältern. Die Chance in der Datennutzung besteht darin, die Lücken, die es im Expertenmodell gibt, durch statistische Lernalgorithmen zu schließen.

Dazu stehen uns verschiedenste Methoden des überwachten und unüberwachten Lernens zur Verfügung. Beispiele für unüberwachtes Lernen sind Mustererkennung (Detektion latenter Variablen) und Clustering in Zeitreihen. Bei den überwachten Lernalgorithmen handelt es sich beispielsweise um Klassifikationsmethoden, Regressionszugänge und künstliche neuronale Netze.

Statistische Lernalgorithmen schaffen Zusammenhang und Verlässlichkeit

Ein Produktionsprozess besteht aus einer Verschaltung von Produktionseinheiten. Die Lücken im Expertenmodell können sich auf fehlende Modellinformationen dieser Einzeleinheiten beziehen oder auf unzureichend bekannte Zusammenhänge zwischen Zielfunktionen für die Optimierung und Designalternativen. Exemplarisch demonstrieren wir dies u. a. in einer Kooperation mit dem Fraunhofer IWM in Freiburg anhand von Glasumformprozessen. Materialparameter werden aus dem dynamischen Verhalten des Glases bei der Umformung geschätzt. Der Prozess selbst wird in physikalisch motivierten Simulationen abgebildet.

Die statistischen Lernalgorithmen erlauben, gelernte Modellzusammenhänge vorzuschlagen sowie deren Verlässlichkeit mit Vertrauensintervallen zu bewerten – nicht nur in Bereichen, in denen Daten existieren, sondern insbesondere auch für die Extrapolation in Bereiche, in denen keine Daten aufgenommen wurden. Mit Strategien der optimalen Versuchsplanung machen wir dann Vorschläge für weitere Datenaufnahmen, um Unsicherheiten bestmöglich zu reduzieren.



WÄRMEHAUSHALT ELEKTRONISCHER SYSTEME MULTIKRITERIELL OPTIMIEREN

In Elektronikbauteilen und Computerprozessoren entsteht durch den elektrischen Widerstand während des Betriebs Wärme. Je nach Rechenleistung können die Komponenten sehr heiß werden; dies führt im schlimmsten Fall zu Fehlfunktionen oder zur Zerstörung der Bauteile. Wir entwickeln für die Industrie Prozessoren, die für ausreichend Kühlung sorgen.

1 *Simulation des Luftstromverhaltens und der Wärmeverteilung*

2 *Lacktrocknung eines Elektromotors*

Unsere Algorithmen übertreffen die Evolutionsverfahren

Passive Kühlungen leiten Wärme von Computerprozessoren entlang von Lamellen an die Luft. Die Wahl der Lamellen, ihre Dicke, Höhe und Abstand beeinflussen Temperatur und Luftverhalten, welche beim Kühlen entstehen. Unsere Algorithmen berechnen die besten Geometrien passiver Kühlungen schnell und akkurat. Im Vergleich zu den gängigen evolutionsgetriebenen Methoden ist das Ergebnis bis zu zehn Mal so gut.

Von Elektronik über Papierherstellung bis hin zu Lackierungen von Autoteilen, alle CAD-modellierten Probleme eignen sich für eine Optimierung. Sandwicking-Algorithmen lösen besonders gut konvexe Probleme. Hyperboxing-Methoden sind etwas langsamer, dafür berechnen sie die besten Kompromisse auch im nichtkonvexen Fall. Vereinfachungen von Modellen helfen uns, schneller das Optimum zu erreichen. Wir entwickeln unsere Algorithmen stetig weiter und passen sie neuen Problemen gegebenenfalls an.

Autoindustrie aufgepasst – Kühlprozesse optimieren

Die Optimierung von Lacktrocknungsprozessen in der Autoindustrie ist unser nächstes Ziel. Temperatur, Luftströmung und Position lackierter Autoteile verändern den Trocknungsprozess in einem Lackierofen. Wir optimieren diesen Vorgang bezüglich der Temperaturverteilung und des Energieverbrauchs, ohne dabei Qualität einzubüßen.

Unser Kooperationspartner, das Fraunhofer-Chalmers Research Centre for Industrial Mathematics FCC in Schweden, hat ein Simulationsverfahren entwickelt: Der IPS IBOFlow kann viele industrielle Prozesse darstellen und automatisiert analysieren. Damit berechnen wir den Wärmeaustausch und die Strömungsdynamiken von Kühlungen.





1 *Labormitarbeiter testet die Benetzungseigenschaften eines Siliziumwafers.*

DIGITALE PRODUKTENTWICKLUNG BEI BASF

Eine der größten Herausforderungen in der Produktentwicklung in der chemischen Industrie ist es, mit möglichst geringem Aufwand eine kostengünstige chemische Zusammensetzung zu finden, welche gleichzeitig gewisse Qualitätseigenschaften hat.

Problemstellung, Projektbeispiel und Softwareentwicklung

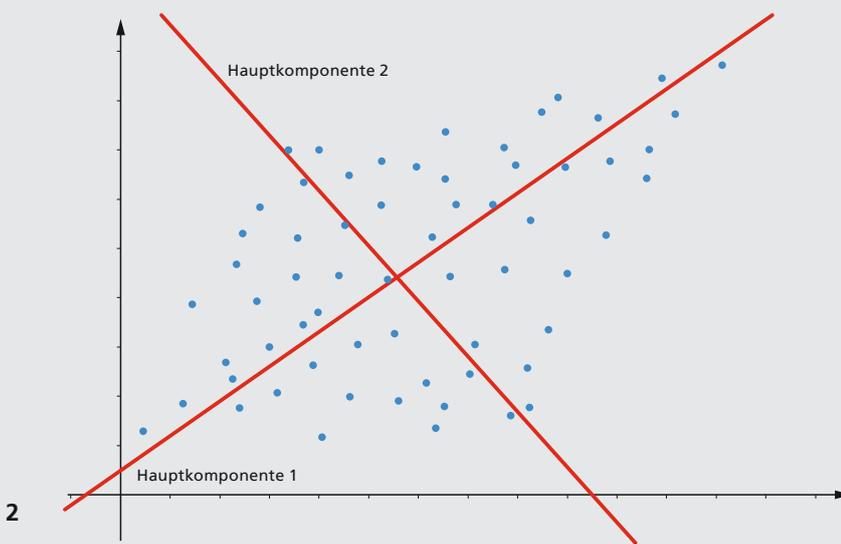
Ein Beispiel ist die Herstellung von Oberflächenbeschichtungen. Je nach Einsatzgebiet der Beschichtung sind verschiedene Eigenschaften wünschenswert. Neben dem Schutz der Oberfläche geht es beispielsweise auch um Glätte oder optische Eigenschaften. Nicht selten stehen sich die Ziele dabei gegenseitig im Weg, so dass ein geeigneter Kompromiss gefunden werden muss.

Ein typischer Workflow für ein neues Forschungsprojekt stellt sich wie folgt dar: Zunächst legen wir die Zielfunktionen und Designgrößen fest, bevor eine erste Versuchsreihe startet. Auf Basis der ersten Ergebnisse erstellen wir ein mathematisches Modell, um Vorhersagen für geeignete Designspezifikationen zu treffen. Darauf aufbauend wird eine neue Versuchsreihe gestartet und dieser Prozess solange iteriert fortgesetzt, bis eine zufriedenstellende Zusammensetzung gefunden ist.

Unsere Abteilung hat ein Softwaretool entwickelt, welches den Chemiker im gesamten Prozess begleitet. Das beginnt mit der Analyse und Visualisierung der Daten, setzt sich fort mit der Modellierung der einzelnen Zielgrößen bis hin zum Finden von optimalen Kompromissen und dem Planen von neuen Versuchen.

Maschinelles Lernen und Modellierung

Einen besonderen Stellenwert nimmt dabei die Wahl des mathematischen Modells ein, welches die Zielfunktionen in Abhängigkeit der Designvariablen beschreibt. Die Prozesse in der Chemie sind oft hochkompliziert und schwierig zu modellieren. In Zusammenarbeit mit der BASF SE entsteht gerade ein Tool, welches an dieser Stelle ansetzt und dabei gängige Algorithmen aus dem Maschinellen Lernen zum Einsatz bringt. Das bedeutet, dass alleine aus den bisherigen Daten ein Modell gewonnen wird, welches die Zusammenhänge beschreibt. Eine besonders komplexe Herausforderung ist die Wahl eines geeigneten Modells, denn dieses ist maßgebend für die Qualität der optimierten Lösungen.



Um die Tauglichkeit des Modelles zu messen, wenden wir verschiedene Verfahren an, wie zum Beispiel die Kreuzvalidierung. Sie nimmt nur einen Teil der Daten zum Training und den verbleibenden Teil zur Validierung des Modells. Genutzt wird sie zum Beispiel in der Komponentenauswahl für lineare Regressionsmodelle, um eine Überanpassung an die Daten zu vermeiden.

Konkret geht es darum, Komponenten mit geringem Einfluss, der lediglich zufälliger Natur ist, herauszufiltern und damit die Modellqualität zu verbessern. Allerdings führt ein rein datengetriebenes Modell nur in den wenigsten Fällen zum Ziel. Daher beziehen wir das Expertenwissen des Anwenders in den Modellierungsprozess mit ein.

Optimierung und Versuchsplanung

Ein zentraler Punkt ist die oben bereits angesprochene Planung neuer Versuche. Diese sind oft kostspielig und zeitintensiv; umso wichtiger ist eine effiziente Versuchsplanung. Das Tool unterstützt den Anwender dabei, mit möglichst wenigen Versuchen auszukommen und somit wertvolle Ressourcen zu sparen.

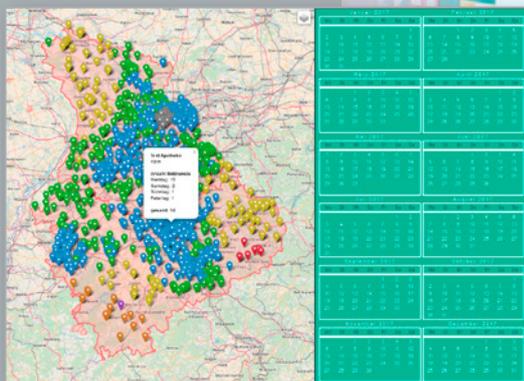
Gelöst wird dieses Problem wie folgt: Der Anwender selbst navigiert auf den Zielfunktionen in einen Bereich, welcher im Hinblick auf deren Werte besonders attraktiv ist. Voraussetzung dafür ist eine im Vorfeld durchgeführte mehrkriterielle Optimierung. In den Grenzen dieses Bereichs werden dann die neuen Versuche geplant. Auch die Vorwärtsplanung mithilfe des Modells unterstützt das Tool, sodass der Nutzer einzelne, besonders vielversprechende Rezepturen direkt testen kann. Der Anwender erhält dabei auch Informationen über die Unsicherheit der Vorhersage in Form von Konfidenzintervallen.

Web-Architektur in einem Big Data System

Realisiert haben wir die Software als Web-Lösung mit moderner Datenbank in einem Hadoop-System, welches eine Vielzahl von Datenmengen zu verwalten mag. Dies ermöglicht eine einfache und rechnerunabhängige Verwendung des Tools auch auf mobilen Endgeräten wie Tablets und Smartphones. Zugleich erhöht es die Produktivität in der Teamarbeit, weil alle Daten zentral gespeichert sind und Benutzer damit immer Zugriff auf den aktuellen Stand haben.

2 Die Abbildung zeigt die beiden Hauptkomponenten im zweidimensionalen Raum für einen Datensatz. Die Hauptkomponentenzerlegung teilt die ursprünglichen Größen durch Linearkombination in maximal aussagekräftige Größen und ordnet diese.





1

2



© istockphoto.com/shapecharge

HealthFaCT – OPTIMIERUNG DER AMBULANTEN MEDIZINISCHEN VERSORGUNG IM LÄNDLICHEN RAUM

1 *Interaktives Evaluieren und Explorieren von optimierten Apotheken-Notdienstplänen*

2 *Apotheken sind ein wesentlicher Bestandteil der ambulanten medizinischen Versorgung.*

Unser Gesundheitssystem steht vor großen Herausforderungen bei der ambulanten medizinischen Versorgung. Diese muss in ländlichen Gebieten gewährleistet bleiben – trotz des Bevölkerungsrückgangs und steigender Kosten. Daher ist das Ziel von HealthFaCT (Facility Location, Covering and Transport), die knappen Ressourcen im ländlichen Bereich optimiert zu verteilen.

Im Verbundprojekt HealthFaCT entsteht ein innovatives softwaregestütztes Optimierungs- und Entscheidungssystem zur Verbesserung der ambulanten medizinischen Versorgung. Die Software soll bei strategischen, taktischen sowie operativen Entscheidungen schnell die bestmöglichen Optionen aufzeigen und evaluieren. Zusätzlich kann der Nutzer die Ergebnisse interaktiv visualisieren, explorieren, analysieren und verifizieren. Dazu entwickeln wir eine webbasierte Simulationsplattform, welche die Optimierungsmethoden der Projektpartner integriert.

Forschungsverbund konzentriert sich auf drei Säulen

Das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderte Projekt konzentriert sich auf drei wesentliche Säulen der ambulanten medizinischen Versorgung: Apotheken, Notärzte sowie den Kranken- und Rettungstransport. Gemeinsam mit den Projektpartnern der RWTH Aachen, der Technischen Universität Kaiserslautern und der Universität Erlangen-Nürnberg werden folgende Bereiche der drei Säulen unter der Prognose zukünftiger Bedarfe optimiert:

- die Standortstruktur und der Notdienstplan von Apotheken
- die Standortstruktur und Ressourcenverteilung im Notarztdienst
- die Wartezeit im Kranken- und Rettungsdienst

Die Mathematik und deren softwarebasierte Umsetzung

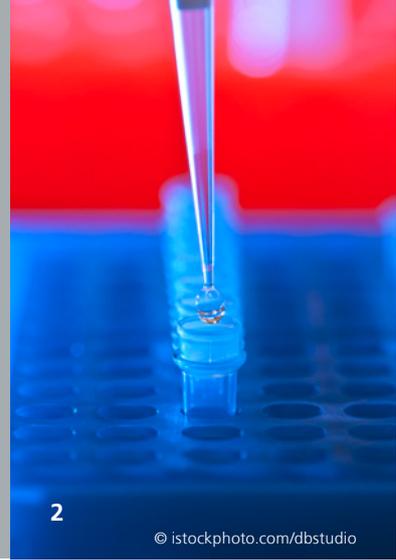
Mathematisch werden in diesem Projekt vor allem Standort-, Überdeckungs- sowie Tourenplanungsprobleme untersucht. Dabei sind die Herausforderungen besonders das robuste Absichern gegen Unsicherheiten sowie die Echtzeitorientierung. Außerdem ist es in diesem komplexen Anwendungsfall mit gegenläufigen Zielfunktionen nicht möglich, eine optimale Lösung rein algorithmisch zu bestimmen.

Daher entwickeln wir ein datengestütztes Tool, das sich auf den Entscheider zentriert. Es zeigt dem Nutzer die Optionen objektiv auf und bietet Möglichkeiten zum interaktiven Evaluieren der Lösungen. Gespräche mit den Anwendungspartnern belegen den Bedarf und das enorme Potenzial eines solchen softwaregestützten Optimierungs- und Entscheidungssystems.

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung



METHODEN FÜR DIE PRODUKTIONSPLANUNG IN DER PERSONALISIERTEN MEDIZIN

Maßgeschneiderte Behandlungskonzepte und personalisierte Therapien sind ein zukunftsweisender Ansatz zur Behandlung von Krankheiten. Wesentliche Voraussetzungen für deren ökonomischen Erfolg sind neben der besseren Wirksamkeit sichere, kostengünstige und vor allem schnelle Produktionsprozesse industriellen Maßstabs. Schließlich möchte kein Patient lange auf seinen persönlichen Wirkstoff warten. Dazu müssen die Prozesse optimal geplant und gesteuert werden.

1 Laborgeräte

2 Pipettieren einer DNA-Lösung

Herausforderungen der Bio-Verfahren

Bio-Verfahren haben Eigenschaften, die eine optimale Auslegung und effiziente Steuerung industrialisierter Prozesse komplizierter gestalten:

- Hohe Qualitätsstandards erfordern häufig die erneute Ausführung einzelner Prozessabschnitte für einen Patienten.
- Unterschiedliche Prozesszeiten verschiedener Vorgangabschnitte erschweren die Entwicklung eines periodischen Produktionsablaufs.
- Stark schwankende Prozesszeiten bedingen Plananpassungen und verhindern einen geordneten und vorhersagbaren Ablauf.

Maßnahmen zur Prozessoptimierung

Eine Maßnahme zur optimalen Auslegung industrieller Prozesse ist, Kapazitäten von Teilprozessen mit hohen Fehlerraten sorgfältig zu analysieren: Mit welchem zeitlichen Abstand sollen Patienten idealerweise ankommen, so dass es keine langen Wartezeiten gibt?

Auf Basis dessen stimmen wir die Teilprozesse aufeinander ab und entscheiden, wo wieviel Mehrkapazität vorgehalten wird, um Auslastungsspitzen abzumildern. Außerdem können Investitionen in zusätzliche Geräte abgesichert werden.

Um häufige Anpassungen zu vermeiden, planen wir Puffer zwischen den Prozessschritten ein. So haben Verzögerungen nur lokale Auswirkungen und es entsteht ein periodischer Fahrplan für die Produktion: Für jeden Prozessabschnitt legen wir fest, wann er für wie viele Patienten gestartet wird. Wer und wie viele es tatsächlich sind, hängt von den Wiederholungen ab.

Wir analysieren die individuellen Herausforderungen von Bio-Prozessen und entwickeln Konzepte zur Steuerung und Optimierung der Abläufe. Zur Bewertung der Konzepte erstellen wir digitale Zwillinge der Prozesse und simulieren das Zusammenspiel der verschiedenen Aspekte.





NEWS AUS DER ABTEILUNG



SPIELTHEORETISCHE KOLLABORATIVE DIENSTE- PLATTFORM FÜR PFLEGEBERUFE

Im 2017 gestarteten Forschungsprojekt GamOR (GameOfRoster) entwickelt unsere Abteilung Modelle und Algorithmen, die Pflegekräfte u. a. bei der Planung ihrer Dienstpläne unterstützt. Insbesondere liegt der Fokus dabei auf der Identifikation von inkompatiblen Planungswünschen sowie deren Auflösung mithilfe spieltheoretischer Ansätze. In Zusammenarbeit mit Arbeitswissenschaftlern, Designern sowie Anwendungspartnern setzen wir die Modelle und Algorithmen in einer prototypischen Dienste-Plattform um und erproben sowie evaluieren sie im täglichen Betrieb.



DIGITALISIERUNG VON BAUDIENSTLEISTUNGEN UND -PROZESSEN MIT INDUSTRIE 4.0-TECHNOLOGIEN

Wie kann Digitalisierung zur Verbesserung und Neugestaltung von Dienstleistungen und Prozessen im Bauwesen eingesetzt werden? Die Beantwortung dieser Frage ist das Ziel des Verbundprojekts ConWearDi (Construction – Wearables – Digitization), welches 2017 gestartet ist. Neben der proto-



typischen Implementierung einer integrierenden Plattform ist dabei die zentrale Aufgabe der Abteilung Optimierung die Erforschung von stochastischen Scheduling-Modellen, die zur Ablaufplanung und Steuerung auf Baustellen eingesetzt werden können.

LEITPROJEKT QUANTUM METHODS FOR ADVANCED IMAGING SOLUTIONS (QUILT)

Seit einigen Jahren entsteht eine zweite Generation von Quantentechnologien. Das Leitprojekt QUILT bündelt Expertise von sechs Fraunhofer-Instituten und quantentechnologischen Einrichtungen, wie dem Institut für Quantenoptik und Quanteninformation, der österreichischen Akademie der Wissenschaften und dem Max-Planck-Institut für die Physik des Lichts. Wir sind am 2017 gestarteten Projekt im Bereich des Quantenimaging beteiligt und nehmen eine Schlüsselrolle bei der Modellierung, Simulation und Optimierung von quantenbasierten berührungsfreien Methoden ein. Das Ziel ist, Bildgabeverfahren für Materialoberflächen verlässlicher, schneller und kostengünstiger zu gestalten.



Von vorne, links nach rechts: Dr. Alexander Schettrler, Jasmin Kirchner, Pascal Wortel, Prof. Dr. Karl-Heinz Küfer, Dr. Christian Weiß, Dr. Michael Helmling, Dr. Tobias Fischer, Dr. Gregor Foltin, Dr. Michal Walczak, Dr. Sebastian Velten, Dr. Martin von Kurnatowski, Dr. Volker Maag, Dr.-Ing. Tino Fleuren, Dr. Heiner Ackermann, Dr. Patricia Bickert, Dr. Neil Jami, Julie Damay, Diana Ackermann, Andreas Dinges, Dr. Neele Leithäuser, Dr. Elisabeth Finhold, Felix Riexinger, Dr. Dimitri Nowak, Dr. Michael Bortz, Till Heller, Esther Bonacker, Dr. Johannes Höller, Melanie Heidgen, Johanna Schneider, Patrick Schwartz, Dr. Raoul Heese, Tobias Seidel, Dr. Jens Babutzka, Dr. Philipp Süss, Dr. Kai Plociennik, Dr. Jan Schwientek, Rasmus Schroeder