New Hybrid Evolutionary Algorithms for Chemical Batch Scheduling under Uncertainty

Zur Erlangung des akademischen Grads eines

Dr.-Ing.

vom Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen
der Universität Dortmund
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Jochen Till

aus

Gelnhausen

Tag der mündlichen Prüfung: 24. August 2007

1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell, Dortmund

2. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Petra Mutzel, Dortmund

Dortmund 2007

Schriftenreihe des Lehrstuhls für Anlagensteuerungstechnik der Universität Dortmund (Prof.-Dr. Sebastian Engell)

Band 5/2007

Jochen Till

New Hybrid Evolutionary Algorithms for Chemical Batch Scheduling under Uncertainty

D 290 (Diss. Universität Dortmund)

Shaker Verlag
Aachen 2007

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek
The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at http://dnb.d-nb.de.

Zugl.: Dortmund, Univ., Diss., 2007

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8322-6839-8
ISSN 0948-7018

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen
Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9
Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Anlagensteuerungstechnik des Fachbereichs Bio- und Chemieingenieurwesen der Universität Dortmund. Dem Lehrstuhlinhaber, Herrn Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell, danke ich sehr herzlich für die Ermöglichung und Betreuung dieser Arbeit. Ihm sowie seinen ehemaligen und aktuellen Mitarbeitern danke ich für die Schaffung einer kreativen und leistungsfördernden Arbeitsatmosphäre am Lehrstuhl.

Für das mit Interesse übernommene Korreferat gilt mein Dank Frau Prof. Dr. rer. nat. Petra Mutzel, der Inhaberin des Lehrstuhls für Algorithm Engineering am Fachbereich Informatik. Den Herren Prof. Dr. David Agar und Prof. Dr.-Ing. Gerhard Schembecker vom Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen danke ich für ihre Mitwirkung in der Prüfungskommission.

Für die finanzielle Förderung dieser Arbeit als Projekt C10 des Sonderforschungsbereichs (SFB) 531 „Design und Management komplexer technischer Prozesse und Systeme mit Methoden der Computational Intelligence“ an der Universität Dortmund danke ich der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Im Rahmen dieses SFB hat sich eine fachbereichsübergreifende, stetige und erfolgreiche Kooperation mit Herrn Prof. Dr. Michael Emmerich entwickelt, die ich hier würdigen möchte. Er ist heute Assistant Professor am Leiden Institute of Advanced Computer Science in den Niederlanden.

Die Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe „Optimierung und Algorithmische Diskrete Mathematik“ des Fachbereichs Mathematik der Universität Duisburg-Essen ermöglichte mir den Einsatz des Softwarewerkzeugs *DDSIP*. Für ihren Beitrag dazu danke ich dem Leiter der Arbeitsgruppe, Herrn Prof. Dr. Rüdiger Schultz, sowie Frau Dipl.-Math. Eva Clostermann.

Mein besonderer Dank gilt Frau Dipl.-Inform. Maren Urselmann für ihr stetiges Engagement bei ihrer Mitarbeit als studentische Hilfskraft, als Diplomandin, und später als geschätzte Kollegin. Mein herzlicher Dank gebührt Herrn Dr.-Ing. Guido Sand für seine unermüdliche Bereitschaft zu fruchtbaren fachlichen Diskussionen und für sein stetig kritisches Hinterfragen meiner Arbeiten. Ihm, Frau Sabine Piana, M. Sc. und Herrn Dipl.-Ing. Wolfgang Mautz danke ich für ihre hilfreichen Hinweise beim Korrekturlesen dieser Arbeit.

Darüber hinaus gilt mein Dank für ihren Beitrag auf dem Weg zu dieser Dissertation den Herren Dr.-Ing. Dipl.-Inform. Sebastian Panek und Prof. Dr.-Ing. Olaf Stursberg.

Auch den beiden „guten Geistern“ des Lehrstuhls, Frau Gisela Hensche und Frau Dorothea Weber, gebührt mein Dank für ihre vielfältige Hilfe.

Schließlich möchte ich noch ein sehr herzliches Dankeschön an meine Freundin Verena und an meine Familie aussprechen, die mich stets unterstützt haben.

Weinheim, im August 2007

Jochen Till

Zusammenfassung

Zweistufige stochastische gemischt-ganzzahlige Programme mit diskreten Szenarien (*2S-MILP*s), die bei der Belegungsplanung von Chargenprozessen unter Unsicherheit enstehen, führen zu großen Optimierungsproblemen. Diese großen Probleme können ohne Dekompositionsmethoden oder problemspezifische Ansätze nur schwer gelöst werden.

Diese Arbeit präsentiert neue hybride evolutionäre Algorithmen für *2S-MILP*s, die auf Stufen-Dekomposition basieren. Dabei wird die Suche auf den Erststufenentscheidungen von einem evolutionären Algorithmus (*EA*) durchgeführt, die entkoppelten Zweitstufen-Szenarioprobleme werden durch einen *MILP*-Solver gelöst. Die Algorithmen werden an einem realistischen Fallbeispiel, der Belegungsplanung eines Chargenprozesses zur industriellen Polymerproduktion unter Unsicherheit in der Nachfrage und in der Anlagenkapazität, evaluiert.

Zunächst wird ein generischer hybrider *EA* für *2S-MILP*s realisiert. Dieser wird dann um drei für das Fallbeispiel spezifische Elemente erweitert. Zuerst wird ein schnelles Initialisierungsschema entwickelt. Dann wird eine Methode zur Reduzierung des Suchraums um zwei Größenordnungen vorgeschlagen. Zuletzt wird, basierend auf dem Konzept der 'minimal moves', ein problemspezifischer *EA* entwickelt. Es zeigt sich, dass dieser spezifische *EA* robuster ist als der generische, und dass er bessere Fähigkeiten zur vollständigen Erkundung des Suchraums aufweist.

Die Leistungsmerkmale der hybriden evolutionären Algorithmen werden mit den beiden besten verfügbaren Algorithmen, dem *MILP*-Solver *CPLEX*, und dem dekompositionsbasierten *2S-MILP*-Algorithmus von Carøe und Schultz (1999), *DDSIP*, verglichen. *DDSIP* benötigt eine problemspezifische Anpassung, um überhaupt eine andere als die initiale Lösung zu liefern. Der generische *EA* hingegen konvergiert ohne Anpassung. Mit den problemspezifischen Anpassungen liefern *DDSIP* und die *EA*-basierten Ansätze in den meisten Fällen bessere Ergebnisse als *CPLEX*. Der Lösungsaufwand des *EA* skaliert etwa linear mit der Anzahl der Szenarien. *CPLEX* und *DDSIP* hingegen skalieren deutlich stärker als linear. Für *2S-MILP*s mit einer relativ großen Zahl von Szenarien sind hybride evolutionäre Algorithmen daher zu bevorzugen, ebenso wenn relativ gute Lösungen nach kurzer Rechenzeit benötigt werden.

Abstract

Two-stage stochastic mixed-integer linear programs with discrete scenarios (*2S-MILP*s) that arise in chemical batch scheduling under uncertainty usually give rise to large scale optimization problems. The large problems cannot be solved easily without incorporating decomposition methods or problem specific knowledge.

A new hybrid evolutionary algorithm framework is proposed. Based on stage-decomposition, an evolutionary algorithm (*EA*) performs the search on the first-stage variables while the decoupled second-stage scenario problems are tackled by a *MILP* solver. The approach is evaluated for a real-world scheduling problem of an industrial polymer production batch plant with uncertainties in the demand and in the plant capacity.

In the beginning a generic hybrid *EA* for *2S-MILP*s is realized. Then it is extended by three elements that are customized to the example problem. First, a computationally cheap specific initialization scheme is developed. Second, a reduction of the search space by two orders of magnitude is proposed. Third, a problem specific *EA* with mutation operators is developed based on the concept of ‘minimal moves’. The specific *EA* is more robust than the generic one and has better abilities to explore the complete search space.

The performance of the hybrid *EA*-based approaches is compared to the performance of the state-of-the-art *MILP* solver *CPLEX* and to that of the state-of-the-art decomposition based *2S-MILP*-algorithm of Carøe and Schultz (1999), *DDSIP*. The latter *2S-MILP*-algorithm required a problem specific adaptation to provide any other than the initial solution, whereas the generic *EA* converged without modifications. With problem specific adaptations, *DDSIP* and the *EA*-based approaches performed better than *CPLEX* in most cases. The scale-up behavior of the *EA* with respect to the number of scenarios is approximately linear, whereas that of *CPLEX* and *DDSIP* is significantly stronger than linear. For *2S-MILP*s with a relatively high number of scenarios, or when relatively good solutions are needed quickly, the *EA* based approach is preferable.

Contents

List of Figures

List of Tables